

**DISEÑO DE LA OPERACIÓN Y EL
CONTROL PARA COLUMNAS DE
DESTILACIÓN BINARIAS POR LOTES**

PRESENTA

I.Q. Salvador Aguirre Robles

**PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS
(INGENIERÍA QUÍMICA)**



Posgrado en Ingeniería Química

Título:

**“DISEÑO DE LA OPERACIÓN Y EL CONTROL PARA COLUMNAS
DE DESTILACIÓN BINARIAS POR LOTES”**

Tesis que presenta:

I.Q. Salvador Aguirre Robles

Para obtener el grado de:

Maestro en Ciencias

(Ingeniería Química)

Asesores:

Dr. Jesús Álvarez Calderón

Dr. Eduardo Castellanos Sahagún

Agradecimientos

A DIOS por todo lo que me ha dado.

A mis padres y hermanos por todo el cariño y apoyo que siempre me han brindado.

Al grupo de trabajo de control de procesos que encabeza el Dr. Jesús Álvarez Calderón.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca número 164674.

A la Universidad Autónoma Metropolitana por la beca que me otorgó para concluir la tesis de maestría.

Salvador Aguirre Robles
Diciembre del 2005

RESUMEN

En esta tesis se presenta una estrategia para diseñar conjuntamente la operación y el control de columnas de destilación binarias por lotes. El esquema se basa en la combinación de nociones y herramientas de estimación y control e ingeniería de destilación. La estrategia propuesta se aplica a un ejemplo representativo cuyos problemas de operación, control y estimación han sido estudiados recientemente en la literatura. El diseño propuesto consiste de un controlador de eventos y un controlador de seguimiento ambos basados en mediciones de temperatura. El control de eventos decide el inicio del periodo de extracción y la terminación del lote, y el control de seguimiento regula la salida de interés. El diseño de la estrategia propuesta es sencillo y el desempeño es igual o mejor que el de técnicas reportadas anteriormente.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 INTRODUCCIÓN	1
1.1 Destilación	2
1.1.1 Destilación por lotes	2
1.2 Antecedentes	2
1.2.1 Modelado	3
1.2.2 Optimización	3
1.2.3 Control y estimación	5
1.3 Motivación y contribución	7
1.4 Organización de la tesis	8
CAPÍTULO 2 FORMULACIÓN DEL PROBLEMA	9
2.1 Columna de destilación por lotes	10
2.2 Modelo para diseño de la operación y el control	13
2.3 Formulación del problema	15
2.4 Conclusiones	16
CAPÍTULO 3 INVERSA DINÁMICA	17
3.1 Operación de columnas de destilación por lotes	18
3.2 Inversión Dinámica	18
3.2.1 Elección de la salida a seguir	22
3.2.2 Criterios para cambio de régimen y paro de la operación	26
3.2.3 Planteamiento de la inversa dinámica	26
3.3 Conclusiones	30
CAPÍTULO 4 IMPLEMENTACIÓN DE LA OPERACIÓN NOMINAL	31
4.1 Ejemplo de aplicación	32
4.2 Diseño de la operación nominal	33
4.3 Operación nominal	35
4.4 Conclusiones	43
CAPÍTULO 5 CONTROL	44
5.1 Control por retroalimentación de estados	45
5.2 Estimador de estados	46
5.3 Control accionado por mediciones	48
5.4 Implementación	51
5.5 Conclusiones	68
CAPÍTULO 6 CONCLUSIONES	69
6.1 Conclusiones y aportaciones del trabajo	70
6.2 Trabajo futuro	71
Apéndice A	72
Apéndice B	83
Bibliografía	96

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

En este capítulo se presenta, motiva y justifica el problema a tratar en este trabajo de investigación. Primero se presenta una breve descripción de las columnas de destilación binarias por lotes. Después se resume el estado del arte enfatizando en los aspectos de modelado, optimización, estimación y control. Posteriormente se justifica, motiva y establecen los objetivos del presente trabajo. Finalmente se describe la manera en que está organizada la tesis.

1.1 Destilación

La destilación es el método de separación más utilizado en las industrias química y petrolera. La propiedad que explota en este proceso de separación es la diferencia de volatilidades (índice de separabilidad) entre las diferentes especies que componen la mezcla. La separación de las especies se lleva a cabo mediante la ebullición parcial de una mezcla líquida. Para poner en íntimo contacto las dos fases y se produzca la distribución de componentes entre el vapor y el líquido, se emplean diferentes tipos de dispositivos, como son empaques (en forma aleatoria o estructurados) y platos. Actualmente está resurgiendo el interés en este proceso en su versión por lotes debido a las ventajas que brinda. Las ventajas son su rápida respuesta a las demandas del mercado, la manufactura de productos de alto valor agregado y de alta pureza.

1.1.1 Destilación por lotes

La producción industrial de sustancias involucra recuperación y purificación de productos, subproductos y materia prima que no reacciona. La recuperación y el reciclado de solventes orgánicos es una tarea común en la industria química, que tiene el compromiso de cumplir con las estrictas regulaciones ambientales. Además, potencialmente hay un beneficio económico si se mejora la eficiencia del uso de solventes en la planta. En las industrias farmacéutica y de perfumes, la producción de pequeños volúmenes de productos de alto valor agregado, aunado al frecuente cambio en las tareas de separación, favorece el uso de un equipo flexible. Mientras que en destilación por lotes se puede separar una mezcla de n componentes en una sola columna, en destilación continua se requiere de un tren de $n-1$ columnas para separar la misma mezcla (Walas, 1990). Otras ventajas de la destilación por lotes respecto a la continua, son que se puede manejar un amplio margen de composiciones de carga, número de componentes, y amplio rango de volatilidades relativas. La volatilidad relativa (VR) es el índice de separabilidad de dos (o más) especies, entre mayor sea la VR, más fácil es la separación. Aunque la destilación por lotes típicamente consume más energía que la destilación continua (los costos de energía se recuperan en la separación de productos de alto valor agregado) ésta provee de mayor flexibilidad y requiere menos capital de inversión. Por lo tanto, es importante proponer nuevos métodos para resolver los problemas de operación y control para columnas de destilación por lotes (Muhler y Luyben, 1992).

1.2 Antecedentes

A continuación se reseña brevemente el estado del arte correspondiente a destilación por lotes en lo que concierne al modelado, optimización, estimación y control.

1.2.1 Modelado

La destilación por lotes es inherentemente un proceso transitorio debido a que continuamente se retira materia de la columna y no se alimenta materia como en destilación continua, por lo tanto la cantidad de materia y las composiciones en el evaporador y los platos cambian continuamente. Debido a eso, un modelo matemático del proceso deberá ser dinámico e involucrará ecuaciones diferenciales y algebraicas. Los modelos reportados en la literatura generalmente incluyen balances de materia y energía, termodinámica, hidráulica de plato, etc. La complejidad de los modelos ha incrementado en paralelo con el desarrollo de las computadoras. En la Tabla 1.1 se presentan trabajos representativos referentes al modelado y simulación de columnas de destilación por lotes. Las suposiciones de modelado estándares son: i) cantidad de vapor despreciable en todos los platos; ii) mezclado perfecto y equilibrio entre las fases vapor y líquido en todas las etapas de la columna; iii) presión constante en la columna; iv) condensador total; v) cantidad de líquido retenido en cada plato constante.

Tabla 1.1 Trabajos de modelado y simulación de columnas de destilación por lotes

Autor(es)	Mezcla	Hidráulica de plato
Huckaba y Danley (1960)	Binaria	No
Distefano (1968)	Multicomponente	No
Gallun y Holland (1982)	Multicomponente	Si
Galindez y Fredenslund (1988)	Multicomponente	No
Chiotti e Iribarren (1991)	Binaria	No
Diwekar y Madhavan (1991)	Multicomponente	No

1.2.2 Optimización

En destilación por lotes generalmente se emplean técnicas de optimización para diseño de la operación de la columna. A continuación se presenta brevemente, como se formula un problema de optimización en destilación por lotes (Sørensen, 1994). En la mayoría de los estudios reportados se considera al reflujo como variable manipulada.

1.- Tiempo Mínimo. La política de operación óptima es aquella que produce una cantidad requerida de destilado con pureza especificada en el menor tiempo posible. Significa encontrar la política óptima del reflujo en función del tiempo $R(t)$, tal que minimice el tiempo de duración del lote (t_f), sujeto a (restricciones) que la composición y la cantidad de destilado cumplan con sus especificaciones.

2.- Destilado Máximo. La política de operación óptima es la que produce la máxima cantidad de destilado, con pureza especificada en un tiempo de duración fijo. Lo cual equivale a encontrar la evolución del reflujo como función del tiempo $R(t)$ que maximice la cantidad de destilado, sujeto a (restricciones) que la composición de destilado y el tiempo total de operación cumplan con sus especificaciones dadas *a priori*.

3.- Utilidad Máxima (\$). La política de operación óptima se diseña con base en la optimización de algún criterio económico. Es decir, consiste encontrar la óptima evolución del reflujo $R(t)$, tal que se maximice alguna función objetivo de utilidad dada *a priori*, sujeto a que se cumplan las especificaciones de la composición y cantidad de destilado.

En la mayoría de los trabajos de optimización en destilación por lotes, diseñan una trayectoria óptima para alguna variable, típicamente el reflujo (o la relación de reflujo) que posteriormente implementan a lazo abierto mediante algún esquema de control (Macchietto y Mujtaba, 1992). Lo que implica que no hay corrección por retroalimentación si la salida a regular diverge de su trayectoria deseada. Otra desventaja de las técnicas de optimización, es que la operación óptima se diseña con base en una composición de alimentación nominal, y en el escenario industrial hay mucha variabilidad en la pureza de los lotes que se tengan que separar. Recientemente Barolo y Dal Cengio, (2001) reportaron una estrategia de optimización en línea para columnas de destilación por lotes. Su estrategia contempla tres pasos, primero calculan (fuera de línea) la trayectoria óptima del reflujo para varias composiciones de alimentación. Después (segundo paso) desarrollan una correlación entre la trayectoria óptima del reflujo y el perfil de composiciones en la columna. Finalmente (tercer paso) durante el periodo de arranque de la columna, detectan el perfil de composiciones y calculan la tasa de reflujo óptima para ser implementada en línea. La desventaja de la esta estrategia es que el procedimiento es muy laborioso ya que la optimización (fuera de línea) se tiene que repetir varias veces para abarcar un amplio margen en las composiciones de alimentación, además de que tienen que desarrollar una correlación que sea confiable para calcular la tasa óptima del reflujo.

La optimización de columnas de destilación por lotes presenta las siguientes dificultades teóricas, computacionales y operacionales (Sørensen, 1994):

- Dependencia del tiempo de la operación, así como la presencia de discontinuidades.
- Modelos del proceso complicados ya que incluyen sistemas de ecuaciones diferenciales y algebraicas (EDAs) acopladas.

- Formulación de varios objetivos para mezclas de más de dos componentes.
- El diseño de la operación está desconectado del diseño del control.

En la Tabla 1.2 se indican algunos trabajos de optimización en destilación por lotes en términos de la relación óptima de reflujo. También se incluye el problema resuelto y el tipo de mezcla estudiada. La nomenclatura es: T_m = Tiempo mínimo; D_m = Destilado máximo; U_m = Utilidad máxima.

Tabla 1.2 Optimización de columnas de destilación por lotes

Autor(es)	Problema resuelto	Mezcla
Hansen y Jorgensen (1986)	T_m	Binaria
Christiansen y Jorgensen (1987)	T_m	Binaria
Mujtaba y Macchietto (1992)	T_m	Multicomponente
Farhat et al., (1991)	D_m	Multicomponente
Barolo y Dal Cengio (2001)	D_m	Multicomponente
Kerkhof y Vissers (1978)	U_m	Binaria
Diwekar et al., (1989)	U_m	Multicomponente
Logsdon et al., (1990)	U_m	Multicomponente
Mujtaba y Macchietto (1993)	U_m	Multicomponente
Masaru et al., (2001)	U_m	Multicomponente

1.2.3 Control y estimación

Los primeros estudios en control de composición de columnas de destilación por lotes, se enfocaron en estrategias de control similares a las aplicadas a columnas de destilación continua para control de composición (Block, 1967). Empleando un controlador proporcional integral (PI) de temperatura (CT) para mantener la temperatura de un plato seleccionado en un valor deseado. La desventaja de esta estrategia es que el producto destilado se obtenía a una pureza más elevada que la requerida. Reuter et al., (1989) incorporaron un controlador proporcional integral en su modelo de una columna de destilación por lotes, en la que consideraron reacción en el evaporador. Los autores señalaron que su modelo se puede utilizar para la investigación de estructuras de control con ayuda del análisis de Arreglo de Ganancias Relativas (AGR), los detalles no fueron dados. Quintero-Marmol et al., (1991) estudiaron la aplicación de un Estimador Extendido de Luenberger para inferir composiciones en columnas de destilación por lotes mediante mediciones de temperatura. Su metodología de diseño considera puntos tales como la selección del número y

ubicación de sensores, asignación de polos del observador y sensibilidad del estimador frente a condiciones iniciales. Este método emplea ganancias constantes y su procedimiento de sintonización es complejo.

Bosley y Edgar, (1992) implementaron en una columna de destilación por lotes la trayectoria óptima (determinada fuera de línea), utilizando un controlador basado en teoría del Modelo de Control Predictivo No Lineal (MCPNL). En dicho trabajo se reportaron ganancias dinámicas y tiempos de respuesta de operación, con la relación de reflujo como variable de control. Finefrock et al., (1994) estudiaron el problema de control de composición para una columna de destilación por lotes. El sistema estudiado fue etanol-agua. Dichos autores notaron que si se emplea un controlador PI de composición, la ganancia del controlador debe ser incrementada durante el periodo de operación con el fin de mantener buen desempeño del controlador. Paralelamente, el tiempo integral del controlador debe ser disminuido. Los autores sugieren utilizar un controlador PI de ganancia variable.

Barolo y Berto, (1998) abordaron el control de composición de columnas de destilación por lotes para mezclas binarias y ternarias. Su esquema de control es una estructura modificada del Modelo de Control Interno No Lineal (MCINL) acoplado a un observador de estados extendido de Luenberger (Quintero-Marmol et al., 1991). Los resultados obtenidos muestran una clara ventaja sobre el desempeño de un controlador de composición convencional (PI). Los autores recomiendan utilizar un Filtro Extendido de Kalman (FEK) cuando hay mucho ruido en las mediciones de temperatura. Álvarez-Ramírez et al., (2000) desarrollaron una ley para el control de composición de columnas de destilación por lotes. En dicho trabajo se propone un controlador proporcional integral diferencial (PID) construido dentro de la estructura de control robusto no lineal, y un observador de orden reducido para estimar la composición de destilado y compensar errores de modelado.

Oisiovici y Cruz, (2001) proponen un sistema de control inferencial para columnas de destilación por lotes de alta pureza, implementaron un Filtro Extendido de Kalman para estimación de las composiciones mediante medición de temperaturas. Esta técnica de estimación (estocástica) es muy empleada, sobre todo en ingeniería de reactores de polimerización. López, (2000) lista las siguientes desventajas del FEK: sólo es aplicable a plantas completamente observables, no garantiza estabilidad, carece de criterio de sintonización (ya que el ajuste de sus parámetros se realiza a prueba y error), y el método requiere de $n(n + 1)/2$ ecuaciones diferenciales - tipo Ricatti - adicionales para una planta n-dimensional.

En la Tabla 1.3 se resumen los trabajos sobre control y estimación en destilación por lotes.

Tabla 1.3 Trabajos previos de control y estimación.

Autor(es)	Tipo de controlador	Tipo de estimador
Reuter et al., (1989)	PI	-
Quintero-Marmol et al., (1991)	Reflujo constante	OEL
Bosley y Edgar (1992)	MCPNL	-
Finefrock et al., (1994)	PI	-
Barolo y Berto (1998)	Control no lineal	OEL
Alvarez-Ramirez et al., (2000)	PID	EOR
Oisiovici y Cruz (2001)	Control no lineal	FEK

Resumiendo, los esquemas de optimización presentan las siguientes desventajas: la trayectoria óptima de reflujo se obtiene para una composición inicial nominal (en la práctica industrial no se tiene conocimiento exacto de las composiciones iniciales). El control de seguimiento para la trayectoria óptima de reflujo se implementa a lazo abierto (en la mayoría de los casos), por ende, no existe corrección por retroalimentación cuando la salida regulada diverge de la deseada (Alvarez et al., 2004). Por otro lado, el procedimiento del caso en que optimizan en línea es muy laborioso (Barolo y Dal Cengio, 2001). En el campo del diseño de esquemas de control a lazo cerrado (que consideran retroalimentación) no contemplan como referencia alguna política de operación nominal u óptima. Se puede ver que no existe una conexión clara entre los diseños de la operación y el control en el área de ingeniería de destilación por lotes. Por lo tanto, es un campo de investigación abierto e interesante.

Tomando la plataforma teórica desarrollada previamente para el diseño de la operación y el control para procesos por lotes (Alvarez et al., 2004), en esta tesis enfocamos su aplicación al caso particular de columnas de destilación binarias por lotes.

1.3 Motivación y contribución

Con base en la anterior revisión bibliográfica, se encontró que en destilación por lotes los diseños de la operación y el control se abordan por separado, mostrando las siguientes desventajas; (i) las operaciones óptimas no son robustas ante incertidumbre en la pureza de la carga, y/o sus procedimientos son muy elaborados, (ii) en los diseños de control a lazo cerrado, no consideran como operación de referencia alguna política de operación óptima. Por tanto, es interesante encontrar si una conexión entre ambos diseños puede superar tales desventajas.

Como un paso en la integración de los diseños de operación y control para columnas de destilación binarias por lotes, en esta tesis se presenta una metodología para diseñar simultáneamente el control y la operación. El marco teórico base de este trabajo fue desarrollado por Alvarez et al., (2004) para procesos por lotes en general, y en este trabajo de tesis se aplicará al caso de una columna de destilación binaria por lotes. El diseño del esquema es sistemático y sencillo, tanto en diseño como en la implementación, además es robusto ante errores de modelado, errores de medición e incertidumbre en la pureza de la carga. El diseño se basa esencialmente en la combinación de nociones y herramientas de ingeniería de destilación, teoría de control y estimación, y principios de optimalidad. Lo anterior motiva y justifica el presente trabajo de tesis.

Objetivos planteados:

- (i) Contribuir con una etapa en el desarrollo de estrategias para el diseño simultáneo de la operación y el control para columnas de destilación binarias por lotes.
- (ii) Obtener un esquema cuyo diseño sea sistemático, sencillo y robusto. Con la finalidad de que sea factible su implementación en situaciones reales.
- (iii) Lograr que el desempeño del esquema propuesto en esta tesis, mejore o al menos iguale el de trabajos anteriores.

1.4 Organización de la tesis

A continuación se reseña brevemente como está organizada la tesis. En el capítulo 2 (formulación del problema) se plantea técnicamente el problema que nos ocupa en este trabajo de investigación. Se inicia con la descripción de una columna de destilación binaria por lotes. Posteriormente se presenta la función objetivo (de utilidad), después se presentan dos modelos matemáticos estándares, uno para emular el proceso y el otro para el diseño de la operación y el control. Finalmente se formula técnicamente el problema. En el capítulo 3 (inversa dinámica) se discute la inversa dinámica del proceso como herramienta para el diseño de la operación nominal, la metodología se basa en la desarrollada por Alvarez et al., (2004). En el capítulo 4 (implementación de la operación nominal) se ilustra con un ejemplo representativo, la operación nominal de una columna de destilación binaria por lotes de 8 platos. En el capítulo 5 (control) se presenta el esquema del control accionado por mediciones de temperatura, cuyo objetivo es mantener la tendencia de la operación nominal. Por último en el capítulo 6 (conclusiones) se resumen los resultados y aportes principales de este trabajo y se propone trabajo a futuro.

Capítulo 2

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

En el presente capítulo se formula técnicamente el problema que se aborda en ésta tesis. Se inicia con la descripción de una columna de destilación binaria por lotes. Después se establece la función objetivo de utilidad. Posteriormente se presentan dos modelos matemáticos, el primero para emular el proceso y el segundo para el diseño de la operación y el control. Dado que ambos modelos son estándares, las suposiciones, derivación y termodinámica se presentan en el apéndice A. Para finalizar, se formula técnicamente el problema.

2.1 Columna de destilación por lotes

La destilación es el método de separación más importante en la industria química y petrolera. Las columnas de destilación constituyen una importante fracción del capital de inversión, además de que los costos de operación son frecuentemente una parte significativa en tales industrias (Muhrer y Luyben, 1992). En su versión por lotes es ampliamente usada en las industrias farmacéutica y de perfumes. En tales industrias se producen y separan pequeñas cantidades de productos de alto valor agregado. Algunas de las ventajas que ofrece la destilación por lotes sobre la destilación continua son: puede separar una mezcla de varios componentes en una sola columna y maneja diversos grados de separación (amplio rango de volatilidades y pureza de producto). Aunque la destilación por lotes típicamente consume más energía que la destilación continua, ésta provee de mayor flexibilidad y requiere menos capital de inversión y dado que los costos de inversión no son tan significativos en los productos de alto valor agregado, la destilación por lotes es una operación de separación atractiva para estos productos (Muhrer y Luyben, 1992).

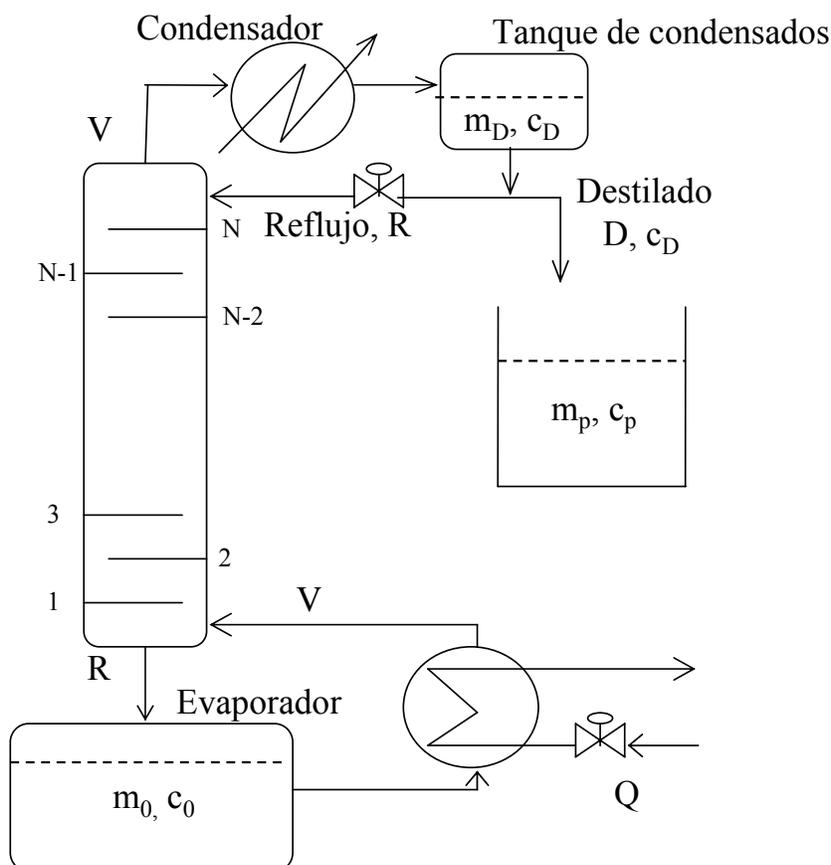


Figura 2.1 Columna de destilación binaria por lotes.

En la Figura 1 se muestra esquemáticamente una columna de destilación binaria por lotes de N platos (numerados de abajo hacia arriba). La operación del proceso típicamente se lleva a cabo de la siguiente manera: (i) se distribuye la mezcla a separar m_L (en moles) en el evaporador, los platos y el tanque de condensados; (ii) se agrega calor en el evaporador, generalmente a la máxima capacidad permisible (V^+ proporcional a Q^+) y se opera a reflujo total (RT) hasta que la composición de destilado $c_D(t)$ alcance una composición de producto prescrita \bar{c}_p ; (iii) se manipula el reflujo (R) para mantener constante $c_D(t)$ (durante el periodo de extracción); (iv) el paro del lote se efectúa ya sea cuando casi no se extrae producto o mediante algún criterio de optimización.

Como en esta tesis abordamos el diseño de la operación de columnas de destilación binarias por lotes, a continuación presentamos la siguiente función objetivo (de utilidad) como criterio económico.

$$J(t) = \frac{C_p m_p(t) - C_L m_L - C_h \lambda_v \int_0^t V(\tau) d\tau - C_c \lambda_R \int_0^t V(\tau) d\tau}{t + t_d} - C_O, \quad (2.1)$$

Donde J es la utilidad (\$/h); C_p , C_L , C_h , C_c y C_O , representan los costos de: producto (\$/mol), mezcla a separar (\$/mol), calentamiento (\$/kJ), enfriamiento (\$/kJ) y renta del equipo (\$/h) respectivamente; t_d es el tiempo muerto entre lotes (debido a carga, descarga y limpieza del equipo); λ_v y λ_R son los calores latentes aproximados de vaporización y condensación en el evaporador y el condensador de la mezcla respectivamente (kJ/mol). Los detalles de la ecuación (2.1) se presentan en el Apéndice A.

La ecuación (2.1) es similar a las empleadas en trabajos previos de optimización (Kerkhof y Vissers, 1978; Mujtaba y Macchietto, 1993; Sørensen et al., 1996; Mujtaba y Macchietto, 1997). Luyben, (1971) propuso el Factor de Capacidad de la Columna (FCC) como una medida de ganancia (o utilidad) y fue empleada por Barolo y Dal Cengio, (2001) en su problema de optimización de columnas de destilación por lotes, en tal trabajo al FCC le dieron el nombre de índice de desempeño (ID).

Si hacemos cero los tres últimos términos del numerador de la ec., (2.1), además si $C_O = 0$, y dividiendo entre C_p a J , se obtiene el FCC de Luyben, (1971) y Luyben, (1988).

Para representar cualquier columna de destilación binaria por lotes se emplea el siguiente modelo matemático (Barolo y Berto, 1998; Luyben, 1988; Barolo y Dal Cengio, 2001).

$$\dot{m}_0 = L_1 - V, \quad m_0(0) = m_1, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.2a)$$

$$\dot{m}_i = L_{i+1} - L_i, \quad m_i(0) = b_\eta, \quad 1 \leq i \leq N-1, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.2b)$$

$$\dot{m}_N = R - L_N, \quad m_N(0) = b_\eta, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.2c)$$

$$\dot{c}_0 = \frac{L_1[c_1 - c_0] + V[c_0 - E(c_0)]}{m_0}, \quad c_0(0) = c_L, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.2d)$$

$$\dot{c}_i = \frac{L_{i+1}[c_{i+1} - c_i] + V[E(c_{i-1}) - E(c_i)]}{m_i}, \quad c_i(0) = c_L, \quad 1 \leq i \leq N-1, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.2e)$$

$$\dot{c}_N = \frac{R[c_D - c_N] + V[E(c_{N-1}) - E(c_N)]}{m_N}, \quad c_N(0) = c_L, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.2f)$$

$$\dot{c}_D = \frac{V[E(c_N) - c_D]}{m_D}, \quad c_D(0) = c_L, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.2g)$$

$$\dot{c}_p = 0, \quad c_p(0) = 0, \quad 0 \leq t \leq t_s, \quad (2.2h)$$

$$\dot{c}_p = \frac{D[c_D - c_p]}{m_p}, \quad c_p(t_s^+) = c_D(t_s^+), \quad t_s < t \leq t_f, \quad (2.2i)$$

$$\dot{m}_p = V - R, \quad m_p(0) = 0, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.7j)$$

$$m_L = m_1 + N \cdot b_\eta + m_D, \quad (2.2k)$$

Donde L_i representa el flujo molar que sale del plato i (mol/h); m_i es el acumulado molar en el plato i ; c_i es la composición líquida en el plato i (todas las composiciones hacen referencia al componente ligero y son adimensionales); $E(c_i)$ es la función del equilibrio vapor-líquido mediante la cual se adquiere la composición (adimensional) del vapor en el plato i ; V es la tasa de flujo de vapor (mol/h); R es la tasa del reflujo (mol/h); m_0 son los moles de mezcla en el evaporador; c_0 es la composición líquida en el evaporador; $E(c_0)$ es la función del equilibrio vapor-líquido con la que se obtiene la composición del vapor en el hervidor; m_D son los moles de mezcla en el tanque de condensados; c_D es la composición de destilado; c_p es la composición en el acumulador; m_p son los moles de producto colectado y $\beta(c_i)$ denota la temperatura de burbuja de la mezcla en la etapa i ($^{\circ}\text{K}$); $t_0 = 0$, t_s y t_f son los tiempo de arranque, cambio de régimen (de reflujo total a periodo de extracción) y paro del lote respectivamente.

Para modelar los flujos de los líquidos internos se emplea una versión linealizada de la ecuación de Francis (Barolo y Berto, 1998; Castellanos-Sahagún y Alvarez, 2004; Skogestad y Morari, 1988).

$$L_i = a_\eta + \frac{(m_i - b_\eta)}{\tau_\eta}, \quad (2.3)$$

Donde a_η es el valor de referencia de la velocidad de flujo interno, m_i y b_η son los acumulados molares actual y de referencia en el plato i , y τ_η es la constante de tiempo hidráulico en los platos.

Las suposiciones del modelo, así como la termodinámica y los detalles se muestran en el apéndice A. El modelo anterior (2.2) se empleará para simular la columna de destilación binaria por lotes.

2.2 Modelo para diseño de la operación y el control

A continuación se presenta el modelo que se empleará para el diseño de la operación y el control, éste es una versión simplificada del modelo (2.2) de la sección anterior, y se obtiene de suponer régimen cuasi-estacionario de la hidráulica de la columna. Tal suposición se fundamenta en el conocimiento (Levy et al., 1969; Skogestad y Morari, 1988; Castellanos-Sahagún et al., 2005) de que la dinámica de acumulados es más rápida (aproximadamente 50 veces en el ejemplo de aplicación que se presentará en el capítulo 4) que la dinámica de composiciones.

La suposición de régimen cuasi-estacionario de la hidráulica implica que:

$$L_1 \approx L_2 \approx \dots \approx L_{N-1} \approx L_N \approx R, \quad (2.4)$$

Significa que los efectos de cualquier cambio que se hagan en el reflujo R (parte superior del equipo), se manifestaran instantáneamente en todos los platos de la columna.

