Control PI y PID de Reactores Tubulares

I.Q. Héctor Fernando Puebla Núñez
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
Distrito Federal, México

Asesor: Dr. Jóse Alvarez-Ramírez
Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
Distrito Federal, México

Apoyado por el CONACyT bajo el contrato
124865/131548
y por el IMP a través del FIES 95-93 II
Julio 28, 1999

Tesis de Maestría en Ingeniería Química

Control PI y PID de Reactores Tubulares

I.Q. Héctor Fernando Puebla Núñez

Julio 1999

En principio, creo, junto con Schopenhauer, que una de las más fuertes motivaciones de los hombres para entregarse al arte y a la ciencia es el ansia de huir de la vida de cada día, con su doloroza crudeza y su horrible monotonía, el deseo de escapar de las cadenas con que nos atan nuestros deseos siempre cambiantes. Una naturaleza de fino temple anhela huir de la vida personal para refugiarse en el mundo de la percepción objetiva y el pensamiento. Este deseo puede ser comparado con el ansia que experimenta el hombre de la ciudad por escapar de un entorno ruidoso y estrecho y dirigirse hacia el silencio de las altas montañas, donde los ojos pueden vagar en el aire tranquilo y puro y apreciar el paisaje sereno, que parace hecho de eternidad.

Albert Einsten (1934)

La experiencia más hermosa que tenemos a nuestro alcance es el misterio. Es la emoción fundamental que está en la cuna del verdadero arte y de la verdadera ciencia. El que no la conozca y no pueda ya admirarse, y no pueda asombrarse ni maravillarse, está como muerto y tiene los ojos nublados. Fue la experiencia del misterio (aunque mezclada con el miedo) la que engendró la religión. La certeza de que existe algo que no podemos alcanzar, nuestra percepción de la razón más profunda y la belleza más deslumbradora, a las que nuestras mentes sólo pueden acceder en sus formas más toscas..., son esta certeza y esta emoción las que conctituyen la auténtica religiosidad. En este sentido, y sólo en éste, es en el que soy un hombre profundamente religioso. No puedo imaginar a un dios que recompense y castigue a sus criaturas, o que tenga una voluntad parecida a la que experimentamos dentro de nosotros mismos. Ni puedo ni querría imaginar que el individuo sobreviva a su muerte física; dejemos que las almas débiles, por miedo o por absurdo egoísmo, se complazcan en estas ideas. Yo me doy por satisfecho con el misterio de la eternidad de la vida y con la conciencia de un vislumbre de la estructura maravillosa del mundo real, junto con el esfuerzo decidido por abarcar una parte, aunque sea muy pequeña, de la Razón que se manifiesta en la naturaleza.

Albert Einsten (1934)

El mundo no se divide en débiles y fuertes; tampoco en triunfadores y fracasados, o en los que llegan o no llegan a la meta. Se divide en los que aprenden y los que se resisten a aprender.

Control PI y PID de Reactores Tubulares

Héctor Fernando Puebla Núñez
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

28 de Julio de 1999

Control PI y PID de Reactores Tubulares

by

Héctor Fernando Puebla Núñez

I.Q., Universidad Autónoma de San Luis Potosí (1997)

Submitted to the Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica
in partial fulfillment of the requirements for the degree of

Maestro en Ingeniería Química

at the

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA

Julio 1999

© Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa 1999

Signature of Author .....
Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica
Julio 1999

Certified by .....
Dr. Gilberto Espinosa Paredes
Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Certified by .....
Dr. Julio Ernesto Solís Daun
Departamento de Matemáticas
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Certified by .....
Dr. Ricardo Aguilar López
Departamento de Energía.
Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco

Accepted by .....
Dr. José de Jesús Alvarez Ramírez
Asesor, Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica

Resumen

Se desarrollan esquemas de control robusto para el caso de tres tipos de reactores tubulares: Un biorreactor tubular de cama empacada con flujo pistón, un reactor tubular de cama empacada con dispersión axial y un reactor tubular con reciclo con flujo pistón. La dinámica de tales sistemas está descrita por ecuaciones diferenciales parciales. La aproximación por diferencias finitas para las derivadas espaciales se usa para transformar las ecuaciones diferenciales parciales resultantes del modelo en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias que se resuelven por integración numérica simultánea. Los esquemas de control propuestos se basan en modelos de bajo orden entrada-salida aumentados con un término que agrupa los errores de modelado del sistema. Por medio de un observador de orden reducido el estado aumentado se reconstruye usando medidas de la entrada y salida del sistema. Los controladores derivados están compuestos por una retroalimentación y un estimador de incertidumbres. Los controladores robustos propuestos son equivalentes a los controladores clásicos proporcional-integral (PI) y proporcional-integral-derivativo (PID). La parametrización del controlador PI está en términos de las constantes de tiempo a lazo cerrado y de estimación de incertidumbres, y para el controlador PID por las constantes de tiempo a lazo cerrado y de estimación de incertidumbres, y un coeficiente de amortiguamiento. Ambos esquemas de control propuestos poseen una estructura natural *anti-reset windup*. El desempeño de los controladores derivados se ilustra a través de simulaciones numéricas.

Prefacio

En la industría química, por lo general, el reactor es la operación unitaria central. En particular, el reactor tubular es uno de los más importantes para las industrias de refinación y petroquímicas. Es bien conocido que los procesos químicos presentan perturbaciones frecuentes generalmente no detectables, incertidumbre en el modelo del proceso, y otros problemas complicados. Es por ello que existe la necesidad de proponer esquemas de control que permitan una operación segura y eficiente de estos procesos. En términos muy generales, el controlar un proceso significa influenciar su comportamiento de modo que se obtenga una meta deseada. Los diseños de esquemas de control de procesos pueden clasificarse básicamente en dos. El primero de ellos parte de un modelo que se supone perfecto del proceso a ser controlado y con base en tal modelo optimizar su comportamiento. El otro diseño consiste en trabajar con un modelo con incertidumbres y usar retroalimentación para corregir las desviaciones del comportamiento deseado. El desarrollo de esquemas de control robustos ha sido una de las principales actividades en los últimos 10 años en el área de control. La robustez de un sistema de control se define por su capacidad para tratar con errores de modelado en el sistema.

En este trabajo se proponen esquemas de control robusto para el caso de reactores tubulares. No obstante, sería un tanto irrealista pensar que en este trabajo se cubran todos o incluso la mayoría de los reactores tubulares existentes, sin embargo se proponen esquemas de control robusto para tres importantes tipos de reactores tubulares: un reactor tubular con dispersión axial, un reactor biológico de cama empacada, y un reactor tubular con reciclo con flujo tipo pistón. En virtud de sus características, dichos reactores cubren la mayoría de los reactores tubulares de interés industrial y teórico. La elección de los tres casos de estudio además obedece a otros factores. Primero, es bien conocido que el reactor tubular de cama empacada es uno de los reactores más importantes para la industria petroquímica. Además, debido a que este reactor se describe por lo general con el modelo de dispersión axial, la rica variedad de comportamientos que presenta este modelo resulta muy útil para fines del estudio de la dinámica y control del sistema. Por otro lado, el biorreactor tubular es un sistema con una elevada incertidumbre en el modelo, lo cual hace muy atractivo el desarrollo de esquemas de control robustos. Finalmente, el reactor tubular con reciclo ha despertado un gran interés teórico debido a que el retroalimentado térmico y de masa puede conducir a inestabilidades en el sistema.

El presente trabajo de tesis esta dirigido tanto a estudiantes recién egresados de licenciatura de carreras de ingeniería, así como a ingenieros de procesos interesados en la dinámica y control de los reactores tubulares. Los antecedentes matemáticos mínimos que se requieren para el lector es un poco de algebra lineal, ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales, nociones de modelamiento matemático, y control lineal. Algunos de los temas mencionados no se cubren típicamente en cursos de licenciatura de ingeniería química, así, por claridad en la presentación, en este trabajo se incluye una breve revisión de cada tema mencionado en el Capítulo 2 y en la sección de apéndices.

El Capítulo de introducción describe la motivación de la tesis y el estado del arte de los reactores tubulares. El Capítulo 2 revisa algunos conceptos clásicos de la teoría de control: la teoría algebraica de sistemas lineales, incluyendo controlabilidad, observabilidad, retroalimentación; estabilidad via Lyapunov; etc.

En el Capítulo 3 se aborda la dinámica de los reactores tubulares con detalle. En especial se revisan los modelos heterogéneos para los reactores de cama fija, así como los modelos seudo-homogéneos a utilizar en este trabajo. Los Capítulos 4 y 5 tratan con el desarrollo de esquemas de control para los tres tipos de reactores tubulares y la implementación a través de simulaciones numéricas para el reactor tubular con dispersión axial y el biorreactor. Desafortunadamente, debido a la ausencia de valores confiables de parámetros para el reactor tubular con reciclo, la implementación de la ley de control derivada no sería adecuada, es por ello que no se presenta la simulación para el esquema de control propuesto, sin embargo, la dinámica del sistema a lazo abierto se discute en el Capítulo 3.

En cuanto a la presentación del trabajo, el texto fue capturado con el procesador *Scientific WorkPlace*, las figuras fueron capturadas en Origin versión 4.1 y la programación para las simulaciones numéricas se realizaron en el lenguaje Fortran F77L.

Héctor Puebla.

Agradecimientos

Deseo expresar mi agradecimiento a mi asesor, **Dr. José Alvarez-Ramírez,** por su apoyo y sus sugerencias desde el inicio hasta el final de este proyecto. Fui afortunado al elegir el control de procesos y poder trabajar con el Dr. Alvarez-Ramírez y de esta forma tener la oportunidad de trabajar en el control de temperatura en células cancerígenas, caos y turbulencia y biorreactores de lote como parte adicional al trabajo de tesis de maestría y con ello poder explorar el gran potencial del control de procesos.

Existen tres personas que particularmente quiero agradecer, que sin su apoyo, no estaría en este punto, a mis padres **Sr. Fernando Puebla y Profa. María Núñez,** y a una gran persona, **Dr. Roberto Leyva Ramos** de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

También de la UASLP deseo agradecer al M.C. Pedro Alonso Dávila, al M.C. Juan Silva Domínguez, al Dr. Edgar Moctezuma, a la I.Q. Lilia Castillo Huerta, y al Dr. Brent Handy por su apoyo y recomendaciones durante mis estudios de Licenciatura.

A mis revisores de tesis de maestría: Dr. Gilberto Espinosa por sus sugerencias, comentarios y retroalimentado de la primera versión de la tesis. Al Dr. Julio Solís y al Dr. Ricardo Aguilar por su aceptación para revisar el manuscrito final y sus comentarios generales. Por supuesto, la responsabilidad de cualquier error final es del autor. Un agradecimiento al Dr. Gerardo Espinosa (UNAM) y al Dr. Guillermo Fernández (UIA) por su tentativa aceptación para ser revisores de este proyecto, desafortunadamente por el problema de la sincronización de fechas esto no fue posible.

De la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, un agradecimiento al grupo de control, en especial al grupo de trabajo del Dr. José Alvarez-Ramírez: M.I.Q. Ilse Cervantes (Doctorado) por algunas discusiones de los temas expuestos en este trabajo, en particular el controlador robusto PID, a la M.I.Q. América Morales (Doctorado), al I.Q. Jesús Valencia (Maestría) por las excelentes referencias de Amundson, y al M.C. Rosendo Monroy (Doctorado).

A mis compañeros y profesores de la maestría de Ingeniería Química de la UAM-I y a Paul Maya, Edmundo Rocha y el Dr. Jaime Moreno de la clase de sistemas no-lineales en la UNAM.

Agradezco el apoyo para realizar esta investigación al **CONACyT** a través del contrato 124865/131548 y al Instituto Mexicano del Petróleo (**IMP**) por el apoyo a través del FIES 95-93 II.

Índice General

1 Introducción **14**

1.1 Motivación 14

1.2 Antecedentes del control de procesos químicos 17

1.3 Estado del arte en el control de reactores tubulares 18

1.4 Definición del problema 22

1.5 Objetivos 24

1.6 Estructura de la tesis 25

2 Marco Teórico **26**

2.1 Diseño de sistemas de control 26

2.1.1 Configuración de control 27

2.1.2 Metas del diseño del controlador 27

2.1.3 El algoritmo PID 29

2.1.4 Implementación del controlador 30

2.1.5 Problemas en el control de procesos: perturbaciones, no-linealidades, muestreo y ruido de medición. 31

2.2 Definiciones y terminología: Sistemas lineales y no lineales 33

2.2.1 Sistemas lineales 35

2.2.2 Estimación y Observadores 38

2.2.3 Sistemas no lineales: Método de estabilidad de Lyapunov 39

2.3 Modelamiento 44

2.3.1 Ecuaciones diferenciales y en diferencias 44

2.3.2 Formulación de un modelo 45
2.3.3 Identificación empírica 46
2.3.4 Incertidumbre del modelo 47
2.3.5 Simulaciones numéricas 48
2.4 Notas y referencias 49

3 Dinámica de los Reactores Tubulares **50**

3.1 Reactores tubulares 50
3.2 Modelos matemáticos de los reactores tubulares 53
3.2.1 Sistemas homogéneos y heterogéneos 53
3.2.2 Modelos de los reactores de cama fija 54
3.2.3 Algunos comentarios adicionales sobre los reactores tubulares 64
3.3 Caracterización de la incertidumbre 66
3.4 Bifurcación, inestabilidad y multiplicidad de los reactores tubulares 67
3.4.1 Multiplicidad de los reactores tubulares 67
3.4.2 Sensibilidad paramétrica 70
3.4.3 Estabilidad de los reactores tubulares 71
3.4.4 Bifurcación de los reactores tubulares 71
3.5 Reactor Tubular Biológico 73
3.5.1 Generalidades 73
3.5.2 Modelamiento 73
3.5.3 Incertidumbre del modelo 76
3.5.4 Dinámica a lazo abierto 76
3.6 Reactor Tubular con Dispersión Axial 79
3.6.1 Generalidades 79
3.6.2 Modelamiento 79
3.6.3 Incertidumbre del modelo 82
3.6.4 Dinámica a lazo abierto 83
3.7 Reactor Tubular con Reciclo 84
3.7.1 Generalidades 84
3.7.2 Modelamiento 87

3.7.3 Incertidumbre del modelo 88
3.7.4 Dinámica a lazo abierto 88
3.8 Notas y Referencias 91

4 Control Robusto de Reactores Tubulares **93**
4.1 Reactor Tubular Biológico 94
4.1.1 Control Ideal 94
4.1.2 Control Robusto PI basado en un modelo lineal de primer orden 96
4.1.3 Control Robusto PI basado en el balance de masa sobre el substrato . . . 100
4.2 Reactor Tubular con Dispersión Axial 103
4.2.1 Control Ideal 103
4.2.2 Control Robusto PI basado en un modelo lineal de primer orden 106
4.2.3 Control Robusto PI basado en el balance de energía 110
4.3 Reactor Tubular con Reciclo 112
4.3.1 Control Ideal 112
4.3.2 Control Robusto PI basado en un modelo de primer orden 115
4.3.3 Controlador Robusto PI basado en el balance de energía. 118
4.4 Función de transferencia y *anti-reset windup* del controlador PI 120
4.5 Control Robusto basado en un modelo de primer orden más tiempo muerto . . . 121
4.5.1 Equivalencia con el controlador clásico PID 125
4.6 Función de transferencia y *anti-reset windup* del controlador PID 126
4.7 Resumen de los controladores derivados 127
4.8 Notas y Referencias 129

5 Simulaciones numéricas **130**
5.1 Reactor Tubular Biológico de Cama Fija 130
5.1.1 Control de la concentración de substrato 131
5.2 Reactor Tubular con Dispersión Axial 145
5.2.1 Control de la temperatura del reactor 145
5.3 Notas y Referencias 154

6 Conclusiones **155**

6.1 Resumen del trabajo de tesis 155

6.2 Conclusiones generales 156

6.3 Trabajo Futuro 161

Bibliografía 162

Apéndices **169**

0.1 **A** *Métodos numéricos para el reactor tubular* 169

0.1.1 Método de diferencias finitas 172

0.2 **B** *Análisis de estabilidad (Alvarez-Ramírez et al., 1998)* 174

0.3 **C** *Notación* 178

0.3.1 Reactor tubular biológico de cama fija 178

0.3.2 Reactor tubular con dispersión axial 179

0.3.3 Reactor tubular con reciclo 180

0.3.4 Reactores heterogéneos 181

Índice de Figuras

3-1 Reactor tubular biológico, dinámica a lazo abierto. 78

3-2 Reactor tubular con dispersión axial, dinámica a lazo abierto (perfil estable). . . 85

3-3 Reactor tubular con dispersión axial, dinámica a lazo abierto (perfil inestable). . 86

3-4 Reactor tubular con reciclo, dinámica a lazo abierto (perfil cuasi-periódico). . . . 89

3-5 Reactor tubular con reciclo, dinámica a lazo abierto (perfil caótico). 90

4-1 (a) Reactor tubular biológico con microorganismos inmovilizados. (b) Diagrama de bloques del esquema de control retroalimentado. 95

4-2 Reactor tubular biológico, aproximación a un modelo lineal de primer orden. . . 97

4-3 (a) Reactor tubular de cama empacada con chaqueta de enfriamiento. (b) Diagrama de bloques del esquema de control retroalimentado. 104

4-4 Reactor tubular con dispersión axial, aproximación a un modelo de primer orden. 107

4-5 (a) Reactor tubular de flujo pistón con reciclo con chaqueta de enfriamiento. (b) Diagrama de bloques del esquema de control retroalimentado. 113

5-1 Reactor tubular biológico, ley de control ideal. Efecto del tiempo a lazo cerrado. 135

5-2 Reactor tubular biológico, control robusto basado en el modelo lineal. Efecto del tiempo de estimación. 136

5-3 Reactor tubular biológico, control robusto basado en el modelo lineal. Efecto de perturbaciones. 137

5-4 Reactor tubular biológico, control robusto basado en el balance de substrato. Efecto del tiempo de estimación. 138

5-5 Reactor tubular biológico, control robusto basado en el balance de substrato. Efecto de perturbaciones. 139
5-6 Reactor tubular biológico, reconstrucción del error de modelamiento. Efecto del tiempo de estimación. 140
5-7 Reactor tubular biológico, efecto de la velocidad de muestreo. 141
5-8 Reactor tubular biológico, efecto de la velocidad de muestreo y del ruido de medición. 142
5-9 Reactor tubular biológico, control robusto PID. Retardo en la entrada de control. 143
5-10 Reactor tubular biológico, control robusto PID. Efecto del ruido de medición. . . 144
5-11 Reactor tubular con dispersión axial, control ideal. 146
5-12 Reactor tubular con dispersión axial, control robusto basado en el modelo lineal. 147
5-13 Reactor tubular con dispersión axial, control robusto basado en el balance energético. 148
5-14 Reactor tubular con dispersión axial, reconstrucción del error de modelamiento. . 150
5-15 Reactor tubular con dispersión axial, efecto de la velocidad de muestreo. 151
5-16 Reactor tubular con dispersión axial, efecto del retraso y del ruido de medición. . 152
5-17 Reactor tubular con dispersión axial, control robusto PID. 153

Índice de Tablas

3.1 Reactor tubular biológico, valores numéricos para la simulación (Dochain et al., 1992) 77

3.2 Reactor tubular con dispersión axial, variables adimensionales 81

3.3 Reactor tubular con dispersión axial, valores numéricos para la simulación (Jensen y Ray, 1982). Perfil Estable 84

3.4 Reactor tubular con dispersión axial, valores numéricos para la simulación (Jensen y Ray, 1982). Perfil Inestable 84

3.5 Reactor tubular con reciclo, variables adimensionales 87

3.6 Reactor tubular con reciclo, valores numéricos para la simulación (Jacobsen y Berezowzky, 1998) 91

4.1 Reactor tubular biológico, resumen de los controladores 128

4.2 Reactor tubular con dispersión axial, resumen de los controladores 128

4.3 Reactor tubular con reciclo, resumen de los controladores 128

Acrónimos

ARW	Anti-Reset Windup
CLR	Reactor de Lazo Circulante
CSTR	Reactor Continuo de Tanque Agitado
IMC	Controlador de Modelo Interno
LQ	Controlador Cuadrático Lineal
LQG	Controlador Gausiano Cuadrático Lineal
LQR	Controlador Cuadrático
LTI	Lineal Invariante en Tiempo
LTV	Lineal Variante en Tiempo
MIMO	Múltiple Entrada-Múltiple Salida
ODE	Ecuación Diferencial Ordinaria
P	Proporcional
PD	Proporcional Derivativo
PDE	Ecuación Diferencial Parcial
PFTR	Reactor Tubular con Flujo Pistón
PI	Proporcional Integral
PID	Proporcional Integral Derivativo
PLC	Controlador Lógico Programable
SISO	Simple Entrada-Simple Salida

Capítulo 1

Introducción

Este capítulo proporciona el estado del arte del control de reactores tubulares y define los objetivos de este trabajo. En la Sección 1.1 se presenta la motivación para el estudio de la dinámica y el desarrollo de esquemas de control de reactores tubulares. Posteriormente, en la Sección 1.2 se aborda brevemente el desarrollo histórico del control de procesos químicos. El control de reactores tubulares se discute en la Sección 1.3. La Sección 1.4 define el problema y lo coloca en el marco de diseño de esquemas de control robusto. Los objetivos de este trabajo se definen en 1.5, y finalmente en la Sección 1.6 se presenta la estructura de este trabajo.

1.1 Motivación

El *reactor tubular* generalmente toma la forma de un recipiente cilíndrico a través del cual los reactantes fluyen. Es decir es una operación continua en la cual hay un movimiento constante de uno o de todos los reactivos en una dirección espacial promedio (los reactivos entran en un extremo del sistema y salen por el otro) y en el que no se hace intento alguno por inducir el mezclado entre los elementos del fluido en ningún punto a lo largo de la dirección de flujo [1].

Los *reactores tubulares* se utilizan en importantes reacciones industriales. Por ejemplo, la destilación térmica fraccionada (*cracking*) de hidrocarburos para obtener etileno y la sulfonación de olefinas para el caso de reacciones homogéneas [2].

El *reactor tubular* puede estar empacado con un catalizador y entonces se denomina reactor tubular catalítico de cama empacada. Tal vez este tipo de reactor sea el más importante en la

industria de refinación del petróleo y la industria petroquímica. De hecho, se considera que un 90-95% de los reactores catalíticos sólido-gas operando industrialmente son de cama empacada [3]. Ejemplos de reacciones en estos reactores incluyen la síntesis de amoníaco, síntesis de metanol, etc. Los reactores catalíticos de cama fija tiene gran variedad de configuraciones, *e.g.*, adiabáticos, no adiabáticos, con enfriamiento o calentamiento a contra y co-corriente.

El uso de *biorreactores tubulares* de cama empacada (*i.e.*, enzimas o microorganismos inmovilizados) para algunos sistemas biológicos permiten mayor estabilidad térmica, uso de un mayor volumen celular, más eficiencia en la extracción de productos y velocidades de flujo mayores. Ejemplos de operaciones de procesos biológicos con *reactores tubulares* son: remoción de contaminantes de efluentes industriales, producción de antibióticos y la producción de etanol [4].

El *reactor tubular* con reciclo ha despertado un gran interés teórico debido al posible surgimiento de inestabilidades debido a la retroalimentación de calor y masa en el sistema. El reciclo se usa generalmente en la práctica industrial como medio de control de temperatura, inhibición de reacciones laterales indeseables, o uso eficiente de reactantes [5]. Cuando el retroalimentado se proporciona por el calor producido en el sistema el reactor se denomina autotérmico. Entre este tipo de reactores, el reactor de lazo circulante (CLR)[1] ha sido propuesto para la operación como un sistema periódico autónomo. Estudios a nivel planta piloto mostraron que el CLR permite conversión total para reacciones débilmente exotérmicas y reacciones limitadas en el equilibrio [6]. Una aplicación inicial de este sistema es la combustión autotérmica de compuestos organicos volátiles emitidos por plantas de polímeros. Un concepto similar se usa en el reactor de flujo inverso, en el cual la dirección del flujo se revierte periódicamente, y a diferencia del CLR, esté opera como un sistema periódico forzado [7].

El modelo dinámico de los *reactores tubulares* está descrito por ecuaciones diferenciales parciales (*i.e.*, sistemas de parámetros distribuidos) por lo general no-lineales. Para el caso unidimensional las ecuaciones diferenciales parciales (PDE) se pueden clasificar como del tipo parabólica cuando el problema es de difusión-reacción, o difusión-convección-reacción. Para el caso de convección-reacción las PDE son hiperbólicas [8]. Es bien conocido que la mayoría de los sistemas de ecuaciones diferenciales no-lineales no se pueden resolver analíticamente.

[1] A través del texto se usaran los acrónimos de acuerdo al idioma ingles debido a su aceptación universal.

Sin embargo, se puede obtener información útil al analizar el comportamiento del sistema a la respuesta a perturbaciones de las variables de estado (*i.e.*, análisis de estabilidad).

La estabilidad y la sensibilidad de un reactor tubular es un tema bastante amplio y mucho más complicado que para el reactor continuo de tanque agitado [9]. La estabilidad de los *reactores tubulares* ha sido investigada desde principos de 1960 principalmente por Amundson y colaboradores [10 – 14]. Amundson demostró la inestabilidad del estado intermedio en el caso de tres estados estacionarios [14] para el reactor tubular adiabático, y un comportamiento mas complejo para el caso no adiabático [15]. Para el caso del reactor de flujo pistón (PFTR) se puede demostrar que solamente son posibles perfiles estacionarios únicos [17]. Un fenómeno asociado al PFTR es la sensibilidad paramétrica. La sensibilidad paramétrica indica una condición particular de la operación del reactor, donde cualquier variación pequeña en los parámetros de entrada del reactor presenta grandes cambios en su comportamiento [16]. Por ejemplo, en un PFTR pueden presentarse "puntos calientes" locales al ocurrir alguna fluctuación paramétrica pequeña [17]. El *reactor tubular* con dispersión axial presenta una rica variedad de comportamientos dinámicos, incluyendo multiplicidad de estados estacionarios, ciclos límite, etc. [18]. En el caso del *reactor tubular* con reciclo debido a la existencia de retroalimentado térmico y/o de masa surge la posibilidad de multiples estados estacionarios, inestabilidades, e incluso comportamiento caótico [19].

Dada la importancia del uso de reactores tubulares en la industria química y debido a que la existencia de sensibilidad paramétrica, múltiples estados estacionarios, ciclos límite, etc., puede conducir a una operación no adecuada, incluso a la destrucción del reactor, se hace necesario el desarrollo de esquemas de control para este tipo de reactores que permitan una operación eficiente y segura. En los siguientes capítulos, en particular en el Capítulo 3 se abordará el modelamiento y la dinámica de los *reactores tubulares* con mayor detalle.

En la siguiente sección se presenta una breve revisión del desarrollo histórico del control de procesos químicos, posteriormente se discute el estado del arte del control de *reactores tubulares*.

1.2 Antecedentes del control de procesos químicos

El control de procesos en el ámbito industrial involucra el control de variables tales como temperatura, presión, flujo, etc., como en los procesos continuos, que van desde procesamiento de minerales y de refinación hasta procesamiento de alimentos y farmacéuticos. Desde una perspectiva de planeación y administración, involucra maximizar beneficios de operación, garantizar calidad de producto, incrementar seguridad, reducir el impacto al ambiente y mejorar condiciones de operación [20].

Los procesos químicos presentan muchos problemas complicados, incluyendo comportamiento dinámico no lineal, interacción multivariable entre variables manipuladas y controladas, variables no medibles, perturbaciones frecuentes y no detectables, parámetros que varían con el tiempo e inciertos, restricciones sobre variables de estado y manipuladas [21].

El objetivo del diseño de un sistema de control es construir un controlador de forma que el sistema a lazo cerrado cumpla con ciertas características deseadas. El controlador (o ley de control) describe el algoritmo que utiliza el procesador de control para generar las señales hacia el actuador a partir de las mediciones del sensor y de las señales de referencia que recibe. Los controladores varían ampliamente en complejidad y efectividad. Los controladores simples incluyen a los controladores proporcionales (P), proporcional-derivativo (PD), proporcional-integral (PI), proporcional-integral-derivativo (PID), los cuales son los más amplia y efectivamente usados en muchas industrias. Controladores más sofisticados incluyen el regulador cuadrático lineal (LQR), el controlador retroalimentado de estados estimados, y el controlador gaussiano cuadrático lineal (LQG). Estos controladores sofisticados fueron usados inicialmente en sistemas aero-espaciales [22].

Los controladores se diseñan por varios métodos. Los controladores simples P o PI tienen solamente pocos parámetros a especificar, y estos parámetros pueden ser ajustados empíricamente. Durante 1930, investigadores de los laboratorios de la Bell Telephone en los Estados Unidos desarrollaron la teoría de amplificadores retroalimentados, basados en asegurar estabilidad y una respuesta apropiada para circuitos eléctricos. Los trabajos por Nyquist, Bode, y otros, constituyen hasta ahora las bases de la mayoría de los diseños en el dominio de frecuencia. Con reglas heurísticas se trata de sintetizar un controlador con el cual el sistema a lazo cerrado permita un buen desempeño [23].

A partir de 1950 con el avance de la teoría de control se comenzaron a desarrollar técnicas poderosas que permitían tratamiento multivariable, sistemas variantes en tiempo, así como muchos problemas no lineales [21]. Contribuciones por Richard Bellman (programación dinámica) y Rudolf Kalman (filtrado, control óptimo cuadrático lineal, y análisis algebraico) en los Estados Unidos, y por L. Pontryagin (control óptimo lineal) en la Unión Soviética, formaron la base de la investigación desde 1960 [22]. La mayoría de los métodos mencionados se basaron en resolver algunos problemas de control óptimos que pueden expresarse en la forma de una ley retroalimentada y en el desarrollo de métodos de cómputo eficientes para resolverlos. Sin embargo, esta teoría tiene la desventaja de estar basada en consideraciones ideales (*i.e.*, el modelo del sistema a controlar se considera perfecto), además las limitaciones de hardware en esas fechas limitó la aplicación a pocos problemas industriales.

Desde 1980 dos técnicas de control han despertado gran interés a la aplicación de sistemas industriales. La primera de ellas es el control predictivo que fue desarrollado en la industria a mediados de los setentas. El control predicitivo está muy relacionado al control óptimo cuadrático lineal, con la ventaja de que el problema de control óptimo conduce a un problema de optimización en tiempo real. El control predictivo es una metodología de control que trata con dinámica compleja, interacciones y perturbaciones medibles y es de fácil comprensión al operador de planta. Además, este método considera restricciones del proceso y de operación. Por otra parte, la teoría del control robusto se desarrolló para tomar en cuenta la incertidumbre del modelo y analizar el efecto sobre la estabilidad y desempeño del sistema de control. Esto implica que el controlador deba ser diseñado de modo que las especificaciones de desempeño a lazo cerrado se logren a pesar de condiciones de operación variantes o diferencias entre la planta/modelo[2] [22].

1.3 Estado del arte en el control de reactores tubulares

A diferencia del reactor continuo de tanque agitado (CSTR), la literatura reportada sobre control de reactores tubulares es pobre, sin embargo han existido esfuerzos notables por controlar este tipo de sistemas con las técnicas de control más importantes.

[2] Por término planta se entiende al sistema fisico (real o teórico) a controlar, en tanto que el modelo se refiere al modelo matemático que representa a la planta.

Strangeland y Foss [24] realizaron uno de los primeros intentos en diseñar esquemas de control para los reactores tubulares. Basados en un modelo de flujo tapón heterogéneo diseñaron un control ante-alimentado para un reactor adiabático. El control se basó en las ecuaciones linealizadas alrededor del estado estacionario deseado, obteniendo la función de transferencia que relacionaba las desviaciones en composición y temperatura con las condiciones de entrada del reactor. Además, investigaron la inyección de una corriente de alimentación secundaria y el efecto de su temperatura para controlar el estado de salida del reactor.

Lynn *et al.* [25], aplicaron el principio del máximo de Pontryagin para formular un problema de control óptimo a un reactor tubular con dispersión axial. Por este método se obtuvieron perfiles de temperatura óptimos para el caso de una reacción consecutiva en el reactor. El objetivo fue maximizar el producto intermedio a la salida del reactor seleccionando la temperatura como función de la longitud del reactor.

Georgakis *et al.* [24 – 26], diseñaron un esquema de control modal para el caso de un reactor tubular con dispersión axial enchaquetado donde ocurre una reacción exotérmica simple irreversible. El desarrollo del control consistió en diseñar la chaqueta de enfriamiento para implementar la acción de control, discretizar las ecuaciones diferenciales parciales del modelo a través de colocación ortogonal, y diseñar el esquema de control basado en la descomposición modal del sistema. Además, por medio del observador de Luenberger reconstruyeron el perfil de concentración del reactor con mediciones de temperatura, para el caso de que la medición de la concentración no era posible. El esquema de control se implementó para estabilizar el estado inestable del reactor.

Sorensen [29] aplicó un filtro de Kalman y control óptimo a un reactor de cama empacada adiabático a nivel planta piloto, en el cual se lleva a cabo una reacción de hidrógeno y oxígeno sobre un catalizador de platino soportado en alúmina. Las PDE del modelo se reducen a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE) por colocación ortogonal. Por medio del filtro de Kalman se obtiene un estimado de los estados del reactor. La implementación del control requirió de 11 mediciones de temperatura, una medición de concentración y una medición de velocidad de flujo. El reactor se controló al ajustar la temperatura de entrada, la concentración de entrada, y la velocidad de flujo. En otro trabajo de Sorensen *et al.* [30], utilizaron el esquema de control desarrollado en [29] para realizar una comparación entre la

implementación continua y discreta del control optimo y el filtrado de Kalman. Por otra parte. Clement *et al.* [31], consideran experimentalmente la implementación discreta del trabajo de Sorensen con perturbaciones estocásticas. Para estos dos ultimos trabajos, la implementación discreta no presentó dificultad alguna, y para velocidades de muestreo lentas presentó mejores resultados respecto a su versión continua.

En [32] Silva *et al.*, consideraron un reactor catalítico de laboratorio de dos camas en serie, con flujo de reactante del primero al siguiente y con una corriente de apagado de hidrogeno inyectada entre las dos camas. El objetivo fue controlar la concentración del producto de salida, la cual se reconstruye con mediciones de la temperatura de la cama. La acción de control se realiza a través de los cambios en la velocidad de flujo y la temperatura de la corriente de apagado. El desarrollo del esquema de control es vía LQG con reducción de las ecuaciones del modelo por colocación ortogonal y con un modelo del proceso incluyendo 11 parámetros. La reconstrucción de la concentración mostró ser muy imprecisa para grandes perturbaciones. Wallman *et al.*, en [33] diseñaron un sistema de control multivariable para regular la concentración de producto de un reactor catalítico de cama fija. El sistema está compuesto de un estimador de la concentración de producto y un controlador PI multivariable que ajusta la velocidad de flujo y la temperatura de una corriente de apagado. El control por LQ se utiliza en esta ocasión con una modificación en la función objetivo para incluir la acción integral en el sistema de control, nuevamente se realiza una discretización por colocación ortogonal. En este caso se utilizan reconstructores de perturbaciones y de estados para implementar la ley de control resultante. A principios de los 80 Foss *et al.* [34], reconsideran el reactor tubular y desarrollaron un sistema de control multivariable de tres entradas para la regulación de la concentración del producto y la temperatura de un reactor catalítico exotérmico de dos camas. Dos de las entradas son la velocidad de flujo y la temperatura de la corriente de apagado inyectada entre las dos camas, la tercera entrada es la temperatura de alimentación. Un compensador dinámico en cascada se diseñó a través del método de localización de características, en este caso se consideró que la concentración es medible.

Cinar [35] considera un reactor tubular de cama empacada con el sistema trabajado en [29]. El problema de control se formula como un problema LQG. La acción de control se implementa al regular una corriente secundaria en el reactor. A diferencia del trabajo de Sorensen [29], de

Silva [32], de Wallman [33] y de Foss [34], en este caso la estimación de los estados del reactor sólo requiere medición en un punto

Mac Gregor *et al.* [36], diseñaron dos tipos de controladores multivariables para un reactor tubular de planta piloto donde se lleva a cabo una reacción exotérmica de hidrogenólisis de butano sobre nickel en un catalizador sol gel. Los dos diseños multivariables presentados son el control LQ y el IMC. En este trabajo se utilizaron modelos empíricos entrada/salida simples. El sistema se estabiliza primero usando la velocidad de flujo de butano para controlar el punto caliente del reactor. La producción de propano y la conversión de butano se controlan al manipular el punto de ajuste o *Set Point* del punto caliente de temperatura y la velocidad de flujo del hidrogeno.

A partir de la década actual, los esfuerzos para desarrollar esquemas de control para los reactores tubulares se enfocaron a técnicas de control no-lineales. Dochain *et al.* [37], diseñaron un esquema de control adaptivo para un reactor biológico de cama empacada, basados sobre la discretización espacial por colocación ortogonal de las ecuaciones diferenciales parciales del modelo. El objetivo fue controlar la concentración de salida del substrato mediante manipulación de la velocidad de flujo de substrato. La implementación del control requirió la medición de la concentración del componente controlado en cada punto de colocación.

Por otra parte, Patwardhan *et al.* [38], aplicaron control predicitvo no-lineal a un reactor de cama fija adiabático, donde se lleva a cabo una reacción irreversible y exotérmica. El objetivo de control fue regular la composición de gas del efluente vía manipulaciones de la velocidad de flujo de la corriente. Para el desarrollo del algoritmo de control se discretizaron las ecuaciones del modelo por colocación ortogonal sobre elementos finitos.

Hanczyc y Palazoglu [39] desarrollaron un esquema de control de modo deslizante (*Sliding mode control*) para el caso de un reactor tubular no isotérmico. La idea principal del control de modo deslizante es definir una superficie sobre la cual el sistema tiene un comportamiento deseado. Para conducir las trayectorias del sistema a la superficie deslizante se proponen leyes de control basadas en condiciones de estabilidad de Lyapunov. Debido a que el modelo del sistema está descrito por ecuaciones diferenciales parciales del tipo hiperbólico, es posible utilizar el método de características para discretizar las ecuaciones y extender la teoría del control de modo deslizante para sistemas de parámetros distribuidos. Para la implemetación de la ley de

control fueron necesarias 5 mediciones de temperatura a lo largo del reactor.

El trabajo de Christofides y Daoutidis [40], sobre el uso de técnicas de control geométrico para sistemas de parámetros distribuidos fue extendido por Gundepudi *et al.* [41], para desarrollar un esquema de control para un reactor tubular isotérmico con flujo pistón. El objetivo fue controlar la concentración de salida de producto mediante manipulaciones de la velocidad de flujo. El controlador diseñado se realizó considerando que no existen perturbaciones y errores de modelado en el sistema.

1.4 Definición del problema

Los reactores químicos, especialmente en los que ocurren reacciones exotérmicas rápidas son generalmente difíciles de controlar. Por ejemplo fluctuaciones amplias en temperaturas extremas resultan de fluctuaciones relativamente pequeñas en una o más variables de operación [17]. Además, la operación en regiones inestables puede resultar en un producto pobre, excursiones de temperatura, deterioramiento rápido del catalizador en reactores tubulares empacados y desgastamiento de los tubos del reactor [42]. El reconocimiento de las circunstancias que pueden causar tales inestabilidades y el saber cómo prevenirlas es un aspecto importante del diseño de esquemas de control que permitan una operación segura y eficiente de estos reactores.

En la mayoría de los esquemas de control propuestos para los reactores tubulares, las técnicas de diseño se han basado en discretización por colocación ortogonal [24 – 32, 35, 36] lo cual tiene la desventaja que en algunos casos implica tener mediciones en los puntos de colocación para fines de control. En otros casos el diseño del controlador involucra seleccionar la colocación óptima de los sensores, y la mejor localización de actuadores [43]. Por otra parte, algunos esquemas de control se basan en sistemas de parámetros distribuidos no lineales que están descritos por ecuaciones diferenciales hiperbólicas de primer orden [39], de forma que la extensión a reactores tubulares descritos con otro tipo de ecuaciones no es directa.

En general, los esquemas de control basados en algoritmos a lazo abierto [24], [25], tienen la desventaja que los errores de modelado y las perturbaciones causan que el proceso se desvíe de la trayectoria óptima, conduciendo a un desempeño pobre. Además, para los controladores formulados con base en la minimización de una función objetivo existe la desventaja que los

problemas de optimización pueden ser no-convexos, entonces el controlador resultante puede ser subóptimo (no se garantiza convergencia a un óptimo global).

En la práctica, cualquier modelo es una copia inexacta de la realidad. Los modelos de procesos químicos incorporan una gran cantidad de diferentes parámetros, algunos de los cuales pueden ser considerados como inciertos. Las incertidumbres pueden ser parámetros del modelo independientes del tiempo, condiciones iniciales, o entradas variantes en tiempo. Para considerar la incertidumbre del modelo, se ha supuesto en algunos casos que la incertidumbre puede representarse como ruido aditivo. Este tipo de incertidumbre fue de interés particular para el desarrollo de control óptimo del tipo LQG [33], [35], [36], filtros de Kalman, y propagación de ruido blanco en sistemas lineales. Sin embargo, el modelo de ruido aditivo es completamente inadecuado para capturar la incertidumbre que surge de variaciones en las propiedades del material de los sistemas físicos [44].

Por otra parte los esquemas de control con técnicas adaptivas [37] tienen la desventaja de que los algoritmos propuestos son altamente no-lineales y dependen del número de parámetros desconocidos o inciertos [45], y para algunos casos el tiempo de cómputo necesario para tales algoritmos puede ser elevado. Los métodos geométricos [21], además tienen la desventaja del uso de un lenguaje abstracto de geometría diferencial, haciendo poco legibles los resultados para los ingenieros de control. En general, los controladores basados en modelo no-lineal [36 – 37] se diseñan para cumplir un desempeño deseado y para garantizar estabilidad sobre un rango de operación mayor. Sin embargo, existe la desventaja que solamente pocas técnicas de diseño de controladores no-lineales permiten lograr un buen desempeño y además asegurar estabilidad. Otra severa desventaja de las estrategias de control no-lineal existentes es el gran esfuerzo usualmente requerido para diseñar estos controladores y el apreciable tiempo de cómputo en línea necesario para calcular la acción de control a ser aplicada.

Como se ha mencionado anteriormente, las incertidumbres del modelo conducen a diferencias entre la planta física real a controlar y el modelo que se usa para representar su comportamiento. El control robusto incluye esta diferencia planta/modelo definiendo un conjunto de plantas de las cuales el proceso verdadero es un elemento. Este conjunto está definido por una descripción de incertidumbres. Así, los controladores se diseñan para ser robustos a la incertidumbre, esto es, para lograr un nivel deseado de desempeño para cualquier planta en el conjunto.

Básicamente, el problema se puede definir como sigue: a pesar de que se han propuesto e implementado estrategias de control para los reactores tubulares, *existe la necesidad de contar con estrategias de control robusto para el caso de reactores tubulares que permitan un buen desempeño a lazo cerrado a pesar de incertidumbres en el modelo y de los parametros (i.e., errores de modelado).* La dificultad asociada con los esquemas de control propuestos radica en la necesidad de demasiada información de parámetros y de mediciones, de las diferencias planta/modelo debida a incertidumbres generalmente despreciada en los controladores que se han propuesto y de los complicados algoritmos que resultan en otros casos.

1.5 Objetivos

El objetivo general de este trabajo es proponer estrategias de control robusto para el caso de reactores tubulares que permitan un diseño simple de los controladores y la capacidad para lograr un desempeño satisfactorio.

Los objetivos particulares son:

1. *Estudiar la dinámica de los reactores tubulares.* Una buena comprensión de los fenómenos físicos y químicos que se llevan a cabo en los reactores tubulares en los procesos industiales es un parámetro importante para el diseño de esquemas de control simples y efectivos.

2. *Desarrollar modelos entrada/salida con el fin de usarlos para el diseño de controladores.* Esta forma es muy conveniente debido a que representa directamente la *causa - efecto* de un proceso.

3. *Caracterizar las incertidumbres asociadas a tales modelos.* Cualquier modelo (lineal o no lineal) es una representación simplificada del proceso. Invariablemente, existen retrasos de transporte adicionales, efectos de mezclado, pérdidas de calor, y otras no linealidades que no son capturadas en el modelo.

4. *Desarrollar esquemas de control robusto para el caso de reactores tubulares.* Es importante desarrollar métodos de diseño y análisis de controladores que aseguren buen desempeño a lazo cerrado a pesar de incertidumbre y errores de modelado.

1.6 Estructura de la tesis

Este trabajo se divide en seis capítulos y tres apéndices:

En el Capítulo 2 se proporciona el marco teórico, herramientas de control, definiciones y terminología de los conceptos a utilizar en el desarrollo de los esquemas de control robusto. Además, se presentan aspectos generales del modelamiento matemático y conceptos básicos de estabilidad de sistemas lineales y no lineales.

En el Capítulo 3 se presenta el modelamiento matemático y el comportamiento dinámico general de los reactores tubulares. En particular se estudia el modelamiento y la dinámica de tres tipos de reactores tubulares. Un reactor biológico, el reactor tubular con dispersión axial y el reactor tubular con reciclo. A nivel industrial este tipo de reactores cubren alrededor de un 90% de los reactores tubulares en operación en las industrias del primer mundo [3].

En el Capítulo 4 se desarrollan esquemas de control robusto para el caso de los tres tipos de reactores tubulares. Además, se muestra la equivalencia de los controladores robustos propuestos con los controladores clásicos PI y PID.

En el Capítulo 5 los esquemas de control robustos para el caso del reactor biológico y el reactor tubular con dispersión axial se implementan a través de simulaciones numéricas.

Finalmente, en el Capítulo 6 se discuten las conclusiones del trabajo.

Al final de cada capítulo se presenta una sección de notas y referencias para la gente interesada en la ampliación de cada tema en particular. En la sección de apéndices se incluye una discusión de los métodos numéricos para el reactor tubular.

La presentación del presente trabajo está planeada de tal forma que sea útil para los estudiantes recién graduados en carreras de ingeniería (en especial de ingeniería química), de primer año de estudios de posgrado y de ingenieros de procesos interesados en el comportamiento dinámico y control de los reactores tubulares.

Capítulo 2

Marco Teórico

> A theory is just a model of the universe, or a restricted part of it, and a set of rules that relate quantities in the model to observations that we make. It exists only in our minds and does not have any other reality (whatever that might mean). A theory is a good theory if it satisfies two requirements: it must accurately describe a large class of observations on the basis of the model that contains only a few arbitrary elements, and it must make definite predictions about the results of future observations.
>
> *Stephen Hawking (1988)*

El objetivo de este capítulo es presentar algunos conceptos teóricos de sistemas y de control tales como: desempeño, observabilidad y robustez. Se discuten además aspectos generales del modelamiento matemático y se presentan algunas nociones de estabilidad de sistemas lineales y no-lineales.

2.1 Diseño de sistemas de control

La meta de la ingeniería de control es modificar el desempeño de un sistema por la adición de sensores, procesadores de control y actuadores. Los sensores miden señales en el sistema, los actuadores se usan para manipular alguna variable de entrada que afecte la variable controlada, y la función del controlador es: dada una medición y una especificación del valor deseado, calcular una señal de salida del controlador adecuada que logre que el desempeño deseado del

sistema se cumpla. En general, el procedimiento para el diseño de un sistema de control puede enunciarse en 5 pasos:

1. Seleccionar los actuadores y sensores, y especificar el comportamiento deseado.
2. Modelar el comportamiento del proceso real por un conjunto de ecuaciones diferenciales.
3. Diseñar una ley de control para el sistema.
4. Analizar y simular el esquema de control resultante.
5. Implementar el esquema de control.

2.1.1 Configuración de control

La *configuración de control* es la selección y colocación de los actuadores y sensores sobre el sistema a ser controlado.

Selección de actuadores y colocación El ingeniero de control debe decidir el tipo y la colocación de los actuadores. En sistemas industriales, por ejemplo, el ingeniero debe decidir dónde colocar los actuadores tales como bombas, calentadores, y válvulas, así como las características de los mismos, incluyendo potencia, velocidad de respuesta, precisión de respuesta y costos.

