

**CONTROL NO LINEAL CON RETROALIMENTACIÓN DE MEDICIONES EN UN
REACTOR DE COPOLIMERIZACIÓN**

TESIS QUE PRESENTA:

I.Q. MARÍA TERESA LÓPEZ ARENAS

PARA LA OBTENCIÓN DEL GRADO DE
MAESTRO EN INGENIERÍA QUÍMICA

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

DEPARTAMENTO DE PROCESOS E HIDRÁULICA

ASESOR: DR. JESÚS ALVAREZ CALDERÓN

COASESOR: M.C. SALVADOR PADILLA LARES

MÉXICO, D.F., MARZO DE 1995.

Dedicado a
mis padres Paco y Tere,
y a Rufino
por su apoyo incondicional.

Agradezco las becas otorgadas por el
Centro de Investigación de Polímeros (CIP)
y CONACyT.

ÍNDICE

1. CONTROL DE REACTORES DE COPOLIMERIZACIÓN		
1.1	Introducción	1
1.2	Modelado de Reactores de Copolimerización : Antecedentes	2
1.3	Control de Reactores de Copolimerización: Antecedentes	5
1.4	Justificación del Proyecto de Tesis	8
1.5	Objetivos	11
2. MODELO MATEMÁTICO PARA EL REACTOR DE COPOLIMERIZACIÓN EN SOLUCIÓN		
2.1	Introducción	12
2.2	Mecanismo Cinético	13
2.3	Modelo de Copolimerización en un RTCA	14
2.4	Densidad de la Mezcla Polimérica	19
2.5	Expresiones para el Modelo Dinámico (Lazo Abierto)	20
2.6	Constantes Cinéticas	25
2.7	Transferencia de Calor en el Reactor	25
3. COMPORTAMIENTO DEL REACTOR AUTONOMO		
3.1	Introducción	28
3.2	Selección de las Condiciones de Operación	29
3.3	Análisis del Comportamiento en Estado Estacionario	
3.3.1	Multiplicidad de Estados Estacionarios	30
3.3.2	Diagramas de Bifurcacion	31
3.4	Análisis del Comportamiento Dinámico y Estabilidad	35
4. CONTROL CON RETROALIMENTACIÓN DE ESTADOS		
4.1	Introducción	39
4.2	Conceptos Preliminares	40
4.2.1	Inversa Dinámica (Algoritmo de Hirschorn)	40
4.2.2	Linealización Entrada - Salida del Sistema	42
4.3	Solución al Problema de Control con Retroalim. de Estados	45

4.4	Implementación del Control al Reactor de Copolimerización	
4.4.1	Selección de las Configuraciones de Control	47
4.4.2	Linealización del Sistema	50
4.4.3	Análisis de la Dinámica Interna	57
4.4.4	Construcción de las Leyes de Control	63
4.4.5	Sintonización de los Lazos de Control	64
4.5	Análisis de la Dinámica a Lazo Cerrado	66
5.	CONTROL CON RETROALIMENTACIÓN DE MEDICIONES	
5.1	Introducción	78
5.2	Solución al Problema de Control	79
5.3	Implementación del Control con Retroalimentación de mediciones	80
5.4	Sintonización de los Lazos de Control	82
5.5	Análisis de la Dinámica a Lazo Cerrado	83
6.	CONCLUSIONES	94
APÉNDICE:		
A	Desarrollo de las Relaciones de Concentración de los Radicales P y Q	97
B	Desarrollo de la Densidad de la Mezcla Polimérica y de su Derivada Temporal	99
C	Desarrollo del Modelo Dinámico de Copolimerización	103
D	Funcionalidades para el Modelo Dinámico	107
E	Propiedades Fisicoquímicas y Parámetros de Operación	109
NOMENCLATURA		111
BIBLIOGRAFÍA		115

CAPÍTULO 1

CONTROL DE REACTORES DE COPOLIMERIZACIÓN

1.1 INTRODUCCIÓN

Durante la operación de una planta química deben satisfacerse requerimientos tales como seguridad, especificaciones de producción, costos, ritmo de producción, etc. que permitan llevar al mercado productos competitivos en calidad, eficiencia y precio. Esto dicta un monitoreo continuo del proceso requiriéndose la implementación de sistemas de control que permitan estabilizar y optimizar el desempeño del proceso. Siendo que el control industrial se realiza en ocasiones empíricamente, en base a la experiencia del proceso (Congalidis *et al.* 1989, Arzamendi *et al.* 1991), es necesario estudiar el problema con herramientas más rigurosas.

Por otra parte, existe una gran variedad de procesos con propiedades no lineales, entre ellos todos los procesos poliméricos. Estos son sistemas complejos que se caracterizan por ser: altamente no lineales, fuertemente interactivos y en ocasiones inestables; originando dificultades en el estudio de modelos que permitan un entendimiento con algo de profundidad de los fenómenos que ocurren.

Por lo anterior existe una gran demanda de desarrollo y diseño de procesos, así como de esquemas de control que sean robustos y que permitan estabilizar y conocer otras facetas del sistema. Lo cual sumado a la rápida evolución de los sistemas digitales (computadoras) permite una mayor factibilidad y disponibilidad para responder a la demanda del mercado y especificaciones de la producción.

En el presente proyecto se aborda el problema del control de la composición en un reactor de copolimerización en solución. Este es un problema industrial muy importante ya que implica el diseño del proceso, las condiciones de operación y en buena medida la calidad del producto final. Además, la composición del polímero en la copolimerización permite adaptar las propiedades físicas, químicas y mecánicas del polímero. Aunado a esto, se presentan dificultades de operación debido a la cinética de polimerización, la complejidad de distribuciones del producto, la alta generación de calor por reacción, sus propiedades viscosas

(que generan dificultades difusionales) y las condiciones no isotérmicas. Tomando en cuenta estas consideraciones se requieren métodos de control que permitan regular diversos parámetros de los procesos de copolimerización, y que garanticen las características del producto final y los criterios de calidad. Estudiándose en particular la solución al problema de control con enfoque en las posibilidades alcanzables de resolución y la naturaleza de la solución con una interpretación física al sistema, empleando como herramientas: ingeniería de reactores, diseño de procesos, modelado y control no lineal.

A continuación se hace un breve análisis de trabajos publicados, examinando primeramente los que se enfocan a la parte de modelado de reactores de copolimerización y posteriormente las investigaciones realizadas para el control de este tipo de reactores.

1.2 MODELADO DE REACTORES DE COPOLIMERIZACION : ANTECEDENTES

En el modelado de reactores de polimerización un factor importante a considerarse es el efecto gel o Trommsdorff, que corresponde a una autoaceleración de la reacción de polimerización. Esto debido que a medida que el monómero se convierte en polímero, en un sistema homogéneo, la viscosidad puede incrementarse rápidamente. Y en un medio altamente viscoso las moléculas de monómero todavía pueden difundirse con facilidad hasta las moléculas en crecimiento, pero las cadenas grandes en crecimiento no pueden difundirse fácilmente una hacia otra; de manera que la velocidad de propagación aumenta y la de terminación disminuye. Esto genera que el grado de polimerización aumente. Esta autoaceleración es pronunciada cuando se forma un polímero de alto peso molecular, agravando con ello una velocidad de generación de calor mayor.

Entre los trabajos enfocados a la introducción del efecto gel se encuentra el de Balke y Hamielec (1973), que estudian la polimerización en masa del metil metacrilato obteniendo datos experimentales a diferentes temperaturas (50, 70 y 90°C). Sugieren que el volumen libre es un buen parámetro para correlacionar el valor cuantitativo del efecto gel porque éste relaciona el posible movimiento de las macromoléculas. Sin embargo, desarrollan una correlación un poco complicada (por depender de cálculos extensos y de diversas gráficas) en función de las tasas y constantes de reacción. En base a estos datos experimentales Ross y Laurence (1976) desarrollan un modelo, donde la característica es que los parámetros cinéticos que son controlados por la difusión son correlacionados con el volumen libre de la mezcla polimérica ; y con estas correlaciones más simples el efecto gel es simulado adecuadamente.

Otro artículo basado en la teoría del volumen libre para introducir el efecto gel es el de Chiu *et al.* (1983), quienes evalúan las limitaciones difusionales desde el inicio de una reacción de homopolimerización tomando en cuenta la movilidad de las cadenas poliméricas (macroradicales) en el medio viscoso así como el incremento de su longitud por la reacción de propagación para la evaluación de las constantes cinéticas (de propagación y terminación). Obteniendo expresiones de estas constantes cinéticas en función de las concentraciones de iniciador, monómero y temperatura. Este modelo ha sido incorporado en trabajos realizados por Sánchez (1989), Alvarez *et al.* (1990) y Vargas (1991), para determinar parámetros y funcionalidades cinéticas en la polimerización en masa del metil metacrilato.

Una extensión de la publicación de Chiu *et al.* (1983) para la copolimerización en masa, es el artículo publicado por Sharma *et al.* (1988). Donde también se incorpora el volumen libre basado en teoría de difusión de polímeros para la determinación de las constantes cinéticas. Realizando un análisis para la región de altas conversiones. Además introducen el cambio de densidad de la mezcla (ya que al polimerizarse se vuelve más densa la mezcla), mediante la definición de un factor de contracción y una fracción conversional promedio.

Balaraman *et al.* (1983) realizan un análisis de sistemas estireno - éster acrílico, principalmente en la región de alta conversión, en un reactor por lotes y continuo; incorporando el efecto gel causado por el control de la difusión de la reacción de terminación. Describiendo que este efecto ocurre cuando el movimiento segmental de las cadenas poliméricas (movimiento de orientación de las cadenas activas para reaccionar) iguala a su difusión traslacional (movimiento de acercamiento de las cadenas activas). Estos autores obtienen expresiones para las constantes cinéticas relacionadas con la conversión, expresadas en función de la fracción de volumen libre. Además analizan la existencia de estados

estacionarios, tanto para reactores por lotes como continuos. Posteriormente, Balaraman *et al.* (1986) con datos disponibles en la literatura para el sistema estireno - metil metacrilato desarrollan un modelo de copolimerización en el que toman en cuenta el trabajo anterior, y además consideran el efecto de la concentración y temperatura en las etapas de propagación y terminación. Realizando un estudio de estabilidad en estado estacionario (para condiciones no isotérmicas) en un reactor continuo agitado.

Otro modelo es el desarrollado por Hamer *et al.* (1981), para la copolimerización en solución del metil metacrilato - acetato de vinilo en un reactor continuo agitado, incluyendo no isothermicidad. Desprecian las variaciones de densidad en los balances de materia y energía, justificando esto las condiciones de polimerización en solución. Así mismo se basan en el estudio de homopolimerización en un reactor continuo agitado que fue analizado por Schmidt y Ray (1981), donde asumen volumen constante, analizando su comportamiento dinámico. Por otra parte, estudian dos diferentes correlaciones para el efecto gel; la primera basada en un ajuste experimental de Friis y Hamielec (1976), y la segunda basada en expresiones desarrolladas por Ross y Laurence (1976) fundamentadas en la teoría del volumen libre.

Padilla (1991) desarrolla un modelo de copolimerización en solución en un reactor continuo agitado, basándose en los trabajos de Hamer *et al.* (1981) y Schimidt y Ray (1981), modificándolo con la finalidad de que se apegue a los sistemas industriales en cuanto a diseño de entradas de materias primas, iniciadores, etc. En este modelado incorpora el efecto gel, y considera que las variaciones en el nivel del reactor son debidas únicamente a cambios en los flujos de alimentación y de salida, despreciando cambios en la densidad. El mecanismo cinético es descrito vía radicales libres, mediante las etapas de iniciación, propagación y terminación, y utilizando el modelo del factor Φ (O dian, 1981) mediante el cual es calculada la constante cinética de terminación cruzada.

1.3 CONTROL DE REACTORES DE COPOLIMERIZACION : ANTECEDENTES

En el área de control de procesos, Congalidis *et al.* (1989) realizaron una combinación de control prealimentado y retroalimentado en un reactor de copolimerización en solución para el sistema metil metacrilato - acetato de vinilo (MMA - AV). Regulando directamente como salidas: la producción de polímero, la composición de copolímero, peso molecular y temperatura del reactor; y tomando como entradas de control: el flujo de alimentación de AV, la razón de flujos de alimentación de MMA y AV, la razón de flujos de alimentación de agente de transferencia y AV, y la temperatura de la chaqueta de enfriamiento. El modelo se refiere a un reactor continuo agitado, tomando la cinética y condiciones de operación de Hamer *et al.* (1981) y Brandrup e Immergut (1975). Donde los resultados de estos últimos autores corresponden a experimentos de reactores a escala piloto e industrial. Además, la investigación de Congalidis *et al.* incluye un reciclaje de monómeros no reaccionados y del solvente, que produce una perturbación al sistema ya que modifica las propiedades del polímero; para esto proponen una estrategia de control prealimentado.

La metodología de Congalidis *et al.* consistió primeramente en el desarrollo de un modelo no lineal y diseño de un punto de operación en estado estacionario. Luego diseñaron un controlador prealimentado de la recirculación, verificando el rechazo a perturbaciones. Posteriormente realizan la construcción del control retroalimentado de las propiedades del polímero y producción, obteniendo las funciones de transferencia del proceso y perturbaciones. Finalmente analizan la estructura del control usando descomposición singular de valores y arreglo de ganancias relativas; así mismo obtiene la realización lineal mínima del modelo de espacio de estados y sintonizan los controladores PI para cambios en el punto de referencia.

La estrategia de prealimentación y retroalimentación se prueba mediante el modelo no lineal de copolimerización para cambios en el punto de referencia y compensación de perturbaciones no medidas del reactor. El desarrollo del sistema de control diseñado es aceptable, siendo fácil su implementación y mantenimiento en planta. Cabe mencionar, que estos últimos investigadores asumen que se dispone continuamente de las medidas precisas de las variables de salida para el control retroalimentado. Esto es fácil para la medición de temperatura, pero no para las otras salidas (concentraciones y composición de copolímero, y

peso molecular); ya que estas son disponibles periódicamente mediante análisis en laboratorio, pero introduce un significativo tiempo muerto. Para ello proponen mediciones en línea mediante instrumentación como viscosímetros ó refractómetro, o bien utilizando un estimador de estados (como el filtro de Kalman modificado) para inferir propiedades del polímero. Por lo que se concluye que los resultados de este trabajo no muestran una aplicación práctica, pese a que las simulaciones mostradas muestran un buen desempeño del control construido.

Otra publicación concerniente a la síntesis de controladores no lineales para procesos multivariables es el de Kravaris y Soroush (1990). Ellos realizan una linealización del sistema en el sentido entrada - salida, y derivan condiciones necesarias y suficientes para dicha linealización mediante un control estático retroalimentado de estados. Desarrollan leyes de control que son aplicadas al proceso introduciendo una acción integral. La metodología propuesta se valida a través de simulaciones, en las que se tiene como fin controlar la composición en un reactor de copolimerización (semicontinuo), para lo cual toman como base los modelos de Hamer *et al.* (1981) y Congalidis *et al.* (1989); sin embargo lo modelan sin incluir el efecto gel y considerando cambios en el volumen sólo por variación en los flujos de entrada y salida. Seleccionando como salidas a regular: la fracción molar de MMA en el copolímero y el peso molecular promedio del copolímero, y tomando como entradas de control: la tasa de intercambio de calor entre el reactor y la chaqueta, y el flujo de alimentación del monómero MMA. Mediante simulaciones analizan el rechazo a error en condiciones iniciales, seguimiento del punto de referencia, y rechazo a perturbaciones escalón y ruido.

La metodología de control desarrollado por Kravaris y Soroush esta basada principalmente en el algoritmo de Hirschon (1979), con el cual se obtiene la inversa dinámica de un sistema multivariable no lineal. Este algoritmo consiste en una secuencia de sistemas donde se cambia el mapa de salidas hasta que el sistema pueda ser resuelto de tal forma que dependa sólo de los estados, variables de control, y las salidas y sus derivadas. Así mismo deriva las condiciones suficientes y necesarias para que exista invertibilidad del sistema de control no lineal.

Recientemente, Alvarez *et al.* (1993) han desarrollado controladores no lineales basados en mediciones de entradas y salidas, para el caso de un reactor de homopolimerización. Obteniendo condiciones suficientes para la existencia de una solución al problema de control de las concentraciones de monómero e iniciador y de la temperatura, siendo esta derivación constructiva. Construyen un controlador no lineal con prealimentación y retroalimentación de estados combinado con un observador (estimador de estados) no lineal de orden completo. El

control dinámico propuesto muestra un buen desempeño, logrando rechazo completo a las perturbaciones de las entradas medidas, y los estados estimados siempre convergen asintóticamente a los estados reales (a modelo perfecto), y las salidas convergen asintóticamente a las referencias. Siendo estos resultados obtenidos por simulaciones numéricas.

En base a esta última investigación, Padilla *et al.* (1993) hace un análisis no lineal del problema de control en un reactor continuo de copolimerización, en el que las salidas a manipular son: la producción, composición de copolímero, concentración de solvente, temperatura y volumen del reactor; y las variables de control son: flujos de alimentación de monómeros y solvente, flujo de descarga y temperatura del medio de enfriamiento. Realizando un estudio de control múltiples entradas múltiples salidas, y la implementación de un control con retroalimentación de estados. El esquema de control dinámico fue implementado al modelo del reactor y verificado mediante simulaciones. En general, el desarrollo del controlador fue bueno, pareciendo ser cualitativamente robusto. Indicando que esta propiedad deseable puede ser fácilmente perdida si la definición de las salidas es modificada, aún con una redefinición estable de salidas.

Debido a que en el trabajo de Padilla *et al.* se manipularon como salidas directamente la composición y producción se requirió de *extensión dinámica*, la cual consiste en una redefinición de estados y variables de control. Sin embargo, Padilla (Tesis doctoral en curso) estudió las configuraciones de control de tal forma que no se manipulen en forma explícita la composición y producción, se evite la extensión dinámica y se logren obtener grados relativos iguales a 1 (lo cual es importante ya que con grados relativos mayores se pierde robustez). Analizando tres casos de configuraciones en los que las salidas seleccionadas son: caso 1) concentraciones de monómeros convertidos, caso 2) concentraciones de los monómeros remanentes, caso 3) concentración del monómero remanente más rápido en reaccionar y concentración del monómero convertido más lento en reaccionar; y como salidas adicionales para los tres casos: concentración de solvente, temperatura y volumen. Teniendo como conjetura que de estos casos el que dará mejores resultados es el que contiene una dinámica interna más rápida, que corresponde al caso (c).

En resumen, en la mayoría de las publicaciones la selección de las salidas de control son (en forma directa): composición instantánea del copolímero o fracción molar, producción y peso molecular. En los que se aplican técnicas lineales convencionales, o bien, técnicas de control no lineal pero que generan el problema de *extensión dinámica*. Exceptuando el trabajo de

Padilla (tesis doctoral), en el que las salidas de control son las concentraciones de monómero remanentes y convertidos; elegidas éstas por medio de interpretación física. Sin embargo, esto sólo es aplicable a un control no lineal con retroalimentación de estados.

1.4 JUSTIFICACIÓN DEL PROYECTO DE TESIS

A partir del análisis bibliográfico, el estudio de un reactor continuo agitado de copolimerización (en solución) se ha abordado lo suficiente en el campo experimental. Además en cuanto a modelado casi todo está conocido, sin embargo se encuentra disperso; ya que algunos investigadores no toman en cuenta o desprecian algunos efectos involucrados (como es el efecto de la variación de la densidad, el efecto gel, etc.)

Un aspecto importante que no ha sido tomado en cuenta en trabajos anteriores es el estudio de la variación de la viscosidad con el avance de la reacción, esto es no se han preocupado por el efecto que puede tener en la dinámica térmica. Este factor afecta en forma directa al proceso dinámico ya que incluye fuertemente en el coeficiente de transferencia de calor, el cual varía en un rango apreciable; ya que cuando aumenta la conversión y el porcentaje de sólidos, la viscosidad del sistema aumenta considerablemente dificultando la extracción de calor generado por la misma reacción. Además, la estimación de la viscosidad del sistema es importante ya que determina en buena medida las concentraciones y conversiones de los reactantes, así mismo determina el rango de factibilidad de operación del reactor para no tener problemas de agitación, disparos térmicos o taponamientos del equipo.

Por lo que en el modelo que se desarrolla en el presente proyecto de investigación se incorpora el efecto de la viscosidad para obtener un coeficiente de transferencia de calor variable, y se incluyen cambios de densidad de la mezcla polimérica debido a la reacción de

polimerización, mediante la definición de factores de contracción de volumen para los monómeros, monómeros convertidos a polímeros y solventes.

Como se mencionó en los antecedentes ya se ha estudiado sobre el comportamiento del reactor en estado estacionario, entre ellos Hamer *et al.* (1981) que encontraron diferentes tipos de multiplicidades para diversas regiones de operación para el caso específico de copolimerización en solución de metil metacrilato - acetato de vinilo, pero sin incluir variaciones en la densidad y viscosidad. Por lo que en los siguientes capítulos se corroborará el comportamiento del reactor autónomo con el fin de determinar si es justificable el uso de modelos reducidos (sin incorporar efectos de variación en la densidad y viscosidad), así como para conocer el comportamiento del reactor autónomo específicamente bajo condiciones de operación seleccionadas; y además para estudiar la consecuencia de introducir el efecto gel que para el caso de control no ha sido considerado (Congalidis *et al.*, 1989; Kravaris y Soroush, 1990). Para este estudio se utiliza la teoría de bifurcación, obteniéndose una región de operación adecuada donde no se corre el riesgo que se extinga la reacción o que se generen altas temperaturas y fluidos viscosos. También se analiza la estabilidad de dichos puntos estacionarios y se selecciona un punto inestable como condición nominal, el cual a lazo abierto no es posible alcanzarlo pero con la implementación de un controlador si será posible obtenerse.

Por otro lado, son pocos los trabajos realizados para llevar a cabo el control de este tipo de reactores. Enfocándose la mayoría de ellos al diseño de controladores lineales convencionales, aún utilizados industrialmente, los cuales son construidos mediante una linealización local del sistema no lineal; pero esto para sistemas fuertemente no lineales causa problemas de estabilidad, robustez y desempeño. Sin embargo, como se mencionó en la reseña, en los últimos años se ha desarrollado la teoría del control no lineal, basada en la geometría diferencial y que tiene una aplicación directa en el diseño básico de ingeniería de reactores.

Por lo tanto, para hacer un estudio integral del problema del control de la composición instantánea del copolímero la investigación se apoyará en la teoría de control no lineal. Cabe indicar que uno de los trabajos que se han enfocado al control (teniendo un previo análisis de la dinámica a lazo abierto) es el de Congalidis *et al.* (1989), en el que su punto de referencia utilizado para controlar (condición nominal) corresponde a un estado estacionario estable, manejando conversiones muy bajas (20%) y además su modelo no incluye el efecto gel; por esto se pretende utilizar como base este caso, para luego modificar la conversión y

concentración de solvente (lo cual dificultará su control), y con esto verificar el desempeño de los controladores no lineales que se diseñen.

Para la selección de la configuración de control se toma como punto de partida los resultados de Padilla (Tesis de doctorado), siendo estos resultados importantes para el control con estados retroalimentados. Esto porque los casos de configuraciones propuestos no controlan en forma directa la composición y producción, sino manipulan como salidas las concentraciones de monómeros remanentes y convertidos, lo cual no se ha hecho en otros trabajos publicados. Además que mediante una interpretación física se conjeturó que el caso que dará un mejor resultado es el que involucra una dinámica más rápida. Por ello en esta tesis se pretende corroborar esto mediante simulaciones numéricas y hacer su extensión a un caso más práctico que correspondería al control con retroalimentación de salidas

Por tanto para la solución al problema de control se analizarán dos aspectos de control: (a) control con retroalimentación de estados, en el que se requieren medir todos los estados del reactor y salidas de control (el cual es necesario para el siguiente diseño de control), (b) control con retroalimentación de mediciones, que resulta ser un control lineal que se ajusta con técnicas lineales multivariadas y convencionales requiriendo únicamente la medición de las salidas, además depende de la condición nominal.

Para estudio se ha elegido el sistema de reacción de metil metacrilato (MMA) y acetato de vinilo (AV), empleando acetato de estilo (AE) y Azo-bis-butironitrilo (AIBN) como solvente e iniciador, respectivamente; este sistema presenta características importantes como es la presencia del efecto gel (aún con alta concentración de solvente), además de presentar un comportamiento dinámico interesante (de acuerdo a la revisión bibliográfica presenta múltiples estados estacionarios que varían dependiendo de la región de trabajo).

1.5 OBJETIVOS

Debido al interés en este tipo de procesos de polimerización en continuo se tienen los siguientes objetivos:

- Estudiar el efecto de la incorporación de la variación de densidad y de la viscosidad en la dinámica del reactor autónomo y a lazo cerrado.
- Estudiar los tres casos de configuraciones de control propuestos por Padilla (Tesis de doctorado) y verificar mediante simulaciones numéricas que al elegir como salidas a las concentraciones de los monómeros no afecta la composición y producción del polímero final, para el esquema de control con retroalimentación de estados. Así como comprobar cuál es la configuración que genera un mejor desempeño en el comportamiento del reactor a lazo cerrado.
- Resolver el problema de control con retroalimentación de mediciones (salidas) para el reactor de copolimerización, el cual correspondería a un diseño de control lineal PID, y estudiar la posibilidad de trasladar los resultados del objetivo anterior a este esquema de control. Analizando dos casos:
 - (a) Control multivariable (múltiples entradas - múltiples salidas)
 - (b) Control convencional (una entrada - una salida)

CAPÍTULO 2

MODELO MATEMÁTICO PARA EL REACTOR DE

COPOLIMERIZACIÓN EN SOLUCIÓN

2.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se desarrolla el modelo matemático para la copolimerización en solución por radicales libres, que se lleva a cabo en un reactor continuo agitado. Con el fin de obtener una ecuación matemática como una representación física del reactor y que permita entender el comportamiento no lineal de éste a lazo abierto. Siendo este modelo aplicable a cualquier sistema polimérico reaccionante. En el cual se abordan características de este tipo de reacciones como el incremento de temperatura por la alta generación de calor, el incremento de la viscosidad que genera dificultades difusionales; así como el efecto "Tromsdorff" o efecto gel que vuelve incontrollable la reacción, aumentando la temperatura, produciendo una conversión rápida y en ocasiones taponamiento del equipo (Chiu *et al.*, 1983). Siendo una ventaja la adición de solvente ya que ayuda a regular la viscosidad de la mezcla polimérica, logrando con esto bajas temperaturas (además de la eliminación de calor por transferencia entre el reactor y la chaqueta de enfriamiento).

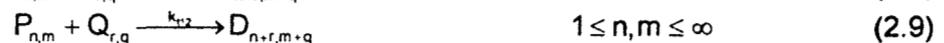
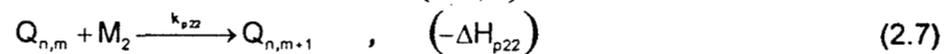
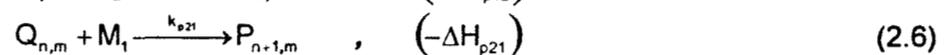
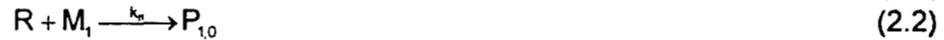
Para el desarrollo del modelo se toma como base el presentado por Padilla (1991), que corresponde a la copolimerización de metil metacrilato y acetato de vinilo con acetato de etilo como solvente (y Azo-Bis-Isobutironitrilo como iniciador), incluyendo un mecanismo vía radicales libres y el efecto gel. A dicho modelo se le incorporará la variación de la densidad de la mezcla polimérica con respecto al tiempo debido a que los polímeros son invariablemente más densos que sus monómeros (lo cual provoca una contracción en el volumen). Además se introduce el efecto de la variación de la viscosidad sobre el coeficiente de transferencia de calor.

Para la obtención del modelo matemático, en las siguientes secciones se plantea primeramente el mecanismo cinético utilizando en los balances de conservación de materia y

energía. En seguida se desarrolla la expresión para la variación de la densidad con respecto al tiempo, la cual se requiere expresar la variación del volumen así como para los balances de masa. Finalmente se obtiene un sistema de 8 ecuaciones diferenciales que constituyen el modelo matemático del reactor de copolimerización en solución.

2.2 MECANISMO CINÉTICO

El mecanismo de reacción para una copolimerización en solución por radicales libres puede expresarse mediante uno convencional de procesos de iniciación, propagación y terminación:



donde I denota el iniciador, R los radicales primarios, M_1 es el monómero 1, M_2 es el monómero 2, $P_{n,m}$ es la cadena polimérica activa con n unidades de M_1 y m unidades de M_2 terminando con un radical activo M_1 , $Q_{n,m}$ representa la cadena polimérica activa con n unidades de M_1 y m unidades de M_2 terminando con un radical activo M_2 , $D_{n,m}$ es el polímero muerto con n unidades de M_1 y m unidades de M_2 , S es el solvente. k_d, k_p, k_{p1}, k_{t1} son las constantes de velocidad de disociación del iniciador, de formación de radicales primarios, de propagación y de terminación, respectivamente.

2.3 MODELO DE COPOLIMERIZACIÓN EN UN RTCA

Se considera un reactor de tanque agitado continuo (RTCA) en el cual se alimentan continuamente el monómero 1, el monómero 2, el solvente e iniciador (en una misma línea de alimentación). Y debido a la alta generación de calor producida por las reacciones de polimerización se requiere removerlo, lo cual se logra con el flujo de salida de la mezcla polimérica y mediante una chaqueta de enfriamiento. El esquema del reactor de copolimerización se muestra en la figura 1.

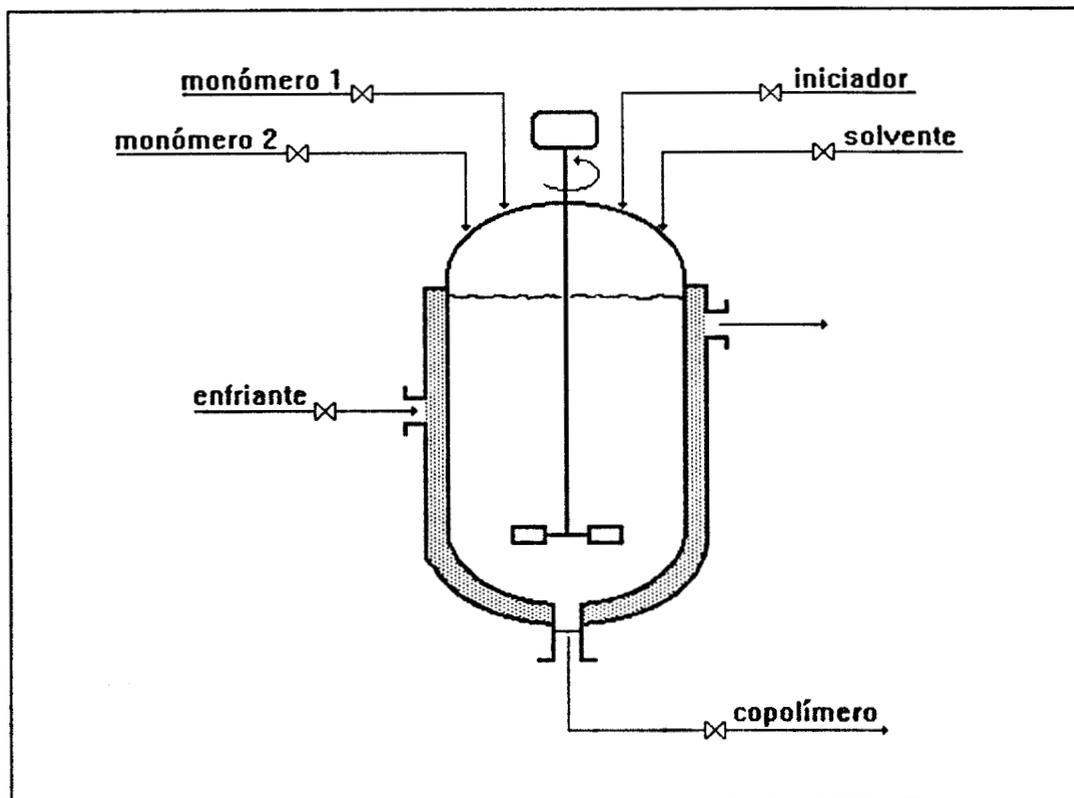


FIGURA 2.1 REACTOR CONTINUO DE POLIMERIZACIÓN EN SOLUCIÓN

Para poder abordar el problema de control se requiere primeramente conocer el comportamiento dinámico del reactor autónomo, así como las regiones de estabilidad a lazo abierto. Para ello se desarrollan los balances de materia y energía del sistema en base al esquema cinético anteriormente descrito, obteniéndose el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

Balance de iniciador (I):

$$\frac{d(I)V}{dt} = W_{ie} - qI - k_d V \quad (2.11a)$$

Balance de radicales primarios (R):

$$\frac{d(R)V}{dt} = qR_e - qR + 2fk_d V - (k_{i1}RM_1 + k_{i2}RM_2)V \quad (2.11b)$$

Balance de monómero 1 (M_1):

$$\frac{d(M_1)V}{dt} = q_1M_{1e} - qM_1 - k_{i1}RM_1V - M_1(k_{p11}P + k_{p21}Q)V \quad (2.11c)$$

Balance de monómero 2 (M_2):

$$\frac{d(M_2)V}{dt} = q_2M_{2e} - qM_2 - k_{i2}RM_2V - M_2(k_{p12}P + k_{p22}Q)V \quad (2.11d)$$

Balance de radicales poliméricos activos ($P_{n,m}$, $Q_{n,m}$):

$$\frac{d(P_{n,m}V)}{dt} = q_1P_{(n,m)e} - qP_{n,m} + M_1(k_{p11}P_{n-1,m} + k_{p21}Q_{n-1,m})V - P_{n,m}(k_{p11}M_1 + k_{p12}M_2 + k_{t11}P + k_{t12}Q)V \quad (2.11e)$$

$$\frac{d(Q_{n,m}V)}{dt} = q_2Q_{(n,m)e} - qQ_{n,m} + M_2(k_{p12}P_{n,m-1} + k_{p22}Q_{n,m-1})V - Q_{n,m}(k_{p21}M_1 + k_{p22}M_2 + k_{t12}P + k_{t22}Q)V \quad (2.11f)$$

Balance de monómero 1 convertido a polímero (P_1):

$$\frac{d(P_1)V}{dt} = q_1P_{1e} - qP_1 + k_{i1}RM_1V + M_1(k_{p11}P + k_{p21}Q)V \quad (2.11g)$$

Balance de monómero 2 convertido a polímero (P_2):

$$\frac{d(P_2)V}{dt} = q_2P_{2e} - qP_2 + k_{i2}RM_2V + M_2(k_{p12}P + k_{p22}Q)V \quad (2.11h)$$

Balance de solvente (S):

$$\frac{d(S)V}{dt} = q_sS_e - qS \quad (2.11i)$$

Balance de masa total:

$$\frac{d(\rho)V}{dt} = q_1\rho_{1e} + q_2\rho_{2e} + q_s\rho_s - q\rho \quad (2.11j)$$

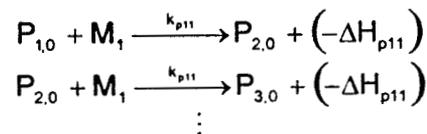
Balance de energía:

$$\frac{d(V\rho C_p T)}{dt} = M_1[(-\Delta H_{p11})k_{p11}P + (-\Delta H_{p21})k_{p21}Q]V + M_2[(-\Delta H_{p12})k_{p12}P + (-\Delta H_{p22})k_{p22}Q]V - UA(T - T_c) + q_1\rho_{1e}C_{p1}T_{1e} + q_2\rho_{2e}C_{p2}T_{2e} + q_s\rho_sC_{ps}T_{se} - q\rho C_p T \quad (2.11k)$$

donde f representa el factor de eficiencia del iniciador (para tomar en cuenta reacciones simultáneas que puedan consumir R), V es el volumen del sistema reaccionante; q_1 , q_2 , q_s simbolizan los flujos de entrada de monómero 1, monómero 2 y de solvente con iniciador, respectivamente; q es la salida neta del reactor; ρ_{1e} , ρ_{2e} , ρ_s , ρ son las densidades de las corrientes de entrada de monómero 1, monómero 2, solvente y mezcla polimérica en el reactor, respectivamente.

Para el estudio de polimerización por radicales libres es posible simplificar el modelo con las siguientes hipótesis, las cuales son asumidas en la mayoría de los modelos cinéticos:

- i. La reactividad de los radicales poliméricos activos es independiente de su longitud (grado de polimerización), es decir, las constantes de velocidad de propagación (k_{pj}) están determinadas únicamente por la última unidad monomérica añadida (esto en base al modelo de Mayo y Lewis 1944).