Sustituyendo la ecuación (2.3) en (2.4) se llega a

$$a_\eta + \frac{(m_1 - b_\eta)}{\tau_\eta} \approx a_\eta + \frac{(m_2 - b_\eta)}{\tau_\eta} \approx \dots \approx a_\eta + \frac{(m_{N-1} - b_\eta)}{\tau_\eta} \approx a_\eta + \frac{(m_N - b_\eta)}{\tau_\eta} \approx R, \quad (2.5)$$

Resolviendo para m_i ($1 \leq i \leq N$) y dado que generalmente b_η , τ_η , a_η y R son datos conocidos, se obtiene

$$m_1 \approx m_2 \approx \dots \approx m_{N-1} \approx m_N \approx \eta(R) = (R - a_\eta)\tau_\eta + b_\eta, \quad (2.6)$$

Entonces sustituyendo las ecuaciones (2.4) y (2.6) en (2.2a-c) y (2.2e-g) se obtiene el modelo reducido (versión simplificada del modelo completo), donde N ecuaciones diferenciales (2.2b-c) son reemplazadas por una ecuación algebraica (2.6).

$$\dot{c}_0 = \frac{R[c_1 - c_0] + V[c_0 - E(c_0)]}{m_0}, \quad c_0(0) = c_{L,} \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.7a)$$

$$\dot{c}_i = \frac{R[c_{i+1} - c_i] + V[E(c_{i-1}) - E(c_i)]}{\eta(R)}, \quad c_i(0) = c_{L,} \quad 1 \leq i \leq N-1, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.7b)$$

$$\dot{c}_N = \frac{R[c_D - c_N] + V[E(c_{N-1}) - E(c_N)]}{\eta(R)}, \quad c_N(0) = c_{L,} \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.7c)$$

$$\dot{c}_D = \frac{V[E(c_N) - c_D]}{m_D}, \quad c_D(0) = c_{L,} \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.7d)$$

$$\dot{c}_p = 0, \quad c_p(0) = 0, \quad 0 \leq t \leq t_s, \quad (2.7e)$$

$$\dot{c}_p = \frac{D[c_D - c_p]}{m_p}, \quad c_p(t_s^+) = c_D(t_s^+), \quad t_s < t \leq t_f, \quad (2.7f)$$

$$\dot{m}_0 = R - V, \quad m_0(0) = m_{I,} \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.7g)$$

$$\dot{m}_p = V - R, \quad m_p(0) = 0, \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.7h)$$

$$\dot{J}(t) = \frac{-J + C_p(V - R) - C_h \lambda_V V - C_c \lambda_R V - C_O}{t + t_d}, \quad J_0(0) = -\left(\frac{C_L m_L}{t_d} + C_O\right), \quad 0 \leq t \leq t_f, \quad (2.7i)$$

donde $\eta(R)$ es la función del acumulado molar en los platos en estado cuasi-estacionario.

Se hace notar que el sistema de ecuaciones (2.7a-h) es el modelo reducido (o versión simplificada) del modelo (2.2). Para tratar el problema de optimización incluimos la derivada de la función objetivo J (ec. 2.7i) en el sistema (2.7a-h) con lo que obtenemos el modelo que se empleará par el diseño de la operación y el control de columnas de destilación binarias por lotes.

En forma compacta, el sistema de ecuaciones (2.7) se representa por:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f(x, u, p), & y &= h(x, p), & z_r &= g(x, p), & x(0) &= x_0, & 0 \leq t \leq t_f, & (2.8) \\ x &= (c_0, c_1, \dots, c_N, c_D, c_p, m_0, m_p, J)', & x_0 &= (c_{L,}, c_{L,}, \dots, c_{L,}, c_{L,}, 0, m_{I,}, 0, J_0)' \\ u &= (u_R, u_e), & u_R &= R, & u_e &= f_{te}(t_s, t_f), & \dim(x) &= n, \end{aligned}$$

donde x es el vector de estados, u_R es la variable de control, p es el vector de parámetros del modelo, u_e señala t_s y t_f , y son las mediciones de temperatura, z_r es la composición a regular.

2.3 Formulación del problema

Nuestro problema consiste en diseñar y operar bajo control retroalimentado la operación de una columna de destilación binaria por lotes. La parte del *diseño de la operación nominal* consiste en, dada una función objetivo (J), una especificación de pureza de producto (\bar{c}_p) y una carga máxima de suministro de calor (\bar{V}^+), determinar: (i) la política de reflujo $\bar{R}(t)$, (ii) los tiempos de operación a reflujo total (\bar{t}_s) y (iii) duración del lote (\bar{t}_f). La parte de *diseño de control retroalimentado* consiste en, dada la operación nominal (estados y entradas de control) y la posibilidad de medir temperaturas (en número de platos y su ubicación a ser determinados) diseñar un controlador accionado por mediciones, que mantenga la optimalidad de la operación frente a perturbaciones en la pureza de la carga inicial, errores de modelado y ruido en las mediciones.

2.4 Conclusiones

En este capítulo se formuló técnicamente el problema a resolver. Primero se presentó la función objetivo de utilidad que se empleará como criterio económico en el diseño de la operación nominal. Después, se presentaron dos modelos para fines de simulación. Uno (modelo completo) se utilizará para emular cualquier columna de destilación binaria por lotes, y el otro (modelo para diseño, conformado por el modelo reducido más la versión diferencial de la función objetivo) será para el diseño de la operación y el control. Tales modelos se obtienen a partir de principios básicos de balances de materia y energía, equilibrio termodinámico, hidráulica de plato e ingeniería de destilación. Dado que los modelos presentados son estándares, las suposiciones, derivación, y su termodinámica se presentan en el apéndice A. El capítulo se concentra en la exposición de las ideas principales que nos ayudaron a formular el problema. Finalmente se presentó el planteamiento técnico del problema.

Capítulo 3

INVERSA DINÁMICA

En el presente capítulo se presenta la inversión dinámica como herramienta para el diseño de la operación nominal de columnas de destilación binarias por lotes. La operación de las columnas de destilación por lotes generalmente se lleva a cabo en dos periodos que son, el de arranque (a régimen de reflujo total) y el de extracción o producción. Al inicio del capítulo se describen ambos periodos. En seguida se presentan los conceptos de grado relativo y pasividad, ya que de acuerdo a la teoría de control, los controladores pasivos son sencillos y robustos. Posteriormente identificamos una salida adecuada para fines de seguimiento y se presentan los criterios para determinar los tiempos de cambio de régimen (del periodo de reflujo total al periodo de extracción) y paro del lote. Finalmente se plantea la inversa dinámica para columnas de destilación binarias por lotes.

3.1 Operación de columnas de destilación por lotes

La operación de las columnas de destilación por lotes generalmente se compone de dos periodos. Un periodo de arranque, que típicamente se hace a reflujo total (RT) y un periodo de extracción o producción. La operación a reflujo total tiene por objetivo enriquecer de componente ligero la parte superior de la columna, de tal modo que cuando comience el periodo de producción no se obtenga producto subpurificado. Durante el periodo de producción se puede operar a reflujo constante, reflujo variable o bajo alguna política diseñada mediante optimización. Cuando se opera a reflujo constante la composición de destilado (disminuye) varía con el tiempo. Las políticas de reflujo variable se implementan con el propósito de mantener constante la composición del destilado.

Para pasar del periodo de RT al periodo de producción existen varios criterios, entre los que destacan; cambiar cuando el perfil de composiciones alcanza un estado estacionario (sin extraer material de la columna), o cambiar en el momento que la composición del destilado alcanza una composición prescrita.

En este trabajo de tesis el arranque se lleva a cabo a reflujo total y en el periodo de producción se manipula el reflujo con el propósito de mantener constante la composición del producto colectado. Por tanto, la inversa dinámica que se presenta en este capítulo se plantea para el periodo de producción.

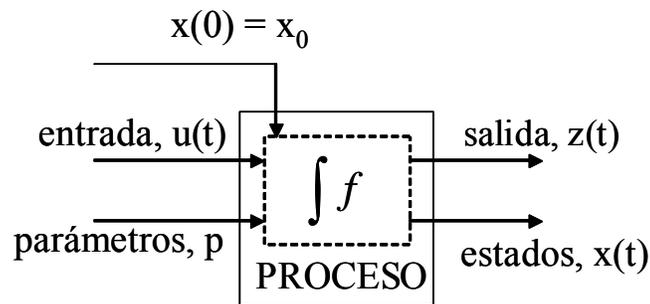
3.2 Inversión Dinámica

En destilación por lotes el diseño de la operación generalmente se hace mediante técnicas de optimización. Las políticas de operación obtenidas mediante optimización se implementan a lazo abierto.

Recientemente en el trabajo de Alvarez et al., (2004) reportaron un procedimiento sistemático para el diseño de la operación nominal de procesos por lotes. El procedimiento está basado en la aplicación recursiva de la inversa dinámica del proceso. Basándonos en el trabajo antes mencionado, en este capítulo se planteará la inversa dinámica de columnas de destilación binarias por lotes para el diseño de la operación nominal.

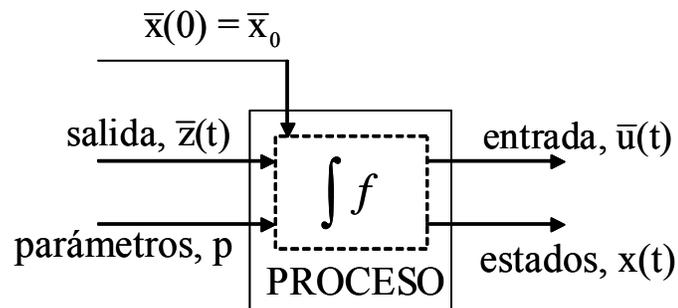
En esta sección se describe en que consiste la inversa dinámica (ID) y se presentan los elementos que la componen. Las definiciones formales se encuentran en la literatura correspondiente, en este trabajo se presenta la idea general de cada herramienta.

En teoría de control generalmente se emplea el término “*dinámica*” para representar un conjunto de ecuaciones (diferenciales y/o algebraicas) matemáticas que producen una salida $z(t)$. La salida $z(t)$ está afectada por un estímulo (entrada u) que actúa sobre el sistema (o proceso). En forma esquemática se puede representar de la siguiente manera



En el esquema anterior se indica con flechas las variables que entran y las que salen del proceso. Las variables que se entran son; las condiciones iniciales (x_0), los parámetros (p) y la trayectoria de la entrada (u). Las variables que salen son los estados (x) y la variable de interés (z). Lo cerca que se obtenga la salida $z(t)$ de la trayectoria deseada $\bar{z}(t)$ depende de la entrada $u(t)$.

Por otro lado, la *inversa dinámica* (ID) consiste en encontrar las condiciones iniciales $\bar{x}(0)$ y la entrada de control $\bar{u}(t)$, tal que aplicadas a la planta se logra que la salida del proceso siga (perfectamente) a la salida de deseada (Slotine y Li, 1991). Esquemáticamente se puede representar de la siguiente manera



La entrada $\bar{u}(t)$ se calcula dando a la planta; la salida de referencia $\bar{z}(t)$, los parámetros del proceso y las condiciones iniciales, produciendo los estados $x(t)$ y la entrada $\bar{u}(t)$. Cuando la entrada $\bar{u}(t)$ se aplica a la planta se logra que la salida del proceso sea exactamente igual a la salida de referencia [$z(t) \equiv \bar{z}(t)$]. La inversa dinámica funciona en el entendido que se tiene modelo perfecto.

Se debe mencionar que la *operación nominal* de la columna de destilación binaria por lotes representa el comportamiento límite alcanzable de la planta bajo cualquier controlador (con modelo perfecto). Quiere decir que la operación nominal es el punto de referencia, que indica si la operación del proceso se está llevando a cabo cerca o lejos del comportamiento límite deseado.

Por lo tanto, con modelo perfecto y conociendo las condiciones iniciales, mediante la ID del proceso se calcula la trayectoria nominal del reflujo [$\bar{u}_R = \bar{R}(t)$], tal que aplicado a la columna de destilación binaria por lotes, se fuerza a que la salida de la planta siga (perfectamente) a la salida deseada $z_r(t) \equiv \bar{z}_r(t) = \bar{c}_p$. En otras palabras, se diseña la operación nominal (ideal) de la columna de destilación binaria por lotes.

Las ventajas de diseñar la operación nominal mediante la ID (Alvarez et al., 2004) son las siguientes: (i) se evita la solución complicada del problema (a veces no resoluble) de optimización, y (ii) se proporciona significado físico a la operación de la columna, ya que como se verá más adelante el controlador resultante es un controlador de Inventarios (Shinskey, 1979; Alvarez et al., 2004; Gonzáles y Alvarez, 2005).

La simplicidad de diseñar la operación mediante la ID tiene un costo. El costo es que durante el procedimiento del diseño en algunos casos se tiene que corregir (rediseñar) la trayectoria de la salida deseada o/y la función objetivo. Por tal motivo es un diseño recursivo.

A continuación se presenta en que consiste la pasividad para sistemas no lineales, ya que de acuerdo a la literatura (Sepulchre et al., 1997), los controladores pasivos son robustos, sencillos y no desperdiciantes (un controlador no desperdiciante es aquel que sólo mantiene las no linealidades estabilizantes). Por tanto, para el diseño de la operación se empleará la versión pasiva de la inversa dinámica de la columna de destilación.

Un sistema no lineal es pasivo cuando su salida es de grado relativo cero o uno y su dinámica cero es estable.

Brevemente se describe qué es grado relativo y dinámica cero, para tal efecto nos hemos apoyamos en Isidori, (1995) y Sepulchre et al., (1997).

Sea (3.1) un sistema no lineal

$$\dot{x} = f(x, u_R, p) \quad x(0) = x_0, \quad \dim(x) = n \quad (3.1a)$$

$$z_r = h(x, p) + j(x, p)u_R, \quad (3.1b)$$

$$x_0 \in X_0, \quad x \in X, \quad p \in P, \quad u_R \in U$$

La entrada u_R , los estados x y los parámetros p toman valores en los conjuntos U , X , y P , los cuales son compactos (acotados y cerrados). Los mapas f y h son diferenciables en sus respectivos dominios.

- (i) El sistema (3.1) es de grado relativo cero en $x = x_0$, si $j(x_0, p) \neq 0$.
- (ii) El sistema (3.1) tiene grado relativo uno en $x = x_0$, si $\frac{\partial \varphi}{\partial u_R} \neq 0$, donde $\varphi = \dot{z}_r = \frac{\partial h}{\partial x} \dot{x}$.

El *grado relativo* (GR) de un sistema también se puede conocer por el número de veces que la salida z_r tiene que ser derivada con respecto al tiempo, para que la entrada u_R aparezca explícitamente (Isidori, 1995; Slotine y Li, 1991). Particularmente, grado relativo 1 significa que en la primera derivada temporal de la salida aparece la variable de control.

Por otro lado, *la dinámica cero* (DC), es la dinámica restringida de los estados del sistema de dimensión $n-1$ (cuando el GR es 1), que resulta cuando el proceso se opera bajo el controlador no lineal que mantiene a la salida z_r en su valor deseado. Se verá mas adelante que la DC de la columna de destilación binaria por lotes, corresponde a la dinámica (de las composiciones, y los moles de mezcla en el evaporador y el acumulador) que se obtiene de operar la columna bajo el control de balance de materia (control de inventarios) que mantiene a la salida z_r en su valor deseado.

La estabilidad de la DC de la columna se garantiza debido al proceso y a las propiedades físicas del sistema de estudio. Las composiciones en las etapas tendrán como límites inferior y

superior los valores de 0 y 1 respectivamente (independientemente de las perturbaciones que pueda sufrir la columna). En caso de tener mezcla azeotrópica, el límite superior correspondería a la composición del azeótropo (c_a) en vez de 1. En el presente trabajo basta aceptar la anterior explicación de estabilidad de la DC de la columna. Su verificación formal es una tarea complicada y queda fuera del alcance del presente trabajo.

A continuación buscaremos una salida adecuada para plantear la inversa dinámica del proceso en su versión pasiva.

3.2.1 Elección de la salida a seguir

Para efectos de robustez, nos damos a la tarea de buscar una salida que genere un sistema pasivo. Después se planteará la inversión dinámica para columnas de destilación binarias por lotes.

Se propone a c_p como salida candidata. El sistema dinámico no lineal con salida $z_r = c_p$ es

$$\dot{x} = f(x, u_R, p), \quad (3.2a)$$

$$z_r = h(x, p) = c_p = \bar{c}_p \quad (3.2b)$$

$$x = (c_0, c_1, \dots, c_N, c_D, c_p, m_0, m_p, J)', \quad u_R = R, \quad (3.2c)$$

para verificar que el sistema (3.2) sea pasivo se debe cumplir que:

- a) el sistema (3.2) sea de GR uno o cero en $c_p = \bar{c}_p$. Es decir, la derivada parcial de φ respecto a u_R tiene que ser diferente de cero, $\frac{\partial \varphi}{\partial u_R} \neq 0$, y
- b) que la dinámica cero del sistema (3.2) sea estable

De acuerdo a la ecuación (3.1b) se puede ver en la ec., (3.2b) que $j(x, p) = 0$, lo que indica que el sistema (3.2) no es de GR cero.

Antes de verificar si el sistema (3.2) es de GR = 1 haremos notar lo siguiente. Como especificación de diseño se establece que durante el periodo de extracción (t_s, t_f] la composición del producto colectado $c_p(t)$ debe ser constante.

esto es

$$c_p(t) = \bar{c}_p, \quad t_s < t \leq t_f \quad (3.3)$$

de donde se obtiene que $\dot{c}(t)_p = \dot{\bar{c}}_p = 0$. Por lo tanto

$$\dot{c}_p(t) = \dot{\bar{c}}_p = \frac{[V - R][c_D - c_p]}{m_p} = 0, \quad (3.4)$$

si sustituimos (3.3) en la ec., (3.4) y resolvemos para c_D tenemos que

$$c_D = \bar{c}_p, \quad (3.5)$$

Ahora para ver si el sistema (3.2) es de GR = 1, en $c_p = \bar{c}_p$, calculamos $\frac{\partial \varphi}{\partial u_R}$, donde

$$\varphi = \dot{z}_r = \frac{\partial \varphi}{\partial u_R} \dot{x} = \frac{[V - R][c_D - c_p]}{m_p}, \quad (3.6)$$

sustituyendo la ecuación (3.5) en la ec., (3.6) se obtiene que $\varphi = 0$, por lo tanto

$$\frac{\partial \varphi}{\partial u_R} = 0, \quad (3.7)$$

La ecuación (3.7) indica que el sistema (3.2) no es de grado relativo uno. No cumpliendo el requisito de grado relativo uno o cero, el sistema (3.2) no es pasivo.

Se propone a c_D como salida. Por tanto $z_r = c_D$ y el sistema no lineal correspondiente es:

$$\dot{x} = f(x, u_R, p), \quad (3.8a)$$

$$z_r = h(x, p) = c_D = \bar{c}_D \quad (3.8b)$$

donde x y u_R están dados por la ecuación (3.2c). Para verificar si el sistema (3.8) es pasivo se debe cumplir que

- a) el sistema (3.8) sea de GR uno o cero en $c_D = \bar{c}_D$. Es decir, identificar si $\frac{\partial \varphi}{\partial u_R} \neq 0$, y
- b) que la dinámica cero del sistema (3.8) sea estable

En la ecuación (3.8b) se aprecia que $j(x, p) = 0$, lo que indica que el sistema (3.8) no es de grado relativo cero. Antes de verificar si el sistema (3.8) es de GR = 1, recordemos de la ec., (3.5) que en $t_s < t \leq t_f$ se tiene que $c_D(t) = \bar{c}_p$, por lo tanto la derivada de $c_D(t)$ es

$$\dot{c}_D(t) = \dot{\bar{c}}_p = \frac{V[E(c_N) - c_D]}{m_D} = 0 \quad (3.9)$$

sustituyendo la ecuación (3.5) en la ec., (3.9) y resolviendo para $E(c_N)$ se llega a

$$E(c_N) = \bar{c}_p, \quad (3.10)$$

Para verificar si el sistema (3.7) es de $GR = 1$, calculamos la derivada parcial de φ respecto a R , donde φ está dada por

$$\varphi = \frac{V[E(c_N) - c_D]}{m_D} \quad (3.11)$$

sustituyendo las ecuaciones (3.5) y (3.10) en la ec., (3.9) se tiene

$$\varphi = \frac{V[\bar{c}_p - \bar{c}_p]}{m_D} = 0 \quad (3.12)$$

por lo tanto $\frac{\partial \varphi}{\partial u_R} = 0$, lo que indica que el sistema (3.8) con salida $z_r = c_p$ tampoco es de $GR = 1$. Al

no ser de grado relativo uno o cero, se concluye que el sistema (3.8) no es pasivo.

Se propone a c_N como salida. Por tanto $z_r = c_N$ cuyo sistema dinámico no lineal es:

$$\dot{x} = f(x, u_R, p), \quad (3.13a)$$

$$z_r = h(x, p) = c_N = \bar{c}_N \quad (3.13b)$$

donde x y u_R están dados por (3.2c). Para saber si el sistema (3.13) es pasivo se debe cumplir que:

- a) el sistema (3.13) sea de GR uno o cero en $c_N = \bar{c}_N$, es decir verificar si $\frac{\partial \varphi}{\partial u_R} \neq 0$, y
- b) que la dinámica cero del sistema (3.13) sea estable

De la ecuación (3.13b) vemos que $j(x, p) = 0$, lo cual señala que el grado relativo del sistema (3.13) no es cero. Resta verificar si el sistema (3.13) es de $GR = 1$, para lo cual procedemos a

calcular $\frac{\partial \varphi}{\partial u_R}$

donde

$$\varphi = \dot{z}_r = \frac{R[c_D - c_N] - V[E(c_{N-1}) - E(c_N)]}{(R - a_\eta)\tau_\eta + b_\eta}, \quad (3.14)$$

sustituyendo las ecuaciones (3.5), (3.10) y $(c_N = \bar{c}_N)$ en la ec., (3.14). Después se calcula $\frac{\partial \phi}{\partial u_R}$, con lo que se llega a

$$\frac{\partial \phi}{\partial u_R} = \frac{[\bar{c}_p - \bar{c}_N][b_\eta - a_\eta \tau_\eta] - V[E(c_{N-1}) - \bar{c}_p] \tau_\eta}{[(R - a_\eta) \tau_\eta + b_\eta]^2}, \quad (3.15)$$

Para que el sistema (3.13) sea de grado relativo 1 tenemos que verificar que la ecuación (3.15) sea diferente de cero. El término $[(R - a_\eta) \tau_\eta + b_\eta]$ es diferente de cero ya que representa el acumulado molar en el plato N y durante la operación de una columna de destilación no se vacían los platos. Estos se vacían (drenando el material residual) después de terminar la separación. Por otro lado, el término $\{[\bar{c}_p - \bar{c}_N][b_\eta - a_\eta \tau_\eta] - V[E(c_{N-1}) - \bar{c}_p] \tau_\eta\}$ es diferente de cero debido a que; (i) los términos V , b_η , a_η y τ_η son constantes conocidas positivas; (ii) durante el periodo de extracción la composición en cada etapa es diferente, particularmente, $\bar{c}_p > \bar{c}_N$, y $E(c_{N-1}) < \bar{c}_p$. Por tanto, concluimos que el sistema no lineal (3.13) con salida $z_r = c_N(t) = \bar{c}_N$ es de $GR = 1$.

Para que el sistema (3.13) sea pasivo, además de tener $GR = 1$ se debe cumplir que su dinámica cero sea estable. Como se dijo anteriormente la DC de la columna es estable debido al proceso y a las propiedades físicas del sistema.

La conclusión de esta sección es la siguiente. Cuando en destilación por lotes, el objetivo es mantener la composición del producto colectado constante $[c_p(t) = \bar{c}_p]$ durante el periodo de producción se debe tomar a c_N como salida a regular, ya que es una forma indirecta de regular a c_p . Esto se muestra si combinando las ecuaciones (3.3), (3.5) y (3.10), con lo que se llega a

$$c_p(t) = c_D(t) = E[c_N(t)] = \bar{c}_p, \quad t_s < t \leq t_f \quad (3.16)$$

y resolviendo para c_N se tiene que

$$c_N = E^{-1}(\bar{c}_p) = \bar{c}_N, \quad (3.17)$$

Por lo tanto, la salida a seguir está dada por

$$z_r = c_N = E^{-1}(\bar{c}_p) = \bar{c}_N, \quad (3.18)$$

3.2.2 Criterios para cambio de régimen y paro de la operación

Los criterios *para determinar* t_s y t_f son: (i) \bar{t}_s se establecerá cuando $c_N(t)$ alcance una composición nominal [dada por, $c_N(t) = E^{-1}(\bar{c}_p)$, donde \bar{c}_p es la composición de producto deseada], y (ii) \bar{t}_f se establecerá cuando la función objetivo J (ec., 2.1) alcance su máximo valor (máxima utilidad).

y quedan representados de la siguiente manera

$$\bar{t}_s = f_{t_s}[c_N(t), \tau_p, | c_N(t) = E^{-1}(\tau_p)], \quad \bar{t}_f = f_{t_f}[J, | \dot{J}(t) = 0] \quad (3.19a,b)$$

Una vez que se ha seleccionado como determinar \bar{t}_s y \bar{t}_f , además de la salida a seguir, proseguimos a plantear la inversión dinámica para columnas de destilación binarias por lotes

3.2.3 Planteamiento de la inversa dinámica

A continuación se plantea la inversión dinámica de columnas de destilación binarias por lotes de acuerdo al procedimiento de Alvarez et al., (2004).

Dada la salida a regular $z_r = \tau_N$, y calculando su derivada se tiene

$$\dot{z}_r = \dot{c}_N = \frac{R[\tau_p - \tau_N] + V[E(c_{N-1}) - E(\tau_N)]}{\eta(R)} = 0, \quad (3.20)$$

en la primera derivada aparece la variable de control R (grado relativo 1). Resolviendo la ecuación (3.20) para R se llega a la siguiente expresión

$$R = \frac{V[E(\tau_N) - E(c_{N-1})]}{\tau_p - \tau_N} = \mu_R(c_{N-1}, \tau_p, \tau_N), \quad (3.21)$$

sustituyendo las ecuaciones (3.10) y (3.18) en la ec., (3.21) se tiene

$$\bar{R}(t) = \frac{V[\bar{c}_p - E(c_{N-1})]}{\tau_p - E^{-1}(\bar{c}_p)} = \bar{\mu}_R(c_{N-1}, \tau_p), \quad (3.22)$$

La teoría de control (Isidori, 1995) no lineal establece que la inversa dinámica (Hirnschorn, 1979) representa el comportamiento límite que se puede alcanzar en una planta con un controlador perfecto. Por otro lado, la ecuación (3.22) coincide con el controlador ideal (feedforward) prealimentado, el cual teóricamente es el controlador perfecto no importando la dificultad del proceso (Shinsky, 1979). El cual mantiene a la composición de salida en su valor nominal ($\bar{z}_r(t) = \bar{c}_N$) balanceando continuamente la materia o la energía entregada al proceso frente a las exigencias de la carga.

La parte dinámica se construye sustituyendo la ecuación (3.22) en el sistema de ecuaciones (2.7a-i), con lo que se llega al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\dot{c}_0 = \frac{V \left\{ \left[\frac{\tau_p - E(c_{N-1})}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right] (c_1 - c_0) + c_0 - E(c_0) \right\}}{m_0}, \quad c_0(\bar{t}_s^+) = \bar{c}_0(\bar{t}_s), \quad (3.23a)$$

$$\dot{c}_i = \frac{V \left\{ \left[\frac{\tau_p - E(c_{N-1})}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right] (c_{i+1} - c_i) + E(c_{i-1}) - E(c_i) \right\}}{\eta(R)}, \quad c_i(\bar{t}_s^+) = \bar{c}_i(\bar{t}_s), \quad 1 \leq i \leq N-2, \quad (3.23b)$$

$$\dot{c}_{N-1} = \frac{V \left\{ \left[\frac{\tau_p - E(c_{N-1})}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right] (\bar{c}_N - c_{N-1}) + E(c_{N-2}) - E(c_{N-1}) \right\}}{\eta(R)}, \quad c_{N-1}(\bar{t}_s^+) = \bar{c}_{N-1}(\bar{t}_s), \quad (3.23c)$$

$$\dot{c}_D = \frac{V[E(\bar{c}_N) - c_D]}{m_D}, \quad c_D(\bar{t}_s^+) = \bar{c}_D(\bar{t}_s), \quad (3.23d)$$

$$\dot{c}_p = V \left\{ 1 + \frac{E(c_{N-1}) - \tau_p}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right\} \frac{[c_D - c_p]}{m_p}, \quad c_p(\bar{t}_s^+) = \bar{c}_D(\bar{t}_s), \quad (3.23e)$$

$$\dot{m}_0 = -V \left\{ 1 + \frac{E(c_{N-1}) - \tau_p}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right\}, \quad m_0(\bar{t}_s^+) = \bar{m}_0(\bar{t}_s), \quad (3.23f)$$

$$\dot{m}_p = V \left\{ 1 + \frac{E(c_{N-1}) - \tau_p}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right\}, \quad m_p(\bar{t}_s^+) = \bar{m}_p(\bar{t}_s^+), \quad (3.23g)$$

$$\dot{\mathbf{j}} = \frac{-\mathbf{J} + \mathbf{V} \left\{ C_p - C_h \lambda_V + \frac{E(c_{N-1}) - \tau_p}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} (C_p + C_c \lambda_R) \right\} - C_O}{t - t_d}, \quad \mathbf{J}_0(\bar{t}_s^+) = \bar{\mathbf{J}}_0(\bar{t}_s), \quad (3.23h)$$

La inversa dinámica [ecs., (3.22) y (3.23)] de la columna destilación binaria por lotes se interpreta así; dados el valor de la salida de interés $z_r = \bar{c}_p$, el flujo de vapor V , los parámetros del modelo y las condiciones iniciales, se puede resolver el sistema de ecuaciones (3.23), con la solución de la ec., (3.23c) y el valor de \bar{c}_p (dato) se puede calcular la trayectoria del reflujo mediante la ecuación (3.22).