Selección de sensores y colocación El ingeniero de control debe decidir cuáles señales en el sistema serán medidas o sensadas, y con qué sensor. En un proceso industrial, por ejemplo el ingeniero de control debe decidir cuáles son las variables críticas (temperaturas, velocidades de flujo, presiones, y concentraciones) a medir. Además de elegir el tipo de transductor y el *hardware* para la adquisición de datos, etc.

2.1.2 Metas del diseño del controlador

Básicamente ésta es: dado un modelo para una planta química industrial y ciertas especificaciones de desempeño, desarrollar un sistema de control que garantice un desempeño dinámico satisfactorio y estable en presencia de todas las perturbaciones del proceso e incertidumbres del modelamiento. Esta importante cualidad del sistema de control se llama *robustez.*

Especificaciones de desempeño Las especificaciones de desempeño describen cómo debe comportarse el sistema a lazo cerrado, por ejemplo:

- Buena regulación a pesar de perturbaciones. Las perturbaciones o ruidos que actuan sobre el sistema deben tener poco efecto sobre alguna variable crítica en el sistema. La capacidad de un sistema de control para atenuar los efectos de perturbaciones sobre alguna variable del sistema se denomina *regulación*.

- Respuesta deseada a señales de referencia. Algunas variables en el sistema deben de responder en forma particular a señales de referencia.

Especificaciones de Robustez La robustez cuantifica el efecto de las incertidumbres del modelamiento sobre las propiedades de un sistema a lazo cerrado tales como su estabilidad y desempeño. Debido a que siempre existe una diferencia entre el modelo y la planta verdadera, la robustez debe ser una parte integral del diseño de un sistema de control. Tales perturbaciones del sistema a ser controladas incluyen: (1) Las características del sistema a ser controlado pueden cambiar. (2) El sistema a ser controlado puede haber sido modelado o identificado imprecisamente, posiblemente intencionalmente. Por ejemplo, ciertos modos estructurales o no-linealidades pueden ser ignorados. (3) Fallas ordinarias, tales como fallas en los actuadores y sensores.

Por otra parte, el sistema de control puede sufrir problemas potenciales durante operación anormal o en puntos de operación que no son los mismos a los de diseño. Por ejemplo, las ganancias del proceso y las constantes de tiempo pueden cambiar drásticamente haciendo necesario el re-sintonizado del controlador.

Las especificaciones de robustez pueden tomar varias formas, por lo general está dada por márgenes garantizados. Es decir, el sistema de control debe tener la capacidad para lograr alguna especificación de desempeño a pesar de algún conjunto de perturbaciones.

Especificaciones de la ley de control Además de la meta y de las especificaciones mencionadas en los párrafos anteriores, existen muchas restricciones sobre la ley de control misma. Estas especificaciones de la ley de control se relacionan generalmente con la implementación del

controlador. (*i.e.*, el controlador tiene una forma específica (*p.ej.* PID), y/o el controlador es lineal e invariante en tiempo (LTI)).

2.1.3 El algoritmo PID

Existen muchos controladores diferentes, pero el controlador retroalimentado más ampliamente usado utiliza un algoritmo proporcional integral y derivativo (PID). Existen muchas variaciones, pero la definición del algoritmo PID es:

$$m(t) = K_p e(t) + K_i \int_0^t e(t)dt + K_d \left[de(t)/dt\right] \tag{2.1}$$

donde $e(t) = (y_{ref} - y(t))$

El término $K_p e(t)$ proporciona una acción de control proporcional al error. El término integral ajusta la salida del controlador en forma continua hasta que el error llega a cero. El término derivativo proporciona un tipo de predicción que permite al controlador anticipar errores futuros.

Al aplicar la transformada de Laplace de la ecuación (2.1), ésta toma la forma:

$$m(s) = \left[K_p + \frac{K_i}{s} + K_d s\right] e(s) \tag{2.2}$$

El término entre corchetes se denomina la función de transferencia y la salida se calcula siempre como el producto de la función de transferencia por la entrada. Una tarea del ingeniero de control es definir la forma del controlador (*p.ej.* PID) y elegir valores apropiados para las constantes del controlador. Mediante un análisis de estabilidad para sistemas con controladores PID se puede mostrar que un controlador pobremente definido puede resultar en un sistema inestable. La naturaleza no intuitiva de la ecuación (2.1), y los problemas asociados con la elección adecuada de las constantes del controlador son las principales desventajas del algoritmo PID. La ventaja obvía del controlador PID es su simplicidad. Entonces, existe una necesidad para diseñar mejores técnicas y estrategias de control que reduzcan la necesidad de una experiencia extensiva y de iteraciones de prueba y error.

Reset Windup El modo integral de los controladores PI o PID se usa para eliminar la desviación en estado estacionario para perturbaciones tipo escalón, y además, como ha indicado Alvarez-Ramírez *et al.* [47], sirve como un estimador de perturbaciones. Para un sistema que logra la saturación y cuenta con un sistema de control con acción integral, si la entrada de control del sistema excede el nivel de saturación debido al cambio repentino en una entrada de referencia o una perturbación, entonces el retroalimentado se interrumpe y el sistema se comporta como un sistema a lazo abierto. Entonces, debido a la acción integral, el sistema conduce a efectos laterales no deseables tales como grandes sobredisparos y tiempos de asentamiento, o incluso puede conducir a inestabilidades [48]. El término general para este fenómeno es el *reset windup*, y la estructura que previene tal comportamiento indeseable se denomina configuración de *anti-reset windup* (ARW). Algunas configuraciones de ARW son usar retroalimentado externo, desconectar la acción integral cuando la saturación está presente, entre otras, que no afectan el desempeño del algoritmo PI/PID en condiciones normales.

2.1.4 Implementación del controlador

El algoritmo que procesa la señal especificada por el controlador se implementa sobre procesadores de control. Los procesadores de control disponibles comercialmente están generalmente restringidos a control lógico y a tipos especificos de leyes de control tales como la PID.

Sintonizado, validación, y prueba de los sistemas de control

Existe una gran variedad de métodos de sintonizado para los controladores retroalimentados. Probablemente un 80 por ciento de los lazos de control se sintonizan experimentalmente [23].

La prueba a los sistemas de control puede implicar: (1) Simulaciones por computadora con un modelo matemático detallado. (2) Simulación en tiempo real del sistema con el procesador del control operando (hardware en el lazo). (3) Simulación en tiempo real del procesador de control conectado al sistema a ser controlado. (4) Pruebas de campo del sistema de control.

2.1.5 Problemas en el control de procesos: perturbaciones, no-linealidades, muestreo y ruido de medición.

Perturbaciones

El rechazo de perturbaciones es un aspecto importante de cualquier sistema de control, y en muchos casos el más importante. La caracterización típica de las perturbaciones es: perturbaciones de carga, errores de medición, y variaciones en los parámetros. Las perturbaciones de mayor influencia para propósitos de determinación de la velocidad de muestreo, son las de alta frecuencia. Es decir, aquellas perturbaciones que son rápidas comparadas con la velocidad de muestreo y la planta.

Perturbaciones de carga Las perturbaciones de carga en el control de procesos pueden deberse a variaciones de la calidad en un flujo de alimentación o a variaciones en la demanda de flujo. En sistemas térmicos las perturbaciones de carga pueden ser variaciones en la temperatura del ambiente. Las perturbaciones de carga por lo general varían lentamente.

Errores de medición Los errores de medición entran en los sensores. Éstos pueden ser errores en estado estacionario debido a errores en la calibración del sensor o pueden ser dinámicos debido a la dinámica del sensor. Por ejemplo, los termopares pueden tener una constante de tiempo de 10 a 50 segundos. Además, puede existir una interacción complicada entre los sensores y el proceso.

Variaciones en los parámetros El ruido de medición y las perturbaciones en la teoría lineal se consideran que aparecen aditivamente. Sin embargo, los sistemas reales son no lineales. Esto implica que las perturbaciones entran en forma más complicada. El proceso de linealización del modelo no lineal puede conducir a perturbaciones que aparecen como variaciones en los parámetros del modelo lineal.

No-linealidades en los sistemas de control

Las no-linealidades se pueden presentar en cualquier parte de un sistema de control conduciendo a un sistema de control no-lineal. Las no-linealidades pueden clasificarse en continuas y

discontinuas. Las no linealidades discontinuas también se conocen como "duras" debido a que no pueden aproximarse localmente por funciones lineales. Algunas no-linealidades comunes en los sistemas de control se discuten a continuación.

Saturación Cuando se incrementa la entrada a un instrumento físico se presenta el siguiente fenómeno: Si la entrada es pequeña, conduce a un incremento por lo general proporcional a la salida, cuando la entrada logra un cierto nivel, un incremento adicional no produce un incremento en la salida. Esto es, la salida permanece en un valor máximo. En tanto que un decremento en la entrada conduce a un valor mínimo. Cuando esto pasa se dice que ocurre una *saturación*. Una no-linealidad de saturación es por lo general provocada por los límites, las propiedades del material, y el poder disponible de algún componente. La mayoría de los actuadores despliegan características de saturación.

Zonas muertas En la mayoría de instrumentos físicos, la salida es cero hasta que la magnitud de la entrada excede cierto valor. Tal relación entrada-salida se denomina una *zona muerta*. La zona muerta puede conducir a ciclos límites o a la inestabilidad del sistema debido a la ausencia de respuesta en esta zona.

Muestreo y ruido de medición

Efecto del muestreo de datos En sistemas de control que usan las computadoras digitales como procesadores de control, las señales se muestrêan a intervalos regulares, los cuales pueden diferir para señales diferentes. En algunos casos estos intervalos son suficientemente cortos que las señales muestradas son buenas aproximaciones de las señales continuas, pero en muchos casos los efectos de este muestreo deben ser considerados en el diseño del sistema de control. Generalmente, el desempeño de un controlador digital se mejora con el incremento en la velocidad de muestreo, pero el costo puede aumentar con un muestreo más veloz. Un decremento en la velocidad de muestreo implica más tiempo disponible para los cálculos de control, por lo tanto son posibles computadoras más pequeñas para una función de control dada, o bien más capacidad de control está disponible para la computadora.

Efecto del ruido de medición La presencia de ruido conduce a un problema de control más difícil, pero es una característica inherente en las aplicaciones de procesos. En algunas aplicaciones el ruido es insignificante o puede removerse por filtros simples. Sin embargo, en muchas aplicaciones debe tratarse directamente.

2.2 Definiciones y terminología: Sistemas lineales y no lineales

La representación de sistemas puede clasificarse en numerosas categorias de acuerdo a su estructura matemática y su realizabilidad física. Por ejemplo, los sistemas pueden estar distribuidos y ser representados comunmente por ecuaciones diferenciales parciales, o agrupados y representarse por ecuaciones diferenciales ordinarias. Pueden ser estocásticos (aleatorios) o determinísticos, lineales o no lineales, discretos o continuos, autónomos o no autónomos. Los sistemas físicos usualmente se suponen que son causales en respuesta y, además no pueden diverger al infinito en tiempo finito (escape en tiempo finito), es decir, deben tener energía finita. Cuando un sistema se describe causalmente, su comportamiento futuro se determina por su pasado, el pasado se resume usualmente en el estado. Para un sistema determínistico todo su comportamiento futuro puede predecirse en este sentido, siempre considerando la restricción que el caos puede imponer sobre la utilidad de la predicción. Para sistemas estocásticos el comportamiento futuro total no puede ser predicho, pero las propiedades promedio usualmente sí pueden hacerlo.

Un sistema dinámico no lineal puede representarse por un conjunto de ecuaciones de la forma

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \tag{2.3}$$

donde $\mathbf{f}$ es una función vectorial no lineal nx1, y $\mathbf{x}$ es un vector de estados nx1. Un valor particular del vector de estados se denomina un punto debido a que corresponde a un punto en el espacio-estado. El número de estados n se denomina el orden del sistema. Una solución $\mathbf{x}(t)$ de la ecuación (2.3) usualmente corresponde a una curva en el espacio-estado conforme t va desde cero a infinito. Esta curva se refiere generalmente como trayectoria del estado o trayectoria del sistema.

Para un sistema con control, la dinámica de la planta es $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$, con la ley de control

$\mathbf{u} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, t)$, entonces la dinámica a lazo cerrado es $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{g}(\mathbf{x}, t), t)$, la cual se puede re-escribir como (2.3). Un caso especial de los sistemas no lineales son los sistemas lineales, los cuales son de la forma $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(\mathbf{t})\mathbf{x}$, donde $\mathbf{A}(\mathbf{t})$ es una matriz nxn. Todos los diseños de la teoría de control pueden representarse en la forma

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t), \\ \mathbf{y} &= \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \end{aligned} \tag{2.4}$$

donde $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ es un vector de variables de estado, $\mathbf{y}$ un vector de observaciones y $\mathbf{u}$ un vector de variables de control. El control retroalimentado busca una función $\mathbf{u} = \mathbf{h}(\mathbf{y})$ que logre ciertas metas; la teoría de control óptimo se ocupa de encontrar el control $\mathbf{u}$ que maximice o minimice alguna funcionalidad de la trayectoria o una función del estado final.

Sistemas autónomos y no-autónomos

Los sistemas lineales se clasifican como variantes o invariantes en tiempo, dependiendo si la matriz $\mathbf{A}$ varía con el tiempo o no.

Definition 1 *El sistema no lineal (2.3), se dice que es autónomo si y sólo si* $\mathbf{f}$ *no depende explícitamente del tiempo, i.e., si la ecuación de estado del sistema puede ser escrita como*

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \tag{2.5}$$

de otra manera, el sistema es llamado no autónomo.

Los sistemas invariantes en tiempo (LTI) también se les llama autónomos y a los sistemas variantes en tiempo (LTV) como no-autónomos.

Puntos de esquilibrio

Definition 2 *Un estado* $\mathbf{x}^*$ *es un estado de equilibrio (o punto de equilibrio) del sistema si una vez que* $\mathbf{x}(t)$ *es igual a* $\mathbf{x}^*$, *éste permanece igual a* $\mathbf{x}^*$ *para todo tiempo futuro.*

2.2.1 Sistemas lineales

Un sistema dinámico lineal puede ser descrito por las ecuaciones diferenciales:

$$\dot{x} = Ax + Bu \tag{2.6}$$

$$y = Cx + Du \tag{2.7}$$

$$x(t_o) = x_o \tag{2.8}$$

donde:

$x(t) \in \mathbb{R}^n$ es el estado del sistema

$u(t) \in \mathbb{R}^m$ es la entrada del sistema

$y(t) \in \mathbb{R}^p$ es la salida del sistema

$x(t_o)$ es la condición inicial.

A, B, C, y D son matrices con coeficientes constantes reales. Cuando $m = 1$ (entrada simple) y $p = 1$ (salida simple) el sistema se denomina simple entrada-simple salida (SISO), de otra forma es llamado un sistema multiple entrada-múltiple salida (MIMO).

En notación compacta el sistema dado por (2.6), (2.7), y (2.8) se puede escribir como:

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ u \end{bmatrix} \tag{2.9}$$

y al tomar la transformada de Laplace de las ecuaciones (2.6), y (2.7) con condición inicial cero ($x(0) = 0$) se puede obtener:

$$\frac{Y(S)}{U(s)} = C(sI - A)^{-1}B + D \tag{2.10}$$

así, la función de transferencia esta dada por:

$$G(s) = C(sI - A)^{-1}B + D \tag{2.11}$$

Orden relativo de sistemas lineales

Considere la transformada de Laplace del sistema lineal.

$$C(sI - A)^{-1}B = \frac{Cadj(sI - A)B}{\det(sI - A)} = \frac{b_m s^m + b_{m-1}s^{m-1} + ... + b_1 s + b_o}{a_n s^n + a_{n-1}s^{n-1} + ... + a_1 s + a_o} \tag{2.12}$$

De la expresión (2.12), el orden del denominador $\det(sI - A)$ es siempre n, pero el orden del numerador $Cadj(sI - A)B$ puede ser cualquier valor entre cero y $n - 1$. El orden relativo del sistema es la diferencia entre el orden del denominador $\det(sI - A)$, y el orden del numerador $\det(sI - A)$.

Ceros y polos de sistemas lineales

Los ceros de un sistema lineal (2.6), son las raíces del polinomio del numerador de la función de transferencia, *i.e.*, las raíces de $Cadj(sI - A)B$. En tanto que los polos del sistema lineal son las raíces del polinomio del denominador de la función de transferencia, *i.e.*, las raíces de $\det(sI - A)$. Un análisis en el dominio del tiempo para un sistema físico (*i.e.*, un sistema causal) conduce a la conclusión importante que los ceros de la función de transferencia no tienen efecto sobre la estabilidad del sistema. Por otra parte, si los polos del sistema permanecen en el semiplano izquierdo complejo el sistema es estable.

Retroalimentado de estado estático

Considere el sistema dado por (2.6) y (2.7) y la condición inicial (2.8) sujeto a la ley de control retroalimentado

$$u = \lambda v - kx \tag{2.13}$$

donde v es una entrada externa escalar, λ es una ganancia escalar para la pre-compensación de entrada externa, y k es un n renglón de ganacias retroalimentadas. Sin perder generalidad con D igual a cero, el sistema a lazo cerrado resultante está dado por

$$\dot{x} = (A - Bk)x + (\lambda B)v \tag{2.14}$$

$$y = Cx \tag{2.15}$$

El retroalimentado estático tiene las siguientes propiedades

1. Preserva la linealidad del sistema.
2. Preserva el orden relativo del sistema.
3. Preserva los ceros del sistema.
4. Modifica los polos del sistema.

Controlabilidad

Definition 3 *El sistema dinámico descrito por las ecuaciones (2.6), y (2.8) o el par (A, B) se dice que es* controlable *si, para cualquier estado inicial $x(0) = x_o$, $t_1 > 0$ y el estado final x_1, existe una entrada $u(\cdot)$ tal que la solución de la ecuación (2.6) satisface $x(t_1) = x_1$. De otra forma, el sistema o el par (A, B) se dice que es* no controlable.

Observabilidad

Definition 4 *El sistema dinámico descrito por las ecuaciones (2.6), (2.7), y (2.8) o por el par (C, A) se dice que es* observable *si, para cualquier $t_1 > 0$, el estado inicial $x(o) = x_o$ puede ser determinado desde la historia de tiempo de la entrada $u(t)$ y la salida $y(t)$ en el intervalo de $[0, t_1]$. De otra forma, el sistema, o (C, A), se dice que es* no observable.

Estabilidad

Definition 5 *Un sistema dinámico no forzado $\dot{x} = Ax$ se dice que es* estable *si todos los eigenvalores de A están en el semiplano izquierdo complejo abierto; esto es, $\mathrm{Re}\,\lambda(A) < 0$. Una matriz A con tal propiedad se dice que es* estable *o Hurwitz.*

Definition 6 *El sistema dinámico de ecuaciones (2.6), o el par (A, B) se dice que es* estabilizable *si existe un retroalimentado de estado $u = Fx$ tal que el sistema sea estable (i.e., $A + BF$ es estable).*

Definition 7 *El sistema (2.6), o el par (C, A), es* detectable *si $A + LC$ es estable para algún L, donde L es una matriz.*

Definition 8 *Sea λ un eigenvalor de A o, equivalentemente, un modo del sistema. Entonces el modo λ se dice que es controlable (observable) si $x^T B \neq 0$ ($Cx \neq 0$) para todos los eigenvectores izquierdos (derechos) de A asociados con λ; esto es, $x^T A = \lambda x$ ($Ax = \lambda x$) y $0 \neq x \in \mathbb{C}^n$. De otra forma, el modo se dice que es no controlable (no observable).*

La controlabilidad y observabilidad de un sistema puede verificarse a través de algunos criterios geométricos o algebraicos. La estabilidad dada por la definición 8 se denomina *estabilidad por retroalimentado de estado.*

2.2.2 Estimación y Observadores

La estimación de estados y parámetros son muy importantes en el control de procesos. Cuando todos los estados del proceso requeridos por el controlador no es posible medirlos o existen perturbaciones no medibles aleatorias sustanciales o ruido de medición en el proceso, surge la necesidad de usar estimadores de estados. A pesar que existen numerosas formas para construir estimadores de estados, las propuestas más comunes involucran estimadores estocásticos tales como los filtros de Kalman y el filtro extendido de Kalman o estimadores determinísticos tales como los denominados observadores.

Un observador es un sistema dinámico con entrada (u, y) y salida (denotada por $\widehat{x}$), que estima asintóticamente al estado x, esto es, $\widehat{x} - x \to 0$ conforme $t \to \infty$ para todos los estados iniciales y para cada entrada.

Theorem 9 *Un observador existe si y sólo si (C, A) es detectable. Además, si (C, A) es detectable, entonces un observador de Luenberger de orden completo está dado por*

$$\dot{q} = Aq + Bu + L(Cq + Du - y) \tag{2.16}$$

$$\widehat{x} = q \tag{2.17}$$

donde L es cualquier matriz tal que $A + LC$ sea estable.

Observadores de orden reducido

El observador de orden completo tiene n estados, donde n es el orden de la realización cuyos estados son observados. Luenberger indicó que el orden del observador puede ser menor al observador de orden completo debido a que la salida observada proporciona una relación lineal $y(t) = Cx(t)$ entre las variables de estado. Por lo tanto es suficiente observar $n - 1$ de los estados y calcular el estado final de ésta relación lineal.

2.2.3 Sistemas no lineales: Método de estabilidad de Lyapunov

Dado un sistema de control, la primera y más importante cuestión acerca de sus propiedades es su estabilidad. Cualitativamente, un sistema se describe como estable si iniciando el sistema en algún lugar cercano al punto de operación deseado implica que permanecerá alrededor del punto en todo instante.

La propuesta más útil para estudiar la estabilidad de un sistema de control no lineal se debe al trabajo de Lyapunov. El trabajo de Lyapunov incluye dos métodos para el análisis de estabilidad. El método de linealización conduce a conclusiones acerca de las propiedades de estabilidad local, de la aproximación lineal de un sistema no lineal, alrededor de un punto de equilibrio. El método directo no se restringe a un movimiento local, y determina las propiedades de estabilidad de un sistema no lineal construyendo funciones escalares "tipo-energéticas" para el sistema y examinado la variación del tiempo de la función. Para presentar las nociones de estabilidad en esta sección se considera un sistema no lineal.

Conceptos de estabilidad

Sea $\mathbf{B}_R$ la región esférica definida por $\|\mathbf{x}\| < R$ en el espacio-estado, y $\mathbf{S}_R$ la esfera misma, definida por $\|\mathbf{x}\| = R$.

Estabilidad e Inestabilidad

Definition 10 *El estado de equilibrio* $\mathbf{x}=0$ *se dice que es estable si, para cualquier* $R \geq 0$, *existe un* $r \geq 0$, *tal que si* $\|\mathbf{x}(0)\| < r$, *entonces* $\|\mathbf{x}(t)\| < R$ *para todo* $t \geq 0$. *De otra forma el punto de equilibrio es inestable.*

Estabilidad asintótica y estabilidad exponencial

Definition 11 *Un punto de equilibrio* $\mathbf{0}$ *es asintóticamente estable si éste es estable, y si además existe algún* $r \geq 0$ *tal que* $\|\mathbf{x}(0)\| < r$ *implica que* $x(t) \to 0$ *conforme* $t \to \infty$.

Un punto de equilibrio el cual es estable pero no asintóticamente estable se denomina marginalmente estable.

Definition 12 *El punto de equilibrio* $\mathbf{0}$ *es exponencialmente estable si existen dos números estrictamente positivos* α *y* λ *tales que*

$$\forall t > 0, \quad \|\mathbf{x}(t)\| \leq \alpha \|\mathbf{x}(0)\| \exp(-\lambda t) \tag{2.18}$$

en alguna bola $\mathbf{B}_r$ *alrededor del origen.*

Estabilidad local y global

Definition 13 *Si la estabilidad asintótica (o exponencial) se mantiene para todos los estados iniciales, el punto de equilibrio se dice que es estable asintóticamente (o exponencialmente) globamente. Esto se denomina estabilidad globalmente asintótica (o exponencial).*

Linealización y estabilidad local

El método de linealización de Lyapunov se ocupa de la estabilidad local de un sistema no-lineal. El método de linealización de Lyapunov sirve como justificación al uso de técnicas de control lineales en la práctica, *i.e.*, muestra que el diseño estable por control lineal garantiza la estabilidad del sistema físico original localmente.

Theorem 14 *(Método de linealización de Lyapunov).*

- *Si el sistema linealizado es estrictamente estable (i.e., si todos los eigenvalores de* $\mathbf{A}$ *están estrictamente en el semiplano izquierdo complejo), entonces el punto de equilibrio es asintóticamente estable (para el sistema no lineal).*

- *Si el sistema linealizado es inestable (i.e., si al menos un eigenvalor de A está estrictamente en el semiplano complejo derecho), entonces el punto de equilibrio es inestable (para el sistema no-lineal).*

- *Si el sistema linealizado es marginalmente estable (i.e., todos los eigenvalores de A están en el semiplano complejo izquierdo, pero al menos uno de ellos está sobre el eje $j\omega$), entonces no se puede concluir nada para la aproximación lineal (el punto de equilibrio puede ser estable, asintóticamente estable, o inestable para el sistema no-lineal).*

Método directo de Lyapunov

El método directo de Lyapunov es probablemente la técnica más ampliamente usada en el análisis de estabilidad de sistemas dinámicos no-lineales. La filosofía básica del método directo de Lyapunov es la extensión matemática de una observación física fundamental: si la energía total de un sistema mecánico (o eléctrico) se disipa continuamente, entonces el sistema, ya sea lineal o no lineal, debe establecerse finalmente en un punto de equilibrio. Así, podemos concluir la estabilidad de un sistema examinado la variación de una función escalar simple. Algunas relaciones entre la energía mecánica y los conceptos de estabilidad son:

- Energía cero corresponde a un punto de equilibrio ($\mathbf{x}^*$, $\dot{\mathbf{x}}= 0$)
- Estabilidad asintótica implica la convergencia de energía mecánica a cero
- La inestabilidad está relacionada al crecimiento de la energía mecánica

Funciones Lyapunov y funciones positivas definidas

Definition 15 *Una función escalar continua $V(\mathbf{x})$ se dice que es positiva definida localmente si $V(0) = 0$ y, para alguna bola $\mathbf{B}_{R_o}$, $\mathbf{x} \neq 0 \Rightarrow V(\mathbf{x}) > 0$. Si $V(0) = 0$ y la propiedad anterior se mantiene sobre el estado-espacio completo, entonces $V(\mathbf{x})$ se dice que es positiva definida globalmente.*

Definition 16 *Si, en una bola $\mathbf{B}_{R_o}$, la función $V(\mathbf{x})$ es positiva definida y tiene derivadas parciales continuas, y si estas derivadas respecto al tiempo a lo largo de cualquier trayectoria*

de estado del sistema (2.5) son negativas semidefinidas, i.e., $\dot{V}(\mathbf{x}) \leq 0$, *entonces* $V(\mathbf{x})$ *se dice que es una función de Lyapunov para el sistema (2.5).*

Teorema de Lyapunov para la estabilidad local

Theorem 17 *(Estabilidad local) Si, en una bola* $\mathbf{B}_{R_o}$, *existe una función escalar* $V(\mathbf{x})$ *con primeras derivadas parciales continuas tal que*

- $V(\mathbf{x})$ *es positiva definida (localmente en* $\mathbf{B}_{R_o}$*)*
- $\dot{V}(\mathbf{x})$ *es negativa semidefinida (localmente en* $\mathbf{B}_{R_o}$*)*

entonces el punto de equilibrio 0 *es estable. Si, la derivada* $\dot{V}(\mathbf{x})$ *es localmente negativa definida en* $\mathbf{B}_{R_o}$, *entonces la estabilidad es asintótica.*

Teorema de Lyapunov para la estabilidad global

Theorem 18 *(Estabilidad global) Supongamos que existe una función escalar* V *del estado* $\mathbf{x}$, *con derivadas de primer orden continuas tal que*

- $V(\mathbf{x})$ *es positiva definida*
- $\dot{V}(\mathbf{x})$ *es negativa semidefinida*
- $V(\mathbf{x}) \rightarrow \infty$ *conforme* $\|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty$

entonces el equilibrio en el origen es estable globalmente asintótico.

Bifurcaciones

El sistema dinámico no lineal (2.5) se puede re-escribir de la forma

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \lambda) \tag{2.19}$$

donde λ es un parámetro real. El estado $\mathbf{x}$ que es una solución de la ecuación (2.19) depende de $\lambda \in \mathbb{R}_+$ Las soluciones estacionarias $\mathbf{x}^*$ de (2.19) resuelven

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}^*, \lambda) = 0 \tag{2.20}$$

Las soluciones periódicas del sistema autónomo (2.19) satisfacen $\mathbf{x}(t+T) = \mathbf{x}(t)$ para todo t y un periodo mínimo $T > 0$. Las soluciones en general varían cuando λ cambia. Existe un continuo de soluciones parametrizadas por λ. El continuo suave de soluciones se denomina una rama. Los diagramas mostrando un escalar representativo de $\mathbf{x}$ contra el parámetro λ se denominan diagramas de ramificación, diagramas de bifurcación, o diagramas de respuesta. Los diagramas de bifurcación dan señales de la estructura dinámica de las ecuaciones [51]. Recordamos que una solución $\mathbf{x}_0$ de (2.19) en $\lambda = \lambda_0$ es estable (asintóticamente) si todos los eigenvalores de $\mathbf{f}_\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, \lambda_0)$ permanecen en el semiplano complejo izquierdo negativo, y son inestables si existe un eigenvalor con parte real positiva. Las soluciones estables son localmente atractoras.

Hablando vagamente, una bifurcación con respecto a λ es una solución específica en λ_0 donde no existe una vecindad alrededor de λ_0 tal que en esta vecindad la rama puede extenderse únicamente. En una bifurcación Hopf, la rama de soluciones estacionarias no bifurcan. El Jacobiano en una bifurcación Hopf tiene un par de eigenvalores puramente imaginarios $\pm i\beta$. Aquí surge una rama de órbitas periódicas. Los sistemas determinísticos (2.19) permiten además soluciones no periódicas que han sido denominadas caos. Existen varias formas de explicar el caos. Una de ellas está relacionada a la duplicación periódica.

Atractores

Un atractor es un objeto matemático hacia el cual un sistema dinámico es finalmente confinado. Cualitativamente, tal objeto (el atractor) es el conjunto de soluciones a las ecuaciones dinámicas cuando la simulación se deja correr un tiempo grande. Existen cuatro tipos principales de atractores: puntos fijos, ciclos límite, toroidal o cuasi-periódico, y extraño. Un atractor punto fijo es sólo un nombre imaginario para un punto de equilibrio. Un ciclo límite, es una curva cerrada que representa las soluciones repetitivas. Un atractor toroidal o cuasi-periódico es una superficie en el espacio fase formada como un toro, el cual puede extenderse y distorcionarse. Las soluciones del sistema son confinadas a esta superficie toroidal. Un atractor extraño es similar pero superficialmente más complicado al cual las soluciones son confinadas. El punto

importante del concepto de atractor es que las dinámicas están acotadas al ser confinadas a la estructura del atractor en un tiempo suficientemente grande.

2.3 Modelamiento

Un sistema físico puede ser observado y estudiado fenomenologicamente con el fin de obtener conocimiento tan profundo como sea posible, de la estructura interna y del comportamiento del sistema mismo. Para tal propósito, son necesarios experimentos e instrumentos adecuados. Cuando, a través de la colección y organización de los datos experimentales se desarrolla la observación sistemática en el análisis, interpretación, y predicción del comportamiento del sistema observado, un modelo matemático se produce. Entonces, el término modelamiento matemático se refiere a cualquier conjunto de ecuaciones matemáticas consistentes y completas que bajo ciertas condiciones y para un cierto propósito proporciona una descripción adecuada de un sistema físico [50]. Cada descripción de un sistema posee ciertas ventajas y desventajas. Por ejemplo, algunos modelos matemáticos se diseñan para propósitos de análisis de la estructura del comportamiento del sistema sobre el tiempo y otros se diseñan principalmente para proporcionar respuestas numéricas a cuestiones numéricas. En cualquier caso, debe mantenerse en mente que un sistema matemático no es más que una proyección del sistema real sobre un eje conceptual. El desarrollo de un modelo implica pasar por varias etapas: la primera pertenece a la teoría o aplicar las leyes físicas (ecuaciones de conservación, propiedades termodinámicas y parámetros del sistema) debido a que es imposible diseñar un buen experimento sin alguna visión teórica y a mayor precisión en la teoría experimentos más decisivos se pueden hacer. Por otra parte, la revisión de ideas y el desarrollo de modelos no es necesariamente en la dirección de gran complejidad o del incremento en el número de parámetros. El progreso puede ser hacia la simplificación y la reducción del número de constantes ajustables.

2.3.1 Ecuaciones diferenciales y en diferencias

Las ecuaciones diferenciales son el tipo más común del modelo en las ciencias físicas, las ODE juegan el mismo papel para sistemas agrupados o constantes como las PDE para sistemas de parámetros distribuidos.

A los sistemas en los cuales los cambios son predominantemente suaves se les conoce como sistemas continuos. Por otra parte, a los sistemas en que los cambios son predominantemente discontinuos se les conoce como sistemas discretos. El estudio de sistemas continuos por lo general se simplifica considerando que los cambios ocurren como una serie de pasos discretos. Las ecuaciones en diferencias son apropiadas cuando la variable dependiente es discreta. Los sistemas continuos muestreados por lo general conducen a ecuaciones en diferencias.

2.3.2 Formulación de un modelo

La formulación de las ecuaciones de un modelo generalmente es una materia de expresar las leyes físicas o principios de conservación en símbolos apropiados. Los principios de conservación invocados para problemas físicos son usualmente los de masa, momentum o energía. Al generalizar estos conceptos al caso de sistemas de flujo, se obtiene un conjunto de ecuaciones diferenciales de cambio para la transferencia de energía, masa, y momentum [52]. Varias alternativas son posibles en este punto: la ruta más general consiste en realizar simplificaciones a las ecuaciones generales tanto como las condiciones físicas del problema lo permitan. Las soluciones analíticas que se obtienen al integrar estas ecuaciones proporcionan la máxima cantidad de información acerca del problema. Si las ecuaciones no son integrables, aún es posible obtener soluciones numéricas para algún conjunto de condiciones, conduciendo a una menor información. Para procesos con flujos turbulentos, es una práctica común realizar simplificaciones al promediar las ecuaciones en el tiempo. Cuando no se necesita tener información acerca de valores locales de los parámetros puede hacerse uso del promediado volumétrico para simplificar las ecuaciones generales de cambio y lograr alguna solucion analítica o numérica (*p.ej.*, [53])

El modelamiento empírico o identificación consiste en desarrollar modelos de datos observados o colectados. Una consideración *a priori* que se usa en el modelamiento empírico puede variar desde débil a fuerte: en una propuesta de caja negra solamente pocas consideraciones se hacen, por ejemplo, linealidad y sistema invariante en tiempo, en tanto en la propuesta de identificación de modelos físicos, una estructura física se asume, y los datos colectados u observados se usan para determinar buenos valores para estos parámetros. Los modelos matemáticos de un sistema se construyen generalmente de modelos de sub-sistemas, los cuales pueden ser desarrollados usando diferentes tipos de modelamiento. Un modelo simple podría capturar

algunos de los rasgos básicos y características del sistema. Además, para fines de control un modelo simple puede simplificar el diseño, simulación, o análisis de los esquemas de control. Un modelo complejo puede ser muy detallado y describir el sistema precisamente, pero un modelo complejo puede complicar demasiado el diseño, simulación, o el análisis del sistema.

2.3.3 Identificación empírica

El modelamiento que resulta de emplear los principios fundamentales, por lo general tiene la gran limitación que da lugar a modelos muy complejos. En general, el modelamiento de la mayoría de procesos reales requiere un gran esfuerzo ingenieril para formular las ecuaciones, determinar todos los valores de los parámetros, y resolver las ecuaciones usualmente a través de métodos numéricos. Este esfuerzo se justifica cuando son necesarias predicciones muy precisas de las respuestas dinámicas sobre un amplio rango de condiciones de operación. Un método de modelamiento alternativo muy eficiente diseñado específicamente para el control de procesos es la identificación empírica. Los modelos desarrollados utilizando este método proporcionan la relación dinámica entre las variables de salida y entrada.

En la construcción del modelo empírico, los modelos se determinan realizando cambios pequeños en las variables de entrada alrededor de las condiciones de operación nominales. La respuesta dinámica resultante se usa para determinar el modelo. Este procedimiento general es esencialmente una linealización experimental del proceso que es válida para alguna región alrededor de las condiciones nominales. Los dos métodos de identificación más conocidos son: El método de curva de reacción, y uno que emplea principios estadísticos. En general, los métodos empíricos conducen a modelos de bajo orden con tiempo muerto.

El método de curva de reacción

El proceso de curva de reacción se desarrolla en cuatro pasos:

1. Permitir que el proceso logre un estado estacionario.
2. Introducir un cambio escalón en la entrada de control.
3. Obtener los datos de la respuesta de salida hasta que el proceso logre un nuevo estado estacionario.

4. Realizar los cálculos gráficos del proceso de curva de reacción.

El modelo empírico resultante del método de curva de reacción se restringe a modelos de primer orden más tiempo muerto:

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_o s + 1} \exp(-\tau_d s) \tag{2.21}$$

donde $Y(s)$ denota la salida, $U(s)$ la entrada, k_p la ganacia en estado estacionario, τ_o la constante de tiempo del proceso a lazo abierto, y τ_d el tiempo de retardo o tiempo muerto.

2.3.4 Incertidumbre del modelo

El término incertidumbre se refiere a las diferencias o errores entre los modelos y la realidad, y cualquier mecanismo usado para expresar estos errores se denomina una representación de la incertidumbre. Las representaciones de incertidumbre varían principalmente en términos de la cantidad de estructura que contienen. Esto refleja nuestro conocimiento de los mecanismos físicos que causan la diferencia entre el modelo y la planta real, y nuestra habilidad para representar estos mecanismos en una forma que facilite manipulaciones convenientes.

Las fuentes del error de modelado pueden clasificarse en dos categorias:

1. Incertidumbre paramétrica: como son las constantes de velocidad de reacción, perturbaciones de entrada persistentes, tales como las propiededes de la materia prima, cambios en condiciones de operación conduciendo a cambios en los parámetros del modelo y conocimiento imperfecto de los parámetros del modelo.

2. Incertidumbre en la estructura del modelo: la reducción del modelo (*i.e.*, linealización), desprecio de fenómenos físicos secundarios en los modelos espacio-estado, (*i.e.*, dinamica no modelada).

Los modelos de plantas típicamente usados en control de procesos son modelos lineales invariantes en tiempo, los cuales representan la dinámica verdadera del proceso sólo aproximadamente. En la teoría de control robusto por conveniencia matemática esta incertidumbre se asume que está acotada en términos de una cierta distancia o norma.

Modelamiento de perturbaciones

Los modelos más simples para las perturbaciones usados en el control de procesos son: perturbaciones impulso, escalón, rampa y sinusoidal.

Perturbación impulso El impulso es una idealización de una perturbación repentina de corta duración. Este tipo de modelo puede representar perturbaciones de carga, así como errores de medición.

Perturbación escalón La perturbación escalón es otro prototipo de perturbación. El modelo escalón se usa para representar una perturbación de carga o una desviación en una medición.

Perturbación rampa La rampa es una señal que es cero para un tiempo negativo y se incrementa linealmente para el tiempo positivo. La rampa es útil para representar errores de medición que se incrementan y perturbaciones que inician repentinamente sin parar. En la práctica, las perturbaciones están acotadas, sin embargo la rampa es una idealizacion útil.

Perturbación sinusoidal La onda seno es un prototipo para una perturbación periódica. Con una elección adecuada de la frecuencia, es posible representar perturbaciones de carga de baja frecuencia, así como ruido de medición de alta frecuencia.

2.3.5 Simulaciones numéricas

Con la llegada de computadoras poderosas, y el desarrollo de algoritmos eficientes fue posible resolver los modelos con computadoras personales. El término de resolver se utiliza para el proceso del cálculo de una aproximación a la solución exacta. Tales soluciones involucran errores de redondeo, errores de truncación, y errores de discretización. Estos errores de aproximación son usualmente menos severos a los errores de modelamiento. Para un gran rango de problemas la resolución de modelos sobre una computadora ha llegado a ser una tarea directa. El proceso de resolver las ecuaciones de un modelo por medio de algoritmos numéricos se denomina *simulación* [51].

2.4 Notas y referencias

Los conceptos de control introducidos en este capítulo se encuentran en la mayoría de textos estándares de control (*p.ej.*, [23] y [46]). Las definiciones de sistemas lineales son tomadas de la referencia [44], una revisión completa sobre sistemas lineales se puede consultar en el libro *Linear Systems*, de Kailath, [54]. Los aspectos de modelamiento se cubren con el enfoque de Aris, R. de la referencia [50]. Las nociones de estabilidad para sistemas no lineales se tomaron del libro *Applied nonlinear control*, de Weiping Li y Slotine [49], el cual tiene un enfoque ingenieril. Un excelente texto para sistemas en tiempo discreto se presenta en la referencia [55].

Capítulo 3

Dinámica de los Reactores Tubulares

> One of the most highly developed skills in contemporay western civilization is dissection: the split-up of problems into their smallest possible components. We are good at it. So good, we often forget to put the pieces back together again.
>
> *Alvin Toffler (1988)*

> When it is well constructed a good model is capable of suggesting further questions and greater refinements. Its several parts are beginnings and ends in themselves
>
> *Aris (1991)*

En este capítulo se estudia el comportamiento dinámico de los reactores tubulares, en especial de tres tipos: el reactor biológico de cama empacada, el reactor tubular con dispersión axial y el reactor tubular con reciclo. Además, se presentan los modelos matemáticos seudo-homogéneos y heterogéneos de los reactores tubulares y se discute la incertidumbre asociada a tales modelos.

3.1 Reactores tubulares

El reactor tubular en general, es cualquier reactor de operación continua en el que hay movimiento constante de uno o de todos los reactivos en la dirección promedio (los reactivos entran en un extremo del sistema y salen por el otro) y en el cual no se hace intento alguno por inducir el mezclado entre los elementos del fluido en algún punto a lo largo de la dirección de

flujo. Levespiel ha mostrado que para algunos sistemas químicos puede obtenerse un menor volumen del reactor y una mejor producción de los reactores, si no están totalmente mezclados [17]. En general los procesos continuos conducen a un menor costo de mano obra debido a la eliminación de operaciones auxiliares (*p.ej.* el constante llenado y vaciado de recipientes), los cuales permiten una mayor facilidad de implementar el control automático, además de que existe una mayor uniformidad en las condiciones de reacción, y por lo tanto mayor uniformidad en la calidad del producto. La diferencia entre los procesos de reacción por lotes y los continuos, es la presencia de un estado de flujo en el proceso continuo lo que puede dar lugar a cambios importantes del sistema. En particular, no todas las moléculas que pasan por el sistema de flujo necesariamente tendrán el mismo tiempo de residencia, ni estaran sujetas a los mismos cambios en concentración o temperatura. Estos factores pueden causar diferencias apreciables en el rendimiento o en la velocidad media de reacción si se les compara con el procesamiento por lotes [1].

La aplicación de los reactores tubulares es para una gran cantidad de reacciones en fase gas y algunas en fase líquida. Por ejemplo la destilación fraccionada térmica de hidrocarburos para obtener etileno, la sulfonación de olefinas, entre otras. En estas reacciones homogéneas el reactor contiene sólo el fluido reaccionante. Los reactores tubulares se usan también para reacciones catalíticas. En este caso, el reactor se encuentra empacado con partículas de catalizador sólido, y por esta razón con frecuencia se le conoce como reactor de cama empacada. Los usos de este reactor incluyen la síntesis de amoniaco, síntesis de metanol y otras importantes reacciones del tipo heterogéneo [3].

En los dos reactores anteriores, los reactivos fluyen axialmente a la salida del reactor, pero hay otros casos en los que el flujo no es tan simple. En algunos casos el fluido reaccionante fluye radialmente, aunque el flujo es radial, el sistema satisface la condición de flujo tapón debido a que no se hace intento de provocar el mezclado entre el recorrido del flujo. Además, en los reactores tubulares la composición del fluido reaccionate necesariamente cambia en la dirección del flujo. Sin embargo, también puede haber variaciones en la composición en las direcciones perpendiculares al flujo que pueden ser resultado de los gradientes de temperatura, de los de velocidad, o de ambos [1].

Los reactores tubulares en ocasiones funcionan en condiciones adiabáticas y otras con trans-

ferencia de calor a través de la pared. En el primer caso, la temperatura se eleva naturalmente a lo largo de la dirección del flujo si la reacción es exotérmica y decae si la reacción es endotérmica. En muchos casos es necesario calentar los reactivos antes de que entren a la zona de reacción ya que de otra manera la reacción sería demasiada lenta, pero una vez iniciada la reacción, con frecuencia es necesario eliminar calor a través de la pared, para evitar que la temperatura aumente en forma excesiva. En el caso no adiabático, la temperatura tiende a elevarse inicialmente a pesar del enfriamiento externo, debido a la elevada rapidez inicial de la reacción. Sin embargo, la temperatura del fluido reaccionante empieza a disminuir con el tiempo, que es el resultado de que la rapidez de desprendimiento de calor caiga por debajo de la rapidez de transmisión de calor a través de la pared [2]. También se presentan variaciones radiales en temperatura, en especial si el fluido reaccionante y el catalizador tiene bajas conductividades térmicas. En las reacciones exotérmicas se producen las temperaturas más altas, naturalmente en aquellas partes del reactor que están más apartadas de la superficie en que se elimina calor. En general, la presencia de una zona o punto caliente puede tener efectos muy adversos, *i.e.*, aparición de reacciones indeseables [17]. Para dispersar de manera efectiva el calor, es evidente que el diámetro de un reactor tubular cilíndrico debe ser pequeño, con el fin de reducir la distancia a través de la cual debe de conducirse el calor hasta la pared. Cuando existen razones de otra índole que obligan a seleccionar un diámetro grande o a colocar el catalizador en grandes charolas, puede ser necesario colocar serpentines de enfriamiento inmersos en el seno del catalizador [2].

Una comparación del reactor tubular con el CSTR se observa directamente en el caso de una serie de CSTR de forma que la corriente fluya de uno al siguiente, esto conduce a un cambio de composición escalonado, como consecuencia de ello, la velocidad media de reacción es menor que la obtenida en un reactor tubular que tenga la misma concentración de reactivos en la alimentación. Por lo tanto, el volumen del reactor, para una producción determinada debe ser mayor y esto debe tomarse en cuenta en el diseño. Puede ser paradojico que el CSTR se utilice para reacciones en fase líquida comparativamente lentas respecto al reactor tubular [1]. La razón es que la construcción es más barata con respecto al reactor tubular.

3.2 Modelos matemáticos de los reactores tubulares

Dependiendo del propósito para el cual se requieren, se pueden derivar modelos matemáticos de varios grados de complejidad para los reactores tubulares. Desde un enfoque matemático los reactores tubulares se modelan como un sistema de parámetros distribuidos en estado transitorio. En estado estacionario pueden ser descritos por ecuaciones diferenciales parciales o por ecuaciones diferenciales ordinarias [9].

3.2.1 Sistemas homogéneos y heterogéneos

Basados en el número de fases involucradas dentro de las fronteras del sistema se pueden distinguir dos clases: sistemas homogéneos y sistemas heterogéneos. Ambas categorias incluyen modelos continuos y modelos discretos como los modelos de celdas. Los sistemas homogéneos son aquellos donde solamente una fase está involucrada en el proceso que se lleva a cabo dentro las fronteras del sistema. En reactores químicos, el comportamiento de estos sistemas está básicamente gobernado por la cinética de las reacciones que se realizan sin la interferencia de cualquier proceso difusivo. La construcción de modelos matemáticos para un sistema reactivo sólido-gas o para un sistema heterogéneo, depende en gran parte del conocimiento de las leyes físicas y químicas que gobiernan los procesos que se llevan a cabo dentro de las fronteras del sistema. Esto incluye el mecanismo de difusión, las velocidades de difusión de las especies reactantes hasta la vecindad de los centros activos (sitios activos) de reacción, y la quimisorción de las especies reactantes sobre estos sitios activos para pellets no porosos. Para pellets porosos se incluye además la difusión de los reactantes a través de los poros de los pellets catalíticos (difusión intrapartícula), los mecanismos y velocidades cinéticas de la reacción de estas especies, la desorción de productos y la difusión de productos lejos de los centros de reacción. Además se incluyen las limitaciones termodinámicas que deciden la factibilidad del proceso para iniciar, la producción y absorción de calor, así como las velocidades de transferencia de calor. Las velocidades de transferencia de calor y la difusión entre la fase gas y la superficie del *pellet* depende en gran medida de la descripción adecuada de los fenómenos del flujo de fluidos en el sistema [2].

