



Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

**Modelado y Control de una Clase de
Reactores Tubulares Exotérmicos**

Tesis que presenta

Israel Nájera Martínez

Para obtener el grado de

Maestro en Ciencias en Ingeniería Química

Asesor: **Dr. Jesús Álvarez Calderón**

México, D. F. mayo 2012



Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

**Modelado y Control de una Clase de
Reactores Tubulares Exotérmicos**

Tesis que presenta

Isrrael Nájera Martínez

Para obtener el grado de

Maestro en Ciencias en Ingeniería Química

Asesor: **Dr. Jesús Álvarez Calderón**

México, D. F. mayo 2012

Agradecimientos

Son tantas las personas a las cuales debo el hecho de encontrarme culminando esta etapa, y aunque el exponer una lista siempre supone el riesgo de olvidar a alguna de ellas, si quisiera hacer especial mención para las siguientes:

En primer lugar a mi familia y a Tere (mi compañera), por su confianza y apoyo brindados, ya que definitivamente no hubiera podido llegar a este punto sin ellos.

Deseo agradecer al Dr. Jesús Álvarez Calderón por su tiempo dedicado para la dirección de esta tesis.

De igual manera agradezco a mis sinodales por sus valiosos comentarios y sugerencias que ayudaron a mejorar la calidad de este trabajo:

Dr. Luis Agustín Álvarez Icaza Longoria

Dr. Alexander Schaum

A mis amigos de generación y aquellos amigos ya de varios años (desde la licenciatura), que han contribuido en gran medida a mi formación profesional y personal.

Por último, y no por ello menos importante, al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por otorgarme el apoyo económico (beca No. 230214) para la realización de mis estudios de maestría.

Resumen

En esta tesis se estudian los problemas de modelado para diseño de equipo y operación así como para diseño de esquemas de monitoreo y control de una clase de reactores tubulares exotérmicos. El problema de modelado consiste en capturar los aspectos relevantes de la estática y dinámica del reactor tubular (RT), esto mediante la aproximación con un tren de reactores continuos de tanque agitado (TRCTA) con retromezclado. La dimensionalidad de la aproximación con tanques es ajustable y depende de si el objetivo es diseñar el equipo, determinar condiciones de operación, plantear esquemas de monitoreo o sistemas de control. El segundo problema consiste en diseñar un control robusto estabilizante de temperatura para el RT, incluyendo criterios de ubicación de sensores. El problema se resuelve en tres etapas: primero, con base en el modelo no lineal de la aproximación con tanques se diseña un controlador no lineal robusto estabilizante accionado por retroalimentación de estados. Luego se recupera el comportamiento de dicho controlador no lineal mediante un control PI de temperatura que se construye con base en un modelo lineal y simplificado a la luz de propiedades de pasividad y observabilidad. Estas dos etapas nos ayudan a establecer los criterios de selección de tanque de medición; finalmente dichos criterios se traducen a una posición espacial en el RT y se le aplica el control estabilizante PI de temperatura a dicho reactor. Los desarrollos se ilustran con un caso representativo de estudio y simulaciones numéricas. De acuerdo a los resultados, en un RT los pares de perfiles (concentración-temperatura) inestables a lazo abierto se pueden estabilizar mediante un controlador lineal PI de temperatura con ubicación espacial debidamente escogida.

Índice General

| | |
|--|-----------|
| Resumen | i |
| Índice General | ii |
| Índice de Tablas | vi |
| Índice de Figuras | viii |
| Lista de Símbolos | xv |
| Capítulo 1. Introducción..... | 1 |
| 1.1 Motivación..... | 1 |
| 1.2 Justificación..... | 4 |
| 1.3 Objetivos..... | 5 |
| 1.3.1 Generales..... | 5 |
| 1.3.2 Específicos..... | 5 |
| 1.4 Organización de la tesis..... | 6 |
| Capítulo 2. Planteamiento formal de los problemas de modelado y control..... | 8 |
| 2.1 Dinámica y estática del reactor tubular (RT)..... | 8 |
| 2.2 Problema de modelado..... | 17 |
| 2.3 Problema de control..... | 18 |
| Capítulo3. El TRCTA con retromezclado y sus analogías con el reactor tubular..... | 20 |

| | |
|---|-----------|
| 3.1 Aproximación del reactor tubular por diferencias finitas..... | 20 |
| 3.2 Modelo del TRCTA con retomezclado..... | 21 |
| 3.3 Conexiones entre el reactor tubular y el TRCTA..... | 24 |
| 3.4 Propuesta para determinar la dimensionalidad de la aproximación en tanques..... | 29 |
| Capítulo 4. Análisis de la estática y dinámica del TRCTA..... | 32 |
| 4.1 Un RCTA con retomezclado (caso I)..... | 32 |
| 4.2 Dos RCTA's en serie con retro mezclado (caso II)..... | 35 |
| 4.3 Tres RCTA's en serie con retomezclado (caso III)..... | 39 |
| Capítulo 5. Solución al problema de control para el TRCTA..... | 48 |
| 5.1 Pasividad del tren de reactores..... | 48 |
| 5.1.1 Grado relativo..... | 49 |
| 5.1.2 Dinámica cero..... | 50 |
| 5.1.2.1 Dinámica cero asociada cuando se regula la temperatura del tanque 1..... | 51 |
| 5.1.2.2 Dinámica cero asociada cuando se regula la temperatura del tanque 2..... | 51 |
| 5.1.2.3 Dinámica cero asociada cuando se regula la temperatura del tanque 3..... | 52 |
| 5.2 Caracterización de la pasividad del TRCTA..... | 53 |
| 5.2.1 Pasividad con relación al estado estacionario EE2 para cada una de las | 53 |

| | |
|---|-----------|
| salidas candidatas..... | |
| 5.2.1.1 Salida de temperatura regulada en tanque 1 ($\bar{\eta}_1 = 1.040$)..... | 53 |
| 5.2.1.2 Salida de temperatura regulada en tanque 2 ($\bar{\eta}_2 = 1.091$)..... | 56 |
| 5.2.1.3 Salida de temperatura regulada en tanque 3 ($\bar{\eta}_3 = 1.184$)..... | 60 |
| 5.2.2 Pasividad con relación al estado estacionario EE4 para cada una de las salidas candidatas..... | 63 |
| 5.2.2.1 Salida de temperatura regulada en tanque 1 ($\bar{\eta}_1 = 1.156$)..... | 63 |
| 5.2.2.2 Salida de temperatura regulada en tanque 2 ($\bar{\eta}_2 = 1.256$)..... | 66 |
| 5.2.2.3 Salida de temperatura regulada en tanque 3 ($\bar{\eta}_3 = 1.253$)..... | 69 |
| Capítulo 6. Control robusto estabilizante de temperatura para el TRCTA..... | 73 |
| 6.1 Control pasivo no lineal por retroalimentación de estados para el TRCTA..... | 73 |
| 6.1.1 Comportamiento a lazo cerrado con control por retroalimentación de estados para estabilizar a EE2 en el TRCTA..... | 75 |
| 6.1.2 Comportamiento a lazo cerrado con un control por retroalimentación de estados para estabilizar a EE4 en el TRCTA..... | 78 |
| 6.2 Control pasivo por retroalimentación de salidas para el TRCTA..... | 80 |
| 6.2.1 Comportamiento a lazo cerrado con un control por retroalimentación de salidas para estabilizar a EE2 en el TRCTA..... | 84 |
| 6.2.2 Comportamiento a lazo cerrado con un control por retroalimentación de salidas para estabilizar a EE4 en el TRCTA..... | 87 |
| 6.3 Comportamiento del control por retroalimentación de salidas en el TRCTA ante | 89 |

| | |
|--|------------|
| perturbaciones conocidas..... | |
| Capítulo 7. Control PI del reactor tubular..... | 94 |
| 7.1 Criterios de ubicación de sensores en el reactor tubular..... | 94 |
| 7.2 Control pasivo no lineal por retro alimentación de estados para el reactor tubular... | 97 |
| 7.2.1 Control para estabilizar al par de perfiles, concentración-temperatura, P2 (perfil de temperatura isotónico)..... | 97 |
| 7.2.2 Control para estabilizar al par de perfiles, concentración-temperatura, P4 (perfil de temperatura con punto caliente)..... | 99 |
| 7.3 Control PI de temperatura para el reactor tubular..... | 100 |
| 7.3.1 Control PI para estabilizar al par de perfiles, concentración-temperatura, P2 (perfil de temperatura isotónico)..... | 101 |
| 7.3.2 Control PI para estabilizar al par de perfiles, concentración-temperatura, P4 (perfil de temperatura con punto caliente)..... | 102 |
| 7.4 Comportamiento del control PI en el RT ante perturbaciones conocidas..... | 104 |
| Capítulo 8. Conclusiones y Trabajo a futuro..... | 108 |
| Bibliografía..... | 110 |
| Apéndices | |
| Apéndice A. Metodología para el trazado de los diagramas de bifurcación..... | 117 |
| Apéndice B. Correspondencia entre el control por retroalimentación de salidas y el control PI | 120 |

Índice de Tablas

| | |
|---|----|
| Tabla 2.1. Parámetros que caracterizan a los reactores tubulares homogéneos..... | 11 |
| Tabla 2.2. Patrones de multiplicidad para diferentes conjuntos de parámetros del reactor tubular..... | 13 |
| Tabla 2.3. Parámetros que producen cinco soluciones estacionarias en el reactor tubular..... | 15 |
| Tabla 3.1. Comparación de los parámetros surgidos al adimensionalizar el modelo dinámico del reactor tubular y del TRCTA con retromezclado..... | 28 |
| Tabla 4.1. Estados estacionarios del reactor perteneciente al caso I..... | 33 |
| Tabla 4.2. Estados estacionarios de cada reactor pertenecientes al caso II..... | 37 |
| Tabla 4.3. Estados estacionarios de cada reactor pertenecientes al caso III..... | 41 |
| Tabla 5.1. Puntos de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del primer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_1 = 1.040$ (EE2)..... | 55 |
| Tabla 5.2. Punto de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del segundo reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_2 = 1.091$ (EE2)..... | 57 |
| Tabla 5.3. Puntos de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del tercer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_3 = 1.184$ (EE2)..... | 60 |
| Tabla 5.4. Puntos de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del primer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_1 = 1.156$ (EE4)..... | 63 |

| | |
|--|----|
| Tabla 5.5. Puntos de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del segundo reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_2 = 1.256$ (EE4)..... | 66 |
| Tabla 5.6. Puntos de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del tercer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_3 = 1.253$ (EE4)..... | 69 |
| Tabla 5.7. Caracterización de la pasividad del TRCTA en función del grado relativo de sistema y su dinámica cero..... | 72 |

Índice de Figuras

| | |
|---|----|
| Figura 2.1. Representación esquemática del reactor tubular..... | 8 |
| Figura 2.2. Diagramas de bifurcación del reactor tubular para diferentes parámetros: a) temperatura adimensional a la salida $\eta(1)$ vs ϕ_0 ($\phi_0 = \phi e^\gamma$), b) composición adimensional a la salida $c(1)$ vs ϕ_0 ($\phi_0 = \phi e^\gamma$)..... | 12 |
| Figura 2.3. Diagramas de bifurcación del RT con cinco soluciones estacionarias: a) temperatura adimensional a la salida $\eta(1)$ vs ϕ_0 ($\phi_0 = \phi e^\gamma$), b) composición adimensional a la salida $c(1)$ vs ϕ_0 ($\phi_0 = \phi e^\gamma$)..... | 14 |
| Figura 2.4. Perfiles de concentración y temperatura estacionarios del reactor tubular... | 15 |
| Figura 2.5. Proyección en dos dimensiones del plano fase del RT a lazo abierto, las concentraciones y temperaturas corresponden a la salida del reactor..... | 16 |
| Figura 2.6. Comportamiento dinámico (a lazo abierto) de la concentración y temperatura a la salida del RT..... | 17 |
| Figura 2.7. Representación esquemática del una serie de RCTA's con reflujo..... | 17 |
| Figura 2.8. Diagrama del esquema de control para el reactor tubular..... | 19 |
| Figura 3.1. Representación esquemática de las discretización espacial del reactor tubular..... | 20 |
| Figura 3.2. Representación por medio de diagrama de bloques del TRCTA con retromezclado..... | 22 |
| Figura 3.3. Representación esquemática de los nexos entre el reactor tubular y el TRCTA con retromezclado..... | 25 |
| Figura 3.4. Representación esquemática del caso I..... | 29 |

| | |
|--|----|
| Figura 3.5. Representación esquemática del caso II..... | 30 |
| Figura 3.6. Representación esquemática del caso III..... | 31 |
| Figura 4.1. Diagramas de bifurcación para el reactor de tanque agitado del caso I..... | 32 |
| Figura 4.2. Plano fase a lazo abierto del RCTA con retromezclado (caso I)..... | 33 |
| Figura 4.3. Dinámica a lazo abierto de la concentración y temperatura en el RCTA del caso I..... | 34 |
| Figura 4.4. Perfiles de concentración y temperatura estacionarios del RT reconstruidos a partir del caso I..... | 34 |
| Figura 4.5. Diagramas de bifurcación para dos RCTA's en serie con retromezclado (caso II)..... | 36 |
| Figura 4.6. Planos fase a lazo abierto de dos RCTA's en serie con retromezclado (caso II)..... | 37 |
| Figura 4.7. Dinámica a lazo abierto de la concentración y temperatura en cada uno de los RCTA's del caso II..... | 38 |
| Figura 4.8. Perfiles de concentración y temperatura estacionarios del RT reconstruidos a partir del Caso II..... | 39 |
| Figura 4.9. Diagramas de bifurcación para tres RCTA's en serie con retro mezclado (Caso III)..... | 40 |
| Figura 4.10. Planos fase a lazo abierto de tres RCTA's en serie con retro mezclado (caso III)..... | 42 |
| Figura 4.11. Dinámica a lazo abierto de la concentración y temperatura en cada uno de los RCTA's del caso III..... | 43 |

| | |
|--|----|
| Figura 4.12. Perfiles de concentración y temperatura estacionarios del RT reconstruidos a partir del caso III..... | 44 |
| Figura 4.13. Comparación de los perfiles obtenidos a partir de dos (caso II) y tres (caso III) y diez tanques en serie con retromezclado contra los perfiles obtenidos a partir de una aproximación de alta dimensión..... | 45 |
| Figura 5.1. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del primer reactor, $\bar{\eta}_1 = 1.040$ (EE2)..... | 53 |
| Figura 5.2. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del primer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_1 = 1.040$ (EE2)..... | 55 |
| Figura 5.3. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del segundo reactor, $\bar{\eta}_2 = 1.091$ (EE2)..... | 58 |
| Figura 5.4. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del segundo reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_2 = 1.091$ (EE2)..... | 59 |
| Figura 5.5. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del tercer reactor, $\bar{\eta}_3 = 1.184$ (EE2)..... | 61 |
| Figura 5.6. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del tercer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_3 = 1.184$ (EE2)..... | 62 |
| Figura 5.7. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del primer reactor, $\bar{\eta}_1 = 1.156$ (EE4)..... | 64 |
| Figura 5.8. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del primer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_1 = 1.156$ (EE4)..... | 65 |
| Figura 5.9. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del segundo reactor, $\bar{\eta}_2 = 1.256$ (EE4)..... | 67 |

| | |
|--|----|
| Figura 5.10. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del segundo reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_2 = 1.256$ (EE4)..... | 68 |
| Figura 5.11. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del tercer reactor, $\bar{\eta}_3 = 1.253$ (EE4)..... | 70 |
| Figura 5.12. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del tercer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_3 = 1.253$ (EE4)..... | 71 |
| Figura 6.1. Diagrama del esquema de control para tres reactores en serie con retromezclado (caso III)..... | 73 |
| Figura 6.2. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control no lineal de temperatura por retro alimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en el segundo reactor para estabilizar EE2..... | 75 |
| Figura 6.3. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control no lineal de temperatura por retro alimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en el tercer reactor para estabilizar EE2..... | 77 |
| Figura 6.4. Comportamiento dinámico de la temperatura de chaqueta cuando se regula por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$): a) la temperatura del segundo reactor, b) la temperatura del tercer reactor, para estabilizar EE2..... | 78 |
| Figura 6.5. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control no lineal de temperatura por retro alimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en el primer reactor para estabilizar EE4..... | 79 |
| Figura 6.6. Comportamiento dinámico de la temperatura de chaqueta cuando se regula por, retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$), la temperatura del primer reactor para estabilizar EE4..... | 80 |

| | |
|--|----|
| Figura 6.7. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control de temperatura por retro alimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) en el segundo reactor para estabilizar EE2..... | 85 |
| Figura 6.8. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control de temperatura por retro alimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) en el tercer reactor para estabilizar EE2..... | 86 |
| Figura 6.9. Comportamiento dinámico de la temperatura de chaqueta cuando se regula por retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$): a) la temperatura del segundo reactor, b) la temperatura del tercer reactor, para estabilizar EE2..... | 87 |
| Figura 6.10. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control de temperatura por retro alimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) en el primer reactor para estabilizar EE4..... | 88 |
| Figura 6.11. Comportamiento dinámico de la temperatura de chaqueta cuando se regula, por retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$), la temperatura del segundo reactor para estabilizar EE4..... | 89 |
| Figura 6.12. Comportamiento robusto a lazo cerrado del TRCTA con un control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (—) y retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) (.....) en el tercer reactor para estabilizar a EE2..... | 90 |
| Figura 6.13. Comportamiento dinámico robusto de la temperatura de chaqueta cuando se regula por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (—) y retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) (.....), la temperatura en el tercer reactor para estabilizar a EE2..... | 91 |
| Figura 6.14. Comportamiento robusto a lazo cerrado del TRCTA con un control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (—) y retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) (.....) en el primer reactor para estabilizar a EE4..... | 92 |

| | |
|---|-----|
| Figura 6.15. Comportamiento dinámico robusto de la temperatura de chaqueta cuando se regula por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (—) y retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0, \omega = 18.0$) (.....), la temperatura en el primer reactor para estabilizar a EE4..... | 93 |
| Figura 7.1. Reconstrucción del perfil de temperatura isotónico del reactor tubular, y traducción de los criterios de selección de tanque a una posición espacial..... | 95 |
| Figura 7.2. Reconstrucción del perfil de temperatura con punto caliente, y traducción de los criterios de selección de tanque a una posición espacial..... | 96 |
| Figura 7.3. a), b) Dinámica a lazo cerrado de la concentración y temperatura a la salida del RT ($z=1$), c) variable de control. Control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en $z=0.75$, perfil isotónico..... | 98 |
| Figura 7.4. Evolución en el tiempo de los perfiles de concentración y temperatura del reactor tubular con un control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en: a) $z=0.75$ para el perfil de temperatura isotónico, b) en $z=0.25$ para el perfil de temperatura con punto caliente..... | 99 |
| Figura 7.5. a), b) Dinámica a lazo cerrado de la concentración y temperatura a la salida del RT ($z=1$), c) variable de control. Control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en $z=0.25$, perfil con punto caliente..... | 100 |
| Figura 7.6. a), b) Dinámica a lazo cerrado de la concentración y temperatura a la salida del reactor tubular ($z=1$), c) variable de control. Control PI ($K_p = 21.0, \tau = 2.6$) de temperatura en $z=0.75$, Perfil isotónico..... | 102 |
| Figura 7.7. Evolución en el tiempo de los perfiles de concentración y temperatura del reactor tubular con un control PI de temperatura ($K_p = 21.0, \tau = 2.6$) en: a) $z=0.75$ para el perfil de temperatura isotónico, b) en $z=0.25$ para el perfil de temperatura con | |

| | |
|---|-----|
| punto caliente..... | 103 |
| Figura 7.8. a), b) Dinámica a lazo cerrado de la concentración y temperatura a la salida del reactor tubular ($z=1$), c) variable de control. Control PI de temperatura ($K_p = 21.0, \tau = 2.6$) en $z=0.25$, perfil con punto caliente..... | 104 |
| Figura 7.9. Comportamiento robusto a lazo cerrado del RT con un control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (→) y PI ($K_p = 21.0, \tau = 2.6$) (.....) en $z=0.75$ para estabilizar al perfil de temperatura isotónico P2..... | 105 |
| Figura 7.9. Comportamiento robusto a lazo cerrado del RT con un control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (→) y PI ($K_p = 21.0, \tau = 2.6$) (.....) en $z=0.25$ para estabilizar al perfil de temperatura con punto caliente P4..... | 106 |

Lista de símbolos

Acrónimos

| | |
|-----------------|---|
| EDO | Ecuaciones diferenciales ordinarias |
| EDP | Ecuaciones diferenciales parciales |
| PI | Control proporcional integral |
| PID | Control proporcional integral derivativo |
| RCTA | Reactor continuo de tanque agitado |
| RT | Reactor tubular |
| TRCTA | Tren de reactores continuos de tanque agitado |
| EE | Estado estacionario |
| EE _z | Estado estacionario de la dinámica cero asociada al sistema |
| P | Perfil en el reactor tubular |

Nomenclatura

| | |
|----------|---|
| a_i | Área para la transferencia de calor en cada RCTA. |
| β | Incremento adiabático de temperatura adimensional $((-\Delta H)c_r/\rho C_p T_r)$ |
| b_i | Entrada exógena |
| γ | Energía de activación adimensional $(E_A/R_g T_r = \varepsilon/T_r)$ |
| C | Concentración del reactante |
| C_r | Concentración de referencia del reactante |
| c | Concentración adimensional del reactante $(c = C/C_r)$ |
| C_e | Concentración del reactante a la entrada del reactor |
| c_e | Concentración adimensional del reactante a la entrada del reactor $(c_e = C_e/C_r)$ |
| C_p | Capacidad calorífica |

| | |
|------------|---|
| δ | Coeficiente de transferencia de calor adimensional, en el RT: $(U(PL)/\rho C_p(Av_r))$, en el TRCTA $(Ua_i N/\rho C_p q_r)$ |
| d | Entradas exógenas |
| D_M | Coeficientes de dispersión másico |
| D_T | Coeficientes de dispersión térmico |
| E_a | Energía de activación |
| e | Error de regulación |
| \dot{e} | Dinámica del error de regulación |
| ϕ | Número de Damköhler, en el RT $(LR(c_r, T_r)/v_r c_r)$, en el TRCTA $(v_i N r(c_r, T_r)/q_r c_r)$ |
| gr | Grado relativo |
| ΔH | Calor de reacción |
| κ_c | Ganancia del controlador |
| k_e | Factor pre-exponencial |
| L | Longitud del RT |
| l | Tamaño de paso en la discretización de RT (L/N) |
| N | Número de intervalos en la discretización del RT Numero de tanques en el modelo del TRCTA |
| η | Temperatura adimensional del reactante (T/T_r) |
| η_e | Temperatura adimensional del reactante a la entrada del reactor (T_e/T_r) |
| η_w | Temperatura adimensional de la chaqueta de enfriamiento (T_w/T_r) |
| P/A | Relación entre el perímetro y el área de sección transversal del RT |
| Pe^M | Número de Peclet másico $(v_r L/D_M)$ |
| Pe^T | Número de Peclet térmico $(v_r L/D_T)$ |
| Q | Caudal adimensional (q/q_r) |

| | |
|--------------------|---|
| q | Flujo volumétrico (caudal) en el reactor |
| q_r | Flujo volumétrico de referencia (caudal) en el reactor |
| q_e | Flujo volumétrico que entra a cada RCTA en el TRCTA |
| q_e^M | Flujo másico que entra a cada RCTA en el TRCTA |
| q_e^T | Flujo térmico que entra a cada RCTA en el TRCTA |
| q_{MT} | Reflujo constante en el TRCTA |
| q_D^M | Reflujo másico (Nq_r/Pe^M) |
| q_D^T | Reflujo térmico (Nq_r/Pe^T) |
| $R(C,T)$ | Velocidad de reacción intrínseca |
| $r(c,\eta)$ | Velocidad de reacción intrínseca adimensional |
| R_g | Constante de los gases |
| ρ | Densidad del reactante |
| T | Temperatura del reactante |
| T_r | Temperatura de referencia del reactante |
| t' | Tiempo dimensional |
| t | Tiempo adimensional, en el RT $(v_r t'/L)$, en el TRCTA $(q_r t'/V_i N)$ |
| T_e | Temperatura del reactante a la entrada del reactor |
| T_w | Temperatura de la chaqueta de enfriamiento |
| V_i | Volumen de cada RCTA en el TRCTA |
| v ($v=q/A$) | Velocidad del flujo reactante en el RT, la cual es igual al caudal sobre el área de la sección transversal del reactor. |
| v_r | Velocidad de referencia del flujo reactante en el RT |
| v | Velocidad adimensional del flujo reactante en el RT (v/v_r) |
| U | Coefficiente global de transferencia de calor |

| | |
|--------------|--|
| \mathbf{x} | Estados del sistema |
| y | Salida a regular |
| u | Entrada de control |
| ω | Ganancia del observador |
| Z | Distancia desde la entrada del RT |
| z | Distancia adimensional desde la entrada del RT (Z/L) |

Capítulo 1

Introducción

1.1 Motivación

La comprensión y descripción de los diferentes procesos en ingeniería química se basan en el análisis de modelos matemáticos que representan al sistema de estudio. Estos modelos son útiles en todas las fases de desarrollo de una planta de procesos, incluso en los estudios económicos relacionados con ésta. El análisis de un modelo matemático complementado con simulaciones, enfocados en cada una de las fases de una planta de procesos, tienen las siguientes ventajas y aplicaciones [1], [2], [3]:

- Investigación y desarrollo: ayudan en el diseño experimental al poder explorar los efectos de las diferentes condiciones de operación. También pueden ayudar a determinar los parámetros y mecanismos de reacción, a partir de los datos obtenidos a nivel laboratorio.
- Diseño: los modelos pueden ser utilizados de forma predictiva para el diseño de equipo, determinando su tamaño y arreglo dentro de la planta. Se pueden usar también para analizar las interacciones de las diferentes partes del proceso, especialmente cuando existe reciclado de material o integración de energía.
- Operación de la planta: los modelos pueden ser utilizados para el control y la optimización de procesos. Pueden ayudar a evaluar rutas alternativas y diferentes situaciones como arranque de equipo o paros de emergencia.

El elemento central de una planta de procesos es el reactor, dentro de la industria los principales reactores son: el reactor continuo de tanque agitado (RCTA) y el reactor tubular (RT). El RT consiste en un tubo cilíndrico, a través del cual los reactantes se consumen continuamente a medida que fluyen a lo largo de dicho reactor, es más eficiente (para algunas reacciones) que el RCTA, además de emplearse en un importante número de procesos que van desde la destilación térmica fraccionada (*cracking*) del petróleo para la obtención de etileno, en

la síntesis de amoníaco y etanol, hasta procesos de tipo biológico como la remoción de contaminantes de efluentes industriales y la obtención de antibióticos [4], [5].

El modelo dinámico que describe el comportamiento de los RT's está formado por ecuaciones diferenciales parciales (EDP) no lineales, también conocidas como sistemas de parámetros distribuidos, esto significa que las variables (concentración y temperatura) cambian con la posición y el tiempo. Para el caso unidimensional las EDP se pueden clasificar como parabólicas cuando se considera que existe difusión-reacción o difusión-convección-reacción, e hiperbólicas sí sólo se considera convección-reacción [4], [6], [7], [8].

El monitoreo y control de los RT's es de gran importancia, siendo los principales objetivos: la regulación de la concentración a la salida del reactor manteniendo la temperatura por debajo de los valores máximos especificados, no sólo para maximizar la calidad del producto sino también minimizar la formación de subproductos y el uso de energía [7]. No obstante, el control de este tipo de reactores es complicado debido al acoplamiento intrínseco de los procesos de transporte, la reacción y su naturaleza distribuida [3] [9]. El enfoque convencional para el control de los RT's está basado en la discretización espacial del sistema de EDP usando algún método de proyección de dimensión finita, seguido por el diseño del control en función del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) resultante [3], [10], [11], [12], [13].

El problema de control de la composición en reactores tubulares ha sido ampliamente estudiado con esquemas de control lineal y no lineal. Para los primero esquemas están los trabajos de Pellegrine *et al* (1993) [14], Alvarez-Ramirez *et al* (2000) [15]. Urrea *et al* (2008) [20] emplearon para el lazo de temperatura una temperatura promedio ponderada de dos mediciones localizadas antes y después del punto caliente en un reactor tubular exotérmico, mejorando la respuesta del controlador en cascada PI frente a perturbaciones en la alimentación. Hernandez-Martínez *et al* (2010) extendieron el uso del controlador en cascada basado en compensadores PI/PID [9]. Mientras que para la parte del control no lineal podemos mencionar los trabajos de Christofides (2001) [11], Hoo y Zheng (2002) [16], Wu y Huang

(2003) [17], Li y Christofides (2007) [18] y Hua-Jutan (2000), estos últimos diseñaron un controlador basado en observadores no lineales de concentración y temperatura [19].

En los últimos diez años se han realizado considerables esfuerzos de investigación en la aplicación de técnicas de control moderno para procesos descritos por sistemas de EDP, que directamente consideran la naturaleza distribuida, los primeros trabajos en esta materia se deben a Georgakis, Aris y Amundson (1977) [21]. Podemos mencionar otros trabajos como los de Christofides (2001) [11] en el que utiliza el método de Galerkin para la derivación de un sistema de EDO cuyas soluciones son una buena aproximación a las obtenidas por el sistema de EDP. El sistema de EDO se utiliza luego para el diseño de un controlador por retroalimentación de salidas que garantiza estabilidad en un RT no isotérmico. Otro trabajo es el de D. Dochain (2001) [12] cuyo objetivo fue extender el diseño de observadores asintóticos y esquemas de control adaptativo a reactores bioquímicos. Para más ejemplos podemos remitirnos a las referencias [13], [22] [23]

La idea básica en el control distribuido es extender los conceptos de control geométrico de las EDO a dichos sistemas; como resultado se han desarrollado controladores de retroalimentación distribuidos que refuerzan la regulación de la salida y garantizan estabilidad global para sistemas a lazo cerrado [11]. Sin embargo la complejidad y la dependencia al modelo de los controladores por retroalimentación resultantes puede ser una limitación seria para su aplicación en la práctica industrial, donde la falta de mediciones y de un modelo dinámico detallado es la situación común. Por lo tanto resulta deseable obtener estructuras de control simples y de fácil implementación como los PI/PID, los cuales son bien aceptados debido a su facilidad de implementación. En la industria los procesos que involucran RT's y reactores de lecho fijo aún son controlados con compensadores de este tipo [24], [25].

La clase de reactores que se estudiará en este trabajo está formada por RT's homogéneos con mezclado axial, no adiabáticos y en los que ocurre una reacción de primer orden, irreversible y exotérmica. Se eligió como reactor de prueba o caso representativo de estudio un RT con cinco pares de perfiles (concentración-temperatura) estacionarios, dos de los cuales son inestables a lazo abierto. El trabajo se centra en dos problemas:

- Problema de modelado: consiste en capturar los aspectos relevantes de la estática y dinámica del RT mediante un tren de reactores continuos de tanque agitado (TRCTA) con retromezclado. La dimensionalidad de la aproximación con tanques dependerá de si el objetivo es diseñar equipo, determinar condiciones de operación, plantear esquemas de monitoreo o sistemas de control. En esta tesis nos enfocaremos principalmente en el último punto, por lo que se desea una aproximación de baja dimensión que contenga los mecanismos relevantes de la estática y dinámica del RT para el diseño del control.
- Problema de control: consiste en diseñar un control robusto de temperatura para el reactor tubular que garantice la estabilidad global a lazo cerrado del par de perfiles (concentración-temperatura) inestables, a partir de la medición de sensores de temperatura localizados a lo largo de la posición axial del reactor y utilizando como variable de control la temperatura de la chaqueta de enfriamiento. Se incluirán criterios de ubicación de sensores, lo anterior con base en la aproximación al comportamiento del RT por medio del TRCTA.

1.2 Justificación

Con lo descrito hasta el momento podemos decir que existen dos vertientes para abordar los dos problemas planteados:

- Emplear métodos de aproximación que consideren directamente la naturaleza distribuida del sistema. Sin embargo la teoría en esta parte no está lo bastante desarrollada y dichos métodos están restringidos, por ejemplo, al hecho de que el sistema de EDP debe tener solución única [11].
- El enfoque convencional basado en la discretización espacial del sistema de EDP, comúnmente por diferencias finitas. Sin embargo también existen ciertas desventajas, por ejemplo propiedades como la controlabilidad y la observabilidad, que deberían depender sólo de la ubicación de sensores también pueden depender del método, del

número y ubicación de los puntos de discretización. Además este enfoque conduce a una pobre aproximación en los procesos con fuertes variaciones espaciales [11], [13].

Resulta necesario explorar otros métodos sistemáticos para abordar el problema de modelado y control del RT con base en EDO, dónde la teoría de control constructivo ofrece un camino metodológico interesante. Nos apoyaremos en aproximaciones basadas en nociones y conceptos de los RCTA's, reactores que en ingeniería química han sido muy estudiados, ya que los modelos matemáticos que los describen son sencillos además de que su análisis provee la base para entender reactores más complejos. Se sabe también que es posible modelar a los RT (Coste *et al*, 1961, Aris, 1970) y reactores catalíticos de lecho fijo (Deans y Lapidus 1960) como una secuencia de RCTA's [26], [27], [28].

Estudios de control en columnas de destilación han mostrado que se pueden controlar sistemas complejos con esquemas de control relativamente simples. Aún teniendo en cuenta las diferencias entre las dinámicas de la columna de destilación y del RT, existen algunos factores comunes tales como la naturaleza distribuida de ambos procesos [29]. También existen trabajos recientes que conectan el control no lineal con el control PI, haciendo uso de las características implicadas en los mecanismos básicos de los reactores RCTA, que podrían trasladarse al RT a partir de la aproximación de éste por medio del TRCTA [30].

1.3 Objetivos

El objetivo general y los objetivos específicos del trabajo de tesis son los siguientes.

1.3.1 Generales

Diseñar un control robusto de temperatura para el reactor tubular que garantice la estabilidad global a lazo cerrado del par de perfiles (concentración-temperatura) inestables, incluyendo un criterio de ubicación de sensores, con base en la aproximación en tanques del RT.

1.3.2 Específicos

- Aproximar el comportamiento del RT mediante un TRCTA con retromezclado.

- Diseñar un controlador no lineal robusto estabilizante accionado por retroalimentación de estados para el TRCTA, estableciendo un criterio de selección para determinar el tanque a controlar.
- Recuperar el comportamiento del controlador no lineal, del conjunto de tanques, mediante un control PI de temperatura.
- Trasladar los criterios de selección de tanque de medición a una posición espacial en el RT y aplicar el control estabilizante PI para determinar si los perfiles inestables a lazo abierto del RT se pueden estabilizar.

1.4 Organización de la tesis

La tesis está organizada del siguiente modo. En el segundo capítulo se comienza analizando el comportamiento dinámico y estático del caso de estudio: un RT con cinco pares de perfiles (concentración-temperatura) estacionarios, dos de los cuales son inestables a lazo abierto; para posteriormente formular técnicamente los problemas de modelado y control de este trabajo.

En el tercer capítulo se modela el comportamiento dinámico del TRCTA con retromezclado y teniendo como base el modelo discretizado del RT por diferencias finitas, se establecen las conexiones y analogías entre el TRCTA y el RT. Por último con el fin de determinar el número de tanques que ofrezcan una buena aproximación al comportamiento del RT, se propone analizar tres situaciones: un RCTA con retro mezclado, dos y tres RCTA's conectados en serie con retromezclado.

En el cuarto capítulo se analiza el comportamiento dinámico y estático de cada uno de los reactores de tanque agitado de los tres casos propuestos en el tercer capítulo, esto con la finalidad de determinar si es posible aproximar el comportamiento del RT a través del TRCTA, así como el número de tanques suficientes para hacerlo con un buen grado de aproximación.

En el quinto capítulo se estudia la existencia de solución al problema de control por retroalimentación de estados para tres RCTA's en serie (Caso III), aproximación con la cual se

capturó la esencia dinámica y estática del RT. Entendiendo como problema de control la selección de la salida a regular, contando con varias candidatas (las temperaturas de cada reactor). La selección de la salida a regular dependerá de la pasividad del tren de reactores, esto ayudará a establecer un criterio para la elegir la ubicación del sensor en uno de los tanques.

En el capítulo 6 se diseña un controlador estabilizante de temperatura accionado por retroalimentación de estados que estabiliza robustamente al conjunto de tanques, con base en el modelo no lineal para tres RCTA's en serie con retromezclado y en los resultados de la caracterización de pasividad para este sistema. El diseño incluye la ley de control no lineal y el criterio para elegir el sensor en uno de los RCTA. Finalmente se recupera el comportamiento del controlador no lineal con retroalimentación de estados mediante un control de temperatura por retroalimentación de salidas, construido con base en un modelo lineal simplificado que se confecciona de acuerdo a propiedades de pasividad y observabilidad del conjunto de tanques que aproximan al reactor tubular.

En el capítulo 7 se soluciona el problema de control para el RT a partir de los diferentes resultados obtenidos de la aproximación con tanques. Primero se definen los criterios de ubicación de sensores con base en el estudio que se realizó a tres RCTA's en serie con retromezclado. Luego se controla el RT con un control no lineal pasivo accionado por retroalimentación de estados y finalmente con un control PI se recupera el comportamiento del control ideal aplicado al RT. Para probar el diseño de los controladores se eligió controlar a los dos pares de perfiles (concentración-temperatura) inestables del RT, uno de los perfiles de temperatura es isotónico mientras que el otro presenta un punto caliente, abarcando así en el trabajo los comportamiento típicos del RT.

Por último en el capítulo 8 se presentan las conclusiones de la tesis y se plantean algunos temas como trabajo a futuro.

Capítulo 2

Planteamiento forma de los problemas de modelado y control

En este capítulo se formulan de manera formal los problemas de modelado y control considerados en esta tesis. Primero se discute la dinámica y estática del reactor tubular en términos de un par de EDP y EDO, respectivamente. Posteriormente se plantea el problema de aproximar el comportamiento del RT mediante un TRCTA con retromezclado. Y finalmente se propone construir un controlador robusto de temperatura a partir de la aproximación con tanques.

2.1 Dinámica y estática del reactor tubular (RT)

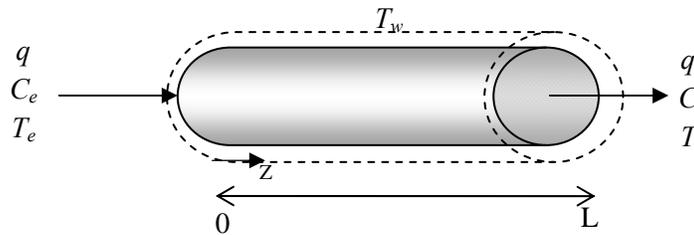


Figura 2.1. Representación esquemática del reactor tubular

La clase de reactores que se estudia en este trabajo está formada por RT's homogéneos con mezclado axial, no adiabáticos y en los que ocurre una reacción de primer orden, irreversible y exotérmica, en donde el reactante A entra al reactor con concentración C_e , temperatura T_e y un caudal q , ver figura 2.1. El modelo que describe el comportamiento de estos reactores toma en cuenta las siguientes suposiciones [31]:

- Las variables dependientes, concentración (C) y temperatura (T), son función sólo de la dirección axial (Z), y del tiempo (t').
- Existe difusión de masa y calor, estas siguen las leyes de Fick y Fourier, respectivamente, considerando coeficientes de dispersión másicos (D_M) y térmicos (D_T).

- Se extrae calor del sistema a través de una chaqueta de enfriamiento la cual se encuentra a una temperatura T_w .

Por lo tanto, el modelo que describe el comportamiento dinámico de la clase de RT's se constituye del siguiente sistema de EDP parabólicas acopladas, generadas a partir del balance de materia y energía.

$$\frac{\partial C}{\partial t'} = D_M \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} - v \frac{\partial C}{\partial Z} - R(C, T), \quad 0 < Z < L, \quad t' > 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t'} = D_T \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - v \frac{\partial T}{\partial Z} + \frac{(-\Delta H)}{\rho C_p} R(C, T) - \frac{PU}{A \rho C_p} (T - T_w), \quad 0 < Z < L, \quad t' > 0 \quad (2.2)$$

Estas ecuaciones transitorias necesitan condiciones de frontera e iniciales que reflejen las condiciones de entrada, así como la distribución inicial de la concentración y temperatura, las cuales son:

$$D_M \frac{\partial C}{\partial Z} = v(C - C_e), \quad D_T \frac{\partial T}{\partial Z} = v(T - T_e) \quad \text{en } Z = 0 \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial Z} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial Z} = 0 \quad \text{en } Z = L \quad (2.4)$$

$$C(Z, 0) = C_{in}(Z), \quad T(Z, 0) = T_{in}(Z) \quad (2.5)$$

Para este caso la velocidad de reacción, $R(C, T)$, estará definida por una expresión tipo Arrhenius:

$$R(C, T) = C k_e \exp(-E_a / R_g T) \quad (2.6)$$

En donde k_e es el factor pre-exponencial, E_a es la energía de activación y R_g es la constante de los gases.

Para disponer de la ecuaciones anteriores en su forma adimensional, definimos las siguientes variables adimensionales

$$c = \frac{C}{C_r}, \quad \eta = \frac{T}{T_r}, \quad \eta_w = \frac{T_w}{T_r}, \quad v = \frac{v}{v_r}, \quad z = \frac{Z}{L}, \quad t = \frac{v_r}{L} t' \quad (2.7)$$

Donde C_r , T_r , y v_r , son valores de referencia de la concentración, la temperatura y la velocidad de la mezcla de reacción a través del reactor. Por lo tanto el sistema de EDP se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{Pe^M} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v \frac{\partial c}{\partial z} - \phi r(c, \eta) \quad 0 < z < 1, \quad t > 0 \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{1}{Pe^T} \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} - v \frac{\partial \eta}{\partial z} + \beta \phi r(c, \eta) - \delta(\eta - \eta_w) \quad 0 < z < 1, \quad t > 0 \quad (2.9)$$

Estando sujeto a las siguientes condiciones (adimensionales) de frontera e iniciales

$$\frac{\partial c}{\partial z} = Pe^M (c - c_e), \quad \frac{\partial \eta}{\partial z} = Pe^T (\eta - \eta_e) \quad \text{en } z = 0 \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial c}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial \eta}{\partial z} = 0 \quad \text{en } z = 1 \quad (2.11)$$

$$c(z, 0) = c_{in}(z), \quad \eta(z, 0) = \eta_{in}(z) \quad (2.12)$$

En donde

$$r(c, \eta) = c \exp[\gamma(\eta - 1)/\eta] \quad (2.13)$$

En estado estacionario el sistema de EDP se reduce a un sistema de EDO, por lo tanto el modelo que describe el comportamiento estático de la clase de RT's es:

$$\frac{1}{Pe^M} \frac{d^2 c}{dz^2} - v \frac{dc}{dz} - \phi r(c, \eta) = 0 \quad 0 < z < 1 \quad (2.14)$$

$$\frac{1}{Pe^T} \frac{d^2 \eta}{dz^2} - v \frac{d\eta}{dz} + \beta \phi r(c, \eta) - \delta(\eta - \eta_w) = 0 \quad 0 < z < 1 \quad (2.15)$$

Sujeto a las siguientes condiciones de frontera

$$\frac{dc}{dz} = Pe^M (c - c_e), \quad \frac{d\eta}{dz} = Pe^T (\eta - \eta_e) \quad \text{en } z = 0 \quad (2.16)$$

$$\frac{dc}{dz} = 0, \quad \frac{d\eta}{dz} = 0 \quad \text{en } z = 1 \quad (2.17)$$

En los modelos que describen a la dinámica y a la estática podemos identificar un conjunto de parámetros que caracterizan el comportamiento de los RT's, estos parámetros aparecen agrupados y definidos en la tabla 2.1.

Tabla 2.1. Parámetros que caracterizan a los reactores tubulares homogéneos.

| Parámetro | Definición |
|-----------|--|
| β | $(-\Delta H)c_r / \rho C_p T_r$ Incremento adiabático de temperatura adimensional |
| ϕ | $LR(c_r, T_r) / v_r c_r$ Número de Damköhler |
| δ | $U(PL) / \rho C_p (Av_r)$ Coeficiente de transferencia de calor adimensional |
| Pe^M | $v_r L / D_M$ Número de Peclet másico |
| Pe^T | $v_r L / D_T$ Número de Peclet térmico |
| γ | $E_A / R_g T_r = \varepsilon / T_r$ Energía de activación adimensional |

A partir de los parámetros anteriores Varma y Amundson (1973) estudiaron el comportamiento cualitativo de la clase de RT's exotérmicos que se pretende analizar en este trabajo. Al estudiar la parte estática, sistema de EDO (2.14)-(2.17), determinaron que para ciertos valores de los parámetros el RT puede presentar multiplicidad de estados estacionarios del tipo 1-3-1, 1-3-1-3-1 y 1-3-5-3-1 [31], [32], [33], como se muestra en las siguientes figuras.

Lo anterior implica que un reactor tubular puede tener de uno hasta cinco pares de perfiles (concentración-temperatura) estacionarios.

