



DINÁMICA Y CONTROL
DE UNA CLASE DE SEPARADORES FLASH REACTIVOS
TESIS QUE PRESENTA
ANTONIO VELÁZQUEZ RAMÍREZ
PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS (INGENIERÍA QUÍMICA)

Asesor: Dr. Jesús Álvarez Calderón

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

14 de diciembre de 2012

Resumen

En este trabajo se estudia la dinámica de una unidad flash reactivo y se diseña su control. Se alimenta un reactante ligero que reacciona dando efluente líquido rico en el producto pesado y efluente vapor rico en reactante. Las salidas a regular son el acumulado de masa reaccionante y la temperatura y las entradas de control son el flujo volumétrico del efluente líquido y la tasa de inyección de calor. Primero se caracteriza la dinámica y estática del proceso en términos de multiplicidad, estabilidad, operación óptima (máxima producción de producto pesado) y estructura variable (líquido reaccionante en ebullición, líquido con reacción y sin ebullición y vaporización total). Luego se diseña un esquema de control multivariable para regular dos salidas medidas (temperatura y el nivel de líquido) manipulando dos entradas de control (inyección de calor y extracción de líquido) de tal suerte que el sistema tenga como atractor robusto el estado estacionario óptimo (que puede ser localmente estable pero no robustamente estable). El control accionado por las salidas medidas: (i) consiste de dos lazos PI saturados y (ii) recupera (con convergencia de observador) el comportamiento de un control robusto pasivo no-lineal construido con base en el modelo detallado de la unidad. La metodología se ilustra y prueba con un caso de estudio representativo y simulaciones numéricas.

Agradecimientos

Gracias al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo otorgado para la realización de esta tesis

Gracias al Instituto de Ciencia y Tecnología del Distrito Federal (ICyT-DF) y a la Universidad Autónoma Metropolitana por el apoyo económico para concluir este trabajo de tesis

Agradecimientos

A mis padres Carmen y Lucino y a mi hermano Lucino, por su respaldo y cariño siempre presentes

A mi asesor Dr. Jesús Álvarez Calderón, gracias por su dedicación a este trabajo, por todos sus consejos y recomendaciones, y por compartir parte de su conocimiento conmigo

A Azaly, por todo su cariño y apoyo incondicional

A todos mis amigos, familia y amigos-familia del GTIIQ

Índice

Capítulo 1.- Introducción.....	1
1.1.-El Proceso de Destilación Reactiva (DR).....	1
1.2.-Motivación.....	3
1.3.-Justificación	3
1.4.-Objetivos.....	4
Objetivo General.....	4
Objetivos particulares	5
1.5.-Organización de la tesis.....	5
Capítulo 2.- Problema de control.....	7
2.1.-El separador reactivo	7
2.1.1.-Régimen de vaporización parcial	11
2.1.2.-Régimen sin vaporización	15
2.1.3.-Régimen de vaporización total	16
2.2.- El problema de control.....	17
Capítulo 3.-Operación óptima	19
3.1.-Función de beneficio económico	19
3.2.-Restricciones.....	21
3.3.-Par estado-entrada óptimo	22
3.4.-Multiplicidad	25
3.4.1.-Multiplicidad del par estado óptimo.....	26
3.4.2.-Dependencia de la multiplicidad con la entrada.....	27
3.5.-Conclusiones.....	31

Capítulo 4.- Dinámica a lazo abierto del proceso	33
4.1.-Dinámica frente a modelado convencional.....	33
4.2.-Estabilidad	36
4.3.-Simulaciones a lazo abierto del régimen de vaporización parcial	38
4.4.- La tarea del control	42
4.5.-Conclusiones.....	43
Capítulo 5.-Control por retroalimentación de estados (RE)	44
5.1.- Condición de resolubilidad	45
5.2.-Control por retroalimentación de estados	48
5.3.-Saturación del control.....	52
5.5.-Conclusiones.....	57
Capítulo 6.-Control por retroalimentación de salidas (RS).....	59
6.1.-Dinámica de las salidas.....	59
6.2.- Diseño del modelo	60
6.3.-Observador de orden reducido.....	61
6.4.-Control por retroalimentación de salidas y conexión con control PI.....	63
6.5.-Prueba de robustez.....	69
6.6.-Conclusiones.....	70
Capítulo 7.-Conclusiones y trabajo futuro.....	73
7.1.-Conclusiones.....	73
7.2.-Trabajo futuro.....	74

Referencias	75
--------------------------	----

Apéndice	79
-----------------------	----

A1.-Parámetros del caso de estudio	79
--	----

A2.-Funciones de punto de burbuja	80
---	----

Índice de Figuras

Figura 1. 1.-Esquema de destilación reactiva vs proceso convencional.....	2
Figura 2. 1.-Esquema de los tres modos de operación del separador flash reactivo	9
Figura 2. 2.-Esquema del régimen de vaporización parcial	11
Figura 2. 3.-Esquema del régimen sin vaporización	15
Figura 2. 4.-Esquema del régimen de vaporización total	16
Figura 2. 5.-Esquema de control propuesto.....	18
Figura 3. 1.- Espacio de estados c-M mostrando la restricción de vaporización parcial.....	23
Figura 3. 2.-Función beneficio económico $\pi(c,m)$ en función del par estado c-M	24
Figura 3. 3.- Estados estacionarios para el par entrada óptimo en el plano c-M.....	27
Figura 3. 4.-Dependencia del par estado con el par entrada.....	28
Figura 3. 5.-Vistas de la dependencia del estado M con el par entrada	28
Figura 3. 6.- Proyección de la curva de bifurcación en el plano Q-q	30
Figura 3. 7.-Mapa de bifurcación	30
Figura 4. 1.- ψ^{\odot}	34
Figura 4. 2.-Comparación de la dinámica rigurosa con la aproximación de EQE	35
Figura 4. 3.-Determinante de J en función de c y M sobre la zona factible	37
Figura 4. 4.-Traza de J en función de c y M sobre la zona factible.....	37
Figura 4. 5.-Proyección sobre el plano c-M la condición de $\text{tr } J=0$	38
Figura 4. 6.- Trayectorias en el plano fase para distintas condiciones iniciales.....	40
Figura 4. 7.-Vectores propios alrededor del punto óptimo.....	40
Figura 4. 8.- Topología aproximada del sistema	41
Figura 4. 9.-Efecto deseado del control en la topología del sistema	43
Figura 5. 1.- Acción del control por retro de estados sobre los estados c y M.....	51
Figura 5. 2.- Trayectorias en el plano fase bajo la acción del control por retro de estados.....	51

Figura 5. 3.- Esfuerzo de las entradas de control Q y q para distintas condiciones iniciales	52
Figura 5. 4.-Elección de los límites de saturación.....	54
Figura 5. 5.-División del plano fase como efecto de la saturación del control	55
Figura 5. 6.-División del plano fase mostrando zonas de saturación y no saturación.....	55
Figura 5. 7.-Dinámica a lazo cerrado con control saturado por retro de estados	56
Figura 5. 8.-Esfuerzos del control por retro de estados bajo saturación.....	56
Figura 5. 9.-Dinámica a lazo cerrado con control por RE saturado en el plano fase C-M.....	57
Figura 5. 10.-a) Elección de los límites violando el criterio de saturación, b) Dinámica a lazo cerrado resultante	57
Figura 6. 1.-Dinámica a lazo cerrado con CRS para distintas condiciones iniciales	67
Figura 6. 2.-Esfuerzos de control correspondientes a las simulaciones de la Figura 6.1	67
Figura 6. 3.-Dinámica a lazo cerrado con CRS.....	68
Figura 6. 4.-Dinámica del separador flash reactivo: a) Lazo abierto y b) Lazo cerrado	68
Figura 6. 5.- Perturbaciones en los parámetros de entrada T_e , c_e y q_e	69
Figura 6. 6.-Respuesta a perturbaciones en los parámetros de entrada	70

Capítulo 1.- Introducción

1.1.-El Proceso de Destilación Reactiva (DR)

El objetivo típico de cualquier proceso industrial es la obtención de un producto de alto valor agregado con la mayor pureza posible. En el enfoque tradicional de procesos la reacción y purificación se llevan a cabo de manera secuencial. La integración de los procesos de reacción y separación en uno solo es una idea antigua que ha cobrado mayor atención en los últimos años, particularmente el caso de la DR.

La DR es una alternativa atractiva para un esquema convencional de reacción-separación, pues en este proceso se aprovecha una diferencia de volatilidad entre reactivos y productos para llevar a cabo la separación *in situ*. Esto tiene como consecuencia una importante reducción tanto en gastos de operación como en inversión y mantenimiento ya que el número y tamaño de equipos puede reducirse de manera dramática. La DR permite utilizar características de la reacción para mejorar la separación, o de manera alterna, propiedades de la separación para mejorar el proceso de reacción. Entre las ventajas más sobresalientes de la destilación reactiva se pueden mencionar las siguientes:

- Se pueden superar limitaciones impuestas por el equilibrio químico pueden superarse debido a que existe una separación *in situ* que desplaza el equilibrio hacia altas concentraciones de producto, lo cual se traduce en mayor selectividad y conversión
- El gasto energético es menor ya que es posible aprovechar la energía liberada por reacciones exotérmicas para mantener al sistema en ebullición
- Debido a la diferencia de volatilidad entre reactivos y productos es posible obtener una alta pureza de producto
- Se reducen los costos de operación e inversión relativos a equipo

Uno de los casos más exitosos de DR es el proceso desarrollado por Eastman Kodak (1) para la producción de metil-acetato de alta pureza en el cual se sustituyó un reactor junto con un tren de separación de alrededor de 9 equipos por una sola columna de destilación reactiva (2) (ver Figura 1.1).

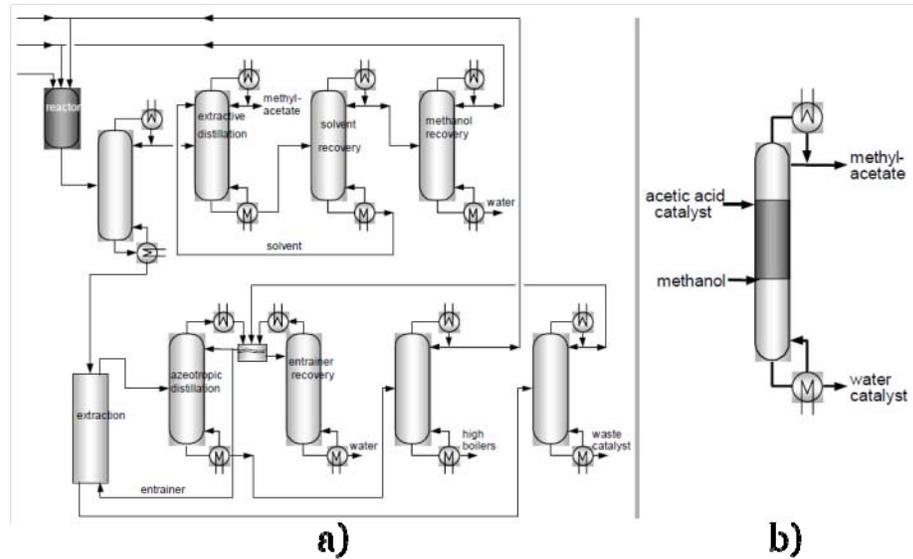


Figura 1. 1.-Proceso para la producción de metil-acetato. a)Proceso tradicional, b)Proceso de destilación reactiva. (Imagen tomada de (2))

A pesar de que la DR presenta múltiples ventajas, existen también diversas restricciones, limitaciones y desventajas, como por ejemplo:

- Debe existir una diferencia significativa en la volatilidad de reactivos y productos
- La reacción debe llevarse a cabo preferentemente en la fase líquida
- El uso de catalizadores homogéneos requiere un paso adicional de separación para recuperar el catalizador
- Las condiciones óptimas de separación deben coincidir con las condiciones óptimas de la reacción
- No se puede aplicar a reacciones que generan sólidos
- Sistemas que involucran azeótropos no presentan mejoras sobre procesos tradicionales

Como es de esperarse la DR no es una solución universal y su aplicación está limitada a un número reducido de casos previo estudio de factibilidad. Entre los casos exitosos se encuentran procesos que involucran isomerización, eterificación, esterificación, hidrodesulfuración, hidrogenación selectiva. La interacción de reacción con separación por destilación, que involucra equilibrio líquido vapor tiene como resultado que los modelos que describen la DR sean altamente no-lineales. Esto es de especial atractivo para su estudio dinámico así como para el diseño del control.

A pesar del incremento de publicaciones relacionadas con la DR (3), un porcentaje mayoritario está relacionado al modelado y a la operación en estado estacionario, siendo menor el número de publicaciones acerca de dinámica y control de DR. Esto es relevante tomando en cuenta que diversos autores como (3), (4), (5), que han reportado fenómenos significativos como multiplicidad de entradas o salidas, ciclos límite e inestabilidad.

1.2.-Motivación

Un número significativo de procesos industriales pueden clasificarse como sistemas distribuidos, es decir que los estados del sistema dependen no solo del tiempo sino de una o más variables espaciales siendo representados por medio de ecuaciones diferenciales parciales (7). Recientemente se ha abordado el caso de un reactor tubular exotérmico (8) mostrando que es posible modelarlo como un tren de reactores continuos de tanque agitado (RCTA) cuyo modelo corresponde a ecuaciones diferenciales ordinarias. Dado que hay ventajas significativas al trabajar con ecuaciones diferenciales ordinarias en lugar de ecuaciones diferenciales parciales, se prefiere un modelo simplificado sobre el modelo riguroso cuando aquel captura las características esenciales del proceso con un número reducido de tanques (9).

Existe una motivación de largo alcance para este trabajo que consiste en considerar que de manera análoga al reactor tubular, una columna de destilación (10), así como una columna de destilación reactiva pueden modelarse como un sistema distribuido mediante ecuaciones diferenciales parciales. Esto hace factible aplicar el mismo enfoque para descomponer el modelo de alto orden dinámico en una secuencia de unidades más simples, en este caso separadores flash o separadores flash reactivos respectivamente los cuales son de bajo orden dinámico. Es posible entonces, a partir de una secuencia de separadores flash reactivos, estudiar la dinámica y estática de una columna de destilación reactiva para propósitos de observación y control.

La motivación inmediata o de corto alcance es que el estudio de la dinámica así como el diseño del control para un separador flash reactivo es un paso fundamental para el modelado, observación y control de columnas de destilación reactiva.

1.3.-Justificación

El proceso de DR presenta fenómenos como multiplicidad y estabilidad en su operación a lazo abierto, el diseño de un control adecuado requiere un estudio cuidadoso de la estática y dinámica del sistema. El estudio del comportamiento dinámico y estático de un separador flash reactivo es relevante dado que este es el caso más simple que retiene la esencia de un proceso de DR. A pesar de que existe numerosa literatura relativa a la dinámica y control de columnas de DR (11), (12), (13), el esfuerzo dedicado al estudio de separadores flash reactivos es significativamente menor.

Dentro de la literatura revisada no se encontró un modelo que tome en cuenta el nivel de líquido como una variable dinámica, siendo esto importante al considerar que cambios bruscos en los parámetros del sistema como las condiciones de alimentación o el tiempo de residencia pueden provocar la evaporación total de la fase líquida o bien provocar que el sistema deje de estar en ebullición. El estudio cuidadoso de la dinámica de un separador flash reactivo así como el diseño de un control que garantice su operación estable y robusta frente a perturbaciones es un paso indispensable para el modelado, monitoreo y control de un proceso de DR con mayor nivel de complejidad tal como una columna de DR.

1.4.-Objetivos

El objetivo general y los objetivos particulares son los siguientes;

Objetivo General

Diseñar un esquema de control multivariable que: (i) manipule dos entradas de control (inyección de calor y flujo de salida de líquido) para regular dos salidas medidas (temperatura y volumen de líquido) alrededor de valores nominales que correspondan a una operación estática óptima en el sentido de máximo beneficio económico y (ii) garantice que el estado estacionario óptimo sea un atractor robustamente estable del sistema a lazo cerrado.

Objetivos particulares

- Determinar las condiciones de operación óptima respecto a una función objetivo de tipo beneficio económico
- Diseñar un controlador robusto no lineal por retroalimentación de estados
- Recuperar el control no lineal por retro de estados mediante un control PI basándose en propiedades de pasividad y observabilidad
- Establecer criterios para la saturación del controlador que garanticen operación estable y robusta a lazo cerrado alrededor del punto óptimo

1.5.-Organización de la tesis

A continuación se reseña de manera breve el contenido de este trabajo de tesis. En el Capítulo 2 (Planteamiento del problema de control) se describe el separador flash reactivo mencionando los tres regímenes posibles de operación y enunciando sus características principales, a continuación se formula el problema de control de manera conceptual.

En el Capítulo 3 (Operación óptima) se determina el punto óptimo de operación respecto a una función objetivo proporcional a la generación de producto y que castiga el uso de materia prima y el gasto de energía. Se caracteriza la estática del punto óptimo concluyendo que presenta multiplicidad.

La dinámica a lazo abierto se muestra en el Capítulo 4 mostrando la inestabilidad y multiplicidad del punto óptimo mediante simulaciones y argumentos topológicos. Para, se retoma la formulación del problema de control ahora de manera técnica y se establece el límite máximo alcanzable por el control.

El Capítulo 5 muestra el diseño del control por retroalimentación de estados. Primero se identifican las condiciones de resolubilidad mostrando que el problema tiene solución en base a pasividad. Luego se construye un control no-lineal por retroalimentación de estados y se establece un criterio de saturación que asegura la no existencia de atractores extraños.

En el Capítulo 6 se realiza el control por retroalimentación de salidas. Mediante propiedades de pasividad o observabilidad se diseña un control lineal desacoplado, que recupera el comportamiento del control no-lineal robusto basado en modelo detallado. El control resultante garantiza la operación robusta estable alrededor del punto óptimo de operación.

Finalmente el Capítulo 7 muestra las conclusiones derivadas de este trabajo y una perspectiva sobre el trabajo a realizarse como continuación del tema.

Capítulo 2.- Problema de control

Resumen

En este capítulo se plantea el problema de control de un proceso representativo que, siendo relativamente simple:

- (i) Captura partes fundamentales que subyacen tanto en separadores flash reactivos en particular como en columnas de destilación reactiva en general*
- (ii) Tiene asociado un problema complejo de control saturado con dos salidas medidas y dos acciones de control que toman valores dentro de ciertos límites.*

El problema de control consiste en diseñar un esquema multivariable acotado que:

- (i) Manipule dos entradas de control (inyección de calor y flujo de salida de líquido) para regular dos salidas medidas (temperatura y volumen de líquido) alrededor de valores nominales que correspondan a una operación estática óptima en el sentido de máximo beneficio económico.*
- (ii) Garantice que el estado estacionario óptimo sea un atractor robustamente estable del sistema a lazo cerrado.*

La complejidad del problema de control reside en que:

- (i) El separador reactivo tiene un comportamiento no-lineal (multiplicidad y bifurcación respecto a la entrada de control*
- (ii) Como se verá, la operación óptima es inestable a lazo abierto y acompañada de dos estados estacionarios estables,*
- (iii) Lo anterior significa la posibilidad de generar, debido a la saturación, uno o dos atractores extraños a lazo cerrado.*

2.1.-El separador reactivo

El separador reactivo corresponde al caso más simple de separación por equilibrio líquido-vapor (ELV) (1) y su entendimiento es una piedra angular para la comprensión de sistemas de separación de mayor complejidad. De manera análoga el separador flash reactivo es el caso base para la comprensión de un sistema de destilación reactiva.

Capítulo 2.- Problema de control

El proceso consiste en un reactor no isotérmico, no adiabático que opera a presión constante. Al reactor se alimenta una corriente de reactante para llevar a cabo una reacción en fase líquida, siendo el producto generado menos volátil en comparación con el reactante alimentado. El reactor tiene una fuente de calor (Q) mediante la cual se inyecta la energía necesaria para que la fase líquida alcance condiciones de ebullición. La separación se lleva a cabo al generarse una fase vapor, conteniendo esta una mayor concentración del reactante (que puede recircularse) y siendo la fase líquida más rica en producto (con una baja concentración de reactante).

Los balances dinámicos de calor y masa determinan la dinámica del sistema. En el caso de reacción con ebullición dichos balances no son independientes debido a que la temperatura de ebullición y la concentración están estáticamente relacionadas mediante la ecuación de punto de burbuja. El caso de reacción sin ebullición corresponde al caso estándar y bien estudiado en que los balances dinámicos de masa y calor son independientes.

La operación del reactor con o sin ebullición depende del valor de la inyección de calor (Q) en relación a dos valores de referencia: (i) el calor mínimo de ebullición (Q_{eb}) y (ii) el calor de vaporización total (Q_{vap}).

El calor mínimo de ebullición es el flujo de calor neto inyectado al sistema necesario para llevarlo al punto de ebullición con las siguientes contribuciones: (i) requerimiento (positivo) calórico para que la corriente de entrada alcance su temperatura de ebullición y (ii) suministro de calor (negativo) al líquido por reacción química. El calor de vaporización total es la suma del calor mínimo de ebullición más el calor necesario para vaporizar totalmente la corriente de alimentación.

Cuando la inyección de calor supera al calor mínimo de ebullición, se genera vapor con una tasa proporcional a la diferencia (positiva) de flujo de calor inyectado menos calor mínimo de ebullición. En este caso la mezcla líquida reaccionante funciona simultáneamente como reactor y separador.

$$Q > Q_{eb} \quad (2.1)$$

Cuando la inyección de calor es inferior o igual al calor mínimo de ebullición, no se genera vapor. En este caso el recipiente con mezcla líquida reaccionante funciona solamente como reactor.

$$Q \leq Q_{eb} \quad (2.2)$$

Cuando la inyección de calor supera al calor de vaporización total la fase líquida desaparece asintóticamente con una velocidad proporcional a la diferencia entre calor inyectado menos requerido para la vaporización completa del líquido.

$$Q > Q_{\text{vap}} \quad (2.3)$$

De acuerdo a lo anterior existen tres regímenes posibles dependiendo de la magnitud de la inyección de calor:

- Régimen de vaporización parcial (dos fases que corresponden a vapor y líquido)
- Régimen sin vaporización (una sola fase en estado líquido)
- Régimen de vaporización total (una sola fase en estado vapor)

El régimen de operación de manera esquemática se presenta en la siguiente figura

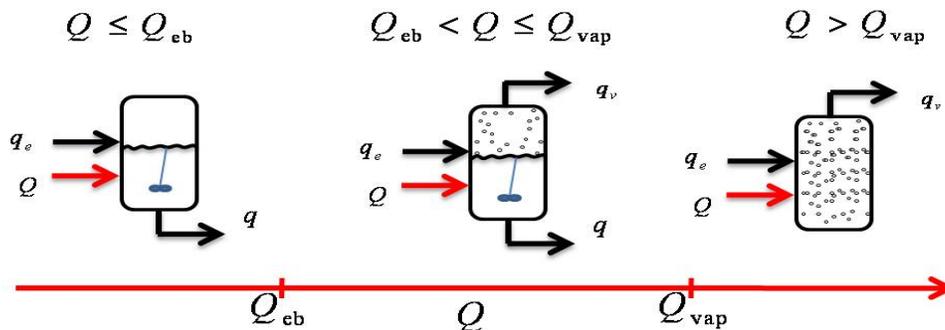


Figura 2. 1.-Esquema de los tres modos de operación del separador flash reactivo

Dentro de la literatura revisada, se encontraron distintos enfoques para el modelado del separador flash reactivo. Los más relevantes se presentan a continuación con una pequeña descripción

- Bildea *et al* (2),(3)

Se presenta el modelo de un sistema binario, no isotérmico, no adiabático a presión y acumulado molar líquido constante con una reacción exotérmica irreversible de primer orden. El trabajo incluye el análisis del comportamiento estático a lazo abierto mostrando multiplicidad. El modelo presenta zonas de infactibilidad que corresponden a cero vaporización o vaporización total.