- ii. La cadena polimérica es larga, esto es, la propagación es la única reacción de importancia ya que se repite muchas más veces por cada etapa de iniciación ó de terminación. Lo anterior permite que las expresiones cinéticas de los monómeros se reduzcan:

$$\begin{aligned} \overset{\substack{\text{r}_{\text{formación de}} \\ \text{radicales primarios}}}{r_{M_1}} &\ll \overset{\text{r}_{\text{propagación}}}{r_{M_1}} \\ r_{M_1} = -k_{i1}RM_1 - M_1(k_{p11}P + k_{p21}Q) &\Rightarrow r_{M_1} = -M_1(k_{p11}P + k_{p21}Q) \quad (a) \\ r_{M_2} = -k_{i2}RM_2 - M_2(k_{p12}P + k_{p22}Q) &\Rightarrow r_{M_2} = -M_2(k_{p12}P + k_{p22}Q) \quad (b) \\ \text{donde: } P = \sum_n \sum_m P_{n,m} &, \quad Q = \sum_n \sum_m Q_{n,m} \end{aligned}$$

- iii. Suposición de estado casi-estacionario, en el cual se asume que las concentraciones de los radicales primarios (R) y los radicales poliméricos activos ($P_{n,m}, Q_{n,m}$) permanecen constantes, debido a que la reacción de polimerización procede lo suficientemente lenta, de tal forma que alcanza un estado estacionario donde la población de radicales poliméricos no cambia apreciablemente con el tiempo (lo cual radica principalmente en los tiempos característicos de reacción). De acuerdo a esta suposición se tiene que:

$$\frac{dR}{dt}, \frac{dP}{dt}, \frac{dQ}{dt} \ll \frac{dM_1}{dt}, \frac{dM_2}{dt}, \frac{dI}{dt}$$

entonces,

$$\frac{dR}{dt} = 0 \quad (a)$$

$$\frac{dP}{dt} = 0 \quad (b)$$

$$\frac{dQ}{dt} = 0 \quad (c)$$

iv. Suposición de estado estacionario para cada una de las especies reactivas $P_{n,m}$ y $Q_{n,m}$, separadamente. Para que las concentraciones de éstas permanezcan constantes, sus tasas de interconversión deben ser iguales. De acuerdo a esta suposición las velocidades de reacción de (2.5) y (2.6) deben ser iguales:

$$k_{p21}M_1Q = k_{p12}M_2P$$

A partir de la suma de todas las cadenas polimérica activa que terminan con monómero 1 (ec. 2.11e) se obtiene una ecuación para la variación de la concentración de radicales P con respecto al tiempo; así mismo, de la suma de todas las cadenas poliméricas que terminan con monómero 2 (ec. 2.11f) se llega a una expresión para la variación de la concentración de los radicales Q. Aplicando las hipótesis anteriormente descritas se obtienen expresiones para las concentraciones de radicales P y Q (el desarrollo se muestra en el apéndice A):

$$P = \left(\frac{k_{p21}M_1}{k_{p12}M_2} \right) Q \quad (2.12a)$$

$$Q = \frac{2fk_dI}{k_{111} \left(\frac{k_{p21}M_1}{k_{p12}M_2} \right)^2 + 2k_{112} \left(\frac{k_{p21}M_1}{k_{p12}M_2} \right) + k_{122}} \quad (2.12b)$$

Desarrollando las derivadas temporales del lado izquierdo de la ecuación (2.11) y aplicando las hipótesis anteriores, la ec. (2.11) se transforma en:

$$\dot{M}_1 = q_1 \frac{M_{1e}}{V} - q \frac{M_1}{V} - R_{p1} - M_1 \frac{\dot{V}}{V} \quad (2.13a)$$

$$\dot{M}_2 = q_2 \frac{M_{2e}}{V} - q \frac{M_2}{V} - R_{p2} - M_2 \frac{\dot{V}}{V} \quad (2.13b)$$

$$\dot{I} = \frac{W_{ie}}{V} - q \frac{I}{V} - R_i - I \frac{\dot{V}}{V} \quad (2.13c)$$

$$\dot{S} = q_s \frac{S_e}{V} - q \frac{S}{V} - S \frac{\dot{V}}{V} \quad (2.13d)$$

$$\dot{P}_1 = q_1 \frac{P_{1e}}{V} - q \frac{P_1}{V} + R_{p1} - P_1 \frac{\dot{V}}{V} \quad (2.13e)$$

$$\dot{P}_2 = q_2 \frac{P_{2e}}{V} - q \frac{P_2}{V} + R_{p2} - P_2 \frac{\dot{V}}{V} \quad (2.13f)$$

$$\dot{T} = r_T - \gamma(T - T_c) + q_1 \frac{\rho_{1e} C_{p1} T_{1e}}{V \rho C_p} + q_2 \frac{\rho_{2e} C_{p2} T_{2e}}{V \rho C_p} + q_s \frac{\rho_s C_{ps} T_{se}}{V \rho C_p} - q \frac{T}{V} - T \frac{\dot{V}}{V} - T \frac{\dot{\rho}}{\rho} \quad (2.13g)$$

$$\dot{V} = q_1 \frac{\rho_{1e}}{\rho} + q_2 \frac{\rho_{2e}}{\rho} + q_s \frac{\rho_s}{\rho} - q - V \frac{\dot{\rho}}{\rho} \quad (2.13h)$$

siendo

$$R_{p1}(M_1, M_2, I, T) = M_1 (k_{p11} P + k_{p21} Q)$$

$$R_{p2}(M_1, M_2, I, T) = M_2 (k_{p12} P + k_{p22} Q)$$

$$R_i(I, T) = k_d I$$

$$r_T(M_1, M_2, P_1, P_2, S, T) = \sum_1^2 \sum_1^2 \beta_{ij} r_{pij}$$

$$\beta_{ij}(M_1, M_2, P_1, P_2, S, T) = \frac{(-\Delta H_{pij}) M_i^0}{\rho C_p} \quad (\text{incremento adiabático de temperatura})$$

$$r_{p11}(M_1, M_2, I, T) = k_{p11} P \frac{M_1}{M_1^0}$$

$$r_{p21}(M_1, M_2, I, T) = k_{p21} Q \frac{M_1}{M_1^0}$$

$$r_{p12}(M_1, M_2, I, T) = k_{p12} P \frac{M_2}{M_2^0}$$

$$r_{p22}(M_1, M_2, I, T) = k_{p22} Q \frac{M_2}{M_2^0}$$

$$\gamma(M_1, M_2, P_1, P_2, S, V) = \frac{UA}{V \rho C_p}$$

2.4 DENSIDAD DE LA MEZCLA POLIMÉRICA

Se definen las siguientes variables de concentración adimensionales

$$m_i = \frac{M_i}{M_i^0} \quad (2.14a)$$

$$p_i = \frac{P_i}{P_i^0} \quad (2.14b)$$

$$s_i = \frac{S_i}{S_i^0} \quad (2.14c)$$

donde las constantes M_i^0 , P_i^0 y S_i^0 representan físicamente las concentraciones molares de cada una de las especies puras :

$$M_i^0 = \frac{\rho_i^m}{m_i} \quad (2.15a)$$

$$P_i^0 = \frac{\rho_i^p}{m_i} \quad (2.15b)$$

$$S_i^0 = \frac{\rho_i^s}{\sigma_i} \quad (2.15c)$$

siendo m_i el peso molecular del i -ésimo monómero, σ_i el peso molecular del i -ésimo solvente.

En términos de densidades de las especies puras y concentraciones molares, la densidad de la mezcla polimérica para "nm" monómeros y "ns" solventes (desarrollo detallado en el Apéndice B) está dada por :

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^{nm} (\rho_i^m m_i + \rho_i^p p_i) + \sum_{i=1}^{ns} \rho_i^s s_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} \quad (2.16a)$$

y su derivada temporal por

$$\frac{\dot{\rho}}{\rho} = \frac{\sum_{i=1}^{nm} \left(\epsilon_i^m \dot{m}_i + \epsilon_i^p \dot{p}_i \right) + \sum_{i=1}^{ns} \epsilon_i^s \dot{s}_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} = \frac{\sum_{i=1}^{nm} \left[\epsilon_i^m \left(q_i \frac{m_{i0}}{V} - r_{p_i} \right) + \epsilon_i^p \left(q_i \frac{p_{i0}}{V} + r_{p_i} \frac{\rho_i^m}{\rho_i^p} \right) \right] + \sum_{i=1}^{ns} \epsilon_i^s \left(q_{s_i} \frac{s_{i0}}{V} \right)}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} \quad (2.16b)$$

siendo $\epsilon_i^m, \epsilon_i^p, \epsilon_i^s$ los factores de contracción de volumen de cada monómero, monómero convertido a polímero y solvente (con respecto a la densidad de la mezcla), respectivamente:

$$\varepsilon_i^m = 1 - \frac{\rho_i^m}{\rho} \quad (2.17a)$$

$$\varepsilon_i^p = 1 - \frac{\rho_i^p}{\rho} \quad 1 \leq i \leq nm \quad (2.17b)$$

$$\varepsilon_i^s = 1 - \frac{\rho_i^s}{\rho} \quad (2.17c)$$

Para el caso particular de 2 monómeros y un solvente, la densidad de la mezcla es:

$$\rho = \frac{\rho_1^m m_1 + \rho_2^m m_2 + \rho_1^p p_1 + \rho_2^p p_2 + s \rho_s}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s} \quad (2.18)$$

donde $\rho_1^m, \rho_2^m, \rho_1^p, \rho_2^p, \rho_s$ son las densidades de monómero 1 puro, monómero 2 puro, monómero 1 convertido, monómero 2 convertido y solvente, respectivamente.

2.5 EXPRESIONES PARA EL MODELO DINÁMICO (LAZO ABIERTO)

En la sección anterior se desarrolló una expresión general para la densidad de la mezcla polimérica, así sustituyendo dicha expresión y su derivada (2.16) en el balance global de materia, se obtiene una expresión general para la variación del volumen respecto al tiempo (desarrollo detallado en el Apéndice C):

$$\dot{V} = - \frac{\sum_{i=1}^{nm} \varepsilon_i V r_{p_i}}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^s s_i} + \sum_{i=1}^{nm} q_i \left[(1 - \varepsilon_i^m) \left(\frac{1 - \varepsilon_i^m m_i}{1 - \varepsilon_i} \right) + \frac{\varepsilon_i^m m_i + \varepsilon_i^p p_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^s s_i} \right] + \sum_{i=1}^s q_s \left[1 + \varepsilon_i^s \left(\frac{s_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^s s_i} - 1 \right) \right] - q \quad (2.19a)$$

o bien

$$\dot{V} = \sum_{i=1}^{nm} r_{p_i} \phi_i V + \sum_{i=1}^{nm} q_i \phi_{i-nm} + \sum_{i=1}^s q_s \phi_{i-2nm} - q \quad (2.19b)$$

la cual para el caso específico de 2 monómeros y un solvente es:

$$\dot{V} = (r_{p1}\phi_1 + r_{p2}\phi_2)N + q_1\phi_3 + q_2\phi_4 + q_s\phi_5 - q \quad (2.19c)$$

donde cada funcionalidad corresponde a:

$$\begin{aligned} \phi_1(m_1, m_2, p_1, p_2, s) &= -\frac{\varepsilon_1}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s} \\ \phi_2(m_1, m_2, p_1, p_2, s) &= -\frac{\varepsilon_2}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s} \\ \phi_3(m_1, m_2, p_1, p_2, s) &= (1 - \varepsilon_1^m) \left(\frac{1 - \varepsilon_1 m_{1e}}{1 - \varepsilon_1} \right) + \frac{\varepsilon_1^m m_{1e} + \varepsilon_1^p p_{1e}}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s} \\ \phi_4(m_1, m_2, p_1, p_2, s) &= (1 - \varepsilon_2^m) \left(\frac{1 - \varepsilon_2 m_{2e}}{1 - \varepsilon_2} \right) + \frac{\varepsilon_2^m m_{2e} + \varepsilon_2^p p_{2e}}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s} \\ \phi_5(m_1, m_2, p_1, p_2, s) &= 1 + \varepsilon^s \left(\frac{s_{1e}}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s} - 1 \right) \end{aligned}$$

Se observa que si se considera densidad constante, los factores de contracción de volumen ε_1^m , ε_1^p y ε_1^s son cero, y por lo tanto $\phi_1 = 0$, $\phi_2 = 0$, $\phi_3 = 1$, $\phi_4 = 1$, $\phi_5 = 1$; y con ello la variación del cambio de volumen con respecto al tiempo se reduce a:

$$\dot{V} = q_1 + q_2 + q_s - q$$

siendo esta expresión la utilizada por Padilla (1991).

Introduciendo tanto la relación del cambio de volumen respecto al tiempo (2.20a) en los balances de materia y energía desarrollados (2.13) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales que modelan el comportamiento dinámico del reactor de copolimerización (desarrollo detallado en el Apéndice C):

$$\dot{m}_1 = -r_{p1}(1 + m_1\phi_1) - r_{p2}m_1\phi_2 + q_1 \left(\frac{m_{1e} - m_1\phi_3}{V} \right) + q_2 \left(-\frac{m_1\phi_4}{V} \right) + q_s \left(-\frac{m_1\phi_5}{V} \right) \quad (2.20a)$$

$$\dot{m}_2 = -r_{p1}m_2\phi_1 - r_{p2}(1 + m_2\phi_2) + q_1 \left(-\frac{m_2\phi_3}{V} \right) + q_2 \left(\frac{m_{2e} - m_2\phi_4}{V} \right) + q_s \left(-\frac{m_2\phi_5}{V} \right) \quad (2.20b)$$

$$\dot{i} = -(r_{p1}i\phi_1 + r_{p2}i\phi_2) - r_1 + \frac{W_{ie}}{l^0V} + q_1\left(-\frac{i\phi_3}{V}\right) + q_2\left(-\frac{i\phi_4}{V}\right) + q_5\left(-\frac{i\phi_5}{V}\right) \quad (2.20c)$$

$$\dot{s} = -r_{p1}s\phi_1 - r_{p2}s\phi_2 + q_1\left(-\frac{s\phi_3}{V}\right) + q_2\left(-\frac{s\phi_4}{V}\right) + q_5\left(\frac{s_e - s\phi_5}{V}\right) \quad (2.20d)$$

$$\dot{p}_1 = r_{p1}(1 - \varepsilon_1 - p_1\phi_1) - r_{p2}p_1\phi_2 + q_1\left(\frac{p_{1e} - p_1\phi_3}{V}\right) + q_2\left(-\frac{p_1\phi_4}{V}\right) + q_5\left(-\frac{p_1\phi_5}{V}\right) \quad (2.20e)$$

$$\dot{p}_2 = -r_{p1}p_2\phi_1 + r_{p2}(1 - \varepsilon_2 - p_2\phi_2) + q_1\left(-\frac{p_2\phi_3}{V}\right) + q_2\left(\frac{p_{2e} - p_2\phi_4}{V}\right) + q_5\left(-\frac{p_2\phi_5}{V}\right) \quad (2.20f)$$

$$\dot{T} = r_T - \gamma(T - T_c) + q_1\left(\frac{C_{p1}}{C_p} T_{1e} - T\right) \frac{\rho_{1e}}{\rho V} + q_2\left(\frac{C_{p2}}{C_p} T_{2e} - T\right) \frac{\rho_{2e}}{\rho V} + q_5\left(\frac{C_{ps}}{C_p} T_{se} - T\right) \frac{\rho_s}{\rho V} \quad (2.20g)$$

$$\dot{V} = (r_{p1}\phi_1 + r_{p2}\phi_2)V + q_1\phi_3 + q_2\phi_4 + q_5\phi_5 - q \quad (2.20h)$$

El sistema de ecuaciones diferenciales (2.20) puede representarse de la siguiente forma vectorial:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{g}_1(\mathbf{x})q_1 + \mathbf{g}_2(\mathbf{x})q_2 + \mathbf{g}_3(\mathbf{x})q_5 + \mathbf{g}_4(\mathbf{x})q + \mathbf{g}_5(\mathbf{x})T_c \quad (2.21a)$$

donde cada vector corresponde a

$$\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ x_3 \ x_4 \ x_5 \ x_6 \ x_7 \ x_8]^T = [m_1 \ m_2 \ i \ s \ p_1 \ p_2 \ T \ V]^T \quad (2.21b)$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_1(x_1, \dots, x_7) \\ f_2(x_1, \dots, x_7) \\ f_3(x_1, \dots, x_7) \\ f_4(x_1, \dots, x_7) \\ f_5(x_1, \dots, x_7) \\ f_6(x_1, \dots, x_7) \\ f_7(x_1, \dots, x_8) \\ f_8(x_1, \dots, x_8) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -r_{p1}(1 + \phi_1 x_1) - r_{p2}\phi_2 x_1 \\ -r_{p1}\phi_1 x_2 - r_{p2}(1 + \phi_2 x_2) \\ -(r_{p1}\phi_1 - r_{p2}\phi_2)x_3 - r_1 + \frac{W_{ie}}{l^0V} \\ -(r_{p1}\phi_1 - r_{p2}\phi_2)x_4 \\ r_{p1}(1 - \varepsilon_1 - \phi_1 x_5) - r_{p2}\phi_2 x_5 \\ -r_{p1}\phi_1 x_6 + r_{p2}(1 - \varepsilon_2 - \phi_2 x_6) \\ r_T - \gamma x_7 \\ (r_{p1}\phi_1 + r_{p2}\phi_2)x_8 \end{bmatrix} \quad (2.21c)$$

$$\mathbf{g}_1 = \begin{bmatrix} g_{11}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{12}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{13}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{14}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{15}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{16}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{17}(x_1, x_2, x_4, \dots, x_8) \\ g_{18}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{x_{1e} - x_1 \phi_3}{x_8} \\ -\frac{x_2 \phi_3}{x_8} \\ -\frac{x_3 \phi_3}{x_8} \\ -\frac{x_4 \phi_3}{x_8} \\ \frac{x_{5e} - x_5 \phi_3}{x_8} \\ -\frac{x_6 \phi_3}{x_8} \\ \left(\frac{C_{p1}}{C_p} T_{1e} - x_7 \right) \frac{\rho_1}{\rho x_8} \\ \phi_3 \end{bmatrix} \quad (2.21d)$$

$$\mathbf{g}_2 = \begin{bmatrix} g_{21}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{22}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{23}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{24}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{25}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{26}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{27}(x_1, x_2, x_4, \dots, x_8) \\ g_{28}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{x_1 \phi_4}{x_8} \\ \frac{x_{2e} - x_2 \phi_4}{x_8} \\ -\frac{x_3 \phi_4}{x_8} \\ -\frac{x_4 \phi_4}{x_8} \\ -\frac{x_5 \phi_4}{x_8} \\ \frac{x_{6e} - x_6 \phi_4}{x_8} \\ \left(\frac{C_{p2}}{C_p} T_{2e} - x_7 \right) \frac{\rho_2}{\rho x_8} \\ \phi_4 \end{bmatrix} \quad (2.21e)$$

$$\mathbf{g}_3 = \begin{bmatrix} g_{31}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{32}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{33}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{34}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{35}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{36}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \\ g_{37}(x_1, x_2, x_4, \dots, x_8) \\ g_{38}(x_1, x_2, x_4, x_5, x_6, x_8) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{x_1 \phi_5}{x_8} \\ -\frac{x_2 \phi_5}{x_8} \\ -\frac{x_3 \phi_5}{x_8} \\ \frac{x_{4e} - x_4 \phi_5}{x_8} \\ -\frac{x_5 \phi_5}{x_8} \\ -\frac{x_6 \phi_5}{x_8} \\ \left(\frac{C_{ps}}{C_p} T_{se} - x_7 \right) \frac{\rho_s}{\rho x_8} \\ \phi_5 \end{bmatrix} \tag{2.21f}$$

$$\mathbf{g}_4 = \begin{bmatrix} g_{41} \\ g_{42} \\ g_{43} \\ g_{44} \\ g_{45} \\ g_{46} \\ g_{47}(x_1, x_2, x_4, \dots, x_7) \\ g_{48} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \gamma \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.21g}$$

$$\mathbf{g}_5 = \begin{bmatrix} g_{51} \\ g_{52} \\ g_{53} \\ g_{54} \\ g_{55} \\ g_{56} \\ g_{57} \\ g_{58} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \gamma \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{2.21h}$$

(donde las funcionalidades utilizadas en estas expresiones se detallan en el Apéndice D).

2.6 CONSTANTES CINÉTICAS DE POLIMERIZACIÓN

Las siguientes expresiones determinan las constantes cinéticas, de acuerdo a Hamer *et al.* (1981) y Padilla (1991):

$$k_d = k_d^0 \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \quad (2.22a)$$

$$k_{p_{ij}} = k_{p_{ij}}^0 \exp\left(-\frac{E_{p_{ij}}}{RT}\right) \quad i,j=1,2 \quad (2.22b)$$

$$k_{t_{ii}} = k_{t_{ii}}^0 \exp\left(-\frac{E_{t_{ii}}}{RT}\right) g_{t_{ii}} \quad i=1,2 \quad (2.22c)$$

$$k_{t_{12}} = \Phi (k_{t_{11}} k_{t_{22}})^{1/2} \quad (2.22d)$$

El factor de "efecto gel" de cada monómero, $g_{t_{ii}}$, se define como la razón entre la constante de terminación observada y la constante de terminación a conversión cero:

$$g_{t_{ii}} = \frac{k_{t_{ii}}}{(k_{t_{ii}})_{x=0}}$$

y se determina mediante correlaciones (apéndice D). Mientras que la constante de terminación cruzada, $k_{t_{12}}$, es determinada por la media geométrica de las constantes de homo-terminación multiplicada por el apropiado factor Φ (éste es usualmente determinado experimentalmente). Hamer *et al.* (1981) demostraron que el parámetro Φ no tiene fuerte efecto sobre el comportamiento dinámico del reactor, estudiando entre valores extremos de 1 y 400; por esta razón se considerará $\Phi=1$.

2.7 TRANSFERENCIA DE CALOR EN EL REACTOR

La eliminación de calor en los reactores de polimerización es muy importante, debido a la exotermicidad de este tipo de reacciones; pudiendo llegar a ocasionar disparos térmicos o taponamientos por la alta viscosidad. Generalmente, la transferencia de calor se realiza por medio de una chaqueta de enfriamiento. Además, debe considerarse que dentro del reactor se realiza agitación para contribuir a la eliminación de calor.

En los procesos de transferencia de calor se conoce que la tasa de eliminación (Q) de calor esta dado por:

$$Q = UA\Delta T \quad (2.23)$$

donde U es el coeficiente global de transferencia de calor, A es el área de transferencia de calor y ΔT es el gradiente de temperatura.

El coeficiente global de transferencia de calor viene dado por la siguiente expresión:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_i} + \frac{L_m}{K_m} + \frac{1}{h_o} \quad (2.24)$$

siendo h_i y h_o los coeficientes individuales de transferencia, de calor interno y externo a la pared del reactor, y (L_m/K_m) es la resistencia a la transferencia a través de la pared.

Esta expresión (2.23) se puede simplificar eliminando el segundo término, considerándose despreciable la resistencia de calor a través de la pared del reactor (entre el fluido de enfriamiento y la mezcla polimérica). Además, como el coeficiente de calor externo se considera que es mucho menor que el interno (lo cual es válido si el diseño de la chaqueta de enfriamiento es el adecuado), obteniéndose que,

$$U = h_i \quad (2.25)$$

Así mismo, los coeficientes individuales dependen de la geometría del reactor, tipo de agitador, diseño de la chaqueta, condiciones de operación y propiedades físicas del fluido. Para tanques enchaquetados con geometría mecánica, el coeficiente interno viene dado por (Kern, 1960) :

$$h_i = \frac{k}{D_t} Ah Re^{Bh} Pr^{Ch} \left(\frac{\mu}{\mu_o} \right)^{Dh} \quad (2.26a)$$

siendo Re el número de Reynolds y Pr el número de Prandtl expresados como :

$$Re = \frac{L^2 N_p}{\mu} \quad (2.26b)$$

$$Pr = \frac{C_p \mu}{k} \quad (2.26c)$$

Utilizando un agitador tipo turbina de 6 aspas, las constantes Ah, Bh, Ch y Dh dependientes de Re han sido correlacionadas por Bondy y Lippa (1983) (expresiones detalladas en el Apéndice E).

La densidad y viscosidad se refieren a la mezcla polimérica, la densidad se obtiene con la expresión obtenida en la sección 2.4. Mientras que la viscosidad de la mezcla polimérica depende de las concentraciones de monómeros, polímeros y solvente, así como de la temperatura. Para el caso de metil metacrilato existen datos y correlaciones para estimar su viscosidad que dependen de la fracción volumen de monómero sin reaccionar (solvente) y de la temperatura (Chiu *et al.*, 1983; Baillagou y Soong, 1985), sin embargo para el caso del acetato de vinilo no hay datos disponibles en la literatura. Por lo anterior se asume que el metil metacrilato y acetato de vinilo se comportan en forma semejante, y se utilizará la expresión obtenida por Sánchez (1989) en base a las publicaciones mencionadas anteriormente:

$$\mu = \mu_0 e^{\left[\frac{2.3\zeta}{A(T) - B\phi_m} \right]^{Cv}} \quad (2.27a)$$

μ_0 es la viscosidad en condiciones de referencia, y se define como:

$$\mu_0 = Av (T - 273)^{-Bv} \quad (2.27b)$$

ϕ_m es la fracción volumen de solvente (considerando el monómero remanente como solvente adicional), el cual redefiniéndolo para el caso de 2 polímero esta dado por:

$$\phi_m = \frac{\text{volumen } M_1 + \text{volumen } M_2 + \text{volumen } S}{\text{volumen total}} = \frac{m_1 + m_2 + s}{m_1 + p_1 + m_2 + p_2 + s} \quad 2.27c)$$

El área de transferencia de calor es:

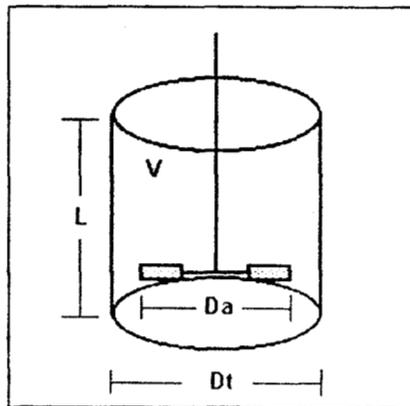


FIGURA 2.2

$$A = 4 \frac{V}{D_t} + \frac{\pi}{4} D_t^2 \quad (2.28)$$

siendo V el volumen del reactor y D_t el diámetro del tanque (reactor).

CAPÍTULO 3

COMPORTAMIENTO DEL REACTOR AUTÓNOMO

3.1 INTRODUCCIÓN

El estudio del comportamiento del reactor en estado estacionario y en estado transitorio, así como su estabilidad ha sido motivo de varios trabajos publicados; como se mencionó en los antecedentes del modelado de reactores de copolimerización. En cuanto a homopolimerización de metil metacrilato o de acetato de vinilo se ha comprobado teórica y experimentalmente la existencia de multiplicidad de estados estacionarios, aún en condiciones isotérmicas (Liu y Amundson, 1961; Uppal *et al.*, 1976, Jasinghani y Ray, 1977; Schmidt y Ray, 1981, 1984). Estos trabajos demuestran que existen tres estados estacionarios, y algunos de ellos analizan inclusive la estabilidad de cada uno de ellos; o bien la dinámica del reactor en estado transitorio. Con respecto a copolimerización, también se ha encontrado la existencia de múltiples estados estacionarios comprobándose en algunos trabajos experimentalmente; así como la existencia de ciclos límites y bifurcaciones; así mismo se han generado criterios de estabilidad de estos puntos de operación del reactor (Hamer *et al.*, 1981; Balaraman *et al.*, 1983, 1986, Teymour y Ray, 1989, 1992).

En las siguientes secciones se analiza la multiplicidad en estado estacionario y el comportamiento transitorio a lazo abierto, para el modelo desarrollado en el capítulo 2. Teniéndose como herramienta adicional para dicho análisis la teoría de bifurcación. Además se estudia el efecto de haber introducido variaciones temporales de la densidad y la viscosidad, ya que en los trabajos publicados para el caso de copolimerización se han tomado estas variaciones despreciables. Todo esto con la finalidad de: (a) verificar que con el modelo desarrollado se obtiene un comportamiento del reactor autónomo como el reportado en la literatura, (b) definir un criterio para justificar el uso de modelos reducidos, (c) generar una condición nominal de operación propia.

3.2 SELECCIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN

La selección de un punto de operación (condicional nominal o "set point") se basó en el caso estudiado por Congalidis *et al.* (1989). En este trabajo no se considera el efecto gel ni variaciones de la densidad y del coeficiente de calor (esto es densidad constante). Por lo tanto se modificó con las incorporaciones de estos tres efectos mencionados. Sin embargo por ser un ejemplo no muy representativo se modificaron algunas condiciones; debido a que dicho caso es relativamente fácil (es un estado estacionario estable con una conversión del 20%, poco viscoso y producción de polímero baja). Con las modificaciones hechas se obtiene un producto más viscoso, mayor conversión (aproximadamente del 47%), mayor producción y con una composición de MMA de 28.9%, y es un punto inestable. Así pues con el punto nominal de operación seleccionado se podrá analizar mejor efecto de variar la viscosidad y la densidad por los cambios de concentración, además que bajo estas condiciones es mejor comprobar el desempeño de los controladores que se diseñaran posteriormente.

Se ha considerado que los monómeros, solvente e iniciador se alimentan individualmente, además que la alimentación de monómero es puro y no hay monómero convertido en dicha alimentación. Siendo las condiciones de operación seleccionadas:

$$m_{1e} = 1.0$$

$$m_{2e} = 1.0$$

$$p_{1e} = 0.0$$

$$p_{2e} = 0.0$$

$$s_e = 1.0$$

$$T_{1e} = T_{2e} = T_{se} = 315.0^\circ\text{K}$$

$$T_c = 338.0^\circ\text{K}$$

$$q_1 = 1.8423 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s} = 1.105 \text{ L/min}$$

$$q_2 = 9.5824 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s} = 5.749 \text{ L/min}$$

$$q_s = 3.5490 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s} = 2.129 \text{ L/min}$$

$$q = 1.3790 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s} = 8.274 \text{ L/min}$$

$$W_{1e} = 1.0272 \times 10^{-4} \text{ Kmol/s}$$

$$\theta_R = 240.0 \text{ min}$$

3.3 ANÁLISIS DEL COMPORTAMIENTO EN ESTADO ESTACIONARIO

3.3.1 Multiplicidad de Estados Estacionarios

Para analizar la multiplicidad se resuelve el sistemas de ecuaciones que modelan al reactor (2.21) en estado estacionario:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{g}_1(\mathbf{x})q_1 + \mathbf{g}_2(\mathbf{x})q_2 + \mathbf{g}_3(\mathbf{x})q_s + \mathbf{g}_4(\mathbf{x})q + \mathbf{g}_5(\mathbf{x})T_c = 0 \quad (3.1)$$

utilizándose el método de Newton - Raphson para resolver este sistema de ecuaciones algebraicas. Localizándose tres estados estacionarios, como se había encontrado para la homopolimerización de cada uno de los monómeros MMA y AV (Schmidt, 1981; Sánchez, 1989; Vargas, 1991).

	estado estacionario estable	estado estacionario inestable	estado estacionario estable
m_1	0.082111 (0.7792 kmol/m ³)	0.008137 (0.0772 kmol/m ³)	0.002646 (0.0251 kmol/m ³)
m_2	0.632716 (6.8471 kmol/m ³)	0.422947 (4.5788 kmol/m ³)	0.232502 (2.5170 kmol/m ³)
i	0.001223 (0.0066 kmol/m ³)	0.000997 (0.0053 kmol/m ³)	0.000062 (0.0003 kmol/m ³)
s	0.239637 (2.4501 kmol/m ³)	0.256432 (2.6225 kmol/m ³)	0.268400 (2.7449 kmol/m ³)
P_1	0.034334 (0.4013 kmol/m ³)	0.101477 (1.1860 kmol/m ³)	0.110981 (1.2905 kmol/m ³)
P_2	0.011202 (0.1548 kmol/m ³)	0.211007 (2.9167 kmol/m ³)	0.385471 (5.3283 kmol/m ³)
$T(^{\circ}\text{K})$	337.94	352.65	389.57
$V(\text{m}^3)$	2.0	2.0	2.0

El primer estado estacionario corresponde a un punto de extinción (estable), de baja conversión y baja temperatura, por lo que no es un punto deseable para operar el reactor. El tercer estado es un punto de ignición (estable), sin embargo por implicar alta temperatura y flujo viscoso tampoco es conveniente operar en dicho punto por posibles problemas de operación, como disparos térmicos o taponamientos. Por lo que el estado estacionario intermedio es el seleccionado como punto de operación, ya que permite obtener una conversión, producción y viscosidad tolerables, además como es inestable no se puede lograr alcanzar a lazo abierto (sólo mediante la introducción de acciones de control).

Para este punto nominal de operación se obtienen las siguientes características del producto final:

conversión total de monómeros	46.84 %
composición del monómero más reactivo (MMA)	28.91 %
producción total de polímero	183.4 Kg/h
porcentaje de sólidos	36.88 %

Para localizar la región donde existe la multiplicidad se construirán diagramas de bifurcación, en los cuales se comprueba que la existencia uno o tres estados estacionarios.

3.3.2 Diagramas de Bifurcación

El término de *bifurcación* se ha utilizado para describir la “división” de las soluciones en equilibrio de una familia de ecuaciones diferenciales (Guckenheimer y Holmes, 1980). Si

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}_{\alpha}(\mathbf{x}) \quad ; \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \alpha \in \mathbb{R}^k \quad (3.2)$$

es un sistema de ecuaciones diferenciales que depende de un parámetro α (k -dimensional), entonces las soluciones en equilibrio de (3.2) están dadas por las soluciones del sistema de ecuaciones algebraicas $\mathbf{f}_{\alpha}(\mathbf{x}) = 0$. Como α varía, implica que este equilibrio está descrito por funciones suaves de α alejándose de aquellos puntos en los cuales la derivada del jacobiano de $\mathbf{f}_{\alpha}(\mathbf{x})$ con respecto a \mathbf{x} , $\mathbf{D}_{\mathbf{x}}\mathbf{f}_{\alpha}$ tiene un valor propio cero. La gráfica de cada una de estas funciones es una “rama” (bifurcación) de equilibrio de (3.2). En el equilibrio (\mathbf{x}_0, α_0) , donde $\mathbf{D}_{\mathbf{x}}\mathbf{f}_{\alpha}$ tiene un valor propio cero, varias ramas de equilibrio pueden juntarse (colapsarse) y se dice que (\mathbf{x}_0, α_0) es un “punto de bifurcación”.

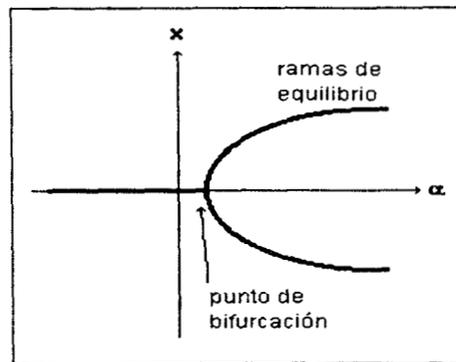


FIGURA 3.1 DIAGRAMA DE BIFURCACIÓN

Para el caso específico del reactor de copolimerización se eligió el parámetro de bifurcación, α , como una función de los flujos de alimentación; esto es

$$\begin{aligned} q_1(\alpha) &= \bar{q}_1 \alpha \\ q_2(\alpha) &= \bar{q}_2 \alpha \\ q_s(\alpha) &= \bar{q}_s \alpha \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde \bar{q}_i son los flujos de entrada (monómero 1, monómero 2 y solvente) en la condición nominal, de tal forma que cuando $\alpha=1$ corresponde al punto de operación nominal seleccionado.

En la figura 3.2 se muestra parte del mapa de bifurcación correspondiente al reactor de copolimerización, el cual se ha generado para tener un diagrama propio bajo evaluado con las condiciones de operación establecidas y con la incorporación de efecto gel, densidad y viscosidad variable. En éste se verifica la existencia de dos regiones, una en la que existe un sólo estado estacionario y otra donde existe la multiplicidad. Sin embargo la región donde hay un sólo estado estacionario que es a flujos muy pequeños o muy altos, no es una región conveniente de operar. Debido a que flujos altos (tiempos de residencia pequeños) se extingue la reacción actuando el reactor como un tanque de mezclado en el que existe lavado, mientras que a flujos bajos se obtiene altas conversiones pero también altas temperaturas y un fluido viscoso.

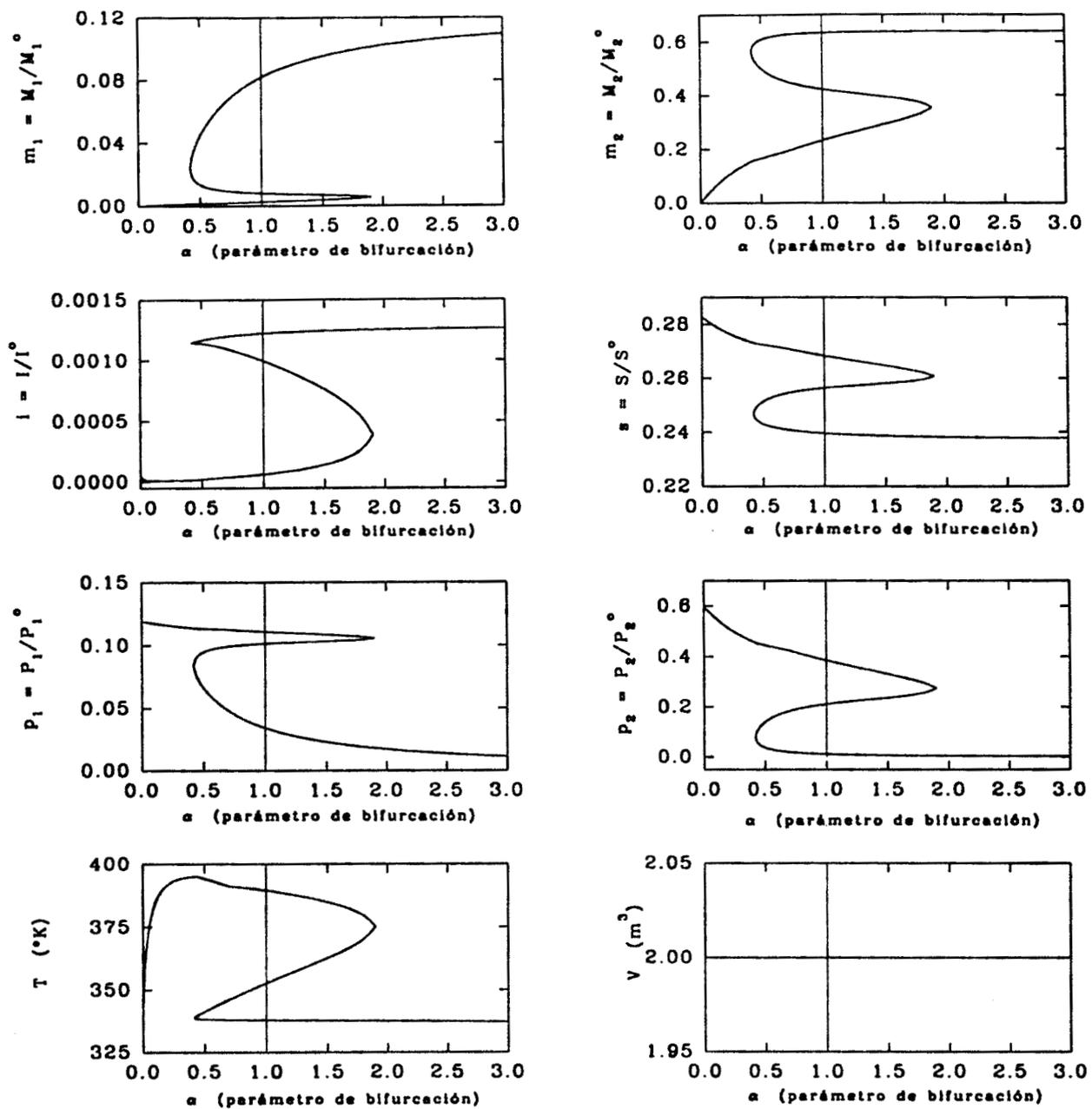


FIGURA 3.2a MAPA DE BIFURCACIÓN (Estados del reactor)

Como se observa en la figura 3.2b, la multiplicidad también existe para la composición final, conversión y velocidad de producción. Siendo éstos los parámetros de calidad y cantidad de mayor interés en la industria. Por esto es la importancia de modelar y seleccionar una condición nominal de operación óptima.

