

Tesis de Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química

*Control Lineal en Reactores
Químicos Continuos*

M.I.Q. Héctor Fernando Puebla Núñez

Junio 2002

CONTROL LINEAL EN
REACTORES QUIMICOS CONTINUOS

CONTROL LINEAL EN
REACTORES QUIMICOS CONTINUOS
Tesis de Doctorado en Ciencias

HECTOR PUEBLA
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa

JOSE ALVAREZ-RAMIREZ
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa

Sobre el autor y el asesor

Héctor Puebla Nació en San Luis Potosí, México, en Marzo 20, 1974. Recibió el grado de I.Q. de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí y el grado de M.I.Q. de la Universidad Autónoma Metropolitana, en 1997 y 1999, respectivamente. De 1999 al 2002 realizó estudios de Doctorado en Ciencias en la Universidad Autónoma Metropolitana. Sus intereses de investigación incluyen aplicaciones de control lineal, control of sistemas de parámetros distribuidos y aplicaciones del caos en ingeniería.

José Álvarez-Ramírez Nació en San Luis Potosí, México, en Marzo 18, 1963. Recibió el grado de I.Q. de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí y el grado de M.C. y de Dr. en Matemáticas Aplicadas de la Universidad Autónoma Metropolitana, en 1986, 1988 y 1993, respectivamente.

Desde 1993 se encuentra en el Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica en la Universidad Autónoma Metropolitana. Sus intereses de investigación incluyen teoría de control, análisis de sistemas dinámicos, control de procesos y caos. El Dr. Alvarez-Ramirez ha publicado mas de 100 artículos científicos en diferentes revistas internacionales y es actualmente el Presidente de la Asociación Mexicana de Control Automático, la cual esta afiliada al IFAC.

Control Lineal en Reactores Químicos Continuos

por

Héctor Fernando Puebla Núñez

Enviado al Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica
en Mayo 2002, en cumplimiento parcial
para obtener el grado de
Doctor en Ciencias en Ingeniería Química

Resumen

El objetivo de esta tesis es estudiar el problema de estabilización de reactores químicos continuos con control lineal clásico Proporcional-Integral (PI). La motivación surge del hecho que a pesar de que el control lineal se utiliza ampliamente en la industria, sus propiedades de robustez y estabilidad no se han estudiado formalmente. El estudio sistemático del control lineal para la clase particular de reactores químicos que se tratan permite, (i) explicar rigurosamente sus propiedades de robustez, y (ii) explorar la posibilidad de mejorar su construcción y funcionamiento. Los procesos químicos considerados incluyen sistemas de dimensión finita e infinita. La primera parte de la tesis -el caso de dimensión finita- considera reactores continuos de tanque agitado (CSTR). Bajo algunas hipótesis moderadas, se prueba que la estabilización global de la dinámica de reactores químicos se puede obtener vía control de temperatura con compensación clásica PI. La prueba se basa en resultados estándares de la teoría de estabilidad de sistemas no lineales perturbados singularmente. El caso de estudio sobre un modelo de un CSTR con tres puntos de equilibrio, uno de ellos inestable, se usa para ilustrar los resultados encontrados. La segunda parte de la tesis trata el problema de control lineal en sistemas de dimensión infinita, en particular, se estudia el control frontera en reactores tubulares. Bajo hipótesis razonables de suavidad, estabilidad a lazo abierto, y medidas retardadas, se prueba que un control lineal con acción integral conduce a regulación exponencial global de la salida del proceso. La aplicabilidad de los resultados teóricos y la construcción del esquema de control se ilustran al considerar tres casos de estudio de interés en la industria química, un intercambiador de calor en paralelo a co-corriente, un reactor biológico, y un reactor químico de flujo tapón.

Linear Control in Continuous Chemical Reactors

by

Héctor Fernando Puebla Núñez

Abstract

Eventhough the linear feedback control is a robust industrial scheme that has been successfully tested, is widely accepted, and is commonly implemented with conventional linear P or PI controllers, so far, there is a lack of rigorous results to back up its regulation and stabilization capabilities. The aim of this work is study the problem of stabilization of chemical reactors with classical PI control. The systematic study of the linear control for the class of chemical reactors considered allows: (i) explain their remarkable robustness property, and (ii) explore the possibility of improving their construction and functioning. The chemical processes considered includes both finite and infinite dimensional systems. In the first part - the finite dimensional case - we consider a continuous stirred tank reactors (CSTR). Under some mild assumptions, it is proven that global stabilization of the chemical reactor dynamics can achieved via temperature control with classical PI compensation. The prove is based on standard results from the stability theory of nonlinear singularly perturbed systems. A simulation example on a classical CSTR benchmark dating from Aris and Amundson (1958) is used to illustrate our results. The second part of this work deals with the boundary control for a class of distributed parameter processes. Under physically reasonable smoothness, stability and steady-state assumptions, it is proven that a linear stable controller with integral action yields global exponential regulation of the process output. The applicability of the theoretical results and their controller construction schemes are illustrated by considering the control cases of a heat exchanger, a biochemical reactor and a chemical reactor.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

Iztapalapa

Control Lineal en Reactores Químicos Continuos

M.I.Q. Héctor Fernando Puebla Núñez

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Distrito Federal, México

Asesor: Dr. José Alvarez-Ramírez

Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Distrito Federal, México

Financiado por el CONACyT bajo el contrato 124865

Junio, 2002

Este trabajo lo dedico
con respeto y
admiración a mis
padres

Control Lineal en Reactores Químicos Continuos

por

Héctor Fernando Puebla Núñez

M.I.Q. Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa (1999)

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

Enviado al Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica

en cumplimiento parcial para obtener el grado de

Doctor en Ciencias en Ingeniería Química

en la

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA

Junio 2002

© Héctor Puebla, 2002.

El autor agradece a la Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa el

permiso para reproducir y
distribuir copias de esta tesis.

Firma del autor
Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica
Mayo 2002

Certificado por
Dr. Carlos Ibarra Valdéz
Departamento de Matemáticas, UAM-I

Certificado por
Dr. Jesús Alvarez Calderón
Departamento de I.P.H., UAM-I

Certificado por
Dr. Gerardo Espinosa Pérez
Facultad de Ingeniería, UNAM

Certificado por
Dr. Rubén Garrido Moctezuma
Departamento de Control Automático, CINVESTAV-IPN

Aceptada por
Dr. José Álvarez-Ramírez
Asesor, Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica

6	Conclusiones	51
	Bibliografía	53
II	Control Lineal de Sistemas de Parámetros Distribuidos	55
7	Introducción	56
8	Preliminares	60
8.1	Consideraciones generales sobre DPS	60
8.2	Modelo matemático de DPS	62
8.3	Hipótesis generales sobre el modelo de DPS	65
9	Control Lineal de DPS	69
9.1	Problema de control	69
9.2	Análisis no-lineal de estabilidad	71
9.2.1	Control proporcional	71
9.2.2	Control proporcional-integral	77
10	Casos de Estudio	81
10.1	Intercambiador de calor	81
10.2	Reactor bio-químico	90
10.3	Reactor químico de flujo tapón	93
11	Conclusiones	100
	Bibliografía	102
12	Conclusiones Generales y Perspectivas	106
A	Material Complementario	108
A.1	Análisis lineal de estabilidad del CSTR	108
A.2	Desigualdades en el método de energía de DPS	111

Índice General

1	Introducción General	15
1.1	El control lineal de procesos químicos	15
1.2	Objetivos de la tesis	16
1.3	Bosquejo de la tesis	17
1.3.1	Parte I. Control Lineal de CSTR	17
1.3.2	Parte II. Control Lineal de Sistemas de Parámetros Distribuidos (DPS) . .	18
I	Control Lineal de Reactores Continuos de Tanque Agitado	20
2	Introducción	21
3	Preliminares	23
3.1	Consideraciones generales sobre el modelamiento de CSTR	23
3.2	Modelo matemático del CSTR	25
3.3	Hipótesis generales sobre el modelo del CSTR	26
4	Control Lineal del CSTR	29
4.1	El problema de control	29
4.2	Análisis lineal de estabilidad	29
4.3	Análisis no-lineal de estabilidad	32
4.3.1	Control proporcional	32
4.3.2	Control proporcional-integral	38
5	Caso de Estudio	43

B	Material Matemático Útil	114
B.1	Estabilidad de sistemas dinámicos	114
B.2	Método de energía	121
B.3	Sistemas perturbados singularmente	123
B.4	Sistemas de dimensión infinita y espacios de Hilbert	125
B.5	Algunos teoremas útiles	127
B.6	Métodos numéricos para PDE	129
B.6.1	Método de diferencias finitas	131

Índice de Figuras

3-1	Diagrama esquemático del CSTR.	24
5-1	Diagrama de Van Heerden para $v = 0$, $\bar{u} = 350$ y tres valores diferentes de K_P . . .	44
5-2	Diagrama de Van Heerden para $v = 0$, $\bar{u} = 360$ y tres valores diferentes de K_P como en la Figura 5.1.	44
5-3	Retrato-fase $(c(t), T(t))$ para el CSTR controlado bajo retroalimentado proporcional puro con $v = 0$, $\bar{u} = 360$ y $K_P = 6$	45
5-4	Retrato-fase $(c(t), T(t))$ para el CSTR controlado con $\bar{u} = 360$, $K_P = 6$ y $K_I = 0.5$	46
5-5	Curva de deslizamiento que corresponde a la localización de puntos de equilibrio $\chi(v)$	47
5-6	Retrato-fase $(c(t), T(t))$ para el CSTR controlado con $K_P = 6$, $K_I = 0.5$ y $\bar{u} = 400$ K	47
5-7	Retrato-fase (c, T) para $K_P = 3.0$, $K_I = 0.5$ y $\bar{u} = 370$	49
5-8	Retrato-fase (c, T) para $K_P = 4.0$, $K_I = 0.5$ y $\bar{u} = 370$	49
5-9	Retrato-fase (c, T) para $K_P = 5.8$, $\bar{u} = 370$ y $K_I = 100.0$	50
10-1	Diagrama esquemático del intercambiador de calor.	82
10-2	Mapa en estado estacionario entrada-salida para el intercambiador de calor $\bar{u} \rightarrow \bar{y}_r$	83
10-3	Respuesta escalón de la temperatura de salida $y_r(t) = T_1(L, t)$	84
10-4	Comportamiento de la temperatura de salida regulada $y_r(t) = T_1(L, t)$ para $y^* = 45$ C y tres valores diferentes de la ganancia proporcional $K_{P,r}$	85

10-5	Comportamiento de la temperatura de salida regulada $y_r(t) = T_1(L, t)$ para $K_{P,r} = -0.005 \text{ ms}^{-1}\text{C}^{-1}$ con retroalimentación de salida secundaria adicional.	86
10-6	Mapa en estado estacionario entrada-salida $\bar{w}_I \rightarrow \bar{y}_r(t) = \bar{T}_1(L, t)$ con $K_{P,a} = -0.01 \text{ ms}^{-1}\text{C}^{-1}$ y $K_{P,r} = -0.005 \text{ ms}^{-1}\text{C}^{-1}$	86
10-7	Temperatura regulada $y_r(t)$ y la velocidad de flujo $v_2(t)$ para $K_{P,r} = -0.002 \text{ ms}^{-1}\text{C}^{-1}$ y tres valores diferentes de la ganancia integral $K_{I,r}$ ($\text{ms}^{-2}\text{C}^{-1}$).	87
10-8	Comportamiento a lazo cerrado bajo una perturbación en la temperatura de alimentación $T_{1,in}$ del primer fluido y un cambio en escalón del punto de referencia ($y^* = 35 \text{ C}$).	88
10-9	Temperatura regulada $y_r(t)$ y la velocidad de flujo $v_2(t)$ cuando 1, 2 y 3 temperaturas diferentes del fluido del proceso se retroalimentan.	89
10-10	Diagrama esquemático del reactor bio-químico	89
10-11(a)	Comportamiento del sistema controlado para diferentes valores de ε . (b) Mapa en estado estacionario entrada-salida.	92
10-12	Diagrama esquemático del reactor químico exotérmico.	95
10-13	Mapa en estado estacionario entrada-salida para el reactor reactor químico exotérmico $\bar{u} \rightarrow \bar{y}_r$	95
10-14	Respuesta en escalón de la concentración de salida de B $y_r(t) = \zeta_B(L, t)$	96
10-15	Perfiles de concentración (ζ_B) y temperatura (T) en estado estacionario.	97
10-16	Comportamiento de la concentración de B de la salida regulada $y_r(t) = \zeta_B(L, t)$, para $y^* = 0.85 \text{ kmolm}^{-3}$, $K_{I,r} = 0.1 \text{ m}^4\text{kmol}^{-1}\text{s}^{-2}$, y tres valores diferentes de la ganancia proporcional $K_{P,r}$ ($\text{m}^4\text{kmol}^{-1}\text{s}^{-1}$).	98
10-17	Comportamiento a lazo cerrado bajo una perturbación (+20%) en la concentración de alimentación de A, $\zeta_{A,in}$ y un cambio del punto de referencia ($y^* = 0.80 \text{ kmolm}^{-3}$) cuando se retroalimentan temperaturas intermedias como un lazo secundario.	99
A-1	Gráfica del lugar geométrico de las raíces del CSTR en lazo cerrado.	110

Índice de Tablas

10.1 Parámetros del reactor químico de flujo tapón	94
--	----

Lista de Acrónimos

PDE.....	Ecuaciones Diferenciales Parciales ¹
ODE.....	Ecuaciones Diferenciales Ordinarias
CSTR.....	Reactor Continuo de Tanque Agitado
PFTR.....	Reactor Tubular de Flujo Tapón
DPS.....	Sistemas de Parámetros Distribuidos
SISO.....	Una Entrada-Una Salida
PI.....	Proporciona-Integral
PID.....	Proporcional-Integral-Deivativo
IMC.....	Controlador de Modelo Interno
HPLIC.....	Control de Ganancia Proporcional-Alta mas Integral-Baja
GUES.....	Estabilidad Exponencial Uniforme Global

¹Debido a su aceptación universal, los acrónimos se derivan de sus siglas en ingles.

Prefacio

Es bien conocido que la teoría de control ha tenido un rol crucial en el progreso de la tecnología e industria. Básicamente, los sistemas de control en procesos químicos tienen tres funciones: seguridad, operabilidad, (*i.e.*, para asegurar que ciertos valores de los parámetros se mantienen dentro ciertos rangos de operación), y controlar la calidad del producto. Existen dos propuestas principales para el diseño de esquemas de control: control a lazo abierto y control retroalimentado. El primero de ellos parte de un modelo que se supone perfecto y con base a tal modelo diseñar el control. Sin embargo, los modelos de los procesos químicos son inciertos y por lo tanto es mejor trabajar con un modelo que retenga las características dominantes del proceso y usar retroalimentación para corregir las desviaciones del comportamiento deseado. Los requerimientos principales para los sistemas de control retroalimentado son estabilidad, desempeño y robustez. En muchos casos, el diseño de control retroalimentado más simple y efectivo es el control lineal. El control lineal es fácil de implementar y es una de las estrategias de control más usadas en aplicaciones industriales. De hecho, se conoce bien que en el ámbito industrial el control lineal ha demostrado una gran flexibilidad, capacidades de estabilización, buen desempeño y robustez. Sin embargo, hasta el mejor conocimiento del autor, en la literatura científica en ingeniería química, no se encuentran resultados formales que respalden tales observaciones. Sin hacer uso de terminología técnica, el problema de control se puede identificar al hacer referencia a la cita “*en la practica funciona, pero, ¿y en la teoría?*”.

El objetivo de esta tesis es estudiar formalmente el problema de estabilización de reactores químicos continuos con control lineal. Básicamente, esta tesis describe un marco de análisis de estabilidad el cual se puede usar para proporcionar información sobre el desempeño de reactores químicos controlados. En esta tesis se explotan las características dominantes de los modelos de los reactores químicos controlados en conjunción con resultados de estabilidad de sistemas

perturbados singularmente y funciones de energía. Así, esta tesis describe un trabajo que se sitúa entre la teoría de control (análisis de estabilidad) y el control de procesos químicos. Como se hace en la mayoría de los trabajos de control, aquí solo se proporciona una breve descripción del modelo matemático para cada problema de control que discutimos. Las áreas de modelamiento y simulación de procesos químicos son muy vastas y merecen estudios extensos que están fuera de los objetivos principales de esta tesis. Por otro lado, el material matemático que se usa en esta tesis es estándar y esta disponible en la literatura científica.

Finalmente, en cuanto a la presentación del texto, esta tesis fue escrita en el procesador *Scientific WorkPlace*, las figuras capturadas en *Origin*, y las simulaciones numéricas se realizaron en *Visual Fortran*.

Agradecimientos

Quiero expresar mi sincero agradecimiento a mi asesor, Dr. José Álvarez-Ramírez, por su orientación y apoyo durante los últimos cinco años de posgrado (maestría y doctorado). Ha sido un privilegio y placer ser su estudiante.

Las contribuciones de los revisores ayudaron a mejorar substancialmente esta tesis. Aprecio la detallada y completa revisión del Dr. Gerardo Espinosa en la versión inicial de este manuscrito. El Dr. Rubén Garrido y el Dr. Jesús Álvarez Calderón aportaron excelentes comentarios constructivos que han sido valiosos para limitar los alcances y perspectivas de esta investigación. Agradezco al Dr. Carlos Ibarra por su entusiasmo y las fructíferas interacciones durante el proceso de revisión de este trabajo, en especial el control de sistemas de parámetros distribuidos. Agradezco la colaboración del Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia en la parte de control de sistemas de parámetros distribuidos y al Dr. Felipe López Isunza por su participación y comentarios en las etapas iniciales de esta investigación.

Estoy en deuda con muchos colegas por discusiones estimulantes durante la realización de esta investigación. Me gustaría mencionar particularmente a la Dr. Ilse Cervantes, a la Dr. América Morales y al Dr. Rosendo Monroy Loperena. Ellos me ayudaron a ampliar mi visión y comprensión del campo de control.

Agradezco el financiamiento otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONA-CyT, Reg.-124865) y del Instituto Mexicano del Petróleo (IMP) el cual me permitió realizar esta investigación.

Valoro mucho la formación que he recibido en la UASLP y en la UAM-I. Extiendo además mi agradecimiento al Dr. Edgar Moctezuma y al Dr. Roberto Leyva por su apoyo cuando manifesté mi intención de realizar estudios de posgrado.

Deseo agradecer a mis compañeros y amigos de licenciatura y posgrado su apoyo en forma di-

recta o indirecta para hacer agradable mi estancia en la UASLP y en la UAM-I. Ellos saben quienes son y seria dificil mencionarlos a todos aquí. En especial, deseo manifestar mi agradecimiento a Alfredo Barajas.

Mis familiares merecen un fraternal agradecimiento por su incondicional apoyo, el cual nunca podre agradecer lo suficiente. Por ultimo, pero no en importancia, deseo expresar un agradecimiento muy especial a Laura Ballesteros por su compañía en los últimos años.

Capítulo 1

Introducción General

1.1 El control lineal de procesos químicos

Los controladores lineales, incluyendo el proporcional-integral (PI), son los controladores dominantes en la mayoría de los procesos químicos industriales prácticos. Su popularidad se debe a su robustez en un amplio rango de condiciones de operación, la simplicidad de su estructura, la familiaridad de diseñadores y operadores con los algoritmos lineales, no es costosa su implementación y funcionan razonablemente bien en la mayoría de sistemas de control industriales. La principal desventaja del controlador PI/PID es que generalmente su diseño y análisis no se basa en el modelo del proceso a controlar (sin embargo, puede considerarse una ventaja en procesos químicos muy complejos). Esto es, el conocimiento de la dinámica del proceso (*e.g.*, tiempo muerto o no linealidades), no se usa explícitamente en la ley de control.

A pesar de su popularidad, en la literatura científica en ingeniería química, hasta el mejor conocimiento del autor, no se encuentra reportado un análisis formal que respalde sus capacidades de robustez y estabilización en procesos químicos. Una posible razón para la ausencia de formalidad se puede identificar con la falta de un análisis de estabilidad del sistema a lazo cerrado resultante que retenga las características dinámicas dominantes del proceso controlado. Tradicionalmente, el diseño y análisis del control lineal en procesos químicos se ha basado en aproximaciones lineales a la dinámica del sistema, ya sea mediante el uso de modelos lineales simples identificados de datos del proceso o que surgen de la linealización de los términos no lineales. Esto conduce eventualmente a resultados de estabilidad locales. En principio, un análisis formal

que incluya las no linealidades inherentes en los procesos químicos controlados debe (i) proporcionar mejoras en el diseño de control y (ii) conducir a resultados que respalden las propiedades en lazo cerrado observadas.

1.2 Objetivos de la tesis

En esta tesis el interés de investigación principal es estudiar el control lineal en reactores químicos continuos. Los reactores químicos continuos se adoptan prácticamente en todas las industrias químicas a gran escala. En general, esto implica reducir costos debido a que se eliminan operaciones, tales como el repetido llenado y vaciado de reactores lote (*batch*), y además, permiten una mejor constancia en las condiciones de reacción.

El objetivo principal de esta tesis es estudiar formalmente la estabilización de reactores químicos continuos con control lineal. Los objetivos particulares de esta tesis son tres. Primero, analizar el sistema en lazo cerrado, que resulta entre el proceso químico y un control lineal, en un marco de análisis no lineal, explotando además las características dominantes de los modelos dinámicos de los reactores químicos considerados. Segundo, identificar las condiciones de estabilidad que resultan del análisis no lineal, de forma que permitan proporcionar mejoras a los diseños de control lineales estudiados. Finalmente, demostrar la aplicabilidad práctica de los resultados encontrados en distintos casos de interés industrial.

Básicamente, en esta tesis se establecen resultados de estabilidad global del control lineal en dos clases de reactores químicos; reactores continuos de tanque agitado y reactores continuos tubulares. Los puntos clave para el análisis de estabilidad son; (1) la estructura del modelo matemático del reactor químico a controlar, (2) resultados de estabilidad de sistemas perturbados singularmente, y el uso de funciones de energía (en reactores tubulares). El método de perturbaciones singulares es valioso en el análisis de sistemas en los cuales el orden dinámico cambia como el resultado de desprestigiar algunos elementos, o hacer algunas simplificaciones. Para un punto de equilibrio dado se puede establecer propiedades de estabilidad asintótica, si el sistema original cumple algunas condiciones. Por otro lado, el método que se basa en el estudio de funciones de energía para ecuaciones diferenciales parciales (PDE) no lineales se ha empleado ampliamente en estudios que se ocupan de la estabilidad, existencia global, y comportamiento asintótico de soluciones.

1.3 Bosquejo de la tesis

Esta tesis se divide en dos partes, la primera trata con el control lineal en reactores continuos de tanque agitado¹ y la segunda trata el control lineal de reactores tubulares². La primera clase de reactores son procesos de dimensión finita, la segunda clase son procesos de dimensión infinita.

La diferencia entre ambos casos se puede establecer como sigue. En general, un sistema químico homogéneo se puede caracterizar localmente por la velocidad, las concentraciones de todas las especies químicas, y una propiedad termodinámica, tal como la temperatura. Estas variables se denominan variables de estado. Un sistema distribuido esta especificado completamente por los valores de las variables de estado en cada punto del sistema, en tanto que un sistema uniforme, se especifica por los valores de las variables de estado en un punto simple. La evolución de sistemas con cambio químico se describe por las ecuaciones de conservación de momento, energía, y masa de cada especie química. Es decir, las variables de estado satisfacen ecuaciones diferenciales apropiadas. El espacio en cual la variable de estado existe se denomina el espacio-estado. Para un sistema de dimensión infinita el espacio-estado correspondiente es de dimensión infinita.

1.3.1 Parte I. Control Lineal de CSTR

Un tipo de reactor que se usa ampliamente en la industria es el de tanque agitado, en el cual existe un flujo continuo del material reactante. Este reactor se conoce como *Reactor Continuo de Tanque Agitado* (CSTR). En esta parte de la tesis se estudia la estabilidad del control lineal en CSTR. Con base a un análisis no lineal de estabilidad, se derivan resultados para asegurar que un control lineal (construido sobre el modelo no lineal completo) conduce a un sistema en lazo cerrado donde el estado a controlar es un atractor estable único. El tratamiento se hace para una clase de funcionalidades de reacción que consideran características esenciales que pertenecen a una clase importante de reactores industriales, *i.e.*, fenómenos de ignición-extinción, multiplicidad a lazo abierto y operación en puntos inestables a lazo abierto.

¹Los resultados de esta parte, con modificaciones menores, fueron publicados con el título, "On classical PI control of chemical reactors", co-autorado con José Álvarez-Ramírez, en la revista *Chemical Engineering Science*, v.56, no. 5/6, pp. 2110-2121 (2000).

²Los resultados de esta parte, con algunas modificaciones, fueron publicados con el título "Linear boundary control for a class of nonlinear PDE processes", co-autorado con José Álvarez-Ramírez y Jesús A. Ochoa-Tapia, en la revista *Systems & Control Letters*, v. 44, pp. 395-403 (2001).

En el Capítulo 2 se presenta la motivación para estudiar el control lineal para el CSTR considerado y se establece el objetivo de esta parte de la tesis. En el Capítulo 3 se discuten las simplificaciones y consideraciones principales del modelo del CSTR a estudiar. En el Capítulo 4 se presenta el análisis lineal y no lineal del CSTR controlado con el control lineal clásico PI. El Capítulo 5 presenta algunos resultados numéricos sobre el caso de estudio de un CSTR que presenta tres estados estacionarios, uno de ellos inestable. Finalmente, el Capítulo 6 presenta algunas conclusiones del control lineal en CSTR.

1.3.2 Parte II. Control Lineal de Sistemas de Parámetros Distribuidos (DPS)

Teóricamente, todos los sistemas físicos son DPS. Solo a través de algún tipo de simplificaciones, tales como el mezclado perfecto en un tanque agitado, se obtienen modelos de parámetros concentrados para la dinámica de los fenómenos físicos. Los reactores tubulares se caracterizan por una dimensionalidad infinita, es decir, requieren de ecuaciones diferenciales parciales (PDE) para describir adecuadamente su comportamiento. La descripción y el análisis correcto de un controlador asociado a un proceso de parámetros distribuidos debe ser en términos de ecuaciones diferenciales parciales con acciones de control que se apliquen en el dominio espacial completo (control distribuido) o en la frontera del proceso (control en frontera). La restricción más importante para el control retroalimentado de DPS es que el algoritmo debe ser de dimensión finita con el fin de que sea implementable en la práctica con un número finito de actuadores y sensores. En esta parte de la tesis se estudia el control lineal de DPS, para los cuales la entrada manipulada actúa en la frontera del dominio espacial. El resultado principal muestra que si el proceso que se describe por PDE es estable exponencialmente, tiene el signo de la ganancia definido y posiblemente con mediciones de salida retardadas, un compensador lineal PI con ganancias bajas se puede usar para conducir a una operación estable con regulación exponencial de la salida. A pesar de que aquí se tratan sistemas estables, se espera que un esquema de control retroalimentado tenga mejores propiedades que un control a lazo abierto, el cual es incapaz de, por ejemplo, rechazar perturbaciones aditivas a la entrada de la planta.

El Capítulo 7 presenta la motivación para estudiar el control en frontera de DPS, una breve discusión sobre el estado del arte en el control de sistemas de parámetros distribuidos, y define el

objetivo de esta parte de la tesis. En el Capítulo 8 se introduce la clase de DPS que se tratan con las consideraciones pertinentes. En el Capítulo 9 después de enunciar el problema de control, se establecen los resultados que se derivan del análisis de estabilidad no lineal sobre la clase de DPS que se consideran. El Capítulo 10 presenta varias simulaciones numéricas para 3 casos de estudio para mostrar las aplicaciones potenciales de los resultados de estabilidad encontrados. Finalmente en el Capítulo 11 se proporcionan las conclusiones sobre el control lineal en frontera para la clase de DPS considerados.

El Capítulo 12 cierra la tesis con conclusiones generales de la tesis e identifica algunas líneas de investigación abiertas para trabajo futuro sobre el estudio del control lineal en procesos químicos. Finalmente, la sección de apéndices presenta algún material útil que se usa a través del texto principal.

Parte I

Control Lineal de Reactores Continuos de Tanque Agitado

Capítulo 2

Introducción

Por lo general, los reactores continuos de tanque agitado (CSTR) se operan cerca de o en puntos de equilibrio inestables, que corresponden a una producción óptima del proceso [1]. Aun cuando el punto de equilibrio sea estable a lazo abierto, este puede ser muy sensible a cambios de carga (*e.g.*, cambios en las condiciones de alimentación). Debido a que los CSTR son comúnmente la parte central de un proceso químico completo, el control de la operación del CSTR ha sido uno de los problemas más importantes en la industria química.

La regulación de temperatura es la operación de control más sencilla de los CSTR. La mayoría de controladores de temperatura en la industria química son controladores PI clásicos [1,2]. Existen muchas razones para esto, incluyendo sus antecedentes de operación probada, el hecho que se entiende bien el funcionamiento por parte de los técnicos, operadores industriales y personal de mantenimiento. Además, en muchas aplicaciones, el hecho que un controlador PI diseñado adecuadamente y bien sintonizado logre o exceda los objetivos de control. Un controlador industrial PI tiene muchas ventajas adicionales que lo hacen práctico para la operación de un CSTR. Por ejemplo, cuenta con interrupción automática y manual, seguimiento del punto de referencia (*set point*) y modos manuales de emergencia.