3.2.2 Modelos de los reactores de cama fija

Modelos seudo-homogéneos

Los modelos seudo-homogéneos son los más simples para el modelamiento del reactor de cama fija catalítico. La consideración básica que se hace es que el reactor puede describirse como una entidad que consiste solamente de una fase simple. En el modelo se supone que toda la superficie catalítica está totalmente expuesta a las condiciones del medio y que tiene las mismas condiciones a las del fluido y puede entonces ser completamente descrito por las variables del medio (temperatura, concentración, presión). Esto es estrictamente válido cuando el factor de efectividad (*i.e.*, la relación de la velocidad de reacción con resistencias difusionales sobre la velocidad de reacción a las condiciones del medio) es igual a la unidad ($\eta = 1.0$) para todas las reacciones y/o componentes. Esto permite que las velocidades intrínsecas de reacción se usen en el modelo de reacción sin ninguna modificación. En general, si el factor de efectividad del *pellet* catalítico es diferente a la unidad, entonces el modelo heterogéneo es el que se debe usar [1].

Modelo de flujo tipo pistón[1] En el modelo seudo-homogéneo de flujo pistón unidimensional se supone que el fluido se mueve como un tapón a través del tubo del reactor, y la velocidad de reacción que depende de la concentración local de las especies y la temperatura se describe como la velocidad de generación o consumo de especies por unidad de volumen. El flujo pistón se define como un estado idealizado de flujo tal que:

- En cualquier sección perpendicular al movimiento del fluido, el gasto másico y las propiedades del fluido (presión, temperatura, composición) son uniformes.
- La difusión relativa al flujo del fluido es insignificante.

El efecto impuesto por tales consideraciones es que todos los elementos del fluido pasan el mismo tiempo dentro del reactor y siguen la misma secuencia de cambios en presión, temperatura y composición. Además de que las moléculas de los reactivos y los productos no se difunden

[1] **Las ecuaciones del modelo se presentan con el biorreactor tubular de cama empacada (sección 3.5.2.)**

de un elemento de fluido a otro durante el paso de estos elementos por el reactor. Entonces, se deduce que la reacción se verifica en el mismo grado en cada elemento y que, por lo tanto, éstos pueden considerarse como reactores intermitentes en miniatura que viajan a través del sistema.

Las desviaciones a la hipótesis de flujo pistón incluyen

- La existencia de gradientes de temperatura perpendiculares a la dirección de flujo debido al calor de reacción.
- Difusión de un elemento de fluido a otro, *i.e.*, efectos de turbulencia o la influencia del empaque, así como la difusión molecular común y la mezcla conductiva debida a diferencias de temperatura.
- La existencia de gradientes de velocidad normales a la dirección del flujo.

Modelo de dispersión[2] El modelo de flujo pistón puede sofisticarse al incluir dispersión axial y/o radial, para el transporte de masa y calor. El mezclado en la dirección axial, el cual se debe a la turbulencia o por la presencia del empaque, se toma en cuenta en un término de dispersión efectivo. El *flux* que surge por este mecanismo se describe por una fórmula análoga a la ley de Fick para la transferencia de masa y la ley de Fourier para la transferencia de calor. La dispersión axial se caracteriza por la relación del término convectivo y el término conductivo del transporte de calor y/o masa (*i.e.*, los números de Peclet) [56]. Es una convención general que la dispersión axial de masa no es apreciable si la relación longitud del tubo sobre el diámetro del *pellet* no es mayor a 50, mientras para el calor es despreciable si esta relación es mayor a 300. Existe evidencia experimental y teórica que indica que el coeficiente de dispersión axial es 10 veces mayor al coeficiente de dispersión radial, y es práctica común considerar sólo la dispersión axial por simplicidad [9]. Los modelos de dispersión axial se describen por un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden del tipo de valor en la frontera de dos puntos. Las condiciones frontera comunmente usadas son las denominadas condiciones frontera de Danckwerts.

[2] **Las ecuaciones del modelo se presentan con el reactor tubular con dispersión axial (sección 3.6.2).**

Modelos heterogéneos[3]

Para reacciones rápidas es necesario distinguir entre las condiciones del fluido en el medio y sobre la superfiie catalítica, así como la superficie del *pellet* y dentro de los poros del catalizador. De este modo las ecuaciones de conservación de energía y masa se escriben por separado para la fase sólida y el fluido [57].

El modelo heterogéneo más simple es el de flujo pistón y considerando resistencias a la transferencia de masa y calor entre el fluido y la superficie catalítica. Un comportamiento más complejo del fluido es considerar mecanismos de dispersión axial y radial dentro el modelo. Si el reactor es no adiabático, la dispersión radial es por lo general más importante.

En el caso general donde el material activo está disperso a través del *pellet*, y el catalizador es poroso, la difusión interna de las especies dentro los poros del *pellet* debe incluirse. De hecho, para muchos casos la difusión a través de los poros del catalizador representa la principal resistencia a la transferencia de masa. Por lo tanto, los perfiles de concentración y temperatura dentro las partículas del catalizador son usualmente no planos y las velocidades de reacción en la fase sólida no son constantes. Como existe una variación continua en los perfiles de concentración y temperatura dentro el *pellet*, se requieren ecuaciones diferenciales de conservación para describir los perfiles de concentración y temperatura. Estos perfiles se usan con las ecuaciones de velocidad intrínsecas para integrarse a través del *pellet* y obtener la velocidad global de reacción para el *pellet*. Las ecuaciones diferenciales para el *pellet* catalítico son dos ecuaciones diferenciales de valor en la frontera de dos puntos y además de la cinética intrínseca se requiere la difusividad efectiva y la conductividad térmica de los poros catalíticos.

Modelo elemental En este modelo se considera que no existen parámetros distribuidos. Es decir, todos los mecanismos de transporte son infinitamente rápidos o lentos y aquellos que son finitos o distintos de cero pueden agruparse en la superficie. Esto implica que el perfil de velocidad es plano, la transferencia de calor está agrupada en la pared y la difusión es despreciable. En este caso resultan balances de calor y de especies de la forma más simple sobre el fluido intersticial y sobre la partícula. Debido a tales consideraciones, los balances de energía

[3] **En esta sección se proporciona sólo una parte de la notación por claridad en la presentación, el resto de la notación se reporta en el Apéndice C.**

serán balances de entalpía. La reacción química se escribe como $\sum_{j=1}^{m} a_j A_j = 0$, donde $a_i > 0$ para un producto. C_j es la concentración molar en el fluido intersticial, y c_j es la concentración intrapartícula. Así, la ecuación de conservación de especies es

$$a\gamma \frac{\partial C_j}{\partial \theta} + ua\gamma \frac{\partial C_j}{\partial x} = ak_{gj} a_v (c_j - C_j) \tag{3.1}$$

donde el único mecanismo de transporte además de la convección forzada es el término de transferencia agrupado en la superficie de la partícula. Con el objetivo de realizar el balance de calor, se toma una envoltura alrededor de la partícula la cual incluye a la película estancada, y se considera que el fluido transportado lleva consigo su entalpía asociada:

$$-ua\gamma \frac{\partial \sum C_j \widehat{H}_{jT}}{\partial x} + a_v a \sum k_{gj}(c_j - C_j)\widehat{H}_{jT} + ha_v a(t-T) + UP(T_a - T) = a\gamma \frac{\partial \sum C_j \widehat{H}_{jT}}{\partial \theta} \tag{3.2}$$

En esta ecuación h es el coeficiente de transferencia de calor de la partícula, U es el coeficiente de transferencia de calor global en la pared del reactor. A la izquierda de la (3.2) el primer término se debe a la entalpía acarreada por convección forzada, el segundo término es la entalpía de los reactantes y los productos transferida a través de la película de difusión en la superficie catalítica, el tercer término es el calor transferido por el mecanismo de conducción a través de la película de transferencia de calor, y el ultimo término es el calor transferido a través de la pared del reactor. El término a la derecha es el término capacitivo. Multiplicando la ecuación (3.1) por $\widehat{H}_{jT}$, sumando sobre j, y substrayéndola de (3.2) se obtiene

$$a\gamma \sum C_j \frac{\partial \widehat{H}_{jT}}{\partial \theta} + ua\gamma \sum C_j \frac{\partial \widehat{H}_{jT}}{\partial x} = ha_v a(t-T) + UP(T_a - T) \tag{3.3}$$

y como $d\widehat{H}_{jT} = C_{pj} dT$, tenemos

$$a\gamma \frac{\partial T}{\partial \theta} - \sum C_j C_{pj} + ua\gamma \frac{\partial T}{\partial x} \sum C_j C_{pj} = ha_v a(t-T) + UP(T_a - T) \tag{3.4}$$

que se escribe usualmente como

$$a\gamma \rho_f c_f \frac{\partial T}{\partial \theta} + ua\gamma \rho_f c_f \frac{\partial T}{\partial x} = ha_v a(t-T) + UP(T_a - T) \tag{3.5}$$

El modelo más simple para la partícula es en el cual se considera que toda la resistencia de transporte dentro de la partícula puede agruparse en la superficie de la partícula para el calor y la masa. La ecuación de conservación de masa para una partícula esférica es

$$k_{gj}(c_j - C_j) + \frac{s}{3}\rho_s S_g f_j = \frac{s}{3}\alpha\frac{\partial c_j}{\partial\theta} \tag{3.6}$$

donde f_j es la velocidad de reacción en moles de A_j formados por unidad de tiempo por unidad de área superficial. El balance de energía es

$$\sum k_{gj}(c_j - C_j)\widehat{H}_{jT} + h(t - T) = \frac{s}{3}\alpha\frac{\partial\sum c_j\widehat{H}_{jT}}{\partial\theta} + \frac{s}{3}(1-\alpha)c_s\rho_s\frac{\partial t}{\partial\theta} \tag{3.7}$$

Al multiplicar la ecuación (3.6) por $\widehat{H}_{jT}$, sumando sobre j, substrayéndola de (3.7) y si $\widehat{H}_{jT} - \widehat{H}_{jt} = C_{pj}(T - t)$, $f_j = a_j f$, $\sum a_j\widehat{H}_{jt} = \Delta H_t$, se obtiene

$$(T - i)\left[\sum k_{gj}(c_j - C_j) + h\right] + \frac{s}{3}\rho_s S_g(-\Delta H_t) = \frac{s}{3}\frac{\partial t}{\partial\theta}\left[\alpha\sum c_j C_{pj} + (1-\alpha)c_s\rho_s\right] \tag{3.8}$$

El primer término a la izquierda en (3.8) es el calor total transferido desde la partícula, el segundo término a la izquierda es el calor generado por la reacción, y el término en el lado derecho es el término capacitivo.

Las condiciones iniciales para el sistema de ecuaciones dado por (3.1), (3.4), (3.6), y (3.8) son

$$\begin{array}{l} c_j = c_{jin} \\ C_j = C_{jin} \\ t = t_{in} \\ T = T_{in} \end{array} \quad , \quad \theta = 0, \quad j = 1, .., m \tag{3.9}$$

y las condiciones de entrada

$$\begin{array}{l} c_j = c_j^{in} \\ t = t^{in} \\ T = T^{in} \end{array} \quad , \quad x = 0, \quad j = 1, .., m \tag{3.10}$$

Para reacciones muy exotérmicas, la partícula en estado estacionario puede existir en uno de tres estados estacionarios, dos de los cuales son en general estables [9]. Además, los perfiles de concentración y temperatura a lo largo del reactor pueden no ser únicos. Este modelo de no transporte puede ser resuelto por el método de características debido a que las ecuaciones son de primer orden (ver Apéndice A). A pesar de que el modelo es matemáticamente muy simple, éste es físicamente complicado porque supone que el transporte radial y el transporte intrapartícula son infinitamente rápidos y que el transporte axial es cero.

Dispersión axial y transporte intrapartícula En este modelo se introducen dos nuevos efectos, la dispersión axial o mezclado, y la difusión y conducción intrapartícula. La ecuación de conservación de especies puede derivarse simplemente y está dada por

$$\gamma D_a a \frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2} + a k_{gj} a_v (c_j - C_j) = a\gamma \frac{\partial C_j}{\partial \theta} + u a \gamma \frac{\partial C_j}{\partial x} \tag{3.11}$$

donde el primer término a la izquierda considera la dispersión axial y se supone que es el mismo para todas las especies debido al mezclado del fluido. La ecuación de energía para este modelo es

$$\gamma D_a a \frac{\partial}{\partial x}\left[\sum \hat{H}_{jT} \frac{\partial C_j}{\partial x}\right] + \gamma K_a a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + h a_v a (t - T) + a_v a \sum k_{gj}(c_j - C_j)\hat{H}_{jT} + UP(T_a - T)$$
$$= a\gamma \frac{\partial \sum C_j \hat{H}_{jT}}{\partial \theta} + u a \gamma \frac{\partial \sum C_j \hat{H}_{jT}}{\partial x} \tag{3.12}$$

A la izquierda de la ecuación (3.12) el primer término es un transporte de entalpía por la dispersión del fluido mientras el segundo término se debe a la dispersión de calor. Por lo general se supone que $K_a = \rho_f c_f D_a$ y existe evidencia experimental y teórica que es una aproximación cierta. D_a no es una difusividad turbulenta, sino una difusividad de mezclado o dispersividad. Si la ecuación (3.11) se multiplica por $\hat{H}_{jT}$, se suma y substrae de (3.12), se obtiene

$$\gamma K_a a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + h a_v a (t - T) + UP(T_a - T) = a\gamma \left[\frac{\partial T}{\partial \theta} \sum C_j C_{pj} + \frac{\partial T}{\partial x} \sum C_{pj} \left(u C_j - D_a \frac{\partial C_j}{\partial x}\right)\right] \tag{3.13}$$

La ecuación (3.13) se escribe normalmente como

$$\gamma K_a a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + h a_v a(t - T) + U P(T_a - T) = a\gamma c_f \rho_f \frac{\partial T}{\partial \theta} + a\gamma u c_f \rho_f \frac{\partial T}{\partial x} \tag{3.14}$$

con $K_a = \rho_f c_f D_a$. Las condiciones de entrada para el reactor son ahora

$$u C_j^{in} = u C_j - D_a \frac{\partial C_j}{\partial x}, \quad x = 0, \quad para \quad j = 1, .., m \tag{3.15}$$

$$u \sum C_j^{in} H_{jT^{in}} = u \sum C_j H_{jT} - D_a \sum H_{jT} \frac{\partial C_j}{\partial x} - K_a \frac{\partial T}{\partial x}, \quad x = 0 \tag{3.16}$$

la ecuación (3.16) normalmente se escribe como

$$u \rho_f c_f (T^{in} - T) = -K_a \frac{\partial T}{\partial x}, x = 0 \tag{3.17}$$

a la salida del reactor $x = l$ se tiene

$$\frac{\partial C_j}{\partial x} = 0 \tag{3.18}$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \tag{3.19}$$

Si las ecuaciones para la partícula son las mismas del modelo elemental, las ecuaciones a ser resueltas son el sistema descrito por (3.6), (3.8)-(3.14), (3.15), y (3.17)-(3.19).

Si se supone que la reacción química es el paso lento en el proceso entonces las ecuaciones de conservación son

$$\gamma D_a a \frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2} + (1 - \gamma) \rho_s S_g a f_j = a \left[\gamma + \alpha(1 - \gamma)\right] \frac{\partial C_j}{\partial \theta} + u a \gamma \frac{\partial C_j}{\partial x} \tag{3.20}$$

$$\begin{aligned} &\gamma K_a a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + U P(T_a - T) + (1 - \gamma) \rho_s S_g a f(-\Delta H_r) = \\ &a \left[[\gamma + (1 - \gamma)\alpha] \sum C_j C_{pj} + (1 - \gamma) c_s \rho_s \right] \frac{\partial T}{\partial \theta} + a \frac{\partial T}{\partial x} \left[\sum C_{pj} \left(u C_j - D_a \frac{\partial C_j}{\partial x} \right) \right] \end{aligned} \tag{3.21}$$

El modelo anterior usa la aproximación de agrupación constante para la partícula catalítica, y por supuesto esto nunca es exactamente correcto debido a que siempre existe alguna resistencia interna a la difusión de calor y de masa. La ecuación de conservación de especies para una partícula esférica se escribe como

$$\alpha D_j \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial c_j}{\partial r}\right) + \rho_s S_g \alpha r^2 f_j = \alpha r^2 \frac{\partial c_j}{\partial \theta} \tag{3.22}$$

con la condición frontera simple

$$D_j \frac{\partial c_j}{\partial r} = k_{gj}(C_j - c_j), \quad r = x \tag{3.23}$$

El balance de calor sobre la partícula es

$$\alpha D_j \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 H^*_{jt} \frac{\partial c_j}{\partial r}\right) + k_s(1-\alpha)\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial t}{\partial r}\right) = (1-\alpha) r^2 c_s \rho_s \frac{\partial t}{\partial \theta} + \alpha r^2 \frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sum c_j \widehat{H}^*_j\right) \tag{3.24}$$

donde se supone una temperatura interna de equilibrio entre el fluido y el sólido. Aquí $\widehat{H}^*_j$ es la entalpía corregida por el calor de transporte $\widehat{H}^*_{jt} = \widehat{H}_{jt} - \frac{1}{2}RT$, la cual puede probablemente despreciarse en la mayoría de reacciones industriales. En general, se considera flujo de Knudsen en la práctica de forma que D_j es una función débil de la temperatura y es independiente de la concentración. Si se desprecia el calor de transporte como es usual conduce a la ecuación para el balance calorífico.

$$\alpha r^2 \frac{\partial t}{\partial r}\sum D_j C_{pj} \frac{\partial c_j}{\partial r} + k_s(1-\alpha)\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial t}{\partial r}\right) + \rho_s S_g r^2 (-\Delta H_i) f = r^2 \frac{\partial t}{\partial \theta}\left[(1-\alpha) c_s \rho_s + \alpha \sum C_{pj} c_j\right] \tag{3.25}$$

con la condición frontera

$$-(1-\alpha) k_s \frac{\partial t}{\partial r} = \left[-\alpha \sum k_{gj}(c_j - C_j) + (1-\alpha)h\right](t - T), \quad r = s \tag{3.26}$$

las condiciones iniciales del modelo son

$$\begin{aligned} T &= T_{in}(x) \\ t &= t_{in}(x,r) \\ C_j &= C_{j_{in}}(x) \\ c_j &= c_{j_{in}}(x,r) \end{aligned} \qquad \theta = 0 \tag{3.27}$$

Entonces, el modelo de dispersión axial con efectos intrapartícula está dado por las ecuaciones (3.11), (3.13), (3.15), (3.17), (3.21)-(3.23), y (3.25)-(3.27).

Para partículas con una elevada conductividad la conducción intrapartícula podría no ser importante. Para partículas con una conductividad baja, la conducción de calor puede ser un factor limitante con la difusión intrapartícula solamente de una importancia marginal.

Modelo de dispersión radial En los modelos previos se ha supuesto que la dispersión radial era tan rápida que se desprecian los gradientes de concentración y de temperatura. A pesar de que esto no parece una consideración realista, se conoce que los coeficientes de mezclado axial son mayores a los de mezclado radial. Diámetros grandes de los reactores se aproximan a adiabáticos en tanto que diámetros reducidos pueden tener aproximadamente una temperatura uniforme. Sin embargo, los reactores de diámetro intermedio pueden tener probablemente gradientes radiales apreciables. La presencia de gradientes de temperatura en la misma dirección de flujo no es contraria a las condiciones postuladas en la hipótesis de flujo pistón.

Las circunstancias que afectan el carácter de los gradientes transversales pueden describirse en forma breve. Si una reacción exotérmica se realiza en un reactor en forma tubular del cual se elimina calor a través de la pared de enfriamiento externa, puede esperarse un perfil de temperaturas de forma que el fluido reaccionante estará más caliente cerca del centro del tubo que cerca de la pared. Por lo tanto, a primera vista parecería que no pueden presentarse si no hay una eliminación transversal de calor, o sea en un reactor con paredes perfectamente aisladas. Sin embargo, también tiene que considerarse el efecto del gradiente de velocidad. Mientras el líquido cercano al tubo viaje más rápidamente que el que se encuentra cerca de las paredes, la elevación de su temperatura a una distancia determinada dentro del tubo es menor (puesto que la reacción ha ocurrido en menor proporción) y por tanto, tiende a invertirse la

forma del perfil de temperaturas. Sin embargo, los perfiles que más se observan en reacciones exotérmicas de reactores con enfriamiento externo, son del tipo flujo pistón [1].

Para el caso de reactores no adiabáticos con camisa, el método más sencillo de tener alguna tolerancia para la variación de temperatura es suponer que ésta se localiza en la pared. Esto equivale a decir que se supone que el sistema tiene una temperatura constante T_f en la sección transversal del fluido reaccionante, pero que cambia abruptamente y por etapas a un valor de T_w en la pared. Este proceso se conoce algunas veces como acumulación, y por ello el problema global de la transferencia de calor dentro de un lecho empacado y desde éste hasta la pared, se "agrupa" en un solo coeficiente de transferencia de calor [2]. Cualquier concesión a la variación transversal de la temperatura debe ir acompañada siempre de la correspondiente concesión a la variación en la difusión transversal del reactivo. Una temperatura elevada y una alta rapidez de reacción en la región del centro del tubo provoca un agotamiento de las cantidades de reactivos en esta región. Por lo tanto, da lugar a marcados gradientes transversales de concentración de los reactivos. El resultado es un flujo de difusión radial del reactivo hacia dentro y la correspondiente difusión radial del producto de reacción hacia afuera.

Las ecuaciones de conservación de especies y el balance de calor para este modelo son

$$-u\gamma\frac{\partial C_j}{\partial x}+\gamma D_a\frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2}+\gamma D_\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial C_j}{\partial\rho}\right)+k_{gj}a_v(c_j-C_j)=\gamma\frac{\partial C_j}{\partial\theta} \tag{3.28}$$

$$-u\gamma c_f\rho_f\frac{\partial T}{\partial x}+\gamma K_a\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\gamma K_\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial T}{\partial\rho}\right)+ha_v(t-T)=\gamma c_f\rho_f\frac{\partial T}{\partial\theta} \tag{3.29}$$

con condición frontera

$$\frac{\partial C_j}{\partial\rho}=0,\quad \rho=S \tag{3.30}$$

esto conduce a

$$-\gamma K_\rho\frac{\partial T}{\partial\rho}=U(T-T_a),\quad \rho=S \tag{3.31}$$

El sistema de ecuaciones a ser resuelto está dado por (3.15), (3.16), (3.22), (3.23) y (3.25)-(3.31).

Los tres efectos dispersivos considerados para los modelo heterogéneos (axial, radial, e in-

trapartícula) pueden ser despreciados o incluidos dependiendo que tanto son necesarios para el modelo particular. El modelo más simple debe usarse de forma que dé la información apropiada para el problema. Como se ha mencionado previamente, estas ecuaciones son altamente no lineales, debido a que las velocidades de reacción son por naturaleza funciones de la temperatura y la concentración y una combinación lineal de estas variables no tiene sentido físico-químico. Un procedimiento normal es incluir variaciones en los parámetros tales como los coeficientes de transferencia de calor y masa con cambios en velocidad, temperatura, concentración, etc. Otros parámetros pueden ser dependientes de la posición tales como las difusividades, conductividades, etc. Además puede existir acanalamiento en el reactor y no es raro tener un elevado flujo en las paredes del reactor donde la fracción de huecos es mucho mayor.

Modelo de celdas La idea principal bajo el modelo de celdas es que conforme el fluido fluye a través de una cama empacada éste pasa a través de etapas donde la velocidad del fluido intersticial puede variar. La misma clasificación usada para los modelos continuos se aplica a los modelos de celdas. En los modelos de celdas el mezclado se describe por una serie de celdas mezcladas perfectamente, en lugar de la ley de Fourier o Fick. En el modelo de celdas se supone que el fluido intersticial consiste de celdas conectadas en cada una de las cuales el fluido tiene propiedades uniformes. En la dirección del flujo estas celdas se supone que están conectadas simplemente en secuencia en la dirección axial. Si se considera el transporte radial, entonces las celdas deben de conectarse lateralmente. En el modelo de celdas más simple las condiciones de temperatura y concentración de cualquier celda dada son dependientes solamente de las filas previas de celdas. La gran ventaja de los modelos de celdas es que las ecuaciones finales a resolverse son relativamente más simples a sus análogos continuos al resultar un conjunto de ODE.

3.2.3 Algunos comentarios adicionales sobre los reactores tubulares

Algunas consideraciones comunes en el modelamiento de reactores catalíticos industriales son [3]:

- La dispersión en la dirección axial es despreciable en reactores industriales debido a los altos flujos y a la gran longitud de los tubos catalíticos, resultando en números de Peclet

que son suficientemente altos para justificar la consideración de flujo pistón.

- La dispersión radial debida a gradientes radiales de concentración y temperatura es despreciable, con lo cual se justifica el uso de modelos unidimensionales.

- Las resistencias externas de transferencia de calor y masa son despreciables debido a que la velocidad de flujo destruye las resistencias externas.

- En muchos casos la conductividad térmica del catalizador es elevada dando lugar a perfiles de temperatura intrapartícula planos.

- En general, los reactores catalíticos industriales usan partículas catalíticas que son pequeñas comparadas a la geometría total del reactor mismo, y por lo tanto, se ha acostumbrado escribir los modelos continuos para el fluido intersticial. La partícula misma se considera como un continuo incrustado dentro del campo de concentración y temperatura, entonces puede suponerse que los campos con los cuales interactúa la partícula son uniformes.

Otras consideraciones generales de los reactores tubulares son [1]

- Cuando el reactor debe de trabajar a baja conversión, el grado de dispersión o retromezclado no es muy importante, no es muy grande la diferencia entre un CSTR y un PFTR.

- Si un lecho empacado es superior a 100 piezas de empaque, lo que casi siempre es el caso, el efecto de la dispersión axial sería incrementar la longitud requerida en 1% aproximadamente sobre el valor correspondiente a un reactor de flujo pistón. Esta es una correción insignificante en vista de las incertidumbres de la cinética y de la uniformidad de producción del catalizador.

- Algunas veces sucede que la reacción es tan rápida que sólo requiere un lecho de poco espesor. Entonces la dispersión axial puede ser muy importante. Sin embargo, en tales casos puede que no sea tan aplicable el modelo de dispersión. Sería más real el modelo de tanques en serie.

- Los reactores catalíticos involucran una sequencia compleja de eventos. La velocidad más importante entre todas las que se llevan a cabo es la velocidad intrínseca de reacción, la cual está compuesta de tres velocidades; la velocidad de reacción superficial, la velocidad de quimisorción y la velocidad de desorción. Los tres procesos se denominan la cinética intrinseca *i.e.*, la velocidad de reacción en la ausencia de cualquier resistencia de transferencia de calor y masa.

- Antes de que tenga lugar la catálisis, los reactivos tienen que difundirse a través de los poros y puede ocurrir que la reacción o la difusión sea el proceso que restringa la rapidez, o que ambos tengan un efecto casi igual. Si la reacción limita la velocidad, como tiende a ocurrir en el intervalo de temperatura baja, los efectos de la concentración y temperatura serán los característicos de una reacción química. A la inversa, si la difusión restringe la velocidad, como tiende a ocurrir en el intervalo de temperaturas alto, los efectos de la concentración y temperatura serán los característicos de la difusión. En la región de transición, la influencia de la temperatura y la concentración con frecuencia es bastante compleja.

- La cinética intrínseca se predice por lo general experimentalmente en reactores de laboratorio usando partículas finas para evitar resistencias difusionales. En general, no es una tarea fácil obtener tales velocidades intrínsecas, en especial para las reacciones exotérmicas debido a los gradientes de temperatura.

- Los gradientes de velocidad por lo general no es un factor muy importante, excepto en el caso de reactores tubulares no empacados cuando se operan bajo condiciones de flujo laminar.

3.3 Caracterización de la incertidumbre

Antes de diseñar cualquier controlador robusto, las diferencias entre la planta real y el modelo matemático para representar su comportamiento tienen que definirse y formularse matemáticamente. La clasificación de las fuentes del error de modelamiento para el caso de los reactores químicos se puede clasificar como:

- Incertidumbre paramétrica: constantes de la velocidad de reacción, perturbaciones de entrada persistentes tales como las propiedades de la materia prima.

- Incertidumbre en la estructura del modelo: reducción en el orden del modelo debido a la descripción de fenómenos físicos secundarios despreciados en los modelos espacio-estado.

Rara vez está disponible la información experimental necesaria para que sea completo el modelo del reactor de lecho fijo. Además, que no se conozca realmente la conductividad térmica del lecho, y su coeficiente de temperatura puede tener un efecto considerable para fines de diseño de equipo. El deterioramiento del catalizador es otro factor que provoca incertidumbre. Debido a estas dificultades, el modelamiento de los reactores tubulares industriales de cama empacada se realiza con frecuencia incluyendo parámetros netamente empíricos basados en el descubrimiento de condiciones de operación satsfactorias en instalaciones a escala piloto.

3.4 Bifurcación, inestabilidad y multiplicidad de los reactores tubulares

3.4.1 Multiplicidad de los reactores tubulares

Los reactores tubulares son sistemas abiertos (*i.e.*, sistemas que intercambian energía y materia con el ambiente a través de sus fronteras). Estos sistemas no tienden al equilibrio termodinámico, sino a un denominado "estado de no-equilibrio estacionario", que está caracterizado por la producción mínima de entropía. Los sistemas abiertos cerca del equilibrio tienden a un estado único de no-equilibrio estacionario, sin importar sus condiciones iniciales. Sin embargo, lejos del equilibrio estos sistemas pueden exhibir multiplicidad de estados estacionarios y aun estados periódicos [3].

Los reactores catalíticos de cama empacada son excepcionalmente ricos en problemas de inestabilidad y bifurcación [18]. Lo cual se puede deber a: multiplicidad isotérmica, multiplicidad térmica, y multiplicidad debido a la configuración del reactor [3]. El estado estable de un sistema abierto, como el reactor tubular, depende del régimen de flujo, de las velocidades de reacción, y del tamaño del sistema.

Multiplicidad isotérmica La multiplicidad isotérmica (o de concentración) es probablemente la mayor fuente intrínseca de multiplicidad en reactores catalíticos que resulta de la dependencia no-monotónica de la velocidad de reacción intrínseca sobre la concentración de reactantes y productos. Sin embargo, la cinética no-monotónica por si sola no produce multiplicidad. Ésta tiene que estar acoplada con algún proceso de difusión, ya sea de resistencia a la transferencia de masa entre la superficie del *pellet* catalítico y la fase gas o dentro los poros de los pellets. Si las condiciones de flujo y el tamaño de los pellets catalíticos son tales que las resistencias difusionales entre la fase gas y los centros activos son despreciables (el sistema en este caso está descrito por un modelo seudo-homogéneo) y la fase gas está en flujo pistón, entonces la multiplicidad no es posible. Sin embargo, para un reactor seudo-homogéneo si la condición del flujo no es flujo pistón, la muliplicidad de estados estacionarios es posible. El rango de desviaciones del flujo pistón que da multiplicidad de estados estacionarios corresponde a camas poco densas con velocidades de flujo de gas pequeñas, una situación que no es aplicable en la mayoría de los reactores industriales [3].

Multiplicidad térmica Es el tipo de multiplicidad más amplia y extensivamente investigada, y está asociada a reacciones exotérmicas. La característica esencial del problema del reactor catalítico, el cual da lugar a la multiplicidad de los estados estacionarios es la forma sigmoide de la curva de generación de calor contra la temperatura, y debido a que la transferencia de calor depende a su vez linealmente de la temperatura, el balance de generación y remoción de calor puede dar lugar a más de una intersección de las curvas de remoción de calor lineal y la de generación sigmoidal. De hecho, este tipo de multiplicidad resulta de algún tipo de comportamiento no monotónico asociado con el cambio de velocidad de reacción bajo variación simultánea de la concentración de reactantes y temperatura acompañando las reacciones que se llevan a cabo dentro del reactor. Para las reacciones exotérmicas, conforme la reacción procede, los reactantes se agotan, lo cual tiende a causar un descenso en la velocidad de reacción. Al mismo tiempo, el aumento de calor incrementa la temperatura y causa que la velocidad de reacción se incremente a través de la dependencia de Arrhenius de la velocidad de reacción sobre la temperatura. Estos dos efectos de la velocidad de reacción asociados con la conversión de los reactantes conducen a una dependencia no monotónica de la velocidad de reacción sobre

la concentración de reactantes, conduciendo a la posibilidad de múltiples estados estacionarios. Sin embargo, similar al caso isotérmico, la multiplicidad no ocurrirá en reactores catalíticos de cama fija debido a este efecto solamente, debe existir algún mecanismo difusional acoplado con la reacción con fin de dar lugar a multiplicidad de estados estacionarios. Por lo tanto para un reactor catalítico donde las condiciones de flujo son tales que las resistencias de transferencia de calor y masa entre la superficie del *pellet* catalítico y la fase gas son despreciables, el tamaño del *pellet* catalítico, la estructura del poro y la conductividad son tales que las resistencias a la transferencia de calor y masa intrapartícula son además despreciables, la fase gas está en flujo pistón y el sistema es adiabático o enfriado a co-corriente, entonces la multiplicidad de estados estacionarios usualmente no es posible. Si la condición de flujo no es flujo pistón entonces la multiplicidad sí es posible. La principal fuente de multiplicidad en reactores catalíticos de cama fija es a través del acoplamiento entre la reacción exotérmica y las resistencias a la transferencia del calor y masa del *pellet* catalítico.

Raymond y Amundson en [12] consideraron el problema de la existencia de múltiples estados estacionarios para el reactor tubular con flujo tapón adiabático, y demostraron que al aumentar la velocidad de flujo es posible eliminar la multiplicidad en algunos casos. Para el reactor tubular con dispersión axial adiabático, Luss y Amundson [14] mostraron que existe la posibilidad de 3 estados estacionarios, con el estado intermedio inestable. Varma y Amundson en [15] presentan resultados numéricos mostrando que para el reactor tubular no adiabático existe la posibildad de una multiplicidad de estados mayor, y en algunos casos más estados inestables que el caso adiabático.

Multiplicidad debida a la configuración del reactor La configuración del reactor puede dar lugar a multiplicidad de estados estacionarios cuando otras fuentes no son suficientes para producir el fenómeno. Por ejemplo un reactor catalítico donde la fase gas está en flujo pistón y las resistencias difusionales son despreciables, se lleva a cabo una reacción exotérmica y es enfriado a contra-corriente puede dar lugar a múltiples estados estacionarios.

3.4.2 Sensibilidad paramétrica

La sensibilidad paramétrica de los reactores catalíticos existe cuando alguna característica de operación muestra una variación extrema si se hace solamente un cambio ligero en una variable de operación [9]. El fenómeno de sensibilidad paramétrica no está directamente relacionado al fenómeno de multiplicidad, la sensibilidad paramétrica se encuentra al usar modelos de flujo seudo-homogéneos, los cuales por definición no muestran multiplicidad de los estados estacionarios [17].

Bilous y Amundson [16], mostraron que el reactor tubular cuasi-isotérmico exhibe sensibilidad paramétrica. En este caso, en algunas regiones de operación, un pequeño cambio en el coeficiente de transferencia de calor en la pared del reactor o una pequeña dilución de la alimentación producirá grandes cambios en el efluente. Para el reactor con una corriente de reciclo reportaron la posibildad de inestabilidad provocada por el retroalimentado térmico y/o de masa.

Rajadhyaksha y Vasudeva [61], estudiaron la sensibilidad paramétrica de los reactores de cama fija considerando limitaciones de transporte del calor y masa. Ellos identificaron cuatro regímenes (reacciones muy lentas, lentas, rapidas y muy rapidas) de operación donde la presión parcial tiene efecto sobre los procesos de transporte, y derivaron condiciones para delimitar los límites permisibles máximos de presión parcial de entrada en cada regimen.

Debido a la sensibilidad de muchas reacciones a la temperatura, el control de temperatura puede ser muy importante. Para una reacción irreversible simple la temperatura óptima es usualmente elegida como la temperatura más alta compatible con los materiales de construcción, las propiedades del catalizador, el problema de precalentamiento a altas temperaturas sin descomposición y los problemas de transferencia de calor que surgen a velocidades de reacción elevadas.

Sensibilidad Otro fenómeno asociado al reactor tubular y simplemente denominado sensibilidad fue estudiado por Amundson en [58]. La sensibilidad del reactor se define como la relación de la desviacion estándar de una salida a la desviación estándar de una entrada cuando tal entrada está sujeta a perturbaciones aleatorias pequeñas sobre-impuestas al valor en estado estacionario. Las ecuaciones diferenciales parciales se analizan con técnicas lineales debido a

que cualquier efecto transitorio se considera como una perturbación del estado estacionario.

3.4.3 Estabilidad de los reactores tubulares

Un estado estacionario se dice que es estable si este tiende a retornar al mismo estado después de sufrir una perturbación [17]. Uno de los primeros trabajos sobre la estabilidad de reactores de cama empacada se debe a Berkelew [42] en el cual se desarrollan algunas correlaciones empíricas para estudiar la estabilidad. Sin embargo, dos propuestas son las más importantes para estudiar la estabilidad de los reactores tubulares. En la primera, las ecuaciones no lineales transitorias se linealizan alrededor del estado estacionario, y las ecuaciones resultantes se examinan para determinar bajo que condiciones las perturbaciones pequeñas se aproximan a cero asintóticamente. En la segunda propuesta, las ecuaciones no-lineales se resuelven numéricamente para mostrar que los criterios desarrollados en la primera propuesta son correctas en la predicción de estabilidad e inestabilidad y para analizar el efecto de mayores perturbaciones en el comportamiento del sistema [13]. Estas propuestas se realizaban con mayor frecuencia en la década de los sesentas debido a que la linealización local no había sido desarrollada para PDE como el trabajo de Lyapunov para las ODE [12]. A partir de 1970 el trabajo de Perlmutter [17] motivó la derivación de condiciones suficientes a través de funciones de Lyapunov. McGreavy y Soliman [62] estudiaron la estabilidad de los reactores tubulares con dispersión axial a través del método directo de Lyapunov.

3.4.4 Bifurcación de los reactores tubulares

Las características dinámicas de los reactores tubulares se pueden observar en un diagrama de bifurcación. Jensen y Ray [18], clasificaron los diagramas de bifurcación de un reactor tubular con enfriamiento usando técnicas de discretización de las ecuaciones diferenciales. Subramanian y Balakotaiah [59] combinaron una reducción implícita Lyapunov-Schmidt con el método de disparo para clasificar el estado estacionario y las características dinámicas de varios problemas de difusión-convección-reacción, descritos por un conjunto de ecuaciones diferenciales en una dimensión.

El trabajo de Jensen y Ray [18] conduce a los siguientes resultados[4]:

[4] Varios de estos resultados habían sido previamente reportados por otros autores utilizando distintos métodos

- Para el caso de los reactores tubulares con dispersión axial no deben existir oscilaciones debidas a la interacción de los efectos de dispersión y reacción. Este efecto sólo se debería presentar en el reactor tubular no empacado muy corto.

- Para el caso del reactor no adiabático con números de Peclet distintos para la transferencia de calor y masa, la solución será única para valores suficientemente altos de los números de Peclet, coeficientes de transferencia de calor altos, o valores pequeños del número de Damkohler.

- Incrementando el aumento de temperatura adiabática o la energía de activación, amplía la región de multiplicidad y la mueve hacia números de Damkohler más pequeños, en tanto que el incremento del orden de reacción reduce la región de multiplicidad.

- Una multiplicidad mayor de tres es posible sólo para el caso del reactor no adiabático.

- La ausencia de perfiles oscilatorios en el reactor con dispersión axial puede explicarse por el hecho que el tiempo característico para el transporte térmico dentro de la cama es mucho más grande al transporte de material, *i.e.*, el número de Lewis (Le) es tan grande que las oscilaciones no se esperan aun en camas poco densas.

El trabajo de Subramanian y Balakotaiah [59] conduce a los siguientes resultados:

- Para el caso del reactor tubular con reciclo, pueden presentarse oscilaciones para valores de los parámetros físicamente posibles y comportamiento bastante complejo cuando el enfriamiento se incrementa.

- Para el modelo de dispersión axial de calor y masa se consideran dos casos: En el primero, el caso adiabático, para regiones paramétricas factibles ($Le > 1$) es posible un comportamiento oscilatorio es posible cuando $\phi_h^2 > \phi_m^2$. Con una masa infinita son posibles oscilaciones de temperatura altas para una región paramétrica factible .

- El caso del modelo del reactor autotérmico con intercambio de calor externo e interno no es característico el comportamiento oscilatorio.

---

de análisis (*p.ej.* Hlavacek *et al.*, 1979).

3.5 Reactor Tubular Biológico

3.5.1 Generalidades

Los procesos biológicos son sistemas que presentan retos interesantes para el diseño de esquemas de control. La aplicación industrial de este tipo de sistemas incluyen: remoción de contaminantes de efluentes industriales, fermentación de leche en la producción de margarina, producción de antibióticos, producción de etanol, entre otros. Los biorreactores tubulares permiten un uso de volumen celular mayor, más eficiencia en la extracción de productos, velocidades de flujo mayores, además de que proporciona mayor estabilidad térmica si el reactor está empacado [63].

Uno de los problemas de los procesos en biorreactores es que los parámetros del proceso no son conocidos exactamente y pueden ser variantes en tiempo. Además, un problema importante en el control de estos sistemas es que las variables clave del proceso tales como la concentración de biomasa, concentración de substrato, actividad enzimatica, etc., no son medibles instantáneamente. El ruido de medición es otra problema frecuente en la mayoría de los sistemas biológicos [4].

Para los sistemas biológicos el desempeño relativo característico del CSTR ideal y el PFTR depende de la velocidad de crecimiento específica de reacción involucrada y de la cinética correspondiente. Para una reacción simple con cinética ordinaria (aumento de la rapidez de crecimiento con el incremento de conversión de substrato, tal como la cinética de Michaels-Menten), el PFTR proporciona una gran conversión de substrato y mayores concentraciones de producto que el CSTR de igual volumen. Para procesos microbianos, el PFTR típicamente maximiza la concentración de producto del efluente. Para crecimiento exponencial, el CSTR es más eficiente a un PFTR o al reactor de lote [4].

3.5.2 Modelamiento

Se considera un reactor biológico tubular de cama empacada como el mostrado en la Figura 3.2, donde se llevan a cabo dos reacciones, una de crecimiento autocatalítico de biomasa, y la otra de desactivación de biomasa,

$$S \rightarrow\!\!\!\!\frown\ X \tag{3.32}$$

$$X \rightarrow X_d \tag{3.33}$$

donde X es la concentración de microorganismos inmovilizados en algún soporte y los cuales permanecen dentro del reactor; S es la concentración de substrato fluyendo a través del reactor; y X_d es la concentración de biomasa desactivada. Para formular el modelo se hacen las siguientes consideraciones [37]:

1. *La sección transversal del reactor es constante.*
2. *Se desprecian los efectos difusivos*
3. *Los microorganismos desactivados son expulsados del reactor mediante el flujo convectivo.*
4. *El reactor es isotérmico.*
5. *El término de velocidad de crecimiento específica (μ) está dado por una cinética del tipo Contois*

$$\mu = \frac{\mu_{\max} S}{k_c X + S} \tag{3.34}$$

La descripción del sistema puede modelarse como:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \mu X - k_d X \tag{3.35}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{F}{A}\frac{\partial S}{\partial Z} - k_1 \mu X \tag{3.36}$$

$$\frac{\partial X_d}{\partial t} = -\frac{F}{A}\frac{\partial X_d}{\partial Z} + k_d X \tag{3.37}$$

las condiciones frontera son:

$$S(t, Z = 0) = S_{in} \tag{3.38}$$

$$X_d(t, Z = 0) = 0 \tag{3.39}$$

con condiciones iniciales

$$S(0, Z) = S_0, \quad X(0, Z) = X_0 \tag{3.40}$$

Las ecuaciones anteriores se derivan de los balances de materia sobre X, S, X_d. El término convectivo para el substrato y la biomasa desactivada están dados por el primer término a la derecha de (3.36) y (3.37) respectivamente. El primer término a la derecha de (3.35) y el segundo término a la derecha de la ecuación (3.36) representan la rapidez de generación de materia. El término $k_d X$ representa la rapidez de desactivación de biomasa y, el término acumulativo está dado por cada una de las derivadas en el tiempo.

Remark 1 *Dos modelos básicos disponibles para describir el crecimiento durante la fermentación microbiana son el modelo de Monod y el modelo de Contois. El modelo de Contois considera limitaciones difusionales debido a densidades celulares elevadas. El modelo de Monod presenta una función de crecimiento monotónica con la concentración de substrato.*

Remark 2 *Debido a la estructura matemática que describe el comportamiento del reactor biológico tubular con flujo tipo tapón, siempre tiene estados estacionarios únicos. Por otra parte, un reactor tubular isotérmico con dispersión axial donde se lleva a cabo una reacción enzimática inhibida por substrato puede dar lugar a múltiples estados estacionarios [65].*

Remark 3 *Es bien conocido que en el caso de reactores con enzimas inmovilizadas la presencia de dispersión no tiene efecto sobre la conversión de substrato en la región de orden cero de la cinética de Michaels-Menten, en tanto en la región de primer orden la conversión es menor en la presencia de dispersión. Sin embargo, se ha demostrado [66] que el modelo de flujo pistón puede aplicarse para representar satisfactoriamente datos experimentales obtenidos con reactores de cama fija con enzimas inmobilizadas.*

3.5.3 Incertidumbre del modelo

La principal incertidumbre del modelo del reactor tubular biológico es la expresión cinética. Se puede examinar brevemente la incertidumbre de la expresión cinética como sigue: la complejidad de la descripción cinética depende de la complejidad de la situación física y la aplicación de la cinética propuesta [63]. Muchos factores pueden influenciar la actividad catalítica de las enzimas o los microorganismos, presumiblemete al afectar la estructura enzimática o el estado químico de los microorganismos. Entre estos factores podemos nombrar: pH, temperatura, flujo (fuerza hidrodinámica, presión hidrostática, y tensión interfacial), agentes químicos, irradación, etc. La cinética de una enzima o un microorganismo inmovilizado puede diferir a la cinética en solución. En general, conduce a retener su actividad más tiempo que una en solución. Además, una enzima o microorganismo inmovilizado puede fijarse en una posición cercana a otras enzimas o mircroorganismos participando en una secuencia catalítica, por lo tanto incrementa la eficiencia catalítica para la conversión multipaso. Las propiedades catalíticas observadas de una partícula catalítica simple conteniendo una enzima o microorganismos inmovilizados depende además de las interacciones de transporte de substrato y de la actividad catalítica de las enzimas o microorganismos.

La principal perturbación para el reactor biológico es el cambio en la concentración de substrato a la entrada del reactor, la cual generalmente puede considerarse como una buena aproximación del tipo escalón. Por otra parte, la fragilidad mecánica característica de las enzimas y los microorganismos puede imponer límites sobre el flujo que puede tolerarse para aumentar la transferencia de masa [4].

3.5.4 Dinámica a lazo abierto

Aspectos Numéricos Para estudiar la dinámica del reactor biológico, las PDE resultantes del modelo se resuelven por el método de líneas [64], con discretización de las ecuaciones en la posición espacial por el método de diferencias finitas. Las ODE resultantes están dadas por:

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{\mu_{\max} S_i}{k_c X_i + S_i} X_i - k_d X_i \tag{3.41}$$

A	k_1	k_d	F	μ_{max}	k_c	S_0	X_0
$0.02\ m^2$	0.4	$0.05\ h^{-1}$	$0.002\ m^3/h$	$0.35\ h^{-1}$	0.4	$0.2489\ gDQO/l$	$3.734\ VSS$

Tabla 3.1: Reactor tubular biológico, valores numéricos para la simulación (Dochain et al., 1992)

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{F}{A}\frac{S_i - S_{i-1}}{\Delta Z} - k_1 \frac{\mu_{max} S_i}{k_c X_i + S_i} X_i \tag{3.42}$$

donde i indica el punto malla de la discretización y ΔZ el incremento en posición. El conjunto de ODE se resuelven por integración a través del algoritmo de Runge-Kutta cuarto orden con un incremento del tiempo de 0.02 h.