- Malone *et al* (4),(5)

El modelo mostrado corresponde a un sistema no isotérmico, adiabático a presión y acumulado molar líquido constante con una reacción exotérmica irreversible de primer orden. El análisis de la estática a lazo abierto se realiza para sistemas binarios y ternarios mostrando multiplicidad, la caracterización de la estática se completa para una de las regiones infactibles (régimen sin vaporización) como un reactor continuo de tanque agitado

- Kienle et al (6)

El modelo presentado consiste en un sistema binario, isotérmico, a presión y acumulado molar constante con una reacción exotérmica irreversible y tres casos: cero, primer y segundo orden. Se analiza la estática a lazo abierto mostrando multiplicidad para dos casos. A diferencia de los dos modelos anteriores, no se menciona la existencia de zonas infactibles.

Es importante resaltar que de los modelos existentes, solo los presentados por Malone y Kienle mencionan la existencia de zonas donde el modelo es infactible (sin vaporización y vaporización total) y solo Malone genera una solución para predecir el comportamiento en la zona sin vaporización, modelando dicha zona como un reactor continuo de tanque agitado (RCTA). Los tres modelos asumen un acumulado molar líquido constante a pesar de que la variación del nivel de líquido es una situación común, en la práctica se debe tener especial cuidado en mantener el nivel de líquido para mantener al sistema en el régimen de vaporización parcial.

El modelo con el que se trabaja en esta tesis consiste en un esquema de estructura variable con énfasis en el régimen de vaporización parcial completando las zonas infactibles como un RCTA para el régimen sin vaporización y como un vaporizador para el régimen de vaporización total, con las siguientes características:

- Sistema binario donde el componente ligero es el reactivo y el componente pesado el producto de interés
- Se asume que el sistema se mantiene a presión constante
- El sistema es no-isotérmico y no-adiabático
- Reacción irreversible exotérmica de primer orden



- La reacción solo se lleva a cabo en la fase líquida
- La velocidad de reacción obedece a la siguiente expresión

$$\alpha(c, T) = ck_0 e^{\frac{-E}{T}} \quad (2.5)$$

Las propiedades del sistema como capacidad calorífica y calor de vaporización se consideran como promedio al suponer que no existe una diferencia significativa entre ambos componentes

$$c_{p1} \approx c_{p2}, \quad \lambda_{v1} \approx \lambda_{v2}$$

Se desprecian los cambios de estas propiedades respecto a la temperatura al considerar que en el intervalo de temperatura en que opera el sistema su variación puede suponerse insignificante por lo cual se asumen constantes

$$\frac{dc_p}{dT} \approx 0, \quad \frac{d\lambda_v}{dT} \approx 0$$

Los parámetros del sistema se tomaron del trabajo de Bildea (3) y Malone(5), y se muestran en el Apéndice 1a.

2.1.1.-Régimen de vaporización parcial

El sistema consiste en un reactor con fase líquida en ebullición. La fase líquida dentro del reactor se encuentra en equilibrio con la fase vapor generada por el calor inyectado. Debido a una diferencia en la volatilidad de los componentes se produce una separación enriqueciéndose la fase vapor en el componente ligero mientras el componente pesado se concentra en la fase líquida. En este sistema la temperatura y la concentración de volátil en el vapor son funciones de la concentración de volátil en la fase líquida por medio de un cálculo de punto de burbuja, los desarrollos de los cálculos de equilibrio líquido vapor se muestran en el Apéndice 1b.

$$T = \beta(c) \tag{2.6a}$$

$$c_v = v(c) \tag{2.6b}$$

Donde T es la temperatura del sistema, c_v es la concentración del componente volátil en la fase vapor y c es la concentración de volátil en la fase líquida.

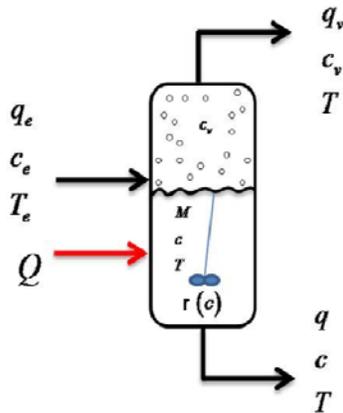


Figura 2. 2.-Esquema del régimen de vaporización parcial

El sistema cuenta con una entrada de materia (en fase líquida) y dos salidas de materia (fase líquida y fase vapor). La reacción se lleva a cabo únicamente en la fase líquida y debido a que bajo ELV la temperatura del sistema es función de la concentración en la fase líquida, entonces la velocidad de reacción depende únicamente de la concentración de volátil en la fase líquida.

$$\alpha(c, \beta(c)) = ck_0 e^{\frac{-E}{\beta(c)}} := r(c) \quad (2.7)$$

La concentración de la fase vapor está dada por las condiciones de equilibrio líquido-vapor, asumiendo un comportamiento de gas ideal. Debido a que el reactor se considera como perfectamente mezclado, entonces la concentración y temperatura de cada fase es igual a la que existe dentro del reactor.

La aplicación de los principios de conservación de materia (total y de componente ligero) y energía en régimen dinámico (entrada neta = acumulación) así como la suposición de que el separador está en régimen de ebullición dan como resultado el siguiente conjunto de tres ecuaciones diferenciales ordinarias (masa total, masa de ligero y calor) y dos algebraicas (punto de burbuja) dadas en (2.6)

$$\text{Masa total:} \quad \frac{dM}{dt} := \dot{M} = q_e - q_v - q \quad (2.8)a$$

$$\text{Masa de ligero:} \quad \frac{d}{dt}(Mc) = q_e c_e - q_v c_v - qc - Mr(c) \quad (2.9)b$$

$$\text{Calor:} \quad \frac{d}{dt}(Mc_p T) = q_e c_p T_e - qc_p T - q_v (c_p T + \lambda_v) + \Theta Mr(c) + Q \quad (2.8)c$$

Modelo con acumulado constante y aproximación del balance de calor en estado casi-estacionario (ECE)

Desde la perspectiva de este conjunto de ecuaciones algebraico-diferenciales la manera en que se modela en la literatura es como sigue: Primero se supone que el acumulado es constante y dado, (digamos en un valor de diseño preestablecido $M = \bar{M}$) el balance de calor (2.8)c está en estado estacionario (sin acumulación dinámica de calor sensible) y se sustituye la ecuación de punto de burbuja en el balance de masa global y el balance de calor, es decir

$$0 = q_e - q_v - q \quad (2.10)$$

$$0 = q_e c_p T_e - qc_p \beta(c) - q_v (c_p \beta(c) + \lambda_v) + \Theta Mr(c) + Q \quad (2.11)$$

Luego se resuelven estas ecuaciones para los flujos de salida y vapor

$$q = q_e - q_v \quad (2.12)$$

$$q_v = \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta Mr(c) + Q}{\lambda_v} \quad (2.13)$$

La sustitución de estas expresiones en el balance de componente ligero lleva al siguiente modelo con un estado dinámico (c) y dos salidas estáticas (q_v y q)

$$\dot{c} = \frac{q_e}{M} (c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta Mr(c) + Q}{M \lambda_v} (v(c) - c) - r(c) \quad (2.14)a$$

$$q = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + Mr(c) \Theta + Q}{\lambda} \quad (2.14)b$$

$$q_v = \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta Mr(c) + Q}{\lambda_v} \quad (2.14)c$$

Estados: concentración de volátil en fase líquida c , concentración de volátil en fase vapor c_v , masa M , temperatura T , flujo de vapor q_v , flujo de líquido q

Entradas exógenas de control: Inyección de calor Q

Entradas exógenas de perturbación: flujo de entrada q_e , temperatura de entrada T_e , concentración de entrada c_e

Modelo con dinámica de acumulado y sin suposición de balance de calor estacionario

En vista del problema de control no lineal saturado que nos ocupa en la presente tesis este modelo debe ser revisado para: (i) incluir la dinámica de acumulado como un paso obligado para el diseño del componente de control que mantiene el nivel de líquido y (ii) revisar críticamente la pertinencia para propósitos de diseño de control de la hipótesis de estado estacionario para el balance de calor.

Para tales propósitos procedemos de la siguiente forma (sin hacer a priori la suposición de estado estacionario para el balance de calor). Considere el modelo de conservación-punto de burbuja, derive la ecuación de punto de burbuja para obtener

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial \beta(c)}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial t} = \beta'(c) \dot{c} \quad (2.15)$$

Capítulo 2.- Problema de control

Sustituya esta ecuación en el balance dinámico de calor (2.8)c (eliminando \dot{T}) para obtener la ecuación:

$$\dot{M}c_p T + Mc_p \beta'(c) \dot{c} = q_e c_p T_e - qc_p T - q_v (c_p T + \lambda_v) + \Theta M \alpha(c, T) + Q \quad (2.16)$$

La solución de esta ecuación para q_v nos da

$$q_v = \frac{q_e c_p T_e - qc_p T + \Theta M \alpha(c, T) + Q - \dot{M}c_p T + Mc_p \beta'(c) \dot{c}}{c_p T + \lambda_v} \quad (2.17)$$

La combinación de esta ecuación con el balance de masa global y su sustitución en el balance de ligero resulta el modelo con dos estados dinámicos (c y M) y una salida estática (q_v):

$$\dot{c} = \left(\frac{1}{1 + \psi(c)} \right) \left[\frac{q_e}{M} (c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta M r(c) + Q}{M \lambda_v} (v(c) - c) - r(c) \right] \quad (2.18)a$$

$$\dot{M} = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) - \beta'(c) (c_e - c) + M r(c) [\Theta + c_p \beta'(c)] + Q}{\lambda - (c_v - c) c_p \beta'(c)} - q \quad (2.18)b$$

$$q_v = \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + (c_e - c) \beta'(c) + M r(c) [\Theta - c_p \beta'(c)] + Q}{\lambda_v + (v(c) - c) c_p \beta'(c)} \quad (2.18)c$$

Donde la función $\Psi(c)$ está dada por:

$$\psi(c) = - \frac{c_p \beta'(c) (v(c) - c)}{\lambda_v} \quad (2.19)$$

Observe que este modelo coincide con el de la literatura bajo las siguientes suposiciones:

$$\psi(c) = 0 \quad M = \bar{M}$$

El termino $\psi(c)$ es un término adimensional que puede interpretarse como una relación entre el cambio en la energía sensible del sistema y la energía de calor latente de vaporización.

Estados: concentración de volátil en fase líquida c , concentración de volátil en fase vapor c_v ,
masa M , temperatura T , flujo de vapor q_v

Entradas exógenas de control: Inyección de calor Q , flujo de líquido q

Entradas exógenas de perturbación: flujo de entrada q_e , temperatura de entrada T_e , concentración de entrada c_e

2.1.2.-Régimen sin vaporización

El sistema consiste en un reactor que opera en fase líquida. La cantidad de calor inyectada mantiene la fase líquida a una temperatura T sin alcanzar su temperatura de ebullición. La corriente de alimentación se encuentra en fase líquida y a una temperatura menor a la que existe dentro del reactor. Debido a que no existe equilibrio líquido vapor en este régimen entonces el comportamiento del sistema se caracteriza por tres estados lo cuales son: concentración del componente ligero en la fase líquida, temperatura y acumulado molar de la fase líquida.

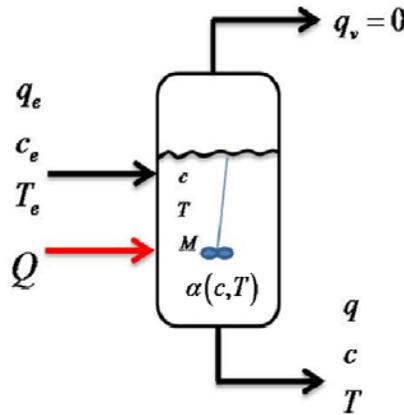


Figura 2. 3.-Esquema del régimen sin vaporización

El sistema cuenta con una entrada y una salida de materia (ambas en fase líquida). La reacción es dependiente tanto de la concentración como de la temperatura dentro del reactor. Debido a que se asume que el reactor se encuentra perfectamente mezclado entonces la concentración y temperatura de la corriente de salida es igual a la que existe dentro del reactor. En este régimen existe generación de producto debido a la existencia de la reacción en la fase líquida, sin embargo no existe separación de una fase a otra por lo cual se desea evitar la permanencia en este régimen.

A partir de balances de materia y energía se obtiene la dinámica compacta del sistema:

$$\text{Masa global} \quad \dot{M} = q_e - q \quad (2.20)$$

$$\text{Masa ligero} \quad \frac{d}{dt}(cM) = c_e q_e - cq - M \alpha(c, T) \quad (2.21)$$

$$\text{Calor sensible} \quad \frac{d}{dt}(M c_p T) = q_e c_p T_e - q c_p T + \Theta M \alpha(c, T) + Q \quad (2.22)$$

Capítulo 2.- Problema de control

El desarrollo algebraico de la dinámica compacta lleva a las expresiones para los estados dinámicos del sistema, en este caso M , c y T . Las expresiones, que se muestran a continuación, son características de un reactor continuo de tanque agitado.

$$\dot{M} = q_e - q \quad (2.23)a$$

$$\dot{c} = \frac{q_e}{M}(c_e - c) - \alpha(c, T) \quad (2.23)b$$

$$\dot{T} = \frac{q_e}{M}(T_e - T) + \frac{\Theta}{c_p}\alpha(c, T) + \frac{Q}{Mc_p} \quad (2.23)c$$

Estados: concentración de ligero en fase líquida c , masa M , temperatura T

Entradas de control: inyección de calor Q , flujo de líquido q

Entradas exógenas de perturbación: flujo de entrada q_e , temperatura de entrada T_e , concentración de entrada c_e

2.1.3.-Régimen de vaporización total

El sistema consiste en un recipiente que opera en fase vapor únicamente. Al sistema se alimenta una corriente en fase líquida a una temperatura inferior a su temperatura de ebullición. La cantidad de calor inyectado vaporiza de manera instantánea la corriente líquida alimentada, el exceso de calor aumenta la temperatura de la fase vapor dentro del sistema.

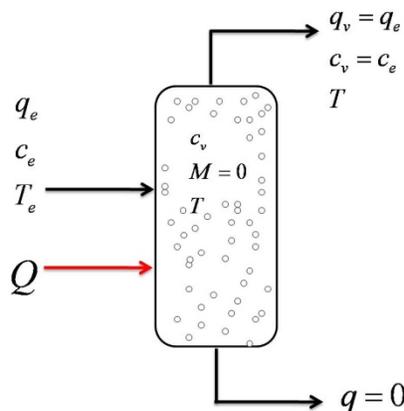


Figura 2. 4.-Esquema del régimen de vaporización total

El sistema cuenta con una entrada y una salida de materia (ambas en fase vapor). Debido a que la reacción solo se lleva a cabo en fase líquida, bajo este régimen no existe generación de producto. El recipiente se encuentra perfectamente mezclado por lo que la temperatura de la corriente de salida es igual a la que existe dentro del recipiente. La concentración de la corriente de salida es la misma que la de la alimentación debido a que no existe reacción.

Se desea evitar este régimen debido a que no existe generación de producto y por lo tanto no hay beneficio económico, además el calor inyectado es de una magnitud mayor en comparación con los dos regímenes anteriores provocando un gasto económico superior. El modelo del régimen de vaporización total es el más simple de los tres debido a las consideraciones que incluyen no reacción química en la fase vapor, no acumulación de moles en fase gaseosa (lo cual es válido al suponer que la presión es constante) y la no existencia de moles en fase líquida.

Dado que la concentración no cambia dentro del sistema y tomando en cuenta que la acumulación de moles es nula, entonces el sistema tiene un solo estado dinámico que corresponde a la temperatura, además, la única entrada de control es ahora la inyección de calor Q (ya que $q=0$ al no existir fase líquida).

El desarrollo algebraico de los balances de materia y energía lleva a la expresión dinámica de la temperatura

$$\dot{T} = \frac{q_e}{M_v} [\gamma T_e - T] + \frac{Q}{c_p^v M_v} \quad (2.24)$$

Estado: temperatura T
Entrada de control: inyección de calor Q
Entradas exógenas de perturbación: flujo de entrada q_e , temperatura de entrada T_e

2.2.- El problema de control

Diseñar un control acotado robusto multivariable (dos entradas – dos salidas) que mediante la medición de dos salidas (temperatura y volumen de acumulado líquido) y la manipulación de dos entradas (calor inyectado y flujo de salida de líquido) garantice la estabilidad global a lazo cerrado de un separador flash reactivo en las condiciones óptimas de operación que pueden ser inestables a lazo abierto. El control diseñado debe garantizar la permanencia del régimen de vaporización parcial ya que los dos regímenes restantes generan condiciones indeseadas de operación.

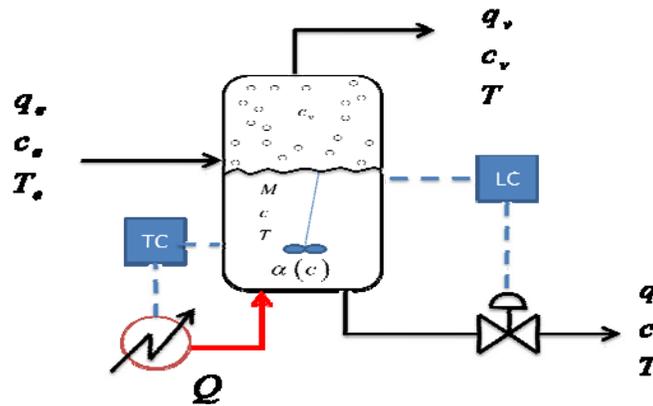


Figura 2. 5.-Esquema de control propuesto

La complejidad del problema de control reside en que: (i) el separador reactivo tiene un comportamiento no-lineal (multiplicidad, bifurcación con respecto a la entrada de control), (ii) como se verá, la operación óptima es inestable a lazo abierto y acompañada de dos estados estacionarios estables, (iii) y esto significa la posibilidad de generar, debido a la saturación, uno o dos atractores extraños a lazo cerrado (7).

Este problema se resolverá mediante los siguientes pasos:

- Con base en un modelo de estructura variable que tome en cuenta los tres regímenes de operación, se diseñará un controlador no lineal robusto estabilizante accionado por retroalimentación de estados
- Se determinará un criterio de saturación del controlador que asegure estabilidad global del punto de operación óptimo y que garantice evitar los regímenes no deseados mediante el análisis de mapas estado-entrada.
- Se buscará recuperar el comportamiento del controlador no lineal anterior mediante un control por retroalimentación de salidas construido con base en un modelo lineal y simplificado a la luz de propiedades de pasividad y observabilidad.

La metodología se ilustrará y probará mediante simulaciones numéricas

Capítulo 3.-Operación óptima

Resumen

En este capítulo se determina el par estado-entrada asociado a la operación óptima estática en el sentido de máximo beneficio económico, tomando en cuenta el valor del producto frente a los costos de reactante, calor y operación. Primero se determina que el problema de optimización tiene solución única para el par estado-entrada. Luego se establece que el estado óptimo en operación a lazo abierto (con la entrada óptima fija) no es único puesto que está acompañado por dos estados estacionarios adicionales. Finalmente, se caracteriza la dependencia de la multiplicidad de los estados estacionarios con respecto al par de entradas de control, en el entendido de que esta caracterización jugará un papel relevante en la derivación del criterio para escoger los límites de control de tal suerte que su saturación no genere atractores extraños estables a lazo cerrado

3.1.-Función de beneficio económico

El beneficio asociado al separador reactivo continuo está dado por la siguiente expresión

$$P = \$_p q (1 - c) - \$_R q_e c_e - \$_Q Q \quad (3.1)$$

Donde

P: Beneficio en económico un unidades dinero por unidad de tiempo

q: Flujo de salida de líquido

q_e: Flujo de entrada

Q: Calor inyectado al proceso

\$_p: Precio por mol de producto generado

\$_R: Precio por mol de reactante alimentado

\$_Q: Precio por Watt de energía inyectada

El producto de interés corresponde al componente pesado que se encuentra en mayor concentración en la fase líquida, por lo tanto el primer término corresponde al valor económico de producto generado. El

Capítulo 3.- Operación óptima

segundo término corresponde al costo relacionado a la materia prima, la cual se alimenta en fase líquida con concentración cercana a pureza total. El costo energético, representado en el tercer término, se calcula como el flujo de calor inyectado multiplicado por el costo por unidad de energía. Los valores nominales de c_e , q_e , T_e se mantienen fijos y sus valores se muestran en el Apendice 1. La división de (3.1) por el flujo molar q_e da el beneficio por mol alimentado

$$p = \$_P \frac{q}{q_e} (1-c) - \$_R c_e - \$_Q \frac{Q}{q_e} \quad (3.2)$$

Definiendo el cociente del flujo de vapor y el flujo de alimentación como una nueva variable, podemos expresar la ecuación anterior en función de fracción de vaporización (J.M. Smith H. C., 2000)

$$\phi = 1 - \frac{q}{q_e} \quad (3.3)$$

Aplicando la definición a la función objetivo

$$p = \$_P (1-\phi)(1-c) - \$_R c_e - \$_Q \frac{Q}{q_e} \quad (3.4)$$

Como puede verse en la Tabla 3.1, el valor de ϕ determina el régimen de operación del separador, a saber: sin vaporización, con vaporización parcial y con vaporización total.

Tabla 3. 1.-Regímenes de operación del separador flash reactivo

Régimen	ϕ	Característica
Sin vaporización	0	No existe salida de vapor
Vaporización parcial	$0 < \phi < 1$	La salida de vapor es mayor a cero y menor a la corriente de alimentación
Vaporización total	$\phi \geq 1$	La salida de vapor es mayor o igual a la corriente de alimentación

Costos

Los costos aquí mostrados usados en la expresión de beneficio económico fueron escogidos de manera arbitraria buscando una diferencia significativa entre los precios de materia prima y producto generado y son válidos únicamente para nuestro caso de estudio.