Básicamente, el controlador PI para regulación de temperatura se diseña en base a una linealización alrededor del punto de equilibrio de operación. El diseño y análisis de controladores PI para la estabilización y regulación de CSTR se origina en el trabajo de Aris y Amundson [3] en los cincuentas, y ha dado lugar, desde entonces, a una literatura abundante y numerosas aplicaciones exitosas. Sin embargo, existen preguntas teóricas importantes que todavía están abiertas. Una

de ellas, la cual es el objetivo de esta parte de la tesis, es la capacidad del controlador PI clásico (lineal) para dar resultados *no-locales* sobre la estabilización de CSTR. De hecho, de la literatura científica en ingeniería química existente, hasta el mejor conocimiento del autor, los resultados que existen sobre el controlador clásico PI en CSTR son de naturaleza *local*.

El objetivo en esta parte de la tesis es estudiar el problema de estabilización de reactores químicos con el controlador clásico PI. Rigurosamente hablando, se ha probado que si la dinámica isotérmica es asintótica globalmente estable, la estabilización global de la dinámica del reactor químico se logra vía compensación de temperatura con el controlador clásico PI. Además, los mecanismos de la estabilización con el control clásico PI se discuten considerando el marco de análisis no lineal propuesto. En específico, se muestra que la acción integral puede verse como un mecanismo de adaptación que actúa a lo largo de una cierta localización de puntos de equilibrio.

Capítulo 3

Preliminares

Notación. $\mathbb{R}_{\geq 0}$ y $\mathbb{R}_{> 0}$ son respectivamente el conjunto de números no negativos y positivos; $\|x\|$ es la norma euclidiana del vector x , y \dot{x} denota la derivada respecto al tiempo dx/dt .

3.1 Consideraciones generales sobre el modelamiento de CSTR

En el CSTR los reactivos se introducen y los productos se extraen simultáneamente y en forma continua. Por lo general, se considera que un CSTR es homogéneo y por lo tanto se modela sin variaciones espaciales en la concentración, temperatura o velocidad de reacción en todo el recipiente. De hecho la consideración más importante en relación a la dinámica del CSTR es que ocurre un mezclado perfecto dentro del reactor. Esto significa que las propiedades de la mezcla reactante se consideran uniformes en cualquier parte dentro del recipiente de reacción y por lo tanto son idénticas a las propiedades de la corriente de salida. Otra consideración importante es que la corriente de entrada se mezcla instantáneamente con la mezcla presente en el reactor. En la práctica, si un elemento de material reactante que entra se distribuye uniformemente por todo el tanque en un tiempo mucho más corto que el tiempo de residencia promedio en el tanque, entonces el tanque se puede considerar bien mezclado. Existen interacciones complejas entre los fenómenos de transporte y las cinéticas de reacción que caracterizan esta clase de reactores y determinan su desempeño. El modelamiento de los mecanismos cinéticos y los fenómenos de transferencia de calor ha sido una área de investigación activa en ingeniería química en años

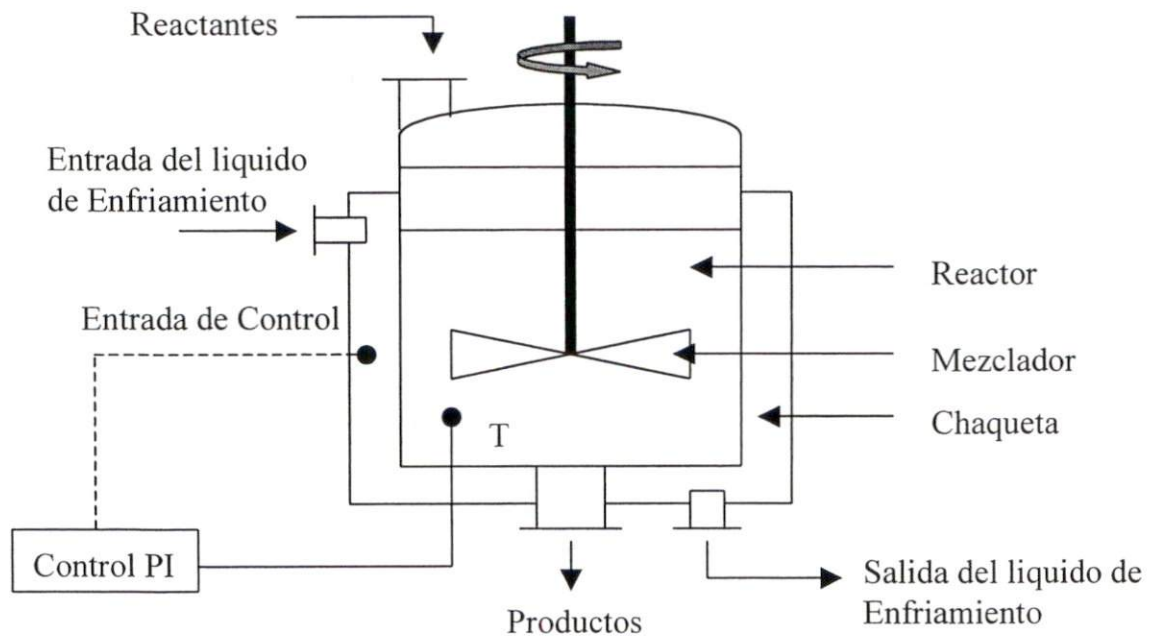


Figura 3-1: Diagrama esquemático del CSTR.

recientes. Desafortunadamente en muchos casos la estructura de la cinética de reacción continua aun siendo incierta. En forma similar a otros trabajos de investigación en esta área, en esta tesis se introducen algunas consideraciones en un intento de reducir la complejidad del modelo. En particular se considera lo siguiente:

- Existe una uniformidad completa de la concentración y temperatura dentro del reactor.
- El volumen del reactor y de la chaqueta son constantes.
- La dinámica de la chaqueta de enfriamiento es despreciable.
- Las entalpías de reacción son independientes de la temperatura, positivas para reacciones endotérmicas y negativas para reacciones exotérmicas.
- Las capacidades caloríficas son constantes.

La Figura 3.1 presenta el diagrama esquemático del CSTR. Para la descripción de la dinámica del reactor químico se usa el formalismo hecho previamente en la literatura [4], [5], [6]. Por conveniencia, se describe el modelo de CSTR básico, sus propiedades generales y consideraciones como en Viel *et al.*, [7].

3.2 Modelo matemático del CSTR

Considérese un CSTR en el cual un conjunto de m reacciones con n componentes ($n > m$) se lleva a cabo. Si el reactor esta mezclado perfectamente, la dinámica esta gobernada por las siguientes ecuaciones (derivadas de balances de masa y energía):

$$\begin{aligned}\dot{c} &= \theta(c_{in} - c) + Er(c, T) \\ \dot{T} &= \theta(T_{in} - T) + H^T r(c, T) + \gamma(u - T)\end{aligned}\tag{1}$$

Donde $c \in \mathbb{R}^n$ es el vector de concentraciones de las especies químicas involucradas, $c_{in} \in \mathbb{R}^n$ es el vector de concentraciones de alimentación constantes y no negativas, $T \in \mathbb{R}$ es la temperatura del reactor, $T_{in} \in \mathbb{R}$ es la temperatura de alimentación constante y no negativa, $r(c, T) \in \mathbb{R}^m$ es el vector de cinéticas de reacción, $E \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ es la matriz estequiométrica, $H \in \mathbb{R}^m$ es el vector de entalpías de reacción constantes, θ y $\gamma \in \mathbb{R}$ son respectivamente la rapidez de dilución y el parámetro de transferencia de calor y u es la temperatura de chaqueta, la cual se toma como la entrada de control.

En el modelo se supone que el tiempo de residencia $1/\theta$ y el coeficiente de transferencia de calor γ se conocen con exactitud. En algunos casos (*e.g.*, reactores de polimerización) γ cambia con variaciones de concentración y temperatura. La matriz estequiométrica, esta asociada a la estequiometria de la reacción, la cual indica las relaciones algebraicas que se aplican a cambios de composición, sin considerar las velocidades de estos cambios.

El primer termino a la derecha en el modelo (1) es la pérdida de calor total debido al flujo de reactantes y la salida de productos; el segundo termino es la expresión de velocidad de reacción, y el tercer termino en la segunda ecuación se debe al enfriamiento/calentamiento de la mezcla reactante por la chaqueta de enfriamiento. El calor que se remueve a través de la pared del reactor es proporcional al área de la pared y a la diferencia en temperatura entre la mezcla reactante y un medio de enfriamiento que circula a través de la chaqueta. En la practica el procesos de extracción de calor se regula al manipular la velocidad del fluido de enfriamiento. En muchos casos la dinámica de la chaqueta es rápida en comparación con la dinámica del reactor, y, por lo tanto, la velocidad del fluido de enfriamiento se enlaza a la temperatura de la chaqueta. Así, la esencia del problema de control se retiene si la temperatura de enfriamiento u , se considera como la variable manipulada.

El modelo cinético básico para procesos isotérmicos toma la siguiente forma

$$r = k_0 \prod_i c_i^{\alpha_i}$$

donde c_i son las concentraciones de los reactantes involucrados en la reacción, k_0 es la constante cinética, y α_i están definidos como el orden de la reacción con respecto al i -ésimo reactante. Para reacciones elementales, los ordenes de reacción son iguales a los coeficientes estequiométricos.

Para reacciones no-isotérmicas, la expresión usada mas comúnmente para expresar la dependencia con respecto a la temperatura T es la ley de Arrhenius, vía la constante cinética

$$k_0 = \exp(-\mathcal{E}_A/R_g T)$$

donde $\mathcal{E}_A > 0$ es una energía de activación y $R_g > 0$ es la constante universal de los gases.

Es bien conocido que la relación exponencial de la velocidad de reacción $r(c, T)$, con respecto a la temperatura del reactor es una de las no linealidades principales. Como una consecuencia de la no linealidad de la cinética de reacción, el CSTR puede desplegar una gran variedad de comportamientos dinámicos, desde multiplicidad de estados estacionarios, oscilaciones sostenidas [3], y atractores extraños [8].

3.3 Hipótesis generales sobre el modelo del CSTR

Cualquier modelo cinético debe en principio ser consistente con la conservación de especies atómicas, la no-negatividad de las concentraciones y temperatura, y la primera y segunda ley de la termodinámica. El primer requisito se considera con la matriz estequiométrica. La primera ley de la termodinámica se incluye en la ecuación de energía. El requerimiento que la cinética química obedezca la segunda ley de la termodinámica es muy restrictivo, debido a que este involucra expresiones para la entropía, potenciales químicos, etc., los cuales no se conocen para todos los sistemas. La no-negatividad de la concentración y temperatura se asegura con las siguientes hipótesis:

Hipótesis A. (*Principio de conservación de masa*). Existe un vector positivo $\omega \in \mathbb{R}^n$ tal que $\omega^T E = 0$.

Hipótesis B. (*Condición de Lipschitz*). El vector $r(c, T)$ es continuamente diferenciable (i.e.,

$r(c, T) \in C^1$), no negativo, acotado y $r(c, T) = 0$ para toda $T \leq 0$. Como una consecuencia, existe una constante positiva k_r tal que

$$\|r(c, T) - r(c, T_1)\| \leq k_r |T - T_1|, \text{ para todo } (c, T) \in \Omega \times \mathbb{R}$$

En particular, la condición de *Lipschitz* en el termino de reacción, se satisface si este posee derivadas continuas. Como una consecuencia del teorema del valor medio, un estimado de la constante k_r se puede tomar como $\max_{(c, T) \in \Omega \times \mathbb{R}_{>0}} \|\partial r(c, T)/\partial T\|$.

La Hipótesis A implica que el sistema de reacción conserva la masa, así la igualdad $\omega^T E = 0$ establece que lo que se produce por el sistema de reacción no es mayor que lo que se consume [9]. Con base en la Hipótesis A, se puede establecer el siguiente resultado sobre el acotamiento de las concentraciones en un reactor químico descrito por el modelo (1) [7],

Lema 1. (*Acotamiento uniforme*). *Bajo la Hipótesis A, el vector de concentraciones $c(t)$ permanece no negativo para toda $t \geq 0$ si $c(0) \geq 0$ y, además, admite como un dominio invariante positivo al conjunto compacto $\Omega = \{c \in \mathbb{R}^n : c \geq 0, \omega^T c \leq \omega^T c_{in}\}$. Así, el vector de concentraciones está acotado uniformemente con respecto a la trayectoria de temperatura.*

El Lema 1 es una consecuencia de la Hipótesis A. Además, $\omega^T \dot{c} \leq \omega^T \theta(c_{in} - c)$ (debido a que $\omega^T Er(c, T) = 0$ y $\omega^T c \leq \omega^T c_{in}$) implica la invarianza positiva del conjunto Ω . En el resto de esta parte de la tesis el vector de concentraciones c se restringe al conjunto acotado Ω . En este caso, en que la velocidad de dilución θ es cero en (1), entonces $\omega^T \dot{c} = \omega^T Er(c, T) = 0$, esto implica la conservación de la masa. Físicamente, el acotamiento del dominio Ω , se debe a la conservación de las especies químicas y la energía y la no-negatividad de las variables c y T .

La Hipótesis B se satisface por la mayoría de las reacciones químicas industriales [4]. Para $T = 0$, $r(c, 0)$ implica que no hay actividad de la reacción en la temperatura del cero absoluto (Kelvin), de acuerdo con el principio termodinámico de que una reacción química no puede ocurrir en el cero absoluto. Se puede mostrar que la Hipótesis B se satisface cuando las funciones $k_i(T)$ están dadas por la ley de Arrhenius. De hecho, en este tipo de reacciones, se puede suponer que la velocidad de reacción $r(c, T)$ es separable $r(c, T) = r(c)r(T)$. Debido a que $r(c)$ es una función continua y c esta acotada, es suficiente mostrar que para $T \in [0, +\infty]$ $r(T)$ esta acotada. De la ley de Arrhenius $r(T) = k_i \exp(-\varepsilon_1/T)$ tal que $0 \leq r(T) \leq k_i$. por lo tanto, $r(c)r(T)$ esta acotada

y tiene derivadas continuas.

Se supone además que el sistema (1) satisface la siguiente hipótesis.

Hipótesis C. (*Hipótesis de fase-mínima*). Las dinámicas isotérmicas $\dot{c} = \theta(c_{in} - c) + Er(c, T^*)$ son asintótica globalmente y exponencial localmente estables (respecto al conjunto Ω) en el punto de equilibrio $c^* \in \Omega$.

Esta hipótesis establece que las concentraciones de los n componentes de la mezcla reactante alcanzan su valor en estado estacionario cuando la temperatura está en su valor en estado estacionario. Así, la Hipótesis C asegura que se puede establecer una relación para c_{eq} en términos de T_{eq} (i.e., $c_{eq} = \kappa(T_{eq}) \in C^1$). Como una consecuencia de la Hipótesis C, se asegura la convergencia de la dinámica interna al punto de equilibrio $c^* \in \Omega$. Además, la dinámica isotérmica coincide con la dinámica cero del mapa entrada-salida $u \rightarrow T$ (ver [7]).

Varios sistemas de reacciones químicas industriales son de fase-mínima en el sentido de la Hipótesis C [10], [11], incluyendo reacciones catalíticas de la industria petroquímica. Por medio del teorema de deficiencia cero, Feinberg [10] ha mostrado que un gran conjunto de redes de reacción químicas que ocurren en un CSTR isotérmico tiene un punto de equilibrio único (un atractor global), es decir, satisfacen la Hipótesis de fase mínima C, que incluyen redes reversibles débiles con cinética de acción de las masas. En términos aproximados, el teorema de deficiencia cero afirma que, al menos cuando la cinética es de acción de la masas, no se debe de esperar un comportamiento exótico (e.g., múltiples estados estacionarios, estados estacionarios inestables, y trayectorias de composición periódicas) que resulte de las ecuaciones diferenciales que se derivan de una red de deficiencia cero.

Debe notarse que a pesar de la estabilidad asintótica global en la condición isotérmica, la dinámica total del reactor a lazo abierto puede tener puntos de equilibrio inestables, debido a la interacción con la dinámica de la temperatura. La operación del punto de equilibrio (c^*, T^*) puede corresponder a un punto de equilibrio inestable con rendimiento o productividad óptima del proceso, de aquí, la necesidad de un control retroalimentado estabilizante.

Capítulo 4

Control Lineal del CSTR

4.1 El problema de control

El problema que se abordará en esta parte de la tesis es la estabilización retroalimentada del modelo CSTR (1) con el controlador clásico PI:

$$u = \bar{u} + K_P(T^* - T) + K_I \int_0^t (T^* - T(\sigma))d\sigma \quad (2)$$

donde $T^* > 0$ es el punto de referencia de temperatura, $\bar{u} > 0$ es una temperatura de chaqueta nominal y constante, K_P y K_I son respectivamente las ganancias proporcional e integral. Las mediciones de temperatura se obtienen fácil y económicamente en aplicaciones industriales. Por otro lado, las mediciones de concentración raramente se hacen por que los dispositivos de medición (*e.g.*, cromatógrafos) son costosos y comúnmente inducen grandes retardos en la entrada de los lazos de control. Esta es una de las razones para explicar el hecho que el control PI con retroalimentación de temperatura se use ampliamente en aplicaciones industriales para el control de CSTR .

4.2 Análisis lineal de estabilidad

Como motivación para el análisis de estabilización global con el control PI del modelo no lineal del CSTR (1), en esta sección se proporciona un resultado de estabilización en un marco de análisis lineal [3].

Tradicionalmente, el análisis de estabilidad de CSTR con compensación PI se ha abordado vía un análisis lineal. En la vecindad $N(c^*, T^*)$ del punto de equilibrio (c^*, T^*) , se puede obtener una versión entrada-salida lineal del modelo (1) vía una linealización local:

$$\frac{\Delta T(s)}{\Delta u(s)} = \frac{B(s)}{A(s)}$$

donde $\Delta T(s)$ y $\Delta u(s)$ denotan variables de desviación, $s = d/dt$, $B(s) = b_n s^n + b_{n-1} s^{n-1} + \dots + b_0$ y $A(s) = s^{n+1} + a_n s^n + \dots + a_0$. En virtud de la Hipótesis C, $B(s)$ es un polinomio Hurwitz (Apéndice B).

Se puede mostrar que la ganancia de alta frecuencia es $b_n = \gamma > 0$ y en general $a_0 \neq 0$. De hecho, en control de procesos es muy común ajustar una función de transferencia de la forma

$$G(s) = \frac{K}{s + \tau^{-1}}$$

a la respuesta escalón. Donde K es la ganancia del proceso en estado estacionario, y τ es la constante de tiempo a lazo abierto. Muchos procesos químicos (*e.g.*, columnas de destilación, intercambiadores de calor, y CSTR[1]) se pueden modelar por la función de transferencia anterior. En este caso, $b_n = K$, y $a_0 = \tau^{-1}$.

Sea $\Delta T_r(s)$ una trayectoria de referencia pre-establecida. Se tiene el siguiente resultado.

Proposición 1. *Existen dos constantes K_P^{\min} y $K_I^{\max} > 0$ tal que, para toda $K_P > K_P^{\min}$ y $0 < K_I < K_I^{\max}$, el CSTR controlado vía acción PI (1)-(2) es asintóticamente estable con respecto a las condiciones iniciales en $N(c^*, T^*)$. Además, $\Delta T(t) \rightarrow \Delta T_r(t)$ conforme $t \rightarrow \infty$ (*i.e.*, sin desviación de estado estacionario).*

Prueba. Si bien la prueba se hace con herramientas estándares y resultados del análisis lineal, y en cierto sentido es directa, está se explicará con el fin de ilustrar las características principales de la compensación PI; es decir, estabilización con compensación proporcional y eliminación de la desviación en estado estacionario con compensación integral.

1) Estabilización vía compensación proporcional. Bajo compensación proporcional pura, la señal

de transferencia $\Delta T(s)/\Delta T_r(s)$ es

$$\frac{\Delta T(s)}{\Delta T_r(s)} = \frac{K_P B(s)}{A(s) + K_P B(s)}$$

Entonces, la señal de transferencia $\Delta T(s)/\Delta T_r(s)$ es estable si y solo si el polinomio característico $A(s) + K_P B(s) = 0$ es Hurwitz. Debido a que $b_n > 0$ y $B(s)$ es Hurwitz, un análisis directo de localización de raíces (Apéndice A) muestra que existe una constante K_P^{\min} , no necesariamente positiva, tal que $A(s) + K_P B(s) = 0$ es Hurwitz. Además, en el caso que $A(s)$ sea no-Hurwitz (*i.e.*, sistema a lazo abierto inestable), entonces $K_P^{\min} > 0$.

- 2) Eliminación de la desviación en estado estacionario con compensación integral. Una desventaja de la compensación proporcional pura es que se presenta desviación en estado estacionario. De hecho, si $a_0 \neq 0$ se tiene que $\Delta T(0)/\Delta T_r(0) = K_P b_0 / (a_0 + K_P b_0) \neq 1$. Esta desviación en estado estacionario puede reducirse, pero no eliminarse, con ganancias proporcionales muy altas. Esto es, $\Delta T(0)/\Delta T_r(0) \rightarrow 1$ conforme $K_P \rightarrow \infty$. No obstante, en la práctica el retroalimentado excesivo de la alta-ganancia no es recomendable, debido a que esto puede conducir a efectos a lazo-cerrado indeseables, tales como la amplificación de ruido de medición y la excitación de dinámicas de alta-frecuencia. Para evitar el uso de ganancias proporcionales excesivamente altas, se propone la adición de una acción integral. En tal caso, la señal de transferencia $\Delta T(s)/\Delta T_r(s)$ esta dada por

$$\frac{\Delta T(s)}{\Delta T_r(s)} = \frac{(K_P s + K_I) B(s)}{s A(s) + (K_P s + K_I) B(s)}$$

Se nota que $\Delta T(0)/\Delta T_r(0) = 1$, así que se elimina la desviación en estado estacionario. Ahora el CSTR controlado (1)-(2) es asintóticamente estable si y solo si el polinomio $s A(s) + (K_P s + K_I) B(s) = 0$ es Hurwitz. Se puede volver a escribir este polinomio como $s(A(s) + K_P B(s)) + K_I B(s) = 0$. De este modo, debido a que $A(s) + K_P B(s) = 0$ es un polinomio Hurwitz para $K_P > K_P^{\min}$, de los resultados en Smith [12] se puede concluir que existe una $K_I^{\max} > 0$ tal que $s(A(s) + K_P B(s)) + K_I B(s) = 0$ es Hurwitz para toda $0 < K_I < K_I^{\max}$. Esto concluye la prueba. ■

Observación 1. Debido a que $K_P > K_P^{\min}$ y $0 < K_I < K_I^{\max}$ se requieren en la Proposición

1, el controlador PI clásico de CSTR se puede ver como un tipo de ganancias PI de compensación “proporcional-alta” más “integral-baja” (HPLIC) para garantizar la estabilización local en $N(c^*, T^*)$ sin desviación en estado estacionario.

Aunque las metodologías de análisis lineal están bien establecidas y son poderosas, la principal desventaja es que conducen solo a resultados de naturaleza *local*. De esta manera, el análisis lineal solo garantiza estabilidad para puntos suficientemente cercanos al punto de operación (c^*, T^*) . Un estimado para las cotas del dominio de atracción del origen del sistema linealizado se puede obtener del teorema de linealización del método de Liapunov. Un problema abierto sobre la estabilización PI de CSTR, que proviene de los resultados de Aris y Amundson [3], es como extender los resultados enunciados en la Proposición 1 dentro de un marco de análisis no lineal con el objetivo de obtener resultados de estabilización global. Básicamente, es el tema que se aborda en esta parte de la tesis.

En la siguiente sección, se proporciona un marco de análisis no lineal para probar que las propiedades de estabilización locales con el controlador PI que se establecen en la Proposición 1 se pueden extender en forma global. Básicamente, se probará que el HPLIC conduce a estabilidad asintótica global del modelo CSTR (1) respecto al punto de operación (c^*, T^*) .

4.3 Análisis no-lineal de estabilidad

4.3.1 Control proporcional

Al seguir pasos análogos a los descritos en el análisis lineal, y como un paso preliminar para estudiar la estabilización de CSTR con compensación PI, en esta sección se trata el problema de estabilización de CSTR con retroalimentación proporcional pura. Básicamente, en esta sección se muestra que un retroalimentado proporcional con ganancia suficientemente grande, es capaz de proporcionar estabilización global de CSTR alrededor de un punto de equilibrio único.

Se considera el modelo de CSTR (1) bajo retroalimentación proporcional pura

$$u = \bar{u} + K_P(T^* - T) + v \quad (3)$$

donde v es una constante positiva, que se usara mas adelante para incluir la parte integral en el

control lineal PI. Observar en la Ec. (3) que $\bar{u} + v$ se puede tomar como una entrada de control “nominal” bajo compensación proporcional pura. En esta sección, se muestra que la primera parte de la prueba de la Proposición 1 se cumple globalmente respecto al dominio $\Omega \times \mathbb{R}_{>0}$.

Proposición 2. Sea $K_P^{\min} \stackrel{def}{=} (k_r \|H\| - \theta - \gamma)/\gamma$. Para toda $K_P > K_P^{\min}$, el CSTR controlado (1), (3) tiene un punto de equilibrio único $(c_{eq}, T_{eq}) \in \Omega \times \mathbb{R}_{>0}$. Además, (c_{eq}, T_{eq}) es asintótico globalmente estable y exponencial localmente estable respecto al dominio $\Omega \times \mathbb{R}_{>0}$.

Prueba. i) Unicidad del punto de equilibrio $(c_{eq}, T_{eq}) \in \Omega \times \mathbb{R}_{>0}$. En virtud de la Hipótesis C, el conjunto de ecuaciones algebraicas

$$\theta(c_{in} - c_{eq}) - Er(c_{eq}, T_{eq}) = 0 \quad (4)$$

tienen solución única $c_{eq} = \kappa(T_{eq}) \in C^1$. Si esta relación se usa con la ecuación de temperatura de equilibrio T_{eq} , y el control proporcional u

$$\begin{aligned} 0 &= \theta(T_{in} - T_{eq}) + H^T r(\kappa(T_{eq}), T_{eq}) + \gamma(u - T_{eq}) \\ u &= \bar{u} + K_P(T^* - T_{eq}) + v \end{aligned}$$

la temperatura de equilibrio T_{eq} satisface la relación

$$-(\theta + \gamma + \gamma K_P)T_{eq} + \beta_1(v) + H^T r(\kappa(T_{eq}), T_{eq}) = 0 = f(T_{eq}) \quad (5)$$

donde $\beta_1(v) = \theta T_{in} + \gamma(K_P T^* + v + \bar{u}) > 0$.

Las soluciones de (5) se pueden interpretar geoméricamente como las intersecciones entre la línea recta $\mathcal{L}(T_{eq}; v) = -(\theta + \gamma + \gamma K_P)T_{eq} + \beta_1(v)$ y la curva no lineal $\mathcal{N}(T_{eq}) = H^T r(\kappa(T_{eq}), T_{eq})$. Físicamente, la igualdad $\mathcal{L}(T_{eq}; v) = \mathcal{N}(T_{eq})$ puede definir uno o mas estados estacionarios en los puntos de intersección donde el calor generado por el termino de reacción es igual al calor removido por el sistema de enfriamiento y el calentamiento de los reactantes. Por la Hipótesis B (i.e., $r(\kappa(T_{eq}), T_{eq}) = 0$ para toda $T_{eq} \leq 0$) y debido a que $\theta + \gamma + \gamma K_P > 0$ y $\beta_1(v) > 0$ se tiene que $\mathcal{L}(T_{eq}; v) = \mathcal{N}(T_{eq})$ solo si $T_{eq} > 0$. Esto muestra que las soluciones de (5) son físicamente factibles.

Por un caso especial del teorema del valor medio, la función $f(T_{eq})$ puede solo ser igual a

cero en dos valores diferentes de T_{eq} , si esta función tiene una derivada cero sobre el rango de temperatura de equilibrio T_{eq} de interés. Se tiene que cualquier criterio que hace que $df(T_{eq})/dT_{eq}$ no sea cero es suficiente para garantizar una solución única de la Ec. (5). Así,

$$\frac{df(T_{eq})}{dT_{eq}} = -(\theta + \gamma + \gamma K_P) + H^T r'(\kappa(T_{eq}), T_{eq})$$

Debido a que $\theta + \gamma + \gamma K_P > 0$, con $K_P > K_P^{\min}$ y de la Hipótesis B (*i.e.*, $r'(\kappa(T_{eq}), T_{eq}) = k_r$), la ecuación (5) tiene solución única.