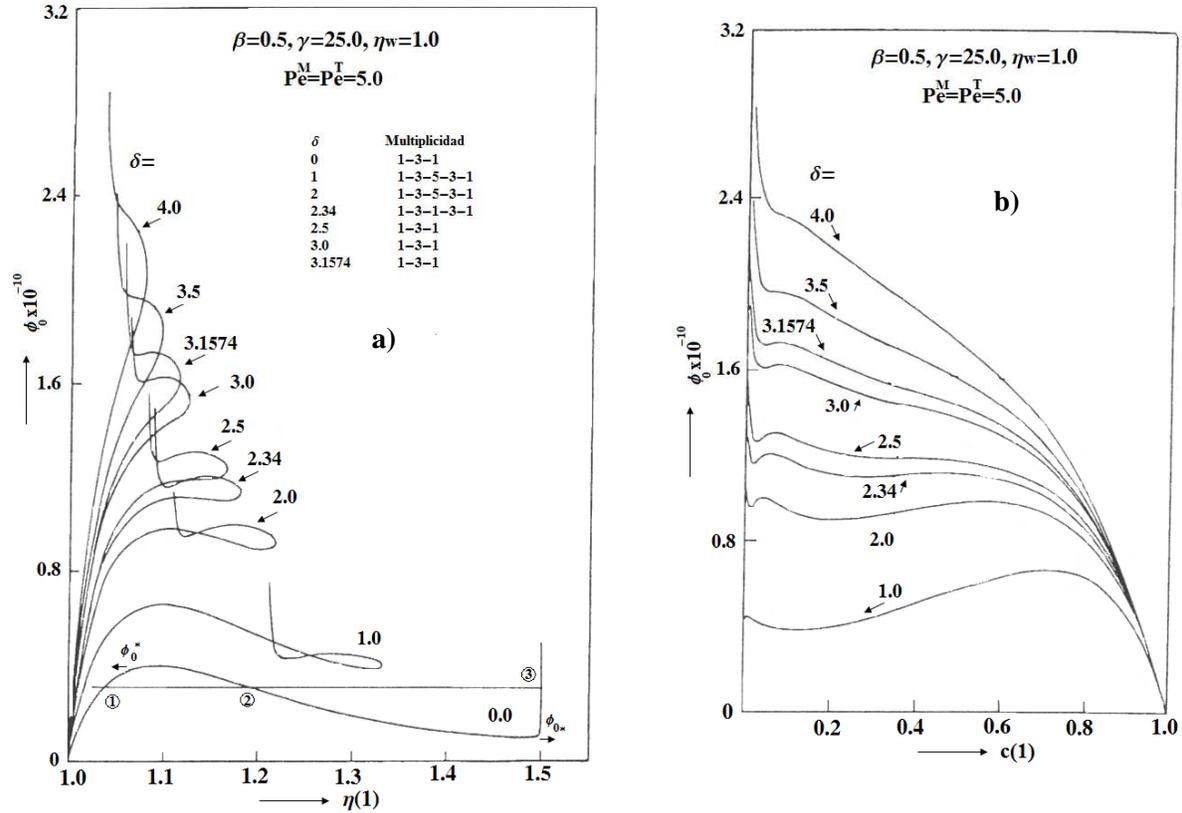


Figura 2.2. Diagramas de bifurcación del reactor tubular para diferentes parámetros: a) temperatura adimensional a la salida $\eta(1)$ vs ϕ_0 ($\phi_0 = \phi e^\gamma$), b) composición adimensional a la salida $c(1)$ vs ϕ_0 ($\phi_0 = \phi e^\gamma$).

En la figura 2.2 se presentan varias curvas de bifurcación para diferentes conjuntos de parámetros; cada punto de cada curva, a δ constante, representa una solución del sistema de ecuaciones (2.14)-(2.17). Se observa también que para $0 \leq \delta < 3.5$ se pueden hallar varias soluciones para un rango de valores de ϕ_0 denotados por $\phi_{0*} \leq \phi_0 \leq \phi_0^*$. Por ejemplo para $\delta = 0$, caso adiabático, conforme se incrementan los valores de ϕ_0 existe una única solución a lo largo de la rama 1 hasta $\phi_0 = \phi_{0*} = 0.102 \times 10^{10}$, donde una nueva solución aparece. Para $\phi_0 > \phi_{0*}$ esta nueva solución se bifurca en dos soluciones a lo largo de las ramas 2 y 3. En $\phi_0 = \phi_0^* = 0.404 \times 10^{10}$ las ramas 1 y 2 se unen, por lo tanto para $\phi_0 > \phi_0^*$ la rama 3 provee una

única solución [31], [32], [33]. La multiplicidad de soluciones para este caso es del tipo 1-3-1, la información anterior y para otros valores de δ se resume en la tabla 2.2.

Tabla 2.2. Patrones de multiplicidad para diferentes conjuntos de parámetros del reactor tubular.

| δ | $\times 10^{-10}$ | | | | Multiplicidad |
|----------|-------------------|---------------|--------------|-------------|---------------|
| | ϕ_0^* | ϕ_0^{**} | ϕ_{0**} | ϕ_{0*} | |
| 0 | 0.404 | - | - | 0.102 | 1-3-1 |
| 1 | 0.662 | 0.449 | 0.434 | 0.388 | 1-3-5-3-1 |
| 2 | 0.998 | 0.981 | 0.950 | 0.896 | 1-3-5-3-1 |
| 2.34 | 1.206 | 1.114 | 1.162 | 1.10 | 1-3-1-3-1 |
| 2.5 | 1.306 | - | - | 1.266 | 1-3-1 |
| 3 | 1.626 | - | - | 1.608 | 1-3-1 |
| 3.1574 | 1.73 | - | - | 1.72 | 1-3-1 |

Otro patrón de bifurcación (1-3-5-3-1) es el encontrado en la curva $\delta = 1.0$, ver tabla 2.2, en este caso existe solución única para $\phi_0 < \phi_{0*}$ o para $\phi_0 > \phi_0^*$; tres soluciones para $\phi_{0*} < \phi_0 < \phi_{0**}$ o para $\phi_0^{**} < \phi_0 < \phi_0^*$ y cinco para $\phi_{0**} < \phi_0 < \phi_0^{**}$, ver figura 2.3. El mismo patrón de multiplicidad se repite para la curva $\delta = 10$, mientras que para valores mayores de δ los patrones de multiplicidad se vuelven a reducir (1-3-1), ya para valores de δ iguales o superiores a 3.5 existe solución única para cualquier ϕ_0 , ver figura 2.2.

Como caso representativo, en éste trabajo se analizará un reactor tubular con cinco soluciones estacionarias, ver figura 2.3, es decir con cinco pares de perfiles (concentración-temperatura) estacionarios. En la tabla 2.3 se muestran los valores de los parámetros adimensionales para éste reactor, los valores nominales de la concentración de entrada, la temperatura de entrada, la temperatura de chaqueta y la velocidad de la mezcla de reacción adimensionales son: $\bar{c}_e = 1.0$, $\bar{\eta}_e = 1.0$, $\bar{\eta}_w = 1.0$, $\bar{v} = 1.0$. En la figura 2.4 se muestran los perfiles de concentración y temperatura estacionarios para este reactor.

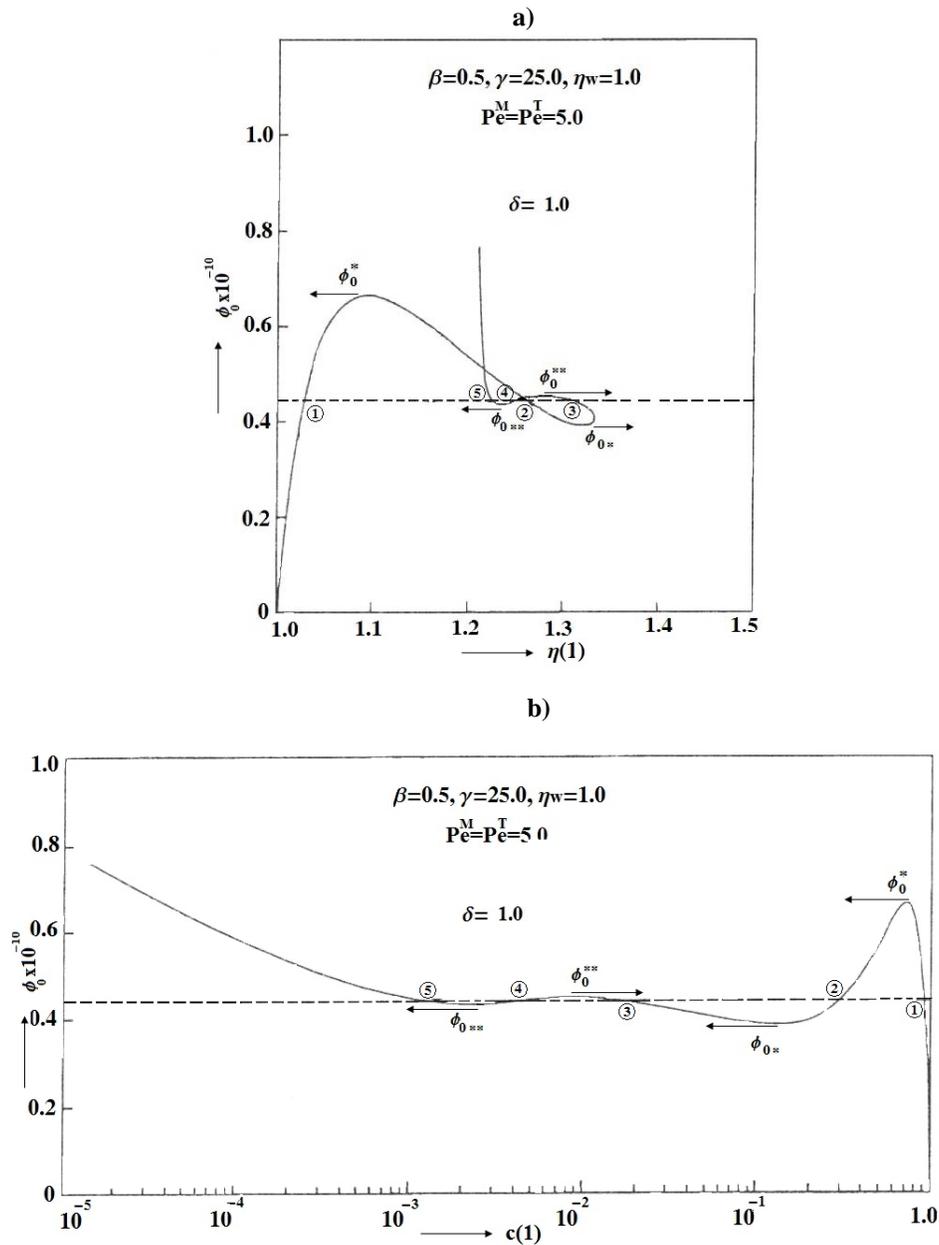


Figura 2.3. Diagramas de bifurcación del RT con cinco soluciones estacionarias: a) temperatura adimensional a la salida $\eta(1)$ vs ϕ_0 ($\phi_0 = \phi e^\gamma$), b) composición adimensional a la salida $c(1)$ vs ϕ_0 ($\phi_0 = \phi e^\gamma$).

El caso representativo se eligió con la finalidad de cubrir la mayoría de eventos posibles en los RT's, además puede servir de base para estudios posteriores que abarquen tres perfiles o un solo par de perfiles estacionarios. Este caso presenta los comportamientos típicos, en el perfil

de temperatura de los RT's, perfiles isotónicos y perfiles no monotónicos (con un punto caliente), ver figura 2.4.

Tabla 2.3. Parámetros que producen cinco soluciones estacionarias en el reactor tubular [31], [33].

| Parámetro | Valor |
|-------------------------------------|-----------------------|
| β | 0.5 |
| $\phi_0 (\phi_0 = \phi e^{\gamma})$ | 0.44×10^{10} |
| δ | 1.0 |
| Pe^M | 5.0 |
| Pe^T | 5.0 |
| γ | 25.0 |

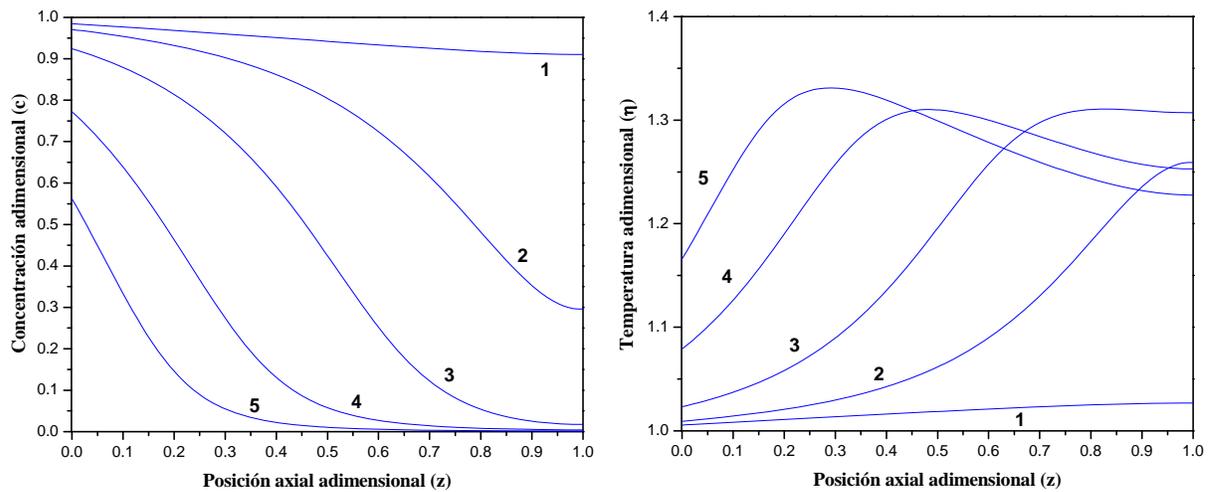


Figura 2.4. Perfiles de concentración y temperatura estacionarios del reactor tubular

Una característica importante es la estabilidad de las soluciones del estado estacionario, dado que aquellas que resultan ser inestables son físicamente imposibles sin ningún tipo de control. Mediante el análisis directo de las ecuaciones transitorias, sistema de EDP (2.1)-(2.5), Varma y Amundson (1973) determinaron que para el reactor tubular anterior los perfiles 2 y 4 son inestables, mientras que los perfiles 1, 3 y 5 son estables [34]. Los valores calculados de la

concentración $c(1,t)$ y temperatura $\eta(1,t)$ a la salida del reactor son graficados en la proyección en dos dimensiones del plano fase del RT, ver figura 2.5, los números fueron asignados dependiendo del perfil al que pertenecen, ver figura 2.4.

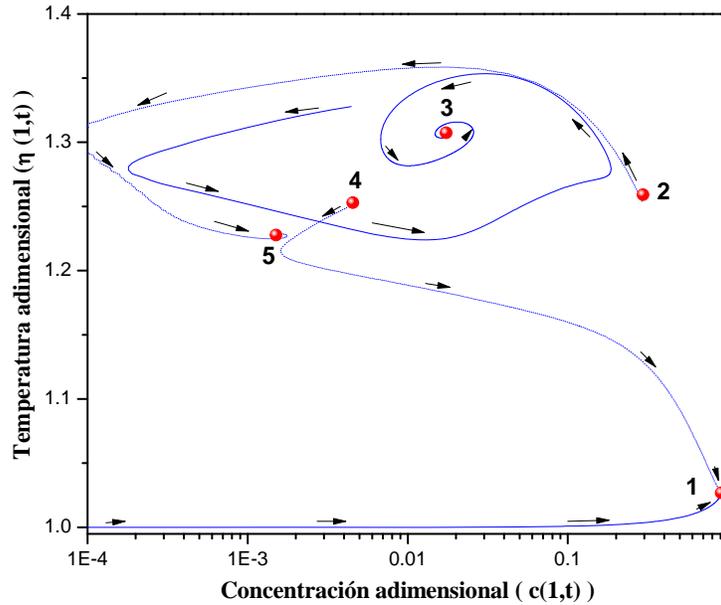


Figura 2.5. Proyección en dos dimensiones del plano fase del RT a lazo abierto, las concentraciones y temperaturas corresponden a la salida del reactor.

En la figura 2.5 se pueden distinguir cinco puntos de equilibrio o estados estacionarios relacionados cada uno con los cinco pares de perfiles de la figura 2.4. Se observa que es posible lograr que el reactor tubular siga trayectorias hacia los puntos 1, 3, 5 (relacionados con los perfiles estables) y se mantenga en estos; no así para los puntos 2 y 4 (relacionados con los perfiles inestables) ya que resulta imposible conseguir que el reactor siga trayectorias hacia estos puntos o se mantenga ahí, dado que cualquier pequeña perturbación obliga a que el reactor tienda hacia los puntos estables. Como complemento a lo anterior, en la figura 2.6 se muestra el comportamiento dinámico (a lazo abierto) de la concentración y temperatura a la salida del RT, se observa como a diferentes condiciones iniciales el RT puede estabilizarse en las trayectorias 1, 3 o 5, relacionadas con los puntos de equilibrio de la proyección del plano fase de la figura 2.5, que a su vez están relacionados con los pares de perfiles (estables) 1, 3 y 5 de la figura 2.4

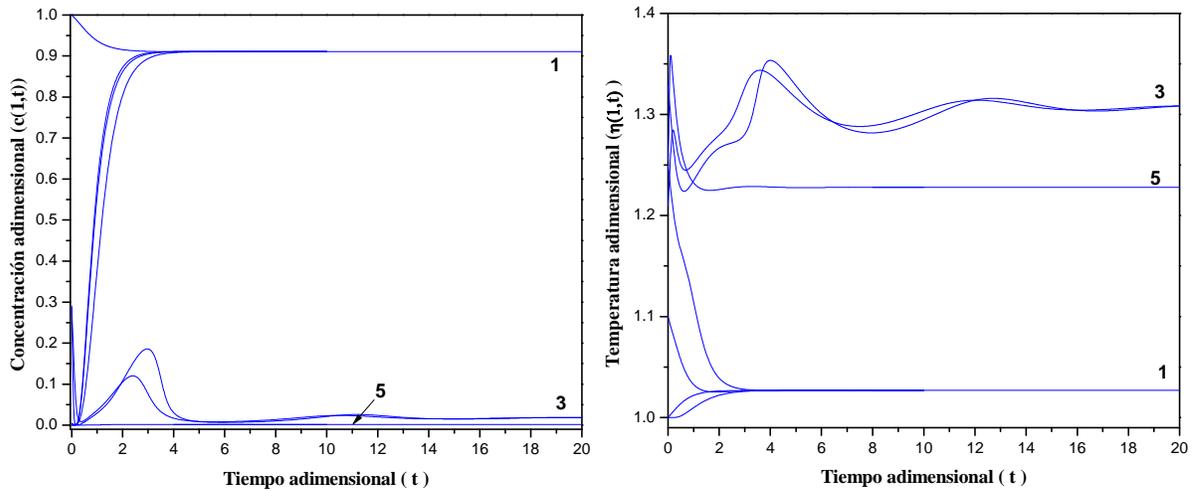


Figura 2.6. Comportamiento dinámico (a lazo abierto) de la concentración y temperatura a la salida del RT.

2.2 Problema de modelado

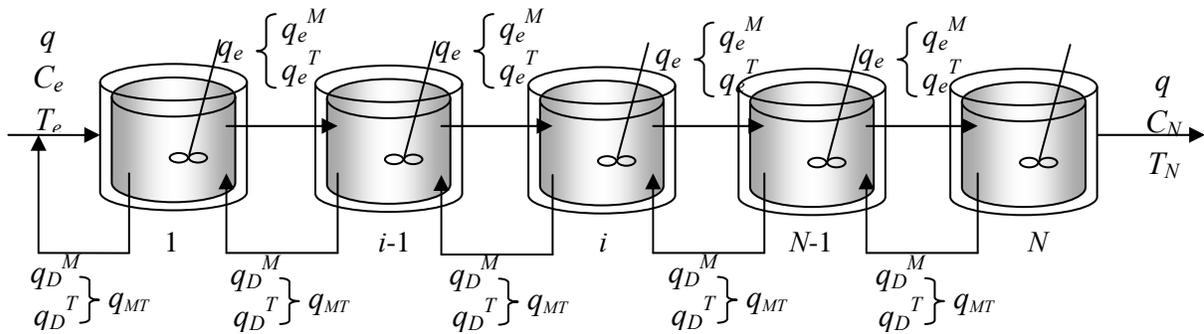


Figura 2.7. Representación esquemática del una serie de RCTA's con reflujo

Consideremos un tren de RCTA's, como el mostrado en la figura 2.7, con las siguientes características:

- Cada reactor posee el mismo volumen (V_i) y la misma área para la transferencia de calor (a_i).
- El flujo volumétrico (q) que entra en el TRCTA es el mismo a la salida.

- Cada RCTA posee un reflujo constante q_{MT} , conceptualmente integrado por un reflujo másico (q_D^M) y un térmico (q_D^T).
- Todos los reactores poseen el mismo sistema de enfriamiento, por lo que cada chaqueta se encuentra a una misma temperatura T_w .

El problema en esta parte consiste en obtener un modelo que describa el comportamiento de una serie de tanques con retromezclado másico y térmico, ver figura 2.7. Dicho modelo servirá para aproximar de manera cualitativa y cuantitativa el comportamiento dinámico y estático del RT. Por aproximar el comportamiento se debe de entender:

- Cualitativamente
 - i) Reproducir los pares de perfiles estacionarios, concentración-temperatura
 - ii) Reproducir la estabilidad o inestabilidad de cada par de perfiles
- Cuantitativamente
 - iii) Reproducir la respuesta dinámica (tiempos de asentamiento, sesgo estacionario, etc.)

En función de los parámetros que caracterizan al RT se determinará:

- i) El número de tanques (N) que conduzcan a una buena aproximación,
- ii) Las corrientes q_D^M y q_D^T de retro mezclado
- iii) La representación adecuada de las condiciones de frontera, del reactor tubular, en el TRCTA.

La aproximación con tanques dependerá de si lo que se busca es diseñar equipo, determinar condiciones de operación, plantear esquemas de monitoreo o sistemas de control. Dado que el propósito de este trabajo es diseñar un controlador de temperatura para el RT, a continuación presentamos la formulación del problema de control.

2.3 Problema de control

El problema consiste en diseñar un control robusto de temperatura para el RT que garantice la estabilidad global a lazo cerrado del par de perfiles (concentración-temperatura) inestable, ver figuras 2.4, 2.5 y 2.6. Este problema se resuelve diseñando el controlador para la representación en tanques del RT, por lo tanto:

- Con base en el modelo no lineal del conjunto de tanques se diseñará un controlador no lineal robusto estabilizante accionado por retroalimentación de estados, con una entrada y una salida, estableciendo un criterio de selección para determinar el tanque a controlar.
- Se buscará recuperar el comportamiento del controlador no lineal anterior mediante un control PI de temperatura, construido con base en un modelo lineal y simplificado a la luz de propiedades de pasividad y observabilidad.
- Se trasladarán los criterios de selección de tanque de medición a una posición espacial en el RT y se aplicará el control estabilizante PI para determinar si el RT, se puede estabilizar, ver el esquema de control de la figura 2.8.

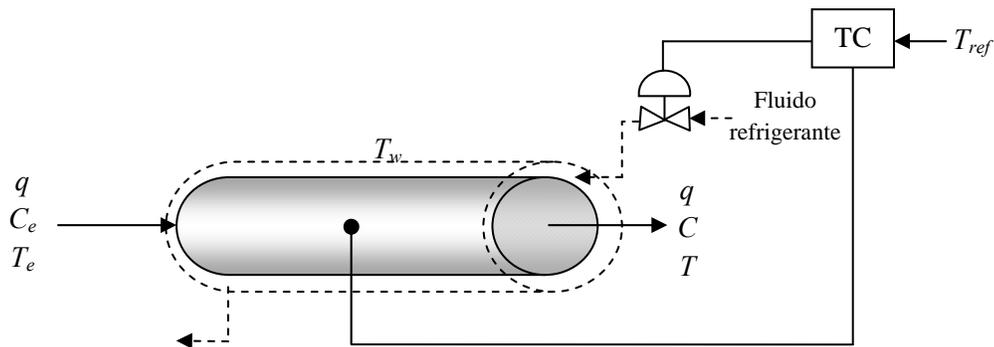


Figura 2.8. Diagrama del esquema de control para el reactor tubular

Con la finalidad de solucionar los problemas planteados, se propone analizar tres casos: un RCTA con retro mezclado, dos y tres RCTA's conectados en serie con retro mezclado; la metodología se ilustrará y probará mediante simulaciones numéricas teniendo como soporte el modelo del reactor tubular aproximado con diferencias finitas.

Capítulo 3

El TRCTA con retromezclado y sus analogías con el reactor tubular

En éste capítulo se modela el comportamiento dinámico del TRCTA con retromezclado. Posteriormente, teniendo como base el modelo discretizado del RT por diferencias finitas, se establecen las conexiones y analogías entre el TRCTA y el RT, determinando las relaciones entre los parámetros de ambos modelos, las relaciones entre las corrientes de retro mezclado y los números de Peclet; así como la representación adecuada de las condiciones de frontera del RT en la aproximación con tanques. Por último con el fin de determinar el número de unidades en el tren de reactores que ofrezcan una buena aproximación al comportamiento del RT, se propone analizar tres casos: un RCTA con retromezclado, dos y tres RCTA's conectados en serie con retromezclado.

3.1 Aproximación del reactor tubular por diferencias finitas

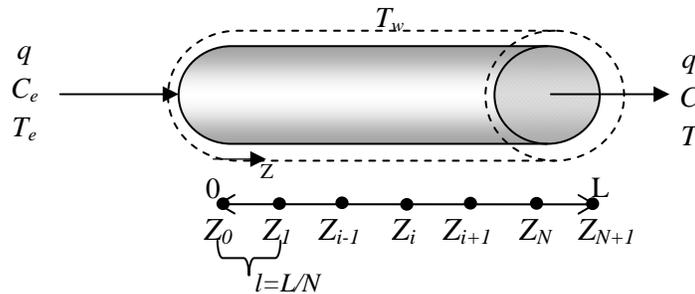


Figura 3.1. Representación esquemática de la discretización espacial del reactor tubular.

El enfoque convencional para el control de sistemas de parámetros distribuidos se basa en la discretización espacial (típicamente a través de los métodos de diferencias finitas o elementos finitos) del sistema de EDP, seguido por el diseño del controlador con base en el sistema (lineal o no lineal) de EDO resultante [3], [10], [11], [12], [13]. A continuación se presenta el modelo dinámico discretizado del RT, expresiones (2.1)-(2.4), por medio del método de diferencias finitas. Para ello se dividió la longitud del reactor en $N+1$ intervalos iguales, ver figura 3.1.

$$\begin{aligned}
 C_0 &= \left(\frac{D_M}{D_M + vl} \right) C_1 + \left(\frac{vl}{D_M + vl} \right) C_e \\
 T_0 &= \left(\frac{D_T}{D_T + vl} \right) T_1 + \left(\frac{vl}{D_T + vl} \right) T_e
 \end{aligned} \quad i = 0 \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned}
 \dot{C}_i &= D_M \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{l^2} - v \frac{C_i - C_{i-1}}{l} - R(C_i, T_i) \\
 \dot{T}_i &= D_T \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{l^2} - v \frac{T_i - T_{i-1}}{l} + \frac{(-\Delta H)}{\rho C_p} R(C_i, T_i) - \frac{PU}{A \rho C_p} (T_i - T_w)
 \end{aligned} \quad 1 \leq i \leq N \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned}
 C_{N+1} &= C_N \\
 T_{N+1} &= T_N
 \end{aligned} \quad i = N + 1 \quad (3.3)$$

En donde

$$R(C_i, T_i) = C_i \exp(-E_a / R_g T_i) \quad (3.4)$$

Para la discretización se utilizaron diferencias centradas, como aproximación para la segunda derivada parcial, y diferencias hacia atrás, como aproximación para la primera derivada parcial, ver (3.2). Con respecto a las condiciones de frontera se usaron diferencias hacia adelante (cuando $Z = 0$), ver (3.1), y diferencias hacia atrás (cuando $Z = L$), ver (3.3), como aproximación para la primera derivada parcial [3], [35]. Por lo tanto se reformuló el problema original de valores a la frontera en un problema de valores iniciales, generando un modelo compuesto por un sistema de ecuaciones algebro-diferenciales.

Se debe notar que dentro del modelo discretizado solo se están considerando N intervalos ($l = L/N$), debido a que la concentración y la temperatura en el último punto de discretización están determinadas de manera implícita, ver (3.3). Esto debido a que dichas variables son continuas en $Z = L$ [36], circunstancia expresada en la condición de frontera, ver (2.4).

3.2 Modelo del TRCTA con retro mezclado

En el capítulo anterior, en el planteamiento técnico del problema de modelado, se habló de las características del TRCTA con retromezclado tomando en cuenta esto, en la figura 3.2 se

muestra un diagrama de bloques detallando la manera en que van a estar interconectados estos reactores con sus respectivos reflujos de masa y energía. Dichos reflujos tienen la finalidad, como más adelante se verá, de aproximar el transporte dispersivo que existe en el reactor tubular. Cada par de bloques verticales en su conjunto representa a un reactor como los mostrados en la figura 2.7. Las líneas punteadas representan la información que se suministra de un bloque a otro, esto se ve más claro al plantear los balances de materia y energía para los bloques i :

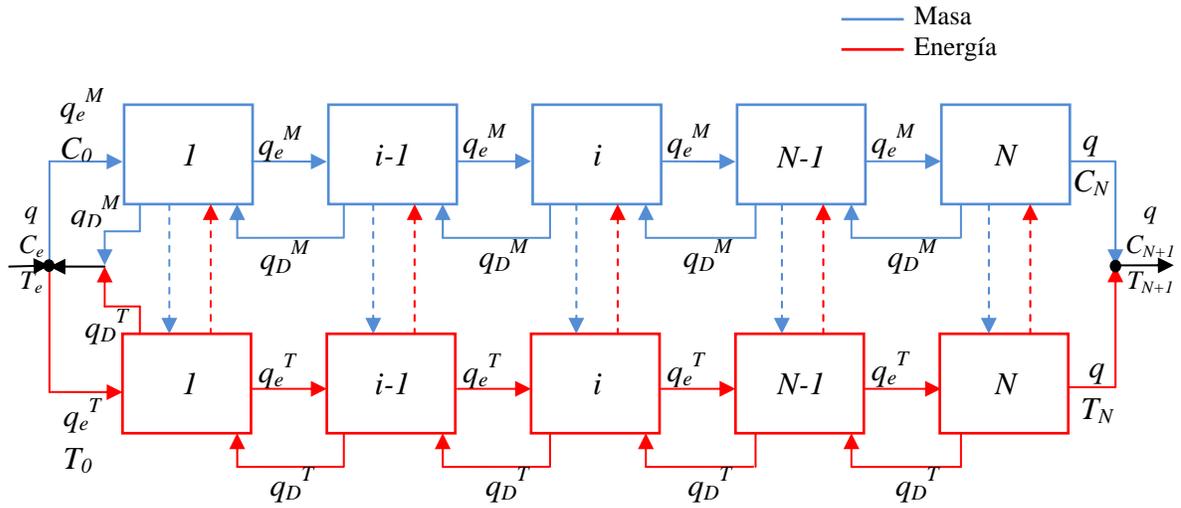


Figura 3.2. Representación por medio de diagrama de bloques del TRCTA con retomezclado.

Balance de materia:

$$\dot{C}_i = \frac{1}{V_i} (q_e^M C_{i-1} + q_D^M C_{i+1} - q_e^M C_i - q_D^M C_i) - R(C_i, T_i) \quad (3.5)$$

En la Figura 3.2 se puede notar que $q_e^M = q + q_D^M$, por lo tanto

$$\dot{C}_i = \frac{q_D^M}{V_i} [C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}] - \frac{q}{V_i} [C_i - C_{i-1}] - R(C_i, T_i) \quad (3.6)$$

Balance de energía:

$$\dot{T}_i = \frac{1}{V_i} [q_e^T T_{i-1} + q_D^T T_{i+1} - q_e^T T_i - q_D^T T_i] + \frac{(-\Delta H)}{\rho C_p} R(C_i, T_i) - \frac{U a_i}{V_i \rho C_p} (T_i - T_w) \quad (3.7)$$

Teniendo en cuenta que $q_e^T = q + q_D^T$, la ecuación anterior queda de la siguiente manera

$$\dot{T}_i = \frac{q_D^T}{V_i} [T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}] - \frac{q}{V_i} [T_i - T_{i-1}] + \frac{(-\Delta H)}{\rho C_p} R(C_i, T_i) - \frac{U a_i}{V_i \rho C_p} (T_i - T_w) \quad (3.8)$$

Por lo tanto el sistema de ecuaciones que describe el comportamiento dinámico de cada reactor con retromezclado es el siguiente:

$$\begin{aligned} \dot{C}_i &= \frac{q_D^M}{V_i} [C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}] - \frac{q}{V_i} [C_i - C_{i-1}] - R(C_i, T_i) \\ \dot{T}_i &= \frac{q_D^T}{V_i} [T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}] - \frac{q}{V_i} [T_i - T_{i-1}] + \frac{(-\Delta H)}{\rho C_p} R(C_i, T_i) - \frac{U a_i}{V_i \rho C_p} (T_i - T_w) \end{aligned} \quad 1 \leq i \leq N \quad (3.9)$$

Para tener totalmente caracterizada la dinámica del tren de reactores aún falta por analizar una par de elementos más. El primero es el nodo donde se mezclan la corriente de entrada y el reflujo del primer reactor, originando una corriente que es alimentada al mismo reactor, ver figura 3.2. Por medio del balance de materia y energía en dicho punto se tiene:

$$\left(\underbrace{q + q_D^M}_{q_e^M} \right) C_0 = q_D^M C_1 + q C_e \quad (3.10)$$

$$\left(\underbrace{q + q_D^T}_{q_e^T} \right) T_0 = q_D^T T_1 + q T_e \quad (3.11)$$

El segundo elemento es un nodo “ficticio” localizado inmediatamente después de la salida del último reactor, ver figura 3.2. Este punto cumplirá con la función de representar la condición de frontera (condición de continuidad) del reactor tubular en $Z = 1$. No perdamos de vista que nuestro objetivo es aproximar el comportamiento de este reactor a partir del TRCTA, por lo tanto para éste punto se tiene que:

$$C_{N+1} = C_N \quad (3.12)$$

$$T_{N+1} = T_N \quad (3.13)$$

De acuerdo con lo anterior, el modelo que describe el comportamiento dinámico del TRCTA con retromezclado está formado por el siguiente sistema de ecuaciones algebro-diferenciales:

$$\begin{aligned} C_0 &= \left(\frac{q_D^M}{q + q_D^M} \right) C_1 + \left(\frac{q}{q + q_D^M} \right) C_e \\ T_0 &= \left(\frac{q_D^T}{q + q_D^T} \right) T_1 + \left(\frac{q}{q + q_D^T} \right) T_e \end{aligned} \quad i = 0 \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \dot{C}_i &= \frac{q_D^M}{V_i} [C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}] - \frac{q}{V_i} [C_i - C_{i-1}] - R(C_i, T_i) \\ \dot{T}_i &= \frac{q_D^T}{V_i} [T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}] - \frac{q}{V_i} [T_i - T_{i-1}] + \frac{(-\Delta H)}{\rho C_p} R(C_i, T_i) - \frac{U a_i}{V_i \rho C_p} (T_i - T_w) \end{aligned} \quad 1 \leq i \leq N \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} C_{N+1} &= C_N \\ T_{N+1} &= T_N \end{aligned} \quad i = N + 1 \quad (3.16)$$

3.3 Conexiones entre el reactor tubular y el TRCTA

En la sección anterior se comenzaron a entrever algunas relaciones entre el RT y el TRCTA, a continuación serán exploradas con mayor detalle. Haciendo uso de los esquemas planteados, se puede ver que es posible establecer alguna equivalencia entre los nodos internos de la discretización en el reactor tubular y los RCTA's con reflujo, ver figura 3.3. Comparando los balances dinámicos de materia y energía de cada uno, (3.2) y (3.15), podemos distinguir que tienen una estructura similar, de dicho cotejo se pueden obtener las siguientes relaciones:

$$\frac{q_D^M}{V_i} = \left(\frac{N}{L} \right)^2 D_M \Rightarrow D_M = \frac{q_D^M}{V_i} \left(\frac{L}{N} \right)^2 \quad (3.17)$$

$$\frac{q}{V_i} = \left(\frac{N}{L} \right) v \Rightarrow v = \frac{q}{V_i} \left(\frac{L}{N} \right) \quad (3.18)$$

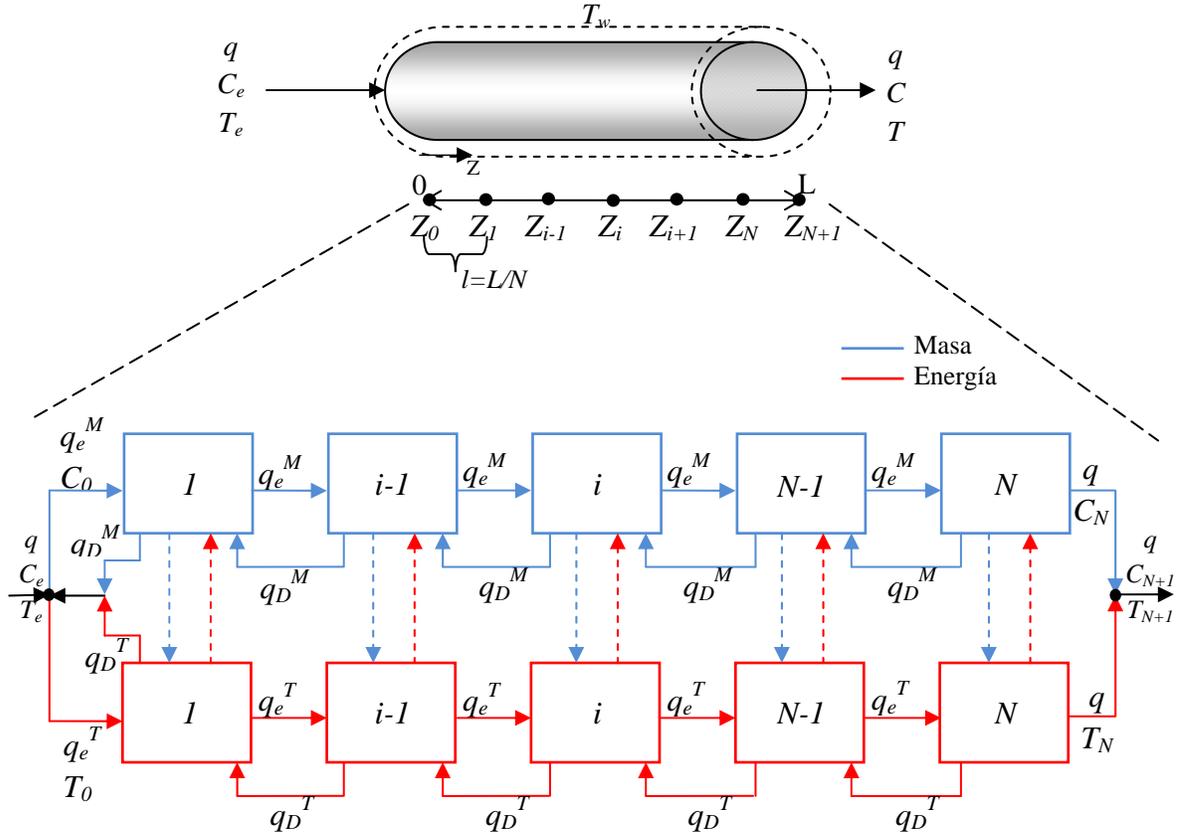


Figura 3.3. Representación esquemática de los nexos entre el reactor tubular y el TRCTA con retromezclado.

Estableciendo que la velocidad de la mezcla (v) de reacción por el área de la sección transversal es igual al flujo volumétrico (q) en el RT y que dicho flujo va ser igual en el TRCTA, podemos decir a partir de las expresiones de (2.7) que:

$$v = \frac{v}{v_r} = \frac{q}{q_r} = Q \quad (3.19)$$

El número de Peclet másico quedó definido en la tabla 2.1 de la siguiente manera $Pe^M = v_r L / D_M$, y por (3.19) puede redefinirse de la siguiente forma $Pe^M = q_r v L / q D_M$, ahora sustituyendo (3.17) y (3.18) en la definición anterior del Peclet, se obtiene:

$$q_D^M = \left(\frac{N}{Pe^M} \right) q_r \quad (3.20)$$

Siguiendo el mismo procedimiento, pero ahora partiendo de los balances de energía y de la definición del Peclet correspondiente ($Pe^T = Lv_r/D_T = q_rLv/qD_T$), se obtiene una expresión similar para el reflujo térmico:

$$q_D^T = \left(\frac{N}{Pe^T} \right) q_r \quad (3.21)$$

Estas expresiones, (3.20) y (3.21), reflejan las relaciones que deben de existir entre ambos tipos de reactores, de tal manera que tengan un comportamiento similar en transporte de masa y de energía, y de ésta forma poder aproximar los perfiles de concentración y temperatura.

Aún falta por determinar cómo quedan representadas las condiciones de frontera del reactor tubular en el arreglo de RCTA's. Con respecto a las condiciones de frontera en $Z=0$, es posible demostrar que existe una equivalencia entre las ecuaciones de (3.1) que caracterizan al nodo Z_0 de la discretización, y las ecuaciones de (3.14) que corresponden al nodo de mezclado del tren de reactores. Partiendo de las condiciones de frontera discretizadas en $Z=0$, ver (3.1), se tiene que:

$$\begin{aligned} \left(D_M + \frac{vL}{N} \right) C_0 &= D_M C_1 + \left(\frac{vL}{N} \right) C_e \\ \left(D_T + \frac{vL}{N} \right) T_0 &= D_T T_1 + \left(\frac{vL}{N} \right) T_e \end{aligned} \quad (3.22)$$

Dividiendo ambos lados de la primera ecuación por D_M , ambos lados de la segunda ecuación por D_T y teniendo en cuenta las definiciones del número de Peclet másico y térmico, se llega a :

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{qPe^c}{q_r N} \right) C_0 &= C_1 + \left(\frac{qPe^c}{q_r N} \right) C_e \\ \left(1 + \frac{qPe^T}{q_r N} \right) T_0 &= T_1 + \left(\frac{qPe^T}{q_r N} \right) T_e \end{aligned} \quad (3.23)$$

Multiplicando ambos lados de la primera ecuación por el reflujo másico q_D^M , ambos lados de la segunda ecuación por el reflujo térmico q_D^T , y teniendo presente las relaciones ya determinadas entre ambos reactores, (3.20) y (3.21), se llega a:

$$\begin{aligned} (q_D^M + q)C_0 &= q_D^M C_1 + qC_e \\ (q_D^T + q)T_0 &= q_D^T T_1 + qT_e \end{aligned} \quad (3.24)$$

Con esto se comprueba la equivalencia entre la condición de frontera en $Z = 0$ y el nodo de mezclado en el TRCTA. Con respecto a la condición de frontera en $Z = L$, la correspondencia de ésta con el nodo al final del TRCTA resulta evidente al comparar las ecuaciones (3.3) y (3.16).

A continuación se adimensionalizará el modelo dinámico del tren de tanques, tomando en cuenta las relaciones que se obtuvieron al comparar el modelo anterior con el modelo discretizado del reactor tubular y proponiendo las siguientes variables adimensionales:

$$c = \frac{C}{C_r}, \quad \eta = \frac{T}{T_r}, \quad \eta_w = \frac{T_w}{T_r}, \quad t = \frac{q_r}{V_i N} t', \quad Q = \frac{q}{q_r} \quad (3.25)$$

Donde C_r , T_r , y q_r , son valores de referencia de la concentración, la temperatura y el flujo volumétrico a través del reactor. Por lo tanto:

$$\begin{aligned} c_0 &= w_1^c c_1 + w_2^c c_e \\ \eta_0 &= w_1^T \eta_1 + w_2^T \eta_e \end{aligned} \quad i = 0 \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \dot{c}_i &= \frac{N^2}{Pe^M} (c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}) - NQ(c_i - c_{i-1}) - \phi r(c_i, \eta_i) \\ \dot{\eta}_i &= \frac{N^2}{Pe^T} (\eta_{i+1} - 2\eta_i + \eta_{i-1}) - NQ(\eta_i - \eta_{i-1}) + \beta \phi r(c_i, \eta_i) - \delta(\eta_i - \eta_w) \end{aligned} \quad 1 \leq i \leq N \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} c_{N+1} &= c_N \\ \eta_{N+1} &= \eta_N \end{aligned} \quad i = N + 1 \quad (3.28)$$

En donde

$$r(c_i, \eta_i) = c_i \exp[\gamma(\eta - 1)/\eta] \quad (3.29)$$

$$w_1^c = \frac{N}{(QPe^M + N)}, \quad w_2^c = \frac{QPe^M}{(QPe^M + N)} \quad (3.30)$$

$$w_1^T = \frac{N}{(QPe^T + N)}, \quad w_2^T = \frac{QPe^T}{(QPe^T + N)} \quad (3.31)$$

Tabla 3.1. Comparación de los parámetros surgidos al adimensionalizar el modelo dinámico del reactor tubular y del TRCTA con retromezclado.

| Reactor tubular | | TRCTA |
|---------------------------------------|----------|---------------------------------------|
| $\frac{(-\Delta H)c_r}{\rho C_p T_r}$ | β | $\frac{(-\Delta H)c_r}{\rho C_p T_r}$ |
| $\frac{U(PL)}{\rho C_p (Av_r)}$ | δ | $\frac{Ua_i N}{\rho C_p q_r}$ |
| $\frac{v_r t'}{L}$ | t | $\frac{q_r t'}{V_i N}$ |
| $\frac{L}{v_r c_r} r(c_r, T_r)$ | ϕ | $\frac{V_i N}{q_r c_r} r(c_r, T_r)$ |

Resulta ilustrativo comparar los parámetros surgidos al adimensionalizar cada modelo, ver tabla 3.1. Dada la definición de los tiempos de residencia, al hecho de que PL (el área total para la transferencia de calor en el reactor tubular) es comparable con $a_i N$ (el área total para la transferencia de calor del en el tren de reactores), así como Av_r equivale a q_r (flujo volumétrico); es claro que existe una correspondencia entre los parámetros de los modelos que describen la dinámica del RT y la dinámica del TRCTA [31].