Tabla 3. 2.- Costos de producto, materia prima y energía

Parámetro	Valor	Unidades	Descripción
$\$P$	100	\$/kmol	Costo por kmol de producto
$\$R$	10	\$/kmol	Costo por kmol de materia prima
$\$Q$	0.005	\$/kW	Costo por kJ de calor inyectado

3.2.-Restricciones

Las restricciones para determinar el punto óptimo de operación corresponden a cumplir la estática del sistema y asegurar que el separador flash reactivo se encuentre en régimen de evaporación parcial mediante las siguientes ecuaciones:

Estática

$$Masa\ global \quad 0 = \frac{q_e}{M}(c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta Mr(c) + Q}{M \lambda_v} (v(c) - c) - r(c) \quad (3.5)a$$

$$Masa\ de\ volátil \quad 0 = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + Mr(c)\Theta + Q}{\lambda_v} - q \quad (3.5)b$$

$$Régimen\ de\ vaporización\ parcial \quad \phi > 0, \phi < 1 \quad (3.6)a-b$$

Para efectos del problema de optimización se cuenta con dos restricciones algebraicas (3.5) y dos desigualdades algebraicas (3.6). La solución de (3.5) para Q y q y su sustitución en (3.6) lleva a:

$$Q = q_e \lambda_v \frac{(c_e - c)}{v(c) - c} - [q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta Mr(c)] - \lambda_v \frac{Mr(c)}{v(c) - c} := t_Q(c, M) \quad (3.7)a$$

$$q = q_e + \frac{Mr(c) - q_e (c_e - c)}{v(c) - c} := t_q(c, M) \quad (3.7)b$$

$$\phi = \frac{q_e (c_e - c) - Mr(c)}{q_e [v(c) - c]} := f_\phi(c, M) \quad (3.8)$$

La sustitución de (3.7) y (3.8) en la función de beneficio económico tiene como resultado:

$$p = \$_p (1 - f_\phi(c, M))(1 - c) - \$_R c_e - \$_Q \frac{t_Q(c, M)}{q_e} := \pi(c, M) \quad (3.9)$$

3.3.-Par estado-entrada óptimo

El par estado-entrada óptimo es aquel que dentro del régimen factible tenga un valor máximo para la función de beneficio económico p definida como:

$$\pi(c, M) = \$_p (1 - f_\phi(c, M))(1 - c) - \$_R c_e - \$_Q \frac{t_Q(c, M)}{q_e} \quad (3.10)$$

Con las restricciones:

$$Q = t_Q(c, M) \quad (3.11)a$$

$$q = t_q(c, M) \quad (3.11)b$$

$$f_\phi(c, M) > 0 \quad (3.12)a$$

$$f_\phi(c, M) < 1 \quad (3.12)b$$

La restricción (3.12) causa que únicamente una región del plano de estados c - M sea factible para encontrar el punto óptimo, dicha región se muestra en la siguiente figura

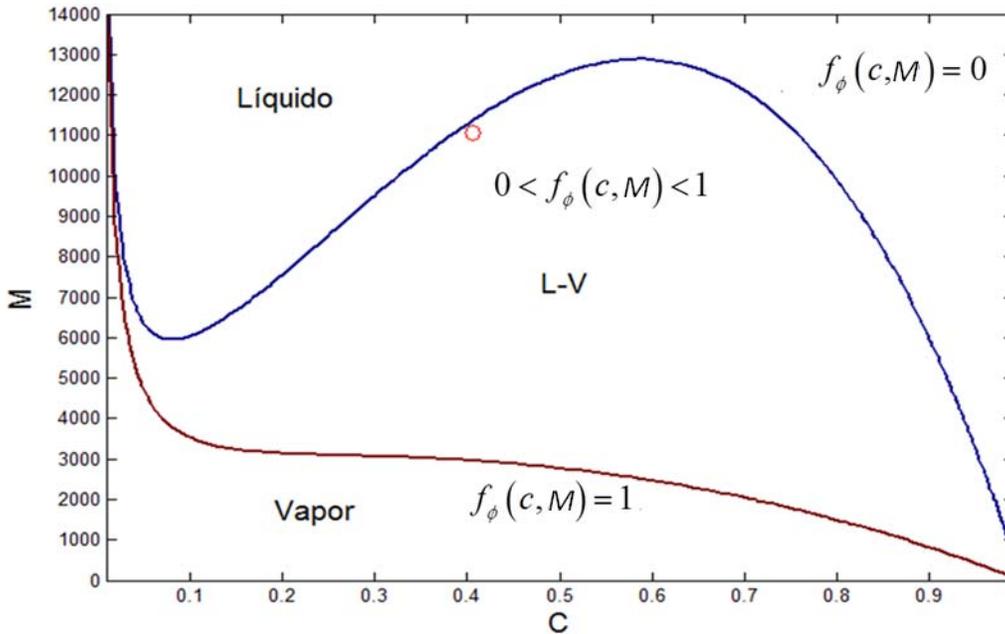


Figura 3. 1.-Espacio de estados c-M mostrando la restricción de vaporización parcial

Un criterio de optimalidad tradicional consiste en cumplir:

$$\frac{\partial \pi(\bar{c}, \bar{M})}{\partial c} = 0, \quad \frac{\partial \pi(\bar{c}, \bar{M})}{\partial M} = 0 \tag{3.13}$$

Donde la barra indica el estado óptimo, sin embargo ningún punto dentro de la zona delimitada por la restricción de vaporización parcial cumple esta condición por lo cual se deduce que el máximo debe encontrarse en una frontera de la región factible.

Se realizó un barrido sobre la zona factible en el plano c - M buscando el par para el cual la función beneficio económico $\pi(c, m)$ fuera máxima. Los valores se analizaron numéricamente encontrando que existe un solo par c - M para el cual la función $\pi(c, m)$ tiene un valor máximo por lo cual podemos concluir que la solución es única. La Figura 3.2 muestra la magnitud del beneficio económico en función de las combinaciones factibles de c y M . Como se puede observar el valor óptimo (señalado en la gráfica por un círculo) se encuentra sobre la frontera con el régimen sin vaporización.

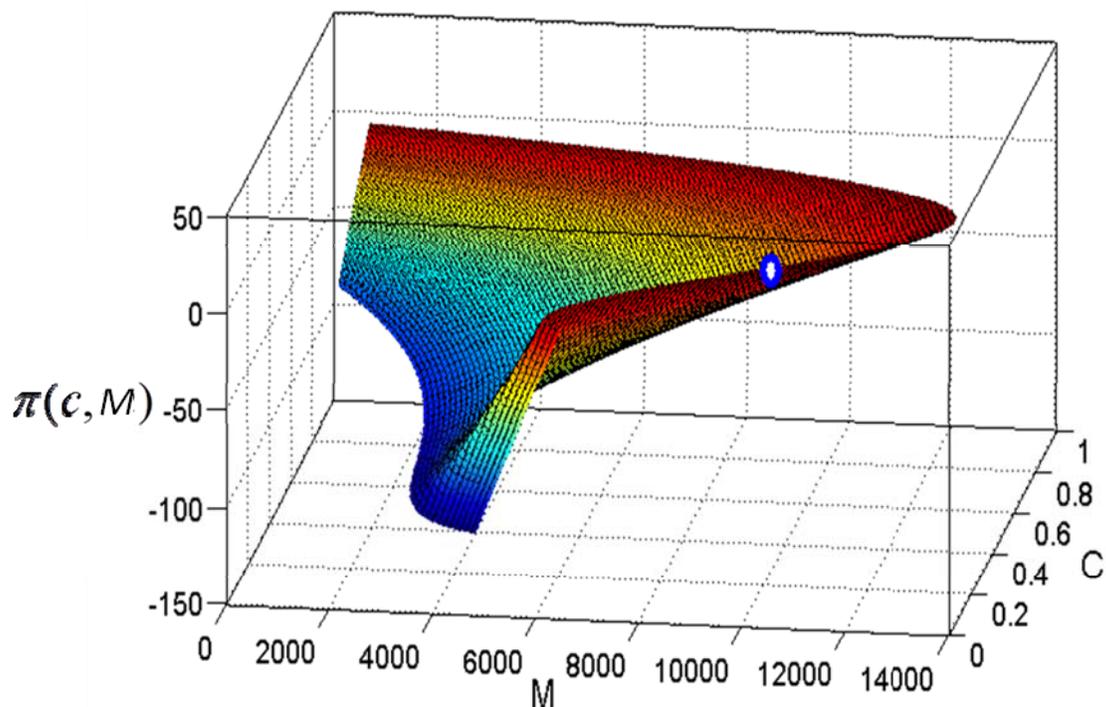


Figura 3. 2.-Función beneficio económico $\pi(c,m)$ en función del par estado $c-M$

Los valores correspondientes a las entradas óptimas Q y q se calculan una vez encontrado el par estado óptimo mediante las expresiones dadas por (3.7) y se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 3. 3.- Par estado-entrada óptimo

		Valor	Unidades
Estados	\bar{c}	0.4032	Adimensional
	\bar{m}	11.23	kmol
Entradas (variables manipuladas)	\bar{Q}	2,361	kW
	\bar{q}	830.61	mol/s

3.4.-Multiplicidad

El problema anterior determinó el par único óptimo x - u en el espacio de 4 dimensiones correspondiente. Es importante tener en mente que dicha unicidad es con respecto a la solución del problema de optimización de la función de beneficio económico y que es diferente de la unicidad de la operación óptima como sistema dinámico a lazo abierto (con la entrada óptima \bar{u} dada como dato y el o los estados estacionarios que le corresponden como incógnita).

Del capítulo anterior sabemos que, para una entrada óptima dada \bar{u} , el estado óptimo asociado \bar{x} satisface la ecuación algebraica

$$\dot{x} = f(\bar{x}, \bar{u}) = 0 \quad (3.14)$$

La pregunta que nos hacemos en este capítulo es si la ecuación anterior es satisfecha por otros estados estacionarios (diferentes del óptimo). Para tal propósito se construirá la dependencia de la solución

$$x = \sigma(u) \quad (3.15)$$

para el estado estacionario x del par de ecuaciones algebraicas

$$f(x, u) = 0 \quad (3.16)$$

Esta ecuación o su forma (3.15) representa una superficie de dos dimensiones en el espacio tetradimensional $E = X \times U$. A la forma (3.15) se le denomina mapa de bifurcación (que bifurca si es que hay zonas monovaluadas y multivaluadas)

Como se mostró en la sección anterior la combinación del balance de energía con los balances de masa lleva a dos ecuaciones que pueden resolverse para el par entrada u , es decir las expresiones mostradas en (3.7) que de forma vectorial se presentan como:

$$u = \iota(x) \quad (3.17)$$

Es decir la inversa del mapa de bifurcación (3.15). A partir del mapa dado por (3.17) es posible observar si existe o no multiplicidad de estados estacionarios.

3.4.1.- Multiplicidad del par estado óptimo

Debido a la no-linealidad del modelo del separador flash reactivo, cabe esperar que el par estado óptimo se encuentre dentro de una zona de multiplicidad, es decir, que exista más de un par estado x que satisfice la ecuación

$$f(x, \bar{u}) = 0 \quad (3.18)$$

La expresión (3.18) consta de dos ecuaciones con dos incógnitas (debido a que el par entrada u está fijo en su valor óptimo). Entonces el numero de grados de libertad es cero y la solución del sistema es de dimensión cero pues corresponde a un punto aunque debe recordarse que la solución puede ser mono o multivaluada.

Es posible encontrar la solución de manera gráfica pues basta con fijar el par entrada en su valor óptimo en la inversa del mapa de bifurcación (3.17) y observar las intersecciones en el plano c - M , es decir

$$v(x) = \bar{u} \quad (3.19)$$

En la forma escalar

$$q_e \lambda_v \frac{(c_e - c)}{v(c) - c} - [q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta Mr(c)] - \lambda_v \frac{Mr(c)}{v(c) - c} = \bar{Q} \quad (3.20)$$

$$q_e + \frac{Mr(c) - q_e (c_e - c)}{v(c) - c} = \bar{q} \quad (3.21)$$

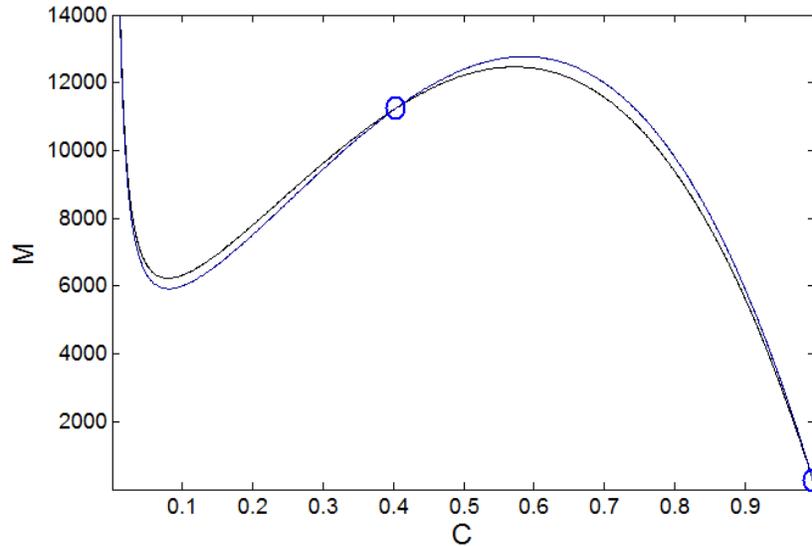


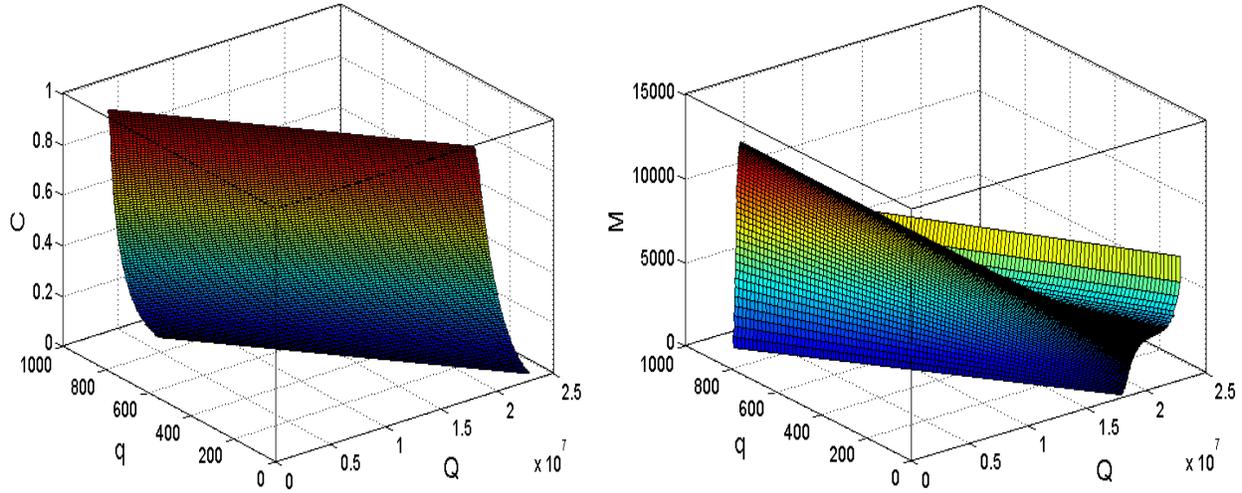
Figura 3. 3.- Estados estacionarios para el par entrada óptimo en el plano $c-M$

La Figura 3.3 muestra la proyección de las curvas (3.20) y (3.21) para los valores óptimos de Q y q respectivamente. La intersección de ambas curvas en el plano $c-M$ corresponde a un estado estacionario. Existen tres intersecciones que corresponden a (i) el par estado $c-M$ óptimo, (ii) un estado que se alcanza de manera asintótica y se encuentra en $M=\infty$, $c=0$ y (iii) un estado estacionario en $c=1$ y $M=0$. A manera de conclusión podemos afirmar que el par estado óptimo no es único en el sentido de que para el valor del par entrada óptimo existen dos estados adicionales.

3.4.2.-Dependencia de la multiplicidad con la entrada

La existencia de zonas donde existe más de un estado estacionario es frecuente en sistemas no-lineales, incluso para esquemas de destilación simple (donde no se lleva a cabo una reacción) Skoogestad y Jacobsen (Elling W. Jacobsen, 1994) demostraron que bajo ciertas condiciones aún en modelos simples con un alto grado de idealización es posible encontrar multiplicidad. Una vez que se conoce la multiplicidad asociada al punto óptimo de operación es conveniente caracterizar el resto de las regiones en las que puede encontrarse el sistema, esto es de especial importancia para el diseño y criterios de saturación del controlador.

Como se mostró en la sección anterior no es posible mostrar en una sola gráfica la dependencia del par de estados con el par de entradas debido a que forman una superficie de 4 dimensiones, sin embargo, aprovechando la linealidad que existe en Q y q es posible visualizar la dependencia de c y M de manera separada como se muestra a continuación.



Figuras 3. 3a y 3.3b.-Dependencia del par estado con el par entrada $x = \sigma(u)$ (3.15)

La Figura 3.3 muestra la dependencia de el par estado x con el par entrada u , como se puede observar en la Figura 3.3b existe una zona de "pliegue" que indica la presencia de multiplicidad. La zona por fuera de los pliegues es una zona donde existe un único estado estacionario.

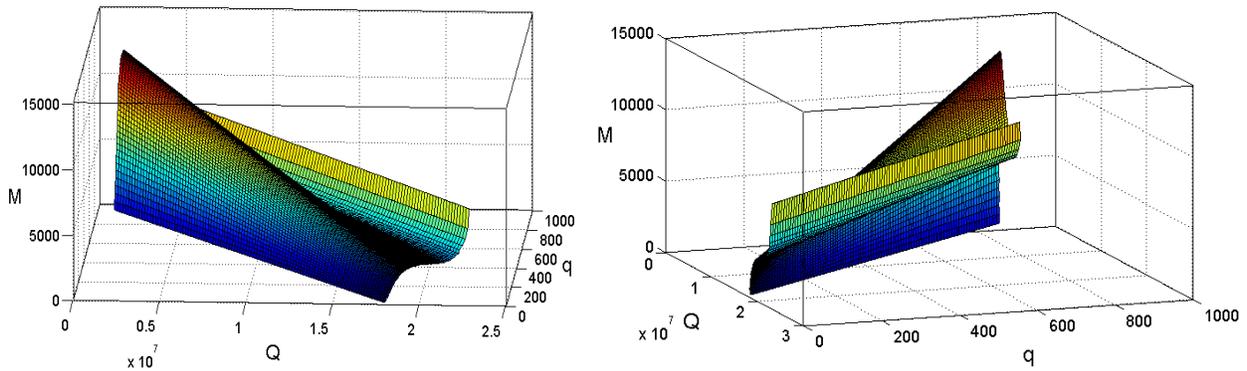


Figura 3. 4.-Vistas de la dependencia del estado M con el par entrada

La Figura 3.4 muestra distintas vistas del espacio Q - q - M , como se observa en ambas las figuras, la superficie posee un conjunto de máximos (decreciente en la dirección Q) y un conjunto de mínimos (creciente en la dirección q). El pliegue de la superficie está delimitado por el conjunto de máximos y mínimos.

Es posible caracterizar la zona de multiplicidad encontrando una expresión analítica que nos permite saber los límites de la zona de multiplicidad para Q y q . A partir de la ecuación (3.7) a, obteniendo la parcial con respecto a c se obtiene la expresión

$$\frac{\partial Q}{\partial c} = -q_e \lambda_v \frac{\sigma(c) + (c_e - c)\sigma'}{\sigma^2(c)} + q_e c_p \beta'(c) - \Theta Mr'(c) - \lambda_v \frac{\sigma(c)Mr'(c) - Mr(c)\sigma'(c)}{\sigma^2(c)} \quad (3.22)$$

donde

$$\sigma(c) = v(c) - c \quad (3.23)$$

$$\sigma'(c) = v'(c) - 1 \quad (3.24)$$

Cuando la expresión (3.22) se iguala a cero es posible obtener una expresión para m en función de c de la siguiente manera

$$M = \frac{q_e \left[\sigma(c) \frac{c_p}{\lambda_v} \beta'(c) - (c_e - c) \frac{\sigma'(c)}{\sigma(c)} - 1 \right]}{r'(c) - r(c) \frac{\sigma'(c)}{\sigma(c)} + r'(c) \sigma(c) \frac{\Theta}{\lambda_v}} \quad (3.25)$$

Dado que tenemos a mano expresiones de Q y q en función de c y M , es trivial obtener los valores de Q y q para los cuales se cumple la expresión (3.25). La combinación de esta expresión con los balances de materia y energía en la forma explícita para el par entrada (3.17) conforman un sistema de 3 ecuaciones y 4 incógnitas siendo su solución una curva (dimensión 1) en un espacio de 4 dimensiones. Dado que esta curva separa las zonas de multiplicidad y unicidad de estados estacionarios, entonces puede interpretarse como una curva de bifurcación.

Una manera útil de visualizar la curva de bifurcación es mediante su parametrización, para esto partimos de los balances de materia y energía en su forma explícita (3.17) y de la expresión (3.25) (condición de bifurcación).

$$c = \kappa, \quad 0 \leq \kappa \leq 1 \quad (3.26a)$$

$$\text{Condición de bifurcación} \quad M = \xi_M(\kappa) \quad (3.26b)$$

$$\text{Masa de volátil} \quad Q = \xi_Q(\kappa) \quad (3.26c)$$

$$\text{Masa global} \quad q = \xi_q(\kappa) \quad (3.26d)$$

De tal suerte que al variar κ de 0 a 1 para cada valor de κ se genera un punto (c, m, Q, q) (κ) en el espacio entrada-estado tetradimensional.

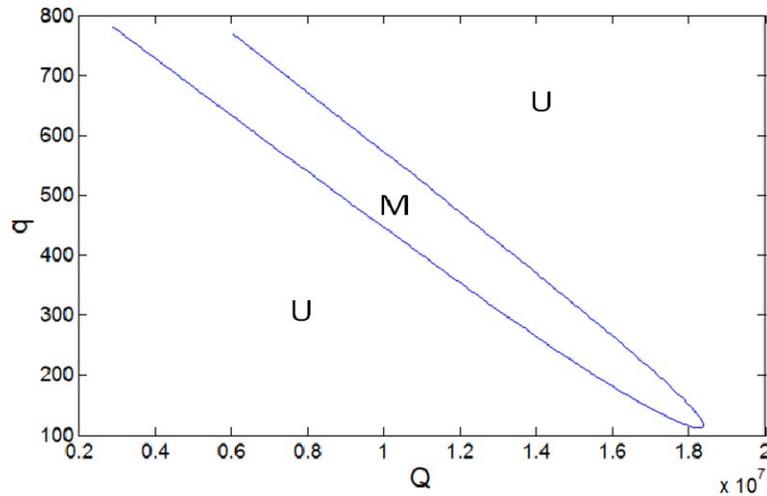


Figura 3. 5.- Proyección de la curva de bifurcación en el plano Q - q

En la Figura 3.5 se muestra la proyección de la curva de bifurcación (de 4 dimensiones) en el espacio de entradas Q - q (de dos dimensiones). Las letras U y M indican las zonas de unicidad y multiplicidad respectivamente.