Considere el siguiente mapeo:

$$\mathcal{T}(T_{eq}) = \frac{\mathcal{N}(T_{eq}) + \beta_1(v)}{\theta + \gamma + \gamma K_P} \quad (6)$$

entonces

$$\left| \frac{d\mathcal{T}(T_{eq})}{dT_{eq}} \right| = \left| \frac{\mathcal{N}'(T_{eq})}{\theta + \gamma + \gamma K_P} \right|$$

donde $\mathcal{N}'(T_{eq}) = d\mathcal{N}(T_{eq})/dT_{eq} = H^T [(dr/dc_{eq})(d\kappa(T_{eq})/dT_{eq}) + (dr/dT_{eq})]$. Debido a que $r(c, T) \in C^1$, la Hipótesis B implica que $\mathcal{N}'(T_{eq}) \leq \|H\| k_r$. Por lo tanto para $K_P > K_P^{\min}$

$$\left| \frac{d\mathcal{T}(T_{eq})}{dT_{eq}} \right| \leq \frac{\mathcal{N}'(T_{eq})}{\theta + \gamma + \gamma K_P} < 1$$

Se deduce que (6) es una contracción. La prueba se completa al aplicar el Teorema del Mapeo de Contracción (Apéndice B) y al observar que $\mathcal{T}(T_{eq}) \in C^1$ con respecto a $c_{eq} = \kappa(T_{eq})$ y T_{eq} . De este resultado, se concluye la existencia de una función $\chi \in C^1$ tal que

$$\begin{pmatrix} c_{eq} \\ T_{eq} \end{pmatrix} = \chi(v) \stackrel{def}{=} \begin{pmatrix} \kappa(\eta(v)) \\ \eta(v) \end{pmatrix} \quad (7)$$

donde $\eta(v)$ es la solución para (5).

ii) *Estabilidad exponencial global del punto de equilibrio* $(c_{eq}^T, T_{eq})^T = \chi(v)$. Se puede escribir el CSTR (1), (3) controlado como

$$\begin{aligned} \dot{c} &= \theta(c_{in} - c) + Er(c, T) \\ \dot{T} &= -(\theta + \gamma + \gamma K_P)(T - T_{eq}) + H^T [r(c, T) - r(c_{eq}, T_{eq})] \end{aligned} \quad (8)$$

Al considerar la función cuadrática $V = (T - T_{eq})^2/2$. La derivada de V a lo largo de las trayectorias de (8) conduce a

$$\begin{aligned}\dot{V}_{(8)} &= -(\theta + \gamma + \gamma K_P)(T - T_{eq})^2 + (T - T_{eq})H^T [r(c, T) - r(c_{eq}, T_{eq})] \\ &\leq -(\theta + \gamma + \gamma K_P)(T - T_{eq})^2 + \|H\| k_r (T - T_{eq})^2 \\ &= -(\theta + \gamma + \gamma K_P - \|H\| k_r) (T - T_{eq})^2 \\ &\leq 0, \text{ para todo } (c, T) \in \Omega \times \mathbb{R}\end{aligned}$$

La prueba se puede concluir al invocar el Principio de Invarianza de LaSalle [13] (Apéndice B) y la Hipótesis C de fase-mínima. La estabilidad exponencial local se deduce de la Hipótesis C y el hecho que $\dot{V}_{(8)} < 0$ en la coordenada T . ■

El mapa $\eta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ es el mapa entrada-salida en estado estacionario del CSTR controlado (1),(3) cuando v se toma como la entrada de control y la temperatura T se toma como la salida regulada. El siguiente resultado establece que no existe multiplicidad de entrada para $K_P > K_P^{\min}$.

Corolario 1. *La función $\eta(v)$ (ver Ec. (7)) se incrementa monótonamente.*

Prueba. De la Ec. (5), y debido a que la Hipótesis B implica $\mathcal{N}'(T_{eq}) \leq \|H\| k_r$ se obtiene que para toda $K_P > K_P^{\min}$ (Proposición 2)

$$\frac{d\eta(v)}{dv} = \frac{\gamma}{\theta + \gamma + \gamma K_P - \mathcal{N}'(T_{eq})} > \frac{\gamma}{\theta + \gamma + \gamma K_P - \|H\| k_r} > 0$$

así que $\eta(v)$ es una función que se incrementa monótonamente. ■

Observación 2. *La Ecuación (5) corresponde a la denominada relación de Van Heerden [3], [14]. A esta ecuación se le puede dar una interpretación física. El término $\mathcal{L}(T_{eq}; v)$ proporciona la velocidad de eliminación de calor por el sistema de enfriamiento y al calentar los reactantes. El término $\mathcal{N}(T_{eq})$ proporciona la velocidad de generación de calor debido a la actividad de reacción. En un punto de equilibrio, las dos velocidades deben ser iguales. Por otro lado, un estado estacionario único se puede asegurar físicamente cuando la pendiente de la línea de calor removido (i.e., $\theta + \gamma + \gamma K_P$), es mayor que la pendiente de la línea de calor generado ($H^T r'(\kappa(T_{eq}), T_{eq})$), en el rango de temperatura de interés.*

Desviación en estado estacionario

En general, $(c_{eq}, T_{eq}) \neq (c^*, T^*)$. De hecho, el control proporcional (3) y el CSTR (1) conducen a

$$0 = \theta(T_{in} - T_{eq}) + H^T r(c_{eq}, T_{eq}) - \gamma T_{eq} + \gamma[\bar{u} + v + K_P(T^* - T_{eq})]$$

entonces, la igualdad $(c_{eq}, T_{eq}) = (c^*, T^*)$ se puede lograr si

$$\bar{u} + v = T^* - \gamma^{-1} [\theta(T_{in} - T^*) + H^T r(c^*, T^*)] \quad (9)$$

Sin embargo, en varios casos industriales el vector de cinéticas de reacción $r(c, T)$ se conoce pobremente o en otros casos es desconocido, así que $r(c^*, T^*)$ no se puede calcular con exactitud. Esto induce un desviación en estado estacionario

$$\Delta = (\Delta_1^T, \Delta_2)^T \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$$

donde $\Delta_1 \stackrel{def}{=} c^* - c_{eq}$ y $\Delta_2 \stackrel{def}{=} T^* - T_{eq}$. Se puede calcular Δ de la siguiente forma. Debido a que (c_{eq}, T_{eq}) satisface

$$\Delta_2 = -\gamma^{-1} K_P^{-1} [\theta(T_{in} - T_{eq}) - \gamma T_{eq} + H^T r(c_{eq}, T_{eq}) + \gamma(\bar{u} + v)]$$

tenemos que Δ satisface las ecuaciones algebraicas

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= -\varkappa(\Delta_2) + c^* \\ \Delta_2 &= T^* - (\theta + \gamma + \gamma K_P)^{-1} [H^T R(\Delta_1, \Delta_2) + \beta_1(v)] \end{aligned} \quad (10)$$

donde $\varkappa(\Delta_2) \stackrel{def}{=} \kappa(T^* - \Delta_2)$ y $R(\Delta_1, \Delta_2) \stackrel{def}{=} r(c^* - \Delta_1, T^* - \Delta_2)$. En virtud de la Proposición 2, el conjunto de ecuaciones algebraicas (10) tiene solución única. Como en el marco de análisis lineal de estabilidad (Sec. 4.1), se tiene que la desviación en estado estacionario tiende a cero conforme $K_P \rightarrow \infty$.

Proposición 3. *La desviación en estado estacionario $\Delta \rightarrow 0$ conforme $K_P \rightarrow \infty$.*

Prueba. De (10) y la definición de $\beta_1(v)$, se tiene lo siguiente

$$\begin{aligned}
\lim_{K_P \rightarrow \infty} \Delta_2 &= T^* - \lim_{K_P \rightarrow \infty} \frac{H^T R(\Delta_1, \Delta_2) + \beta_1(v)}{\theta + \gamma + \gamma K_P} \\
&= T^* - \lim_{K_P \rightarrow \infty} \frac{H^T R(\Delta_1, \Delta_2) + \theta T_{in} + \gamma(K_P T^* + v + \bar{u})}{\theta + \gamma + \gamma K_P} \\
&= T^* - \lim_{K_P \rightarrow \infty} \frac{\gamma K_P T^*}{\gamma K_P} = 0
\end{aligned}$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned}
\lim_{K_P \rightarrow \infty} \Delta_1 &= \lim_{\Delta_2 \rightarrow 0} [-\kappa(T^* - \Delta_2) + c^*] \\
&= \lim_{\Delta_2 \rightarrow 0} [-\kappa(T^*) + c^*] \\
&= \lim_{\Delta_2 \rightarrow 0} [-c^* + c^*] = 0
\end{aligned}$$

Esto prueba que el error en estado estacionario Δ tiende a cero conforme $K_P \rightarrow \infty$. ■

Observación 3. De la Ec. (9) se puede obtener un valor para la entrada nominal \bar{u} . De hecho, si $\bar{\gamma} > 0$ es un estimado del parámetro de transferencia de calor γ y si el vector de cinéticas de reacción $r(c, T)$ se desconoce, se puede tomar $\bar{u} = T^* - \bar{\gamma}^{-1} \theta (T_{in} - T^*)$.

Como en el caso del análisis lineal, la desviación en estado estacionario se puede reducir, pero no eliminar, vía control con ganancia proporcional alta. Como se discutió antes, las ganancias altas excesivas altas no son recomendables, debido a que se pueden amplificar los efectos del ruido de medición y de la dinámica no modelada.

De los resultados en las proposiciones 1 y 2 se puede observar que no se requieren ganancias proporcionales excesivas altas para lograr la estabilización (sin considerar la desviación en estado estacionario). La condición en la Proposición 1 proporciona un estimado bastante conservador del límite inferior de la ganancia proporcional que se requiere vía análisis lineal. La Proposición 2 proporciona un estimado de la ganancia proporcional que asegura que no existe multiplicidad de entrada para $K_P > K_P^{\min}$. De hecho,

$$K_P^{\min} \stackrel{def}{=} \frac{\|H\| k_r - \theta - \gamma}{\gamma} \quad (11)$$

Al seguir ideas tradicionales, como en el análisis lineal, en la siguiente sección se introduce una

acción integral para remover la desviación en estado estacionario.

4.3.2 Control proporcional-integral

En el análisis anterior, se tomo a v como un parámetro constante. En esta sección, este parámetro se toma para el diseño de la compensación integral:

$$\dot{v} = K_I(T^* - T) \quad (12)$$

donde $K_I > 0$ es la ganancia integral.

Teorema 1. *Considere el controlador PI clásico*

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + K_P(T^* - T) + v \\ \dot{v} &= K_I(T^* - T) \end{aligned} \quad (13)$$

con $K_P > K_P^{\min}$. Existe un $K_I^{\max} > 0$ tal que el CSTR controlado (1),(13) es asintótico globalmente y exponencial localmente estable en la posición de equilibrio $(c^*, T^*) \in \Omega \times \mathbb{R}_{>0}$, para todo $0 < K_I < K_I^{\max}$.

Prueba. Para probar el resultado, se hace uso de una técnica de transformación de lazo que se describe en [15]. Las ecuaciones que describen el sistema en lazo cerrado son

$$\begin{aligned} \dot{c} &= \theta(c_{in} - c) + Er(c, T) \\ \dot{T} &= \theta(T_{in} - T) + H^T r(c, T) - \gamma T + \gamma K_P(T^* - T) + \gamma v + \gamma \bar{u} \\ \dot{v} &= K_I(T^* - T) \end{aligned} \quad (14)$$

El desplazamiento del punto de equilibrio al origen se describe a continuación. Primero, se define v^* que satisface la relación

$$T^* = \eta(v^*) \quad (15)$$

y la función φ como

$$\varphi(v) = \kappa(\eta(v^*)) \quad (16)$$

Observar que $\varphi(v) \in C^1$. Ahora, se definen las nuevas variables

$$\begin{aligned} z(t) &= c(t) - \varphi(v(t)) \\ y(t) &= T(t) - \eta(v(t)) \\ w(t) &= v(t) - v^* \end{aligned} \tag{17}$$

Al usar $z(t)$, $y(t)$ y $w(t)$ como variables de estado, la Ec. (14) es

$$\begin{aligned} \dot{z} &= \theta (c_{in} - z - \varphi(w + v^*)) + E\rho(z, y, w) \\ &\quad + K_I D_w \varphi(w + v^*) [y + \eta(w + v^*) - \eta(v^*)] \\ \dot{y} &= -(\theta + \gamma + \gamma K_P) [y + \eta(w + v^*)] + H^T \rho(z, y, w) + \beta_1 (w + v^*) \\ &\quad + K_I D_w \eta(w + v^*) [y + \eta(w + v^*) - \eta(v^*)] \\ \dot{w} &= -K_I [y + \eta(w + v^*) - \eta(v^*)] \end{aligned} \tag{18}$$

donde $D_w \varphi(w + v^*) = \partial \varphi(w + v^*) / \partial w$, $D_w \eta(w + v^*) = \partial \eta(w + v^*) / \partial w$ y

$$\rho(z, y, w) = r(z + \varphi(w + v^*), y + \eta(w + v^*)) \tag{19}$$

Las condiciones iniciales para el sistema (18) están dadas por $z(0) = c(0) - \varphi(v(0))$, $y(0) = T(0) - \eta(v(0))$ y $w(0) = v(0) - v^*$. Debido a que $r(c, T) \in C^1$, la solución $(z(t), y(t), w(t))$ de (18) esta definida únicamente para toda $t > 0$.

Se puede comprobar que la Proposición 2 y la igualdad $y_{eq} + \eta(w_{eq} + v^*) - \eta(v^*) = 0$ implican que el origen es el punto de equilibrio *único* de (18). Además, debido a que $r(c, T) \in C^1$, $(z(t), y(t), w(t)) \rightarrow (0_n, 0, 0)$ conforme $t \rightarrow \infty$ implica que $(c(t), T(t)) \rightarrow (c^*, T^*)$ conforme $t \rightarrow \infty$. Por lo tanto, esto es suficiente para probar la convergencia asintótica $(z(t), y(t), w(t)) \rightarrow (0_n, 0, 0)$.

Sea $\tau \stackrel{def}{=} K_I t$ la nueva escala de tiempo, *i.e.*, τ es un tiempo lento comparado a t . Tomando a las variables z_p , y_p y w_p en la nueva escala de tiempo:

$$\begin{aligned} z_p(\tau) &= z(\tau/K_I) \\ y_p(\tau) &= y(\tau/K_I) \\ w_p(\tau) &= w(\tau/K_I) \end{aligned} \tag{20}$$

Se denota z'_p a $dz_p/d\tau$, etc. En esta nueva escala de tiempo, se puede volver a escribir (18) como

$$\begin{aligned}
K_I z'_p &= \theta (c_{in} - z_p - \varphi(w_p + v^*)) + E\rho(z_p, y_p, w_p) \\
&\quad + K_I D_w \varphi(w_p + v^*) [y_p + \eta(w_p + v^*) - \eta(v^*)] \\
K_I y'_p &= -(\theta + \gamma + \gamma K_P) [y_p + \eta(w_p + v^*)] + H^T \rho(z_p, y_p, w_p) + \beta_1(w_p + v^*) \\
&\quad + K_I D_w \eta(w_p + v^*) [y_p + \eta(w_p + v^*) - \eta(v^*)] \\
w'_p &= -y_p - \eta(w_p + v^*) + \eta(v^*)
\end{aligned} \tag{21}$$

Básicamente, las Ecs. (18) y (21) describen las mismas dinámicas pero en diferentes escalas de tiempo, entonces, como en (18), el origen es el punto de equilibrio único de (21). Para valores suficientemente pequeños de $K_I > 0$, el sistema está en la forma estándar de perturbación singular [15], [16] (Apéndice B), donde $(z^T, y)^T \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ es el vector de variables rápidas, $w \in \mathbb{R}$ es la variable lenta y $K_I > 0$ es el parámetro de perturbación.

Si en (18), $K_I = 0$, entonces $w(t) + v^* = v(0)$ para toda $t \geq 0$, se tiene

$$\begin{aligned}
\dot{z} &= \theta (c_{in} - z - \varphi(v(0))) + E\rho(z, y, v(0) - v^*) \\
\dot{y} &= -(\theta + \gamma + \gamma K_P) [y + \eta(v(0))] + H^T \rho(z, y, v(0) - v^*) + \beta_1(v(0))
\end{aligned} \tag{22}$$

Este sistema (22) con $v(0)$ tratado como un parámetro fijo se denomina el sistema de capa-límite [15] del sistema perturbado singularmente (21). El sistema (22) se puede escribir en la forma (8) con $(c_{eq}, T_{eq})^T = \chi(v(0))$, de forma que la Proposición 2 implica que (22) es asintótico globalmente y exponencial localmente estable para toda $K_P > K_P^{\min}$.

Si en (21) $K_I = 0$, entonces se obtiene el sistema reducido [16] del sistema perturbado singularmente (21):

$$w'_p = \eta(v^*) - \eta(w_p + v^*) \tag{23}$$

Con respecto a este sistema, existe una constante positiva δ tal que la solución de (23) satisface que para toda $w_p(0) \in \mathbb{R}$ y para toda $\tau > 0$

$$|w_p(\tau, w_p(0))| \leq |w_p(0)| \exp(-\delta\tau) \tag{24}$$

De hecho, al tomar la función cuadrática $P(w_p) = w_p^2$, la derivada $\dot{P}_{(24)}$ a lo largo de la trayectoria

de (24) esta dada por

$$\dot{P}_{(24)} = 2w_p [\eta(v^*) - \eta(w_p + v^*)]$$

Debido a que $\eta(v)$ es una función que se incrementa monótonamente (Corolario 1), (i.e., $-(\eta(w_p + v^*) - \eta(v^*)) = -\delta w$) se obtiene

$$\dot{P}_{(24)} \leq -2\delta w^2$$

Por lo tanto, de la definición de $P(w_p)$, se tiene que

$$\frac{d}{dt} (w_p(\tau, w_p(0)))^2 \leq -2\delta (w_p(\tau, w_p(0)))^2$$

lo cual conduce a la desigualdad (24). Esto prueba que el sistema reducido (23) es exponencial globalmente estable.

En este punto, se ha probado que el sistema a lazo cerrado (21) cumple todas las consideraciones del Teorema 2 en Hoppensteadt [16]. Por consiguiente, existe una $K_I^{\max} > 0$ tal que para toda $K_I \in (0, K_I^{\max})$, el punto de equilibrio (c^*, T^*) del CSTR controlado vía compensación PI es asintótico globalmente y exponencial localmente estable. Esto concluye la prueba. ■

Observación 4. *Del análisis de estabilidad antes descrito, se puede interpretar a la acción integral $\dot{v} = K_I(T^* - T)$ como un tipo de compensación adaptable lenta, donde la variable $v(t)$ proporciona un estimado asintótico de la constante en estado estacionario desconocida (ver Ec. (9)) $T^* - \gamma^{-1} [\theta(T_{in} - T^*) + H^T r(c^*, T^*)] - \bar{u}$.*

Observación 5. *En línea a las técnicas de linealización entrada-salida [17], el análisis de estabilidad descrito en esta parte de la tesis proporciona una extensión natural del compensador PI clásico. De hecho, si la temperatura de alimentación T_{in} se mide y $\bar{\gamma} > 0$ es un estimado del parámetro de transferencia de calor γ , se puede tomar una entrada nominal variante en tiempo; es decir, $\bar{u} = T - \bar{\gamma}^{-1}(T_{in} - T)$. En este caso, los resultados de esta parte de tesis también son válidos. Observar que $\bar{u} = T - \bar{\gamma}^{-1}(T_{in} - T)$ se puede ver como una pre-compensación para la velocidad de remoción de calor debida al calentamiento de reactantes y el sistema de enfriamiento.*

Observación 6. *Con base al cambio de coordenadas (17) y la estructura de perturbación singular del CSTR controlado (21), se puede hacer una interpretación geométrica de la estructura PI clásica. Debido a que el subsistema lento en (21) corresponde a la acción integral $v(t) =$*

$K_I \int_0^t (T^* - T(\sigma))d\sigma$, en tiempos cortos $\mathcal{O}(K_I)$ se tiene que $v(t) \simeq v(0)$. Por lo tanto, el subsistema rápido en (21) corresponde al CSTR controlado bajo retroalimentación proporcional casi pura $u = \bar{u} + K_P(T^* - T) + v(0)$ para tiempos del orden de $\mathcal{O}(K_I)$. Se conoce que el subsistema rápido (22) es asintótico globalmente estable alrededor del punto de equilibrio $\chi(v(0))$ (Proposición 2). En virtud del cambio de coordenadas (17), las cuales miden la distancia desde la trayectoria de estado física $(c(t), T(t))^T$ hasta la localización de puntos de equilibrio $\chi(v)$, las trayectorias controladas vía compensación PI convergen a una vecindad del punto de equilibrio $\chi(v(0))$. A largo plazo, la acción integral $v(t) = K_I \int_0^t (T^* - T(\sigma))d\sigma$ actualiza lentamente el valor $v(t)$, en tal forma que la trayectoria controlada $(c(t), T(t))^T$ se desliza asintóticamente a lo largo de la curva de localización de raíces $\chi(v(t))$ para alcanzar el punto de equilibrio deseado $(c^*, T^*)^T$. De esta forma, como se discutió en la Observación 4, la acción integral $K_I \int_0^t (T^* - T(\sigma))d\sigma$ también se puede interpretar como un tipo de esquema de adaptación a lo largo de la curva $\chi(v)$.

Observación 7. Se debe hacer énfasis que la condición $0 < K_I < K_I^{\max}$ en el Teorema 1 es solamente suficiente. De hecho, en el caso de estudio que se presenta en el siguiente capítulo se muestra que la estabilidad asintótica global se puede obtener aun cuando $K_I \rightarrow \infty$. Sin embargo, la estimación de K_I^{\max} para casos específicos no es un tema fácil, así, el resultado en el Teorema 1 se debe ver como un resultado de robustez.

Capítulo 5

Caso de Estudio

En este capítulo se ilustran los resultados del análisis derivados en el capítulo previo con un ejemplo clásico; el CSTR estudiado por Aris y Amundson [3]. El caso de estudio consiste de una reacción altamente exotérmica e irreversible de primer-orden $A \rightarrow \text{Productos}$. Si $c \in \mathbb{R}$ se usa para denotar la concentración de la especie química A , el modelo se puede describir con la Ec. (1) con $E = [-1]$, $r(c, T) = k_0 c \exp(-\mathcal{E}_a/R_g T)$, donde $\mathcal{E}_a > 0$ es la energía de activación y R_g es la constante universal de los gases. Para $\theta = 1$, $c^{in} = 1$, $T^{in} = 1$, $k_0 = \exp(25)$, $\mathcal{E}_a/R_g = 10^4$, $H = 200$, $\gamma = 1$ y $u = 350$, el CSTR presenta tres puntos de equilibrio [3]. Uno de esos puntos de equilibrio, localizado en $(0.5, 400)$, es inestable (tipo silla).

Se considera que el objetivo de control es estabilizar el CSTR en el punto de operación inestable $(c^*, T^*) = (0.5, 400)$. En este caso, la Hipótesis C se satisface. De hecho, las dinámicas isotérmicas $\dot{c} = \theta(c_{in} - c) - k_0 c \exp(-\mathcal{E}_a/R_g T^*)$ son lineal y asintóticamente estables con respecto al punto de equilibrio $c^* = \theta c_{in}/[\theta + k_0 \exp(-\mathcal{E}_a/R_g T^*)]$. Por lo tanto, en virtud del Teorema 1, la estabilización exponencial local y asintótica global se puede obtener con el control clásico PI con valores suficientemente grandes de la ganancia proporcional $K_P > 0$ y valores suficientemente pequeños de la ganancia integral $K_I > 0$.

Se considera primero el CSTR controlado bajo ganancia proporcional pura $u = \bar{u} + K_p(T^* - T) + v$, donde $v \in \mathbb{R}$, se utiliza (ver Ec. (3)). Un estimado de $K_p^{\min} = (k_r \|H\| - \theta - \gamma)/\gamma$ se puede obtener (ver Proposición 2), donde $\mathcal{N}'(T_{eq}) = H^T [(dr/dc_{eq})(d\kappa(T_{eq})/dT_{eq}) + (dr/dT_{eq})]$. Debido a que la Hipótesis B implica que $\mathcal{N}'(T_{eq}) \leq \|H\| k_r$, entonces al tomar la igualdad en la expresión anterior con $r(c_{eq}, T_{eq}) = k_0 c_{eq} \exp(-\mathcal{E}_a/R_g T_{eq})$ y $\kappa(T_{eq}) = \theta c_{in}/[\theta + k_0 \exp(-\mathcal{E}_a/R_g T_{eq})]$, se obtiene

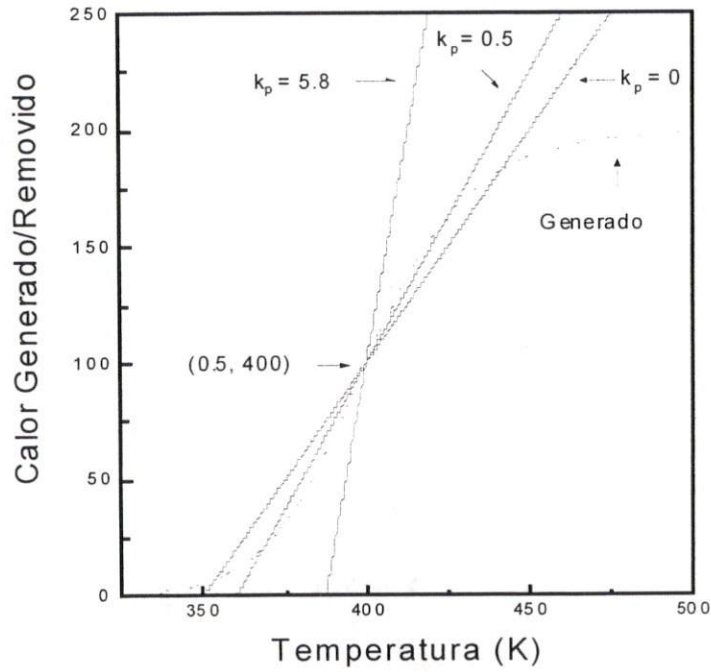


Figura 5-1: Diagrama de Van Heerden para $v = 0$, $\bar{u} = 350$ y tres valores diferentes de K_P .

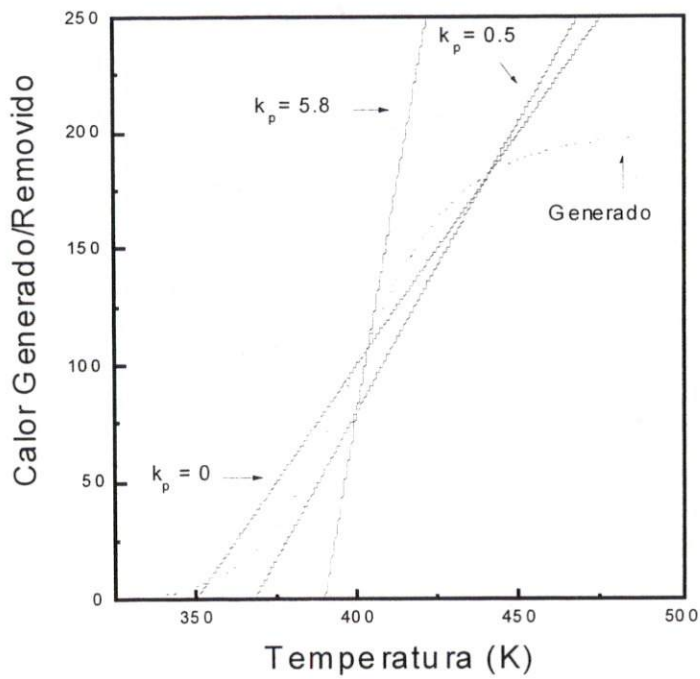


Figura 5-2: Diagrama de Van Heerden para $v = 0$, $\bar{u} = 360$ y tres valores diferentes de K_P como en la Figura 5.1.

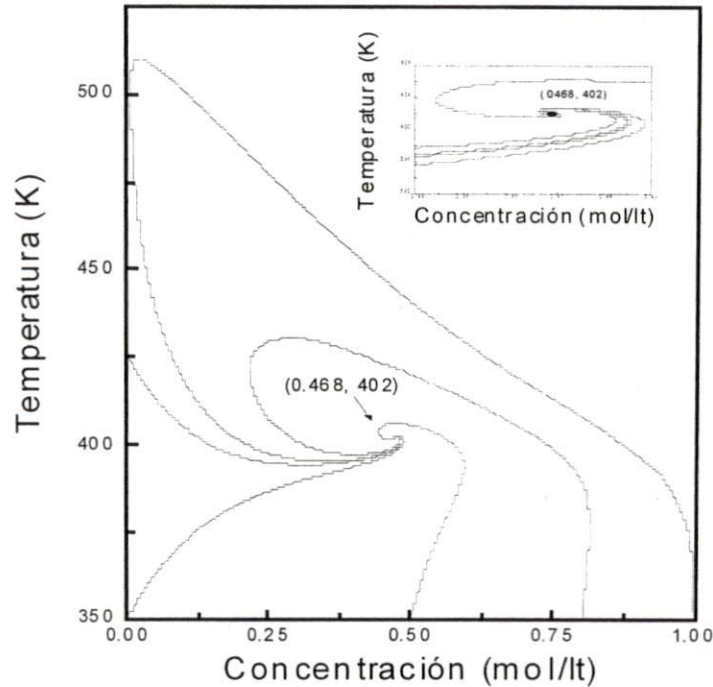


Figura 5-3: Retrato-fase $(c(t), T(t))$ para el CSTR controlado bajo retroalimentado proporcional puro con $v = 0$, $\bar{u} = 360$ y $K_P = 6$.