En notación compacta se tiene

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{f}[\mathbf{x}, \bar{\boldsymbol{\mu}}, \bar{\mathbf{c}}_p, \mathbf{p}], & \mathbf{x}(\bar{t}_s^+) &= \bar{\mathbf{c}}_{s0}, & (3.24) \\ \mathbf{x} &= (\mathbf{c}_0, \mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_{N-1}, \mathbf{c}_D, \mathbf{c}_p, \mathbf{m}_0, \mathbf{m}_p, \mathbf{J})', & \dim(\mathbf{x}) &= n-1, \\ \bar{\boldsymbol{\mu}} &= (\bar{\boldsymbol{\mu}}_v, \bar{\boldsymbol{\mu}}_e), & \bar{\boldsymbol{\mu}}_v &= V, & \bar{\boldsymbol{\mu}}_e &= \mathbf{f}_{te}(\bar{t}_s, \bar{t}_f) \end{aligned}$$

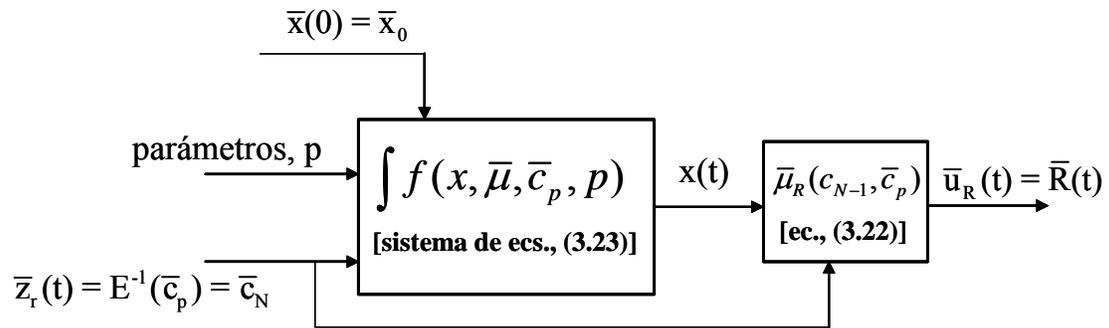
debido a que $z_r(t) = c_N(t) = \bar{c}_N$, la dinámica de $c_N(t)$ es

$$\dot{c}_N(t) = 0, \quad t_s < t \leq t_f, \quad (3.25)$$

el sistema (3.24) está compuesto por las dos siguientes partes:

- (1) *La dinámica cero* (sistema de ecs., 3.23) es la dinámica restringida de dimensión $n-1$ de: (i) las composiciones (en $N-1$ platos de la columna, en el evaporador, el tanque de condensados y en el acumulador), (ii) los moles de mezcla en el evaporador y en el tanque colector del producto, y (iii) la función objetivo. Tales dinámicas resultan cuando la columna se opera en modo de control de balance de materia (BM) (Shinsky, 1979; Gonzáles y Alvarez, 2005) que mantiene la salida $z_r = \bar{c}_n = E^{-1}(\bar{c}_p)$ en su valor nominal.
- (2) *Parte estática* (ec., 3.22) controlador de balance de materia que resulta de resolver para R en el balance dinámico del plato N , con $c_N = \bar{c}_N$ y $\dot{c}_N = 0$.

La inversa dinámica [ecs., (3.22) y (3.23)] se puede representar esquemáticamente como sigue



Es decir, si se preprograma la trayectoria del reflujo $\bar{R}(t)$ a la columna de destilación binaria por lotes con condiciones iniciales nominales $x(0) = \bar{x}_0$, se obtendrá la composición del producto colectado en su valor deseado [$z_r = \bar{c}_n = E^{-1}(\bar{c}_p)$].

3.3 Conclusiones

En el presente capítulo se presentó la inversión dinámica para columnas de destilación binarias por lotes. La inversión dinámica del proceso, es la herramienta que emplearemos para el diseño de la operación nominal del proceso. Se presentó de manera muy general el concepto de pasividad, ya que de acuerdo a la literatura, los controladores pasivos son sencillos, robustos y no desperdiciantes. Posteriormente se concluyó que tomar como salida a regular la composición del producto colectado no produce un controlador pasivo, en su lugar, se determinó a la composición en el plato N como salida a regular. Además se mostró que tomar a c_N como salida a regular, es una forma de regular indirectamente a c_p . Una vez que se identificó la salida adecuada para fines de seguimiento, se discutió la inversa dinámica para columnas de destilación binarias por lotes. La inversión dinámica se compone de una parte dinámica y una parte estática, la parte estática coincidió con la estructura de un controlador ideal (feedforward) prealimentado, el cual es un control de inventarios que realiza la tarea de seguimiento balanceando continuamente la materia o la energía entregada al proceso frente a las exigencias de la carga.

Capítulo 4

IMPLEMENTACIÓN DE LA OPERACIÓN NOMINAL

En este capítulo se presenta la operación nominal de una columna de destilación binaria por lotes cuyos problemas de operación y control han sido estudiados previamente. Al inicio del capítulo se dan las características del ejemplo de aplicación, después se presenta el procedimiento para el diseño de la operación de procesos por lotes. Tal procedimiento ha sido previamente establecido y se basa en la aplicación recursiva de la inversa dinámica del proceso. Finalmente, se presenta la operación nominal del ejemplo de aplicación para un amplio rango de pureza en la carga de la mezcla.

4.1 Ejemplo de aplicación

Para ilustrar el diseño de la operación nominal para columnas de destilación binarias por lotes, se toma un ejemplo representativo que ha sido previamente estudiado por Barolo y Berto, (1998). El sistema a separar es una mezcla binaria de etanol-agua cuyas características se presentan en la siguiente tabla.

Tabla 4.1 Características del sistema de estudio.

Composición de producto (c_p), fracción mol	0.84
Flujo de vapor (V^+), mol/h	5400.0
Acumulado de líquido en el plato (b_η) (en estado estacionario), moles	30.0
Acumulado de líquido en el tanque del condensador (m_D), moles	250.0
Carga total de alimentación (m_i), moles	8000.0
Composición de alimentación (c_i), fracción mol	0.4
Tiempo constante hidráulico de plato (τ_η), h	0.001
Número de platos (N)	8

En la Tabla 4.2 se presentan los valores de las constantes de la función objetivo (los costos del producto, materia prima, calentamiento, enfriamiento y renta del equipo). Estos valores son típicos en la literatura (Sørensen, 1994).

Tabla 4.2 Constantes de la función objetivo.

Costo del producto por mol (C_p), \$/mol	50.0
Costo de la materia prima por mol (C_L), \$/mol	5.0
Costo de calentamiento por unidad de calor (C_h), \$/kJ	2×10^{-6}
Costo de enfriamiento por unidad de calor retirado (C_c), \$/kJ	2×10^{-6}
Costo de operación de la columna por unidad de tiempo (C_o), \$/h	3
Calor latente de vaporización aproximado de la mezcla (λ_v), kJ/mol	40.137
Calor latente de condensación aproximado de la mezcla (λ_r), kJ/mol	38.912
Tiempo muerto entre lotes (t_d), h	0.5

Debido a que los valores de los calores latentes de vaporización del etanol y del agua son similares (véase Tabla A.3), el calor latente de vaporización de la mezcla (λ_v) se aproximó mediante

$$\lambda_v = \lambda_v^{OH}c + \lambda_v^{H_2O}(1-c), \quad (4.1a)$$

De manera similar se aproximó el calor latente de condensación

$$\lambda_R = \lambda_R^{OH}c + \lambda_R^{H_2O}(1-c) \quad (4.1b)$$

Donde λ_V^{OH} y $\lambda_V^{H_2O}$ (λ_R^{OH} y $\lambda_R^{H_2O}$) son los calores latentes de vaporización (condensación) del etanol y agua respectivamente, y c es la composición de etanol. Dado que al inicio de la separación hay 40% de etanol en la mezcla, y como durante el proceso de separación el etanol se va empobreciendo en el evaporador (es casi cero en $t = t_f$), se escogieron valores promedios de c para las ecuaciones (4.1a)-($c = 0.2$) y (4.1b)-($c = 0.84$).

Los valores de λ_V^{OH} , $\lambda_V^{H_2O}$, λ_R^{OH} y $\lambda_R^{H_2O}$ se presentan en la Tabla A.3.

4.2 Diseño de la operación nominal

A continuación se presentan los cuatro pasos del procedimiento recursivo en el que nos basamos (Alvarez et al., 2004), para diseñar la operación nominal de la columna de destilación binaria por lotes. Después del listado, se da una breve explicación de cada punto.

- (i). Establecer un criterio para juzgar el diseño del control-trayectoria de estados [en esta tesis, corresponde a maximizar la función objetivo J (ec., 2.1)].
- (ii). Proponer un par de *parámetros del equipo-trayectoria de salida a regular* [p_e , $z_r(t)$], y establecer un controlador pasivo.
- (iii). Diseñar la inversión dinámica del proceso (IDP) y evaluar el cumplimiento de las propiedades de pasividad, estimabilidad y compatibilidad, y determinar la operación nominal.
- (iv). Evaluar la operación nominal, si no se acepta, rediseñar el par [p_e , $z_r(t)$] y regresar al paso (ii).

De acuerdo al procedimiento anterior, el punto (i) correspondió a establecer la función objetivo (ec., 2.1). En el punto (ii) suponemos que los parámetros del equipo ($p_e \mid V$, b_η , a_η , τ_η) son conocidos. Por otro lado, la salida a regular se determinó en el capítulo 3 (véase sección 3.3.1) y el controlador pasivo está dado por la ecuación (3.22). El punto (iii) corresponde a diseñar la trayectoria del reflujo, que aplicada al proceso fuerce a la variable a regular a que siga la trayectoria deseada. La verificación formal de las propiedades de pasividad, estimabilidad y compatibilidad, quedan fuera del alcance del trabajo de tesis. Por último, el punto (iv) corresponde a la evaluación de la operación nominal, la cual se presentará con simulaciones en la sección 4.3 del presente capítulo.

Operación nominal. A continuación se presenta la operación nominal para el ejemplo de aplicación.

En la sección 3.3, se estableció que $z_r(t) = c_N$ debe ser la salida a seguir, y de acuerdo a la Tabla 4.1 tenemos 8 platos ($N = 8$), por lo tanto

$$z_r(t) = c_N = c_8 = E^{-1}(\bar{c}_p) = E^{-1}(0.84) = \bar{c}_8 = 0.8211, \quad (4.2)$$

Los tiempos nominales de cambio de régimen (\bar{t}_s) y de duración del lote (\bar{t}_f) se determinan respectivamente por:

$$\bar{t}_s = f_{t_s}[c_8(t), \tau_p, | c_8(t) = E^{-1}(\tau_p) = E^{-1}(0.84)], \quad \bar{t}_f = f_{t_f}[\bar{J}, | \dot{\bar{J}}(t) \approx 0], \quad (4.3a-b)$$

sustituyendo la ecuación (4.2) en la ec., (3.22) se obtiene que la trayectoria nominal de $\bar{R}(t)$ estará dada por

$$\bar{R}(t) = \frac{V[\bar{c}_p - E(c_7)]}{\tau_p - E^{-1}(\bar{c}_p)} = \bar{\mu}_R(c_7, \tau_p), \quad (4.4)$$

que corresponde a la parte estática de la inversa dinámica del proceso. Sustituyendo la ec., (4.4) en el sistema de ecuaciones (3.23) (con $N = 8$) se obtiene la parte dinámica de la ID

$$\dot{c}_0 = \frac{V \left\{ \left[\frac{\tau_p - E(c_7)}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right] (c_1 - c_0) + c_0 - E(c_0) \right\}}{m_0}, \quad c_0(\bar{t}_s^+) = c_0(\bar{t}_s), \quad (4.5a)$$

$$\dot{c}_i = \frac{V \left\{ \left[\frac{\tau_p - E(c_7)}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right] (c_{i+1} - c_i) + E(c_{i-1}) - E(c_i) \right\}}{\eta(R)}, \quad c_i(\bar{t}_s^+) = c_i(\bar{t}_s), \quad 1 \leq i \leq 6, \quad (4.5b)$$

$$\dot{c}_7 = \frac{V \left\{ \left[\frac{\tau_p - E(c_7)}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right] (c_8 - c_7) + E(c_6) - E(c_7) \right\}}{\eta(R)}, \quad c_7(\bar{t}_s^+) = c_7(\bar{t}_s), \quad (4.5c)$$

$$\dot{c}_D = \frac{V[E(\bar{c}_N) - c_D]}{m_D}, \quad c_D(\bar{t}_s^+) = c_D(\bar{t}_s), \quad (4.5d)$$

$$\dot{c}_p = V \left\{ 1 + \frac{E(c_7) - \tau_p}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right\} \frac{[c_D - c_p]}{m_p}, \quad c_p(\bar{t}_s^+) = c_D(\bar{t}_s), \quad (4.5e)$$

$$\dot{m}_0 = -V \left\{ 1 + \frac{E(c_7) - \tau_p}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right\}, \quad m_0(\bar{t}_s^+) = m_0(\bar{t}_s), \quad (4.5f)$$

$$\dot{m}_p = V \left\{ 1 + \frac{E(c_7) - \tau_p}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right\}, \quad m_p(\bar{t}_s^+) = \bar{m}_p(\bar{t}_s^+), \quad (4.5g)$$

$$\dot{J} = \frac{-J + V \left\{ C_p - C_h \lambda_V + \left[\frac{E(c_7) - \tau_p}{\tau_p - E^{-1}(\tau_p)} \right] (C_p + C_c \lambda_R) \right\} - C_O}{t - t_d}, \quad J_0(\bar{t}_s^+) = J_0(\bar{t}_s), \quad (4.5h)$$

En notación compacta:

$$\dot{x} = f[x, \mu, \tau_p, p], \quad x(\bar{t}_s^+) = \bar{c}_{s0}, \quad \dim(x) = n-1 = 13, \quad (4.6)$$

$$x = (c_0, c_1, \dots, c_6, c_7, c_D, c_p, m_0, m_p, J)', \quad \bar{\mu} = (\bar{\mu}_v, \bar{\mu}_e), \quad \bar{\mu}_v = V, \quad \bar{\mu}_e = f_{te}(\bar{t}_s, \bar{t}_f),$$

$$\bar{t}_s = f_{ts}[c_8(t), \tau_p, | c_8(t) = E^{-1}(\tau_p)], \quad \bar{t}_f = f_{tf}[\bar{J}, | \dot{J}(t) = 0] \quad (4.7b,c)$$

En esta sección quedó planteada la inversión dinámica para una columna de destilación binaria por lotes. En la siguiente sección se muestran mediante simulaciones las trayectorias nominales del ejemplo de aplicación.

4.3 Operación nominal

A continuación se determina de la operación nominal del proceso que estamos tratando. Al inicio de la separación se agrega calor a la columna y se opera a reflujo total hasta que la composición del plato 8 alcance la composición nominal $[c_8(t) = E^{-1}(\bar{c}_p) = E^{-1}(0.84) = \bar{c}_8 = 0.8211]$, a partir de entonces comienza el periodo de producción o extracción.

Para el *periodo de arranque* se emplea el sistema de ecuaciones (2.7), con $N = 8$ y $\bar{R} = \bar{V}$. Durante el *periodo de extracción* la evolución de los estados está dada por el sistema de ecuaciones (4.5) y el reflujo se calcula con la ecuación (4.4). La operación del lote finaliza cuando

la función objetivo alcanza su máximo valor (que equivale a que la derivada de la función objetivo sea igual a cero).

En la Figura 4.1 se muestra la operación nominal de la columna de destilación binaria por lotes de 8 platos. La pureza de carga de etanol fue del 40%. La operación del proceso finalizó cuando $\dot{\bar{J}}(t) \approx 0$ (equivalente a parar cuando \bar{J} está en su máximo valor \bar{J}^+).

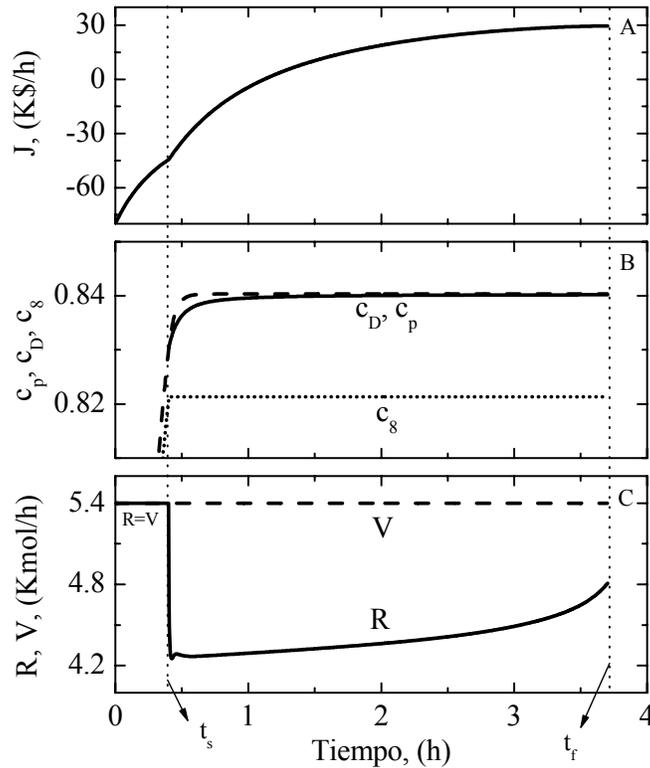


Figura 4.1 Operación nominal.

La Figura 4.1 muestra la operación nominal del ejemplo que se tomó para ilustrar el diseño. Las líneas verticales punteadas indican los tiempos de cambio de régimen y termino de la operación del lote. La Figura 4.1A muestra la evolución de la función objetivo que determina el fin de la operación del proceso. En la Figura 4.1B se muestra la evolución de las composiciones de: producto colectado \bar{c}_p (—), destilado \bar{c}_D (---), y del plato 8 \bar{c}_8 (·····). En la Figura 4.1C se muestran los flujos de vapor \bar{V} , (---) y de reflujo \bar{R} (—).

Tabla 4.3 Valores de \bar{c}_p , \bar{c}_D , \bar{c}_8 y \bar{J} en: $t = 0$, $t = \bar{t}_s$ y $t = \bar{t}_f$.

	$t_0 = 0.0, (h)$	$\bar{t}_s^+ = 0.4003, (h)$	$\bar{t}_f = 3.7038, (h)$
\bar{c}_p	0.0	0.83	0.84
\bar{c}_D	0.4	0.83	0.84
\bar{c}_8	0.4	0.82	0.82
$\bar{J}, (K\$/h)$	-80.0	-44.43	29.58

En la Tabla 4.3 se presentan los valores de \bar{c}_p , \bar{c}_D , \bar{c}_8 y \bar{J} al inicio de la operación, en el momento del cambio de régimen y al término de la operación del lote.

En la Figura 4.1B se observa que las composiciones de destilado y del producto colectado nominales son iguales en \bar{t}_s [$c_p(\bar{t}_s^+) = c_D(\bar{t}_s^+) = 0.83$] y \bar{t}_f [$c_p(\bar{t}_f) = c_D(\bar{t}_f) = 0.84$]. Lo anterior muestra que durante el periodo de producción las dinámicas de c_D y c_p no son cero. Tales dinámicas tienden a cero asintóticamente (conforme el tiempo avanza). En la Figura 4.1B se puede ver que las composiciones del destilado y del producto colectado son constantes a partir de las 0.8 horas (48 minutos) y 2 horas (120 minutos) respectivamente.

El motivo por el que c_D y c_p presentan tales dinámicas, se debe al criterio de cambio de régimen. Recordemos que en $t = 0$, todas las etapas están a la misma composición ($\bar{c}_L = 0.4$). Posteriormente durante el periodo a reflujo total, cuando la composición en el plato 8 alcanza la composición nominal [$c_8(t_s) = \bar{c}_8 = 0.8211$], la composición de destilado es $c_D(t_s) = 0.83$. Como consecuencia tenemos que al inicio del periodo de extracción se obtiene producto subpurificado, $c_p(\bar{t}_s^+) = 0.83$.

En las siguientes dos Figuras se muestran las trayectorias nominales de las composiciones y temperaturas de la columna.

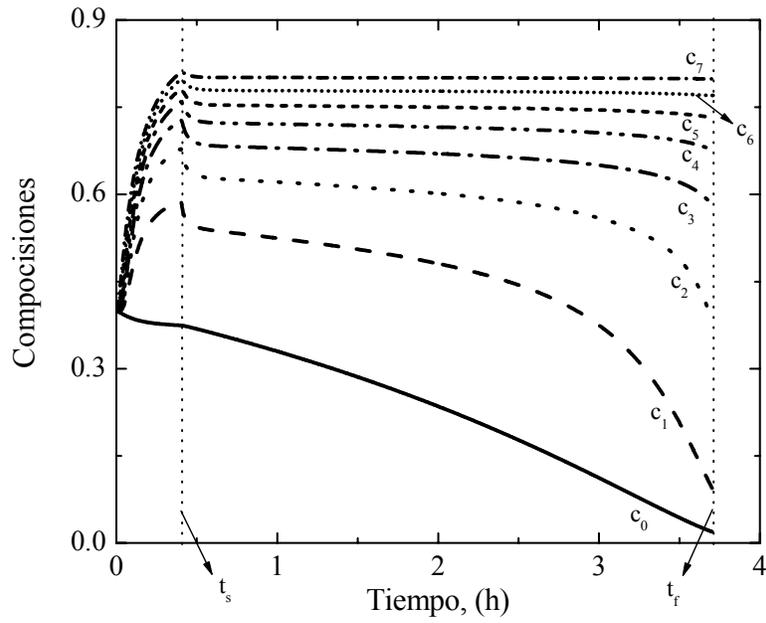


Figura 4.2 Evolución de las composiciones en la columna.

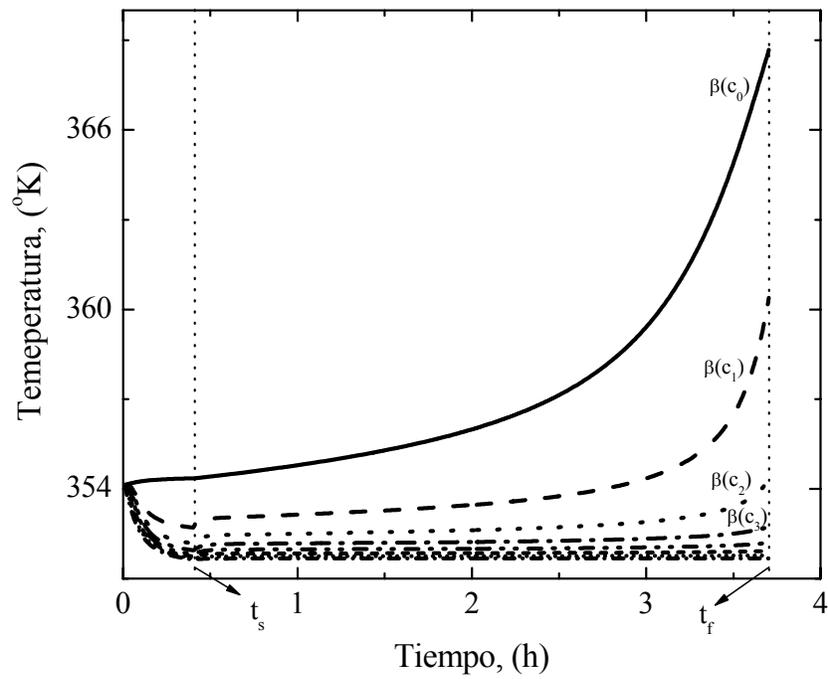


Figura 4.3 Evolución de las temperaturas en la columna.

La Figura 4.2 muestra la evolución de las composiciones del etanol en las etapas de la columna. Se puede ver que en las etapas inferiores es donde están los mayores cambios de composición. Las composiciones en la parte superior de la columna presentan una tendencia aproximadamente constante durante el periodo de extracción.

En la Figura 4.3 se presentan los perfiles de temperatura de las diferentes etapas de la columna. La temperatura en el evaporador es la que mas cambia a lo largo de la duración del lote debido a que en el evaporador se encuentra la mayor cantidad de la mezcla a separar y conforme el tiempo avanza, se va agorando el etanol en el hervidor. También se distinguen cambios notables en las temperaturas en los platos 1 y 2. Por otro lado, las temperaturas de los platos 3, 4, 5, 6, 7 y 8 son aproximadamente constantes durante el periodo de extracción.

La evaluación de la operación nominal obtenida para la columna de destilación la podemos considerar como adecuada debido a que: (i) la composición del producto se obtiene en el valor deseado, (ii) la función objetivo alcanza un máximo valor (positivo), y (iii) la trayectoria del reflujo no presenta cambios drásticos (en la práctica industrial es conveniente que las trayectorias de las variables de control sean suaves para no dañar a los actuadores).

En base a que se juzgó adecuada la operación nominal diseñada, la podemos considerar como la operación óptima del proceso. No se requirió de ninguna iteración de acuerdo al procedimiento en el que nos basamos. El hecho de no requerir de ninguna iteración, se debe a que por especificación de diseño, se estableció que la variable a regular debía ser constante durante el periodo de extracción. En casos donde se especifique que la variable de interés sea variante en el tiempo, quizá no corramos con la misma suerte y se requerirá de algunas iteraciones para considerar como aceptable alguna operación nominal.

Operación nominal con diferente pureza en la carga. Para mostrar el efecto de la pureza inicial de carga sobre la operación nominal, se simularon cinco lotes cuyas composiciones iniciales fueron $\bar{c}_L = (0.2, 0.3, 0.4, 0.5 \text{ y } 0.6)$. En la Figura 4.4 se muestran los resultados. Se observa que a mayor pureza en la carga de alimentación: (i) mayor es el tiempo de operación, (ii) se obtiene más producto colectado (moles) y (iii) mayor es la utilidad obtenida. Por otro lado, \bar{f}_s disminuye cuando hay más pureza en la carga, lo cual se debe a que la composición en el plato 8, alcanza más rápido el valor nominal. En la Tabla 4.4 se presentan los datos numéricos.

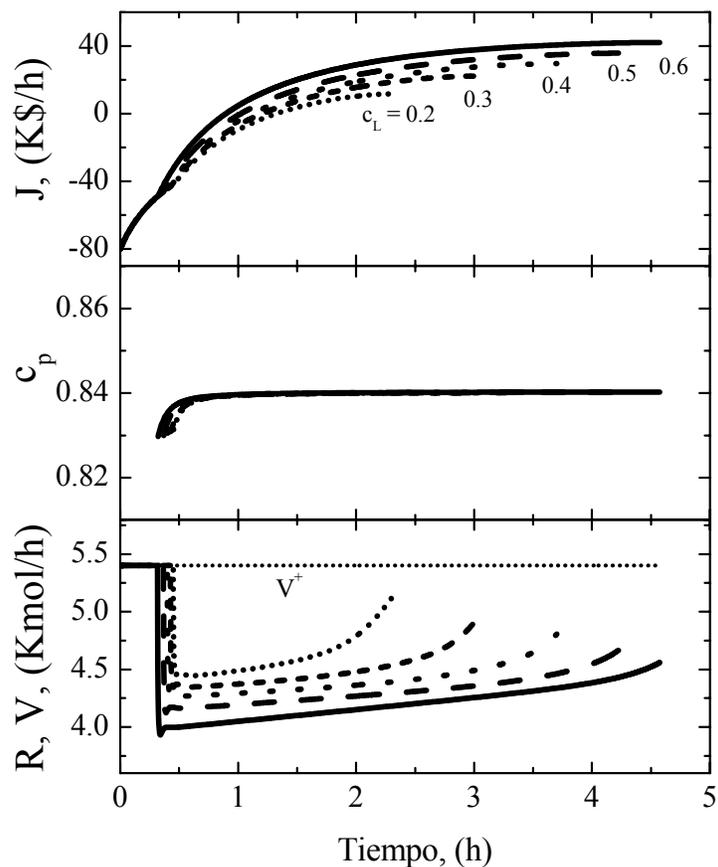


Figura 4.4 Operación nominal con diferentes purzas en la carga inicial.

Tabla 4.4 Operación nominal para varias composiciones de alimentación.

$\bar{c}_L(t_0)$	$\bar{c}_p(\bar{t}_f)$	$\bar{J}(\bar{t}_f)$, (K\$/h)	\bar{t}_s , (h)	\bar{t}_f , (h)	$\bar{m}_p(\bar{t}_f)$, (moles)
0.2	0.84	11.726	0.450	2.338	1466
0.3	0.84	22.278	0.426	3.038	2377
0.4	0.84	29.577	0.403	3.704	3287
0.5	0.84	35.768	0.368	4.246	4196
0.6	0.84	42.058	0.319	4.574	5068

Operación de la columna de destilación bajo control prealimentado. Debido a que en el escenario industrial no se tiene conocimiento exacto en la pureza de la mezcla a separar, a continuación se presenta el funcionamiento de la columna de destilación bajo control prealimentado. El propósito es ver como se desempeñan las técnicas de optimización en presencia de incertidumbre en la composición de la carga. Recordemos que en optimización convencional, primero se diseña la operación y después se implementan a lazo abierto la política de operación nominal.

A una serie de cinco lotes dosificamos una política nominal del reflujo diseñada con $\bar{c}_L = 0.4$. Aplicamos la misma política del reflujo a los cinco lotes, porque suponemos que todos tienen 40% de etanol en la carga inicial, la realidad es que tienen 20, 30, 40, 50 y 60% de etanol. En la Figura 4.5 se muestran los resultados.

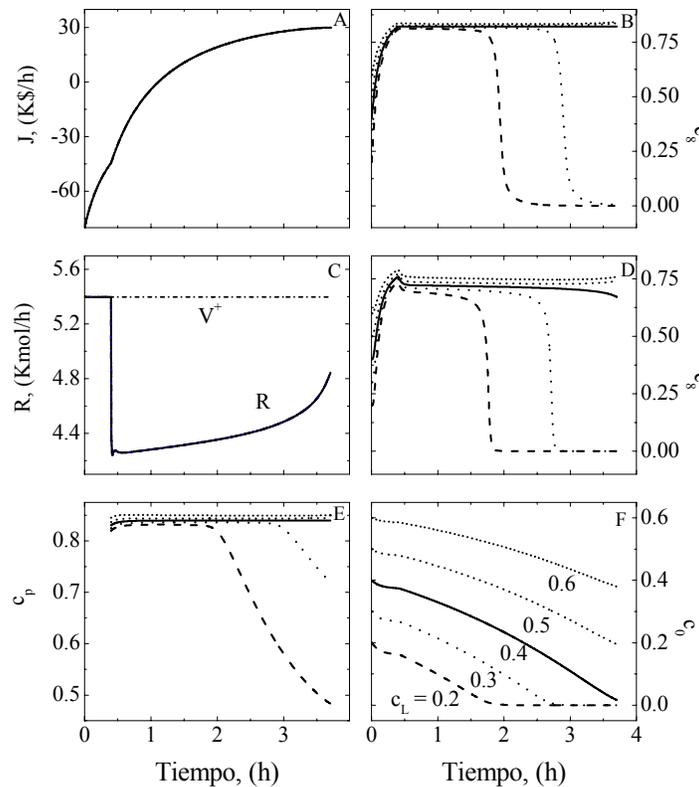


Figura 4.5 Operación de la columna bajo control prealimentado.

Los resultados muestran las desventajas de operar la columna de destilación por lotes bajo control prealimentado en presencia de incertidumbre de composiciones iniciales.

En la Figura 4.5A se presenta la evolución de la función objetivo cuya trayectoria es la misma en los cinco casos. Esto debido a que en J (ec., 2.1) no consideramos penalización en caso de no cumplir con las especificaciones de pureza de $c_p(t_f)$.