Como es bien conocido, para obtener resultados de simulación con una presición satisfactoria con diferencias finitas, podría ser necesario un elevado número de puntos malla. A través de simulaciones numéricas se encontró que 50 nodos o puntos malla son suficientes para reproducir los resultados obtenidos por Dochain, *et al.* [37], al utilizar colocación ortogonal.

Los perfiles de concentración de biomasa y substrato a lazo abierto se muestran en la Figura 3.1. Los valores numéricos de los parámetros usados en la simulación son los reportados por Dochain *et al.* [37], se muestran en la Tabla 3.1, los cuales corresponden a un reactor planta piloto anaerobio para tratamiento de aguas residuales.

Dinámica a lazo abierto (sin control) La respuesta inversa inicial puede ser atribuida a efectos transitorios iniciales. Efectos similares se pueden observar en otros procesos químicos tales como las columnas de destilación [23]. Se presenta además un crecimiento inicial elevado de la concentración de biomasa, esto se debe a la acumulación elevada de substrato en la etapa inicial. Este sobredisparo se desvanece al lograr el tiempo de adaptación de los microorganismos a las condiciones de alimentación de substrato y por el efecto de la muerte y remoción de biomasa causado por la alta concentración de biomasa.

El efecto de una perturbación tipo escalón en la concentración de subtrato de entrada se presenta en la misma figura con una línea punteada. La perturbación conduce a un nuevo perfil en estado estacionario. Existe además un tiempo de retardo entre la entrada de la perturbación y la respuesta de alrededor de 6-8 horas. El retardo se debe al flujo del subtrato a través del reactor.

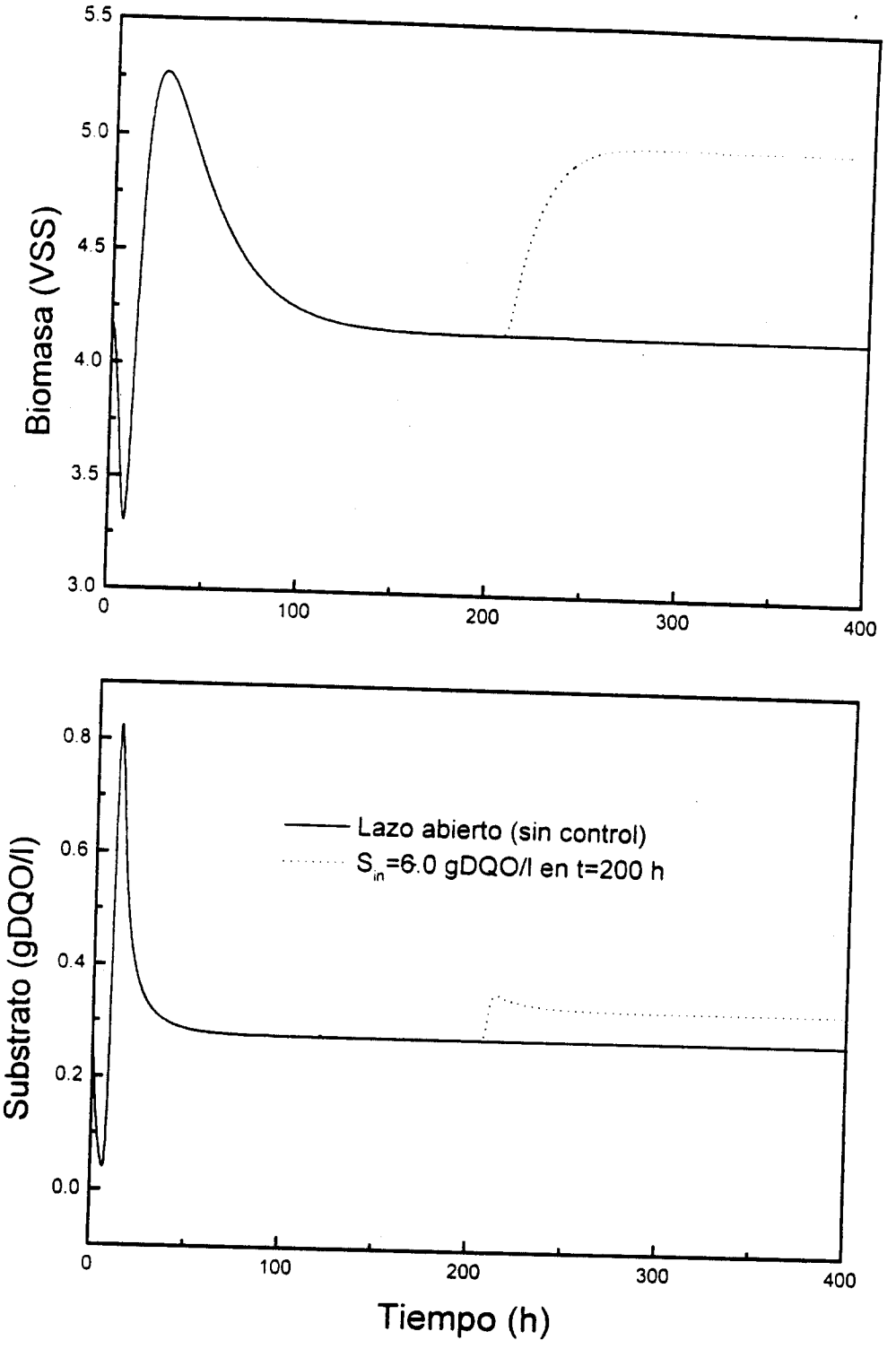


Figura 3-1: Reactor tubular biológico, dinámica a lazo abierto.

3.6 Reactor Tubular con Dispersión Axial

3.6.1 Generalidades

Los reactores catalíticos de lecho empacado tienen gran importancia económica y constituyen la columna vertebral de la industria química. La síntesis de amoniaco, la producción de ácido sulfúrico y la refinación del petróleo son tres procesos en los que se tratan grandes volúmenes y en los que se utilizan reactores catalíticos de lecho empacado [3]. Muchos de estos reactores con menor volumen de producción, pero en los que se obtienen materiales de muy alto valor, se encuentran en la industria petrolera.

El mecanismo por el cual el calor o la masa se dispersan en una cama empacada a través de la cual un fluido está fluyendo ha sido objeto de una gran atención [56]. Se ha supuesto que la dispersión de calor y masa en la dirección axial y radial es un proceso difusional sobre-impuesto al flujo convectivo, de esta forma el efecto global se describe por un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales parabólicas (*i.e.*, segunda derivada en el término dispersivo de calor y de masa). Estas ecuaciones se simplifican por lo general para el caso simétrico en la dirección radial. La dispersión radial de masa y calor en reactores catalíticos sólido-gas de cama fija se expresa usualmente por los números de Peclet para transporte de masa y calor. En muchos casos la dispersión radial es despreciable si el reactor es adiabático debido a que no existe una fuerza motora para gradientes elevados en la dirección radial. Para reactores no adiabáticos, el coeficiente de transferencia de calor en la pared entre la mezcla reactante y el medio de enfriamiento se debe especificar.

3.6.2 Modelamiento

El sistema a ser considerado es un reactor tubular con chaqueta de enfriamiento descrito por el modelo de dispersión axial, en el cual una reacción exotérmica de primer orden irreversible se lleva a cabo

$$A \rightarrow productos \tag{3.43}$$

bajo las siguientes consideraciones [18]:

1. *Perfil de velocidad plano (v_z)*

2. *Dipersividad de masa (D_L), conductividad térmica (K_L), capacidades calorífics (C_{ps}, C_{pf}), densidad (ρ_f, ρ_s) y calor de reacción ($-\Delta H$) constantes.*

3. *El término de reacción tiene dependencia de la temperatura tipo Arrheneius.*

Bajo tales consideraciones las ecuaciones del modelo de dispersión axial seudo-homogéneo son dos ecuaciones diferenciales parciales parabólicas no-lineales acopladas para la concentración del reactante y la temperatura

$$\epsilon_p \frac{\partial c(z',t')}{\partial t'} = D_L \frac{\partial^2 c(z',t')}{\partial z'^2} - v_z \frac{\partial c(z',t')}{\partial z'} - k_o(1-\epsilon_p)c(z',t')\exp\left[-E_A/RT(z',t')\right] \qquad (3.44)$$

$$\begin{aligned}\left[\epsilon_p \rho_f C_{pf} + (1-\epsilon_p)\rho_s C_{ps}\right] \frac{\partial T(z',t')}{\partial t'} &= K_L \frac{\partial^2 T(z',t')}{\partial z'^2} - \rho_f C_{pf} v_z \frac{\partial T(z',t')}{\partial z'} \\ &+(-\Delta H)k_o(1-\epsilon_p)T(z',t')\exp\left[-E_A/RT(z',t')\right] \\ &-\frac{4}{d_r}U_w\left[T(z',t') - T_w(z',t')\right] \qquad (3.45)\end{aligned}$$

donde c y T representan la concentración y temperatura, D_L y K_L son los coeficientes de dispersión longitudinal, v_z es la velocidad del gas. Los subíndices f, s, y w denotan la fase del fluido, del sólido, y la pared del reactor respectivamente. ϵ_p y d_r es la porosidad de la cama y el diámetro. k_o y E_A son los parámetros de la expresión de Arrhenius. U_w es el coeficiente de transferencia de calor global entre el reactor y el medio de enfriamiento. El efecto de la dispersión de calor radial puede incluirse en U_w realizando una aproximación en un punto de colocación al perfil de temperatura radial.

Las condiciones iniciales y de frontera para resolver el problema en particular son

$$c(z',0) = c_{in}(z'), \quad T(z',0) = T_{in}(z') \qquad (3.46)$$

$$-D_L \frac{\partial c(z',t')}{\partial z'}\Big|_0 = v_z\left[c_o(t') - c(0,t')\right] \qquad (3.47)$$

$x_1 = \frac{c-c_0}{c_0}$	$\gamma = \frac{E_A}{RT_0}$	$Pe_1 = \frac{v_z l}{D_l}$	$Le = \frac{\epsilon_p \rho_f C_{pf} + (1-\epsilon_p)\rho_s C_{ps}}{\epsilon_p \rho_f C_{pf}}$
$x_2 = \left(\frac{T-T_0}{T_0}\right)\frac{E_A}{RT_0}$	$t = \frac{t\, v_z}{\epsilon_p l}$	$Pe_2 = \frac{v_z l \rho_f C_{pf}}{k_l}$	$B = \frac{(-\Delta H) c_0 \gamma}{\rho_f C_{pf} T_0}$
$x_{2w} = \left(\frac{T_w-T_0}{T_0}\right)\frac{E_A}{RT_0}$	$z = \frac{z}{l}$	$Da = \frac{l(1-\epsilon_p) k_0 \exp(-\gamma)}{v_z}$	$\beta = \frac{4 l U_w}{v_z d_r \rho_f C_{pf}}$

Tabla 3.2: Reactor tubular con dispersión axial, variables adimensionales

$$\frac{\partial c(z', t')}{\partial z'} \mid_l = 0 \tag{3.48}$$

$$-K_L \frac{\partial T(z', t')}{\partial z'} \mid_0 = v_z \rho_f C_{pf} \left[T_o(t') - T(0, t')\right] \tag{3.49}$$

$$\frac{\partial T(z', t')}{\partial z'} \mid_l = 0 \tag{3.50}$$

Aplicando el siguiente grupo de variables adimensionales:

se obtienen las siguientes ecuaciones diferenciales en forma adimensional

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = \frac{1}{Pe_1 Le} \frac{\partial^2 x_1}{\partial^2 Z} - \frac{1}{Le} \frac{\partial x_1}{\partial Z} + \frac{Da}{Le}(1 - x_1) \exp\left\{\frac{x_2}{1 + x_2/\gamma}\right\} \tag{3.51}$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial t} = \frac{1}{Pe_2 Le} \frac{\partial^2 x_2}{\partial^2 Z} - \frac{1}{Le} \frac{\partial x_2}{\partial Z} + \frac{BDa}{Le}(1 - x_1) \exp\left\{\frac{x_2}{1 + x_2/\gamma}\right\} + \frac{\beta}{Le} x_{2w} - \frac{\beta}{Le} x_2 \tag{3.52}$$

con condiciones frontera

$$x_1(0, t), \quad \frac{\partial x_1}{\partial z} = P_{e1} \tag{3.53}$$

$$x_2(0, t), \quad \frac{\partial x_2}{\partial z} = P_{e2} \tag{3.54}$$

En el caso especial adiabático y con $Le = 1$, las ecuaciones del modelo pueden reducirse a una ecuación. Esto se hace al multiplicar el balance de masa por B y subtrayendo el resultado del balance de energía para dar una ecuación cuya única solución es, $x_2 = Bx_1$.

Remark 4 *A pesar de las imprecisiones de algunas de las predicciones, el modelo de dispersión axial es el más utilizado para representar el flujo de un fluido dentro de los reactores de cama empacada. Entre estas imprecisiones está el hecho de que el modelo de dispersión axial predice retromezclado. Además, debido a la naturaleza parabólica de las ecuaciones, el modelo predice una propagación de señal instantánea [56].*

Remark 5 *Para números de Reynolds altos y una relación del diámetro tubo-partícula suficientemente alta, el número de Peclet radial debe estar alrededor de* 11. *En tanto el número de Peclet axial debe estar alrededor de 2 para números de Reynolds suficientemente altos y un material de empacado esférico [1].*

Remark 6 *Debido a los complejos procesos de reacción y transporte en los reactores de cama fija, se generan múltiples estados estacionarios por varios mecanismos físico-químicos y cinéticos. De los resultados de Jensen y Ray [18] se conoce que para la unicidad de las soluciones puede obtenerse con números de Peclet altos, valores elevados del coeficiente de transferencia de calor, o valores de Damkholer pequeños.*

3.6.3 Incertidumbre del modelo

El modelo del reactor tubular con dispersión axial presenta varios parámetros que pueden ser considerados como inciertos. Sin embargo, la principal fuente de incertidumbre es la expresión cinética involucrada en el modelo. La causa de-tal incertidumbre se examina a continuación.

La rapidez de reacción observada depende de la naturalza de la superficie, de cuánta esté presente en el reactor y de la capacidad de las moléculas para llegar y alejarse de esta superficie [2]. Cabe hacer notar que *hasta ahora la capacidad para predecir la actividad catalítica es limitada, aunque es posible descubrir tendencias generales.* Además la superficie de un catalizador se envenena con mucha facilidad con pequeñas cantidades de substancias perjudiciales. Es importante mencionar dos puntos más. Primero, la efectividad de un catalizador radica en su capacidad de proporcionar una trayectoria de reacción con una menor energía de activación. En segundo lugar, la interacción entre la difusión y la reacción significa que los datos cinéticos de laboratorio deben interpretarse muy cuidadosamente.

Por otra parte, la obtención de un estimado del término dispersivo y del término convectivo

tiene cierto grado de incertidumbre. Esto se debe a los efectos del empaque del catalizador, variaciones del flujo, y de gradientes de temperatura en el interior del reactor que pueden distorcionar el perfil de flujo.

3.6.4 Dinámica a lazo abierto

Aspectos Numéricos Al aplicar el método de líneas [64] con discretización de las ecuaciones resultantes del modelo (3.51)-(3.52) y las condiciones frontera en la posición espacial por el método de diferencias finitas conduce al conjunto de ODE dadas por:

$$\frac{dx_{1_i}}{dt} = \frac{1}{Pe_1 Le}\frac{x_{1_i} - x_{1_{i-1}}}{\Delta Z} - \frac{1}{Le}\frac{x_{1_{i+1}} - 2x_{1_i} + x_{1_{i-1}}}{\Delta Z^2} + \frac{Da}{Le}(1 - x_{1_i})\exp\left\{\frac{x_{2_i}}{1 + x_{2_i}/\gamma}\right\} \quad (3.55)$$

$$\frac{dx_{2_i}}{dt} = \frac{1}{Pe_2 Le}\frac{x_{2i} - x_{2_{i-1}}}{\Delta Z} - \frac{1}{Le}\frac{x_{2_{i+1}} - 2x_{2_i} + x_{2_{i-1}}}{\Delta Z^2} + \frac{BDa}{Le}(1 - x_{1_i})\exp\left\{\frac{x_{2_i}}{1 + x_{2_i}/\gamma}\right\} + \frac{\beta}{Le}x_{2w} - \frac{\beta}{Le}x_{2_i} \quad (3.56)$$

$$x_1(0,t), \quad x_{1_0} = x_{1_1} - \Delta Z P_{e1} \quad (3.57)$$

$$x_2(0,t), \quad x_{2_0} = x_{2_1} - \Delta Z P_{e2} \quad (3.58)$$

donde i indica el punto malla de la discretización y ΔZ el incremento en posición. El conjunto de ODE se resuelven por integración numérica a través del algoritmo de Runge-Kutta cuarto orden con un incremento del tiempo adimensional de 0.0002.

A través de simulaciones numéricas se encontró que 200 nodos o puntos malla son suficientes para reproducir los resultados que obtuvo Jensen y Ray [18] al utilizar colocación ortogonal. A pesar del elevado número de puntos malla utilzados, el tiempo cómputo es del orden de 1 minuto al utilizar una PC personal con procesador Pentium a 133 MHz con 32 Megas en RAM.

Los valores numéricos de los parámetros usados en la simulación son los reportados por Jensen y Ray [18] y se muestran en la Tabla 3.3 y la Tabla 3.4, los cuales corresponden a dos regiones físicamente factibles de operación y concuerdan con resultados téoricos y experimentales

Pe_1	Pe_2	Le	Da	γ	B	β_{ch}	X_{2w}	X_{10}	X_{20}
5.0	5.0	1.0	0.158	20.0	11.0	2.25	0.0	0.0	0.0

Tabla 3.3: Reactor tubular con dispersión axial, valores numéricos para la simulación (Jensen y Ray, 1982). Perfil Estable

Pe_1	Pe_2	Le	Da	γ	B	β_{ch}	X_{2w}	X_{10}	X_{20}
5.0	5.0	1.0	0.185	20.0	14.0	3.0	0.0	0.0	0.0

Tabla 3.4: Reactor tubular con dispersión axial, valores numéricos para la simulación (Jensen y Ray, 1982). Perfil Inestable

encontrados en un gran número de reacciones industriales [17, y sus referencias dentro].

Dinámica a lazo abierto (sin control) Los perfiles dinámicos a lazo abierto de la temperatura y la concentración para dos casos se presentan en las Figuras 3.2 y 3.3. La Figura 3.2 presenta un perfil estable que corresponde a la región de perfiles estacionarios estables únicos. El perfil inestable de la Figura 3.3 corresponde a una región de múltiples perfiles inestables en estado estacionario. Las oscilaciones que presenta el perfil inestable son señales de la existencia de un ciclo límite, y como se ha examinado en las secciones anteriores limitan el desempeño en la producción de los reactores tubulares. La operación en tales regiones debe evitarse al implementar control para permitir la operación en tal región.

3.7 Reactor Tubular con Reciclo

3.7.1 Generalidades

La demanda para una producción más eficiente ha resultado en que las plantas de procesamiento químico llegen a estar más integradas. Las materias primas se reciclan para incrementar la conversión efectiva y simultáneamente reducir las emisiones al ambiente. Similarmente, las corrientes calientes del proceso se intercambian con las corrientes frías para incrementar la energía en forma eficiente. Bilous y Amundson [16] consideran la dinámica del reactor de flujo pistón con reciclo, y a través de una analogía con sistemas de control retroalimentado ellos concluyeron que el reciclo puede desestabilizar el reactor. Reilly y Schmitz [67]-[68] presentan resultados mostrando que el reciclo en reactores de flujo pistón conduce a múltiples estados estacionarios y ciclos límites estables.

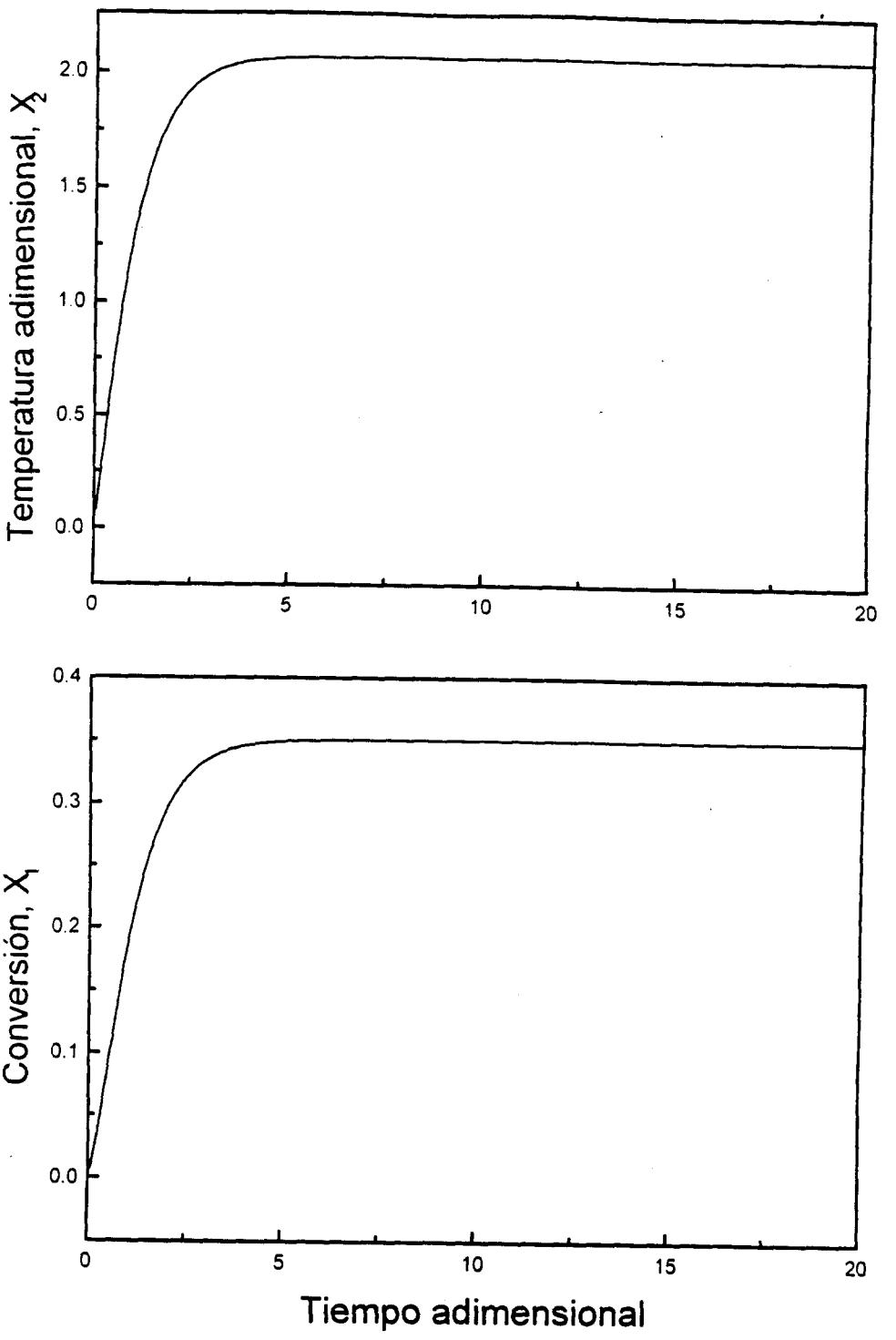


Figura 3-2: Reactor tubular con dispersión axial, dinámica a lazo abierto (perfil estable).

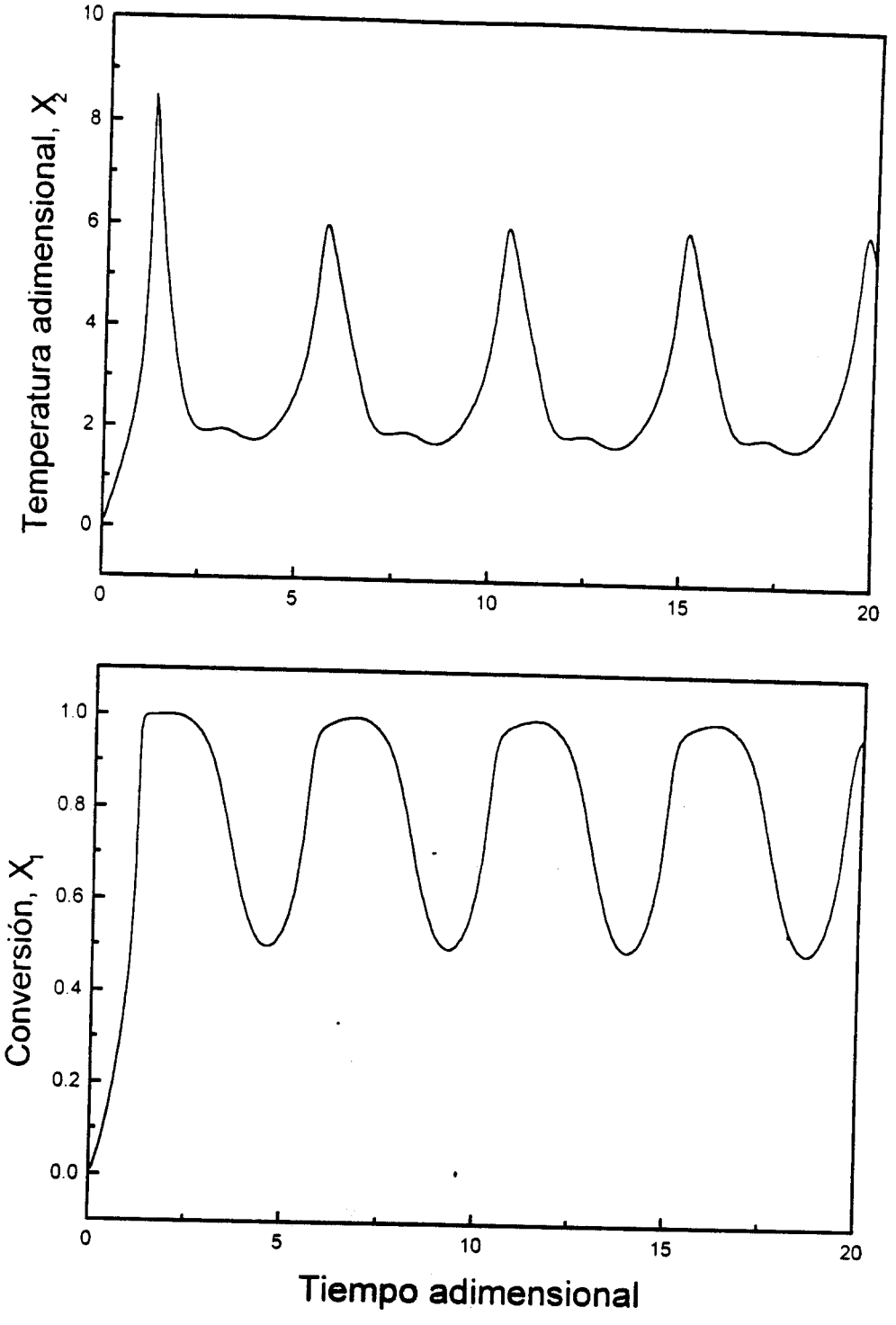


Figura 3-3: Reactor tubular con dispersión axial, dinámica a lazo abierto (perfil inestable).

$\tau = \frac{\dot{F}_0}{(1-f)V_R}t$	$\varphi = -Da R_A \nu$	$\beta = \frac{(-\Delta H_A)C_{A0}}{T_0 \rho C_p}$	$R_A = \frac{r_A}{r_{A0}}$
$\alpha = \frac{u_{A0}-u_A}{u_{A0}}$	$R_A = (1-\alpha)^n \exp\left(\gamma \frac{\beta\alpha}{1+\beta\alpha}\right)$	$Da = \frac{V_R(-r_{A0})}{\dot{F}_0 C_{A0}}$	$\xi = \frac{z}{L}$

Tabla 3.5: Reactor tubular con reciclo, variables adimensionales

3.7.2 Modelamiento

Se considera un reactor tubular donde se lleva a cabo una reacción exotérmica simple $A \rightarrow B$, en el cual una fracción del producto del reactor se recicla y mezcla con la alimentación fresca. Las consideraciones que se hacen son las siguientes [19]:

1. *Se recicla la energía y masa del efluente.*
2. *La corriente de reciclo no tiene retardo.*
3. *El fluido sigue un comportamiento tipo pistón.*
4. *parámetros constantes.*

Los balances de masa y energía están dados como sigue:

$$\rho \frac{\partial u_A}{\partial t} = -\rho w \frac{\partial u_A}{\partial z} + \nu M_A(-r_A) \tag{3.59}$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho w C_p \frac{\partial T}{\partial z} + (-\Delta H_A)(-r_A) + \delta(\theta_H - \theta) \tag{3.60}$$

donde u_A es la fracción masa, w es la velocidad, y M_A es la masa molecular del componente A. El resto de los parámetros se definen en el Apéndice C.

Introducendo las variables adimensionales:

Las ecuaciones (3.59) y (3.60) se pueden escribir como:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = -\frac{\partial \alpha}{\partial \xi} + (1-f)\varphi(\alpha, \theta) \tag{3.61}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial \theta}{\partial \xi} + (1-f)\left[\varphi(\alpha, \theta) + \delta(\theta_H - \theta)\right] \tag{3.62}$$

Si se supone que no hay reacción ni perdidas de calor en el lazo de reciclo, las condiciones de entrada se determinan al formular los balances de masa y energía para el punto de mezclado M.

$$\alpha(0,\tau) = f\alpha(1,\tau) + (1-f)\alpha_o(\tau) \tag{3.63}$$

$$\theta(0.\tau) = f\theta(1,\tau) + (1-f)\theta_o(\tau) \tag{3.64}$$

donde α_o, y θ_o son las condiciones de alimentación.

3.7.3 Incertidumbre del modelo

La expresión de velocidad de reacción se considera en este caso como la principal fuente de incertidumbre del modelo, y básicamente se debe a la limitada capacidad para predecir la actividad catalítica.

3.7.4 Dinámica a lazo abierto

Aspectos Numéricos Al aplicar el método de líneas con discretización en la posición espacial por diferencias finitas a las ecuaciones (3.61)-(3.62) conduce al conjunto de ecuaciones discretizadas dadas por:

$$\frac{d\alpha}{d\tau} = -\frac{\alpha_i - \alpha_{i-1}}{\Delta\xi} + (1-f)\left[\dot{Da}(1-\alpha_i)^{1.5}\exp\left(\gamma\frac{\beta\alpha_i}{1+\beta\alpha_i}\right)\nu\right] \tag{3.65}$$

$$\frac{d\theta}{dt} = -\frac{\theta_i - \theta_{i-1}}{\Delta\xi} + (1-f)\left[\dot{Da}(1-\alpha_i)^{1.5}\exp\left(\gamma\frac{\beta\alpha_i}{1+\beta\alpha_i}\right)\nu + \delta(\theta_H - \theta_i)\right] \tag{3.66}$$

$$\alpha_0 = f\alpha_n + (1-f)\alpha_f \tag{3.67}$$

$$\theta_0 = f\theta_n + (1-f)\theta_f \tag{3.68}$$

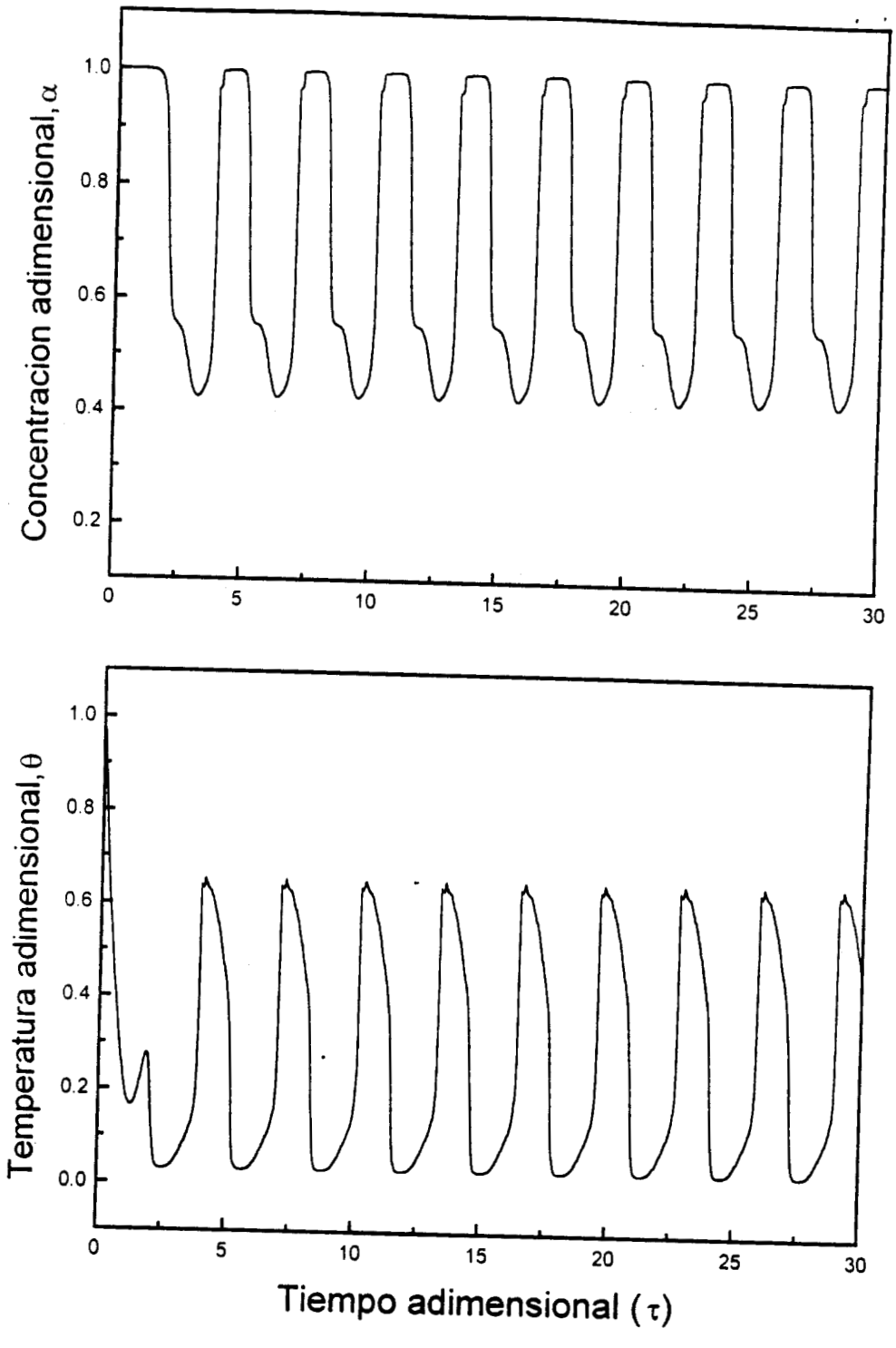


Figura 3-4: Reactor tubular con reciclo, dinámica a lazo abierto (perfil cuasi-periódico).

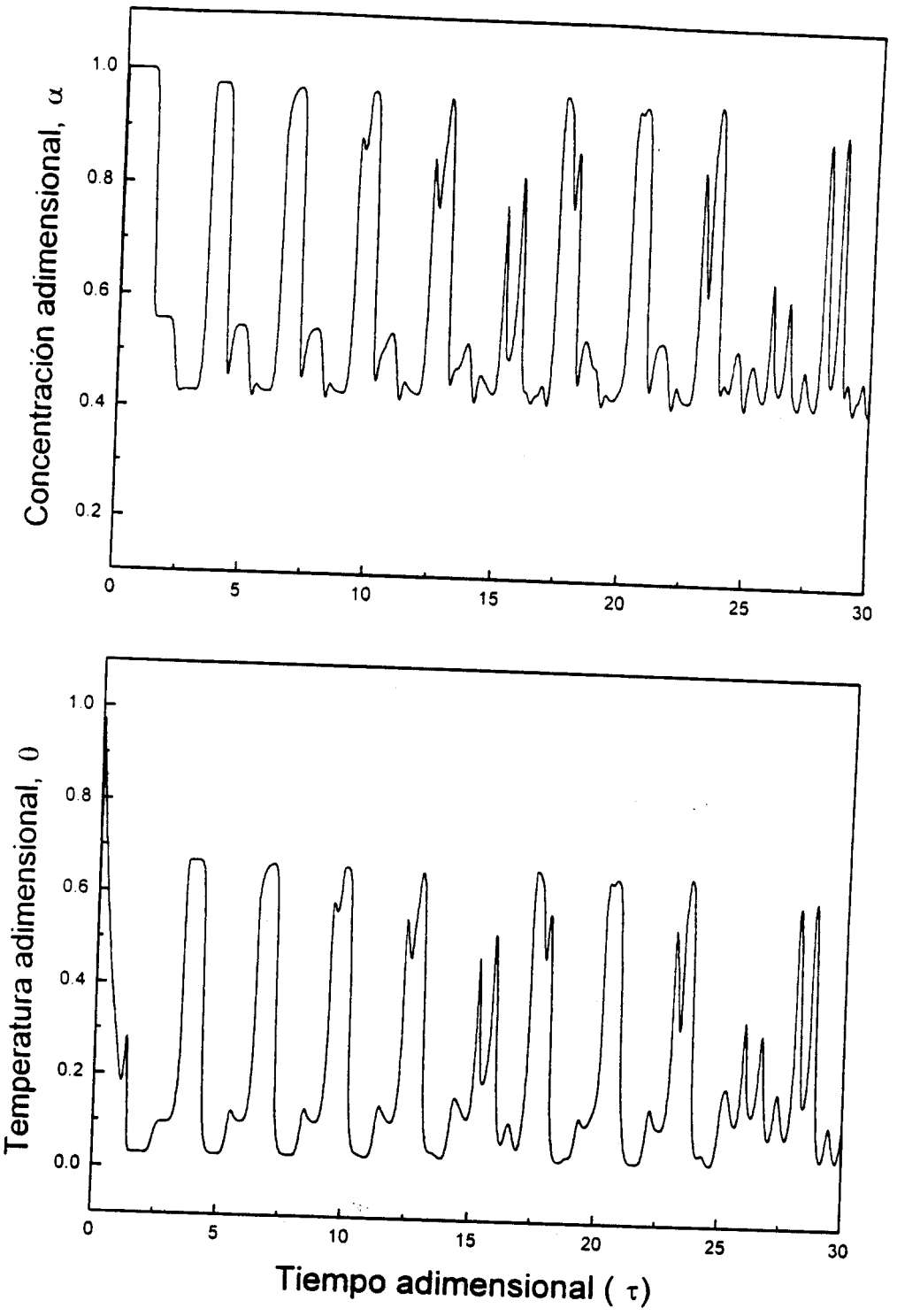


Figura 3-5: Reactor tubular con reciclo, dinámica a lazo abierto (perfil caótico).

Da	β	n	γ	δ	f	α_0	θ_0
0.15	2.0	1.5	15.0	3.0	0.5	0.0	0.0

Tabla 3.6: Reactor tubular con reciclo, valores numéricos para la simulación (Jacobsen y Berezowzky, 1998)

donde i indica el punto malla de la discretización y ΔZ el incremento en posición. El conjunto de ODE se resuelven por integración numérica a través del algoritmo de Runge-Kutta cuarto orden con un incremento del tiempo adimensional de 0.001.

Por medio de simulaciones numéricas se encontró que 75 puntos malla son suficientes para reproducir los resultados que obtenidos con el método de características por Jacobsen y Berezowski [19] que corresponden al comportamiento teórico reportado en el mismo trabajo. El tiempo cómputo es menor a 1 minuto al utilizar una PC personal con procesador Pentium a 133 MHz con 32 Megas en RAM. La Tabla 3.6 muestra los valores numéricos de los parámetros que se usan en la simulación y corresponden a los parámetros reportados por Jacobsen y Berezowski [19].

Dinámica a lazo abierto (sin control) Cuando el parámetro de reciclo f es igual a cero las ecuaciones del modelo se reducen al modelo del reactor tubular con flujo pistón, para el cual sólo son posibles perfiles estacionarios únicos [17]. Sin embargo, cuando $f \neq 0$ el reactor tubular con reciclo puede exhibir una gran variedad de comportamientos [59]. La Figura 3.5 muestra el comportamiento caótico que puede presentar este tipo de reactor, y la Figura 3.4 un comportamiento cuasi-periódico. El comportamiento periódico y caótico que presenta este reactor concuerda con los resultados obtenidos por Bilous y Amundson [16], Subramanian y Balakotahai [59]. y Jacobsen y Berezowsky [19]. El comportamiento tan complejo de este sistema se atribuye al efecto del reciclo físico de calor y de masa, así como al efecto simultáneo de variaciones en la temperatura a través de la chaqueta de enfriamiento.

3.8 Notas y Referencias

El comportamiento dinámico de los reactores tubulares raramente se cubre en los textos estándares de reactores químicos. La mayoría de la teoría de los reactores tubulares presentada en este capítulo se puede consultar en las referencias [1], [3], y [9]. Los aspectos del modelamiento

matemático de los reactores tubulares con modelos heterogéneos se toman de la referencia [57] de Amundson. Un texto clásico de reactores químicos con un tratamiento amplio en análisis y diseño de los reactores tubulares se presenta en la referencia [2].

Capítulo 4

Control Robusto de Reactores Tubulares

Perhaps mathematics is efective in organizing physical existence because it is inspired by physical existence.

Ian Stewart (1989)

Este capítulo tiene como objetivo diseñar los esquemas de control robusto para el reactor biológico tubular de cama empacada, el reactor tubular con dispersión axial y el reactor tubular con reciclo. Se analizan dos casos: El primero se refiere a sistemas sin efectos de retardo en la entrada de control (sistemas de fase mínima) mostrando la equivalencia de los controladores robustos derivados con el controlador clásico PI, con una parametrización en términos de las constantes de tiempo a lazo cerrado y de estimación de incertidumbres. El segundo considera un retardo en la entrada de control (sistema de fase no mínima) y se deriva un controlador con la estructura de un controlador clásico PID, con una parametrizacion en términos de un factor de amortiguamiento y las constantes de tiempo de estimación de incertidumbres y a lazo cerrado.

4.1 Reactor Tubular Biológico

El objetivo de control es mantener la concentración de substrato a la salida del reactor biológico mediante manipulaciones del flujo de entrada. La Figura 4.1 muestra el sistema de control y el diagrama de bloques para el esquema de control retroalimentado.

4.1.1 Control Ideal

En una primera etapa se desarrolla una ley de control ideal bajo las siguientes consideraciones:

1. *La velocidad de flujo volumétrica F. es la entrada de control*
2. *La medición de las concentraciones de substrato y biomasa están disponibles a la salida del reactor.*
3. *Los parámetros del sistema son conocidos.*
4. *La variable de control se satura en el rango de 0.0010 y 0.0030* m^3/h

Al denotar con y a la concentración del substrato a la salida del reactor, y con w a la concentración de biomasa en la misma posición se obtiene:

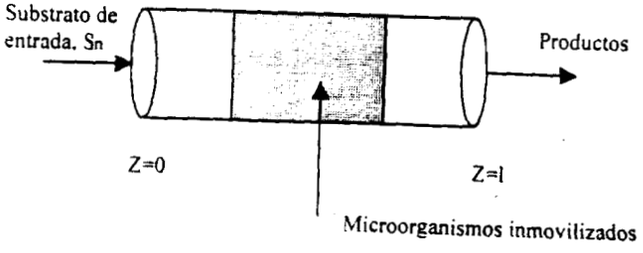
$$\frac{dy}{dt} = -\frac{F}{A}\frac{\partial y}{\partial Z}\mid_{z=1} - k_1 w \frac{\mu_{\max} y}{k_c w + y} \tag{4.1}$$

En el punto de ajuste del control $y_{ref} = S_{ref}$. Definiendo el error de regulación respecto al punto de control como $e_{ref} = y_{ref} - y$. El objetivo es que $e_{ref}(t)$ tienda a cero para valores grandes de t. Asignando una dinámica lineal al error de regulación, la ecuación de primer orden que lo describe está dada por:

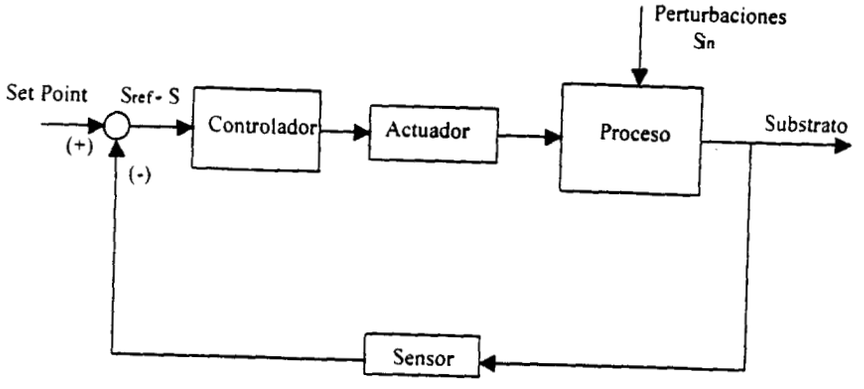
$$\frac{de_{ref}}{dt} + \tau_c^{-1} e_{ref} = 0 \tag{4.2}$$

donde τ_c es la constante de tiempo del proceso a lazo cerrado. La raíz de la ecuación característica es $-\tau_c^{-1}$. Como $\tau_c^{-1} > 0$, se tiene que $e_{ref}(t) \to 0$, conforme $t \to \infty$. Sustituyendo el error de regulación en (4.2) conduce a

$$\frac{dy}{dt} = \tau_c^{-1}(y_{ref} - y) \tag{4.3}$$



Bioreactor de cama fija con microorganismos inmovilizados



Esquema de control retroalimentado

Figura 4-1: (a) Reactor tubular biológico con microorganismos inmovilizados. (b) Diagrama de bloques del esquema de control retroalimentado.

al igualar las ecuaciones (4.1) y (4.3), y al despejar la variable de control F.

$$F = -A^{-1}\left(\frac{\partial y}{\partial Z}\mid_{z=1}\right)\left[k_1 w\frac{\kappa_{\max} y}{k_c w + y} + \tau_c^{-1}(y_{ref} - y)\right] \tag{4.4}$$

esta expresión de control como una función de la saturación está dada por

$$F_r = Sat(F) \tag{4.5}$$

donde

$$Sat(F) = \begin{array}{ll} F_{\min}, & si \quad F \leq F_{\min} \\ F, & si \quad F_{\min} < F < F_{\max} \\ F_{\max}, & si \quad F \geq F_{\max} \end{array} \tag{4.6}$$

para el reactor biológico en estudio, $F_{\min} = 0.0010\ m^3/h$ y $F_{\max} = 0.0030\ m^3/h$.

La ley de control ideal tiende asintóticamente al estado de la planta de referencia deseado. Sin embargo, la implementación de la ley de control requiere el conocimiento de todos los términos involucrados en (4.4). En la práctica tal situación no es posible debido a las incertidumbres del modelo del reactor biológico. Con el fin de diseñar un esquema de control considerando tales limitaciones en la siguiente sección se deriva una ley de control que utiliza *a priori* un mínimo de conocimiento del sistema y removiendo la consideracion 3 realizada en la derivación del esquema de control ideal.

4.1.2 Control Robusto PI basado en un modelo lineal de primer orden

El objetivo de esta sección es la derivación de un controlador robusto basado en el ajuste de la planta a un modelo lineal de primer orden.