$K_P^{\min} \simeq 5.8$. De acuerdo con la Proposición 2, el CSTR bajo la retroalimentación proporcional anterior tiene un punto de equilibrio único para cualquier $\bar{u} + v \in \mathbb{R}$ y $K_P > K_P^{\min}$.

La Figura 5.1 presenta el diagrama de Van Heerden para $v = 0$, $\bar{u} = 350$ y tres valores diferentes de K_P . Debido a que $\bar{u} = 350$ corresponde al valor nominal actual de la entrada de control, $(0.5, 400)$ es siempre un punto de equilibrio para cualquier $K_P > K_P^{\min}$. Esto es, conforme K_P se incrementa, la línea de remoción de calor $\mathcal{L}(T_{eq}; v)$ gira en sentido contrario a las manecillas del reloj con el punto $(0.5, 400)$ como pivote fijo. Este no es el caso si $\bar{u} \neq 350$. La Figura 5.2 presenta el diagrama de Van Heerden para $v = 0$, $\bar{u} = 360$ y los tres valores diferentes de K_P como en la Figura 5.1. Observar que, conforme K_P se incrementa, la línea de remoción de calor $\mathcal{L}(T_{eq}; v)$ gira en sentido contrario a las manecillas del reloj sin pivote fijo. Esto es, el punto $(0.5, 400)$ ya no es el punto de equilibrio del CSTR controlado y, por lo tanto, se presenta la desviación en estado estacionario. Sin embargo, como se predice por la Proposición 2, la desviación en estado estacionario disminuye conforme K_P se incrementa.

La Figura 5.3 presenta el retrato-fase $(c(t), T(t))$ para el CSTR controlado bajo retroalimentado

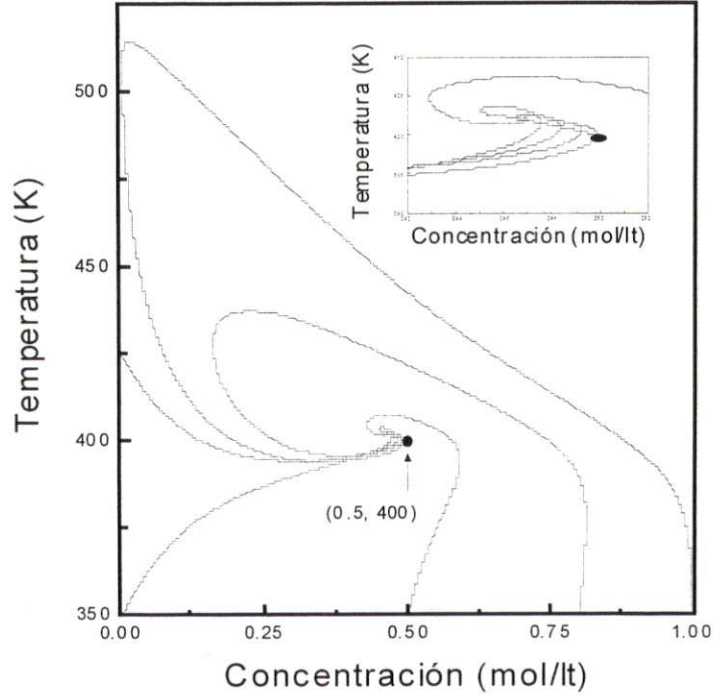


Figura 5-4: Retrato-fase $(c(t), T(t))$ para el CSTR controlado con $\bar{u} = 360$, $K_P = 6$ y $K_I = 0.5$.

proporcional puro con $v = 0$, $\bar{u} = 360$ y $K_P = 6$. Debido a que $K_P > K_P^{\min}$, se obtiene estabilidad asintótica global respecto al punto de equilibrio $\chi(0) \simeq (0.468, 402)$ (Proposición 2). Para eliminar la desviación en estado estacionario $(0.5, 400) - (0.468, 402)$, se usa una acción integral simple con ganancia integral suficientemente pequeña K_I . La Figura 5.4 presenta el retrato-fase $(c(t), T(t))$ para el CSTR controlado con $K_I = 0.5$. A excepción de una vecindad del punto de equilibrio deseado $(0.5, 400)$, el retrato-fase con el control PI es el mismo al retrato-fase con control proporcional puro. De hecho, en una vecindad de $(0.5, 400)$, la acción integral rectifica las trayectorias para alcanzar el punto de operación deseado (ver los detalles en el la inserción). Aun más, las trayectorias primero convergen dentro una vecindad al punto de equilibrio anterior $(0.468, 402)$, y se “deslizan” dentro una vecindad de una curva para alcanzar el punto de equilibrio $(0.5, 400)$. Como se discutió en la Observación 6, tal curva de deslizamiento corresponde a la localización de puntos de equilibrio $\chi(v)$ (ver Figura 5.5). Este fenómeno se puede apreciar mejor en la Figura 5.6 donde se toma $\bar{u} = 400 K$.

Del análisis lineal se obtiene un estimado de K_P^{\min} , es decir $K_{P,lin}^{\min}$ (ver Sección 4.2). En el punto

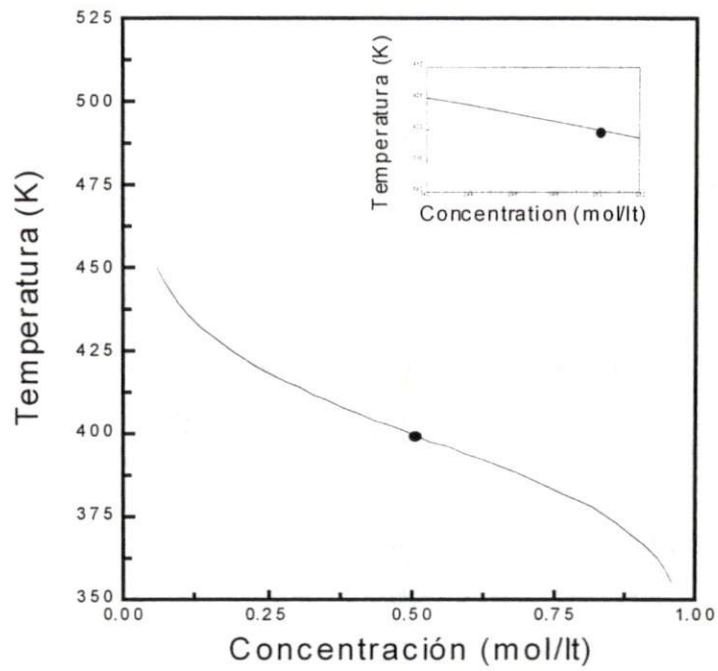


Figura 5-5: Curva de deslizamiento que corresponde a la localización de puntos de equilibrio $\chi(v)$.

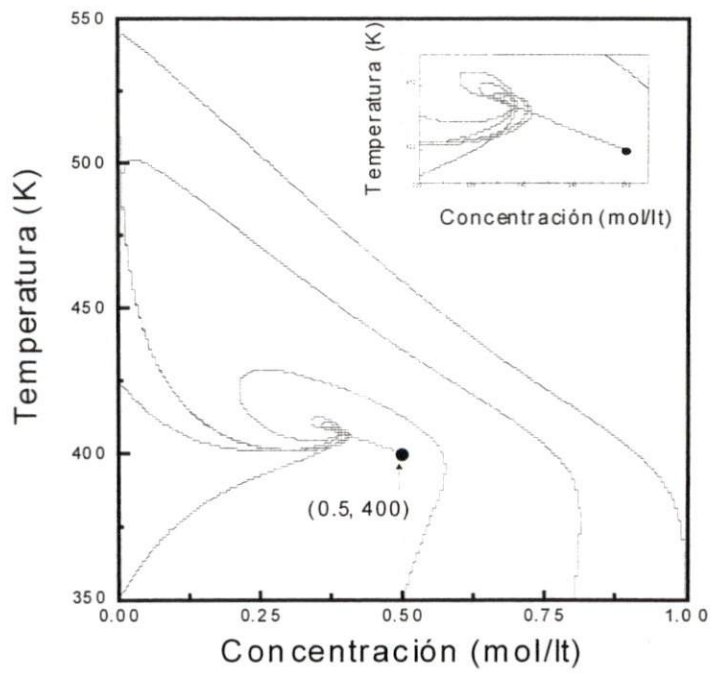


Figura 5-6: Retrato-fase $(c(t), T(t))$ para el CSTR controlado con $K_P = 6$, $K_I = 0.5$ y $\bar{u} = 400$ K.

de operación (0.5, 400), la linealización local conduce a la función de transferencia (Apéndice A)

$$\frac{\Delta T}{\Delta u} = \frac{s + 2}{s^2 - 2.25s - 2.25}$$

El polinomio característico en lazo-cerrado bajo retroalimentado proporcional puro es $s^2 + (K_p - 2.25)s + (2K_p - 2.25) = 0$. Por lo tanto, $K_{P,lin}^{min} = 2.25$ es suficiente para obtener estabilización local. Sin embargo, la condición $K_p > 2.25$ no es suficiente para obtener estabilización global. De hecho, la Figura 5.7 presenta el retrato-fase (c, T) para $K_p = 3.0$, $K_I = 0.5$ y $\bar{u} = 370$, lo cual muestra que las trayectorias controladas con condiciones iniciales lejos del punto de operación que se desea (0.5, 400) son atrapadas por un ciclo límite estable. La inserción en esta figura muestra una trayectoria convergente, lo cual demuestra que el controlador PI con el conjunto de parámetros de control que se establecen antes es un estabilizador local. *Esta simulación ilustra el hecho que los estimados del análisis lineal no son suficientes para obtener estabilización global, es decir, solo proporcionan un estimado de la ganancia proporcional, para obtener resultados de estabilidad local.* Sin embargo, el estimado $K_p^{min} \simeq 5.8$ del análisis no lineal puede ser conservativo. La Figura 5.8 presenta el retrato-fase para $K_p = 4.0$, de la cual es evidente que se puede obtener estabilización global PI del CSTR para $K_{P,lin}^{min} < K_p < K_p^{min}$.

Para ilustrar el hecho que K_I^{max} puede ser muy grande (ver Observación 7), la Figura 5.9 presenta el retrato-fase para un valor grande de la ganancia integral; $K_I = 100$. Se puede ver que se obtiene estabilización asintótica global con este valor grande de K_I .

Los resultados en las Figuras 5.3, 5.4, 5.6, 5.8, y 5.9, muestran que para preservar la propiedad de estabilidad global alrededor de la referencia $T = 400.0$, se presentan excursiones de temperatura muy grandes. Esto se debe a las limitaciones del sistema de enfriamiento para remover el calor generado por la reacción. Si no se puede añadir o remover calor suficientemente rápido del CSTR, entonces el volumen del proceso se debe disminuir hasta que la transferencia de calor ocurra a una velocidad adecuada. Así, es necesario considerar una acción adicional con el fin de enfriar el reactor. Una posibilidad factible es disminuir la cantidad de reactante alimentada al reactor con el fin de reducir las velocidades de reacción, y por lo tanto, el calor que se genera.

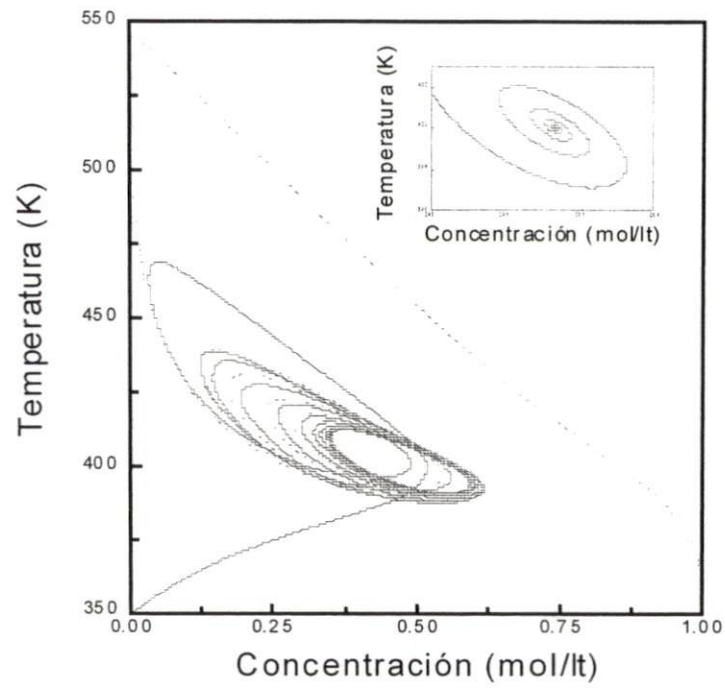


Figura 5-7: Retrato-fase (c, T) para $K_P = 3.0$, $K_I = 0.5$ y $\bar{u} = 370$.

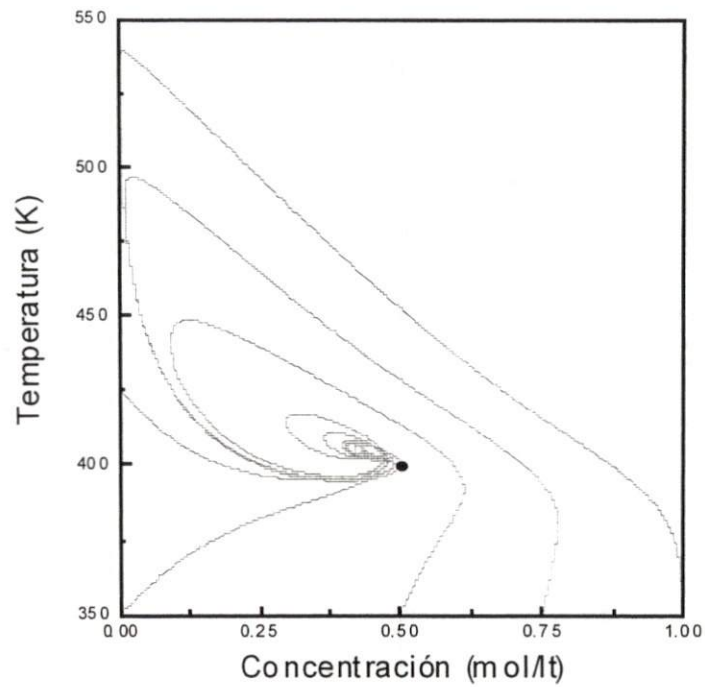


Figura 5-8: Retrato-fase (c, T) para $K_P = 4.0$, $K_I = 0.5$ y $\bar{u} = 370$.

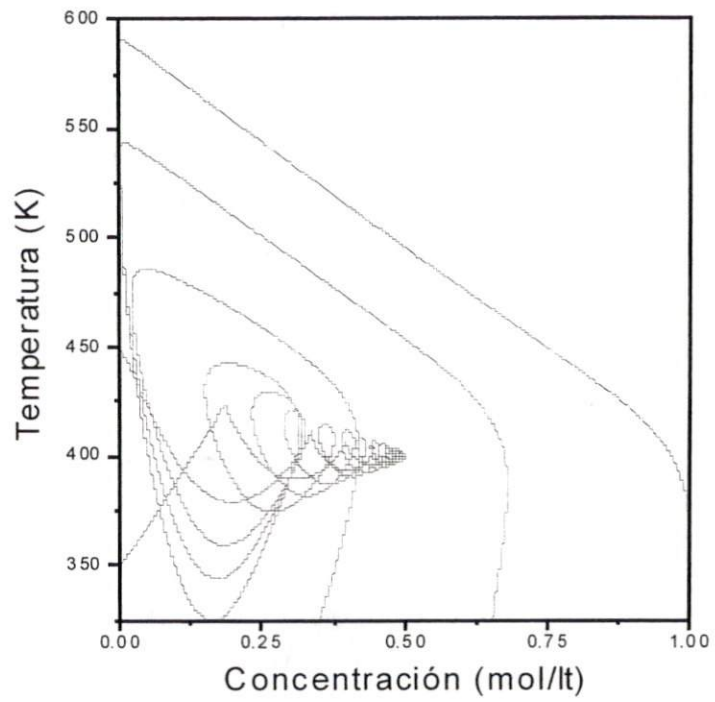


Figura 5-9: Retrato-fase (c, T) para $K_P = 5.8$, $\bar{u} = 370$ y $K_I = 100.0$.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta parte de la tesis se ha estudiado la estabilidad del CSTR controlado bajo compensación de temperatura PI clásica. Al explotar la estructura de los modelos de CSTR y al usar resultados de estabilidad de sistemas no lineales perturbados singularmente, se prueba que la estabilización asintótica global de CSTR se puede obtener con un compensador de ganancia proporcional alta más ganancia integral baja. Además, las consideraciones fundamentales que soportan este resultado son moderadas y realistas.

Se ha demostrado que el control lineal retroalimentado PI para la regulación de temperatura tiene propiedades de estabilidad no-locales, lo cual respalda las propiedades en lazo cerrado observadas en la industria al usar este tipo de controladores con una sintonización adecuada.

Los resultados de las simulaciones numéricas sobre el CSTR exotérmico de Aris y Amundson [3], muestran que para preservar la propiedad de estabilidad global, se puede requerir un esfuerzo de control excesivo, el cual origina grandes excursiones de temperatura, las cuales desde una perspectiva industrial no son aceptables. Esta condición de operación en reactores industriales se puede relajar al introducir variables manipulables extras para compensar las limitaciones del intercambio de calor.

Algunos problemas prácticos con respecto al control PI clásico necesitan un estudio adicional. En particular,

- no existen estimados globales eficientes del funcionamiento,
- las propiedades de estabilidad bajo saturaciones en la entrada de control se deben establecer,

- los efectos de dinámicas no-modelada de alta-frecuencia (*e.g.*, dinámica de actuadores) sobre las propiedades de estabilización PI global se deben estudiar.

El uso de esquemas más sofisticados, como los que se basan en la teoría de control moderna de sistemas no lineales [18], [6], [7], ha resuelto satisfactoriamente los puntos anteriores. Sin embargo, la motivación inherente de estudiar formalmente los alcances y limitaciones del control lineal se debe a su estructura tan simple y su aceptación en la práctica industrial.

Bibliografía

- [1] Luyben, W.L. (1990). *Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers*. McGraw-Hill, Singapore.
- [2] Paladino, O., & Ratto, M. (2000). Robust stability and sensitivity of real controlled CSTRs. *Chemical Engineering Science*, 55, 321-330.
- [3] Aris R., & Amundson, N.R. (1958). An analysis of chemical reactor stability and control-I, II, III. *Chemical Engineering Science*, 7, 121-155.
- [4] Bastin G., & Dochain, D. (1990). *On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors*. Elsevier, Amsterdam.
- [5] Bastin G., & Levine, J. (1993). On state accessibility in reaction systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, AC-38, 733-742.
- [6] Alvarez-Ramirez J. (1994). Stability of a class of uncertain continuous stirred chemical reactors with a nonlinear feedback. *Chemical Engineering Science*, 49, 1743-1748.
- [7] Viel F., Jadot, F., & Bastin, G. (1997). Global stabilization of exothermic chemical reactors under input constraints. *Automatica*, 33, 1437-1448.
- [8] Pellegrini, I., & Biardi, G. (1990). Chaotic behavior of a controlled CSTR. *Computers and Chemical Engineering*, 14, 1237-1247.
- [9] Gavalas, G.R. (1968). *Nonlinear Differential Equations of Chemical Reacting Systems*. Springer-Verlag, New York.

- [10] Feinberg, M. (1987). Chemical reaction network structure and the stability of isothermal reactors. I: The deficiency zero and the deficiency one theorems. *Chemical Engineering Science*, 42, 2229-2268.
- [11] Rouchon, P. (1992). Remarks on some applications of nonlinear control techniques to chemical processes. *Proceedings of Nonlinear Control Systems Design Symposium*, Bordeaux, France.
- [12] Smith M.C. (1991). Stabilization by reduced-order controllers. *IEEE Transactions on Automatic Control*, AC-36, 120-124.
- [13] Khalil, N.K. (1992) *Nonlinear Systems*. Mcmillan, New York.
- [14] Van Heerden, C. (1953). Autothermic process. Properties and reactor design. *Industrial and Engineering Chemistry*, 45, 1242-1253.
- [15] Desoer Ch., & Lin, Ch.-A. (1985). Tracking and disturbance rejection of MIMO nonlinear systems with PI controller. *IEEE Transactions on Automatic Control*, AC-30, 861-867.
- [16] Hoppensteadt F. (1974). Asymptotic stability of singular perturbation problems. II: Problems having matched asymptotic expansion solutions. *J. Diff. Equations*, 15, 510-521.
- [17] Isidori A. (1989). *Nonlinear Control Systems*. Springer-Verlag, New York.
- [18] Kravaris, C., & Palanki, S. (1988). Robust nonlinear state feedback under structured uncertainty. *A.I.Ch.E. Journal*, 34, 1119-1127.

Parte II

Control Lineal de Sistemas de Parámetros Distribuidos

Capítulo 7

Introducción

Muchos procesos en ingeniería química son esencialmente sistemas de parámetros distribuidos (DPS) por que se describen adecuadamente por ecuaciones diferenciales parciales (PDE). Esto significa que se caracterizan por una dimensionalidad infinita, con tiempos de retardo largos, variables y desconocidos debido a los fenómenos de difusión y convección inherentes en tales procesos. Procesos químicos representativos que se modelan por DPS incluyen reactores bioquímicos [1], procesos de extracción de vapor [2], transporte reactivo biológico cerca de pozos de inyección [3], separación cromatográfica [4], reactores químicos [5], y procesos de extrucción en polímeros[6].

La mayoría de las técnicas prácticas de control para DPS se basan en modelos *ad hoc* de parámetros concentrados espacio-estado o entrada-salida simples. Por lo general tales aproximaciones son inadecuadas para diseños de control y análisis de estabilidad de DPS, debido a que estos modelos de parámetros agrupados ignoran la naturaleza espacial variante del DPS, perdiendo características intrínsecas de los sistemas originales. Por lo tanto, la descripción y el análisis correcto del sistema de control asociado con DPS debe ser en términos de PDE, con acciones de control que estén distribuidas sobre el dominio espacial total (*control distribuido*), que se apliquen en la frontera del dominio espacial (*control frontera*), o que se activen solo en puntos específicos de este dominio (*control puntual*). El diseño de control y el análisis de estabilidad para DPS son problemas complicados para los académicos y los ingenieros de control industriales [7], [8], [9].

Varias propuestas se han realizado para desarrollar un marco que unifique la síntesis y el análisis de controladores retroalimentados para DPS que toman en cuenta la naturaleza no lineal y distribuida de esta clase de procesos. El uso de linealización de términos no lineales para obtener

un DPS lineal y después aplicar algún método de control para DPS lineales es ineficiente debido a las severas no linealidades, ya que esto garantiza solo estabilidad local [10]. Chen y Chang [11] propusieron el uso de técnicas de descomposición espectral para desarrollar modelos de orden reducido para procesos no lineales difusión-convección, al explotar la propiedad de separación de escalas de tiempo de los operadores elípticos. Este concepto se extendió por Christofides y Daoutidis [8], [12] y Christofides [13] para desarrollar controladores retroalimentados estabilizantes de dimensión-finita para sistemas de control distribuidos. Específicamente, ellos proporcionaron una propuesta rigurosa y sistemática para diseñar controladores no lineales y analizar la dinámica a lazo cerrado resultante. Pruebas numéricas extensivas han demostrado la eficacia del diseño de control propuesto y la propuesta del análisis de estabilidad. Ejemplos de aplicación de estas técnicas de control incluyen el control de temperatura en el proceso de crecimiento del cristal Czochralski [14], control de la distribución de tamaños en un cristizador continuo [15] y un reactor de aerosol de titania [16]. Con una perspectiva elegante y diferente, Alonso e Ydstie [17] y Alonso *et al.* [18] usaron conceptos de pasividad y termodinámica para diseñar controladores estabilizantes para una clase de DPS. La principal conclusión de sus resultados es que cualquier proceso químico se puede estabilizar por control PID lineal distribuido a condición de que la localización de actuadores y sensores sea adecuada.

El problema de control frontera de DPS ha recibido mucho menor atención que el control distribuido. La principal dificultad asociada con el control frontera de DPS deriva del hecho de que las acciones aplicadas en la frontera tienen solo efectos de control indirecto en el dominio del sistema [9]. Ejemplos de procesos industriales con acciones de control en la frontera del sistema son reactores bioquímicos [1], extracción de vapor [2], transporte reactivo biológico cerca de pozos de inyección [3], separación cromatográfica [4] y reactores químicos [5]. En la literatura de ingeniería de procesos, pocos artículos han aparecido que tratan el problema de control frontera. En particular, Olivei [19] presentó una aplicación de la regulación de temperatura en procesos de crecimiento de cristales. Hanczyc y Palazoglu [20] aplicaron control de modo deslizante a un reactor tubular isotérmico. Desafortunadamente, el control de modo deslizante es discontinuo, lo cual, en la práctica, puede conducir a efectos de estabilidad y de funcionamiento adversos (*e.g.*, amplificación severa de ruido). Olmstead y Schmitendorf [21] usaron control óptimo con aplicación al problema clásico de conducción de calor puro. A pesar de que la propuesta de control óptimo conduce a resultados de estabilidad global, estos controladores dan una lógica de interrupción

compleja y no garantizan propiedades de robustez en lazo cerrado, debido a la ausencia de una caracterización adecuada de incertidumbres. Gundepudi y Friedly [5] usaron teoría de control geométrico para tratar el diseño de control de velocidad para una clase de DPS hiperbólicos no lineales. El control retroalimentado resultante es una dinámica inversa no lineal la cual hace uso de la cancelación exacta de las no linealidades. Chakravarti y Ray [22] usaron identificación en línea de funciones singulares, las cuales capturan la naturaleza variante espacial de DPS. La idea principal para el análisis de la operación y el diseño de control es usar modelos aproximados, con base a las funciones singulares. En este caso, se usó la dinámica de un reactor químico tubular para ejemplificar sus resultados.

Estos resultados constituyen avances interesantes, en el sentido que muestran como el diseño del control frontera para procesos de parámetros distribuidos puede mejorarse, aún con lo hecho usando técnicas de control avanzado lineal o no lineal. Sin embargo, para el desarrollo de una metodología de diseño de control con un procedimiento sistemático de construcción-sintonizado y con un riguroso respaldo teórico con ideas de control constructivo desarrolladas recientemente, los siguientes puntos deben de tratarse: la condición de estabilidad robusta a lazo cerrado, su relación con el esquema de sintonizado de las ganancias, la identificación y caracterización de los compromisos desempeño-robustez fundamentales que respaldan el funcionamiento robusto, y las propiedades de estabilidad robusta.

Desde el punto de vista de aplicación, muchos DPS en la industria química y bioquímica se han resuelto en forma eficiente al usar control lineal, incluyendo compensadores PI/PID tradicionales. Sin embargo, a pesar del funcionamiento exitoso industrial del control lineal, hasta ahora en la literatura científica sobre control de procesos químicos, no se encuentran resultados rigurosos reportados que respalden esta capacidad de regulación.

En objetivo de esta parte de la tesis, es usar un marco de sistemas no lineales, para diseñar y estudiar el control en frontera lineal PI en una clase de DPS no lineales. En particular, se prueba que si el proceso de parámetros distribuidos no-lineal es estable exponencialmente y tiene un mapa entrada-salida estrictamente monótono, entonces un controlador retroalimentado simple PI de ganancias bajas, conduce a una regulación asintótica global y exponencial local de la salida. A pesar que se tratan sistemas estables, un control retroalimentado tiene mejores propiedades que el control a lazo abierto, el cual es incapaz por ejemplo, de rechazar perturbaciones aditivas a la entrada de la planta. El análisis de estabilidad, conduce a una construcción sistemática del

controlador, a un criterio de estabilidad en lazo cerrado, y a una explicación del comportamiento dinámico en lazo cerrado. La aplicabilidad de los resultados teóricos y la construcción de los esquemas de control se ilustran al considerar tres casos de interés en la industria química: un intercambiador de calor, un reactor bioquímico y un reactor químico de flujo tapón con reacciones paralelas.

Capítulo 8

Preliminares

Notación. $\mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^n)$ es un espacio de Hilbert de dimensión infinita, de funciones vectoriales de dimensión n definido sobre el dominio $I_z = [z_1, z_2] \subset \mathbb{R}$, donde $z \in I_z$ es la coordenada espacial; $0_n \in \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^n)$ es la función cero. ; para la función $g(y)$; $Dg(y_0)$ denota la derivada de Fréchet de g evaluada en y_0 ; para la función $f(x, y)$, $D_1f(x_0, y_0)$ ($D_2f(x_0, y_0)$) denota la derivada de f con respecto a la primera (segunda, respectivamente) variable evaluada en (x_0, y_0) ; $|f|$ denota la norma Euclidiana del vector $f \in \mathbb{R}^n$; $\|f\|$ denota la norma sobre $L^2(I_z)$, *i.e.*, $\|f\|^2 = \int_{I_z} |f|^2 dz$, y $E(f, t) = \frac{1}{2} \|f(t)\|^2$ es la energía de $f(t)$. Finalmente, x^T denota la transpuesta de x .