Las variables más afectadas (respecto a las trayectorias nominales) son las composiciones de las etapas inferiores de la columna. Cuando una política de operación se implementa al caso donde la composición de carga inicial de la mezcla es mayor que la composición a la que se diseñó la operación nominal, los valores de $c_p(t_f)$ se obtienen arriba de sus valores nominales. Por otro lado, cuando la política de operación se implementa a casos, donde la composición inicial de la mezcla es menor que la composición con la que se diseñó la operación nominal, la composición de $c_p(t_f)$ se obtiene por debajo de la deseada. En la Tabla 4.5 se resumen los resultados.

Tabla 4.5 Datos del control prealimentado para diferente pureza de carga.

$c_L(\bar{t}_0)$	$c_p(\bar{t}_f)$	$\bar{J}(\bar{t}_f)$, (K\$/h)	\bar{t}_s , (h)	\bar{t}_f , (h)	$\bar{m}_p(\bar{t}_f)$, (moles)
0.2	0.48319	29.577	0.403	3.704	3287
0.3	0.72046	29.577	0.403	3.704	3287
0.4	0.84	29.577	0.403	3.704	3287
0.5	0.8444	29.577	0.403	3.704	3287
0.6	0.85	29.577	0.403	3.704	3287

En vista de que se obtiene mal funcionamiento de la columna cuando se opera bajo control prealimentado, surge la necesidad de diseñar un controlador por retroalimentación que sea capaz de recuperar la optimalidad de la operación frente a incertidumbre en las composiciones iniciales. En el siguiente capítulo nos enfocamos al diseño de tal controlador.

4.4 Conclusiones

En este capítulo se presento la operación nominal de una columna de destilación binaria por lotes. Para tal efecto se tomó de la literatura un ejemplo que ha sido estudiado previamente. El capítulo se inició con la presentación del procedimiento en el que nos basamos para el diseño de la operación nominal de la columna que está siendo tratada en este trabajo. Después, mediante simulaciones se presentó la operación nominal de la columna de destilación binaria por lotes, primero para una composición de carga inicial y después para un amplio rango de composiciones, mostrando que los tiempos de cambio de régimen (del periodo de arranque al periodo de extracción) y de duración de los lotes dependen fuertemente de la condición inicial. Por último se mostró la fragilidad operar la columna de destilación bajo un control prealimentado, concluyendo que es necesario diseñar un controlador que supere las deficiencias que presenta el control prealimentado.

Capítulo 5

CONTROL

El control que se presenta en esta sección nace de la necesidad de diseñar un controlador que aplicado a la columna de destilación (dado un amplio rango de composición iniciales) aproxime la operación de la columna a su trayectoria nominal. Los elementos que componen el control que se presenta en el presente capítulo son, un controlador por retroalimentación de estados, un control de eventos y un estimador de estados. El controlador por retroalimentación de estados realiza la función de seguimiento de la salida dada. El control de eventos determina los momentos de cambio de régimen y paro del lote. Ambos controladores requieren del conocimiento de algunos estados, por lo tanto se implementa un estimador que basado en mediciones de temperatura, infiere en tiempo real los estados que necesitan ambos controladores. El funcionamiento del esquema se ilustra mediante simulaciones. Al final del capítulo se muestra que el esquema propuesto es robusto ante errores de medición e incertidumbre en la composición de carga inicial.

5.1 Control por retroalimentación de estados

En esta sección se presenta el controlador por retroalimentación de estados (RE) para operar la columna de destilación por lotes del ejemplo de aplicación. El controlador se construye bajo la premisa de que la salida a seguir es $z_r = \tau_N = \tau_8$, la cual nos permite obtener un controlador pasivo como se mostró en el capítulo 3.

De acuerdo a Isidori, (1995) la construcción del controlador por retroalimentación de estados se basa en dos consideraciones: i) se asume que los estados de la planta y el par de funciones del modelo f y h [ec., (2.8)] están disponibles para aplicar el control, y ii) el controlador se fuerza a seguir una dinámica lineal no interactiva y de polo asignable [ec., (5.1)] para la salida $z_r = \tau_8$.

$$\dot{c}_8 = \dot{\tau}_8 - K_c [c_8 - \tau_8], \quad (5.1)$$

Recordemos que durante el periodo de extracción la derivada de τ_8 es $\dot{\tau}_8 = 0$, por lo tanto se tiene que:

$$\dot{c}_8 = -K_c [c_8 - \tau_8], \quad (5.2)$$

donde K_c es la ganancia del controlador.

Sustituyendo las ecuaciones (5.2) y (2.6) en la ec., (2.7c) (con $N = 8$) y resolviendo para $u_R = R$, se obtiene el controlador no lineal por retroalimentación de estados.

$$u_R = \frac{K_c(c_8 - \tau_8)(b_\eta + a_\eta \tau_\eta) - V[E(c_7) - E(c_8)]}{c_D - c_8 - K_c(c_8 - \tau_8)\tau_\eta} := \mu_R(x_D, z_r, p) \quad (5.3)$$

$$x_D = (c_0, c_1, \dots, c_7, c_8, c_D, c_p, m_0, m_p, J)', \quad z_r = E^{-1}(\bar{c}_p) = \bar{c}_8$$

donde c_8 es la salida a ser seguida por el controlador y x_D representa los estados de la planta que se suponen disponibles en línea. Combinando el controlador no lineal por retroalimentación de estados, el control de eventos, la derivada de la función objetivo y suponiendo que se dispone de x_D , se plantea la operación a lazo cerrado con el controlador por retroalimentación de estados para la columna de destilación binaria por lotes.

Cabe resaltar que la operación a lazo cerrado de la columna se llevará a cabo en dos partes, en la primera suponemos que los estados requeridos por el controlador (ec., 5.3) están disponibles en línea, y en la segunda parte, implementamos una herramienta (el estimador de estados) que infiere en tiempo real los estados que en la primera parte supusimos conocidos. Las simulaciones de esta segunda parte se muestran en la sección 5.3.

5.2 Estimador de estados

El escenario industrial actual exige que los productos cumplan con estrictas especificaciones de calidad, si la compañía que elabora los productos no cumple con las especificaciones establecidas, se podría hacer acreedora a severas sanciones. En destilación por lotes una medida de la calidad es la pureza del componente de interés. Con el propósito de conseguir la pureza especificada se implementan controladores de composición, los cuales generalmente requieren del conocimiento de la composición instantánea en alguna(s) etapa(s) de la columna. Es sabido que medir la composición es una tarea difícil, y equipos tales como los cromatógrafos son caros y hay retraso en la entrega de respuesta (Barolo y Berto, 1998; Alvarez y López, 1999). Una alternativa para superar la desventaja de no tener información de las composiciones en tiempo real, es la implementación de un estimador de estados. Un estimador de estados es un sistema dinámico que permite inferir propiedades no medibles en tiempo real (como lo es la composición de la mezcla), mediante mediciones secundarias como son la temperatura y la presión, las cuales pueden ser adquiridas en línea y a bajo costo de inversión (López, 2000). En ingeniería de destilación la medición más empleada para estimación de estados es la temperatura de burbuja (Castellanos-Sahagún, 1998; Barolo y Berto, 1998).

Por otro lado, el problema de estimación en columnas de destilación por lotes ha sido tratado con el Filtro Extendido de Kalman (FEK) (Oisiovici y Cruz, 2001) y el Estimador Extendido de Luenberger (EEL) (Quintero-Marmol et al., 1991; Barolo y Berto, 1998; Barolo y Dal Cengio, 2001). El FEK es el método de estimación más empleado en ingeniería química, pero presenta las desventajas (Alvarez y López, 1999) que se listan a continuación: i) carece de criterio sistemático de sintonización (sus parámetros se ajustan a prueba y error), ii) no garantiza estabilidad, y iii) el método requiere $n(n + 1)/2$ ecuaciones adicionales tipo Ricatti para una planta n -dimensional. Por otro lado, la principal desventaja del EEL es que en destilación por lotes ha sido implementado con ganancias invariantes en el tiempo, y esto no es conveniente para procesos por lotes (Barolo y Berto, 1998).

Recientemente se han propuesto en la literatura (Alvarez, 1996; Alvarez y López, 1999; Hernández y Alvarez, 2003; López y Alvarez, 2004) Estimadores Extendidos de Luenberger, cuya selección de ganancias (variantes en el tiempo) esta basada en teoría de control no lineal. Las características principales de tales estimadores son: i) diseño sistemático tanto en construcción como en su sintonización y ii) garantiza estabilidad y robustez aunado a que el diseño de tales estimadores es más sencillo que el FEK y el EEL reportados anteriormente.

Con base en lo mencionado anteriormente, en este trabajo se implementará el EEL tipo PI de Alvarez y López, (1999) (en el Apéndice B se presentan detalles). Aplicando el teorema 2 del trabajo de dichos autores se produce el siguiente el estimador geométrico no lineal.

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}_i = \mathbf{K}(\hat{\mathbf{x}}_i, \omega)[y(t) - h(\hat{\mathbf{x}})], \quad \mathbf{t} = (t_1, \dots, t_m)', \quad \hat{\mathbf{x}}_m(t_0) = 0 \quad (5.4a)$$

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}_i = \mathbf{f}_i(\hat{\mathbf{x}}_i, \hat{\mathbf{x}}_v, \mathbf{u}_R) + \mathbf{G}(\hat{\mathbf{x}}_i, \omega, \zeta)[y(t) - h(\hat{\mathbf{x}})] + \hat{\mathbf{t}}, \quad \hat{\mathbf{x}}_i = (\hat{c}_{s_1}, \dots, \hat{c}_{s_i})', \quad \hat{\mathbf{x}}_i(t_0) = \hat{\mathbf{x}}_{i0} \quad (5.4b)$$

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}_v = \mathbf{f}_v(\hat{\mathbf{x}}_i, \hat{\mathbf{x}}_v, \mathbf{u}_R), \quad \hat{\mathbf{x}}_v(t_0) = \hat{\mathbf{x}}_{v0} \quad (5.4c)$$

$$(\hat{\mathbf{x}}_i', \hat{\mathbf{x}}_v')' = \mathbf{I}_p \hat{\mathbf{x}}, \quad (\mathbf{f}_i', \mathbf{f}_v')' = \mathbf{I}_p \mathbf{f}, \quad \omega = \min(\omega_1, \dots, \omega_m)$$

$$\mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}}_i, \omega) = \text{diag}[\omega_1^2/\beta'(\hat{c}_{s_1}), \dots, \omega_m^2/\beta'(\hat{c}_{s_m})], \quad \mathbf{G}(\hat{\mathbf{x}}_i, \omega, \zeta) = 2\text{diag}[\zeta_1\omega_1/\beta'(\hat{c}_{s_1}), \dots, \zeta_m\omega_m/\beta'(\hat{c}_{s_m})]$$

Donde \mathbf{x}_i son los estados innovados, \mathbf{x}_v son los estados no innovados, $\hat{\mathbf{t}}$ es la parte integral (para compensar errores de modelado), ω_i es la frecuencia característica, ζ_i es el factor de amortiguamiento, m es el número de sensores de temperatura, \mathbf{I}_p es una matriz identidad de columna-permutada, \mathbf{K} y \mathbf{G} son las matrices de las ganancias.

El estimador de estados (5.4) está formado (López T., 2000) por: (i) un *término predictor* que corresponde a la aproximación basada en el modelo de la planta, $\mathbf{f}(\hat{\mathbf{x}}_i, \hat{\mathbf{x}}_v, \mathbf{u}_R)$; (ii) un *término corrector* forzado por la diferencia de la medición de temperatura real y su estimado, $[y(t) - h(\hat{\mathbf{x}})]$. El término corrector está formado por una ganancia proporcional (\mathbf{G}) para compensar errores rápidos y una ganancia integral (\mathbf{H}) para compensar errores lentos (de modelado). Los estados que contienen ambos términos (predictor y corrector) son los *estados innovados*, y los que sólo contienen el término predictor son los *estados no innovados*. Dado que el diseño del estimador tiene como grado de libertad a la estructura de estimación \mathbf{S} (que determina los estados innovados y no innovados), el estimador deberá ser de tal forma que se logre un compromiso equilibrado entre la velocidad de reconstrucción de estados y la robustez del estimador.

Para que el estimador (5.4) funcione se debe cumplir (López y Alvarez, 2004) que: (i) la trayectoria de estados sea parcialmente observable en $0 \leq t \leq t_f$, lo que equivale a que el rango de $\mathbf{G}[\hat{\mathbf{x}}_i(t), \omega, \zeta]$ sea m , y se traduce a que $\beta'(\hat{c}_{s_i}) \neq 0$, lo cual se cumple siempre y cuando \hat{c}_{s_i} no sea la composición azeotrópica (ó no este cerca de ella), y (ii) la trayectoria de estados no innovados sea estable, lo cual se cumple ya que los términos no innovados corresponden a la parte aproximada del modelo de la planta y a lazo cerrado serán guiados por la variable de control \mathbf{R} .

En la siguiente sección se combinan el controlador por RE, el control de eventos y el estimador de estados para conformar el esquema de control que se propone es este trabajo.

5.3 Control accionado por mediciones

A continuación se plantea la operación de columnas de destilación binarias por lotes bajo un control activado por mediciones de temperatura (el número y la ubicación de sensores se determinarán en la siguiente sección). El esquema propuesto se obtiene combinando: (i) el estimador de estados (ec., 5.4), (ii) el controlador por retroalimentación de estados (ec., 5.3), y (iii) el control de eventos (ec., 3.18). Dicho control queda expresado de la siguiente forma:

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}} = \mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}}_t, \omega)[y(t) - h(\hat{\mathbf{x}})], \quad \mathbf{t} = (t_1, \dots, t_m)', \quad \hat{\mathbf{x}}_0(t_0) = \mathbf{0} \quad (5.5a)$$

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}_t = \mathbf{f}_t(\hat{\mathbf{x}}_t, \hat{\mathbf{x}}_v, \mathbf{u}_R) + \mathbf{G}(\hat{\mathbf{x}}_t, \omega, \zeta)[y(t) - h(\hat{\mathbf{x}})] + \hat{\mathbf{t}}, \quad \hat{\mathbf{x}}_t = (\hat{c}_{s_1}, \dots, \hat{c}_{s_r})', \quad \hat{\mathbf{x}}_t(t_0) = \hat{\mathbf{x}}_{t_0} \quad (5.5b)$$

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}_v = \mathbf{f}_v(\hat{\mathbf{x}}_t, \hat{\mathbf{x}}_v, \mathbf{u}_R), \quad \hat{\mathbf{x}}_v(t_0) = \hat{\mathbf{x}}_{v_0} \quad (5.5c)$$

$$\mathbf{u}_R = \frac{\mathbf{K}_c(\hat{c}_N - \tau_N)(b_\eta + a_\eta \tau_\eta) - V[E(\hat{c}_{N-1}) - E(\hat{c}_N)]}{\hat{c}_D - \hat{c}_N - \mathbf{K}_c(\hat{c}_N - \tau_N)\tau_\eta} := \mu_R(\hat{\mathbf{x}}_t, \hat{\mathbf{x}}_v, \tau_N, \mathbf{K}_c, p) \quad (5.5d)$$

$$\hat{\mathbf{t}}_s = \mathbf{f}_s[\hat{c}_N(t), \tau_p, | \hat{c}_N(t) = E^{-1}(\tau_p)], \quad \hat{\mathbf{t}}_r = \mathbf{f}_r[\hat{\mathbf{J}}, | \hat{\mathbf{J}}(t) = \mathbf{0}] \quad (5.5e)$$

$$\hat{\mathbf{J}} = \frac{[-\hat{\mathbf{J}} + C_p(V - R) - C_h \lambda_V V - C_c \lambda_R V - C_O]}{(t + t_d)}, \quad \hat{\mathbf{J}} \in \hat{\mathbf{x}}_v, \quad \hat{\mathbf{J}}_0(0) = -\left(\frac{C_L m_L}{t_d} + C_O\right), \quad (5.5f)$$

El controlador accionado por mediciones aplicado a la planta tiene por objetivo recuperar la tendencia de la operación nominal (capítulo 3), la cual se ilustró con un ejemplo representativo en el capítulo anterior.

El funcionamiento y flujo de información del esquema (5.5) es el siguiente. (i) se agrega a la estructura de estimador la derivada de la función objetivo, la cual pasa a ser parte del conjunto de estados no innovados; (ii) se proporciona(n) el(los) valor(es) de la(s) temperatura(s) medida(s), el flujo de vapor y el reflujo [con la diferencia de que en el arranque $R = V$, y durante el periodo de producción, R estará dado por la ecuación (5.5d)]; por último, (iii) se pasa la información de los estados inferidos (por el estimador) al controlador de seguimiento y al control de eventos.

En la Figura 3.1 se muestra esquemáticamente el flujo de información del esquema propuesto.

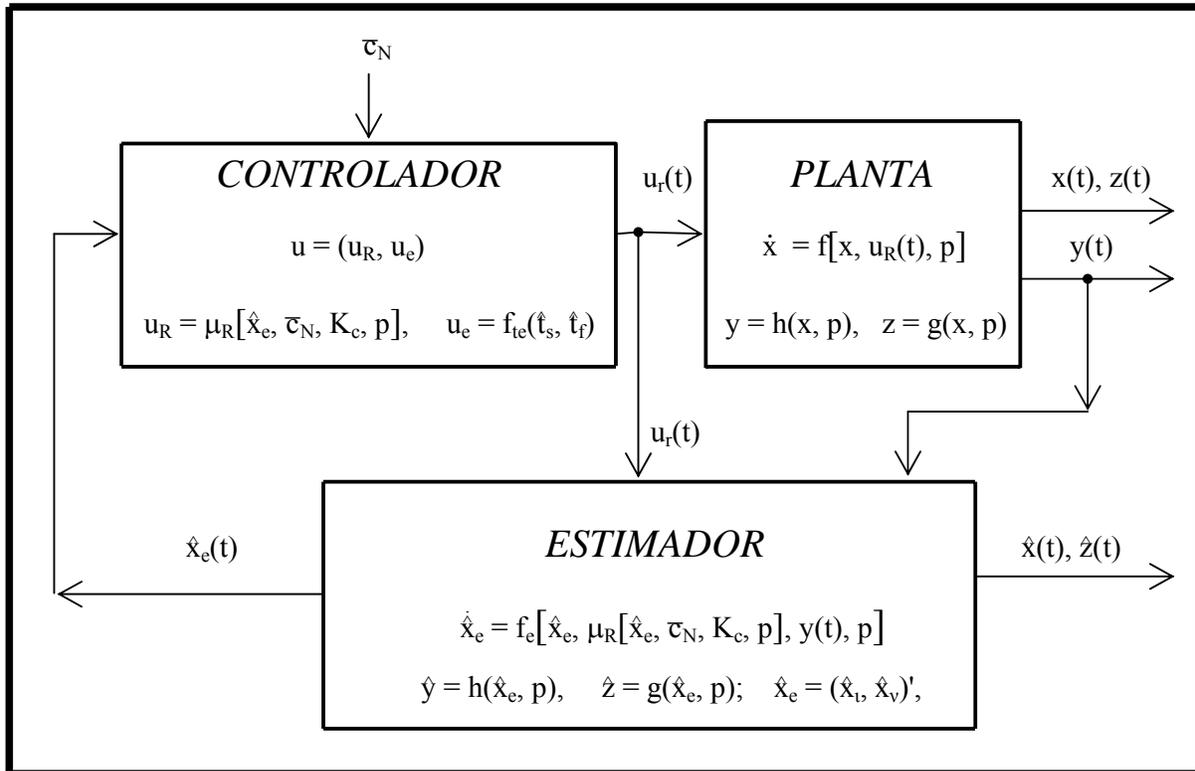


Figura 5.1 Diagrama de bloques del control accionado por mediciones.

Los elementos (o bloques) que componen el esquema propuesto han sido desarrollados e implementados en trabajos previos. En cuanto al estimador, López y Alvarez (2004) lo emplearon para inferir propiedades de un copolimero en ingeniería de reactores de polimerización, Fernández y Alvarez, (2005) lo utilizan para inferir composiciones en columnas de destilación continua. En el caso del controlador, en el trabajo de Barolo y Berto, (1998) lo emplearon para control de composición de columnas de destilación por lotes. Por otro lado, la función objetivo es similar a las empleadas por Kerkhof y Vissers, (1978), y Mujtaba y Macchietto, (1993) para la optimización de columnas de destilación por lotes.

Debido a lo mencionado anteriormente, hacemos notar que la originalidad de este trabajo de investigación radica en la manera de conectar adecuadamente cada uno de los elementos del diagrama (5.1) para obtener un esquema sencillo que hace posible la optimización en línea del proceso.

Con el propósito de proporcionar una idea cualitativa de la sencillez del esquema propuesto, a continuación se describe de manera muy general en que consiste el diseño de la operación mediante técnicas convencionales de optimización. En destilación por lotes el procedimiento se lleva a cabo en dos etapas:

- (1^a) Diseño de la trayectoria óptima del reflujo
- (2^a) Diseño e implementación del controlador de seguimiento

En la primera etapa (antes de operar la columna) se determina la trayectoria óptima del reflujo tal que se maximice una función objetivo dada. Diseñar la trayectoria óptima constituye solucionar un problema de optimización dinámica (Srinivasan et al., 2003). La solución del problema de optimización dinámica se puede hacer por métodos analíticos y numéricos. Los métodos puramente analíticos no aplican en problemas prácticos, excepto para sistemas de uno o dos estados. Los métodos numéricos que tratan el problema de optimización dinámica se clasifican en tres clases: (i) Métodos de optimización directa, cuyos procedimientos de solución tienden a ser lentos debido a que se requiere de costosas y repetidas soluciones de los sistemas de ecuaciones; (ii) Métodos basados en el Principio Mínimo de Pontryagin (solución de sistemas de ecuaciones algebraico-diferenciales), cuyas desventajas son los altos requerimientos computacionales, problemas de estabilidad y frecuentes problemas con discontinuidades; y (iii) Métodos basados en el principio de optimalidad de Hamilton-Jacobi-Bellman (requiere la solución de una ecuación diferencial parcial), la desventaja es la complejidad (computacional) de su solución ya que se lleva a cabo mediante programación dinámica (Srinivasan et al., 2003).

En la segunda etapa se diseña un controlador (que generalmente se implementa a lazo abierto) para que siga la política del reflujo obtenida mediante optimización (en la literatura existen muchas técnicas que pueden ser usadas para realizar la tarea de seguimiento). Una vez que se tiene la $u_R(t)$ óptima y también se tiene un controlador para su seguimiento, se lleva a cabo la implementación. Las desventajas en la implementación suelen ser las siguientes: (i) no existe corrección por retroalimentación ya que el controlador generalmente se implementa a lazo abierto, y (ii) la trayectoria óptima $u_R(t)$ obtenida mediante optimización, fue diseñada para una pureza de carga inicial, y en el escenario industrial no se tiene conocimiento exacto de la pureza inicial de la mezcla.

En resumen, el diseño de la operación de columnas de destilación por lotes mediante técnicas convencionales de optimización puede llegar a ser una tarea muy complicada, y a la hora de la implementación éstas políticas óptimas presentan ciertas desventajas.

En la siguiente sección implementación el esquema que proponemos en este trabajo.

5.4 Implementación

En esta sección se presenta la operación a lazo cerrado de la columna de destilación binaria por lotes cuyas características se presentaron en el capítulo 4. Antes de presentar la operación de la planta bajo el control accionado por mediciones, se analizará que estructura (elección del número y ubicación de los sensores) del estimador es la más adecuada.

Estructura del estimador

Para la elección de la estructura del estimador se tomaron de la literatura los siguientes dos criterios: (i) *el número de singularidad* $\kappa(i)$ (ec., 5.6), que indica si una medición es buena o mala con base en su ubicación, la(s) etapa(s) con valor (absoluto) pequeño de $\kappa(i)$ será(n) la(s) más adecuada(s) para medición (López y Alvarez, 2004), y (ii) *el gradiente de temperatura* $\Delta\beta(c_i)$ (ec., 5.7), el cual establece que las etapas que tengan el mayor gradiente de temperatura, serán las más adecuadas para medición (Tolliver et al., 1980; Castellanos-Sahagún y Alvarez, 2004). Para ver las trayectorias de $\kappa(i)$ y $\Delta\beta(c_i)$ tomamos las de la operación nominal con $\bar{c}_L = 0.4$ del capítulo 4.

$$\kappa(i) = |1/\beta'(c_i)| < \infty, \quad 0 \leq i \leq 8, \quad (5.6)$$

$$\Delta\beta(c_i) = |\beta(c_i) - \beta(c_{i-1})|^+, \quad 1 \leq i \leq 8, \quad (5.7)$$

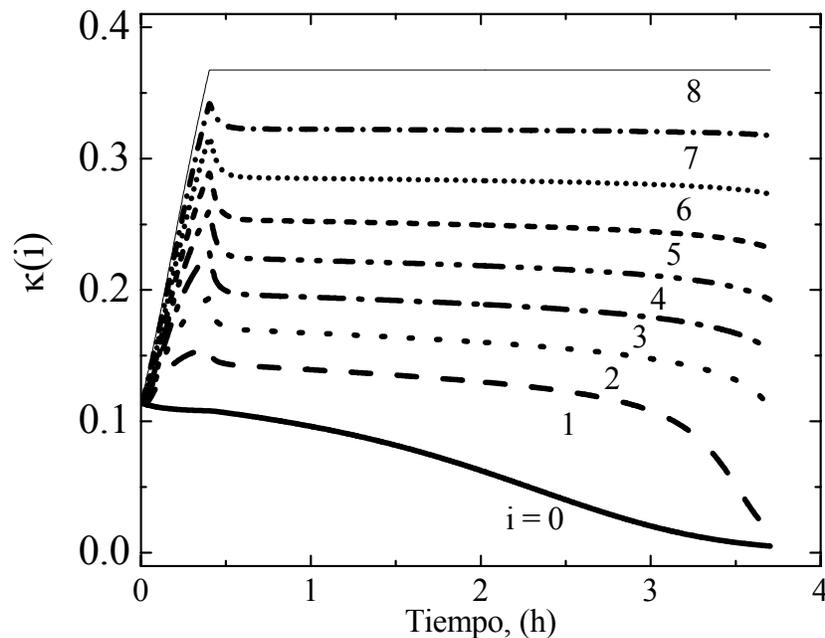


Figura 5.2 Trayectorias de la medida de singularidad en las etapas de la columna

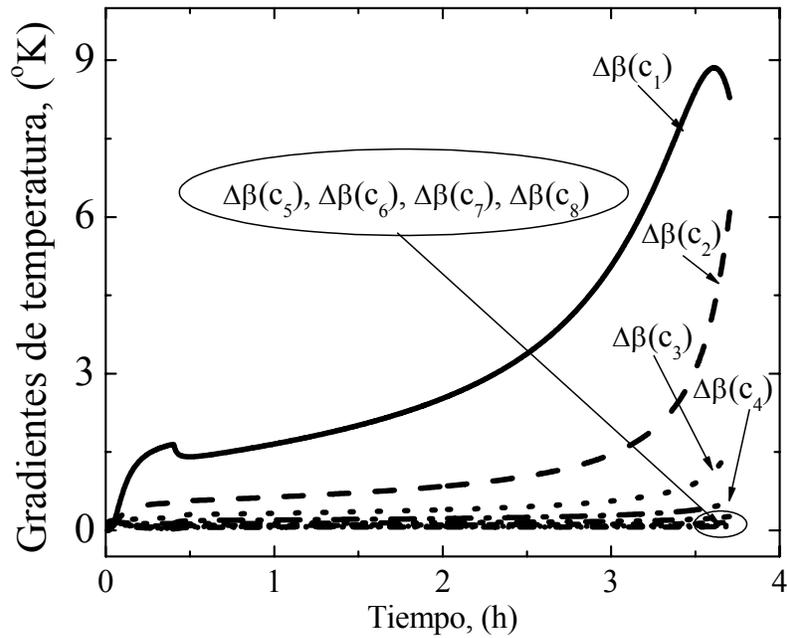


Figura 5.3 Trayectorias de los gradientes de temperatura en la columna

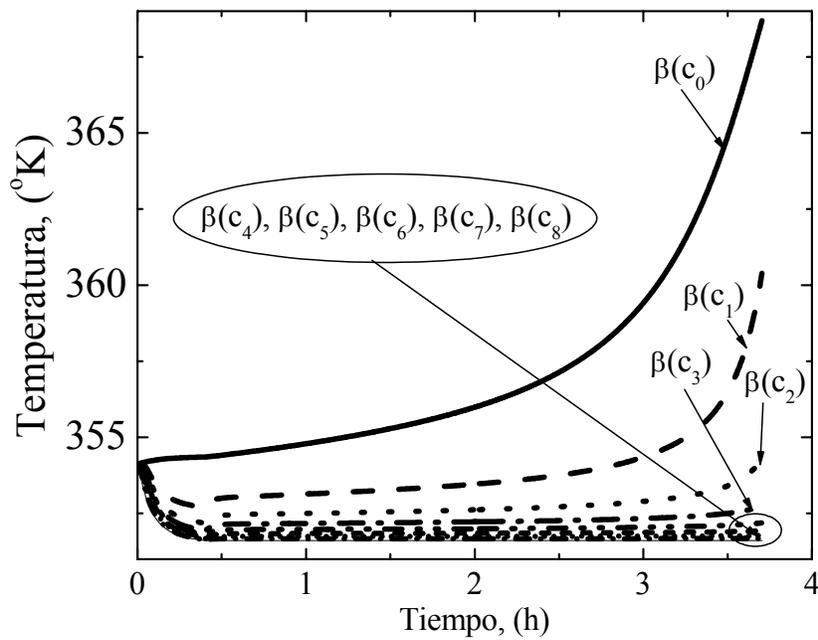


Figura 5.4 Perfiles de temperatura en las etapas de la columna.