Como punto de partida para la derivación del esquema de control robusto se aplican las siguientes consideraciones

1. *La tasa de reacción específica es desconocida.*
2. *El modelo de la planta se ajusta a un comportamiento lineal de primer orden.*
3. *La planta está afectada por no linealidades no modeladas y por perturbaciones externas.*

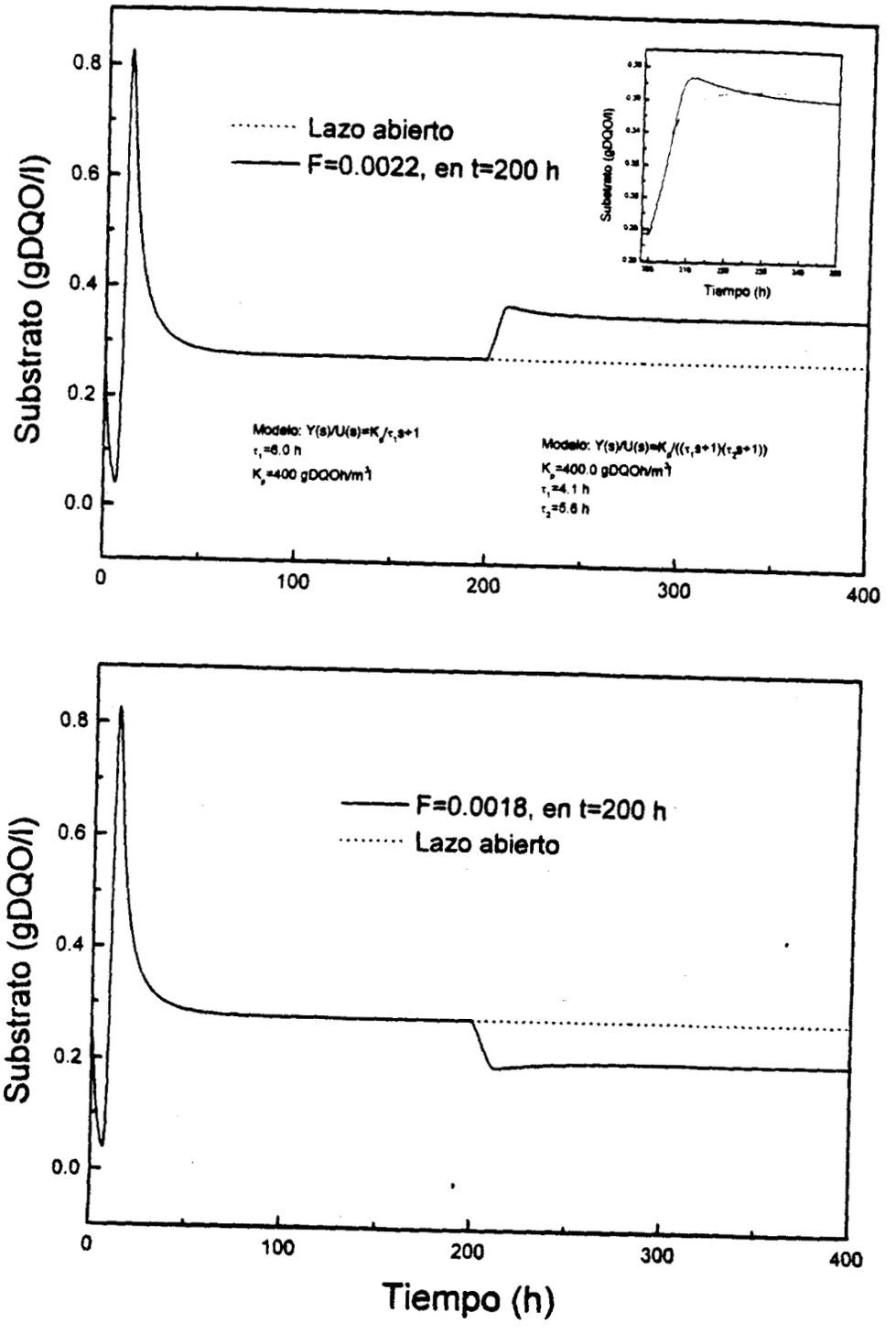


Figura 4-2: Reactor tubular biológico, aproximación a un modelo lineal de primer orden.

La aproximación al modelo lineal de primer orden se muestra en la Figura 4.2 donde se ha realizado un cambio escalón positivo y negativo en el flujo de substrato a la entrada del reactor. En términos de variables de desviación de la concentración de substrato

$$\frac{dy}{dt} = -\tau_o^{-1} y + k_p' u \tag{4.7}$$

donde $k_p' = k_p/\tau_o$, k_p y τ_o son la ganancia en estado estacionario y la constante de tiempo a lazo abierto del proceso respectivamente, u es la entrada de control (F).

Aplicando la transformada de Laplace en la ecuación (4.7), y como la condición inicial es $Y(0) = 0$ en $t = 0$ se obtiene

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_o s + 1} \tag{4.8}$$

El modelo para la planta afectado por no-linealidades y perturbaciones externas está dado por

$$\frac{dy}{dt} = -\tau_o^{-1}(\overline{S} - S) + k_p'(\overline{F} - F) + \eta \tag{4.9}$$

donde $\overline{S}$ y $\overline{F}$ son los valores nominales de la concentración de substrato y el flujo respectivamente (en este caso se toman como los valores en estado estacionario), η es el término que agrupa los errores de modelado (*i.e.*, incertidumbres en la expresión cinética, en el término convectivo, perturbaciones externas, y no linealidades no modeladas), y y_{ref} es la concentración de substrato de referencia (*Set Point*). Además, el término $\tau_o y_{ref}$ se toma como una perturbación constante y se puede incluir en η.

Introduciendo el error de regulación, $e_{ref} = y_{ref} - y$, donde $y = \overline{S} - S$, al substituir en (4.9) conduce a

$$\frac{de_{ref}}{dt} = -\tau_o^{-1} e_{ref} - k_p'(\overline{F} - F) + \eta \tag{4.10}$$

Un controlador retroalimentado para el sistema (4.10) está dado por

$$\overline{F} - F = \frac{1}{k_p'}\left[-\tau_o^{-1} e_{ref} + \tau_c^{-1} e_{ref} + \eta\right] \tag{4.11}$$

El sistema a lazo cerrado conduce a la dinámica $\dot{e}_{ref} = -\tau_c^{-1} e_{ref}$. Sin embargo, la expresión de la ley de control incluye el término η, el cual es desconocido y agrupa los errores de modelado de la planta. Con el fin de implementar la ley de control es necesario estimar el valor de η. Para tal efecto, del modelo de la planta (4.10) se observa que

$$\eta = \frac{de_{ref}}{dt} + \tau_o^{-1} e_{ref} + k_p'(\overline{F} - F) \tag{4.12}$$

Así, $\eta(t)$ puede reconstruirse usando mediciones de $e_{ref}(t)$, $F(t)$, y un derivador con respecto al tiempo para evaluar $\dot{e}_{ref}$. Debido a que los derivadores perfectos no se pueden construir, una alternativa es usar observadores. Entonces, se propone un observador de orden reducido como un estimador para $\eta(t)$.

La dinámica de reconstrucción del estado aumentado, $\eta(t)$ está dada por

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta - \widehat{\eta}) \tag{4.13}$$

de la ecuación (4.12),

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}\left[\frac{de_{ref}}{dt} + k_p'(\overline{F} - F) + \tau_o^{-1} e_{ref} - \widehat{\eta}\right] \tag{4.14}$$

Introduciendo la variable $W = \tau_e \widehat{\eta} - e_{ref}$, el controlador robusto está dado por las ecuaciones

$$\dot{W} = k_p'(\overline{F} - F) + \tau_o^{-1} e_{ref} - \widehat{\eta} \tag{4.15}$$

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(W + e_{ref}) \tag{4.16}$$

$$F = \overline{F} + \frac{1}{k_p'}\left[(\tau_o^{-1} - \tau_c^{-1}) e_{ref} - \widehat{\eta}\right] \tag{4.17}$$

La entrada de control real está dada por $F_r = Sat(F)$. La equivalencia del controlador robusto con el controlador clásico PI se presenta en la siguiente sección.

Equivalencia con el controlador clásico PI

Aplicando el retroalimentado dado por la ecuación (4.17) en el filtro de estimación (4.15) conduce a la dinámica del filtro dada por $\dot{W} = \tau_c^{-1} y$. Introduciendo la variable $\tau_c W = \nu$ en las ecuaciones (4.15), (4.16) y (4.17) se pueden re-escribir como

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(\tau_c^{-1}\nu + e_{ref}) \tag{4.18}$$

$$\overline{F} - F = \frac{1}{k_p'}\left[(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_e\tau_c)^{-1}\upsilon\right] \tag{4.19}$$

$$\dot{\upsilon} = e_{ref} \tag{4.20}$$

el cual es un controlador clásico PI, con ganancias proporcional e integral dadas por:

$$K_p = \frac{1}{k_p'}(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1}) \tag{4.21}$$

$$K_i = \frac{K_p}{\tau_i} = \frac{1}{k_p'}(\tau_c\tau_e)^{-1} \tag{4.22}$$

donde el tiempo integral está dado por

$$\tau_i = (\tau_c\tau_e)\,(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1}) \tag{4.23}$$

El controlador descrito por las ecuaciones (4.15), (4.16) y (4.17) tiene la estructura de un controlador clásico PI, con ganancias integrales y proporcionales dadas en términos de las constantes de tiempo de estimación y a lazo cerrado. Al fijar un parámetro de control (τ_c, τ_e) sólo resta un parámetro ajustable, el cual se puede encontrar fácilmente mediante simulaciones numéricas.

4.1.3 Control Robusto PI basado en el balance de masa sobre el substrato

Al tomar la ecuación dinámica del substrato y denotando con y la concentración de substrato a la salida del reactor, y con w a la concentración de biomasa en la misma posición, obtenemos

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{F}{A}\frac{\partial S}{\partial Z}\,|_{Z=1} - k_1 w \frac{\mu_{\max} y}{k_c w + y} \tag{4.24}$$

Debido a que el término convectivo y la rapidez específica de crecimiento son desconocidas y/o inciertas, un modelo para la planta está dado por

$$\frac{dy}{dt} = -\left(\frac{\beta}{A}\right) F + \eta \tag{4.25}$$

donde η agrupa las incertidumbres del modelo,

$$\eta = -\frac{F}{A}\left\{\frac{\partial S}{\partial Z}\,|_{Z=1} - \beta\right\} - k_1 w \frac{\mu_{\max} y}{k_c w + y} \tag{4.26}$$

y el término β es un estimado del término convectivo dado por

$$\beta = \underset{\sim}{e}\left\{\frac{\partial S}{\partial Z}\,|_{Z=1}\right\} \tag{4.27}$$

al introducir $e_{ref} = y_{ref} - y$,

$$\frac{de_{ref}}{dt} = -\left(\frac{\beta}{A}\right) F + \eta \tag{4.28}$$

un controlador retroalimentado para la ecuación (4.28) está dado por

$$F = \left[\frac{A}{\beta}\right]\left\{\tau_c^{-1}(y_{ref} - y) + \eta\right\} \tag{4.29}$$

Proponiendo el siguiente observador de orden reducido para reconstruir el término que agrupa las incertidumbres:

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta - \widehat{\eta}) \tag{4.30}$$

de (4.28) se puede ver que

$$\eta = \frac{de_{ref}}{dt} + \left(\frac{\beta}{A}\right) F \tag{4.31}$$

Entonces, la ecuación (4.30) se puede escribir como,

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}\left\{\frac{de_{ref}}{dt} + \left(\frac{\beta}{A}\right)F - \widehat{\eta}\right\} \tag{4.32}$$

al introducir la variable $W = \tau_e\widehat{\eta} - e_{ref}$, las ecuaciones (4.29), (4.30) y (4.32) se pueden re-escribir como

$$\dot{W} = \left(\frac{\beta}{A}\right)F - \widehat{\eta} \tag{4.33}$$

$$F = \left(\frac{A}{\beta}\right)\{\tau_c^{-1}(y_{ref} - y) + \widehat{\eta}\} \tag{4.34}$$

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(W + e_{ref}) \tag{4.35}$$

Las ecuaciones (4.33), (4.34), y (4.35), constituyen el diseño del controlador robusto basado en el balance de masa de substrato.

Equivalencia con el controlador clásico PI

Aplicando el retroalimentado (4.34) en el filtro de estimación (4.33), conduce a la dinámica $\dot{W} = \tau_c^{-1}e_{ref}$. Al introducir la variable $\tau_c W = \nu$ las ecuaciones (4.33) a (4.35) se pueden re-escribir como

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(\tau_c^{-1}\nu + e_{ref}) \tag{4.36}$$

$$F = \frac{A}{\beta}\left\{(\tau_c^{-1} + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_c\tau_e)^{-1}\nu\right\} \tag{4.37}$$

$$\dot{\nu} = e_{ref} \tag{4.38}$$

el cual es un controlador clásico PI, con ganancias proporcional e integral dadas por:

$$K_p = \frac{A}{\beta}(\tau_c^{-1} + \tau_e^{-1}) \tag{4.39}$$

$$K_i = \frac{K_p}{\tau_i} = \frac{A}{3}(\tau_c \tau_e)^{-1} \tag{4.40}$$

donde el tiempo integral está dado por

$$\tau_i = (\tau_c \tau_e)(\tau_c^{-1} + \tau_e^{-1}) \tag{4.41}$$

Así, el controlador robusto basado en el balance de masa sobre el substrato tiene la estructura de un controlador clásico PI, con ganancias integrales y proporcionales dadas en términos de las constantes de tiempo de estimación y a lazo cerrado. Al fijar un parámetro de control $(\tau_c \tau_e)$ sólo resta un parámetro ajustable, el cual se puede encontrar fácilmente mediante simulaciones numéricas.

4.2 Reactor Tubular con Dispersión Axial

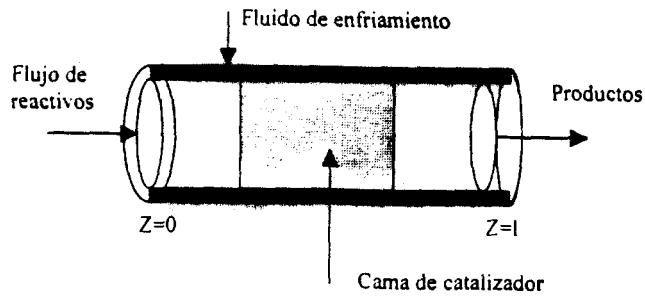
El objetivo de control es mantener en un punto de referencia la temperatura a la salida del reactor mediante manipulaciones de la temperatura de enfriamiento. La Figura 4.3 muestra el esquema de control retroalimentado del reactor tubular con dispersión axial.

4.2.1 Control Ideal

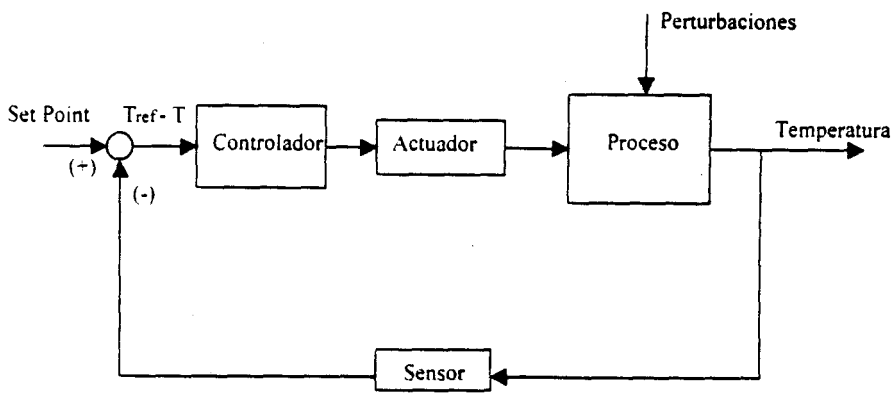
En una primera etapa se desarrolla una ley de control ideal bajo las siguientes consideraciones:

1. *La temperatura de chaqueta X_{2w}, es la entrada de control.*
2. *Los parámetros del sistema son conocidos.*
3. *La variable de control se satura en el rango de -4.0 y 4.0, que corresponde a un cambio de temperatura de aproximadamente 150°* C.

Al denotar con y a la temperatura a la salida del reactor, y con w a la concentración del reactivo A a la salida del reactor, la ecuación de temperatura del reactor tubular con dispersión axial se puede escribir como:



Reactor tubular de cama empacada con chaqueta de enfriamiento



Esquema de control retroalimentado

Figura 4-3: (a) Reactor tubular de cama empacada con chaqueta de enfriamiento. (b) Diagrama de bloques del esquema de control retroalimentado.

$$\frac{dy}{dt} = \frac{1}{Pe_2 Le}\frac{\partial^2 y}{\partial Z^2}\mid_{z=1} - \frac{1}{Le}\frac{\partial y}{\partial Z}\mid_{z=1} + \frac{BDa}{Le}(1-w)\exp\left\{\frac{y}{1+y/\gamma}\right\} + \frac{\beta}{Le}X_{2w} - \frac{\beta}{Le}y \quad (4.42)$$

En el punto de control, $y_{ref} = X_{2wref}$, definiendo el error de regulación respecto al punto de control como $e_{ref} = y_{ref} - y$. El objetivo es que $e_{ref}(t)$ tienda a cero para valores grandes de t. Asignando una dinámica lineal del error de regulación, la ecuación de primer orden lineal para el error de regulación es

$$\frac{de_{ref}}{dt} + \tau_c^{-1} e_{ref} = 0 \quad (4.43)$$

donde τ_c es la constante de tiempo del proceso a lazo cerrado. La raíz de la ecuación característica es $-\tau_c^{-1}$. Como $\tau_c^{-1} > 0$, se tiene que $e_{ref}(t) \to 0$, conforme $t \to \infty$. Substituyendo el error de regulación en (4.43)

$$\frac{dy}{dt} = \tau_c^{-1}(y_{ref} - y) \quad (4.44)$$

Al igualar las ecuaciones (4.42) y (4.44), y despejar la variable de control X_{2w},

$$X_{2w} = \frac{1}{\beta}\left[\tau_c^{-1}(y_{ref} - y) - \frac{1}{Pe_2 Le}\frac{\partial^2 y}{\partial Z^2}\mid_{z=1} + \frac{1}{Le}\frac{\partial y}{\partial Z}\mid_{z=1} - \frac{BDa}{Le}(1-w)\exp\left\{\frac{y}{1+y/\gamma}\right\} + \frac{\beta}{Le}y\right] \quad (4.45)$$

la expresión de control con función de saturación está dada por

$$X_{2wr} = Sat\,(X_{2w}) \quad (4.46)$$

donde

$$Sat(X_{2w}) = \begin{cases} X_{2w\min}, & si \quad X_{2w} \le X_{2w\min} \\ X_{2w}, & si \quad X_{2w\min} < X_{2w} < X_{2w\max} \\ X_{2w\max}, & si \quad X_{2w} \ge X_{2w\max} \end{cases} \quad (4.47)$$

para el caso en estudio: $X_{2w\min} = -4.0$ y $X_{2w\max} = +4.0$

El esquema de control ideal tiende asintóticamente al estado de la planta de referencia deseado. Debido a que la implementación de la ley de control requiere el conocimiento de todos los términos involucrados en (4.45), y como el modelo de dispersión axial posee una elevada incertidumbre, se deriva un esquema de control robusto en la siguiente sección que usa *a priori* un mínimo de conocimiento del sistema.

4.2.2 Control Robusto PI basado en un modelo lineal de primer orden

El objetivo de esta sección es la derivación de un controlador robusto basado en el ajuste de la planta a un modelo de primer orden para el reactor tubular con dispersión axial.

Las siguientes consideraciones se realizan para la derivación del esquema de control robusto.

1. *La tasa de reacción es desconocida.*

2. *El modelo de la planta se ajusta a un comportamiento de primer orden lineal.*

3. *La planta está afectada por no linealidades no modeladas y por perturbaciones externas.*

La Figura 4.4 muestra la aproximación al modelo lineal de primer orden. En términos de variables de desviación de la temperatura del reactor

$$\frac{dy}{dt} = \tau_o^{-1} y + k_p' u \tag{4.48}$$

donde $k_p' = k_p/\tau_o$, k_p y τ_o son la ganancia y la constante de tiempo a lazo abierto del proceso respectivamente, u es la entrada de control (X_{2w}).

Aplicando la transformada de Laplace a la ecuación (4.48), y como la condición inicial es cero,

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p'}{\tau_o s + 1} \tag{4.49}$$

Un modelo para la planta afectada por no.linealidades y perturbaciones externas está dado por

$$\frac{dy}{dt} = -\tau_o^{-1}(\overline{X_2} - X_2) + k_p'(\overline{X_{2w}} - X_{2w}) + \eta \tag{4.50}$$

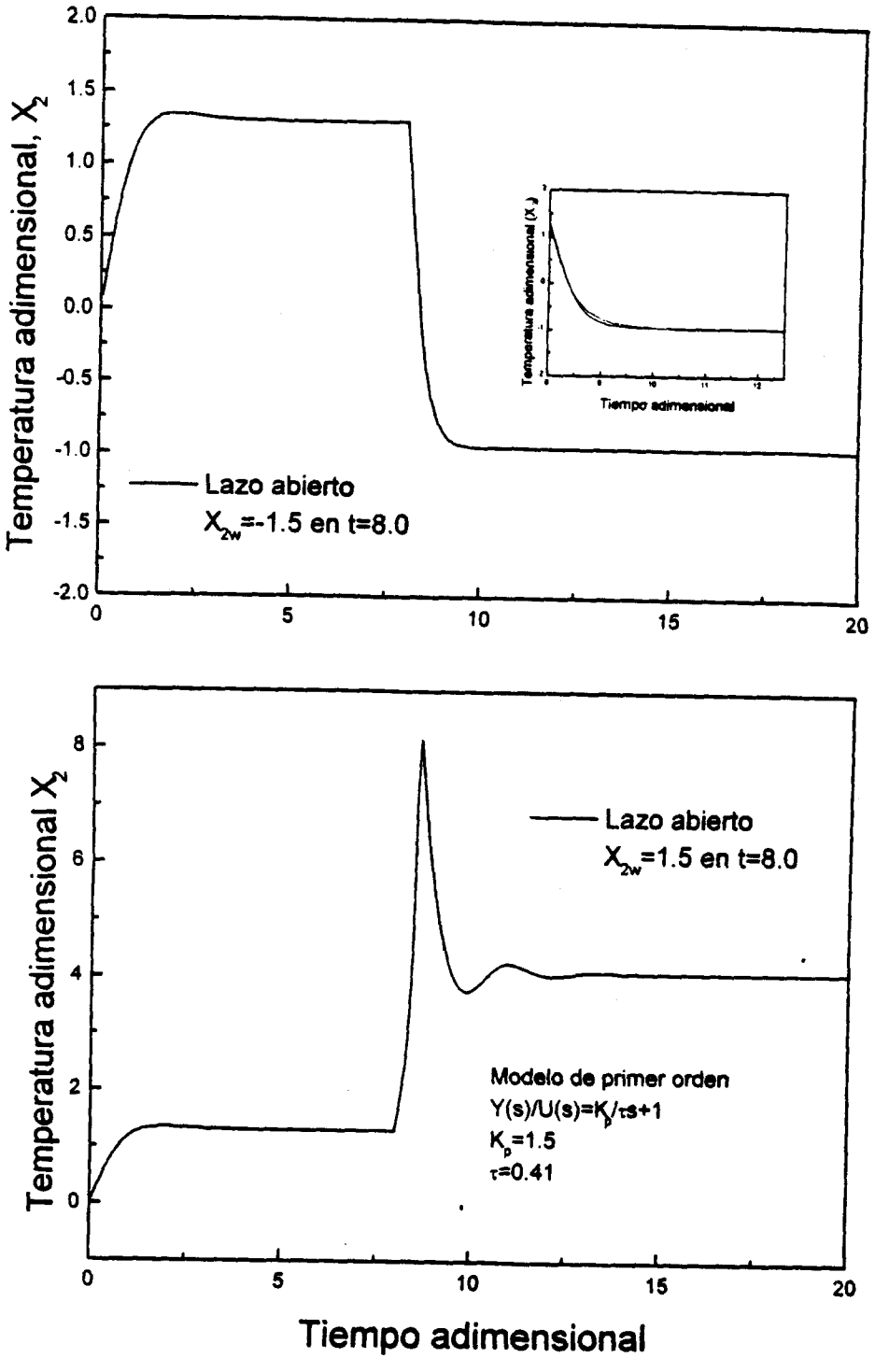


Figura 4-4: Reactor tubular con dispersión axial, aproximación a un modelo de primer orden.

donde $\overline{X_2}$ y $\overline{X_{2w}}$ son los valores nominales de la temperatura del reactor y la temperatura de chaqueta respectivamente (en este caso se toman como los valores en estado estacionario). η es el término que agrupa los errores de modelado y y_{ref} es la temperatura del reactor de referencia (*Set Point*). Además, el término $\tau_o y_{ref}$ se toma como una perturbación constante y se puede incluir en η.

Si $e_{ref} = y_{ref} - y$, donde $y = \overline{X_2} - X_2$. Al substituir en (4.50) conduce a

$$\frac{de_{ref}}{dt} = -\tau_o^{-1} e_{ref} - k_p(\overline{X_{2w}} - X_{2w}) + \eta \tag{4.51}$$

Un controlador retroalimentado para le ecuación (4.51) está dado por

$$\overline{X_{2w}} - X_{2w} = \frac{1}{k_p}\left[-\tau_o^{-1} e_{ref} + \tau_c^{-1} e_{ref} + \eta\right] \tag{4.52}$$

El sistema a lazo cerrado conduce a la dinámica $\dot{e}_{ref} = -\tau_c^{-1} e_{ref}$. Sin embargo, la expresión de la ley de control incluye el término η el cual es desconocido y agrupa los errores de modelado de la planta. Con el fin de implementar la ley de control es necesario estimar el valor de η. Del modelo de la planta se tiene

$$\eta = \frac{de_{ref}}{dt} + \tau_o^{-1} e_{ref} + k_p(\overline{X_{2w}} - X_{2w}) \tag{4.53}$$

Entonces, $\eta(t)$ puede reconstruirse usando mediciones de $e_{ref}(t)$, $X_{2w}(t)$, y un derivdor para evaluar $\dot{e}_{ref}$. La operación de derivación es una operación muy inestable, un observador de orden reducido se propone como un estimador de $\eta(t)$.

La dinámica de reconstrucción del término que agrupa los errores de modelado, $\eta(t)$ está dada por

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}\left(\eta - \widehat{\eta}\right) \tag{4.54}$$

sustituyendo (4.53)

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}\left[\frac{de_{ref}}{dt} + k_p(\overline{X_{2w}} - X_{2w}) + \tau_o^{-1} e_{ref} - \widehat{\eta}\right] \tag{4.55}$$

al introducir la variable $W = \tau_e \widehat{\eta} - e_{ref}$, el controlador robusto está dado por las ecuaciones

$$\dot{W} = k_p(\overline{X_{2w}} - X_{2w}) + \tau_o^{-1} e_{ref} - \widehat{\eta} \tag{4.56}$$

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(W + e_{ref}) \tag{4.57}$$

$$X_{2w} = \overline{X_{2w}} + \frac{1}{k_p}\left[(\tau_o^{-1} - \tau_c^{-1})e_{ref} - \widehat{\eta}\right] \tag{4.58}$$

La entrada de control real está dada por $X_{2wr} = Sat(X_{2w})$. La equivalencia del controlador robusto con el controlador clásico PI se presenta en la siguiente sección.

Equivalencia con el controlador clásico PI

Aplicando el retroalimentado dado por la ecuación (4.58) en el filtro de estimación dado por (4.56) conduce al comportamiento dado por $\dot{W} = \tau_c^{-1} y$. Introduciendo la variable $\tau_c W = \nu$ las ecuaciones (4.56) a (4.58) se pueden escribir como

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(\tau_c^{-1}\nu + e_{ref}) \tag{4.59}$$

$$\overline{X_{2w}} - X_{2w} = \frac{1}{k_p}\left[(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_e\tau_c)^{-1}\upsilon\right] \tag{4.60}$$

$$\dot{\upsilon} = e_{ref} \tag{4.61}$$

el cual es un controlador clásico PI, con ganancias proporcional e integral dadas por:

$$K_p = \frac{1}{k_p}(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1}) \tag{4.62}$$

$$K_i = \frac{K_p}{\tau_i} = \frac{1}{k_p}(\tau_c\tau_e)^{-1} \tag{4.63}$$

donde el tiempo integral está dado por

$$\tau_i = (\tau_c \tau_e)(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1}) \tag{4.64}$$

El controlador descrito por las ecuaciones (4.59) a (4.61) tiene la estructura de un controlador clásico PI. con ganancias integral y proporcional dadas en términos de las constantes de tiempo de estimación y a lazo cerrado. Al fijar un parámetro de control ($\tau_c \tau_e$) sólo resta un parámetro ajustable el cual se puede encontrar fácilmente mediante simulaciones numéricas.

4.2.3 Control Robusto PI basado en el balance de energía

Al tomar la ecuación dinámica de la temperatura y denotando con y la temperatura a la salida del reactor y con w a la concentración del reactivo A en la misma posición,

$$\frac{dy}{dt} = \frac{1}{Pe_2}\frac{\partial^2 y}{\partial Z^2}\Big|_{z=l} - \frac{\partial y}{\partial Z}\Big|_{z=l} + BDa(1-w)\exp\left\{\frac{y}{1+y/\gamma}\right\} + \beta X_{2w} - \beta y \tag{4.65}$$

Debido a que el término dispersivo, el término convectivo y la expresión cinética y la entalpía de reacción son desconocidas y/o inciertas un modelo entrada-salida aumentado con un término que agupa las incertidumbres del modelo está dado por

$$\frac{dy}{dt} = \beta_e X_{2w} - \beta_e y + \eta \tag{4.66}$$

con η definido por,

$$\eta = \frac{1}{Pe_2}\frac{\partial^2 y}{\partial Z^2}\Big|_{z=l} - \frac{\partial y}{\partial Z}\Big|_{z=l} + BDa(1-w)\exp\left\{\frac{y}{1+y/\gamma}\right\} \tag{4.67}$$

y el término β_e es un estimado del coeficiente de transferencia de calor $\beta_e = \underset{\sim}{e}\ \beta$. Introduciendo $e_{ref} = y_{ref} - y$,

$$\frac{de_{ref}}{dt} = -\beta_e X_{2w} - \beta_e e_{ref} + \eta \tag{4.68}$$

Un controlador retroalimentado para el sistema dado por (4.68) es

$$X_{2w} = \beta_e^{-1}\left\{(\tau_c^{-1} - \beta_e)e_{ref} + \eta\right\} \tag{4.69}$$

Proponiendo el siguiente observador de orden reducido para reconstruir el término que agrupa los errores de modelamiento

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta - \widehat{\eta}) \tag{4.70}$$

de (4.68) se puede observar que

$$\eta = \frac{de_{ref}}{dt} + \beta_e X_{2w} + \beta_e e_{ref} \tag{4.71}$$

así, la ecuación (4.70) se puede escribir como,

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}\left\{\frac{de_{ref}}{dt} + \beta_e X_{2w} + \beta_e e_{ref} - \widehat{\eta}\right\} \tag{4.72}$$

introduciendo la variable $W = \tau_e\widehat{\eta} - e_{ref}$ se obtiene

$$\dot{W} = \beta_e X_{2w} + \beta_e e_{ref} - \widehat{\eta} \tag{4.73}$$

$$X_{2w} = \beta_e^{-1}\left\{(\tau_c^{-1} - \beta_e)e_{ref} + \widehat{\eta}\right\} \tag{4.74}$$

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(W + e_{ref}) \tag{4.75}$$

Las ecuaciones (4.73), (4.74), y (4.75), constituyen el diseño del controlador robusto basado en el balance de masa de substrato.

Equivalencia con el controlador clásico PI

Aplicando el retroalimentado (4.74) en el filtro de estimación (4.73), conduce a la dinámica $\dot{W} = \tau_c^{-1}e_{ref}$, y al introducir la variable $\tau_c W = \nu$ las ecuaciones (4.73) a (4.75) se pueden escribir como

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(\tau_c^{-1}\nu + e_{ref}) \tag{4.76}$$

$$X_{2w} = \beta_e^{-1}\left\{(\tau_c^{-1} - \beta_e + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_c\tau_e)^{-1}\nu\right\} \tag{4.77}$$

$$\dot{\nu} = e_{ref} \tag{4.78}$$

el cual es un controlador clásico PI, con ganancias proporcional e integral dadas por:

$$K_p = \beta_e^{-1}(\tau_c^{-1} - \beta_e + \tau_e^{-1}) \tag{4.79}$$

$$K_i = \frac{K_p}{\tau_i} = \beta_e^{-1}(\tau_c\tau_e)^{-1} \tag{4.80}$$

donde el tiempo está dado por,

$$\tau_i = (\tau_c\tau_e)(\tau_c^{-1} - \beta_e + \tau_e^{-1}) \tag{4.81}$$

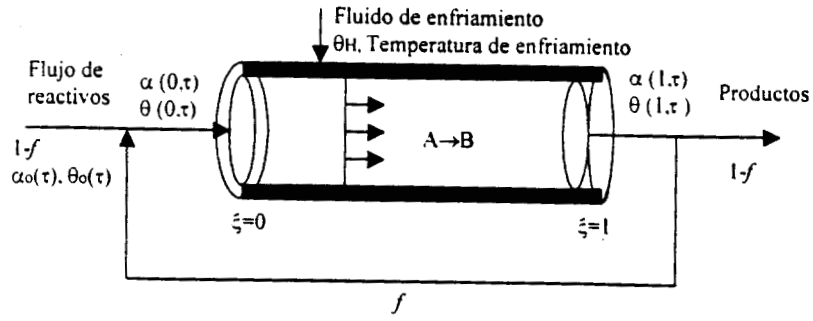
El controlador basado en el balance de energía tiene la estructura de un controlador clásico PI, con ganancias integral y proporcional dadas en términos de las constantes de tiempo de estimación y a lazo cerrado. Al fijar un parámetro de control ($\tau_c\tau_e$) sólo resta un parámetro ajustable, el cual se puede encontrar fácilmente mediante simulaciones numéricas.

4.3 Reactor Tubular con Reciclo

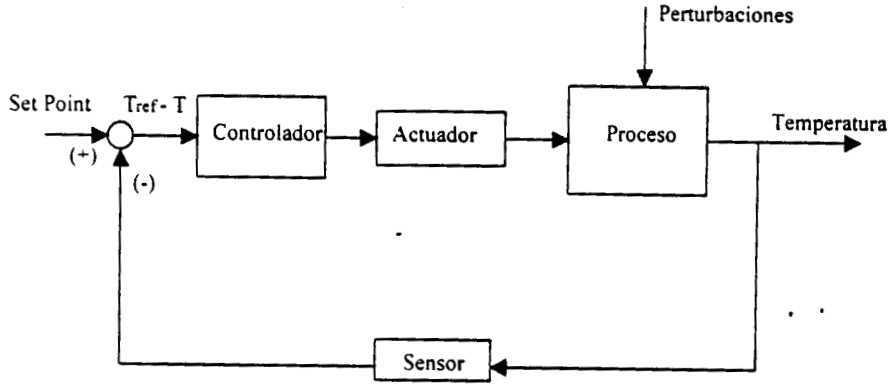
El objetivo de control es mantener en un punto de referencia la temperatura a la salida del reactor mediante manipulaciones de la temperatura de enfriamiento. La Figura 4.5 muestra el esquema de control retroalimentado para este reactor.

4.3.1 Control Ideal

En una primera etapa se desarrolla una ley de control ideal bajo las siguientes consideraciones:



Reactor tubular de flujo tapón con reciclo con chaqueta de enfriamiento



Esquema de control retroalimentado

Figura 4-5: (a) Reactor tubular de flujo pistón con reciclo con chaqueta de enfriamiento. (b) Diagrama de bloques del esquema de control retroalimentado.

1. *La temperatura de chaqueta X_{2w}, es la entrada de control.*

2. *Los parámetros del sistema son conocidos.*

3. *La variable de control se satura en el rango de -0.2 y 0.2.*

Al denotar con y a la temperatura adimensional a la salida del reactor, y con w a la concentración adimensional a la salida del reactor, la ecuación de temperatura del reactor tubular con reciclo se puede escribir como:

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{\partial y}{\partial \xi}\mid_{\varepsilon=l} + (1-f)Da(1-w)\exp\left\{\gamma\frac{\beta y}{1+\beta y}\right\} + (1-f)\delta X_{2w} - (1-f)\delta y \tag{4.82}$$

En el punto de control, $y_{ref} = X_{2wref}$, definiendo el error de regulación respecto al punto de control como $e_{ref} = y_{ref} - y$. El objetivo es que $e_{ref}(t)$ tienda a cero para valores grandes de t. Asignando una dinámica lineal del error de regulación, la ecuación de primer orden lineal para el error de regulación es

$$\frac{de_{ref}}{dt} + \tau_c^{-1} e_{ref} = 0 \tag{4.83}$$

donde τ_c es la constante de tiempo del proceso a lazo cerrado. La raíz de la ecuación característica es $-\tau_c^{-1}$. Como $\tau_c^{-1} > 0$, se tiene que $e_{ref}(t) \to 0$, conforme $t \to \infty$. Sustituyendo el error de regulación en (4.43)

$$\frac{dy}{dt} = \tau_c^{-1}(y_{ref} - y) \tag{4.84}$$

Al equiparar las ecuaciones (4.82) y (4.84), al despejar la variable de control X_{2w},

$$X_{2w} = \frac{1}{(1-f)\delta}\left[\tau_c^{-1}(y_{ref} - y) + \frac{\partial y}{\partial \xi}\mid_{\varepsilon=l} -(1-f)Da(1-w)\exp\left\{\gamma\frac{\beta y}{1+\beta y}\right\} + \delta(1-f)y\right] \tag{4.85}$$

la expresión de control con la función de saturación está dada por

$$X_{2wr} = Sat\,(X_{2w}) \tag{4.86}$$

donde

$$Sat(X_{2w}) = \begin{cases} X_{2w\min}, & si \quad X_{2w} \leq X_{2w\min} \\ X_{2w}, & si \quad X_{2w\min} < X_{2w} < X_{2w\max} \\ X_{2w\max}, & si \quad X_{2w} \geq X_{2w\max} \end{cases} \tag{4.87}$$

para este caso: $X_{2w\min} = -0.2$ y $X_{2w\max} = +0.2$

El esquema de control ideal tiende asintóticamente al estado de la planta a la referencia deseada. Debido a que la implementación de la ley de control requiere el conocimiento de todos los términos involucrados en (4.85), lo cual no es una consideración realista por la incertidumbre que presenta el modelo del reactor tubular con reciclo, un esquema de control robusto se deriva en la siguiente sección que usa *a priori* un mínimo de conocimiento del sistema.

4.3.2 Control Robusto PI basado en un modelo de primer orden

Las siguientes consideraciones se hacen para la derivación del esquema de control robusto.

1. *La tasa de reacción es desconocida*
2. *El modelo de la planta se ajusta a un comportamiento de primer orden lineal*
3. *La planta está afectada por no linealidades no modeladas y por perturbaciones externas*

$$\frac{dy}{dt} = \tau_o^{-1} y + k_p' u \tag{4.88}$$

donde $k_p' = k_p/\tau_o$, k_p y τ_o son la ganancia y la constante de tiempo a lazo abierto del proceso. u es la entrada de control X_{2w}.

Aplicando la transformada de Laplace a la ecuación (4.88), y como la condición inicial es cero, obtenemos

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_o s + 1} \tag{4.89}$$

Un modelo para la planta afectada por no-linealidades y perturbaciones externas está dado por

$$\frac{dy}{dt} = -\tau_o^{-1}(\overline{X_2} - X_2) + k_p(\overline{X}_w - X_{2w}) + \eta \tag{4.90}$$

donde $\overline{X_2}$ y $\overline{X_{2w}}$ son los valores nominales de la temperatura del reactor y la temperatura de chaqueta respectivamente (en este caso se toman como los valores en estado estációnario). η es el término que agrupa los errores de modelado y y_{ref} es la temperatura del reactor de referencia (*Set Point*). Además, el término $\tau_o y_{ref}$ se toma como una perturbación constante y se incluye en η.

Si $e_{ref} = y_{ref} - y$, donde $y = \overline{X_2} - X_2$. Al substituir en (4.90) conduce a

$$\frac{de_{ref}}{dt} = -\tau_o^{-1} e_{ref} - k_p(\overline{X_{2w}} - X_{2w}) + \eta \tag{4.91}$$

Un controlador retroalimentado para la ecuación (4.91) está dado por

$$\overline{X_{2w}} - X_{2w} = \frac{1}{k_p}\left[-\tau_o^{-1} e_{ref} + \tau_c^{-1} e_{ref} + \eta\right] \tag{4.92}$$

El sistema a lazo cerrado conduce a la dinámica $\dot{e}_{ref} = -\tau_c^{-1} e_{ref}$. Sin embargo, la expresión de la ley de control incluye el término η el cual es desconocido y agrupa los errores de modelado de la planta. Con el fin de implementar la ley de control es necesario estimar el valor de η. Del modelo de la planta se tiene

$$\eta = \frac{de_{ref}}{dt} + \tau_o^{-1} e_{ref} + k_p(\overline{X_{2w}} - X_{2w}) \tag{4.93}$$

Entonces, $\eta(t)$ puede reconstruirse usando mediciónes de $e_{ref}(t)$, $X_{2w}(t)$, y un derivador para evaluar $\dot{e}_{ref}$. La operación de derivación es una operación muy inestable, entonces un observador de orden reducido se propone como un estimador de $\eta(t)$.

La dinámica de reconstrucción del término que agrupa los errores de modelado, $\eta(t)$ está dado por

$$\frac{d\hat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta - \hat{\eta}) \tag{4.94}$$

sustituyendo (4.93)

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}\left[\frac{de_{ref}}{dt} + k_p(\overline{X_{2w}} - X_{2w}) + \tau_o^{-1}e_{ref} - \widehat{\eta}\right] \tag{4.95}$$

al introducir la variable $W = \tau_e\widehat{\eta} - e_{ref}$, el controlador robusto está dado por las ecuaciones

$$\dot{W} = k_p(\overline{X_{2w}} - X_{2w}) + \tau_o^{-1}e_{ref} - \widehat{\eta} \tag{4.96}$$

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(W + e_{ref}) \tag{4.97}$$

$$X_{2w} = \overline{X_{2w}} + \frac{1}{k_p}\left[(\tau_o^{-1} - \tau_c^{-1})e_{ref} - \widehat{\eta}\right] \tag{4.98}$$

La entrada de control real está dada por $X_{2wr} = Sat(X_{2w})$. La equivalencia del controlador robusto con el controlador clásico PI se presenta en la siguiente sección.

Equivalencia con el controlador clásico PI

Aplicando el retroalimentado dado por la ecuación (4.98) en el filtro de estimación (4.96) conduce al comportamiento dado por $\dot{W} = \tau_c^{-1}y$. Introduciendo la variable $\tau_c W = \nu$ las ecuaciones (4.96) a (4.98) se pueden escribir como

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(\tau_c^{-1}\nu + e_{ref}) \tag{4.99}$$

$$\overline{X_{2w}} - X_{2w} = \frac{1}{k_p}\left[(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_e\tau_c)^{-1}\upsilon\right] \tag{4.100}$$

$$\dot{\upsilon} = e_{ref} \tag{4.101}$$

el cual es un controlador clásico PI, con ganancias proporcional e integral dadas por:

$$K_p = \frac{1}{k_p}(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1}) \tag{4.102}$$

$$K_i = \frac{K_p}{\tau_i} = \frac{1}{k_p}(\tau_c \tau_e)^{-1} \tag{4.103}$$

donde el tiempo integral está dado por

$$\tau_i = (\tau_c \tau_e)(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1}) \tag{4.104}$$

El controlador descrito por las ecuaciones (4.99) a (4.101) tiene la estructura de un controlador clásico PI, con ganancias integral y proporcional en términos de las constantes de tiempo de estimación y a lazo cerrado. Al fijar un parámetro de control (τ_c, τ_e) sólo resta un parámetro ajustable, el cual se puede encontrar fácilmente mediante simulaciónes numéricas.

4.3.3 Controlador Robusto PI basado en el balance de energía.

Al tomar la ecuación dinámica de la temperatura y denotando con y la temperatura a la salida del reactor y con w a la concentración del reactivo A en la misma posición se obtiene

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{\partial y}{\partial \xi}\Big|_{\xi=l} + (1-f)Da(1-w)\exp\left\{\gamma \frac{\beta y}{1+\beta y}\right\} + (1-f)\delta X_{2w} - (1-f)\delta y \tag{4.105}$$

Debido a que el término convectivo, la expresión cinética y la entalpía de reacción son desconocidas y/o inciertas un modelo entrada-salida aumentado con un término que agrupa las incertidumbres del modelo está dado por

$$\frac{dy}{dt} = -(1-f)\delta y + (1-f)\delta X_{2w} + \eta \tag{4.106}$$

con η definido por,

$$\eta = -\frac{\partial y}{\partial \xi} + (1-f)Da(1-w)\exp\left\{\gamma \frac{\beta y}{1+\beta y}\right\} \tag{4.107}$$

al introducir $e_{ref} = y_{ref} - y$,

$$\frac{de_{ref}}{dt} = -(1-f)\delta e_{ref} - (1-f)\delta X_{2w} + \eta \tag{4.108}$$

un controlador retroalimentado para el sistema dado por (4.108) es

$$X_{2w} = [(1-f)\delta]^{-1}\left\{(\tau_c^{-1} - (1-f)\delta)e_{ref} + \eta\right\} \tag{4.109}$$

Proponiendo el siguiente observador de orden reducido para reconstruir el término que agrupa los errores de modelado

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta - \widehat{\eta}) \tag{4.110}$$

de (4.108) se puede observar que

$$\eta = \frac{de_{ref}}{dt} + (1-f)\delta X_{2w} + (1-f)\delta e_{ref} \tag{4.111}$$

la ecuación (4.110) se puede escribir como,

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}\left\{\frac{de_{ref}}{dt} + (1-f)\delta X_{2w} + (1-f)\delta e_{ref} - \widehat{\eta}\right\} \tag{4.112}$$

al introducir la variable $W = \tau_e\widehat{\eta} - e_{ref}$,

$$\dot{W} = (1-f)\delta X_{2w} + (1-f)\delta e_{ref} - \widehat{\eta} \tag{4.113}$$

$$X_{2w} = [(1-f)\delta]^{-1}\left\{(\tau_c^{-1} - (1-f)\delta)e_{ref} + \widehat{\eta}\right\} \tag{4.114}$$

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(W + e_{ref}) \tag{4.115}$$

Las ecuaciones (4.113) a (4.115), constituyen el diseño del controlador robusto basado en el balance de masa de substrato.

Equivalencia con el controlador clásico PI

Aplicando el retroalimentado (4.114) en el filtro de estimación (4.113), conduce a la dinámica $\dot{W} = \tau_c^{-1}e_{ref}$. Introduciendo la variable $\tau_c W = \nu$ las ecuaciones (4.113) a (4.115) se pueden escribir como

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(\tau_c^{-1}\nu + e_{ref}) \tag{4.116}$$

$$X_{2w} = [(1-f)\delta]^{-1}\left\{(\tau_c^{-1} - (1-f)\delta + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_c\tau_e)^{-1}\nu\right\} \tag{4.117}$$

$$\dot{\nu} = e_{ref} \tag{4.118}$$

el cual es un controlador clásico PI, con ganancias proporcional e integral dadas por:

$$K_p = [(1-f)\delta]^{-1}(\tau_c^{-1} - (1-f)\delta + \tau_e^{-1}) \tag{4.119}$$

$$K_i = \frac{K_p}{\tau_i} = [(1-f)\delta]^{-1}(\tau_c\tau_e)^{-1} \tag{4.120}$$

donde el tiempo integral esta dado por,

$$\tau_i = (\tau_c\tau_e)(\tau_c^{-1} - (1-f)\delta + \tau_e^{-1}) \tag{4.121}$$

El controlador basado en el balance de energía tiene la estructura de un controlador clásico PI, con ganancias integral y proporcional dadas en términos de las constantes de tiempo de estimación y a lazo cerrado. Al fijar un parámetro de control ($\tau_c\tau_e$) sólo resta un parámetro ajustable, el cual se puede encontrar fácilmente mediante simulaciones numéricas.