8.1 Consideraciones generales sobre DPS

Los sistemas físicos que aparecen en la naturaleza son comúnmente de carácter distribuido. Es decir que las variables de estado dependen de las variaciones espaciales y temporales y los modelos matemáticos que describen estos fenómenos involucran PDE. Los sistemas de PDE no lineales surgen frecuentemente en el modelamiento de procesos difusión-convección-reacción (*e.g.*, reactores de cama empacada y de cama fluidizada). Ejemplos de DPS en ingeniería química incluyen reactores de cama empacada o tubulares, procesos de calentamiento metalúrgicos, reactores de cama fluidizada y procesos de extrucción en polímeros [6].

Los procesos químicos de parámetros distribuidos típicos se describen por PDE de primer y segundo orden, que se clasifican comúnmente en tres categorías: hiperbólicas, parabólicas y elípticas. Los sistemas de PDE hiperbólicos se caracterizan por un carácter altamente oscilatorio,

con frecuencias altas, velocidad de propagación finita y ausencia de suavidad. Los sistemas de PDE parabólicos tienen propiedades de regularidad y espectrales diferentes a las ecuaciones hiperbólicas, y se caracterizan por tener modos de alta frecuencia estables [23].

Todas las PDE de primer orden son hiperbólicas (*e.g.*, reactores de flujo tapón (PFTR)). La denominada ecuación de calor y los reactores con dispersión axial son parabólicos. Estos sistemas se describen en estado estacionario por ODE (donde la variación de las variables de estado es solo en una dirección de las coordenadas espaciales), o PDE (cuando la variación de las variables de estado es en más de una dirección). Las ODE del estado estacionario del modelo distribuido uni-dimensional puede ser un problema de valor inicial (*e.g.*, modelos de flujo tapón) o problemas de valor en la frontera en dos puntos (*e.g.*, modelos con dispersión axial sobrepuesta al flujo tapón). Las ecuaciones que describen la dinámica de procesos distribuidos son invariante PDE.

Es útil recordar que el estado estacionario de un sistema de parámetros concentrados es un punto en el espacio estado, que se define por la solución de un conjunto de ecuaciones diferenciales algebraicas que surgen cuando las derivadas respecto al tiempo son cero. En DPS el estado estacionario debe ser una función de la posición espacial, debido a que esta es la solución de un conjunto de ODE. Para un PFTR se puede mostrar que solo son posibles perfiles únicos en estado estacionario [24]. Cuando existe un retromezclado de masa y calor, existe la posibilidad de múltiples estados estacionarios [25]. El retromezclado puede resultar del reciclo físico o por efectos difusivos o dispersivos (*i.e.*, reactores con dispersión axial). Para el modelo de dispersión axial con una reacción simple se han desarrollado condiciones suficientes para la unicidad, al utilizar métodos de punto fijo, teoremas de comparación, teoría de bifurcación y funciones de Liapunov [25].

La ausencia de una teoría de PDE suficientemente general y desarrollada apropiadamente que cubra tópicos como: existencia, unicidad, regularidad, etc., ha sido el principal obstáculo para desarrollar y analizar esquemas de control para DPS [23]. Por otro lado, la complejidad de los modelos de PDE y las dificultades de tratar con espacios de dimensión infinita pueden conducir a diseños de control imprácticos o imposibles de construir (dentro del marco de la tecnología actual). En general, para diseños de esquemas de control, se prefiere hacer uso de sistemas de parámetros concentrados, que se obtienen mediante alguna simplificación, a usar modelos de parámetros distribuidos, sin embargo, esto no es posible sin perder características intrínsecas del

sistema original de DPS (*e.g.*, sistemas hiperbólicos).

En años recientes, se han desarrollado resultados para PDE que tienen implicaciones prácticas en el desarrollo y análisis de esquemas de control para DPS [23]. En particular, en esta parte de la tesis se hace uso del método de funciones de energía [26] y de la teoría de sistemas perturbados singularmente [27], para el estudio del control lineal en frontera para una clase de DPS exponencialmente estables.

8.2 Modelo matemático de DPS

Se consideran procesos una entrada una salida (SISO) descritos por PDE cuasi-lineales en una dimensión espacial con la siguiente representación estado-espacio:

$$\frac{\partial c(z, t)}{\partial t} = -B_0 \frac{\partial [v(z, t)c(z, t)]}{\partial z} + D_c \frac{\partial^2 c(z, t)}{\partial z^2} + f(c(z, t), z) \quad (1 \text{ (a)})$$

$$\frac{\partial v(z, t)}{\partial t} = -v(z, t) \frac{\partial v(z, t)}{\partial z} + D_v \frac{\partial^2 v(z, t)}{\partial z^2} \quad (1 \text{ (b)})$$

con salida controlada

$$y_r = h_r(c(z, t)) \in \mathbb{R} \quad (2)$$

salida medida

$$\begin{aligned} y_m &= (y_a^T, y_r)^T \\ &= [h_a(c(z, t))^T, h_r(c(z, t))]^T \in \mathbb{R}^a \times \mathbb{R} \end{aligned}$$

condiciones frontera

$$\begin{aligned} A_1 c(z_1, t) + B_1 \frac{\partial c(z_1, t)}{\partial z} &= C_1 \\ A_2 c(z_2, t) + B_2 \frac{\partial c(z_2, t)}{\partial z} &= C_2 \end{aligned} \quad (3)$$

y

$$\begin{aligned} a_1 u(t) + b_1 \frac{\partial v(z_1, t)}{\partial z} &= \gamma_1 \\ a_2 v(z_2, t) + b_2 \frac{\partial v(z_2, t)}{\partial z} &= \gamma_2 \end{aligned} \quad (4)$$

y la condición inicial:

$$\begin{aligned} c(z, 0) &= c_0(z) \\ v(z, 0) &= v_0(z) \end{aligned} \tag{5}$$

donde $c \in \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^n)$ es el vector de variables de proceso, $v \in \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R})$ es la velocidad del fluido, $t \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ es el tiempo, la condición frontera $u(t) = v(z_1, t) \in \mathbb{R}$ denota la *variable manipulada*, $D_c \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es la matriz de coeficientes de dispersión, $f(c, z) \in \mathbb{R}^n$ y $h(c)$ son funciones no lineales C^1 , $\frac{\partial}{\partial z}$ y $\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ denotan a los operadores diferenciales de derivadas espaciales de primer y segundo orden, y A_1, A_2, B_0, B_1 y B_2 son matrices de dimensión adecuada. En particular, B_0 es una matriz diagonal con $B_{0,ii}$ igual a cero o uno. Un cero, y un 1 indican que no existe (*e.g.*, puramente difusivo) o existe convección de la i -ésima variable del proceso, respectivamente.

Las condiciones frontera (3) y (4) son muy generales. En particular, se tienen los siguientes casos: (i) condición frontera de Dirichlet si $B_i = 0$; (ii) condición frontera de Newman si $A_i = C_i = 0$, y (iii) la condición frontera de Danckwerts. Además, la posibilidad que el sistema de Ecs. (1)-(5) pueda admitir condiciones frontera en dos puntos separados (*e.g.*, procesos a contracorriente) se captura por la condición frontera (3) evaluada en z_1 y z_2 .

El modelo de la Ec. (1) describe procesos difusión-convección-reacción para los cuales el coeficiente de difusión/dispersión es independiente de las variables del proceso. En el modelo (1) $v(z, t)$ es la aceleración local de la partícula del fluido en un punto fijo del espacio. En la Ec. (1 (a)) el primer termino a la derecha es el termino convectivo de la i -ésima variable del proceso; el segundo termino se debe a efectos de difusión o dispersión y finalmente, el tercer termino incorpora las no linealidades del proceso (*e.g.*, el termino de reacción). En la Ec. (1 (b)) el termino $\partial v / \partial z$ predice como difiere el flujo de una localización espacial a la siguiente en el mismo instante de tiempo.

Observación 1. *Varios procesos en ingeniería química se controlan en la práctica al manipular la velocidad de flujo. Por otro lado, cuando el fluido es un líquido, es razonable considerar velocidad casi infinita para las perturbaciones de flujo: $v(z, t) = u(t)$. En tal caso, el modelo del proceso (1) se puede escribir como*

$$\frac{\partial c(z, t)}{\partial t} = -u(t)B_0 \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} + D_c \frac{\partial^2 c(z, t)}{\partial z^2} + f(c(z, t), z)$$

Este caso se encuentra en bio-reactores cortos para tratamiento de aguas residuales. En esta parte de la tesis, tal clase de problemas de control se considera como control en frontera debido a que el controlador actúa finalmente en una frontera del proceso. En este sentido, tal problema de control es análogo al de controlar reactores químicos tubulares vía manipulaciones de la temperatura de chaqueta (frontera) [28]. En este caso, los balances de masa y energía conducen a las siguientes PDE para la dinámica de la concentración $\varsigma(z, t) \in \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R})$ y temperatura $T(z, t) \in \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^n)$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varsigma(z, t)}{\partial t} &= -v(t) \frac{\partial \varsigma(z, t)}{\partial z} + D_\varsigma \frac{\partial^2 \varsigma(z, t)}{\partial z^2} + \mathcal{E} r(\varsigma(z, t), T(z, t)) \\ \frac{\partial T(z, t)}{\partial t} &= -v(t) \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} + D_T \frac{\partial^2 T(z, t)}{\partial z^2} + \Delta H^T r(\varsigma(z, t), T(z, t)) + \gamma(u(t) - T(z, t))\end{aligned}$$

donde \mathcal{E} es la matriz estequiométrica, $r(\varsigma, T)$ es el vector de velocidades de reacción, ΔH es el vector de calor de reacción, $\gamma > 0$ es el parámetro de transferencia de calor, y $u(t)$ es la temperatura de chaqueta. A pesar de que esta clase de DPS no se estudia en esta tesis, el control de esta clase de problemas puede analizarse también con las técnicas que se presentan aquí en tanto se cumplan consideraciones similares a las antes descritas. Los biofiltros para el control de la contaminación en el aire y agua constituyen otros problemas de control en frontera interesantes. En este caso, el objetivo de control es regular la concentración del contaminante en el efluente a través de manipulaciones de la velocidad del vapor[29].

Observación 2. *Si $f(c, z)$ es una función lineal y el fluido es incompresible, el problema de control es no lineal (bi-lineal) debido al producto entre la variable v y la derivada espacial de c , i.e., $v\partial c/\partial z$.*

Observación 3. *En esta parte, se considera que el proceso descrito por el sistema de PDE (1)-(5) tiene una solución única, la cual es continuamente diferenciable, aún bajo los controladores desarrollados más adelante. La verificación de diferenciability de las soluciones de las PDE es un problema difícil en general [30]. Sin embargo, como se discutirá más adelante, la ausencia de diferenciability de la solución no tiene una consecuencia real en el diseño de control. De hecho, la consideración de diferenciability es una consideración técnica que se requiere en el análisis de estabilidad.*

8.3 Hipótesis generales sobre el modelo de DPS

Por simplicidad en la presentación, y sin pérdida de generalidad, se considera el caso donde $D_v = 0$ (sin dispersión de fluido) y condición frontera de velocidad $v(z_1, t) = u(t)$. Además, en la parte restante de la tesis se usará la siguiente notación ¹

$$F_1(c, v) \stackrel{def}{=} -B_0 \frac{\partial [vc]}{\partial z} + D_c \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + f(c) \quad (6 \text{ (a)})$$

$$F_2(c, v) \stackrel{def}{=} -v \frac{\partial v}{\partial z} \quad (6 \text{ (b)})$$

Si $u = \bar{u} > 0$ es una velocidad frontera constante, la velocidad en estado estacionario \bar{v} satisface $\bar{v} = \bar{u}$. Entonces, el punto de equilibrio \bar{c} satisface la relación $F_1(\bar{c}, \bar{u}) = 0$. Se considera además que el proceso no lineal descrito por (1)-(3) satisface las siguientes hipótesis.

Hipótesis 1. (*Velocidad en estado estacionario, REE*). El proceso se opera dentro el régimen de velocidad en estado estacionario $I_v \stackrel{def}{=} [v_{\min}, v_{\max}]$, con $v_{\max} > v_{\min} \geq 0$.

Hipótesis 2. (*Salida retardada, SR*). La salida $y_m = h_m(c) \stackrel{def}{=} [h_a(c)^T, h_r(c)]^T$ se mide con tiempo de retardo $t_d \geq 0$.

Hipótesis 3. (*Funciones Lipschitz, FGL*). Las funciones C^1 , $f(c)$ y $h_m(c)$ son globalmente Lipschitz. Esto es, existen dos constantes positivas α_f y α_h tal que $|Df(x)| \leq \alpha_f$ y $|Dh(c)| \leq \alpha_h$, para toda $x \in \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^{n+1})$.

Hipótesis 4. (*Punto de equilibrio único, EU*). Existe una función C^1 , $g_0 : \mathbb{R} \times I_z \rightarrow \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^n)$ tal que para toda $\bar{u} \in I_v$,

$$F_1(\bar{c}, \bar{u}) = 0 \text{ si y solo si } g_0(\bar{u}) = \bar{c}$$

y $|D_1 g_0| \leq \alpha_g$, para toda $\bar{u} \in I_v$. Esto significa que toda entrada constante $\bar{u} \in I_v$, el sistema (1)-(5) tiene un punto de equilibrio único $\bar{c} = g_0(\bar{u})$.

Hipótesis 5. (*Mapa monótono, MM*). El mapa $h \circ g_0 : \bar{u} \rightarrow h(g_0(\bar{u}))$ es una biyección de I_v sobre la imagen $(h \circ g_0)$. Esto es, cada salida en estado estacionario $\bar{y} = h(g_0(\bar{u}))$ se alcanza por una y solamente una entrada del proceso constante \bar{u} . Entonces, el mapa $h \circ g_0 : \bar{u} \rightarrow h(g_0(\bar{u}))$ es estrictamente creciente o estrictamente decreciente en el domino de operación I_v .

Hipótesis 6. (*Estabilidad exponencial uniforme global, GUES*). Para toda entrada constante

¹Por simplicidad, en el resto de la tesis se omiten los argumentos espaciales z y de tiempo t .

$\bar{u} \in I_v$, y toda condición inicial $x_0 \in \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^{n+1})$, la solución $x(t, x_0, \bar{u})$ es exponencial uniforme globalmente estable (GUES) (uniforme en la entrada constante \bar{u}). Esto es, existen dos constantes positivas p y α tal que

$$E(x(t, x_0, \bar{u}) - g_{0,a}(\bar{u}); t) \leq pE(x_0 - g_{0,a}(\bar{u}); t) \exp(-\alpha t)$$

donde $x \stackrel{\text{def}}{=} (c, v)^T$ y $g_{0,a}(\bar{u}) \stackrel{\text{def}}{=} (g_0(\bar{u}), \bar{u})$. Entonces, la energía de la variable de perturbación $x(t, x_0, \bar{u}) - g_{0,a}(\bar{u})$ decae al menos exponencialmente en el tiempo (ver [26]).

Los siguientes comentarios respecto a las hipótesis 1 – 6 son pertinentes:

Procesos estables a lazo abierto. El modelo (1)-(5) con las Hipótesis 1 a 6 describe procesos estables a lazo abierto con acciones de control sobre la salida regulada y_r y las salidas adicionales y_a retardadas por fenómenos de difusión-convección. Las condiciones de estabilidad, suavidad, y medidas retardadas son necesarias para la discusión y las pruebas de los resultados que se derivan en el siguiente capítulo. Estas no son restricción severas, debido a que en general, procesos como difusión, calentamiento, y una gran parte de procesos químicos son estables. De hecho, la mayoría de los procesos químicos descritos por difusión y conducción de calor son disipativos, y por lo tanto estables a lazo abierto. Las reacciones químicas exotérmicas pueden introducir inestabilidades en puntos de operación estacionarios particulares y pueden no ser estables a lazo abierto. En general, existe un compromiso entre los efectos disipativos (difusión/conducción de calor) y los efectos no disipativos (reacción química) [18].

Medidas retardadas e intermedias. La salida medida $y_m = h_m(c)$ incluye a la salida regulada $y_r = h_r(c)$ y un conjunto finito de mediciones adicionales $y_a = h_a(c) \in R^a$, $a = m - 1$. Se pueden ver a $y_r = h_r(c)$ y $y_a = h_a(c)$ como las medidas principal y secundarias, respectivamente. Las medidas secundarias se retroalimentan comúnmente para añadir algún amortiguamiento en el lazo de control [31]. El tiempo de retardo es una característica común de muchos procesos industriales. Este ocurre normalmente en situaciones de control de procesos químicos debido al tiempo necesario para completar un análisis de composición y además surge cuando los DPS se aproximan con modelos de orden bajo con retardo. En particular, para la clase de sistemas (1)-(5) considerados en este caso se puede deber a dos contribuciones: (i) la relación entre la entrada de control (velocidad de entrada) y la salida del sistema, y (ii) tiempo para efectuar la medida de la salida. Por ejemplo, la regulación de composición en reactores químicos puede

modelarse dentro este marco. De hecho, las mediciones de composición se efectúan por dispositivos de medición (e.g., equipo cromatográfico), en tanto que las mediciones de temperatura pueden considerarse para retroalimentación como salidas secundarias. El control directo de la temperatura de salida de reactor se conoce que es difícil en muchos sistemas, debido a que estos sistemas pueden exhibir tiempos muertos grandes y respuestas inversas. Además, el reactor tubular empacado tiene un tiempo muerto grande entre un cambio en la temperatura de entrada y su efecto sobre la temperatura de salida debida a la inercia térmica del empacado.

Multiplicidad de entrada y estabilidad exponencial. La Hipótesis 6, establece que el proceso a lazo abierto es estable exponencialmente. Esta es una consideración moderada, de hecho, la mayoría de los procesos industriales descritos por PDE son exponencialmente estables alrededor de un punto de equilibrio único. Tervo y Nihtila [32] y Winkin *et al.*, [33] han demostrado la estabilidad exponencial para dos clases de reactores químicos tubulares. Tervo y Nihtila[32], probaron la estabilidad exponencial de la solución en estado estacionario para una PDE no-lineal que describe el comportamiento de un reactor de cama empacada de parámetros distribuidos. Winkin *et al.*, [33] han mostrado que los reactores de flujo tapón y dispersión axial que involucran reacciones secuenciales, para los cuales la cinética solo depende de la concentración de los reactantes involucrados en la reacción, son estables exponencialmente. La Hipótesis 5, establece que en el rango de operación $I_v = [v_{\min}, v_{\max}]$, no existe multiplicidad de entrada. Esto es particularmente importante en reactores químicos con productos intermedios. Si la Hipótesis 5 no se cumple, al usar una función de saturación sobre la entrada de control, se puede restringir el rango de operación I_v de modo que no se presenten multiplicidades.

Observación 4. *La verificación a priori de las hipótesis 4 a 6 puede en principio realizarse al utilizar análisis no lineal en dimensión infinita [26]. Sin embargo, en la mayoría de situaciones prácticas estos cálculos son difíciles de ejecutar. En la práctica, las hipótesis 4 y 5 se pueden verificar de simulaciones o datos experimentales. Por otro lado, la Hipótesis 6 se puede verificar a través de simulaciones numéricas.*

Observación 5. *Básicamente, la Ec. (1 (b)) representa un modelo aproximado del campo de velocidad del fluido a lo largo del proceso (i.e., una ecuación del tipo Burgers para convección no lineal). Además, se ha considerado que el momentum se desacopla del resto del campo de estado. A pesar de que se pueden usar modelos más sofisticados para describir el campo de velocidad, la Ec. (1 (b)) retiene las características básicas para el diseño de control y análisis; es decir, las*

perturbaciones en el campo de velocidad de alimentación $u(t)$ se transportan a lo largo del proceso, lo cual introduce un retardo inicial en la acción de control. Estos fenómenos de transporte son particularmente importantes en reactores químicos y bioquímicos con una fase gas/vapor (ver por ejemplo [34]). Sin embargo, los resultados de control en esta parte de la tesis se cumplen para modelos de flujo de fluidos más completos, siempre y cuando se cumplan las hipótesis de estado estacionario, estabilidad y suavidad descritas antes.

Observación 6. *Se puede considerar el término viscoso en la Ec. (1b), que usa el modelo de Burgers. Este término añade efectos de amortiguamiento en frentes de choque en el campo de velocidad². Sin embargo, contrario al conocimiento convencional, el desempeño no se mejora necesariamente al añadir un amortiguamiento positivo, y de hecho, existen muchos casos en los cuales el desempeño se degrada.*

²Comunicación Personal, Felipe López Isunza, (2001).

Capítulo 9

Control Lineal de DPS

9.1 Problema de control

Dado el sistema (1-3), la salida medida $y_m = h_m(c)$ y la señal de referencia $y_r^* \in \text{imagen}(h_r \circ g_0)$, diseñar un control retroalimentado lineal de salida de dimensión finita $u = F(y_m)$ al manipular la velocidad en frontera $u(t) = v(z_1, t)$ tal que el sistema extendido que incluye la dinámica del sistema y el control lineal sea *asintótica globalmente estable alrededor de* $c^* \in \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^n)$, donde $c^* = g_0(u^*)$ y u^* satisfacen $h(g_0(u^*)) = y^*$.

El control retroalimentado lineal es un esquema industrial robusto que se ha probado exitosamente, se acepta ampliamente, y se implementa comúnmente con controladores PI y PID convencionales. De hecho, comúnmente los controladores retroalimentados lineales se usan en la práctica para regular la operación de la clase de DPS definidos por las Ecs. (1)-(5). En particular, esta parte de la tesis se concentra en controladores retroalimentados lineales de la salida medida con la siguiente estructura retroalimentada tipo PI:

$$u = v_{dc} + \underbrace{K_{P,a}(\bar{y}_a - y_a)}_{\text{Retroalimentado estabilizante}} + \underbrace{K_{P,r}(y_r^* - y_r) + K_{I,r} \int_0^t (y_r^* - y_r(\tau)) d\tau}_{\text{Retroalimentado regularizante}} \quad (7)$$

donde $v_{dc} \in I_v$ es una velocidad nominal de pre-compensación (dc-bias), $\bar{y}_a \in \mathbb{R}^m$ es un valor nominal (constante) de las mediciones secundarias adicionales y_a , $K_p = (K_{P,a}^T, K_{p,r})^T \in \mathbb{R}^m$ es una ganancia retroalimentada de la salida medida y_m , y $K_{I,r} \in \mathbb{R}$ es una ganancia integral que corresponde a la salida regulada y_r . Cuando $K_{p,a} = 0$, el retroalimentado lineal es un control PI

estándar de la salida regulada y_r . De esta forma, el controlador retroalimentado es un control PI extendido con acción proporcional que actúa sobre la salida medida completa y_m , y retroalimentado integral que actúa solamente sobre la salida regulada y_r .

Algunos comentarios respecto al esquema de control son pertinentes.

Dimensión finita del controlador. La hipótesis de dimensionalidad finita de la entrada y la salida es natural desde un punto de vista ingenieril. En general, típicamente existen solamente un número finito de entradas de control y mediciones.

Función del controlador. Debido a que el proceso a lazo abierto es GUES, el control retroalimentado se usa para mejorar la estabilidad de los modos estables sensitivos a perturbaciones. La idea principal en el controlador es que básicamente se está controlando el estado estacionario del sistema al seleccionar el valor de referencia y^* y las ganancias adecuadas. Básicamente, la dinámica del sistema original se acelera con el término proporcional seleccionado adecuadamente. La función de la parte integral es remover la desviación en estado estacionario. Por otro lado, el controlador (7) se puede ver como un controlador multi-lazo (cascada paralelo) [31] que se compone de dos partes: el servo-compensador (parte integral I, del controlador) y el compensador estabilizante (parte proporcional P, del controlador). El servo-compensador se construye sobre la base de la señal de referencia y_r^* . La idea básica del servo-compensador es cambiar el estado estacionario, de modo que conforme el nuevo estado estacionario se alcanza, la regulación $y_r(t) \rightarrow y_r^*$ también ocurre. El propósito del compensador estabilizante es acelerar, si es posible, la dinámica del sistema.

Regulación de salida. La salida regulada y_r es una función de la variable de estado en la corriente de salida ($z = z_{\max}$). Esta selección es bastante común en situaciones prácticas donde la velocidad de flujo es una elección natural como variable de entrada manipulada, debido a que esta afecta directamente las ecuaciones de variables de estado, y por lo tanto la salida misma [5]. La consideración que la señal de referencia sea constante no es la más general. Las referencias sinusoidales y exponenciales son importantes, sin embargo, la señal de referencia constante es el caso más importante y permite desarrollar la teoría sin complejidad matemática excesiva.

Medidas secundarias. La medición directa de las concentraciones usualmente implica equipo costoso y tiempo de retardo inaceptables. Además, se conoce bien que la clave para mejorar el comportamiento de un sistema de control es incorporar más y mejores mediciones. Desde una perspectiva práctica, la retroalimentación de medidas secundarias ayuda a reducir constantes de tiempo internas del proceso. Por otro lado, la localización de las medidas secundarias debe elegirse

de forma que proporcione la información mas relevante del proceso al controlador. Por ejemplo, se conoce que para el caso de un reactor tubular, las mediciones de temperatura se deben localizar en el área de mayor temperatura en el reactor [35]. En general, las acciones de control que se basan en pocas medidas, seleccionadas en forma adecuada, proporcionan un mejor desempeño en lazo cerrado, sin embargo, este es un tópico difícil que esta fuera de los objetivos de esta tesis.

Propiedades a lazo cerrado. Bajo el control retroalimentado tipo PI (7), las propiedades a lazo cerrado globales deseadas incluyen (i) estabilidad entrada-salida, (ii) seguimiento exponencial del punto de referencia regulado, y (iii) estabilidad interna del lazo de control.

9.2 Análisis no-lineal de estabilidad

En principio, el análisis de estabilidad debe de proporcionar información sobre el desempeño de control y también conducir a mejoras en los diseños de control en cascada [36]. En esta sección se estudia la estabilidad del DPS (1)-(3) en lazo cerrado con el control lineal (7) en un marco de análisis de sistemas no lineales. Los pasos para el análisis de estabilidad son los siguientes: (i) Probar que las Hipótesis 4 a 6 son invariantes bajo retroalimentado proporcional. En particular, probar que bajo el retroalimentado proporcional de ganancia baja, la propiedad de estabilidad exponencial del sistema descrito por PDE no se altera. (ii) Probar que una acción integral de ganancia baja proporciona regulación de la salida regulada y_r con estabilidad global del lazo de control. La idea del análisis de estabilidad es ver al controlador PI (7) como una configuración multi-lazo. En un primer paso, el lazo retroalimentado (secundario) proporcional se construye al considerar la acción integral como una entrada constante w_I , En un segundo paso, el lazo retroalimentado (principal) se construye al substituir la entrada constante w_I por el retroalimentado $K_{I,r} \int_0^t (y_r^* - y_r(\tau)) d\tau$.

9.2.1 Control proporcional

Proposición 1. *Sea el sistema (1)-(3), que satisface las Hipótesis 1-6. Si $|K_P|$ es suficientemente pequeña, entonces el sistema (1)-(3) bajo el retroalimentado proporcional*

$$w = v_{dc} + K_{P,a}(\bar{y}_a - y_a) + K_{P,r}(y_r^* - y_r) + w_I \quad (8)$$

y el operador de saturación-retardo

$$\sigma(\mathcal{D}_{t_d}(w(t)))$$

aplicado en la frontera del sistema (1)-(3)

$$\mathcal{B}(w(t)) \stackrel{\text{def}}{=} \sigma(\mathcal{D}_{t_d}(w(t)))$$

satisface las siguientes propiedades:

Propiedad 1. Existe una función C^1 , $g_p : \mathbb{R} \times I_z \rightarrow \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^n)$ tal que para toda $\bar{w}_I \in \mathbb{R}$,

$$F_1(\bar{c}, \bar{w}_I) = 0 \text{ si y solamente si } g_p(\bar{w}_I) = \bar{c} \quad (9)$$

$|Dg_p| \leq \alpha_{gp}$, para toda $\bar{w}_I \in \mathbb{R}$. Esto significa que para toda entrada constante $\bar{w}_I \in \mathbb{R}$, el sistema (1)-(3),(10) tiene un punto de equilibrio único $\bar{c} = g_p(\bar{w}_I)$.

Propiedad 2. El mapa entrada-salida $h_r \circ g_p : \bar{w}_I \rightarrow h_r(g_p(\bar{w}_I))$ es una biyección de \mathbb{R} sobre la imagen($h_r \circ g_p$). Esto es, cada salida en estado estacionario $\bar{y} = h_r(g_p(\bar{w}_I))$ se alcanza por una y solamente una entrada del proceso constante \bar{w}_I . Entonces, el mapa $h_r \circ g_p : \bar{w}_I \rightarrow h_r(g_p(\bar{w}_I))$ es estrictamente creciente o estrictamente decreciente en el dominio de operación I_v .