3.4 Propuesta para determinar la dimensionalidad de la aproximación en tanques

Con el propósito de determinar el número de unidades en el tren de reactores que ofrezcan una buena aproximación al comportamiento del RT, se plantea analizar tres casos: un RCTA con retro mezclado, dos y tres RCTA's conectados en serie con retro mezclado. A partir del modelo dinámico del TRCTA (3.26-3.28) se puede deducir, para cada caso, el sistema de EDO adimensionales que describa el comportamiento dinámico de cada reactor:

Caso I

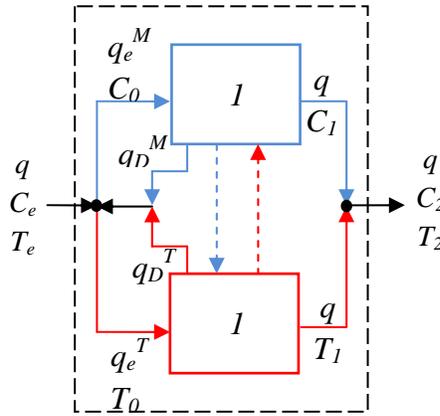


Figura 3.4. Representación esquemática del caso I

$$\begin{aligned}\dot{c}_1 &= Q(c_e - c_1) - \phi r(c_1, \eta_1) \\ \dot{\eta}_1 &= Q(\eta_e - \eta_1) + \beta \phi r(c_1, \eta_1) - \delta(\eta_1 - \eta_w)\end{aligned}\quad (3.32)$$

Caso II

$$\begin{aligned}\dot{c}_1 &= \frac{N^2}{Pe^M}(c_2 - c_1) - NQ(c_1 - c_e) - \phi r(c_1, \eta_1) \\ \dot{\eta}_1 &= \frac{N^2}{Pe^T}(\eta_2 - \eta_1) - NQ(\eta_1 - \eta_e) + \beta \phi r(c_1, \eta_1) - \delta(\eta_1 - \eta_w)\end{aligned}\quad (3.33)$$

$$\begin{aligned}\dot{c}_2 &= \frac{N^2}{Pe^M}(c_1 - c_2) - NQ(c_2 - c_1) - \phi r(c_2, \eta_2) \\ \dot{\eta}_2 &= \frac{N^2}{Pe^T}Q(\eta_1 - \eta_2) - NQ(\eta_2 - \eta_1) + \beta \phi r(c_2, \eta_2) - \delta(\eta_2 - \eta_w)\end{aligned}\quad (3.34)$$

En donde $N = 2$

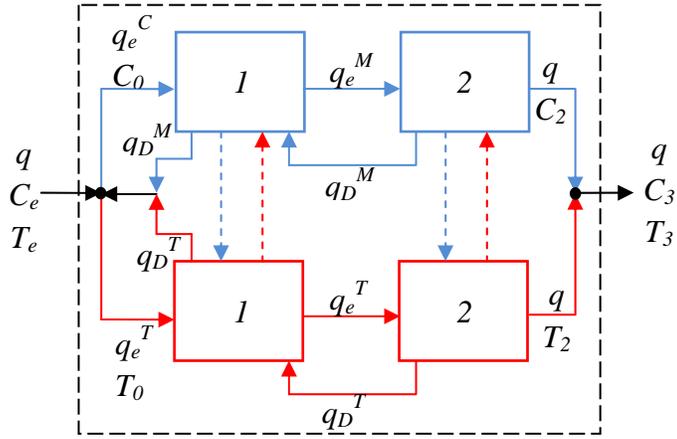


Figura 3.5. Representación esquemática del caso II

Caso III

$$\dot{c}_1 = \frac{N^2}{Pe^M} (c_2 - c_1) - NQ(c_1 - c_e) - \phi r(c_1, \eta_1) \quad (3.35)$$

$$\dot{\eta}_1 = \frac{N^2}{Pe^T} (\eta_2 - \eta_1) - NQ(\eta_1 - \eta_e) + \beta \phi r(c_1, \eta_1) - \delta(\eta_1 - \eta_w)$$

$$\dot{c}_2 = \frac{N^2}{Pe^M} (c_3 - 2c_2 + c_1) - NQ(c_2 - c_1) - \phi r(c_2, \eta_2) \quad (3.36)$$

$$\dot{\eta}_2 = \frac{N^2}{Pe^T} (\eta_3 - 2\eta_2 + \eta_1) - NQ(\eta_2 - \eta_1) + \beta \phi r(c_2, \eta_2) - \delta(\eta_2 - \eta_w)$$

$$\dot{c}_3 = \frac{N^2}{Pe^M} (c_2 - c_3) - NQ(c_3 - c_2) - \phi r(c_3, \eta_3) \quad (3.37)$$

$$\dot{\eta}_3 = \frac{N^2}{Pe^T} (\eta_2 - \eta_3) - NQ(\eta_3 - \eta_2) + \beta \phi r(c_3, \eta_3) - \delta(\eta_3 - \eta_w)$$

En donde $N = 3$

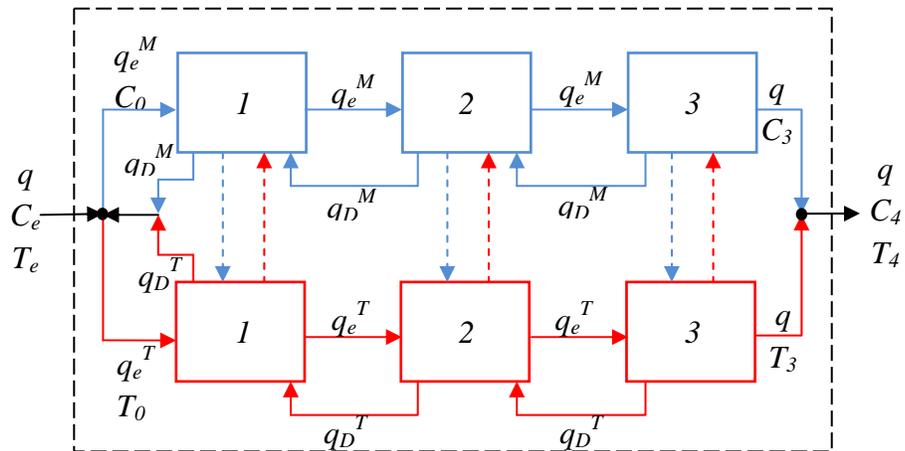


Figura 3.6. Representación esquemática del caso III

Del análisis de los sistemas anteriores podemos inferir que el caso I es un modelo incompleto debido a que las contribuciones de los fenómenos dispersivos se anulan, apareciendo solo fenómenos convectivos en la dinámica del reactor y de acuerdo a la literatura, este tipo de sistemas siempre exhiben patrones de multiplicidad del tipo 1-3-1 para reacciones simples [31], [34]. Por lo que para un RT como el que se analiza en este trabajo, con cinco soluciones estacionarias, el caso I representa una aproximación parcial de este comportamiento. Para los casos II y III ambos fenómenos (dispersivos-convectivos) están presentes en la dinámica de cada RCTA, solo falta por determinar si este par de propuestas es suficiente para capturar el comportamiento del RT.

Capítulo 4

Análisis de la estática y dinámica del TRCTA

Con el propósito de determinar si es posible aproximar el comportamiento del reactor tubular a través del tren de tanques con retromezclado, así como el número de tanques suficientes para hacerlo con un buen grado de aproximación; en este capítulo nos enfocamos a analizar el comportamiento dinámico y estático de cada uno de los reactores de tanque agitado de los tres casos propuestos en el capítulo anterior.

4.1 Un RCTA con retromezclado (caso I)

El modelo que describe el comportamiento dinámico del RCTA con retromezclado está formado por el sistema de EDO definido en (3.32), para la parte estática este se reduce al siguiente sistema de ecuaciones algebraicas:

$$\begin{aligned} Q(c_e - c_1) - \phi r(c_1, \eta_1) &= 0 \\ Q(\eta_e - \eta_1) + \beta \phi r(c_1, \eta_1) - \delta(\eta_1 - \eta_w) &= 0 \end{aligned} \quad (4.1)$$

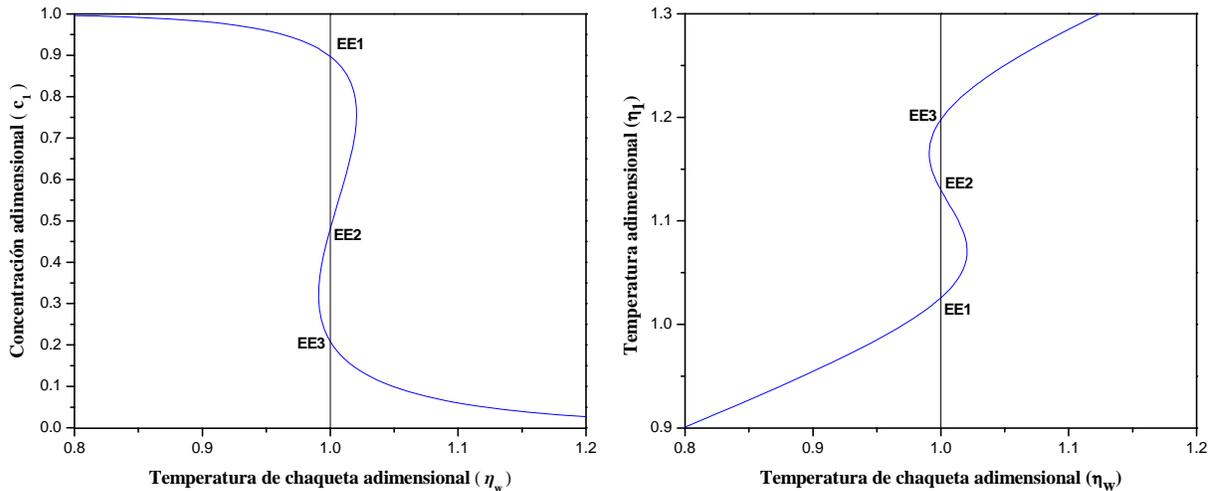


Figura 4.1. Diagramas de bifurcación para el reactor de tanque agitado del caso I.

Con los valores nominales de $\bar{c}_e = 1.0$, $\bar{\eta}_e = 1.0$, $\bar{Q} = 1.0$, y utilizando los parámetros del reactor tubular definidos en la tabla 2.3 se construyeron los diagramas de bifurcación para la

parte estática, ver figura 4.1, en el apéndice A se describe la metodología para el trazado de estos diagramas por medio de un método de continuación. Cada punto de cada curva a η_w constante representa una solución del sistema de ecuaciones (4.1). Por ejemplo, para $\eta_w = 1.0$ el RCTA presenta tres pares de soluciones (concentración-temperatura) estacionarias EE1, EE2 y EE3.

Tabla 4.1. Estados estacionarios del reactor perteneciente al caso I.

| | EE1 | EE2 | EE3 |
|---------------------------------------|--------------------------------|-----------------|------------------------------|
| Concentración adimensional (c_1) | 0.897 | 0.481 | 0.208 |
| Temperatura adimensional (η_1) | 1.025 | 1.129 | 1.198 |
| Eigenvalores | -0.944+0.335i -0.944-0.335i | -0.584 1.605 | 0.045+1.648i 0.045-1.648i |
| Condición local | Estable | Inestable | Inestable |

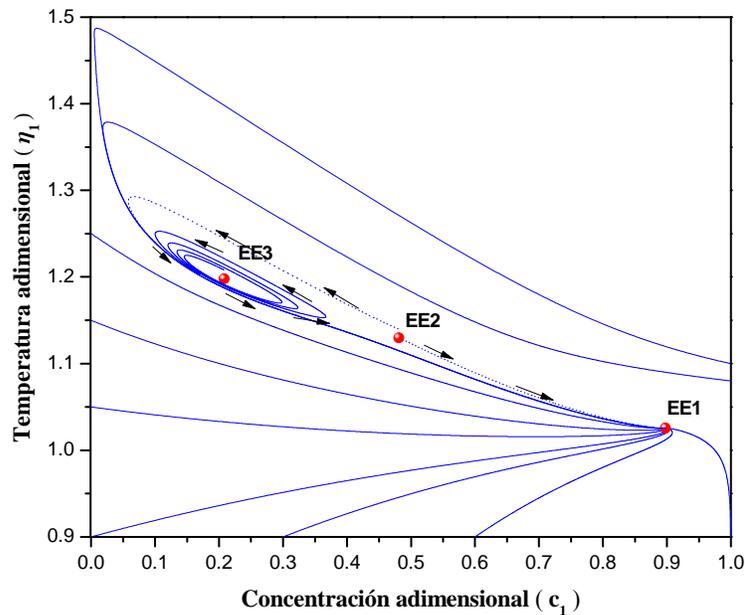


Figura 4.2. Plano fase a lazo abierto del RCTA con retromezclado (caso I).

Para determinar si los estados estacionarios encontrados son estables o inestables en forma local, se utilizó el primer método de Lyapunov. A partir de la linealización del sistema (3.32),

se obtuvo la matriz jacobiana y los eigenvalores para cada punto de equilibrio o estado estacionario [37]. Los resultados aparecen resumidos en la tabla 4.1 e indican que para este caso existe un estado estacionario estable (EE1) y dos inestables (EE2 y EE3) y en la figura 4.2 se muestra el plano fase del RCTA a lazo abierto, pudiéndose distinguir los tres estados estacionarios con las características mencionadas. Se debe de observar en el plano fase que EE3 es un ciclo límite inestable, aunque no es motivo de estudio en esta tesis es importante mencionar que esto conlleva a una bifurcación tipo Hopf [38], que será abordada en trabajos posteriores.

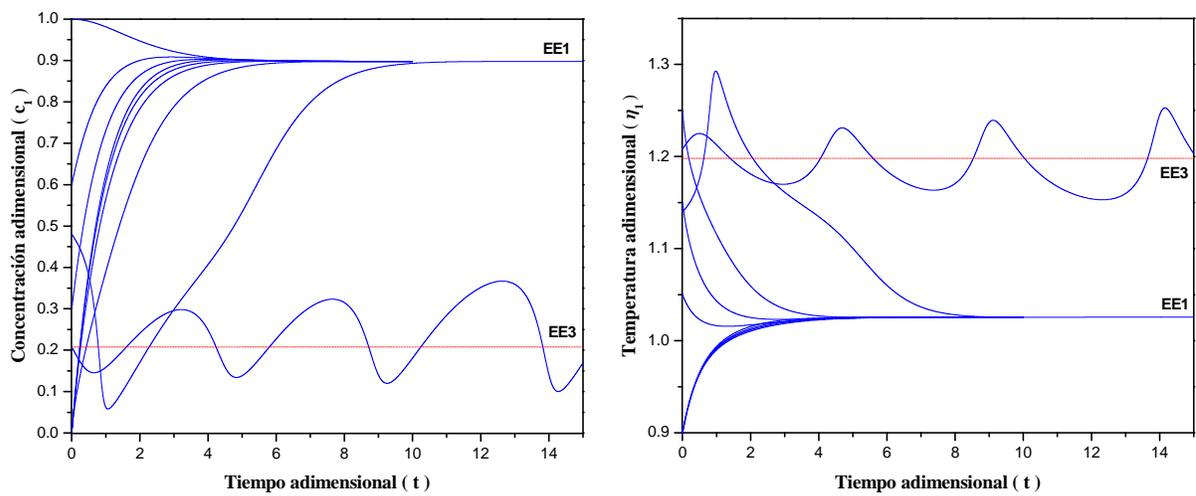


Figura 4.3. Dinámica a lazo abierto de la concentración y temperatura en el RCTA del caso I.

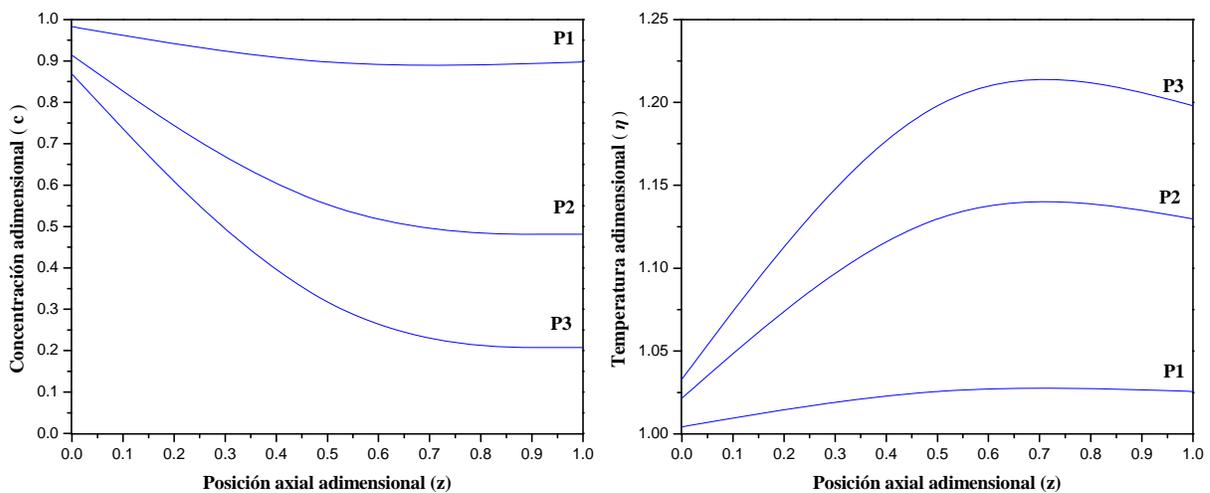


Figura 4.4. Perfiles de concentración y temperatura estacionarios del RT reconstruidos a partir del caso I

En la figura 4.3 se muestra la dinámica a lazo abierto de la concentración y temperatura en el RCTA. Se puede observar que para diferentes condiciones iniciales el reactor se estabiliza en EE1; también se puede notar que la concentración y temperatura del reactor pueden fluctuar alrededor del estado EE3, esto concuerda con lo mostrado en el plano fase de la figura 4.2 en donde se puede ver que se forma un ciclo límite alrededor de dicho estado inestable.

A partir del análisis de las ecuaciones que describen al caso I, en el capítulo anterior se dijo que este era una aproximación parcial al comportamiento del RT, debido a que en la dinámica del tanque con retromezclado no aparecían los fenómenos dispersivos. Esto se ve reforzado con los análisis anteriores de la dinámica y estática, ya que a partir de los estados estacionarios encontrados sólo se pueden aproximar tres de cinco pares de perfiles estacionarios presentes en el RT, ver figura 4.4, y por correspondencia con las características de EE1, EE2 y EE3, de estos tres perfiles uno es estable (P1) y los otros dos inestables (P2 y P3).

Para la reconstrucción de los perfiles se trasladaron las concentraciones y temperaturas estacionarias de cada uno de los elementos de la aproximación con tanques (para este caso un nodo de mezclado, el RCTA y el nodo final, ver figura 3.4) a una posición espacial en el RT, posteriormente se utilizó una interpolación mediante splines cúbicos (con ayuda del graficador OriginPro 8) para generar cada uno de los pares de perfiles de la figura 4.4.

4.2 Dos RCTA's en serie con retro mezclado (caso II)

Para este caso el comportamiento estático de cada reactor es descrito por el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas:

$$\begin{aligned}
 \frac{N^2}{Pe^c}(c_2 - c_1) - NQ(c_1 - c_e) - \phi r(c_1, \eta_1) &= 0 \\
 \frac{N^2}{Pe^T}(\eta_2 - \eta_1) - NQ(\eta_1 - \eta_e) + \beta \phi r(c_1, \eta_1) - \delta(\eta_1 - \eta_w) &= 0 \\
 \frac{N^2}{Pe^c}(c_1 - c_2) - NQ(c_2 - c_1) - \phi r(c_2, \eta_2) &= 0 \\
 \frac{N^2}{Pe^T}(\eta_1 - \eta_2) - NQ(\eta_2 - \eta_1) + \beta \phi r(c_2, \eta_2) - \delta(\eta_2 - \eta_w) &= 0
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

En donde $N = 2$

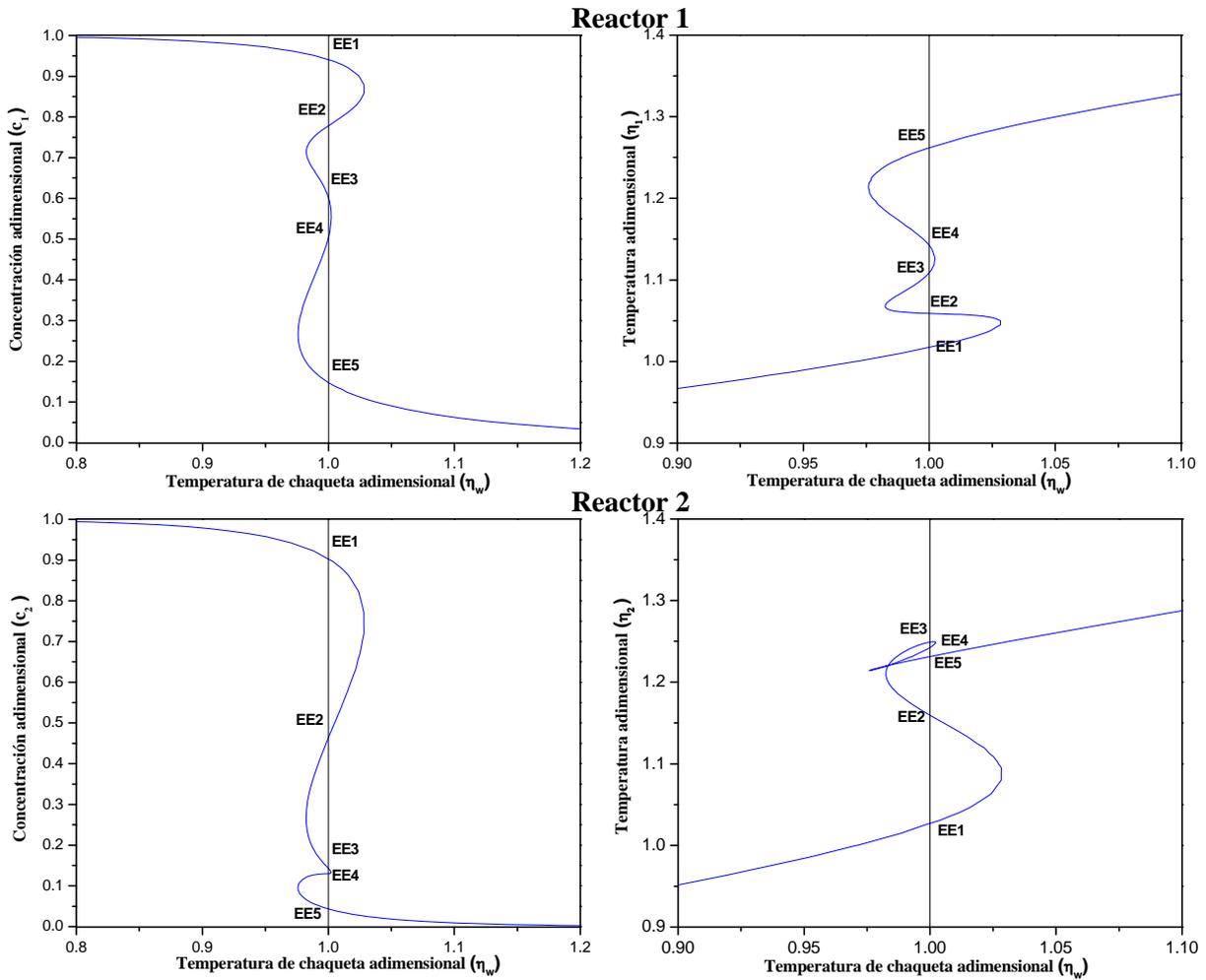


Figura 4.5. Diagramas de bifurcación para dos RCTA's en serie con retomezclado (caso II).

Al igual que en el caso I, a partir de los parámetros que caracterizan al reactor tubular y usando el algoritmo descrito en el apéndice A, se construyeron los diagramas de bifurcación. Para $\eta_w = 1.0$ cada RCTA presenta cinco pares de soluciones (concentración-temperatura) estacionarias, ver figura 4.5. Llama la atención la forma del diagrama de bifurcación para la temperatura del reactor 2, pero esto se debe a que el comportamiento de este reactor es una aproximación de la zona en donde existe un entrecruzamiento de perfiles en el RT, ver figura 2.4. El análisis de estabilidad (a partir del primer método de Lyapunov) de cada uno de los

estados estacionarios encontrados arrojó que: EE1, EE3 y EE5 son estables, mientras que EE2 y EE4 son inestables; los resultados aparecen resumidos en la tabla 4.2.

Tabla 4.2. Estados estacionarios de cada reactor pertenecientes al caso II.

| | | EE1 | EE2 | EE3 | EE4 | EE5 |
|----------------------------|----------|-----------------|-----------|----------------|-----------------|-----------------|
| Concentración adimensional | c_1 | 0.941 | 0.777 | 0.602 | 0.503 | 0.147 |
| | c_2 | 0.903 | 0.460 | 0.143 | 0.130 | 0.043 |
| Temperatura adimensional | η_1 | 1.017 | 1.058 | 1.108 | 1.142 | 1.262 |
| | η_2 | 1.026 | 1.160 | 1.249 | 1.242 | 1.231 |
| Eigenvalores | | $-4.277+0.321i$ | -3.885 | $-3.42+2.312i$ | $-3.751+2.415i$ | $-1.772+3.046i$ |
| | | $-4.277-0.321i$ | -0.918 | $-3.42-2.312i$ | $-3.751-2.415i$ | $-1.772-3.046i$ |
| | | $-1.281+0.322i$ | 2.578 | $-0.7+1.016i$ | 1.134 | $-6.091+1.195i$ |
| | | $-1.281-0.322i$ | -2.742 | $-0.7-1.016i$ | -1.184 | $-6.091-1.195i$ |
| Condición local | | Estable | Inestable | Estable | Inestable | Estable |

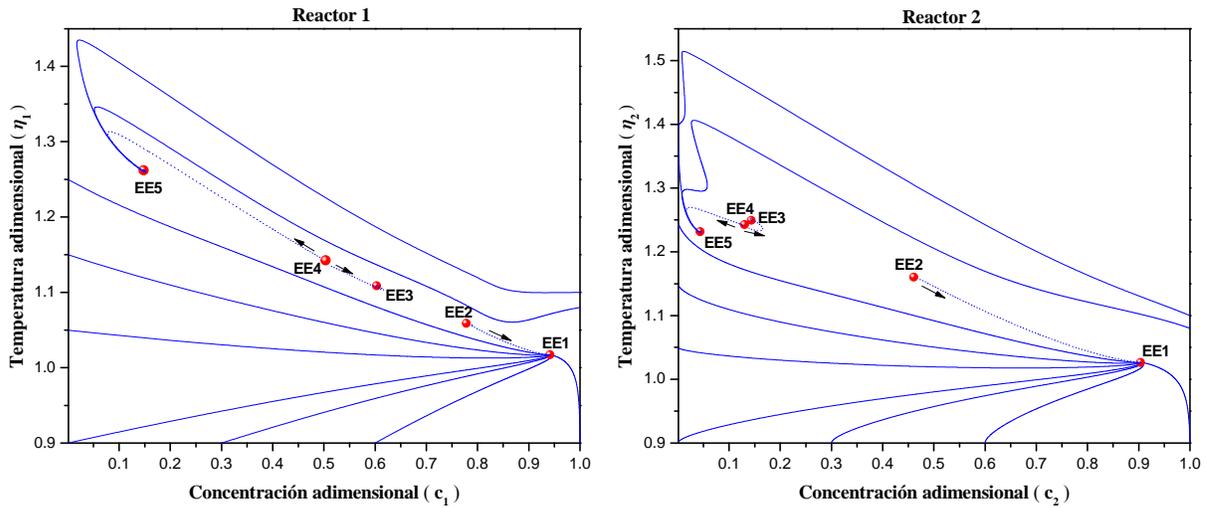


Figura 4.6. Planos fase a lazo abierto de dos RCTA's en serie con retromezclado (caso II).

En la figura 4.6 se muestran los planos fase de cada RCTA a lazo abierto, pudiéndose distinguir los cinco puntos de equilibrio de cada uno de los reactores. Resulta casi imposible lograr que el par de reactores siga trayectorias hacia EE2 o EE4 o que se mantengan en estos puntos, ya que cualquier perturbación obliga a los reactores tender hacia EE1, EE3, o EE5, que son los estados estables. Lo anterior se refuerza con lo mostrado en la figura 4.7, la

dinámica a lazo abierto de la concentración y temperatura en cada uno de los RCTA's, en donde se puede observar que para diferentes condiciones iniciales el par de tanques con retromezclado puede estabilizarse en tres estados diferentes EE1, EE3 o EE5.

Mediante los estados estacionarios encontrados se pudieron reconstruir de manera aproximada, usando una interpolación mediante splines cúbicos y con ayuda del graficador OriginPro 8, los cinco pares de perfiles estacionarios presentes en el RT (ver figura 4.8) junto con las propiedades de estabilidad reportadas en la literatura; ya que por correspondencia con las características de EE1, EE2, EE3, EE4 y EE5, los perfiles P1, P3 y P5 son estables, mientras que P2 y P4 son inestables.

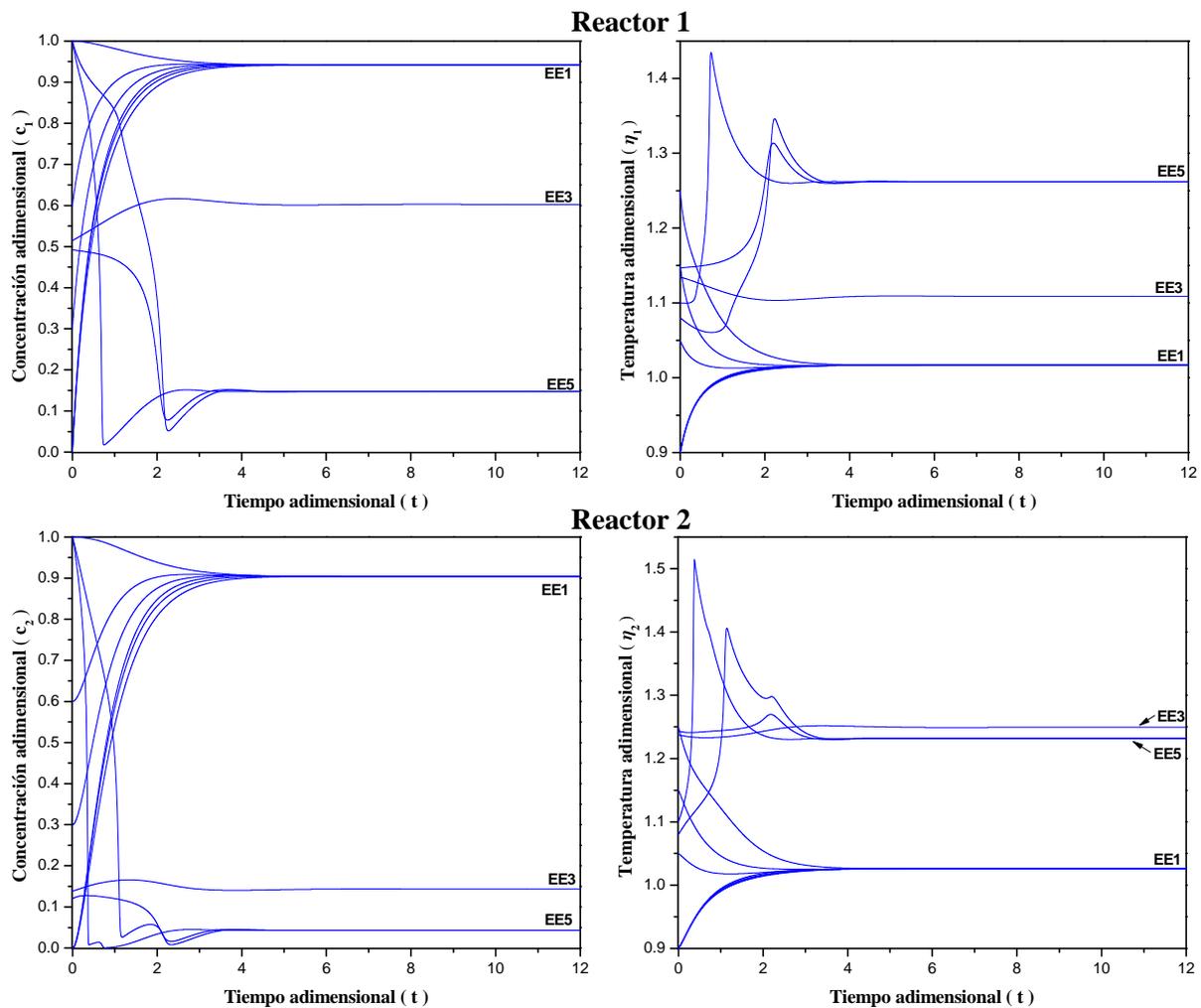


Figura 4.7. Dinámica a lazo abierto de la concentración y temperatura en cada uno de los RCTA's del caso

II.

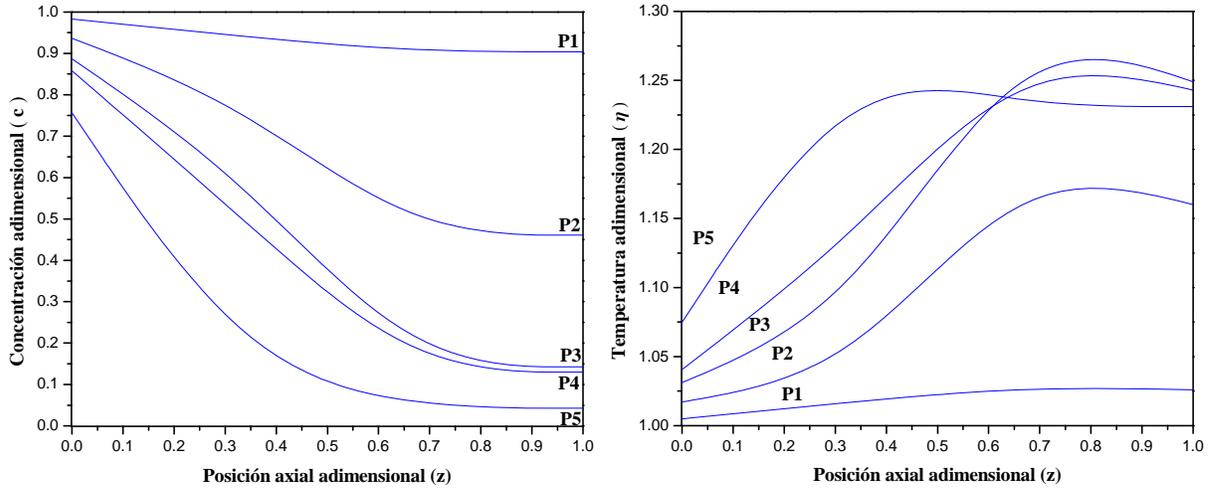


Figura 4.8. Perfiles de concentración y temperatura estacionarios del RT reconstruidos a partir del Caso II.

4.3 Tres RCTA's en serie con retromezclado (caso III)

El comportamiento estático de cada reactor es descrito por el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas:

$$\begin{aligned}
 \frac{N^2}{Pe^c}(c_2 - c_1) - NQ(c_1 - c_e) - \phi r(c_1, \eta_1) &= 0 \\
 \frac{N^2}{Pe^T}(\eta_2 - \eta_1) - NQ(\eta_1 - \eta_e) + \beta \phi r(c_1, \eta_1) - \delta(\eta_1 - \eta_w) &= 0 \\
 \frac{N^2}{Pe^c}(c_3 - 2c_2 + c_1) - NQ(c_2 - c_1) - \phi r(c_2, \eta_2) &= 0 \\
 \frac{N^2}{Pe^T}(\eta_3 - 2\eta_2 + \eta_1) - NQ(\eta_2 - \eta_1) + \beta \phi r(c_2, \eta_2) - \delta(\eta_2 - \eta_w) &= 0 \\
 \frac{N^2}{Pe^c}(c_2 - c_3) - NQ(c_3 - c_2) - \phi r(c_3, \eta_3) &= 0 \\
 \frac{N^2}{Pe^T}(\eta_2 - \eta_3) - NQ(\eta_3 - \eta_2) + \beta \phi r(c_3, \eta_3) - \delta(\eta_3 - \eta_w) &= 0
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

En donde $N = 3$

Del análisis de los diagramas de bifurcación se derivó que cada RCTA, para $\eta_w = 1.0$, presenta cinco pares de soluciones (concentración-temperatura) estacionarias: EE1, EE2, EE3,

EE4 y EE5, ver figura 4.9. Por medio de un análisis de estabilidad (a partir del primer método de Lyapunov) se determinó que: EE1, EE3 y EE5 son estables, mientras que EE2 y EE4 son inestables, los resultados aparecen resumidos en la tabla 4.3. En la figura 4.10 se muestran los planos fase de cada RCTA a lazo abierto y en donde se pueden apreciar los cinco estados estacionarios con las características mencionadas. Resalta de nuevo el comportamiento atípico de los diagramas de bifurcación para la temperatura de los reactores 2 y 3, pero se debe a que en la zona que se está tratando de aproximar los perfiles se entrecruzan, ver figura 2.4.

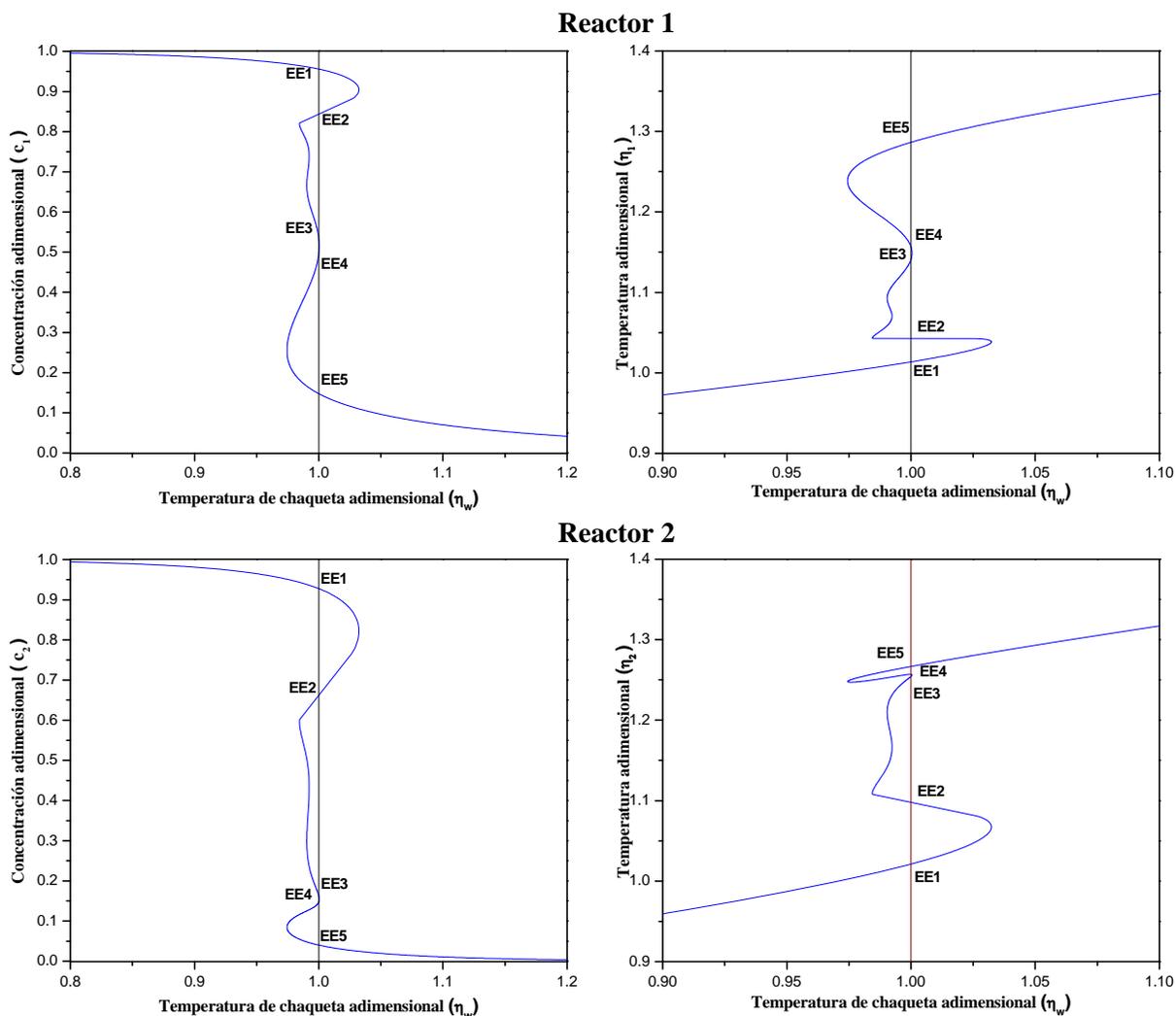


Figura 4.9. Diagramas de bifurcación para tres RCTA's en serie con retro mezclado (Caso III).

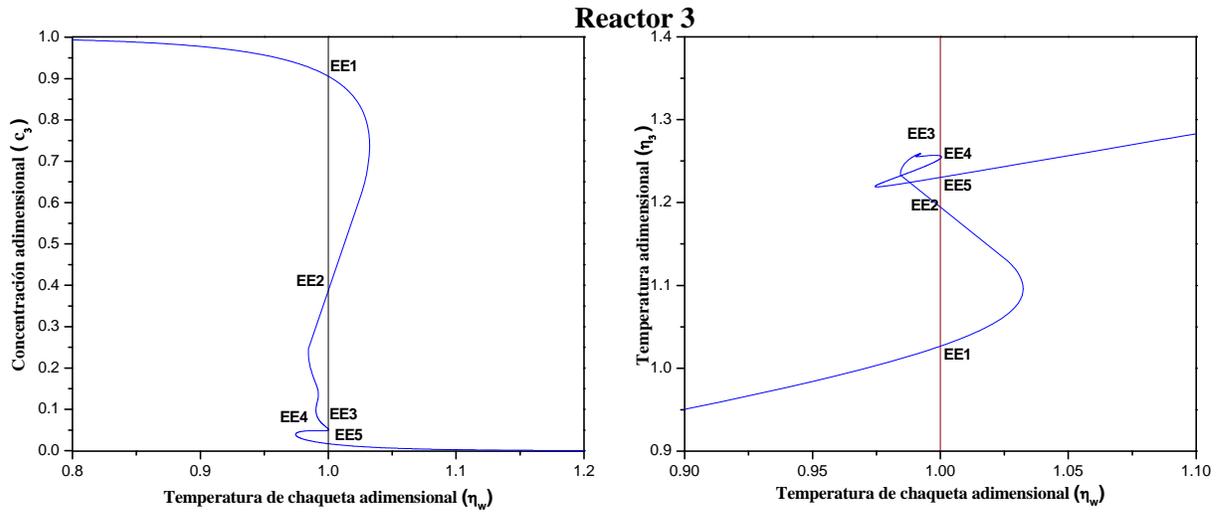


Figura 4.9 (continuación). Diagramas de bifurcación para tres RCTA's en serie con retro mezclado (caso III).

Tabla 4.3. Estados estacionarios de cada reactor pertenecientes al caso III.

| | | EE1 | EE2 | EE3 | EE4 | EE5 |
|----------------------------|----------|---------------|-----------|---------------|---------------|--------------|
| Concentración adimensional | c_1 | 0.955 | 0.852 | 0.535 | 0.494 | 0.147 |
| | c_2 | 0.927 | 0.683 | 0.163 | 0.147 | 0.040 |
| | c_3 | 0.905 | 0.419 | 0.052 | 0.049 | 0.016 |
| Temperatura adimensional | η_1 | 1.013 | 1.040 | 1.141 | 1.156 | 1.286 |
| | η_2 | 1.021 | 1.091 | 1.254 | 1.256 | 1.266 |
| | η_3 | 1.026 | 1.184 | 1.256 | 1.253 | 1.230 |
| Eigenvalores | | -9.937+0.319i | 3.235 | -10.94+2.144i | -11.06+2.131i | -16.017 |
| | | -9.937-0.319i | -9.572 | -10.94-2.144i | -11.06-2.131i | -3.03+3.403i |
| | | -1.419+0.319i | -4.318 | -5.051+1.848i | -5.301+1.922i | -3.03-3.403i |
| | | -1.419-0.319i | -1.009 | -5.051-1.848i | -5.301-1.922i | -11.541 |
| | | -4.784+0.319i | -2.765 | -0.384+0.832i | 0.712 | -5.109 |
| | | -4.784-0.319i | -8.255 | -0.384-0.832i | -1.05 | -8.588 |
| Condición local | | Estable | Inestable | Estable | Inestable | Estable |

Al igual que en el caso II, en la figura 4.10 se puede observar que resulta casi imposible lograr que los reactores sigan trayectorias hacia EE2 o EE4 o que se mantengan en estos puntos, ya

que cualquier perturbación obliga a los reactores tender hacia los estados estacionarios vecinos estables. Como complemento a los planos fase a lazo abierto, en la figura 4.11 se muestra la dinámica a lazo abierto de la concentración y temperatura en cada uno de los RCTA's, en donde se puede observar que para diferentes condiciones iniciales los tanques con retromezclado pueden estabilizarse en tres estados diferentes EE1, EE3 o EE5.

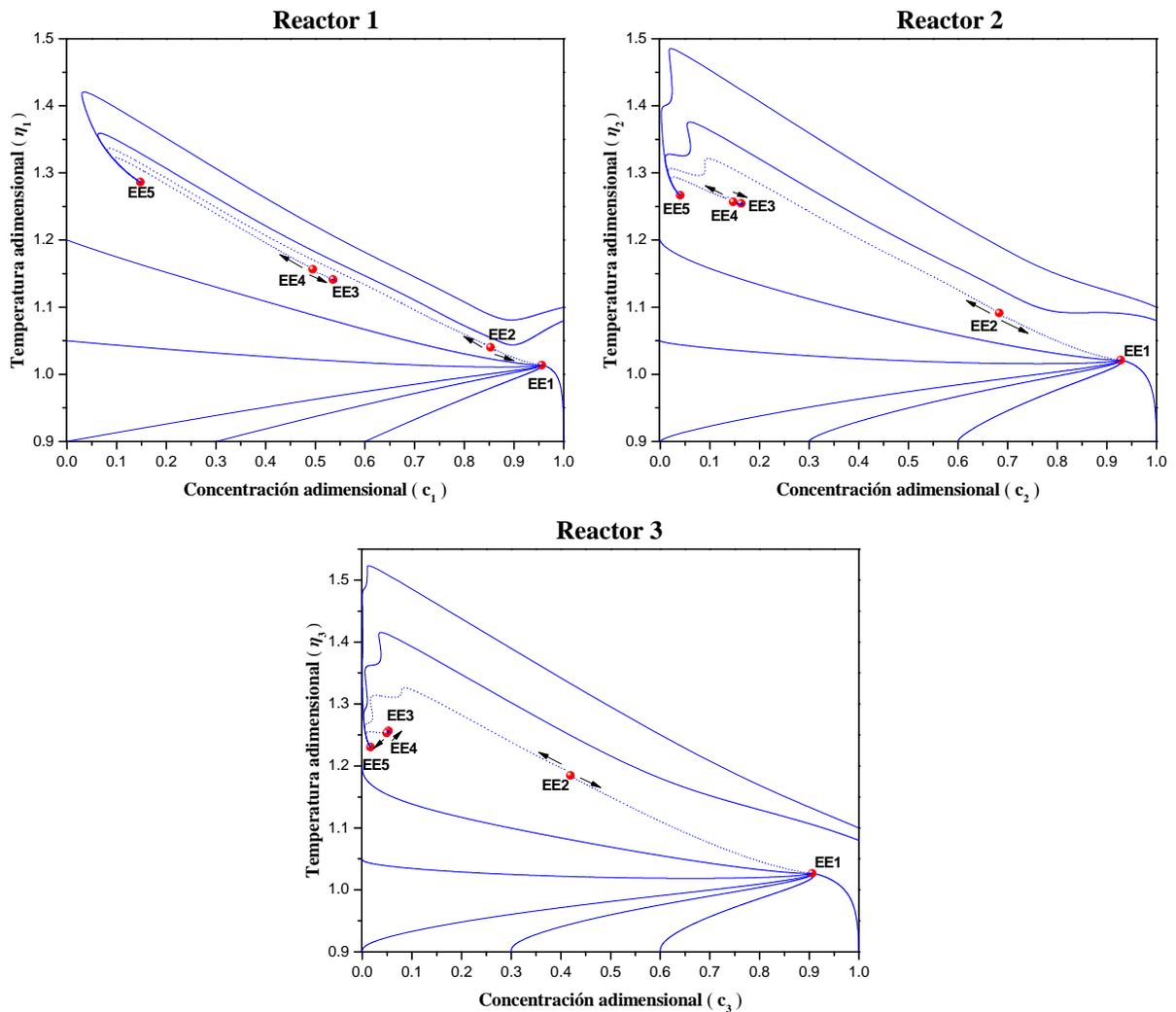


Figura 4.10. Planos fase a lazo abierto de tres RCTA's en serie con retro mezclado (caso III).