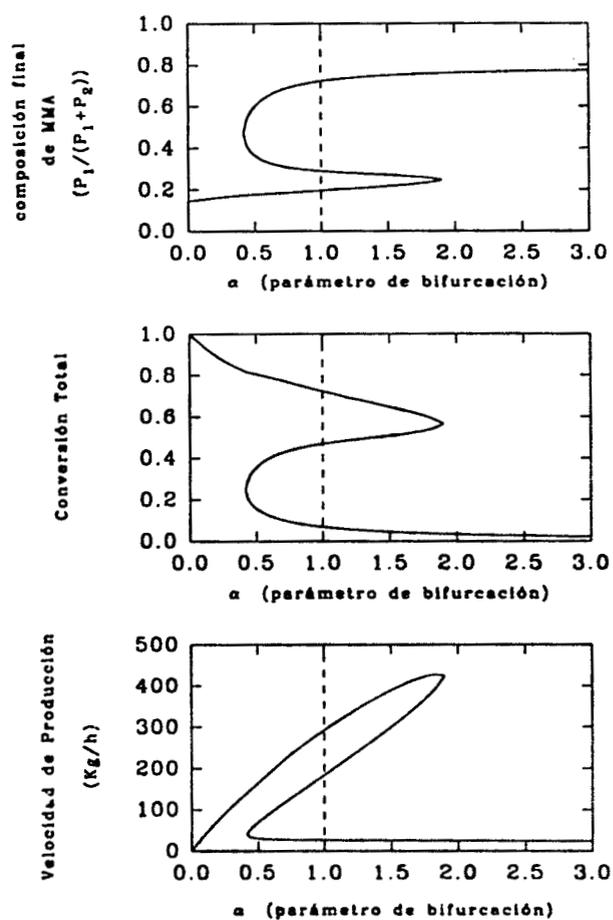


FIGURA 3.2b MAPA DE BIFURCACIÓN (Composición, conversión y producción)

3.4 ANÁLISIS DEL COMPORTAMIENTO DINÁMICO Y ESTABILIDAD

Para analizar el comportamiento del reactor en estado transitorio y la estabilidad de cada uno de los estados estacionarios encontrados anteriormente, se resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales (2.21):

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}}(t) &= \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{g}_1(\mathbf{x})q_1 + \mathbf{g}_2(\mathbf{x})q_2 + \mathbf{g}_3(\mathbf{x})q_3 + \mathbf{g}_4(\mathbf{x})q_4 + \mathbf{g}_5(\mathbf{x})T_c \\ \mathbf{x}(0) &= \mathbf{x}_0\end{aligned}\quad (3.4)$$

(para solucionar el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias se utilizó el método de Runge - Kutta - Verner de quinto orden).

Se hicieron pruebas que verificaron la estabilidad de cada uno de los estados estacionarios a partir del comportamiento transitorio para condiciones iniciales de los estados (\mathbf{x}_0) iguales a los estados estacionarios ($\bar{\mathbf{x}}$). Corroborándose que los dos estados extremos (ignición y extinción) son estables, mientras que el intermedio es un estado inestable que converge hacia el estado de extinción.

La figura 3.3 corresponde a un caso donde las condiciones iniciales son diferentes a los estados estacionarios, y converge al estado de ignición. Entonces para poder alcanzar la condición nominal (estado estacionario inestable, línea horizontal en la figura 3.3) es necesario acoplar un controlador que regule la operación del reactor en dicho punto nominal. Además a partir de esta gráfica se observan ciertas características, que tendrá el reactor a lazo cerrado (al introducir las acciones de control), primeramente el comportamiento a lazo abierto es oscilatorio tardando en llegar al estado estable en un tiempo de 600 min (aprox. 2.5 veces el tiempo de residencia); otra característica es que la dinámica de la concentración del iniciador y de la temperatura son un poco más rápidas (aprox. 400 min). Por lo anterior, es de esperar que la dinámica a lazo cerrado de algunos de los estados será como máximo de 600 min y como mínimo dependerá de la magnitud de las ganancias que se introduzcan. Además como se introducirán acciones PI entonces el comportamiento no será tan oscilatorio como la dinámica a lazo abierto.

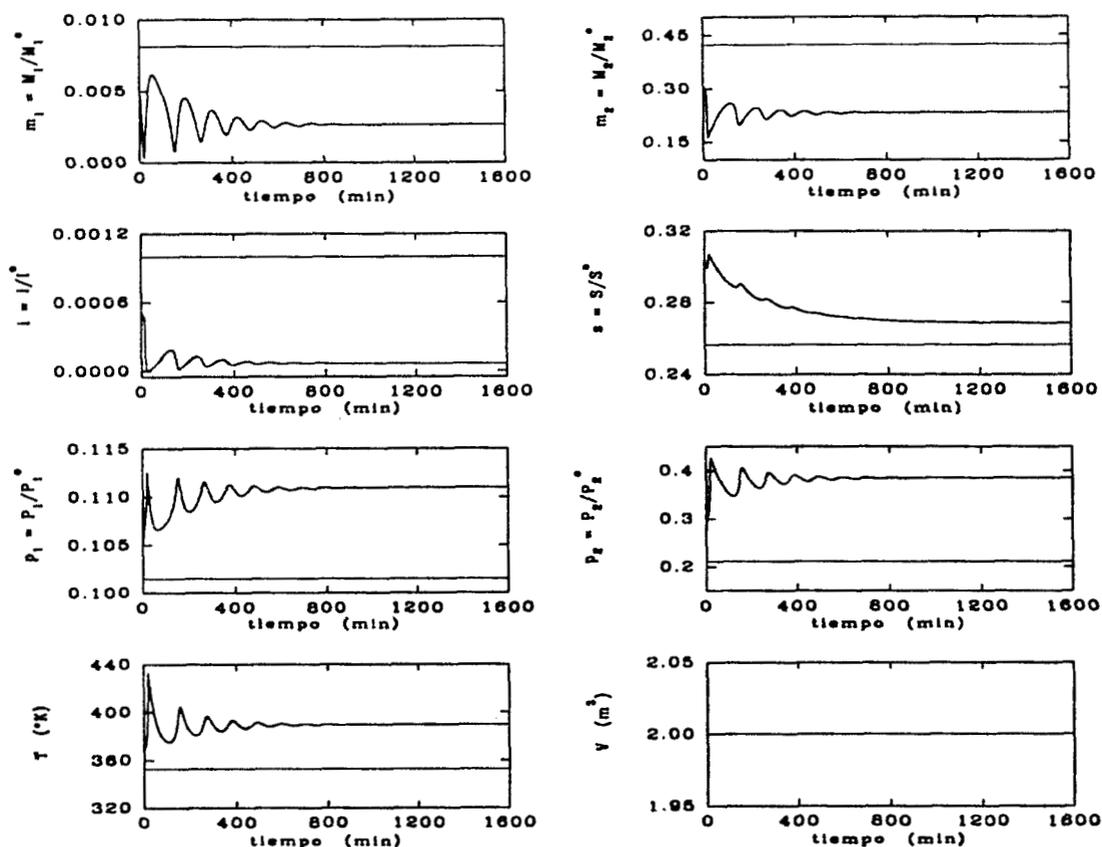


FIGURA 3.3 COMPORTAMIENTO DINÁMICO: CONDICIÓN INICIAL(x_0) \neq CONDICIÓN NOMINAL(\bar{x})

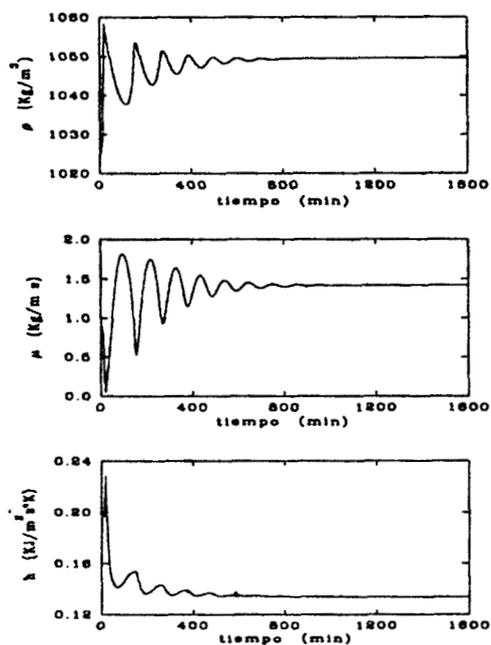
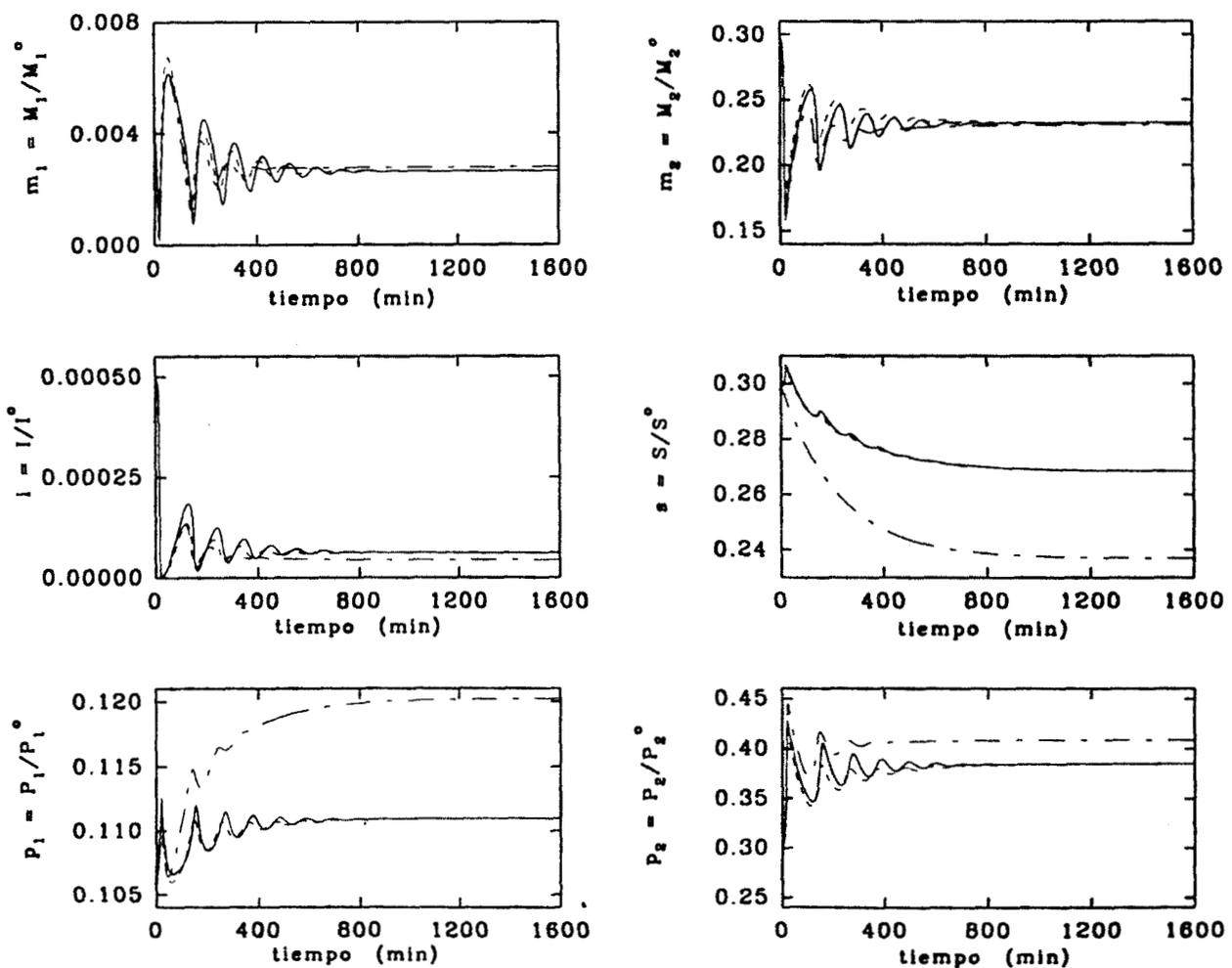


FIGURA 3.4 DENSIDAD, VISCOSIDAD Y COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR

En la figura 3.4 se muestra el comportamiento transitorio de la densidad y viscosidad, y su influencia sobre coeficiente de transferencia de calor. Observándose que la densidad varía en un rango pequeño por lo que podría considerarse como constante y tomar esta variación como un error de modelado para cuestiones de control; sin embargo la viscosidad oscila en un rango más apreciable entre 0.1 y 1.8 kg/m s (100 - 1800 cp), por lo que este factor no debiera considerarse como constante, siendo que es el que tiene más peso sobre la evaluación del coeficiente de transferencia. Este comportamiento también se refleja en la condición nominal ya que al considerar viscosidad constante se alcanza una condición nominal distinta como se observa en la figura 3.5, donde hay cambios apreciables en las concentraciones de solvente y monómeros convertidos principalmente, originando una conversión aparentemente mayor. Mientras que esto no ocurre con el caso de considerar densidad constante.



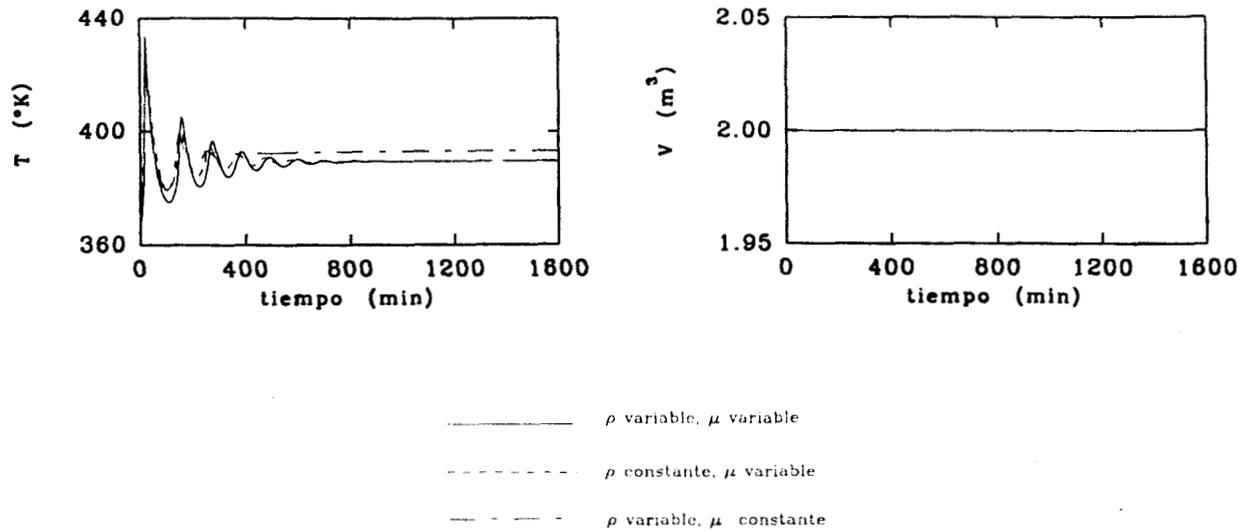


FIGURA 3.5 COMPORTAMIENTO DINÁMICO: EFECTO DE LA DENSIDAD Y LA VISCOSIDAD.

En resumen, se ha verificado que puede existir multiplicidad de estados estacionarios, pero no siempre y depende de las condiciones de operación (flujos de alimentación y descarga, temperaturas de entrada y de la chaqueta, concentraciones de alimentación, etc.). Se ha seleccionado una condición nominal (\bar{x}) que corresponde a un estado inestable, pero todo lo que se realizará en los siguientes capítulos con respecto al control del proceso será válido para cualquier \bar{x} . Y finalmente, se ha analizado el comportamiento transitorio con el fin de entender la dinámica no lineal del reactor a lazo abierto.

CAPÍTULO 4

CONTROL CON RETROALIMENTACIÓN DE ESTADOS

4.1 INTRODUCCIÓN

El interés principal es estudiar la existencia de solución al problema de control y su naturaleza. Entendiendo por el problema de control: (a) la elección de un conjunto de salidas reguladas y entradas, (b) la interconexión entre éstas; teniendo varias alternativas tanto de salidas como de entradas, por lo que su elección dependerá de la robustez, estabilidad y tiempos de respuesta.

Para la selección de la configuración de control (entradas - salidas) se toma como base tres casos estudiados por Padilla (tesis de doctorado), donde las alternativas en las salidas a regular son: (1) concentraciones de monómeros remanentes (m_1, m_2), (2) concentraciones del monómero remanente 1 y del monómero convertido 2 (m_1, p_2), y (3) concentraciones de los monómeros convertidos (p_1, p_2). Escogiéndose estos casos por tener grados relativos igual a 1 para cada lazo de control ($\kappa_i = 1$), ya que grados relativos mayores implica perder robustez. Y se tiene la conjetura que el caso 2 dará mejores resultados porque es el que involucra una dinámica interna más rápida, lo cual se estudia en detalle en la sección 4.4.

Con respecto al esquema de control, en este capítulo se resuelve el problema de regulación con retroalimentación de estados considerando que todos los estados del sistema son conocidos (8 estados para el reactor). Sin embargo en un caso práctico no es posible medir todos los estados en tiempo real, por lo que es de mayor interés el problema de control donde se requieran únicamente las mediciones de las entradas y salidas (que es el esquema de control que se desarrolla en el siguiente capítulo). Pero para la resolución al problema de regulación con retroalimentación de salidas es necesario el problema de regulación con retroalimentación de estados (Isidori y Byrnes; 1990).

4.2 CONCEPTOS PRELIMINARES

Para abordar el problema de control con retroalimentación de estas se utiliza la técnica del control no lineal, que se basa en geometría diferencial (Isidori, 1989). La metodología a seguir consiste principalmente en la obtención de un sistema lineal equivalente a partir del modelo no lineal, y luego aplicar la teoría del control para diseñar los controladores lineales, utilizando el control convencional (criterios de estabilidad, diseño de controladores PID, sintonización, etc.). La linealización total o parcial de un sistema no lineal se logra mediante una transformación de estados y/o entradas de control. Y con dicha transformación se logra un sistema equivalente lineal controlable y observable. Siendo este nuevo sistema exacto en comparación a una linealización local.

Para desarrollar el esquema de control se considera un sistema no lineal de la forma:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) + \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{d})\mathbf{u} \quad (4.1a)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) \quad (4.1b)$$

$$\mathbf{G} = [\mathbf{g}_1 \quad \mathbf{g}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{g}_m]$$

donde $\mathbf{x} \in \mathbf{X} \subset \mathbb{R}^n$, $\mathbf{y} \in \mathbf{Y} \subset \mathbb{R}^m$, $\mathbf{u} \in \mathbf{U} \subset \mathbb{R}^m$. \mathbf{f} y \mathbf{g} son campos vectoriales suaves en $\mathbf{X} \times \mathbf{D}$. \mathbf{x} son los estados del sistema, \mathbf{y} son las salidas, \mathbf{u} son las entradas de control y \mathbf{d} son las entradas exógenas conocidas, siendo continuas por tramos en el tiempo.

La invertibilidad dinámica de este sistema es otro elemento importante, ya que se relaciona con la factibilidad de una estructura de control. Hirschorn (1979) encontró las condiciones suficientes para que un sistema no lineal multivariable sea invertible, y su algoritmo ha sido extendido para los sistemas con perturbaciones exógenos por Alvarez *et al.* (1990).

4.2.1 Inversa Dinámica (Algoritmo de Hirschorn)

Definición 1. Se dice que un sistema es invertible, en sentido de Hirschorn (1979), si para cada salida $\mathbf{y}(t)$ existe una única entrada $\mathbf{u}(t)$ que aplicada al sistema da como salida $\mathbf{y}(t)$; y además no depende de extensión dinámica de control $(u, \dot{u}, \dots, u^{(n)})$.

El algoritmo de Hirschorn para invertir sistemas no lineales multivariables, consiste principalmente en construir una secuencia de sistemas que se obtienen derivando las salidas (y) sucesivamente respecto al tiempo, t . Las derivadas son efectuadas hasta que el vector de entradas (u) aparezca explícitamente, y así pueda resolverse u en términos de x y y .

De esta manera se obtiene la siguiente relación entre entradas y salidas:

$$\begin{bmatrix} y_1^{(\kappa_1)} \\ y_2^{(\kappa_2)} \\ \vdots \\ y_m^{(\kappa_m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_f^{\kappa_1} h_1(x, d) \\ L_f^{\kappa_2} h_2(x, d) \\ \vdots \\ L_f^{\kappa_m} h_m(x, d) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} L_{g_1} L_f^{\kappa_1-1} h_1(x, d) & L_{g_2} L_f^{\kappa_1-1} h_1(x, d) & \dots & L_{g_m} L_f^{\kappa_1-1} h_1(x, d) \\ L_{g_1} L_f^{\kappa_2-1} h_2(x, d) & L_{g_2} L_f^{\kappa_2-1} h_2(x, d) & \dots & L_{g_m} L_f^{\kappa_2-1} h_2(x, d) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{g_1} L_f^{\kappa_m-1} h_m(x, d) & L_{g_2} L_f^{\kappa_m-1} h_m(x, d) & \dots & L_{g_m} L_f^{\kappa_m-1} h_m(x, d) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

donde: $L_f h_i = \langle dh_i, f \rangle = \frac{\partial h_i}{\partial x} f$

$$L_f h_i = L_f h_i + h_{i,d} \dot{d} = h_{i,x} f + h_{i,d} \dot{d}$$

$$L_f^0 h_i = h_i$$

$$L_f^\alpha h_i = L_f (L_f^{\alpha-1} h_i) \quad , \quad \alpha \geq 1$$

$$h_{i,x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_i}{\partial x_1} & \frac{\partial h_i}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial h_i}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad , \quad h_{i,d} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_i}{\partial d_1} & \frac{\partial h_i}{\partial d_2} & \dots & \frac{\partial h_i}{\partial d_m} \end{bmatrix}$$

Correspondiendo κ_i al grado relativo de la i -ésima salida y_i (t), el cual es el número de veces que es necesario derivar dicha salida para que aparezca explícitamente al menos alguna entrada u_i , y $\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 + \dots + \kappa_m$ es el grado relativo total del sistema.

La sistema (4.2) puede representarse como: $V = b(x, d) + A(x, d)u$ (4.3)

que tiene solución en u , si la matriz de coeficientes del vector de entradas A , llamada *matriz de desacoplamiento*, es no singular.

4.2.2 Linealización Entrada - Salida del Sistema

Definición 2. La planta (4.1) es linealizable entrada - salida si existe una retroalimentación de estados con prealimentación de perturbaciones (con un nuevo control \mathbf{v} y una nueva perturbación \mathbf{w})

$$\mathbf{u} = \mu(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{v}) \quad (4.4)$$

de tal suerte que la planta a lazo cerrado

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) + \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) \mu(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{v}) \quad (4.5a)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) \quad (4.6b)$$

adquiere la siguiente dinámica entrada - salida

$$y_i^{(\kappa_i)} = v_i \quad (4.7)$$

(κ_i es el grado relativo de la i -ésima salida, obtenidas a partir de la inversa dinámica en sentido de Hirschorn).

Teorema 1. La planta (4.1) es linealizable entrada - salida si y solo si

i) $L_{g_i} L_f^k \mathbf{h} = 0$, $0 \leq i \leq m$, $0 \leq j \leq m$, $1 \leq k \leq \kappa_i - 2$

ii) Existen $n - \kappa$ campos escalares $\phi_{\kappa+1}(\mathbf{x}), \dots, \phi_n(\mathbf{x})$ tales que el mapeo

$$\phi(\mathbf{x}) = \left[h_1(\mathbf{x}), \dots, L_f^{(\kappa_1-1)} h_1(\mathbf{x}), \dots, h_m(\mathbf{x}), \dots, L_f^{(\kappa_m-1)} h_m(\mathbf{x}), \phi_{\kappa+1}(\mathbf{x}), \dots, \phi_n(\mathbf{x}) \right]$$

es globalmente invertible para \mathbf{x} .

iii) $\det \left[L_{g_i} L_f^{\kappa_i-1} \mathbf{h} \right]_{n \times m} \neq 0$

De acuerdo a las nociones de invertibilidad y linealización entrada - salida, se puede definir un sistema equivalente del sistema (4.1) por medio de la transformación no lineal:

nuevos estados: $\mathbf{z} = \phi(\mathbf{x}, t)$ (4.8a)

nuevas entradas: $\mathbf{v} = \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ (4.8b)

correspondiendo a

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_k \\ \vdots \\ z_{k+1} \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ L_f^{(k_1-1)} h_1(\mathbf{x}) \\ h_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ L_f^{(k_2-1)} h_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ h_m(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ L_f^{(k_m-1)} h_m(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \phi_{k+1}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \phi_n(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \tag{4.9a}$$

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_f^{k_1} h_1 + \sum_{i=1}^m L_g L_f^{k_1-1} h_{1i} u_i \\ \vdots \\ L_f^{k_m} h_m + \sum_{i=1}^m L_g L_f^{k_m-1} h_{mi} u_i \end{bmatrix} \tag{4.9b}$$

De tal manera que las derivadas de z_i satisfacen la siguiente dinámica lineal

$$\begin{aligned}
 \dot{z}_1 &= z_2 \\
 \dot{z}_2 &= z_3 \\
 &\vdots \\
 \dot{z}_{k_1-1} &= z_{k_1} \\
 \dot{z}_{k_1} &= v_1 & y_1 &= z_1 \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 \dot{z}_{k-k_m+1} &= z_{k-k_m+2} \\
 &\vdots \\
 \dot{z}_k &= v_m & y_m &= z_{k-k_m+1}
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

y para el caso de z_{II}

$$\dot{z}_{II} = \theta(z_I, z_{II}, \mu(x)) \quad (4.11)$$

denotando este subsistema como dinámica cero (o dinámica interna), la cual es susceptible de una interpretación física que se hará en la sección 4.4.3. Además será necesario que esta dinámica sea estable para tener solución el problema de control, como se verá más adelante.

En forma vectorial (4.10) - (4.11) se obtiene el sistema equivalente lineal en la forma normal

$$\dot{z}_I = \Gamma z_I + \Pi V \quad \dim z_I = \kappa \quad (4.12a)$$

$$\dot{z}_{II} = \theta(z_I, z_{II}, \mu(x)) \quad \dim z_{II} = n - \kappa \quad (4.12b)$$

$$y = \Delta z_I \quad \dim y = m \quad (4.12c)$$

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \Gamma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Gamma_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \Gamma_m \end{bmatrix}_{m \times m}, \quad \Gamma_i = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}_{\kappa_i \times \kappa_i}$$

$$\Pi = \begin{bmatrix} \Pi_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Pi_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \Pi_m \end{bmatrix}_{m \times m}, \quad \Pi_i = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}_{\kappa_i \times 1}$$

$$\Delta = \begin{bmatrix} \Delta_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Delta_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \Delta_m \end{bmatrix}_{m \times m}, \quad \Delta_i = [1 \ 0 \ \dots \ 0]_{1 \times \kappa_i}$$

donde el par (Γ, Π) es controlable y el par (Γ, Δ) es observable.

4.3 SOLUCIÓN AL PROBLEMA DE CONTROL CON RETROALIMENTACIÓN DE ESTADOS

Para este caso se considera que los estados y las perturbaciones son conocidos, lo cual implica que pueden medirse en línea; pero que en casos físicos no es posible acceder en tiempos reales.

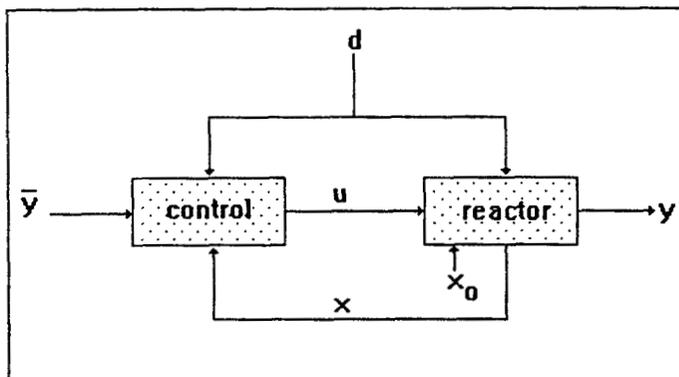


FIGURA 4.1 CONTROL CON RETROALIMENTACIÓN DE ESTADOS

Definición 3. Considerando un conjunto de estados iniciales $x_0 \in X_0$, un conjunto de perturbaciones conocidas $d(t) \in D$, y un conjunto de salidas de referencia $\bar{y} \in Y$. El problema de control con retroalimentación de estados tiene solución si existe una ley estática:

$$u = \mu(x, D_d d, D_y \bar{y}) \tag{4.13}$$

donde $D_d d, D_y \bar{y}$ son las perturbaciones y sus derivadas, y las salidas de referencia y sus derivadas. De tal suerte que el controlador:

$$\dot{x}(t) = f(x, d) + G(x, d) \mu(x, D_d d, D_y \bar{y}) \tag{4.14a}$$

$$y = h(x, d) \tag{4.14b}$$

hace que el sistema a lazo cerrado tenga el siguiente comportamiento:

a) Rechazo a perturbaciones:

$$x_0 = \bar{x}_0 \Rightarrow y(t) = \bar{y}(t) \quad , \quad x(t) = \bar{x}(t)$$

b) Dinámica del error de salida lineal, no interactivo y con κ polos asignables:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i^{(\kappa)} - k_{i,\kappa} \varepsilon_i^{(\kappa-1)} - \dots - k_{i,1} \varepsilon_i &= 0 \\ \varepsilon_i &= y_i(t) - \bar{y}_i(t) \quad , \quad \kappa = \kappa_1 + \dots + \kappa_m \end{aligned}$$

c) Estabilidad interna global y asintótica:

$$x_0 \neq \bar{x}_0 \Rightarrow x(t) \rightarrow \bar{x}(t) \quad , \quad y(t) \rightarrow \bar{y}(t)$$

siendo $\bar{x}(t)$ una trayectoria nominal de estados.

Teorema 2. Para la planta (4.1), el problema de control con retroalimentación de estados tiene solución si y solo si:

- i) La planta es linealizable entrada - salida.
- ii) La dinámica cero (interna) es semiglobalmente estable.

Como el sistema (4.12) se encuentra en la forma normal y es controlable, entonces existe un control lineal equivalente:

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{K}(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}}) \quad (4.15)$$

tal que el sistema (4.12) a lazo cerrado tiene la dinámica:

$$\dot{\mathbf{z}}_1 = (\Gamma + \Pi\mathbf{K})\mathbf{z}_1 + \Pi\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{K}\bar{\mathbf{z}}_1 \quad (4.16a)$$

$$\mathbf{y} = \Delta\mathbf{z}_1 \quad (4.16b)$$

donde $\bar{\mathbf{v}}$, $\bar{\mathbf{z}}$ son sus respectivos valores en la condición nominal (estado estacionario).

Se requiere que el sistema a lazo cerrado (4.16) tenga una dinámica del error de salida no interactiva y lineal. Definiendo el error de salida como:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{z}_1 - \bar{\mathbf{z}}_1 \quad (4.17)$$

o bien en coordenadas originales $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y}(t) - \bar{\mathbf{y}}(t)$, entonces el sistema adquiere la dinámica

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = (\Gamma + \Pi\mathbf{K})\boldsymbol{\varepsilon} \quad (4.18)$$

donde es necesario asignar κ polos de la matriz $(\Gamma + \Pi\mathbf{K})$ para que el sistema sea estable, y esto seleccionando correctamente la matriz de ganancias \mathbf{K} . De tal manera que $\boldsymbol{\varepsilon}(t) \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow \infty$, garantizando así la estabilidad del sistema equivalente y del sistema original: $\mathbf{z}(t) \rightarrow \bar{\mathbf{z}}(t)$, $\mathbf{y}(t) \rightarrow \bar{\mathbf{y}}(t)$

4.4 IMPLEMENTACIÓN AL REACTOR DE COPOLIMERIZACIÓN

4.4.1 Selección de la Configuración de Control

La parte más importante para la resolución al problema de control de la composición en el reactor de copolimerización depende en buena medida de la selección de la configuración de control, porque ésta interviene tanto en la existencia de solución como en la rapidez de respuesta a lazo cerrado.

Como se ha mencionado los objetivos de control son regular la composición de copolímero y la conversión de monómero total a polímero (condiciones de calidad del producto); así como la mantener el nivel de solvente, temperatura y volumen del reactor, esto para tener condiciones de operación más factibles en cuanto a manejo de flujos poco viscosos, evitar disparos térmicos y además mantener el nivel de producción total. Seleccionándose el punto de operación inestable (capítulo 3):

$$\bar{m}_1 = \bar{x}_1 = 0.008137$$

$$\text{conversión total} = 46.84 \%$$

$$\bar{m}_2 = \bar{x}_2 = 0.422947$$

$$\text{composición del monómero más reactivo (MMA)} = 28.91 \%$$

$$\bar{i} = \bar{x}_3 = 0.000997$$

$$\text{velocidad de producción total de polímero} = 183.4 \text{ Kg/h}$$

$$\bar{s} = \bar{x}_4 = 0.256432$$

$$\bar{p}_1 = \bar{x}_5 = 0.101477$$

$$\bar{p}_2 = \bar{x}_6 = 0.211007$$

$$\bar{T} = \bar{x}_7 = 352.65^\circ \text{K}$$

$$\bar{V} = \bar{x}_8 = 2.0 \text{ m}^3$$

Ya definidos los objetivos de control ahora es necesario seleccionar las configuraciones de control, esto es, escoger las salidas (y), las variables manipuladas (u) y las interconexiones entre estas que generen un buen desempeño de los controladores diseñados. Dependiendo la configuración de control en forma directa de los objetivos de control, de la naturaleza y de las restricciones del proceso.

En este aspecto se toma como punto de partida resultados sobre las configuraciones de control estudiadas por Padilla (tesis de doctorado), seleccionándose tres casos donde los grados relativos son igual a 1 (con el fin de no perder robustez) y además que estos casos no requieren el problema de la extensión dinámica. En dichos casos las variables que se manipularán (entradas) son los flujos de alimentación del monómero 1, del monómero 2, del solvente, la temperatura de la chaqueta de enfriamiento y la descarga del reactor; y las variables medidas (salidas de control) son:

CASO 1) Control de las concentraciones de monómeros remanentes (sin reaccionar) y solvente, así como el volumen y temperatura del reactor (m_1, m_2, s, T, V). Lo cual implica dejar libres las concentraciones de los monómeros convertidos (p_1, p_2), esto es, actuarán de acuerdo a su naturaleza dinámica y corresponde a la *dinámica interna*.

CASO 2) Control de las concentración de monómero remanente más reactivo, monómero convertido menos reactivo, solvente, volumen y temperatura del reactor (m_1, p_2, s, T, V); dejando como dinámica interna las concentraciones del monómero remanente menos reactivo y del monómero convertido más reactivo (m_2, p_1).

CASO 3) Control de las concentraciones de los monómeros convertidos y solvente, volumen y temperatura del reactor (p_1, p_2, s, T, V); dejando como dinámica interna las concnetracione de los monómeros remanentes (m_1, m_2).

y las perturbaciones (d) al sistema son las concentraciones y temperaturas de entrada de cada monómero y del solvente, que pueden variar con el tiempo; así como las concentraciones de los monómeros convertidos en polímero en la alimentación.

De estos tres casos se establecerá cual es la mejor estructura para este proceso; estando esto sujeto al estudio de: la existencia de solución al problema de control y de la dinámica interna (así como de su entendimiento físico). Para el caso 3 se demostrará más adelante que no existe solución al problema de control, y considerando que las concentraciones que nos interesan son los de los monómeros convertidos y no los remanentes entonces se tiene como conjetura que el caso 2 funcionará mejor; esto porque en el caso 1 la respuesta estará restringida por la naturaleza dinámica del monómero convertido más lento en polimerizarse y en el caso 2 sólo esta restringida por el monómero convertido con dinámica más rápida.

Para el reactor de copolimerización se tiene que el sistema de ecuaciones diferenciales (2.21) puede ser presentado de la siguiente notación estándar de control:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) + \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{d})\mathbf{u} \quad (4.19a)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) \quad (4.19b)$$

$$\mathbf{x} \in \mathbf{X} \subset \mathbf{R}^8, \quad \mathbf{d} \in \mathbf{D} \subset \mathbf{R}^7, \quad \mathbf{u} \in \mathbf{U} \subset \mathbf{R}^5, \quad \mathbf{y} \in \mathbf{Y} \subset \mathbf{R}^5$$

donde cada vector corresponde a

$$\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ x_3 \ x_4 \ x_5 \ x_6 \ x_7 \ x_8]^T = [m_1 \ m_2 \ i \ s \ p_1 \ p_2 \ T \ V]^T$$

$$\mathbf{d} = [d_1 \ d_2 \ d_3 \ d_4 \ d_5 \ d_6 \ d_7]^T = [m_{1e} \ m_{2e} \ W_{1e} \ s_e \ T_{1e} \ T_{2e} \ T_{se}]^T$$

$$\mathbf{G} = [g_1 \ g_2 \ g_3 \ g_4 \ g_5]^T$$

$$\mathbf{u} = [u_1 \ u_2 \ u_3 \ u_4 \ u_5]^T = [q_1 \ q_2 \ q_s \ T_c \ q]^T$$

$$\mathbf{y} = [y_1 \ y_2 \ y_3 \ y_4 \ y_5]^T = [h_1 \ h_2 \ h_3 \ h_4 \ h_5]^T$$

siendo \mathbf{x} los estados del sistema, \mathbf{u} las entradas de control, \mathbf{y} las salidas o variables de control; $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d})$, $\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{d})$ y $\mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{d})$ son campos vectoriales suaves en $\mathbf{X} \times \mathbf{D}$.