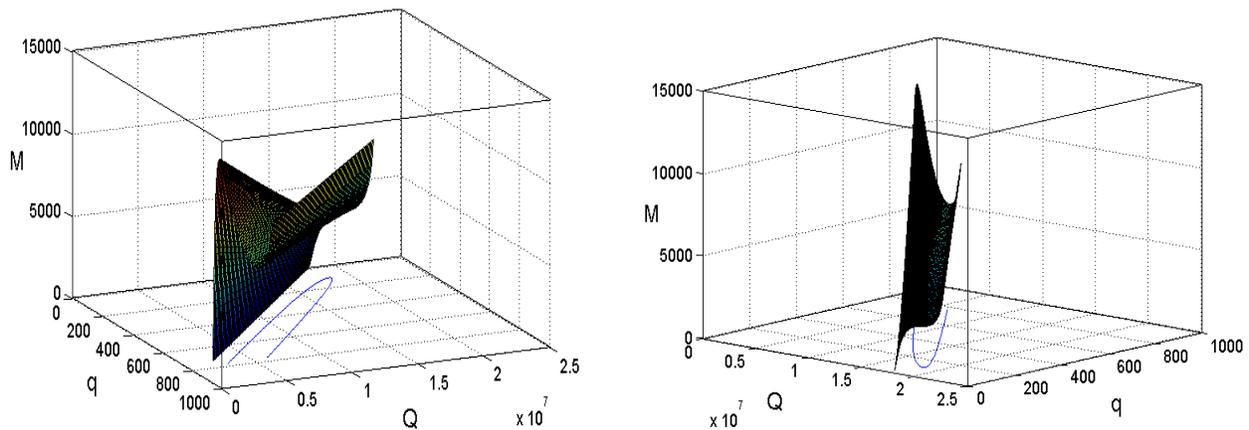


Figura 3. 6.- Mapa de bifurcación $x = \sigma(u)$ (3.15) y proyección de la curva de bifurcación en el plano Q - q

La figura 3.6 muestra la proyección en el plano Q - q de la curva de bifurcación (3.26) de manera simultánea con el mapa de bifurcación $x = \sigma(u)$ (3.15) mostrando el estado M . La línea azul sobre el plano en Q - q muestra la proyección de las "cordilleras" que forman los conjuntos de máximos y mínimos y se puede observar cómo se conectan en un único punto que corresponde al sitio donde la curva de bifurcación tiene un mínimo.

Conclusiones

Se identificaron las condiciones óptimas de operación como el par de estados $c-M$ y entradas $Q-q$ que maximizan una función objetivo de tipo beneficio económico. Se encontró que el punto óptimo de operación es solución única de la función objetivo.

El punto óptimo de operación se encuentra en una zona de multiplicidad de estados estacionarios y está acompañado de dos estados estacionarios adicionales. Esto es importante para la tarea de control pues parte de su objetivo será eliminar los estados adicionales.

Se caracterizó la dependencia de los estados estacionarios ($c-M$) respecto a las entradas de control ($Q-q$) para intervalos alrededor del punto óptimo de operación identificando regiones de multiplicidad y unicidad. Se encontró una expresión parametrizada de la curva de bifurcación que permite acotar la zona de multiplicidad en el espacio tetradimensional formado por el par de estados-entradas. Esto es relevante puesto que será útil para el criterio de saturación al ubicar en el espacio de entradas la región donde existe multiplicidad de estados estacionarios.

Capítulo 4.- Dinámica a lazo abierto del proceso

Resumen

En este capítulo se estudia la dinámica a lazo abierto del separador flash reactivo. Primero se valora la suposición de ECE (estado casi-estacionario) para el balance de calor en términos de comportamiento estático (número y tipo de estados estacionarios y su estabilidad) y dinámico (tiempo de asentamiento). Se identifica la topología del sistema encontrando potencialidad de estados estacionarios extraños para el control saturado y se plantea en términos técnicos la tarea del control a diseñar.

4.1.-Dinámica frente a modelado convencional

Retomando del Capítulo 2 las expresiones dinámicas para el régimen de vaporización parcial en sus dos formas: (i) Forma rigurosa y (ii) Aproximación de ECE para el balance de calor

Forma rigurosa

$$\dot{c} = \left(\frac{1}{1 + \psi(c)} \right) \left[\frac{q_e}{M} (c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta Mr(c) + Q}{M \lambda_v} (v(c) - c) - r(c) \right] \quad (4.1)a$$

$$\dot{M} = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c) - \beta'(c)(c_e - c)) + Mr(c) [\Theta + c_p \beta'(c)] + Q}{\lambda - (c_v - c) c_p \beta'(c)} - q \quad (4.1)b$$

Aproximación de ECE para el balance de calor

$$\dot{c} = \frac{q_e}{M} (c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta Mr(c) + Q}{M \lambda_v} (v(c) - c) - r(c) \quad (4.2)a$$

$$\dot{M} = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + Mr(c) \Theta + Q}{\lambda_v} - q \quad (4.2)b$$

La aproximación de ECE para el balance de calor es una técnica común en el estudio de sistemas de separación que involucran etapas de equilibrio de fases (J.D. Seader, 1998),(Ernest J. Henley, 1981) y se basa en que la dinámica del balance de calor es mucho más rápida que la dinámica de la concentración y el acumulado.

El parámetro $\Psi(c)$ engloba los efectos del modelado riguroso y su interpretación física corresponde a una relación entre el calor sensible transferido a la fase vapor de la fase líquida y el calor latente de vaporización, su magnitud siempre es positiva.

$$\psi(c) = -\frac{c_p \beta'(c)(v(c)-c)}{\lambda_v} > 0 \quad (4.3)$$

Cuando el valor de (4.3) se aproxima a cero entonces el modelo riguroso se vuelve idéntico al enfoque tradicional

$$\psi(c) \ll 1 \quad \text{entonces} \quad \psi(c) \approx 0$$

$$\dot{c} = \frac{q_e}{M}(c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta M \alpha(c) + Q}{M \lambda_v} (v(c) - c) - \alpha(c)$$

$$\dot{M} = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + M r(c) \Theta + Q}{\lambda_v} - q$$

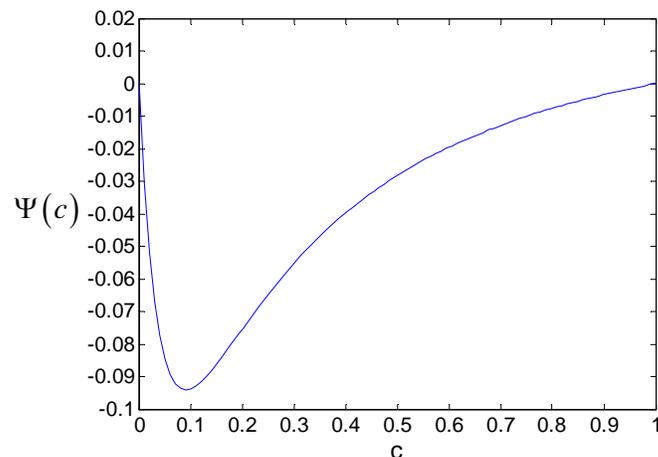


Figura 4. 1.- $\psi(c)$

Como muestra la Figura 4.1, el valor de ψ oscila entre 0.01 hasta valores de 0.1 lo cual puede modificar la dinámica del sistema aunque no de manera significativa. El parámetro ψ es dependiente del valor del cociente c_p/λ , para este sistema este cociente tiene un valor de 0.0041K^{-1} . La siguiente Tabla muestra una lista de valores típicos de la relación c_p/λ para distintas sustancias

Tabla 4. 1.- Valores típicos del cociente c_p/λ

Sustancia	Cp [J/mol*K]	Calor Latente λ [J/mol]	Cp/ λ [K ⁻¹]
Agua	75.3	40000	0.002
Metanol	81.1	35000	0.0023
Acido Acético	123.3	23700	0.0052
Cloroetano	103.3	24730	0.0044
Etano	52.5 (vap)	14700	0.0037
Etanol	112.3	38560	0.0030
Propanol	143.9	40000	0.0036
i-Butano	140	22440	0.0064
Pentano	167.2	25790	0.0068
Pentanol	208.1	41400	0.0053

A continuación se presentan simulaciones dinámicas utilizando un acumulado constante para el régimen de vaporización parcial con distintas condiciones iniciales comparando la dinámica rigurosa con la aproximación de EQE para el balance de calor

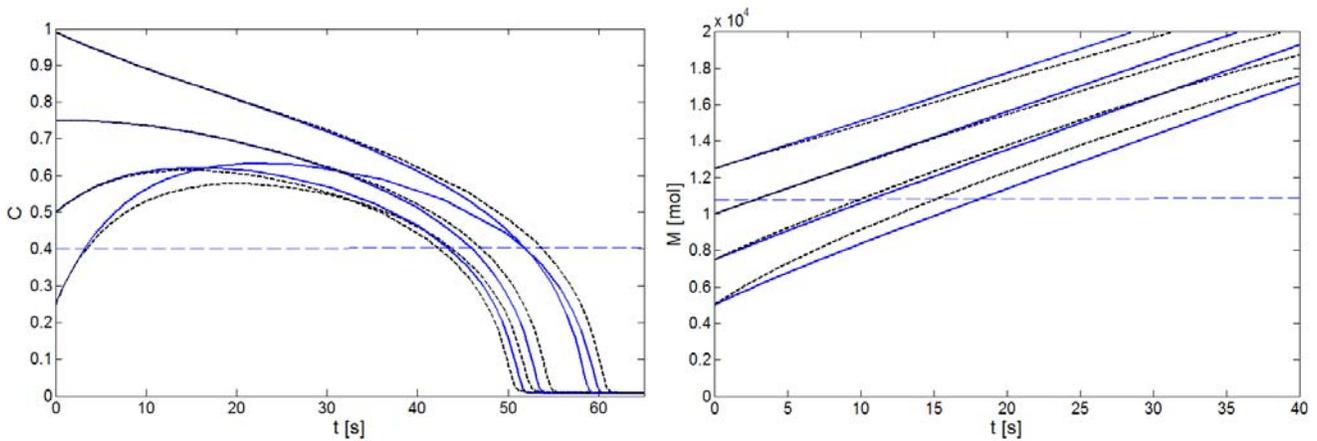


Figura 4. 2.-Comparación de la dinámica rigurosa con la aproximación de EQE

Las líneas continuas y punteadas corresponden respectivamente a la dinámica rigurosa y a la aproximación de EQE. La concentración alcanza el mismo valor tanto para la dinámica rigurosa como para la aproximación de EQE, sin embargo es posible ver como el acumulado líquido parece prolongarse sin alcanzar un estado estacionario. Como se mostró en el Capítulo anterior, uno de los estados estacionarios corresponde a un valor $c=0$ donde el acumulado parece crecer sin cota lo cual se observa en estas Figuras.

La aproximación de EQE tiene como principal efecto el disminuir el tiempo de asentamiento lo cual significa que la dinámica es ligeramente más rápida que la dinámica rigurosa, la estabilidad de los estados estacionarios no muestra diferencias y dado que ambas dinámicas llegan al mismo estado estacionario entonces se puede concluir que la estática del sistema no se ve afectada por la aproximación de EQE.

Dado que el cambio en la dinámica del sistema introducido por la aproximación de EQE es mínimo y solo relacionado a la velocidad con que se alcanza el estado estacionario (la estática no se ve afectada) entonces podemos concluir que la aproximación es válida.

4.2.-Estabilidad

De acuerdo al primer método de Lyapunov (Dale E. Seaborg, 2010) es posible caracterizar la estabilidad del sistema mediante la observación de la traza y el determinante del jacobiano.

Las condiciones necesarias y suficientes para asegurar estabilidad local son las siguientes:

$$\det(J) > 0 \quad (4.4)$$

$$-tr(J) > 0 \quad (4.5)$$

Donde J es el jacobiano del sistema. A partir de la expresión del determinante de J

$$\det J = \frac{\Theta}{m\lambda_v} \left[q_e r + \sigma' \theta r + m r r' + \sigma r' \theta - \sigma \frac{q_e c_p}{m \Theta} \beta' \theta + \left(\frac{q_e^2 c_p}{m \Theta} \beta' - q_e r' \right) (c_e - c) \right] \quad (4.6)$$

donde

$$\theta(c, m, Q, q_e, T_e) = q_e \frac{c_p}{\lambda_v} (T_e - \beta(c)) + \frac{Q}{\lambda_v} + \frac{\Theta}{\lambda_v} m r(c) \quad (4.7)$$

De las expresiones (4.6) y (4.7) es posible conocer el valor del determinante en función de los estados c y M, haciendo un barrido sobre la zona factible

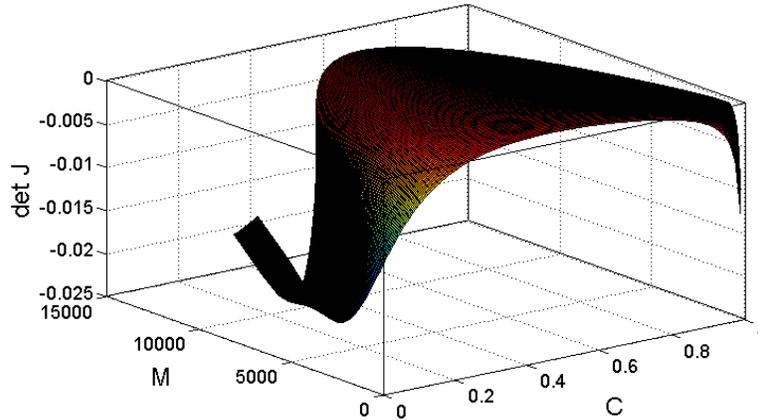


Figura 4. 3.-Determinante de J en función de c y M sobre la zona factible

Como se aprecia en la Figura 4.3 el determinante es siempre negativo para los valores correspondientes a la zona factible. Esto significa que al menos uno de los dos valores propios del sistema es negativo mientras el otro es positivo, debido a este resultado podemos afirmar que ningún punto dentro de la zona factible posee estabilidad local.

A partir de la expresión para la traza de J

$$tr J = -\frac{\Theta}{\lambda_v} r(c) - \frac{q_e}{m} - \frac{\sigma(c)}{m} \left[-q_e \frac{c_p}{\lambda_v} \beta'(c) + \frac{\Theta}{\lambda_v} m r'(c) \right] - \frac{\sigma'(c)}{m} \theta(c, m, Q, q_e, T_e) - r'(c) \quad (4.8)$$

El resultado de evaluar la traza del jacobiano junto con los balances de materia y energía para los valores correspondientes a la zona factible se muestra en la Figura 4.4.

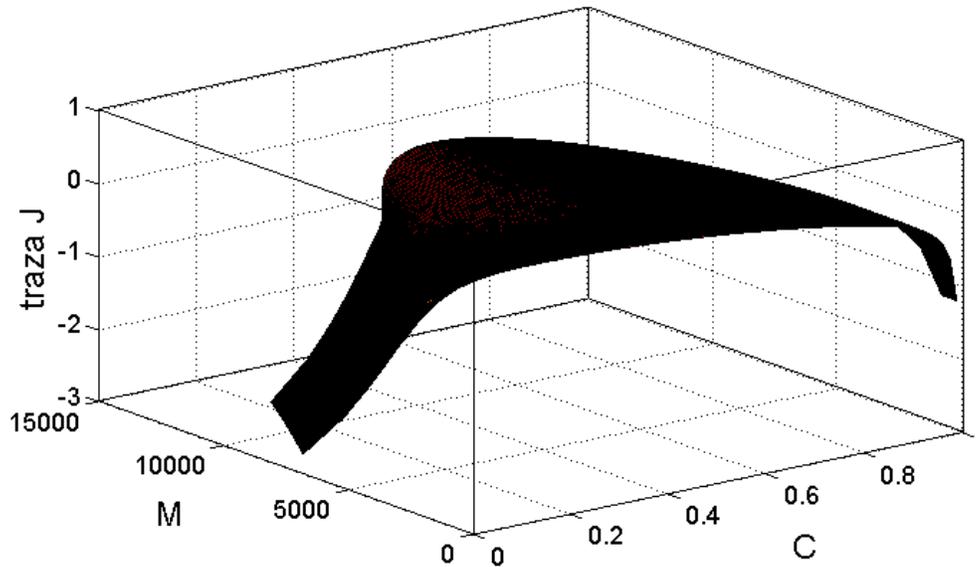


Figura 4. 4.-Traza de J en función de c y M sobre la zona factible

Como se puede observar la traza tiene valores tanto positivos como negativos, proyectando sobre el plano c - M pidiendo que la traza sea cero se encuentra la siguiente figura

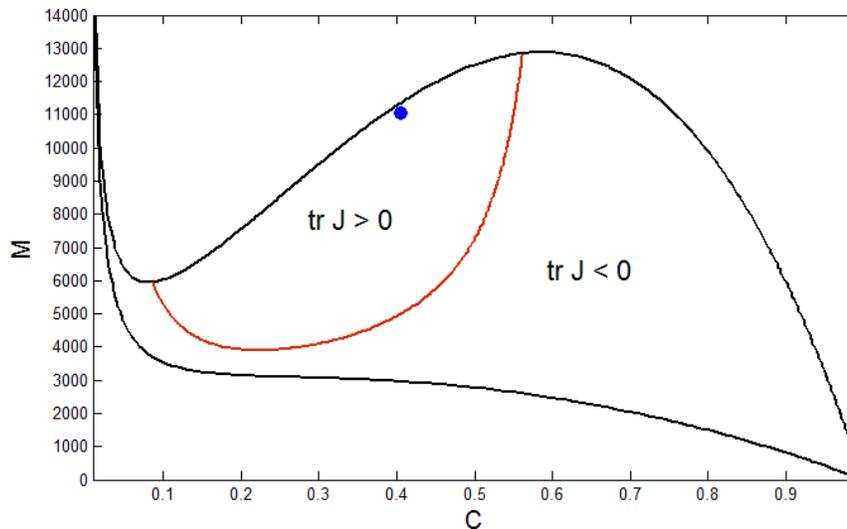


Figura 4. 5.-Proyección sobre el plano c - M la condición de $\text{tr } J=0$

La figura 4.5 muestra que la zona factible de operación está dividida en dos zonas de acuerdo al valor de la traza del jacobiano. El punto óptimo se encuentra dentro de la zona donde la traza es positiva lo cual significa que el valor propio más grande es el positivo.

De acuerdo a los resultados obtenidos tanto el punto óptimo como todos los estados estacionarios dentro de la zona factible tienen características de inestabilidad al presentar el determinante del jacobiano valores negativos en toda la zona factible. Existen regiones dentro de la zona factible donde se cumple la segunda condición para garantizar estabilidad local ($\text{tr } J < 0$) sin embargo es requisito indispensable se cumplan ambas condiciones por lo cual ningún estado puede ser considerado estable.

4.3.-Simulaciones a lazo abierto del régimen de vaporización parcial

De los tres regímenes posibles, el régimen de vaporización parcial es en el que se desea permanecer puesto que solo en este se lleva a cabo de manera simultánea reacción y separación. La caracterización de su dinámica entonces es de mayor relevancia que hacerlo con los regímenes restantes, puesto que asumimos a priori que mediante un esquema de control adecuado podemos evitar (o bien minimizar) que el sistema se desplace a cualquiera de los regímenes no deseados.

Retomando la dinámica del régimen de vaporización parcial

$$\dot{c} = \frac{q_e}{M}(c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta M r(c) + Q}{M \lambda_v} (v(c) - c) - r(c) := F_C(c, M) \quad (4.9)$$

$$\dot{M} = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + M r(c) \Theta + Q}{\lambda_v} - q := F_M(c, M) \quad (4.10)$$

Antes de mostrar los resultados de las simulaciones es conveniente mostrar que el intervalo $[0,1]$ es un invariante para \dot{c} , lo cual significa que cualquier condición inicial perteneciente a ese intervalo tendrá como punto estacionario un valor dentro del mismo intervalo.

$$F_C(0, M) = \frac{q_e}{M} c_e > 0 \quad (4.11)$$

$$F_C(1, M) = -r(1) < 0 \quad (4.12)$$

Lo anterior es válido debido a que los valores de los parámetros q_e y c_e son siempre positivos y diferentes de cero, la tasa de reacción es positiva para $c=1$ y es una imposición del modelo que el acumulado líquido M siempre sea diferente de cero y positivo.

A continuación se presenta un conjunto de simulaciones dinámicas con distintas condiciones iniciales para el régimen de vaporización parcial, las líneas punteadas representan los límites de factibilidad siendo la zona por encima de la línea verde el régimen sin vaporización y la zona por debajo de la línea roja el régimen de vaporización total. El punto óptimo de operación está representado por un círculo de color rojo y se encuentra en la frontera entre el régimen de vaporización parcial y el régimen sin vaporización.

Las siguientes simulaciones se realizaron utilizando el modelo dinámico del régimen de vaporización parcial y tienen como objetivo mostrar su topología.