En la Figura 5.2 se muestra el número de condición en función del tiempo y ubicación de sensores individuales. Con base en el criterio (i), la mejor etapa para medición es el evaporador, y la peor es el plato 8. En la Figura 5.3 se muestran los gradientes de temperatura entre las etapas de la columna, y de acuerdo al criterio (ii), la etapa más adecuada para medición es también el evaporador debido a que es donde se encuentra el mayor gradiente de temperaturas. En la Figura 5.4 se muestra el perfil de temperaturas en la columna, donde también se pueden apreciar las etapas con mayor gradiente durante la operación del proceso. Como conclusión del análisis de las Figuras 5.2, 5.3 y 5.4, y basándonos en los dos criterios mencionados anteriormente (*número de singularidad y gradiente de temperatura*) se tiene que **la mejor estructura del estimador, es colocar un solo sensor ubicado en el evaporador.**

De acuerdo a lo discutido anteriormente, a continuación mostramos el esquema de operación de la columna de destilación binaria por lotes, bajo el control accionado por una medición (en el evaporador) de temperatura:

$$\dot{\hat{c}}_0 = \frac{R[\hat{c}_1 - \hat{c}_0] + V[\hat{c}_0 - E(\hat{c}_0)]}{\hat{m}_0} + \left[\frac{2\zeta_0\omega_0}{\beta'(\hat{c}_0)} \right] [y_0(t) - h(\hat{c}_0)] + \left[\frac{\omega_0^2}{\beta'(\hat{c}_0)} \right] \hat{i}_0, \quad \hat{c}_0(0) = \hat{c}_L, \quad (5.8a)$$

$$\dot{\hat{c}}_i = \frac{R[\hat{c}_{i+1} - \hat{c}_i] + V[E(\hat{c}_{i-1}) - E(\hat{c}_i)]}{\eta(R)}, \quad 1 \leq i \leq 7, \quad \hat{c}_i(0) = \hat{c}_L, \quad (5.8b)$$

$$\dot{\hat{c}}_8 = \frac{R[\hat{c}_D - \hat{c}_8] + V[E(\hat{c}_7) - E(\hat{c}_8)]}{\eta(R)}, \quad \hat{c}_8(0) = \hat{c}_L, \quad (5.8c)$$

$$\dot{\hat{c}}_D = \frac{V[E(\hat{c}_8) - \hat{c}_D]}{m_D}, \quad \hat{c}_D(0) = \hat{c}_L, \quad (5.8d)$$

$$\dot{\hat{c}}_p = \frac{[(V-R)(\hat{c}_D - \hat{c}_p)]}{\hat{m}_p}, \quad \hat{c}_p(0) = 0, \quad (5.8e)$$

$$\dot{\hat{m}}_0 = R - V, \quad \hat{m}_0(0) = \hat{m}_I, \quad (5.8f)$$

$$\dot{\hat{m}}_p = V - R, \quad \hat{m}_p(0) = 0, \quad (5.8g)$$

$$\hat{J}(t) = \frac{[-\hat{J} + C_p(V - R) - C_h\lambda_V V - C_c\lambda_R V - C_O]}{(t + t_d)}, \quad \hat{J}_0(0) = -\frac{C_L\hat{m}_L}{t_d} - C_O, \quad (5.8h)$$

$$\hat{i}_0 = [y_0(t) - h(\hat{c}_0)], \quad \hat{i}_0(0) = 0, \quad (5.8i)$$

$$\hat{t}_s = f_{t_s}[\hat{c}_8(t), \tau_p, | \hat{c}_8(t) = E^{-1}(\tau_p) = E^{-1}(0.84)], \quad \hat{t}_f = f_{t_f}[\hat{J}, | \hat{J}(t) = 0] \quad (5.9a-b)$$

$$R(t) = \frac{K_c(\hat{c}_8 - \tau_8)(b_\eta + a_\eta\tau_\eta) - V[E(\hat{c}_7) - E(\hat{c}_8)]}{\hat{c}_D - \hat{c}_8 - K_c(\hat{c}_8 - \tau_8)\tau_\eta} = \hat{\mu}_R, \quad (5.10)$$

Las partes que componen es esquema anterior son: i) el estimador geométrico no lineal tipo proporcional integral (ec., 5.8), ii) el controlador de eventos (ec., 5.9), y iii) el controlador de seguimiento (ec., 5.10).

Para mostrar el funcionamiento del esquema propuesto (ecs., 5.8, 5.9 y 5.10) se llevaron a cabo las siguientes simulaciones con diferentes estructuras del estimador (se varió el número y la ubicación de los sensores). Las estructuras analizadas fueron: (a) una medición en el evaporador; (b) una medición en el plato 4; (c) dos mediciones (evaporador y plato 8); y (d) tres mediciones (evaporador, plato 4 y plato 8). La sintonización del estimador y del controlador se llevaron a cabo de acuerdo a las guías del trabajo de Fernández y Alvarez (2005), de las cuales se llegó (para los cuatro casos) a que: el factor de amortiguamiento es $\zeta_i = 2.0$ (esto es, $\zeta = \zeta_0 = \zeta_4 = \zeta_8 = 2.0$), para evitar la propagación excesiva de errores de modelado; la frecuencia característica del observador [$\omega = \omega_0 = \omega_4 = \omega_8 = \omega_h/3 = 41.66 \text{ h}^{-1}$ (0.694 min^{-1})] la hacemos tres veces más lenta que la frecuencia de la hidráulica de la columna, [$\omega_h = (\tau_h/8)^{-1} = 125 \text{ h}^{-1}$ (2.08 min^{-1})] de la columna; la ganancia del controlador [$K_c = \omega/3 = 13.88 \text{ h}^{-1}$ (0.231 min^{-1})], la hacemos tres veces más lenta que la frecuencia del estimador. Los resultados de las simulaciones (de las cuatro estructuras del estimador) se muestran en la Figura 5.5.

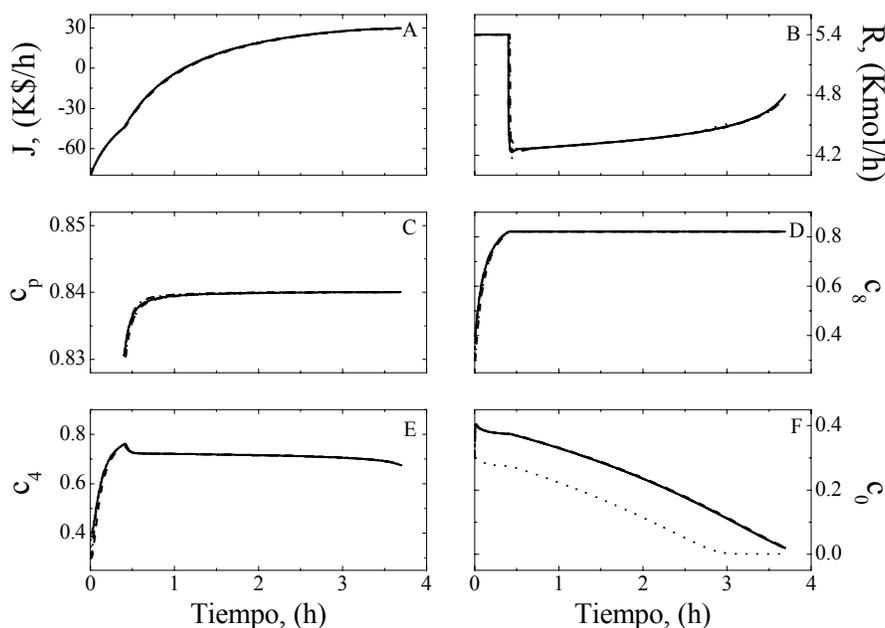


Figura 5.5 Operación a lazo cerrado de los casos: (a)-(—); (b)-(•••••); (c)-(—•—•—); (d)-(—••—••—).

Se emplearon las siguientes condiciones iniciales en los cuatro casos.

$$m_1 = 7510, \quad c_L = 0.4, \quad b_\eta = 30, \quad (5.11)$$

$$\hat{m}_1 = 7510, \quad \hat{c}_L = 0.3, \quad \hat{J}_0 = -80.0 \quad (5.12)$$

La Figura 5.5 muestra el desempeño del control accionado por mediciones con las diferentes estructuras del estimador. Los casos (a), (c) y (d) presentan comportamientos similares en la reconstrucción de estados (Figuras. 5.5C-D), evolución de la variable de control (Figura. 5.5B) y la trayectoria de la función objetivo (Figura 5.5A). Dicha similitud se debe a que tienen en común la medición de temperatura en el evaporador (etapa donde está el 94% de la mezcla). La diferencia del caso (b) respecto al desempeño de los otros casos [(a), (c) y (d)], es que la composición estimada en el evaporador no converge a la composición real (véase Figura 5.5F). Lo anterior se debe a que en el caso (b) la medición se hace en el plato 4, donde apenas se tiene el 0.4% de la mezcla a separar.

De las simulaciones anteriores se concluye que: i) es necesario que un sensor se coloque en el evaporador (lo cual fortalece los resultados de los criterios presentados al principio de esta sección); ii) en caso de disponer de dos sensores, uno se tiene que colocar en el evaporador y el otro en cualquier etapa de la columna; y iii) no mejora el funcionamiento del estimador con tres o más sensores.

Efecto de errores de medición

Apoyándonos en las conclusiones anteriores, en seguida se presentan simulaciones que emulan ruido en las mediciones. Las simulaciones consideran los siguientes casos: (i) un sensor en el evaporador, (ii) dos sensores-(evaporador y plato 1), (iii) dos sensores-(evaporador y plato 3), y (iv) dos sensores-(evaporador y plato 5). Las características del ruido son: distribución gaussiana, media cero, desviación estándar de 0.1 °K, el ruido se inyecta cada 0.15 minutos (≈ 10 segundos), estas características se han empleado en trabajos previos (Barolo y Berto, 1998; Oisiovici y Cruz, 2001).

En las Figuras 5.6, 5.7, 5.8 y 5.9 se muestran los resultados de simular inyección de ruido en las mediciones de temperatura.

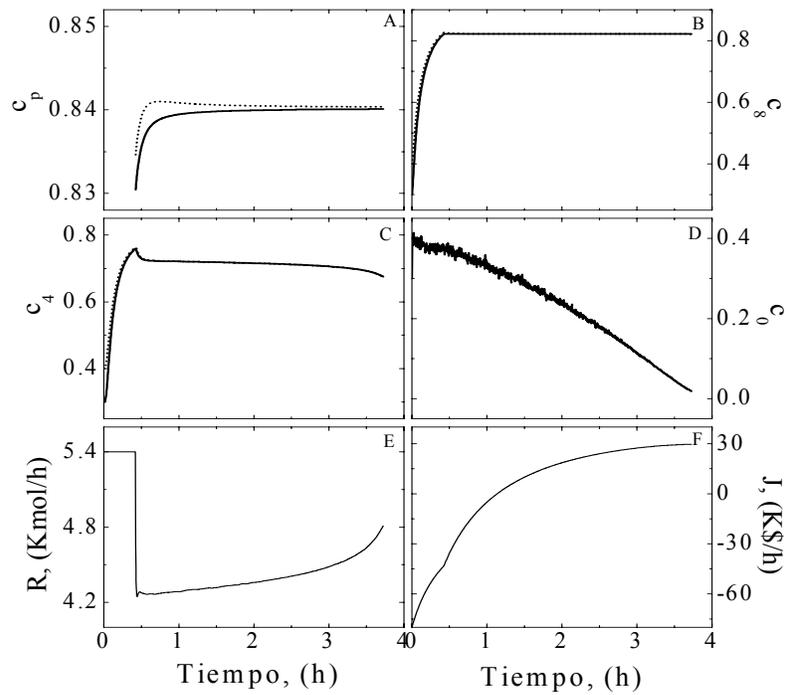


Figura 5.6 Control con un sensor en el evaporador, estados reales (—), estimados (••••).

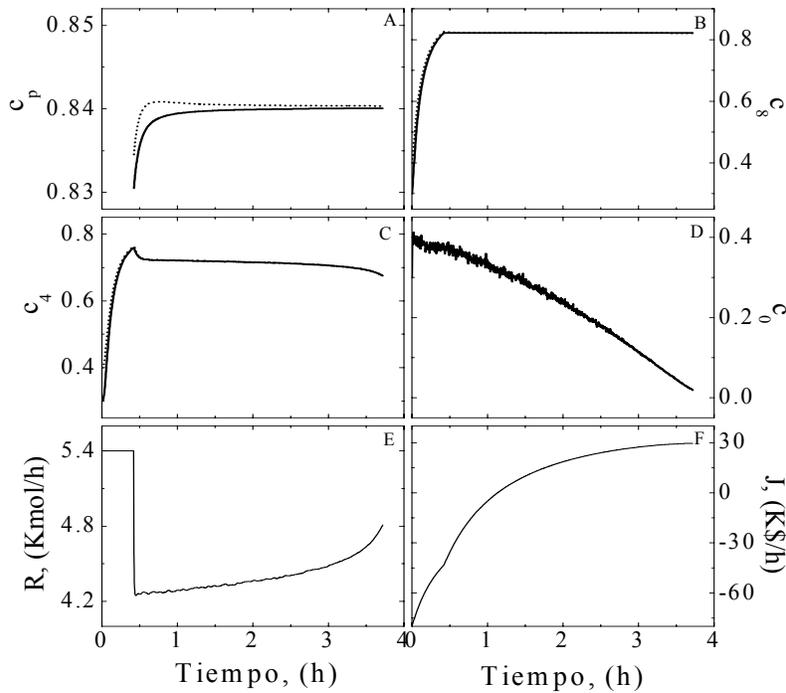


Figura 5.7 Control con dos sensores (evaporador y plato 1), estados reales (—), estimados (••••).

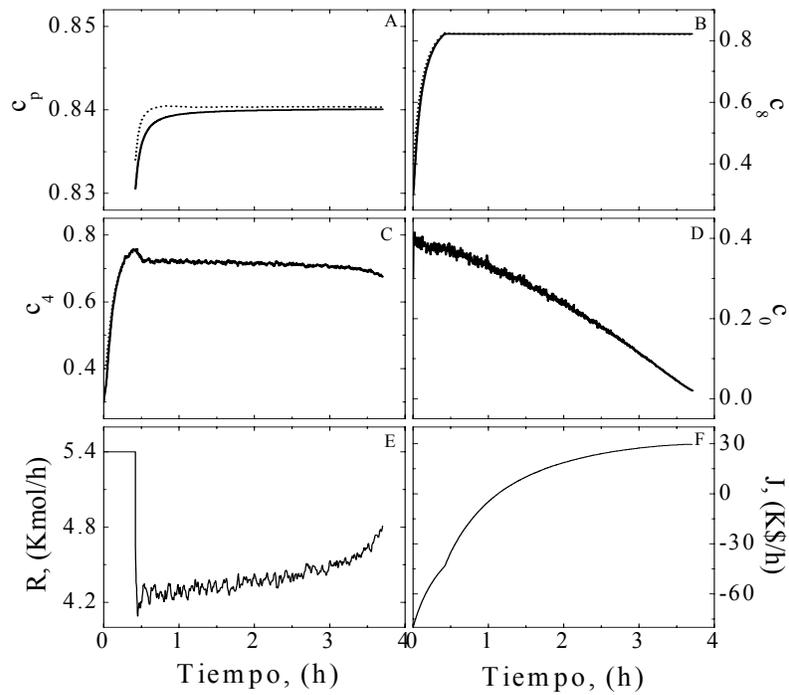


Figura 5.8 Control con dos sensores (evaporador y plato 3). Estados reales (—), estimados (•••).

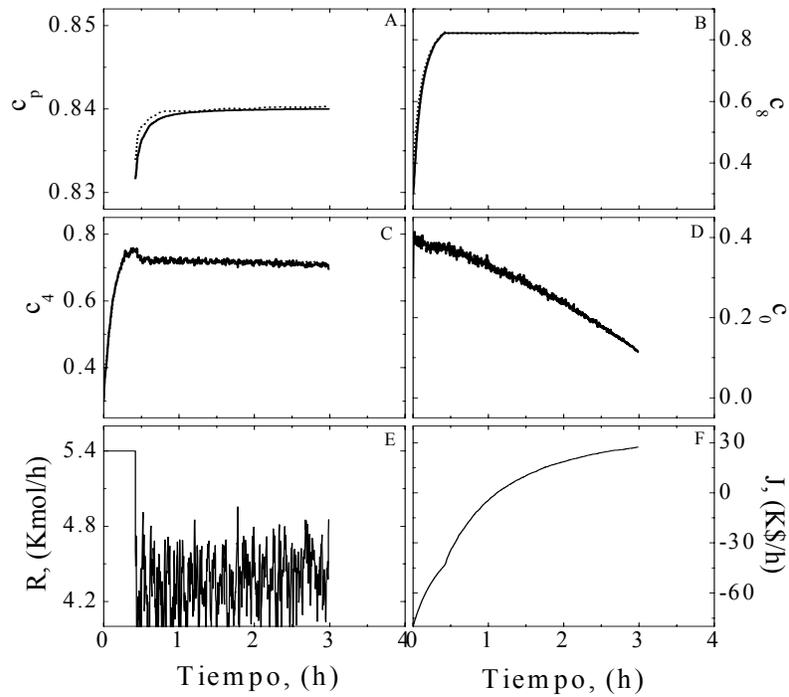


Figura 5.9 Control con dos sensores (evaporador y plato 5). Estados reales (—), estimados (•••).

En las Figuras 5.6 [caso (i)] y 5.7 [caso (ii)] se muestran desempeños similares en todas las variables (composiciones, función objetivo y variable de control). En la Figura 5.8 [caso (iii)] se puede ver que la reconstrucción de estados y la trayectoria de la función objetivo son parecidas a las de las Figuras 5.6 y 5.7. Lo mismo no sucede con la trayectoria de la variable de control, ya que esta se ve más degradada en la Figura 5.8E. La Figura 5.9 es la estructura del estimador [caso (iv)] que exhibe el peor desempeño de los 4 casos. Debido a que la variable de control realiza cambios drásticos (Figura 5.9E) que son perjudiciales para la válvula.

De anteriores resultados se concluye que a medida que un segundo sensor se coloca en etapas superiores de la columna, hay mayor velocidad en la reconstrucción de los estados pero también hay mayor degradación de la variable de control R.

Debido a que las estructuras de los casos (i)-(un sensor en el evaporador) y (ii)-(dos sensores, uno en el evaporador y el otro en el plato 1) resultaron ser las más robustas, en las siguientes simulaciones incrementa a $0.7\text{ }^{\circ}\text{K}$ la desviación estándar del ruido. Los resultados de estas corridas se muestran en las Figuras 5.10 y 5.11.

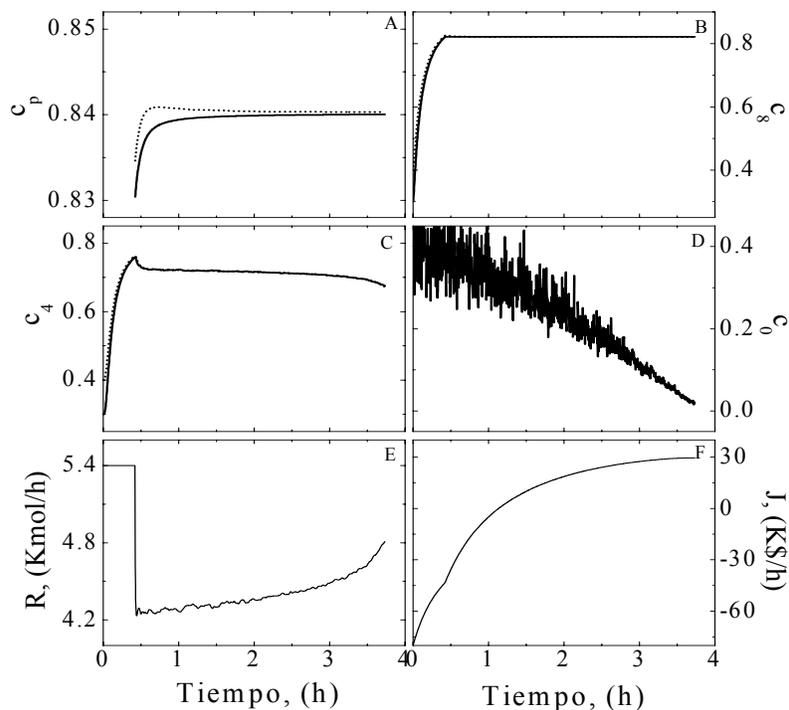


Figura 5.10 Operación a lazo cerrado con un sensor en el evaporador. Estados reales (—), estimados (•••) (desviación estándar del ruido = $0.7\text{ }^{\circ}\text{K}$).

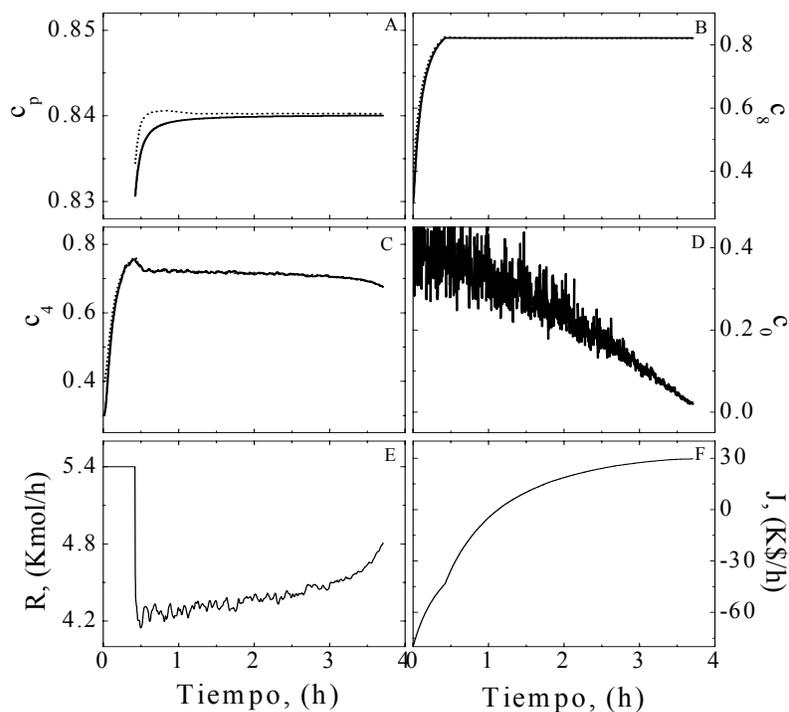


Figura 5.11 Operación a lazo cerrado con dos sensores (evaporador y plato 1). Estados: reales (—), estimados (••••) (desviación estándar del ruido = 0.7 °K).

En las Figuras 5.10 y 5.11 se observa que la reconstrucción de estados y la trayectoria de la función objetivo son similares en ambos casos. La ligera diferencia que se nota es que la trayectoria de la variable de control se ve más degradada cuando se emplean dos sensores (nótese la ligera diferencia en las Figuras 5.10E y 5.11E).

En resumen, la estructura del estimador con un sensor de temperatura colocado en el evaporador es la que más tolera el ruido en las mediciones. Estas últimas simulaciones concuerdan y a su vez fortalecen las conclusiones predichas de las Figuras 5.2-4 donde se dijo que la etapa más adecuada para medición de temperaturas era el evaporador.

Desempeño de control accionado por mediciones.

En esta sección se comparan la operación a lazo cerrado de la columna de destilación por lotes bajo: (i) el esquema propuesto (control accionado por mediciones), (ii) la operación nominal (inversión dinámica), y (iii) el control por retroalimentación de estados (control ideal). Para comparar el esquema de control que se propone es esta tesis, tomamos el de la estructura con un sensor en el evaporador. Dicha comparación se muestra en la Figura 5.12, donde se observa que la

operación de la columna bajo el control por retroalimentación de una temperatura, recupera el comportamiento del controlador por retroalimentación de estados, y este a su vez recupera el comportamiento de la operación nominal.

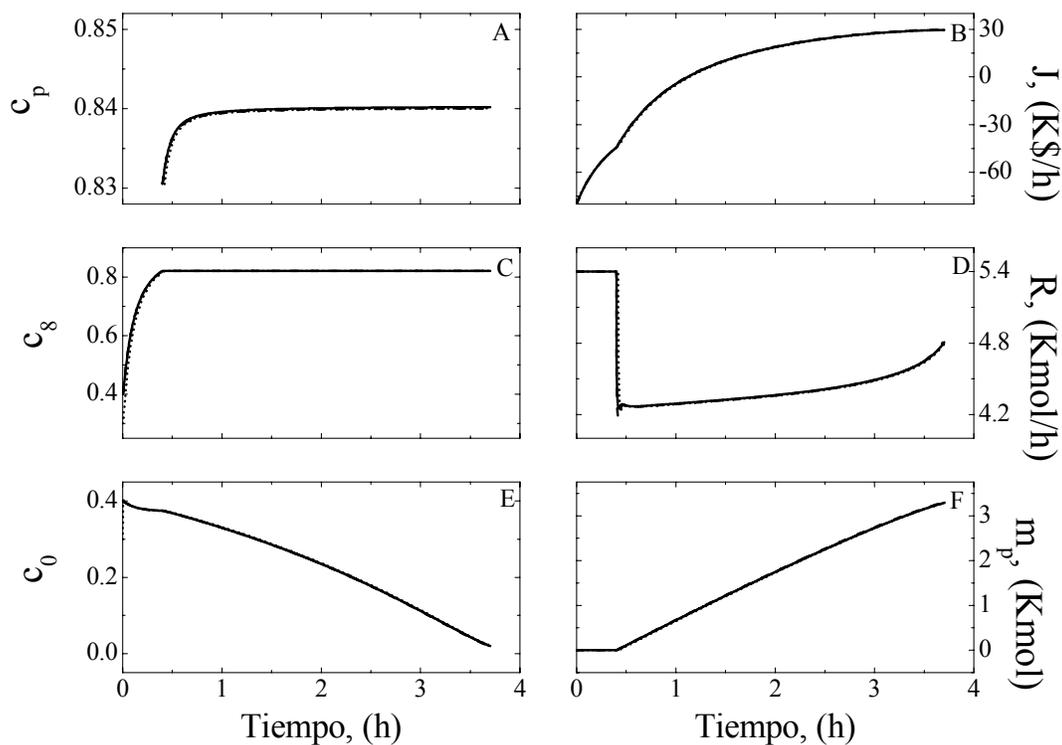


Figura 5.12 Operación a lazo cerrado de: La operación óptima (—), el control por retroalimentación de estados (---) y el control por retroalimentación de salidas (••••).

Tabla 5.1 Comparación de la op., nominal y el control por retroalimentación de mediciones.

	Operación nominal	Control accionado por mediciones
t_s , (h)	0.4003	0.42
t_f , (h)	3.704	3.716
J , (K\$/h)	29.58	29.57
$C_p(t_f)$	0.84	0.84
$c_D(t_f)$	0.84	0.84
$c_8(t_f)$	0.82	0.82

En la Tabla 5.1 se compara numéricamente la operación nominal (la cual le llamamos operación óptima) y el control accionado por mediciones de temperatura, donde podemos apreciar que se obtienen los mismos valores de las variables de interés, que esencialmente son la utilidad (J) y la pureza del producto (c_p). La ganancia del controlador y las condiciones iniciales fueron, $K_c = 13.88 \text{ h}^{-1}$ (0.231 min^{-1}) y

$$m_1 = 7510, \quad c_L = 0.4, \quad b_\eta = 30, \quad (\text{realidad}), \quad (5.13\text{a-c})$$

$$\hat{m}_1 = 7510, \quad \hat{c}_L = 0.3, \quad \hat{J}_0 = -80.0, \quad (\text{estimador}), \quad (5.13\text{d-f})$$

Control de inventarios

El controlador de inventarios (Shinsky, 1979) basado en el estimador se obtiene haciendo cero a la ganancia del controlador accionado por mediciones (ec., 5.10), y queda expresado de la siguiente manera:

$$R = - \frac{V[E(\hat{c}_7) - E(\hat{c}_8)]}{\hat{c}_D - \hat{c}_8} = \hat{\mu}_R, \quad (5.14)$$

El funcionamiento del controlador de inventarios (ec., 5.14) se comparará con el del controlador de la ecuación (5.10), este último es similar al empleado en el trabajo de Barolo y Berto, (1998), Ellos consideran la ganancia del controlador diferente de cero ($K_c = 0.416 \text{ min}^{-1}$). La comparación del desempeño de los controladores (5.10) y (5.14) está en la Figura 5.13.

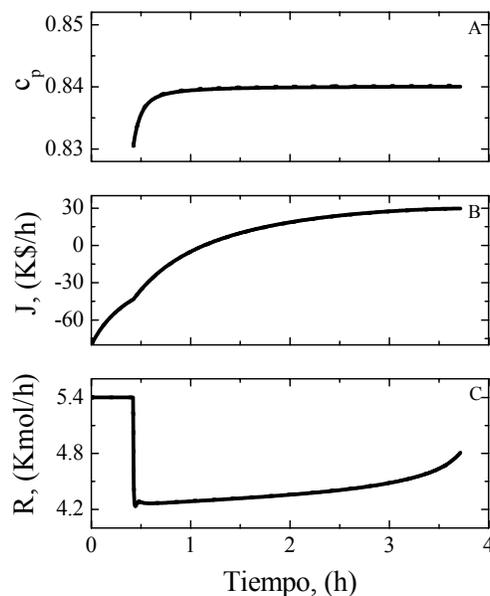


Figura 5.13 Desempeño del control por retroalimentación de mediciones-(—) y el control de inventarios-(••••).

En la Figura 5.13 se compara el funcionamiento del controlador accionado por mediciones (ec., 5.10) y el control de inventarios basado en el estimador (ec., 5.14). De esta Figura se observa que no hay diferencia alguna en el desempeño de ambos controladores.

Puesto que el control por retroalimentación de mediciones y el control de inventarios tienen el mismo desempeño, en el presente trabajo utilizamos al controlador de inventarios como el controlador de seguimiento. De esta forma, nos olvidamos de la sintonización de la ganancia del controlador (5.10). Por otro lado, con el control de inventarios (de BM) ofrecemos un controlador de seguimiento con la estructura de un controlador ideal basado en un estimador de estados.

Por lo tanto, la combinación de las ecuaciones (5.5a-e) y (5.14) representa el esquema de la operación a lazo cerrado para columnas de destilación binarias por lotes que se propone en este trabajo.

A partir de esta parte de la tesis, se utiliza el esquema mencionado en el párrafo anterior para todas las simulaciones siguientes.

Robustez

Para probar la robustez del esquema se presentan dos tipos de errores. El primero consiste en simular ruido en los sensores de temperatura, y el segundo radica en variar la pureza de la carga inicial.

Con respecto al primer tipo de error, se llevan a cabo simulaciones con inyección de ruido en un sensor de temperatura el cual está colocado en el evaporador, se hicieron pruebas para cuatro desviaciones estándar (0.1, 0.5, 0.7 y 1 °K).

Los resultados se muestran en la Figura 5.14, donde podemos ver que la variable de control tiene un comportamiento ya sea suave a brusco según sea la magnitud del ruido, a mayor magnitud (mayor desviación estándar) del ruido, más se degrada el desempeño del controlador. En la Figura 5.14 se presentan únicamente las trayectorias de la variable de control, debido a que es donde se siente más el efecto del ruido. Aunque no se presentan las trayectorias de los estados ni de la función objetivo, se hace mención de que tales trayectorias son esencialmente las mismas en los cuatro casos.