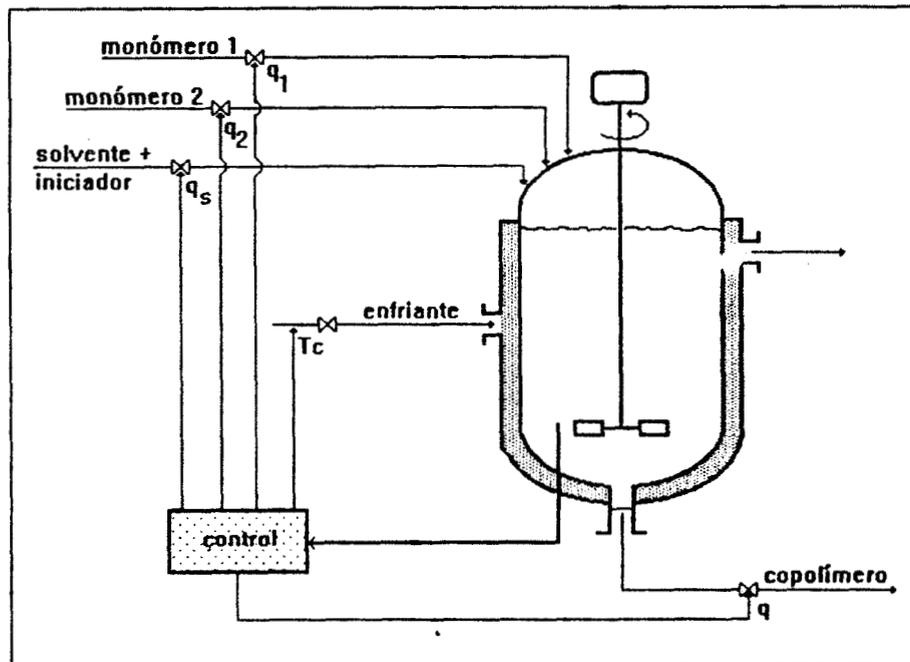


FIGURA 4.2 REACTOR CONTINUO DE POLIMERIZACIÓN EN SOLUCIÓN A LAZO CERRADO

4.4.2 Linealización del Sistema

Siguiendo el algoritmo de Hirschorn para encontrar la inversa dinámica (sección 4.2.1), se deriva el mapa de salidas (y) con respecto al tiempo hasta que pueda resolverse el sistema para las entradas (u):

$$\begin{bmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \\ \dot{y}_3 \\ \dot{y}_4 \\ \dot{y}_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_f h_1 \\ L_f h_2 \\ L_f h_3 \\ L_f h_4 \\ L_f h_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} L_{g_1} h_1 & L_{g_2} h_1 & L_{g_3} h_1 & L_{g_4} h_1 & L_{g_5} h_1 \\ L_{g_1} h_2 & L_{g_2} h_2 & L_{g_3} h_2 & L_{g_4} h_2 & L_{g_5} h_2 \\ L_{g_1} h_3 & L_{g_2} h_3 & L_{g_3} h_3 & L_{g_4} h_3 & L_{g_5} h_3 \\ L_{g_1} h_4 & L_{g_2} h_4 & L_{g_3} h_4 & L_{g_4} h_4 & L_{g_5} h_4 \\ L_{g_1} h_5 & L_{g_2} h_5 & L_{g_3} h_5 & L_{g_4} h_5 & L_{g_5} h_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

Desarrollando las derivadas de las salidas (4.20) para cada caso se obtiene:

CASO 1: Control de los monómeros remanentes, solvente, volumen y temperatura.

$$\text{salidas: } \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 = m_1 \\ x_2 = m_2 \\ x_4 = s \\ x_7 = T \\ x_8 = V \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

$$\begin{bmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \\ \dot{y}_3 \\ \dot{y}_4 \\ \dot{y}_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_4 \\ f_7 \\ f_8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} g_{11} & g_{21} & g_{31} & 0 & 0 \\ g_{12} & g_{22} & g_{32} & 0 & 0 \\ g_{14} & g_{24} & g_{34} & 0 & 0 \\ g_{17} & g_{27} & g_{37} & g_{47} & 0 \\ g_{18} & g_{28} & g_{38} & 0 & g_{58} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} \quad \kappa_1 = \kappa_2 = \kappa_3 = \kappa_4 = \kappa_5 = 1 \quad (4.22)$$

CASO 2: Control del monómero remanente más reactivo, monómero convertido menos reactivo, solvente, volumen y temperatura.

$$\text{salidas: } \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 = m_1 \\ x_6 = p_2 \\ x_4 = s \\ x_7 = T \\ x_8 = V \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

$$\begin{bmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \\ \dot{y}_3 \\ \dot{y}_4 \\ \dot{y}_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_6 \\ f_4 \\ f_7 \\ f_8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} g_{11} & g_{21} & g_{31} & 0 & 0 \\ g_{16} & g_{26} & g_{36} & 0 & 0 \\ g_{14} & g_{24} & g_{34} & 0 & 0 \\ g_{17} & g_{27} & g_{37} & g_{47} & 0 \\ g_{18} & g_{28} & g_{38} & 0 & g_{58} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} \quad \kappa_1 = \kappa_2 = \kappa_3 = \kappa_4 = \kappa_5 = 1 \quad (4.24)$$

CASO 3: Control de los monómeros convertidos, solvente, volumen y temperatura.

$$\text{salidas: } \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_5 = p_1 \\ x_6 = p_2 \\ x_4 = s \\ x_7 = T \\ x_8 = V \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

$$\begin{bmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \\ \dot{y}_3 \\ \dot{y}_4 \\ \dot{y}_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_5 \\ f_6 \\ f_4 \\ f_7 \\ f_8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} g_{15} & g_{25} & g_{35} & 0 & 0 \\ g_{16} & g_{26} & g_{36} & 0 & 0 \\ g_{14} & g_{24} & g_{34} & 0 & 0 \\ g_{17} & g_{27} & g_{37} & g_{47} & 0 \\ g_{18} & g_{28} & g_{38} & 0 & g_{58} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} \quad \kappa_1 = \kappa_2 = \kappa_3 = \kappa_4 = \kappa_5 = 1 \quad (4.26)$$

Las ecuaciones (4.22), (4.24) y (4.26) pueden expresarse en forma vectorial

$$\mathbf{V} = \mathbf{b}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) + \mathbf{A}(\mathbf{x}, \mathbf{d})\mathbf{u} \quad (4.27)$$

donde \mathbf{V} corresponde al vector de derivadas de las salidas, \mathbf{b} es el vector que contiene toda la parte cinética del reactor, y \mathbf{A} es la matriz de desacoplamiento en la cual contiene las interacciones entre los lazos de control.

De acuerdo a (4.27) para que exista solución en \mathbf{u} debe cumplirse que la matriz de desacoplamiento (\mathbf{A}) no sea singular, esto es: $|\mathbf{A}| \neq 0$. Para determinar la factibilidad de invertir el sistema en cada caso, se desarrollan a continuación los determinantes.

CASO 1

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{21} & g_{31} & 0 & 0 \\ g_{12} & g_{22} & g_{32} & 0 & 0 \\ g_{14} & g_{24} & g_{34} & 0 & 0 \\ g_{17} & g_{27} & g_{37} & g_{47} & 0 \\ g_{18} & g_{28} & g_{38} & 0 & g_{58} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_4 \\ f_7 \\ f_8 \end{bmatrix} \quad (4.28a)$$

$$|\mathbf{A}| = g_{47} g_{58} (g_{11} g_{22} g_{34} + g_{17} g_{24} g_{31} + g_{14} g_{21} g_{32} - g_{14} g_{22} g_{31} - g_{12} g_{21} g_{34} - g_{11} g_{24} g_{32}) \quad (4.28b)$$

En variables originales:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \begin{bmatrix} \frac{m_{1e} - m_1 \phi_3}{V} & \frac{-m_1 \phi_4}{V} & \frac{-m_1 \phi_5}{V} & 0 & 0 \\ \frac{-m_2 \phi_3}{V} & \frac{m_{2e} - m_2 \phi_4}{V} & \frac{-m_2 \phi_5}{V} & 0 & 0 \\ \frac{-s_2 \phi_3}{V} & \frac{-s \phi_4}{V} & \frac{-s \phi_5}{V} & 0 & 0 \\ \left(\frac{C_{p1}}{C_p} T_{1e} - T \right) \frac{\rho_1}{\rho V} & \left(\frac{C_{p2}}{C_p} T_{2e} - T \right) \frac{\rho_2}{\rho V} & \left(\frac{C_{ps}}{C_p} T_{se} - T \right) \frac{\rho_s}{\rho V} & \gamma & 0 \\ \phi_3 & \phi_4 & \phi_5 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$|\mathbf{A}| = \frac{\gamma}{V^3} [m_{1e} (m_2 s_e \phi_4 + m_{2e} s \phi_5) - m_{2e} s_e (m_{1e} - m_1 \phi_3)]$$

y para el caso de estudio $m_{1e} = m_{2e} = s_e = 1.0$, por lo tanto: $|\mathbf{A}| = \frac{\gamma}{V^3} [m_1 \phi_3 + m_2 \phi_4 + s \phi_5 - 1] \neq 0$.

Analizando en términos físicos se tiene que el determinante siempre será diferente de cero, debido a que el volumen y γ son siempre positivos, $0 < \phi_3, \phi_4, \phi_5 \leq 1$ (por ser iguales a la unidad en el caso de densidad constante); y si m_1, m_2, s llegarán a ser cero simultáneamente (lo cual ocurriría difícilmente) entonces $|\mathbf{A}| = \gamma/V^3$ y aún así se cumple que la matriz de desacoplamiento \mathbf{a} no es singular. Por tanto para este caso siempre hay invertibilidad.

CASO 2

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{21} & g_{31} & 0 & 0 \\ g_{16} & g_{26} & g_{36} & 0 & 0 \\ g_{14} & g_{24} & g_{34} & 0 & 0 \\ g_{17} & g_{27} & g_{37} & g_{47} & 0 \\ g_{18} & g_{28} & g_{38} & 0 & g_{58} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_6 \\ f_4 \\ f_7 \\ f_8 \end{bmatrix} \quad (4.29a)$$

$$|A| = g_{47}g_{58} (g_{11}g_{26}g_{34} + g_{17}g_{24}g_{31} + g_{14}g_{21}g_{36} - g_{14}g_{26}g_{31} - g_{16}g_{21}g_{34} - g_{11}g_{24}g_{36}) \tag{4.29b}$$

En variables originales:

$$A(x, d) = \begin{bmatrix} \frac{m_{1e} - m_1\phi_3}{V} & \frac{-m_1\phi_4}{V} & \frac{-m_1\phi_5}{V} & 0 & 0 \\ \frac{-p_2\phi_3}{V} & \frac{p_{2e} - p_2\phi_4}{V} & \frac{-p_2\phi_5}{V} & 0 & 0 \\ \frac{-s_2\phi_3}{V} & \frac{-s_2\phi_4}{V} & \frac{-s_2\phi_5}{V} & 0 & 0 \\ \left(\frac{C_{P1}}{C_P} T_{1e} - T\right) \frac{\rho_1}{\rho V} & \left(\frac{C_{P2}}{C_P} T_{2e} - T\right) \frac{\rho_2}{\rho V} & \left(\frac{C_{Ps}}{C_P} T_{se} - T\right) \frac{\rho_s}{\rho V} & \gamma & 0 \\ \phi_3 & \phi_4 & \phi_5 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$|A| = \frac{\gamma}{V^3} [m_{1e}(p_2s_2\phi_4 + p_{2e}s_2\phi_5) - p_{2e}s_2(m_{1e} - m_1\phi_3)]$$

y para el caso de estudio $m_{1e} = s_2 = 1.0$ y $p_{2e} = 0.0$:

$$|A| = \frac{\gamma}{V^3} (p_2\phi_4) \neq 0$$

Donde físicamente puede verse que el desempeño del controlador para este caso dependerá de la concentración de p_2 ya que el volumen y γ son positivos, y $0 < \phi_4 \leq 1$. En la situación extrema $p_2 = 0$ se tendrá entonces que A es singular y no habrá solución al problema de control. En conclusión a concentraciones pequeñas de p_2 ($|A| \rightarrow 0$) se podrá tener problemas de control.

CASO 3

$$A(x, d) = \begin{bmatrix} g_{15} & g_{25} & g_{35} & 0 & 0 \\ g_{16} & g_{26} & g_{36} & 0 & 0 \\ g_{14} & g_{24} & g_{34} & 0 & 0 \\ g_{17} & g_{27} & g_{37} & g_{47} & 0 \\ g_{18} & g_{28} & g_{38} & 0 & g_{58} \end{bmatrix}, \quad b(x, d) = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_5 \\ f_6 \\ f_4 \\ f_7 \\ f_8 \end{bmatrix} \tag{4.30a}$$

$$|A| = g_{47}g_{58} (g_{15}g_{26}g_{34} + g_{17}g_{24}g_{36} + g_{14}g_{25}g_{36} - g_{14}g_{26}g_{35} - g_{16}g_{25}g_{34} - g_{15}g_{24}g_{36}) \tag{4.30b}$$

En variables originales:

$$A(x, d) = \begin{bmatrix} \frac{m_{1e} - m_1 \phi_3}{V} & \frac{-m_1 \phi_4}{V} & \frac{-m_1 \phi_5}{V} & 0 & 0 \\ \frac{-m_2 \phi_3}{V} & \frac{m_{2e} - m_2 \phi_4}{V} & \frac{-m_2 \phi_5}{V} & 0 & 0 \\ \frac{-s_2 \phi_3}{V} & \frac{-s \phi_4}{V} & \frac{-s \phi_5}{V} & 0 & 0 \\ \left(\frac{C_{P1}}{C_P} T_{1e} - T \right) \frac{\rho_1}{\rho V} & \left(\frac{C_{P2}}{C_P} T_{2e} - T \right) \frac{\rho_2}{\rho V} & \left(\frac{C_{Ps}}{C_P} T_{se} - T \right) \frac{\rho_s}{\rho V} & \gamma & 0 \\ \phi_3 & \phi_4 & \phi_5 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$|A| = \frac{\gamma}{V^3} [p_{1e} (p_2 s_e \phi_4 + p_{2e} s \phi_5) - p_{2e} s_e (p_{1e} - p_1 \phi_3)]$$

y para el caso de estudio $p_{1e} = p_{2e} = 0.0$: $|A| = 0$; por lo tanto no existe solución al problema de control para esta estructura. Siendo esta conclusión grave, ya que esta configuración de control aparentemente muestra ser la mejor por ser en la que se controlan directamente las concentraciones de interés; y además al no haber solución al problema de control origina tener que seleccionar otras configuraciones alternativas.

Entonces es posible resolver las entradas de control invirtiendo (4.27), únicamente para los casos 1 y 2:

$$u = A^{-1}(x, d)[V - b(x, d)] \quad (4.31)$$

$$A^{-1}(x, d) = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & 0 \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & 0 & a_{55} \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{y}_1 \\ \dot{y}_2 \\ \dot{y}_3 \\ \dot{y}_4 \\ \dot{y}_5 \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

CASO 1

$$\begin{aligned} a_{11} &= (g_{34} g_{22} - g_{24} g_{32}) / \alpha & a_{41} &= [g_{17} (g_{24} g_{32} - g_{22} g_{34}) + g_{27} (g_{12} g_{34} - g_{14} g_{32}) + g_{37} (g_{14} g_{22} - g_{12} g_{24})] / \alpha \\ a_{12} &= -(g_{21} g_{34} - g_{24} g_{31}) / \alpha & a_{42} &= -[g_{17} (g_{24} g_{31} - g_{21} g_{34}) + g_{27} (g_{11} g_{34} - g_{14} g_{31}) + g_{37} (g_{14} g_{21} - g_{11} g_{24})] / \alpha \\ a_{31} &= (g_{21} g_{32} - g_{22} g_{31}) / \alpha & a_{43} &= [g_{17} (g_{22} g_{31} - g_{21} g_{32}) + g_{27} (g_{11} g_{32} - g_{12} g_{31}) + g_{37} (g_{12} g_{21} - g_{11} g_{22})] / \alpha \\ a_{21} &= -(g_{12} g_{34} - g_{14} g_{32}) / \alpha & a_{44} &= 1/g_{47} \\ a_{22} &= (g_{11} g_{34} - g_{14} g_{31}) / \alpha & a_{51} &= [g_{18} (g_{24} g_{32} - g_{22} g_{34}) + g_{28} (g_{12} g_{34} - g_{14} g_{32}) + g_{38} (g_{14} g_{22} - g_{12} g_{24})] / \alpha \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_{23} &= -(g_{11}g_{32} - g_{12}g_{31})/\alpha & a_{52} &= -[g_{18}(g_{24}g_{31} - g_{21}g_{34}) + g_{28}(g_{11}g_{34} - g_{14}g_{31}) + g_{38}(g_{14}g_{22} - g_{12}g_{24})]/\alpha \\
a_{31} &= (g_{12}g_{24} - g_{14}g_{22})/\alpha & a_{53} &= [g_{18}(g_{22}g_{31} - g_{21}g_{32}) + g_{28}(g_{11}g_{32} - g_{12}g_{31}) + g_{38}(g_{12}g_{21} - g_{11}g_{22})]/\alpha \\
a_{32} &= -(g_{11}g_{24} - g_{14}g_{21})/\alpha & a_{55} &= 1/g_{58} \\
a_{33} &= (g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21})/\alpha
\end{aligned}$$

donde: $\alpha = g_{11}g_{22}g_{34} + g_{12}g_{24}g_{31} + g_{14}g_{21}g_{32} - g_{14}g_{22}g_{31} - g_{12}g_{21}g_{34} - g_{11}g_{24}g_{32}$

CASO 2

$$\begin{aligned}
a_{11} &= (g_{34}g_{26} - g_{24}g_{36})/\alpha & a_{41} &= [g_{17}(g_{24}g_{36} - g_{26}g_{34}) + g_{27}(g_{16}g_{34} - g_{14}g_{36}) + g_{37}(g_{14}g_{26} - g_{16}g_{24})]/\alpha \\
a_{12} &= -(g_{21}g_{34} - g_{24}g_{31})/\alpha & a_{42} &= -[g_{17}(g_{24}g_{31} - g_{21}g_{34}) + g_{27}(g_{11}g_{34} - g_{14}g_{31}) + g_{37}(g_{14}g_{21} - g_{11}g_{24})]/\alpha \\
a_{31} &= (g_{21}g_{36} - g_{26}g_{31})/\alpha & a_{43} &= [g_{17}(g_{26}g_{31} - g_{21}g_{36}) + g_{27}(g_{11}g_{36} - g_{16}g_{31}) + g_{37}(g_{16}g_{21} - g_{11}g_{26})]/\alpha \\
a_{21} &= -(g_{16}g_{34} - g_{14}g_{36})/\alpha & a_{44} &= 1/g_{47} \\
a_{22} &= (g_{11}g_{34} - g_{14}g_{31})/\alpha & a_{51} &= [g_{18}(g_{24}g_{36} - g_{26}g_{34}) + g_{28}(g_{16}g_{34} - g_{14}g_{36}) + g_{38}(g_{14}g_{26} - g_{16}g_{24})]/\alpha \\
a_{23} &= -(g_{11}g_{36} - g_{16}g_{31})/\alpha & a_{52} &= -[g_{18}(g_{24}g_{31} - g_{21}g_{34}) + g_{28}(g_{11}g_{34} - g_{14}g_{31}) + g_{38}(g_{14}g_{22} - g_{12}g_{24})]/\alpha \\
a_{31} &= (g_{16}g_{24} - g_{14}g_{26})/\alpha & a_{53} &= [g_{18}(g_{26}g_{31} - g_{21}g_{36}) + g_{28}(g_{11}g_{36} - g_{16}g_{31}) + g_{38}(g_{16}g_{21} - g_{11}g_{26})]/\alpha \\
a_{32} &= -(g_{11}g_{24} - g_{14}g_{21})/\alpha & a_{55} &= 1/g_{58} \\
a_{33} &= (g_{11}g_{26} - g_{16}g_{21})/\alpha
\end{aligned}$$

donde: $\alpha = g_{11}g_{22}g_{34} + g_{12}g_{24}g_{31} + g_{14}g_{21}g_{32} - g_{14}g_{22}g_{31} - g_{12}g_{21}g_{34} - g_{11}g_{24}g_{32}$

Seguindo la metodología expuesta en la sección 4.2.2, la relación (4.26) sugiere la siguiente transformación no lineal $\mathbf{z} = \Phi(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{v} = \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$:

$$\begin{aligned}
\phi_1(\mathbf{x}, t) &= y_1 = h_1 \\
\phi_2(\mathbf{x}, t) &= y_2 = h_2 \\
\phi_3(\mathbf{x}, t) &= y_3 = x_4 & \Phi_1 & \quad (\dim = \kappa=5) \\
\phi_4(\mathbf{x}, t) &= y_4 = x_7 \\
\phi_5(\mathbf{x}, t) &= y_5 = x_8
\end{aligned} \tag{4.33}$$

como el sistema equivalente debe ser de dimensión $n = 8$, entonces existen $n - \kappa = 3$ funciones adicionales (Φ_{II}) tal que el mapeo de Φ sea globalmente invertible para \mathbf{x} . Entonces

$$\Phi = \begin{bmatrix} \Phi_I \\ \text{---} \\ \Phi_{II} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_5 \\ \text{---} \\ \phi_6 \\ \phi_7 \\ \phi_8 \end{bmatrix} \quad \dim \Phi = n \quad (4.34)$$

siendo el espacio de estados transformados:

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} \mathbf{z}_I \\ \text{---} \\ \mathbf{z}_{II} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_1 = y_1 \\ z_2 = y_2 \\ z_3 = y_3 \\ z_4 = y_4 \\ z_5 = y_5 \\ \text{---} \\ \phi_6 \\ \phi_7 \\ \phi_8 \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

cuya dinámica representada en la forma normal simplificada está dada por:

$$\begin{array}{ll} \dot{z}_I & \begin{array}{ll} \dot{z}_1 = v_1 & y_1 = z_1 \\ \dot{z}_2 = v_2 & y_2 = z_2 \\ \dot{z}_3 = v_3 & y_3 = z_3 \\ \dot{z}_4 = v_4 & y_4 = z_4 \\ \dot{z}_5 = v_5 & y_5 = z_5 \end{array} \\ \text{---} & \\ \dot{z}_{II} & \begin{array}{l} \dot{z}_6 = \theta_1(z_I, z_{II}, t, u) \\ \dot{z}_7 = \theta_2(z_I, z_{II}, t, u) \\ \dot{z}_8 = \theta_3(z_I, z_{II}, t, u) \end{array} \end{array} \quad (4.36)$$

donde \dot{z}_{II} corresponde a la dinámica interna asociada a la configuración de control seleccionada. Y es necesario que esta dinámica sea estable para que tenga solución el problema de control (condición (ii) del teorema 2), por lo que en la siguiente sección se estudia su estabilidad local alrededor de la condición nominal de operación.

La dinámica del sistema equivalente lineal (4.36) puede expresarse en forma vectorial

$$\dot{z}_I = \Gamma z_I + \Pi v \quad (4.37a)$$

$$\dot{z}_{II} = \theta(z_I, z_{II}, t, u) \quad (4.37b)$$

$$y = \Delta z_I \quad (4.37c)$$

donde $z \in Z \subset \mathbb{R}^8$, $v \in V \subset \mathbb{R}^5$, $y \in Y \subset \mathbb{R}^5$ para todo $t \geq 0$.

$$\Gamma = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}_{5 \times 5}, \quad \Pi = \Delta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

4.4.3 Análisis de la Dinámica Interna

La elección de la dinámica interna debe ser tal que satisfaga la condición (ii) del teorema 1, esto es, la transformación $z = \Phi(x, t)$ debe ser invertible para x . Además que para ser admisible la estructura de control debe ser la dinámica interna asintóticamente estable, condición (ii) del teorema 2.

Como la dinámica interna corresponde a la parte no controlable del sistema entonces no es posible acelerarla como se hace con la parte controlable, por ello debe pedirse que sea lo más rápida posible y sólo se logra con una buena selección de la configuración de control. Esto es, si se controlan aquellas variables tales que contengan parte de la "dinámica rápida" del sistema entonces dentro de la dinámica interna estará la parte lenta, lo cual implica que el tiempo de respuesta del sistema a lazo cerrado estará dominada por la parte lenta y el controlador construido no dará un buen desempeño. Por el contrario, si se controlan las variables que tengan la dinámica más lenta (que por tanto podrá acelerarse) de tal suerte que la dinámica interna contenga la parte más rápida entonces favorecerá al proceso logrando un tiempo de asentamiento más rápido.

Para el reactor de copolimerización se seleccionaron las siguientes coordenadas \mathbf{z}_{II} y dinámicas internas:

CASO 1

En este caso se han fijado como salidas las concentraciones de monómeros remanentes, solvente, volumen y temperatura $(\bar{m}_1, \bar{m}_2, \bar{s}, \bar{T}, \bar{V})$; de tal forma que la dinámica interna puede elegirse como iniciador y concentraciones de monómeros convertidos (i, p_1, p_2) , o bien iniciador y concentraciones de monómeros totales (i, e_1, e_2) . Siendo en este caso las concentraciones de monómeros totales definidas como $e_1 = \bar{m}_1 + p_1 / (1 - \varepsilon_1)$ y $e_2 = \bar{m}_2 + p_2 / (1 - \varepsilon_2)$, que en variables originales corresponden a $M_1 + P_1$ y $M_2 + P_2$, respectivamente. Al elegirse alguna de éstas como dinámica interna puede verse que contendrá tanto el monómero convertido más rápido en polimerizarse como el más lento, por lo tanto la dinámica del sistema estará dominada por el más lento (p_2).

$$\mathbf{z}_{II} = \begin{bmatrix} x_3 = i \\ \bar{x}_1 + x_5 / (1 - \varepsilon_1) = e_1 \\ \bar{x}_2 + x_6 / (1 - \varepsilon_2) = e_2 \end{bmatrix} \quad (4.38a)$$

$$\dot{\mathbf{z}}_{II} = \begin{bmatrix} \dot{x}_3 \\ \dot{x}_1 + \frac{\dot{x}_5}{1-\varepsilon_1} \\ \dot{x}_2 + \frac{\dot{x}_6}{1-\varepsilon_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_3 + g_{13}u_1 + g_{23}u_2 + g_{33}u_3 \\ \left(f_1 + \frac{f_5}{1-\varepsilon_1}\right) + \left(g_{11} + \frac{g_{15}}{1-\varepsilon_1}\right)u_1 + \left(g_{21} + \frac{g_{25}}{1-\varepsilon_1}\right)u_2 + \left(g_{31} + \frac{g_{35}}{1-\varepsilon_1}\right)u_3 \\ \left(f_2 + \frac{f_6}{1-\varepsilon_2}\right) + \left(g_{12} + \frac{g_{16}}{1-\varepsilon_2}\right)u_1 + \left(g_{22} + \frac{g_{26}}{1-\varepsilon_2}\right)u_2 + \left(g_{32} + \frac{g_{36}}{1-\varepsilon_2}\right)u_3 \end{bmatrix} \quad (4.38b)$$

CASO 2

Como se han fijado las concentraciones del monómero remanente más rápido, del monómero convertido más lento y del solvente, temperatura y volumen ($\bar{m}_1, \bar{p}_2, \bar{s}, \bar{T}, \bar{V}$) entonces las alternativas para la dinámica interna son las concentraciones de: iniciador, monómero remanente 2, monómero convertido 1 (i, m_2, p_1) o iniciador, monómeros totales 1 y 2 ($i, e_1 = \bar{m}_1 + p_1 / (1 - \varepsilon_1), e_2 = m_2 + \bar{p}_2 / (1 - \varepsilon_2)$). Para este caso la dinámica interna solo está restringida por la dinámica del polímero más rápido (p_1) debido a que la concentración del monómero remanente no interesa en el producto final.

$$\mathbf{z}_{II} = \begin{bmatrix} x_3 = i \\ \bar{x}_1 + x_5 / (1 - \varepsilon_1) = e_1 \\ x_2 + \bar{x}_6 / (1 - \varepsilon_2) = e_2 \end{bmatrix} \quad (4.39a)$$

$$\dot{\mathbf{z}}_{II} = \begin{bmatrix} \dot{x}_3 \\ \dot{x}_1 + \frac{\dot{x}_5}{1-\varepsilon_1} \\ \dot{x}_2 + \frac{\dot{x}_6}{1-\varepsilon_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_3 + g_{13}u_1 + g_{23}u_2 + g_{33}u_3 \\ \left(f_1 + \frac{f_5}{1-\varepsilon_1}\right) + \left(g_{11} + \frac{g_{15}}{1-\varepsilon_1}\right)u_1 + \left(g_{21} + \frac{g_{25}}{1-\varepsilon_1}\right)u_2 + \left(g_{31} + \frac{g_{35}}{1-\varepsilon_1}\right)u_3 \\ \left(f_2 + \frac{f_6}{1-\varepsilon_2}\right) + \left(g_{12} + \frac{g_{16}}{1-\varepsilon_2}\right)u_1 + \left(g_{22} + \frac{g_{26}}{1-\varepsilon_2}\right)u_2 + \left(g_{32} + \frac{g_{36}}{1-\varepsilon_2}\right)u_3 \end{bmatrix} \quad (4.39b)$$

Estos subsistemas deben ser estables según el teorema 2, lo cual implica que debe existir un solo punto de equilibrio y que sea atractor. A continuación se demuestra analíticamente la estabilidad de ambos casos.

Desarrollando las ecuaciones (4.38b) y (4.39b) en variables originales se tiene:

$$\dot{i} = -\left(r_{p1}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, i, \bar{T})\phi_1(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s}) + r_{p2}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, i, \bar{T})\phi_2(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s})\right) - r_1(i, \bar{T}) + \frac{W_{le}}{I^o V} - \left(\frac{q_1}{V}\phi_3(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s}) + \frac{q_2}{V}\phi_4(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s}) + \frac{q_s}{V}\phi_5(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s})\right)i \quad (4.40a)$$

$$\dot{\mathbf{e}}_1 = -\left(r_{p1}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, i, \bar{T})\phi_1(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s}) + r_{p2}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, i, \bar{T})\phi_2(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s})\right)\mathbf{e}_1 + \frac{q_1}{V}(\mathbf{e}_{1e} - \mathbf{e}_1\phi_3(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s})) - \left(\frac{q_2}{V}\phi_4(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s}) + \frac{q_s}{V}\phi_5(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s})\right)\mathbf{e}_1 \quad (4.40b)$$

$$\dot{\mathbf{e}}_2 = -\left(r_{p1}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, i, \bar{T})\phi_1(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s}) + r_{p2}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, i, \bar{T})\phi_2(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s})\right)\mathbf{e}_2 + \frac{q_2}{V}(\mathbf{e}_{2e} - \mathbf{e}_2\phi_4(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s})) - \left(\frac{q_1}{V}\phi_3(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s}) + \frac{q_s}{V}\phi_5(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \bar{s})\right)\mathbf{e}_1 \quad (4.40c)$$

De acuerdo a la ecuación (2.20h) : $\dot{V} = (r_{p1}\phi_1 + r_{p2}\phi_2)V + q_1\phi_3 + q_2\phi_4 + q_s\phi_5 - \zeta$, y sustituyendo ésta en (4.40):

$$\dot{i} = -k_d(\bar{T}) + \frac{W_{le}}{I^o V} - \left(\frac{q}{V} + \frac{\dot{V}}{V}\right)i$$

$$\dot{\mathbf{e}}_1 = \frac{q_1}{V}\mathbf{e}_{1e} - \left(\frac{q}{V} + \frac{\dot{V}}{V}\right)\mathbf{e}_1$$

$$\dot{\mathbf{e}}_2 = \frac{q_2}{V}\mathbf{e}_{2e} - \left(\frac{q}{V} + \frac{\dot{V}}{V}\right)\mathbf{e}_2$$

o bien

$$(\dot{i}V) = -k_d(\bar{T}) + \frac{W_{le}}{I^o} - qi \quad (4.41a)$$

$$(\mathbf{e}_1 \dot{V}) = q_1 \mathbf{e}_{1e} - q\mathbf{e}_1 \quad (4.41b)$$

$$(\mathbf{e}_2 \dot{V}) = q_2 \mathbf{e}_{2e} - q\mathbf{e}_2 \quad (4.41c)$$

donde las tres ecuaciones (4.41) son lineales y por tanto su dinámica es exponencialmente estable, con lo cual se demuestra que la dinámica interna es asintóticamente estable; observándose además que la dinámica de las concentraciones totales de monómeros actúa como un tanque de mezclado ya que no aparecen los términos cinéticos (ec. 4.41b-4.41c).

Para corroborar que existe un solo punto de equilibrio, a continuación se hace un análisis numérico utilizando nuevamente diagramas de bifurcación para el sistema en estado estacionario. Tomando como el parámetro de bifurcación (ω) para el primer caso como las concentraciones de monómeros remanentes y para el segundo caso la concentración de monómero 1 remanente y monómero 2 convertido:

$$\text{CASO 1} \quad \begin{aligned} m_1(\omega) &= \bar{m}_1\omega \\ m_2(\omega) &= \bar{m}_2\omega \end{aligned}$$

$$\text{CASO 2} \quad \begin{aligned} m_1(\omega) &= \bar{m}_1\omega \\ p_2(\omega) &= \bar{p}_2\omega \end{aligned}$$

Para realizar el diagrama de bifurcación se considera el sistema en estado estacionario $\dot{\mathbf{z}}_I = 0$, $\dot{\mathbf{z}}_{II} = 0$. Por lo tanto el mapa de bifurcación corresponderá al subsistema (en coordenadas originales):

CASO 1

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_7, \bar{x}_8, \bar{d})\boldsymbol{\mu} + \mathbf{b}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_7, \bar{x}_8, \bar{d}) &= 0 \\ f_3(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_7, \bar{d}_3) + g_{13}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8)\mu_1 + g_{23}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8)\mu_2 + \\ &g_{33}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8)\mu_3 = 0 \\ f_5(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_7) + g_{15}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8)\mu_1 + g_{25}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8)\mu_2 + \\ &g_{35}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8)\mu_3 = 0 \\ f_6(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_7) + g_{16}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8)\mu_1 + g_{26}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8)\mu_2 + \\ &g_{36}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8)\mu_3 = 0 \end{aligned} \quad (4.42)$$

CASO 2

$$\mathbf{A}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_7, \bar{x}_8, \bar{d})\boldsymbol{\mu} + \mathbf{b}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_7, \bar{x}_8, \bar{d}) = 0$$

$$\begin{aligned}
 f_3(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_7, \bar{d}_3) + g_{13}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8) \mu_1 + g_{23}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8) \mu_2 + \\
 g_{33}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8) \mu_3 = 0 \\
 f_2(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_7) + g_{12}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8) \mu_1 + g_{22}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8, \bar{d}_2) \mu_2 + \\
 g_{32}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8) \mu_3 = 0 \\
 f_5(\bar{x}_1, \bar{x}_2, x_3, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_7) + g_{15}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8) \mu_1 + g_{25}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8) \mu_2 + \\
 g_{35}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_4, x_5, x_6, \bar{x}_8) \mu_3 = 0
 \end{aligned}
 \tag{4.43}$$

En las figuras 4.3 Y 4.4 se muestran los mapas de bifurcación correspondientes, en donde las trayectorias crecen o decrecen monótonamente, no hallándose puntos de bifurcación. Con lo cual se demuestra que existe un sólo punto crítico. Con esto se concluye que las dinámicas internas de los casos estudiados son semiglobalmente asintóticamente estables, y por lo tanto si es factible diseñar un controlador para estas dos estructuras seleccionadas.

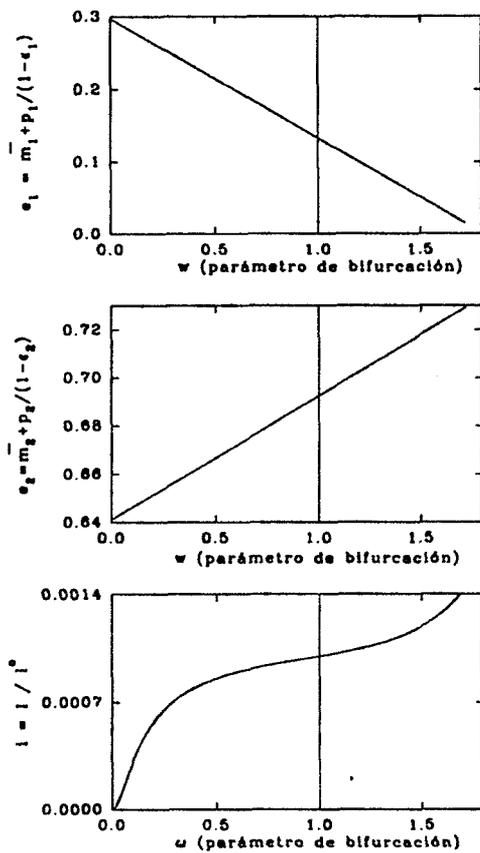


FIGURA 4.3 ANÁLISIS DE LA DINÁMICA INTERNA:
CASO 1

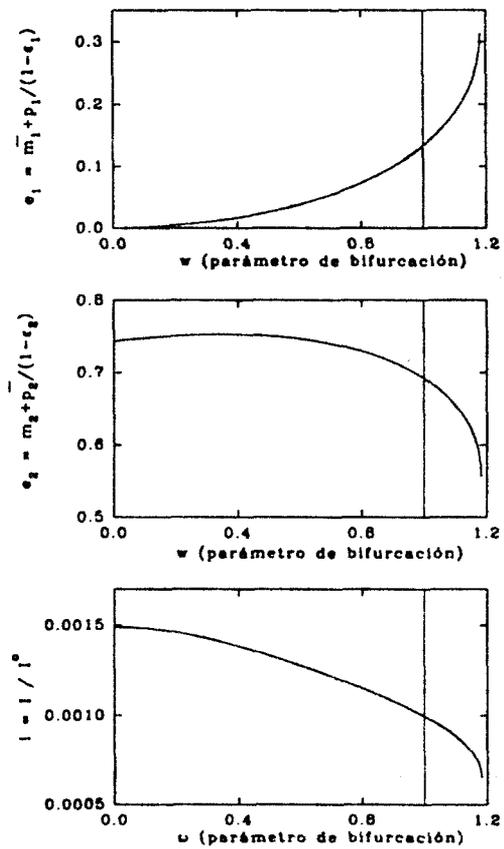


FIGURA 4.4 ANÁLISIS DE LA DINÁMICA INTERNA:
CASO 2

En resumen: en el primer caso la dinámica interna está constituida por la dinámica de los monómeros convertidos a polímeros (p_1 y p_2) y por lo tanto estará dominada por la dinámica del monómero menos reactivo p_2 (esto es, el más lento para polimerizarse), mientras que en el segundo caso la dinámica depende de la dinámica de conversión del monómero más reactivo p_1 (el más rápido en polimerizarse); entonces la respuesta del reactor a lazo cerrado deberá ser más rápida en alcanzar la condición nominal para el caso 2. Y con esto se concluye que la dinámica no controlable puede modificarse mediante la selección de una configuración de control y por lo tanto no es trivial esta selección.

4.4.4 Construcción de las Leyes de Control (Retroalimentación de Estados)

Basándose en el sistema lineal equivalente (4.37) que es controlable y observable, entonces existe un control lineal equivalente, $\mathbf{v} = \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$:

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{K}(\mathbf{z}(t) - \bar{\mathbf{z}}) \quad (4.44)$$

o en coordenadas originales, con acción proporcional (P)

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{k}_p(\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}) \quad (4.45)$$

Para considerar errores de modelado y rechazo ante perturbaciones se introduce acciones proporcional - integral (PI):

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{k}_p(\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}) + \mathbf{k}_i \int (\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}) dt \quad (4.46)$$

donde $\mathbf{v}_i = \dot{\bar{\mathbf{y}}}_i = 0$ para el caso de regulación.

Sustituyendo (4.45) en (4.31) se obtienen las **leyes de control**:

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) \begin{bmatrix} k_{P1} (y_1 - \bar{y}_1) \\ k_{P2} (y_2 - \bar{y}_2) \\ k_{P3} (y_3 - \bar{y}_3) \\ k_{P4} (y_4 - \bar{y}_4) \\ k_{P5} (y_5 - \bar{y}_5) \end{bmatrix} + \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) \begin{bmatrix} k_{I1} \int (y_1 - \bar{y}_1) dt \\ k_{I2} \int (y_2 - \bar{y}_2) dt \\ k_{I3} \int (y_3 - \bar{y}_3) dt \\ k_{I4} \int (y_4 - \bar{y}_4) dt \\ k_{I5} \int (y_5 - \bar{y}_5) dt \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \end{bmatrix} \quad (4.47)$$

siendo estas leyes de control para el caso de introducir acciones PI, y para el caso de solo acción P entonces el segundo término de (4.47) se elimina.