4.4 Función de transferencia y *anti-reset windup* del controlador PI

Como $e_{ref} = y_{ref} - y$, $u = \overline{F} - F$, $u_r = \overline{F} - F_r$, para el reactor biológico tubular , y $u = \overline{X_{2w}} - X_{2w}$, $u_r = \overline{X_{2w}} - X_{2wr}$, para el reactor tubular con dispersión axial y el reactor tubular con reciclo, el controlador dado por las ecuaciones (4.15) a (4.17) para el reactor biológico tubular, (4.56) a (4.58) para el reactor tubular con dispersión axial, y (4.96) a (4.98) para el reactor tubular con reciclo, en el dominio de Laplace toma la forma:

$$U_r(s) = \frac{\overline{\tau_o}}{\overline{k_p}} \left\{ \frac{\left(\tau_c^{-1} + \tau_e^{-1} - \overline{\tau_o^{-1}}\right) s + (\tau_c \tau_e)^{-1}}{(s + \tau_e^{-1})} \right\} E_{ref}(s) + \frac{\tau_e^{-1}}{(s + \tau_e^{-1})} U(s) \tag{4.122}$$

Si la entrada de control no está saturada, $U_r(s) = U(s)$, la función de transferencia del controlador se puede escribir como

$$U_r(s) = \frac{\overline{\tau_o}}{\overline{k_p}} \left\{ \frac{\left(\tau_c^{-1} + \tau_e^{-1} - \overline{\tau_o^{-1}}\right) s + (\tau_c \tau_e)^{-1}}{s} \right\} E_{ref}(s) \tag{4.123}$$

La equivalencia del controlador robusto con el controlador clásico PI se puede apreciar fácilmente, con ganancias proporcional e integral dadas por

$$K_p = \frac{1}{k_p'} (\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1}) \tag{4.124}$$

$$K_i = \frac{K_p}{\tau_i} = \frac{1}{k_p'} (\tau_c \tau_e)^{-1} \tag{4.125}$$

donde el tiempo integral está dado por

$$\tau_i = (\tau_c \tau_e)(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1}) \tag{4.126}$$

Además, en este caso el controlador robustò PI basado en la aproximación a un modelo lineal de primer orden posee una estructura natural *anti-reset windup* (ARW), la cual se obtiene debido a que el controlador tiene conocimiento de los límites de entrada de control físicamente posibles (saturación de la entrada de control).

4.5 Control Robusto basado en un modelo de primer orden más tiempo muerto

En esta sección se deriva un esquema de control robusto considerando el efecto del retardo en la entrada de control. Para el reactor biológico este retardo se debe a el tiempo necesario para obtener la medición del substrato fuera de línea debido a la ausencia de sensores apropiados.

Para el reactor tubular con dispersion axial y el reactor tubular con reciclo, este tiempo de retardo es por lo general despreciable debido a la gran precisión y al tiempo de respuesta de los sistemas de medición de temperatura. Las consideraciones adicionales respecto a la derivación del controlador robusto basado en un modelo lineal de primer orden son:

1. *El modelo de la planta se ajusta a un comportamiento de primer orden lineal más tiempo muerto*

2. *La aproximación de Padé de primer orden para el tiempo muerto se usa para representar el término* $\exp(-\tau_d s)$.

La aproximación al modelo de primero orden lineal más tiempo muerto en el dominio de Laplace es

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_o s + 1} \exp(-\tau_d s) \tag{4.127}$$

donde k_p y τ_o son la ganancia en estado estaciónario y la constante de tiempo a lazo abierto del proceso respectivamente, τ_d es el tiempo de retardo en la entrada de control, y u es la entrada de control. La aproximación de Padé de primer orden para el tiempo muerto está dada por

$$\exp(-\tau_d s) \simeq \frac{1 - (0.5\tau_d)s}{1 + (0.5\tau_d)s} \tag{4.128}$$

la ecuación (4.127), se puede escribir como

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_o s + 1} \left(\frac{1 - (0.5\tau_d)s}{1 + (0.5\tau_d)s} \right) \tag{4.129}$$

re-ordenado

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{\beta}{s^2 + \alpha_1 s + \alpha_0} (1 - \tau_z s) \tag{4.130}$$

donde $\tau_z = 0.5\tau_d$ es la constante de tiempo del cero, $\alpha_1 = (\tau_o + \tau_z)/(\tau_o \tau_z)$, $\alpha_0 = (\tau_o \tau_z)^{-1}$, y $\beta = k_p/(\tau_o \tau_z)$. Se puede ver fácilmente que la función de transferencia está compuesta de dos términos, el primero es un modelo lineal de segundo orden causal, y el segundo término está dado por $1 - \tau_z s$, el cual es no causal. Con el fin de que el sistema dado por la ecuación (4.130).

sea físicamente realizable (*i.e.*, causalidad) se implementa un filtro de primer orden de forma que se puede escribir la ecuación (4.130) como

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{\beta}{s^2 + \alpha_1 s + \alpha_0}\left(\frac{1 - \tau_z s}{1 + \tau_f s}\right) \tag{4.131}$$

En el dominio del tiempo, se propone un modelo de segundo orden que corresponde a la función causal de transferencia de segundo orden, y el término restante se considera como la principal causa de incertidumbre.

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \alpha_1 \frac{dy}{dt} + \alpha_0 y = \beta u + \eta \tag{4.132}$$

al introducir, $e_{ref} = y_{ref} - y$, se obtiene

$$\frac{d^2e_{ref}}{dt^2} + \alpha_1 \frac{de_{ref}}{dt} + \alpha_0 e_{ref} = -\beta u + \eta \tag{4.133}$$

y $\alpha_0 y_{ref}$ se incluye en η como una perturbación constante. La ecuación (4.133) puede escribirse como

$$\frac{de_{ref}}{dt} = q \tag{4.134}$$

$$\dot{q} = -\alpha_1 q - \alpha_0 e_{ref} - \beta u + \eta \tag{4.135}$$

Un controlador retroalimentado para la planta dada por las ecuaciones (4.135) y (4.134), está dado por

$$u = \beta^{-1}\left[(k_1 - \alpha_1)q + (k_0 - \alpha_0)e_{ref} + \eta\right] \tag{4.136}$$

bajo está ley de control retroalimentada, la dinámica resultante es

$$\frac{d^2e_{ref}}{dt^2} + k_1 \frac{de_{ref}}{dt} + k_0 e_{ref} = 0 \tag{4.137}$$

Del modelo de segundo orden lineal general (*i.e.*, $\tau^2 \ddot{e} + 2\varepsilon\tau \dot{e} + e = 0$), las constantes k_1, y k_0 están dadas por

$$k_1 = \frac{2\varepsilon}{\tau_c}, \quad k_0 = \tau_c{}^{-2} \tag{4.138}$$

De la dinámica natural de la planta se puede ver que los parámetros del modelo de segundo orden están dados por

$$\tau_c = \sqrt{\tau_o \tau_z}, \quad \varepsilon = \frac{\tau_o + \tau_z}{2\sqrt{\tau_o \tau_z}} \tag{4.139}$$

La ley de control dada por (4.136) incluye el término η que agrupa los errores de modelado de la planta. Para poder implementar la ley retroalimentada se propone un observador de orden reducido para reconstruir a η.

La dinámica de reconstrucción de η es

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta - \widehat{\eta}) \tag{4.140}$$

donde η está dada por

$$\eta = \dot{q} + \alpha_1 q + \alpha_0 e_{ref} + \beta u \tag{4.141}$$

sustituyendo en (4.140),

$$\frac{d\widehat{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}(\dot{q} + \alpha_1 q + \alpha_0 e_{ref} + \beta u - \widehat{\eta}) \tag{4.142}$$

al introducir $W = \tau_e \widehat{\eta} - q$, conduce a

$$\dot{W} = \alpha_1 q + \alpha_0 e_{ref} + \beta u - \widehat{\eta} \tag{4.143}$$

Se puede ver que el filtro de estimación está en función del error de regulación y de la entrada q, la cual se obtiene como una versión filtrada de la salida natural de la planta y

$$q = -\tau_f^{-1}(y_{ref} - y) \tag{4.144}$$

donde τ_f es la constante de tiempo de filtrado. El controlador robusto basado en el modelo de primer orden más tiempo muerto está dado por:

$$u = \beta^{-1}\left[(k_1 - \alpha_1)q + (k_0 - \alpha_0)e_{ref} + \widehat{\eta}\right] \tag{4.145}$$

$$\dot{W} = \alpha_1 q + \alpha_0 e_{ref} + \beta u - \widehat{\eta} \tag{4.146}$$

$$\frac{de_{ref}}{dt} = q \tag{4.147}$$

$$q = -\tau_f^{-1}(y_{ref} - y) \tag{4.148}$$

La equivalencia con el controlador PID clásico se obtiene en la siguiente sección.

4.5.1 Equivalencia con el controlador clásico PID

Aplicando el retroalimentado dado por la ecuación (4.145) en el filtro de estimación (4.146) conduce a la dinámica del filtro dada por $\dot{W} = k_1 q + k_0 y$, como $y = e_{ref}$, y $q = \dot{e}_{ref}$ se puede re-escribir la ecuación $\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(W + q)$ como

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}\left(\int_0^t k_1 \dot{e}_{ref}(\xi)d\xi + \int_0^t k_0 e_{ref}(\xi)d\xi + e_{ref}\right) \tag{4.149}$$

o bien

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1} k_1 \dot{e}_{ref}(t) + \tau_e^{-1}\int_0^t k_0 e_{ref}(\xi)d\xi + \tau_e^{-1} e_{ref} \tag{4.150}$$

al sustituir (4.150) en (4.145) conduce a

$$u = \beta^{-1}\left[(\alpha_1 - k_1 - \tau_e^{-1})\dot{e}_{ref} + (\alpha_0 - k_0 - \tau_e^{-1}k_1)e_{ref} - \tau_e^{-1}\int_0^t k_0 e_{ref}(\xi)d\xi\right] \tag{4.151}$$

el cual es un controlador clásico PID, con ganancias derivativa, integral y proporcional dadas

por:

$$K_D = \beta^{-1}(\alpha_1 - k_1 - \tau_e^{-1}) \tag{4.152}$$

$$K_I = \beta^{-1}(-k_0\tau_e^{-1}) \tag{4.153}$$

$$K_P = \beta^{-1}(\alpha_0 - k_0 - \tau_e^{-1}k_1) \tag{4.154}$$

debido a que $k_1 = \frac{2\varepsilon}{\tau_c}$, $k_0 = {\tau_c}^{-2}$, $\alpha_1 = (\tau_o + \tau_z)/(\tau_o\tau_z)$, $\alpha_0 = (\tau_o\tau_z)^{-1}$ y $\beta = k_p/(\tau_o\tau_z)$ entonces

$$K_p = \frac{\tau_c^3\tau_e - \tau_o\tau_z\tau_c\tau_e - 2\varepsilon\tau_o\tau_z\tau_c^2}{k_p\tau_c^3\tau_e} \tag{4.155}$$

$$K_D = \frac{(\tau_o + \tau_z)\tau_c\tau_e - \tau_o\tau_z\tau_c - 2\varepsilon\tau_o\tau_z\tau_e}{k_p\tau_c\tau_e} \tag{4.156}$$

$$K_I = -\frac{\tau_o\tau_z}{k_p\tau_c^2\tau_e} \tag{4.157}$$

El controlador descrito por las ecuaciones, (4.145) a (4.148) tiene la estructura de un controlador clásico PID, con ganancias proporcional, integral y derivativa en términos de un coeficiente de amortiguamiento y las constantes de tiempo de estimación de incertidumbres y a lazo cerrado. Al fijar la constante de tiempo a lazo cerrado, y especificar el coeficiente de amortiguamiento sólo resta la constante de tiempo de estimación de incertidumbres que se usa para asegurar la estabilidad a lazo cerrado.

4.6 Función de transferencia y *anti-reset windup* del controlador PID

Haciendo uso de $e_{ref} = y_{ref} - y$, de $u = \overline{F} - F$, $u_r = \overline{F} - F_r$, para el reactor biológico tubular . y de $u = \overline{X_{2w}} - X_{2w}$, $u_r = \overline{X_{2w}} - X_{2wr}$ para el reactor tubular con dispersión axial y el reactor

tubular con reciclo y además como $q = \dot{e}$ el controlador dado por las ecuaciones (4.145) a (4.147) en el dominio de Laplace se puede escribir como:

$$U_r(s) = \mathcal{J}^{-1}\left\{\frac{\left(\alpha_1 - k_1 - \tau_e^{-1}\right)s^2 + (\alpha_0 - k_0 - k_1\tau_e^{-1})s + (-k_0\tau_e^{-1})}{(s+\tau_e^{-1})}\right\}E_{ref}(s) + \frac{\tau_e^{-1}}{(s+\tau_e^{-1})}U(s) \tag{4.158}$$

Si la entrada de control no está saturada, $U_r(s) = U(s)$, la función de transferencia del controlador se reduce a

$$U_r(s) = \left[\mathcal{J}^{-1}(\alpha_0 - k_0 - k_1\tau_e^{-1}) + \mathcal{J}^{-1}\left(\alpha_1 - k_1 - \tau_e^{-1}\right)s + \mathcal{J}^{-1}\frac{(-k_0\tau_e^{-1})}{s}\right]E_{ref}(s) \tag{4.159}$$

No es difícil ver la equivalencia del controlador robusto con el controlador clásico PID, con ganancias integral, derivativa y proporcional dadas por (4.157), (4.156), y (4.155) respectivamente.

Además, en nuestro caso el controlador posee una estructura natural *anti-reset windup* (ARW), la cual se obtiene debido a que el controlador tiene conocimiento de los límites de entrada de control físicamente posibles (saturación de la entrada de control). Es decir, la entrada de control real conduce a la planta correctamente aún con la presencia de saturaciones.

4.7 Resumen de los controladores derivados

En este capitulo se diseñaron esquemas de control para un reactor biológico de cama fija, un reactor tubular con dispersión axial y un reactor tubular con reciclo. La Tabla muestra las leyes de control ideal (CI), robusta (CR), PI con base en la aproximación al modelo lineal (PI^1), y PI con base en los balances de masa o energía (PI^2).

donde $\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(\tau_c^{-1}\nu + e_{ref})$, $\dot{\upsilon} = e_{ref}$, con $e_{ref} = S - S_{ref}$ para el biorreactor, $e_{ref} = X_2 - X_{2ref}$ para el reactor con dispersión axial y el reactor con reciclo y los términos β, α_0, α_1, k_0, k_1, se definen como en la sección anterior.

CI	$F = -A^{-1}\left(\frac{\partial y}{\partial Z}\mid_{z=1}\right)$	$k_1 w \frac{\kappa_{max} y}{k_c w + y} + \tau_c^{-1}(y_{ref} - y)$
CR	$F = \overline{F} + \frac{1}{k_p}\left[(\tau_o^{-1} - \tau_c^{-1})e_{ref} - \widehat{\eta}\right]$	
PI^1	$\overline{F} - F = \frac{1}{k_p}\left[(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_e\tau_c)^{-1}\upsilon\right]$	
PI^2	$F = \frac{1}{\beta}\left\{(\tau_c^{-1} + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_c\tau_e)^{-1}\nu\right\}$	
PID	$F = \beta^{-1}$	$(\alpha_1 - k_1 - \tau_e^{-1})\,\dot{e}_{ref} + (\alpha_0 - k_0 - \tau_e^{-1}k_1)e_{ref} - \tau_e^{-1}\int_0^t k_0 e_{ref}(\xi)d\xi$

Tabla 4.1: Reactor tubular biológico. resumen de los controladores

CI	$X_{2w} = \frac{1}{\beta}$	$\tau_c^{-1}(y_{ref} - y) - \frac{1}{Pe_2 Le}\frac{\partial^2 y}{\partial Z^2}\mid_{z=1} + \frac{1}{Le}\frac{\partial y}{\partial Z}\mid_{z=1} - \frac{BDa}{Le}(1-w)\exp\left\{\frac{y}{1+y/\gamma}\right\} + \frac{\beta}{Le}y$
CR	$X_{2w} = \overline{X_{2w}} + \frac{1}{k_p}\left[(\tau_o^{-1} - \tau_c^{-1})e_{ref} - \widehat{\eta}\right]$	
PI^1	$\overline{X_{2w}} - X_{2w} = \frac{1}{k_p}\left[(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_e\tau_c)^{-1}\upsilon\right]$	
PI^2	$X_{2w} = \beta_e^{-1}\left\{(\tau_c^{-1} - \beta_e + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_c\tau_e)^{-1}\nu\right\}$	
PID	$X_{2w} = \beta^{-1}$	$(\alpha_1 - k_1 - \tau_e^{-1})\,\dot{e}_{ref} + (\alpha_0 - k_0 - \tau_e^{-1}k_1)e_{ref} - \tau_e^{-1}\int_0^t k_0 e_{ref}(\xi)d\xi$

Tabla 4.2: Reactor tubular con dispersión axial, resumen de los controladores

CI	$X_{2w} = \frac{1}{(1-f)\delta}$	$\tau_c^{-1}(y_{ref} - y) + \frac{\partial y}{\partial \xi}\mid_{z=l} - (1-f)Da(1-w)\exp\left\{\gamma\frac{\beta y}{1+\beta y}\right\} + \delta(1-f)y$
CR	$X_{2w} = \overline{X_{2w}} + \frac{1}{k_p}\left[(\tau_o^{-1} - \tau_c^{-1})e_{ref} - \widehat{\eta}\right]$	
PI^1	$\overline{X_{2w}} - X_{2w} = \frac{1}{k_p}\left[(\tau_c^{-1} - \tau_o^{-1} + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_e\tau_c)^{-1}\upsilon\right]$	
PI^2	$X_{2w} = [(1-f)\delta]^{-1}\left\{(\tau_c^{-1} - (1-f)\delta + \tau_e^{-1})e_{ref} + (\tau_c\tau_e)^{-1}\nu\right\}$	

Tabla 4.3: Reactor tubular con reciclo, resumen de los controladores

4.8 Notas y Referencias

El análisis de estabilidad del controlador robusto PI ha sido previamente reportado por Alvarez-Ramírez *et al.*, [69], y se presenta en el Apéndice B. La derivación general de los controladores robustos PI se puede encontrar en la misma referencia. Algunas aplicaciones de los esquemas de control tipo PI y tipo PID para sistemas descritos por ODE y por ecuaciones diferenciales con retardo están reportados en las referencias [70]-[73].

Capítulo 5

Simulaciones numéricas

> The theoretical side of chemical engineering is well in hand or will be shortly. Unfortunately the experimental and practical implementation of these results lags. Universities are not equipped to operate chemical reactors on a scale necessary to validate models appropriate to the industrial scene. The chemical and petroleum companies are loath to present proprietary results and for a good reasons. This is regrettable, and one cannot fail to notice that there is not one industrial paper presented in this volume.
>
> *Amundson (1984)*

En este capítulo los modelos de los controladores derivados para el reactor tubular biológico y el reactor tubular con dispersión axial se prueban a través de simulaciones numéricas. Se examina el efecto de perturbaciones, ruido de medición y del error de modelamiento en el desempeño del controlador.

5.1 Reactor Tubular Biológico de Cama Fija

El objetivo de control es regular la concentración de substrato a la salida del reactor manipulando la velocidad de flujo volumétrico.

5.1.1 Control de la concentración de substrato

Control Ideal

La ley de control ideal esta dada por

$$F = -A^{-1}\left(\frac{S_{z=1} - S_{z-1}}{\Delta Z}\right)\left[k_1 w \frac{\kappa_{\max} S_{z=1}}{k_c X_{z=1} + S_{z=1}} + \tau_c^{-1}(S_{ref} - S_{z=1})\right] \tag{5.1}$$

donde $z = 1$ denota la posición a la salida del reactor. Para realizar las simulaciones numéricas con la ley de control ideal, solo es necesario modificar el algoritmo de simulación a lazo abierto con la ecuación (5.1) y con la función de saturación definida en la Sección 4.1.1. Los parámetros del sistema son los reportados en la Tabla 3.1.

Los resultados de la simulación al implementar la ley de control ideal se presentan en la Figura 5.1. El lazo de control se activa después de eliminar el efecto inicial transitorio de 15 horas, y con un cambio en el *Set Point* (de 0.3 a 0.35 gDQOl^{-1}) en el tiempo de 200 horas. La simulación con el lazo cerrado se realiza para tres valores de la constante de tiempo a lazo cerrado. Puede observarse que para valores muy pequeños de τ_c, el comportamiento a lazo cerrado presenta oscilaciones, y para valores altos de τ_c se presenta una respuesta lenta. Si se elige la constante a lazo cerrado del orden de la constante de tiempo a lazo abierto se obtiene un desempeño aceptable.

Control Robusto PI

Las ecuaciones del modelo del algoritmo de control robusto están dadas por

$$W_{t+\Delta t} = W_t + \Delta t\left[k_p'(\overline{F} - F) + \tau_o^{-1}(S_{ref} - S_{z=1}) - \widehat{\eta}\right] \tag{5.2}$$

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(W_{t+\Delta t} + (S_{ref} - S_{z=1})) \tag{5.3}$$

$$F = \overline{F} + \frac{1}{k_p'}\left[(\tau_o^{-1} - \tau_c^{-1})(S_{ref} - S_{z=1}) - \widehat{\eta}\right] \tag{5.4}$$

donde se ha usado la aproximación de Euler para la ODE del filtro de estimación y un Δt de 0.5.

Para llevar a cabo los experimentos de simulación a lazo cerrado, el algoritmo de simulación a lazo abierto se modifica con una subrutina adicional, que se utiliza para integrar la ODE del filtro y calcular la entrada de control. Para simular el ruido de medición se utiliza un generador de números aleatorios con una amplitud de ruido del 5% al valor de salida del substrato por medio de la Subrutina Ran0 del *Numerical Recipes*.

Elección de las constantes τ_c, y τ_e El desempeño del esquema de control robusto basado en la aproximación a un modelo lineal de primer orden se muestra en la Figura 5.2. La figura muestra simulaciones para tres valores de la constante de tiempo de estimación de incertidumbres. Para el valor de τ_e más pequeño se presentan oscilaciones que de hecho conducen a la inestabilidad del sistema a lazo cerrado. Valores de τ_e del orden de la constante de tiempo a lazo abierto presentan un buen desempeño. De las simulaciones numéricas es fácil ver que las constantes τ_c, y τ_e se utilizan para designar un comportamiento a lazo cerrado deseado, y para asegurar la estabilidad a lazo cerrado. Por otra parte, al examinar las ganancias integral y proporcional (K_P, K_I) cuando τ_c y τ_e tienden a cero K_P y K_I tienden al infinito, conduciendo a una elevada sensibilidad del sistema a lazo cerrado. El comportamiento oscilatorio indica que la inestabilidad del sistema a lazo cerrado para valores pequeños de τ_e se debe a que un par de eigenvalores complejos cruzan el eje imaginario hacia el semiplano derecho complejo.

Rechazo de perturbaciones y cambio de *Set Point* El efecto de un cambio en la concentración de substrato de entrada S_{in} de 20 % y un cambio en el *Set Point* se presenta en la Figura 5.3 para τ_c = 5.0 h, y τ_e = 4.5 h. El cambio en el *Set Point* y el rechazo de la perturbación se logra sin grandes esfuerzos de control.

La Figura 5.4 presenta simulaciones numéricas de las ecuaciones del esquema de control robusto basado en el balance de masa sobre el substrato para tres valores de τ_e conduciendo a resultados similares al esquema de control basado en el modelo lineal. El cambio en el *Set Point* y una perturbación de 20 % en la concentración del substrato de entrada se presenta en la Figura 5.5. El desempeño del control presenta un sobredisparo inicial elevado en la acción de control.

Estimación de incertidumbres En la Figura 5.6 se muestra la reconstrucción del error de modelamiento real para diferentes valores del tiempo de estimación τ_e. Para valores pequeños de τ_e la reconstrucción del error de modelamiento es más rápida, sin embargo presenta mayor oscilación, lo cual conduce al deterioro del esquema de control.

Efecto de la velocidad de muestreo y del ruido de medición Típicamenta, la medición del sustrato involucra muestreo seguido de análisis en laboratorio, lo cual conduce a un retardo en la disponibilidad de información actualizada para el controlador. En general, el retardo de medición deteriora el desempeño del control.

La Figura 5.7 muestra el efecto de la velocidad de medición sobre el desempeño del esquema de control para tres valores del tiempo de muestreo τ_m. Un retardo en la medición mayor a la constante de tiempo de estimación conduce a oscilaciones e inestabilidades en la variable controlada. Debido a que la derivación del controlador robusto se basó en una aproximación a un modelo de primer orden sin considerar el tiempo muerto por el retardo en la entrada de control, al presentarse el retardo conduce a un gran efecto de dinámica no modelada. El efecto de perturbaciones externas persistentes, tales como el ruido de medición no permiten una regulación perfecta. Sin embargo, el efecto del ruido de medición (Figura 5.8) sobre el sistema de control no conduce a un deterioro apreciable.

Control Robusto PID

La derivación del esquema de control robusto basado en un modelo lineal de primer orden mas tiempo muerto se realiza con el propósito de compensar el retardo en la entrada de control debida en el caso del reactor biológico a velocidades de medición lentas del substrato.

La implementación del esquema de control robusto PID mediante simulaciones numéricas, requiere resolver las siguientes ecuaciones

$$F = \beta^{-1}\left[(k_1 - \alpha_1)q + (k_0 - \alpha_0)e_{ref} + \widehat{\eta}\right] \tag{5.5}$$

$$\dot{W} = \alpha_1 q + \alpha_0 e_{ref} + \beta u - \widehat{\eta} \tag{5.6}$$

$$\dot{e}_{ref} = q \tag{5.7}$$

$$q = -\tau_f^{-1}(y_{ref} - y) \tag{5.8}$$

donde $k_1 = \frac{2\varepsilon}{\tau_c}$, $k_0 = \tau_c{}^{-2}$, $\alpha_1 = (\tau_o + \tau_z)/(\tau_o\tau_z)$, $\alpha_0 = (\tau_o\tau_z)^{-1}$, y $e_{ref} = S_{ref} - S_{z=1}$, y $\beta = k_p/(\tau_o\tau_z)$. En este caso, el algoritmo a lazo abierto se modifica con una subrutina que integra la ODE del filtro de estimación y la ODE del error de regulación con el método de integración de Runge-Kutta cuarto orden y calcula la entrada de control F. La Figura 5.9 presenta el controlador robusto PID para tres valores del tiempo de medición τ_m. El controlador PID permite controlar la concentración de substrato para valores de hasta 4.5 h de retrado en la entrada de control. Además, en la figura se observa que el rechazo de la perturbación en el substrato de entrada y el cambio de *Set Point* se logra sin grandes esfuerzos de control. Comparando el esquema de control PI y el PID para retardos en la entrada de control se puede ver fácilmente que el controlador PID presenta un mayor margen de estabilidad que el controlador PI. Esto se debe a que el controlador PI con retardo en la entrada de control presenta un gran efecto de dinámica no modelada al despreciar el tiempo muerto en el canal de entrada de control. Por otra parte, la implementación de la acción derivativa del controlador PID rara vez se usa en los sistemas de control con grandes cantidades de interferencia o ruido. La Figura 5.10 ilustra el efecto del ruido de medición sobre el desempeño del controlador PID. Debido a la presencia del ruido de medición la regulación perfecta no puede obtenerse, sin embargo no se deteriora apreciablemente el desempeño del esquema de control.

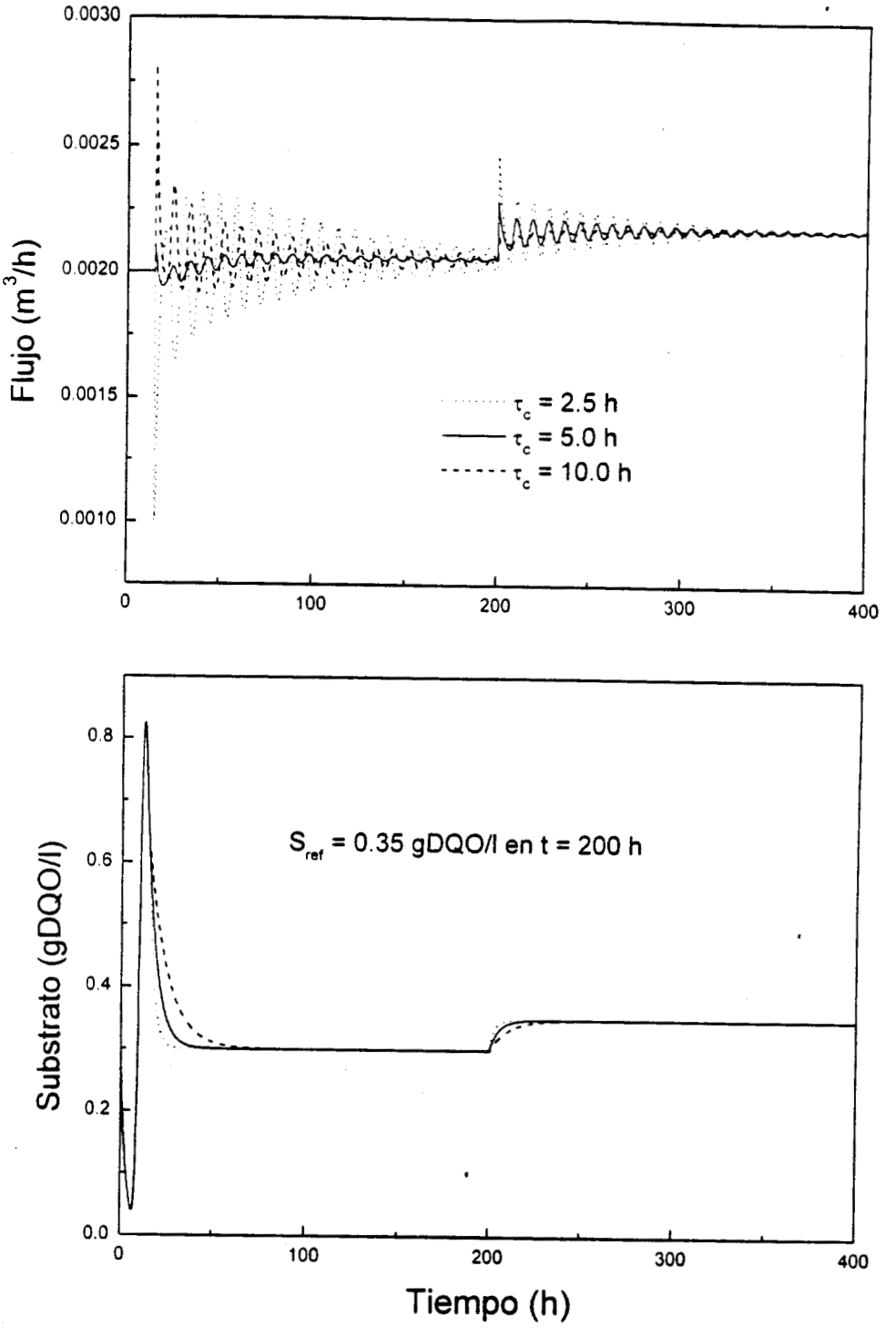


Figura 5-1: Reactor tubular biológico, ley de control ideal. Efecto del tiempo a lazo cerrado.

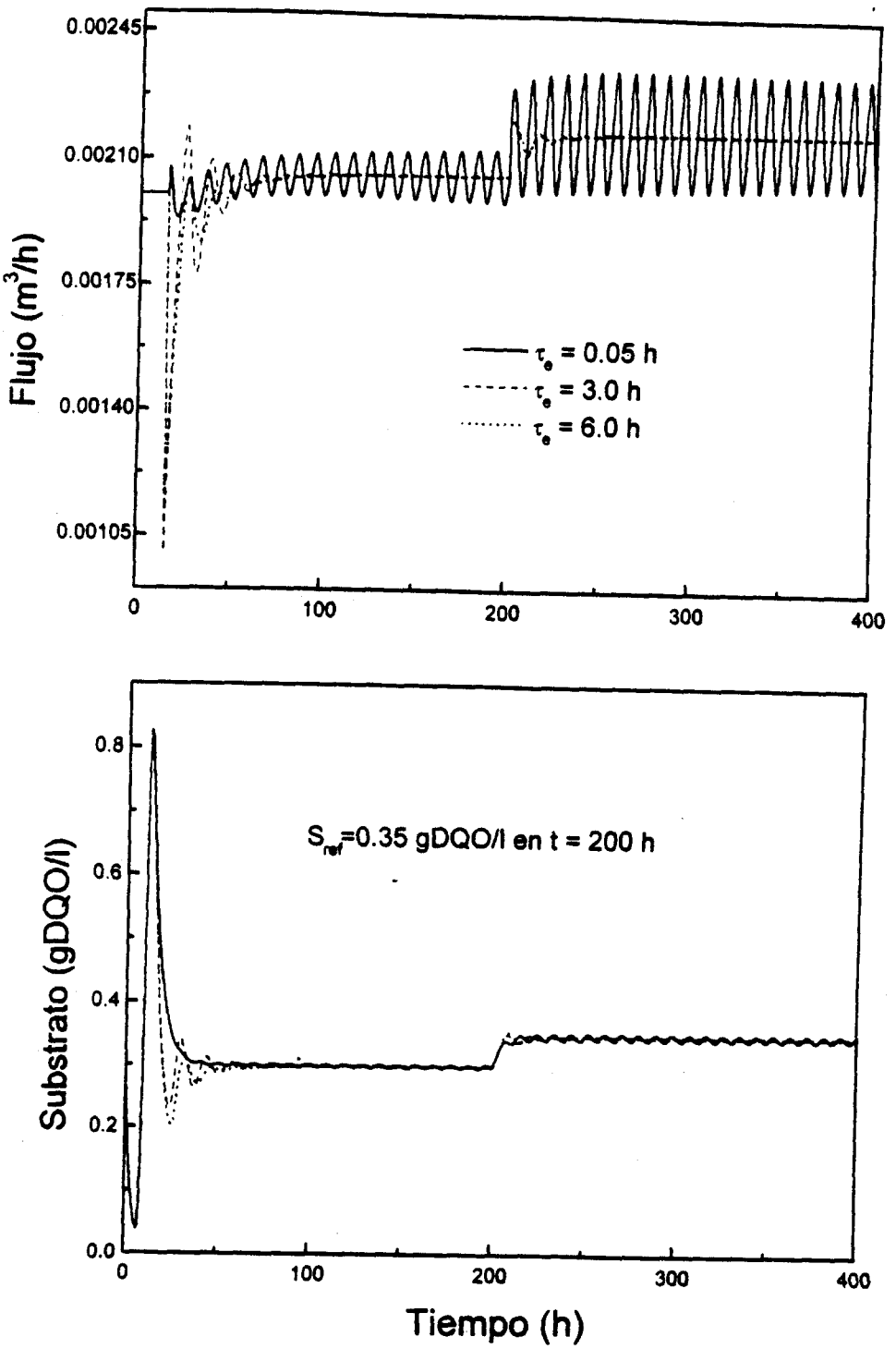


Figura 5-2: Reactor tubular biológico, control robusto basado en el modelo lineal. Efecto del tiempo de estimación.

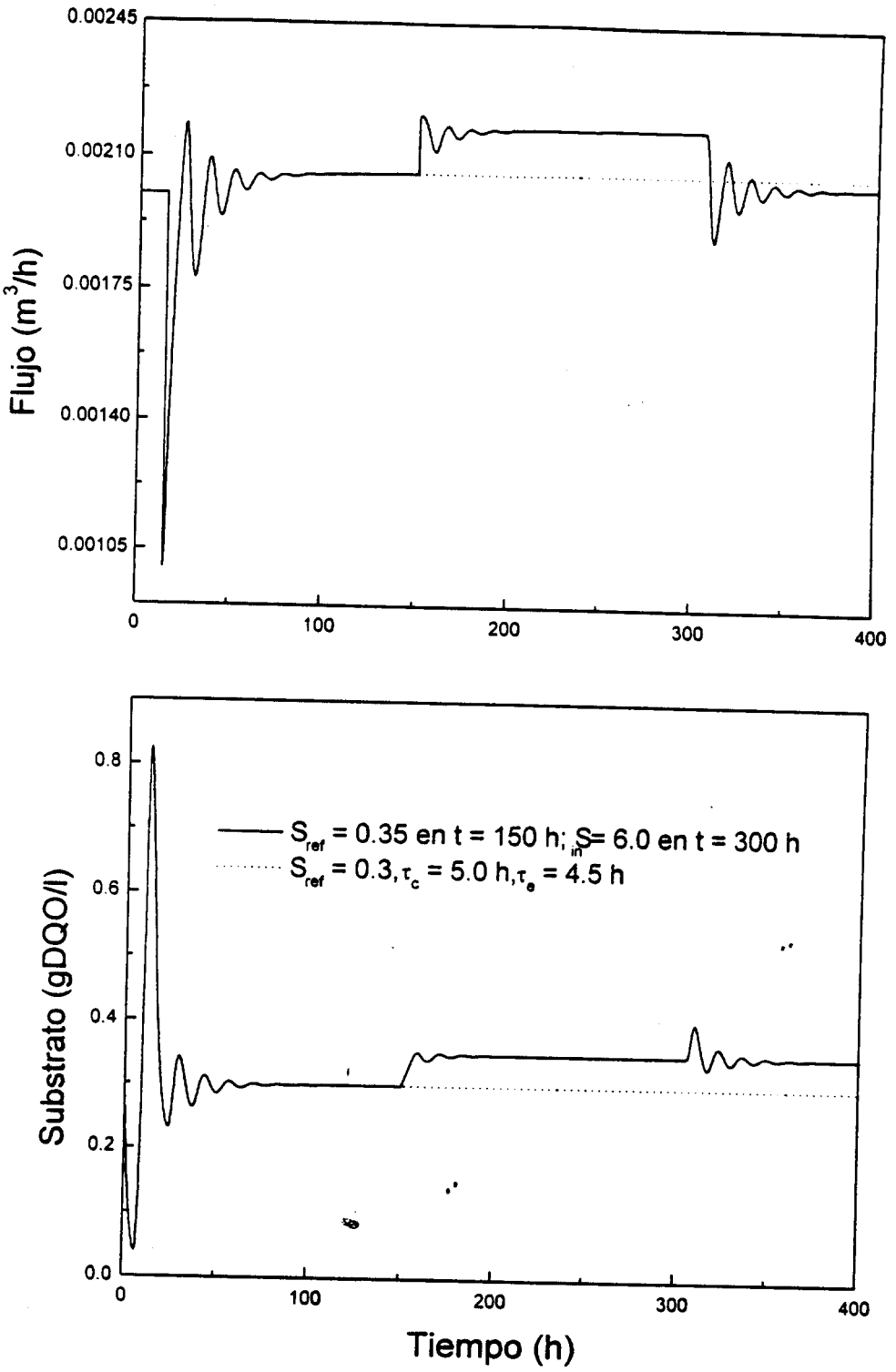


Figura 5-3: Reactor tubular biológico, control robusto basado en el modelo lineal. Efecto de perturbaciones.

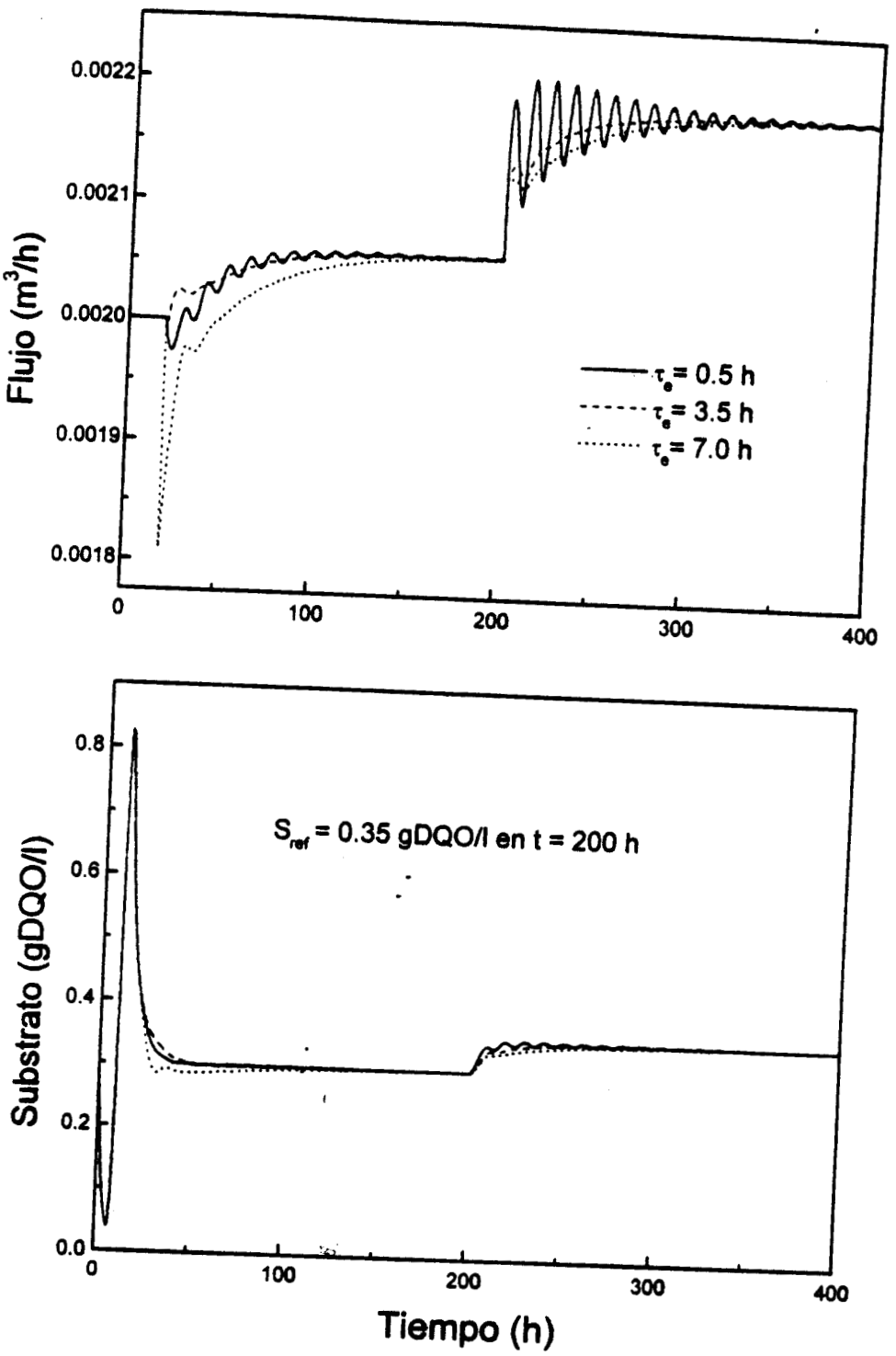


Figura 5-4: Reactor tubular biológico, control robusto basado en el balance de substrato. Efecto del tiempo de estimación.

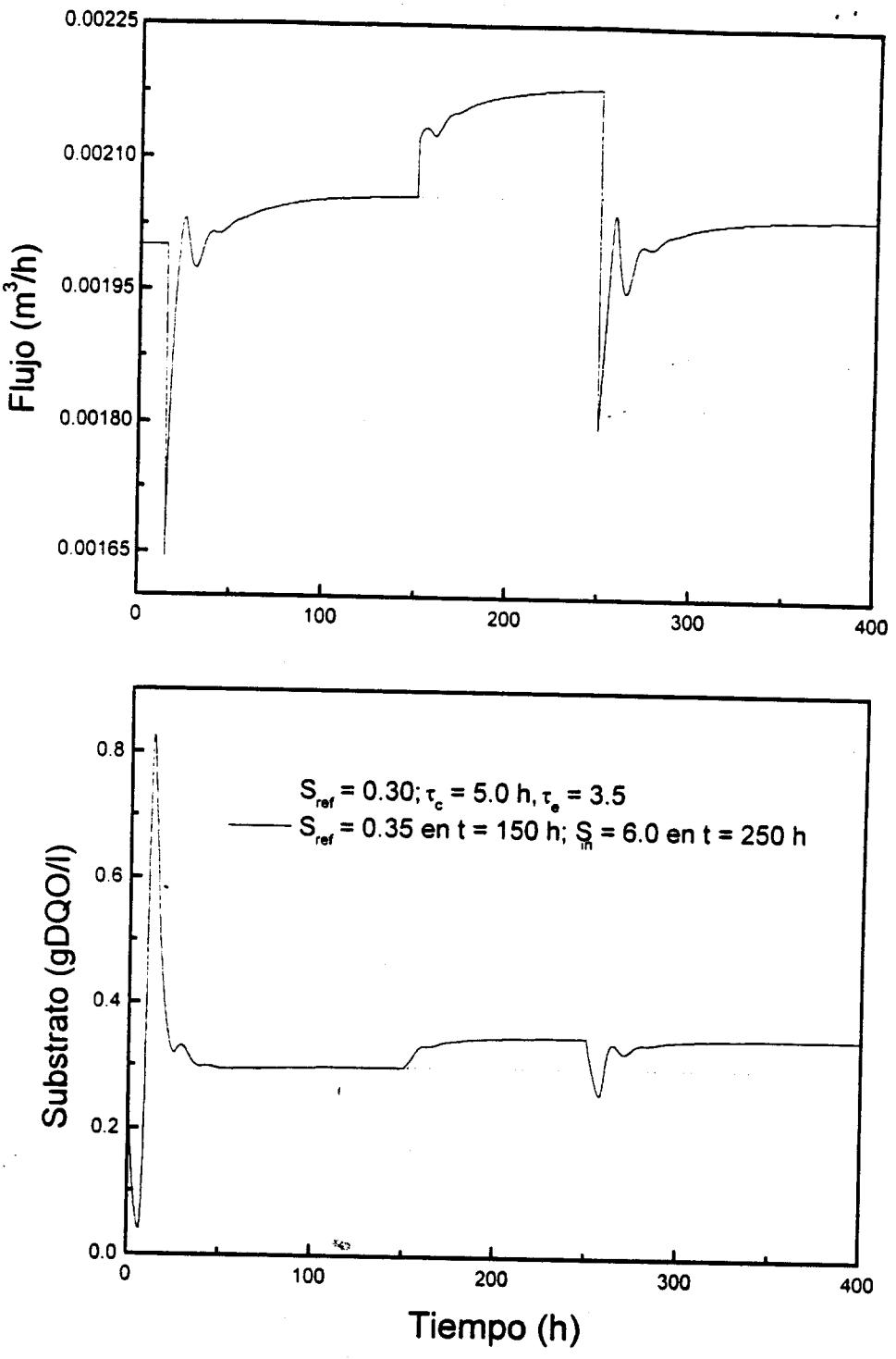


Figura 5-5: Reactor tubular biológico, control robusto basado en el balance de substrato. Efecto de perturbaciones.