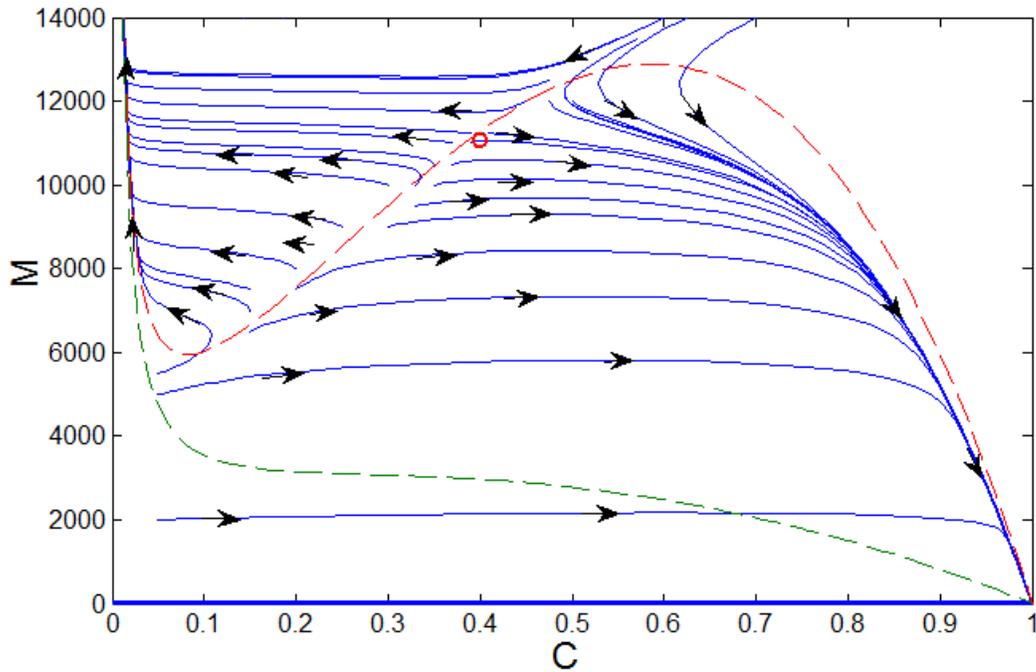


Figura 4. 6.- Trayectorias en el plano fase para distintas condiciones iniciales

Como se observa en la Figura 4.6 el punto óptimo de operación es claramente un repulsor puesto que ninguna de las trayectorias permanece en él. Dependiendo de la ubicación de la condición inicial, las trayectorias se dirigen hacia dos direcciones que corresponden a puntos estacionarios estables. El primer punto está ubicado en $c=0$ y $M=\infty$ (de forma asintótica) mientras que el segundo corresponde a $c=1$ $M=0$.

Los valores propios del punto óptimo corresponden a $\lambda_1 = -0.012$ y $\lambda_2 = 0.0638$ lo cual corrobora la inestabilidad observada, al graficar los vectores propios alrededor del punto óptimo se pueden observar las direcciones principales.

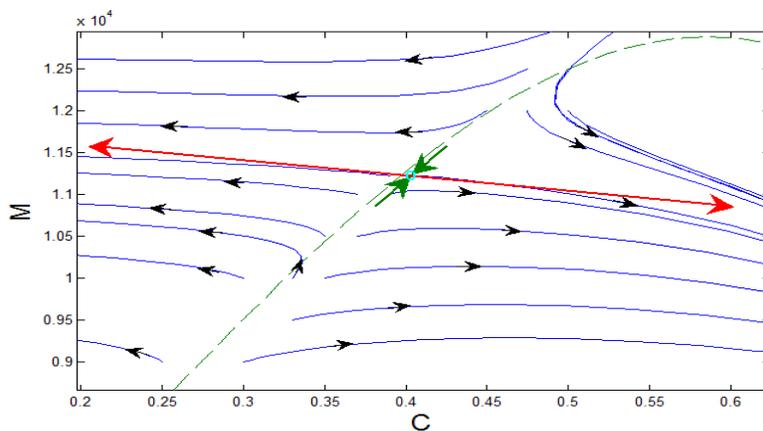


Figura 4. 7.-Vectores propios alrededor del punto óptimo

Analizando las trayectorias de la Figura 4.6 es posible entrever que el plano fase se encuentra dividido por dos curvas las cuales cortan en el punto óptimo. Sea X el conjunto invariante en $c[0,1]$ y sea \bar{X} el punto óptimo de operación entonces existen dos curvas C_A y C_R tales que:

- C_A es una curva atractora para X
- C_R es una curva repulsora para X
- \bar{X} es un atractor para C_R
- \bar{X} es un repulsor para C_A

A partir de la Figura 4.6 es posible imaginar la forma de las curvas C_A y C_R observando cómo existe una separatriz que pareciera coincidir con la frontera de factibilidad entre el régimen de vaporización parcial y el régimen sin vaporización.

De manera intuitiva el arreglo de las curvas en el plano fase tendría la siguiente forma aproximada:

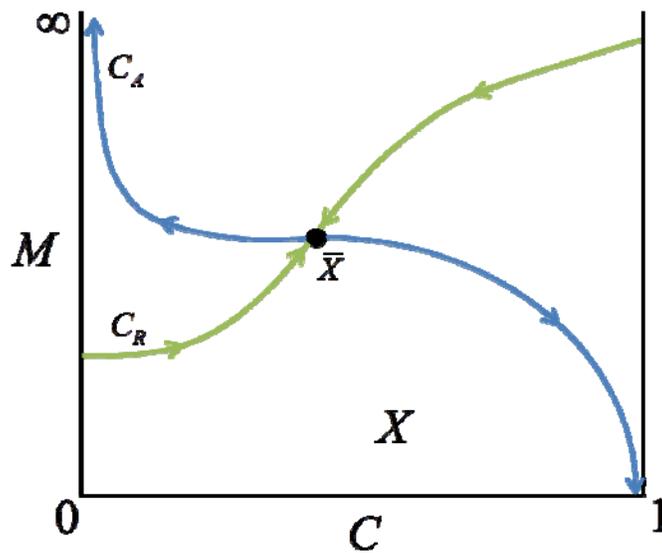


Figura 4. 8.- Topología aproximada del sistema

La Figura 4.7 muestra el arreglo de las curvas C_A y C_R con el conjunto invariante X en el plano c - M , todas las trayectorias que comiencen por debajo de la curva C_R tendrán como estado estacionario las coordenadas $c=1$ y $M=0$ mientras que las trayectorias iniciadas por encima de C_R tienden a alcanzar asintóticamente el punto $c=0$, $M=\infty$. La topología del sistema es similar a una silla de montar cuyo centro (y mínimo local) se encuentra en \bar{X} .

4.4.- La tarea del control

Una vez conocido el comportamiento dinámico del sistema, es posible establecer cuál será el máximo objetivo alcanzable por el control a diseñar, es decir, podemos retomar la formulación del problema de control dada en el Capítulo 2 ahora con una visión topológica del sistema.

A manera de resumen el sistema presenta las siguientes características:

- El estado óptimo \bar{X} es inestable a lazo abierto
- Además del estado óptimo \bar{X} , existen dos estados estacionarios estables a lazo abierto e indeseables (potencial de atractores extraños en operación a lazo cerrado bajo saturación)
- El conjunto es invariante en el intervalo $c [0,1]$ y no está acotado en M

La tarea del control descrita a grandes rasgos es garantizar que cualquier trayectoria no importando su condición inicial (dentro de los límites factibles) tenga como único punto de convergencia el punto óptimo de operación. Es además deseable que las trayectorias no pasen (o al menos permanezcan el menor tiempo posible) dentro de las zonas que pertenecen a los regímenes sin vaporización y vaporización total ya que son regiones donde el beneficio económico es considerablemente menor al del punto óptimo e incluso negativo.

El diseño del control debe entonces cumplir con las siguientes condiciones:

- Transformar X en un conjunto acotado en c y M
- Eliminar los dos estados estacionarios indeseables (generación de producto nula)
- Volver el estado óptimo \bar{X} estable
- Establecer un criterio de saturación adecuado que garantiza la ausencia de atractores extraños

En la Figura 4.8 se observa que el punto óptimo \bar{X} es atractor de la curva C_R y repulsor de la curva C_A , el diseño del control puede entonces aprovechar que existe una dirección benéfica para \bar{X} y convertirlo en un atractor de ambas curvas lo cual se manifestaría de la siguiente manera

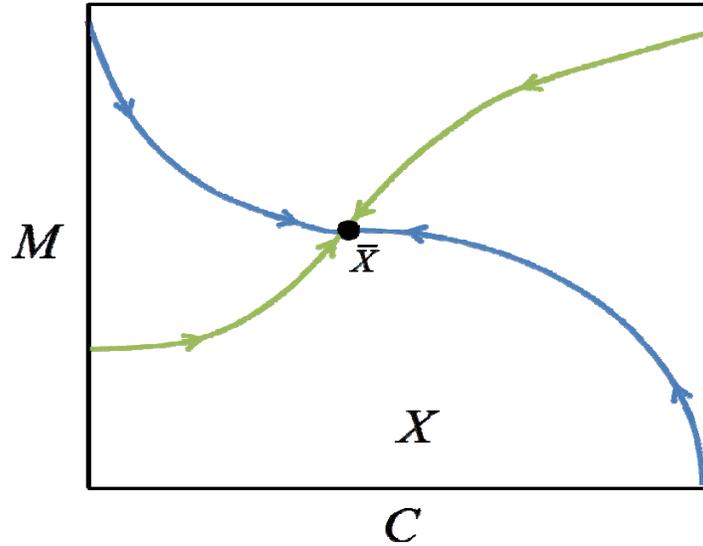


Figura 4. 9.-Efecto deseado del control en la topología del sistema

En la Figura 4.9 puede observarse que, de lograrse esta conversión, ahora X es un conjunto compacto en c - M con único estado estable el punto óptimo de operación. A partir del Teorema de Bendixon-Poincare (Teschl, 2010) se deduce que para nuestro caso, dado que X es un conjunto invariante y debido a la inexistencia de ciclos límites y a que existe un único punto de equilibrio entonces el punto óptimo de operación \bar{X} es el único punto al que converge cualquier trayectoria cuya condición inicial pertenezca a X .

Conclusiones

La aproximación de EQE del balance de calor no introduce grandes cambios respecto a la dinámica rigurosa, la estática no se ve modificada y la diferencia se evidencia en los tiempos de asentamiento siendo la dinámica aproximada un 5-10% más rápida que la dinámica rigurosa.

El sistema a lazo abierto presenta multiplicidad de estados estacionarios existiendo además del punto óptimo, dos estados estacionarios estables. Esto lleva a concluir que en ausencia de un criterio adecuado de los límites de saturación, existe la posibilidad de que al saturar el control se generen atractores extraños.

El sistema a lazo abierto muestra una topología con tres estados estacionarios siendo inestable el punto óptimo, el sistema es invariante en c pero no está acotado en M . La acción deseada del control requiere transformar al sistema en un invariante en c y M además de eliminar los dos estados estables y volver globalmente estable al punto óptimo de operación.

Capítulo 5.-Control por retroalimentación de estados (RE)

Resumen

En este capítulo se diseña, con base en modelo detallado, un control robusto no-lineal por retroalimentación de estados que garantiza la operación estable a lazo cerrado alrededor del punto óptimo (que, de capítulos anteriores, se sabe que es inestable a lazo abierto). Primero se identifican las condiciones de resolubilidad al problema en términos de pasividad (con los dos grados relativos igual a 1 y que la dinámica cero no existe). Luego se establece un criterio para su saturación que garantiza no existan atractores extraños (riesgo importante de la saturación). El desempeño del control se evalúa con simulaciones mostrando que el punto óptimo (antes inestable y acompañado de dos estados estables) es globalmente estable a lazo cerrado.

5.1.- Condición de resolubilidad

El problema de control robusto por retroalimentación de estados consiste en encontrar una ley de control de la siguiente forma:

$$u = \mu(x,d) \quad \mu = \begin{bmatrix} \mu_q(x,d) \\ \mu_Q(x,d) \end{bmatrix}$$

$$\mu_q(x,d) = \text{sat}[\mu_q(x,d)] \quad \text{con límites } q^- \text{ y } q^+$$

$$\mu_Q(x,d) = \text{sat}[\mu_Q(x,d)] \quad \text{con límites } Q^- \text{ y } Q^+$$

Donde x es el vector de estados y d las perturbaciones a los parámetros de entrada

Tal que al aplicarlo al separador flash reactivo:

$$\dot{x} = f[x, d, \mu(x,d)] := f(x,d,u) \quad x(0) = x_0$$

Con salidas medidas $y_T = \beta(c) \quad y \quad y_V = \nu(c)M$

Donde y_T es la temperatura del sistema y y_V el volumen de acumulado líquido fácilmente medible mediante un sensor de nivel.

Garantice que

- (i) El estado óptimo x_o sea el único estado estacionario, con estabilidad robusta
- (ii) En ausencia de saturación, el error en la salida medida se desvanezca exponencialmente con dinámica lineal de primer orden desacoplada y velocidad ajustable de acuerdo a la expresión

$$\dot{\tilde{y}}_T = -k_T \tilde{y}_T \quad \tilde{y}_T = y_T - \bar{y}_T$$

$$\dot{\tilde{y}}_V = -k_V \tilde{y}_V \quad \tilde{y}_V = y_V - \bar{y}_V$$

El modelo dinámico (mostrado en el Capítulo 2) reformulado de manera útil para propósito de control:

$$\dot{c} = f_c(c, M) - \gamma_c(c, M)Q \quad (5.1)$$

$$\dot{M} = f_M(c, M) - \gamma_M Q - q \quad (5.2)$$

Donde

$$f_c(c, M) = \frac{q_e}{M}(c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta M \alpha(c)}{M \lambda_v} (v(c) - c) - \alpha(c) \quad (5.3)$$

$$\gamma_c(c, M) = \frac{(v(c) - c)}{M \lambda_v} \quad (5.4)$$

$$f_M(c, M) = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + M \alpha(c) \Theta}{\lambda_v} \quad (5.5)$$

$$\gamma_M = -\frac{1}{\lambda_v} \quad (5.6)$$

De acuerdo a (A. Isidori, 2000) el problema tiene solución si el sistema es pasivo. Para que un sistema multivariable pueda considerarse pasivo deben de cumplirse las condiciones de grado relativo y fase mínima (Rodolphe Sepulchre, 1997), las condiciones a cumplir son:

- i) El sistema debe tener dos relaciones entrada-salida con grado relativo 1 cada una
- ii) La dinámica cero del sistema debe ser estable

i) Grado relativo del sistema

El grado relativo del sistema es el número de veces que hay que derivar las salidas respecto al tiempo hasta encontrar expresiones en las que de manera explícita aparezcan las entradas de control. El grado relativo uno significa que es necesario derivar una sola vez para encontrar expresiones algebraicas con solución única para las entradas de control.

A partir de la expresión para la salida y_T

$$y_T = \beta(c) \quad (5.7)$$

Derivando la salida respecto al tiempo

$$\dot{y}_T = \beta'(c)\dot{c} \quad (5.8)$$

Sustituyendo la expresión dinámica de c en su forma para propósito de control

$$\dot{y}_T = \beta'(c)f_c(c, M) - \beta'(c)\gamma_c(c, M)Q \quad (5.9)$$

Donde

$$\gamma_c(c, M) = \frac{v(c) - c}{M\lambda_v} \quad (5.10)$$

La expresión (5.9) muestra que la entrada de control Q aparece en la primera derivada. Dado que la derivada de la temperatura respecto a la concentración es siempre diferente de cero, entonces la condición que debe cumplirse para garantizar grado relativo uno es:

$$\frac{v(c) - c}{M\lambda_v} \neq 0 \quad (5.11)$$

Esta condición está relacionada con la volatilidad de los componentes, sistemas que presenten azeotropía no cumplirán la condición de grado relativo uno ya que la concentración de volátil en la fase vapor y en la fase líquida es idéntica, sin embargo para nuestro caso de estudio esta diferencia es siempre diferente de cero por lo cual se cumple siempre.

Para la salida y_V

$$y_v = v(c)M \quad (5.12)$$

Donde $v(c)$ es el volumen molar de la fase líquida. Derivando respecto al tiempo

$$\dot{y}_v = v(c)\dot{M} + v'(c)\dot{c}M \quad (5.13)$$

Sustituyendo las expresiones dinámicas de c y M en su forma para propósito de control

$$\dot{y}_v = v(c)f_M(c, M) + Mv'(c)f_c(c, M) - [\gamma_M + v'(c)M\gamma_c(c, M)]Q - v(c)q \quad (5.14)$$

En la ecuación (5.14) aparece de manera explícita la entrada de control q multiplicada por el volumen molar promedio de la fase líquida. La condición que ha de cumplirse para garantizar grado relativo uno es la siguiente:

$$v(c) \neq 0 \quad (5.15)$$

La condición se cumple para cualquier valor de c ya que el volumen molar promedio es siempre diferente de cero en el intervalo $[0,1]$.

ii) Dinámica cero

La dinámica cero resulta de suponer que tenemos una entrada de control tal que la salida a regular se mantiene constante lo cual genera un sub-sistema dinámico, el cual es requisito que tenga un único estado estacionario que sea estable. Cuando esta condición se cumple entonces se dice que el sistema es de “Fase mínima” lo cual es un requisito para que el sistema sea pasivo

En nuestro caso esta condición se cumple de manera trivial ya que la dimensión del sistema es cero pues tenemos dos entradas de control y dos salidas a regular por lo cual la dinámica cero no existe.

5.2.-Control por retroalimentación de estados

Definiendo el error de las variables medidas respecto a su valor nominal

$$\tilde{c} = c - \bar{c} \quad (5.16)$$

$$\tilde{M} = M - \bar{M} \quad (5.17)$$

Se desea que la dinámica del error sea de la siguiente forma

$$\dot{\tilde{c}} = -k_c \tilde{c} \quad (5.18)$$

$$\dot{\tilde{M}} = -k_M \tilde{M} \quad (5.19)$$

Donde k_c y k_M son positivas y constantes. Dado que los valores nominales son constantes entonces

$$\dot{(c - \bar{c})} = \dot{c} \quad (5.20)$$

$$\dot{(M - \bar{M})} = \dot{M} \quad (5.21)$$

Igualando (5.20) y (5.21) con (5.18) y (5.19) y aplicando la definición de error

$$\dot{c} = -k_c (c - \bar{c}) \quad (5.22)$$

$$\dot{M} = -k_M (M - \bar{M}) \quad (5.23)$$

La imposición de la dinámica (lineal, desacoplada, de primer orden) al sistema nos lleva a

$$\frac{q_e}{M} (c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta M r(c) + Q}{M \lambda_v} (v(c) - c) - r(c) = -k_c (c - \bar{c}) \quad (5.24)$$

$$q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + M r(c) \Theta + Q}{\lambda} - q = -k_M (M - \bar{M}) \quad (5.25)$$

Resolviendo (5.24) existe una solución única para Q

$$Q = \left(\frac{M \lambda_v}{(v(c) - c)} \right) \left[k_c (c - \bar{c}) + \frac{q_e}{M} (c_e - c) - r(c) \right] - q_e c_p (T_e - \beta(c)) - \Theta M r(c) := \mu_Q^{RE}(c, M) \quad (5.26)$$

Por otro lado, resolviendo (5.25)

$$q = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + Mr(c)\Theta + Q}{\lambda} + k_M (M - \bar{M}) \quad (5.27)$$

Sustituyendo (5.26) en (5.27) obtenemos la expresión para q en función únicamente de c y M

$$u_q(c, M) = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + Mr(c)\Theta + u_Q(c, M)}{\lambda} + k_M (M - \bar{M}) \quad (5.28)$$

La sustitución de las ecuaciones (5.26) y (5.28) dan como resultado la dinámica del sistema a lazo cerrado

$$\dot{c} = \left(\frac{1}{1 + \psi(c)} \right) \left[\frac{q_e}{M} (c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta Mr(c) + u_Q}{M \lambda_v} (v(c) - c) - r(c) \right] \quad (5.29)a$$

$$\dot{M} = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c) - \beta'(c)(c_e - c)) + Mr(c) [\Theta + c_p \beta'(c)] + u_Q}{\lambda - (c_v - c) c_p \beta'(c)} - u_q \quad (5.29)b$$

$$q_v = \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c) - \beta'(c)(c_e - c)) + Mr(c) [\Theta + c_p \beta'(c)] + u_Q}{\lambda - (c_v - c) c_p \beta'(c)} \quad (5.29)c$$

$$u_Q = \mu_Q(c, M; q_e, c_e, T_e), \quad u_q = \mu_q(c, M; q_e, c_e, T_e) \quad (5.29)d$$

Para ajustar la ganancia del controlador (u_Q) se busca que la dinámica a lazo cerrado sea entre 3-5 veces más rápida que la dinámica natural del sistema

$$k_c \approx 3k_n \quad (5.30)$$

Donde k_n es la ganancia natural del sistema la cual se define como

$$k_n = \left(\frac{t_a}{4} \right)^{-1} \quad (5.31)$$

En la ecuación (5.31) t_a es el tiempo de asentamiento del sistema el cual se define como el tiempo necesario para que la salida del sistema alcance una diferencia constante de aproximadamente el 5% respecto de su valor final.