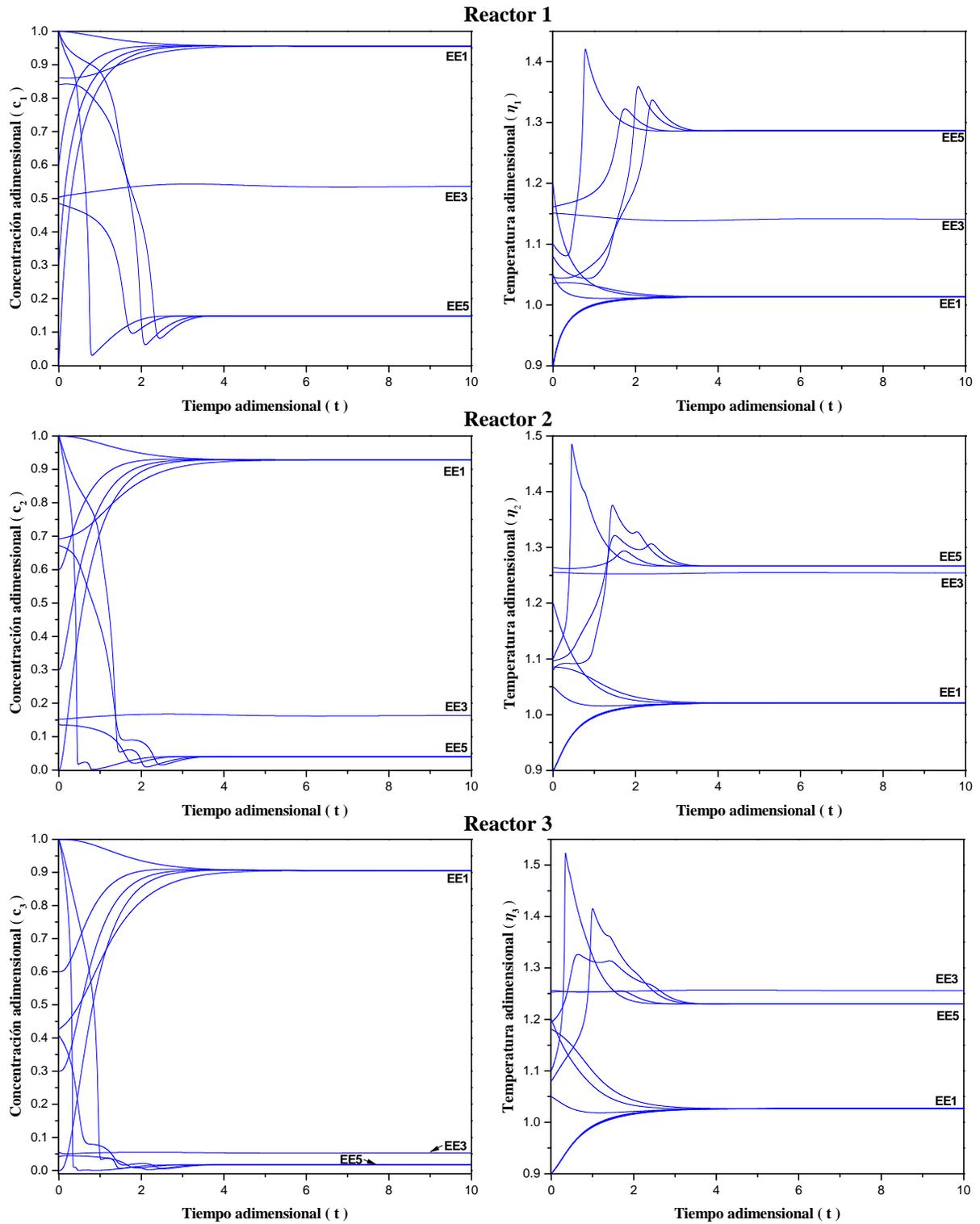


Figura 4.11. Dinámica a lazo abierto de la concentración y temperatura en cada uno de los RCTA's del caso III.

Al igual que en los casos anteriores se usó una interpolación mediante splines cúbicos (empleando el graficador OriginPro 8) para reconstruir de manera aproximada a partir de los estados estacionarios hallados los cinco pares de perfiles estacionarios presentes en el RT, ver figura 4.12. Por relación con las características de EE1, EE2, EE3, EE4 y EE5 podemos decir que los perfiles P1, P3 y P5 son estables, mientras que P2 y P4 son inestables.

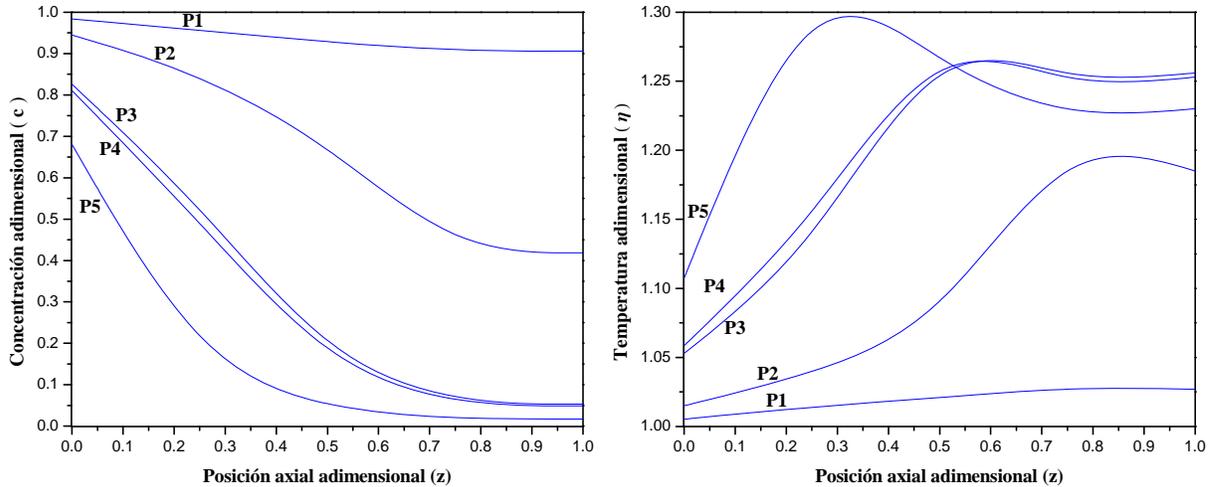


Figura 4.12. Perfiles de concentración y temperatura estacionarios del RT reconstruidos a partir del caso III.

Con el fin de determinar que tan buenas son las aproximaciones al comportamiento del RT generadas a través de los dos casos propuestos, en la figura 4.13 se comparan los pares de perfiles (concentración-temperatura) reconstruidos a partir de dos (caso II) y tres (caso III) tanques en serie con retromezclado con los perfiles obtenidos a partir de aproximaciones con mediana y alta dimensionalidad (diez y cien tanques respectivamente). De esta comparación se desprende lo siguiente:

- Con dos, tres y diez tanques con retromezclado se logra reproducir las tendencias y los comportamientos de cada uno de los pares de perfiles del RT, resultando evidente que si aumenta el número de RCTA's la aproximación mejora ya que con cien tanques ésta coincide con la obtenida por medio de diferencias finitas (102 puntos de discretización).

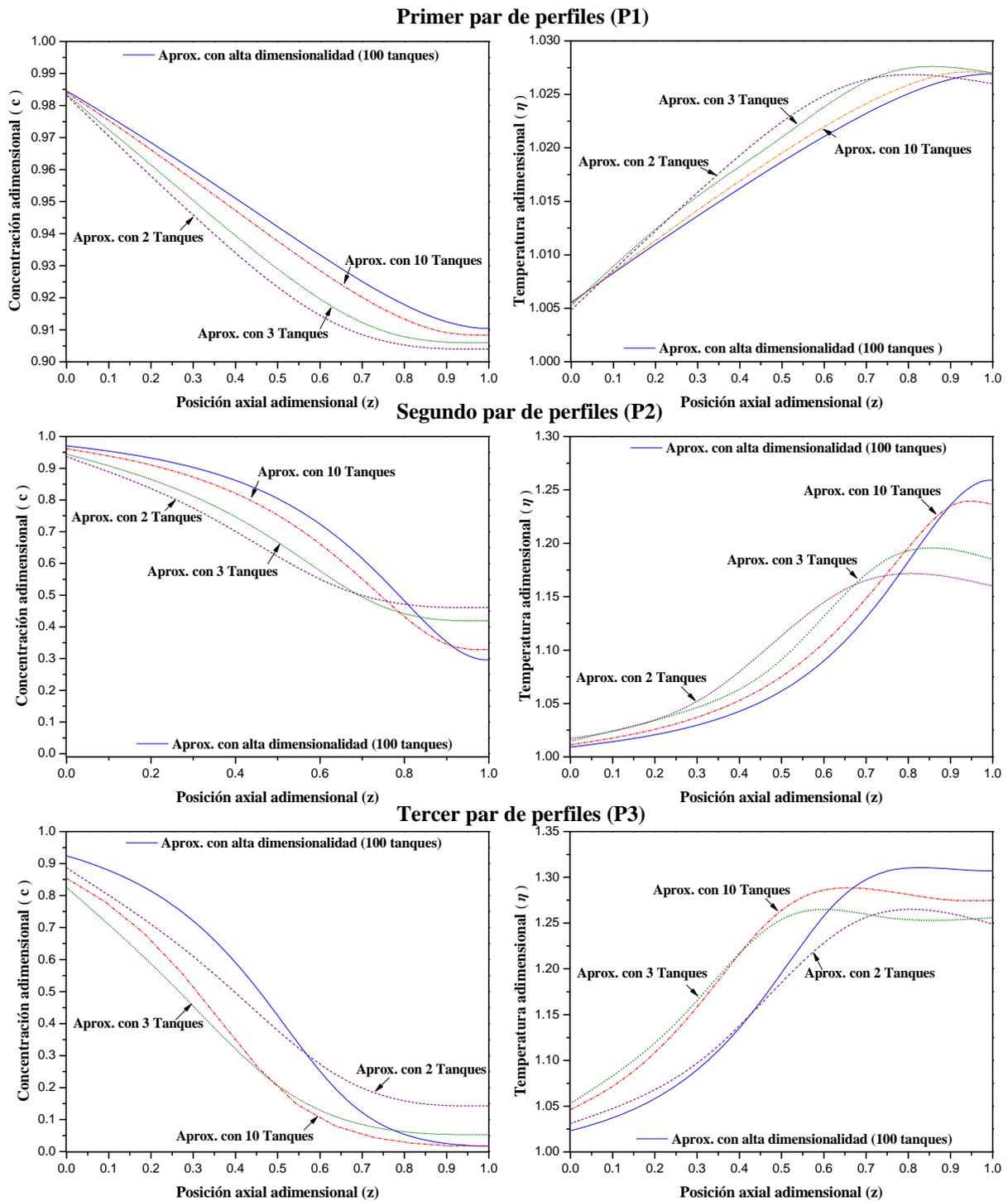


Figura 4.13. Comparación de los perfiles obtenidos a partir de dos (caso II) y tres (caso III) y diez tanques en serie con retromezclado contra los perfiles obtenidos a partir de una aproximación de alta dimensión.

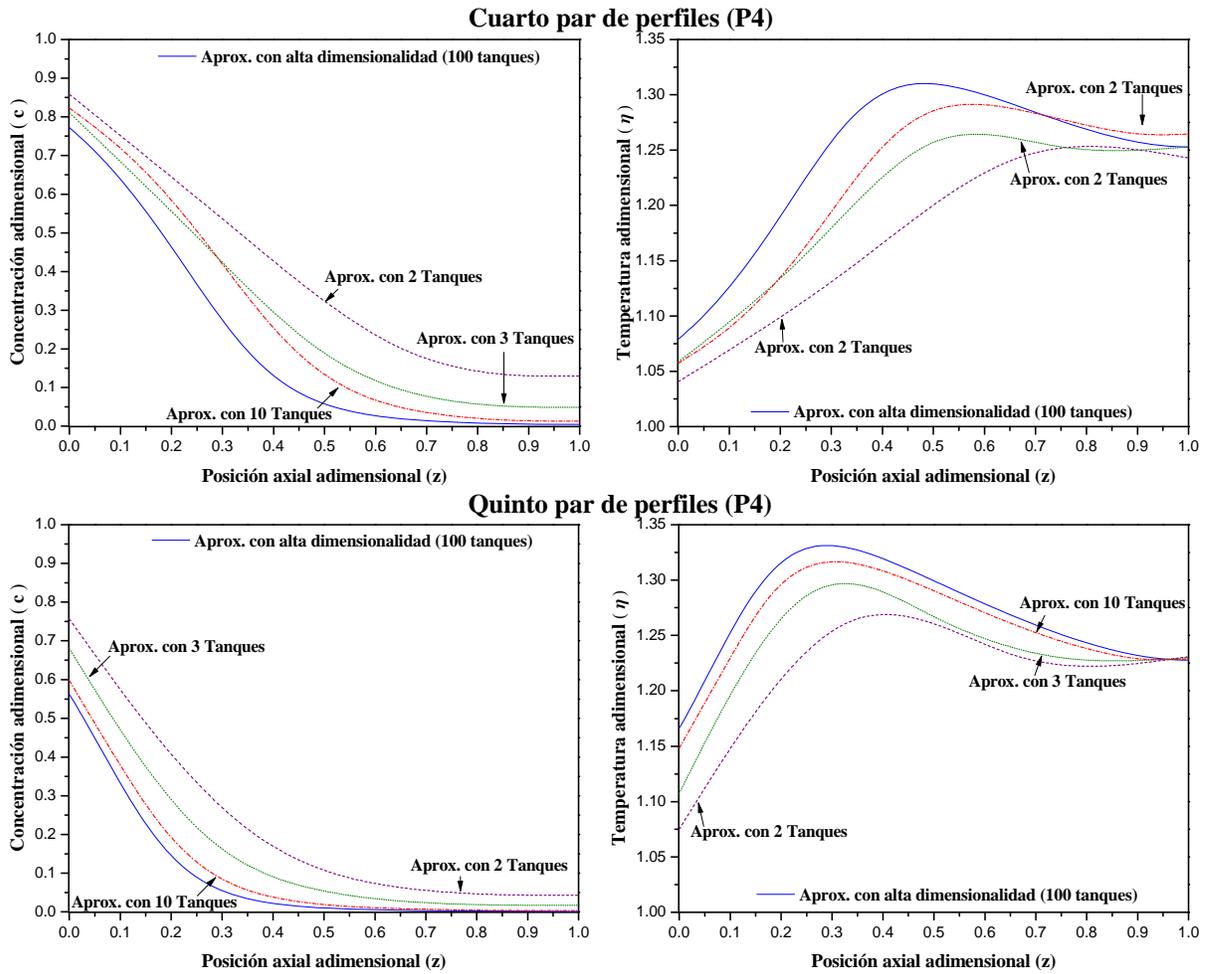


Figura 4.13 (continuación). Comparación de los perfiles obtenidos a partir de dos (caso II) y tres (caso III) y diez tanques en serie con retromezclado contra los perfiles obtenidos a partir de una aproximación de alta dimensión.

- Las aproximaciones para los perfiles de temperatura son buenas en ambos casos, encontrándose errores de 1%-12% para el caso II, mientras que para el caso III los errores fluctúan entre 1%-8%, ya para diez tanques los errores están entre 1%-5%.
- Situación contraria ocurre con la concentración en donde las aproximaciones a partir de dos y tres tanques son deficientes, encontrándose errores superiores al 50% para el caso II, hasta de un 20% para el caso III, y 15 % con diez tanques. Esto resulta más evidentes en aquellos perfiles en donde ocurre una mayor conversión de reactivo (perfiles 3, 4 y 5), ver figura 4.13.

Debido a que se desea una aproximación de baja dimensión que contenga los mecanismos relevantes de la estática y dinámica del RT para el diseño del control, con los análisis anteriores podemos decir que dos o tres RCTA's con retro mezclado son suficientes para capturar dichos mecanismos los mecanismos, siendo la aproximación con tres tanques la adecuada para los propósitos de este trabajo, diseñar un controlador de temperatura para el RT.

CAPÍTULO 5

Solución al problema de control para el TRCTA

Como paso metodológico hacia la solución del problema de control para el RT, en este capítulo nos enfocamos a estudiar la existencia de solución al problema de control por retroalimentación de estados para tres RCTA's en serie (caso III), aproximación con la cual se capturó la esencia dinámica y estática del RT. Entendiendo como problema de control la selección de la salida a regular, contando con varias candidatas: η_1 , η_2 , η_3 (que son las temperaturas de cada reactor), teniendo como entrada de control a η_w (temperatura de la chaqueta de enfriamiento) y dos estados estacionarios a controlar (EE2 y EE4). La selección de la salida a regular depende de la pasividad del tren de reactores, esto nos ayudará a establecer un criterio para la elegir la ubicación del sensor en uno de los tanques.

5.1 Pasividad del tren de reactores

Byrnes e Isidori (1991) derivaron las condiciones bajo las cuales un sistema no lineal puede llegar a ser pasivo vía retroalimentación de estados [39], [40] [41], y mostraron que esto es posible sí y solo sí el sistema en cuestión tiene:

- Grado relativo igual a 1 con respecto al par entrada de control-salida regulada
- La dinámica cero asociada tiene un punto de equilibrio global y asintóticamente estable

Para la selección de la configuración del control para los tres RCTA's en serie (Caso III) se tiene: una entrada de control η_w (temperatura de la chaqueta de enfriamiento), tres salidas candidatas a regular η_1 , η_2 , η_3 (que son las temperaturas de cada reactor), y dos estados estacionarios a controlar (EE2 y EE4). Dichos estados son inestables a lazo abierto con inestabilidad estructural debido a bifurcación, ver los planos fase de la figura 4.10 y los diagramas de bifurcación de la figura 4.9, en la tabla 4.3 se muestran las características de estabilidad local de estos puntos de equilibrio. Además debemos de recordar que:

- A partir de EE2 se pudo aproximar el par de perfiles (concentración-temperatura) inestables P2 del RT, ver figuras 4.8 y 4.9, en donde el perfil de temperatura es isotónico.
- A partir de EE4 se pudo aproximar el par de perfiles (concentración-temperatura) inestables P4 del RT, ver figuras 4.8 y 4.9, en donde el perfil de temperatura es no monótono (con un máximo o punto caliente).

Se eligieron EE2 y EE4 por ser las situaciones más desfavorables para el controlador, cuando se desea operar alrededor de un estado estacionario inestable a lazo abierto, bajo el entendido de que para un estado estable el análisis será similar.

5.1.1 Grado relativo

Considerando un sistema no lineal de la forma

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) + \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{d})u; \quad y = \mathbf{h}(\mathbf{x}) \quad (5.1)$$

En donde \mathbf{x} son los estados del sistema, y es la salida, u es la entrada de control y \mathbf{d} son las entradas de exógenas.

El grado relativo es el número de veces que es necesario derivar la salida a regular para que aparezca explícitamente la entrada de control [42], [43], [44], para nuestro caso

$$\begin{aligned} \dot{y} = \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{d}, u) &= \frac{\partial \mathbf{h}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{h}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) + \frac{\partial \mathbf{h}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{d})u \\ &= L_f \mathbf{h}(\mathbf{x}) + L_g \mathbf{h}(\mathbf{x})u \end{aligned} \quad (5.2)$$

Si $L_g h(x) \neq 0$, se dice que el sistema es de grado relativo 1, lo que implica que para la salida seleccionada y existe una única entrada de control u , esto nos lleva a que la ecuación $\dot{y} = \varphi(x, d, u)$ tiene solución única para la entrada $u = \iota(x, d, \dot{y})$.

Para tener al modelo de tres RCTA's en serie, expresiones (3.35-3.37), en la forma (5.1) se eligieron como variables de estado a

$$\begin{aligned} x_i &= c_i & i &= 1 \dots 3 \\ x_i &= \eta_i & i &= 4 \dots 6 \end{aligned} \quad (5.3)$$

Como entradas exógenas: $d_1 = c_e$, $d_2 = \eta_e$, $d_3 = Q$, como entrada de control $u = \eta_w$ y como salida

$$y = \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \eta_i \quad (5.4)$$

En donde valor de i va a depender de la temperatura que se elija como salida regula.

Por lo tanto

$$f(x, d) = \begin{bmatrix} f_1(x, d) \\ f_2(x, d) \\ f_3(x, d) \\ f_4(x, d) \\ f_5(x, d) \\ f_6(x, d) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_M(x_2 - x_1) - B(x_1 - d_1) - \phi r(x_1, x_4) \\ A_M(x_3 - 2x_2 + x_1) - B(x_2 - x_1) - \phi r(x_2, x_5) \\ A_M(x_2 - x_3) - B(x_3 - x_2) - \phi r(x_3, x_6) \\ A_T(x_5 - x_4) - B(x_4 - d_2) + \beta \phi r(x_1, x_4) - \delta x_4 \\ A_T(x_6 - 2x_5 + x_4) - B(x_5 - x_4) + \beta \phi r(x_2, x_5) - \delta x_5 \\ A_T(x_5 - x_6) - B(x_6 - x_5) + \beta \phi r(x_3, x_6) - \delta x_6 \end{bmatrix}, \quad g(x, d) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \delta \\ \delta \\ \delta \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

En donde $A_M = N^2 / Pe^M$, $A_T = N^2 / Pe^T$, $B = NQ$, $N = 3$, $r(x_i, x_j) = x_i \exp[\gamma(x_j - 1) / x_j]$

Resulta evidente que, independientemente de la temperatura que se elija como salida, para que el sistema anterior sea de grado relativo 1 el coeficiente de transferencia de calor no debe ser cero ($\delta \neq 0$) de modo que se permita el intercambio de calor.

5.1.2 Dinámica cero

La dinámica cero asociada a la salida y resulta de imponer las siguientes restricciones a la dinámica (n dimensional) del sistema (5.1)

$$y = \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \bar{y}, \quad \dot{y} = \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{d}, u) = 0 \quad (5.6)$$

Debido a la segunda restricción y por la propiedad de grado relativo 1, existe una solución única para la entrada de control tal que

$$u = \iota(\mathbf{x}, \mathbf{d}, 0) = \mu_z(\mathbf{x}_z, \mathbf{d}, \bar{y}) \quad (5.7)$$

Como la salida se ha fijado en su valor nominal, la dinámica correspondiente a esta salida se elimina resultando un nuevo subsistema (n-1 dimensional)

$$\dot{\mathbf{x}}_z = \mathbf{f}(\mathbf{x}_z, \mathbf{d}) + \mathbf{g}(\mathbf{x}_z, \mathbf{d})\mu_z(\mathbf{x}_z, \mathbf{d}, \bar{y}) \quad (5.8)$$

Si el sistema (5.1) tiene grado relativo 1 entonces será pasivo con respecto a la salida elegida si el subsistema equivalente (5.8), para un conjunto de valores iniciales tal que $\mathbf{x}_{z0} \neq \bar{\mathbf{x}}_{z0} \Rightarrow \mathbf{x}_z(t) \rightarrow \bar{\mathbf{x}}_z(t)$ [45], tiene a $\bar{\mathbf{x}}_z$ como estado estacionario único y estable.

A continuación detallaremos los subsistemas generados para cada una de las tres salidas de temperatura candidatas.

5.1.2.1 Dinámica cero asociada cuando se regula la temperatura del tanque 1

$$y = \bar{x}_4 = \bar{\eta}_1, \quad \dot{y} = \dot{\eta}_1 = 0 \quad (5.9)$$

$$u = \eta_w = \frac{\bar{\eta}_1(A_T + B + \delta) - \beta\phi r(c_1, \bar{\eta}_1) - A_T\eta_2 - B\eta_e}{\delta} \quad (5.10)$$

$\dot{\mathbf{x}}_z$ en variables originales del tren de reactores es:

$$\begin{aligned} \dot{c}_1 &= A_M(c_2 - c_1) - B(c_1 - c_e) - \phi r(c_1, \bar{\eta}_1) \\ \dot{c}_2 &= A_M(c_3 - 2c_2 + c_1) - NQ(c_2 - c_1) - \phi r(c_2, \eta_2) \\ \dot{\eta}_2 &= A_T(\eta_3 - 2\eta_2 + \bar{\eta}_1) - NQ(\eta_2 - \bar{\eta}_1) + \beta\phi r(c_2, \eta_2) - \delta(\eta_2 - \eta_w) \\ \dot{c}_3 &= A_T(c_2 - c_3) - NQ(c_3 - c_2) - \phi r(c_3, \eta_3) \\ \dot{\eta}_3 &= A_T(\eta_2 - \eta_3) - NQ(\eta_3 - \eta_2) + \beta\phi r(c_3, \eta_3) - \delta(\eta_3 - \eta_w) \end{aligned} \quad (5.11)$$

En donde $A_M = N^2/Pe^M$, $A_T = N^2/Pe^T$, $B = NQ$, $N = 3$, $r(c_i, \eta_i) = c_i \exp[\gamma(\eta_i - 1)/\eta_i]$

5.1.2.2 Dinámica cero asociada cuando se regula la temperatura del tanque 2

$$y = \bar{x}_5 = \bar{\eta}_2, \quad \dot{y} = \dot{\eta}_2 = 0 \quad (5.12)$$

$$u = \eta_w = \frac{-\eta_1 (A_T + B) + \bar{\eta}_2 (2A_T + B + \delta) - \beta \phi r(c_2, \bar{\eta}_2) - A_T \eta_3}{\delta} \quad (5.13)$$

$\dot{\mathbf{x}}_z$ en variables originales del tren de reactores es:

$$\begin{aligned} \dot{c}_1 &= A_M (c_2 - c_1) - B(c_1 - c_e) - \phi r(c_1, \eta_1) \\ \dot{\eta}_1 &= A_T (\bar{\eta}_2 - \eta_1) - B(\eta_1 - \eta_e) + \beta \phi r(c_1, \eta_1) - \delta(\eta_1 - \eta_w) \\ \dot{c}_2 &= A_M (c_3 - 2c_2 + c_1) - B(c_2 - c_1) - \phi r(c_2, \bar{\eta}_2) \\ \dot{c}_3 &= A_T (c_2 - c_3) - B(c_3 - c_2) - \phi r(c_3, \eta_3) \\ \dot{\eta}_3 &= A_T (\bar{\eta}_2 - \eta_3) - B(\eta_3 - \bar{\eta}_2) + \beta \phi r(c_3, \eta_3) - \delta(\eta_3 - \eta_w) \end{aligned} \quad (5.14)$$

En donde $A_M = N^2 / Pe^M$, $A_T = N^2 / Pe^T$, $B = NQ$, $N = 3$, $r(c_i, \eta_i) = c_i \exp[\gamma(\eta_i - 1)/\eta_i]$

5.1.2.3 Dinámica cero asociada cuando se regula la temperatura del tanque 3

$$y = \bar{x}_6 = \bar{\eta}_3, \quad \dot{y} = \dot{\eta}_3 = 0 \quad (5.15)$$

$$u = \eta_w = \frac{-\eta_2 (A_T + B) + \bar{\eta}_3 (A_T + B + \delta) - \beta \phi r(c_3, \bar{\eta}_3)}{\delta} \quad (5.16)$$

$\dot{\mathbf{x}}_z$ en variables originales del tren de reactores es:

$$\begin{aligned} \dot{c}_1 &= A_M (c_2 - c_1) - B(c_1 - c_e) - \phi r(c_1, \eta_1) \\ \dot{\eta}_1 &= A_T (\bar{\eta}_2 - \eta_1) - B(\eta_1 - \eta_e) + \beta \phi r(c_1, \eta_1) - \delta(\eta_1 - \eta_w) \\ \dot{c}_2 &= A_M (c_3 - 2c_2 + c_1) - B(c_2 - c_1) - \phi r(c_2, \bar{\eta}_2) \\ \dot{\eta}_2 &= A_T (\bar{\eta}_3 - 2\eta_2 + \eta_1) - B(\eta_2 - \eta_1) + \beta \phi r(c_2, \eta_2) - \delta(\eta_2 - \eta_w) \\ \dot{c}_3 &= A_T (c_2 - c_3) - B(c_3 - c_2) - \phi r(c_3, \bar{\eta}_3) \end{aligned} \quad (5.17)$$

En donde $A_M = N^2 / Pe^M$, $A_T = N^2 / Pe^T$, $B = NQ$, $N = 3$, $r(c_i, \eta_i) = c_i \exp[\gamma(\eta_i - 1)/\eta_i]$

Habiendo establecido que el TRCTA tiene grado relativo 1 para cada una de las salidas candidatas a regular (temperatura de cada reactor), el tren es pasivo con respecto a la salida η_i

si la dinámica cero asociada tiene a \bar{x}_z (EE2 o EE4 según sea el análisis) como atractor global asintóticamente estable.

A continuación procederemos a caracterizar el comportamiento estático y dinámico de cada uno de los subsistemas anteriores (5.9-5.17) apoyándonos, como en el capítulo anterior, en el análisis de los diagramas de bifurcación y en el primer método de Lyapunov. Para este estudio se utilizarán los parámetros del reactor tubular definidos en la tabla 2.3 y los valores nominales de $\bar{c}_e = 1.0$, $\bar{\eta}_e = 1.0$, $\bar{Q} = 1.0$.

5.2 Caracterización de la pasividad del TRCTA

5.2.1 Pasividad con relación al estado estacionario EE2 para cada una de las salidas candidatas

5.2.1.1 Salida de temperatura regulada en tanque 1 ($\bar{\eta}_1 = 1.040$)

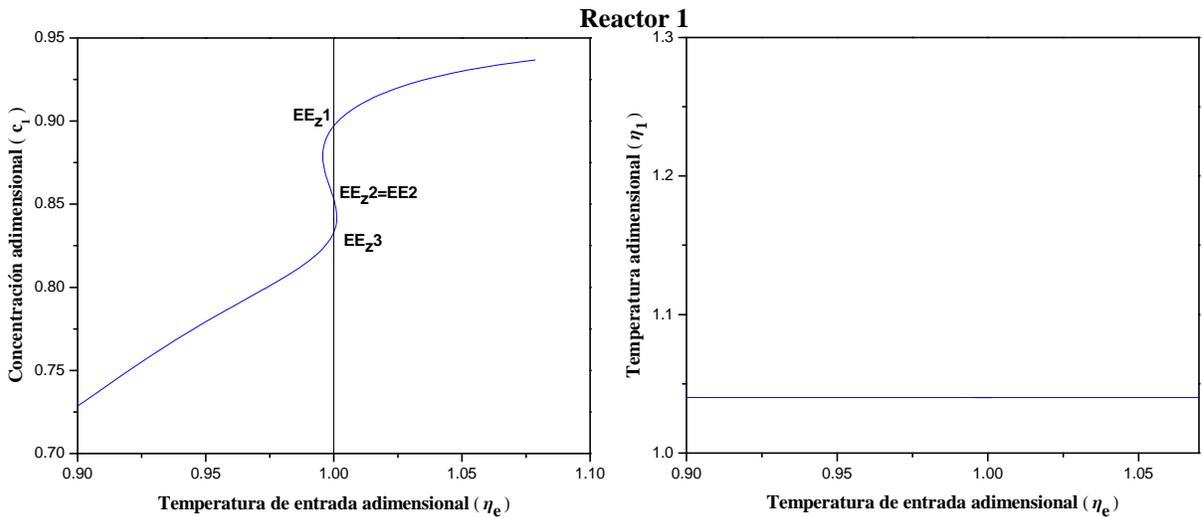


Figura 5.1. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del primer reactor, $\bar{\eta}_1 = 1.040$ (EE2).

El análisis de la parte estática del subsistema (5.10-5.11) dio como resultado tres estados estacionarios o puntos de equilibrio (EE_{z1} , EE_{z2} , EE_{z3}) para cada reactor, ver figura 5.1, mientras que con un análisis de estabilidad (a partir del primer método de Lyapunov) se

determinó que dos de estos puntos son inestables (EE_{z2} , EE_{z3}) y uno estable (EE_{z1}). Se debe notar que uno de los puntos de equilibrio inestables (EE_{z2}) es igual al estado EE_2 , los resultados se resumen en la tabla 5.1.

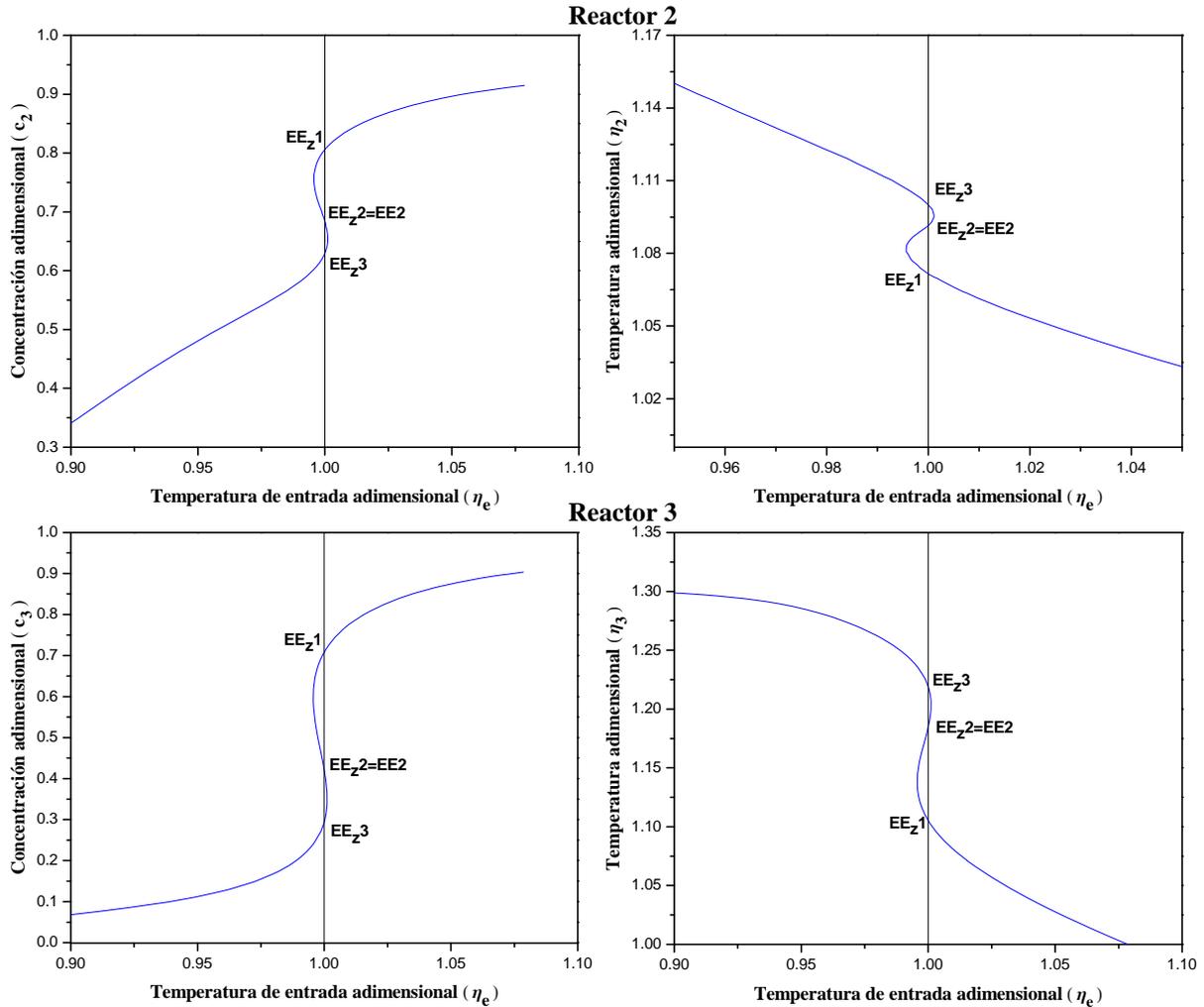


Figura 5.1 (continuación). Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del primer reactor, $\bar{\eta}_1 = 1.040$ (EE_2).

En la figura 5.2 se muestra el comportamiento dinámico del subsistema (5.10-5.11), se puede observar, como era de esperarse, que el reactor es asintóticamente estable en EE_{z1} y no en EE_{z2} . Por lo tanto podemos decir que si se regulara la temperatura del primer tanque el TRCTA no sería pasivo, dado que la dinámica inversa no tiene a EE_2 como punto de equilibrio único y estable.

Tabla 5.1. Puntos de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del primer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_1 = 1.040$ (EE2).

| | | EE_z1 | EE_z2=EE2 | EE_z3 |
|----------------------------|----------|------------------------|----------------------------|------------------------|
| Concentración adimensional | c_1 | 0.897 | 0.852 | 0.833 |
| | c_2 | 0.805 | 0.683 | 0.629 |
| | c_3 | 0.708 | 0.419 | 0.294 |
| Temperatura adimensional | η_2 | 1.071 | 1.091 | 1.10 |
| | η_3 | 1.105 | 1.184 | 1.219 |
| | η_w | 1.031 | 1.0 | 0.986 |
| Eigenvalores | | -9.871 | -9.811 | 0.762+1.232i |
| | | -4.932 | -0.553 | 0.762-1.232i |
| | | -1.166+0.829i | 2.098 | -9.73 |
| | | -1.166-0.829i | -5.214 | -5.783 |
| | | -7.762 | -6.765 | -6.232 |
| Condición | | Estable | Inestable | Inestable |

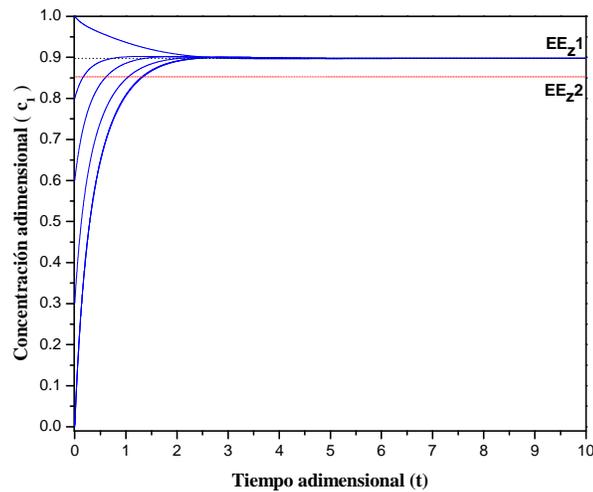


Figura 5.2. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del primer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_1 = 1.040$ (EE2).

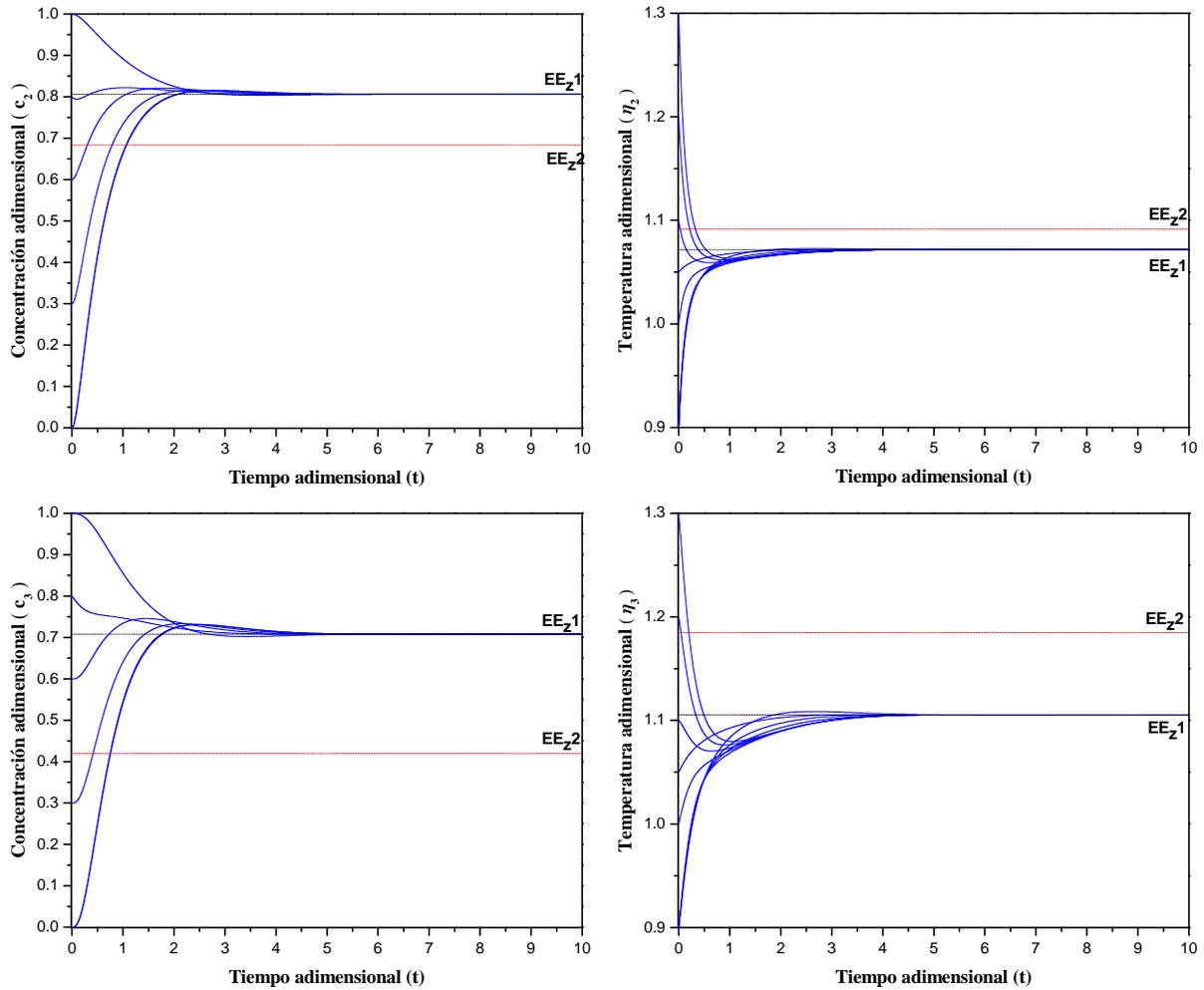


Figura 5.2 (continuación). Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del primer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_1 = 1.040$ (EE2).

El tren de reactores con $y = \eta_1$ como salida regulada no es pasivo con relación al estado estacionario EE2, por lo que el problema de control no lineal robusto con retroalimentación de estados no tiene solución.

5.2.1.2 Salida de temperatura regulada en tanque 2 ($\bar{\eta}_2 = 1.091$)

El estudio de las características del subsistema (5.13-5.14) dio como resultado que este posee un solo punto de equilibrio estable, ver los diagramas de bifurcación de la figura 5.3 y la tabla 5.2. En la figura 5.4 se muestra el comportamiento dinámico del subsistema (5.18) y con lo

observado se puede concluir que el TRCTA es pasivo si se regula la temperatura del segundo tanque, ya que la dinámica cero asociada tiene a EE2 como punto de equilibrio único y estable. Por lo tanto sería posible estabilizar al estado EE2 en el TRCTA con un control no lineal de temperatura accionado por retro alimentación de estados en el segundo tanque.

Tabla 5.2. Punto de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del segundo reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_2 = 1.091$ (EE2).

| EE ₂ 1=EE2 | | |
|-------------------------------|----------|----------------|
| Concentración adimensional | c_1 | 0.852 |
| | c_2 | 0.683 |
| | c_3 | 0.419 |
| Temperatura adimensional | η_1 | 1.040 |
| | η_3 | 1.184 |
| | η_w | 1.0 |
| Eigenvalores | | -0.369+1.346i |
| | | -0.369-1.346i |
| | | -4.424 |
| | | -10.029+1.268i |
| | | -10.029-1.268i |
| Condición | Estable | |

El tren de reactores con $y = \eta_2$ como salida regulada es pasivo con relación al estado estacionario EE2, por lo que el problema de control no lineal robusto con retroalimentación de estados tiene solución.