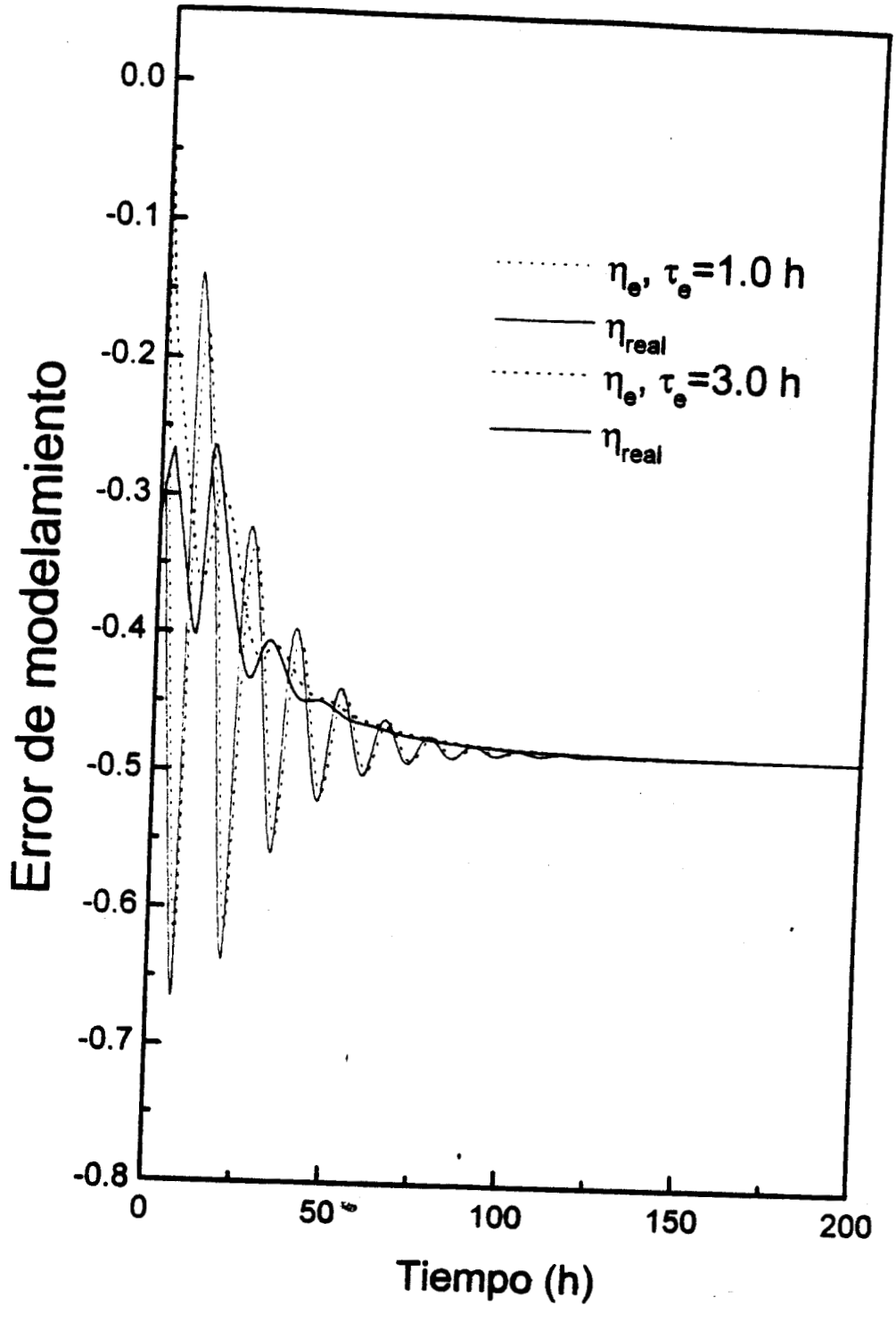


Figura 5-6: Reactor tubular biológico, reconstrucción del error de modelamiento. Efecto del tiempo de estimación.

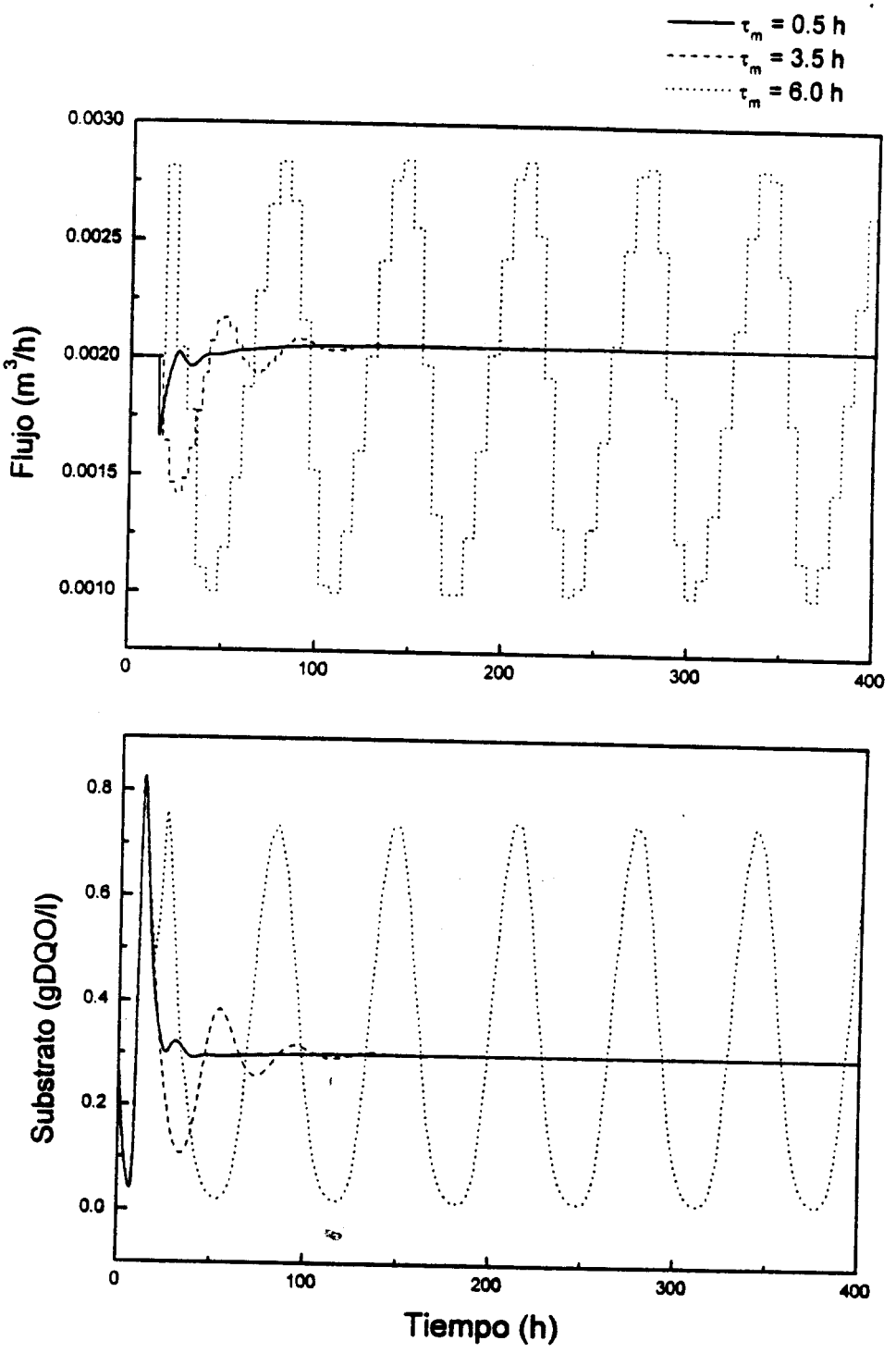


Figura 5-7: Reactor tubular biológico, efecto de la velocidad de muestreo.

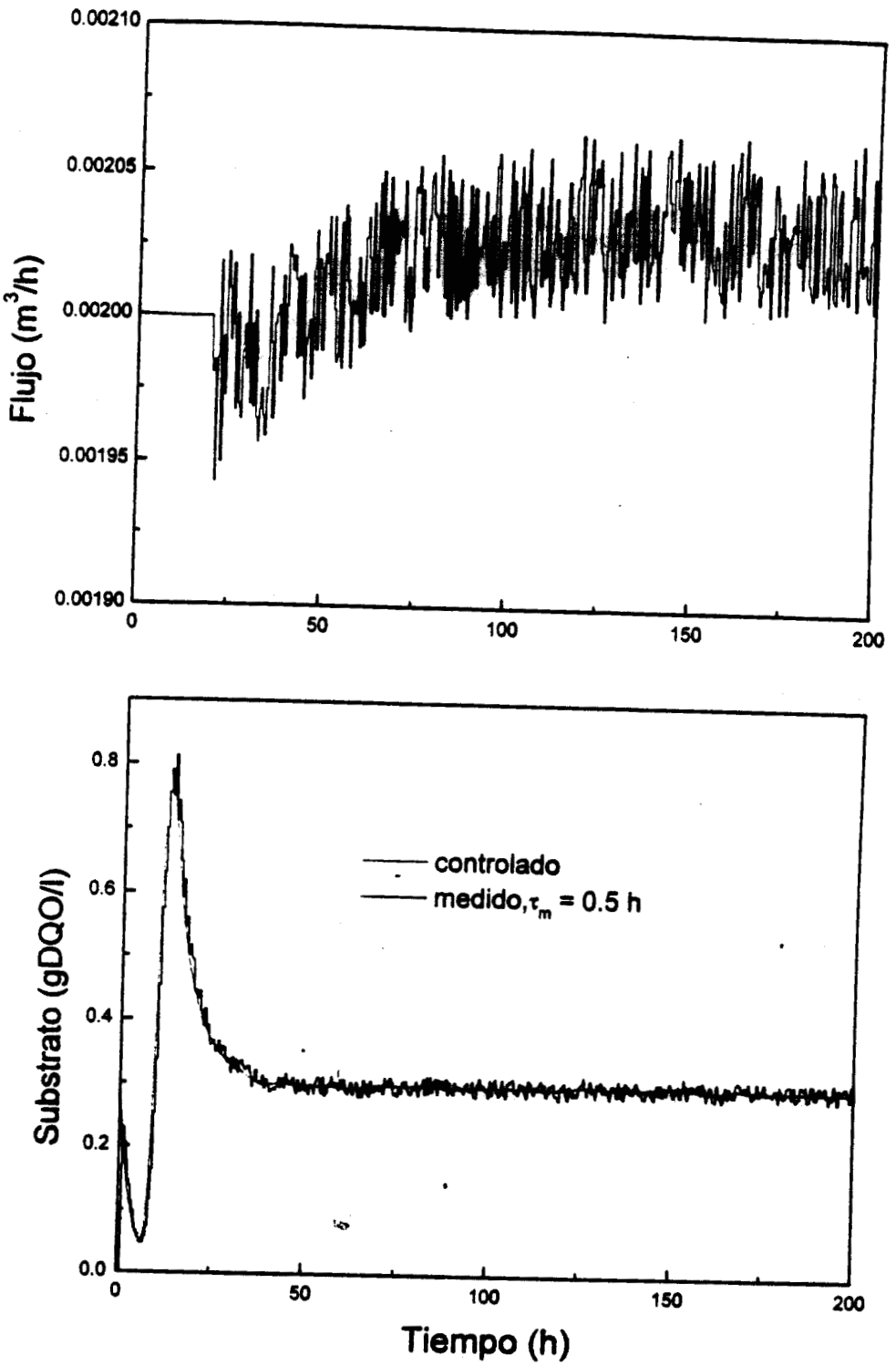


Figura 5-8: Reactor tubular biológico, efecto de la velocidad de muestreo y del ruido de medición

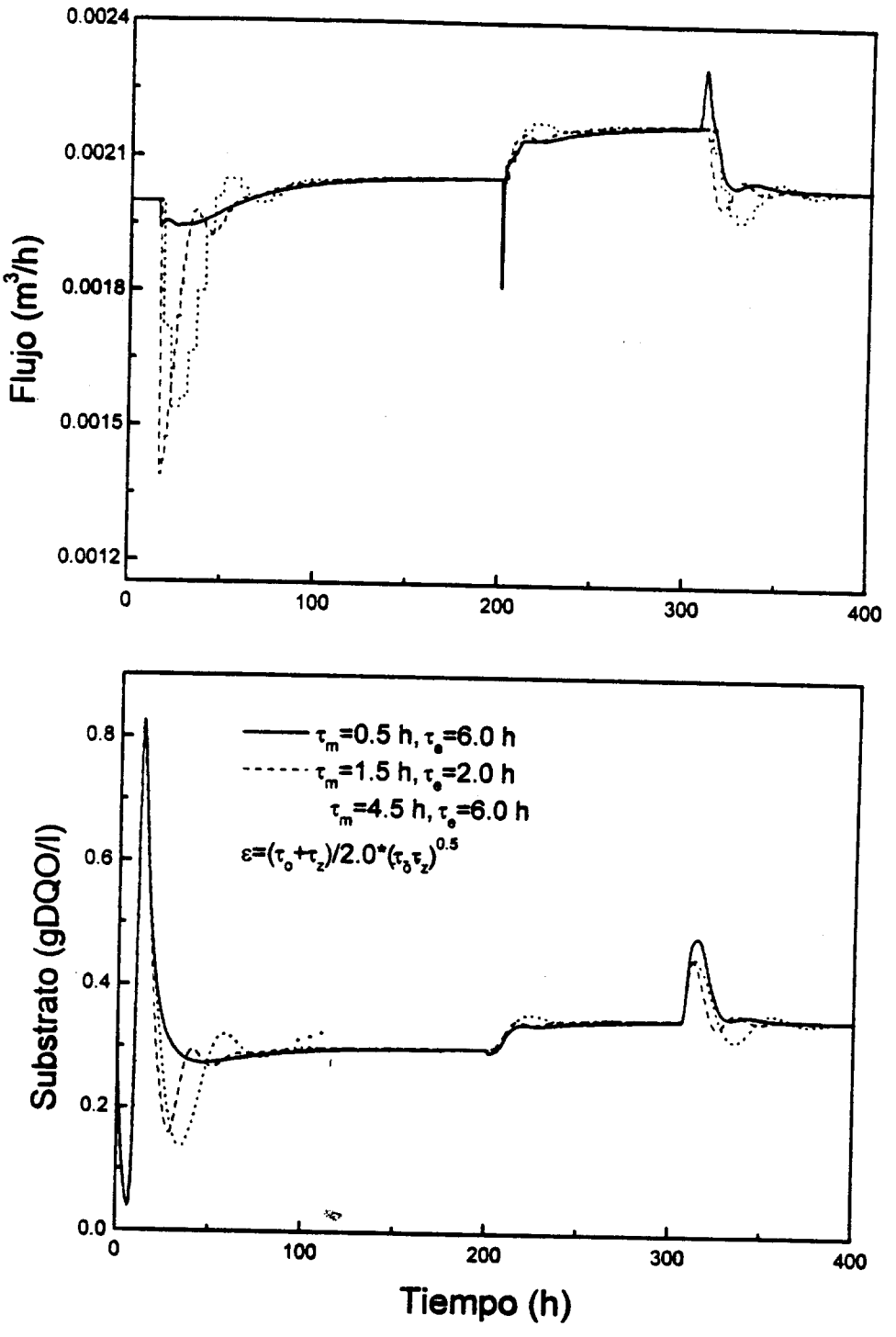


Figura 5-9: Reactor tubular biológico, control robusto PID. Retardo en la entrada de control.

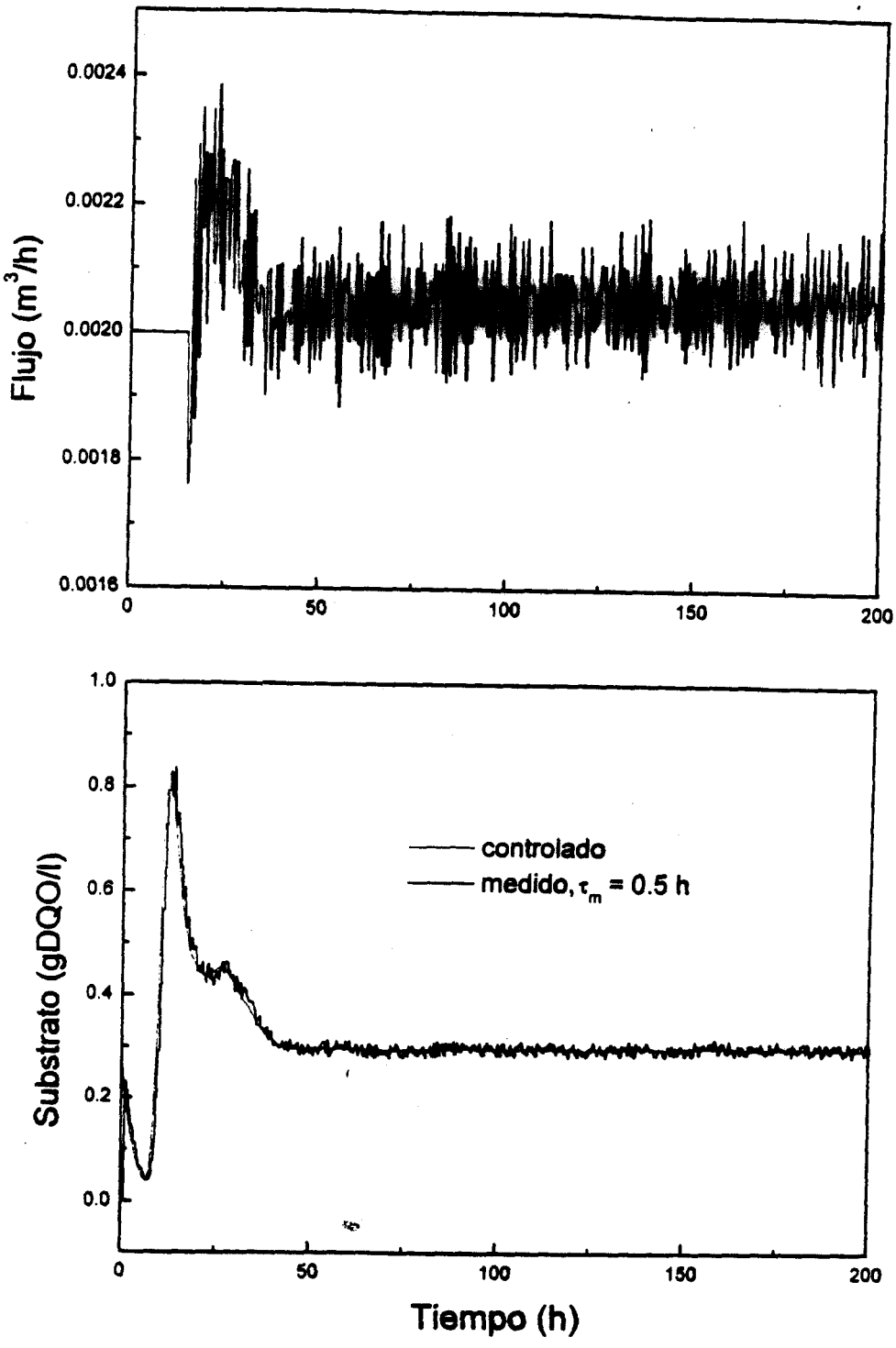


Figura 5-10: Reactor tubular biológico, control robusto PID. Efecto del ruido de medición.

5.2 Reactor Tubular con Dispersión Axial

El objetivo de control es regular la temperatura del reactor mediante manipulaciones de la temperatura de enfriamiento.

5.2.1 Control de la temperatura del reactor

Control Ideal

La ley de control derivada en el capítulo anterior para el reactor tubular con dispersión axial esta dada por

$$\begin{aligned} X_{2w} &= \frac{1}{\beta}\left[\tau_c^{-1}(X_{2ref} - X_{2_{Z=l}}) - \frac{1}{Pe_2 Le}\frac{x_{2_{Z=l+1}} - 2x_{2_{Z=l}} + x_{2_{Z=l-1}}}{\Delta Z^2}\right] + \\ &\quad \frac{1}{\beta}\left[\frac{1}{Le}\frac{x_{2_{Z=l}} - x_{2_{Z=l-1}}}{\Delta Z} - \frac{BDa}{Le}(1 - x_{1_{Z=l}})\exp\left\{\frac{x_{2_{Z=l}}}{1 + x_{2_{Z=l}}/\gamma}\right\} + \frac{\beta}{Le}x_{2_{Z=l}}\right] \quad (5.9) \end{aligned}$$

donde $Z = l$ denota la salida del reactor. Para realizar los experimentos de simulación a lazo cerrado, la expresión de control ideal (5.9) con la función de saturacion descrita en la Sección 4.2.1 se incluye en el algoritmo de simulación a lazo abierto y se activa después de eliminar un poco de efectos transitorios iniciales.

Elección de τ_c El desempeño del esquema de control ideal se muestra en la Figura 5.11 para tres valores de la constante de tiempo de estimación a lazo cerrado. La implementación del esquema de control se lleva a cabo en la región de perfiles estacionarios únicos para el reactor tubular con dispersión axial. Los parámetros del modelo están reportados en la Tabla 3.3. En la Figura 5.11 se puede observar que valores pequeños de τ_c presentan un sobredisparo inicial elevado en la acción de control y una regulacion en la temperatura del reactor bastante rápida. El valor de τ_c del orden de la constante de tiempo a lazo abierto presenta un buen desempeño, y un valor de τ_c muy grande conduce a una respuesta de control muy lenta.

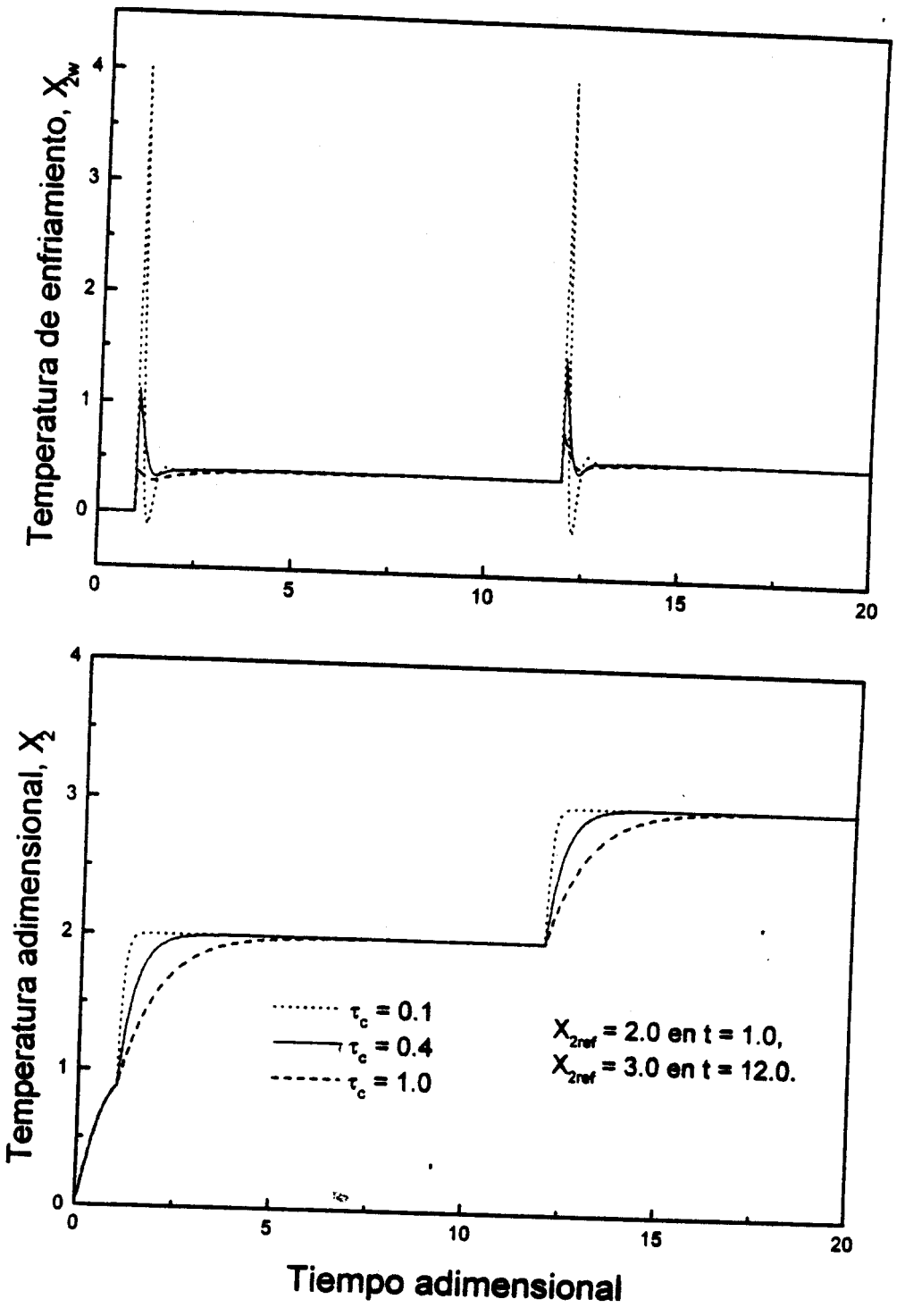


Figura 5-11: Reactor tubular con dispersión axial, control ideal.

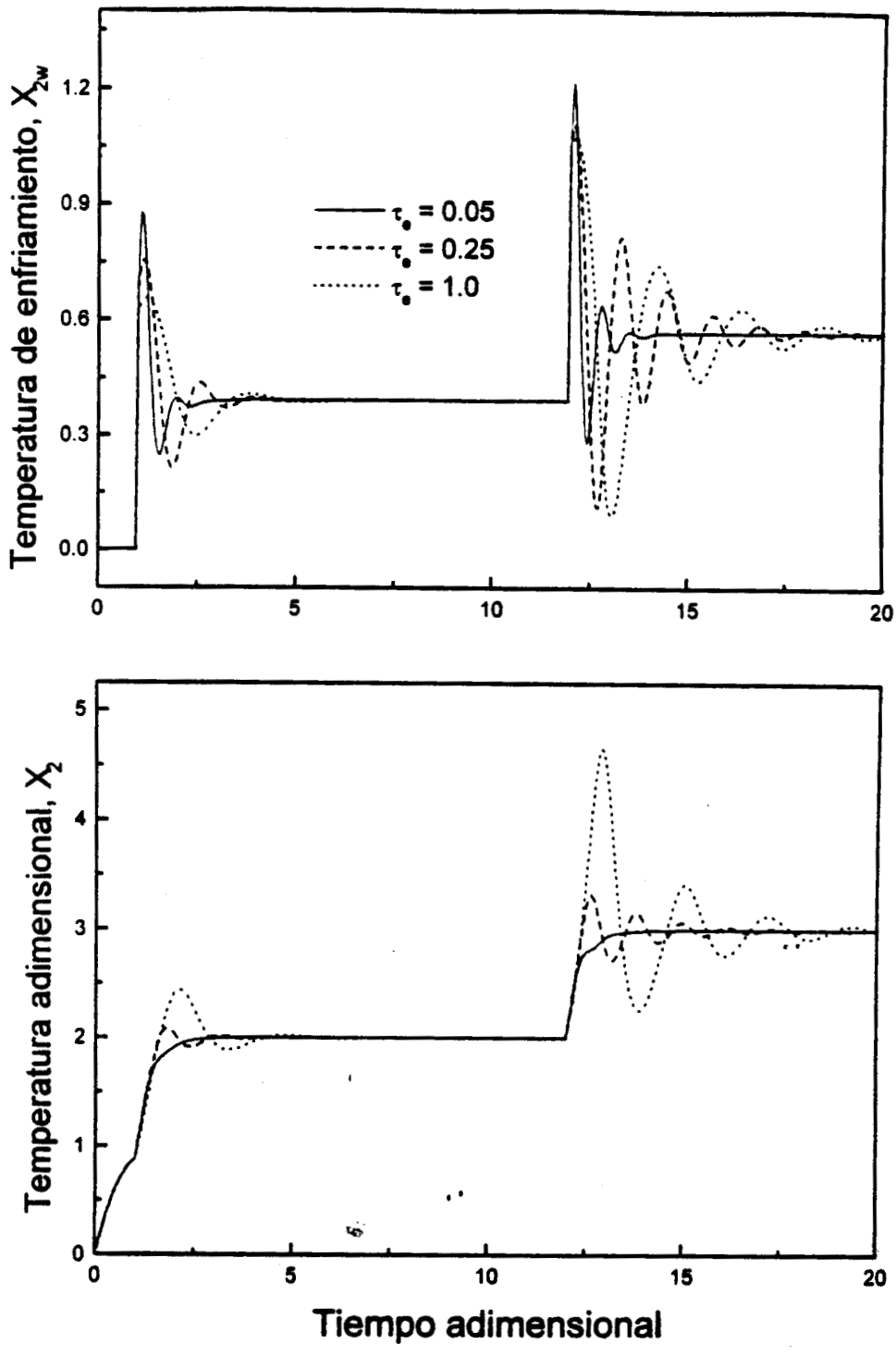


Figura 5-12: Reactor tubular con dispersión axial, control robusto basado en el modelo lineal.

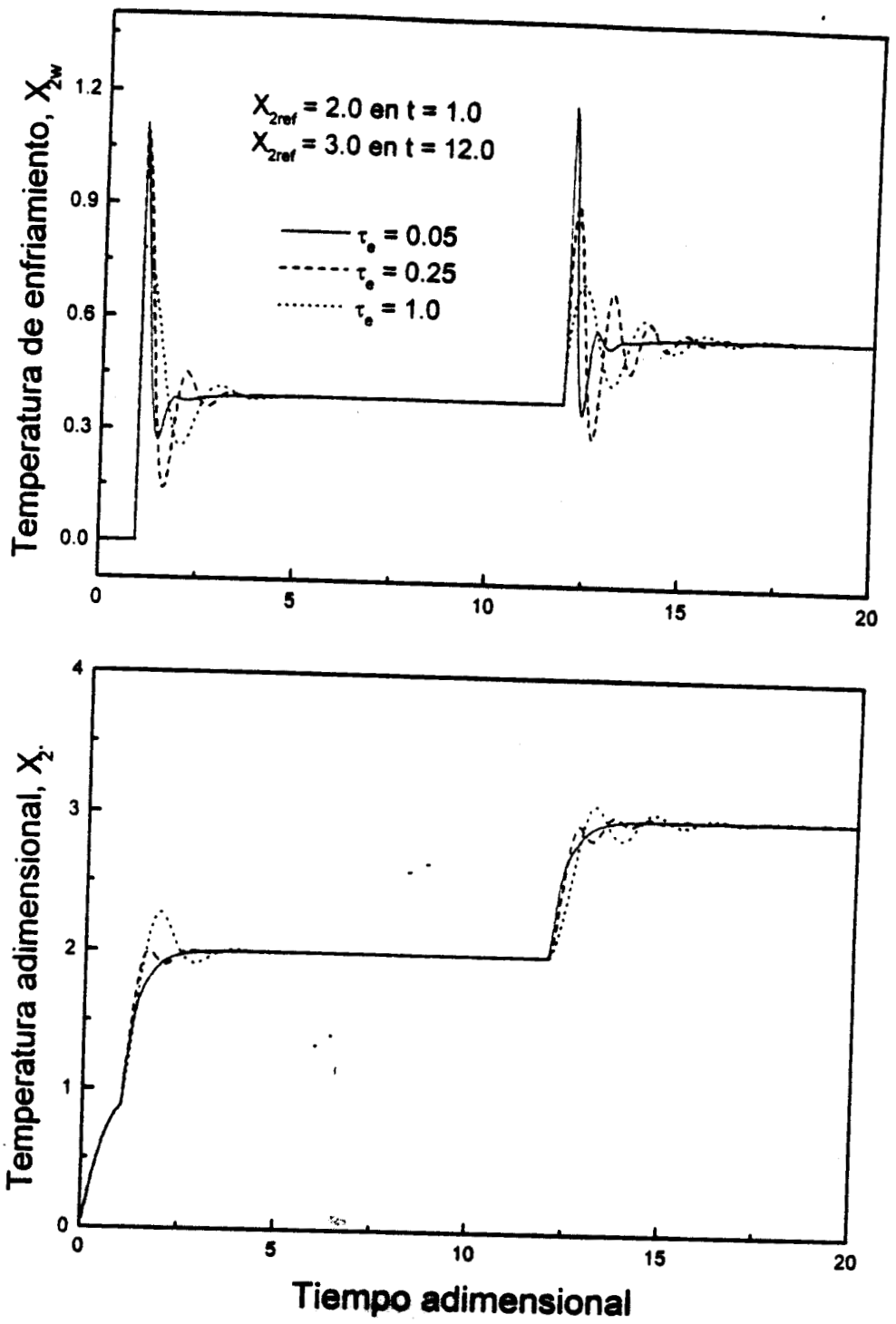


Figura 5-13: Reactor tubular con dispersión axial, control robusto basado en el balance energético.

Control Robusto

El esquema de control robusto esta dado por la ODE para el filtro de estimación, la expresion de estimación de incertidumbres y la entrada de control dadas por las siguientes ecuaciones

$$W_{t+\Delta t} = W_t + \Delta t \left[k_p(\overline{X_{2w}} - X_{2w}) + \tau_o^{-1}(X_{2ref} - X_{2_{Z=l}}) - \widehat{\eta}\right] \tag{5.10}$$

$$\widehat{\eta} = \tau_e^{-1}(W + (X_{2ref} - X_{2_{Z=l}})) \tag{5.11}$$

$$X_{2w} = \overline{X_{2w}} + \frac{1}{k_p}\left[(\tau_o^{-1} - \tau_c^{-1})(X_{2ref} - X_{2_{Z=l}}) - \widehat{\eta}\right] \tag{5.12}$$

para implementar vía simulaciones numéricas la ley de control robusta, se modifica el algoritmo de simulación a lazo abierto con una subrutina que integra la ODE por el método de Euler y calcula la entrada de control. La subrutina Ran0 del *Numerical Recipes* se utiliza para simular el ruido de medición con una amplitud del 5% de la señal de salida de temperatura.

Elección de τ_e La Figura 5.12 ilustra el desempeño del esquema de control robusto basado en la aproximación a un modelo lineal de primer orden para tres valores de la constante de tiempo de estimación. Cuando el valor de τ_e es muy pequeño el desempeño del esquema de control tiende al desempeño bajo la ley de control ideal. Valores de τ_e mayores al tiempo a lazo abierto conducen a oscilaciones o inclusive a inestabilidades del sistema a lazo cerrado. Además se muestra en la Figura un cambio del *Set Point*. El desempeño del controlador es excelente para $\tau_e = 0.05$.

El desempeño del controlador basado en el balance energético para los mismos valores de τ_e y un cambio de *Set Point* se presenta en la Figura 5.13. El esquema de control presenta un comportamiento similar al controlador basado en el modelo lineal, pero con menor esfuerzo de control.

Estimación de incertidumbres La Figura 5.14 muestra la reconstrucción del error de modelamiento real para diferentes valores del tiempo de estimación τ_e. En este caso valores pequeños de τ_e conducen a una reconstrucción del error de modelamiento rápida y sin oscilaciones. Va-

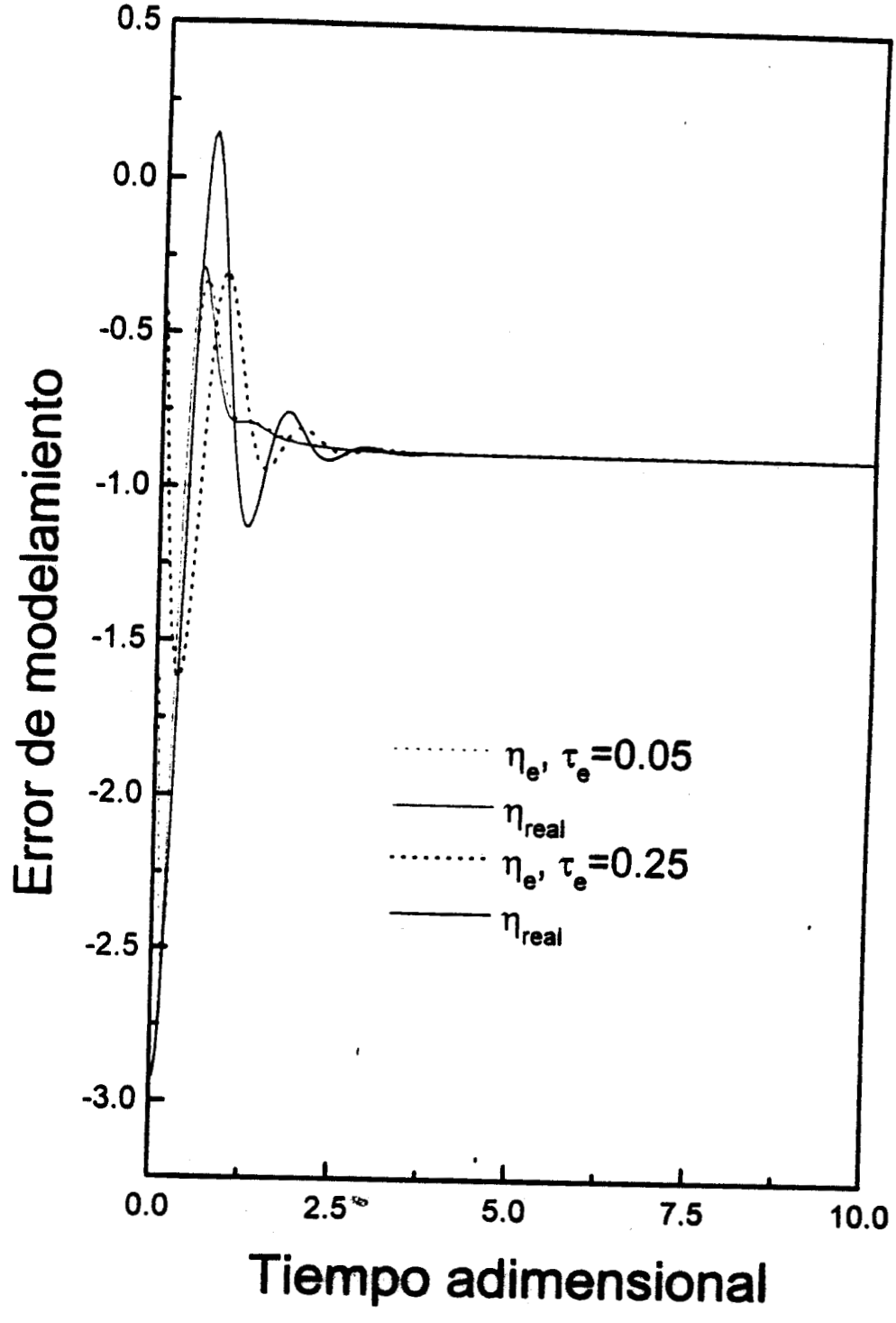


Figura 5-14: Reactor tubular con dispersión axial, reconstrucción del error de modelamiento.

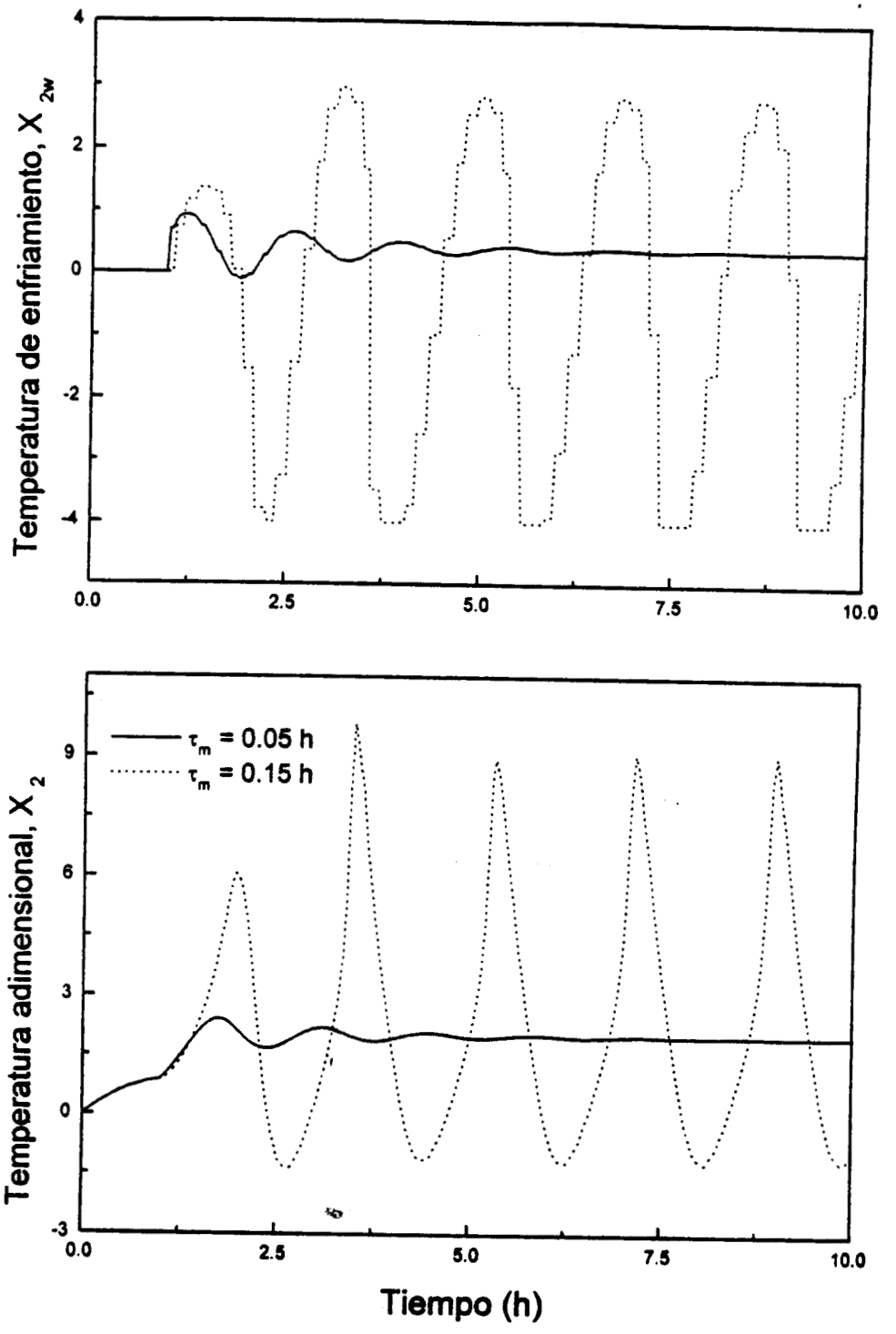


Figura 5-15: Reactor tubular con dispersión axial, efecto de la velocidad de muestreo.

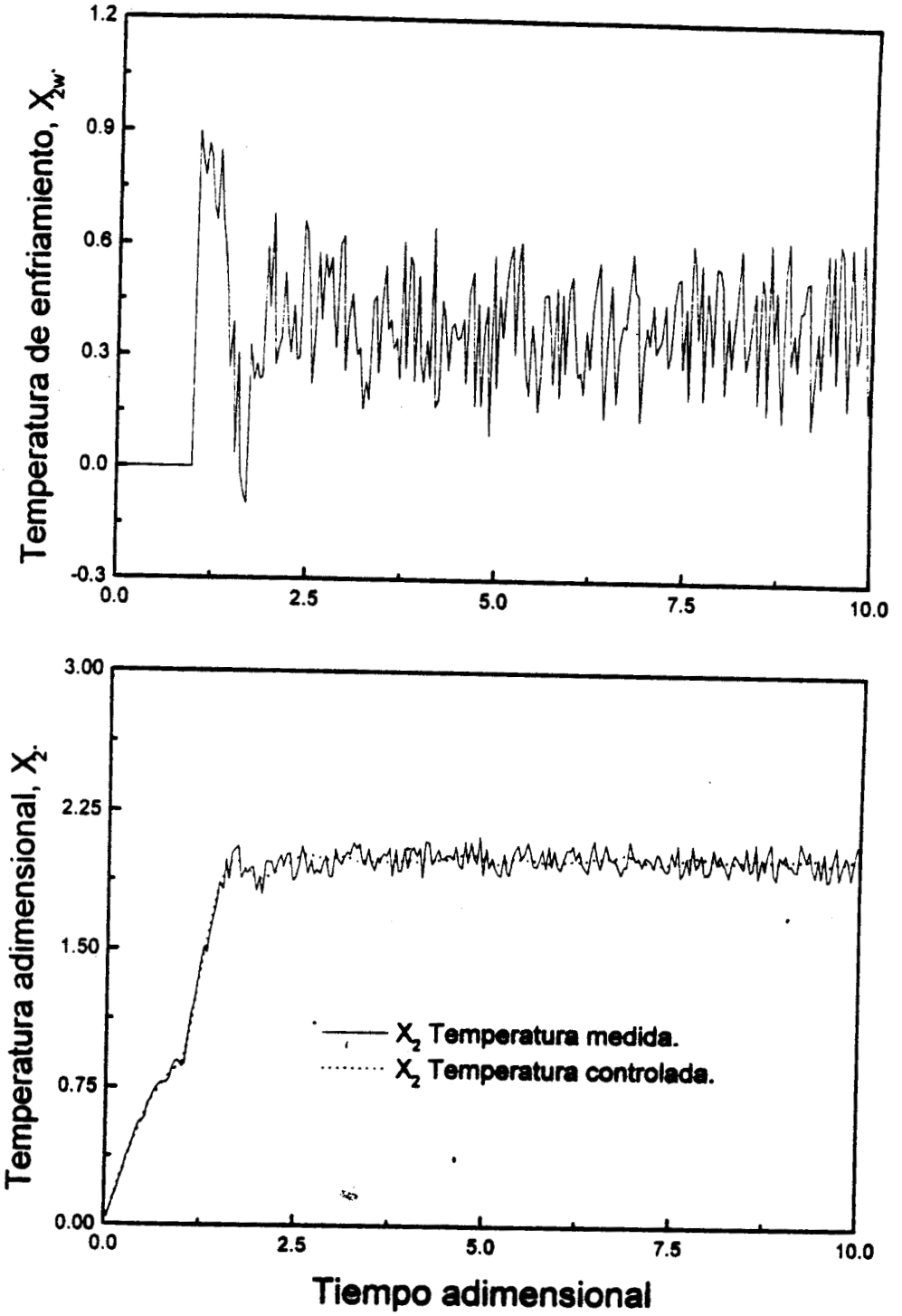


Figura 5-16: Reactor tubular con dispersión axial, efecto del retraso y del ruido de medición.

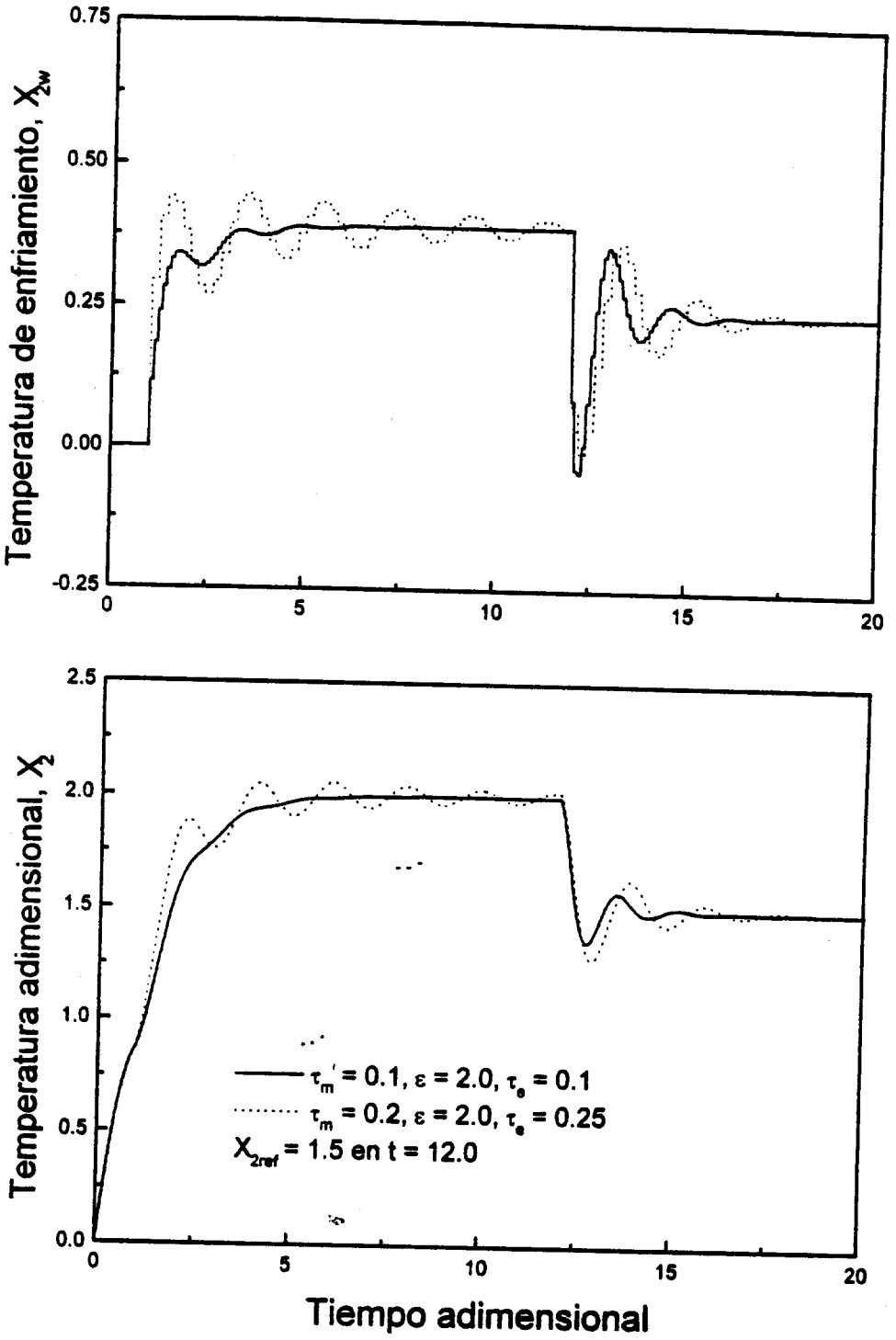


Figura 5-17: Reactor tubular con dispersión axial, control robusto PID.

lores grandes de τ_e conducen a una mayor oscilación lo cual conduce al deterioro del esquema de control.