Analizando la simulación dinámica del sistema a lazo abierto manteniendo M constante el tiempo de asentamiento es aproximadamente de 70 segundos lo que da una ganancia natural de 0.050 por lo cual la ganancia de la entrada de control u_Q se fija

$$k_T = 3(0.05) = 0.15 \quad (5.32)$$

La ganancia para el control de nivel se prueba con un valor inicial de 0.05

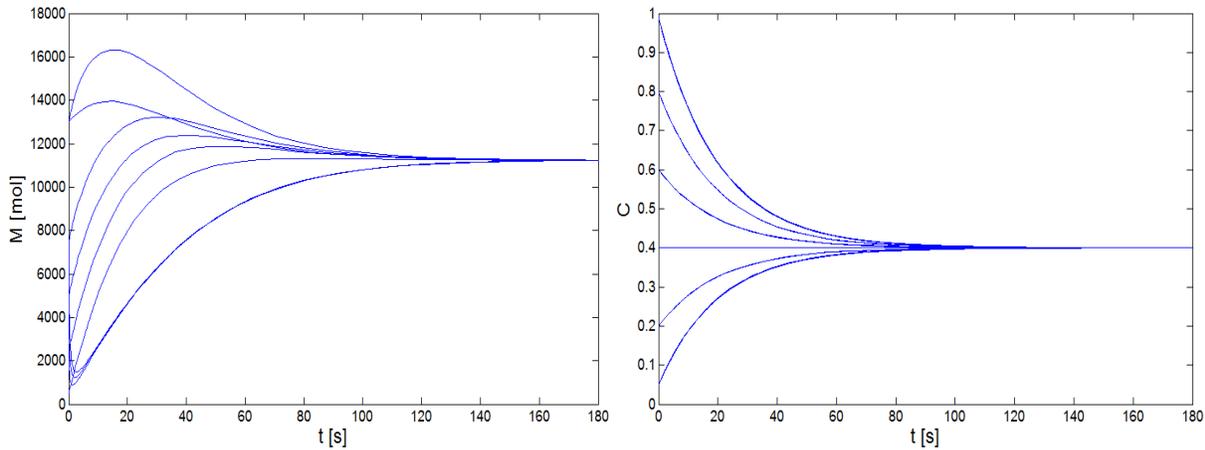


Figura 5. 1.- Acción del control por retro de estados sobre los estados c y M

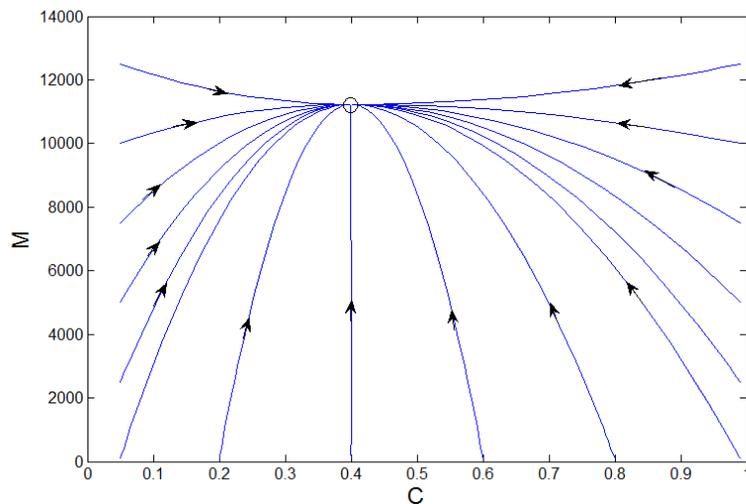
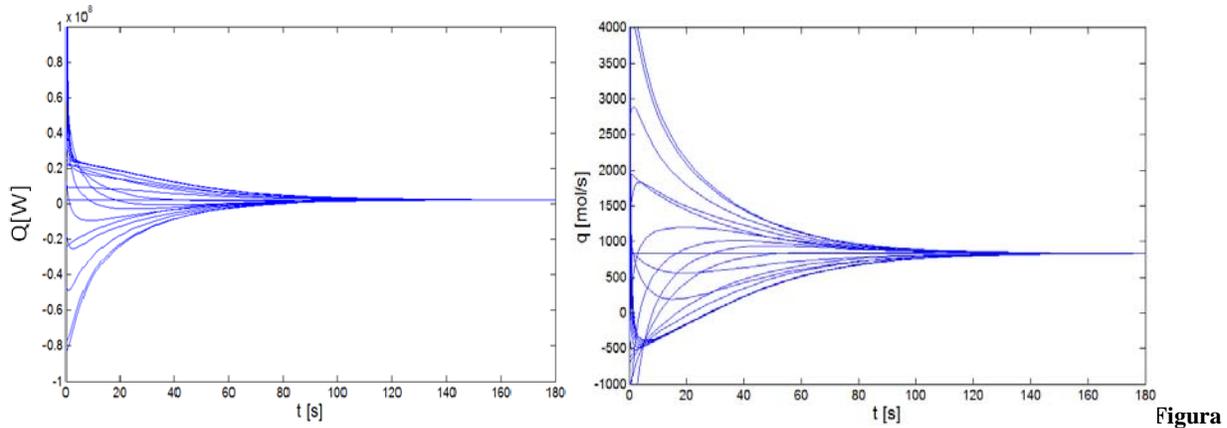


Figura 5. 2.- Trayectorias en el plano fase bajo la acción del control por retro de estados

Las Figura 5.1 muestra que no importando la condición inicial los estados convergen al estado correspondiente al punto óptimo de operación, el tiempo de asentamiento para el estado c es en promedio de 140s y para el estado M de 110s. La figura 5.2 muestra el efecto del control en la topología del sistema

pues es posible observar que el punto óptimo ahora es estable y no existe ningún otro punto estacionario lo que lo convierte en atractor global.



5. 3.- Esfuerzo de las entradas de control Q y q para distintas condiciones iniciales

Al analizar los esfuerzos de control mostrados en la Figura 5.3 se observa que la entrada Q alcanza valores de hasta $8 \times 10^7 J$ así como valores negativos, lo que implica retirar calor del sistema lo cual significaría contar con un sistema de refrigeración cuyo costo es más elevado que el de agregar calor al proceso. Por otra parte la entrada q muestra valores desproporcionados de hasta $3800 mol/s$ (alrededor de 5 veces el flujo de entrada) así como valores negativos lo cual carece de sentido físico.

5.3.-Saturación del control

La elección adecuada de los límites de saturación para el controlador garantiza la existencia de un solo estado estacionario globalmente estable. Un criterio adecuado para elegir estos puntos (Jesús Alvarez J. A., 1991) consiste en cumplir las siguientes condiciones:

$$u^+ > u^* \tag{5.33}$$

Donde u^+ es el límite superior de saturación, es decir, el valor máximo que puede alcanzar el controlador y u^* es el punto de bifurcación ubicado a la derecha del estado estacionario óptimo

$$u^- < u_* \tag{5.34}$$

Donde u^- es el límite inferior de saturación, es decir, el valor mínimo que puede alcanzar el controlador y u^* es el punto de bifurcación ubicado a la izquierda del estado estacionario óptimo.

El argumento para escoger los límites de saturación lejos de los puntos de bifurcación es garantizar que la saturación ocurra en una zona donde exista un solo estado estacionario dejando que el control actúe sin cota en la zona de multiplicidad. Al violar esta condición y escoger un límite de saturación dentro de una zona de multiplicidad puede generarse un atractor extraño ya que el control se saturará donde existe más de un estado estacionario.

El separador flash reactivo cuenta con dos estados dinámicos y dos entradas de control por lo cual no es posible la visualización de los puntos de bifurcación ya que el espacio completo consta de 4 dimensiones. Sin embargo es posible observar las zonas donde se presenta multiplicidad y unicidad al proyectar por separado los estados c y M en función de las entradas de control.

Como se mencionó en el Capítulo 3, la curva de bifurcación que separa en el espacio tetradimensional estado-entrada las zonas de unicidad y multiplicidad se obtiene al aplicar la condición:

$$\frac{\partial Q}{\partial c} = 0 \quad (5.35)$$

La condición mencionada lleva a una expresión parametrizada de la curva de bifurcación de la siguiente forma

$$c = \kappa, \quad 0 \leq \kappa \leq 1 \quad (5.36)a$$

$$m = \xi_M(\kappa) \quad (5.36)b$$

$$Q = \xi_Q(\kappa) \quad (5.36)c$$

$$q = \xi_q(\kappa) \quad (5.36)d$$

La proyección de la curva de bifurcación en el plano de entradas Q - q

Mediante la proyección de la curva de bifurcación en el espacio de entradas Q - q (mostrada en el Capítulo 3) es posible establecer un criterio para la saturación del control pidiendo que los límites mínimo y máximo de cada entrada, estén por fuera de la curva mostrada, es decir

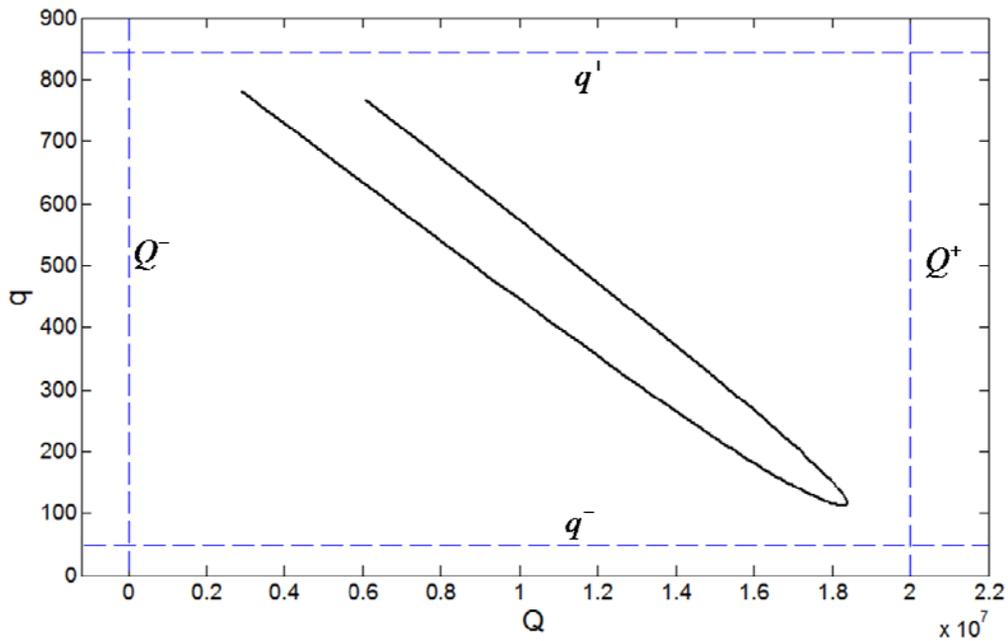


Figura 5. 4.-Elección de los límites de saturación

$$u_Q(c, M) = \begin{cases} u_Q \geq Q^+ & Q^+ \\ Q^+ > u_Q > Q^- & u_Q \\ u_Q \leq Q^- & Q^- \end{cases}$$

$$u_q(c, M) = \begin{cases} u_q \geq q^+ & q^+ \\ q^+ > u_q > q^- & u_q \\ u_q \leq q^- & q^- \end{cases}$$

Los límites de saturación se muestran en la siguiente tabla

Tabla 5. 1.-Límites de saturación

	Valor	Unidades
Q^+	2×10^7	W
Q^-	0	W
q^+	50	mol/s
q^-	850	mol/s

Mediante una gráfica de nivel es posible observar que el plano fase c - M queda dividido en zonas por el controlador saturado.

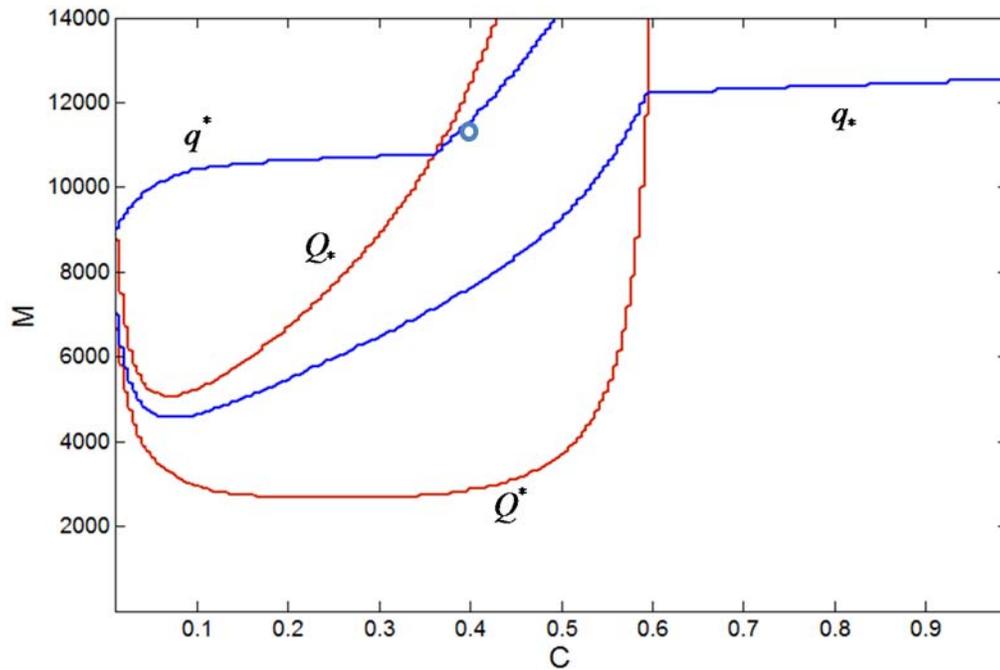


Figura 5. 5.-División del plano fase como efecto de la saturación del control

Las curvas de color azul corresponden a los límites de saturación de la entrada q mientras que las líneas rojas indican la entrada Q .

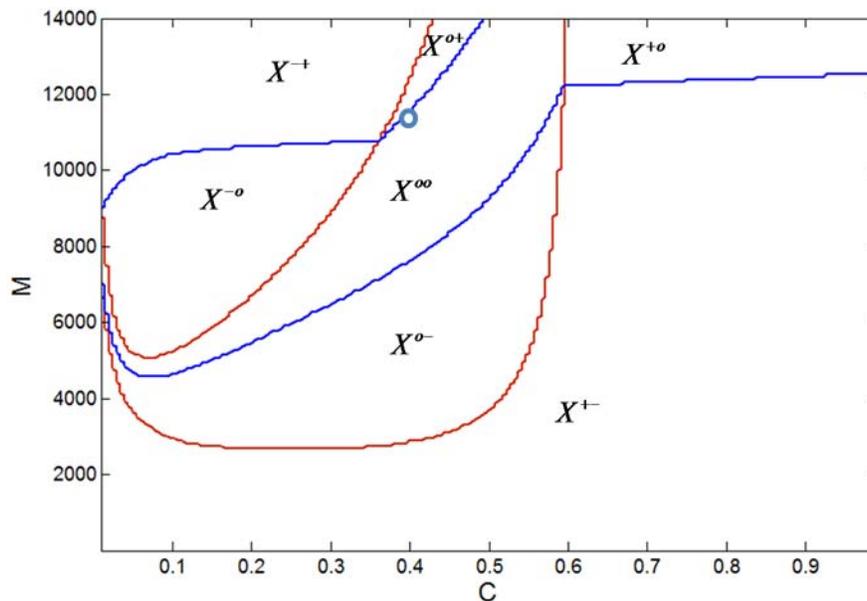


Figura 5. 6.- División del plano fase mostrando zonas de saturación y no saturación

El plano fase queda dividido en 7 zonas de acuerdo al tipo de saturación del controlador. El primer super-índice se refiere a la entrada Q mientras que el segundo a la entrada q . Los símbolos + y - indican saturación por arriba (límite superior) y por abajo (límite inferior) respectivamente, 0 significa que el control no está saturado.

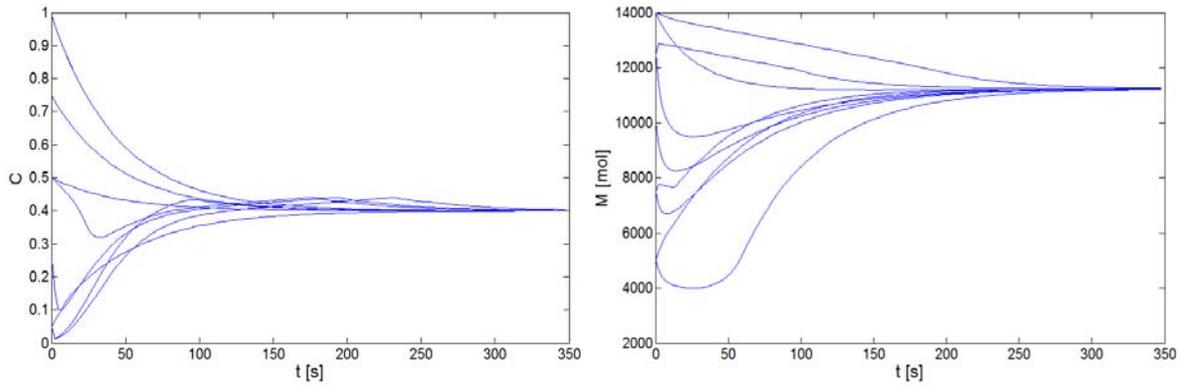


Figura 5. 7.-Dinámica a lazo cerrado con control saturado por retro de estados

La Figura 5.7 muestra el comportamiento del sistema bajo la acción del control por RE con saturación. En comparación con el control sin saturar los tiempos de asentamiento son aproximadamente del doble, esto se debe a que al estar bajo saturación, el control tiene una menor libertad de acción.

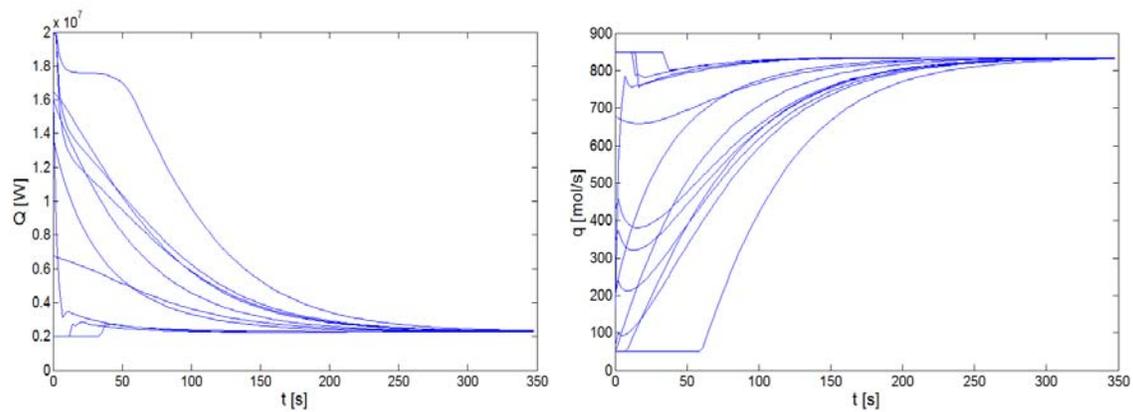


Figura 5. 8.-Esfuerzos del control por retro de estados bajo saturación

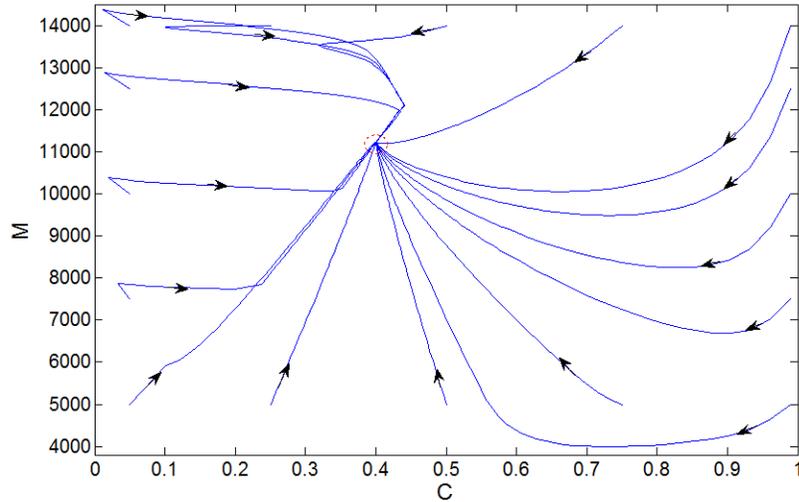


Figura 5. 9.-Dinámica a lazo cerrado con control por RE saturado en el plano fase C-M

El plano fase mostrado en la Figura 5.9 muestra la dinámica a lazo cerrado bajo la acción del control saturado por RE. Se puede observar que el plano muestra un único estado estacionario el cual es estable y que cualquier condición inicial converge al punto óptimo de operación (inestable y acompañado de dos estados a lazo abierto), por lo tanto es posible concluir que el control cumple su propósito.

Ahora se muestra el efecto de una mala elección de los límites de saturación. Escogiendo el límite inferior de la entrada Q así como el límite superior de la entrada q de tal manera que corten la curva de bifurcación, entonces existe la posibilidad de generar atractores extraños lo que causa el fallo del controlador.

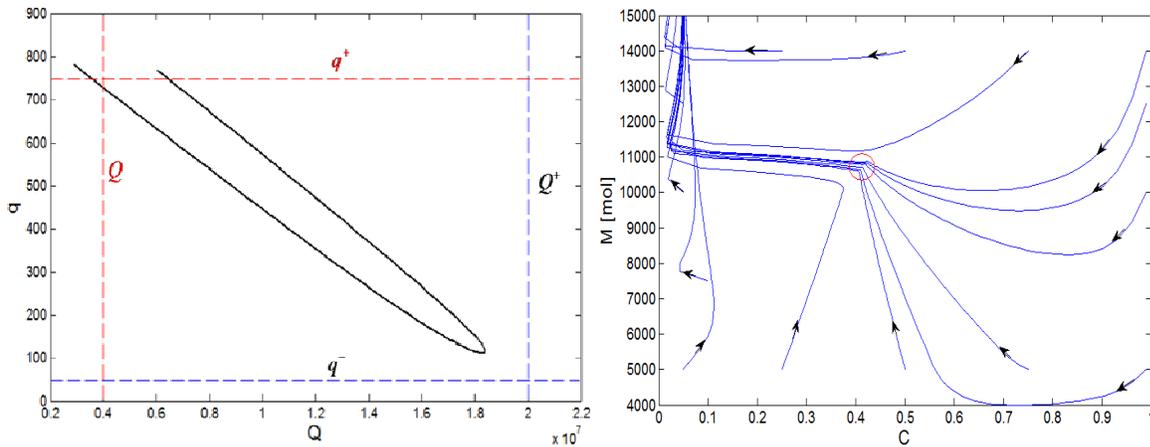


Figura 5. 4.-a) Elección de los límites violando el criterio de saturación, b) Dinámica a lazo cerrado resultante

La Figura 5.9a muestra como un límite de saturación de cada entrada viola el criterio de saturación dado en esta sección. Como consecuencia, la dinámica a lazo cerrado no muestra al punto óptimo como

atractor global. Como se puede observar en las trayectorias mostradas en la Figura 5.9b, a pesar de que varias condiciones iniciales parecen aproximarse al punto óptimo, ninguna converge en su vecindad sino que se alejan en dirección de $M = \infty$ y $c=0$.

Conclusiones

Se identificó la condición de resolubilidad para el problema de control encontrando que el sistema tiene un par de relaciones entrada-salida cada una con un grado relativo igual a 1 y que una dinámica cero inexistente, por lo que el sistema es pasivo y el problema tiene solución en todos los puntos.

Se diseñó un control no-lineal robusto por retroalimentación de estados basado en modelo detallado el cual servirá como máxima meta alcanzable a recuperar por el control por retroalimentación de salidas. El control resultante garantiza la operación robusta estable alrededor del punto óptimo a lazo cerrado. Los estados estacionarios adicionales se eliminaron y el espacio C-M es ahora acotado. El estado estacionario óptimo es el único estado estacionario y posee estabilidad global.

Se estableció un criterio para la saturación del control mediante la caracterización de la curva de bifurcación de forma parametrizada lo cual permite observar sus proyecciones en el plano de entradas $Q-q$ y escoger los límites en zonas de un solo estado estacionario lo cual elimina la presencia de atractores extraños.