4.4.5 Sintonización de los Lazos de Control

En esta sección se establecen los valores de las ganancias K_p y K_i que hacen que el sistema a lazo cerrado sea estable, y además que generen una respuesta dinámica lo más rápida posible. La sintonización se realiza sobre el sistema equivalente lineal y aplicando la teoría de control convencional.

I. ACCIONES PROPORCIONALES

Sustituyendo las acciones de control (4.44) en el sistema equivalente (4.37) se obtiene el sistema a lazo cerrado

$$\dot{\mathbf{z}}_1 = (\Gamma + \Pi \mathbf{k}_p) \mathbf{z}_1 + \Pi \bar{\mathbf{v}} - \mathbf{K} \bar{\mathbf{z}}_1 \quad (4.48a)$$

$$\mathbf{y} = \Delta \mathbf{z}_1 \quad (4.48b)$$

Definiendo el error de salida como $\varepsilon = \mathbf{z}_1 - \bar{\mathbf{z}}_1$, donde $\bar{\mathbf{z}}_1$ corresponde al sistema en la condición nominal. Entonces,

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\mathbf{z}}_1 - \dot{\bar{\mathbf{z}}}_1 \quad (4.49)$$

y sustituyendo (4.48a) en (4.49) se obtiene la siguiente dinámica del error de salida

$$\dot{\varepsilon} = (\Gamma + \Pi k_p) \varepsilon \quad (4.50)$$

La matriz de ganancias K_p deben seleccionarse de tal forma que la matriz $(\Gamma + \Pi k_p)$ tenga valores propios con parte real negativa, para que el sistema a lazo cerrado se estable. Y con esto, cuando $t \rightarrow \infty$ $\varepsilon(t) \rightarrow 0$.

Las ecuaciones diferenciales (4.50) en forma individual

$$\dot{\varepsilon}_i - k_{pi} \varepsilon_i = 0 \quad (4.51)$$

resultando un sistema de dinámica de primer orden. Y reescribiendolas en notación estándar de control

$$\tau_i \dot{\varepsilon}_i + \varepsilon_i = 0 \quad (4.52)$$

donde τ_i es la constante de tiempo del proceso, y esta definida como el tiempo de asentamiento por período (tiempo de asentamiento/ 2π).

Para un sistema de primer orden el tipo de respuesta es exponencial, y su tiempo de respuesta puede ser manipulado mediante la selección de la ganancia de control. Esta relación entre el tiempo de asentamiento y las ganancias se consigue comparando las ecuaciones (4.51) y (4.52),

$$k_{pi} = -\frac{1}{\tau_i} \quad (4.53)$$

Los tiempos de asentamiento de los lazos de control utilizados en las simulaciones numéricas fueron de 125 min para los lazos de control de los monómeros, solvente, iniciador y temperatura, y de 25 min para el lazo del volumen ($\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = \tau_4 = 125 / 2\pi$, $\tau_5 = 25 / 2\pi$), tomándose estos tiempos de asentamiento para tener una respuesta lo más rápida posible.

II. ACCIONES PROPORCIONAL - INTEGRAL:

Siguiendo la metodología anterior, para el caso de acciones PI se logra la siguiente dinámica del error de salida de segundo orden:

$$\varepsilon_i'' - k_{pi} \dot{\varepsilon}_i - k_{ii} \varepsilon_i = 0 \quad (4.54)$$

la cual en notación estándar de control se puede escribir como

$$\tau_i^2 \ddot{\varepsilon}_i + 2\xi_i \tau_i \dot{\varepsilon}_i + \varepsilon_i = 0 \quad (4.55)$$

donde τ_i es la constante de tiempo del proceso (tiempo de asentamiento// 2π), y ξ_i es el factor de amortiguamiento.

Resultando que las siguientes relaciones entre las ganancias y τ_i , ξ_i :

$$k_{p_i} = -\frac{2\xi_i}{\tau_i} \quad (4.55)$$

$$k_{i_i} = -\frac{1}{\tau_i^2}$$

Asignándoles los mismos valores de tiempos de asentamiento y un factor de amortiguamiento $\xi_1 = \xi_2 = \xi_3 = \xi_4 = \xi_5 = 0.7$ para obtener una respuesta dinámica poco oscilatoria.

4.5 ANÁLISIS DE LA DINÁMICA A LAZO CERRADO

La respuesta dinámica del sistema a lazo cerrado (esto es, con la implementación del control) se obtuvo mediante simulaciones numéricas para los dos casos expuestos, considerándose las siguientes condiciones iniciales (x_0) bajo las cuales el reactor a lazo abierto tiende a estabilizarse en el punto de ignición y no en la condición nominal establecida (ver sección 3.2).

Condiciones iniciales:

$$x_1 = m_1 = 0.0050$$

$$x_2 = m_2 = 0.3000$$

$$x_3 = i = 0.0005$$

$$x_4 = s = 0.3000$$

$$x_5 = p_1 = 0.1050$$

$$x_6 = p_2 = 0.2500$$

$$x_7 = T = 368.0^\circ K$$

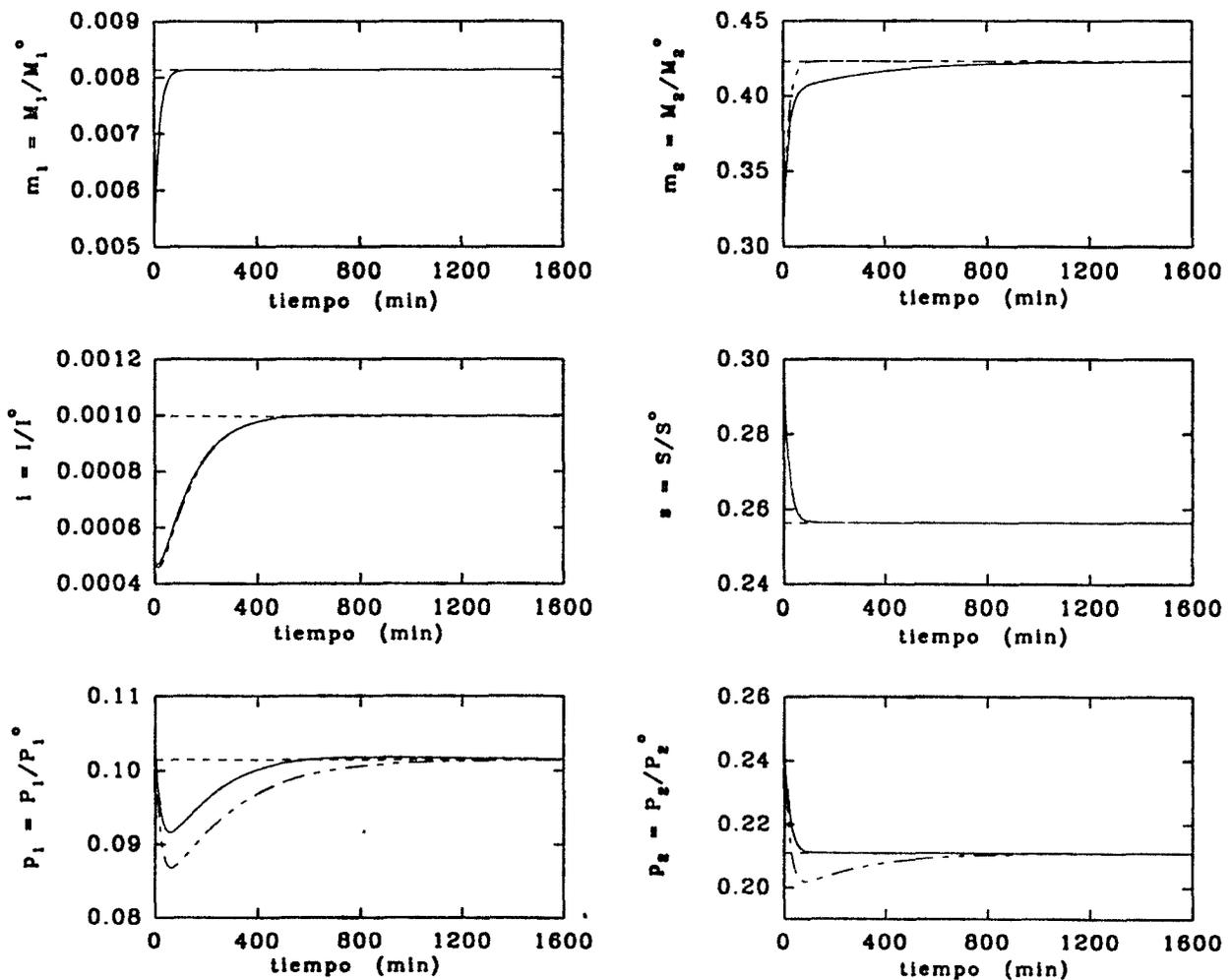
$$x_8 = V = 2.0 \text{ m}^3$$

Las figuras 4.5 - 4.8 se muestra la respuesta dinámica del proceso, considerando solo acciones proporcionales de control. Obteniéndose los siguientes resultados:

- Para la configuración del caso 1, donde se controla la concentración de los monómeros no convertidos, se logra estabilizar los estados del reactor en el punto de referencia establecido (condición nominal), ver fig. 4.5. Siendo la respuesta dinámica de los estados de forma exponencial, ya que por la construcción del controlador se obtuvo una dinámica del error de salida de primer orden. Para este caso, las salidas (m_1, m_2, s, T, V) llegan al estado estacionario en un tiempo equivalente al tiempo de asentamiento establecido (125 min) el cual es la mitad del tiempo de residencia del reactor. Mientras que el iniciador tarda aproximadamente el mismo tiempo que a lazo abierto (400 min.) pero en forma exponencial y no oscilatoria; así mismo los monómeros convertidos (p_1 y p_2) logran el estado estacionario en un tiempo aproximado de 800 min. lo cual también corresponde al tiempo de asentamiento a lazo abierto (fig. 3.7, capítulo 3). Esta respuesta es coherente, ya que los monómeros convertidos y el iniciador corresponden a la dinámica interna.
- Sin embargo, a pesar de que se logran las concentraciones deseadas con la primera estructura, se mejora la respuesta dinámica del reactor con la segunda estructura de control. La cual corresponde a controlar el monómero más reactivo (rápido) y el polímero menos reactivo (lento), con lo cual se tiene al monómero más lento y al polímero más rápido dentro de la dinámica interna. Como se mencionó en el análisis de la dinámica interna (sección 4.4.3) era de esperarse un mejor resultado para este caso por el hecho de controlar el polímero más lento y estar el polímero más rápido dentro de la dinámica interna, asegurándose así que la dinámica de ambos es lo más rápida posible. En la figura 4.6 se observa que realmente todos los estados llegan al punto de referencia, sin embargo comparando con el caso 1 se tienen mejores resultados debido a que los dos monómeros convertidos (p_1 y p_2) tienen tiempos de asentamiento menores al caso anterior.
- Se ha verificado que el caso 2 es mejor debido a que los estados convergen más rápidamente a la condición nominal. No obstante nuestros objetivos son regular la composición y conversión indirectamente, así como mantener la producción de polímero. En la figura 4.8 se muestra que tanto la respuesta de la composición instantánea (en función de la tasa de reactor dentro del reactor), la composición del copolímero final (en función de las concentraciones de los polímeros) y la conversión deseada es más rápida para el caso 2. Además se muestra que la producción total de copolímero (que se encuentra bajo la

restricción de $\pm 5\%$ en la composición final) es ligeramente mayor también para el segundo caso. Comprobándose así la conjetura inicial de obtener mejores resultados con el caso 2, debido principalmente a la elección de la dinámica interna.

- Por otra parte con lo que respecta a las acciones de control no existe gran diferencia en la respuesta de las entradas de control para cada caso (flujos de alimentación y de descarga), existiendo sólo un ligero cambio en la acción de la temperatura de la chaqueta (fig. 4.6). Este pequeño cambio en la temperatura al tener principal efecto en la velocidad de reacción, y tomando en cuenta que al ser el monómero 1 el más reactivo y por tanto sobre el que se tiene mayor facilidad de maniobra, entonces se tiene un efecto positivo sobre la rapidez de respuesta del sistema (que también es reflejado en la composición, conversión y producción de polímero).



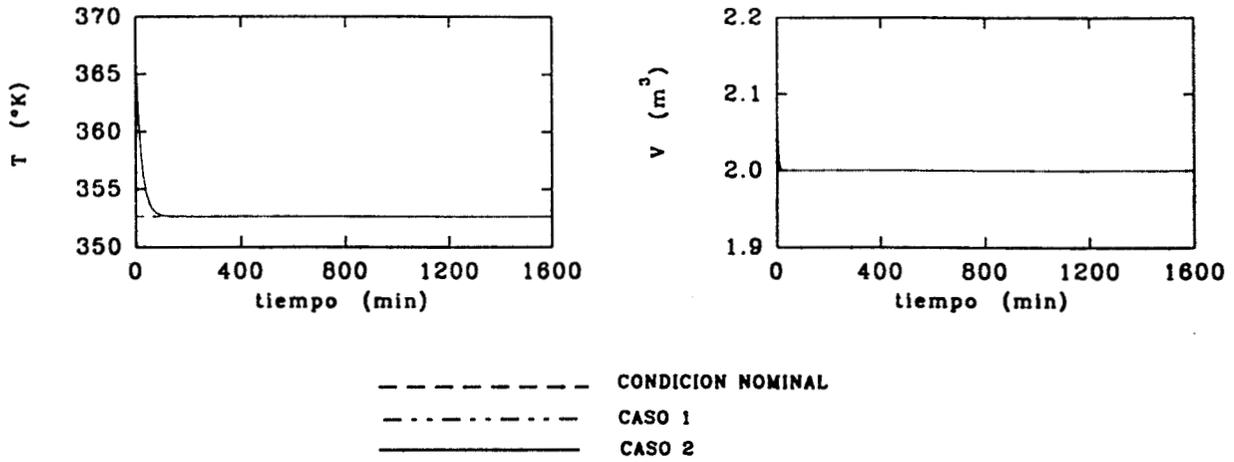


FIGURA 4.5 COMPORTAMIENTO DE LOS ESTADOS DEL REACTOR.

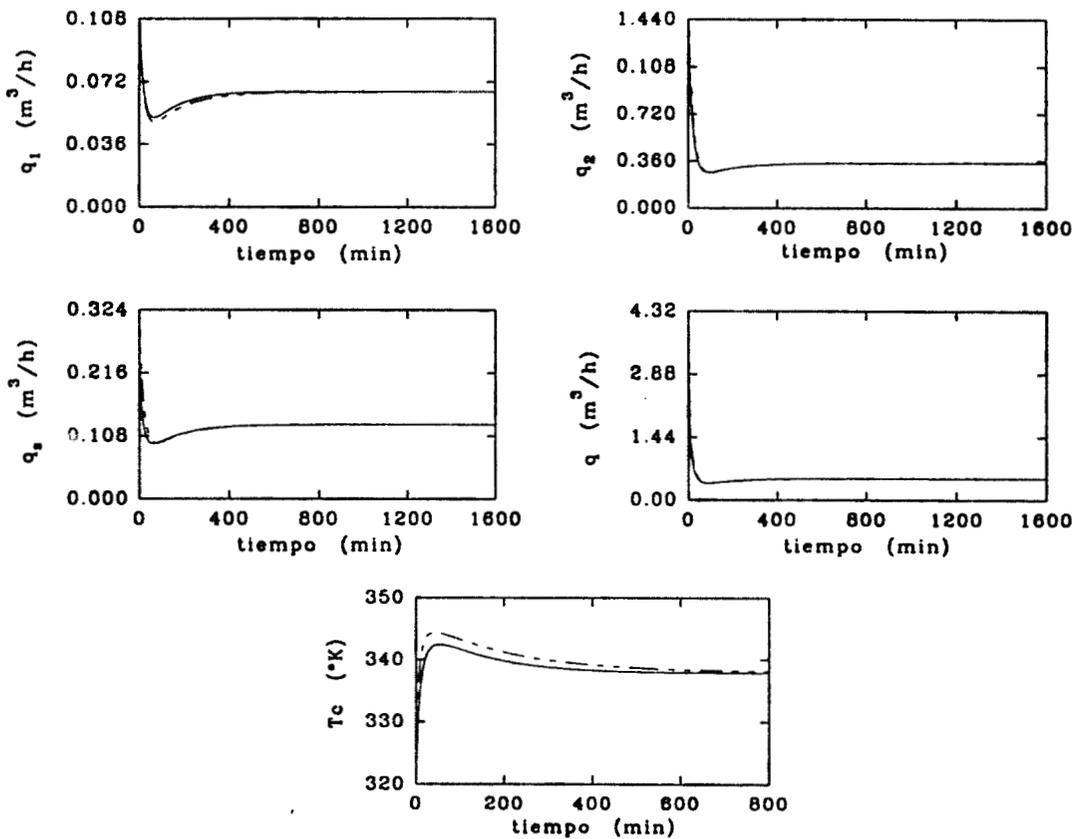


FIGURA 4.6 ACCIONES DE CONTROL.

(ACCIÓN PROPORCIONAL, CONDICIONES INICIALES DIFERENTES A LA COND. NOMINAL)

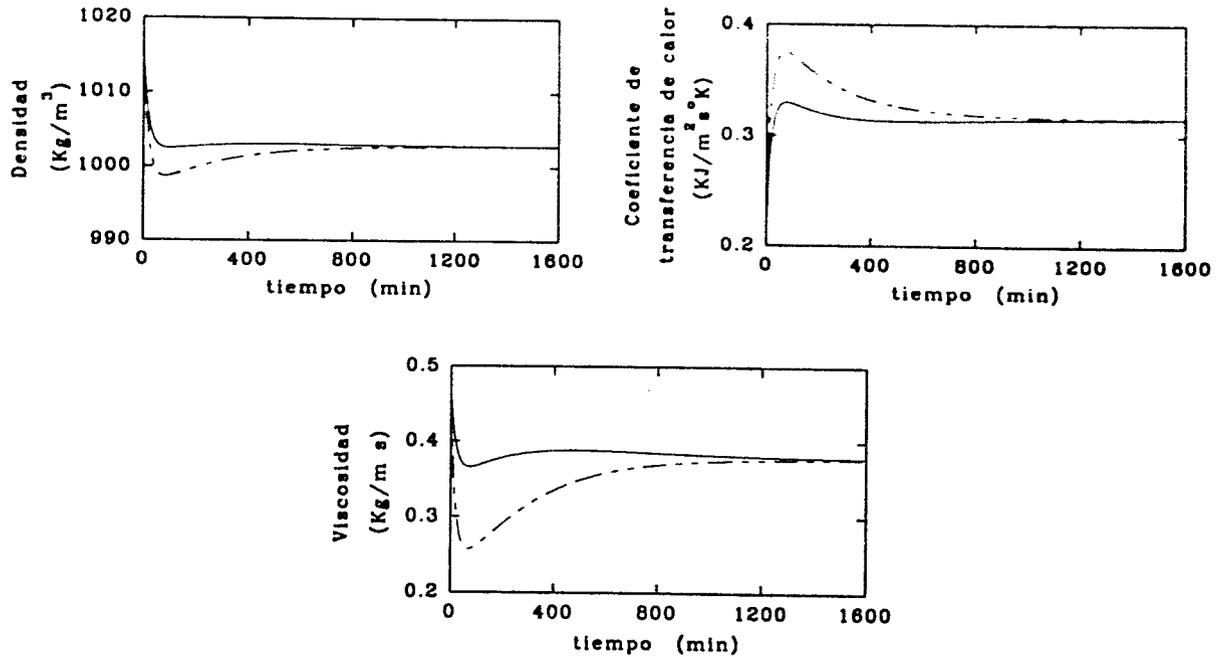


FIGURA 4.7 PROPIEDADES DE LA MEZCLA POLIMÉRICA Y COEFICIENTE DE CALOR.

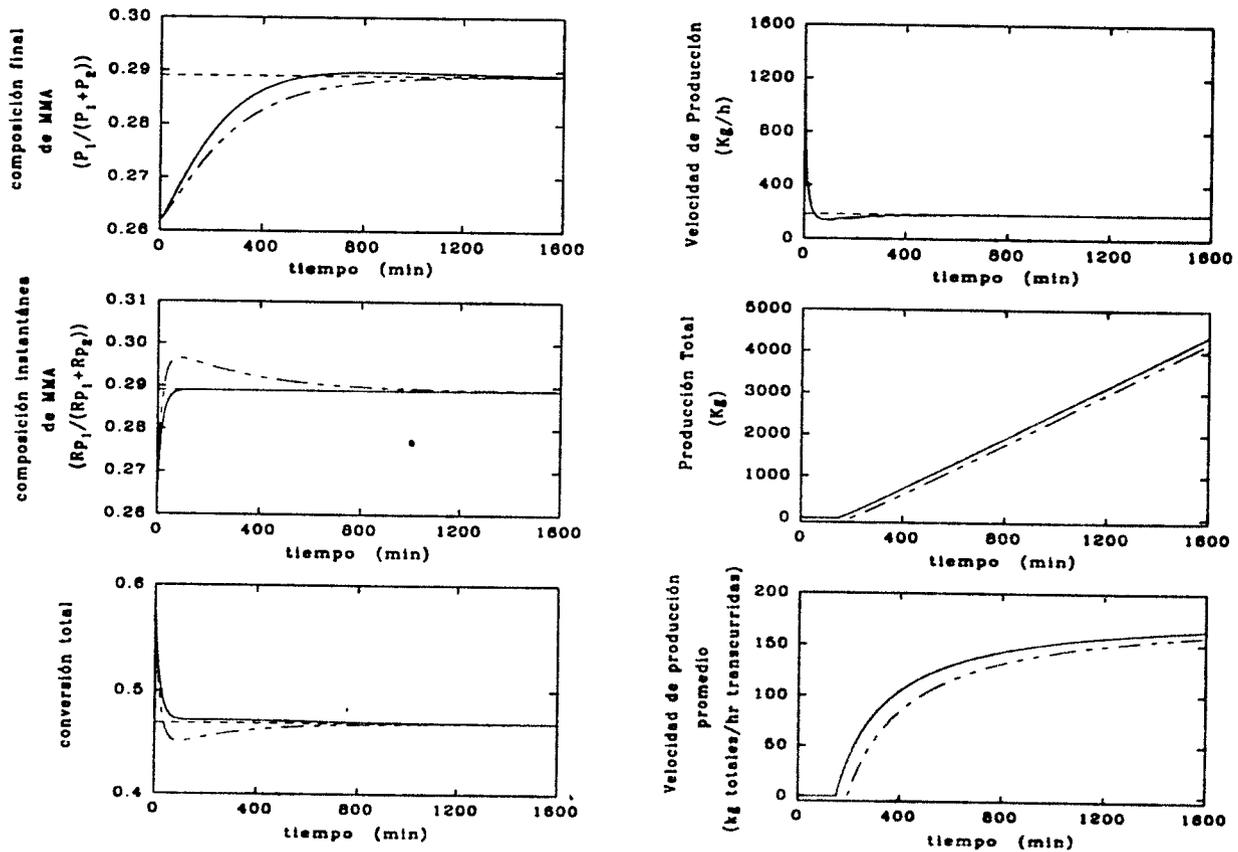


FIGURA 4.8 COMPOSICIÓN Y PRODUCCIÓN.

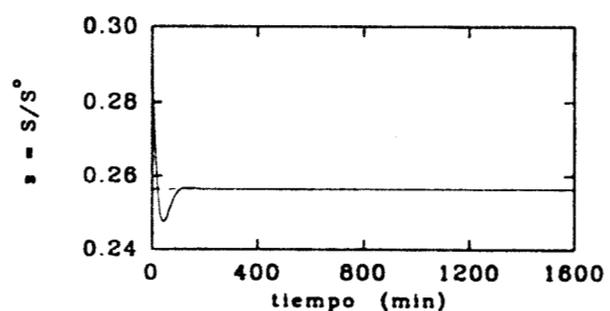
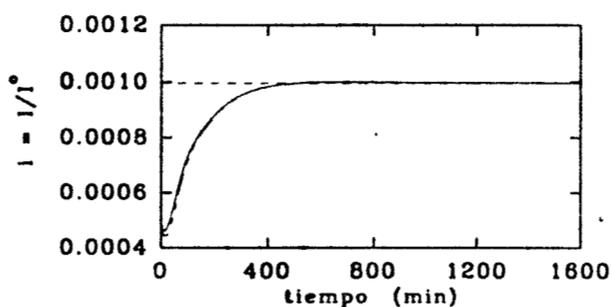
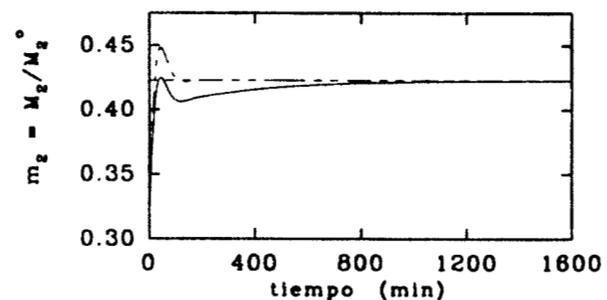
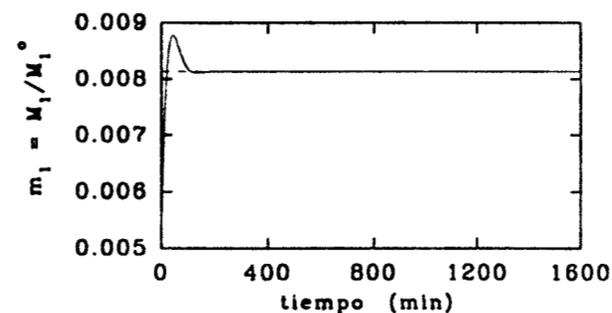
(ACCIÓN PROPORCIONAL, CONDICIONES INICIALES DIFERENTES A LA COND. NOMINAL)

EFFECTO DE LA ACCIÓN PI

Con el fin de verificar la robustez del controlador diseñado se incluye el modo integral, así como para ver su respuesta ante cambios en las entradas exógenas (perturbaciones). Primero se repite la simulación anterior con las mismas condiciones iniciales y ganancias, para comparar el comportamiento dinámico; luego se introduce una perturbación en la concentración de alimentación de monómero 1 (m_{1e}).

Las figuras 4.9 - 4.11 corresponden al efecto de la acción PI, con los siguientes resultados:

- Al introducir el modo integral las respuestas de los estados tienen una ligera oscilación al inicio lo cual no ocurre con el caso de sólo acción proporcional. Y esto es debido a que al incluir la acción integral se genera un error de salida de segundo orden (obtenido en la sintonización de los lazos de control). A pesar de esto, se alcanza el estado de referencia en el mismo tiempo de asentamiento que sin haber introducido el modo integral. Verificándose que el caso 2 también da mejores resultados.
- En cuanto a los esfuerzos de control (fig. 4.10), estos también tienen una pequeña oscilación inicial. Y comparando con el caso de acción proporcional son prácticamente los mismos, no obstante que en los primeros 20 minutos los flujos (que convergen rápidamente a los valores nominales) son un poco más altos.



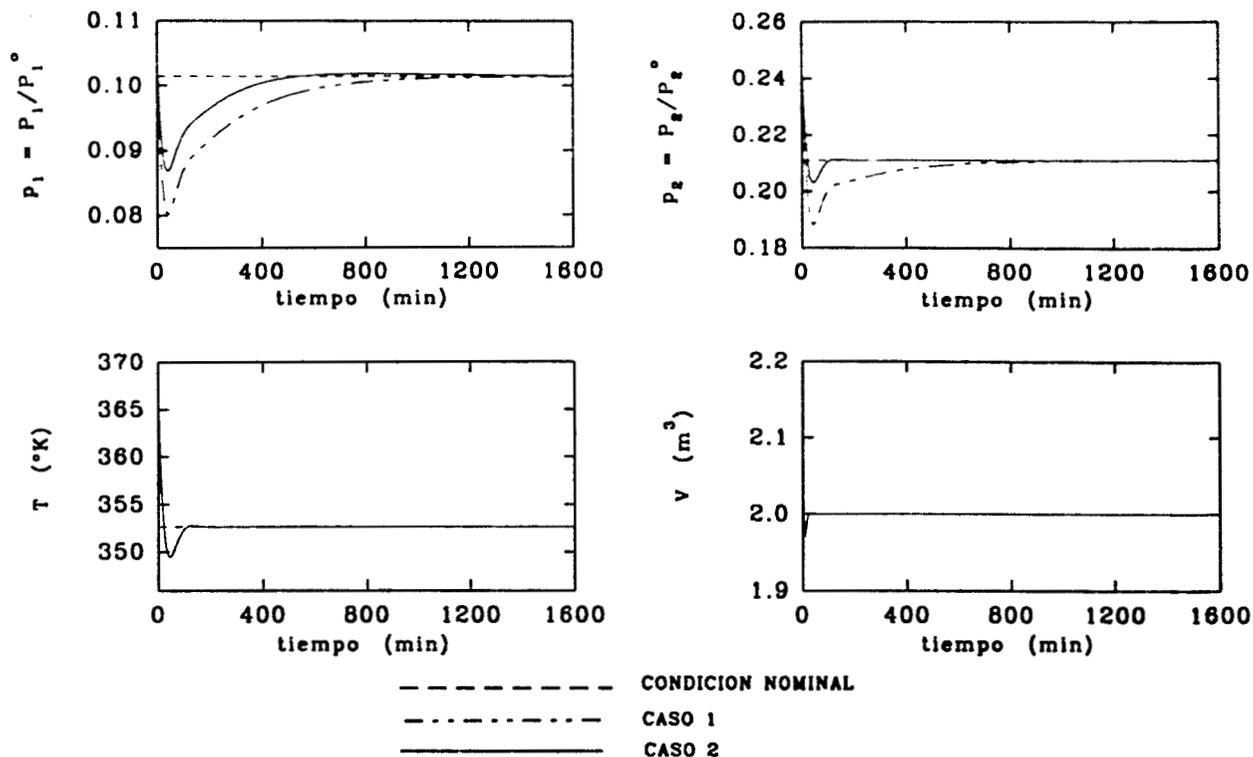


FIGURA 4.9 COMPORTAMIENTO DE LOS ESTADOS DEL REACTOR.
(ACCIÓN PI, CONDICIONES INICIALES DIFERENTES A LA COND. NOMINAL)

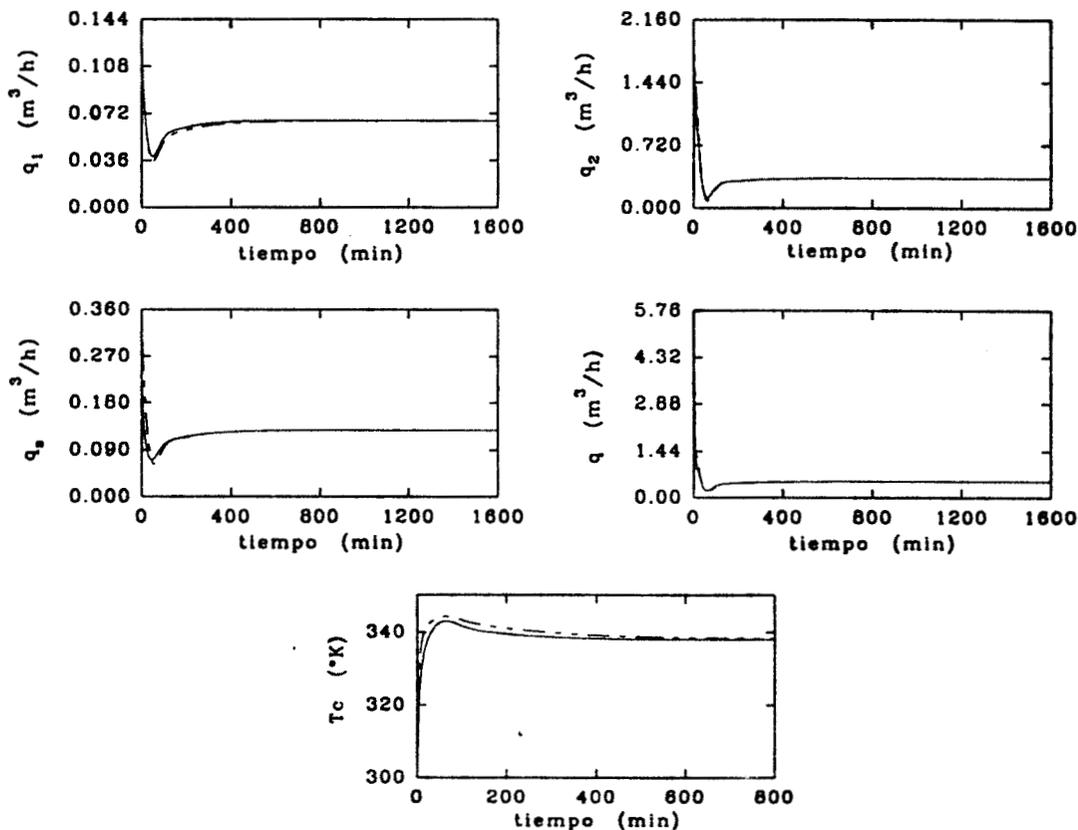


FIGURA 4.10 ACCIONES DE CONTROL.
(ACCIÓN PI, CONDICIONES INICIALES DIFERENTES A LA COND. NOMINAL)

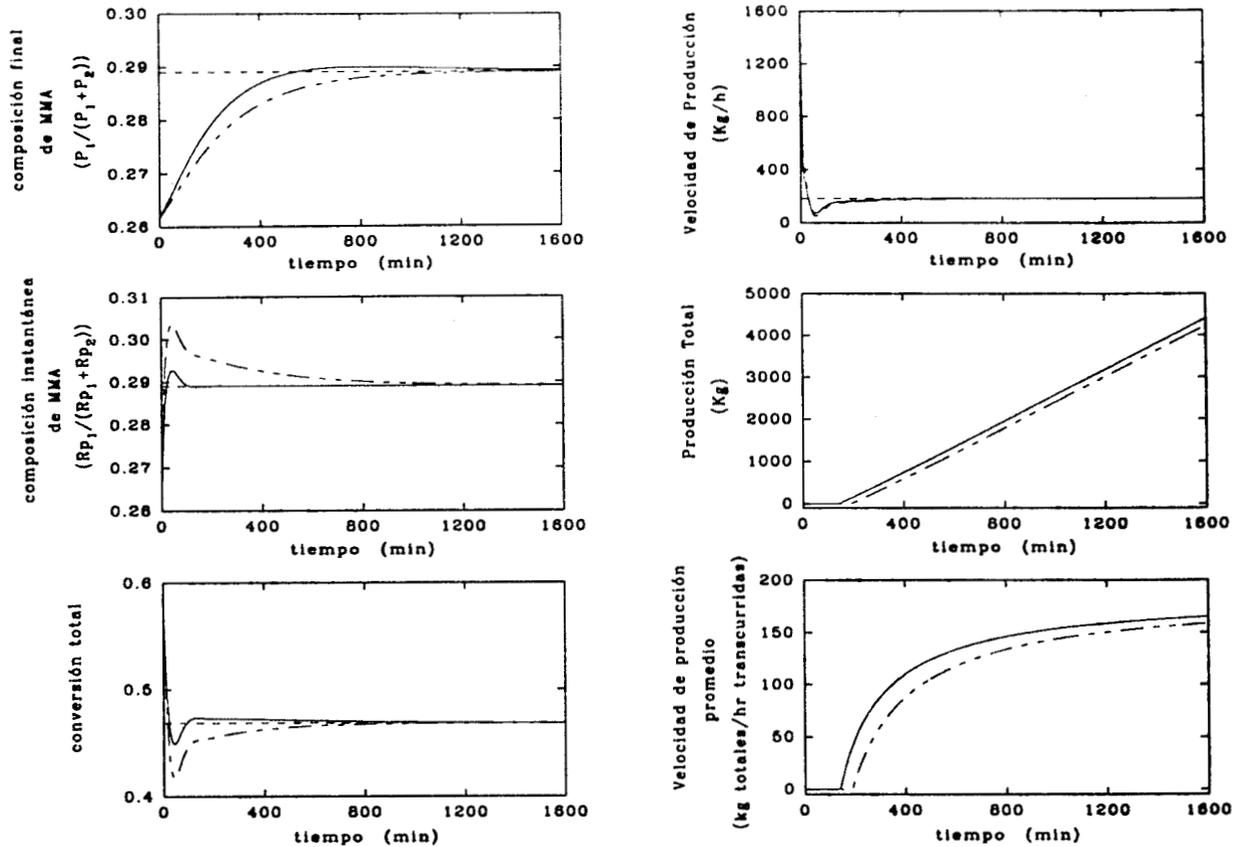


FIGURA 4.11 COMPOSICIÓN Y PRODUCCIÓN.
(ACCIÓN PI, CONDICIONES INICIALES DIFERENTES A LA COND. NOMINAL)

COMPORTAMIENTO ANTE PERTURBACIONES CONOCIDAS

Se introdujo una perturbación senoidal en la concentración de alimentación del monómero 1, con el fin de observar la estabilidad del sistema y la robustez del controlador diseñado. Siendo esta situación un caso extremo (por las oscilaciones continuas en la concentración de alimentación) de operación del reactor de copolimerización.

Se considera que la perturbación es conocida: $m_{1o} = 0.975 + 0.025\text{sen}(\pi t / 40)$, y las condiciones iniciales son las mismas establecidas con la finalidad de poder comparar.