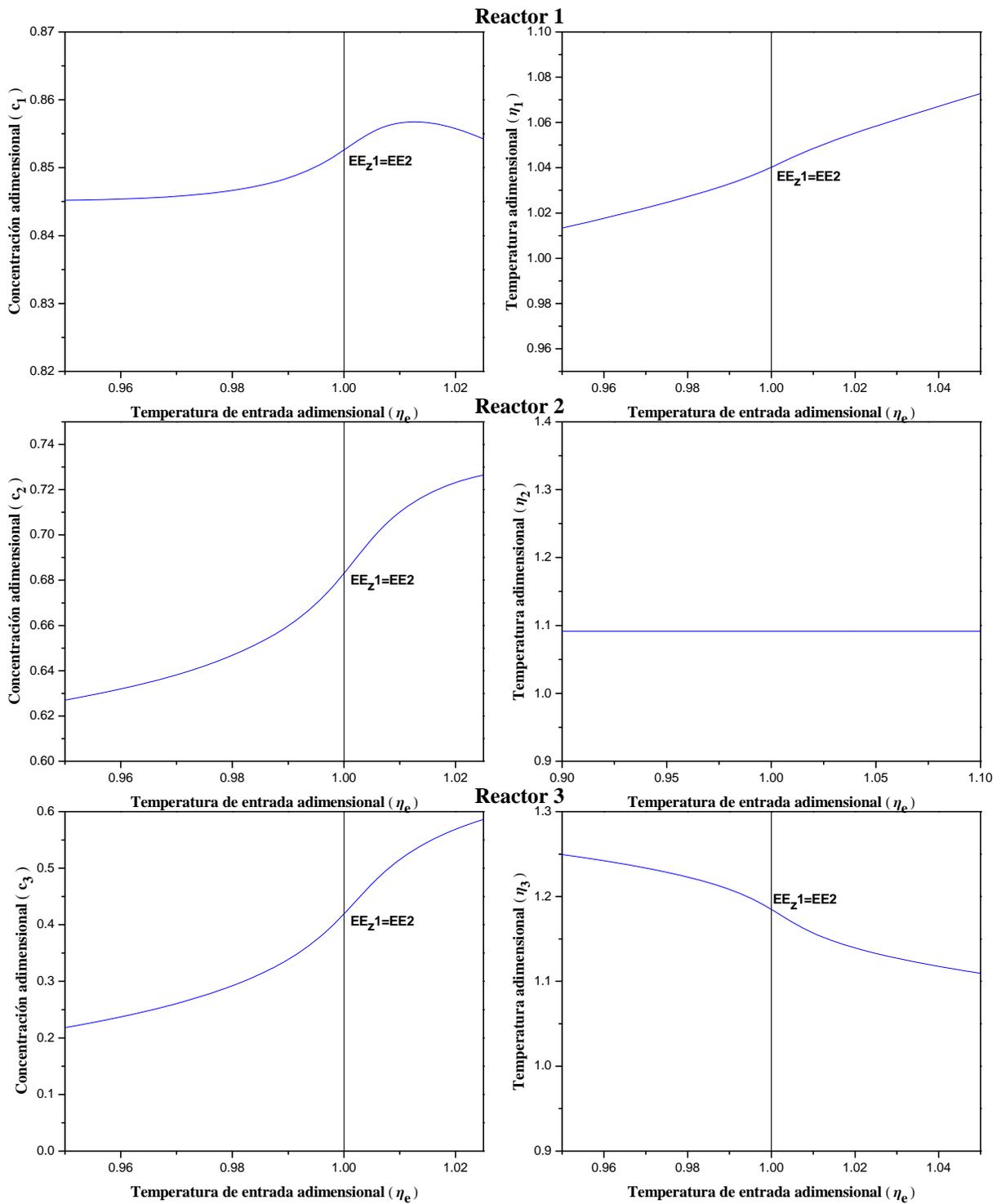


Figura 5.3. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del segundo reactor, $\bar{\eta}_2 = 1.091$ (EE2).

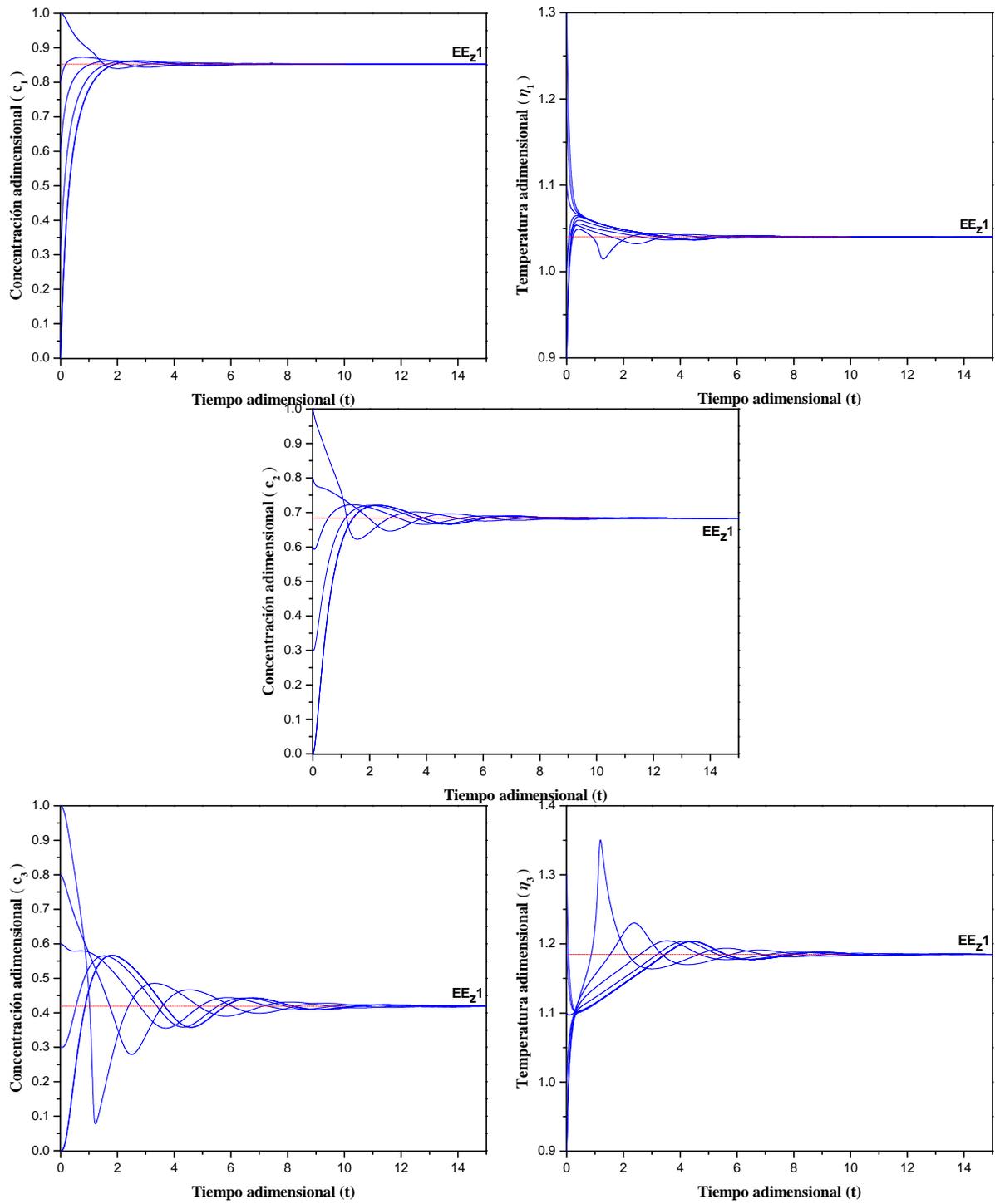


Figura 5.4. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del segundo reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_2 = 1.091$ (EE2).

5.2.1.3 Salida de temperatura regulada en tanque 3 ($\bar{\eta}_3 = 1.184$)

Los resultados del análisis del subsistema (5.16-5.17) se resumen en la tabla 5.3 y se observa que este posee un solo punto de equilibrio estable (EE_z1) que es igual al estado EE2, ver figura 5.5. En la figura 5.6 se muestra el comportamiento dinámico del subsistema y con lo observado se puede concluir que el TRCTA es pasivo si se regula la temperatura del tercer tanque, por lo que también sería posible estabilizar al estado EE2 en el TRCTA con un control no lineal de temperatura accionado por retro alimentación de estados en dicho tanque.

Tabla 5.3. Puntos de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del tercer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_3 = 1.184$ (EE2).

| EE _z 1=EE2 | | |
|-------------------------------|----------|-----------------|
| Concentración adimensional | c_1 | 0.852 |
| | c_2 | 0.683 |
| | c_3 | 0.419 |
| Temperatura adimensional | η_1 | 1.040 |
| | η_2 | 1.091 |
| | η_w | 1.0 |
| Eigenvalores | | -1.302 |
| | | -10.902 |
| | | -5.821 |
| | | $-7.455+3.989i$ |
| | | $-7.455-3.989i$ |
| Condición | Estable | |

El tren de reactores con $y = \eta_3$ como salida regulada es pasivo con relación al estado estacionario EE2, por lo que el problema de control no lineal robusto con retroalimentación de estados tiene solución.

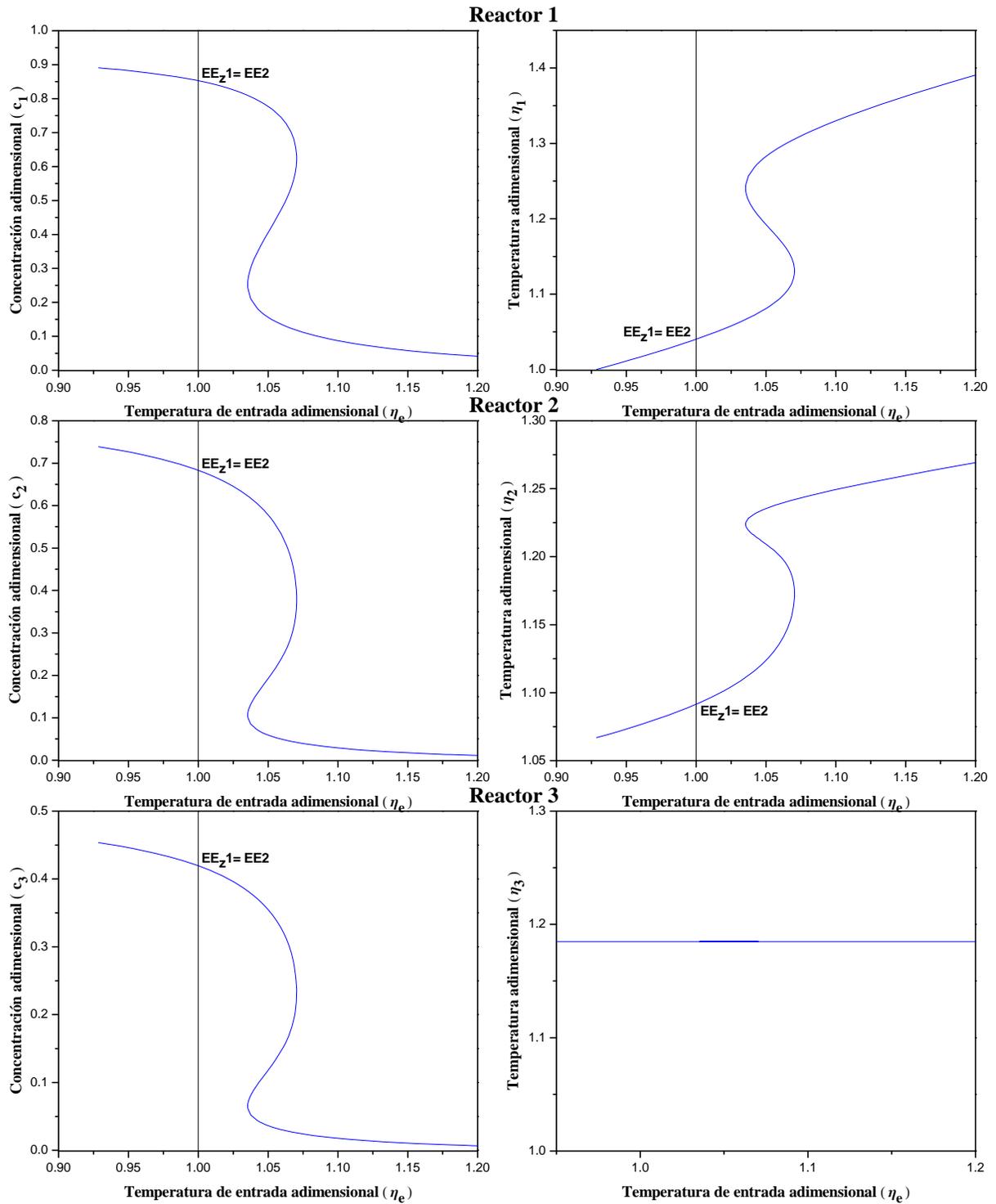


Figura 5.5. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del tercer reactor, $\bar{\eta}_3 = 1.184$ (EE2).

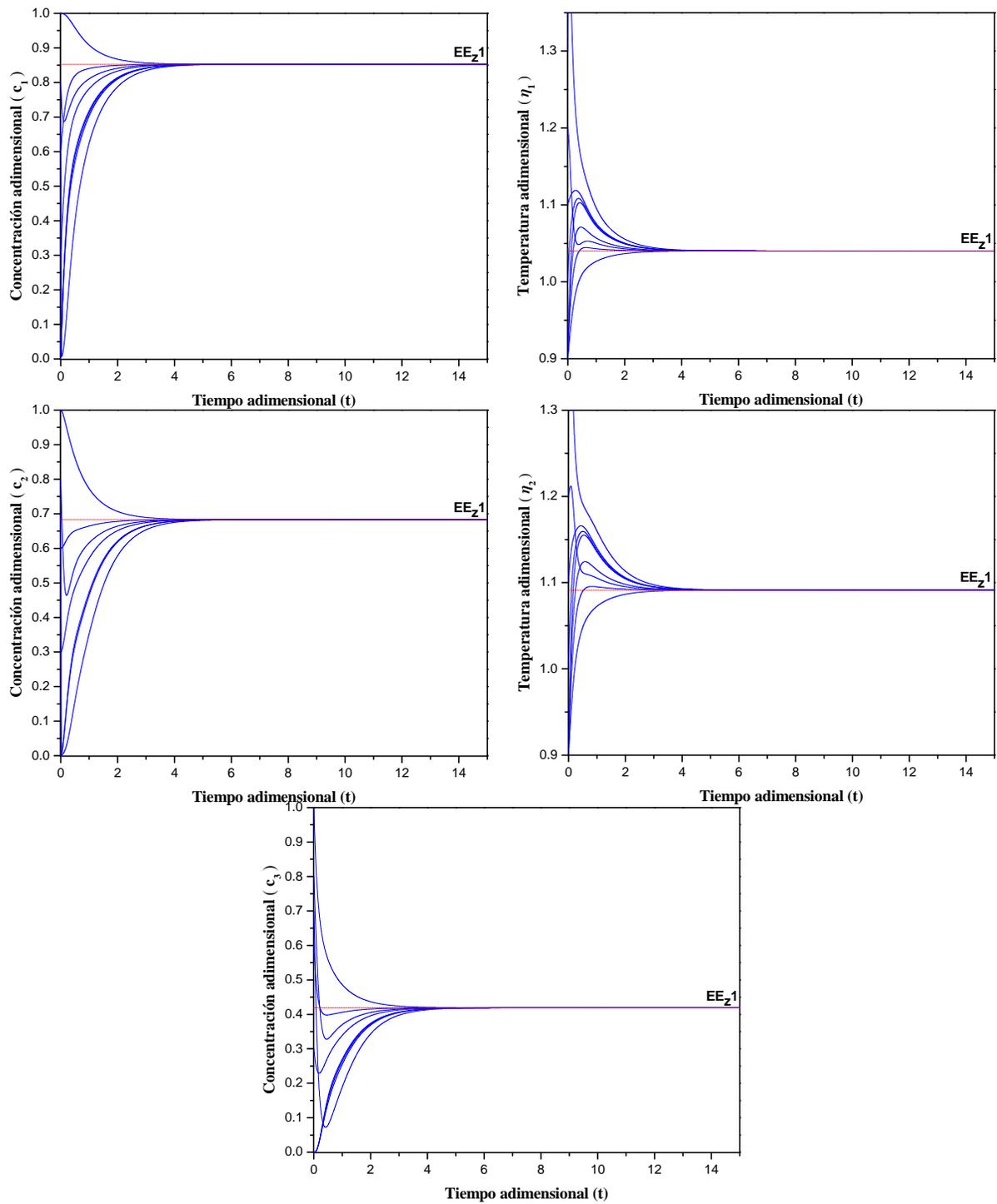


Figura 5.6. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del tercer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_3 = 1.184$ (EE2).

5.2.2 Pasividad con relación al estado estacionario EE4 para cada una de las salidas candidatas

5.2.2.1 Salida de temperatura regulada en tanque 1 ($\bar{\eta}_1 = 1.156$)

A continuación estudiaremos el comportamiento del subsistema (5.10-5.11) pero ahora con un valor nominal de $\bar{\eta}_1 = 1.156$, valor de la temperatura adimensional en el primer reactor que corresponde al estado EE4 (ver tabla 4.3). El análisis de la parte estática del subsistema dio como resultado un solo punto de equilibrio cuyos valores de concentración y temperatura corresponden a los de EE4 en cada uno de los reactores, ver figura 5.7, mientras que con el primer método de Lyapunov se determinó que dicho punto es estable; los resultados se resumen la tabla 5.4.

Tabla 5.4. Puntos de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del primer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_1 = 1.156$ (EE4).

| EE _z 1=EE4 | |
|-------------------------------|----------------|
| Concentración adimensional | c_1 0.494 |
| | c_2 0.147 |
| | c_3 0.049 |
| Temperatura adimensional | η_2 1.256 |
| | η_3 1.253 |
| | η_w 1.0 |
| Eigenvalores | -10.913+1.757i |
| | -10.913-1.757i |
| | -4.464+4.533i |
| | -4.464-4.533i |
| | -6.565 |
| Condición | Estable |

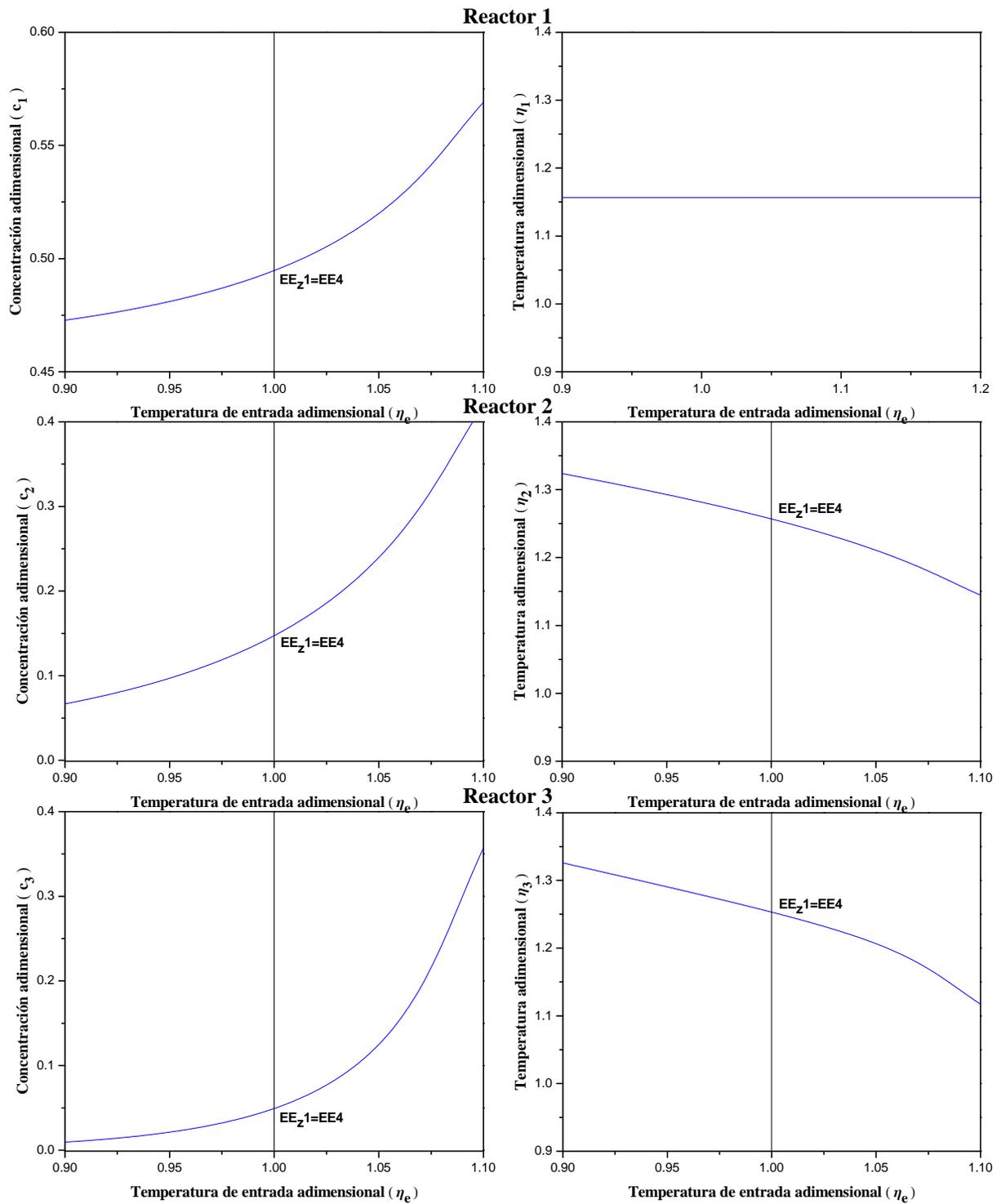


Figura 5.7. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del primer reactor, $\bar{\eta}_1 = 1.156$ (EE4).

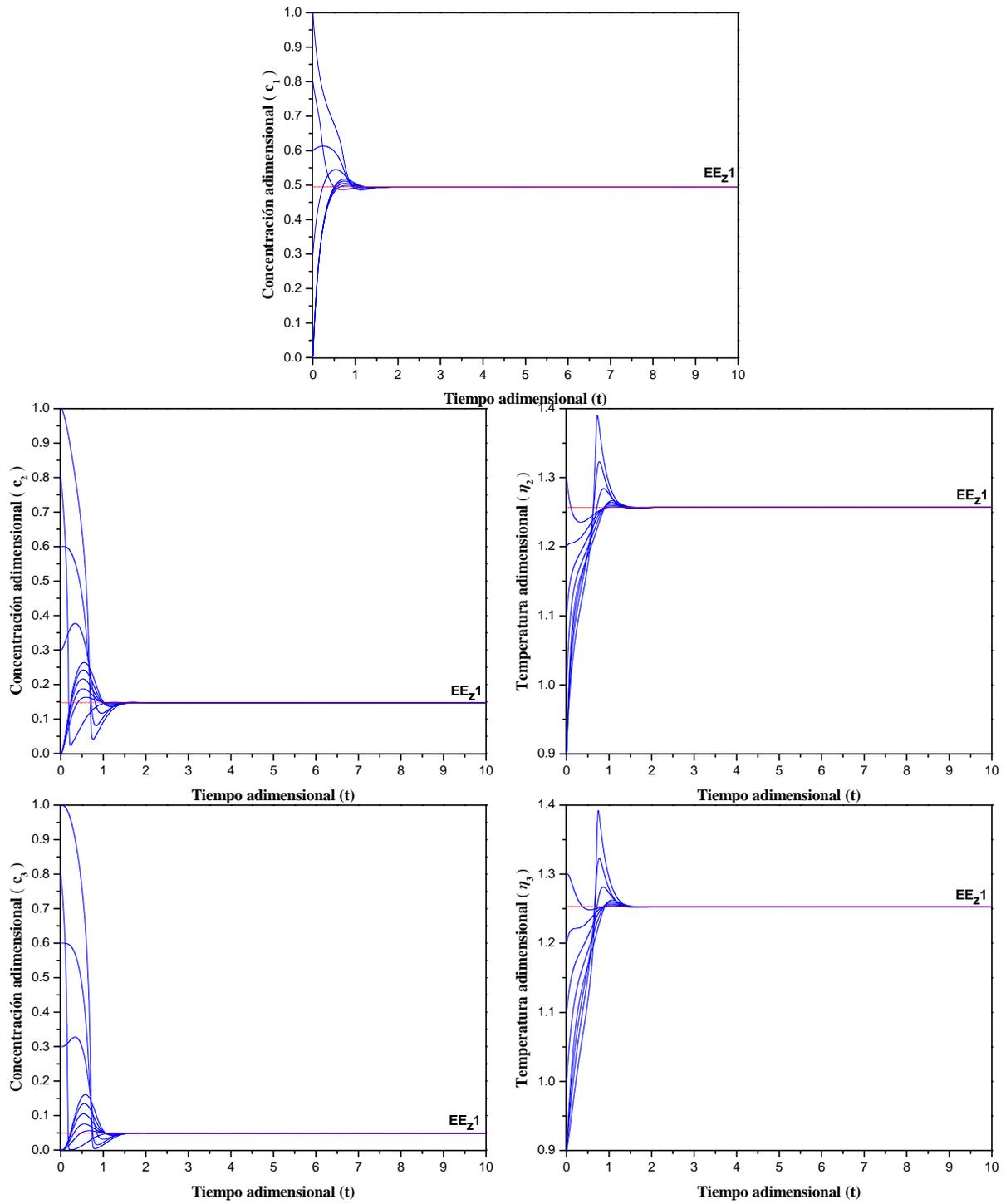


Figura 5.8. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del primer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_1 = 1.156$ (EE4).

En la figura 5.8 se muestra el comportamiento dinámico del subsistema (5.15) con $\bar{\eta}_1 = 1.156$, en donde se muestra que para diferentes condiciones iniciales el sistema llega a un solo estado estable. Por lo tanto el tren de reactores con $y = \eta_1$ como salida regulada es pasivo con relación al estado estacionario EE4, por lo que el problema de control no lineal robusto con retroalimentación de estados tiene solución.

5.2.2.2 Salida de temperatura regulada en tanque 2 ($\bar{\eta}_2 = 1.256$)

Tabla 5.5. Puntos de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del segundo reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_2 = 1.256$ (EE4).

| | | EE_z1=EE4 | EE_z2 | EE_z3 |
|-------------------------------|----------------|----------------------------|------------------------|------------------------|
| Concentración adimensional | c ₁ | 0.494 | 0.480 | 0.183 |
| | c ₂ | 0.147 | 0.143 | 0.055 |
| | c ₃ | 0.049 | 0.048 | 0.025 |
| Temperatura adimensional | η ₁ | 1.156 | 1.161 | 1.268 |
| | η ₃ | 1.253 | 1.251 | 1.222 |
| | η _w | 1.0 | 0.990 | 0.984 |
| Eigenvalores | | -14.135+2.949i | -14.068+2.987i | -12.288+4.544i |
| | | -14.135-2.949i | -14.068-2.987i | -12.288-4.544i |
| | | -7.716+1.017i | -7.664+1.087i | -3.834 |
| | | -7.716-1.017i | -7.664-1.087i | -7.763+2.617i |
| | | -0.091 | 0.09 | -7.763-2.617i |
| Condición | | Estable | Inestable | Estable |

El estudio de las características del subsistema (5.13-5.14), con $\bar{\eta}_2 = 1.256$, dio como resultado que este tiene tres puntos de equilibrio, dos estables (EE_z1, EE_z3) y uno inestable (EE_z2), ver tabla 5.5 y figura 5.9, debe notarse que existe una correspondencia entre el punto de equilibrio estable EE_z1 y el estado EE4.

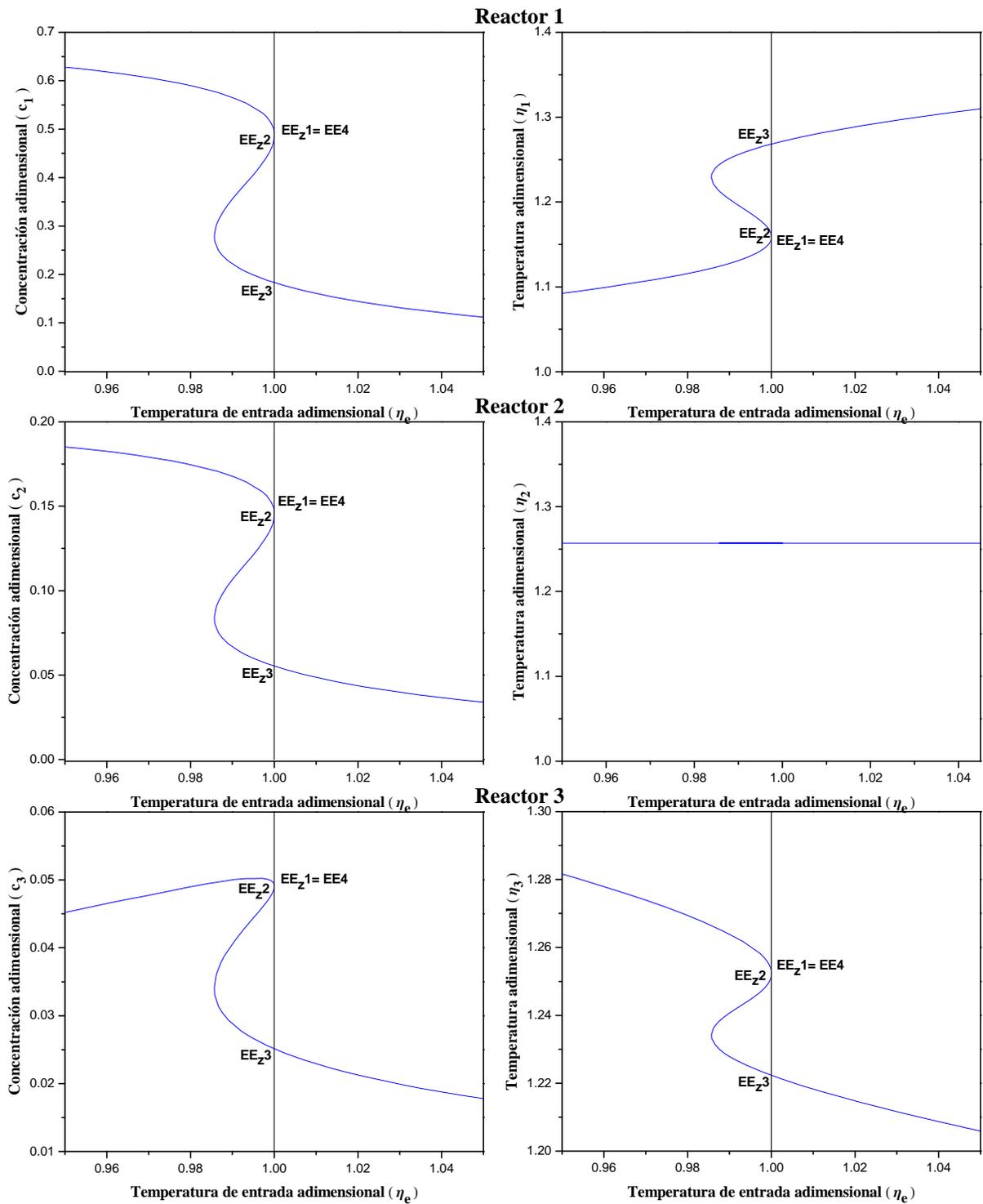


Figura 5.9. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del segundo reactor, $\bar{\eta}_2 = 1.256$ (EE4).

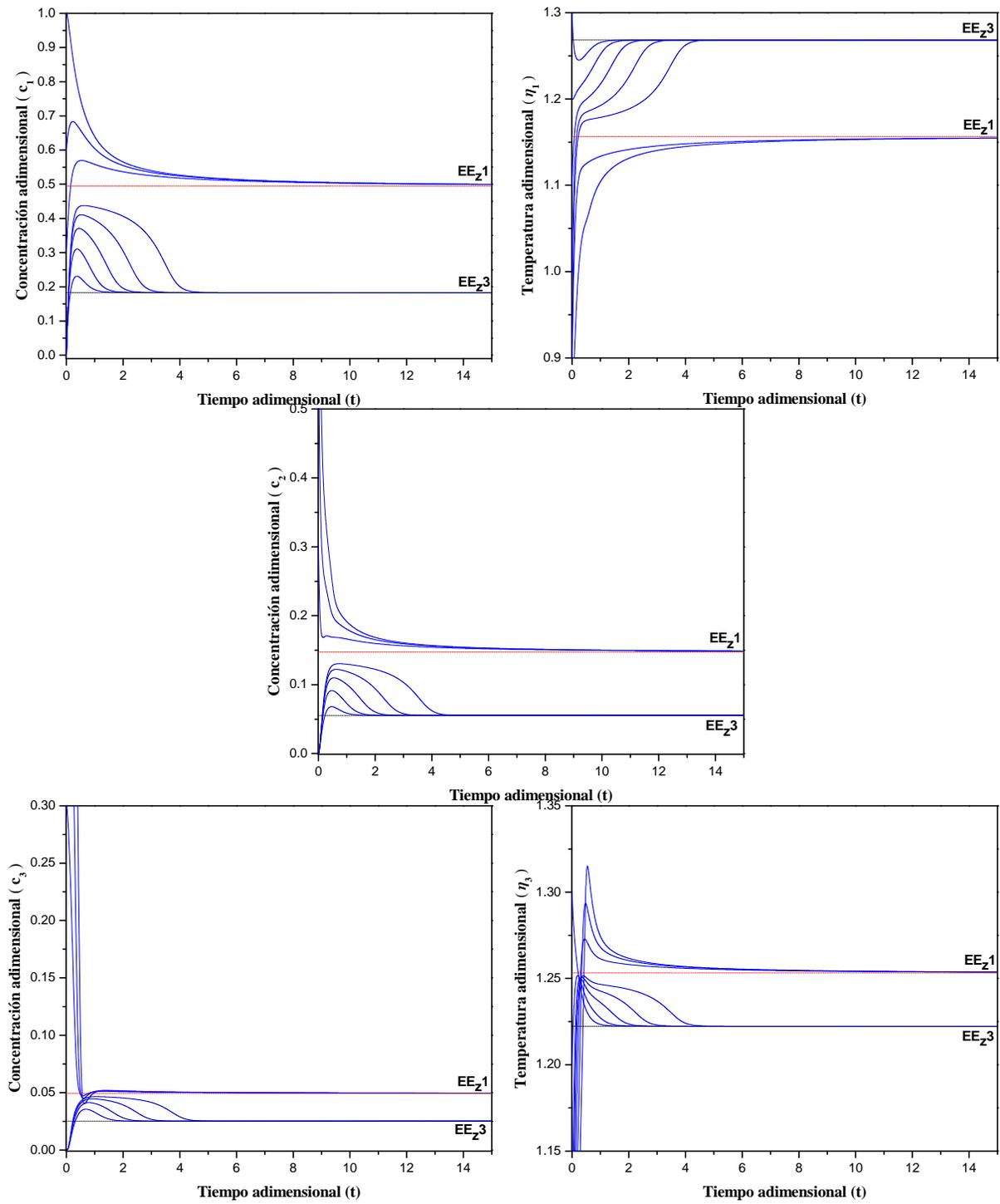


Figura 5.10. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del segundo reactor.

Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_2 = 1.256$ (EE4).

En la figura 5.10 se muestra el comportamiento dinámico del subsistema (5.13-5.14), con $\bar{\eta}_2 = 1.256$, en donde se observa que para diferentes condiciones iniciales éste puede llegar a estabilizar en EE_{z1} o EE_{z3} , por lo tanto el tren de reactores con $y = \eta_2$ como salida regulada no es pasivo con relación al estado estacionario EE_4 , por lo que el problema de control no lineal robusto con retroalimentación de estados no tiene solución.

5.2.2.3 Salida de temperatura regulada en tanque 3 ($\bar{\eta}_3 = 1.253$)

Tabla 5.6. Puntos de equilibrio de la dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del tercer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_3 = 1.253$ (EE4).

| | | EE_{z1} | EE_{z2}=EE4 | EE_{z3} |
|-------------------------------|----------------|------------------------|----------------------------|------------------------|
| Concentración adimensional | c ₁ | 0.789 | 0.494 | 0.10 |
| | c ₂ | 0.534 | 0.147 | 0.021 |
| | c ₃ | 0.178 | 0.049 | 7.11E-3 |
| Temperatura adimensional | η ₁ | 1.053 | 1.156 | 1.317 |
| | η ₂ | 1.130 | 1.256 | 1.289 |
| | η _w | 0.988 | 1.0 | 1.043 |
| Eigenvalores | | -0.574 | -8.94+7.008i | -24.467 |
| | | -14.045 | -8.94-7.008i | -10.834+7.643i |
| | | -8.716+4.386i | -5.414 | -10.834-7.643i |
| | | -8.716-4.386i | -13.435 | -8.123 |
| | | -5.542 | 0.991 | -10.707 |
| Condición | | Estable | Inestable | Estable |

Para este caso el subsistema (5.16-5.17), con $\bar{\eta}_3 = 1.253$, tiene tres puntos de equilibrio, dos estables (EE_{z1} , EE_{z3}) y uno inestable (EE_{z2}), ver tabla 5.6 y el diagrama de bifurcación de la figura 5.11; se debe notar que existe una correspondencia entre el punto de equilibrio inestable y el estado EE_4 .

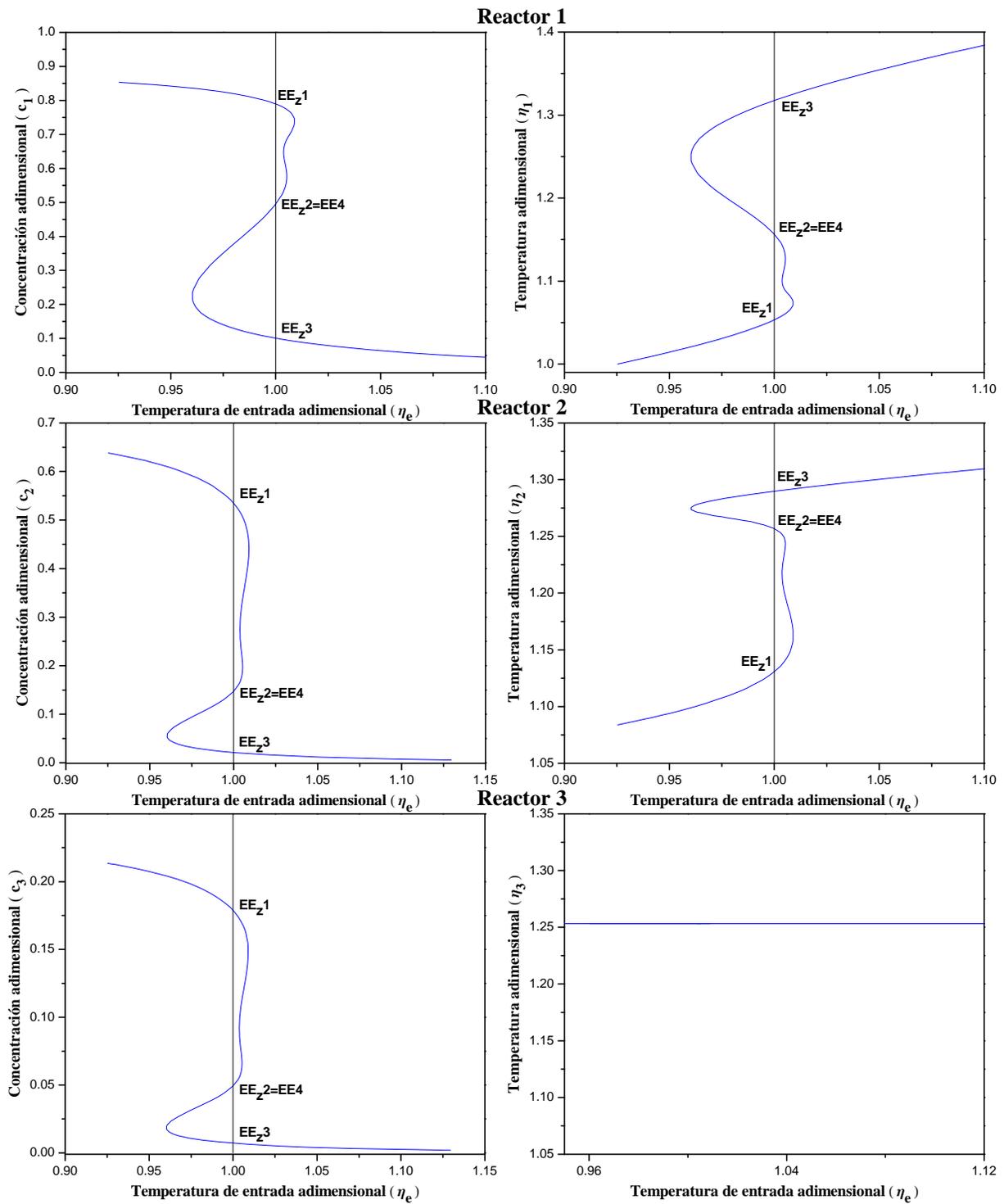


Figura 5.11. Diagramas de bifurcación para la dinámica cero asociada a tres RCTA's en serie cuando se regula la temperatura del tercer reactor, $\bar{\eta}_3 = 1.253$ (EE4).

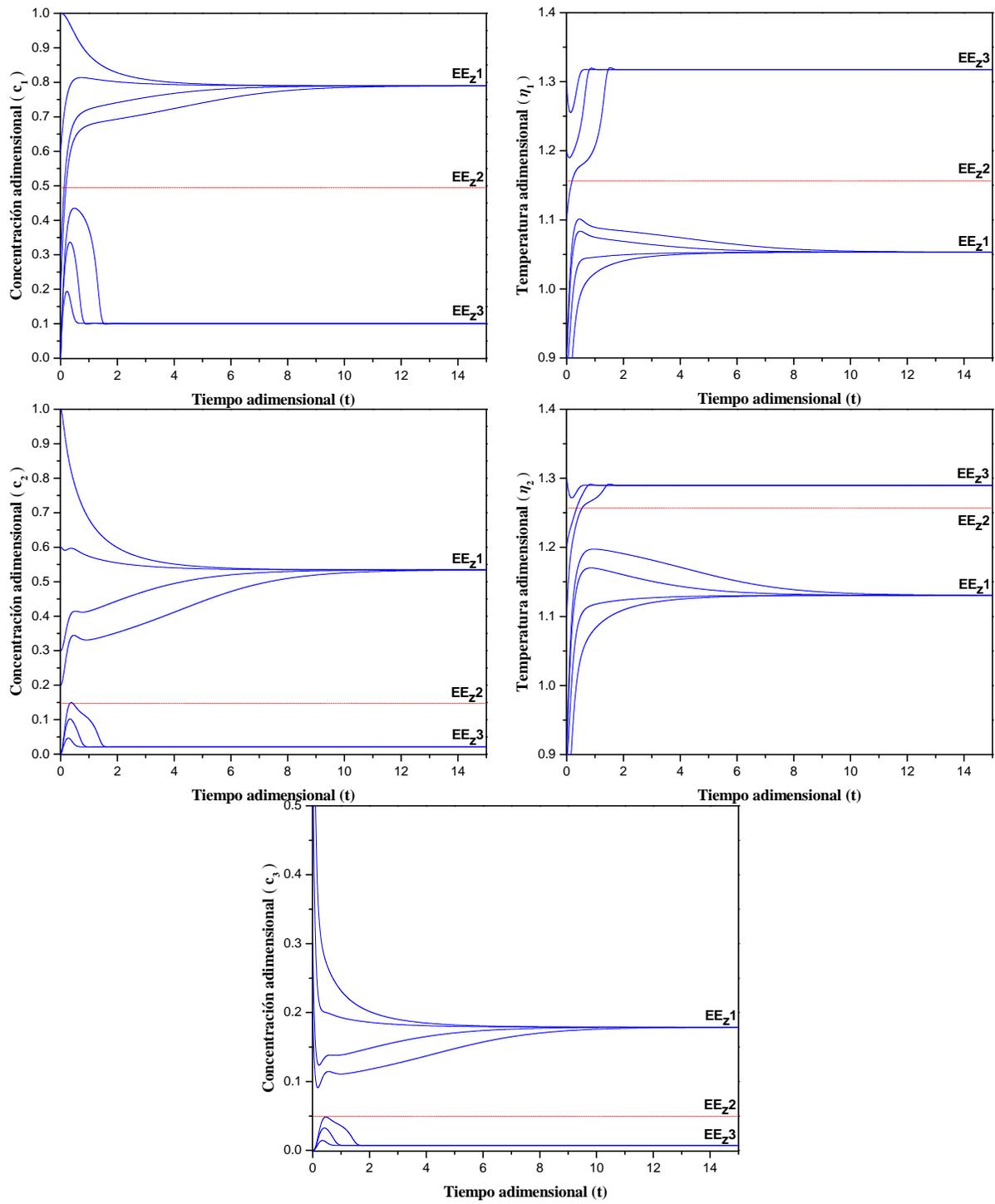


Figura 5.12. Dinámica cero asociada al caso III cuando se regula la temperatura del tercer reactor. Valor nominal de temperatura $\bar{\eta}_3 = 1.253$ (EE4).

En la figura 5.12 se muestra el comportamiento dinámico del subsistema (5.16-5.17) en donde se observa que para diferentes condiciones iniciales éste se puede estabilizar en EE_{z1} o EE_{z3} , por lo tanto el tren de reactores con $y = \eta_3$ como salida regulada no es pasivo con relación al estado estacionario EE_4 , por lo que el problema de control no lineal robusto con retroalimentación de estados no tiene solución.

Recapitulando, en la tabla 5.7 se resumen los resultados de la caracterización de pasividad del TRCTA, en función de la ubicación de la salida de temperatura regulada, para los dos estados inestables EE_2 y EE_4 . A partir de estos resultados se pueden establecer los criterios para elegir la ubicación del sensor de temperatura en uno de los tanques, dependiendo del estado a controlar.

Tabla 5.7. Caracterización de la pasividad del TRCTA en función del grado relativo de sistema y su dinámica cero.

| Temperatura de salida regulada | Dinámica cero | Pasividad |
|---|---|------------------|
| Estado estacionario EE_2 (inestable a lazo abierto) | | |
| η_1 | El TRCTA tiene tres puntos de equilibrio, uno estable y dos inestables, ver tabla 5.1 | No |
| η_2 | El TRCTA tiene a EE_2 como punto de equilibrio único y estable, ver tabla 5.2 | Si |
| η_3 | El TRCTA tiene a EE_2 como punto de equilibrio único y estable, ver tabla 5.3 | Si |
| Estado estacionario EE_4 (inestable a lazo abierto) | | |
| η_1 | El TRCTA tiene a EE_4 como punto de equilibrio único y estable, ver tabla 5.4 | Si |
| η_2 | El TRCTA tiene tres puntos de equilibrio, dos estables y uno inestable, ver tabla 5.5 | No |
| η_3 | El TRCTA tiene tres puntos de equilibrio, dos estables y uno inestable, ver tabla 5.6 | No |

CAPÍTULO 6

Control robusto estabilizante de temperatura para el TRCTA

Con base en el modelo no lineal para tres RCTA's en serie con retromezclado y en los resultados de la caracterización de pasividad para este sistema, en este capítulo se diseña un controlador estabilizante de temperatura accionado por retro alimentación de estados que estabiliza robustamente al conjunto de tanques. El diseño incluye la ley de control no lineal y el criterio para elegir el sensor en uno de los RCTA. Por último se recupera el comportamiento del controlador no lineal con retro de estados mediante un control de temperatura por retroalimentación de salidas que se construye con base en un modelo lineal simplificado que se confecciona de acuerdo a propiedades de pasividad y observabilidad del conjunto de tanques que aproximan al reactor tubular.