Capítulo 6.-Control por retroalimentación de salidas (RS)

Resumen

- *En este capítulo se diseña el controlador por retroalimentación de salidas para obtener estabilidad robusta a lazo cerrado con el estado óptimo (inestable a lazo abierto, acompañado de dos estados estacionarios y posiblemente estructuralmente inestable) como único atractor nodo (sin estados estacionarios extraños debidos a saturación) en un conjunto acotado de estados, suficientemente grande en relación a condiciones prácticas de operación, en el plano concentración-acumulado.*

Primero, para obtener un controlador lineal, desacoplado y con dependencia reducida en el modelo detallado, se diseña un modelo lineal, dinámico y desacoplado con dos estados, dos salidas y dos controles. El controlador resultante: (i) Consiste de dos controladores PI con protección anti-encuerdamiento cuya implementación requiere solamente aproximaciones de las ganancias estáticas calor inyectado a cambio en temperatura y flujo de salida a volumen de líquido, (ii) Tiene un criterio que (constituye una extensión del criterio para el control no-lineal) de estabilidad a lazo cerrado en términos de límites y ganancias de control (iii) Recupera, con la velocidad de convergencia de un observador, el desempeño del control no-lineal (basado en el modelo detallado del separador) por retroalimentación de estados usando el mismo criterio de saturación y garantiza la operación robusta estable alrededor del punto óptimo

6.1.-Dinámica de las salidas

A partir del modelo dinámico en su forma de control con funcionalidades definidas en el capítulo anterior

$$\dot{c} = f_c(c, M) - \gamma_c(c, M)Q \quad (6.1)$$

$$\dot{M} = f_M(c, M) - \gamma_M Q - q \quad (6.2)$$

Las salidas a regular y_V y y_T corresponden al volumen de líquido y a la temperatura del sistema (ambos fácilmente medibles)

$$y_V = Mv(c) = V \quad (6.3)$$

$$y_T = \beta(c) = T \quad (6.4)$$

Derivando las salidas respecto al tiempo se obtiene su expresión dinámica

$$\dot{y}_V = \dot{M}v(c) + Mv'(c)\dot{c} \quad (6.5)$$

$$\dot{y}_T = \beta'(c)\dot{c} \quad (6.6)$$

Sustituyendo la dinámica de c y M en (6.5) y (6.6)

$$\dot{y}_V = (f_M(c, M) + \gamma_M Q - q)v(c) + Mv'(c)(f_c(c, M) - \gamma_c(c, M)Q) \quad (6.7)$$

$$\dot{y}_T = \beta'(c)(f_c(c, M) - \gamma_c(c, M)Q) \quad (6.8)$$

6.2.- Diseño del modelo

A continuación se diseña un modelo para la dinámica de las salidas buscando máxima simplicidad, linealidad y desacoplamiento.

Arreglando las ecuaciones

$$\dot{y}_V = -v(\bar{c})q + q[-v(c) + v(\bar{c})] + (f_M(c, M) + \gamma_M Q)v(c) + Mv'(c)(f_c(c, M) - \gamma_c(c, M)Q) \quad (6.9)$$

$$\dot{y}_T = -\beta'(\bar{c})\gamma_c(\bar{c}, \bar{M})Q + Q(\beta'(\bar{c})\gamma_c(\bar{c}, \bar{M}) - \beta'(c)\gamma_c(c, M)) + \beta'(c)f_c(c, M) \quad (6.10)$$

Definiendo las siguientes constantes:

$$a_V = -v(\bar{c}) \quad (6.11)$$

$$a_T = -\beta'(\bar{c})\gamma_c(\bar{c}, \bar{M}) \quad (6.12)$$

Agrupando los términos restantes

$$b_V = -q[v(c) - v(\bar{c})] + (f_M(c, M) + \gamma_M Q)v(c) + Mv'(c)(f_c(c, M) - \gamma_c(c, M)Q) \quad (6.13)$$

$$b_T = Q(\beta'(\bar{c})\gamma_c(\bar{c}, \bar{M}) - \beta'(c)\gamma_c(c, M)) + \beta'(c)f_c(c, M) \quad (6.14)$$

Sustituyendo las expresiones (6.11)-(6.14) en la dinámica de las salidas se llega a las siguientes expresiones que corresponden a un modelo lineal de dos estados con dinámica desacoplada. Las entradas b_V y b_T son desconocidas

$$\text{Volumen de líquido} \quad \dot{y}_V = a_V q + b_V \quad (6.15)$$

$$\text{Temperatura} \quad \dot{y}_T = a_T Q + b_T \quad (6.16)$$

6.3.-Observador de orden reducido

Las salidas se escogen de tal manera que su medición sea fácil, rápida y barata en términos económicos. A partir de su medición en línea y dado que conocemos de dato los valores de las entradas Q y q entonces es posible, mediante el diseño de un observador de orden reducido, estimar el parámetro desconocido.

Para asegurar la convergencia del estimador se pide que la rapidez de reconstrucción del estimado sea mucho mayor que la tasa de cambio del parámetro desconocido

$$\frac{\dot{b}_V}{b_V} \ll \omega_V \quad \frac{\dot{b}_T}{b_T} \ll \omega_T \quad (6.17)$$

Entonces

$$\dot{b}_V \approx 0 \quad \dot{b}_T \approx 0 \quad (6.18)$$

Se requiere que el observador tenga la siguiente dinámica

$$\dot{\hat{b}}_V = \omega_V (\dot{y}_V - \dot{\hat{y}}_V) \quad (6.19)$$

$$\dot{\hat{b}}_T = \omega_T (\dot{y}_T - \dot{\hat{y}}_T) \quad (6.20)$$

A partir de la dinámica del estimado de las salidas

$$\dot{\hat{y}}_V = a_V q + \hat{b}_V \quad (6.21)$$

$$\dot{\hat{y}}_T = a_T q + \hat{b}_T \quad (6.22)$$

Sustituyendo (6.21) y (6.22) en (6.19) y (6.20) respectivamente

$$\dot{\hat{b}}_V = \omega_V (\dot{y}_V - a_V q - \hat{b}_V) \quad (6.23)$$

$$\dot{\hat{b}}_T = \omega_T (\dot{y}_T - a_T Q - \hat{b}_T) \quad (6.24)$$

Las ecuaciones (6.23) y (6.24) son expresiones dinámicas que permiten estimar los parámetros desconocidos b_V y b_T a partir de la medición de las salidas y_V y y_T y dando de dato los valores de las entradas Q y q .

Para propósitos útiles al control es conveniente introducir un cambio de coordenadas para el observador

$$\chi_V = \hat{b}_V - \omega_V y_V \quad (6.25)$$

$$\chi_T = \hat{b}_T - \omega_T y_T \quad (6.26)$$

Sustituyendo en (6.23) y (6.24)

$$\dot{\chi}_V = -\omega_V \chi_V - \omega_V (a_V q + \omega_V y_V) \quad (6.27)$$

$$\dot{\chi}_T = -\omega_T \chi_T - \omega_T (a_T Q + \omega_T y_T) \quad (6.28)$$

Resolviendo para b_V y b_T

$$\hat{b}_V = \chi_V + \omega_V y_V \quad (6.29)$$

$$\hat{b}_T = \chi_T + \omega_T y_T \quad (6.30)$$

6.4.-Control por retroalimentación de salidas y conexión con control PI

Control por retroalimentación de salidas

Se busca que la dinámica de las salidas obedezca la siguiente expresión

$$\dot{y}_V = -k_V (y_V - \bar{y}_V) \quad (6.31)$$

$$\dot{y}_T = -k_T (y_T - \bar{y}_T) \quad (6.32)$$

Donde \bar{y}_V y \bar{y}_T indican el valor nominal de las salidas.

Igualando (6.31) y (6.32) con (6.15) y (6.16) respectivamente

$$a_V q + b_V = -k_V (y_V - \bar{y}_V) \quad (6.33)$$

$$a_T Q + b_T = -k_T (y_T - \bar{y}_T) \quad (6.34)$$

Resolviendo para las entradas de control se genera la ley de control correspondiente

$$q = \frac{-b_V - k_V (y_V - \bar{y}_V)}{a_V} \quad (6.35)$$

$$Q = \frac{-b_T - k_T (y_T - \bar{y}_T)}{a_T} \quad (6.36)$$

Sustituyendo (6.29) y (6.30)

$$q = \frac{-\chi_V - \omega_V y_V - k_V (y_V - \bar{y}_V)}{a_V} := \mu_q^{RS} (y_V, \chi_V) \quad (6.37)$$

$$Q = \frac{-\chi_T - \omega_T y_T - k_T (y_T - \bar{y}_T)}{a_T} := \mu_Q^{RS} (y_T, \chi_T) \quad (6.38)$$

Donde el superíndice indica control por RS y el subíndice la entrada de control. Las entradas de control dependen de los valores de las salidas así como del estimador. Al sustituir las expresiones (6.37)-(6.38) en la dinámica del sistema se obtiene el modelo dinámico a lazo cerrado

$$\dot{c} = \left(\frac{1}{1 + \psi(c)} \right) \left[\frac{q_e}{M} (c_e - c) - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c)) + \Theta Mr(c) + u_Q (\chi_T, T)}{M \lambda_v} (v(c) - c) - r(c) \right]$$

$$\dot{M} = q_e - \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c) - \beta'(c)(c_e - c)) + Mr(c) [\Theta + c_p \beta'(c)] + u_T (\chi_T, T)}{\lambda - (c_v - c) c_p \beta'(c)} - u_q (\chi_V, V)$$

$$q_v = \frac{q_e c_p (T_e - \beta(c) - \beta'(c)(c_e - c)) + Mr(c) [\Theta + c_p \beta'(c)] + u_Q (c, M)}{\lambda - (c_v - c) c_p \beta'(c)}$$

$$\dot{\chi}_V = -\omega_V \chi_V - \omega_V (a_V q + \omega_V V)$$

$$\dot{\chi}_T = -\omega_T \chi_T - \omega_T (a_T Q + \omega_T T)$$

$$\hat{b}_V = \chi_V + \omega_V V, \quad \hat{b}_T = \chi_T + \omega_T T$$

$$u_q = \mu_q^{RS} (y_V, \chi_V), \quad u_Q = \mu_Q^{RS} (y_T, \chi_T)$$

Conexión con el Control PI

En trabajos recientes (Salgado, Alvarez, Schaum, & Moreno, 2012) se ha demostrado que existe una conexión entre técnicas avanzadas de control (Control no-lineal) y controles tipo PI. A la luz de propiedades de pasividad y observabilidad se muestra que el control no-lineal por retroalimentación de salidas es equivalente a un control PI mejorado lo cual es un resultado no trivial.

Á partir de la expresión de las entradas de control dadas en (6.37) y (6.38)

$$q = \frac{\chi_V + \omega_V y_V + k_V (y_V - \bar{y}_V)}{-a_V} \quad (6.37)$$

$$Q = \frac{\chi_T + \omega_T y_T + k_T (y_T - \bar{y}_T)}{-a_T} \quad (6.38)$$

Sumando y restando $\bar{\chi} - \omega\bar{y}$ en el numerador y agrupando términos

$$q = \frac{(\chi_V - \bar{\chi}_V) + (\omega_V + k_V)(y_V - \bar{y}_V) + \bar{\chi}_V + \omega_V \bar{y}_V}{-a_V} \quad (6.39)$$

$$Q = \frac{(\chi_T - \bar{\chi}_T) + (\omega_T + k_T)(y_T - \bar{y}_T) + \bar{\chi}_T + \omega_T \bar{y}_T}{-a_T} \quad (6.40)$$

Definiendo variables de desviación para χ_V y χ_T

$$\xi_V = \chi_V - \bar{\chi}_V \quad (6.41)$$

$$\xi_T = \chi_T - \bar{\chi}_T \quad (6.42)$$

Donde $\bar{\chi}_V$ y $\bar{\chi}_T$ se obtienen a partir de (6.27) y (6.28) en estado estacionario

$$\bar{\chi}_V = -(\omega_V \bar{q} + \omega_V \bar{y}_V) \quad (6.43)$$

$$\bar{\chi}_T = -(\omega_T \bar{Q} + \omega_T \bar{y}_T) \quad (6.44)$$

Sustituyendo en (6.39) y (6.40) y agrupando

$$a_V (q - \bar{q}) = -\xi_V - (\omega_V + k_V)(y_V - \bar{y}_V) \quad (6.45)$$

$$a_T (Q - \bar{Q}) = -\xi_T - (\omega_T + k_T)(y_T - \bar{y}_T) \quad (6.46)$$

Por otro lado, sustituyendo (6.37) y (6.38) en (6.27) y (6.28) en se obtiene

$$\dot{\chi}_V = \omega_V k_V (y_V - \bar{y}_V) \quad (6.47)$$

$$\dot{\chi}_T = \omega_T k_T (y_T - \bar{y}_T) \quad (6.48)$$

Dado que la dinámica de χ es igual a la dinámica de su variable en desviación ξ , entonces

$$\xi_V = \omega_V k_V \int_0^{t'} (y_V - \bar{y}_V) dt \quad (6.49)$$

$$\xi_T = \omega_T k_T \int_0^{t'} (y_T - \bar{y}_T) dt \quad (6.50)$$

Sustituyendo en (6.45) y (6.46)

$$a_V (q - \bar{q}) = -(\omega_V + k_V)(y_V - \bar{y}_V) - \omega_V k_V \int_0^{t'} (y_V - \bar{y}_V) dt \quad (6.51)$$

$$a_T (Q - \bar{Q}) = -(\omega_T + k_T)(y_T - \bar{y}_T) - \omega_T k_T \int_0^{t'} (y_T - \bar{y}_T) dt \quad (6.52)$$

Arreglando en términos de variable de desviación

$$\tilde{q} = k_{P_V} \left[\tilde{y}_V + \frac{1}{\tau_V} \int_0^{t'} \tilde{y}_V dt \right] := \mu_V^{PI}(\tilde{y}_V) \quad (6.53)$$

$$\tilde{Q} = k_{P_T} \left[\tilde{y}_T + \frac{1}{\tau_T} \int_0^{t'} \tilde{y}_T dt \right] := \mu_T^{PI}(\tilde{y}_T) \quad (6.54)$$

Donde k_P representa la ganancia del término proporcional y τ la ganancia del término integral

$$k_{P_V} = \frac{k_V + \omega_V}{-a_V}, \quad k_{P_T} = \frac{k_T + \omega_T}{-a_T}, \quad \tau_V = \frac{k_V + \omega_V}{k_V \omega_V}, \quad \tau_T = \frac{k_T + \omega_T}{k_T \omega_T} \quad (6.55)$$

Las ecuaciones (6.53)-(6.54) tienen la forma característica de un control PI. El control resultante es equivalente a un PI con protección anti-encuadamiento (Salgado, Alvarez, Schaum, & Moreno, 2012) que lo hace preferible a un controlador PI estándar (Doyle, 1999). La protección anti-encuadamiento se debe a la combinación de control-observador donde el observador continua funcionando sin importar si el control se encuentra o no saturado.

Dinámica a lazo cerrado con control por RS

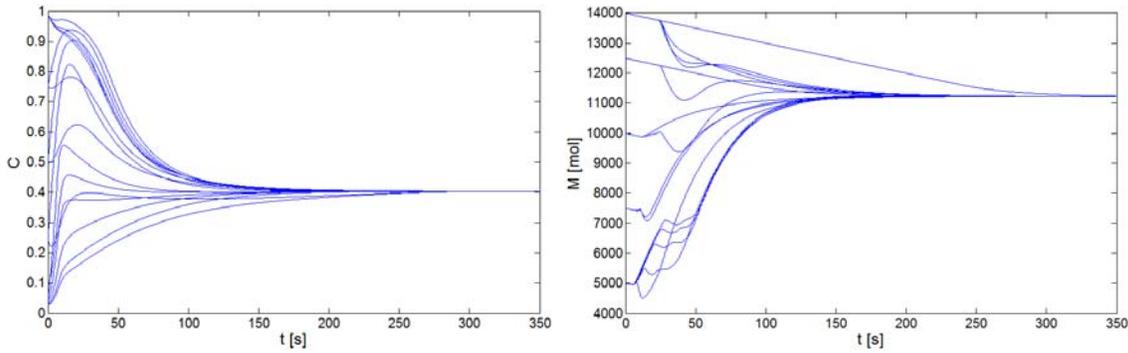


Figura 6. 1.-Dinámica a lazo cerrado con CRS para distintas condiciones iniciales

La Figura 6.1 muestra el comportamiento del separador flash reactivo bajo la acción del controlador. Para distintas condiciones iniciales los estados convergen a un único estado estacionario que corresponde al punto óptimo de operación lo cual significa que los estados adicionales han sido eliminados por la acción del controlador. El punto óptimo de operación ahora es globalmente estable.

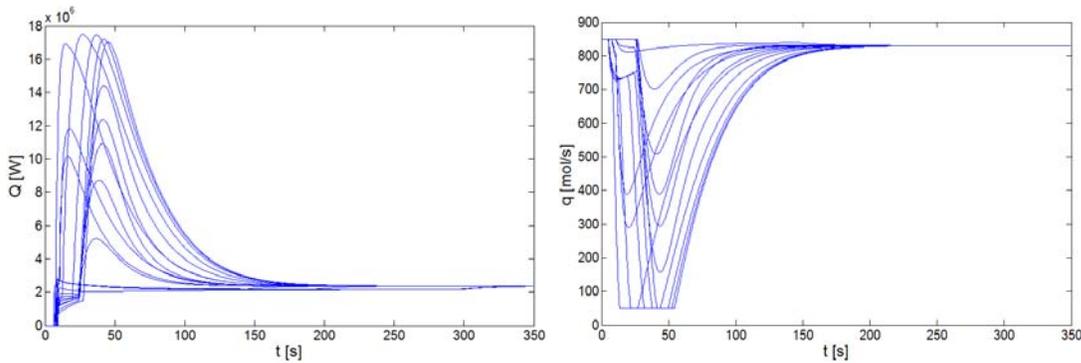


Figura 6. 2.-Esfuerzos de control correspondientes a las simulaciones de la Figura 6.1

Los esfuerzos de control son razonables y las entradas de control no permanecen mucho tiempo bajo saturación. El flujo de calor se satura únicamente por abajo mientras que el flujo de salida de líquido muestra doble saturación.

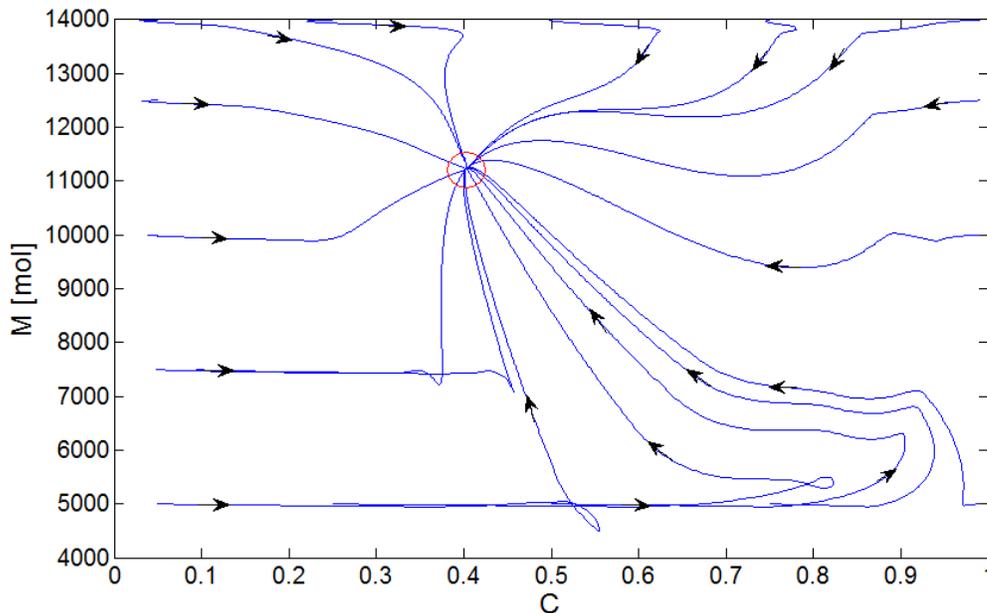


Figura 6. 3.-Dinámica a lazo cerrado

El plano fase con las trayectorias para distintas condiciones iniciales muestra la acción del controlador. Como puede apreciarse existe un único atractor que es el punto óptimo de operación. El efecto de la saturación del controlador causa que algunas trayectorias parezcan alejarse del punto óptimo para luego converger a este.

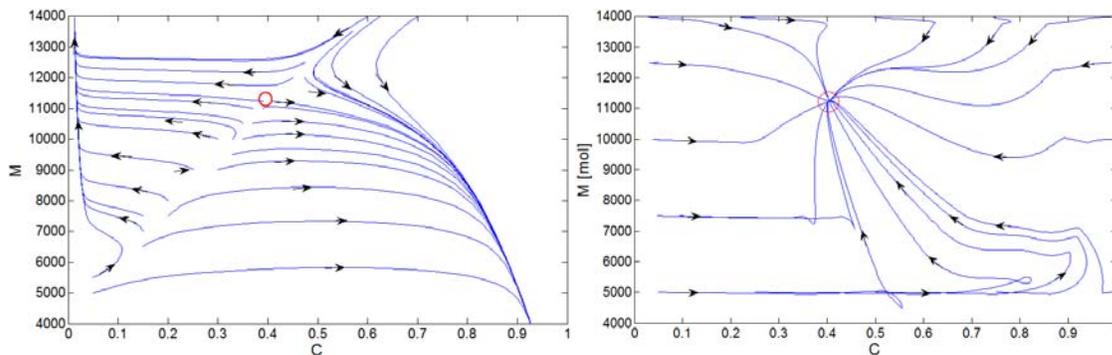


Figura 6. 4.-Dinámica del separador flash reactivo: a) Lazo abierto y b) Lazo cerrado

Con objeto de resaltar el desempeño del control diseñado se muestra del lado izquierdo el comportamiento dinámico del sistema a lazo abierto con los valores fijos de las entradas correspondientes al punto óptimo. El lado derecho muestra la dinámica a lazo cerrado con el control por RS saturado, el separador flash ahora tiene un único estado estacionario que es atractor global.

6.5.-Prueba de robustez

A continuación se prueba el funcionamiento del controlador frente a perturbaciones en los parámetros de alimentación. Los parámetros perturbados fueron la concentración, flujo y temperatura de la corriente de alimentación con una perturbación de tipo senoidal.

$$T_e = \bar{T}_e + 5 \sin(0.5t) \quad [K] \quad (6.56)$$

$$q_e = \bar{q}_e + 100 \sin(0.5t) \quad \left[\frac{\text{mol}}{\text{s}} \right] \quad (6.57)$$

$$c_e = \bar{c}_e + 0.05 \sin(0.5t) \quad (6.58)$$

Donde los valores nominales de T_e , q_e y c_e corresponden a 280K, 840 mol/s y 0.95 respectivamente. La frecuencia fue la misma para las tres perturbaciones con un valor de $0.5s^{-1}$. Las siguientes figuras muestran la variación en el tiempo de los parámetros de entrada T_e , q_e y c_e . La línea punteada corresponde a su valor nominal.