Propiedad 3. Para toda entrada constante $\bar{w}_I \in \mathbb{R}$, y toda condición inicial $x_0 \in \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^{n+1})$, la energía de la solución de perturbación $x(t, x_0, \bar{w}_I) - g_{p,a}(\bar{w}_I)$ decae al menos exponencial uniformemente en tiempo (uniforme en \bar{w}_I), donde $g_{2,a}(\bar{w}_I) \stackrel{\text{def}}{=} (g_2(\bar{w}_I), \bar{w}_I)$. Esto es, el estado estacionario $g_{2,a}(\bar{w}_I)$ es exponencial uniforme globalmente estable.

Prueba. i) Incorporación del retardo y saturación de la entrada de control w .

Al usar argumentos de principios de modelo interno para sistemas estables con retardo [37], el operador de saturación-retardo $\sigma(\mathcal{D}_{t_d}(m(y_m)))$, incorporado dentro del modelo de la planta (1)-(3) a través de la condición frontera (4) como sigue:

$$v(z_1, t) = u(t) = \mathcal{B}(w(t)) = \sigma(\mathcal{D}_{t_d}(m(y_m))) \quad (10)$$

permite diseñar una función retroalimentada no-acotada y libre de retardo $w = m(y_m)$ para estabilizar el sistema (1)-(3), (10) alrededor de c^* . De hecho, el operador de retardo actuando

sobre la salida medida y_m

$$\mathcal{D}_{t_d}(y_m(t)) = y_m(t - t_d)$$

permite escalar a la variable de salida medida y_m , de tal forma que la respuesta a lazo cerrado es independiente del retardo en la entrada de control [37]. Por otro lado, para toda entrada constante $\bar{u} \in \mathbb{R}$ la función de saturación

$$\sigma : \mathbb{R} \rightarrow [v_{\min}, v_{\max}]$$

donde

$$\sigma(u^*) = \begin{cases} v_{\min} & \text{si } u^* \leq v_{\min} \\ u^* & \text{si } v_{\min} < u^* < v_{\max} \\ v_{\max} & \text{if } u^* \geq v_{\max} \end{cases}$$

asegura que $\bar{u} \in I_v$. Observar que la función de saturación $\sigma(u)$ es diferenciable en todas partes, excepto en los puntos aislados $[v_{\min}, v_{\max}]$. A una distancia arbitrariamente pequeña $\delta > 0$ de estos puntos se puede tomar una aproximación- δ suave de forma que $|\sigma_\delta - \sigma| \leq 0$. Además, para el caso particular que las salidas se miden sin retardo (e.g., propagación infinita de velocidad y medidas instantáneas), la función retroalimentada actual toma la forma $u = \sigma(m(y_m))$.

ii) *Propiedad 1.* Para toda $\bar{w}_I \in \mathbb{R}$, el estado estacionario $(\bar{c}(z), \bar{v}(z))$ del sistema (1)-(3), (10) satisface las relaciones

$$F_1(\bar{c}, \bar{v}) = -\frac{d[\bar{v}\bar{c}]}{dz} + D\frac{d^2\bar{c}}{dz^2} + f(\bar{c}) = 0 \quad (11)$$

$$F_2(\bar{c}, \bar{v}) = -\bar{v}\frac{d\bar{v}}{dz} = 0 \quad (12)$$

con condiciones frontera

$$\begin{aligned} A_1\bar{c}(z_1) + B_1\frac{d\bar{c}(z_1)}{dz} &= C_1 \\ A_2\bar{c}(z_2) + B_2\frac{d\bar{c}(z_2)}{dz} &= C_2 \end{aligned} \quad (13)$$

y

$$\bar{v}(z_1) = \mathcal{B}(K_{P,a}(\bar{y}_a - h_a(\bar{c})) + K_{P,r}(y_r^* - h_r(\bar{c})) + \bar{w}_I) \quad (14)$$

$$\mathcal{B}(K_{P,a}(\bar{y}_a - h_a(c)) + K_{P,r}(y_r^* - y_r) + w_I) \stackrel{def}{=} \sigma(\mathcal{D}_{t_d}(v_{dc} + K_{P,a}(\bar{y}_a - h_a(c)) + K_{P,r}(y_r^* - y_r)) + w_I))$$

Para cualquier $\bar{w}_I \in \mathbb{R}$, sea $x(t, x_0, \bar{w}_I; K_P)$ la solución del sistema (1)-(3),(8). Observar que, $x(t, x_0, \bar{w}_I; 0) = x(t, x_0, v_{dc} + \bar{w}_I)$. De (12), se tiene que $d\bar{v}/dz = 0$, de forma que $\bar{v}(z) = \mathcal{B}(K_{P,a}(\bar{y}_a - h_a(\bar{c})) + K_{P,r}(y_r^* - h_r(\bar{c})) + \bar{w}_I) = \text{constante}$. Debido a que el sistema (1)-(3) satisface la Hipótesis 4 (*EU*), se tiene que $\bar{c} = g_0(\bar{u})$, de forma que

$$\bar{c} = \vartheta(\bar{c}, K_P) \quad (15)$$

donde $\vartheta(\bar{c}, K_P) = g_0(v_{dc} + K_{P,a}(\bar{y}_a - h_a(\bar{c})) + K_{P,r}(y_r^* - h_r(\bar{c})) + \bar{w}_I)$. Observar que para $K_P = 0$, la Ec. (15) tiene una solución única (Hipótesis 4). Se tiene que

$$\begin{aligned} D\vartheta(\bar{c}, K_P) &= -(Dg_0)(K_{P,a}Dh_a + K_{P,r}Dh_r) \\ |D\vartheta(\bar{c}, K_P)| &\leq |K_P| |Dg_0| |Dh_m| \\ &\leq |K_P| \alpha_{g_0} \alpha_{h_m} \\ &< 1 \quad \text{para } |K_P| \text{ suficientemente pequeña.} \end{aligned}$$

Debido a que Dg_0 , Dh_a y Dh_r están acotadas uniformemente con respecto a \bar{c} (Hipótesis 3 y 4), se tiene que $|D\vartheta(\bar{c}, K_P)| < 1$ para $|K_P|$ suficientemente pequeña. Por el Teorema de la Función Inversa Global [38], existe una solución única $\bar{c} = g_p(\bar{w}_I)$, para toda $\bar{w}_I \in \mathbb{R}$, y $g_p(\bar{w}_I)$ es una función suave.

ii) *Propiedad 2.* Por la Hipótesis 5 (*MM*), el mapa $h_r \circ g_0 : \bar{w} \rightarrow h_r(g_0(\bar{w}))$ es una biyección de \mathbb{R} sobre su imagen($h_r \circ g_0$), de forma que $|Dh_r \circ g_0(\bar{w})| > 0$, para toda $\bar{w} \in \mathbb{R}$. Debido a que $\bar{y} = h_r[g_0((v_{dc} + K_{P,a}(\bar{y}_a - \bar{y}_a) + K_{P,r}(y_r^* - \bar{y}_r) + \bar{w}_I))]$, donde $\bar{y}_r = h_r(\bar{c})$, se tiene que

$$d\bar{y}/d\bar{w}_I = (Dh_r \circ Dg_0)(-K_{P,a}d\bar{y}_a/d\bar{w}_I - K_{P,r}d\bar{y}_r/d\bar{w}_I + 1)$$

Consecuentemente, para $|K_P|$ suficientemente pequeña,

$$\begin{aligned} |d\bar{y}/d\bar{w}_I| &= |(1 + K_{P,r}(Dh_r \circ g_0))^{-1} [(Dh_r \circ g_0)(1 - K_{P,a}d\bar{y}_a/d\bar{w}_I)]| \\ &\geq (1 + K_{P,r}\alpha_{g_1}\alpha_{h_r})^{-1} |Dh_r \circ g_0| |1 - K_{P,a}d\bar{y}_a/d\bar{w}_I| \end{aligned}$$

Debido a que $d\bar{y}_a/d\bar{w}_I$ esta acotada uniformemente para toda \bar{w}_I , esto muestra que $d\bar{y}/d\bar{w}_I$ nunca es cero para $|K_P|$ suficientemente pequeña, lo cual prueba la Propiedad 2.

iii) *Propiedad 3.* El sistema (1)-(3),(10) se puede escribir como

$$\frac{\partial x}{\partial t} = F(x), \quad x(z, 0) = x_0(z) \quad (16)$$

con condiciones frontera

$$\begin{aligned} \beta_1(x(z_1, t)) &= E\mathcal{B}(K_P(y^* - H(x(z, t)))) + w_I \\ \beta_2(x(z_2, t)) &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

donde $y^* = (y_r^*, \bar{y}_a^T)^T$, $F(x) = (F_1(x), F_2(x))^T$, $H(x) = (h(c)^T, 0)^T$,

$$\begin{aligned} \beta_1(x(z_1, t)) &\stackrel{def}{=} A_{a,1}x(z_1, t) + B_{a,1}\frac{\partial x(z_1, t)}{\partial z} - C_{a,1} \\ \beta_2(x(z_2, t)) &\stackrel{def}{=} A_{a,2}x(z_2, t) + B_{a,2}\frac{\partial x(z_2, t)}{\partial z} - C_{a,2} \end{aligned}$$

$A_{a,1} = \text{diag}(A_1, 1)$, $A_{a,2} = \text{diag}(A_2, 0)$, $B_{a,i} = \text{diag}(B_i, 0)$, $C_{a,i} = \text{diag}(C_i, 0)$, para $i = 1, 2$, y $E = \text{diag}(0_1, \dots, 0_n, 1)$. Considere el sistema (16), (17) con entrada $\bar{w}_I \in \mathbb{R}$, y sea $\bar{w}_{I,1} = (1 + K_P H g_0)^{-1} \bar{w}_I$. La solución de equilibrio de (16), (17) es $\bar{x} = g_0(\bar{w}_{I,1})$. Al trasladar al origen la solución de equilibrio, definir la coordenada de desviación $x_d \stackrel{def}{=} x - g_0(\bar{w}_{I,1}) = x - g_0(1 + K_P H g_0)^{-1}(\bar{w}_I)$, y escribir el sistema (16)-(17) como

$$\frac{\partial x_d}{\partial t} = F(x_d + g_0(\bar{w}_{I,1})), \quad x_d(z, 0) = x_0(z) - g_0(\bar{w}_{I,1}) \quad (18)$$

con condiciones frontera

$$\begin{aligned} \beta_1(x_d(z_1, t) + g_0(\bar{w}_{I,1}, z_1)) &= E[\mathcal{B}(\bar{w}_{I,1}) + \Delta\mathcal{B}(x_d, \bar{w}_{I,1})] \\ \beta_2(x_d(z_2, t) + g_0(\bar{w}_{I,1}, z_2)) &= 0 \end{aligned} \quad (19)$$

donde

$$\begin{aligned} \Delta\mathcal{B}(x_d, \bar{w}_{I,1}) &\stackrel{def}{=} \mathcal{B}(K_P(y^* - H(x_d + g_0(\bar{w}_{I,1})))) + (1 + K_P H g_0)\bar{w}_{I,1} - K_P H(g_0(\bar{w}_{I,1}) + x_d) \\ &\quad - \mathcal{B}(K_P(y^* - H(x_d + g_0(\bar{w}_{I,1})))) + \bar{w}_{I,1} \end{aligned}$$

En virtud de la Hipótesis 3 (*FGL*) se obtiene

$$\begin{aligned} |\Delta\mathcal{B}(x_d, \bar{w}_{I,1})| &\leq \alpha_f |K_P| |Hg_0(\bar{w}_{I,1}) - H(g_0(\bar{w}_{I,1} + x_d))| \\ &\leq \alpha_f \alpha_{g_0} |K_P| |x_d| \end{aligned} \quad (20)$$

Observar que $x_d(z, t) = 0_{n+1}(z, t)$ es la solución en estado estacionario del sistema (18), (19). Se sabe por la Hipótesis 6 (*GUES*) que para toda $\bar{w}_{I,1} \in \mathbb{R}$ la solución de equilibrio $x_d(z, t) = 0_{n+1}(z, t)$ del sistema (18), (19) con $\Delta\mathcal{B}(x_d(z, t), \bar{w}_{I,1}) = 0$ (*i.e.*, $K_P = 0$) es exponencial uniforme globalmente estable en la entrada constante $\bar{w}_{I,1}$. Entonces, la estabilidad exponencial uniforme del sistema K_P -perturbado se puede establecer vía métodos de energía (ver [26]). ■

Los resultados en la Proposición 1 tienen información práctica importante para la regulación global de DPS con control frontera retroalimentado. Básicamente, la Proposición 1 establece que, a pesar de las saturaciones de entrada y las medidas retardadas, el retroalimentado proporcional de ganancia baja de dimensión finita, no cambia las propiedades estructurales y de estabilidad de la solución en estado estacionario; es decir, el sistema a lazo cerrado de *dimensión infinita* correspondiente tiene una solución única, global y exponencialmente estable. Además, el mapa entrada-salida $\bar{w}_I \rightarrow h(g_p(\bar{w}_I))$ es estrictamente creciente o estrictamente decreciente, lo que implica que el sistema en lazo cerrado de dimensión infinita no presenta multiplicidades de entrada (*i.e.*, para cada valor en estado estacionario de la salida regulada $h_r(g_p(\bar{w}_I))$, existe una entrada de control en estado estacionario única \bar{w}_I).

Desde un punto de vista práctico, *la Proposición 1 implica que se puede añadir algún amortiguamiento adicional por retroalimentado de estado parcial, sin deterioro de las propiedades de estabilidad global*. Esta es una propiedad importante para aplicaciones de control debido a que, por ejemplo, un sistema de dimensión infinita tiene un número infinito de polos, de modo que la localización arbitraria de los polos no se puede obtener con un controlador de dimensión finita. Por otro lado, de un análisis estándar de localización de raíces se puede concluir que el comportamiento inestable del sistema controlado se puede obtener para valores grandes de la ganancia proporcional $|K_P|$ [7]. Esto es debido a que algunos polos a lazo cerrado se aproximan al lado derecho del plano complejo, conforme $|K_P|$ se incrementa. De esta forma, parece que el control retroalimentado de *ganancia baja* es necesario para la mayoría de DPS cuando se usa un controlador de dimensión finita [7], [9], [39].

Desviación en estado estacionario

Se ha demostrado que, bajo retroalimentado proporcional suficientemente pequeño, el proceso (1)-(5) tiene un estado estacionario único **GUES**. Debido a que el mapa de salida h es continuo y satisface $|Dh(c)| \leq \alpha_h$ para toda entrada constante $\bar{w}_I \in I_z$, la salida de la planta correspondiente y_m tiende exponencialmente a la salida constante $h(g_p(\bar{w}_I))$. Por la Propiedad 2, cada salida en estado estacionario $h(g_p(\bar{w}_I))$ se alcanza por una y solamente una entrada al proceso (1)-(3) constante \bar{w}_I . Sin embargo, si \bar{w}_I no es la entrada tal que $h_r(g_p(\bar{w}_I)) = y_r^*$, se presenta una desviación en estado estacionario $|y_r^* - h_r(g_p(\bar{w}_I))| \neq 0$. Básicamente, tal desviación en estado estacionario se debe a los errores de modelado de la planta real actual. Desde el punto de vista de control clásico, parece razonable introducir una acción integral para remover tal desviación en estado estacionario.

9.2.2 Control proporcional-integral

Para este fin, considere el control retroalimentado proporcional-integral:

$$\begin{aligned} w &= v_{dc} + K_{P,a}(\bar{y}_a - y_a) + K_{P,r}(y_r^* - y_r) + w_I \\ \frac{dw_I}{dt} &= K_{I,r}(y_r^* - y_r), \quad w_I(0) = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

donde $K_{I,r}$ es la ganancia integral. La idea atrás de este control retroalimentado es que la acción integral $w_I = K_{I,r} \int_0^t (y_r^* - y_r(\tau)) d\tau$ debe de converger a la entrada en estado estacionario exacta $\bar{w}_I \in \mathbb{R}$ y por lo tanto se remueve la desviación en estado estacionario, *i.e.*, $y_r^* - h_r(g_p(\bar{w}_I)) = 0$.

El resultado principal puede establecerse como sigue.

Teorema 1. *Considere el proceso (1)-(5) que satisface las Hipótesis 1-6 y bajo el controlador PI (21). Si $y_r^* \in \text{imagen}(h_r \circ g_p)$ y $\text{signo}(K_{I,r}) = \text{signo}(Dh_r(g(\bar{u}))$ y $|K_{I,r}|$ es suficientemente pequeño, entonces existe $\varepsilon^{\max} > 0$ tal que, para todo $0 < |K_{I,r}| < \varepsilon^{\max}$, el proceso controlado (1)-(5), (21) tiene un estado estacionario único el cual es **GUES**. Además, $y_r(t) \rightarrow y_r^*$ exponencialmente.*

Prueba. Se escriben las ecuaciones a lazo cerrado como

$$\frac{\partial x}{\partial t} = F(x), \quad x(z, 0) = x_0(z)$$

$$\frac{dw_I}{dt} = K_{I,r}(y_r^* - h_r(c)), w_I(0) = 0 \quad (22)$$

con condiciones frontera

$$\begin{aligned} \beta_1(x(z_1, t)) &= EB(K_P(y^* - H(x)) + w_I) \\ \beta_2(x(z_2, t)) &= 0 \end{aligned} \quad (23)$$

Para continuar el análisis, se traslada primero el estado estacionario al origen. Primero, se define la entrada en estado estacionario correcta w_I^* por

$$y^* = h_r(g_p(w_I^*)) \quad (24)$$

y entonces se definen las nuevas variables x_d y $w_{I,d}$ por

$$\begin{aligned} x_d &= x - g_p(w_I) \\ w_{I,d} &= w_I - w_I^* \end{aligned} \quad (25)$$

Al usar x_d y $w_{I,d}$ como variables de estado, el proceso controlado (22), (23) es (por simplicidad en la notación, en el resto de la prueba se omite $K_P(y^* - H(x))$ de la condición frontera (23))

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_d}{\partial t} &= F(x_d + g_p(w_{I,d} + w_I^*)) - K_I Dg_p(w_{I,d} + w_I^*) \Omega(x_d, w_{I,d}) \\ \frac{dw_{I,d}}{dt} &= K_I \Omega(x_d, w_{I,d}), w_{I,d}(0) = -w_I^* \end{aligned} \quad (26)$$

donde $\Omega(x_d, w_{I,d}) \stackrel{def}{=} h_a g_p(w_I^*) - h_a(g_p(w_{I,d} + w_I^*) + x_d)$. Las condiciones frontera son

$$\begin{aligned} \beta_1(x_d(z_1, t) + g_p(w_{I,d} + w_I^*, z_1)) &= EB(w_{I,d} + w_I^*) \\ \beta_2(x_d(z_2, t) + g_p(w_{I,d} + w_I^*, z_2)) &= 0 \end{aligned} \quad (27)$$

Las Propiedades 1 y 2 implican que $(x_d(z, t), w_{I,d}(t)) = (0_{n+1}(z), 0)$ es el punto de equilibrio único de (26)-(27). Debido a que h_a y g_2 son continuas, $(x_d(z, t), w_{I,d}(t)) \rightarrow (0_{n+1}(z), 0)$ conforme $t \rightarrow \infty$ implica que $y(t) \rightarrow y^*$ conforme $t \rightarrow \infty$.

Sea $K_I = \text{signo}(K_I)\varepsilon$, donde $\varepsilon > 0$, y sea $\tau \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon t$ una nueva escala de tiempo. Con cierto abuso de notación, el sistema (26) se puede escribir en la nueva escala de tiempo como

$$\begin{aligned}\varepsilon \frac{\partial x_d}{\partial \tau} &= F(x_d + g_p(w_{I,d} + w_I^*)) - \varepsilon \text{signo}(K_I) Dg_p(w_{I,d} + w_I^*) \Omega(x_d, w_{I,d}) \\ \frac{dw_{I,d}}{d\tau} &= \text{signo}(K_{I,r}) \Omega(x_d, w_{I,d}), \quad w_{I,d}(0) = -w_I^*\end{aligned}\quad (28)$$

con condiciones iniciales, $x_d(0) = x_0 - g_p(w_I^*)$ y $w_{I,d}(0) = -w_I^*$ y condiciones frontera como en (27). Para $\varepsilon > 0$ suficientemente pequeña, el sistema (27)-(28) esta en la forma de perturbación singular estándar donde x_d y $w_{I,d}$ son las variables rápidas y lentas, respectivamente. Por hipótesis, $\text{signo}(K_{I,r}) = \text{signo}(Dh_r(g_p(\bar{u}))) = \text{signo}(DH(g_p(\bar{u})))$, de forma que la Propiedad 2 implica que el sistema reducido

$$\frac{dw_{I,d}}{d\tau} = \text{sign}(K_{I,r}) \Omega(0, w_{I,d}), \quad w_{I,d}(0) = -w_I^*$$

es **GUES** alrededor del origen. Por otro lado, por la Propiedad 3, el sistema de capa límite

$$\frac{\partial x_d}{\partial \tau} = F(x_d + g_p(w_I^*))$$

con condiciones frontera

$$\begin{aligned}\beta_1(x_d(z_1, t) + g_p(w_I^*, z_1)) &= EB(w_I^*) \\ \beta_2(x_d(z_2, t) + g_p(w_I^*, z_2)) &= 0\end{aligned}$$

es además **GUES** alrededor de la solución de equilibrio cero. En este punto, se pueden usar argumentos de teoría de sistemas perturbados singularmente estándares (ver por ejemplo [27]) para obtener que existe $\varepsilon^{\max} > 0$, tal que si $\varepsilon \in (0, \varepsilon^{\max})$, entonces el estado del proceso controlado descrito por PDE (27)-(28) converge al menos exponencialmente a la solución cero $(0_{n+1}(z), 0)$. Finalmente, debido a que h_a y g_p son continuas, se obtiene que $y(t) \rightarrow y^*$. ■

Observación 7. Rigurosamente hablando, el resultado en el teorema anterior establece que, dado el proceso descrito por las PDE (1)-(5) que satisface las hipótesis 1-6 de suavidad, estabilidad, estado estacionario y mediciones retardadas, si las ganancias de control son suficientemente pequeñas, entonces el compensador PI (21) conduce a estabilidad interna global y estabilidad asintótica global con regulación exponencial local de la salida del proceso $y_r(t)$. Aun mas, la propiedad de estabi-

lidad exponencial del sistema a lazo cerrado garantiza un cierto grado de robustez con respecto a incertidumbres y perturbaciones suficientemente pequeñas en los parámetros del proceso.

Observación 8. Observar que la consideración de diferenciabilidad no se requiere para el diseño de control. De hecho, la diferenciabilidad de soluciones es una consideración técnica que se requiere para la propuesta del análisis de estabilidad particular, la cual hace uso de una transformación de coordenadas (25).

Observación 9. El resultado de regulación que se establece antes se puede extender al caso de controladores generales PI de la forma

$$\begin{aligned} w &= v_{dc} + K_{P,a}G_a(s)(\bar{y}_a - y_a) + K_{P,r}G_r(s)(y_r^* - y_r) + w_I \\ \frac{dw_I}{dt} &= K_{I,r}(y_r^* - y_r), \quad w_I(0) = 0 \end{aligned} \quad (29)$$

donde $s = d/dt$, y $G_r(s)$ y $G_a(s)$ son compensadores estables y propios con $G_r(0) = 1$ y $G_a(0) = 1$. La prueba se puede hacer al usar ideas análogas a las que conducen al Teorema 1. La clase de compensadores (29) incluyen controladores PI desintonizados como el siguiente

$$C(s) = C_{PI}(s)G_{LL}(s)$$

donde $C_{PI}(s)$ es un controlador PI dado como antes y $G_{LL}(s) = (\tau_L s + 1)/(\alpha \tau_L s + 1)$, $\alpha > 1$, es un compensador adelanto-retardo (lead-lag). La meta en este caso es aumentar la cantidad de acción de control (i.e., ganancias más altas) a frecuencias bajas sin afectar el comportamiento del controlador en la vecindad de ciertas frecuencias resonantes. En la práctica, es deseable combinar el ajuste del control a bajas frecuencias para mejorar el desempeño, y a altas frecuencias, el sistema se tiene que desintonizar para garantizar una estabilidad robusta (loop shaping). Este tipo de controladores PI desintonizados se usa comúnmente en el control de procesos químicos y bioquímicos (ver, por ejemplo [40]). Por otro lado, $G_a(s)$ y $G_r(s)$ se pueden ver como pre-filtros usados para reducir ruido de medición (de alta frecuencia) o para dar forma a la respuesta deseada de la salida controlada y_r .

Capítulo 10

Casos de Estudio

En este capítulo, se usan tres casos de estudio: un reactor químico exotérmico [5], un reactor bio-químico, y el intercambiador de calor, para ilustrar el desempeño y los resultados de estabilidad del control frontera PI que se han estudiado en los capítulos previos. Sin embargo, los resultados teóricos descritos en el capítulo anterior se aplican para una gran variedad de procesos químicos y bio-químicos (*e.g.*, bio-filtración [29], y separaciones cromatograficas [4].)

10.1 Intercambiador de calor

Para ilustrar los resultados teóricos, se usa como primer caso de estudio el modelo de un intercambiador de calor a co-corriente con $I_z = [0, L]$ y $c = (T_1, T_2)^T$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial T_1}{\partial t} &= -v_p \frac{\partial T_1}{\partial z} + D_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial z^2} + \gamma_1(T_2 - T_1) \\ \frac{\partial T_2}{\partial t} &= -u \frac{\partial T_2}{\partial z} + D_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial z^2} - \gamma_2(T_1 - T_2)\end{aligned}\tag{30}$$

con condiciones iniciales $T_1(z, 0) = T_{1,0}(z)$ y $T_2(z, 0) = T_{2,0}(z)$, y condiciones frontera $T_1(0, t) = T_{1,in}$, $T_2(0, t) = T_{2,in}$, $\partial T_1(L, t)/\partial z = 0$ y $\partial T_2(L, t)/\partial z = 0$, donde T_1 y T_2 son respectivamente las temperaturas del proceso y el fluido de servicio, $v_p > 0$ es la velocidad del fluido del proceso, u es la velocidad del fluido del proceso de servicio, $\gamma_1 > 0$ y $\gamma_2 > 0$ son los parámetros de transferencia de calor.

Un diagrama esquemático del intercambiador a co-corriente se presenta en la Figura 10.1. En

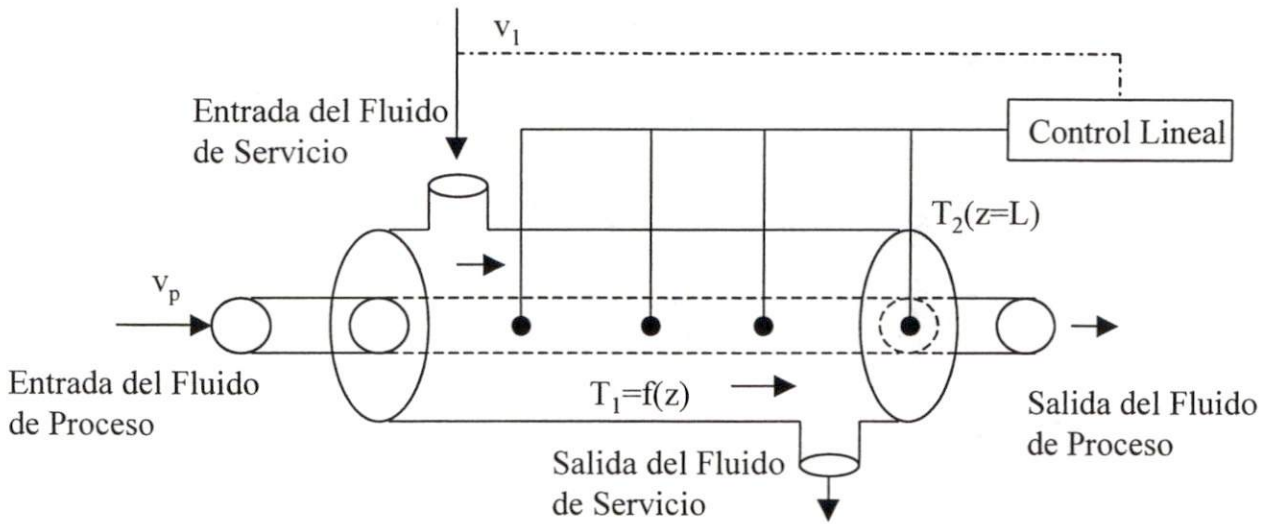


Figura 10-1: Diagrama esquemático del intercambiador de calor.

varios procesos industriales, los esquemas a co-corriente y contra corriente con altas velocidades de flujo son las condiciones de operación más comunes. El objetivo de control es regular la temperatura del proceso $y_r = T_1(L, t)$ vía manipulación de la velocidad del fluido del proceso de servicio u . Para simulaciones numéricas, se toma el siguiente conjunto de parámetros: $v_p = 0.02 \text{ ms}^{-1}$, $I_v = [0, 2.5] \text{ ms}^{-1}$, $\gamma_1 = 0.315 \text{ s}^{-1}$, $\gamma_2 = 0.195 \text{ s}^{-1}$, $D_1 = D_2 = 0.001 \text{ m}^2 \text{ C}^{-1} \text{ s}^{-1}$ y $T_{1,in} = 100 \text{ C}$ y $T_{2,in} = 20 \text{ C}$. El proceso se simuló a través del método de diferencias finitas (Apéndice B) con 300 puntos malla espaciales, y las ODE resultantes se integraron con un método Runge-Kutta.