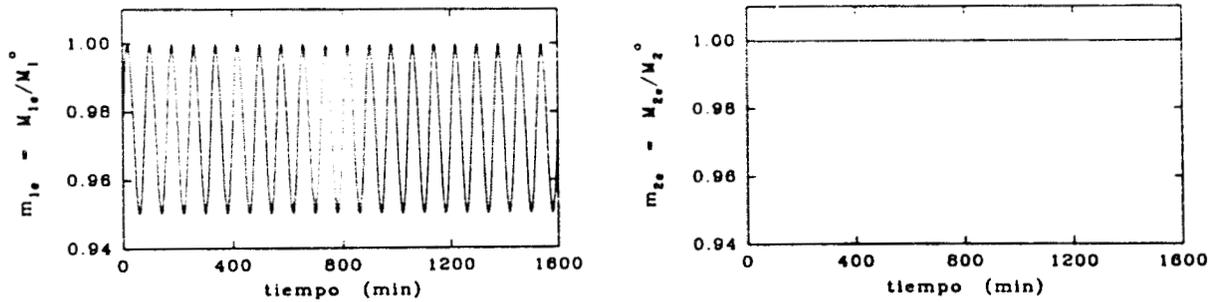


FIGURA 4.12 CONCENTRACIONES DE ALIMENTACIÓN DE LOS MONÓMEROS
(ACCIÓN PI, PERTURBACIÓN EN m_{1e})

El comportamiento del reactor a lazo cerrado ante perturbaciones es el siguiente:

- La respuesta del sistema se muestra en las figuras 4.13 a 4.15. Observándose el rechazo a la perturbación, ya que los estados tienden a convergir en la condición nominal. Para el caso de los estados que corresponden a las salidas (y) se logra en el tiempo de asentamiento establecido, mientras que para los estados comprendidos como dinámica interna lo logran en el tiempo equivalente a lazo abierto pero con un pequeño "offset" (que para cuestiones prácticas puede considerarse despreciable).
- El principal efecto para el rechazo de la perturbación introducida está en la acción de control del flujo de alimentación del monómero 1, lo cual se esperaba ya que aquí es donde está ocurriendo la variación de concentración. Por lo que respecta a los demás flujos, su comportamiento es el mismo que el caso anterior donde no había perturbación al sistema.
- Es de hacer notar que, observando los estados, el caso de la configuración 1 tiene offset en m_2 y p_1 , mientras que el caso 2 tiene offset en p_1 y p_2 ; y como el principal interés está en los monómeros convertidos podría considerarse como mejor selección el caso 2. Pero observando las composiciones, el caso 1 tiene un offset del 0.9% y el caso 2 si logra obtener exactamente la condición nominal. Sin embargo como este pequeño offset del caso 2 se encuentra todavía dentro de la restricción de obtener un producto final con $0.289 \pm 5\%$ y además como la respuesta es ligeramente más rápida, entonces la producción es también un poco mayor para este caso. Verificándose también que la configuración del caso 2 da un mejor comportamiento.

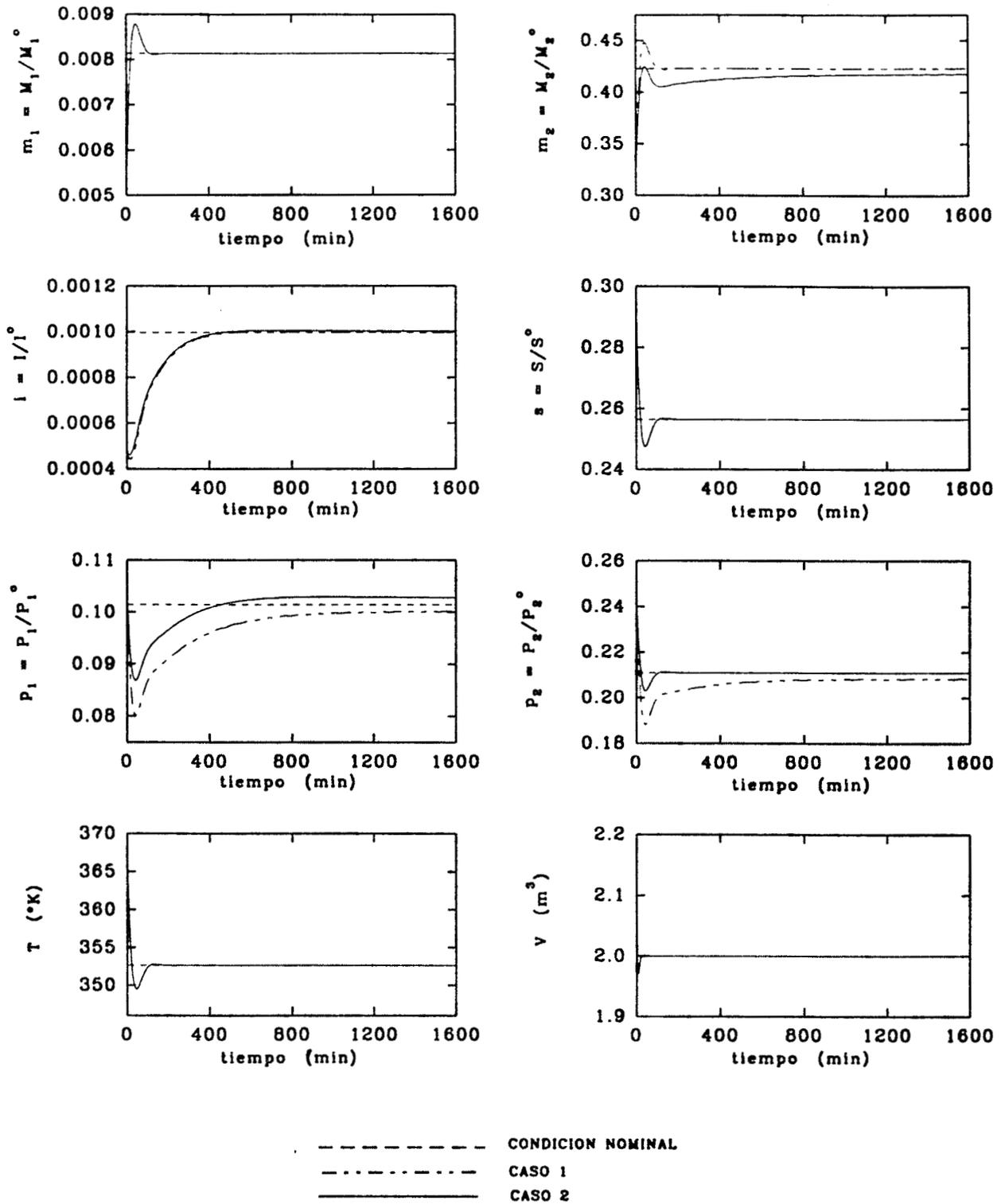


FIGURA 4.13 COMPORTAMIENTO DE LOS ESTADOS DEL REACTOR. (ACCIÓN PI, PERTURBACIÓN EN m_{10})

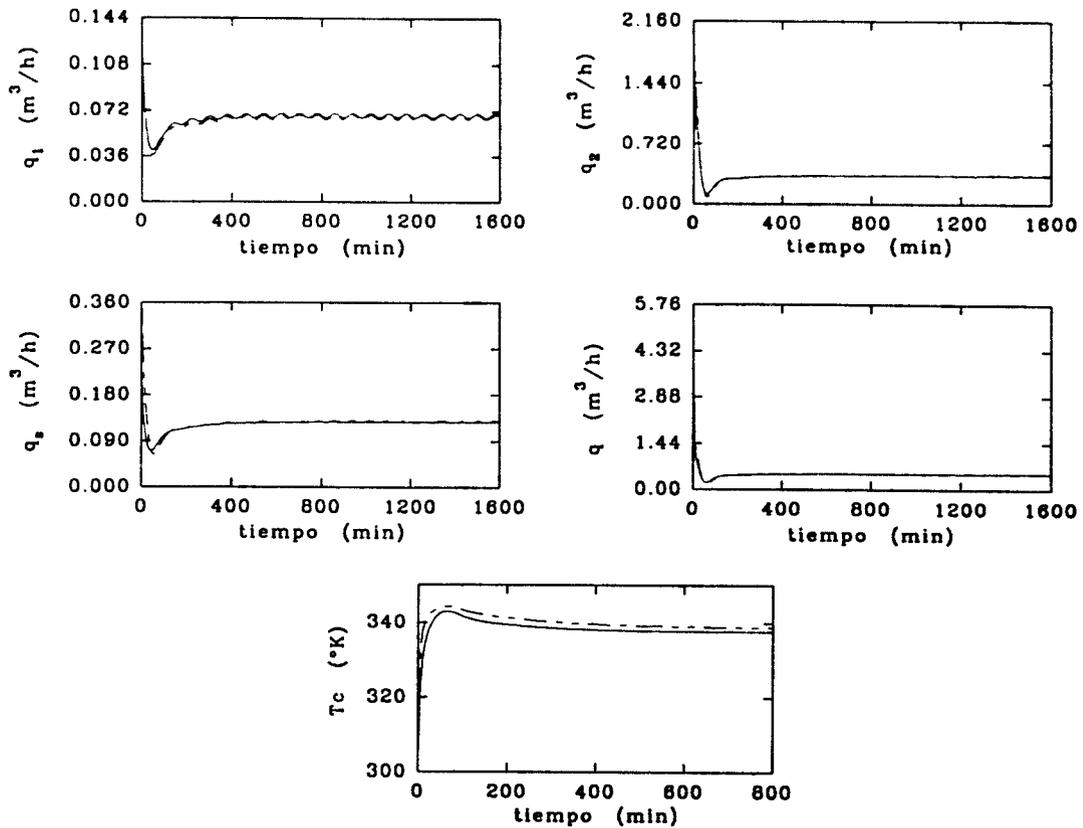


FIGURA 4.14 ACCIONES DE CONTROL.

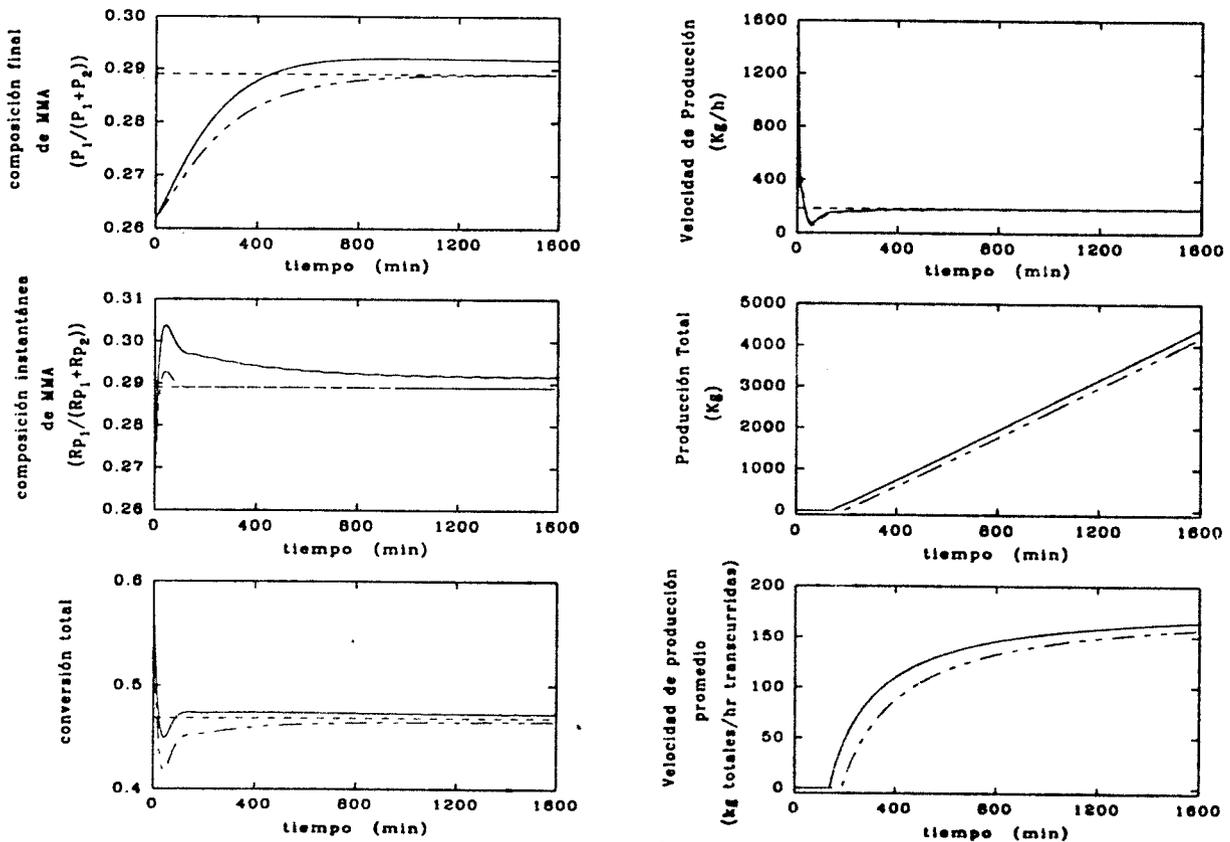


FIGURA 4.15 COMPOSICIÓN Y PRODUCCIÓN.
(ACCIÓN PI, PERTURBACIÓN EN m_{1e})

De las características de estas tres simulaciones realizadas (acción P, acción PI y rechazo a perturbaciones) se concluye que el control con retroalimentación de estados diseñado, que corresponde a un control multivariable, permite estabilizar el proceso mediante una manipulación simultánea y sincronizada de las entradas de control (flujos de entradas y salida, y temperatura de la chaqueta). Estas combinaciones de aumentar o disminuir los flujos y calentar o enfriar mediante la chaqueta hace que el control de este proceso dependa tanto de la transferencia de calor como de las tasas de reacción de polimerización.

La interacción entre los lazos del control multivariable se encuentra en la magnitud de cada uno de los elementos de la matriz de desacoplamiento (**A**), por lo que si sus elementos de la diagonal tuviesen mayor magnitud que los elementos restantes entonces se podría tener un control descentralizado, esto es un control convencional con lazos totalmente desacoplados y donde cada salida es manipulada por una sola entrada, no afectando el desempeño del control y mostrando un diseño e implementación más sencillo que el control multivariable.

CAPÍTULO 5

CONTROL CON RETROALIMENTACIÓN DE MEDICIONES

5.1 INTRODUCCIÓN

En el capítulo anterior se obtuvo con la teoría de control no lineal una ley de control con retroalimentación de estados, esto es, bajo la suposición que se conocen todos los estados del sistema. Para una implementación práctica no se cuenta con mediciones de todos los estados sino de algunos de ellos. A continuación se evalúa la posibilidad de implementar un esquema de control que utilice únicamente las mediciones, que en este caso corresponde a las mediciones de las salidas.

Entre de las posibilidades para introducir un controlador que utilice únicamente las mediciones de las salidas está la implementación de técnicas de estimación, como es el filtro de Kalman y el diseño de "observadores" (Wonham, 1985) que consiste en recuperar información de los estados no medidos mediante la medición de las salidas. Sin embargo en este capítulo se construye un control con retroalimentación de mediciones a partir de una linealización local del control con retroalimentación de estados obtenido. El control que se diseña se ajusta a técnicas lineales convencionales, cuya estructura correspondería a un esquema de control lineal multivariable, que maneja y compensa fuertes interacciones y garantiza la estabilización del reactor que a lazo abierto tiene como punto deseado de operación un punto estacionario inestable. Además se considera el caso de desacoplar cada uno de los lazos de control, logrando un control descentralizado formado por lazos independientes una entrada - una salida (UEUS) y que puede mostrar ventajas sobre un control multivariable (múltiples entradas - múltiples salidas, MEMS). Entre estas ventajas están: la flexibilidad de operación; la tolerancia de fallo, ya que si algún actuador o sensor falla solo afecta al lazo de control involucrado; diseño y sintonización de control más simplificados (Campo y Morari, 1994).

5.2 SOLUCIÓN AL PROBLEMA DE CONTROL

El control no lineal obtenido de retroalimentación de estados (4.13) se expresó como:

$$\mathbf{u} = \mu(\mathbf{x}, D_d \mathbf{d}, D_y \bar{\mathbf{y}}), \text{ o bien}$$

$$\mathbf{u} = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \quad (5.1)$$

Partiendo de (5.1), se linealiza el control mediante una aproximación lineal en series de Taylor. Dicha aproximación se realiza alrededor del punto de operación ($\mathbf{x} = \bar{\mathbf{x}}$ y $\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}}$):

$$\mathbf{u} = \psi(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{v}}) + \frac{\partial \psi(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{v}})}{\partial \mathbf{v}} (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}) + \frac{\partial \psi(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{v}})}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) + H(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \quad (5.2)$$

donde $H(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ contiene términos de orden mayor. En esta aproximación $\psi(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{v}}) = \bar{\mathbf{u}}$, que corresponde al valor de las entradas de control en la condición nominal.

Considerando $\vartheta(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ como la suma de los términos lineales en \mathbf{x} y términos de orden mayor de dos en \mathbf{x} y \mathbf{v} , y reorganizando (5.2)

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \frac{\partial \psi(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{v}})}{\partial \mathbf{v}} (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}) + \vartheta(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \quad (5.3)$$

Introduciendo acciones de control PI, se tiene que las leyes de control (\mathbf{v}) en variables originales están dadas por

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{k}_p (\mathbf{y}(t) - \bar{\mathbf{y}}) + \mathbf{k}_i \int_0^t (\mathbf{y}(\xi) - \bar{\mathbf{y}}) d\xi \quad (5.4)$$

Sustituyendo (5.4) en (5.3), y considerando despreciable el término $\vartheta(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ se obtiene

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \frac{\partial \psi(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{v}})}{\partial \mathbf{v}} \left(\mathbf{k}_p (\mathbf{y}(t) - \bar{\mathbf{y}}) + \mathbf{k}_i \int_0^t (\mathbf{y}(\xi) - \bar{\mathbf{y}}) d\xi \right) \quad (5.5)$$

A partir de la inversa dinámica (en el sentido de Hirschon) se obtuvo que las entradas de control (4.31) están definidas como

$$\mathbf{u} = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{V}) = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x})(\mathbf{v} - \mathbf{b}(\mathbf{x})) \quad (5.6)$$

entonces el jacobiano esta dado por

$$\frac{\partial \psi(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{v}})}{\partial \mathbf{v}} = \mathbf{A}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}) \quad (5.7)$$

Con ésta última expresión (5.7) y con (5.5) se redefiniran las ganancias de control como:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{k}}_p &= \mathbf{k}_p \mathbf{A}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}) \\ \hat{\mathbf{k}}_i &= \mathbf{k}_i \mathbf{A}^{-1}(\bar{\mathbf{x}}) \end{aligned} \quad (5.8)$$

en donde las nuevas ganancias de control dependen de la inversa de la matriz de desacoplamiento evaluado en el estado estacionario (condición nominal) y de las ganancias \mathbf{k}_p y \mathbf{k}_i que deben seleccionarse tal que el sistema se estabilice. En la siguiente sección se sintonizan los lazos de control y se seleccionan los valores de dichas ganancias.

Con lo anterior el control (5.5) se reduce a:

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \hat{\mathbf{k}}_p (\mathbf{y}(t) - \bar{\mathbf{y}}) + \hat{\mathbf{k}}_i \int_0^t (\mathbf{y}(\xi) - \bar{\mathbf{y}}) d\xi \quad (5.9)$$

que corresponde a un control lineal multivariable. Para el caso de introducir únicamente acciones de control proporcionales se elimina el último término de la ecuación 5.9.

5.3 IMPLEMENTACIÓN DEL CONTROL LINEAL AVANZADO

Como se mencionó en la introducción de este capítulo un sistema de control descentralizado (UEUS) puede mostrar ventajas sobre un control multivariable (MEMS), además de ser una regla en control aplicado industrial. Pero el requerimiento para que un sistema de control multivariable sea descentralizado introduce el problema de hacer pares entradas - salidas en la configuración de control. Para una planta totalmente no interactiva la selección de éstas es obvia y el beneficio de un control descentralizado es trivial. No obstante en un problema práctico

hay interacciones en la planta (en mayor o menor magnitud) como es el caso de la mayoría de los procesos químicos, y esto implica que si el control es descentralizado entonces los lazos del sistema no son independientes uno del otro (Campo y Morari, 1994).

Por lo anterior la implementación del control con retroalimentación de mediciones se realizará para dos casos de control:

CASO I. MEMS: El control linealizado obtenido (ec. 5.9) corresponde al caso multivariable que depende de la inversa de la matriz de desacoplamiento, en la cual están contenidas las interacciones entre los lazos de control.

CASO II. UEUS: Este corresponde a un control descentralizado en el que se considera cada lazo desacoplado. Para este caso se toman en cuenta sólo los elementos de la diagonal de la inversa de la matriz de desacoplamiento, de tal forma que u_1 control y_1 , u_2 control y_2 , etc.

De acuerdo a (5.8) y (5.9) las expresiones para las entradas de control del reactor en términos de las variables originales son:

CASO I (MEMS)

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ \bar{u}_2 \\ \bar{u}_3 \\ \bar{u}_4 \\ \bar{u}_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{k}_{p11} & \hat{k}_{p12} & \hat{k}_{p13} & 0 & 0 \\ \hat{k}_{p21} & \hat{k}_{p22} & \hat{k}_{p23} & 0 & 0 \\ \hat{k}_{p31} & \hat{k}_{p32} & \hat{k}_{p33} & 0 & 0 \\ \hat{k}_{p41} & \hat{k}_{p42} & \hat{k}_{p43} & \hat{k}_{p44} & 0 \\ \hat{k}_{p51} & \hat{k}_{p52} & \hat{k}_{p53} & 0 & \hat{k}_{p55} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 - \bar{y}_1 \\ y_2 - \bar{y}_2 \\ x_4 - \bar{x}_4 \\ x_7 - \bar{x}_7 \\ x_8 - \bar{x}_8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{k}_{i11} & \hat{k}_{i12} & \hat{k}_{i13} & 0 & 0 \\ \hat{k}_{i21} & \hat{k}_{i22} & \hat{k}_{i23} & 0 & 0 \\ \hat{k}_{i31} & \hat{k}_{i32} & \hat{k}_{i33} & 0 & 0 \\ \hat{k}_{i41} & \hat{k}_{i42} & \hat{k}_{i43} & \hat{k}_{i44} & 0 \\ \hat{k}_{i51} & \hat{k}_{i52} & \hat{k}_{i53} & 0 & \hat{k}_{i55} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \int (y_1 - \bar{y}_1) dt \\ \int (y_2 - \bar{y}_2) dt \\ \int (x_4 - \bar{x}_4) dt \\ \int (x_7 - \bar{x}_7) dt \\ \int (x_8 - \bar{x}_8) dt \end{bmatrix} \quad (5.10)$$

CASO II (UEUS)

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{u}_1 \\ \bar{u}_2 \\ \bar{u}_3 \\ \bar{u}_4 \\ \bar{u}_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{k}_{p11} (y_1 - \bar{y}_1) \\ \hat{k}_{p22} (y_2 - \bar{y}_2) \\ \hat{k}_{p33} (x_4 - \bar{x}_4) \\ \hat{k}_{p44} (x_7 - \bar{x}_7) \\ \hat{k}_{p55} (x_8 - \bar{x}_8) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{k}_{i11} \int (y_1 - \bar{y}_1) dt \\ \hat{k}_{i22} \int (y_2 - \bar{y}_2) dt \\ \hat{k}_{i33} \int (x_4 - \bar{x}_4) dt \\ \hat{k}_{i44} \int (x_7 - \bar{x}_7) dt \\ \hat{k}_{i55} \int (x_8 - \bar{x}_8) dt \end{bmatrix} \quad (5.11)$$

donde para la configuración del caso 1: $y_1 = x_1$, $y_2 = x_2$; y para el caso 2: $y_1 = x_1$, $y_2 = x_6$. Y las ganancias de control están dadas por

$$\begin{aligned}\hat{k}_{p_{ij}} &= k_{p_{ij}} a_{ij}(\bar{\mathbf{x}}) \\ \hat{k}_{l_{ij}} &= k_{l_{ij}} a_{ij}(\bar{\mathbf{x}})\end{aligned}\quad (5.12)$$

los valores de $a_{ij}(\bar{\mathbf{x}})$ corresponden a los elementos de la matriz de desacoplamiento inversa, y $k_{p_{ij}}$, $k_{l_{ij}}$ son obtenidos mediante la sintonización de los lazos de control.

(para las situaciones donde solo se incluya acción proporcional las ecuaciones 5.10 y 5.11 se reduce eliminando el último termino, respectivamente).

5.4 SINTONIZACIÓN DE LOS LAZOS DE CONTROL

ACCIÓN PROPORCIONAL:

Partiendo de la ley de control (5.4), pero con ganancias proporcionales únicamente

$$v_i = \bar{v}_i + k_{p_i}(y_i - \bar{y}_i) \quad (5.13)$$

y definiendo el error de salida como la diferencia entre la salida y su el valor nominal ($\varepsilon_i = y_i - \bar{y}_i$) se obtiene la siguiente dinámica del error de salida:

$$\begin{aligned}\dot{\varepsilon}_i &= \dot{y}_i - \dot{\bar{y}}_i \\ \dot{\varepsilon}_i &= V_i - \bar{V}_i \\ &\Downarrow \\ \boxed{\dot{\varepsilon}_i - k_{p_i} \varepsilon_i = 0}\end{aligned}\quad (5.14)$$

resultando un sistema de dinámica de primer orden. Escogiéndose las ganancias de igual forma que en el esquema de retroalimentación de estados, $k_{p_i} = -1/\tau_i$. Y para hacer una

comparación con los esquemas de control diseñados en capítulos anteriores se escogen los mismos valores utilizados de tiempos de asentamiento: $\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = \tau_4 = 125 \text{ min}$ y $\tau_5 = 25 \text{ min}$.

ACCIÓN PROPORCIONAL - INTEGRAL:

La sintonización se llevó a cabo en forma similar al caso anterior. Partiendo de (5.4), en forma individual:

$$v_i = \bar{v}_i + k_{p_i}(y_i - \bar{y}_i) + k_{i_i} \int (y_i - \bar{y}_i) dt \quad (5.15)$$

y con la misma definición del error de salida se obtiene la siguiente dinámica del error:

$$\ddot{\varepsilon}_i - k_{p_i} \dot{\varepsilon}_i - k_{i_i} \varepsilon_i = 0 \quad (5.16)$$

como resulta ser de segundo orden se seleccionan las ganancias como $k_{p_i} = -2\xi_i/\tau_i$ y $k_{i_i} = -1/\tau_i^2$; asignándole los mismos valores de tiempos de asentamiento y un factor de amortiguamiento $\xi_1 = \xi_2 = \xi_3 = \xi_4 = \xi_5 = 0.7$ para obtener una respuesta dinámica poco oscilatoria.

5.5 ANÁLISIS DE LA DINÁMICA A LAZO CERRADO

Para los dos casos de control mencionados se llevaron a cabo simulaciones numéricas para estudiar el comportamiento dinámico del reactor a lazo cerrado, empleando las mismas condiciones iniciales y ganancias del control con retroalimentación de estados diseñado en el capítulo anterior con la finalidad de comparar las respuestas dinámicas. Analizando tres situaciones:

- Efecto de incluir solo acción P.
- Efecto de incluir acciones PI.
- Rechazo ante perturbaciones.

Las simulaciones se hicieron para las dos configuraciones de control seleccionadas en el capítulo anterior, obteniéndose que con cualquier esquema de control siempre se logra una mejor respuesta (menor tiempo de asentamiento) para la configuración del caso 2, por lo que solo se muestran los resultados para ésta configuración.

A continuación se señalan algunas de las características del sistema a lazo cerrado:

EFEECTO DE LA ACCIÓN P

- Para esta situación se logra alcanzar la condición nominal en aproximadamente 2 tiempos de residencia (500 min) para la mayoría de los estados, en ambos casos de control: MEMS y UEUS. El hecho de tomar un control multivariable (MEMS) que proviene de la linealización del control con retroalimentación de estados hace que la respuesta dinámica sea más lenta y no en forma exponencial como en dicho caso de control, pero aún así muestra un buen desempeño. El control UEUS que contempla esta linealización y además un desacoplamiento entre los lazos, lo cual que implica que la interacción que adquiere cada lazo de modo natural no es tomada, sigue aún mostrando resultados tan buenos como el caso MEMS ya que tiene respuestas dinámicas muy similares.
- Casi todos los estados exhiben el mismo comportamiento en ambos casos de control, ocurriendo una diferencia en la concentración de solvente y volumen que tiene tiempos de asentamiento poco mayores para el caso UEUS. Siendo este comportamiento debido a la acción de control del flujo de alimentación de solvente, como se ve en la figura 5.2 para el caso MEMS este flujo al inicio es cercano al flujo nominal de operación mientras que para el caso UEUS muestra un comportamiento contrario ya que inicia con una saturación (flujo cero). Siendo los esfuerzos de control suaves para las restantes entradas de control y con comportamiento semejante para ambos casos, por lo que el lazo del flujo de control actúa de esta forma ya que es el que requiere de la interacción de algún otro lazo de control.
- Asimismo, la composición y conversión (fig. 5.3) alcanzan la condición nominal en un tiempo de asentamiento equivalente al de estados retroalimentados pese a no haber un comportamiento exponencial. Y la producción total es tan sólo afectada en los primeros 50 min. que corresponden a un período transitorio en el que las composiciones no se encuentran bajo restricción (de 5% de la composición final en la condición nominal), que afortunadamente no afecta la velocidad de producción promedio.

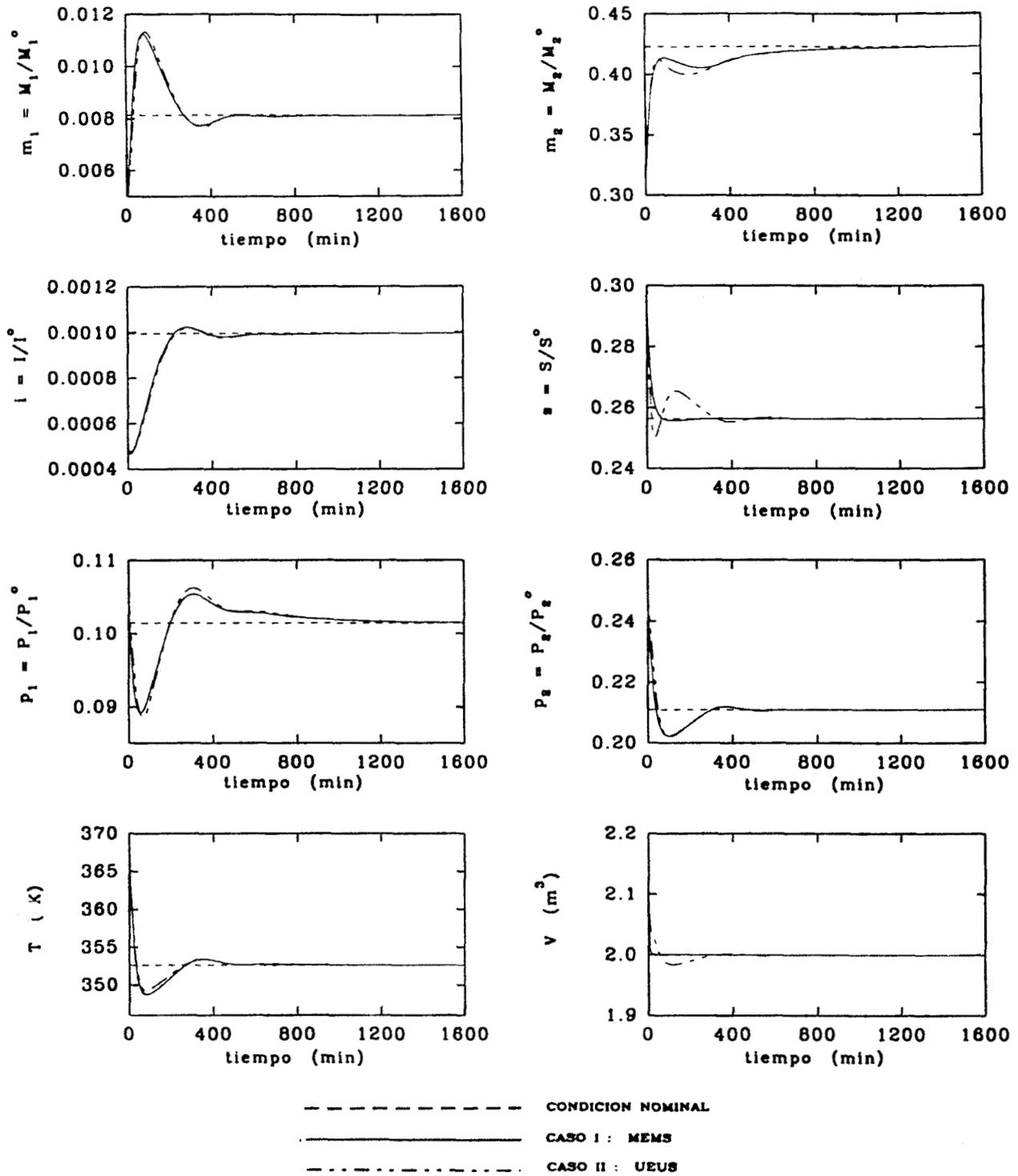


FIGURA 5.1 COMPORTAMIENTO DE LOS ESTADOS DEL REACTOR. ACCIÓN P.

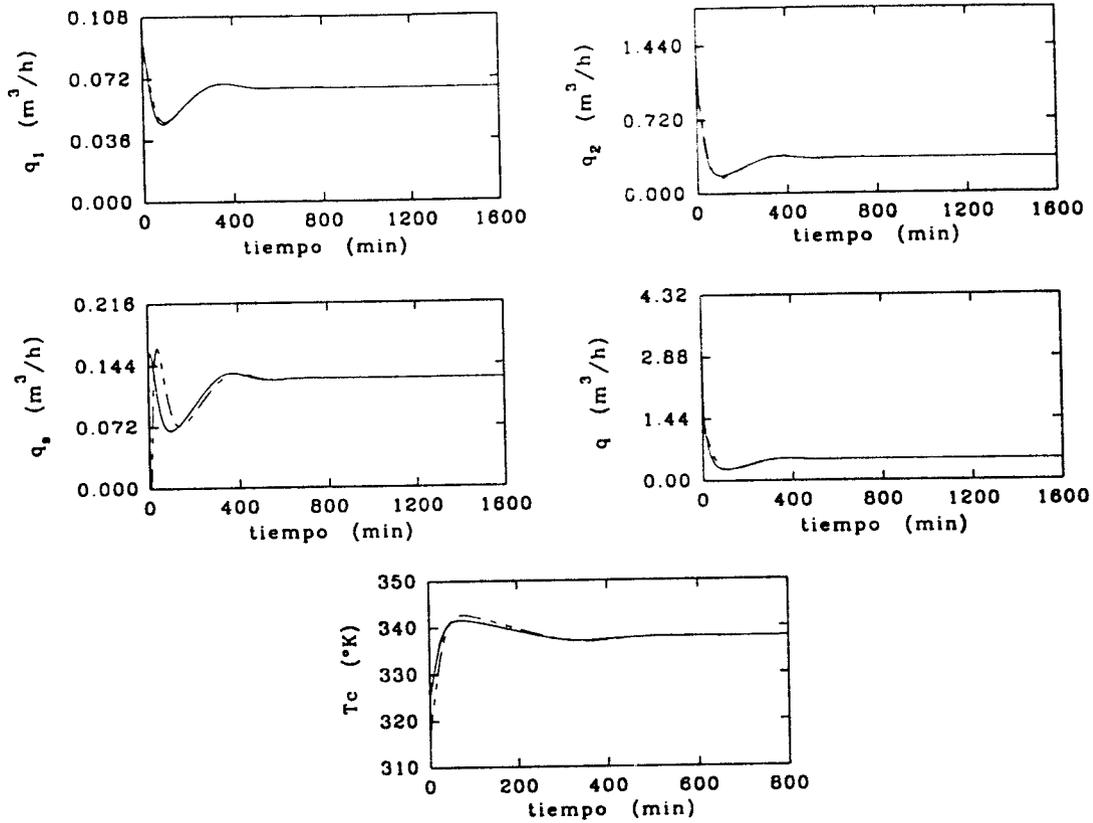


FIGURA 5.2 ACCIONES DE CONTROL.

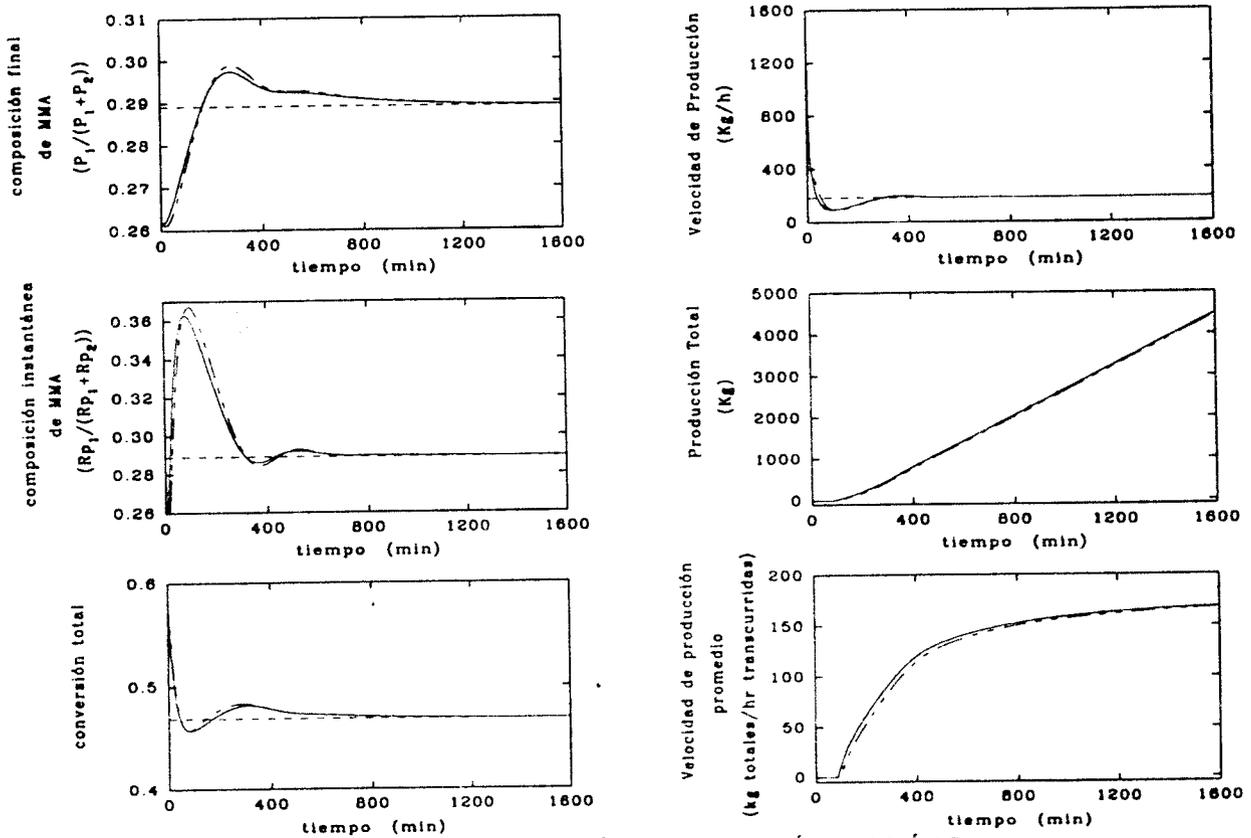
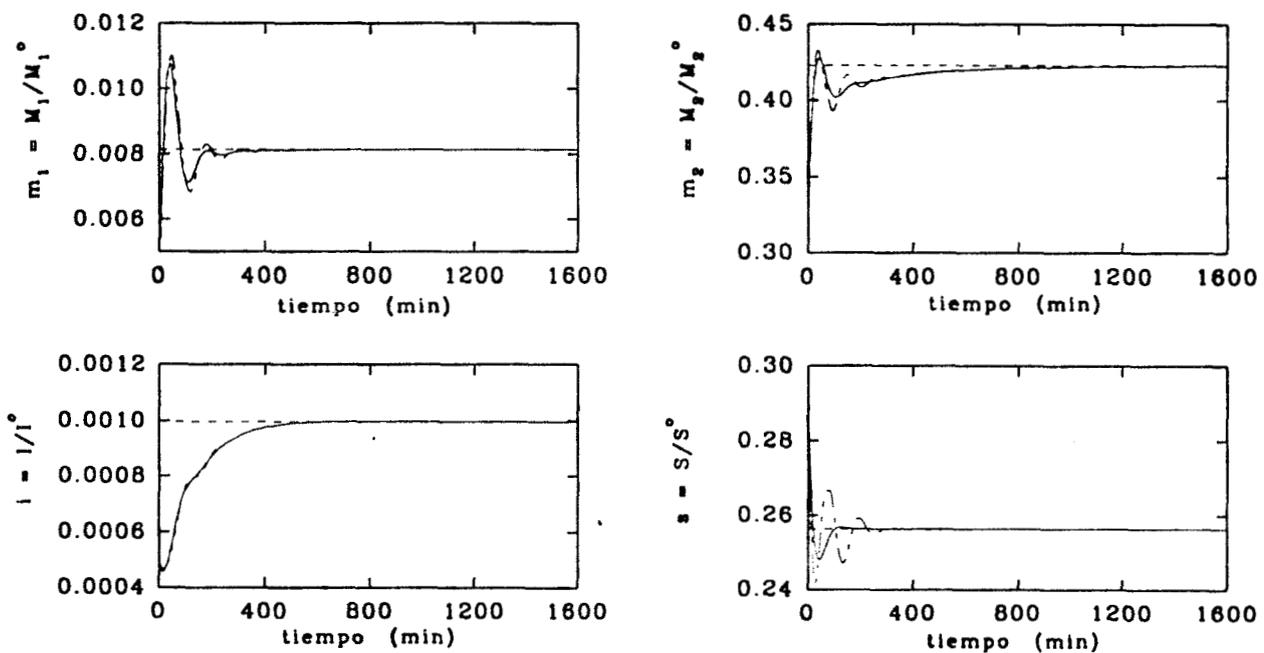


FIGURA 5.3 COMPOSICIÓN Y PRODUCCIÓN. ACCIÓN P.