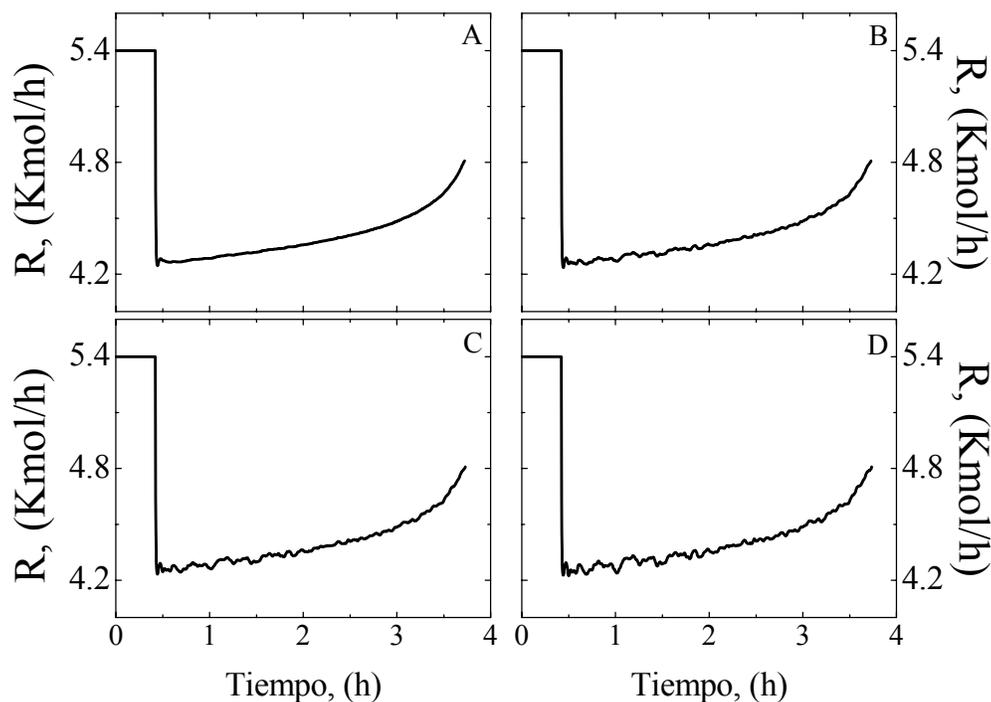


Figura 5.14 Operación de la columna bajo el control de inventarios, con inyección de ruido en el sensor de temperatura y desviaciones estándar de: 0.1-(A), 0.5-(B), 0.7-(C) y 1.0-(D) °K.

Los resultados muestran que el esquema es robusto ante ruido en las mediciones. Comparando este caso (un sensor en el evaporador) con el caso de dos sensores (Figura 5.11), se muestra que el estimador con una medición se ve menos afectado por el ruido en la medición.

Para probar la robustez del esquema frente a incertidumbre en la pureza de la carga, se varió en un amplio rango las condiciones iniciales del proceso $c_L = (0.2, 0.3, 0.4, 0.5 \text{ y } 0.6)$, manteniendo en los cinco casos las condiciones iniciales del estimador en $\hat{c}_L = 0.4$. Además se inyectó ruido en las mediciones de temperatura, la desviación estándar fue de $0.1 \text{ } ^\circ \text{K}$. Los resultados se presentan en la Figura 5.15. Donde se aprecia que los tiempos de cambio de régimen y de paro del lote se ajustan para las diferentes purezas de carga inicial. La tendencia es la siguiente, cuando la mezcla a separar es rica en etanol, mayor es la duración de operación de la columna y también es mayor la utilidad obtenida. Por otro lado, cuando la mezcla inicial es pobre en etanol, el tiempo de operación es corto y la utilidad obtenida también es menor.

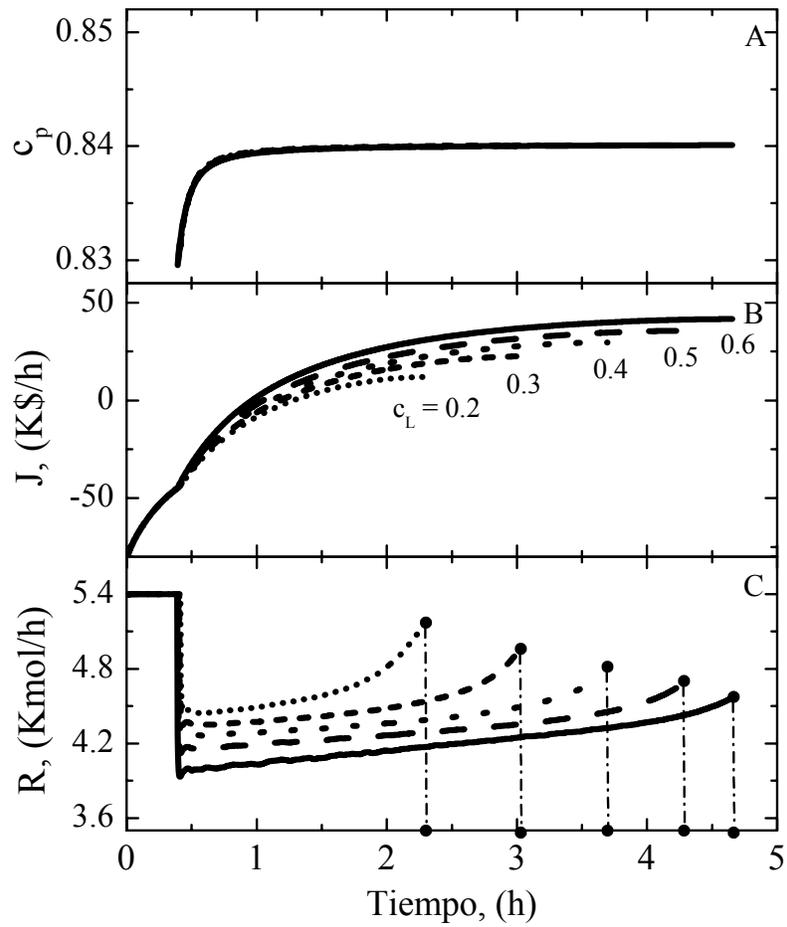


Figura 5.15 Operación a lazo cerrado, para distintas composiciones de alimentación y ruido en las mediciones de temperatura.

Tabla 5.2 Efecto de la pureza de la carga a separar.

c_L	\hat{c}_L	\hat{t}_s (h)	\hat{t}_f (h)	$\hat{J}(\hat{t}_f)$ (K\$/h)	$\hat{c}_p(\hat{t}_f)$	$c_p(\hat{t}_f)$
0.2	0.4	0.4119	2.2957	11.967	0.8400	0.8391
0.3	0.4	0.4061	3.0193	22.443	0.8401	0.8398
0.4	0.4	0.4003	3.6976	29.692	0.8401	0.8401
0.5	0.4	0.3945	4.2745	35.636	0.8401	0.8404
0.6	0.4	0.3887	4.6543	41.614	0.8401	0.8408

En la Tabla 5.2 se presentan cuantitativamente los resultados del funcionamiento del esquema con diferente pureza en la carga de inicial. Los datos indican que a medida que hay más etanol en la carga inicial, dura más la operación del lote, y también mayor es la utilidad obtenida. Lo contrario ocurre con el tiempo de cambio de régimen, ya que a medida que la pureza aumenta, el tiempo de cambio de régimen es menor. Por otro lado, las composiciones real y estimada del producto colectado se mantienen en su valor nominal hasta el final de los lotes.

En la Figura 5.16 se presentan gráficamente los componentes del esquema que recomendamos en esta tesis.

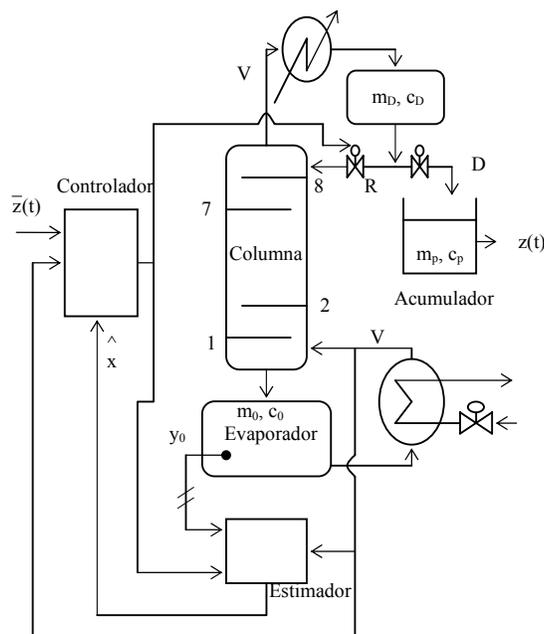


Figura 5.16 Columna de destilación y esquema de control basado en una medición.

Para mostrar que el esquema propuesto en esta tesis para el diseño de la operación y el control de columnas de destilación binarias por lotes, es mejor que el de técnicas anteriores. A continuación se presenta la operación de la columna con diferente pureza de carga bajo: (i) control prealimentado (como se haría con técnicas de optimización), (ii) un controlador perfecto (operación ideal), y (iii) el controlador de inventarios basado en mediciones de temperatura (esquema que proponemos en el presente trabajo).

El funcionamiento de columnas de destilación por lotes bajo control prealimentado, se realiza bajo las siguientes condiciones. Tomamos la operación nominal diseñada para una composición de carga (\bar{c}_L) de 40% de etanol. Los datos nominales de $\bar{R}(t)$, \bar{t}_s y \bar{t}_f , se proporcionan a la serie de los cinco lotes, “creyendo” que todos tienen el 40% de etanol en la carga inicial.

La realidad es que los cinco lotes tienen pureza de carga diferente, esto es, $c_L = [0.2, 0.3, 0.4, 0.5 \text{ y } 0.6]$. Los resultados se muestran en la columna (i) de la Figura 5.17.

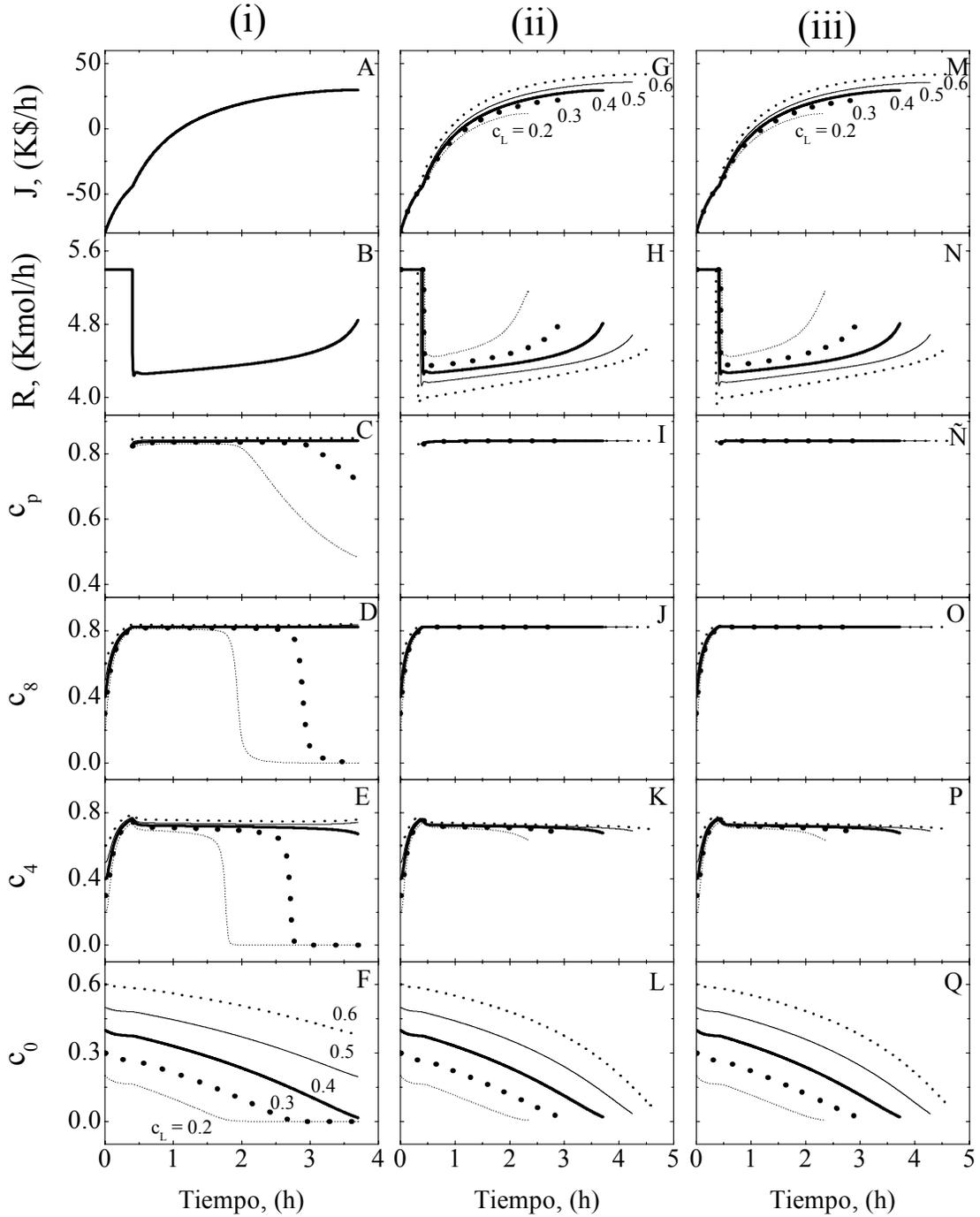


Figura 5.17 Operación de la columna bajo control: (i) Prealimentado, (ii) ideal y (iii) de inventarios basado es mediciones de temperatura.

En la Figura 5.17 columna (ii), se presenta la operación nominal ideal (bajo controlador perfecto y conocimiento exacto de pureza inicial de etanol) de los cinco lotes. Estas simulaciones se presentan con el propósito de ver si el esquema de control por retroalimentación de mediciones propuesto en este trabajo, recupera el comportamiento de la operación nominal ideal.

Finalmente en la columna (iii) de la Figura 5.17 se muestra la serie de los cinco lotes operados bajo el controlador de inventarios basado en el estimador. En los cinco casos se inició con la misma composición de etanol estimada ($\hat{c}_L = 0.4$), “creyendo” que los cinco lotes tenían la misma pureza. La realidad es que en la planta se tenían purezas de etanol diferentes, estas fueron $c_L = [0.2, 0.3, 0.4, 0.5 \text{ y } 0.6]$. Lo anterior se presenta para hacer una comparación justa del funcionamiento del esquema propuesto, con la operación nominal y con la operación de la columna bajo control prealimentado.

Las Figuras 5.17A-F muestran que no conviene operar columnas de destilación por lotes bajo políticas de control prealimentado. Debido a que generalmente estas políticas de operación están diseñadas para una condición inicial y en el escenario industrial hay gran variabilidad en la pureza de la carga. Cuando la columna se opera bajo una política diseñada con carga inicial por arriba de la que en realidad tiene, al final de la operación la composición del producto colectado se obtiene por debajo de su composición nominal (lo cual ocasiona pérdidas de dinero, porque se tiene que volver a destilar el lote). Y en general, todas las composiciones de la columna se obtienen por debajo de su valor nominal al final de la operación. Lo anterior se debe a que la tasa de reflujo implementada es menor que la requerida (cuando hay poco componente ligero, es más difícil la separación). También debemos recordar que t_s y t_r están fijos y si en la mezcla inicial hay poco etanol, posiblemente se agote antes de que la operación del lote se pare.

Sucede lo contrario para columnas de destilación por lotes, operadas bajo control prealimentado diseñadas con composiciones iniciales por debajo de las que en realidad tienen.

Las Figuras 5.17M-Q muestran la operación de la columna de destilación binaria por lotes bajo el control de inventarios que se propone en este trabajo. El control de inventarios recupera el comportamiento de la operación nominal (Figuras 5.17G-L). Además, el desempeño es robusto ante errores de modelado, incertidumbre en la composición de carga inicia y ruido en la medición de temperatura.

5.5 Conclusiones

En este capítulo se presentó es esquema propuesto para operar columnas de destilación binarias por lotes. Los componentes que conforman el esquema propuesto son: (i) un controlador de inventarios (para fines de seguimiento), (ii) un control de eventos y, (iii) un estimador de estados. El control de inventarios propuesto pertenece a la estructura de un controlador ideal prealimentado (feedforward). Este tipo de controladores lo recomiendan en la literatura para procesos que son difíciles de controlar, como lo son los procesos por lotes. Por otro lado, el control de eventos decide los tiempos de cambio de régimen y de paro del lote. Para que funcionen los dos controladores se requiere del conocimiento de algunos estados. La información de los estados requeridos la proporciona el estimador de estados implementado, que basado en mediciones de temperatura infiere en tiempo real las composiciones de la mezcla en la columna. En base a los análisis realizados, se encontró que la estructura del estimador que más tolera el ruido en las mediciones, es la utilizar un sensor ubicado en el evaporador. El diseño e implementación del estimador usado es más sencillo que el FEK y el EEL reportados previamente. Para finalizar, se mostró mediante simulaciones que el esquema que proponemos para operar columnas de destilación binarias por lotes, es mejor que los esquemas reportados anteriormente.

Capítulo 6

CONCLUSIONES

En este último capítulo se reseñan los resultados y aportaciones de la tesis, y se propone el trabajo a futuro para darle continuidad al tema que se abordó en el presente trabajo.

6.1 Conclusiones y aportaciones del trabajo

En esta tesis se propuso un esquema para diseñar dentro de un mismo marco teórico la operación y el control de columnas de destilación binarias por lotes. El esquema propuesto se basa en una metodología desarrollada previamente para procesos por lotes en general, y en este trabajo se aplicó al caso particular de una columna de destilación binaria por lotes.

El diseño de la operación nominal consistió en, dadas la especificación de pureza de producto \bar{c}_p , la función objetivo \bar{J} (de utilidad) y la carga de suministro de calor (proporcional a \bar{V}^+), determinar la política de reflujo $\bar{R}(t)$, y los tiempos de operación a reflujo total y de duración del lote, \bar{t}_s y \bar{t}_f respectivamente. Apoyándonos en que los controladores pasivos son robustos, sencillos y no desperdiciantes, se determinó como salida a regular la composición del plato N (c_N). El diseño de la operación nominal se llevó a cabo mediante la inversa dinámica del proceso.

La parte de *diseño de control* consistió en, dada la operación nominal (estados y entradas de control) y la posibilidad de medir temperaturas, diseñar un controlador que accionado por las mediciones mantenga la tendencia de la operación nominal (que nosotros denominamos como operación óptima) frente a perturbaciones en la composición de carga, errores de modelado y ruido en las mediciones.

El control propuesto lo conforman tres partes, (i) un estimador de estados (ii) un controlador de eventos y (iii) un controlador de seguimiento. El controlador de seguimiento propuesto, coincidió con el controlador de inventarios ideal prealimentado (feedforward). El cual es teóricamente un controlador perfecto no importando la dificultad del proceso. Que mantiene la composición de salida en su valor nominal, balanceando continuamente la materia y la energía entregada al proceso frente a la demanda de la carga. El controlador de eventos decide automáticamente: (i) en que momento cambia la operación de reflujo total a periodo de producción, y (ii) la finalización de la operación. Para que ambos controladores funcionaran se requirió del conocimiento de algunas composiciones, tal información fue proporcionada por el estimador de estados, el cual, mediante la medición de temperaturas infiere los estados requeridos por los controladores.

El funcionamiento del esquema se probó variando las composiciones de alimentación e inyectando ruido en las mediciones de temperatura. Los resultados obtenidos muestran que el esquema es robusto ante tales errores, ya que en todos los casos se recuperó el comportamiento de la operación nominal, la tendencia fue la siguiente, a mayor pureza de etanol en la carga inicial, mayor era el tiempo de operación y también mayor la utilidad, por otro lado, a menor pureza de etanol, menor el tiempo de operación y también menor la utilidad, en todos los casos la composición del producto colectado terminó en la especificada y la utilidad en su máximo valor. Con estos resultados se mostró que la estrategia propuesta es factible para situaciones reales, donde generalmente existe incertidumbre en la pureza de la carga, y donde como se dijo en el capítulo 5, la implementación de las estrategias de optimización presentan dificultades.

Peculiaridades del presente trabajo (no reportadas anteriormente):

- Se utilizó la forma diferencial de la función objetivo para realizar la optimización en línea del proceso.
- Mediante simulaciones se encontró que la operación de la planta bajo el controlador no lineal (5.3), funciona igual con el valor de la ganancia (K_c) igual o diferente de cero.

Resumiendo, el diseño e implementación del esquema propuesto es sistemático y más sencillo que las técnicas de optimización convencional y los resultados obtenidos en este trabajo son similares o mejores que los logrados por los métodos convencionales. Por la sencillez y robustez del esquema propuesto, se puede decir que hay amplias posibilidades de que se pueda implementar en una situación real.

6.2 Trabajo futuro

Como trabajo a futuro se propone lo siguiente

- Comparar cuantitativamente la estrategia propuesta en este trabajo con alguna técnica de optimización convencional.
- Ampliar el esquema al caso de mezclas multicomponentes.
- Implementar la estrategia propuesta a nivel planta piloto, para mezclas binarias en un principio y posteriormente a mezclas multicomponentes.
- Planear el diseño de la operación de columnas de destilación por lotes en el horizonte lote a lote.

APÉNDICE A

Suposiciones del modelo

i) La cantidad de vapor acumulado en cada plato se desprecia. Esta suposición no se debe hacer cuando los componentes en la mezcla a separar sean muy volátiles, para columnas que operan a altas presiones y para separaciones criogénicas donde por lo regular la densidad del líquido es baja (Skogestad, 1992). La cantidad de vapor acumulado se puede despreciar para columnas que operan a menos de 10 bares de presión (Choe y Luyben, 1987).

ii) Las entalpías de evaporación molar de los componentes de la mezcla líquida son aproximadamente iguales. Esto implica que un mol de vapor que se condensa transmite suficiente calor para vaporizar un mol de líquido (Stephanopoulos, 1984; Skogestad, 1992).

iii) La columna esta aislada térmicamente (Stephanopoulos, 1984).

iv) Se modelará la hidráulica de plato de acuerdo a la versión linealizada de la ecuación de Francis (Skogestad y Morari, 1988), (Barolo y Berto, 1998).

v) Presión es constante en toda la columna.

vi) También se supondrá que la dinámica de los balances de energía es mucho más rápida que los flujos líquidos y composiciones (Pradeep, 1985). Esta suposición junto con i), ii), y iii) simplifican el modelo matemático de la columna.

vii) Se tiene un condensador total (todo el vapor proveniente del último plato se condensa) de modo que el destilado y el reflujo del condensador tienen la misma composición (Stephanopoulos, 1984; Barolo y Berto, 1998).

viii) Los platos tienen una eficiencia de separación del 100%, lo que implica que el vapor que sale de cada etapa esta en equilibrio termodinámico con el líquido de esa misma etapa (Sorensen, 1994; Stephanopoulos, 1984; Barolo y Berto, 1998).

ix) Se desprecia el balance de momentum en cada plato (Stephanopoulos, 1984).

Las tres primeras suposiciones implican que el flujo de vapor en todas las etapas de la columna sea el mismo, es decir, que un cambio de flujo de vapor en el fondo de la columna, inmediatamente cambiará el flujo de vapor en la parte superior de la misma (Skogestad, 1992).

Modelo completo

El siguiente modelo que se presenta se usa como representación de una columna de destilación por lotes, solo se considera una mezcla binaria, pero se puede ampliar a mezclas de más componentes.

Balances para un plato cualquiera.

La primera ecuación que se escribe es el balance total de masa, la cual, cuando no hay reacción química, se puede escribir en unidades molares (Smith y Corripio, 1994). Valido para cualquier plato, exceptuando el último. Recordar que los platos se numeran de abajo hacia arriba.

$$\dot{m}_i = L_{i+1} - L_i, \quad 1 < i \leq N, \quad (\text{A.1})$$

Para escribir el balance de masa del componente más volátil en cada plato, se supone que el líquido en la misma etapa esta perfectamente mezclado, de manera que las propiedades del líquido que sale del plato son iguales a las del líquido que resta en el mismo. Sin esta aproximación de parámetro localizado, seria necesario escribir los balances en cada punto del plato y las ecuaciones resultantes serian diferenciales parciales. También se supone que el líquido que fluye hacia abajo se mezcla perfectamente con el que está en el plato. El balance en el plato i del componente más volátil es:

$$(\dot{m}_i c_i) = c_i \dot{m}_i + m_i \dot{c}_i = L_{i+1} c_{i+1} + V E(c_{i-1}) - L_i c_i - V E(c_i), \quad 1 < i \leq N, \quad (\text{A.2})$$

al sustituir la ecuación (A.1) en la ec., (A.2) y reorganizando obtenemos

$$\dot{c}_i = \frac{\{L_{i+1}[c_{i+1} - c_i] + V[E(c_{i-1}) - E(c_i)]\}}{m_i}, \quad 1 < i \leq N, \quad (\text{A.3})$$

Balances para el evaporador.

Consideramos que la razón de recirculación a través del hervidor es alta en comparación con la razón de sedimentación. Por esta razón se supone que el líquido esta bien mezclado y tiene la misma composición en todo el evaporador.

♦ Balance de masa

$$\dot{m}_0 = L_1 - V, \quad (\text{A.4})$$

- ♦ Dinámica de composición en el evaporador.

$$\dot{c}_0 = \frac{\{L_1[c_1 - c_0] + V[c_0 - E(c_0)]\}}{m_0}, \quad (A.5)$$

Balances para el plato superior.

♦ Balance de masa; considerando que del condensador se recircula R, el balance se escribe de la siguiente forma:

$$\dot{m}_N = R - L_N, \quad (A.6)$$

- ♦ Dinámica de composición en el plato N.

$$\dot{c}_N = \frac{\{R[c_D - c_N] + V[E(c_{N-1}) - E(c_N)]\}}{m_N}, \quad (A.7)$$

Balances para el condensador.

♦ La dinámica de masa total de esta parte se supuso despreciable. D es la velocidad de flujo de destilado.

$$\dot{m}_D = V - R - D = 0, \quad (A.8)$$

- ♦ Dinámica de composición en el condensador queda de la siguiente forma:

$$\dot{c}_D = \frac{V[E(c_N) - c_D]}{m_D}, \quad (A.9)$$

Balances para el recipiente colector de producto

- ♦ Balance de masa

$$\dot{m}_p = V - R, \quad (A.10)$$

- ♦ Dinámica de composición en el acumulador.

$$\dot{c}_p = \frac{[V - R][c_D - c_p]}{m_p}, \quad (A.11)$$

Debido a que en el periodo $[0, t_s]$ $m_p = 0$, la ecuación (A.11) se singulariza, una manera alternativa para calcular $c_p(t)$, (Luyben, 1971) es:

$$c_p = \frac{\int_{t_s}^{t_r} (V-R)c_D}{\int_{t_s}^{t_r} (V-R)}, \quad (A.12)$$

Para realizar la optimización, se requiere definir una función objetivo. En esta tesis lo que se desea maximizar es la utilidad, por lo tanto se hace el siguiente balance de costos.

$$\text{Utilidad} := J = \frac{(\text{Precio del producto} - \text{Gastos de operación})}{\text{tiempo del lote} + \text{tiempo muerto}}, \quad (\text{A.13})$$

$$\text{precio del producto} = \{C_p m_p(t)\}$$

$$\text{gastos de operación} \left\{ \begin{array}{ll} C_L m_L & = \text{Costo de materia prima} \\ C_h \lambda_V \int_0^t V(\tau) d\tau & = \text{Costo por calentamiento} \\ C_c \lambda_R \int_0^t V(\tau) d\tau & = \text{Costo por enfriamiento} \\ C_O(t_f + t_d) & = \text{Costo de planta} \end{array} \right\}$$

$$J(t) = \frac{[C_p m_p(t) - C_L m_L - C_h \lambda_V \int_0^t V(\tau) d\tau - C_c \lambda_R \int_0^t V(\tau) d\tau - C_O(t_f + t_d)]}{(t + t_d)}, \quad (\text{A.14})$$

simplificando

$$J(t) = \frac{[C_p m_p(t) - C_L m_L - C_h \lambda_V \int_0^t V(\tau) d\tau - C_c \lambda_R \int_0^t V(\tau) d\tau]}{(t + t_d)} - C_O, \quad (\text{A.15})$$

Donde: J es la utilidad (\$) por unidad de tiempo, C_p es el costo del producto por mol, C_L es el costo de la materia prima por mol, C_h es el costo de calentamiento por unidad de calor; C_c es el costo de enfriamiento por unidad de calor, C_O es el costo de operación de la columna por unidad de tiempo, t_d es el tiempo muerto (carga, descarga y limpieza de la columna), λ_V es un valor aproximado del calor latente de vaporización de la mezcla a separar, λ_R es un valor aproximado del calor latente de condensación de la mezcla.

La forma diferencial de la ecuación (A.15) es:

$$\dot{J}(t) = \frac{[-J + C_p(V - R) - C_h \lambda_V V - C_c \lambda_R V - C_O]}{(t + t_d)}, \quad J_0(0) = -\left(\frac{C_L m_L}{t_d} + C_O\right), \quad (\text{A.16})$$

Modelo Reducido

El modelo que se presenta en esta sección reutiliza para diseño de la operación y control. Para obtener el modelo reducido, se supone estado cuasi-estacionario de los acumulados en los platos, (Levy et al., 1969). Esta suposición es valida ya que la dinámica de los flujos líquidos es mucho más rápida que la de composiciones (Khalil, 1995). Castellanos-Sahagún y Alvarez, (1994) emplean un modelo reducido para control de composición en columnas de destilación continua.

La suposición de régimen cuasi-estacionario de la hidráulica implica que:

$$L_1 \approx L_2 \approx \dots \approx L_{N-1} \approx L_N \approx R, \quad (\text{A.17})$$

Recordando que la velocidad de flujos líquidos interno se modela de acuerdo a la versión linealizada de la ecuación de Francis (2.3.),

$$L_i = a_\eta + \frac{(m_i - b_\eta)}{\tau_\eta}, \quad (2.3)$$

sustituyendo la ecuación (2.3) en la ec., (A.17) obtenemos

$$a_\eta + \frac{(m_1 - b_\eta)}{\tau_\eta} \approx a_\eta + \frac{(m_2 - b_\eta)}{\tau_\eta} \approx \dots \approx a_\eta + \frac{(m_{N-1} - b_\eta)}{\tau_\eta} \approx a_\eta + \frac{(m_N - b_\eta)}{\tau_\eta} \approx R, \quad (A.18)$$

resolviendo para m_i , $1 \leq i \leq N$ llegamos a

$$m_1 \approx m_2 \approx \dots \approx m_{N-1} \approx m_N \approx \eta(R) \approx (R - a_\eta)\tau_\eta + b_\eta, \quad (A.19)$$

Sustituyendo las ecuaciones (A.17) y (A.19) en las ecs., (A.1) y (A.3-7) se obtiene el modelo reducido (versión simplificada del modelo completo). En el que se puede ver que N ecuaciones diferenciales (A.1) son reemplazadas por una ecuación algebraica (A.19).