A pesar de que $f(c)$ es una función lineal, el problema de control es no lineal (bilineal) debido al término $u \frac{\partial T_2}{\partial z}$. Para mostrar que el sistema (30) pertenece a la clase de DPS que se consideran, es suficiente mostrar que las Hipótesis 4 a 6 se cumplen. Para cada entrada constante de control \bar{u} , el sistema es lineal de modo que tiene una solución en estado estacionario única $(\bar{T}_1(z), \bar{T}_2(z))$ (Hipótesis 4) definida por

$$\begin{aligned} -v_p \frac{d\bar{T}_1}{dz} + D_1 \frac{d^2\bar{T}_1}{dz^2} + \gamma_1(\bar{T}_2 - \bar{T}_1) &= 0 \\ -\bar{u} \frac{d\bar{T}_2}{dz} + D_2 \frac{d^2\bar{T}_2}{dz^2} - \gamma_2(\bar{T}_1 - \bar{T}_2) &= 0 \end{aligned} \quad (31)$$

Por otro lado, la Figura 10.2 muestra que el mapa en estado estacionario entrada-salida $\bar{u} \rightarrow \bar{y}_r$, para $\bar{u} \in I_v$, es estrictamente creciente (*i.e.*, sin multiplicidades de entrada) (Hipótesis 5).

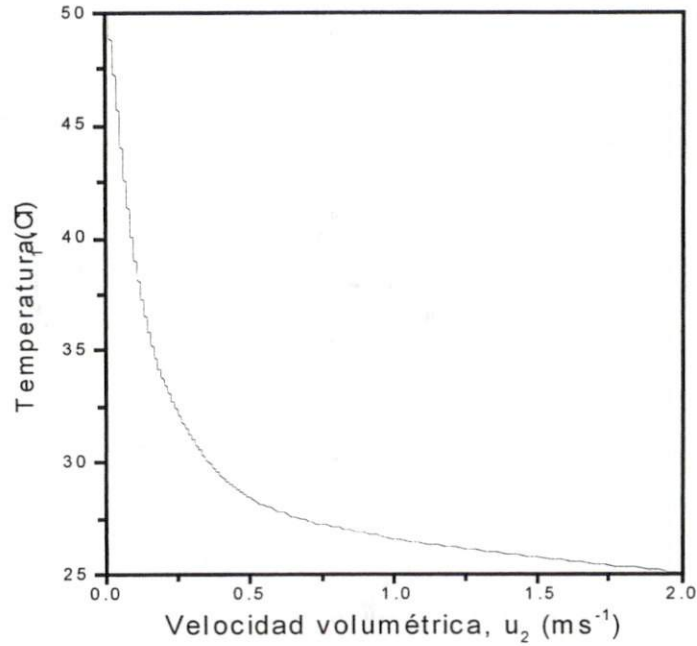


Figura 10-2: Mapa en estado estacionario entrada-salida para el intercambiador de calor $\bar{u} \rightarrow \bar{y}_r$.

La verificación de la Hipótesis 6 involucra cálculos más complicados. Primero, se introduce la variable de desviación $\tilde{c}(z, t) = c(z, T) - \bar{c}(z)$, donde $\bar{c}(z) = (\bar{T}_1(z), \bar{T}_2(z))^T$, de tal forma que la solución cero $\tilde{c}(z, t) = 0$ es una solución a las siguientes que describen la dinámica del intercambiador en términos de la coordenada de desviación, *i.e.*,

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} = -V \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} + D_c \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial z^2} + f(\tilde{c}) \quad (32)$$

con condiciones frontera homogéneas $\tilde{c}(0, t) = \tilde{c}(L, t) = 0$ [41]. En este caso, $V = (v_p, \tilde{u})^T$, $D_c = (D_1, D_2)^T$, y $f(\tilde{c}) = -A\tilde{c}$, donde

$$A = \begin{bmatrix} \gamma_1 & -\gamma_1 \\ -\gamma_2 & \gamma_2 \end{bmatrix}$$

Observar que $A \geq 0$ (*i.e.*, A es una matriz semi-positiva definida), de modo que su eigenvalor mínimo es $\lambda_{\min}(A) = 0$.

Si se considera la función de energía $E = \frac{1}{2} \|\tilde{c}\|^2$ (ver Notación), al usar la propiedad de pasividad del operador convectivo $V \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z}$ y el hecho que $\lambda_{\min}(A) = 0$, se puede demostrar que la

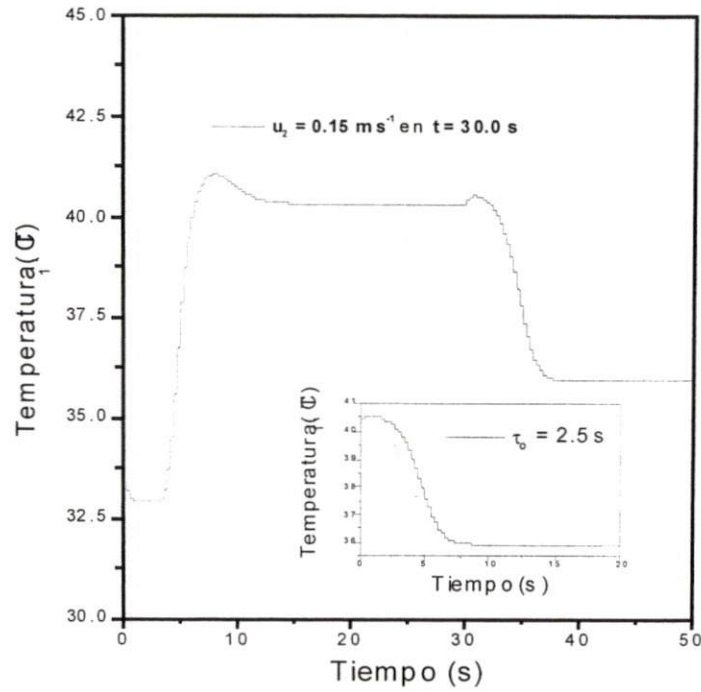


Figura 10-3: Respuesta escalón de la temperatura de salida $y_r(t) = T_1(L, t)$.

derivada en tiempo de $E(t)$ (Apéndice A) a lo largo de las trayectorias de (32) se puede acotar como (ver Capítulo 2 en [26] y Apéndice B)

$$\frac{dE}{dt} \leq -2D_{c\min}\pi^2 E$$

donde $D_{c\min} = \min\{D_1, D_2\}$. Esto muestra que la solución cero $\tilde{c}(z, t) = 0$ tiende a cero exponencialmente. Por lo tanto, la solución en estado estacionario actual $(\bar{T}_1(z), \bar{T}_2(z))^T$, es GUES.

La Figura 10.3 ilustra este hecho al mostrar la respuesta en escalón de la temperatura de salida $y_r(t) = T_1(L, t)$. Se puede ver en la misma figura que la dinámica $y_r(t)$ se puede aproximar como $y_r(t) \approx \exp(-t/\tau_o)$, donde $\tau_o = 2.5$ s es una constante de tiempo en lazo abierto. ■

Para ilustrar los resultados en la Proposición 1, la Figura 10.4 muestra el comportamiento de la temperatura de salida regulada $y_r(t) = T_1(L, t)$ para $y^* = 45$ C y tres valores diferentes de la ganancia proporcional $K_{P,r}$. Se observa que el intercambiador de calor controlado experimenta un comportamiento inestable conforme la ganancia $|K_{P,r}|$ toma valores más grandes. El valor $|K_{P,r}^{\max}| \approx -0.02$ $m s^{-1} C^{-1}$ se obtuvo a través de simulaciones numéricas. En principio, se pueden usar medidas secundarias de temperatura y_a , para añadir amortiguamiento

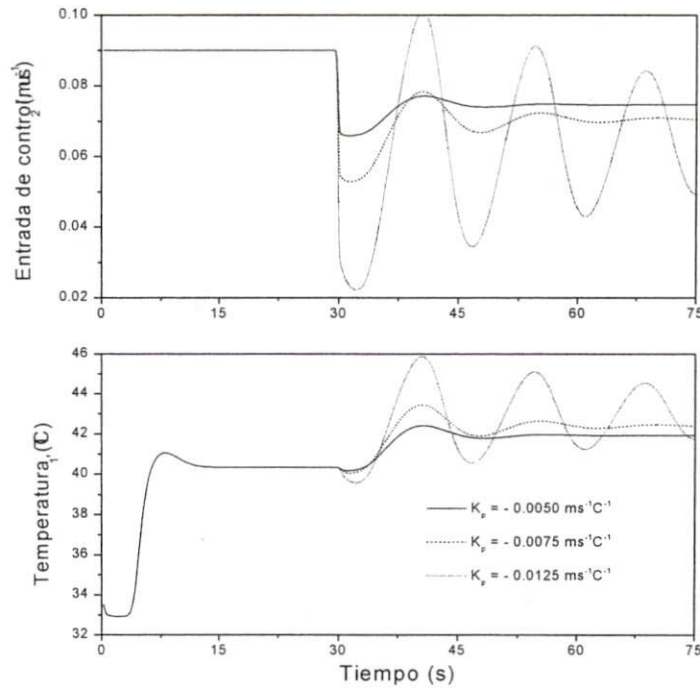


Figura 10-4: Comportamiento de la temperatura de salida regulada $y_r(t) = T_1(L, t)$ para $y^* = 45$ C y tres valores diferentes de la ganancia proporcional $K_{P,r}$.

en el lazo de control retroalimentado. Considere el caso con el retroalimentado proporcional $K_{P,a}(\bar{y}_a - y_a(t)) = K_{P,a}(70.75 - T_1(L/2, t))$. Esto es, la temperatura del fluido del proceso en la posición intermedia $z = L/2$ se usa como una medida secundaria para retroalimentar. La Figura 10.5 presenta el comportamiento de la temperatura de la salida regulada $y_r(t) = T_1(L, t)$ para la misma referencia ($y^* = 45$ C) y tres valores diferentes de la ganancia proporcional $K_{P,a}$. Se observa que el comportamiento es más amortiguado que en el caso anterior y la desviación a la referencia es menor, con $|K_{P,r}| = -0.005 \text{ ms}^{-1}\text{C}^{-1}$. Por supuesto, debido a que las temperaturas del proceso y del fluido del servicio se pueden medir fácilmente, las acciones retroalimentadas múltiples se pueden incluir en el lazo de control para obtener una respuesta más rápida con propiedades aumentadas de robustez. Finalmente, la Figura 10.6 presenta el mapa en estado estacionario entrada-salida $\bar{w}_I \rightarrow \bar{y}_r(t) = \bar{T}_1(L, t)$ con $K_{P,a} = -0.005 \text{ ms}^{-1}\text{C}^{-1}$ y $K_{P,r} = -0.01 \text{ ms}^{-1}\text{C}^{-1}$, lo cual muestra que la propiedad de monótonicidad se preserva para valores moderados de $|K_P|$. ■

- *Control con un lazo.* Varias simulaciones se realizaron para ilustrar la estabilidad y desempeño del sistema controlado cuando solamente la salida regulada $y_r(t)$ se retroalimenta.

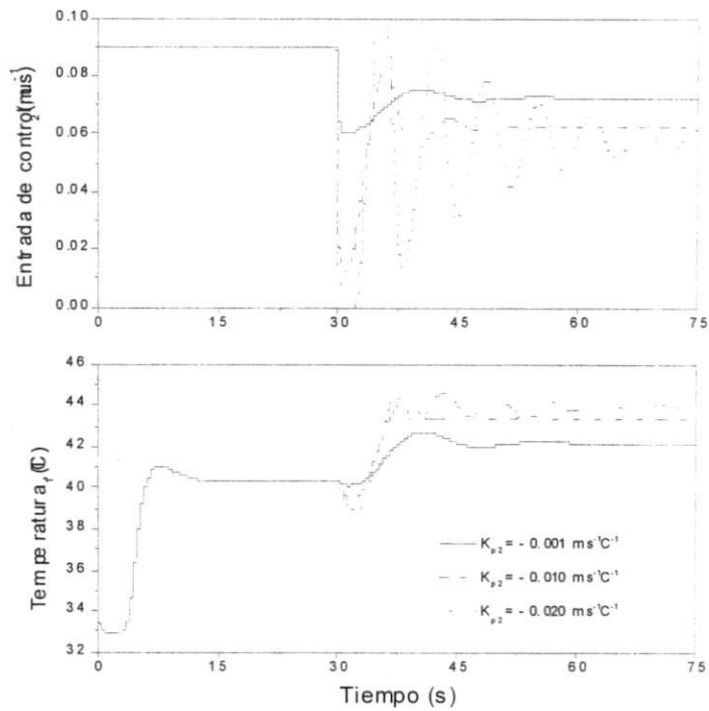


Figura 10-5: Comportamiento de la temperatura de salida regulada $y_r(t) = T_1(L, t)$ para $K_{P,r} = -0.005 \text{ ms}^{-1}\text{C}^{-1}$ con retroalimentación de salida secundaria adicional.

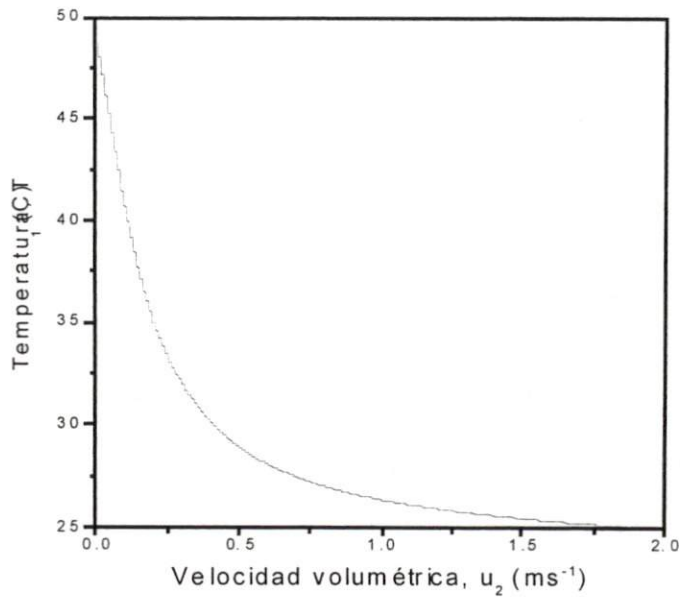


Figura 10-6: Mapa en estado estacionario entrada-salida $\bar{w}_I \rightarrow \bar{y}_r(t) = \bar{T}_1(L, t)$ con $K_{P,a} = -0.01 \text{ ms}^{-1}\text{C}^{-1}$ y $K_{P,r} = -0.005 \text{ ms}^{-1}\text{C}^{-1}$.

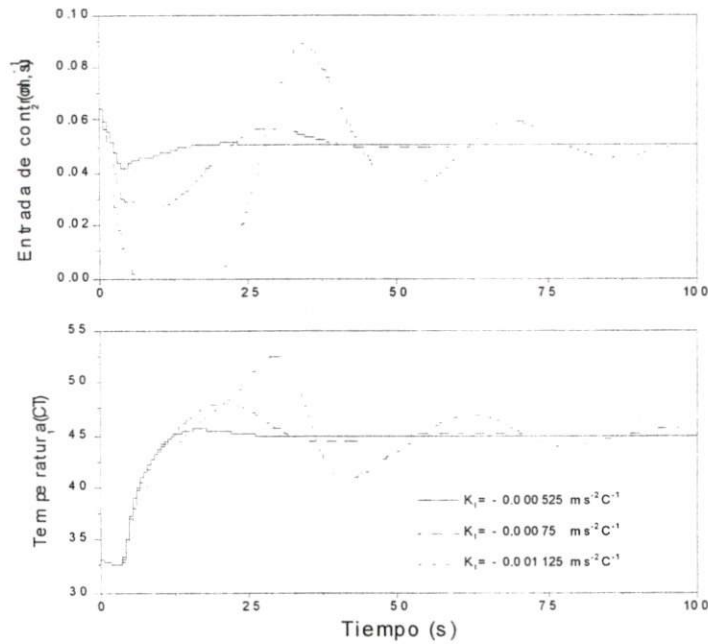


Figura 10-7: Temperatura regulada $y_r(t)$ y la velocidad de flujo $v_2(t)$ para $K_{P,r} = -0.002 \text{ ms}^{-1} \text{ C}^{-1}$ y tres valores diferentes de la ganancia integral $K_{I,r}$ ($\text{ms}^{-2} \text{ C}^{-1}$).

La Figura 10.7 muestra la temperatura regulada $y_r(t)$ y la velocidad de flujo $v_2(t)$ para $K_{P,r} = -0.002 \text{ ms}^{-1} \text{ C}^{-1}$ y tres valores diferentes de la ganancia integral $K_{I,r}$ ($\text{ms}^{-2} \text{ C}^{-1}$). Observar que, conforme $K_{I,r}$ toma valores más grandes, se obtiene una convergencia más rápida. Sin embargo, para valores excesivos de la ganancia integral, se presenta un comportamiento oscilatorio. De esta forma, existe una limitación en la velocidad de convergencia máxima que se puede obtener del lazo de control cuando se usa solamente la temperatura regulada $T_1(L, t)$ para retroalimentación. Para ilustrar el desempeño del controlador bajo perturbaciones externas, la Figura 10.8 muestra el comportamiento a lazo cerrado bajo una perturbación de +15 % en la temperatura de alimentación $T_{1,in}$ del primer fluido y un cambio de punto de referencia de $y^* = 45 \text{ C}$ a $y^* = 35 \text{ C}$, para $K_{I,r} = -5.625 \times 10^{-4} \text{ ms}^{-2} \text{ C}^{-1}$. A pesar de que el controlador en frontera PI es capaz de rechazar las perturbaciones sin un esfuerzo de control excesivo, el desempeño es muy pobre para aceptarse desde una perspectiva industrial práctica.

- *Control multi-lazo.* En principio, el retroalimentado de medidas de temperaturas múltiples puede acelerar la respuesta del lazo de control. Considere las ganancias del lazo de regu-

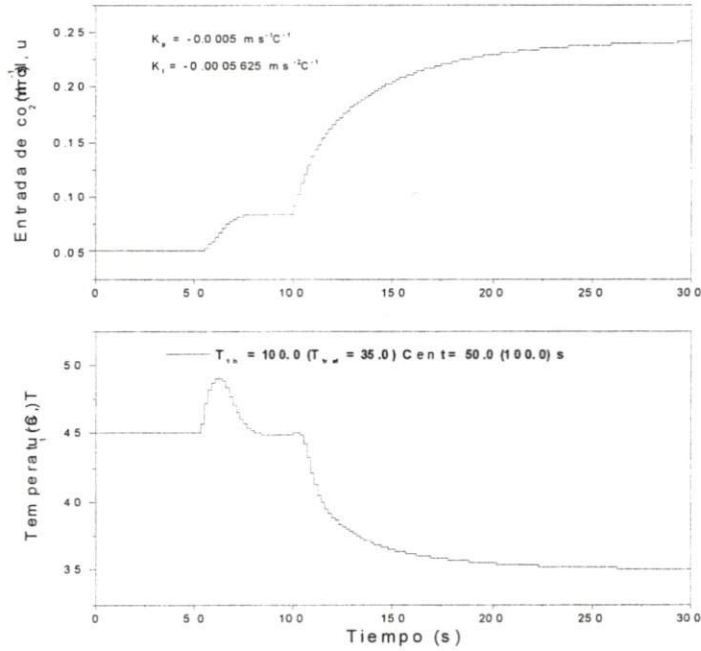


Figura 10-8: Comportamiento a lazo cerrado bajo una perturbación en la temperatura de alimentación $T_{1,in}$ del primer fluido y un cambio en escalón del punto de referencia ($y^* = 35 \text{ C}$).

lación $K_{P,r} = -0.001 \text{ m s}^{-1} \text{ C}^{-1}$, $K_{I,r} = -4.5 \times 10^{-4} \text{ m s}^{-2} \text{ C}$. Estas ganancias conducen a comportamiento inestable cuando la configuración es de un lazo sencillo (ver Figura 10.7). La Figura 10.9 muestra la temperatura regulada $y_r(t)$ y la velocidad de flujo $v_2(t)$ cuando se retroalimentan hasta 3 temperaturas diferentes de fluido de proceso. Las mediciones de temperatura se localizan en $z_1 = 3L/4$, $z_2 = L/2$ y $z_3 = L/4$, y los valores de ganancias correspondientes se proporcionan en la misma figura. Observar que se obtiene una velocidad de convergencia más rápida conforme se retroalimentan las tres medidas adicionales. Desde una perspectiva del esquema de control en cascada [31], tal mejora en el desempeño se obtiene debido a que las mediciones secundarias que se localizan en las posiciones z_i antes de la posición regulada $z = L$ reducen el tiempo de respuesta del control a los efectos de las perturbaciones sobre la salida regulada, de forma que el controlador reduce los efectos de las perturbaciones vía la acción retroalimentada $K_{P,a}(\bar{y}_a - y_a)$.

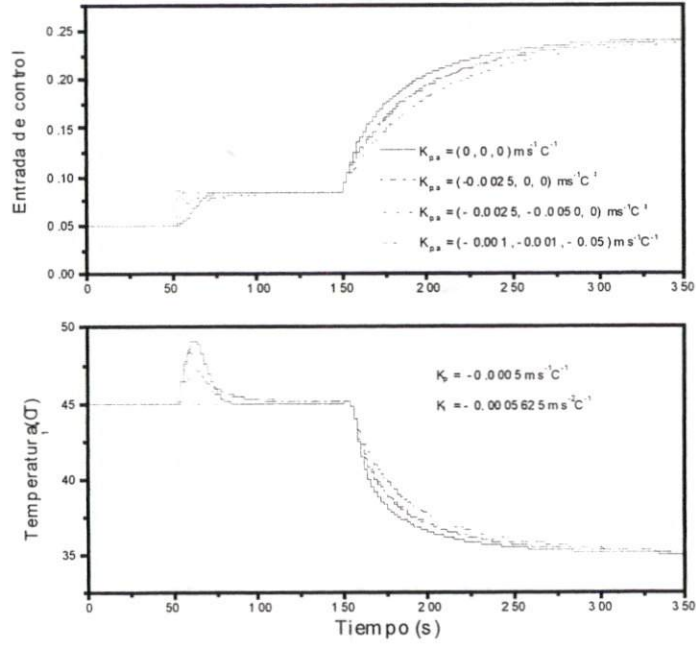


Figura 10-9: Temperatura regulada $y_r(t)$ y la velocidad de flujo $v_2(t)$ cuando 1, 2 y 3 temperaturas diferentes del fluido del proceso se retroalimentan.

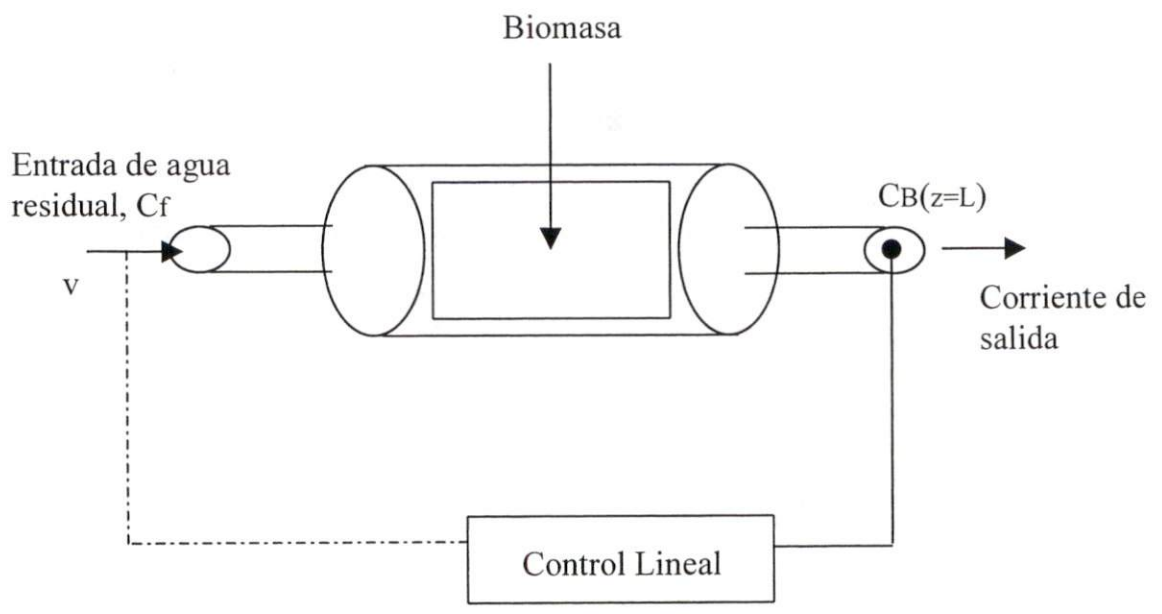


Figura 10-10: Diagrama esquemático del reactor bio-químico

10.2 Reactor bio-químico

Un proceso de digestión anaeróbico para tratamiento de aguas residuales se usa para ilustrar que la ausencia de la verificación de diferenciabilidad no tiene una consecuencia real en el diseño de control. La digestión anaeróbica se lleva a cabo en un bio-reactor tipo fluidizado donde la biomasa (consorcio de bacterias) se adhiere a un soporte plástico. Después de un periodo de adaptación donde la biomasa alcanza una concentración y estructura estable, el agua residual se alimenta a un bio-reactor donde los contaminantes se convierten en gas metano y bi-óxido de carbón [42]. Además de la contribución del término convectivo, el uso de ecuaciones gobernantes de transporte promediadas para la concentración del contaminante da lugar al término de difusión-dispersión. El modelo del proceso se puede describir como sigue:

$$\frac{\partial c(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} + D_c \frac{\partial^2 c(z, t)}{\partial z^2} + f(c(z, t)) \quad (33)$$

donde $c(z, t) \in \mathcal{H}(I_z, \mathbb{R}^n)$, con $I_z = [0, L]$, representa la concentración de contaminante en el agua residual, $f(c)$ es la velocidad de la bio-reacción a la cual los contaminantes se convierten en bio-gas, y D_c es el parámetro de dispersión. Debido a las restricciones físicas, $c(z, t)$ no puede ser negativo. Si c_f es la concentración de contaminante en el flujo de alimentación, las condiciones frontera para este proceso se pueden formular como sigue:

$$\begin{aligned} c(0, t) &= c_f \\ \frac{\partial c(L, t)}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \quad (34)$$

La función de velocidad de bio-reacción $f(c)$ se modela comúnmente como una función de Monod no lineal

$$f(c) = -\frac{\mu_{\max} c}{K_s + c} \quad (35)$$

donde μ_{\max} y K_s son constantes positivas. Para concentraciones bajas y moderadas, la expresión de velocidad de bio-reacción se comporta en forma lineal $f(c) = -\mu c$, donde $\mu = \mu_{\max}/K_s$. El objetivo de control es mantener la concentración del contaminante en el efluente $y(t) = c(L, t)$ en un valor pre-establecido y^* por medio de manipulaciones de la velocidad de flujo de alimentación $v(t)$. La regulación eficiente de $y(t)$ es de gran importancia por restricciones de conservación

ambiental en aguas residuales industriales y municipales [43]. La Figura 10.10 presenta el diagrama esquemático del bio-reactor.

Por simplicidad en el análisis, se considera que $f(c) = -\mu c$. Esto es una consideración razonable en aguas residuales municipales, las cuales contienen concentraciones de contaminantes $c_f(t)$ bajas a moderadas.

- *Solución en estado estacionario.* La solución en estado estacionario $\bar{c}(z)$ esta dada como la solución del la ODE:

$$D_c \frac{d^2 \bar{c}(z)}{dz^2} - v \frac{d\bar{c}(z)}{dz} - \mu \bar{c} = 0 \quad (36)$$

y las condiciones frontera correspondientes

$$\begin{aligned} \bar{c}(0) &= c_f \\ \frac{d\bar{c}(L)}{dz} &= 0 \end{aligned} \quad (37)$$

Para una constante dada $\bar{v} \geq 0$, las Ecs. (36) y (37) definen un sistema lineal cuya solución única (Hipótesis 4) esta dada por

$$\bar{c}(z, \bar{v}) = \exp(\bar{v}z/2) [\alpha_1(\bar{v}) \exp(rz) - \alpha_2(\bar{v}) \exp(-rz)]$$

donde $r = \frac{1}{2} \sqrt{\bar{v}^2 + 4D_c\mu}$,

$$\alpha_1(\bar{v}) = - \frac{[(\bar{v}/2) - r] \exp(-rL)}{[(\bar{v}/2) + r] \exp(rL) - [(\bar{v}/2) - r] \exp(-rL)} c_f$$

y $\alpha_2(\bar{v}) = c_f - \alpha_1(\bar{v})$. Después de manipulaciones algebraicas, se puede mostrar que $d\bar{c}(L, \bar{v})/d\bar{v} > 0$ para toda $0 < \bar{v} < \infty$. Esto es, la salida en estado estacionario $\bar{y} = \bar{c}(L, \bar{v})$ es una función estrictamente creciente de la velocidad en estado estacionario \bar{v} (Hipótesis 5). Físicamente, esta condición establece que a velocidades de alimentación mayores, el tiempo de residencia de los contaminantes es menor, lo cual conduce a una degradación de contaminantes más baja.