Efecto de la velocidad de muestreo y del ruido de medición La Figura 5.15 muestra el efecto de la velocidad de medición sobre el desempeño del esquema de control. En este caso un retardo en la medición mayor a la constante de tiempo de estimación de incertidumbres conduce a oscilaciónes e inestábilidades en la variable controlada. De hecho, el esquema de control no permite un retardo en la entrada de control mayor a un 10 % de la constante de tiempo a lazo abierto. El efecto de tiempo muerto o bien del retardo en la entrada de control conduce a un gran efecto de dinámica no modelada. El efecto del ruido de medición se presenta en la Figura 5.16, en este caso el sistema de control no presenta un deterioro apreciable, se incluye además un retardo en la entrada de control de 0.05 horas.

Control Robusto PID

La implementación de las ecuaciones del esquema de control robusto basado en el modelo lineal mas tiempo muerto, se realiza en forma similar al caso del control PID para el biorreactor. El desempeño de la ley de control PID se muestra en la Figura 5.17. Para el reactor tubular con dispersión axial el retardo en la entrada de control debida a mediciones de temperatura lentas no es apreciable, sin embargo, para ilustrar las capacidades del esquema PID propuesto se incluye un retardo en la entrada de control del 25 % y del 50 % del tiempo a lazo abierto.

5.3 Notas y Referencias

La implementación de los esquemas de control derivados para el caso del reactor tubular con reciclo no se han presentado debido a la ausencia de datos reportados en literatura que permitan realizar simulaciones confiables.

Capítulo 6

Conclusiones

"in technology as in science, simplicity is the ultimate sophistication"

Publicidad de Rockwell

Everything should be made as simple as posible, but not simpler.

Albert Einstein

En este capítulo se resumen las principales conclusiones del diseño de los esquemas de control robustos para el caso de los reactores tubulares. La dinámica de los reactores tubulares ha sido previamente discutida en el Capítulo 3 y los resultados al implementar los modelos de los controladores derivados en el Capítulo 4 se han presentado en el Capítulo 5.

6.1 Resumen del trabajo de tesis

En este trabajo se desarrollaron esquemas de control robustos para tres importantes tipos de reactores tubulares: un reactor biológico de cama empacada, un reactor tubular con dispersión axial, y un reactor tubular con reciclo. En el Capítulo 1 se presento el estado del arte de los reactores tubulares y bajo tales antecedentes se identifico la necesidad de desarrollar esquemas de control robustos para este tipo de reactores. El Capítulo 2 cubrió los aspectos teóricos necesarios para el desarrollo de los esquemas de control robustos. Específicamente se presentaron conceptos de sistemas lineales tales como observabilidad, controlabilidad y estabilidad, y de

sistemas no lineales relacionadas al método de estabilidad de Lyapunov con el fin de clarificar los términos de estabilidad exponencial y asintótica y los criterios de estabilidad presentados en el Apéndice B. Además, se presento una breve discusión del modelamiento matemático con el propósito de identificar los diversos modelos que surgen dependiendo del fin que persiguen y la incertidumbre que surge en los modelos matemáticos. El Capítulo 3 se enfocó al estudio de la dinámica de los reactores tubulares y en especial se estudio la dinámica del reactor biológico de cama empacada, el reactor tubular con dispersión axial, y el reactor tubular con reciclo. El reactor tubular biológico representa una alternativa factible para algunos procesos de fermetación, el reactor tubular con dispersión axial es el tipo de reactor mas importante para las industrias de refinación del petróleo y la industria petroquímica en general debido a las importantes reacciones industriales sólido-gas que se realizan en tales reactores, y finalmente el reactor tubular con reciclo representa una alternativa para reacciones limitadas en el equilibrio. El desarrollo de los esquemas de control robustos se realizó en el Capítulo 4 para los tres reactores tubulares bajo estudio, con base a modelos lineales de primer orden con y sin retardo en la entrada de control. Los modelos se derivaron del método de identificación empírica y del balance de masa de substrato para el biorreactor y los balances energéticos para el reactor con dispersión axial y el reactor con reciclo, aumentados con un término que agrupa los errores de modelado. Además, se demostró la equivalencia de los controladores robustos con los controladores clásicos PI y PID. Finalmente en el Capítulo 5 se implementaron los modelos de los controladores robustos derivados a través de simulaciones numéricas considerando además el efecto del retardo en la entrada de control debida al muestreo y el ruido de medición. En este capítulo se presentan las principales conclusiones sobre los esquemas de control derivados.

6.2 Conclusiones generales

1. *Sobre la estructura de los controladores robustos:*

   - Se diseñaron esquemas de control robustos simples basados en modelos de bajo orden entrada-salida obtenidos de la identificación empírica del proceso y de los balances de materia y energía al remover los términos inciertos y/o desconocidos. Los esquemas de control robustos derivados no presentan las desventajas de los controladores

lineales clásicos (*i.e.*, desprecio de dinamica no modelada y de perturbaciones externas) diseñados sobre la base del modelo de la planta linealizada por jacobiano o sobre la base de un modelo empírico lineal. Esto se debe a que el efecto de dinámica no modelada y la presencia de perturbaciones externas se incluye en la derivación del controlador por medio de un término que agrupa los errores de modelado del sistema.

- El esquema de control robusto basado en un modelo lineal de primer orden tiene una estructura del controlador clásico PI con solamente dos parámetros ajustables, la constante de tiempo de estimación de incertidumbres y la constante de tiempo a lazo cerrado.
- El retardo en la entrada de control puede incorporarse en el esquema de control robusto al considerar un modelo de primer orden más tiempo muerto. El controlador robusto retroalimentado que resulta al tomar como base tal modelo, es equivalente a un controlador clásico PID, con tres parámetros ajustables, las constantes de tiempo a lazo cerrado y de estimación de incertidumbres, y un coeficiente de amortiguamiento.
- Ambos esquemas de control robustos, a diferencia de los controladores clasicos PI y PID poseen una estrucura natural *anti-reset windup.*
- La ley de control robusta retroalimentada resultante está compuesta de un lazo retroalimentado y un estimador de incertidumbres. Para el controlador robusto PI, el término de estimación de incertidumbres se debe principalmente a los errores de modelado del sistema a controlar. Para el controlador robusto PID la principal fuente de incertidumbre es la dinámica correspondiente al tiempo de retardo en el canal de entrada de control.

2. *Parametrización de los controladores robustos PI y PID:*

- Un resultado directo de la estructura de los controladores robustos PI y PID (Tabla 4.1 a Tabla 4.3) es la implementación a sistemas industriales a partir de los controladores lógicos programables (PLC) comerciales. Además debido a la parametrizacion resultante en términos de las constantes de tiempo a lazo cerrado y de estimación de

incertidumbres permiten una sintonización simple de los controladores robustos PI y PID.

- Para el controlador PI, al designar el comportamiento a lazo cerrado deseado a través de τ_c, sólo resta un parámetro ajustable τ_e, el cual se usa para asegurar la estabilidad del sistema a lazo cerrado.
- Los parámetros del controlador PID están relacionados con el desempeño deseado a traves de τ_c, y de la dinámica a lazo cerrado por medio del coeficiente de amortiguamiento ε. La constante de tiempo de estimación de incertidumbres se usa para asegurar la estabilidad del sistema a lazo cerrado.

3. *Sintonizado de los controladores:* Las simulaciones numéricas de los esquemas de control robustos derivados para el reactor tubular biológico y el reactor tubular con dispersión axial permiten obtener la siguiente sintonización de los controladores robustos PI y PID.

   - Controlador PI y PID: para plantas estables, elegir la constante de tiempo a lazo cerrado τ_c del orden de la constante de tiempo a lazo abierto τ_o. Teniendo en mente que valores altos de τ_c permiten mayores márgenes de estabilidad, pero presentan la desventaja de requerir un tiempo mayor para lograr la referencia de control.
   - Controlador PI: elegir la constante de tiempo de estimación de incertidumbres τ_e lo más pequeña que sea permisible. La limitación del valor más pequeño se debe principalmente a efectos de dinámica no modelada, tal como la dinámica despreciada de los actuadores o de la presencia de ruido de medición del orden de la frecuencia de la constante de tiempo de estimación de incertidumbres.
   - Controlador PID: elegir el coeficiente de amortiguamiento a lazo cerrado ε del orden del coeficiente natural de amortiguamiento del sistema a lazo abierto si este es mayor a 1. Para valores de ε_o menores a 1 asignar un valor de ε alrededor de 1.5 a 2.
   - Controlador PID: elegir la constante de tiempo de filtrado τ_f del orden de τ_z.
   - Controlador PID: la constante de tiempo de estimación de incertidumbres elegirla del orden de 2.5-3 veces la constante de tiempo del cero.

4. *Desempeño de los controladores:* Los esquemas de control propuestos han sido implementados en una PC por medio de metodos de solución numéricos y se realizaron pruebas simulando el desmpeño de control, obteniendo los siguintes resultados pára un reactor biológico de cama fija y un reactor tubular con dispersión axial:

   Reactor tubular biológico

   - El esquema de control presenta un buen desempeño a pesar de que el controlador no tiene información acerca de la tasa de reacción y de la presencia de perturbaciones.
   - El controlador PI se desestabiliza con tiempos de retardo en la entrada de control mayores a un 25% de la constante de tiempo a lazo abierto.
   - El controlador PID soporta retardos en la entrada de control de hasta 70% de la constante de tiempo a lazo abierto sin un deterioro apreciable.

   Reactor tubular con dispersión axial

   - El esquema de control presenta buen desempeño a pesar de las incertidumbres del modelo.
   - El controlador PI presenta una desestabilización severa para valores mayores al 15% de la constante de tiempo a lazo abierto.
   - El controlador robusto PID permite retardos en la entrada de control de hasta 50% del valor de la constante de tiempo a lazo abierto.

   Ambos reactores

   - Para valores prácticos del ruido de medición, no se degrada el desempeño del controlador apreciablemente.

5. *Estabilidad y Robustez de los controlador PI y PID*

   - Como se ha mencionado, las diferencias planta/modelo afectan el desempeño del control. Tales diferencias se deben a dinámica no modelada y a no-linealidades. La dinámica no modelada surge cuando la planta a ser controlada es de un orden mayor y

cuando existe tiempo de retardo en la entrada de control. Para el controlador robusto derivado en este trabajo, la constante de tiempo de estimación de incertidumbres puede tomarse como una medida de robustez del sistema a lazo cerrado y los valores límites pueden obtenerse fácilmente a partir de simulaciones numéricas con el sistema a lazo cerrado o con argumentos simples como localización de raíces.

- El análisis de estabilidad de los controladores robustos PI y PID está fuera de los objetivos de este trabajo. Sin embargo el análisis reportado por Alvarez-Ramírez *et al.* [69], (ver Apéndice B) para los controladores tipo PI se aplica directamente para los controladores del tipo PI derivados en este trabajo. El análisis de estabilidad muestra que existe una constante de tiempo de estimación máxima. Valores superiores a la constante de tiempo de estimación máxima conducen a inestabilidad del sistema a lazo cerrado. El análisis de estabilidad para los controladores tipo PID es mas complicado y está reportado en [71].

6. *Limitaciones en el desempeño:*

   - En general, los factores limitantes para lograr un desempeño a lazo cerrado adecuado, son los retardos en la entrada de control, restricciones de entrada, e incertidumbre del modelo de la planta. En este trabajo se desarrollaron esquemas de control robustos que tratan directamente con tales limitaciones, específicamente la incertidumbre del modelo se considera en un término que agrupa los errores de modelado, el retardo en la entrada de control se toma en cuenta en la derivación de controladores robustos conduciendo al esquema de control PID, y finalmente la saturación en la entrada de control considera restricciones en los límites de los actuadores.

Finalmente, se ha demostrado para el caso de los reactores tubulares que despliegan un gran comportamiento no-lineal, que se puede obtener un desempeño satisfactorio con esquemas de control robustos lineales simples.

6.3 Trabajo Futuro

Una línea de investigación abierta es la valdación experimental de los controladores robustos tipo PI y PID derivados en el presente trabajo para los reactores tubulares. La implementación experimental del algoritmo de control debería ser directa a través de los PLC comerciales. En particular, para el caso del reactor biológico, debido a que los parámetros utilizados en la simulación corresponden a un reactor de planta piloto, la validación a tal nivel es el paso inmediato. Para el reactor tubular con dispersión axial, podría existir alguna dificultad de implementar experimentalmente el esquema de control derivado, esto se debe principalmente a que las universidades generalmente no están equipadas para operar este tipo de reactores sobre una escala apropiada para validar los controladores y en general los modelos matemáticos para la escena industrial. Sin embargo, debido a que el esquema de control derivado en este caso conduce a controladores clásicos PI y PID, no es tan aventurado pensar sobre una posible implementación a nivel industrial con el equipo de control estándar. Para el caso del reactor con reciclo al encontrar valores confiables, el primer paso es validar a través de simulaciones numéricas el esquema de control derivado y si es posible proseguir con su implemetación experimental.

Bibliografía

[1] Denbigh. K.G., and Turner, J.C.R., 1972. *Chemical Reactor Theory: An Introducion.* Third Edition, Cambridge University Press., New York.

[2] Froment, G.F., and Bischoff, K.B., 1990. *Chemical Reactor Analysis and Design.* Second Edition, John Wiley and Sons, Inc.

[3] Elnashaie, S.S.E.H., and Elshishini, S.S., 1993. *Modelling, Simulation and Optimization of Industrial Fixed Bed Catalytic Reactors.* Topics in Chemical Engineering. Edited by R. Hughes. Gordon and Breach Science Publishers. OPA (Amsterdam).

[4] Doran, M.P., 1995. *Bioprocess Engineering Principles.* Academic Press Limited, San Diego, C.A.

[5] Schmeal, W.R., and Amundson, N.R., 1966. The effect of recycle on linear reactor. *AIChE J.*, **12**, 1202.

[6] Hua, X., Mangold, M., Kienle, A., and Gilles, E.D., 1998. State profile estimation of an autothermal periodic fixed-bed reactor. *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 47-58.

[7] Khinast, J., and Luss, D., 1997. Mapping regions with different bifurcation diagrams of a reverse-flow reactor. *AIChE J.*, **34**, 2034-2047.

[8] Farlow, S.J., 1993. *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers.* First Edition, Dover Publications, Inc. New York.

[9] Aris, R., 1969. *Elementary Chemical Reactor Analysis.* Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J.

[10] Liu, S.L., and Amundson, N.R., 1962. Stability of adiabatic packed bed reactors, an elementary treatment. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, **1**, 200.

[11] Liu, S.L., Aris, R., and Amundson, N.R., 1963. Stability of nonadiabatic packed bed reactors. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, **2**, 12.

[12] Raymond, L.R., and Amundson, N.R., 1964. Some observations on tubular reactor stability. *Canad. Jour. Chem. Eng.*, **42**, 173.

[13] Amundson, N.R., 1965. Some further observations on tubular reactor stability. *Canad. Jour. Chem. Eng.*, **43**, 49.

[14] Luss, D., and Amundson, N.R., 1967. Some general observations on tubular reactor stability. *Can. J. Chem. Eng.*, **45**, 341.

[15] Varma, A., and Amundson, N.R., 1973. The non-adiabatic tubular reactor: stability considerations. *Can. J. Chem. Eng.*, **51**, 459.

[16] Bilous, O.G., and Amundson, N.R., 1955. Chemical reactor stability and sensitivity-II: Effect of parameters on sensitivity of empty tubular reactors. *AIChE J.*, **2**, 117.

[17] Perlmutter, D.D., 1972. *Stability of chemical reactors*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J.

[18] Jensen, K.F., and Ray, W.H., 1982. The bifurcation behavior of tubular reactors. *Chem. Eng. Sci.*, **37**, 199-222.

[19] Jacobsen, E.W., and Berezowski, M., 1998. Chaotic dynamics in homogeneous tubular reactors with recycle. *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 4023-4029.

[20] Fisher, D.G., 1991. Process control: An overview and personal perspective. *Can. J. Chem. Eng.*, **69**, 5-26.

[21] Bequette, B.W., 1991. Nonlinear control of chemical processes: A review. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**, 1391-1413.

[22] Morari, M., 1991. Process control and operations: Current trends and a look at the future. *Proceedings of the fourth world congress of chemical engineering.* Karlsruhe Germany. 99-107.

[23] Luyben, W.L., 1990. *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers.* McGraw-Hill, New York, NY.

[24] Stangeland, B.E., and Foss, A.S., 1970. Control of a fixed-bed chemical reactor. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **9**, 38-48.

[25] Lynn, L.L., Parkin, E.S., and Zahradnik, R.L., 1970. Near-optimal control by trajectory approximation: tubular reactors with axial dispersion. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **9**, 58-63.

[26] Georgakis, C., Aris, R., and Amundson, N.R., 1977. Studies in the control of tubular reactors-I: General considerations. *Chem. Eng. Sci.*, **32**, 1359-1369.

[27] Georgakis, C., Aris, R., and Amundson, N.R., 1977. Studies in the control of tubular reactors-II: Stabilization by modal control. *Chem. Eng. Sci.*, **32**, 1371-1379.

[28] Georgakis, C., Aris, R., and Amundson, N.R., 1977. Studies in the control of tubular reactors-III: Stabilization by observer design. *Chem. Eng. Sci.*, **32**, 1381-1387.

[29] Sorensen, J.P., 1977. Experimental investigation of the optimal control of a fixed-bed reactor. *Chem. Eng. Sci.*, **32**, 763-774.

[30] Sorensen, J.P., Jorgensen, S.B., and Clement, K., 1980. Fixed-bed reactor kalman filtering and optimal control-I: Computational comparison of discrete vs continuos time formulation. *Chem. Eng. Sci.*, **35**, 1223-1230.

[31] Clement, K., Jorgensen, S.B., and Sorensen, J.P., 1980. Fixed-bed reactor kalman filtering and optimal control-II: Experimental investigation of discrete time case with stochastic disturbances. *Chem. Eng. Sci.*, **35**, 1231-1236.

[32] Silva, J.M., Wallman, P.H., and Foss, A.S., 1979. Multi-bed catalytic reactor control systems: configuration development and experimental testing. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **18**, 383-391.

[33] Wallman, P.H., Silva, J.M., and Foss, A.S., 1979. Multivariable intergral controls for fixed-bed reactors. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **18**, 392-399.

[34] Foss, A.S., Edmunds, J.M., and Kouvarltakis, B., 1980. Multivariable control system for two-bed reactors by the characteristic locus method. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **19**, 109-117.

[35] Cinar, A., 1984. Controller design for a tubular catalytic reactor. *Canad. J. Chem. Eng.*, **62**, 746-754.

[36] MacGregor, J.F., and Kozub, D.J., and Wright, J.D., 1987. Application of LQ and IMC controllers to a packed-bed reactor. *AIChE J.*, **33**, 1496.

[37] Dochain, D., Babary, J.P. and Tali-Maamar, N., 1992. Modeling and adaptive control of nonlinear distributed parameter bioreactors via orthogonal collocation. *Automatica*, **28**, 873-883.

[38] Patwardhan, A.A., Wright, G.T., and Edgar, T.F., 1992. Nonlinear model-predictive control of distributed-parameter systems. *Chem. Eng. Sci.*, **47**, 721-735.

[39] Hanczyc, E.M., and Palazoglu, A., 1995. Sliding mode control of nonlinear distributed parameter chemical processes. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **34**, 557-566.

[40] Christofides, P.D., and Daoutidis, P., 1996. Feedback control of hyperbolic PDE systems. *AIChE J.*, **42**, 3063.

[41] Gundepudi, P.K., and Friedly, J.C., 1998. Velocity control of hyperbolic partial differential equation systems with single characteristic variable. *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 4055-4072.

[42] Berkelew, C.H., 1959. Stability of chemical reactors. *Chem. Eng. Prog. Symp. Series* No. 25, 55, **37**.

[43] Colantuoni, G., and Padmanabhan, L., 1977. Optimal sensor locations for tubular flow reactor systems. *Chem. Eng. Sci.*, **32**, 1035-1049.

[44] Zhou, K., and Doyle, J.C., 1998. *Essentials of Robust Control.* Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey.

[45] **Alvarez-Ramírez, J.**, and Suarez, R., 1999. A control scheme for a class of uncertain linear plants. *Chem. Eng. Sci.*, **54**, 51-60.

[46] Boyd, S.P., and Barratt, C.H., 1991. *Linear Controller Design: Limits of Performance.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

[47] **Alvarez-Ramírez, J.**, Femat, R. and Barreiro, A., 1997. A PI controller with disturbance estimation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 3668.

[48] Park, J.K, and Choi, C.H., 1997. Dynamical anti-reset windup method for discrete-time saturating systems. *Automatica.*, **33**, 1055-1072.

[49] Slotine, J.J.E., and Li, W., 1991. *Applied Nonlinear Control.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

[50] Aris, R., 1994. *Mathematical Modelling Techniques.* First Edition, Dover Publication Inc., New York.

[51] Seydel, R., 1997. Nonlinear Computation. *Int. J. Bifurcation and Chaos*, **7**, 205-2126.

[52] Fulford, G.D., and Pei, D.C., 1969. A unified approach to the study of transfer processes. *Ind. & Eng. Chem.*, **61**, 47-69

[53] Espinosa-Paredes, G., and Soria, A., 1998. Method of finite difference solutions to the transient bubbly air-water flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids,* **26**, 1155-1180

[54] Kailath, T., 1980. *Linear Systems.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

[55] Astrom, K.J., and Wittenmark, B., 1990. *Computer-Controlled Systems: Theory and Design.* Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

[56] Sundarsen, S., Amundson, N.R., and Aris, R., 1980. Observations on fixed-bed dispersión models: the role of the interstitial fluid. *AIChE J.*, **26**, 529.

[57] Amundson, N.R., 1970. Mathematical models of fixed bed reactors. *Berichte der Bunsen Gesellschaft fur physikalische Chemie (fruher Zeitschrift fur Elektrochemie)*, **74**, 90.

[58] Coste, J., Aris, R., and Amundson, N.R., 1961. Tubular reactor sensitivity. *AIChE J.*, **7**, 124.

[59] Subramanian, S., and Balakotaiah, V., 1996. Classification of steady-state and dynamic behavior of distributed reactor models. *Chem. Eng. Sci.*, **51**, 401-421.

[60] Kubicek, M., Hofmann H., and Hlavacek, V., 1979. Modeling of chemical reactors-XXXII. *Chem. Eng. Sci.*, **34**, 593-600.

[61] Rajadhyaksha. R.A., and Vasudeva, K., 1975. Parametric sensitivity in fixed bed reactors. *Chem. Eng. Sci.*, **30**, 1399-1408.

[62] McGreavy, C., and Soliman, M.A., 1973. Stability of tubular reactors. *AIChE J.*, **19**, 174.

[63] Bailey, J.E., and Ollis, D.F., 1987. *Biochemical Engineering Fundamentals.* Second Edition, McGraw Hill, Inc., New York.

[64] Heafner, J.W., 1996. *Modeling Biological Systems. Principles and Applications.* Chapman & Hall, New York, NY.

[65] DeVera, L.A., and Varma, A., 1979. Substrate inhibited enzyme reaction in a tubular reactor with axial dispersion. *Chem. Eng. Sci.*, **34**, 275-278.

[66] Lortie, R., and Pelletier, D., 1992. Comparison between dispersion and plug-flow models for fixed-bed enzyme reactors. *AIChE J.*, **38**, 1477.

[67] Reilly, M.J., and Schmitz, R.A., 1966. Dynamics of a tubular reactor with recycle. part 1. stability of steady state. *AIChE J.*, **12**, 1.

[68] Reilly, M.J., and Schmitz, R.A., 1967. Dynamics of a tubular reactor with recycle. part 2. nature of the transient state. *AIChE J.*, **13**, 3.

[69] **Alvarez-Ramírez, J.**, Morales, A., and Cervantes, I., 1998. Robust proportional-integral control. *Ind. Eng. Chem. Res.* **37**, 4740-4747.

[70] **Alvarez-Ramirez, J.**, Cervantes, I., Espinosa-Perez, G., Maya, P., and Morales, A., (1999) PI control configuration for DC-DC power converters. *Submitted to IEEE Trans. Circ. Syst.*

[71] Cervantes, I., **Alvarez-Ramirez, J.**, Espinosa-Perez, G., and Morales, A., (1999) Novel PID control configuration and tunning rules for the regulation of DC-DC power converters. *Submitted to IEEE Trans. Industrial Electronics.*

[72] **Alvarez-Ramirez, J., and Puebla, H.**, (1999) Control of nonlinear system with time-delay dynamics. *Submitted to Physics Letters A.*

[73] Monroy-Loperena, R., (1999) *Control Robusto de Torres de Destilación Complejas.* D.Sc. Thesis, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, in preparation.

[74] Varma, A., Georgakis, C., Amundson, N.R., and Aris, R., 1976. Computational methods for the tubular chemical reactor. *Comp. Methods in App. Mech. and Eng.*, **8**, 319.

Apéndices

0.1 A *Métodos numéricos para el reactor tubular*

En las últimas 3 decadas se han desarrollado y mejorado diversos métodos para encontrar soluciones aproximadas a las ecuaciones diferenciales parciales. Entre los métodos de aproximación, el método de diferencias finitas, el método de caraterísticas, y los métodos variacionales han dominado las aplicaciones para los problemas en ingeniería. En los últimos años el método de elemento finito, una derivación de los métodos variacionales clásicos ha ganado una popularidad considerable entre los practicantes de matemáticas aplicadas.

El método de diferencias finitas está dotado con la simplicidad de su principio (*i.e.*. la representación de las derivadas de una función, en términos de series de Taylor finitas). y la facilidad de formulación e implementación sobre computadoras digitales. Las desventajas incluyen: la dificultad en implementar las condiciones frontera sobre fronteras irregulares, y la dificultad en representar con precisión dominios irregulares.

Los métodos variacionales clásicos se basan ya sea en la minimización de una función cuadrática asociada con el problema dado, o en la minimización del error de aproximación. A pesar de su simplicidad y precisión, los métodos variacionales clásicos no se consideran competitivos con el método de diferencias finitas, debido esto a la dificultad en construir funciones de aproximación para dominios irregulares.

Método de características El uso práctico del método de características se restringe al caso donde coeficientes constantes multiplican los términos diferenciales en un conjunto de ecuaciones diferenciales hiperbólicas. Esto conduce a líneas rectas para las direcciones características. Esto permite que la ecuación diferencial parcial sea representada exactamente por una ecuación diferencial ordinaria a lo largo de la dirección característica. Para el caso unidimensional, esto reduce el problema a la aproximación por integración numérica en una dimensión (la dirección característica).

Método de colocación ortogonal La técnica de colocación ortogonal en su forma más simple fue desarrollada como una modificación de los métodos de colocación. En los métodos de colocación, los coeficientes de la expansión de las funciones prueba son típicamente determinados por principios variacionales o por métodos de residuos pesados. El método de colocación ortogonal está basado sobre la elección adecuada de series de prueba para representar la solución de las ecuaciones diferenciales parciales. Los coeficientes de las series de prueba se determinan al hacer cero la ecuación residual en un conjunto de puntos denominados "puntos de colocación", en el dominio de solución. La característica del método de colocación es que expresa las derivadas en cada punto como una combinación lineal de los valores en todos los puntos de colocación en lugar de solo los puntos vecinos como en el caso de diferencias finitas.

Por otra parte, el método de colocación ortogonal no tiene ninguna de las restricciones del método de características al considerar los coeficientes de la ecuación diferencial o la forma hiperbólica. Por ejemplo si existe un término dispersivo resulta un sistema no hiperbólico, el cual no es manejable por el análisis característico. La colocación ortogonal, sin embargo conduce a aproximaciones en el tiempo y la longitud del reactor. Como tal, se debe esperar que las soluciones sean menos precisas al método de características, el cual requiere la aproximación en una sola dimensión. Dada la severa restricción del método de características a una forma hiperbólica especial, debería preferirse el método de colocación ortogonal, a condición que la solución sea lo suficientemente precisa. Este nivel de precisión esta siempre dictado por el fin para el cual se usa el modelo. Generalmente se considera que los modelos para control son mucho más simples y menos precisos a los modelos de diseño y optimización. Además, la elección del orden de colocación es una aspecto crucial para el método de colocación, debido a

que puede introducirse oscilaciones artificiales en los perfiles dinámicos.

Método de elemento finito El método de elemento finito supera las desventajas de los métodos variacionales clásicos al buscar soluciones aproximadas sobre una colección de subdominios simples (llamados elementos) sobre los cuales las funciones de aproximación pueden generarse sistemáticamente. La colección de elementos, llamados una malla de elemento finito, reemplaza el dominio original a una precisión deseada. Los métodos variacionales, incluyendo el método de elemento finito, están basados en enunciados integrales, los cuales se obtienen al multiplicar la ecuación con una función peso e integrar sobre el dominio. Por lo tanto, no son adecuados para problemas con gradientes pronunciados o discontinuidades debido a que el método tiende a suavizar las discontinuidades, lo cual no es deseable cuando se está interesado en predecir la magnitud del gradiente.

Colocación ortogonal sobre elementos finitos La principal limitación del método de colocación ortogonal se debe a que los puntos malla se localizan en los ceros de los polinomios ortogonales y éstos no tienen una relación directa sobre el perfil global. Sin embargo, el método puede combinarse convenientemente con elementos finitos para dar un método de solución muy eficiente y flexible.

La atracción particular de la colocación ortogonal sobre elementos finitos es que los puntos de colocación pueden ser localizados en las regiones más apropiadas. Sin embargo, mientras es relativamente fácil encontrar una combinación apropiada de elementos finitos y puntos de colocación que dan buenos resultados en estado estacionario, para los sistemas dinámicos no es tan sencillo. Esto se debe al cambio de los perfiles en posición y tiempo de modo que es necesario que los elementos finitos se muevan. El aumentar el número de puntos de colocación no es una alternativa muy útil, no solamente porque aumenta el tiempo de cómputo, sino que no garantiza una mejor solución. De hecho la solución tiende a oscilar y puede no converger. Una alternativa para el problema anterior es adoptar una estrategia que re-localice los elementos finitos en el dominio espacial.

0.1.1 Método de diferencias finitas

El método de diferencias finitas trata con puntos específicos dentro un dominio, denominados puntos malla. El dominio está dividido en intervalos equidistantes, aunque tal consideración de intervalos iguales no es necesaria.

Si se supone que se tiene una función continua $\theta(x)$, al usar una expansión de Taylor se pueden deducir fórmulas en diferencias para la primer y segunda derivada involucrando solamente los valores en x_{i-1}, x_i, y x_{i+1}, donde i indica el punto malla de la discretizacion. Sea $\theta_i = \theta(x_i)$ al escribir una serie de Taylor para θ_{i+1}, y θ_{i-1} conduce a

$$\theta_{i+1} = \theta_i + \theta_i' \Delta x + \theta_i'' \frac{\Delta x^2}{2!} + \theta_i''' \frac{\Delta x^3}{3!} + ... \tag{A1}$$

$$\theta_{i-1} = \theta_i - \theta_i' \Delta x + \theta_i'' \frac{\Delta x^2}{2!} - \theta_i''' \frac{\Delta x^3}{3!} + ... \tag{A2}$$

al reordenar y dividir por Δx se obtienen dos expresiones para la primer derivada

$$\frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{\Delta x} = \theta_i' + \theta_i'' \frac{\Delta x}{2!} + ... \tag{A3}$$

$$\frac{\theta_i - \theta_{i-1}}{\Delta x} = \theta_i' - \theta_i'' \frac{\Delta x}{2!} + ... \tag{A4}$$

Cada fórmula es correcta hasta el orden de Δx. Alternativamente, se puede substraer las ecuaciones (A1), y (A2), reordenar, y dividir por Δx para obtener,

$$\frac{\theta_{i+1} - \theta_{i-1}}{2\Delta x} = \theta_i' + \theta_i''' \frac{\Delta x}{3!} + ... \tag{A5}$$

La cual es correcta hasta el orden de Δx^2. Al sumar las ecuaciones (A1), y (A2), re-arreglar, y al dividir por Δx^2 se obtiene una expresión para la segunda derivada

$$\frac{\theta_{i+1} - 2\theta_i + \theta_{i-1}}{\Delta x^2} = \theta_i'' + \theta_i'''' \frac{2\Delta x^2}{4!} + ... \tag{A6}$$

El método de diferencias finitas tiene la ventaja de su fácil formulación, sin embargo es necesario en algunos casos un elevado número de puntos malla para obtener una alta precisión.

Cuando la solución en los puntos malla se conoce, la solución en otra posición se encuentra por interpolación lineal.

Para el caso de los reactores tubulares, las ecuaciones diferenciales parciales se discretizan en la posición espacial, lo cual conduce a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (una para cada punto malla en cada variable dependiente). Estas ecuaciones pueden ser integradas por distintos métodos, por ejemplo, esquemas de integración explicita, tales como los métodos de Runge-Kutta o Euler mejorado pueden utilizarse.

0.2 B *Análisis de estabilidad (Alvarez-Ramírez et al., 1998)*

El análisis de estabilidad que se deriva en esta sección esta reportado en [69]. Como punto de partida, se denota como e_1 al error de regulación $y_{ref} - y$ y como $e_2 = \eta - \hat{\eta}$. Además, se considera lo siguiente:

1. *Las perturbaciones externas tiene una variación acotada*
2. *Las no-linealidades permanecen en un sector cónico*
3. *El signo de la ganancia de alta frecuencia se conoce*

Un modelo de primer orden lineal para una planta afectada por no-linealidades no modeladas y perturbaciones no medibles está dado por

$$\dot{e_1} = -\overline{\tau_c}^{-1} e_1 + \varphi(e, u, d) - \frac{\overline{k_p}}{\tau_o} u \tag{B1}$$

donde $\varphi(e, u, d)$ es el error de modelamiento de la planta y está dado por

$$\varphi(e, u, d) = \Delta_a e_1 + \sigma(e) + d(t) - \Delta_b u \tag{B2}$$

donde $\sigma(e)$ representa las no-linealidades, $d(t)$ las perturbaciones externas y u la entrada de control. Al definir un estado aumentado $\eta \in \mathbb{R}$ el sistema (B1) se puede escribir como

$$\dot{e_1} = -\overline{\tau_c}^{-1} e_1 + \eta - \frac{\overline{k_p}}{\tau_o} u \tag{B3}$$

la dinámica del estado aumentado está dada por

$$\dot{\eta} = \Psi(e, n, U, D) \tag{B4}$$

donde

$$\dot{\eta} = \frac{d\varphi(x, u, d)}{dt} = \left(\Delta_a + \dot{\sigma}\,(e_1)\right) \dot{e_1} - \Delta_b u' + d' \tag{B5}$$

susbtituyendo (B3) en (B5)

$$\dot{\eta} = \left(\Delta_a + \dot{\sigma}\,(e_1)\right)\left(-\overline{\tau_c}^{-1}e_1 + \eta - \frac{\overline{k_p}}{\tau_o}u\right) - \Delta_b u + d \tag{B6}$$

así,

$$\Psi(e,n,U,D) = \left(\Delta_a + \dot{\sigma}\,(e_1)\right)\left(-\overline{\tau_c}^{-1}e_1 + \eta - \frac{\overline{k_p}}{\tau_o}u\right) - \Delta_b u + d \tag{B7}$$

al tomar la derivada de u de la señal de control retroalimentada dada por la ecuación $u = \frac{\overline{\tau_o}}{k_p}\left((\tau_c^{-1} - \overline{\tau_o}^{-1})e_1 + \bar{\eta}\right)$
conduce a $\frac{\overline{k_p}}{\tau_o}\dot{u} = (\tau_c^{-1} - \overline{\tau_o}^{-1})\,\dot{e_1} + \dot{\bar{\eta}}$
la cual se puede escribir como

$$\dot{u} = \frac{\overline{\tau_o}}{k_p}\left[(\tau_c^{-1} - \overline{\tau_o}^{-1})\left(-\overline{\tau_c}^{-1}e_1 + \eta - \frac{\overline{k_p}}{\tau_o}u\right) + \tau_e^{-1}e_2\right] \tag{B8}$$

entonces la ecuación (B7) se puede escribir como:

$$\begin{aligned}\Psi(e,n,D) \;=\; & \left(\Delta_a + \dot{\sigma}\,(e_1)\right)\left(-\overline{\tau_c}^{-1}e_1 + \eta - \frac{\overline{k_p}}{\tau_o}u\right) - \\ & \Delta_b\frac{\overline{\tau_o}}{k_p}\left[(\tau_c^{-1} - \overline{\tau_o}^{-1})\left(-\overline{\tau_c}^{-1}e_1 + \eta - \frac{\overline{k_p}}{\tau_o}u\right) + \tau_e^{-1}e_2\right] + d\end{aligned} \tag{B9}$$

en términos de e_1, e_2, y D

$$\Psi(e_1,e_2,D) = -\Delta_b\frac{\overline{\tau_o}}{k_p}\left[\tau_e^{-1}e_2\right] + \Xi(e_1,e_2) + d \tag{B10}$$

donde

$$\Xi(e_1,e_2) = \left[\Delta_a + \dot{\sigma}\,(e_1) - \Delta_b\frac{\overline{\tau_o}}{k_p}(\tau_c^{-1} - \overline{\tau_o}^{-1})\right](-\tau_c^{-1}e_1 + e_2) \tag{B11}$$

el término $-\Delta_b\frac{\overline{\tau_o}}{k_p}\left[\tau_e^{-1}e_2\right]$ refleja el efecto retroalimentado inducido por la incertidumbre relacionada a la entrada $\Delta_b u$.

La dinámica del error de reconstrucción se puede obtener con $\dot{\eta} = \Psi(e,\eta,D,U)$ y $\dot{\bar{\eta}} = \tau_e^{-1}e_2$ como

$$\dot{e}_2 = -\frac{k_p}{\tau_o}\left(\frac{\overline{\tau_o}}{\overline{k_p}}\right)\tau_e^{-1}e_2 + \Xi(e_1, e_2) + d' \tag{B12}$$

El sistema a lazo cerrado, se puede escribir como:

$$\dot{e}_1 = -\tau_c^{-1}e_1 + e_2 \tag{B13}$$

$$\dot{e}_2 = -\tau_e^{-1}\mu e_2 + \Xi(e_1, e_2) + d' \tag{B14}$$

donde $\mu = \frac{k_p}{\tau_o}\left(\frac{\overline{\tau_o}}{\overline{k_p}}\right)$

En virtud de la Consideración 3 que como el $signo\frac{k_p}{\tau_o} = signo\frac{\overline{k_p}}{\overline{\tau_o}}$ la dinámica nominal $\dot{e}_2 = -\tau_e^{-1}\mu e_2$ es exponencialmente estable.

Por otra parte, de la Consideración 2 que la clase de no linealidades no modeladas incluye funciones en secciones tipo conicas, *i.e.*, $\|\sigma(e_1)\| \leq \gamma_2 \|e_1\| + \gamma_3$ y de la Consideración 1, la ecuación (B11) toma la forma

$$\begin{aligned}\|\Xi(e_1, e_2)\| \quad \leq \quad & \tau_c^{-1}\|e_1\|\|\Delta_a\| + \tau_c^{-1}\|e_1\|\gamma_1 + \tau_c^{-1}\|e_1\|\left\|\frac{\Delta_b}{\overline{b}}(\tau_c^{-1} - \overline{\tau_o}^{-1})\right\| + \|e_2\|\|\Delta_a\| + \|e_2\|\gamma_1 \\ & + \|e_2\|\left\|\frac{\Delta_b}{\overline{b}}(\tau_c^{-1} - \overline{\tau_o}^{-1})\right\|\end{aligned} \tag{B15}$$

La ecuación (B15) se puede re-escribir como

$$\|\Xi(e_1, e_2)\| \leq \lambda_1\|e_1\| + \lambda_2\|e_2\| \tag{B16}$$

al definir los términos

$\lambda_1 = \tau_c^{-1}\left\{\|\Delta_a\| + \gamma_1 + \left\|\frac{\Delta_b}{\overline{b}}(\tau_c^{-1} - \overline{\tau_o}^{-1})\right\|\right\}$

$\lambda_2 = \tau_c\lambda_1$

Como λ_1 y λ_2 son independientes de τ_e, al designar un desempeño a lazo cerrado a través de τ_c, el controlador tiene un parámetro ajustable simple τ_e, el cual se usa para lograr la estabilidad a lazo cerrado.

Proponiendo la función candidato de Lyapunov

$$V(x,e) = \frac{{e_1}^2 + e_2^2}{2} \tag{B17}$$

está claro que esta función tiene derivadas continuas con respecto a e_1, y e_2, y que es positiva definida. decreciente, y acotada. Tomando la derivada $\dot{V}(e_1, e_2)$ a lo largo de las trayectorias del sistema a lazo cerrado conduce a

$$\dot{V} = -\tau_c^{-1} e_1^2 - \tau_e^{-1} \mu e_2^2 + e_1 e_2 + e(\Xi(e_1, e_2) + d^1) \tag{B18}$$

substituyendo (B16) en (B18), tomando la norma euclidiana y con la desigualdad de Shwartz y la del triángulo, se obtiene el siguiente criterio de estabilidad

$$\dot{V} \leq -\tau_c^{-1} \|e_1\|^2 - (\tau_e^{-1}\mu - \lambda_2) \|e_2\|^2 + (1 + \lambda_1) \|e_1\| \|e_2\| + \delta_2 \|e_2\| \tag{B19}$$

La idea de la prueba consiste en fijar el desempeño a lazo cerrado vía la constante de tiempo a lazo cerrado $\tau_c > 0$ y sintonizar la constante de tiempo de estimación $\tau_e > 0$ para lograr la estabilidad a lazo cerrado.

0.3 C *Notación*

0.3.1 Reactor tubular biológico de cama fija

Notación

A Área de la sección transversal, m^2

F Velocidad de flujo volumétrico, m^3/h

$\overline{F}$ Velocidad de flujo nominal, m^3/h

k_1 Coeficiente de producción

k_c Constante de Contois

k_d Coeficiente de degradación, h^{-1}

k_p Ganancia en estado estacionario, $gDQOh/m^3l$

S Concentración de substrato, $gDQO/l$

S_{in} Concentración de substrato de entrada, $gDQO/l$

S_o Concentración inicial de substrato, $gDQO/l$

S_{ref} Concentración de referencia del substrato, $gDQO/l$

$\overline{S}$ Concentración nominal de substrato, $gDQO/l$

t Tiempo, h

u Entrada de control

w Concentración de biomasa en la posición $Z = 1m$

X Concentración de biomasa, sólidos volátiles suspendidos (VSS)

X_d Concentración de biomasa desactivada, (VSS)

X_o Concentración inicial de biomasa, (VSS)

y Concentración de substrato en la posición $Z = 1m$

z Variable espacial, m

Z Longitud del reactor, m

Letras Griegas

β Estimado del término convectivo, $gDQO/lm$

μ Rapidez específica de crecimiento, h^{-1}

$\mu_{\max}$ Rapidez específica de crecimiento máxima, h^{-1}

0.3.2 Reactor tubular con dispersión axial

Notación

B Aumento de temperatura adiabática, adimensional

c Concentración

c_o Concentración de alimentación

C_{pf} Capacidad calorífica de la fase fluida

C_{ps} Capacidad calorífica de la fase solida

d_r Diámetro del reactor

Da Número de Damkohler

D_L Coeficiente de dispersión longitudinal

E_A Energía de activación

k_o Factor pre-exponencial

k_L Coeficiente de conducción térmica longitudinal

l Longitud del reactor

Le Número de Lewis

Pe_1 Número de Peclet para la dispersión de masa

Pe_2 Número de Peclet para la dispersión de calor

R Constante universal de los gases

t' Tiempo

t Tiempo adimensional

T Temperatura

T_w Temperatura de la pared del reactor

T_o Temperatura de alimentación

U_w Coeficiente de transferencia de calor

v_z Velocidad del gas

x_1 Conversión

x_2 Temperatura adimensional

x_{2w} Temperatura de pared adimensional

z' Coordenada longitudinal

z Coordenada longitudinal adimensional

Letras Griegas

β Coeficiente de transferencia de calor adimensional

γ Energía de activación adimensional

ΔH Entalpia de reacción

ϵ_p Porosidad de cama

ρ_f Densidad de la fase fluida

ρ_s Densidad de la fase solida

0.3.3 Reactor tubular con reciclo

Notación

C Concentración del componente A, $kmol/m^3$

Da Número de Damkohler

f Fracción de reciclo

n Orden de reacción

T Temperatura, K

Letras Griegas

α Concentración adimensional, $\left(\frac{C_{o^*}-C}{C_{o^*}}\right)$

β Número adimensional relacionado al aumento de temperatura adibático

γ Energía de activación adimensional

δ Coeficiente de transferencia de calor adimensional

θ Temperatura adimensional, $\left(\frac{T-T_{o^*}}{\beta T_{o^*}}\right)$

ξ Coordenada de posición adimensional a lo largo del reactor

τ Tiempo adimensional

Subíndices

H Intercambio de calor

0 Condicion de alimentación

0^* Condicion de alimentación nominal

0.3.4 Reactores heterogéneos

Notación

a Área transversal del reactor cilíndrico

A_j Especies químicas

a_j Coeficiente estequiometrico en una reacción química

a_v Área de empacado por unidad de volumen del empacado del reactor

c_j Concentración de A_j en el fluido intrapartícula

C_j Concentración de A_j en el fluido intersticial

C_{pj} Capacidad calorífica molar de A_j

c_f Calor específico del fluido intersticial

c_s Calor específico de la partícula catalítica

C_{pjn} Capacidad calorífica molar de A_j en la $n-esima$ celda

C_{jin} Concentración inicial de A_j (en $\theta = 0$) en el fluido intersticial

c_{jin} Concentración inicial de A_j (en $\theta = 0$) en el fluido intrapartícula

C^{in} Concentración de entrada de A_j en $x = 0$

C_{jn} Concentración de A_j en la $n-ésima$ celda

D_a Dispersividad axial (difusividad) en el fluido intersticial

D_ρ Dispersividad radial (difusividad) en el fluido intersticial

D_j Coeficiente de difusión de A_j en el fluido intrapartícula

E^* Energía libre molar de A_j corregida por la energía de transporte

f_j Velocidad de reacción en moles de A_j, producidos por unidad de tiempo por unidad de área

f Velocidad de reacción intrínseca

h Coeficiente de transferencia de calor en la superficie catalítica

$\widehat{H}_j$ Entalpía molar parcial de A_j

$\widehat{H}_{jT}$ Entalpía molar parcial de A_j a la temperatura T

$\widehat{H}^*_{jT}$ Entalpía molar parcial corregida por el calor de transporte

k_{gj} Coeficiente de transferencia de masa para la $j-esima$ especies de A_j

K_ρ Dispersividad radial en el fluido intersticial para el calor

K_ρ Dispersividad axial en el fluido intersticial para el calor

l Longitud del reactor

P Perímetro del reactor= $2\pi S$

r Variable radial en la partícula catalítica

s Radio de la partícula catalítica

S Radio del reactor (cilíndrico)

S_g Área superficial catalítica por gramo de catalizador

T Temperatura del fluido intersticial

t Temperatura intrapartícula

T^{in} Temperatura de entrada del fluido

T_{in} Temperatura inicial del fluido intersticial

t_{in} Temperatura inicial de la partícula

u Velocidad del fluido intersticial

U Coeficiente de transferencia de calor global a la pared del reactor

x Variable espacial axial

Letras Griegas

α Fracción de huecos en la partícula catalítica

γ Fracción de huecos en el reactor

ρ Variable espacial radial en el reactor

ρ_f Densidad del fluido intersticial

ρ_s Densidad de la partícula catalítica

θ Variable del tiempo

σ Constante de Boltzman

ΔH_T Calor de reacción

ΔH_j Calor de reacción basado sobre un mol de A_j