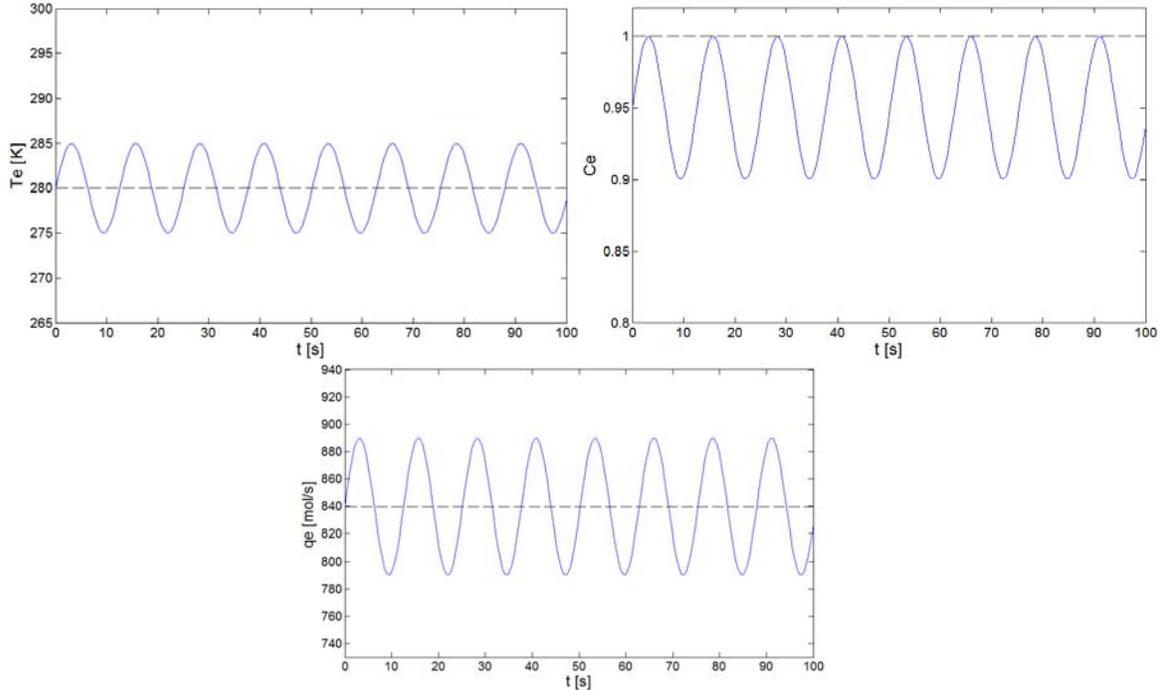


Figura 6. 5.- Perturbaciones en los parámetros de entrada T_e , c_e y q_e

Probando el control por retroalimentación de salidas con perturbación en los parámetros de entrada se obtuvieron los siguientes resultados

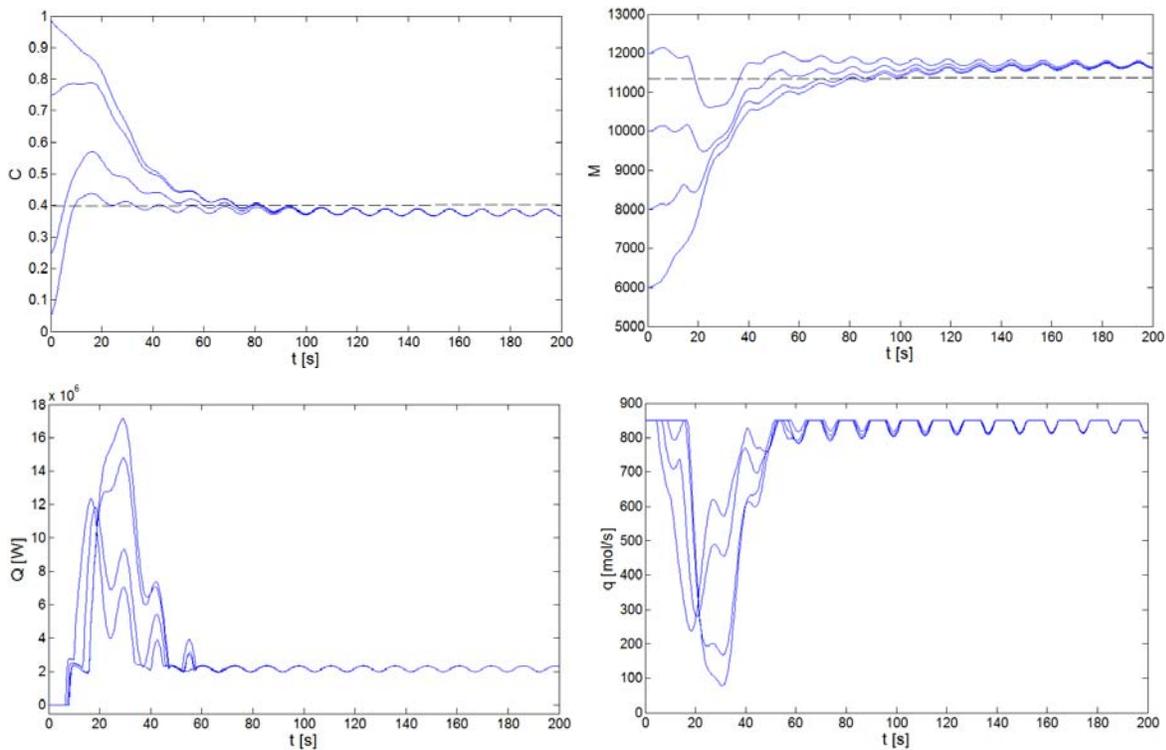


Figura 6. 6.-Respuesta a perturbaciones en los parámetros de entrada

Tanto la concentración como el acumulado líquido oscilan alrededor de un punto cercano al estado estacionario óptimo. Esto es un efecto de la perturbación en los parámetros de entrada. Los esfuerzos de control se saturan una vez cada uno y después se mantienen oscilando alrededor de un valor cercano al óptimo. Puede observarse un desfase del estado estacionario alcanzado respecto al valor óptimo de operación (línea punteada) esto puede atribuirse a un efecto combinado de dos situaciones: (i) la concentración nominal de entrada fue alterada ($c_e=0.95$) para evitar que la perturbación careciera de sentido físico. Esto ocasiona que el valor óptimo sea distinto al calculado con la anterior concentración nominal de entrada ($c_e=1$), (ii) el punto óptimo se encuentra cerca de la frontera con el régimen sin vaporización cuya proyección en el plano de entradas Q - q coincide con el límite de saturación superior para el flujo de salida de líquido q . Como puede observarse en la figura 6.4, la entrada de control q se satura continuamente debido a la perturbación. Esto tiene como resultado que q no alcance su valor nominal sino que oscile alrededor de un punto cercano.

Conclusiones

Se diseñó un control por retroalimentación de salidas usando propiedades de pasividad y observabilidad. Los criterios para la sintonización y la saturación empleados son una extensión de los criterios usados para el control no-lineal y garantizan la estabilidad de la operación a lazo cerrado. Las simulaciones mostraron la inexistencia de atractores extraños bajo saturación.

El controlador resultante recupera el comportamiento del control robusto no-lineal basado en modelo detallado y es equivalente a dos controladores PI con saturación que cuentan con protección anti-encuerdamiento lo cual los hace preferibles respecto a un control clásico PI.

El controlador es robusto frente a perturbaciones en los parámetros de entrada garantizando la operación robusta estable en la vecindad del punto óptimo de operación. La magnitud de las perturbaciones usadas en este trabajo exceden los límites probables en un caso real. En la dinámica a lazo cerrado se observa un ligero desplazamiento del estado estacionario que se debe a que el flujo de salida se encuentra continuamente saturado lo cual le impide permanecer exactamente en el punto óptimo.

Capítulo 7.-Conclusiones y trabajo futuro

7.1.-Conclusiones

En este trabajo se analizó la dinámica y estática de un separador flash reactivo, unidad mas simple posible que captura la esencia de un proceso de destilación reactiva. La dinámica no lineal del separador flash genera un problema interesante de control al presentar fenómenos como multiplicidad y bifurcación respecto a la entrada de control.

Se valoró la pertinencia de la aproximación de estado casi-estacionario (ECE) para el balance de calor (ampliamente usada en la literatura), comparándola con la estática y dinámica resultante del modelo sin dicha aproximación. Se muestra que los tiempos de asentamiento son 10-15% mas rápidos para la aproximación de ECE respecto a la dinámica rigurosa. La estática del sistema, en términos de estabilidad, multiplicidad y estados estacionarios no se ve modificada. El modelo mostrado en este trabajo considera el acumulado líquido como un estado dinámico lo que implica una mayor complejidad del modelo y una mejor aproximación al comportamiento real del proceso.

Las condiciones óptimas de operación se determinaron mediante un problema de optimización, siendo la función objetivo el beneficio económico asociado a la generación de producto. El problema de optimización tiene solución única y el par de estados-entradas óptimo se encuentra en la frontera con el régimen sin vaporización.

El punto óptimo de operación se encuentra en una zona de multiplicidad acompañado de dos estados estacionarios adicionales. Las zonas de multiplicidad y unicidad de estados estacionarios se caracterizaron mediante la expresión de la curva de bifurcación. El análisis de estabilidad mediante el primer método de Lyapunov determinó que el punto óptimo es inestable a lazo abierto y no hay puntos estacionarios estables en el régimen de vaporización parcial. La inestabilidad y multiplicidad del punto óptimo se corroboró mediante simulaciones dinámicas a lazo abierto manteniendo las entradas fijas en su valor óptimo.

Se evaluó la solución al problema de control mediante pasividad, encontrando que el sistema posee un par de relaciones entrada-salida igual a 1 y que la dinámica cero es inexistente. Se construyó un control no-lineal robusto basado en modelo detallado que garantiza la operación estable alrededor del punto óptimo.

Capítulo 7.- Conclusiones y trabajo futuro

Se estableció un criterio para la saturación del controlador usando la proyección de la curva de bifurcación en el plano de entradas $Q-q$, situando los límites dentro de zonas de un solo estado estacionario. Las simulaciones mostraron que el criterio funciona correctamente al operar el punto óptimo de manera estable a lazo cerrado. Se verificó, además, que situando los límites de manera que se viole el criterio de saturación, se generan atractores extraños y el punto óptimo se vuelve inestable.

Se diseñó un control por retroalimentación de salidas usando propiedades de pasividad y observabilidad. Los criterios para la sintonización y la saturación empleados garantizan la estabilidad de la operación a lazo cerrado. El controlador resultante recupera de manera adecuada el comportamiento del control robusto no-lineal basado en modelo detallado y es equivalente a dos controladores PI con saturación que cuentan con protección anti-encuerdamiento.

7.2.-Trabajo futuro

La saturación con dos entradas es un tema complejo que a pesar de resolverse favorablemente en este trabajo, requiere una caracterización mayor que permitirá mejorar el desempeño de los controladores bajo saturación. Esto está directamente relacionado con la bifurcación con dos estados y dos parámetros que es un tópico relativamente poco estudiado en la literatura comparado con la bifurcación con un solo parámetro.

En la motivación a largo alcance se mencionó que un objetivo alcanzable consiste en la aproximación de columnas de destilación reactiva a partir de trenes de separadores flash reactivos. Ya que en este trabajo se ha estudiado la dinámica y el control de un separador flash reactivo entonces se propone el estudiar la interacción de unidades en secuencia y su relación con una columna completa.

Finalmente se sugiere el incorporar la presión del sistema como un estado dinámico, lo cual genera un problema adicional de control y aproxima de una manera más realista el comportamiento de un sistema de destilación reactiva.

Referencias

- A. Isidori, A. S. (2000). Global robust output regulation for a class of nonlinear systems. *System & Control Letters* , 39, 133-139.
- A.P. Higler, R. T. (1999). Nonequilibrium Modelling of Reactive Distillation: Multiple steady states in MTBE synthesis. *Chemical Engineering Science* , 54, 1389-1395.
- Badillo, U. (2012). *Modelado, monitoreo y control de reactores tubulares para sintesis de biogas*. Tesis de doctorado, UNAM.
- C.P. Almeida Rivera, P. L. (2004). Designing reactive distillation processes: present and future. *Computers and Chemical Engineering* , 28, 1997-2020.
- Company, E. K. (1990). *Patente n° 4,939,294*. U.S.A.
- Dale E. Seaborg, D. A. (2010). *Process Dynamics and Control*. Wiley.
- Doyle, Francis J. (1999). An anti-windup input-output linearization scheme for SISO systems.» *Journal of Process Control* 9: 213-220.
- Elling W. Jacobsen, S. S. (1994). Instability on Distillation Columns. *AIChE Journal* , 40 (9), 1466-1478.
- Ernest J. Henley, J. D. (1981). *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*. Wiley.
- F.S. Vos, C. B. (2007). Exothermic Isomerization in One-Stage Reactive Distillation. *Ind. Eng. Chem. Res.* , 46, 203-210.
- Gerardo Ruiz, M. D. (1998). Singularities in Reactive Separation Processes. *Ind. Eng. Chem. Res.* , 47, 2808-2816.
- H. Orbey, S. S. (1998). *Modelling Vapor-Liquid Equilibria* (2nd ed.). Cambridge University Press.
- Harmsen, G. J. (2007). Reactive distillation: The front-runner of industrial process intensification. A full review of commercial applications, scale-up, research, design and operation. *Chemical Engineering and Processing* , 46, 774-780.
- Iván E. Rodriguez, A. Z. (2004). Parametric dependence of solution multiplicity in reactive flashes. *Chemical Engineering Science* , 59, 1589-1600.
- Ivan E. Rodriguez, A. Z. (2001). The stability of a reactive flash. *Chemical Engineering Science* , 56, 4737-4745.
- J. M. Prausnitz, R. N. (1998). *Molecular Thermodynamics of Fluid Phase Equilibria* (3rd ed.). Prentice Hall.
- J.D. Seader, E. H. (1998). *Separation Process Principles* (1 ed.). Wiley.

- J.M. Smith, H. C. (2000). *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics* (6 ed.). McGraw Hill.
- Jesús Alvarez, J. A. (1991). Nonlinear bounded control for a class of continuous agitated reactors. *Chemical Engineering Science* , 46 (12), 3235-3249.
- Jesús Alvarez, J. A. (1991). Nonlinear bounded control for a class of continuous agitated tank reactors. *Chemical Engineering Science* , 46 (12), 2335-3249.
- Jorge Díaz-Salgado, J. A. (2012). Feedforward output-feedback control for continuous exothermic reactors with isotonic kinetics. *Journal of Process Control* , 22, 303-320.
- Kai Sundmacher, A. K. (2002). *Reactive Distillation: Status and Future*. Wiley.
- Klaus Althaus, H. G. (2009). *Experience in Reactive Distillation*. BASF AG, Process Engineering.
- Kokotovic, P. V. (2001). Constructive nonlinear control : a historical perspective. *Automatica* , 37 (5), 637-662.
- Liang-Heng Cheng, H.-C. C. (1985). Global effects of controller saturation on closed-loop dynamics. *Chemical Engineering Science* , 40 (12).
- M. G. Sneesby, M. O. (1998). Steady-state transitions in the reactive distillation of MTBE. *Computers Chem. Engineering* , 22 (7), 879-892.
- M.V. Pavan Kumar, N. K. (2008). Decentralized control of a kinetically controlled ideal reactive distillation column. *Chemical Engineering Science* , 63, 228-243.
- M.V. Pavan Kumar, N. K. (2008). Role of multiplicity in reactive distillation control system design. *Journal of Process Control* , 18, 692-706.
- Martínez, I. N. (2012). *Modelado y control de una clase de reactores tubulares exotérmicos, Tesis de Maestría*. UAM-I.
- Michael F. Malone, M. F. (2000). Commentaries about Reactive Distillation. *Ind. Eng. Chem. Res* , 39, 3953-3957.
- Ogata, K. (2009). *Modern Control Engineering*. Prentice Hall.
- R. Lakerveld, C. B.-R. (2005). Exothermic Isomerization Reaction in a Reactive Flash: Steady State Behaviour. *Ind. Eng. Chem. Res* , 44, 3815-3822.
- R. Waschler, S. P. (2003). Multiple steady states in two-phase reactors under boiling conditions. *Chemical Engineering Science* , 58, 2203-2214.
- R.S. Huss, F. C. (1999). Computer-Aided Tools for the Design of Reactive Distillation Systems. *Computers and Chemical Engineering Supplement* , S955-S962.
- Radhakant Padhi, S. F. (2009). An account of chronological developments in control for distributed parameter systems. *Annual Reviews in Control* , 33 (1), 59-68.

Rodolphe Sepulchre, M. J. (1997). *Constructive Nonlinear Control*. Springer.

Rosendo Monroy-Loperena, E. P.-C.-R. (1999). Nonlinear PI Control of an Ethylene Glycol Reactive Distillation Column. *Computers and Chemical Engineering Supplement* , S835-S838.

S. Karacan, H. H. (1998). Generalized predictive control to a packed distillation column for regulatory problems. *Computers Chem. Engineering* , 22 Supl., S629-S632.

Teschl, G. (2010). *Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems*. American Mathematical Society.

Zoltan K Nagy, R. K. (2207). Advanced Control of a Reactive Distillation Column. *17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering* (págs. 805-810). Elsevier B.V.

Apéndice

A1.-Parámetros del caso de estudio

Los valores fueron tomados de los trabajos de (1) y (2).

Propiedades de componente

<i>Propiedad</i>	<i>Descripción</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidades</i>
λ	Calor de vaporización	20120	J/mol
c_p	Capacidad calorífica molar	83	J/mol*K
p.m.	Peso molecular	46.07	gr/mol
ρ	Densidad molar	0.017	mol/cm ³

Parámetros de las funciones de burbuja

<i>Propiedad</i>	<i>Descripción</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidades</i>
λ_B	Constante de función de equilibrio L-V	2428	J/mol
A_1	Constante de Antoine Componente 1	21.31	Adimensional
A_2	Constante de Antoine Componente 2	19.23	Adimensional

Parámetros de reacción

<i>Propiedad</i>	<i>Descripción</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidades</i>
E	Energía de activación	7300	K
k	Factor pre-exponencial	5.8×10^8	s ⁻¹
Θ	Entalpía de reacción	2090	J/mol

Parámetros de operación

<i>Propiedad</i>	<i>Descripción</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidades</i>
c_e	Concentración de volátil en la alimentación	1	Fracción molar
q_e	Flujo molar de alimentación	840	mol/s
T_e	Temperatura de alimentación	280	K
P	Presión del separador flash reactivo	501330	Pa

A2.-Funciones de punto de burbuja

A2.1.-Temperatura de burbuja

A partir de la Ley de Raoult para una mezcla binaria

$$P = cP_1(T) + (1-c)P_2(T) \quad (\text{A.1})$$

Donde P_1 y P_2 son las presiones de vapor del componente ligero y pesado respectivamente. Con una expresión tipo Antoine de la siguiente forma:

$$P_i(T) = e^{A_i - \frac{\lambda}{T}} \quad (\text{A.2})$$

Sustituyendo (A.2) en (A.1)

$$P = e^{-\frac{\lambda}{T}} [ce^{A_1} + (1-c)e^{A_2}] \quad (\text{A.3})$$

Resolviendo para T

$$\ln\left(\frac{P}{ce^{A_1} + (1-c)e^{A_2}}\right) = -\frac{\lambda}{T} \quad (\text{A.4})$$

$$T = \frac{-\lambda}{\ln\left(\frac{P}{ce^{A_1} + (1-c)e^{A_2}}\right)} := \beta(c) \quad (\text{A.5})$$

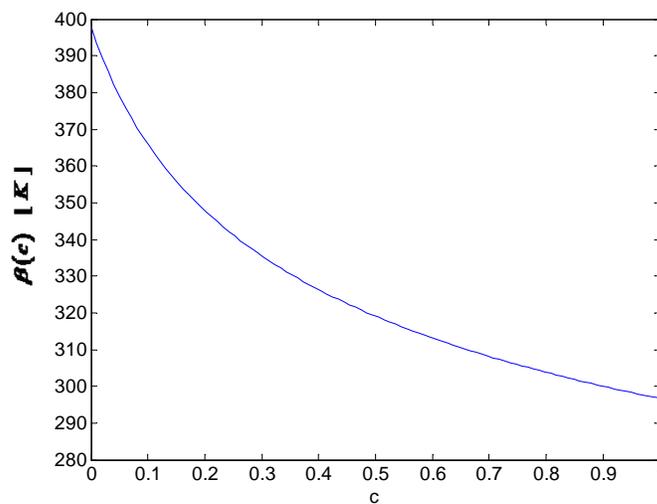


Figura A1.-Temperatura de burbuja en función de la concentración de volátil

A2.2.-Concentración de vapor mediante punto de burbuja

A partir de la Ley de Raoult para una mezcla binaria, la condición de equilibrio líquido vapor más sencilla establece que las presiones parciales deben ser iguales para cada componente, es decir:

$$c_v P = c P_1 \quad (\text{B.1})$$

Donde P_1 es la presión de vapor del componente ligero con una expresión tipo Antoine

$$P_1(T) = e^{A_1 - \frac{\lambda}{T}} \quad (\text{B.2})$$

Sustituyendo en (B.1) y resolviendo para c_v

$$c_v(c, T) = \frac{c e^{A_1 - \frac{\lambda}{T}}}{P} \quad (\text{B.3})$$

Sustituyendo la definición de temperatura de burbuja dada en (A.5)

$$c_v(c, \beta(c)) = \frac{c e^{A_1 - \frac{\lambda}{\beta(c)}}}{P} := v(c) \quad (\text{B.4})$$

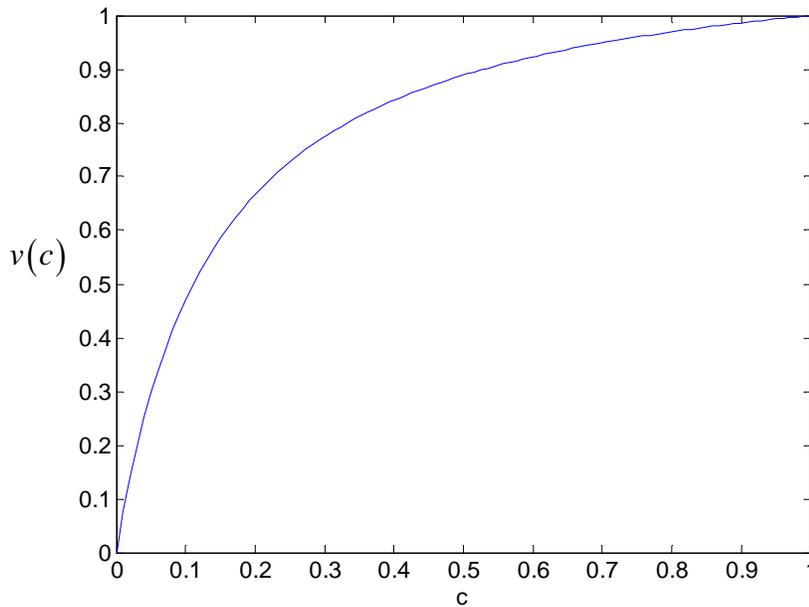


Figura A2.-Concentración del componente volátil en la fase vapor en función de la concentración en la fase líquida



Casa abierta al tiempo

**DINÁMICA Y CONTROL
DE UNA CLASE DE SEPARADORES FLASH REACTIVOS**

TESIS QUE PRESENTA

ANTONIO VELÁZQUEZ RAMÍREZ

PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS (INGENIERÍA QUÍMICA)

Gracias al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico para la realización de esta tesis

Asesor: Dr. Jesús Álvarez Calderón



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

14 de diciembre de 2012