EFECTO DE LA ACCIÓN PI

- Al introducir el modo integral la velocidad de respuesta se acelera radicalmente, ya que el tiempo de asentamiento de las salidas es el deseado en la sintonización (125 min, ver figura 5.4) no lográndose para el control con solo acción proporcional. Además muestra otra característica importante, el comportamiento de los estados es muy similar al del control con retroalimentación de estados en cuanto a tiempos de asentamiento y dinámica con ligeras oscilaciones. Y las composiciones y la producción de copolímero también se ven mejoradas por el efecto de la acción integral, figura 5.6.
- En este caso las acciones de control son un poco bruscas, fig. 5.5, ya que en los primeros 50 minutos el control pide que los flujos de monómero 2, solvente y flujo de salida sean casi cero, lo cual no sucedió con la situación anterior de solo incluir acción P. Siendo este período de saturación relativamente corto ya que se estabilizan los flujos rápidamente en casi 200 min. equivalente a un tiempo de residencia. Además también ocurre el mismo comportamiento del flujo del solvente comparado a cuando solo se incluye modo P, para MEMS al inicio el flujo es ligeramente mayor al de la condición nominal y para UEUS el flujo inicial es cero, siendo para este caso (acciones PI) el flujo que más se satura y oscila.
- Sin embargo en la industria el interés es la composición, conversión y producción, las cuales son estabilizadas en la condición nominal en tiempos iguales a los tiempos de asentamiento del control con retroalimentación de estados, mostrando así que el implementar el control linealizado MEMS o UEUS da un buen desempeño con la ventaja que solo está basado en las mediciones de las salidas.



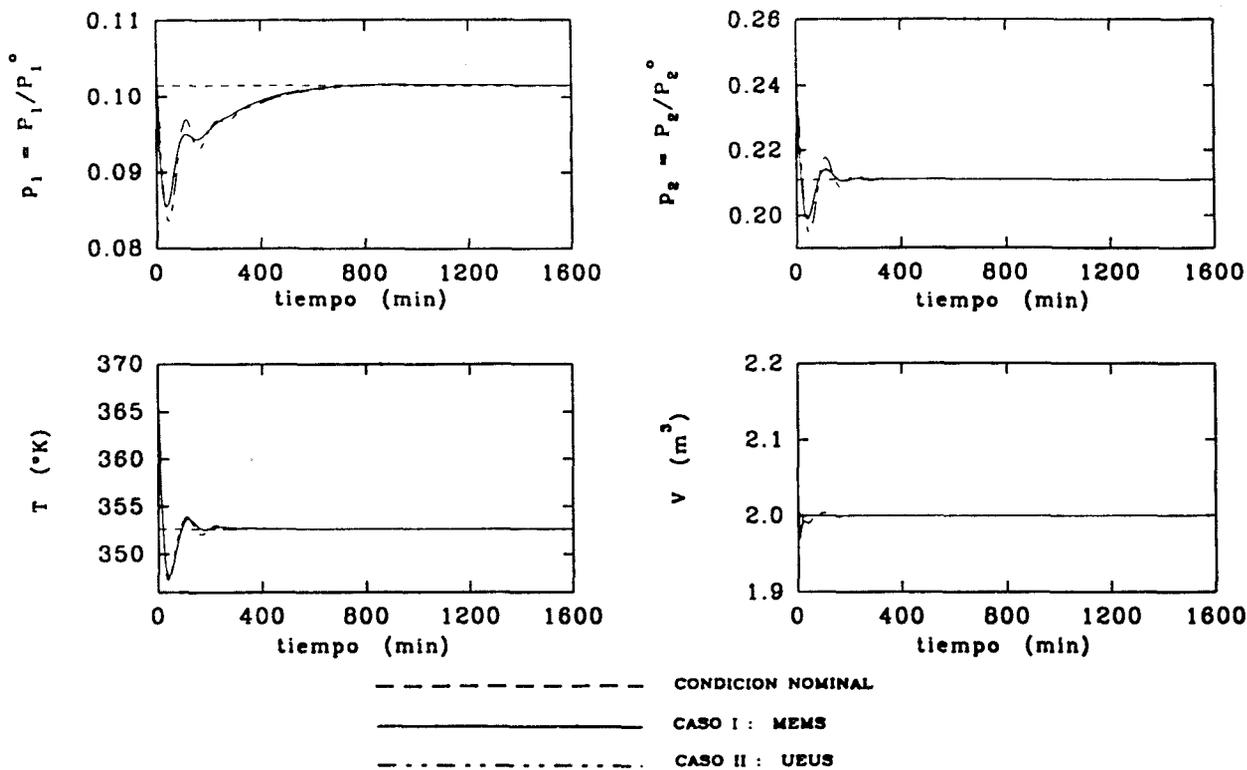


FIGURA 5.4 COMPORTAMIENTO DE LOS ESTADOS DEL REACTOR. ACCIÓN PI.

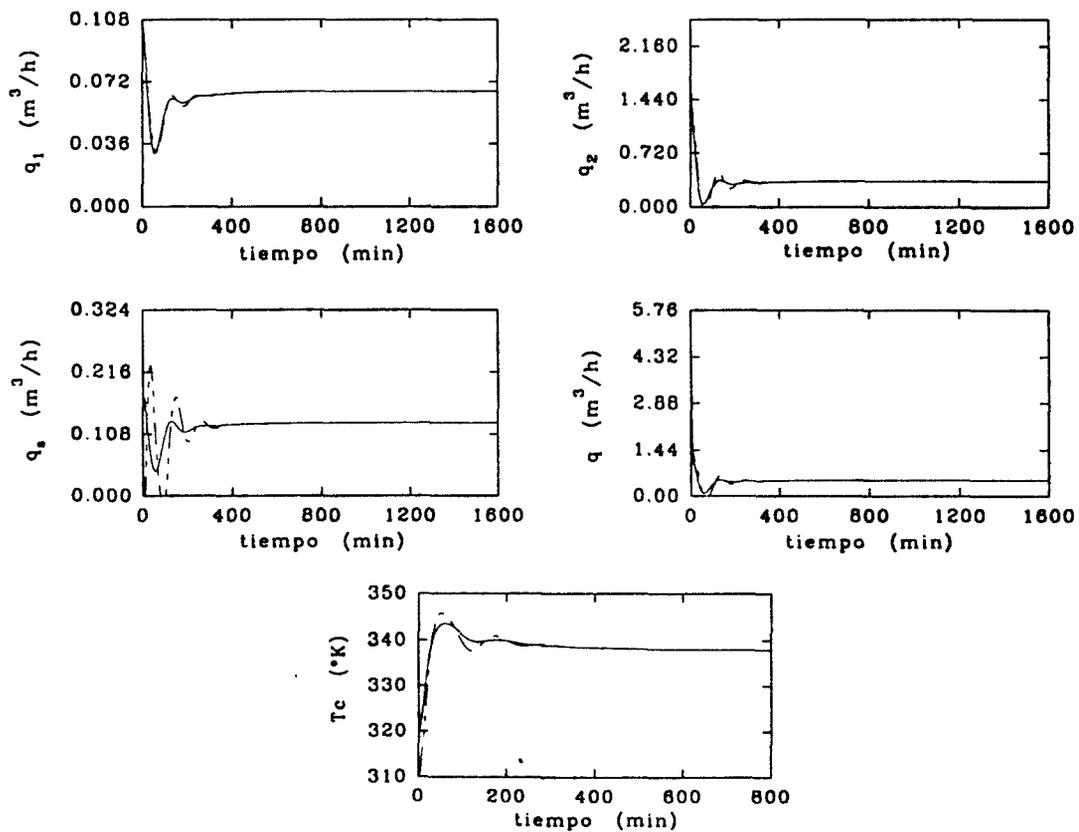


FIGURA 5.5 ACCIONES DE CONTROL.

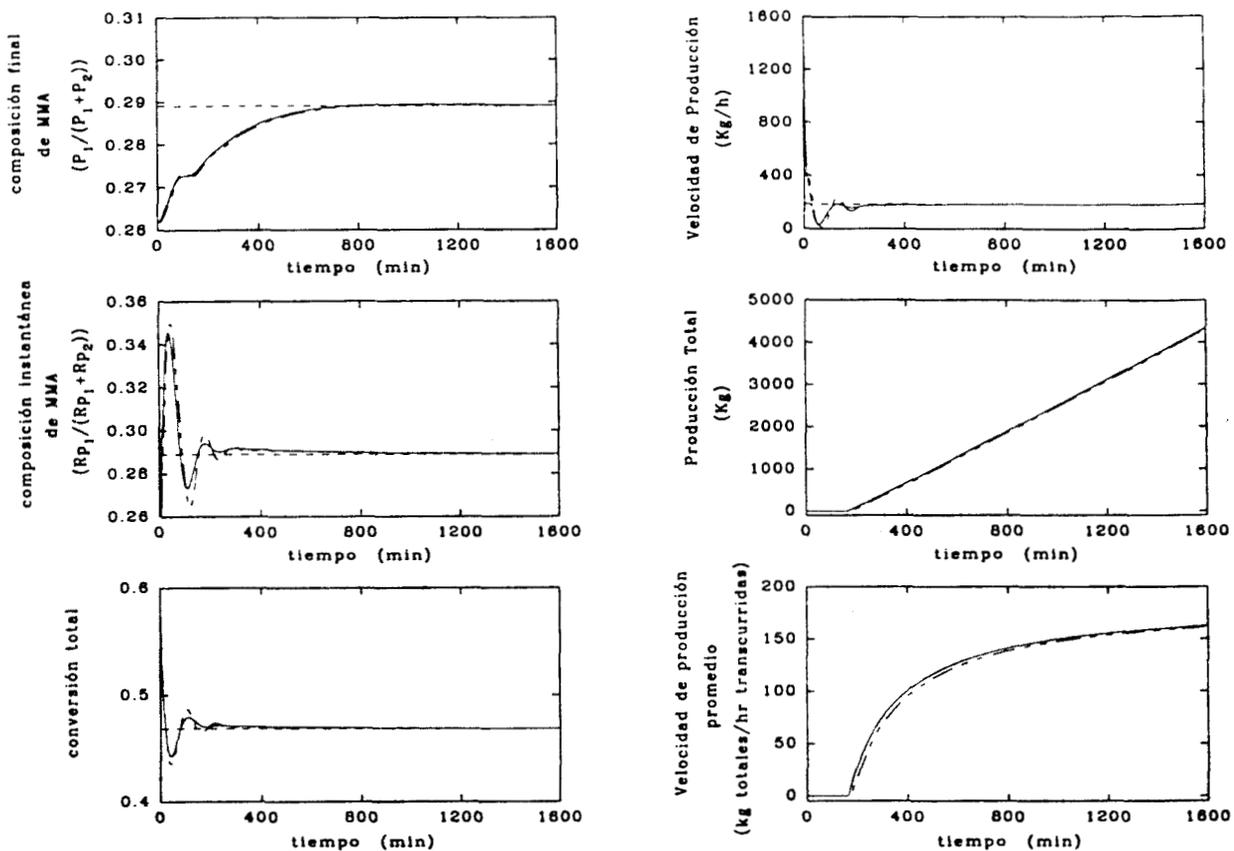
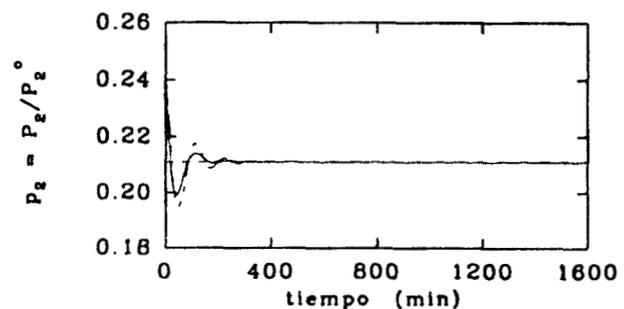
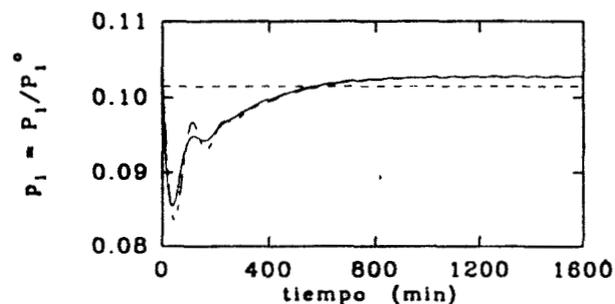
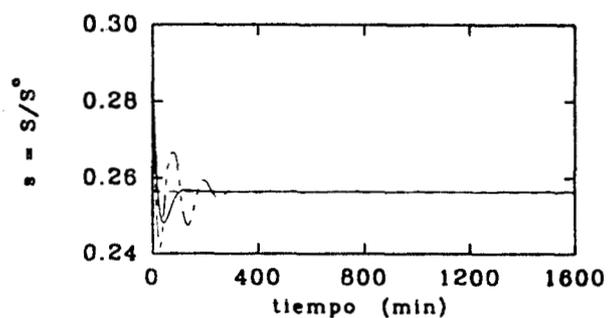
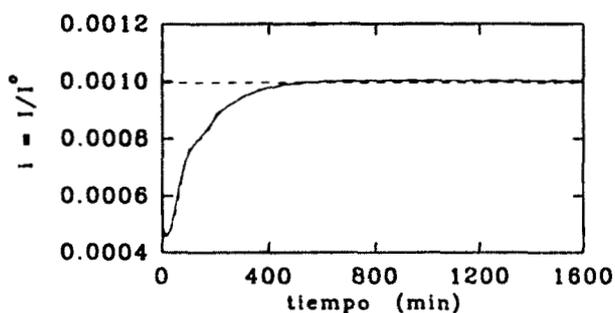
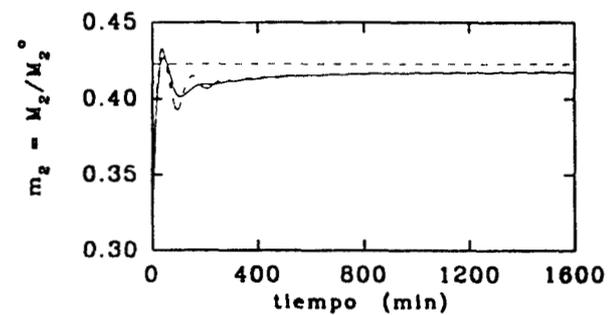
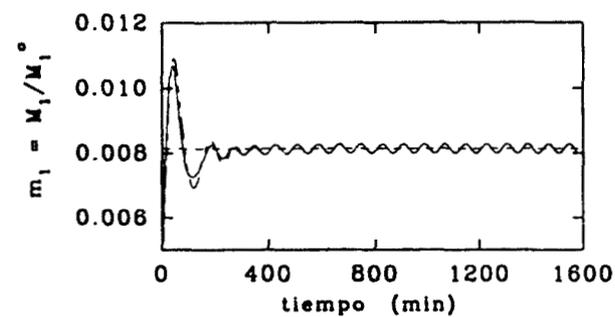


FIGURA 5.6 COMPOSICIÓN Y PRODUCCIÓN. ACCIÓN PI.

RECHAZO ANTE PERTURBACIONES

- Aquí se considera el caso de incluir acciones PI y una perturbación conocida en la concentración de alimentación del monómero 1: $m_{10} = 0.975 + 0.025\text{sen}(\pi t / 40)$ (fig. 4.12).
- Como se mencionó en el caso de incluir acciones PI, la acción integral hace que la respuesta de los estados del reactor sea más rápida y además el comportamiento de éstos sea semejante al de control con estados retroalimentados. Al introducir una perturbación en la concentración del monómero 1 de alimentación se observa que el control actúa rechazando esta perturbación, ya que el comportamiento de los estados no es afectado exceptuando la concentración de monómero 1 y su flujo de alimentación que se mantienen oscilando alrededor de la condición nominal (fig. 5.7 - 5.9); manteniendo un "offset" del 2%, pero que realmente no afecta a la composición, conversión y producción que son de interés debido a que las oscilaciones son reflejadas solo en la composición que se encuentra aún bajo la restricción establecida del $\pm 5\%$ sobre la composición final nominal.

- Con lo que respecta a las acciones de control, éstas nuevamente presentan saturaciones al inicio (100 min) y además con fluctuaciones en los flujos de monómero 1 y de solvente. Esto porque que la perturbación ocurre en el flujo del monómero 1 y como se vio en las simulaciones anteriores el lazo de control de solvente es el que necesita interacción de otros lazos para evitar este comportamiento.
- Estos resultados muestran que el control linealizado obtenido conserva las características del control con retroalimentación de estados, permitiendo también el rechazo de perturbaciones aún en el caso de UEUS que corresponde al caso extremo porque además de la linealización se han considerado despreciables las interacciones entre lazos que tiene por naturaleza del proceso.



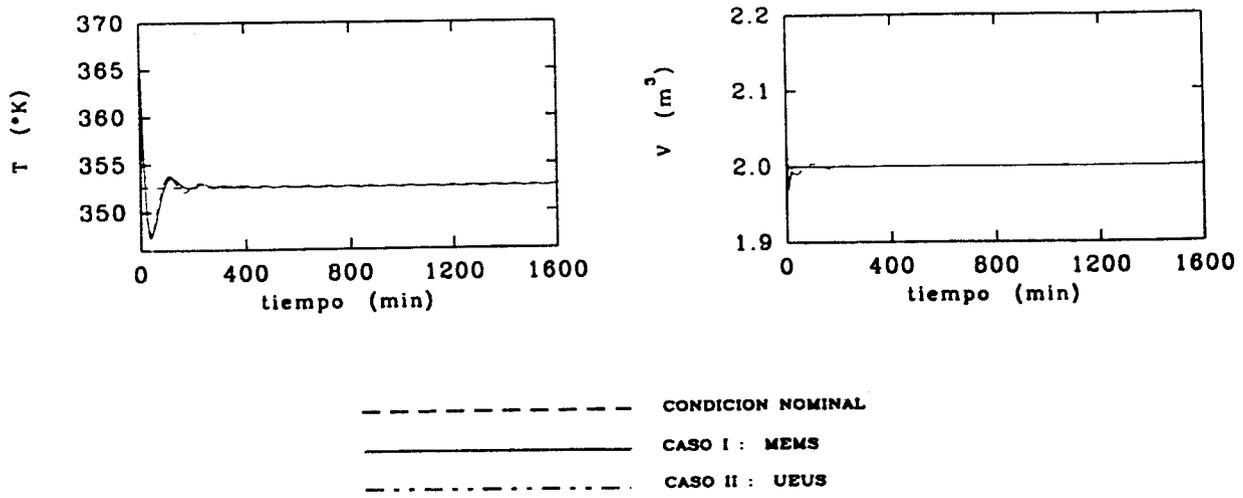


FIGURA 5.7 COMPORTAMIENTO DE LOS ESTADOS DEL REACTOR. ACCIÓN PI, PERTURBACIÓN EN m_{1e} .

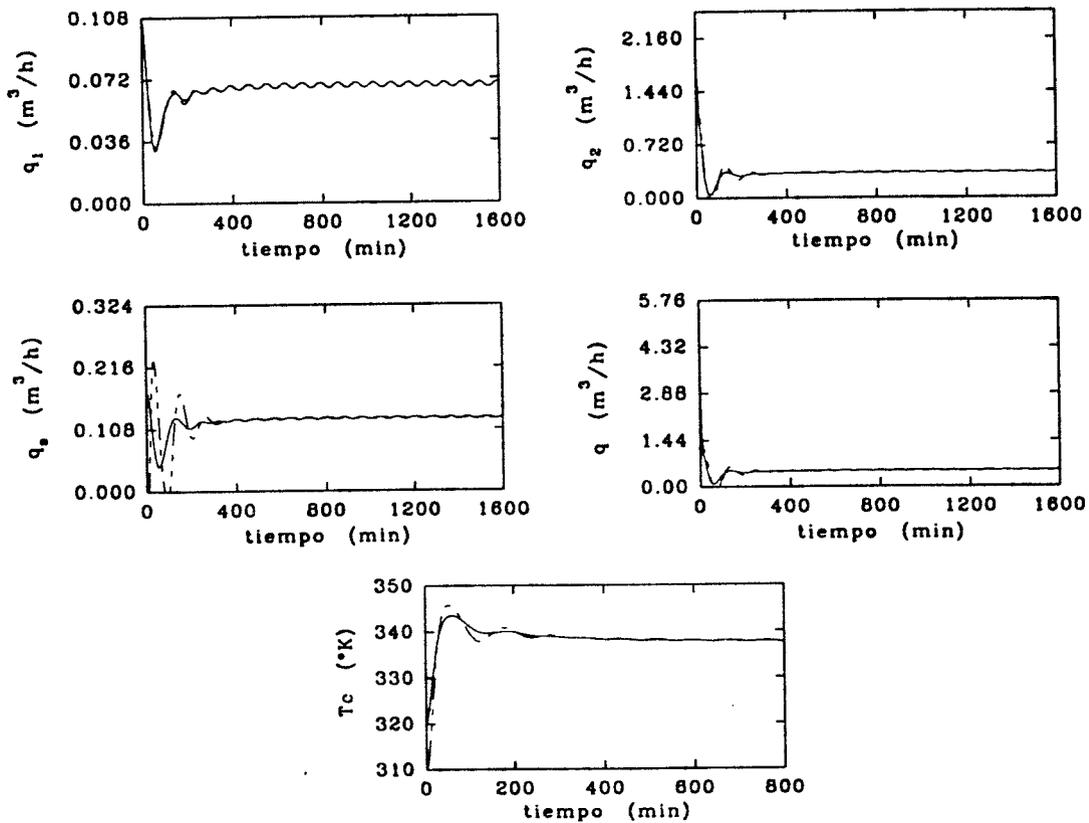


FIGURA 5.8 ACCIONES DE CONTROL.

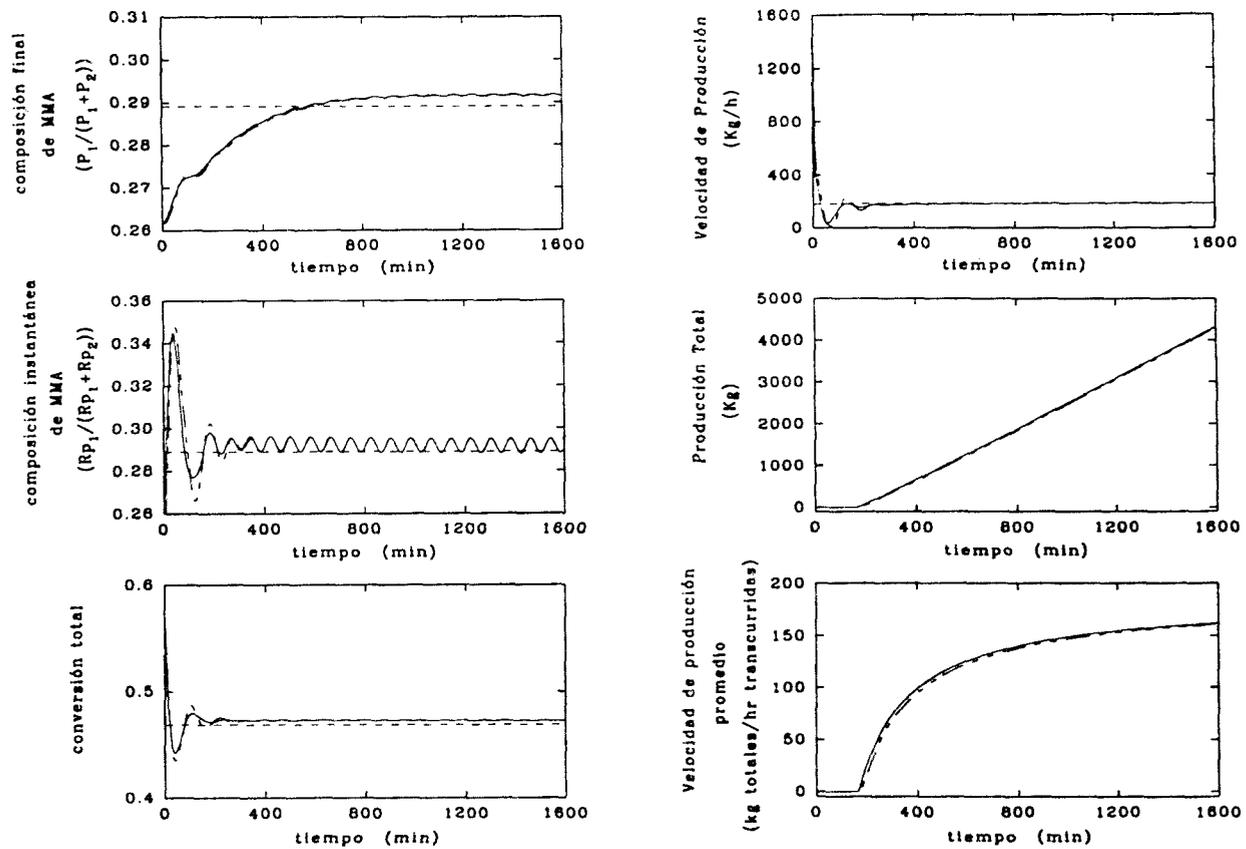


FIGURA 5.9 COMPOSICIÓN Y PRODUCCIÓN. ACCIÓN PI, PERTURBACIÓN EN m_{1e} .

Algunas de las conclusiones generales del diseño e implementaron del controlador lineal multivariable son:

Para existir solución al problema de control con retroalimentación de salidas es necesario que exista solución al problema con retroalimentación de estados. Permitiendo la linealización del control con retroalimentación de estados la implementación de un controlador que se basa únicamente en las mediciones de las salidas, y que se necesita como principal requerimiento para su solución conocer el estado estacionario (condición nominal) para evaluar las ganancias de control, que son función de la matriz de desacoplamiento. Siendo ésta matriz la que contiene el grado de magnitud de las interacciones entre los lazos de control.

Por otra parte, con un control lineal multivariable diseñado es posible tener respuestas un poco más rápidas en los casos de acciones PI empleando ganancias de control más grandes (con tiempos de asentamiento más pequeños, como mínimo de: 45 min para MEMS y 67 min para UEUS). Siendo estos tiempos de asentamiento menores a los posibles con un control con retroalimentación de estados, y esto es debido principalmente a que se pierde cierta parte de la información no lineal del sistema al haber linealizado el control y es "recuperada" a su vez al introducir el modo integral; por tanto las respuestas a lazo cerrado siguen logrando los objetivos de control. Siendo dichas respuestas un poco más oscilatorias que con estados retroalimentados.

En cambio si las ganancias de control son disminuidas (con tiempos de asentamiento mayores del tiempo de residencia, 240 min) de tal forma que el sistema responda de forma más lenta se inestabiliza el sistema, lo cual no sucede con un control con estados retroalimentados, y esto nuevamente es debido a la linealización del control. Por lo tanto la sintonización de los lazos de control es parte fundamental para este control con retroalimentación de salidas, ya que emplear altas ganancias favorecen al proceso mientras que pequeñas ganancias lo inestabilizan por completo.

CAPÍTULO 6

CONCLUSIONES

Se ha estudiado una estrategia para el problema de control de la composición en un reactor de copolimerización aplicando la teoría de control no lineal (control avanzado), en la cual se han determinado las condiciones necesarias para la existencia de solución y se ha enfatizado el estudio del problema de control en general en una interpretación física del proceso.

Para determinar las posibilidades de implementar un control avanzado se concluyó que depende en buena medida de la selección de la configuración de control ya que ésta influye directamente tanto en las condiciones para que exista solución como en la naturaleza de dicha solución. Siendo estas condiciones para la existencia de solución: (a) la matriz de desacoplamiento debe ser invertible, (b) la dinámica interna asociada al sistema debe ser estable.

Con lo que respecta a la dinámica interna se obtuvo que como ésta corresponde a la parte no controlable del sistema entonces la forma de favorecer la respuesta dinámica global del sistema a lazo cerrado consiste en elegir como salidas de control aquellas variables con dinámica más lenta (que por tanto es posible acelerar la dinámica interna) dejando así como dinámica interna las variables con dinámica más rápida. Consecuentemente es posible modificar la dinámica interna mediante la selección de la configuración de control, que influirá en el desempeño del controlador que se diseñe.

Para el problema aplicado al reactor de copolimerización se estudiaron tres casos de configuraciones de control. El caso donde se eligieron como salidas los monómeros convertidos (p_1 , p_2) parecía ser el que diera mejor tiempo de respuesta ya que se controlan directamente las concentraciones de interés, no obstante condujo a un sistema con una matriz de

desacoplamiento no invertible y por tanto no fue posible diseñar un control. Para los otros dos casos de configuraciones si se cumplieron las dos condiciones necesarias (invertibilidad de la matriz de desacoplamiento y estabilidad de la dinámica interna), distinguiéndose por la dinámica interna asociada. En el caso 1 se manipularon los monómeros remanentes (m_1, m_2) implicando quedar dentro de la dinámica interna al monómero convertido más lento, mientras que en el caso 2 se manipuló al monómero remanente más rápido y el monómero convertido más lento (m_1, p_2) dejando como dinámica interna al monómero convertido más rápido; así pues al contener el caso 2 una dinámica interna más rápida da mejores resultados en el desempeño del control, lo cual se comprobó mediante las simulaciones realizadas. Demostrando así que la selección de la configuración de control no es trivial comprendiendo el problema en términos físicos.

Es importante señalar que para controlar la composición y la conversión de copolímero en el producto final no es necesario seleccionar a éstas como salidas de control directamente, ya que en este trabajo se han manipulado las concentraciones de monómeros remanentes y convertidos lográndose estabilizar en la condición nominal tanto para composiciones y conversión como para la producción de polímero (siendo industrialmente éstas de mayor interés que las concentraciones finales).

El primer esquema de control, retroalimentación de estados, mostró un buen desempeño y actuando los lazos en forma sincronizada permitiendo estabilizar en el tiempo deseado. La respuesta dinámica fue de aproximadamente 4 tiempos de residencia para lograr estabilizar en la condición nominal, la cual resulta ser más rápida comparando con controles implementados reportados en literatura. Tal es el caso de Congalidis *et al.* (1989) que diseñó un control lineal convencional (UEUS) obteniendo un tiempo de asentamiento de aproximadamente 18 veces el tiempo de residencia del reactor. Sin embargo una desventaja de la implementación de este control con estados retroalimentados es que se requieren medir todos los estados del reactor (concentraciones de monómeros, polímeros, solvente e iniciador; temperatura y volumen), pero la obtención de las leyes con estados retroalimentados es necesario para la construcción de un control con retroalimentación de salidas.

En el control con retroalimentación de mediciones construido, que corresponde a un control lineal multivariable, se requiere para su implementación conocer: (a) únicamente las mediciones de las salidas, que en este caso son 5 de los estados, (b) la condición nominal para evaluar la matriz de desacoplamiento, lo cual no fue necesario en el control con retroalimentación de estados. Concluyéndose además que para considerar un control MEMS (que corresponde a un control lineal riguroso manteniendo la interacción natural entre lazos de control) o UEUS (el cual es obtenido a partir del control MEMS por medio del desacoplamiento de los lazos) depende en buena medida de la matriz de desacoplamiento, debido a que esta contiene la información sobre las interacciones entre los lazos de control. Obteniéndose que para el caso del reactor de copolimerización es posible pasar de un control lineal MEMS a un control convencional lineal (UEUS) sin que afecte el desempeño global del reactor, ya que con la implementación de este control se obtuvieron tan buenos resultados como el caso de control con retroalimentación de estados. Mostrando así ventajas el implementar prácticamente el control UEUS construido con acción PI que permite estabilizar el sistema rápidamente y tiene el comportamiento de rechazo a perturbaciones, ya que es equivalente a un control lineal convencional usado industrialmente.

Apéndice A

Desarrollo de las Relaciones de Concentración de los Radicales P y Q.

- Aplicación de la hipótesis (iii) de estado estacionario para los radicales primarios, a partir de la ecuación diferencial (11b):

$$\frac{d(RV)}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad 2fk_d I = r_{R1} + r_{R2} \quad (A.1)$$

siendo $r_{R1} = k_{t1}RM_1$, $r_{R2} = k_{t2}RM_2$.

- Sumando las radicales activos que terminan con monómero 1 (a partir de 11e) se obtiene:

$$\frac{d(PV)}{dt} = \frac{d(\sum \sum P_{n,m} V)}{dt} = q_1 P_o - qP + r_{R1} V + k_{p21} M_1 QV - k_{p12} M_2 PV - (k_{t11} P + k_{t12} Q)PV \quad (A.2)$$

de igual forma para los que radicales activos que terminan con monómero 2 (a partir de 11f):

$$\frac{d(QV)}{dt} = \frac{d(\sum \sum Q_{n,m} V)}{dt} = q_2 Q_o - qQ + r_{R2} V + k_{p12} M_2 PV - k_{p21} M_1 QV - (k_{t12} P + k_{t22} Q)QV \quad (A.3)$$

Aplicación de la hipótesis (iii) de estado estacionario para los radicales poliméricos activos P y Q :

$$\begin{aligned} r_{R1} + k_{p21} M_1 Q - k_{p12} M_2 P - (k_{t11} P + k_{t12} Q)P &= 0 \\ r_{R2} + k_{p12} M_2 P - k_{p21} M_1 Q - (k_{t12} P + k_{t22} Q)Q &= 0 \end{aligned} \quad (A.4)$$

sumando ambas expresiones y sustituyendo (A.1)

$$r_{R1} + r_{R2} = (k_{t11} P + k_{t12} Q)P + (k_{t12} P + k_{t22} Q)Q = 2fk_d I \quad (A.5)$$

despejando de ésta última Q se obtiene la siguiente relación

$$Q = \sqrt{\frac{2fk_d I}{k_{t11} \left(\frac{P}{Q}\right)^2 + 2k_{t12} \left(\frac{P}{Q}\right) + k_{t22}}} \quad (A.6)$$

- Aplicando la hipótesis (iv) de estado estacionario para cada una de las especies P_{nm} y Q_{nm} , separadamente. Se tiene que las velocidades de reacción de (5) y (6) deben ser iguales:

$$k_{p21}M_1Q = k_{p12}M_2P \tag{A.7}$$

o bien

$$P = \left(\frac{k_{p21}M_1}{k_{p12}M_2} \right) Q \tag{A.8}$$

sustituyendo (A.8) en (A.6) se obtiene finalmente

$$Q = \frac{2fk_dI}{\sqrt{k_{i11} \left(\frac{k_{p21}M_1}{k_{p12}M_2} \right)^2 + 2k_{i12} \left(\frac{k_{p21}M_1}{k_{p12}M_2} \right) + k_{i22}}} \tag{A.9}$$

Apéndice B

Desarrollo de la Densidad de la Mezcla Polimérica y de su derivada temporal.

En esta sección se desarrolla la expresión para la densidad así como para la variación del volumen respecto al tiempo, de una mezcla polimérica que contiene en forma general "nm" monómeros y "ns" solventes:

- Considerando aditividad de volúmenes específicos:

$$v = \sum_{i=1}^{nm} (w_i^m v_i^m + w_i^p v_i^p) + \sum_{i=1}^{ns} w_i^s v_i^s \quad (B.1.a)$$

ó

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^{nm} \left(\frac{w_i^m}{\rho_i^m} + \frac{w_i^p}{\rho_i^p} \right) + \sum_{i=1}^{ns} \frac{w_i^s}{\rho_i^s} \quad (B.1.b)$$

donde v, v_i^m, v_i^p, v_i^s son los volúmenes específicos de la mezcla polimérica, monómero puro, monómero convertido a polímero y solvente, respectivamente; $\rho, \rho_i^m, \rho_i^p, \rho_i^s$ son las densidades de la mezcla polimérica, monómero puro, monómero convertido a polímero y solvente, respectivamente; w_i^m, w_i^p, w_i^s son las fracciones masa de monómero, monómero convertido a polímero y solvente.