Dinámicas de masa y composición en el evaporador

$$\dot{m}_0 = R - V, \quad (A.20)$$

$$\dot{c}_0 = \frac{\{R[c_1 - c_0] + V[c_0 - E(c_0)]\}}{\eta(R)}, \quad (A.21)$$

Dinámica de composición para cualquier plato de la columna, exceptuando el último

$$\dot{c}_i = \frac{\{R[c_{i+1} - c_i] + V[E(c_{i-1}) - E(c_i)]\}}{\eta(R)}, \quad 1 < i \leq N-1, \quad (A.22)$$

Dinámica de composición en el plato N

$$\dot{c}_N = \frac{\{R[c_D - c_N] + V[E(c_{N-1}) - E(c_N)]\}}{\eta(R)}, \quad (A.23)$$

Dinámica de composición en el condensador

$$\dot{c}_D = \frac{V[E(c_N) - c_D]}{m_D}, \quad (A.24)$$

Dinámicas de masa y composición en el acumulador

$$\dot{c}_p = \frac{[V - R][c_D - c_p]}{m_p}, \quad (A.25)$$

$$\dot{m}_p = V - R, \quad (A.26)$$

$\eta(R) = (R - a_\eta)\tau_\eta + b_\eta$ representa el acumulado molar en los platos de acuerdo a la versión linealizada de la ecuación de Francis.

Equilibrio termodinámico

En la destilación, la distribución de los componentes de una mezcla se lleva a cabo cuando las fases se ponen en contacto en etapas (platos). Si hay suficiente tiempo de contacto, las especies químicas se distribuirán en las fases de acuerdo con las consideraciones termodinámicas de equilibrio. El equilibrio termodinámico entre una mezcla líquida y su vapor se presenta cuando las fugacidades de ambas fases son iguales (Prausnitz et al., 1980)

$$f_{iV} \equiv f_{iL}, \quad (\text{A.27})$$

donde f_{iV} es la fugacidad del componente i en fase vapor y f_{iL} es la fugacidad del componente i en fase líquida. Para formar una relación de equilibrio se sustituyen las fugacidades por las expresiones equivalentes en función de fracciones molares. Las sustituciones pueden ser muy diversas. La siguiente ecuación es una forma de cómo se expresan las fugacidades.

$$f_{iV} = \phi_i E(c_i) P_T \quad (\text{A.28})$$

$$f_{iL} = \gamma_i c_i f_i^{\text{pl}} \quad (\text{A.29})$$

Donde ϕ_i es el coeficiente de fugacidad de la especie i en fase gas, $E(c_i)$ es la función del equilibrio vapor-líquido mediante la cual se obtiene la composición del componente i , P_T es la presión total (mmHg), γ_i es el coeficiente de actividad en fase líquida de la especie i , c_i es la fracción molar del componente i en el líquido, y f_i^{pl} es la fugacidad del líquido puro en estado estándar (mmHg).

A bajas presiones el valor de ϕ_i es cercano a la unidad. También a bajas presiones, la fugacidad (f_i^{pl}) del líquido se puede sustituir por su presión de vapor (P_i^s) (Prausnitz et al., 1980). Por lo tanto el equilibrio vapor-líquido está dado por

$$E(c_i) P_T = \gamma_i c_i P_i^s, \quad (\text{A.30})$$

Si el sistema a separar se puede describir como solución ideal, el coeficiente de actividad en (A.30) es igual a 1, esto es:

$$E(c_i) P_T = c_i P_i^s, \quad (\text{A.31})$$

Una solución ideal es cuando las diferencias de tamaño molecular son pequeñas y las interacciones entre las moléculas iguales son similares a las interacciones entre moléculas diferentes. Las soluciones ideales forman un sistema homólogo.

Para una mezcla binaria de componentes i y j , además de la ec., (A.31) se tiene la siguiente ecuación:

$$E(c_j) P_T = c_j P_j^s, \quad (A.32)$$

sumando las ecs., (A.31) y (A.32) se tiene

$$E(c_i) P_T + E(c_j) P_T = c_i P_i^s + c_j P_j^s, \quad (A.33)$$

dividiendo entre P_T se llega a

$$E(c_i) + E(c_j) = \frac{P_i^s}{P_T} c_i + \frac{P_j^s}{P_T} c_j \quad (A.34)$$

para una mezcla binaria se tiene que

$$E(c_i) + E(c_j) = 1, \quad c_i + c_j = 1 \quad (A.35a-b)$$

despejando c_j se tiene

$$c_j = 1 - c_i \quad (A.35c)$$

La ecuación de Antoine es una correlación empírica ampliamente usada para estimar las presiones de vapor P_i^s y P_j^s [ecs., (A.36) y (A.37)]. En la literatura existen datos reportados de las constantes A , B , y C para un gran número de sustancias (Henley y Seader, 1990).

$$\log P_i^s = A_i - \frac{B_i}{C_i + T} \quad (A.36)$$

$$\log P_j^s = A_j - \frac{B_j}{C_j + T} \quad (A.37)$$

sustituyendo las ecuaciones (A.35a), (A.35c), (A.36) y (A.37) en la ecuación (A.34) se tiene

$$1 = E(c_i) + E(c_j) = \frac{10^{[A_i - B_i/(C_i + T)]}}{P} c_i + \frac{10^{[A_j - B_j/(C_j + T)]}}{P} (1 - c_i) \quad (A.38)$$

rearrreglando la ecuación anterior llegamos a

$$f_{bi}(c_i, T) = \frac{10^{[A_i - B_i/(C_i + T)]}}{P} c_i + \frac{10^{[A_j - B_j/(C_j + T)]}}{P} (1 - c_i) - 1 = 0 \quad (A.39)$$

Las constantes de la ecuación de Antoine A_{ij} , B_{ij} , y C_{ij} en la ecuación (A.38) son conocidas. Si la columna se opera a presión constante, entonces P también es conocida. Para resolver para T la ecuación algebraica no lineal (A.39) se tiene que dar el valor de la composición c_i . La ecuación se resolvió con el método de Müller.

En líquidos que contienen especies polares diferentes, especialmente cuando se forman o se rompen enlaces de hidrógeno, casi nunca es válida la suposición de solución líquida ideal. Para este tipo de líquidos, se emplea el coeficiente de actividad de la fase líquida para calcular el equilibrio. Se tiene que disponer de datos experimentales para determinar los parámetros de interacción binaria que intervienen en las correlaciones del coeficiente de actividad. Si no se tienen datos experimentales, se pueden emplear los métodos de contribución de grupos (Henley y Seader, 1990).

Por tanto, para una mezcla binaria el equilibrio de la especie i está dado por la ec., (A.30)

$$E(c_i) P_T = \gamma_i c_i P_i^s,$$

y el de la especie j por

$$E(c_j) P_T = \gamma_j c_j P_j^s, \quad (A.40)$$

Para el caso de una mezcla binaria, con solución líquida no ideal y siguiendo el mismo procedimiento que en las ecuaciones (A.33) a la (A.38) se llega a

$$f_b(c, T) = \frac{10[A_i - B_i/(C_i + T)]}{P} \gamma_i c_i + \frac{10[A_j - B_j/(C_j + T)]}{P} \gamma_j (1-c_i) - 1 = 0 \quad (A.41)$$

En la literatura existen varias formas de estimar los coeficientes de actividad (Henley y Seader, 1990). En este trabajo se determinan mediante las ecuaciones (A.42) y (A.43) (NRTL Nonrandom Two Liquids, (Gmehling y Onken, 1977).

$$\ln \gamma_i = c_2^2 \left[\tau_{21} \left(\frac{G_{21}}{c_1 + c_2 G_{21}} \right)^2 + \left(\frac{\tau_{12} G_{12}}{(c_2 + c_1 G_{21})^2} \right) \right], \quad (A.42)$$

$$\ln \gamma_j = c_1^2 \left[\tau_{12} \left(\frac{G_{12}}{c_2 + c_1 G_{12}} \right)^2 + \left(\frac{\tau_{21} G_{21}}{(c_1 + c_2 G_{12})^2} \right) \right], \quad (A.43)$$

donde
$$\tau_{12} = \frac{g_{12} - g_{21}}{RT}, \quad \tau_{21} = \frac{g_{21} - g_{11}}{RT}, \quad (A.44)$$

$$G_{12} = \exp(-\alpha_{12} \tau_{12}), \quad G_{21} = \exp(-\alpha_{21} \tau_{21}), \quad (A.45)$$

g_{ij} son parámetros para interacción entre componentes i y j , R es la constante universal de los gases (cal/mol °K). La solución de la ecuación (A.41) es similar a la solución de la ec., (A.39). Las constantes ($A_{i/j}$, $B_{i/j}$, y $C_{i/j}$) de la ecuación de Antoine son conocidas. P también es conocida. Para resolver la ecuación algebraica no lineal (A.41) se da el valor de la composición c_i y se obtiene la temperatura de burbuja de la mezcla, para lo cual se empleó el método de Müller.

Las constantes de la ecuación de Antoine para el sistema binario etanol-agua son las siguientes (Gmehling y Onken, 1977).

Tabla A.1. Valores de las constantes de la ecuación de Antoine, ecs., (A.36) y (A.37).

Componente	A	B	C
Etanol (1)	8.1122	1592.864	-46.966
Agua (2)	8.07131	1730.630	-39.724

Los valores de los parámetros para el cálculo de los coeficientes de actividad (mediante NRTL) del sistema etanol-agua se presentan en la siguiente Tabla.

Tabla A.2 Valores de los parámetros de interacción, ec., (A.31)

Parámetro	Valor
$\alpha_{21} = \alpha_{12}$	0.2951
$g_{12} - g_{21}$	-152.9335
$g_{21} - g_{11}$	1342.5010

(El subíndice 1 denota el componente más volátil, etanol)

con $R = 1.987$ (cal/mol °K) (constante universal de los gases) y presión total, $P_T = 760$ mmHg.

En las siguientes figuras se muestran los diagramas de equilibrio vapor-líquido del sistema etanol-agua. Los diagramas se presentan para los casos de solución ideal (A.39) y no ideal (A.41).

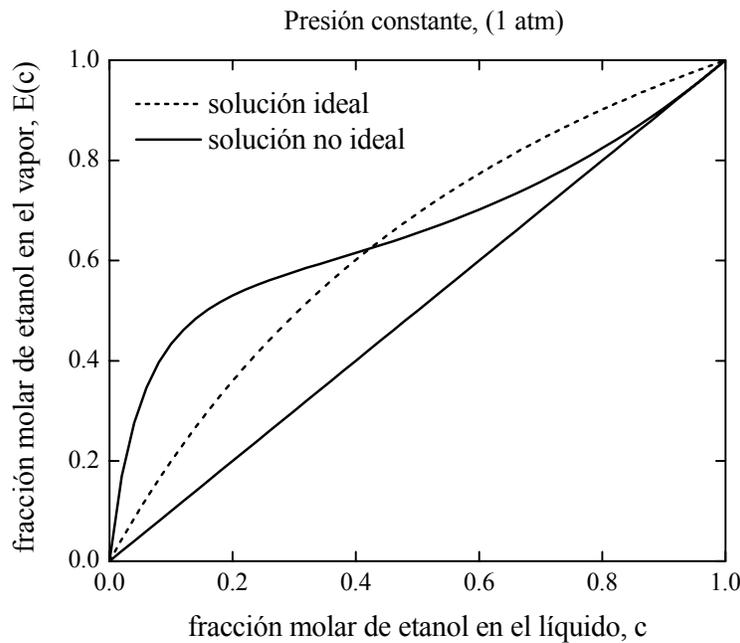


Figura A.1. Diagrama de equilibrio, c vs $E(c)$

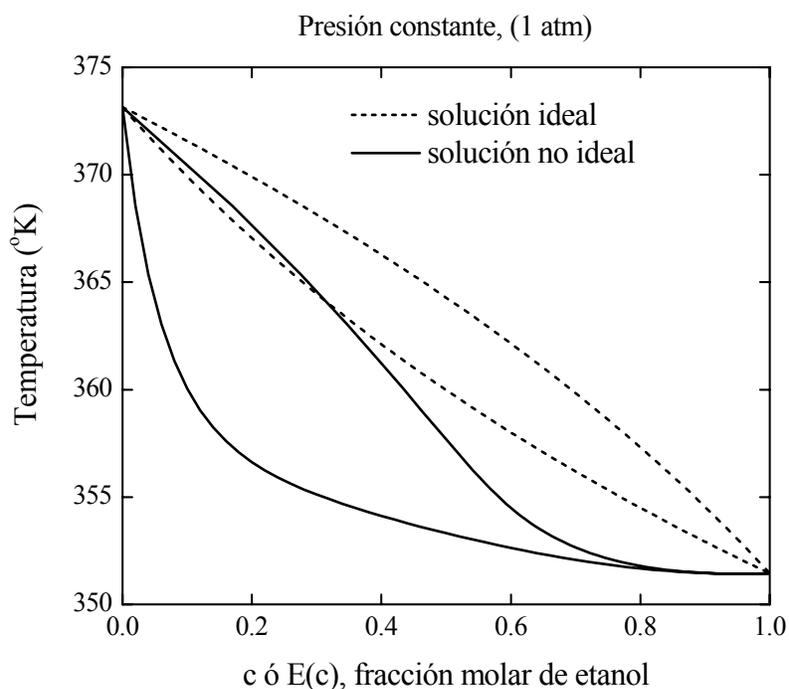


Figura A.2. Diagrama de equilibrio, c y E(c) vs T

En las dos Figuras anteriores se muestran los diagramas del sistema etanol-agua modelados como solución ideal (- - -) y como solución no ideal (—). Se puede ver que cuando se modela como solución no ideal se puede predecir el azeótropo ($c_a = 0.96$). Dado que el sistema etanol-agua es un sistema muy polar, se tiene que modelar como solución ideal. Por tanto, las simulaciones que se presentan en este trabajo se hacen considerando solución no ideal.

Tabla A.3 Valores de los calores latentes de vaporización y condensación, ecs., (4.1a-b).

λ_V^{OH} , (kJ/mol)	38.65
$\lambda_V^{H_2O}$, (kJ/mol)	37.54
λ_R^{OH} , (kJ/mol)	-38.65
$\lambda_R^{H_2O}$, (kJ/mol)	-37.54

En el capítulo 5 (control) se presenta el estimador implementado en este trabajo, cuya construcción se aborda brevemente en el apéndice B. Uno de los términos de las ganancias del estimador es la derivada parcial de la temperatura respecto a la composición, esto es

$$\frac{\partial\beta(c)}{\partial c} = \beta'(c) \quad (\text{A.46})$$

donde $\beta(c)$ representa la función de la temperatura de burbuja de la mezcla, la cual se calcula resolviendo la ecuación algebraica no lineal (A.41). Esto es

$$f_b[c,T] = 0, \quad (\text{A.47})$$

dado que en la ec., (A.47) las variables c y T son implícitas, la derivada parcial de β respecto a c se calcula como sigue (Granville, 1992)

$$\frac{\partial\beta(c)}{\partial c} = \beta'(c) = -\frac{\frac{\partial f_b}{\partial c}}{\frac{\partial f_b}{\partial T}} \quad (\text{A.48})$$

En la Figura A.3 se muestra el valor de $\beta'(c)$ (para solución no ideal) en función de la composición (c) del etanol

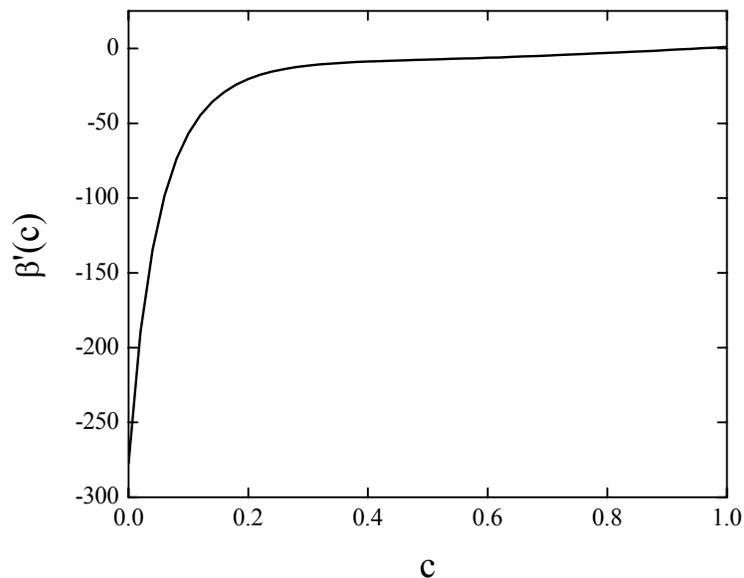


Figura A.3. Derivada de la temperatura respecto a la concentración vs c .

APÉNDICE B

Estimador de estados

En este apéndice se presenta lo relacionado con el estimador de estados que se implemento en esta tesis (Alvarez y López, 1999).

El apéndice se divide en tres partes. La primera parte es un extracto del trabajo arriba mencionado. En material contenido es: formulación del problema de estimación, condiciones de estimabilidad y presentación del Teorema que produce el estimador. En la segunda parte adecuamos el estimador original a las características del caso que nos ocupa en este trabajo y se presenta el procedimiento de sintonización. Finalmente, en la tercera parte se ilustra la construcción del estimador para dos casos particulares y se presenta el caso general.

Primera parte (Alvarez y López, 1999)

Sea la planta no lineal no autónoma (entradas exógenas variantes en el tiempo) de múltiples entradas - múltiples salidas (MEMS). Se considera un solo vector de entradas (u) que engloba a las entradas de control y las entradas exógenas.

$$\dot{x} = f[x, u(t), b], \quad y = h(x, b), \quad z = h_z(x, b), \quad x(t_0) = x_0 \quad (\text{B.1})$$

con n estados (x), m salidas medidas (y), m_e salidas de interés (z), p entradas (u) y n_b parámetros del modelo (b). Las funciones $u_1(t), \dots, u_p(t)$ son funciones del tiempo continuas por tramos, y los mapas f, h y h_z son suficientemente suaves (diferenciables) alrededor de la evolución $E(t)$.

$$E(t) = \{x(t), u(t), y(t)\} \quad (\text{B.2})$$

donde la trayectoria

$$x(t) = \theta_x[t, t_0, x_0, u(t), b] \quad (\text{B.3})$$

(posiblemente inestable) está determinada por el conjunto de datos $\{x_0, u(t), b\}$ -(estados-entradas-parámetros iniciales).

El problema de estimación consiste en diseñar un procesador dinámico de datos

$$\dot{\hat{x}}_e = f_e[\hat{x}_e, u(t), y(t), \delta], \quad \hat{x} = h_e(\hat{x}_e), \quad \hat{y} = h(\hat{x}, \delta), \quad \hat{z} = h_z(\hat{x}, \delta), \quad \hat{x}_e = (\hat{x}', \hat{x}_m) \quad (\text{B.4})$$

que construido con un vector de parámetros aproximado δ y accionado por las mediciones $u(t)$ y $y(t)$, genere:

- (i) una trayectoria $\hat{x}(t)$ que RE(robustamente exponencialmente)-converja a la trayectoria $x(t)$ de la planta
- (ii) una trayectoria de salida $\hat{y}(t)$ que E(exponencialmente)-converja sin sesgo a la salida medida $y(t)$, con dinámica c(cuasi)-LNPA(lineal no-interactiva y de polos asignables), y
- (iii) una trayectoria de salida $\hat{z}(t)$ que RE-converge a la salida actual $z(t)$.

El estimador de estados (\hat{x}_e) (B.4) incluye el estimado de estados actual (\hat{x}) así como un estado aumentado (\hat{x}_m), para reproducir asintóticamente las entradas(u)-salidas(y) de la planta (mediante la compensación de perturbaciones persistentes causadas por errores de modelado).

A continuación se presenta (de forma muy general) una interpretación de *trayectoria RE(robustamente y exponencialmente)-estable*, y la definición de *estimabilidad* que son claves en el estudio y diseño de estimadores. La formalidad esta en el trabajo de Alvarez y López, (1999).

Si la trayectoria $x(t)$ es perturbada en las condiciones iniciales de los estados (χ_0 en lugar de x_0), en la evolución de las entradas [$v(t)$ en lugar de $u(t)$] y en los parámetros iniciales (β en lugar de p), y si la trayectoria perturbada de $\chi(t)$ se mantiene arbitrariamente cerca de la trayectoria $x(t)$, entonces $x(t)$ es RE-estable.

Definición 1. (*Estimabilidad robusta-exponencial*). La trayectoria $x(t)$ (B.3) de la planta n -dimensional (B.1) es RE-estimable si existe una estructura de estimabilidad S (B.5) tal que, a lo largo de la evolución $E(t)$ (B.2) de la planta, las siguientes propiedades se cumplen

- i) El mapa $\phi_1(x, \mathcal{U}, p)$ (B.8) es R(robustamente) x_1 -invertible y continuamente diferenciable en (u, b)
- ii) El mapa $\varphi(x, \mathcal{U}, v, p)$ (B.9) es continuamente diferenciable en (x, u, b)
- iii) La trayectoria x_{II} es RE-estable

La estructura de estimabilidad (S) está dada por:

$$S = (k, x_I), \tag{B.5}$$

$$k = (\kappa_1, \dots, \kappa_m)', \tag{B.6}$$

$$m \leq \kappa_1 + \dots + \kappa_m = \kappa \leq n, \quad \hat{x} = I_p(x_I', x_{II}')' \tag{B.7}$$

donde los índices de observabilidad ($\kappa_1, \dots, \kappa_m$) denotan el número de derivadas temporales que se emplearán para la construcción del estimador; $k = (\kappa_1, \dots, \kappa_m)$ puede definirse de manera combinatorial, tal que se cumpla la condición: $m \leq \kappa_1 + \dots + \kappa_m \leq n$; el índice de observabilidad

global (κ) determina el número de estados observables, siendo $(n-\kappa)$ el número de estados no observables; I_p es la permutación en columnas de la matriz identidad $(n \times n)$ que denota la partición x_I-x_{II} del vector de estados x . El conjunto de estados observables (x_I) se reconstruyen a partir del modelo y de las salidas (y_i) y sus (κ_i-1) derivadas. El conjunto de estados no observables (x_{II}) se reconstruyen a partir del modelo. La partición de estados (x_I, x_{II}) se puede seleccionar de diversas formas.

$$\phi(x, \mathcal{U}, p) = [h_1, \dots, L_f^{\kappa_1-1} h_1; \dots; h_m, \dots, L_f^{\kappa_m-1} h_m]', \quad (B.8)$$

$$\varphi(x, \mathcal{U}, v, p) = [L_f^{\kappa_1} h_1, \dots, L_f^{\kappa_m} h_m]', \quad (B.9)$$

donde $L_f^i \alpha$ es la i -ésima derivada direccional recursiva del campo escalar variante en el tiempo $\alpha(x,t)$ a lo largo del campo vectorial $f(x, t)$:

$$L_f^{i+1} \alpha = L_f(L_f^i \alpha), \quad i \geq 1; \quad L_f^0 \alpha = \alpha, \quad (B.10a)$$

$$L_f \alpha = \alpha_x f + \alpha_t, \quad \alpha_x = \frac{\partial \alpha}{\partial x}, \quad \alpha_t = \frac{\partial \alpha}{\partial t}, \quad (B.10b)$$

Por motivos relacionados con la sintonización del estimador, es presentamos las siguientes ecuaciones que representan la dinámica lineal no interactiva y de polo asignable (LNPA) del error de salida del estimador, los detalles están en el trabajo de Alvarez y López (1999).

$$\mu_i^{(v_i)} + k_{1i}^u \mu_i^{(v_i-1)} + \dots + k_{v_i i}^u \mu_i = 0, \quad 1 \leq i \leq p; \quad \mu_i = \hat{u}_i - u_i, \quad (B.11a)$$

$$v_i^{(\kappa_i+1)} + k_{1i}^o v_i^{(\kappa_i)} + \dots + k_{\kappa_i i}^o \dot{v}_i + k_i^I v_i = 0, \quad 1 \leq i \leq m; \quad v_i = \hat{y}_i - y_i, \quad (B.11b)$$

Teorema 2 del trabajo de Alvarez y López (1999). Sea la trayectoria $x(t)$ de la planta (B.1) RE-estimable, de acuerdo a la definición 1, y sean las ganancias de referencia $K_u(1)$, $K_o(1)$, $K_I(1)$, que hacen estable la dinámica lineal no interactiva y de polo asignable (LNPA) del error de salida (B.11). Entonces, el estimador PI.

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}}_u &= \Gamma_u \hat{x}_u + K_u(s_u)(u - \Delta_u \hat{x}_u), & \dot{\hat{u}} &= \Delta_u \hat{x}_u \\ \dot{\hat{x}}_q &= K_I(s_o) [y - h(\hat{x}, \beta)] \\ \dot{\hat{x}} &= f(\hat{x}, \Delta_u \hat{x}_u, \beta) + G(\hat{x}, \hat{x}_u, \beta)[y - h(\hat{x}, \beta)] + H(\hat{x}, \hat{x}_u, \beta) \hat{x}_q, \\ \hat{y} &= h(\hat{x}, p), & \hat{z} &= h_z(\hat{x}, p) \end{aligned} \quad (B.12)$$

con ganancias parametrizadas $K_u(s_o)$, $K_o(s_o)$, $K_I(s_o)$ y ganancias no lineales

$$G(\hat{x}, u_u, p) = [I_{11}' \ I_{21}']' \phi_{I_{X_1}}^{-1}(\hat{x}, u_u, p) K_o(s_o) \quad (B.13)$$

$$H(\hat{x}, u_u, p) = [I_{11}' \ I_{21}']' \phi_{I_{X_1}}^{-1}(\hat{x}, u_u, p) \Pi_o \quad (B.14)$$

genera una trayectoria $\hat{x}(t)$ que RE-converge a $x(t)$, si el parámetro s_o es suficientemente grande tal que se cumpla la siguiente desigualdad.

$$\begin{aligned} s_o \lambda_o^e &> a_o^e m_I && \text{si } \kappa = n, \quad o \\ s_o \lambda_o^e &> a_o^e [m_I + c_x^\phi(a_x/\lambda_{II}) m_{II} n_I] && \text{si } \kappa < n \end{aligned} \quad (B.15)$$

donde $(c_x^\phi, a_x, \lambda_{II}, m_I, m_{II}, n_I)$ y (a_o^e, λ_o^e) están dados en el trabajo de Alvarez y López (1999).

NOTA: El Teorema anterior produce un estimador, el cual tiene como objetivos que: (i) El exo-observador (\hat{x}_u) filtre el ruido en las entradas medidas (u), y (ii) El estimador (\hat{x}) obtenga estados que RE-converjan a los estados reales (x).

El estimador tiene los siguientes grados de libertad (Alvarez y López, 1999):

- I. *La estructura de estimabilidad (S)* (ec., B.5) la cual depende a su vez de dos factores a escoger: el vector de estimabilidad (k) (ec., B.6) y la partición de los mapas observables y no observables (x_I, x_{II}).
- II. *La sintonización del estimador*, en la cual se requiere fijar las ganancias de referencia $K_u(1)$, $K_o(1)$ y $K_I(1)$ y el parámetro de ajuste s_o para la convergencia, que en conjunción determinan las ganancias parametrizadas $K_u(s_o)$, $K_o(s_o)$ y $K_I(s_o)$.

En la siguiente sección se establece bajo las condiciones que se implementará el estimador antes mencionado.

Segunda parte (estimador de estados adecuado al caso aplicado en este trabajo)

En esta parte adecuaremos el estimador del Teorema anterior a las siguientes características:

- (i) asumimos que los parámetros (p) del modelo son conocidos (modelo perfecto)
- (ii) descartamos filtrar el ruido en las entradas, (no requerimos del exo-observador)
- (iii) las señales medidas (y) y sus derivadas temporales son conocidas
- (iv) la salida de interés es $z_r = c_N$
- (v) la entrada de control es $u_R = R$

- (vi) $m \leq \kappa_1 + \dots + \kappa_m = \kappa < n$ (el No., de mediciones es menor que el No., de estados)
 (vii) $k = (\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_m)' = (1, 1, \dots, 1)'$, (estimador pasivo, López y Alvarez, 2004)

Por tanto, en base al Teorema y dadas las características de nuestro caso de estudio, se produce lo siguiente: Sea la trayectoria $x(t)$ de la planta (B.1) RE-estimable, de acuerdo a la definición 1, y sean las ganancias de referencia $K_o(1)$ y $K_I(1)$, que hacen estable la dinámica LNPA del error de salida (B.11b). Entonces, el estimador PI queda como a continuación sigue:

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}}_q &= K_I(s_o) [y - h(\hat{x}, p)] \\ \dot{\hat{x}} &= f(\hat{x}, u, p) + G(\hat{x}, u, p) [y - h(\hat{x}, p)] + H(\hat{x}, u, p) \hat{x}_q, \\ \hat{y} &= h(\hat{x}, p), \quad \hat{z} = h_z(\hat{x}, p) \end{aligned} \quad (B.16)$$

con ganancias parametrizadas $K_o(s_o)$, $K_I(s_o)$ y ganancias no lineales

$$G(\hat{x}, u, p) = [I_{11}', I_{21}']' \phi_{I_{x_1}}^{-1}(\hat{x}, u, p) K_o(s_o) \quad (B.17)$$

$$H(\hat{x}, u, p) = [I_{11}', I_{21}']' \phi_{I_{x_1}}^{-1}(\hat{x}, u, p) \Pi_o \quad (B.18)$$

que genera una trayectoria $\hat{x}(t)$ que RE-converge a $x(t)$, si el parámetro s_o es suficientemente grande tal que

$$s_o \lambda_o^e > a_o^e [m_I + c_x^\phi(a_x/\lambda_{II}) m_{II} n_I] \quad \text{si } \kappa < n \quad (B.19)$$

donde c_x^ϕ , (a_x, λ_{II}) , (m_I, m_{II}, n_I) , y (a_o^e, λ_o^e) están dadas en el trabajo de Alvarez y López, (1999). En el presente trabajo es suficiente mencionar que en tal trabajo recomiendan que el valor de s_o sea aproximadamente 10 veces mas lenta que la hidráulica del proceso.

Las ganancias ajustables tienen la siguiente forma parametrizada

$$K_o(s_o) = \text{bd}[(s_o k_{11}^o)', \dots, (s_o k_{1m}^o)'], \quad s_o > 0 \quad (B.20)$$

$$K_I(s_o) = \text{diag}[s_o^{\kappa_1+1} k_1^I, \dots, s_o^{\kappa_m+1} k_m^I] = \text{diag}[s_o^2 k_1^I, \dots, s_o^2 k_m^I] \quad (B.21)$$

y la matriz Π_o está dada por

$$\Pi_o = \text{bd}[\pi_1^o, \dots, \pi_m^o], \quad \pi_{i(\kappa_i \times 1)}^o = [0, \dots, 0, 1] \quad (B.22)$$

Los valores de referencia corresponden a un valor de $s_o = 1$ (Alvarez y López, 1999).