6.1 Control pasivo no lineal por retro alimentación de estados para el TRCTA

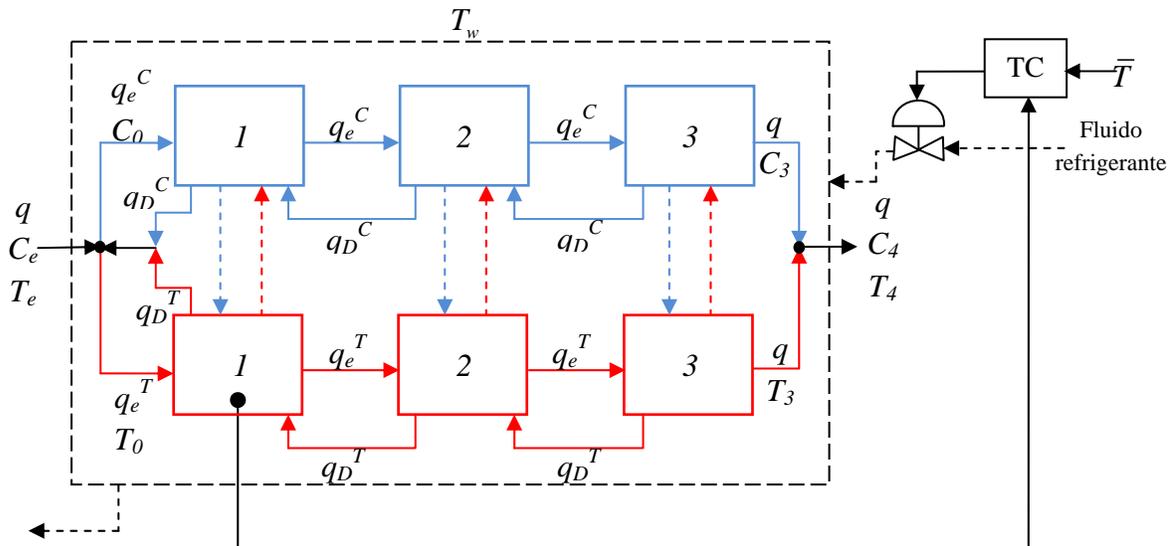


Figura 6.1. Diagrama del esquema de control para tres reactores en serie con retromezclado (caso III).

A partir de las conclusiones obtenidas de la caracterización de pasividad y con base en el modelo no lineal del conjunto de tanques, se diseñará un controlador pasivo no lineal de temperatura accionado por retro alimentación de estados, con una entrada de control (η_w), una

variable medida (η_1 , η_2 , o η_3) y una salida regulada (η_1 , η_2 , o η_3), ver el esquema del control propuesto en la figura 6.1. Dicho controlador tiene como objetivo garantizar que el estado estacionario (inestable a lazo abierto) EE2 o EE4 pueda mantenerse estable a lo largo del TRCTA.

Para el diseño del controlador definiremos el error de regulación de la temperatura como:

$$e = (\eta_i - \bar{\eta}_i) \quad (6.1)$$

En donde: el valor de i va a depender del tanque de medición seleccionado y $\bar{\eta}_i$ va a ser el valor de referencia deseado en la salida regulada.

Se quiere que el error de regulación tenga la siguiente dinámica [45], [46]:

$$\dot{e} + \kappa_c e = 0 \quad (6.2)$$

Como se trata de un control por regulación se tiene que $\dot{\bar{\eta}}_i = 0$, por lo tanto

$$\dot{\eta}_i = -\kappa_c (\eta_i - \bar{\eta}_i) \quad (6.3)$$

Sustituyendo la dinámica anterior en la dinámica del Caso III, dependiendo del tanque de medición seleccionado para aplicar el control, se pueden obtener las siguientes leyes de control

Ley de control para el TRCTA con la temperatura del primer reactor como salida regulada

$$\eta_w = \frac{-\kappa_c (\eta_1 - \bar{\eta}_1) - A_T (\eta_2 - \eta_1) + B (\eta_1 - \eta_e) - \phi \beta r (c_1, \eta_1) + \delta \eta_1}{\delta} \quad (6.4)$$

Ley de control para el TRCTA con la temperatura del segundo reactor como salida regulada

$$\eta_w = \frac{-\kappa_c (\eta_2 - \bar{\eta}_2) - A_T (\eta_3 - 2\eta_2 + \eta_1) + B (\eta_2 - \eta_1) - \phi \beta r (c_2, \eta_2) + \delta \eta_2}{\delta} \quad (6.5)$$

Ley de control para el TRCTA con la temperatura del tercer reactor como salida regulada

$$\eta_w = \frac{-\kappa_c (\eta_3 - \bar{\eta}_3) - A_T (\eta_2 - \eta_3) + B (\eta_3 - \eta_2) - \phi \beta r(c_3, \eta_3) + \delta \eta_3}{\delta} \quad (6.6)$$

En donde $A_T = N^2 / P e^T$, $B = NQ$, $N = 3$, $r(c_i, \eta_i) = c_i \exp[\gamma(\eta_i - 1)/\eta_i]$. κ_c es la ganancia del controlador y se le asignará un valor siguiendo las guías de sintonización descritas en la sección 6.2, tomando en cuenta un compromiso adecuado entre la velocidad de respuesta y la robustez del controlador.

6.1.1 Comportamiento a lazo cerrado con control por retroalimentación de estados para estabilizar a EE2 en el TRCTA

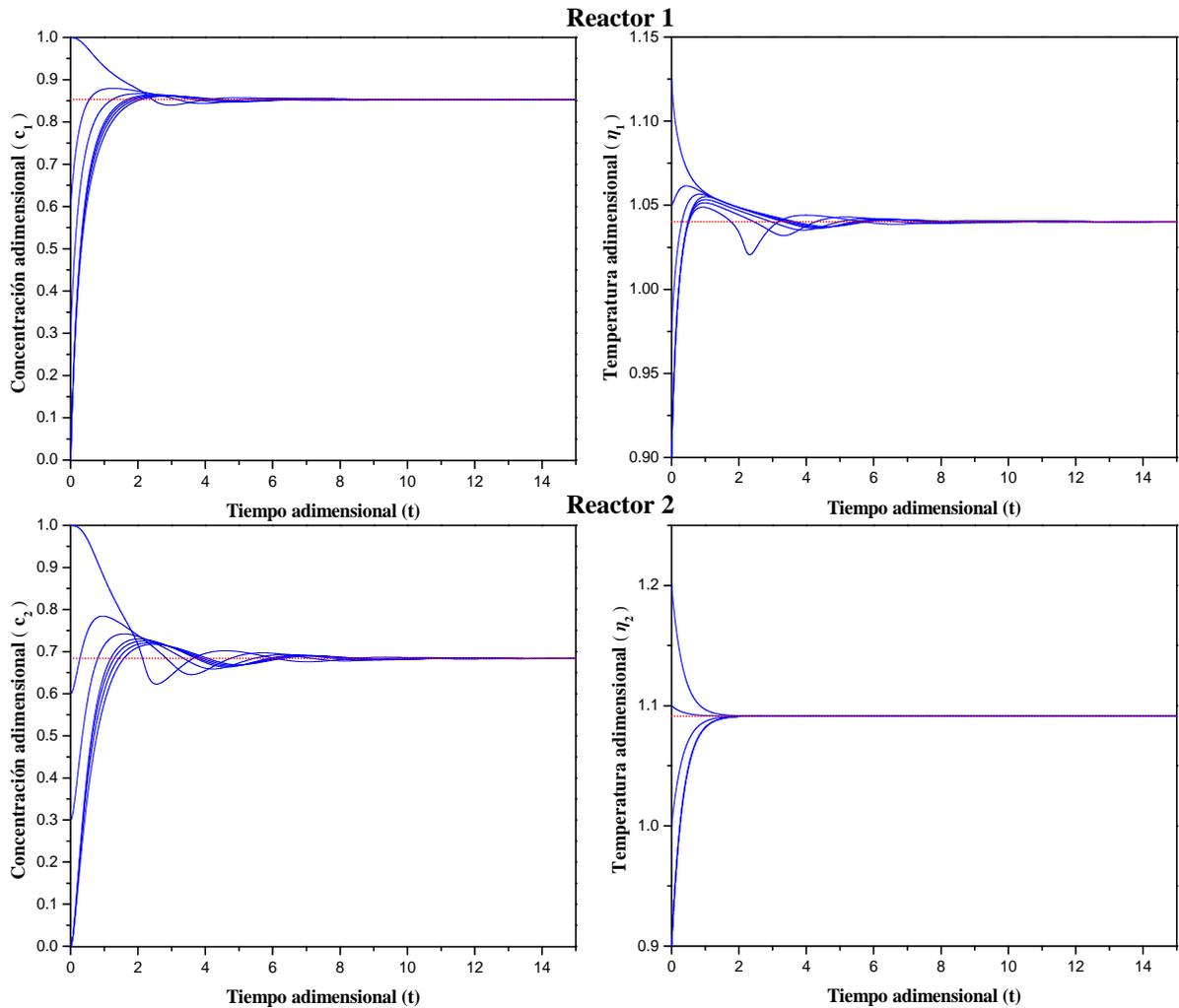


Figura 6.2. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control no lineal de temperatura por retro alimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en el segundo reactor para estabilizar EE2.

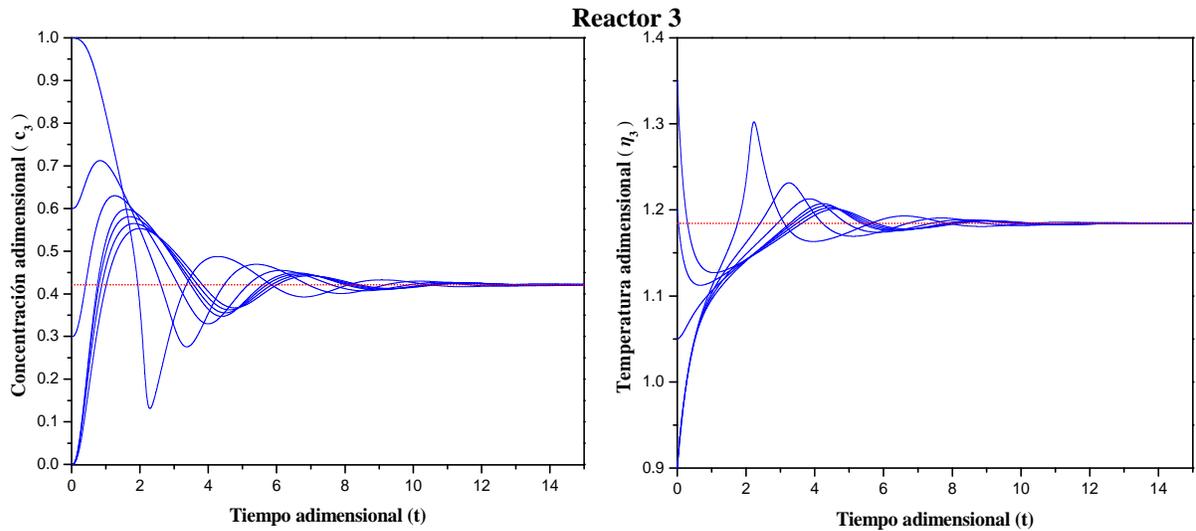


Figura 6.2 (continuación). Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control no lineal de temperatura por retro alimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en el segundo reactor para estabilizar EE2.

En la tabla 5.7 del capítulo anterior se concluyó que el conjunto de tanques es pasivo vía retroalimentación de estados, teniendo a EE2 como punto de equilibrio único y estable, si se regulaba la temperatura del segundo o del tercer reactor. De acuerdo a lo anterior y tomando en cuenta las leyes de control definidas en (6.5) y (6.6) con un valor de $\kappa_c = 3.0$ (tres veces más rápida que el tiempo de residencia del TRCTA), en las figuras 6.2 y 6.3 se muestra el comportamiento dinámico a lazo cerrado del TRCTA aplicando un control de temperatura en el segundo reactor y tercer reactor respectivamente. En dichas figuras se observa como EE2 se vuelve global y asintóticamente estable en cada uno de los reactores.

Al comparar las figuras 6.2 y 6.3 (obtenidas con las mismas condiciones iniciales) podemos decir que el control en el tercer reactor es mejor, ya que es dos veces más rápido que un control en el segundo reactor, teniendo un tiempo de asentamiento de 5 y 10 respectivamente. Esto a pesar de que los esfuerzos de control en cada situación son similares como se puede ver en la figura 6.4, en donde se muestra el comportamiento de la entrada de control (temperatura de la chaqueta de enfriamiento) para cuando se regula la temperatura del segundo y del tercer reactor.

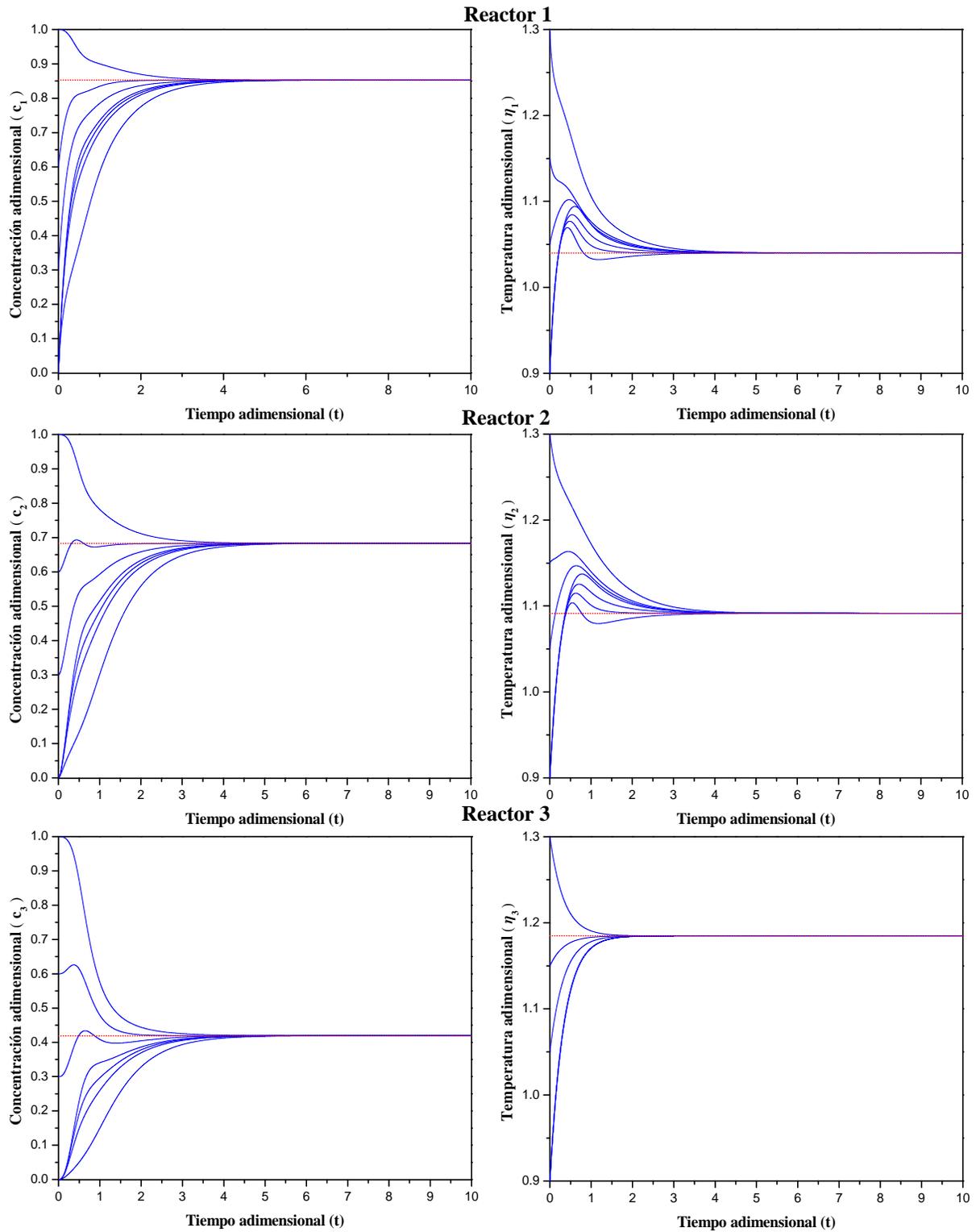


Figura 6.3. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control no lineal de temperatura por retro alimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en el tercer reactor para estabilizar EE2.

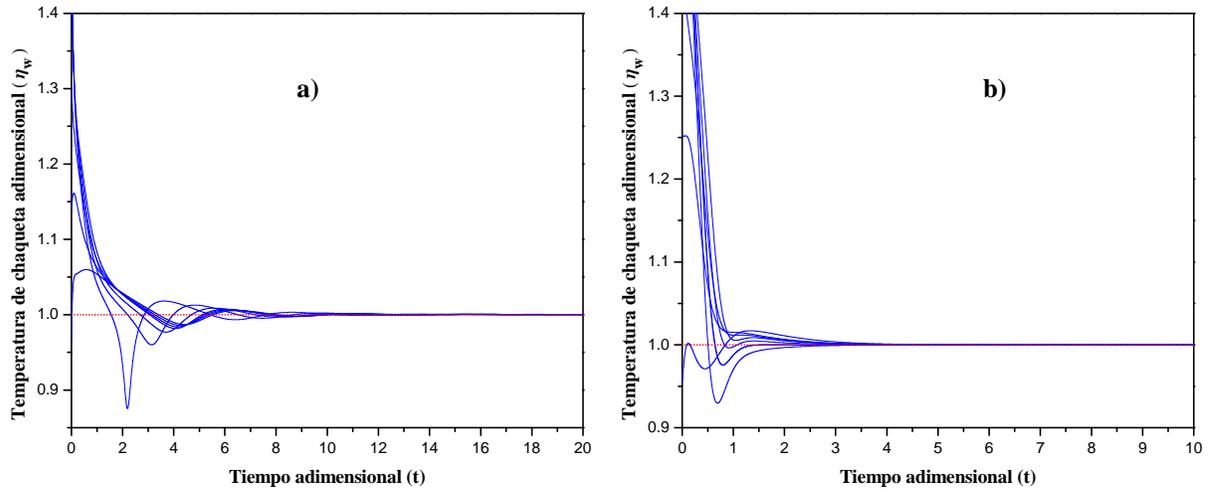


Figura 6.4. Comportamiento dinámico de la temperatura de chaqueta cuando se regula por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$): a) la temperatura del segundo reactor, b) la temperatura del tercer reactor, para estabilizar EE2.

6.1.2 Comportamiento a lazo cerrado con un control por retroalimentación de estados para estabilizar a EE4 en el TRCTA

En la tabla 5.7 del capítulo anterior se concluyó que el conjunto de tanques es pasivo vía retroalimentación de estados, teniendo a EE4 como punto de equilibrio único y estable, si se regulaba la temperatura del primer reactor. De acuerdo a lo anterior, tomando en cuenta la ley de control definida en (6.4) y con un valor de $\kappa_c = 3.0$, en la figura 6.5 se muestra el comportamiento dinámico a lazo cerrado del TRCTA aplicando un control de temperatura en el primer reactor. En esta figura se observa que, independientemente de las condiciones iniciales, se consigue estabilizar (en un tiempo aproximado de 2) a EE4 en cada uno de los reactores.

En la figura 6.6 se muestra la acción de control necesaria para llevar la salida (en este caso la temperatura del primer reactor) a su valor deseado. Si comparamos este esfuerzo de control con los necesarios para estabilizar a EE2, ver figura 6.4, el esfuerzo para estabilizar a EE4 resulta ser mayor debido a que EE4 es el punto de equilibrio de más alta temperatura en el TRCTA, ver tabla 4.3.

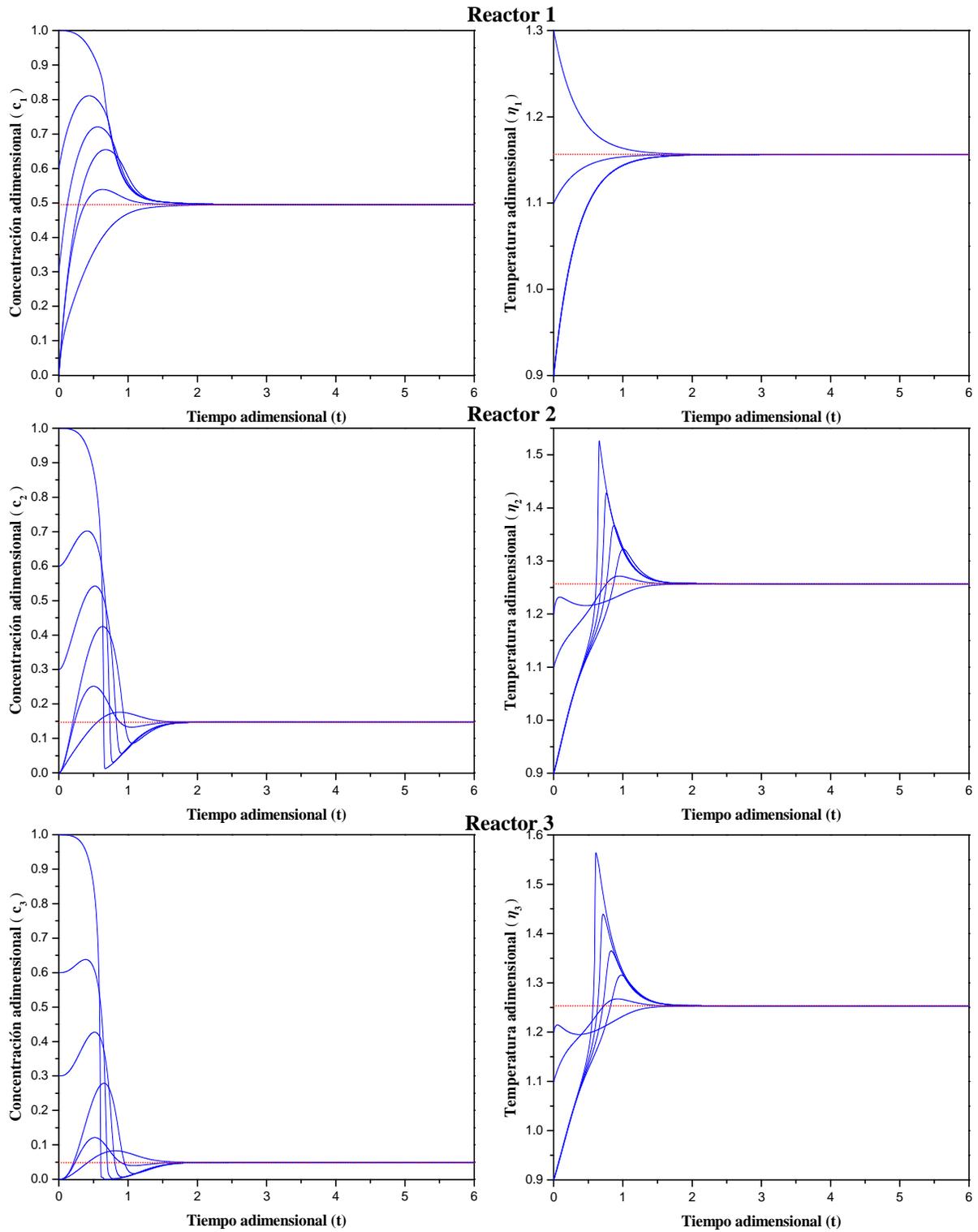


Figura 6.5. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control no lineal de temperatura por retro alimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en el primer reactor para estabilizar EE4.

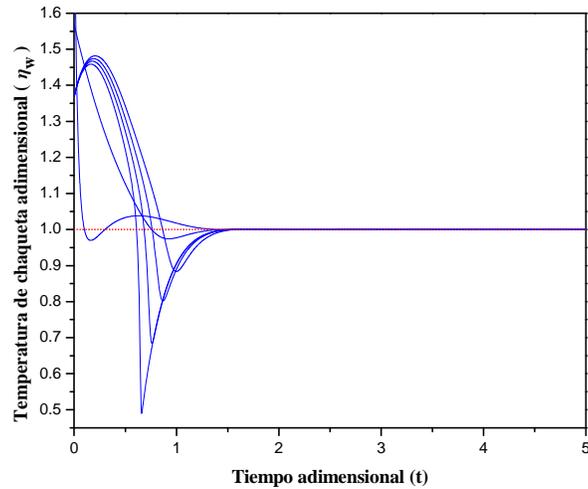


Figura 6.6. Comportamiento dinámico de la temperatura de chaqueta cuando se regula por, retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$), la temperatura del primer reactor para estabilizar EE4.

6.2 Control de pasivo por retro alimentación de salidas para el TRCTA

El controlador no lineal por retro alimentación de estados es un controlador ideal, ya que no puede ser implementado debido a que depende estrechamente del modelo del reactor, de que se conozca la velocidad de reacción y la concentración en línea [46]. En esta sección se recuperará el comportamiento del controlador ideal (apoyado en un modelo detallado) mediante un controlador pasivo por retro alimentación de salidas (apoyado en un modelo lineal y simplificado). El diseño de este controlador se basa en acoplar un observador de orden reducido con el controlador ideal; en la práctica es bien sabido que este tipo de observadores poseen mejor margen de estabilidad (mayor tolerancia a errores de modelado) que sus contrapartes, los observadores de orden completo [47].

A continuación siguiendo la metodología descrita en los trabajos de J. Alvarez-Ramirez, J. Álvarez y A. Morales (2002) [48], P. González y J. Álvarez (2005) [49], E. Castellanos-Sahagún, J. Álvarez-Ramírez, J. Álvarez, (2005) [50] y J. Díaz Salgado, J. Álvarez *et. al* (2011) [30], se diseñará un modelo simplificado (acorde a las propiedades de pasividad y observabilidad) para el control por retro alimentación de salidas; buscando que dicho modelo sea lineal e independiente.

La dinámica de temperatura del reactor a controlar puede reescribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\dot{\eta}_i &= b_i + a\eta_w, & y = z = \eta_i \\ b_i &= \zeta_i(\mathbf{x}, u, \mathbf{d})\end{aligned}\quad (6.7)$$

En donde a es una aproximación al coeficiente de transferencia de calor y b_i es una entrada exógena que depende de la función ζ_i , que de acuerdo al reactor a controlar esta definida de la siguiente manera:

$$\zeta_1 = A_T(\bar{\eta}_2 - \eta_1) - B(\eta_1 - \eta_e) + \beta\phi r(c_1, \eta_1) - \delta\eta_1 - (a - \delta)\eta_w \quad (6.8)$$

$$\zeta_2 = A_T(\eta_3 - 2\eta_2 + \bar{\eta}_1) - B(\eta_2 - \bar{\eta}_1) + \beta\phi r(c_2, \eta_2) - \delta\eta_2 - (a - \delta)\eta_w \quad (6.9)$$

$$\zeta_3 = A_T(\eta_2 - \eta_3) - B(\eta_3 - \eta_2) + \beta\phi r(c_3, \eta_3) - \delta\eta_3 - (a - \delta)\eta_w \quad (6.10)$$

En donde $A_T = N^2 / Pe^T$, $B = NQ$, $N = 3$, $r(c_i, \eta_i) = c_i \exp[\gamma(\eta_i - 1)/\eta_i]$

Por lo que la expresión (6.7) tiene dos componentes: (i) Uno dinámico lineal: con estados \mathbf{x} , una entrada exógena b (no medible-observable), una salida y (medible), la entrada de control u , y una salida regulada z . (ii) Otro estático (ver expresiones 6.8-6.10) no lineal que genera a b con base a $(\mathbf{x}, u, \mathbf{d})$. Para el diseño del controlador por retroalimentación de salidas se dejará de lado este último componente. La solución para el par (η_i, b_i) da como resultado:

$$b_i = \dot{\eta}_i - a\eta_w \quad (6.11)$$

Lo que implica que el par (η_i, b_i) es únicamente determinado por $(\eta_i, \dot{\eta}_i, \eta_w)$, o lo que equivale a decir que es observable [30], [50].

Por construcción el grado relativo (gr) de (6.7) es igual al del modelo exacto, con respecto al par entrada (η_w)-salida (y) de control. La relación entre el grado relativo de este último par, en (6.7), con el par entrada exógena b - salida (y), es la siguiente: $gr(\eta_w, \eta_i) = gr(b, \eta_i) = 1$. Por lo tanto (6.7) cumple con la condición de concurrencia, que establece la existencia de solución al

problema de control robusto por retroalimentación de salidas basado en un modelo simplificado [30], [51].

A continuación se deduce el controlador pasivo por retroalimentación de salidas, entrelazando el diseño del observador de orden reducido y del control, tomando como base el modelo simplificado (6.7). Para ello el controlador no lineal por retroalimentación de estados (6.4-6.6) puede ser reescrito como sigue, dependiendo del tanque a controlar

$$\eta_w = -\left(\frac{\kappa_c (\eta_i - \bar{\eta}_i) + b_i}{a}\right) \quad (6.12)$$

Se debe de observar que si b_i es reemplazada por alguna de las funciones ζ_i (6.8-6.10) este controlador coincide con el controlador ideal (6.4-6.6), apoyado en un modelo detallado.

Dado que b_i es determinado por el par entrada (η_w)-salida (y), ver (6.11), b_i puede ser estimado vía un observador lineal de orden reducido como a continuación se muestra; definiendo el error de estimación de b_i como $\tilde{b}_i = b_i - \hat{b}_i$ y la dinámica de este error como $\dot{\tilde{b}}_i = -\omega \tilde{b}_i$, en donde \hat{b}_i es el estimado de b_i .

Si $\dot{\tilde{b}}_i \approx 0$ y $b_i = \dot{\eta}_i - a\eta_w$
 entonces la dinámica del error de estimación puede reescribirse como

$$\hat{b}_i = \omega \left[\dot{\eta}_i - (a\eta_w + \hat{b}_i) \right] \Rightarrow (\hat{b}_i - \omega\eta_i) = -\omega(\hat{b}_i - \omega\eta_i) - \omega^2\eta_i - \omega a\eta_w \quad (6.13)$$

introduciendo el siguiente cambio de variable $\chi_i = \hat{b}_i - \omega\eta_i$
 se obtiene el observador de orden reducido

$$\dot{\chi}_i = -\omega\chi_i - \omega(a\eta_w + \omega\eta_i), \quad \chi_i(0) = \chi_{i0}$$

Reemplazando en (6.12) a b_i por su valor estimado y combinando con el observador se obtienen, dependiendo del tanque de medición seleccionado, las siguientes leyes de control:

Ley de control para el TRCTA con la temperatura del primer reactor como salida regulada

$$\eta_w = -\left(\frac{\kappa_c (\eta_1 - \bar{\eta}_1) + \chi_1 + \omega \eta_1}{a}\right), \quad \dot{\chi}_1 = -\omega \chi_1 - \omega (a \eta_w + \omega \eta_1) \quad (6.14)$$

Ley de control para el TRCTA con la temperatura del segundo reactor como salida regulada

$$\eta_w = -\left(\frac{\kappa_c (\eta_2 - \bar{\eta}_2) + \chi_2 + \omega \eta_2}{a}\right), \quad \dot{\chi}_2 = -\omega \chi_2 - \omega (a \eta_w + \omega \eta_2) \quad (6.15)$$

Ley de control para el TRCTA con la temperatura del tercer reactor como salida regulada

$$\eta_w = -\left(\frac{\kappa_c (\eta_3 - \bar{\eta}_3) + \chi_3 + \omega \eta_3}{a}\right), \quad \dot{\chi}_3 = -\omega \chi_3 - \omega (a \eta_w + \omega \eta_3) \quad (6.16)$$

En donde κ_c y ω son las ganancias del controlador y del observador respectivamente, cuyos valores se determinarán teniendo en cuenta un compromiso adecuado entre la velocidad de respuesta y la robustez del controlador. Para ello se combinará el análisis de estabilidad del sistema a lazo cerrado con guías de sintonización utilizadas en la práctica industrial como a continuación se describe:

- Fijar la ganancia del controlador de manera conservadora, aproximadamente el inverso del tiempo de residencia del sistema: $\kappa_c \approx Q$.
- Fijar la ganancia del observador de 3 a 5 veces más rápida que el inverso del tiempo de residencia del sistema: $\omega \approx (3-5)Q$, dependiendo del nivel de ruido del instrumento de medición.
- Incrementar, gradual y proporcionalmente, la ganancia del observador (ω) hasta un valor último (ω^*) en donde la respuesta del controlador sea excesivamente oscilatoria. Dar marcha atrás y fijar el valor de la ganancia como: $\omega = \omega^*/(2-3)$.

- Sintonizar la ganancia del controlador, hacia arriba y hacia abajo, y seleccionar el valor que ofrezca una mejor respuesta.

Siguiendo los pasos anteriores se obtuvieron las siguientes ganancias:

$$\kappa_c = 3.0, \quad \omega = 18.0 \quad (6.17)$$

A continuación retomaremos los diferentes análisis que se hicieron en la sección 5.3 ahora aplicando un control por retro alimentación de salidas, buscando recuperar el comportamiento del control ideal.

6.2.1 Comportamiento a lazo cerrado con un control por retroalimentación de salidas para estabilizar a EE2 en el TRCTA

De la tabla 5.7 se concluyó que el conjunto de tanques es pasivo vía retroalimentación de estados, teniendo a EE2 como punto de equilibrio único y estable, si se regulaba la temperatura del segundo o del tercer reactor, esto quedó verificado en la sección 6.1.1. Tomando como base estas conclusiones y teniendo en cuenta las leyes de control definidas en (6.15) y (6.16) y las ganancias de (6.17); en las figuras 6.7 y 6.8 se muestra el comportamiento dinámico a lazo cerrado del TRCTA aplicando un control de temperatura por retroalimentación de salidas en el segundo y tercer reactor respectivamente, mientras que en la figura 6.9 se muestra el esfuerzo de control para el par de situaciones anteriores.

Al comparar las figuras 6.7 y 6.8 con las figuras 6.2 y 6.3 podemos ver que se logra recuperar el comportamiento del control ideal, ya que se consigue estabilizar a EE2 en cada uno de los reactores, además se puede observar que la respuesta del control por retroalimentación de salidas es aproximadamente 0.25 veces más lenta que la respuesta del control ideal. Lo anterior también queda de manifiesto al comparar los esfuerzos de control en cada caso, ver figuras 6.4 y 6.9.

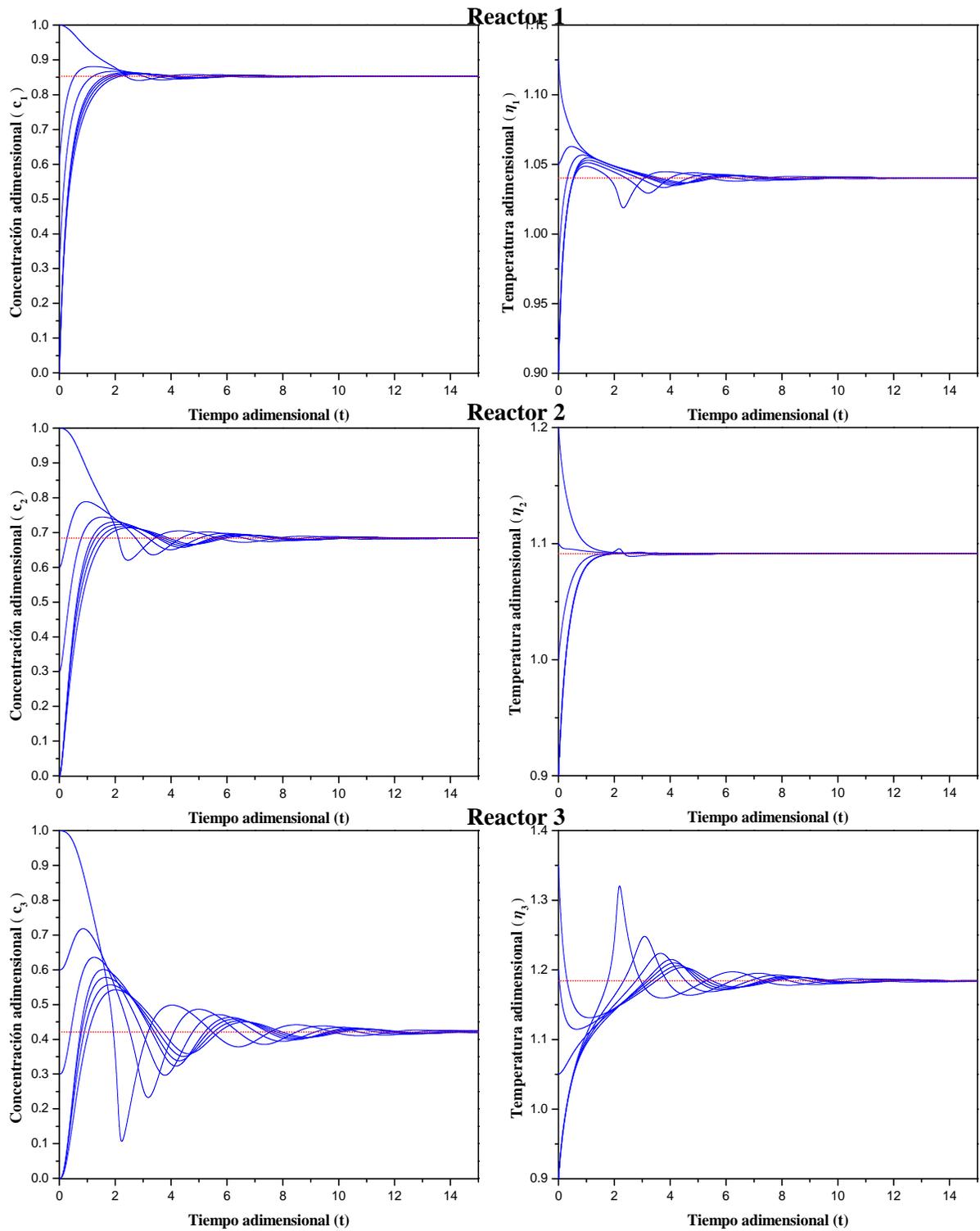


Figura 6.7. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control de temperatura por retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) en el segundo reactor para estabilizar EE2.

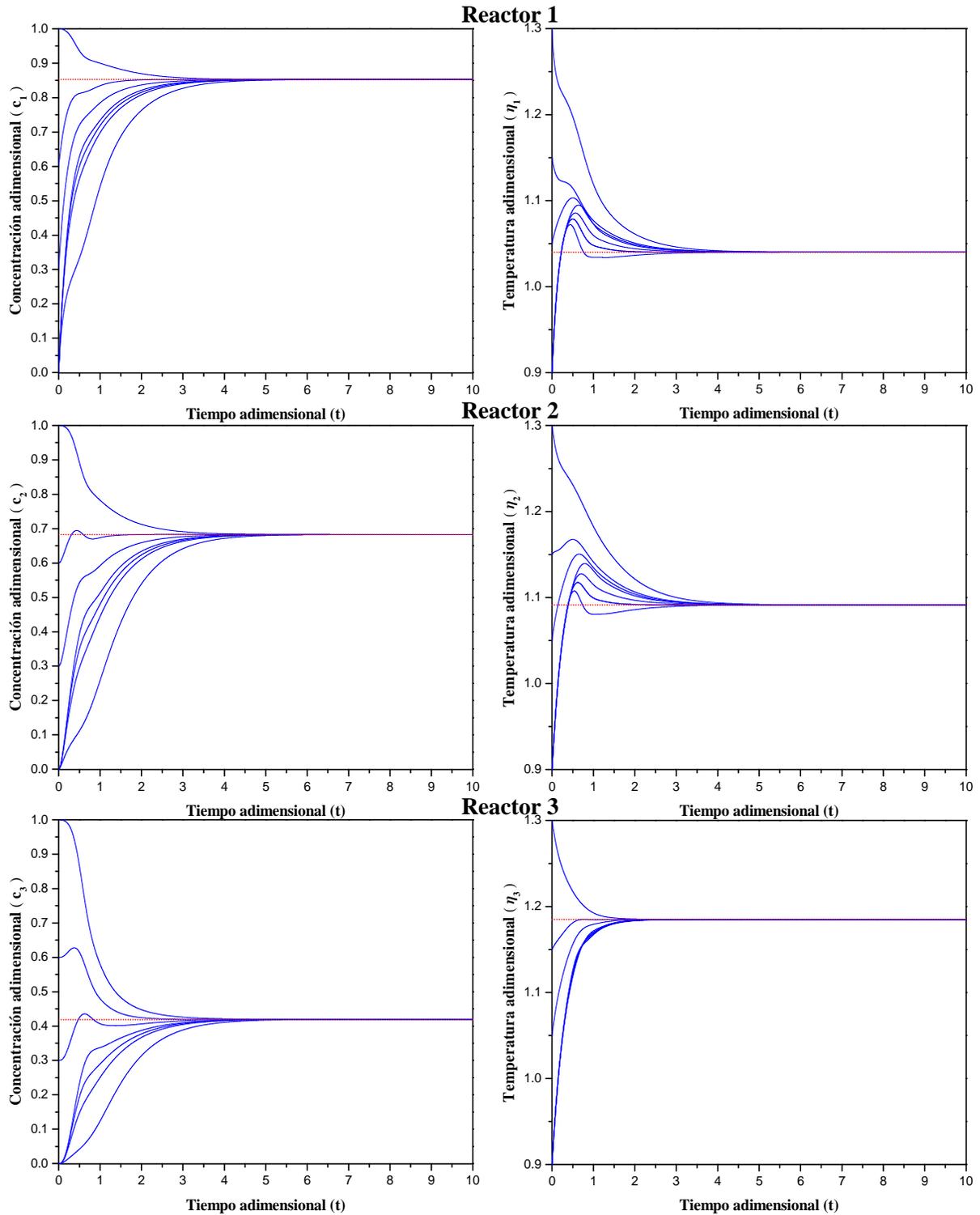


Figura 6.8. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control de temperatura por retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) en el tercer reactor para estabilizar EE2.

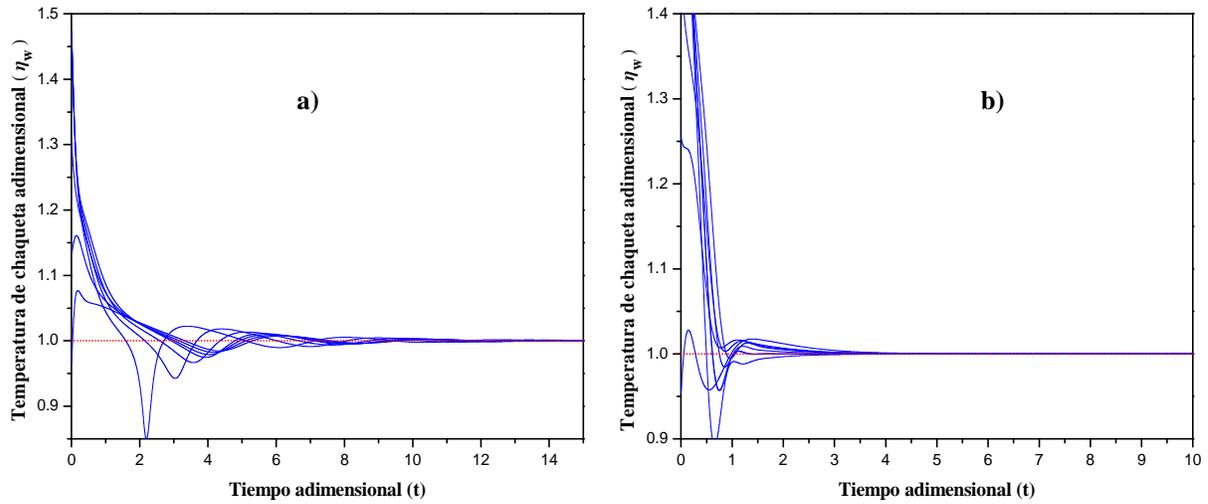


Figura 6.9. Comportamiento dinámico de la temperatura de chaqueta cuando se regula por retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$): a) la temperatura del segundo reactor, b) la temperatura del tercer reactor, para estabilizar EE2.

6.2.2 Comportamiento a lazo cerrado con un control por retroalimentación de salidas para estabilizar a EE4 en el TRCTA

De la tabla 5.7 se concluyó que el conjunto de tanques es pasivo vía retroalimentación de estados, teniendo a EE4 como punto de equilibrio único y estable, si se regulaba la temperatura del primer reactor, esto quedó demostrado en la sección 6.1.2. Teniendo como base estas conclusiones y tomando en cuenta la ley de control definida en (6.14), en la figura 6.10 se muestra el comportamiento dinámico a lazo cerrado del TRCTA aplicando un control de temperatura por retroalimentación de salidas en el primer reactor, mientras que en la figura 6.11 se muestra el esfuerzo de control.

Al comparar la figura 6.10 con la figura 6.5 podemos ver que se logra recuperar el comportamiento del control ideal, ya que se consigue estabilizar a EE4 en cada uno de los reactores, y al igual que en el caso anterior la respuesta del control por retroalimentación de salidas es aproximadamente 0.25 veces más lenta que la respuesta del control ideal. Lo anterior también queda de manifiesto al comparar los esfuerzos de control en cada caso, ver figuras 6.6 y 6.11.