- Las fracciones masa de los componentes están dadas por:

$$w_i^m = \frac{M_i^m}{\sum_{j=1}^{nm} (M_j + P_j) \sigma_j + \sum_{j=1}^{ns} S_j \sigma_j} \quad (B.2.a)$$

$$w_i^p = \frac{P_i^p}{\sum_{j=1}^{nm} (M_j + P_j) \sigma_j + \sum_{j=1}^{ns} S_j \sigma_j} \quad (B.2.b)$$

$$w_i^s = \frac{S_i^s}{\sum_{j=1}^{nm} (M_j + P_j) \sigma_j + \sum_{j=1}^{ns} S_j \sigma_j} \quad (B.2.c)$$

y en términos de las variables adimensionales definidas por (14), la ecuación (B.2) se vuelve:

$$w_i^m = \frac{m_i \rho_i^m}{\sum_{j=1}^{nm} (m_j \rho_j^m + p_j \rho_j^m) + \sum_{j=1}^{ns} s_j \rho_j^m} \quad (\text{B.3.a})$$

$$w_i^p = \frac{p_i \rho_i^p}{\sum_{j=1}^{nm} (m_j \rho_j^p + p_j \rho_j^p) + \sum_{j=1}^{ns} s_j \rho_j^p} \quad (\text{B.3.b})$$

$$w_i^s = \frac{s_i \rho_i^s}{\sum_{j=1}^{nm} (m_j \rho_j^s + p_j \rho_j^s) + \sum_{j=1}^{ns} s_j \rho_j^s} \quad (\text{B.3.c})$$

- Sustituyendo (B.3) en (B.1):

$$v = \frac{1}{\rho} = \frac{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i \rho_i^m + p_i \rho_i^m) + \sum_{i=1}^{ns} s_i \rho_i^m} \quad (\text{B.4.a})$$

o bien

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^{nm} (\rho_i^m m_i + \rho_i^p p_i) + \sum_{i=1}^{ns} \rho_i^s s_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} \equiv \frac{N}{D} \quad (\text{B.4.b})$$

- Derivando la expresión de la densidad respecto del tiempo (B.4):

$$\dot{\rho} = \frac{\dot{N} - \rho \dot{D}}{D} \Rightarrow \frac{\dot{\rho}}{\rho} = \frac{\dot{N}/\rho - \dot{D}}{D} \quad (\text{B.5})$$

siendo $\dot{N} = \sum_{i=1}^{nm} (\rho_i^m \dot{m}_i + \rho_i^p \dot{p}_i) + \sum_{i=1}^{ns} \rho_i^s \dot{s}_i$ (B.6.b)

$$\dot{D} = \sum_{i=1}^{nm} (\dot{m}_i + \dot{p}_i) + \sum_{i=1}^{ns} \dot{s}_i \quad (\text{B.6.c})$$

Sustituyendo (B.6) en (B.5) se obtiene:

$$\frac{\dot{\rho}}{\rho} = - \frac{\sum_{i=1}^{nm} \left[\left(1 - \frac{\rho_i^m}{\rho}\right) \dot{m}_i + \left(1 - \frac{\rho_i^p}{\rho}\right) \dot{p}_i \right] + \sum_{i=1}^{ns} \left(1 - \frac{\rho_i^s}{\rho}\right) \dot{s}_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} \quad (\text{B.7.a})$$

rearrgando ésta última, en términos de los factores de contracción definidos por (15):

$$-\frac{\dot{\rho}}{\rho} = \frac{\sum_{i=1}^{nm} [\epsilon_i^m \dot{m}_i + \epsilon_i^p \dot{p}_i] - \sum_{i=1}^{ns} \epsilon_i^s \dot{s}_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} \tag{B.7.b}$$

- La relación del cambio de densidad con respecto del tiempo (B.7) se encuentra en función de las variaciones con respecto al tiempo de concentración de monómeros, monómeros convertidos a polímeros y solventes. De acuerdo a los balances de materia para cada una de estas especies (13), se pueden generalizar en forma adimensional como:

$$\dot{m}_i = q_i \frac{m_{ie}}{V} - q \frac{m_i}{V} - r_{p_i} - m_i \frac{\dot{V}}{V} \tag{B.8.a}$$

$$\dot{p}_i = q_i \frac{p_{ie}}{V} - q \frac{p_i}{V} + r_{p_i} \frac{\rho_i^m}{\rho_i^p} - p_i \frac{\dot{V}}{V} \tag{B.8.b}$$

$$\dot{s}_i = q_{s_i} \frac{s_{ie}}{V} - q \frac{s_i}{V} - s_i \frac{\dot{V}}{V} \tag{B.8.c}$$

$$\dot{i} = \frac{W_{ie}}{I^p V} - q \frac{i}{V} - r_i - s_i \frac{\dot{V}}{V} \tag{B.8.d}$$

$$\dot{V} = \sum_{i=1}^{nm} q_i \frac{\rho_{ie}}{\rho} + \sum_{i=1}^{ns} q_{s_i} \frac{\rho_i^s}{\rho} - q - V \frac{\dot{\rho}}{\rho} \tag{B.8.e}$$

donde:

$$r_{p_i} = \frac{R_{p_i}}{M_i^0} \quad , \quad r_i = \frac{R_i}{I^p}$$

- Sustituyendo las expresiones de los balances de masa (B.8.a) - (B.8.c) en la expresión de la derivada de la densidad, (B.7.b):

$$-\frac{\dot{\rho}}{\rho} = \frac{\sum_{i=1}^{nm} \left[\epsilon_i^m \left(q_i \frac{m_{ie}}{V} - q \frac{m_i}{V} - r_{p_i} - m_i \frac{\dot{V}}{V} \right) + \epsilon_i^p \left(q_i \frac{p_{ie}}{V} - q \frac{p_i}{V} + r_{p_i} \frac{\rho_i^m}{\rho_i^p} - p_i \frac{\dot{V}}{V} \right) \right] + \sum_{i=1}^{ns} \epsilon_i^s \left(q_{s_i} \frac{s_{ie}}{V} - q \frac{s_i}{V} - s_i \frac{\dot{V}}{V} \right)}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i}$$

rearrgando términos:

$$-\frac{\dot{\rho}}{\rho} = \frac{\sum_{i=1}^{nm} \left[\varepsilon_i^m \left(q_i \frac{m_{ie}}{V} - r_{p_i} \right) + \varepsilon_i^p \left(q_i \frac{p_{ie}}{V} + r_p \frac{\rho_i^p}{\rho_i^m} \right) \right] + \sum_{i=1}^{ns} \varepsilon_i^s \left(q_s \frac{s_{ie}}{V} \right)}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} - \left(\frac{q}{V} + \frac{\dot{V}}{V} \right) \left[\frac{\sum_{i=1}^{nm} (\varepsilon_i^m m_i + \varepsilon_i^p p_i) + \sum_{i=1}^{ns} \varepsilon_i^s s_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} \right] \tag{B.9}$$

y desarrollando el último término del lado derecho de la ec. (B.9)

$$\frac{\sum_{i=1}^{nm} (\varepsilon_i^m m_i + \varepsilon_i^p p_i) + \sum_{i=1}^{ns} \varepsilon_i^s s_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} = \frac{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} - \frac{\sum_{i=1}^{nm} \left(\frac{\rho_i^m}{\rho} m_i + \frac{\rho_i^p}{\rho} p_i \right) + \sum_{i=1}^{ns} \frac{\rho_i^s}{\rho} s_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} = 1 - \frac{\rho}{\rho} = 0$$

entonces, se obtiene finalmente la derivada temporal de la densidad:

$$-\frac{\dot{\rho}}{\rho} = \frac{\sum_{i=1}^{nm} \left[\varepsilon_i^m \left(q_i \frac{m_{ie}}{V} - r_{p_i} \right) + \varepsilon_i^p \left(q_i \frac{p_{ie}}{V} + r_p \frac{\rho_i^p}{\rho_i^m} \right) \right] + \sum_{i=1}^{ns} \varepsilon_i^s \left(q_s \frac{s_{ie}}{V} \right)}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} \tag{B.10}$$

Apéndice C

Desarrollo del Modelo Dinámico de Copolimerización.

Considerando los balances de materia y energía ya desarrollados (13), así como las relaciones de densidad y su derivada temporal (B.4 y B.10) se obtienen las siguientes expresiones:

- Variación del Volumen Respecto al Tiempo:

La variación del volumen respecto al tiempo está dada por la ec. B.8.e.:

$$\dot{V} = \sum_{i=1}^{nm} q_i \frac{\rho_{ie}}{\rho} + \sum_{i=1}^{ns} q_{s_i} \frac{\rho_i^s}{\rho} - q - V \frac{\dot{\rho}}{\rho}$$

donde la densidad de la i -ésima corriente de entrada es calculada mediante la relación de densidad monómero-polímero (Alvarez, *et al.*, 1990):

$$\rho_{ie} = \rho_i^m \left(\frac{1 - \varepsilon_i m_{ie}}{1 - \varepsilon_i} \right) \tag{C.1.a}$$

$$\varepsilon_i = 1 - \frac{\rho_i^m}{\rho_i^p} \tag{C.1.b}$$

siendo ε_i el factor de contracción de volumen del i -ésimo monómero (con respecto a la densidad del polímero). Entonces B.8.e se vuelve

$$\dot{V} = \sum_{i=1}^{nm} q_i \frac{\rho_i^m}{\rho} \left(\frac{1 - \varepsilon_i m_{ie}}{1 - \varepsilon_i} \right) + \sum_{i=1}^{ns} q_{s_i} \frac{\rho_i^s}{\rho} - q - V \frac{\dot{\rho}}{\rho} \tag{C.2}$$

Sustituyendo B.10 en C.2

$$\dot{V} = \sum_{i=1}^{nm} q_i \frac{\rho_i^m}{\rho} \left(\frac{1 - \varepsilon_i m_{ie}}{1 - \varepsilon_i} \right) + \sum_{i=1}^{ns} q_{s_i} \frac{\rho_i^s}{\rho} - q + \frac{\sum_{i=1}^{nm} \left[\varepsilon_i^m (q_i m_{ie} - r_{p_i} V) + \varepsilon_i^p \left(q_i p_{ie} + r_{p_i} \frac{\rho_i^m}{\rho_i^p} V \right) \right] + \sum_{i=1}^{ns} \varepsilon_i^s (q_{s_i} s_{ie})}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i}$$

rearreglando

$$\dot{V} = - \frac{\sum_{i=1}^{nm} \varepsilon_i V r_{p_i}}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} + \sum_{i=1}^{nm} q_i \left[(1 - \varepsilon_i^m) \left(\frac{1 - \varepsilon_i m_{ie}}{1 - \varepsilon_i} \right) - \frac{\varepsilon_i^m m_{ie} + \varepsilon_i^p p_{ie}}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} \right] + \sum_{i=1}^{ns} q_{s_i} \left[1 + \varepsilon_i^s \left(\frac{s_{ie}}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} - 1 \right) \right] - q \quad (C.3)$$

Reagrupando cada termino se obtiene finalmente:

$$\dot{V} = \sum_{i=1}^{nm} r_{p_i} \phi_i V + \sum_{i=1}^{nm} q_i \phi_{i-nm} + \sum_{i=1}^{ns} q_{s_i} \phi_{i-2nm} - q \quad (C.4)$$

donde cada funcionalidad corresponde a

$$\phi_i = - \frac{\varepsilon_i}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i}$$

$$\phi_{i-nm} = (1 - \varepsilon_i^m) \left(\frac{1 - \varepsilon_i m_{ie}}{1 - \varepsilon_i} \right) + \frac{\varepsilon_i^m m_{ie} + \varepsilon_i^p p_{ie}}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i}$$

$$\phi_{i-2nm} = 1 + \varepsilon_i^s \left(\frac{s_{ie}}{\sum_{i=1}^{nm} (m_i + p_i) + \sum_{i=1}^{ns} s_i} - 1 \right)$$

Cabe mencionar que para el caso que no se consideren cambios en la densidad de la mezcla polimérica (es decir, densidad constante), la expresión (C.4) se reduce a la siguiente expresión, ya que para este caso particular $\varepsilon_i^m, \varepsilon_i^p, \varepsilon_i^s = 0$:

$$\dot{V} = \sum_{i=1}^{nm} q_i + \sum_{i=1}^{ns} q_{s_i} - q \quad (C.5)$$

Para el caso particular de 2 monómeros y un solvente se tiene la siguiente expresión:

$$\dot{V} = (r_{p_1} \phi_1 + r_{p_2} \phi_2) V + q_1 \phi_3 + q_2 \phi_4 + q_s \phi_5 - q \quad (C.6)$$

- Variación de las Concentraciones de Monómeros, Solvente e Iniciador Respecto al Tiempo:

Partiendo de la expresión adimensional para la concentración del monómero 1 (B.8.a),

$$\dot{m}_1 = q_1 \frac{m_{1e}}{V} - q \frac{m_1}{V} - r_{p1} - m_1 \frac{\dot{V}}{V}$$

sustituyendo la variación de volumen (C.6) en (B.8.a):

$$\dot{m}_1 = q_1 \left(\frac{m_{1e} - m_1 \phi_3}{V} \right) - q_2 \frac{m_1 \phi_4}{V} - q_1 \frac{m_1 \phi_5}{V} - q \frac{m_1}{V} + q \frac{m_1}{V} - r_{p1} - m_1 (r_{p1} \phi_1 + r_{p2} \phi_2)$$

y finalmente reorganizando

$$\dot{m}_1 = -r_{p1}(1 + m_1 \phi_1) - r_{p2} m_1 \phi_2 + q_1 \left(\frac{m_{1e} - m_1 \phi_3}{V} \right) + q_2 \left(-\frac{m_1 \phi_4}{V} \right) + q_s \left(-\frac{m_1 \phi_5}{V} \right) \quad (C.7.a)$$

De igual forma para las concentraciones de monómero 2, iniciador, solvente, monómero 1 convertido a polímero y monómero 2 convertido a polímero (B.8) se llega a las siguientes expresiones :

$$\dot{m}_2 = -r_{p1} m_2 \phi_1 - r_{p2} (1 + m_2 \phi_2) + q_1 \left(-\frac{m_2 \phi_3}{V} \right) + q_2 \left(\frac{m_{2e} - m_2 \phi_4}{V} \right) + q_s \left(-\frac{m_2 \phi_5}{V} \right) \quad (C.7.b)$$

$$\dot{i} = -(r_{p1} i \phi_1 + r_{p2} i \phi_2) - r_i + \frac{W_{ie}}{V} + q_1 \left(-\frac{i \phi_3}{V} \right) + q_2 \left(-\frac{i \phi_4}{V} \right) + q_s \left(-\frac{i \phi_5}{V} \right) \quad (C.7.c)$$

$$\dot{s} = -r_{p1} s \phi_1 - r_{p2} s \phi_2 + q_1 \left(-\frac{s \phi_3}{V} \right) + q_2 \left(-\frac{s \phi_4}{V} \right) + q_s \left(\frac{s_e - s \phi_5}{V} \right) \quad (C.7.d)$$

$$\dot{p}_1 = r_{p1} \left(\frac{\rho_1^m}{\rho_1^p} - p_1 \phi_1 \right) - r_{p2} p_1 \phi_2 + q_1 \left(\frac{p_{1e} - p_1 \phi_3}{V} \right) + q_2 \left(-\frac{p_1 \phi_4}{V} \right) + q_s \left(-\frac{p_1 \phi_5}{V} \right) \quad (C.7.e)$$

$$\dot{p}_2 = -r_{p1} p_2 \phi_1 - r_2 \left(\frac{\rho_2^p}{\rho_2^p} - p_2 \phi_2 \right) + q_1 \left(-\frac{p_2 \phi_3}{V} \right) + q_2 \left(\frac{p_{2e} - p_2 \phi_4}{V} \right) + q_s \left(-\frac{p_2 \phi_5}{V} \right) \quad (C.7.f)$$

- Variación de la Temperatura del Reactor Respecto al Tiempo:

Tomando en cuenta el balance de energía del reactor (13g), en el que se incluye una chaqueta de enfriamiento para la eliminación del calor generado:

$$\dot{T} = r_T - \gamma(T - T_c) + q_1 \frac{\rho_1 C_{p1} T_{1e}}{V \rho C_p} + q_2 \frac{\rho_2 C_{p2} T_{2e}}{V \rho C_p} + q_s \frac{\rho_s C_{ps} T_{se}}{V \rho C_p} - q \frac{T}{V} - T \left(\frac{\dot{V}}{V} + \frac{\dot{\rho}}{\rho} \right) \quad (C.8)$$

donde el último término puede reemplazarse mediante el balance de masa global (11j) :

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = q_1 \rho_1 + q_2 \rho_2 + q_s \rho_s - q \rho$$

el cual desarrollado y reorganizando:

$$\frac{\dot{V}}{V} + \frac{\dot{\rho}}{\rho} = q_1 \frac{\rho_1}{\rho V} + q_2 \frac{\rho_2}{\rho V} + q_s \frac{\rho_s}{\rho V} - q \frac{1}{V} \quad (C.9)$$

Sustituyendo (C.9) en (C.8) se obtiene la siguiente relación de la variación de la temperatura respecto al tiempo:

$$\dot{T} = r_T - \gamma(T - T_c) + q_1 \left(\frac{C_{p1}}{C_p} T_{1e} - T \right) \frac{\rho_1}{\rho V} + q_2 \left(\frac{C_{p2}}{C_p} T_{2e} - T \right) \frac{\rho_2}{\rho V} + q_s \left(\frac{C_{ps}}{C_p} T_{se} - T \right) \frac{\rho_s}{\rho V} \quad (C.10)$$

Apéndice D

Funcionalidades para el Modelo Dinámico.

$$M_1^o = \frac{\rho_1^m}{\gamma_{c_1}} \quad , \quad M_2^o = \frac{\rho_2^m}{\gamma_{c_2}} \quad , \quad P_1^o = \frac{\rho_1^p}{m_1} \quad , \quad P_2^o = \frac{\rho_2^p}{m_2} \quad , \quad S^o = \frac{\rho_s}{\sigma}$$

$$m_1 = \frac{M_1}{M_1^o} \quad , \quad m_2 = \frac{M_2}{M_2^o} \quad , \quad p_1 = \frac{P_1}{P_1^o} \quad , \quad p_2 = \frac{P_2}{P_2^o} \quad , \quad s = \frac{S}{S^o}$$

$$r_{p1}(m_1, m_2, i, T) = m_1(k_{p11}P + k_{p21}Q)$$

$$r_{p2}(m_1, m_2, i, T) = m_2(k_{p12}P + k_{p22}Q)$$

$$r_i(x_1, x_7) = k_d i$$

$$k_d = k_d^o \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right)$$

$$k_{pij} = k_{pij}^o \exp\left(-\frac{E_{pij}}{RT}\right) \quad i, j=1,2$$

$$k_{ui} = k_{ui}^o \exp\left(-\frac{E_{ui}}{RT}\right) g_{ui} \quad i=1,2$$

$$k_{i12} = \phi(k_{i11}, k_{i22})^{1/2}$$

$$g_{i11} = \exp[-(b_{11} + b_{12}T)x_T]$$

$$g_{i22} = \exp[-(b_{21} + b_{22}T)x_T]$$

$$x_i = \frac{p_1 P_1^o + p_2 P_2^o}{m_1 M_1^o + m_2 M_2^o + p_1 P_1^o + p_2 P_2^o + s S^o}$$

$$P(m_1, m_2, i, T) = \left(\frac{k_{p21} m_1 M_1^o}{k_{p12} m_2 M_2^o} \right) Q$$

$$Q(m_1, m_2, i, T) = \sqrt{\frac{2fk_d j S^o}{k_{i11} \left(\frac{k_{p21} m_1 M_1^o}{k_{p12} m_2 M_2^o} \right)^2 + 2k_{i12} \left(\frac{k_{p21} m_1}{k_{p12} m_2} \right) + k_{i22}}$$

$$\gamma(m_1, m_2, p_1, p_2, s, V) = \frac{UA}{\rho V C_p}$$

$$r_T(m_1, m_2, p_1, p_2, s, T) = \sum_1^2 \sum_1^2 \beta_{ij} r_{pij}$$

$$\beta_{ij}(m_1, m_2, p_1, p_2, s, T_i) = \frac{(-\Delta H_{pij}) M_i^0}{\rho C_p}$$

$$r_{p11}(m_1, m_2, i, T) = k_{p11} P m_1$$

$$r_{p21}(m_1, m_2, i, T) = k_{p21} Q m_1$$

$$r_{p12}(m_1, m_2, i, T) = k_{p12} P m_2$$

$$r_{p22}(m_1, m_2, i, T) = k_{p22} Q m_2$$

$$\rho(m_1, m_2, p_1, p_2, s) = \frac{\rho_1^m m_1 + \rho_2^m m_2 + \rho_1^p p_1 + \rho_2^p p_2 + s \rho_s}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s}$$

$$\phi_1(m_1, m_2, p_1, p_2, s) = -\frac{\varepsilon_1}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s}$$

$$\phi_2(m_1, m_2, p_1, p_2, s) = -\frac{\varepsilon_2}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s}$$

$$\phi_3(m_1, m_2, p_1, p_2, s) = (1 - \varepsilon_1^m) \left(\frac{1 - \varepsilon_1 m_{1e}}{1 - \varepsilon_1} \right) + \frac{\varepsilon_1^m m_{1e} + \varepsilon_1^p p_{1e}}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s}$$

$$\phi_4(m_1, m_2, p_1, p_2, s) = (1 - \varepsilon_2^m) \left(\frac{1 - \varepsilon_2 m_{2e}}{1 - \varepsilon_2} \right) + \frac{\varepsilon_2^m m_{2e} + \varepsilon_2^p p_{2e}}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s}$$

$$\phi_5(m_1, m_2, p_1, p_2, s) = 1 + \varepsilon_s \left(\frac{s_{1e}}{m_1 + m_2 + p_1 + p_2 + s} - 1 \right)$$

$$\varepsilon_i = 1 - \frac{\rho_i^m}{\rho_i^p} \quad i=1,2$$

Apéndice E

Propiedades Fisicoquímicas y Parámetros de Operación.

PROPIEDADES FISICOQUIMICAS

m_1	= 100.11 Kmol/Kg	C_{p1}	= 1.80 KJ/Kg°K
m_2	= 86.09 Kmol/Kg	C_{p2}	= 1.97 KJ/Kg°K
σ	= 88.10 Kmol/Kg	C_{ps}	= 1.91 KJ/Kg°K
ρ_1^m	= 950.0 Kg/m ³	ρ_1^p	= 1170.0 Kg/m ³
ρ_2^m	= 932.0 Kg/m ³	ρ_2^p	= 1190.0 Kg/m ³
ρ_s	= 901.0 Kg/m ³		
$-\Delta H_{11}$	= 56484.0 KJ/Kmol	$-\Delta H_{21}$	= 56484.0 KJ/Kmol
$-\Delta H_{12}$	= 87864.0 KJ/Kmol	$-\Delta H_{22}$	= 87864.0 KJ/Kmol
k	= 0.000193 KJ/m s°K		

PARAMETROS CINETICOS

k_d^o	= 5.95x10 ¹³ m ³ /Kmol s	E_d	= 123846.4 KJ/Kmol
k_{p11}^o	= 7.00x10 ⁶ m ³ /Kmol s	E_{p11}	= 26359.2 KJ/Kmol
k_{p22}^o	= 1.30x10 ⁸ m ³ /Kmol s	E_{p22}	= 26359.2 KJ/Kmol
k_{t11}^o	= 1.76x10 ⁹ m ³ /Kmol s	E_{t11}	= 11715.2 KJ/Kmol
k_{t22}^o	= 2.80x10 ¹⁰ m ³ /Kmol s	E_{t22}	= 11715.2 KJ/Kmol
b_{11}	= 54.5	b_{12}	= -0.13
b_{21}	= 32.2	b_{22}	= -0.08
f	= 0.60		

PARAMETROS DE TRANSFERENCIA DE CALOR

Av	= 4.14x10 ²⁵
Bv	= 9.6763
Cv	= 1.99
$A(T)$	= AA + BA(1-T/Tg) + CA(1-T/Tg) ²
B	= 0.03
AA	= 0.1678
BA	= 0.0000

$CA = -1.23577$
 $T_g = 387.15^\circ K$
 $Ah = 0.54 \quad Re < 400 \quad , \quad Ah = 0.74 \quad Re > 400$
 $Bh = 2/3$
 $Ch = 1/3$
 $Dh = 0.14$

PARAMETROS DE DISEÑO

$V = 2.0 \text{ m}^3$
 $D_t = 1.3 \text{ m}$
 $D_a = 0.7 \text{ m}$
 $L = 1.51 \text{ m}$
 $N = 2.33 \text{ Rev/s (140.0 RPM)}$

CONDICIONES DE OPERACION

$m_{1e} = 1.0$	$M_1^\circ = 9.48960 \text{ kmol/m}^3$
$m_{2e} = 1.0$	$M_2^\circ = 10.82588 \text{ kmol/m}^3$
$p_{1e} = 0.0$	$P_1^\circ = 11.68714 \text{ kmol/m}^3$
$p_{2e} = 0.0$	$P_2^\circ = 13.82274 \text{ kmol/m}^3$
$s_e = 1.0$	$S^\circ = 10.22701 \text{ kmol/m}^3$
$T_{1e} = T_{2e} = T_{se} = 315.0^\circ K$	
$T_c = 338.0^\circ K$	
$q_1 = 1.8423 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$	
$q_2 = 9.5824 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$	
$q_s = 3.5490 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$	
$q = 1.3790 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$	
$W_{1e} = 1.0272 \times 10^{-4} \text{ kmol/s}$	
$\theta_R = 240.0 \text{ min}$	

Nomenclatura

- A Area de transferencia de calor, m^2
- A** Matriz de desacoplamiento.
- Ah Constante de la función del coeficiente de transferencia de calor.
- a_{ij} elementos de la matriz inversa de desacoplamiento.
- A(T) Funcionalidad de la viscosidad.
- Av Constante de la función de viscosidad.
- B Funcionalidad de la viscosidad.
- Bh Constante de la función del coeficiente de transferencia de calor.
- Bv Constante de la función de viscosidad.
- b_{ij} Constantes de la función del efecto gel.
- Ch Constante de la función del coeficiente de transferencia de calor.
- Cp Capacidad calorífica de la mezcla polimérica, $KJ/Kg \text{ } ^\circ K$
- Cp_i Capacidad calorífica del i -ésimo monómero, $KJ/Kg \text{ } ^\circ K$
- Cp_s Capacidad calorífica del i -ésimo solvente, $KJ/Kg \text{ } ^\circ K$
- Cv Constante de la función de viscosidad.
- d** Vector de entradas exogenas.
- D_a Diámetro del agitador, m
- D_t Diámetro del reactor, m
- Dh Constante de la función del coeficiente de transferencia de calor.
- $D_{n,m}$ Concentración del polímero muerto con n unidades de M_1 y m unidades de M_2 , $kmol/m^3$
- E_d Energía de activación de disociación del iniciador, $KJ/Kmol$
- $E_{p_{ij}}$ Energía de activación de propagación, $KJ/Kmol$
- $E_{t_{ij}}$ Energía de activación de terminación, $KJ/Kmol$
- f Factor de eficiencia del iniciador.
- f_i Funcionalidades de la ecuación de estado.
- g_{ij} Funcionalidades de la ecuación de estado.
- $g_{t_{ij}}$ Factor del efecto gel del i -ésimo monómero.
- h_i Coeficiente individual de transferencia de calor interno, KJ/s
- h_o Coeficiente individual de transferencia de calor externo, KJ/s
- $-\Delta H_{p_{ij}}$ Constante de velocidad de propagación, $KJ/Kmol$
- i Concentración adimensional del iniciador.
- I Concentración del iniciador, $kmol/m^3$
- I^o Concentración molar del iniciador en la alimentación, $kmol/m^3$

k	Conductividad térmica, $\text{KJ/m s}^\circ\text{K}$
k_d	Constante de velocidad de disociación del iniciador, s^{-1}
k_d°	Factor de frecuencia de disociación del iniciador, s^{-1}
k_{ij}	Constante de velocidad de formación de radicales primarios, $\text{m}^3/\text{Kmol s}$
k_{pij}	Constante de velocidad de propagación, $\text{m}^3/\text{Kmol s}$
k_{pij}°	Factor de frecuencia de formación de radicales primarios, $\text{m}^3/\text{Kmol s}$
k_{tij}	Constante de velocidad de terminación, $\text{m}^3/\text{Kmol s}$
k_{tij}°	Factor de frecuencia de propagación, $\text{m}^3/\text{Kmol s}$
L	Longitud del reactor (altura), m
m_i	Concentración adimensional del i -ésimo monómero.
M_i	Concentración del i -ésimo monómero, kmol/m^3
M_{ie}	Concentración en la alimentación del i -ésimo monómero, kmol/m^3
M_i°	Concentración molar del i -ésimo monómero puro, kmol/m^3
N	Velocidad de agitación, Rev/s
P	Concentración total de los radicales activos que terminan con un radical M_1 , kmol/m^3
p_i	Concentración adimensional del i -ésimo monómero convertido a polímero.
P_i	Concentración del i -ésimo monómero convertido a polímero, kmol/m^3
P_{ie}	Concentración en la alimentación del i -ésimo monómero convertido a polímero, kmol/m^3
P_i°	Concentración molar del i -ésimo polímero, kmol/m^3
$P_{n,m}$	Concentración de la cadena polimérica activa con n unidades de M_1 y m unidades de M_2 terminando con un radical activo M_1 , kmol/m^3
Pr	Número adimensional de Prandtl.
$Q_{n,m}$	Concentración de la cadena polimérica activa con n unidades de M_1 y m unidades de M_2 terminando con un radical activo M_2 , kmol/m^3
Q	Concentración total de los radicales activos que terminan con un radical M_2 , kmol/m^3
Q^*	Tasa de transferencia de calor, KJ/s
q	Flujo de descarga del reactor, m^3/s
q_i	Flujo de alimentación del i -ésimo monómero, m^3/s
q_{si}	Flujo de alimentación del i -ésimo solvente, m^3/s
R	Concentración de los radicales primarios, kmol/m^3
Re	Número adimensional de Reynolds.
R_e	Concentración en la alimentación de los radicales primarios, kmol/m^3
r_i	Velocidad de reacción del iniciador, s^{-1}
R_i	Velocidad de reacción de polimerización del i -ésimo monómero, $\text{Kmol/m}^3 \text{ s}$
r_{pi}	Velocidad de reacción de polimerización del i -ésimo monómero, s^{-1}
R_{pi}	Velocidad de reacción de polimerización del i -ésimo monómero, $\text{Kmol/m}^3 \text{ s}$

r_{pij}	Velocidades de reacción individuales de propagación, s^{-1}
r_T	Velocidad en el incremento adiabático de temperatura, $^{\circ}K/s$
s_i	Concentración adimensional del i -ésimo solvente.
S_i	Concentración del i -ésimo solvente, $kmol/m^3$
S_{ie}	Concentración en la alimentación del i -ésimo solvente, $kmol/m^3$
t	Tiempo, s
T	Temperatura, $^{\circ}K$
T_{ie}	Temperatura de alimentación del i -ésimo monómero, $^{\circ}K$
T_{se}	Temperatura de alimentación del solvente, $^{\circ}K$
u	Vector de entradas de control.
U	Coficiente de transferencia de calor, $KJ/m^2 s ^{\circ}K$
v	vector de las derivadas de las salidas.
V	Volumen del reactor, m^3
W_{ie}	Flujo másico de alimentación del iniciador, $Kmol/s$
w_i^m	Fracción masa del i -ésimo monómero.
w_i^p	Fracción masa del i -ésimo monómero convertido a polímero.
w_i^s	Fracción masa del i -ésimo solvente.
x	Vector de estados.
x_i	Estados del sistema.
x_t	Conversión total incluyendo el solvente.
y	Vector de las salidas de control.
β_i	Incremento adiabático de temperatura (individual), $^{\circ}K$
ΔT	Gradiente de temperatura, $^{\circ}K$
ϵ_i	Factor de contracción de volumen del i -ésimo monómero (respecto a la densidad del polímero)
ϵ_i^m	Factor de contracción de volumen del i -ésimo monómero (respecto a la densidad de la mezcla)
ϵ_i^p	Factor de contracción de volumen del i -ésimo polímero (respecto a la densidad de la mezcla)
ϵ_i^s	Factor de contracción de volumen del i -ésimo solvente (respecto a la densidad de la mezcla)
ϕ_i	Funciones de contracción de volumen.
ϕ_m	Fracción volumen de solvente incluyendo el monómero remanente.
γ	Velocidad de transferencia de calor entre el reactor y la chaqueta de enfriamiento, s^{-1}

μ	Viscosidad de la mezcla polimérica, Kg/m s
μ_0	Viscosidad de referencia de la mezcla polimérica, Kg/m s
M_i	Peso molecular del i -ésimo monómero, Kg/Kmol
ρ	Densidad de la mezcla polimérica, Kg/m ³
ρ_i^m	Densidad del i -ésimo monómero puro, Kg/m ³
ρ_i^p	Densidad del i -ésimo polímero, Kg/m ³
ρ_i^s	Densidad del i -ésimo solvente, Kg/m ³
ρ_{i*}	Densidad del i -ésimo flujo de alimentación de monómero, Kg/m ³
σ_i	Peso molecular del i -ésimo solvente, Kg/Kmol
v	Volumen específico de la mezcla polimérica.
v_i^m	Volumen específico del i -ésimo monómero.
v_i^p	Volumen específico del i -ésimo polímero.
v_i^s	Volumen específico del i -ésimo solvente.

Bibliografía

- Arzamendi, G., Leiza, J.B., 1991, "Semicontinuos Emulsion Copolymerization of Methyl Methacrylate and Ethyl Acrylate", *J. of Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.*, 29, pag. 1549-1559.
- Alvarez, J., Hernández, E., Sánchez, R., 1990, "Nonlinear Control of a Continuous Stirred Tank Reactor", *Chem. Eng. Sci.*, 44, 5, pag. 1147-1160.
- Baillagou, P.E., Soong, D.S., 1985, "Molecular Weight Distribution of Products of Free Radical Nonisothermal Polymerization with Gel Effect. Simulation for Polymerization of Poly (Methyl Methacrylate)", *Chem. Eng. Science*, 40, 1, pag. 87-104.
- Balaraman, K.S., Kulkarni, B.D., Mashulkar, B.A., Sept. 1983, "Bulk Copolymerization of Styrene-Acrylic Esters: Some Analysis and Design Considerations", *Polymer Eng and Sci.*, 23, 13, pag. 719-725.
- Balaraman, K.S., Kulkarni, B.D., Mashulkar, B.A., 1986, "Nonisothermal Bulk Copolymerization of Styrene and Methyl Methacrylate in a CSTR: Multiplicity and Stability Analysis", *J. of Applied Pol. Sci.*, 31, pag. 885-900.
- Balke, S.T., Hamielec, A.E., 1973, "Bulk Polymerization of Methyl Methacrylate", *J. of Applied Pol. Sci.*, 17, pag. 905-949.
- Bamford, C.H., Tipper, C.F.H., 1976, *Comprehensive Chemical Kinetics, Vol 14A (Free Radical Polimerization)*, Elseviere Scientific Publishing Company.
- Bondy, F., Lippa S., 1983, "Heat Transfer in Agitated Vessels", *Chem. Eng.*, April 4, pag. 62-71.
- Brandrup J., Immergut, E.H., 1975, *Polymer Handbook*, Wiley, Ne. York.
- Campo, P.J., Morari, M., 1994, "Achievable Closed-Loop Properties of Systems Under Decentralized Control: Conditions Involving the Steady-State Gain", *IEEE Trans. Aut. Control*, Mayo, 5, pag. 932-943.
- Congalidis, J.P., Richards, J.R., Ray, W.H., Junio 1989, "Feedforward and Feedback Control of a Solution Copolymerization Reactor", *AIChE Journal*, 35, 6, pag. 891-907.
- Chiu, W.Y., Carratt, G.M. and Soong, D.S., 1983, "A Computer Model for the Gel Effect in Free-Radical Polymerization", *Macromolecules*, 16, pag. 348-357.
- Friis, N., Hamielec, A.E., 1976, *ACS Symp. Series*, 24, pag. 82.

- Guckenheimer J., Holmes, P., 1980, *Dynamical Systems and Bifurcations of Vector Fields*, Springer - Verlag.
- Hamer, J.W., Akramov, T.A., Ray, W.H., 1981, "The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors-II. Nonisothermal Solution Homopolymerization and Copolymerization in a CSTR", *Chem. Eng. Sci.*, 36, 12, pag. 1897-1914.
- Hirschorn, R.M., 1979, "Invertibility of Multivariable Nonlinear Control Systems", *IEEE Transactions on Automatic Control*, Vol. AC-24, 6, December, pag. 855-865.
- Jaisinghani R., Ray, W.H., 1977, "On the dynamic Behavior of a Class of Homogeneous Continuous Stirred Tank Reactors", *Chem. Eng. Sci.*, 31, pag. 205-214.
- Kravaris, C., Soroush, M., 1990, "Synthesis of Multivariable Nonlinear Controllers by Input/Output Linearization", *AIChE Journal*, 36, 2, pag. 249-264.
- Kern, D.Q., 1960, *Process Heat Transfer*, Mc Graw Hill Company.
- Liu S., Amundson N.R., 1961, "Polymerization Reactor Stability", *Zeitschrift Fur Elektrochemie*, 65, 3, pag. 276-282.
- Odian, G., 1981, *Principles of Polymerization*, Wiley Interscience, New York.
- Padilla Lares, S., 1991, "El Problema de Operación y Control en Reactores de Copolimerización Continuos", Tesis de Maestría en Ing. Química, UAM-I, D.F.
- Rodriguez, M., 1993, "Control Basado en Mediciones de un Reactor de Polimerización Mediante el Uso de Observadores", Tesis de Maestría en Curso, UAM-I, D.F.
- Ross, R.T., Laurence, R.L., 1976, "Gel Effect and Free Volume in the Bulk Polymerization of Methyl Methacrylate", *AIChE Symp. Series*, 72, pag. 74
- Sánchez, A., 1989, "Control Regulatorio y Seguimiento de Trayectorias en un Reactor Continuo Agitado de Polimerización", Tesis de Maestría en Ing. Química, UAM-I, D.F.
- Schmidt, A.D., Clinch, A.B., Ray, W.H., 1984, "The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors-III. An Experimental Study of Multiple Steady States in Solutions Polymerization", *Chem. Eng. Sci.*, 39, 3, pag. 419-432.
- Schmidt, A.D., Ray, W.H., 1981, "The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors-I. Isothermal Solution Polymerization in a CSTR", *Chem. Eng. Sci.*, 36, pag. 1401-1410.
- Sharma, D.K., Soane, D.S.(Soong), 1988, "High-Conversion Diffusion-Controlled Copolymerization Kinetics", *Macromolecules*, 21, pag. 700-710.
- Teymour, F., Ray, W.H., 1989, "The Dynamic Behavior of Continuous Solution Polymerization Reactors - IV. Dynamic Stability and Bifurcation Analysis of an Experimental Reactor", *Chem. Eng. Sci.*, 44, 9, pag. 1967-1982.

Teymour, F., Ray, W.H., 1992, "The Dynamic Behavior of Continuous Solution Polymerization Reactors - V. Experimental Investigation of Limit-Cycle Behavior for Vinyl Acetate Polymerization", Chem. Eng. Sci., 47, 15/16, pag. 4121-4132.

Teymour, F., Ray, W.H., 1992, "The Dynamic Behavior of Continuous Solution Polymerization Reactors - VI. Complex Dynamics in Full-Scale Reactors", Chem. Eng. Sci., 47, 15/16, pag. 4133-4140.

Uppal A., Ray, W.H., Poore, A.B., 1976, "The Classification of the dynamic Behavior of Continuous Stirred Tank Reactors. Influence of Reactor Residence Time", Chem. Eng. Sci., 31, pag. 205-214.

Vargas, F., 1991, "Control no Lineal de Pesos Moleculares en un Reactor Continuo Agitado de Polimerización", Tesis de Maestría en Ing. Química, UAM-I, D.F.

Wonham, W., 1985, Linear Multivariable Control. A Geometric Approach, Springer - Verlag