Sintonización. De acuerdo a Alvarez y López (1999), las matrices de ganancias K_o y K_I se ajustan mediante un procedimiento de asignación de polos.

Rescribiendo la dinámica de referencia LNPA del i -ésimo error de salida v_i (B.11b).

$$v_i^{(n_i)} + k_1^i v_i^{(n_i-1)} + \dots + k_{n_i}^i v_i = 0, \quad n_i = \kappa_i + 1 \quad (B.23)$$

cuyo polinomio característico es:

$$(\gamma_i)^{n_i} + k_1^i (\gamma_i)^{n_i-1} + \dots + k_{n_i}^i = \prod_{l=1}^{n_i} (\gamma_i - \gamma_l^i) = 0, \quad (B.24)$$

A continuación se ilustra como se asignan los polos de las matrices K_o y K_I para el caso particular de este trabajo. De acuerdo al punto (vii) de la segunda parte del presente apéndice, nos limitaremos al caso de índices de observabilidad $\kappa_i = 1$ ($n_i = 2$), es decir, por cada medición de temperatura solo se hace corrección en un estado. Por lo tanto la dinámica lineal de referencia del error de salida

$$\ddot{v}_i + k_1^i \dot{v}_i + k_2^i v_i = 0 \quad (B.25)$$

cuyo polinomio característico es

$$(\gamma_i)^2 + k_1^i \gamma_i + k_2^i = (\gamma_i - \gamma_1^i)(\gamma_i - \gamma_2^i) = 0 \quad (B.26)$$

de (B.26) tendremos dos polos de referencia característicos (γ_1^i, γ_2^i) . Desarrollando los binomios del lado derecho de la ecuación (B.26) se tiene

$$(\gamma_i)^2 + k_1^i \gamma_i + k_2^i = (\gamma_i)^2 - \gamma_i \gamma_2^i - \gamma_1^i \gamma_i + \gamma_1^i \gamma_2^i \quad (B.27)$$

reduciendo términos y agrupando

$$k_1^i \gamma_i + k_2^i = -\gamma_i (\gamma_1^i + \gamma_2^i) + \gamma_1^i \gamma_2^i \quad (B.28)$$

comparando los coeficientes de la ecuación anterior se llega a

$$k_1^i = -(\gamma_1^i + \gamma_2^i) \quad (B.29)$$

$$k_2^i = \gamma_1^i \gamma_2^i \quad (B.30)$$

Asignación de polos. La asignación de polos se hace con base al análisis de la respuesta transitoria para sistemas lineales. En la literatura se encuentra el caso general (Luyben, 1992; Stephanopoulos, 1984). En este trabajo presentamos el análisis de respuesta para un sistema lineal de segundo orden.

Se presenta el siguiente sistema lineal de segundo orden

$$a_2 \ddot{y} + a_1 \dot{y} + a_0 y = b f(t) \quad (\text{B.31})$$

con $f(t)$ como función entrada variante en tiempo. Reescribiendo la ecuación anterior (si $a_0 \neq 0$)

$$\tau^2 \ddot{y} + 2\zeta\tau \dot{y} + y = K_p f(y) \quad (\text{B.32})$$

donde $\tau = (a_2/a_0)^{1/2}$, $\zeta = a_1/(2\tau a_0)$, y $K_p = b/a_0$, son el periodo natural de oscilación, el factor de amortiguamiento y la ganancia estática del sistema, respectivamente. El polinomio característico de la ec., (B.32) es

$$\tau^2 \gamma^2 + 2\zeta\tau \gamma + y = 0 \quad (\text{B.33})$$

resolviendo la ecuación (B.33) para γ , se llega a

$$\gamma_1 = -\frac{1}{\tau} (\zeta + \sqrt{\zeta^2 - 1}), \quad \gamma_2 = -\frac{1}{\tau} (\zeta - \sqrt{\zeta^2 - 1}) \quad (\text{B.34a,b})$$

el comportamiento de la respuesta transitoria depende de la ubicación de los polos en el plano complejo, y estos a su vez quedan en función del valor de ζ . Resultando los tres siguientes casos

1. Si $\zeta > 1$, los polos son reales y distintos. Provoca respuesta sobreamortiguada.
2. Si $\zeta = 1$, los polos son reales e iguales. Causa respuesta críticamente amortiguada.
3. Si $\zeta < 1$, los polos son complejos conjugados. Produce respuesta subamortiguada.

Por lo tanto, los polos de un sistema de segundo orden están dados por

$$\gamma_1^i = -\omega_1^o \left(\zeta_i + \sqrt{\zeta_i^2 - 1} \right) \quad (\text{B.35})$$

$$\gamma_2^i = -\omega_1^o \left(\zeta_i - \sqrt{\zeta_i^2 - 1} \right), \quad (\text{B.36})$$

donde $\frac{1}{\tau_i^o} = \omega_1^o$

sustituyendo las ecuaciones (B.35) y (B.36) en las ecs., (B.29) y (B.30), y reduciendo términos se llega a

$$k_1^i = 2 \omega_i^0 \xi_i \quad (B.37)$$

$$k_2^i = (\omega_i^0)^2 \quad (B.38)$$

las ecuaciones (B.35) y (B.36) son las ganancias de referencia en términos de la frecuencia característica (ω_i^0) y del factor de amortiguamiento (ξ_i) .

Por lo tanto con $\kappa_i = 1$ ($n_i = 2$), los polos $(\gamma_1^i, \gamma_{n_i}^i)$ determinan las matrices de ganancias $K_o(s_o)$ y $K_I(s_o)$ y estarán dadas por

$$K_o(s_o) = \text{bd}[(s_o k_{11}^o)', \dots, (s_o k_{1m}^o)'] = \text{bd}[(2\omega_1^0 \xi_1), \dots, (2\omega_m^0 \xi_m)] \quad s_o > 0 \quad (B.39)$$

$$K_I(s_o) = \text{diag}[s_o^2 k_1^I, \dots, s_o^2 k_{\kappa_m}^I] = \text{diag}[(\omega_1^0)^2, \dots, (\omega_m^0)^2] \quad (B.40)$$

Tercera parte (construcción del estimador para dos casos particulares y se presenta el caso general)

Caso 1. Construcción del estimador empleando una medición de temperatura en el evaporador. Basándonos en el criterio de gradiente de temperatura (sección 5.4) (Tolliver et al., 1980). Que establece que la etapa mas adecuada para tomar medición es donde está el mayor gradiente de temperatura. La Figura 4.3 se muestra que el gradiente de temperatura mas grande esta entre el evaporador y el plato 1.

Se va a construir un estimador para el sistema (B.41), esto es

$$\dot{x} = f(x, u_R, p), \quad x = (c_0, \dots, c_8, c_D, c_p, m_0, m_p, J)', \quad x(0) = x_0, \quad (B.41)$$

$$y_I = h_1(x, p), \quad h_1 = \beta(c_0), \quad u_R = R, \quad \dim(x) = 14, \quad (B.42)$$

lo que produce los siguientes datos

$$\begin{aligned} m &= 1, & k &= (\kappa_1)', & \kappa_m &= \kappa_1 = \kappa = 1, & n &= 14 \\ x_I &= (\hat{c}_0)', & \dim(x_I) &= 1, & x_{II} &= (\hat{c}_1, \dots, \hat{m}_p, \hat{J})', & \dim(x_{II}) &= 13 \end{aligned}$$

$$[I_{11}', I_{21}']_{(1 \times 14)} = [1, 0, 0, 0, \dots, 0], \quad [I_{11}', I_{21}']'_{(14 \times 1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (B.49)$$

sustituyendo las ecuaciones (B.48a), (B.45) y [(B.39) con $m = 1$] en la ec., (B.17) se tiene

$$G(\hat{x}, u, p) = [I_{11}', I_{21}']' \phi_{I_{x_1}}^{-1}(\hat{x}, u, p) K_o(s_o) = \frac{2 \omega_1^0 \xi_1}{\beta'(\hat{c}_0)} \quad (B.50)$$

supliendo las ecuaciones (B.48a), (B.45) y [(B.22) con $m = 1$] en (B.18) obtenemos

$$H(\hat{x}, u, p) = [I_{11}', I_{21}']' \phi_{I_{x_1}}^{-1}(\hat{x}, u, p) \Pi_o = \frac{1}{\beta'(\hat{c}_0)} \quad (B.51)$$

El estado observable $[x_I = (\hat{c}_0)']$ (estado innovado) se reconstruye con el modelo (parte predictiva) y la salida medida junto con las ganancias no lineales (parte correctiva). El conjunto de estados no observables $[x_{II} = (\hat{c}_1, \hat{c}_2, \dots, \hat{J}_0)']$ (estados no innovados) se reconstruyen a partir del modelo. Por tanto, el estimador con una medición de temperatura en el evaporador es

$$\dot{\hat{c}}_0 = \frac{R[\hat{c}_1 - \hat{c}_0] + V[\hat{c}_0 - E(\hat{c}_0)]}{\hat{m}_0} + \frac{2\omega_1^0 \xi_1}{\beta'(\hat{c}_0)} [y_1 - h_1(\hat{x}, p)] + \frac{(\omega_1^0)^2}{\beta'(\hat{c}_0)} \int_{t_0}^t [y_1 - h_1(\hat{x}, p)] d\tau \quad (B.52a)$$

$$\dot{\hat{c}}_i = \frac{R[\hat{c}_{i+1} - \hat{c}_i] + V[E(\hat{c}_{i-1}) - E(\hat{c}_i)]}{\eta(R)}, \quad 1 \leq i \leq 7, \quad \hat{c}_i(0) = \hat{c}_L, \quad (B.52b)$$

$$\dot{\hat{c}}_8 = \frac{R[\hat{c}_D - \hat{c}_8] + V[E(\hat{c}_7) - E(\hat{c}_8)]}{\eta(R)}, \quad \hat{c}_8(0) = \hat{c}_L, \quad (B.52c)$$

$$\dot{\hat{c}}_D = \frac{V[E(\hat{c}_8) - \hat{c}_D]}{m_D}, \quad \hat{c}_D(0) = \hat{c}_L, \quad (B.52d)$$

$$\dot{\hat{c}}_p = \frac{[(V-R)(\hat{c}_D - \hat{c}_p)]}{\hat{m}_p}, \quad \hat{c}_p(0) = 0, \quad (B.52e)$$

$$\dot{\hat{m}}_0 = R - V, \quad \hat{m}_0(0) = \hat{m}_I, \quad (B.52f)$$

$$\dot{\hat{m}}_p = V - R, \quad \hat{m}_p(0) = 0, \quad (B.52g)$$

$$\dot{\hat{J}}(t) = \frac{[-\hat{J} + C_p(V - R) - C_h \lambda_V V - C_c \lambda_R V]}{(t + t_d)}, \quad \hat{J}_0(0) = -\frac{C_L m_L}{t_d} - C_O, \quad (B.52h)$$

La condición iii) de la Definición 1 se cumple debido a que no se contemplan errores de modelado, y como se dijo en el capítulo 3, las composiciones estarán acotadas por 0 y 1 (o c_a).

Caso 2. Construcción del estimador empleando dos mediciones de temperatura, una en el evaporador y la otra en el plato 1. Por lo tanto se tiene

$$\begin{aligned} n = 14, \quad m = 2, \quad k = (\kappa_1, \kappa_2)' = (1, 1)' \quad \kappa = \kappa_1 + \kappa_2 = 2 \\ x_I = (\hat{c}_0, \hat{c}_1)', \quad \dim(x_I) = 2, \quad x_{II} = (\hat{c}_2, \dots, \hat{m}_p, \hat{J})', \quad \dim(x_{II}) = 12 \end{aligned}$$

primero calculamos los términos de las ganancias no lineales $G(\hat{x}, u_u, p)$ y $H(\hat{x}, u_u, p)$

$$\phi_I(\hat{x}, u_R, p) = [h_1, h_2]' \quad (B.53)$$

$$\phi_{I_{x_1}}(\hat{x}, u_u, p) = \begin{bmatrix} \beta'(\hat{c}_0) & 0 \\ 0 & \beta'(\hat{c}_1) \end{bmatrix} \quad (B.54)$$

$$\phi_{I_{x_1}}^{-1}(\hat{x}, u_u, p) = \begin{bmatrix} 1/\beta'(\hat{c}_0) & 0 \\ 0 & 1/\beta'(\hat{c}_1) \end{bmatrix} \quad [\text{condición i) de la Definición 1}] \quad (B.55)$$

$$\varphi(\hat{x}, u_R, p) = \begin{bmatrix} L_f h_1 \\ L_f h_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \beta(\hat{c}_0)}{\partial \hat{c}_0} f_0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial \beta(\hat{c}_1)}{\partial \hat{c}_1} f_1 \end{bmatrix}, \quad [\text{condición ii) de la Definición 1}] \quad (B.56)$$

ahora las matrices $I_{11}'_{(2 \times 2)}$ y $I_{21}'_{(12 \times 2)}$ están dadas por

$$I_{11}'_{(2 \times 2)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad I_{21}'_{(12 \times 2)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & , & \dots & , & 0 \\ 0 & 0 & , & \dots & , & 0 \end{bmatrix}, \quad [I_{11}', I_{21}']'_{(14 \times 1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (B.57abc)$$

sustituyendo las matrices (B.57a), (B.55) y [(B.39) con $m = 2$] en la ec., (B.17) se tiene

$$G(\hat{x}, u_u, p) = [I_{11}', I_{21}']' \phi_{I_{x_1}}^{-1}(\hat{x}, u_u, p) K_o(s_o) = \begin{bmatrix} \frac{2 \omega_1^o \xi_1}{\beta'(\hat{c}_0)} & 0 \\ 0 & \frac{2 \omega_2^o \xi_2}{\beta'(\hat{c}_1)} \end{bmatrix} \quad (B.58)$$

sustituyendo las matrices (B.57a), (B.55) y [(B.22) con $m = 2$] en la ecuación (B.18) obtenemos

$$H(\hat{x}, u_w, p) = [I_{11}', I_{21}']' \Phi_{I_{x_1}}^{-1}(\hat{x}, u_w, p) \Pi_o = \begin{bmatrix} 1/\beta'(\hat{c}_0) & 0 \\ 0 & 1/\beta'(\hat{c}_1) \end{bmatrix} \quad (B.59)$$

Como en el caso anterior, los estados observables (\hat{c}_0 y \hat{c}_1) se reconstruyen a partir del modelo y mediciones \hat{y} junto con las ganancias no lineales [ecs., (B.58) y (B.59)]. El conjunto de estados no observables ($\hat{c}_2, \dots, \hat{J}$) se reconstruye a partir del modelo. Lo anterior resulta en:

$$\dot{\hat{c}}_0 = \frac{R[\hat{c}_1 - \hat{c}_0] + V[\hat{c}_0 - E(\hat{c}_0)]}{\hat{m}_0} + \frac{2\omega_1^0 \xi_1}{\beta'(\hat{c}_0)} [y_1 - h_1(\hat{x}, p)] + \frac{(\omega_1^0)^2}{\beta'(\hat{c}_0)} \int_{t_0}^t [y_1 - h_1(\hat{x}, p)] d\tau \quad (B.60a)$$

$$\dot{\hat{c}}_1 = \frac{R[\hat{c}_2 - \hat{c}_1] + V[E(\hat{c}_0) - E(\hat{c}_0)]}{\eta(R)} + \frac{2\omega_2^0 \xi_2}{\beta'(\hat{c}_1)} [y_2 - h_2(\hat{x}, p)] + \frac{(\omega_2^0)^2}{\beta'(\hat{c}_1)} \int_{t_0}^t [y_2 - h_2(\hat{x}, p)] d\tau \quad (B.60b)$$

$$\dot{\hat{c}}_i = \frac{R[\hat{c}_{i+1} - \hat{c}_i] + V[E(\hat{c}_{i-1}) - E(\hat{c}_i)]}{\eta(R)}, \quad 2 \leq i \leq 7, \quad \hat{c}_i(0) = \hat{c}_L, \quad (B.60c)$$

$$\dot{\hat{c}}_8 = \frac{R[\hat{c}_D - \hat{c}_8] + V[E(\hat{c}_7) - E(\hat{c}_8)]}{\eta(R)}, \quad \hat{c}_8(0) = \hat{c}_L, \quad (B.60d)$$

$$\dot{\hat{c}}_D = \frac{V[E(\hat{c}_8) - \hat{c}_D]}{m_D}, \quad \hat{c}_D(0) = \hat{c}_L, \quad (B.60e)$$

$$\dot{\hat{c}}_p = \frac{[(V-R)(\hat{c}_D - \hat{c}_p)]}{\hat{m}_p}, \quad \hat{c}_p(0) = 0, \quad (B.60f)$$

$$\dot{\hat{m}}_0 = R - V, \quad \hat{m}_0(0) = \hat{m}_I, \quad (B.60g)$$

$$\dot{\hat{m}}_p = V - R, \quad \hat{m}_p(0) = 0, \quad (B.60h)$$

$$\dot{\hat{J}}(t) = \frac{[-\hat{J} + C_p(V - R) - C_h \lambda_V V - C_c \lambda_R V]}{(t + t_d)}, \quad \hat{J}_0(0) = -\frac{C_L \hat{m}_L}{t_d} - C_O, \quad (B.60i)$$

La condición iii) de la Definición 1 se cumple bajo los mismos argumentos que se presentaron en el caso 1.

En el siguiente caso se plantea de forma general y el estimador de estados, para cualquier columna de destilación binaria por lotes con N platos y m mediciones de temperatura.

Caso 3. Caso general. Para cualquier número de mediciones siempre y cuando $m < n$, la nomenclatura esta dada en el capítulo 5.

$$\hat{\mathbf{t}} = \mathbf{K}(\hat{\mathbf{x}}_t, \omega)[\mathbf{y}(t) - \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}})], \quad \mathbf{t} = (t_1, \dots, t_m)', \quad \hat{\mathbf{x}}_m(t_0) = \mathbf{0} \quad (\text{B.61a})$$

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}_t = \mathbf{f}_t(\hat{\mathbf{x}}_t, \hat{\mathbf{x}}_v, \mathbf{u}_R) + \mathbf{G}(\hat{\mathbf{x}}_t, \omega, \zeta)[\mathbf{y}(t) - \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}})] + \hat{\mathbf{t}}, \quad \hat{\mathbf{x}}_t = (\hat{c}_{s_1}, \dots, \hat{c}_{s_r})', \quad \hat{\mathbf{x}}_t(t_0) = \hat{\mathbf{x}}_{t0} \quad (\text{B.61b})$$

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}_v = \mathbf{f}_v(\hat{\mathbf{x}}_t, \hat{\mathbf{x}}_v, \mathbf{u}_R), \quad \hat{\mathbf{x}}_v(t_0) = \hat{\mathbf{x}}_{v0} \quad (\text{B.61c})$$

$$(\hat{\mathbf{x}}_t', \hat{\mathbf{x}}_v')' = \mathbf{I}_p \hat{\mathbf{x}}, \quad (\mathbf{f}_t', \mathbf{f}_v')' = \mathbf{I}_p \mathbf{f}, \quad \omega = \min(\omega_1, \dots, \omega_m)$$

$$\mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}}_t, \omega) = \text{diag}[\omega_1^2/\beta'(\hat{c}_{s_1}), \dots, \omega_m^2/\beta'(\hat{c}_{s_m})], \quad \mathbf{G}(\hat{\mathbf{x}}_t, \omega, \zeta) = 2\text{diag}[\zeta_1\omega_1/\beta'(\hat{c}_{s_1}), \dots, \zeta_m\omega_m/\beta'(\hat{c}_{s_m})]$$

Donde \mathbf{x}_t son los estados innovados, \mathbf{x}_v son los estados no innovados, $\hat{\mathbf{t}}$ es la parte integral (para compensar errores de modelado), ω_i es la frecuencia característica, ζ_i es el factor de amortiguamiento, m es el número de sensores de temperatura, \mathbf{I}_p es una matriz identidad de columna-permutada, \mathbf{H} y \mathbf{G} son las matrices de las ganancias no lineales.

Bibliografía:

- Alvarez, J., "Output-Feedback Control of Nonlinear Plants", *AIChE Journal*, 42, 2540-2554, 1996.
- Alvarez, J., y López T., "Robust Dynamic State Estimation of Nonlinear Plants", *AIChE Journal*, 45, 107-123, 1999.
- Alvarez, J., Zaldo, F., y Oaxaca, G., "Towards a Joint Process and Control Design for Batch Processes: application to semibatch polymer reactors". En: *Integration of Process and Control* (Ed. Georgiadis, M. Seferlis, P.), Elsevier, 2004.
- Alvarez-Ramírez, J., Monroy-Loperena, R., Cervantes, I., y Morales, A., "A Novel Proporcional-Integral-Derivative Control Configuration with Application to the Control of Batch Distillation" *Ind. Eng. Chem. Res.*, 39, 432-440, 2000.
- Barolo, M., y Berto, F., "Composition Control in Batch Distillation: Binary and Multicomponent Mixtures". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 37, 4689-4698, 1998.
- Barolo, M., y Dal Cengio P., "Closed-loop Optimal Operation of Batch Distillations Columns" *Comp. Chem. Eng.*, 25, 561-569, 2001.
- Block, B., "Control of Batch Distillation" *Chem. Eng.*, Jan., 16, 147-150, 1967.
- Bosley, J.R., y Edgar, T., "Application of Nonlinear Model Predictive Control to Optimal Batch Distillation" 3rdIFAC Symposium DYC'D'92, 271-276, 1992.
- Castellanos-Sahagún, E., Alvarez-Ramírez, J., y Alvarez, J., "Two-Point Control Structure and Algorithm Design for Binary Distillation Columns". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, 142-152, 2005.
- Castellanos-Sahagún, E., y Alvarez, J., "Synthesis of Two-Point Controllers for Binary Distillation Columns". *Sometido a Chem. Eng. Comm.*, 2004.
- Castellanos-Sahagún, E., "Control Geométrico No Lineal Para Columnas de Destilación, Mediante Retroalimentación de Salidas". Tesis de Maestría en Ingeniería Química, U. de G., 1998.
- Chiotti, O.J., e Iribarren, O.A., "Simplified Models for Binary Batch Distillation", *Comp. Chem. Eng.*, 15(1), 1-5, 1991.
- Choe, Y.S., y Luyben, W.L., "Rigorous Dynamic Models of Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 26, 2158-2161, 1987.
- Christiansen, F.M., y Jorgensen, S.B., "Optimal Control of Binary Batch Distillation with Recycled Waste Cut", *Chem. Eng. J.*, 34, 57-64, 1987.
- Distefano, G.P., "Mathematical Modeling and Numerical Integration of Multicomponent Batch Distillation Equations", *AIChE J.*, 14, 190-199, 1968.

- Diwekar, U.M., Madhavan, K.P., y Swaney, R.E., "Optimization of Multicomponent Batch Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Res.* 28, 1011-1017, 1989.
- Diwekar, U.M., y Madhavan, K.P., "BATCH-DIST: A Comprehensive Package for Simulation, Design, Optimization and Optimal Control of Multicomponent, Multifraction Batch Distillation Columns", *Comp. Chem. Eng.*, 15, 833-842, 1991.
- Farhat, S.L., Pibouleau, S., Domenech, y Czernicki, M., "Optimal Control of Batch Distillation via Nonlinear Programming", *Chem. Eng. Process*, 29, 33-38, 1991.
- Fernández, C., y Alvarez J., "Estimation Structure and Algorithm Design for Binary Batch Distillation Columns". Próximo a enviarse, 2005.
- Finefrock, Q.B., Bosley, J.R., y Edgar, T., "Gain Scheduled PID Control of Batch Distillation to Overcome Changing System Dynamics", *AIChE Annual Mtng*, San Francisco, 1994.
- Galindez, H., y Fredenslund, A., "Simulation of Multicomponent Batch Distillation Processes", *Comp. Chem. Eng.*, 12, 281-288, 1988.
- Gallun, S.E., y Holland, C.D., "Gear's Procedure for the Simultaneous Solution of Differential and Algebraic Equations with Application to Unsteady State Distillation Systems", *Comp. Chem. Eng.*, 6, 231-244, 1982.
- Gmehling, J., Onken, U., "Vapour-Liquid Equilibrium Data Collection". DECHEMA, Chemistry Data Series, Vol. 1, Part 1, 161, Dortmund Germany, 1977.
- González, P., y Alvarez, J., "Nonlinear Control of Continuous Polymer Reactors Via Passivation", 16TH IFAC WORLD CONGRESS, Prague, Czech Republic, July 4 to 8, 2005.
- Granville, W.A., "Cálculo Diferencial e Integral", México, Limusa, 1992.
- Hansen, T.T., y Jorgensen, S.B., "Optimal Control of Binary Batch Distillation in Tray or Packed Columns", *Chem. Eng. J.*, 33, 151-155, 1986.
- Henley, E.J., y Seader, J.D., "Operaciones por Operación de Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química", Editorial Reverté, 1990.
- Hernández, H., y Alvarez, J., "Robust Estimation of Continuous Nonlinear Plants with Discrete Measurements", *Journal of Process Control*, 13, 69-89, 2003.
- Hirschorn, R.M., "Invertibility of Multivariable Nonlinear Control Systems". *IEEE TAC.* 24, 855-866, 1979.
- Huckaba, C.E., y Danley, D.E., "Calculation Procedures for Binary Batch Distillation", *AIChE J.*, 5, 335-342, 1960.
- Isidori, A., "Nonlinear Control Systems", 3rd Ed., Springer Verlag, 1995.
- Kerkhof, L.H.J., y Vissers, H.J.M., "On the Profit of Optimum Control in Batch Distillation" *Chem. Eng. Sci.*, 33, 961-970, 1978.

- Khalil, H., "Nonlinear Systems". Second Edition, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1996.
- Levy, R.S., Foss, A.S., y Grens, E.A., "Response Modes of a Binary Distillation Column", *Ind. Eng. Chem. Fundamentals*, 8, 765-776, 1969.
- Logsdon, J.S., Diwekar, U.M., y Biegler, L.T., "On the Simultaneous Optimal Design and Operation of Batch Distillation Columns", *Chem. Eng. Res. Dev.*, 68, 434-444, 1990.
- López, T., "Estimación y Control no Lineal de Reactores Continuos de Polimerización en Solución". Tesis de Doctorado. Universidad Autónoma Metropolitana, 2000.
- López, T., y Alvarez, J., "On the Effect of the Estimation Structure in the Functioning of a Nonlinear Copolymer Reactor Estimator", *Journal of Process Control*, 14, 99-109, 2004.
- Luyben, W.L., "Multicomponent Batch Distillation. 1. Ternary Systems with Slop Recycle", *Eng. Chem. Res.*, 27, 642-647, 1988.
- Luyben, W.L., "Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers". Second Edition, McGraw-Hill, International Editions, 1996.
- Luyben, W.L., "Some Practical Aspects of Optimal Batch Distillation Design", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* 10, 54-59, 1971.
- Macchietto, S., y Mujtaba, I.M., "Design and Operation Policies for Batch Distillation", *Proc. NATO ASI on Batch Processing Systems Engineering*, Antalya, Turkey, May, 29-june 7, 1992.
- Masaru, N., Akifumi, K., Takashi, C., Shinji H., e Iori, H., "Optimal Structure and On-line Optimal Operation of Batch Distillation Column", *Comp. Chem. Eng.*, 25, 109-117, 2001.
- Muhrer, C.A., y Luyben, W., "Batch Distillation. En: W. L. Luyben (Ed.), *Practical Distillation Control*", 508-528, NY, Van Nostrand Reinhold, 1992.
- Mujtaba, I.M., y Macchietto, S., "Efficient Optimization of Batch Distillation with Chemical Reaction Using Polynomial Curve Fitting Techniques", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 36, 2287-2295, 1997.
- Mujtaba, I.M., y Macchietto, S., "Optimal Operation of Multicomponent Batch Distillation-Multiperiod Formulation and Solution", *Comp. Chem. Eng.*, 17, 1191-1207, 1993.
- Oisiović, R.M., y Cruz, S.L., "Inferential Control of High-Purity Multicomponent Batch Distillation Columns Using an Extended Kalman Filter" *Ind. Eng. Chem. Res.*, 40, 2628-2639, 2001.
- Pradeep, B.D., "Distillation Dynamics and Control" Instrument Society of America, Research Triangle Park, NC., 1985.

- Prausnitz, J., Anderson, T., Grens, E., Eckert, C., Hsieh, R., O'Connell, J., "Computer Calculation for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria". Prentice Hall, 1980.
- Quintero-Marmol, E., Luyben, W.L., Georgakis, C., "Application of an Extended Luenberger Observer to the Control of Multicomponent Batch Distillation". *Ind. Eng. Chem. Res.* 30, 1870-1880, 1991.
- Reuter, E.G., Wozny, y Jeromin, L., "Modeling of Multicomponent Batch Distillation Processes with Chemical Reaction and Their Control Systems", *Comp. Chem. Eng.*, 13, S499-510, 1989.
- Sepulchre, R.M., Jankovic and Kokotovic, P.V., "Constructive Nonlinear Control". Springer-Verlag, New York, 1997.
- Shinsky, F.G., "Process Control Systems". McGraw-Hill, New York, 1979.
- Skogestad, S., "Dynamics and Control of Distillation Columns. A Critical Survey". (DYCORD+'92), 1-25, 1992.
- Skogestad, S., y Morari, M., "Understanding the Dynamic Behavior of Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 27, 1848-1862, 1988.
- Slotine, J.J.E., y Li, W., "Applied Nonlinear Control". Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1991.
- Smith, C., y Corripio, A., "Control Automático de Procesos. Teoría y Práctica". Limusa, 1994.
- Sørensen, E., Macchietto, S., Stuart, G., y Skogestad, S., "Optimal Control and On-Line Operation of Reactive Batch Distillation", *Comp. Chem. Eng.*, 20, 1491-1498, 1996.
- Sørensen, E., "Studies on Optimal Operation and Control of Batch Distillation Columns". PhD Thesis, University of Trondheim, The Norwegian Institute of Technology, 1994.
- Srinivasan, B., Palanki, S., y Bonvin, D., "Dynamic Optimization of Batch Processes. I. Characterization of the Nominal Solution", *Comp. Chem. Eng.*, 27, 1-23, 2003.
- Stephanopoulos, G., "Chemical Process Control: An Introduction to Theory and Practice". Prentice Hall, 1994.
- Tolliver, T.L., McCune, L.C., "Finding the Optimum Temperature Control Trays for Distillation Columns", *Instrum., Technol., (InTech)* 27, 75-80, 1980.
- Walas, S.M., "Chemical Process Equipment". Butterworth-Heinemann Series in Chemical Engineering, 1990.