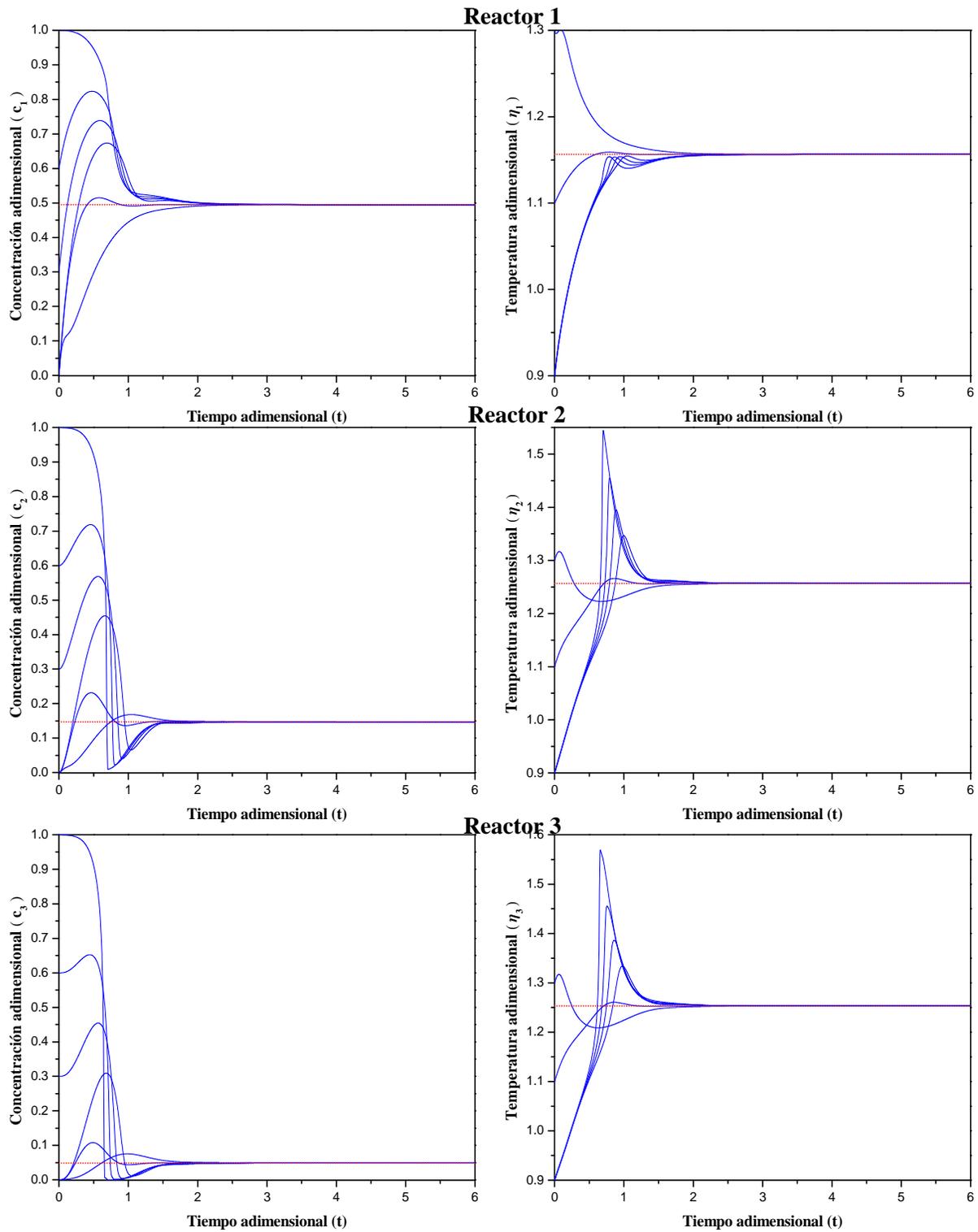


Figura 6.10. Comportamiento dinámico a lazo cerrado del caso III, con un control de temperatura por retro alimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) en el primer reactor para estabilizar EE4.

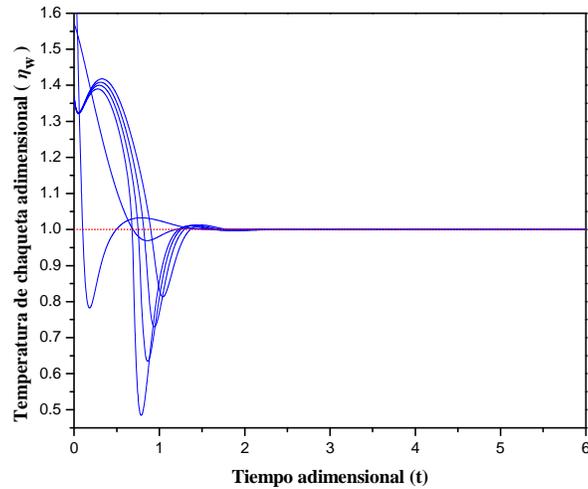


Figura 6.11. Comportamiento dinámico de la temperatura de chaqueta cuando se regula, por retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$), la temperatura del segundo reactor para estabilizar EE4.

En la práctica industrial el objetivo principal del diseño de un controlador, para un proceso continuo, es el rechazo a perturbaciones durante periodos prolongados de tiempo [1]. Por ello el comportamiento de un controlador debe ser evaluado más por su respuesta estacionaria en presencia de perturbaciones típicas en las entradas exógenas y errores de medición, por lo tanto a continuación se presentan los resultados de la evaluación de la robustez del controlador por retroalimentación de salidas para el TRCTA.

6.3 Comportamiento del control por retroalimentación de salidas en el TRCTA ante perturbaciones conocidas

Con el fin de observar la robustez del controlador, el sistema a lazo cerrado fue sujeto a perturbaciones oscilatorias tanto en la concentración de entrada (con una función coseno de 0.02 de amplitud), como en la temperatura de entrada (con una función seno de 0.006 ($\approx 2K$) de amplitud), siendo estas situaciones un caso extremo de operación del sistema:

$$c_e = 0.98 + 0.02 \cos(4\pi t), \quad \eta_e = 1.0 + 0.006 \sin(4\pi t) \quad (6.18)$$

El comportamiento del TRCTA a lazo cerrado ante estas perturbaciones se muestra en las siguientes figuras:

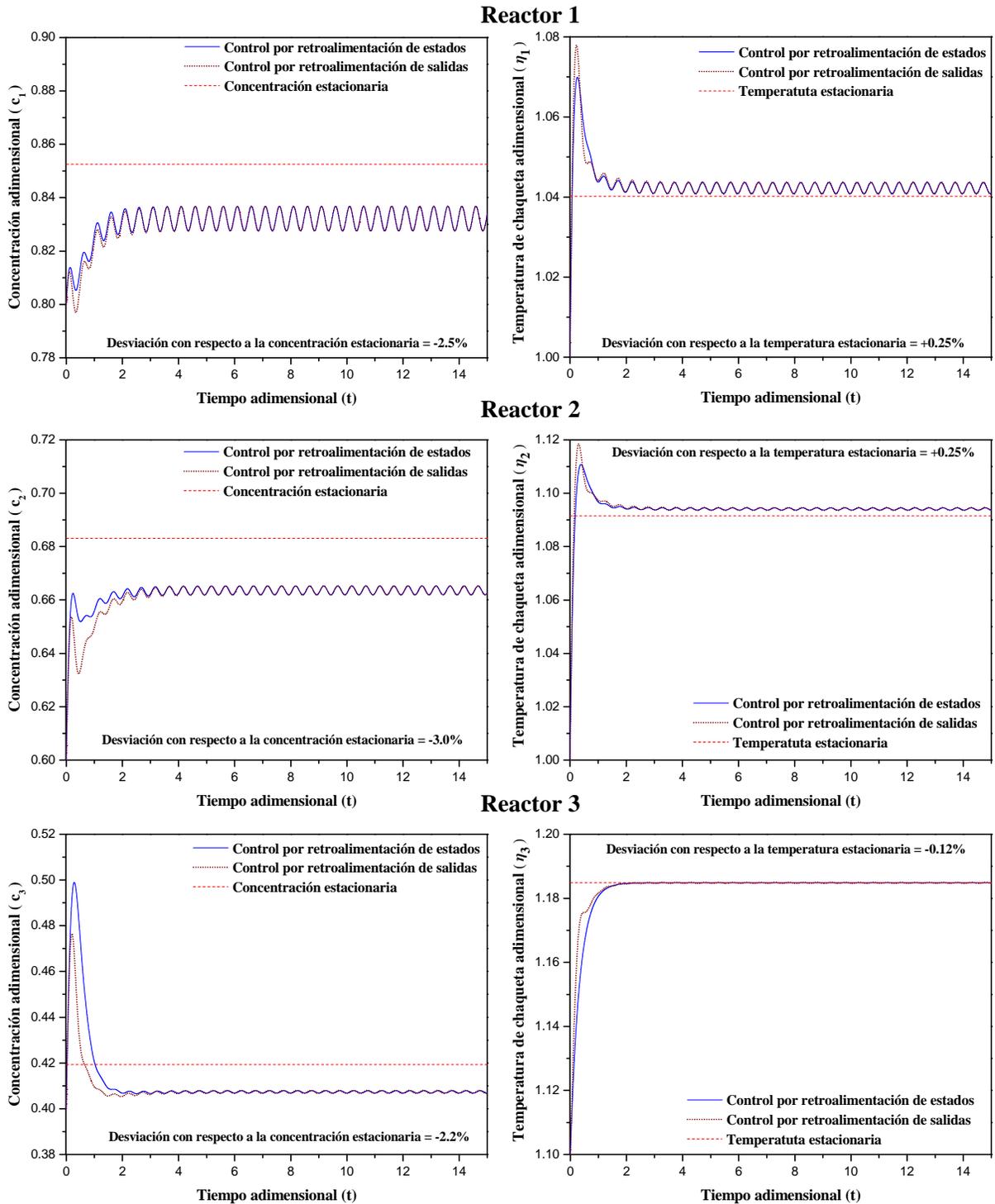


Figura 6.12. Comportamiento robusto a lazo cerrado del TRCTA con un control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (→) y retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) (···) en el tercer reactor para estabilizar a EE2.

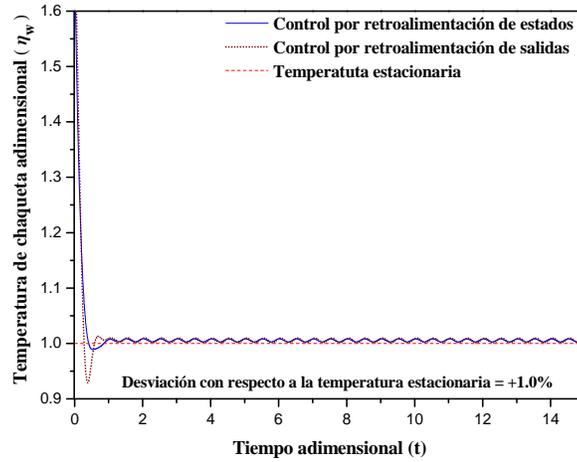


Figura 6.13. Comportamiento dinámico robusto de la temperatura de chaqueta cuando se regula por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (—) y retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0, \omega = 18.0$) (---), la temperatura en el tercer reactor para estabilizar a EE2.

El comportamiento dinámico a lazo cerrado del TRCTA se muestra en las figuras 6.12 y 6.14 para cuando se regula la temperatura del tercer reactor (para estabilizar a EE2) y del primer reactor (para estabilizar a EE4), respectivamente, aplicando tanto el control por retroalimentación de estados como el de retroalimentación de salidas. Ambos controladores, además de tener respuestas similares, alcanzan estabilidad en el sentido práctico sobre los estados estacionarios inestables a lazo abierto (EE2y EE4). En las figuras 6.12 y 6.14 también se nota que el par de controladores ofrecen concentraciones y temperaturas con pequeñas desviaciones (*offsets*) con respecto al estado estacionario, que para cuestiones prácticas pueden considerarse despreciables; dichas desviaciones son mayores cuando se regula el estado EE2 comparado con el EE4.

El principal efecto al rechazo de las perturbaciones está en el esfuerzo de control ya que al comparar las figuras 6.13 y 6.15, en donde se muestran los esfuerzos para estabilizar a EE2 y EE4 respectivamente, se observa que este último esfuerzo de control es mayor, lo cual va en concordancia con el hecho de que las desviaciones en la concentración y en la temperatura para cuando se regula EE4 son pequeñas; además no debemos olvidar que este estado es de mayor energía que EE2 por lo que se necesita un mayor esfuerzo de control para estabilizarlo.

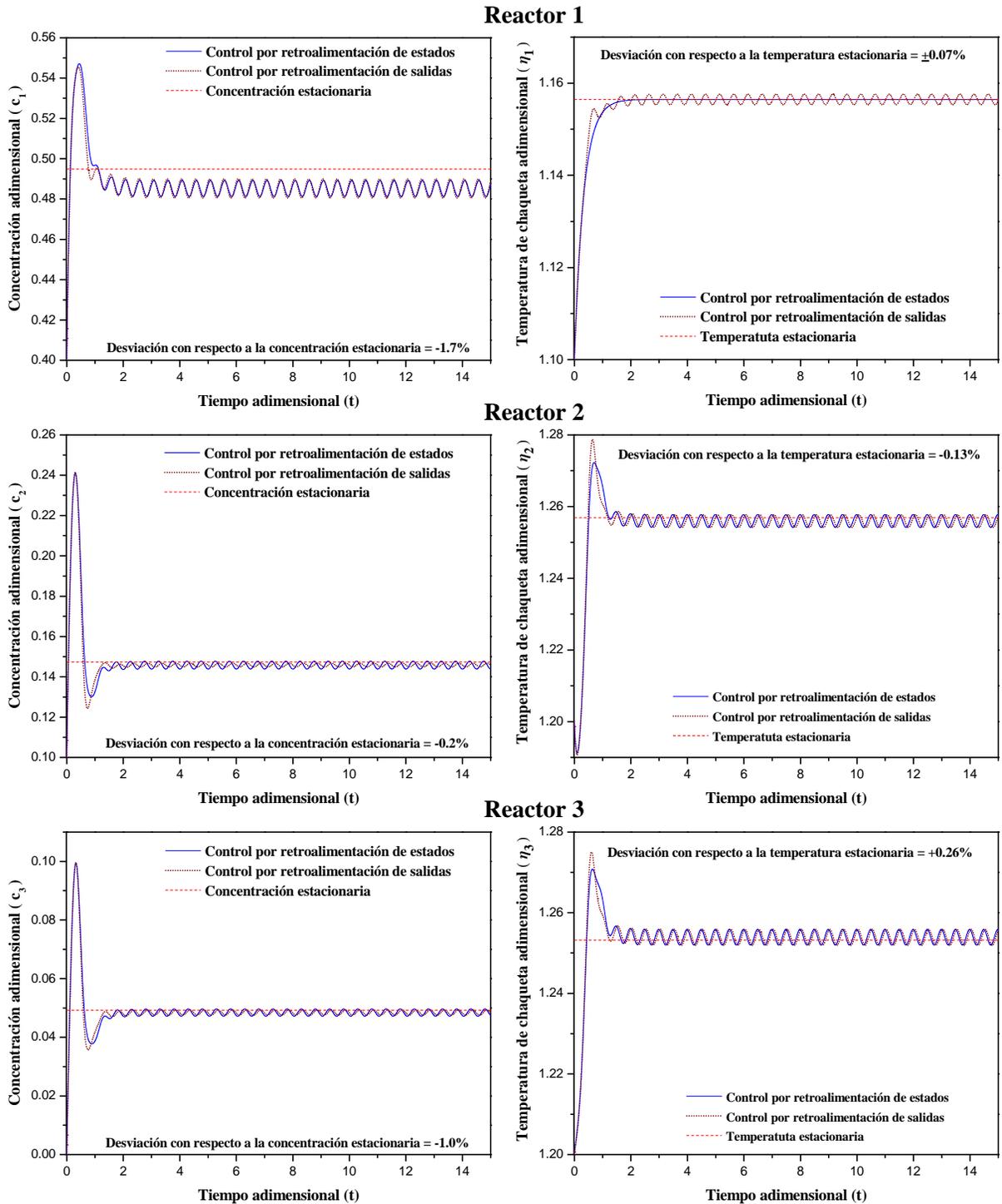


Figura 6.14. Comportamiento robusto a lazo cerrado del TRCTA con un control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (—) y retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) (⋯) en el primer reactor para estabilizar a EE4.

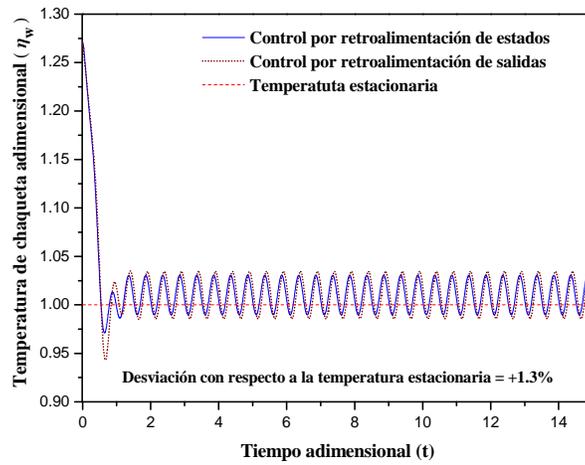


Figura 6.15. Comportamiento dinámico robusto de la temperatura de chaqueta cuando se regula por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (—) y retroalimentación de salidas ($\kappa_c = 3.0$, $\omega = 18.0$) (⋯), la temperatura en el primer reactor para estabilizar a EE4.

Con las pruebas anteriores se corroboran: la estabilidad global del par de estados, EE2 y EE4, al regular la temperatura del tercer y del primer tanque respectivamente, la recuperación del comportamiento del control ideal por el de retroalimentación de salidas; así como se manifiesta la robustez de éste último a través del rechazo a las perturbaciones introducidas.

Capítulo 7

Control PI del reactor tubular

En este capítulo nos enfocamos a la solución del problema de control para el RT a partir de los diferentes resultados obtenidos de la aproximación con tanques. Primero se definen los criterios de ubicación de sensores con base en el estudio que se realizó a tres RCTA's en serie con retromezclado. Luego se controla el RT con un control no lineal pasivo accionado por retroalimentación de estados que, como se demostró en el capítulo anterior, logró estabilizar a la aproximación con tres tanques. Finalmente con un control PI se recupera el comportamiento del control ideal aplicado al RT. Para probar el diseño de los controladores se eligió estabilizar a los dos pares de perfiles (concentración-temperatura) inestables del RT, uno de los perfiles de temperatura es isotónico mientras que el otro presenta un punto caliente, abarcando así en el trabajo los comportamiento típicos del RT.

7.1 Criterios de ubicación de sensores en el reactor tubular

En el capítulo anterior se probó la veracidad de los criterios obtenidos por la caracterización de la pasividad del TRCTA, y establecidos para elegir la ubicación del sensor de temperatura en uno de los tanques, dependiendo del estado a controlar en el tren de reactores (EE2 o EE4). Debemos recordar que con el conjunto de estos estados se puede aproximar el comportamiento de los dos pares de perfiles inestables (concentración-temperatura) del RT P2 y P4, ver figuras 4.8 y 4.9, además en el capítulo 3 se demostró que existe una correspondencia entre los nodos internos de la discretización del RT y los tanques con retromezclado. Por lo tanto es posible que los criterios de selección de tanque de medición se puedan traducir a una posición espacial en el RT, y así establecer un criterio de ubicación de sensores para el control de este reactor.

En la figura 7.1 se muestra la aproximación al perfil de temperatura P2 (perfil isotónico) del reactor tubular, en esta aproximación podemos distinguir tres zonas: la zona 1 a la entrada del reactor en donde comienza la reacción siendo suaves los cambios de temperatura, la zona 2 es una región dominada por el calor de reacción en donde ocurren los cambios más importantes de temperatura y la zona 3 (esta se puede notar por el cambio de signo en la pendiente de la

curva) en donde ocurre un fenómeno de atenuación dado que empieza a cobrar importancia el transporte de calor hacia la chaqueta de enfriamiento.

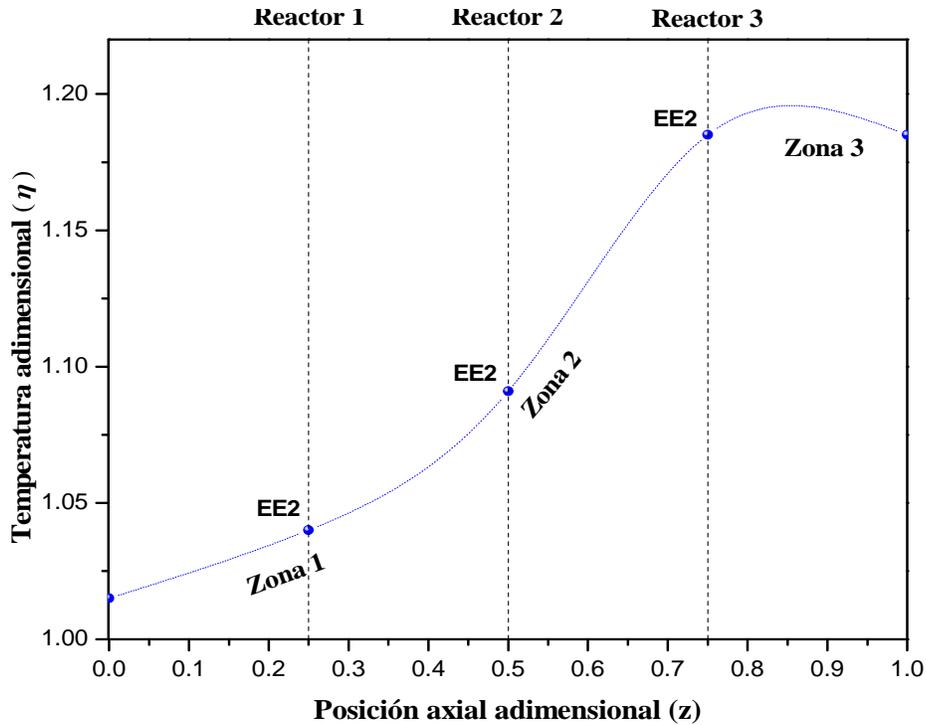


Figura 7.1. Reconstrucción del perfil de temperatura isotónico del reactor tubular, y traducción de los criterios de selección de tanque a una posición espacial.

Con el análisis de pasividad se concluyó que para poder estabilizar al estado estacionario EE2 en el TRCTA se debía de controlar la temperatura del segundo o tercer reactor. Trasladando este criterio de selección de tanque a una posición espacial, ver figura 7.1, podemos decir que para poder estabilizar en el reactor tubular un perfil de temperatura isotónico se deben colocar los sensores en la zona 2, preferentemente en la parte cercana a la zona 3.

En la figura 7.2 se muestra la aproximación al perfil de temperatura P4 (perfil con punto caliente) del RT, en esta aproximación podemos también distinguir tres zonas: la zona 1 dominada por el calor de reacción dejando en segundo plano el transporte de energía hacia la chaqueta, la zona 2 es ahora la región en donde ocurre un fenómeno de atenuación dado que empieza a cobrar importancia el transporte de calor hacia la chaqueta de enfriamiento (es esta zona donde la que la temperatura llega a su máximo), y la zona 3 (más amplia que en el perfil

anterior) dominada por transferencia de energía hacia la chaqueta de enfriamiento dado que la reacción ha perdido fuerza debido al agotamiento del reactivo.

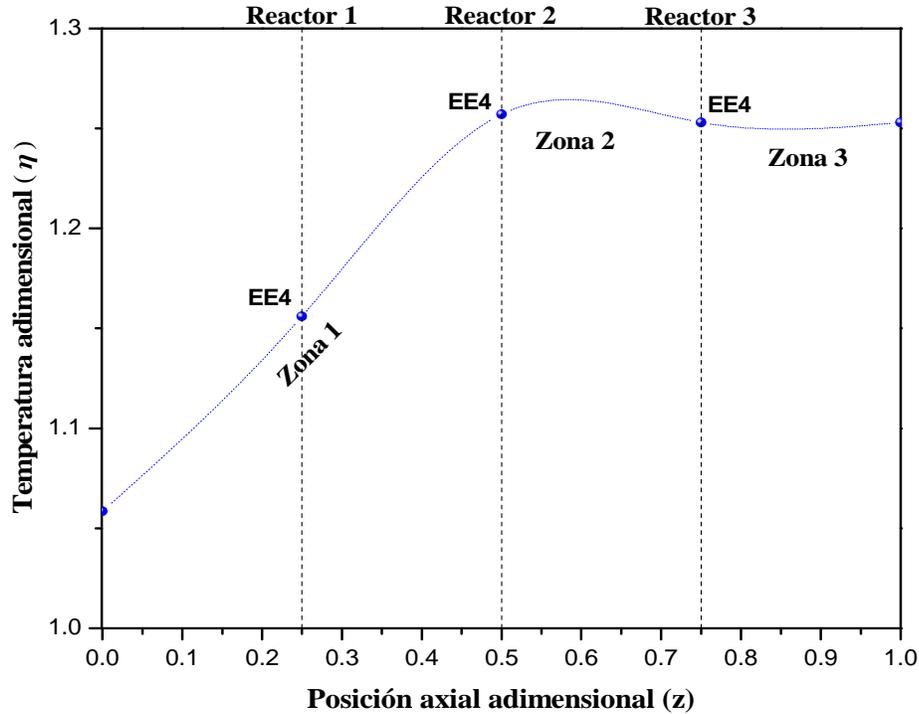


Figura 7.2. Reconstrucción del perfil de temperatura con punto caliente, y traducción de los criterios de selección de tanque a una posición espacial.

Con el análisis de pasividad se determinó que para poder estabilizar al estado estacionario EE4 en el TRCTA se debía de controlar la temperatura del primer reactor. Trasladando estos criterios de selección de tanque a una posición espacial, ver figura 7.2, podemos decir que para poder estabilizar en el reactor tubular un perfil de temperatura con punto caliente se deben colocar los sensores en la zona 1, antes del punto caliente.

Estos criterios de ubicación de sensores, para la estabilización de los dos tipos de perfiles, coinciden con diferentes trabajos reportados en la literatura como los de Kumar y Seinfeld (1978) [52], Harris et al. (1980) [53], Alvarez et al. (1981) [54] en los cuales se utilizan criterios de optimización basados en los erros de la matriz de covarianza de los filtros de Kalman; o con trabajos más recientes como los de Van der Berg et al. (2000) [55], en donde se definen criterios basados en la observabilidad del Gramniano del sistema o Singh y Hahn

(2005) [56] en donde determinan la ubicación de los sensores basados en la observabilidad de las matrices de covarianza. Todos estos trabajos coinciden con el hecho de que para estimar (con una buena aproximación) y estabilizar un perfil con punto caliente conviene colocar sensores en la zona adyacente a dicho punto [57], preferentemente antes, mientras que para perfiles isotónicos conviene colocar sensores en la parte superior de este perfil [7], aunque tiene prácticamente los mismos resultados si se colocan sensores en una zona cercana a esta parte de la curva de temperatura. En las siguientes secciones validaremos los criterios definidos en este trabajo de tesis.

7.2 Control pasivo no lineal por retro alimentación de estados para el reactor tubular

Con base en los criterios de ubicación de sensores y a partir del modelo adimensional discretizado del RT, se diseñará un controlador pasivo de temperatura accionado por retroalimentación de estados, con una entrada de control (η_w), una variable medida (η_i) y una salida regulada (η_i). Dicho controlador tiene como objetivo garantizar la estabilidad del par de perfiles (concentración-temperatura) P2 o P4, según sea el caso, a lo largo del RT.

La ley de control para este reactor está definida de la siguiente manera:

$$\eta_w = \frac{-\kappa_c (\eta_i - \bar{\eta}_i) - \left(\frac{N^2}{Pe^T} \right) (\eta_{i+1} - 2\eta_i + \eta_{i-1}) + N (\eta_i - \eta_{i-1}) - \phi \beta r(c_i, \eta_i) + \delta \eta_i}{\delta} \quad (7.1)$$

En donde N es el número de puntos de discretización, el subíndice i señala el punto de discretización (asociado con una posición axial) en donde se va a colocar el sensor y κ_c es la ganancia del controlador. Recordemos que el modelo de RT se discretizó en el espacio usando diferencias finitas, convirtiendo al modelo original en un conjunto de $2 \times N$ EDO no lineales. En este trabajo se eligieron 100 puntos de discretización para las simulaciones numéricas de los esquemas de control propuestos que a continuación se describen.

7.2.1 Control para estabilizar al par de perfiles, concentración-temperatura, P2 (perfil de temperatura isotónico)

Tomando en cuenta los criterios de ubicación de sensores, el control de temperatura es propuesto en $z = 0.75$ y utilizando la misma ganancia del controlador que se determinó para la

aproximación en tanques del RT $\kappa_c = 3.0$, ver sección 6.2. Tomando en cuenta lo anterior en la figura 7.3 se observa como se estabiliza la temperatura y concentración a la salida del reactor regulando la temperatura de la chaqueta de enfriamiento, cuyo comportamiento también se muestra en esta figura. En la figura 7.4 a) se muestra la evolución en el tiempo de los perfiles de concentración y temperatura del reactor tubular, se puede notar como en tiempos mayores a 2.5 el reactor ya alcanza su perfil estacionario, esto se probó con un perfil inicial lejos del deseado.

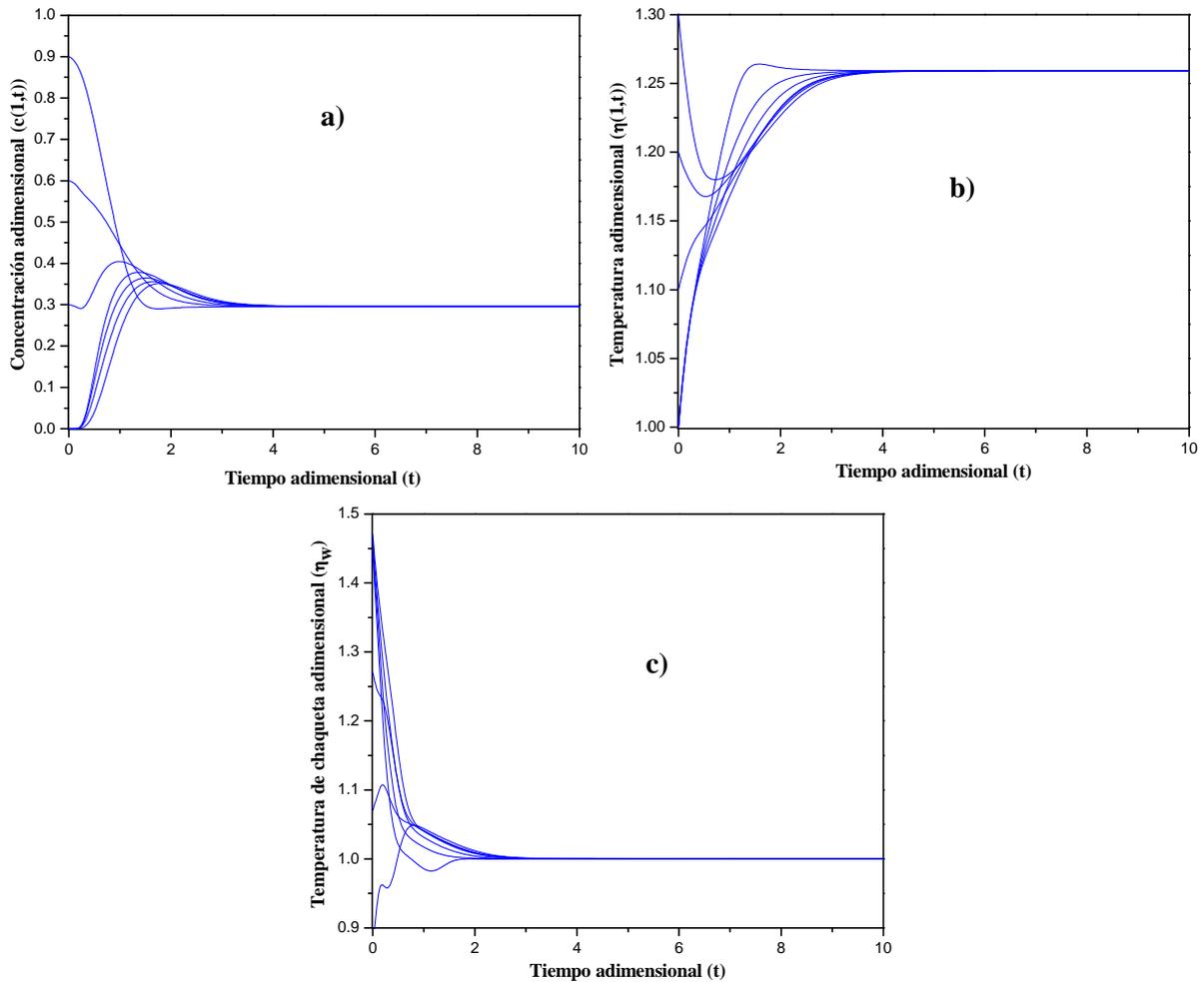


Figura 7.3. a), b) Dinámica a lazo cerrado de la concentración y temperatura a la salida del RT ($z=1$), c) variable de control. Control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en $z=0.75$, perfil isotónico.

7.2.2 Control para estabilizar al par de perfiles, concentración-temperatura, P4 (perfil de temperatura con punto caliente)

Para este caso el control de temperatura es propuesto con la localización del sensor en $z = 0.25$, y al igual que en la sección anterior la ganancia del controlador se fijó en $\kappa_c = 3.0$. En la figura 7.4 b) se muestra la evolución en el tiempo de los perfiles de concentración y temperatura del reactor tubular, se puede notar que conforme transcurre el tiempo el reactor alcanza su perfil estacionario para $t > 1.5$. En la figura 7.5 se observa que la temperatura y concentración a la salida del reactor se estabilizan regulando la temperatura de la chaqueta de enfriamiento, cuyo comportamiento también se muestra en esta figura.

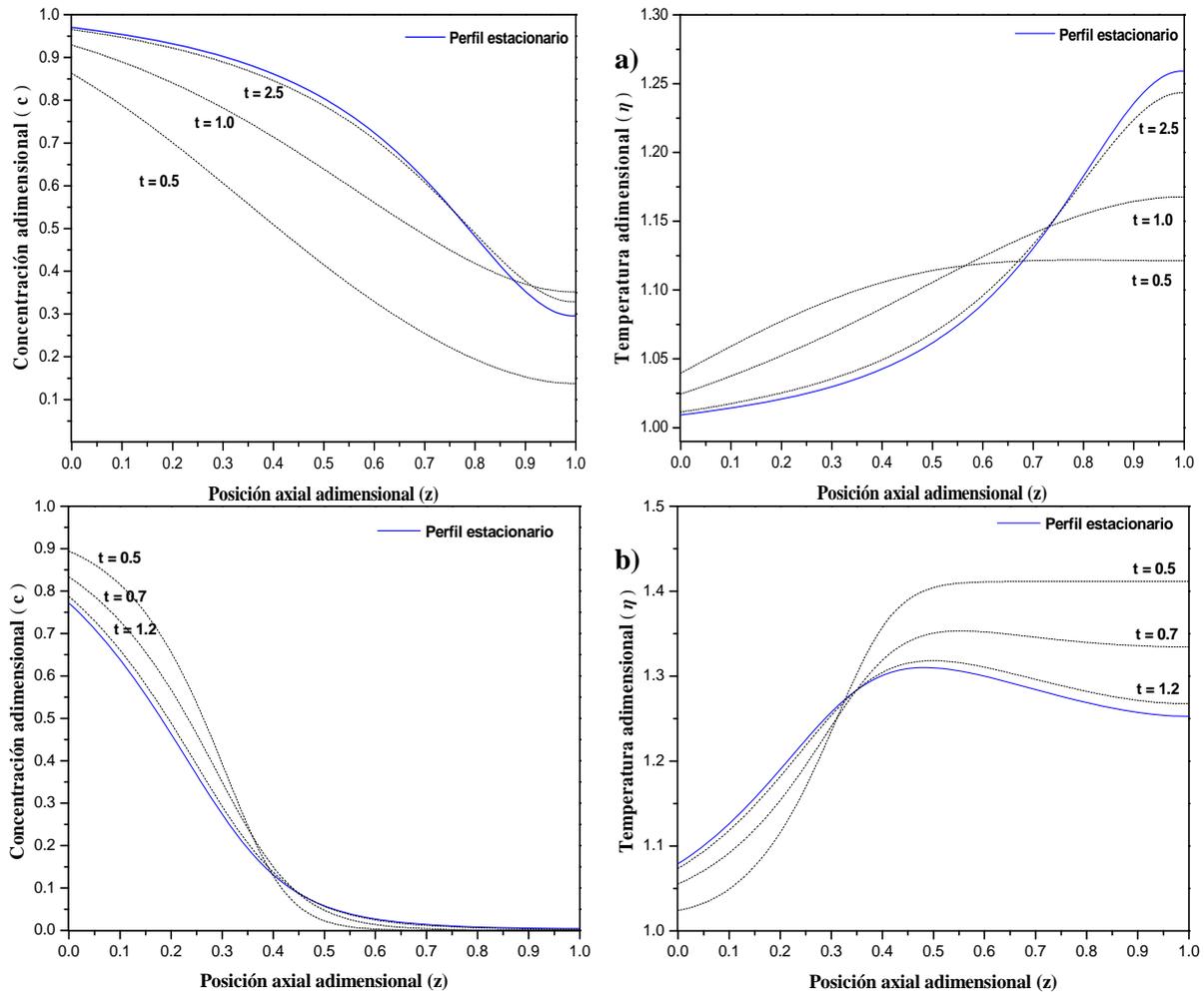


Figura 7.4. Evolución en el tiempo de los perfiles de concentración y temperatura del reactor tubular con un control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en: a) $z=0.75$ para el perfil de temperatura isotónico, b) en $z=0.25$ para el perfil de temperatura con punto caliente.

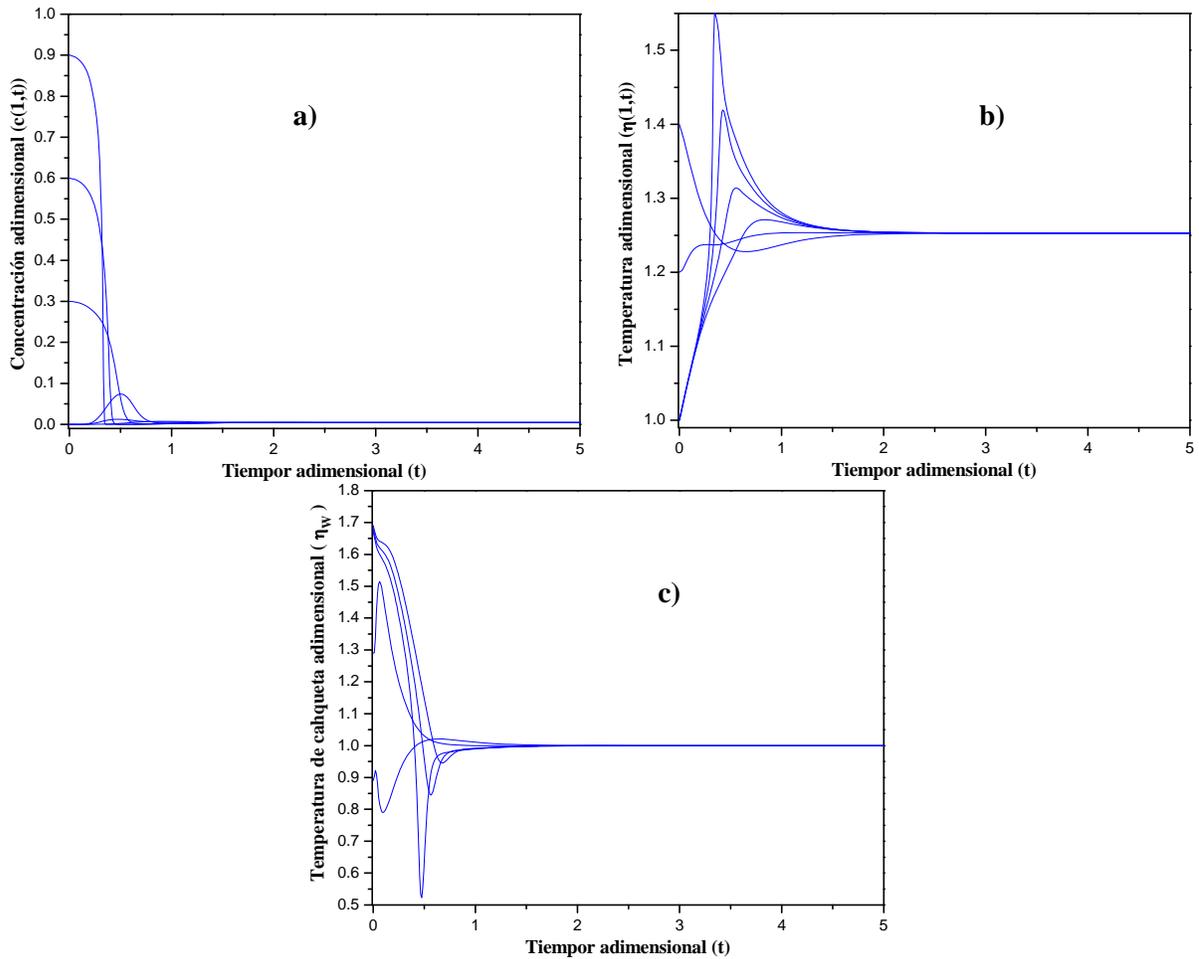


Figura 7.5. a), b) Dinámica a lazo cerrado de la concentración y temperatura a la salida del RT ($z=1$), c) variable de control. Control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) en $z=0.25$, perfil con punto caliente.

7.3 Control PI de temperatura para el reactor tubular

Existen trabajos recientes que establecen las conexiones entre el control no lineal y el control industrial (PI), haciendo uso de las características implicadas en los mecanismos básicos (pasividad y observabilidad) en reactores de tanque agitado [30], [49]. J. D-Salgado, J. Alvarez, *et al* (2011) demostraron que el control por retroalimentación de salidas es una versión mejorada del esquema de control PI empleado comúnmente en la industria para el control de estos reactores, y probaron que a partir de la ley del control por retroalimentación de salidas es posible llegar a la forma de un control PI:

$$\eta_w = \bar{\eta}_w - \left(\frac{\kappa_c + \omega}{a} \right) \left[(\eta_i - \bar{\eta}_i) + \left(\frac{\kappa_c \omega}{\kappa_c + \omega} \right) \int_0^t (\eta_i - \bar{\eta}_i) d\xi \right] \quad (7.2)$$

En donde:

$$\left(\frac{\kappa_c + \omega}{a} \right) = K_p \text{ (ganancia proporcional)}, \quad \left(\frac{\kappa_c \omega}{\kappa_c + \omega} \right) = \frac{1}{\tau} \text{ (\tau es el tiempo integral)}$$

La demostración formal de la conexión entre el control por retroalimentación de salidas y el control industrial PI se muestra en el apéndice B.

Quedó verificado en el capítulo anterior que el control de temperatura por retroalimentación de salidas funciona para la aproximación en tanques del RT, además como se mencionó este tipo de control equivale a aplicar un PI, por lo tanto podemos suponer que este último controlador funciona para el RT. Tomando en cuenta los criterios de ubicación de sensores a continuación se mostrarán los resultados de aplicar un control PI de temperatura en el reactor tubular para tratar de estabilizar el par de perfiles (concentración-temperatura) P2 o P4, inestables a lazo abierto.

7.3.1 Control PI para estabilizar al par de perfiles, concentración-temperatura, P2 (perfil de temperatura isotónico)

El control PI de temperatura es propuesto con la localización del sensor en $z = 0.75$, las ganancias proporcional e integral se fijaron de acuerdo a los valores que se usaron para las ganancias del controlador y del observador en el capítulo anterior, $\kappa_c = 3.0$ y $\omega = 18.0$. En la figura 7.6 se observa como se estabiliza la temperatura y concentración a la salida del reactor regulando la temperatura de la chaqueta de enfriamiento, cuyo comportamiento también se muestra en esta figura. En la figura 7.7 a) se observa la evolución en el tiempo de los perfiles de concentración y temperatura del reactor tubular, se puede notar como en tiempos mayores a 2.5 el reactor alcanza su perfil estacionario. Al comparar las figura 7.6 y 7.3 podemos concluir que se recupera el comportamiento del control no lineal por retroalimentación de estados,

además de dicha comparación también se desprende el hecho de que la respuesta del control PI es un poco más lenta comparada con la del control ideal.

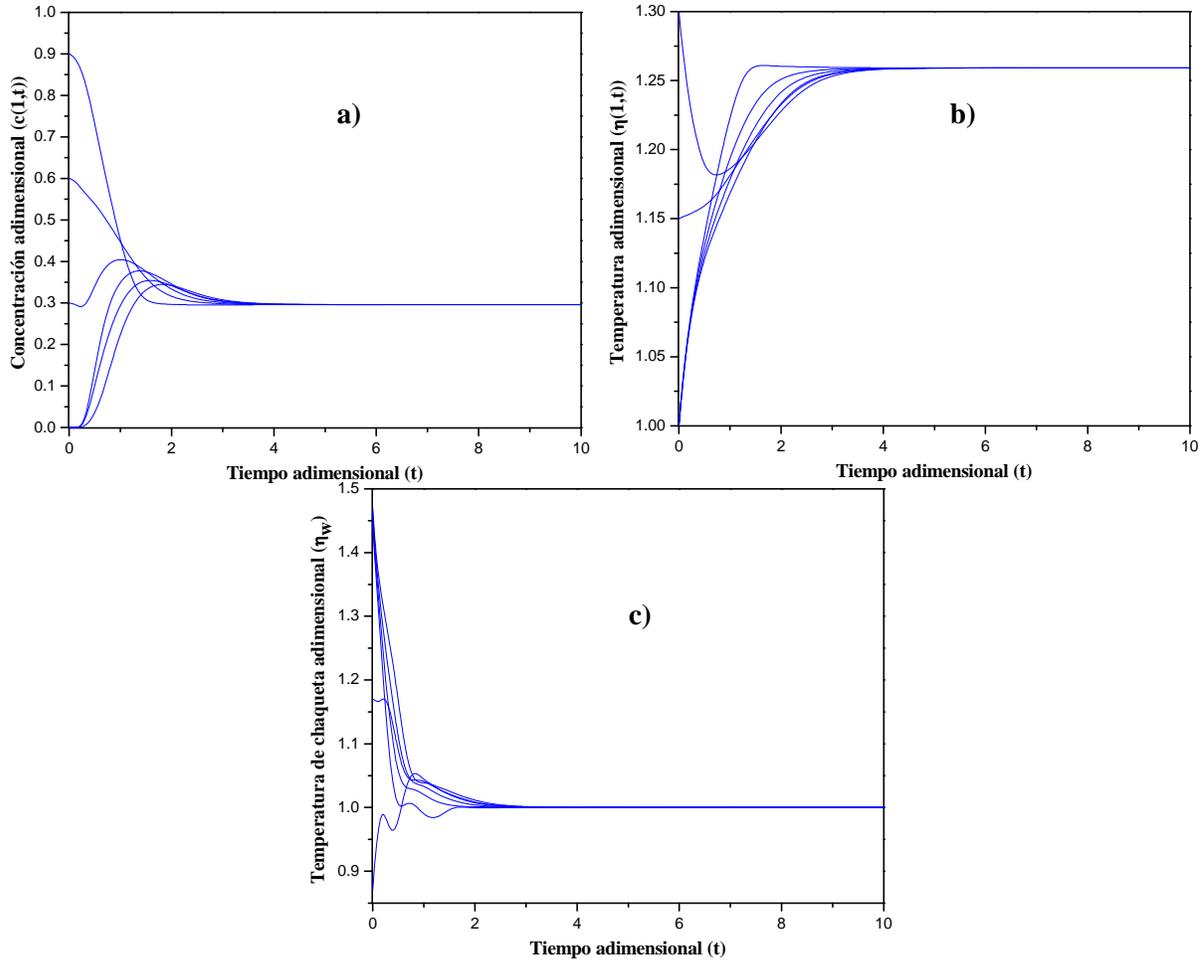


Figura 7.6. a), b) Dinámica a lazo cerrado de la concentración y temperatura a la salida del reactor tubular ($z=1$), c) variable de control. Control PI ($K_p = 21.0$, $\tau = 2.6$) de temperatura en $z=0.75$, Perfil isotónico.

7.3.2 Control PI para estabilizar al par de perfiles, concentración-temperatura, P4 (perfil de temperatura con punto caliente)

Para este caso el control PI de temperatura se probó con la localización del sensor en $z = 0.25$, fijando las ganancias proporcional e integral de acuerdo a los valores que se usaron para las ganancias del controlador y del observador en el capítulo anterior, $\kappa_c = 3.0$ y $\omega = 18.0$. En la figura 7.7 b) se muestra la evolución en el tiempo de los perfiles de concentración y

temperatura del reactor tubular, en donde se observa que el reactor alcanza el perfil estacionario deseado a tiempos mayores a 1.5.

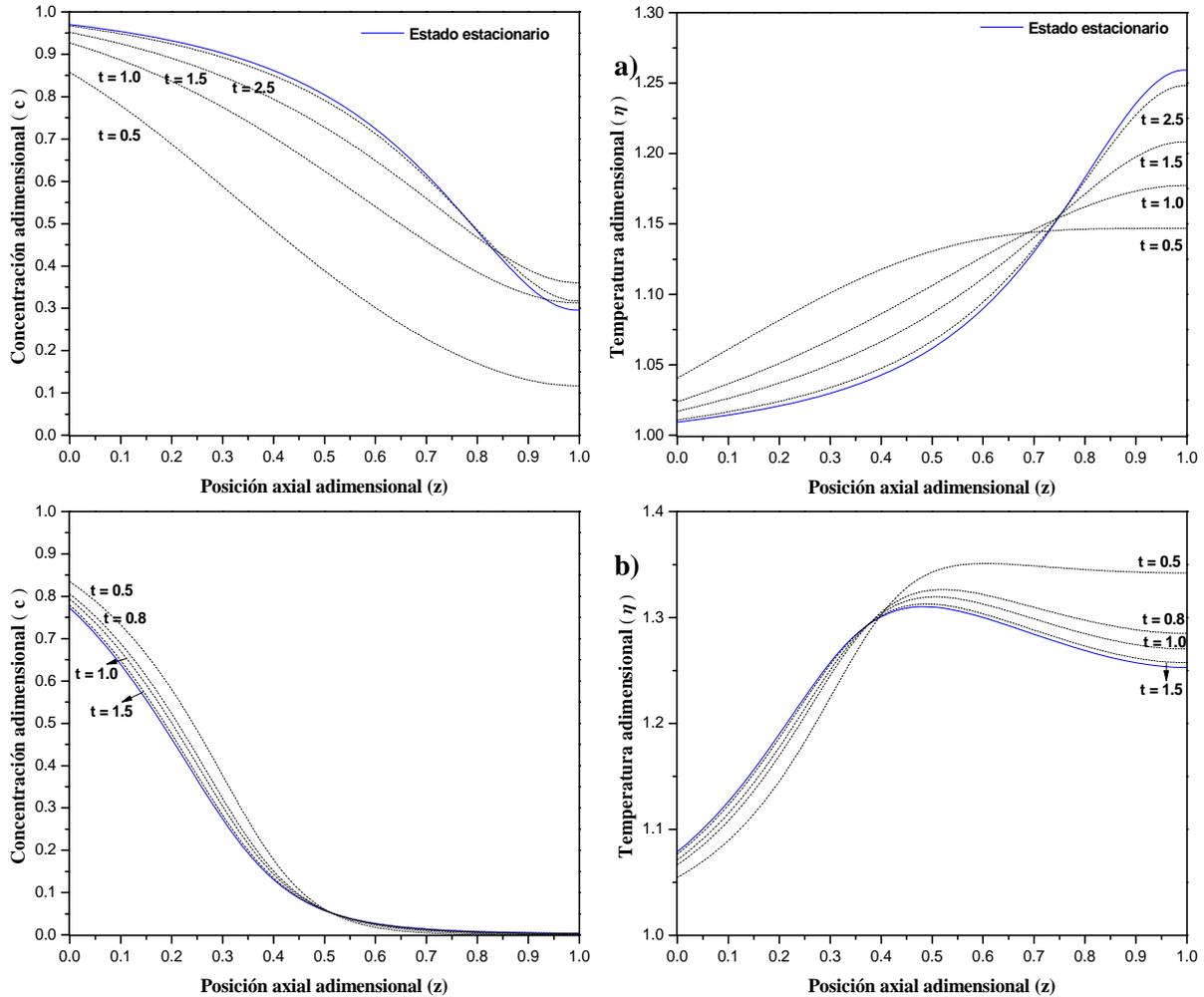


Figura 7.7. Evolución en el tiempo de los perfiles de concentración y temperatura del reactor tubular con un control PI de temperatura ($K_p = 21.0$, $\tau = 2.6$) en: a) $z=0.75$ para el perfil de temperatura isotónico, b) en $z=0.25$ para el perfil de temperatura con punto caliente.

En la figura 7.8 se observa que la temperatura y concentración a la salida del reactor se estabilizan regulando la temperatura de la chaqueta de enfriamiento, cuyo comportamiento también se muestra en esta figura. Al comparar las figuras 7.8 y 7.5 se puede ver que se recupera el comportamiento del control ideal, además al igual que en la sección anterior podemos decir que la respuesta del control PI es más lenta comparada con la del control ideal.

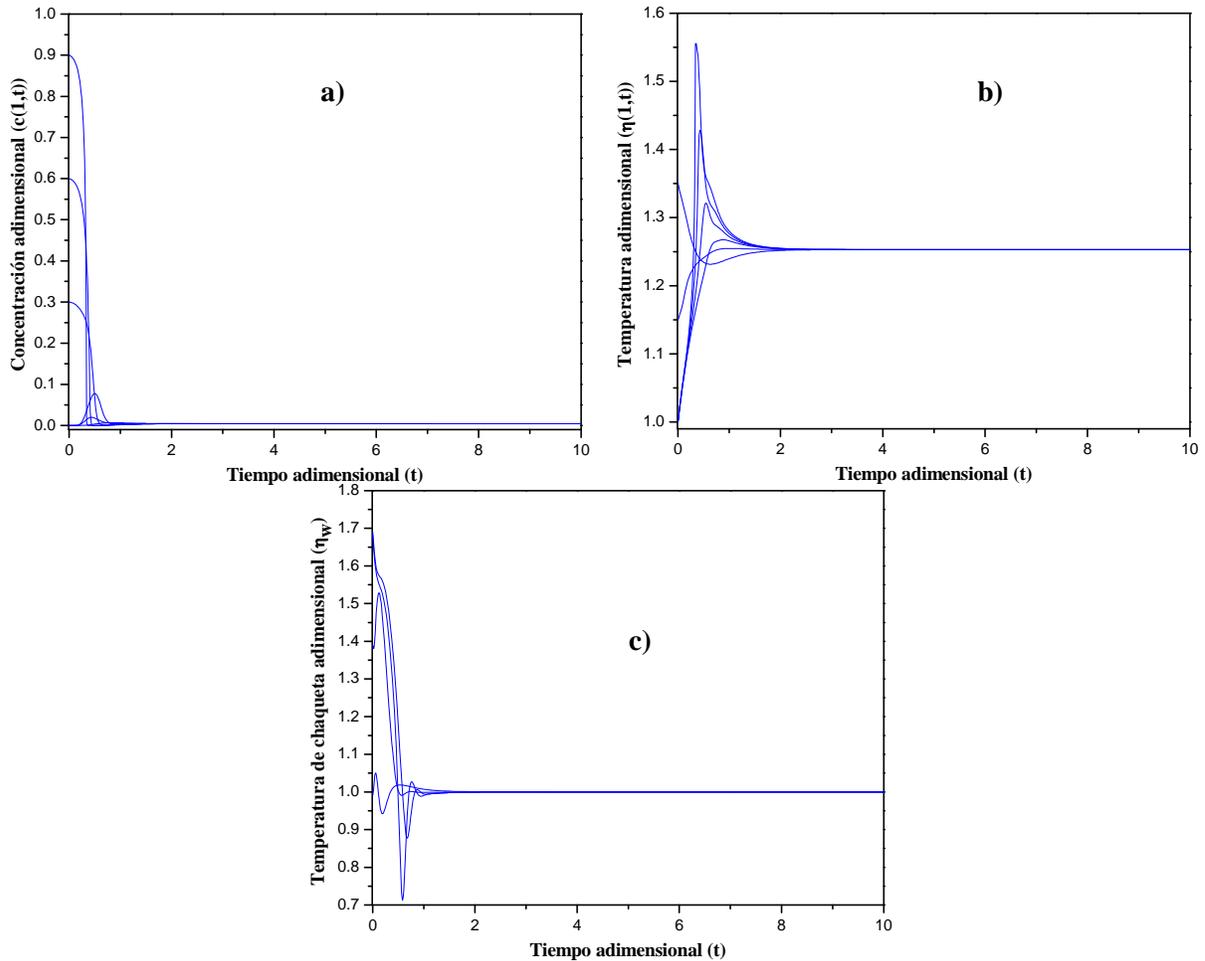


Figura 7.8. a), b) Dinámica a lazo cerrado de la concentración y temperatura a la salida del reactor tubular ($z=1$), c) variable de control. Control PI de temperatura ($K_p = 21.0$, $\tau = 2.6$) en $z=0.25$, perfil con punto caliente.

Como se mencionó en el capítulo anterior el objetivo principal del diseño de un controlador, para un proceso continuo, es el rechazo a perturbaciones durante periodos prolongados de tiempo; por lo cual a continuación se presentan los resultados de la evaluación de la robustez del controlador PI para el RT.

7.4 Comportamiento del control PI en el RT ante perturbaciones conocidas

Al igual que para el TRCTA el sistema a lazo cerrado fue sujeto a perturbaciones oscilatorias tanto en la concentración de entrada (con una función coseno de 0.02 de amplitud), como en la temperatura de entrada (con una función seno de 0.006 ($\approx 2K$) de amplitud), ver expresiones

en (6.18). El comportamiento del RT a lazo cerrado ante estas perturbaciones se muestra en las siguientes figuras.

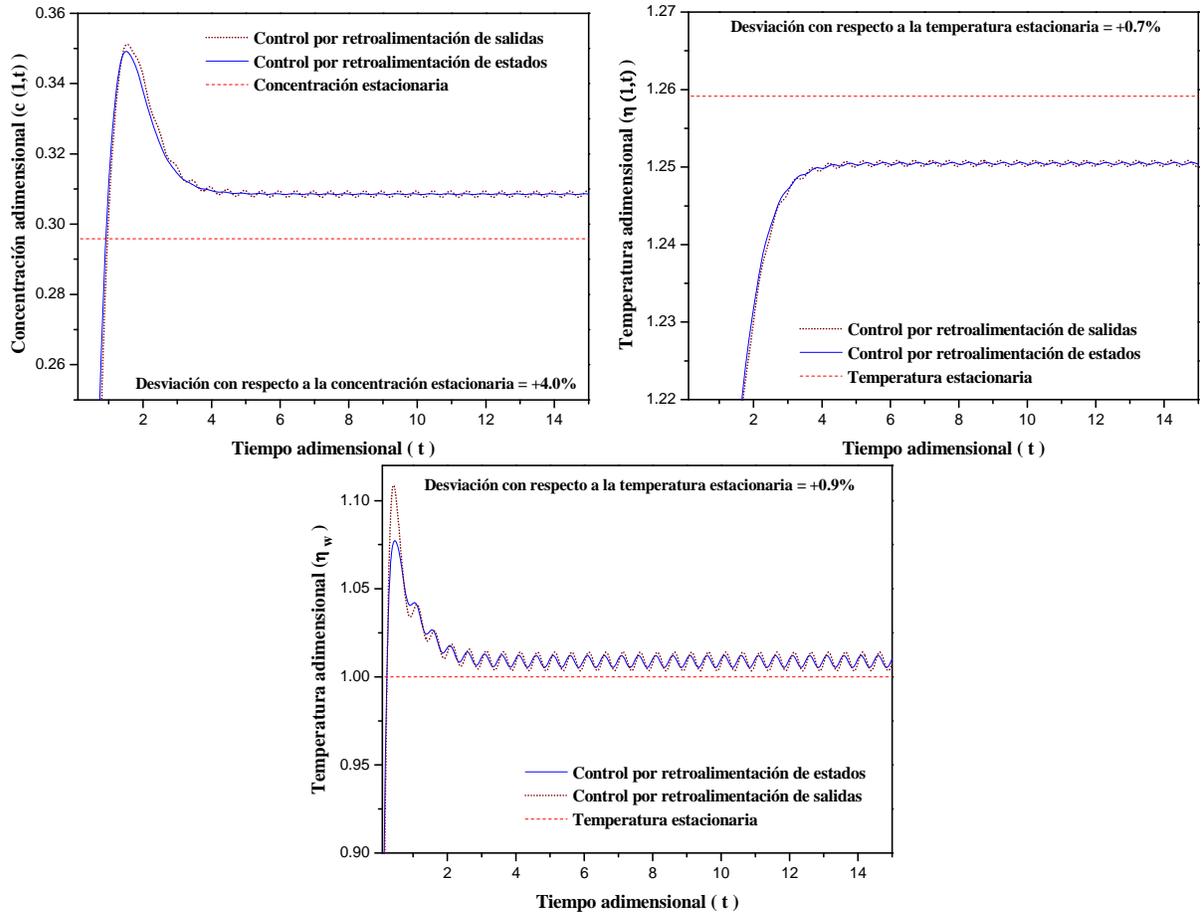


Figura 7.9. Comportamiento robusto a lazo cerrado del RT con un control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (\rightarrow) y PI ($K_p = 21.0$, $\tau = 2.6$) (\cdots) en $z=0.75$ para estabilizar al perfil de temperatura isotónico P2.

El comportamiento dinámico a lazo cerrado del RT se muestra en las figuras 7.9 y 7.10 para cuando se regula la temperatura en $z=0.75$ (para estabilizar a P2) y en $z=0.25$ (para estabilizar a P4), aplicando tanto el control por retroalimentación de estados como un PI. Podemos observar que: el PI recupera el comportamiento del control ideal y alcanza estabilidad en el sentido práctico sobre el par de perfiles estacionarios inestables a lazo abierto (P2y P4). En las figuras 7.9 y 7.10 también se nota que el par de controladores ofrecen concentraciones y temperaturas con pequeñas desviaciones (*offsets*) con respecto al estado estacionario, que para

cuestiones prácticas pueden considerarse despreciables; dichas desviaciones son mayores para el perfil P2 (perfil isotónico) que para el P4 (perfil con punto caliente).

En la figura 7.9 se muestran las concentraciones y temperaturas tanto en el punto caliente ($z=0.5$) como a la salida del reactor ($z=1.0$) correspondientes a P4 y se observa que el control PI (con la ubicación del sensor en $z=0.25$) actúa rechazando las perturbaciones ya que la concentración y la temperatura se mantienen oscilando alrededor de las condiciones nominales, conservando una desviaciones inferiores al 1% para la temperatura (en el punto caliente y en la entrada), mientras que para la concentración las mayores desviaciones se encuentran a la salida del reactor ($\approx 7\%$) pero que para cuestiones prácticas pueden considerarse despreciables.

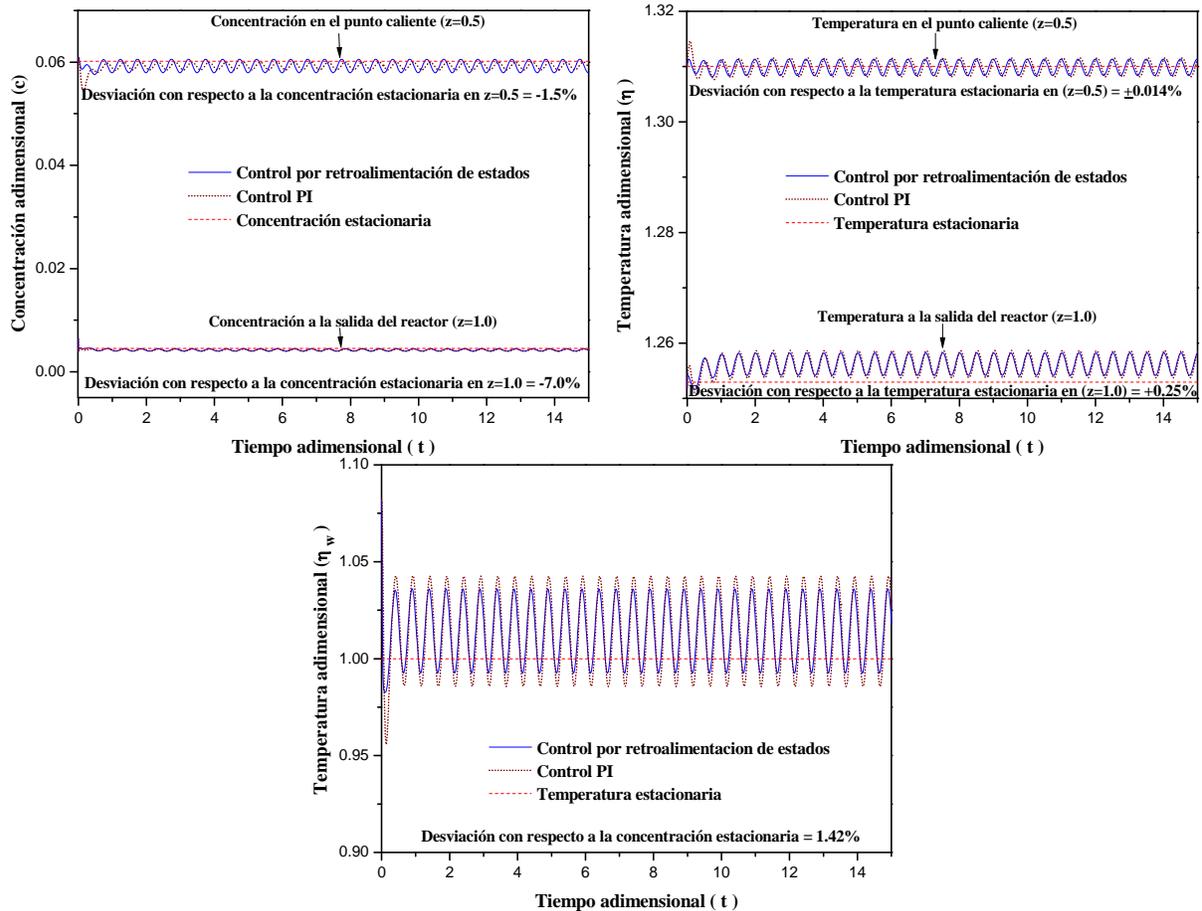


Figura 7.9. Comportamiento robusto a lazo cerrado del RT con un control de temperatura por retroalimentación de estados ($\kappa_c = 3.0$) (—) y PI ($K_p = 21.0$, $\tau = 2.6$) (····) en $z=0.25$ para estabilizar al perfil de temperatura con punto caliente P4.

El principal efecto al rechazo de las perturbaciones está en el esfuerzo de control ya que al comparar las figuras 7.9 y 7.10, en donde se muestran los esfuerzos para estabilizar a P2 y P4 respectivamente, se observa que este último esfuerzo de control es mayor, lo cual va en concordancia con el hecho de que las desviaciones en la concentración y en la temperatura para cuando se regula P4 son pequeñas; además no debemos olvidar que este perfil posee un punto caliente por lo que necesita un mayor esfuerzo de control para estabilizarlo.

Capítulo 8

Conclusiones y Trabajo a Futuro

8.1 Conclusiones

En este trabajo se eligió como caso representativo de estudio un reactor tubular (RT) con mezclado axial, no isotérmico, no adiabático, en el que ocurría una reacción exotérmica de primer orden. Dicho reactor presentaba multiplicidad, cinco pares de perfiles (concentración-temperatura) estacionarios, dos de los pares de perfiles eran inestables a lazo abierto, en uno el perfil de temperatura era isotónico y en el otro el perfil de temperatura tenía un punto caliente. El objetivo del trabajo fue diseñar un control robusto de temperatura que garantizara la estabilidad global a lazo cerrado de este par de perfiles, incluyendo un criterio de ubicación de sensores, con base en una aproximación en tanques del RT. Por lo tanto el trabajo de tesis se centró en dos problemas, uno de modelado y otro de control.

En la parte del modelado se determinó que es posible representar los aspectos esenciales de la dinámica y estática del RT mediante un conjunto de RCTA's con retomezclado debido a la dispersión. El número de reactores continuos para aproximar depende de:

- El tipo de sistema reactivo-difusivo-convectivo en particular.
- El grado de aproximación requerido, que a su vez depende del propósito del modelo: diseñar equipo, determinar condiciones de operación, plantear esquemas de monitoreo o sistemas de control.

Para los objetivos de este trabajo tres tanques con retomezclado fueron suficientes para capturar con buena aproximación los aspectos relevantes de la estática y dinámica del RT.

Para la otra parte del trabajo se estudió el problema de control robusto con base en pasividad. Como un paso metodológico hacia la solución del problema de control para el RT y a partir del modelo no lineal del conjunto de tanques, se diseñó un controlador estabilizante de temperatura accionado por retroalimentación de estados para la aproximación con tres tanques, y se estableció un criterio para elegir el sensor en uno estos. Posteriormente, de acuerdo a la

metodología descrita en los trabajos de J. Alvarez-Ramirez, J. Álvarez y A. Morales (2002) [48], P. González y J. Álvarez (2005) [49], E. Castellanos-Sahagún, J. Álvarez-Ramírez, J. Álvarez, (2005) [50] y J. Díaz Salgado, J. Álvarez *et. al* (2011) [30], se generó un modelo simplificado (combinado la pasividad con la idea de observabilidad) que permitió hacer un controlador lineal para recuperar el comportamiento del control ideal. Traduciendo los criterios de selección de tanque de medición a una posición espacial en el RT, y al aplicar un control estabilizante PI de temperatura se concluyó que un perfil inestable a lazo abierto, en el RT, se puede estabilizar mediante un controlador lineal PI de temperatura con ubicación espacial de sensores debidamente escogida.

La aproximación mediante tanques permitió resolver satisfactoriamente un problema de análisis dinámico y control para un RT cuya solución desde la perspectiva de sistemas distribuidos no parece obvia. Un aspecto importante es la ubicación del sensor para un perfil inestable, para el caso de un perfil de temperatura isotónico resultó conveniente poner el sensor de temperatura cerca de la salida del RT, para el perfil con punto caliente en una zona adyacente antes de dicho punto; en ambos casos la zona de máxima pendiente de temperatura, lo que coincide con diferentes trabajos reportados en la literatura como los de Kumar y Seinfeld (1978) [52], Harris *et al.* (1980) [53], Alvarez *et al.* (1981) [54].

8.2 Trabajo a futuro

La aportación de este trabajo va principalmente sobre una línea metodológica, los resultados presentados se derivan de analizar un caso representativo sencillo pero que contiene todos los elementos para que a partir de dichos resultados se pueda motivar la realización de investigaciones adicionales enfocadas a tratar problemas más complejos. Por ejemplo:

- En este trabajo se estudió una cinética elemental (de primer orden), podría plantearse como paso siguiente el estudio de cinéticas más complejas: cinéticas reversibles, cinéticas con inhibición o cinéticas tipo Langmuir-Hinshelwood.
- Extender el análisis para otros sistemas distribuidos como reactores de lecho fijo o columnas de destilación fraccionadas y empacadas.

Bibliografía

- [1] W. L. Luyben, (1990), *Process modeling, simulation, and control for chemical engineers*, 2nd Ed., McGraw-Hill, Inc.
- [2] J. Ingham, I. J. Dunn, E. Heinzle, J. E. Prenosil, J. B. Snape, (2007) *Chemical Engineering Dynamics: An Introduction to Modelling and Computer Simulation*, 3 Ed., WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
- [3] H. Li, C. Qib (2010), Modeling of distributed parameter systems for applications—A synthesized review from time–space separation, *Journal of Process Control*, 20, 891.
- [4] Froment G. and Bischoff K.B. (1990). *Chemical Reactor Analysis and Design*, 2nd Ed., John Wiley and Sons, Inc.
- [5] Doran M. P. (1995). *Bioprocess Engineering Principles*, Academic Press Limited, Sandiego, C.A.
- [6] J. J. Carberry (2001), *Chemical and Catalytic Reaction Engineering*, Courier Dover publications, Toronto Canada.
- [7] D. M. Boskovic, M. Krstic (2002), Backstepping control of chemical tubular reactors, *Computers and Chemical Engineering*, 26, 1077.
- [8] Farlow S.J. (1993). *Partial Diferential Equations for Scientists and Engineers*, First Ed., Dover Publications, Inc. N. Y.
- [9] E. Hernández-Martínez, H. Puebla and J. Álvarez-Ramírez (2010), Cascade Control Scheme for Tubular Reactors with Multiple Temperature Measurements, *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, Vol. 8, S3.
- [10] R. W. Harmon (1981). *Advanced Process Control*. Butterworths Series in Chemical Engineering, Boston.
- [11] P. D. Christofides (2001), *Nonlinear and Robust Control of PDE Systems. Methods and Applications to Transport-Reaction Processes*, Birkhäuser, Los Angeles, CA.

- [12] D. Dochain (2001), State observation and adaptive linearizing control for distributed parameter (bio)chemical reactors, *Int. J. Adapt. Control Signal Process*, 15, 633.
- [13] P. D. Christofides, P. Daoutidis (1998), Robust control of hyperbolic PDE systems, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 53, 85.
- [14] L. Pellegrini, C.T. Possio, S. Albertoni and G. Biardi (1993), Different scenarios in a controlled tubular reactor with a counter current coolant, *Chaos Solutions and Fractals*, Vol. 3 (5), 537.
- [15] J. Alvarez-Ramirez, R. Suarez and A. Morales (2000), Cascade control for a class uncertain nonlinear system: A backstepping design approach, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 55, 1695.
- [16] K. Hoo and D. Zheng (2002), Low order control relevant models for a class of distributed parameters systems, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 56, 6683.
- [17] W. Wu and M. Huang (2003), Nonlinear inferential control for an exothermic packed-bed reactor: Geometric approaches, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 58, 2023.
- [18] M. Li and D. Christofdes (2007), An input/output approach to the optimal transition control of a class of distributed chemical reactors, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 62, 2979.
- [19] X. Hua, and A. Jutan (2000), Nonlinear inferential Cascade control of Exothermic Fed-Bed Reactors, *AICHE*, Vol. 46 (5) 980.
- [20] R. Urrea, J. Alvarez, and J. Alvarez-Ramirez (2008), Linear PI temperature-composition cascade control for tubular reactor, *Chem. Eng. Comm.*, Vol. 195, 803.
- [21] Georgakis, C., Aris, R., & Amundson, N. R. (1977). Studies in the control of tubular reactors. Parts I–III. *Chem. Eng. Sci.*, 32, 1359.
- [22] Panagiotis D. Christofides, (1998), Robust control of parabolic PDE systems, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 53, 2949.

- [23] N. Beniich, A. El Bouhtouri, D. Dochain (2010), Input constrained adaptive tracking for a nonlinear distributed parameter tubular reactor, *Int. J. Adapt. Control Signal Process.*, 24,249.
- [24] D. Del Vecchio , N. Petit, (2005), Boundary control for an industrial under-actuated tubular chemical reactor, *Journal of Process Control*, 15, 771.
- [25] W. L. Luyben (2001), Effect of design and kinetic parameters on the control of cooled tubular reactor systems. *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 40, 3623.
- [26] J. Coste, D. Rudd, N. R. Amundson (1961), Taylor diffusion in tubular reactors, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 39, 149.
- [27] R. Aris (1961), *The Optimal Design of Chemical Reactors: A study in dynamic programming*, Academic Press, N.Y.
- [28] H. A Deans, L. Lapidus (1960), A computational model predicting and correlating the behavior of fixed bed reactors: II Extension to chemically, *AIChE Journal*, Vol. 6, 663.
- [29] G. R. Urrea García (2008), *Esquemas de Control Lineal PI para Procesos Distribuidos*, Tesis Doctoral, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, México D.F.
- [30] J. Diaz-Salgado, J. Alvarez, A. Schaum, J.A. Moreno (2012), Feedforward output-feedback control for continuous exothermic reactors with isotonic kinetics, *Journal of Process Control*, Vol. 22, 303.
- [31] L. Lapidus, N. R. Amundson (1977), *Chemical reactor theory: a review: dedicated to the memory of Richard H. Wilhelm*, Prentice-Hall.
- [32] A. Varma, N. R. Amundson (1972), Some problems concerning the non-adiabatic tubular reactor a-priori bounds, qualitative behavior, preliminary uniqueness and stability considerations, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 50, 470.

- [33] A. Varma, N. R. Amundson (1973), Some observations on uniqueness and multiplicity of steady states in non-adiabatic chemically reacting systems, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 51, 206.
- [34] A. Varma, N. R. Amundson (1973), The non-adiabatic tubular reactor: Stability considerations, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 51, 459.
- [35] R. Haberman, (2003), *Ecuaciones en derivadas parciales con series de fourier y problemas de valores a la frontera*, 3a ed., PEARSON EDUCACION, Madrid.
- [36] E. Stanley Lee (1968), *Quasilinearization and Invariant Imbedding, With Applications to Chemical Engineering and Adaptive Control*, Academic Press INC, N. Y.
- [37] D. D. Perlmutter, (1972), *Stability of Chemical Reactors*, Prentice-Hall, Inc., U.S.A.
- [38] Y. A. Kuznetsov, (2000), *Elements of Applied Bifurcation Theory , Second Edition, Series: Applied mathematical sciences*, Springer-Verlag, N.Y.
- [39] Byrnes, C.I. and A. Isidori (1991), Passivity, Feedback Equivalence, and the Global Stabilization of Minimum Phase Nonlinear Systems, *IEEE Trans. Automat. Control*, Vol. 36, 1228.
- [40] A. Isidori (2010), Robust feedback design for nonlinear systems: a survey, *Turk J Elec Eng & Comp Sci*, Vol.18, 5, 693.
- [41] R. Sepulchre, M. Jankovic, P. Kokotovic , (1996), *Constructive Nonlinear Control*, Springer-Verlag.
- [42] P. Sarma, B. Bandyopadhyay (2010), Nonlinear zero dynamics in control systems, Encyclopedia of Life Support Systems (EOLSS), *Control Systems, Robotics, and Automation*, Vol. XIII.
- [43] H. K. Khalil, (2002), *Nonlinear Systems*, third edition, Prentice Hall, New Jersey.
- [44] H. J. Marquez, (2003), *Nonlinear Control System Analysis and Desing*, JOHN WILEY & SONS publications, Hoboken New Jersey.

- [45] M. T. L. Arenas, (1995), *Control no Lineal con Retroalimentacion de Mediciones en un Reactor de Copolimerizacion*, Tesis de maestría, UAM-I.
- [46] J. Díaz Salgado (2005). *Estudio del problema de estimación y control de una clase de reactores químicos*, Tesis de maestría, UNAM.
- [47] R.T. Stefani, C.J. Savant Jr., B. Shahian, G.H. Hostetter, (1994), *Design of Feedback Control Systems*, 3rd ed., Saunders College Publishing, Florida.
- [48] J. Alvarez-Ramirez, J. Alvarez, A. Morales, (2002), An adaptive cascade control for a class of chemical reactors, *Int. J. Adapt. Control Signal Process*, 16, 681.
- [49] P. Gonzalez, J. Alvarez (2005), Combined PI-inventory control of solution homopolymerization reactors, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, 7147.
- [50] E. Castellanos-Sahagún, J. Alvarez-Ramírez, J. Alvarez, (2005), Two-Point Temperature Control Structure and Algorithm Design for Binary Distillation Columns, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, 142.
- [51] I. Kanellakopoulos, P. V. Kokotovic, (1990), Observer-based Adaptive Control of Nonlinear Systems Under Matching Conditions, *American Control Conference*, 549.
- [52] S. Kumar, J. H. Seinfeld, (1978), Optimal Location of Measurements in Tubular Reactors, *Chem. Eng. Sci.*, 33, 1507.
- [53] T. J. Harris, J. F. Macgregor, J. D. Wright, (1980), Optimal Sensor Location with an Application to a Packed Bed Tubular Reactor, *AIChE*, 26, 910.
- [54] J. Alvarez, J. A. Romagnoli, G. Stephanopoulos (1981), Variable measurement structures for the control of tubular reactors, *Chem. Eng. Sci.*, 36, 1695.
- [55] F. W. J. van den Berg, H. C. J. Hoefsloot, H. F. M. Boelens, A. K. Smilde, (2000), Selection of optimal sensor position in a tubular reactor using robust degree of observability criteria, *Chem. Eng. Sci.*, 55, 827.

- [56] A. K. Singh, J Hahn (2005), Determining optimal sensor locations for state and parameter estimation for stable nonlinear systems, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, 5645.
- [57] A. Cinar, (1984), Controller Design for a Tubular Catalytic Reactor, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 62, 746.
- [58] E. L. Allgower, K. Georg., (1990), *Introduction to Numerical Continuation Methods*, Classics in applied mathematics, 45.
- [59] H. B. Keller (1986), *Lectures on Numerical Methods in Bifurcation Problems*, Published for the Tata Institute of Fundamental Research, Springer-Verlag.
- [60] E. J. Doedel, (1984), Continuation techniques in the study of chemical reaction schemes, in: *Proc. Special Year in Energy Math.*, Univ. of Wyoming, K. I. Gross, ed., SIAM Publ., 103.
- [61] R. Seydel, (2010), *Practical Bifurcation and Stability Analysis*, Third Edition, Interdisciplinary Applied Mathematics, 5, Springer-Verlag.

Apéndices

Apéndice A

Metodología para el trazado de los diagramas de bifurcación

El propósito de un diagrama de bifurcación es mostrar de forma cualitativa el comportamiento o la estructura topológica de las soluciones en equilibrio (estado estacionario) de un sistema dinámico, como el mostrado en (A.1), a través de la variación de un parámetro físico λ implícito en f [38], [58]. Recordemos que en este trabajo se utilizó como parámetro de bifurcación la temperatura de chaqueta adimensional (η_w) para el análisis de la estática y la dinámica del TRCTA (ver capítulo 4), y la temperatura de entrada adimensional (η_e) para la caracterización de la pasividad del TRCTA (ver capítulo 5).

$$\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}, \lambda), \quad \mathbf{x}, f \in R^n \quad (\text{A.1})$$

La variación del parámetro λ produce diferentes puntos de equilibrio, dados por la solución de:

$$f(\mathbf{x}, \lambda) = 0 \quad (\text{A.2})$$

que en su conjunto conforman al diagrama de bifurcación, ver figura A.1. Podemos observar en la figura que el número de puntos de equilibrio para un mismo parámetro λ varía a lo largo de la curva, y aquellos puntos (λ_* y λ^*) en donde el número de soluciones cambia se llaman puntos de bifurcación [59], [60].

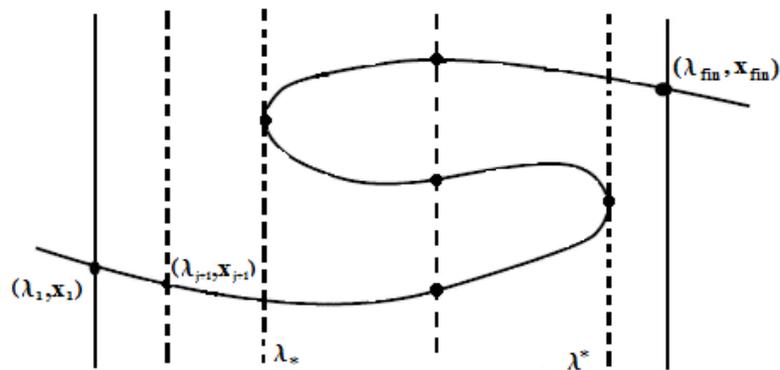


Figura A.1. Representación esquemática de un diagrama de bifurcación.

Aunque no es motivo de estudio en este trabajo de tesis, es importante mencionar que además de las soluciones en estado estacionario para sistemas como (A.1), existen soluciones periódicas que originan lo que se conoce como bifurcación tipo Hopf. Esto conduce a la aparición, desde el estado de equilibrio, de pequeñas oscilaciones periódicas llamadas ciclos límite [38], [60].

El trazado del diagrama de bifurcación consiste básicamente en un problema algebraico no lineal, ver expresión (A.2), que puede ser resuelto numéricamente utilizando algún método de continuación, en la figura A.2 se muestra algoritmo que describe de manera general el funcionamiento de dichos métodos [58], [61].

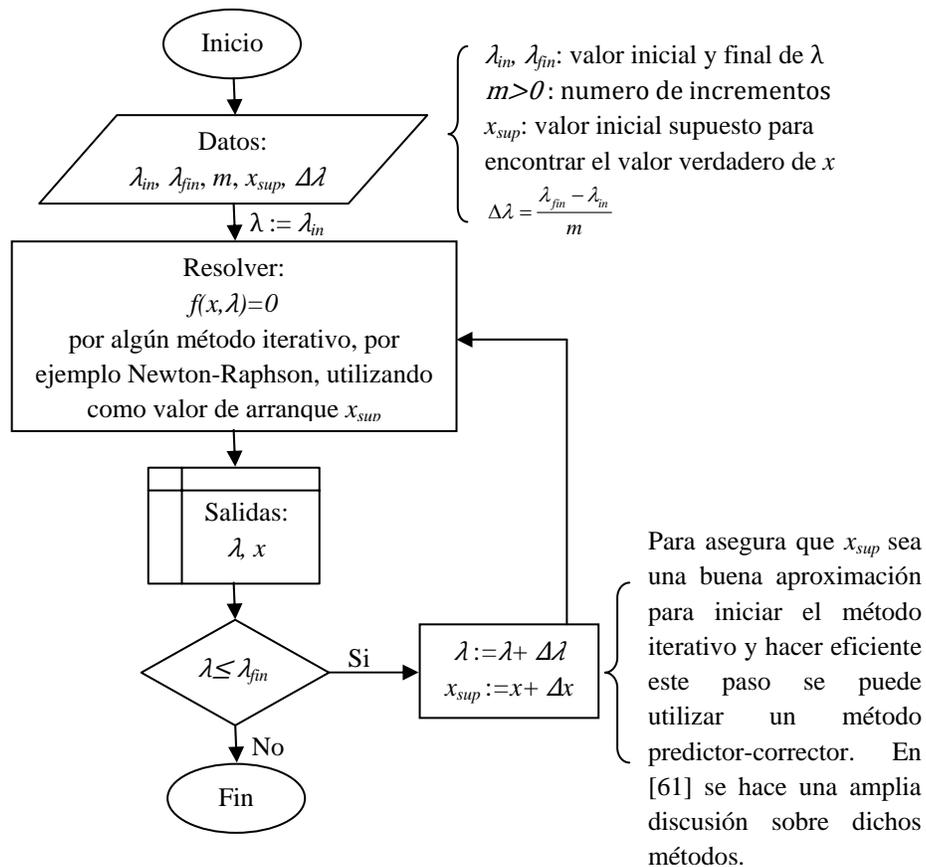


Figura A.2. Algoritmo general de los métodos de continuación.

Como podemos observar en la figura A.2, los métodos de continuación estriban en que a partir del cálculo de un punto de equilibrio se identifiquen los puntos restantes. El proceso de

continuación se inicia desde una solución (λ_l, x_l) de la ecuación (A.2) para un valor de parámetro λ_l y el objetivo es calcular la solución (λ_{j+1}, x_{j+1}) para el siguiente valor del parámetro λ_{j+1} , figura A.1. En la figura A.2 en el elemento adyacente a la toma de decisión se predice un nuevo valor de arranque para el proceso iterativo, la mayoría de los métodos de continuación están apoyados en métodos predictores-correctores que ayudan a mejorar dicha predicción; en la referencia [61] se abordan de manera detallada los diferentes métodos que pueden ser utilizados en esta parte.

Uno de los inconvenientes de los métodos de continuación es el hecho de que se puede producir un error en los puntos de inflexión (λ_* y λ^*) de la curva de bifurcación, ver figura A.1., por lo que es necesario escoger un $\Delta\lambda$ lo bastante pequeño para que el método tenga éxito [58].

En este trabajo de tesis se utilizó Newton-Raphson como método iterativo para la solución de sistemas de la forma (A.2) y como método predictor-corrector una extrapolación lineal, los cuales fueron programados en FORTRAN.

Apéndice B

Correspondencia entre el control por retroalimentación de salidas y el control PI

A continuación se realizará la demostración formal de la correspondencia entre el control por retroalimentación de salidas (desarrollado en el capítulo 6) y el control industrial PI. Partiendo de las leyes de control definidas para el TRCTA en la sección 6.2 tenemos:

$$\eta_w = - \left(\frac{\kappa_c (\eta_i - \bar{\eta}_i) + \chi_i + \omega \eta_i}{a} \right) \quad (\text{B.1})$$

$$\dot{\chi}_i = -\omega \chi_i - \omega (a \eta_w + \omega \eta_i) \quad (\text{B.2})$$

Rearreglando (B.1) e introduciendo los términos $\omega \bar{\eta}_i$ y $\bar{\chi}_i$ se obtiene la siguiente expresión en función de variables de desviación

$$\begin{aligned} a \eta_w &= -\kappa_c (\eta_i - \bar{\eta}_i) - \chi_i - \omega \eta_i \\ &\Downarrow \\ a \eta_w + \omega \bar{\eta}_i + \bar{\chi}_i &= -\kappa_c (\eta_i - \bar{\eta}_i) - \chi_i - \omega \eta_i + \omega \bar{\eta}_i + \bar{\chi}_i \\ &\Downarrow \\ a \eta_w + \omega \bar{\eta}_i + \bar{\chi}_i &= -\kappa_c (\eta_i - \bar{\eta}_i) - \omega (\eta_i - \bar{\eta}_i) - (\chi_i - \bar{\chi}_i) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

De la parte estática de (B.2) se tiene:

$$0 = -\omega \bar{\chi}_i - \omega (a \bar{\eta}_w + \omega \bar{\eta}_i) \Rightarrow \bar{\chi}_i = -a \bar{\eta}_w - \omega \bar{\eta}_i \quad (\text{B.4})$$

Sustituyendo (B.4) en (B.3) se obtiene

$$\begin{aligned} a \eta_w + \omega \bar{\eta}_i + \bar{\chi}_i &= -\kappa_c (\eta_i - \bar{\eta}_i) - \omega (\eta_i - \bar{\eta}_i) - (\chi_i - \bar{\chi}_i) \\ &\Downarrow \\ a \eta_w - a \bar{\eta}_w &= -\kappa_c (\eta_i - \bar{\eta}_i) - \omega (\eta_i - \bar{\eta}_i) - (\chi_i - \bar{\chi}_i) \\ &\Downarrow \\ a (\eta_w - \bar{\eta}_w) &= -(\kappa_c + \omega) (\eta_i - \bar{\eta}_i) - (\chi_i - \bar{\chi}_i) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Sustituyendo (B.1) en (B.2)

$$\begin{aligned}
 \dot{\chi}_i &= -\omega\chi_i - \omega(-\kappa_c(\eta_i - \bar{\eta}_i) - \chi_i) \\
 &\Downarrow \\
 \dot{\chi}_i &= \omega\kappa_c(\eta_i - \bar{\eta}_i) \\
 &\Downarrow \\
 (\chi_i - \bar{\chi}_i) &= \omega\kappa_c(\eta_i - \bar{\eta}_i) \\
 &\Downarrow \\
 (\chi_i - \bar{\chi}_i) &= \omega\kappa_c \int_0^t (\eta_i - \bar{\eta}_i) d\xi
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

Sustituyendo (B.6) en (B.5)

$$\begin{aligned}
 a(\eta_w - \bar{\eta}_w) &= -(\kappa_c + \omega)(\eta_i - \bar{\eta}_i) - \omega\kappa_c \int_0^t (\eta_i - \bar{\eta}_i) d\xi \\
 &\Downarrow \\
 (\eta_w - \bar{\eta}_w) &= -\left(\frac{\kappa_c + \omega}{a}\right)(\eta_i - \bar{\eta}_i) - \frac{\omega\kappa_c}{a} \int_0^t (\eta_i - \bar{\eta}_i) d\xi \\
 &\Downarrow \\
 \eta_w &= \bar{\eta}_w - \left(\frac{\kappa_c + \omega}{a}\right)\left((\eta_i - \bar{\eta}_i) - \left(\frac{\omega\kappa_c}{\kappa_c + \omega}\right) \int_0^t (\eta_i - \bar{\eta}_i) d\xi\right)
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

Llegando así a la forma de un control PI, en donde:

$$\left(\frac{\kappa_c + \omega}{a}\right) = K_p \text{ (ganancia proporcional)}, \quad \left(\frac{\omega\kappa_c}{\kappa_c + \omega}\right) = \frac{1}{\tau} \text{ (\tau es el tiempo integral)}$$