- *Estabilidad de la solución en estado estacionario.* Para estudiar la estabilidad de la solución en estado estacionario $\bar{c}(z, \bar{v})$, se introduce la variable de desviación $\tilde{c}(z, t) = c(z, t) - \bar{c}(z, \bar{v})$.

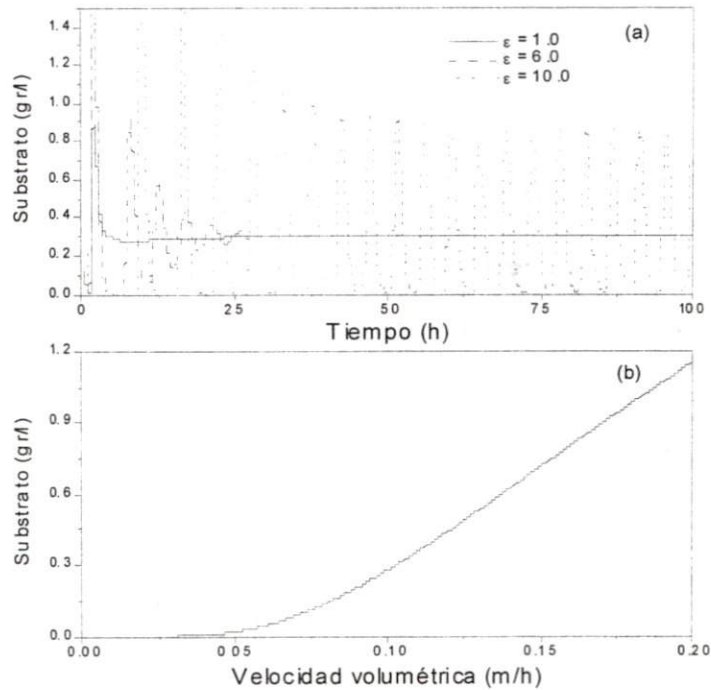


Figura 10-11: (a) Comportamiento del sistema controlado para diferentes valores de ϵ . (b) Mapa en estado estacionario entrada-salida.

La estabilidad del sistema (33), (34) con $f(c) = \mu c$ alrededor de la solución en estado estacionario $\bar{c}(z, \bar{v})$ se puede establecer al investigar la estabilidad de la solución cero del sistema [26]

$$\frac{\partial \tilde{c}(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial \tilde{c}(z, t)}{\partial z} + D_c \frac{\partial^2 \tilde{c}(z, t)}{\partial z^2} - \mu \tilde{c}$$

con condiciones frontera

$$\tilde{c}(0, t) = \tilde{c}(L, t) = 0$$

Al usar métodos de energía (Apéndice A), se puede verificar que $\frac{dE}{dt} \leq -(\pi^2 D_c + \mu)E$, donde la energía del proceso es $E = \frac{1}{2} \|\tilde{c}\|^2$. Consecuentemente, la solución en estado estacionario $\bar{c}(z)$ es exponencial globalmente estable (Hipótesis 6). Estos resultados implican que la concentración del efluente $y(t) = c(L, t)$ se puede regular con control lineal equipado con una acción integral.

- *Control en frontera PI.* Considere un control PI con $K_P = 0.1 \text{ m l gr}^{-1} \text{ h}^{-1}$, $K_I = \epsilon \tilde{K}_I$ con $\tilde{K}_I = 0.24 \text{ m l gr}^{-1} \text{ h}^{-2}$, y $t_d = 0.3 \text{ h}$. Se debe observar que el controlador hace uso

solamente de la señal medida $c(L, t)$, tal que la verificación de diferenciabilidad de la solución $c(z, t)$ no se requiere para su implementación. La Figura 10.11 (a) muestra la respuesta de la concentración del efluente controlada $c(L, t)$ para $y^* = 0.3 \text{ g l}^{-1}$ y tres valores diferentes de ε , y la Figura 10.11 (b) muestra el mapa en estado estacionario $\bar{v} \rightarrow \bar{y}$, la cual es una curva estrictamente creciente como se predice. Los parámetros del proceso son $c_f = 5.0 \text{ g l}^{-1}$, $v_{\min} = 0.0$, $v_{\max} = 0.8 \text{ m h}^{-1}$, $L = 1 \text{ m}$, $\mu = 3.0 \text{ h}^{-1}$, y $D_c = 0.1 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Para valores pequeños de ε , la concentración del efluente converge a la composición del efluente pre-establecida $y^* = 0.3 \text{ g l}^{-1}$. Sin embargo, para $\varepsilon > \varepsilon_{\max}$ con $\varepsilon_{\max} \approx 8.56$ el proceso controlado presenta un comportamiento inestable.

10.3 Reactor químico de flujo tapón

Un reactor químico de flujo tapón que se describe con un *modelo hiperbólico* (i.e., $D_c = 0$), reportado previamente por Gundepudi y Friedly [5], se usa como un segundo caso de estudio. Reacciones consecutivas $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$ ocurren bajo condiciones no-isotérmicas en el reactor rodeado por una chaqueta de enfriamiento. Una corriente de solución que consiste del reactante A puro a una concentración $\zeta_{A,in}$ y temperatura T_{in} entra al reactor en $z = 0$. La chaqueta de enfriamiento se mantiene a una temperatura constante T_w . Bajo las consideraciones estándar de modelamiento [34], las ecuaciones del modelo que representan los balances de material y energía en el reactor con la condición frontera en $z = 0$ corresponden a las PDE de la forma considerada en las Ecs. (1)-(5) con $c = (\zeta_A, \zeta_B, T)^T$, $c_{in} = (\zeta_{A,in}, 0, T_{in})^T$,

$$f(c) = \begin{bmatrix} -k_1 \zeta_A^2 \\ k_1 \zeta_A^2 - k_2 \zeta_B \\ (-\Delta H_1 / \rho c_p) k_1 \zeta_A^2 + (-\Delta H_2 / \rho c_p) k_2 \zeta_B + (U_w / \rho c_p) (T_w - T) \end{bmatrix}$$

$k_1 = k_{10} \exp(-E_1/RT)$ y $k_2 = k_{20} \exp(-E_2/RT)$. Aquí, ζ_A y ζ_B representan las concentraciones de A y B dentro del reactor, respectivamente, y T representa la temperatura del reactor. Los valores de los parámetros del proceso se muestran en la Tabla 10.1 y un diagrama esquemático del proceso se presenta en la Figura 10.12.

El objetivo de control es regular la concentración del producto deseado B en la corriente de

Tabla 10.1: Parámetros del reactor químico de flujo tapón

$\zeta_{A,in}$	1 kmolm^{-3}
$\zeta_{B,in}$	0 kmolm^{-3}
$T_{,in}$	298 K
T_w	500 K
k_{10}	$11 \text{ m}^3 \text{ s kmol}^{-1}$
k_{20}	$172.2 \text{ m}^3 \text{ s kmol}^{-1}$
E_1	$4180 \text{ kJ kmolK}^{-1}$
E_2	$34833 \text{ kJ kmolK}^{-1}$
ρ	1000 kg m^{-3}
C_p	$1 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
ΔH_1	$418000 \text{ kJ kmol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
ΔH_2	$418000 \text{ kJ kmol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
U_w	$2317 \text{ kJ m}^{-3} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1}$
L	10 m

salida $y_r(t) = \zeta_B(L, t)$. Existen cuatro alternativas para la variable manipulada; temperatura de entrada, concentración de entrada, temperatura en la pared y la velocidad de flujo. La temperatura en la pared influye en la temperatura en todo el reactor y es una buena elección cuando se trata de controlar la temperatura máxima del reactor o el rendimiento global a la salida del reactor. La temperatura de pared tiene poco efecto en la localización del punto caliente. Por otro lado, la temperatura de entrada y la velocidad de flujo pueden afectar en forma importante la localización del punto caliente. El uso de la concentración de entrada como variable de control tiene la ventaja de que el efecto de la acción de control es más rápida, pero tiene la desventaja que su influencia sobre la velocidad de reacción no es tan fuerte como la temperatura¹. En este caso se considera a la velocidad de flujo $v(t)$ como la variable manipulada. Se considera que las mediciones de composición se obtienen con un tiempo de retardo $t_d = 60 \text{ s}$, y que las medidas de temperatura se obtienen sin retardo. Por otro lado, la concentración $y_r(t) = \zeta_B(L, t)$ se toma como la medida principal, y las temperaturas intermedias en varias posiciones axiales diferentes se toman como medidas secundarias.

- *Mapa en estado estacionario entrada-salida.* La Figura 10.13 muestra la variación de la salida y_r en estado estacionario con la velocidad de flujo v . Debido a los efectos competitivos de las dos reacciones consecutivas [34], existen dos valores en estado estacionario de la

¹Comunicación personal, Felipe López Isunza (2001).

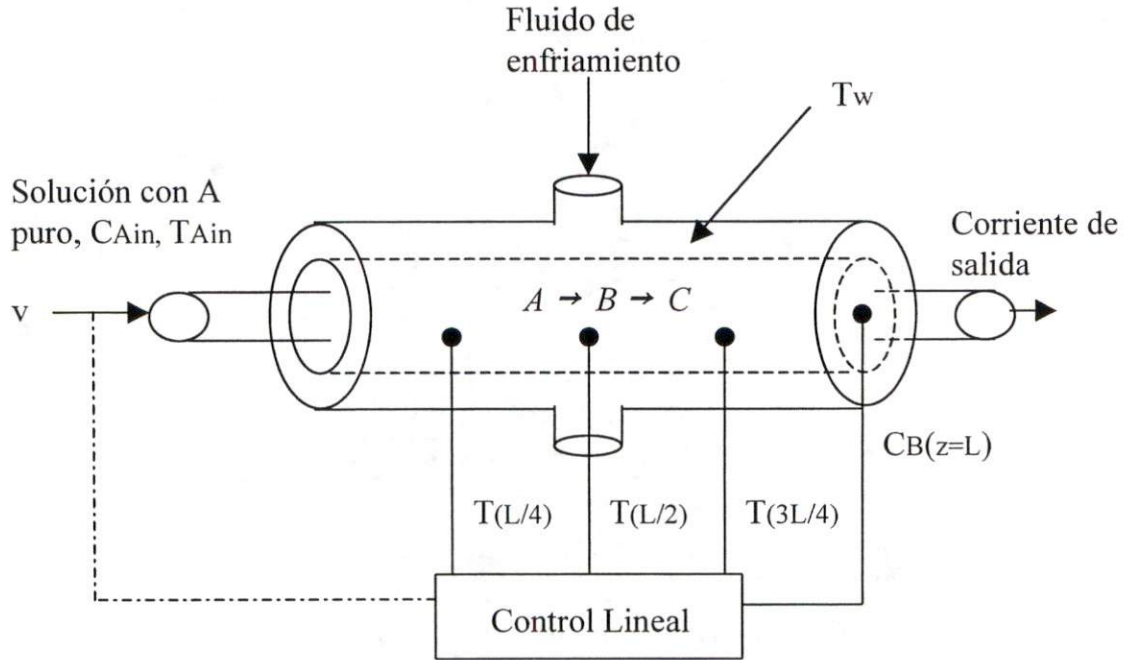


Figura 10-12: Diagrama esquemático del reactor químico exotérmico.

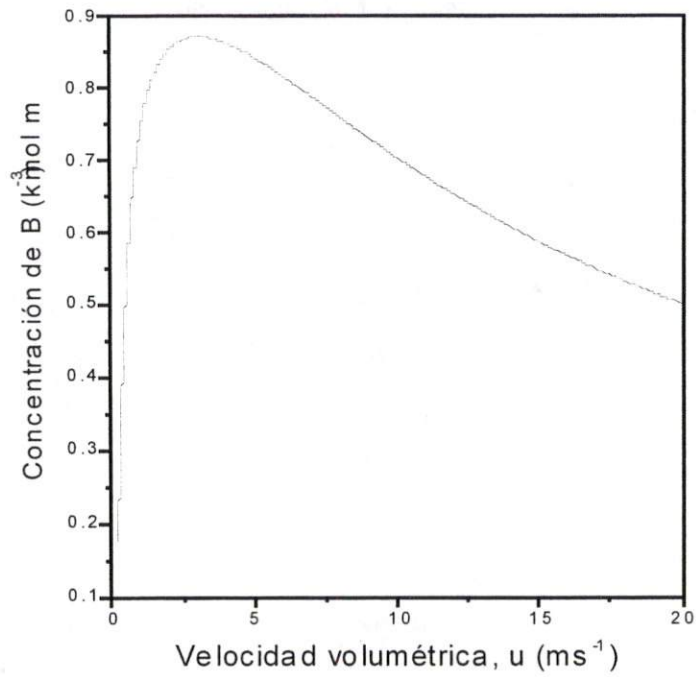


Figura 10-13: Mapa en estado estacionario entrada-salida para el reactor reactor químico exotérmico $\bar{u} \rightarrow \bar{y}_r$.

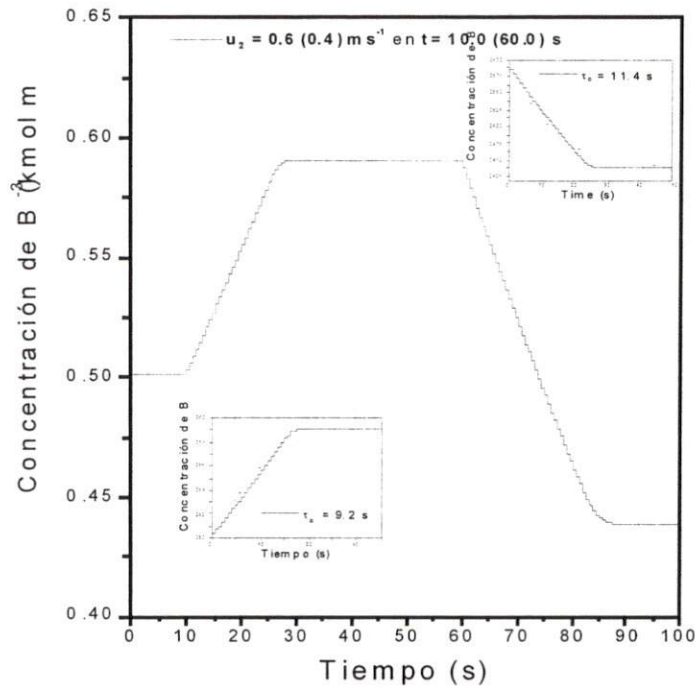


Figura 10-14: Respuesta en escalón de la concentración de salida de B $y_r(t) = \zeta_B(L, t)$.

velocidad de flujo que corresponden a un valor dado de $\bar{y}_r = \bar{\zeta}_B(L)$. Esto significa que la Hipótesis 5 no se satisface en el rango de velocidad de flujo completo. Sin embargo, si el rango se restringe a $I_v = [0, 2.9] \text{ m s}^{-1}$, el mapa $\bar{v} \rightarrow \bar{y}_r$ es estrictamente creciente (*i.e.*, sin multiplicidades de entrada). De esta forma, las Hipótesis 4 y 5 se cumplen. Por otro lado, las simulaciones numéricas en la Figura 10.14 muestran que las dinámicas del reactor son estables exponencialmente alrededor de un punto de equilibrio único (Hipótesis 6). En virtud del Teorema 1, si la velocidad de flujo v se restringe a tomar valores en $I_v = [0, 2.9] \text{ m s}^{-1}$, un control en frontera lineal tipo PI es capaz de estabilizar la concentración de la corriente de salida $y_r(t) = \zeta_B(L, t)$ en un punto de referencia dado $y_r^* \in \text{imagen}(I_v)$.

- *Perfiles en estado estacionario.* La Figura 10.15 muestra el perfil en estado estacionario para la condición de operación $\bar{v} = 0.47 \text{ m s}^{-1}$. La concentración $\bar{\zeta}_B(z)$ alcanza un valor máximo ($\approx 0.86 \text{ kmol m}^{-3}$) aproximadamente en $z = 2 \text{ m}$. Por otro lado, el perfil de temperatura $\bar{T}(z)$ es estrictamente creciente, lo cual muestra la alta exotermicidad de la reacción química. *Control con un lazo.* La respuesta escalón que se muestra en la Figura 10.14 se uso para sintonizar un control PI con base a reglas IMC [37]. Debido al retardo inherente

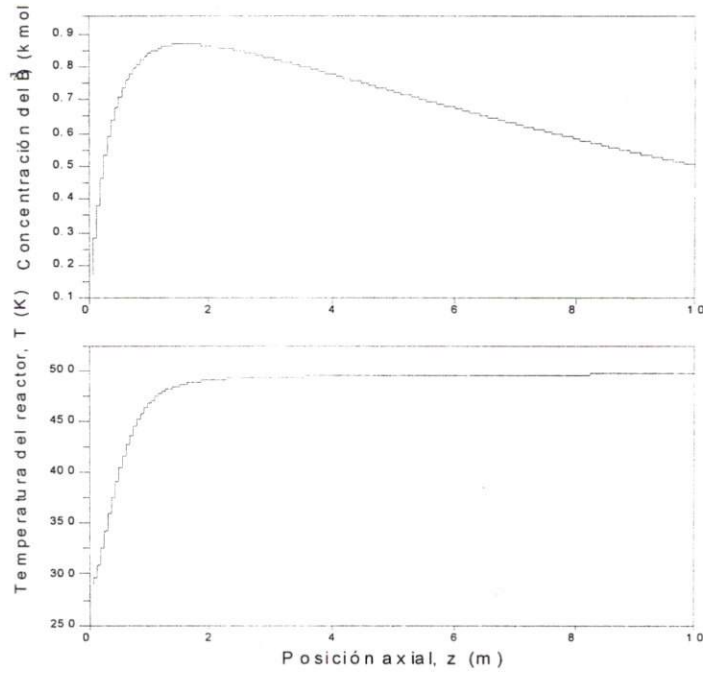


Figura 10-15: Perfiles de concentración (ζ_B) y temperatura (T) en estado estacionario.

de los DPS y al retardo de medición t_d , la respuesta es lenta, lo cual puede ser inaceptable desde un punto de vista práctico. La Figura 10.16 muestra la dinámica de la concentración regulada $y_r(t) = \zeta_B(L, t)$ para tres valores diferentes de la ganancia proporcional $K_{P,r}$, y cuando se presenta un cambio del punto de referencia de + 20% en la concentración de entrada $\zeta_{A,in}$. Se considera el valor de punto de referencia $y_r^* = 0.85 \text{ kmol m}^{-3}$ [5]. A pesar de que el control PI con un lazo sencillo es capaz de llevar a la concentración de la corriente de salida al punto de referencia $y_r^* = 0.85 \text{ kmol m}^{-3}$, se presenta un sobredisparo grande que se induce por la perturbación en la corriente de entrada.

- *Control multi-lazo.* Como en el caso del intercambiador de calor, se pueden usar medidas secundarias de temperatura $y_a(t)$ para acelerar la dinámica del sistema en presencia de perturbaciones externas. Para la misma ganancia integral de las simulaciones en la Figura 10.16 y $K_{P,r} = 0.05 \text{ m}^4 \text{ kmol}^{-1} \text{ s}^{-1}$, la Figura 10.17 presenta la respuesta de la concentración de la corriente de salida controlada $y_r(t) = \zeta_B(L, t)$ cuando se retroalimentan hasta 3 temperaturas intermedias en el lazo secundario. Estas mediciones se localizan en $z_1 = 3L/4$, $z_2 = L/2$ y $z_3 = L/4$, y el vector de ganancias correspondiente se proporciona en la misma

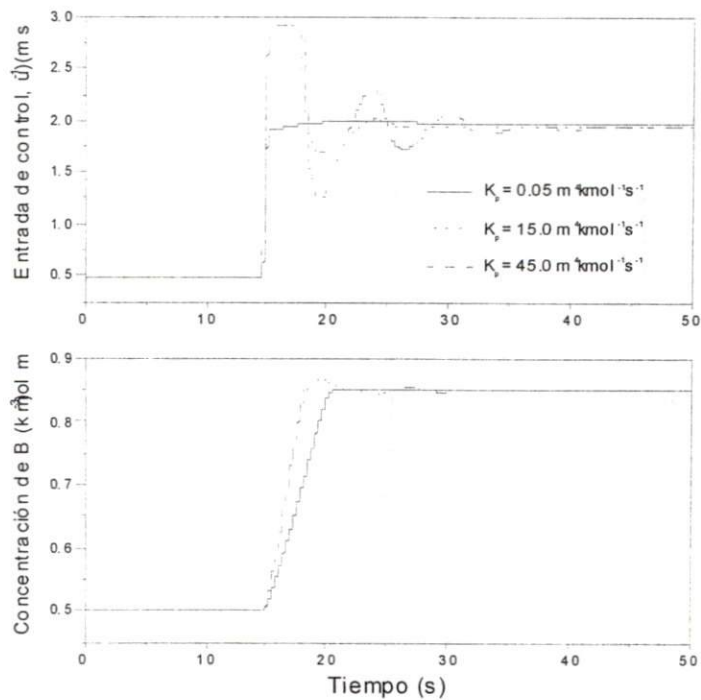


Figura 10-16: Comportamiento de la concentración de B de la salida regulada $y_r(t) = \zeta_B(L, t)$, para $y^* = 0.85 \text{ kmol m}^{-3}$, $K_{I,r} = 0.1 \text{ m}^4 \text{ kmol}^{-1} \text{ s}^{-2}$, y tres valores diferentes de la ganancia proporcional $K_{P,r}$ ($\text{m}^4 \text{ kmol}^{-1} \text{ s}^{-1}$).

figura. Como en las respuestas típicas del control en cascada, las mediciones secundarias aumentan las capacidades de rechazo a perturbaciones del lazo de control. Sin embargo, el retardo de medición es una fuerte limitación para reducir efectos adversos de la corriente de entrada. En esta tesis, para ilustrar la estructura del control, las mediciones de temperatura secundarias se realizan en posiciones axiales distribuidas equitativamente. Tal selección de posiciones pueden no ser óptimas para introducir la cantidad de amortiguamiento adecuada. No obstante, este problema de selección de estructura merece un estudio sistemático [35], y no entra en los objetivos de esta tesis.

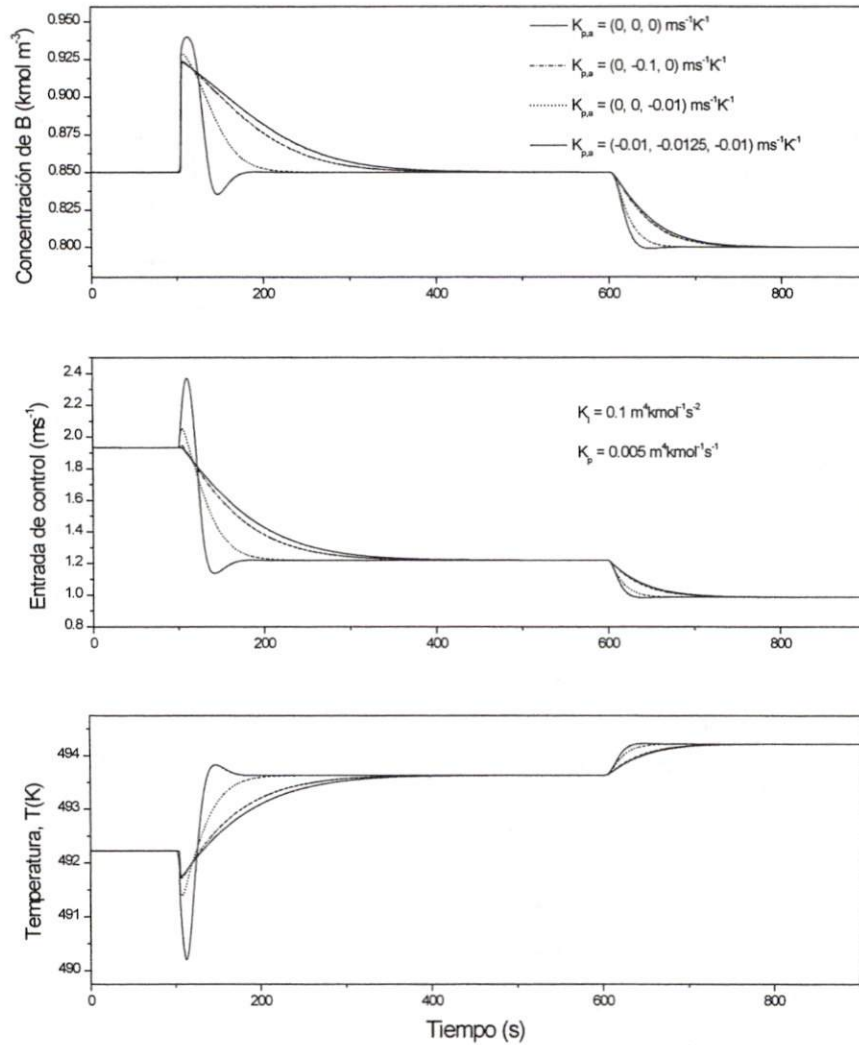


Figura 10-17: Comportamiento a lazo cerrado bajo una perturbación (+20%) en la concentración de alimentación de A, $\zeta_{A,in}$ y un cambio del punto de referencia ($y^* = 0.80 \text{ kmolm}^{-3}$) cuando se retroalimentan temperaturas intermedias como un lazo secundario.

Capítulo 11

Conclusiones

Varios aspectos de estabilidad del problema de control en frontera de una clase de DPS estables exponencialmente se han tratado al utilizar una propuesta de dimensión infinita asociada con las PDE que describen la dinámica de los procesos a controlar. Esta clase de DPS incluye varios procesos interesantes convección-difusión-reacción en ingeniería química, tales como reactores bioquímicos [1], extracción de vapor [2], transporte reactivo biológico cerca de pozos de inyección [3], separación cromatográfica [4] y reactores químicos [5].

Específicamente, se ha demostrado que la estabilidad exponencial se preserva cuando se aplica un retroalimentado de ganancia baja de la salida regulada y de un conjunto finito de estados medidos. Esta propiedad permite la introducción de un amortiguamiento adicional para aumentar el desempeño del sistema sin desventajas serias sobre la dinámica del lazo de control. Además, se demostró que una acción integral de ganancia baja proporciona seguimiento asintótico global y exponencial local de la salida regulada. De esta forma, la construcción del controlador resultante es similar a los reportados previamente en diseños de control en cascada, asegurando en este caso la estabilidad interna y la estabilidad global entrada-salida en la presencia de dinámicas de dimensión infinita. Esta construcción y características de funcionamiento robusto fueron: (i) respaldadas por una condición de convergencia robusta conjuntamente con la caracterización dinámica a lazo cerrado, y (ii) corroboradas por la implementación de diseños de control de lazo sencillo y lazo múltiple a un reactor químico, un reactor bio-químico y un intercambiador de calor. .

Algunos problemas importantes requieren estudios adicionales. Por ejemplo, hace falta un procedimiento sistemático de sintonizado para los lazos secundarios. Además, el número óptimo

y localización de medidas secundarias es un problema importante que se debe de tratar para sistematizar los diseños de control de dimensión finita. Metodológicamente hablando, esta parte de la tesis sugiere una forma de proceder en el empleo de técnicas de control avanzadas con orientación en estabilidad, para tratar o revisar problemas de control orientados a aplicaciones en el control de procesos químicos de parámetros distribuidos.

Bibliografía

- [1] Dochain, D., Babary, J.P., & Tali-Maamar, N. (1992). Modelling and adaptive control of nonlinear distributed parameter bioreactors via orthogonal collocation. *Automatica*, 55, 873-883.
- [2] Ng, Ch.-On, & Mei, Ch.C. (1996). Aggregate diffusion model applied to soil vapor extraction in unidirectional and radial flows. *Water Resources Research*, 32, 1289-1297.
- [3] Clement, T.P., Hooker, B.S., & Skeen, R.S. (1996). Numerical modeling of biologically reactive transport near nutrient injection well. *Journal of Environmental Engineering*, Septiembre.
- [4] Kaczmarski, K. (1996). Use of orthogonal collocation on finite elements with moving boundaries in the simulation of non-linear multicomponent chromatography, influence of fluid velocity variation on retention time in LC and HPLC. *Computers and Chemical Engineering*, 20, 49-64.
- [5] Gundepudi, P.K., & Friedly, J.C. (1998). Velocity control of hyperbolic partial differential equation systems with single characteristic variable. *Chemical Engineering Science*, 53, 4055-4072.
- [6] Ray, W.H. (1978). Some recent applications of distributed parameter systems theory- A survey. *Automatica*, 14, 281-287.
- [7] Byrnes, C.I., Gilliam, D.S., & He, J. (1994). Root locus and boundary feedback design for a class of distributed parameter systems. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 31, 1364-1427.
- [8] Christofides, P.D., & Daoutidis, P. (1996). Feedback control of hyperbolic PDE systems. *A.I.Ch.E. Journal*, 42, 3063-3086.

- [9] Byrnes, C.I., Gilliam, D.S., & Shubov, V.I. (1999). Boundary control, stabilization and zero-pole dynamics for a non-linear distributed parameter system. *International Journal of Robust and Nonlinear Control*, 9, 737-768.
- [10] Balas, M.J. (1982). Toward a more practical control theory for distributed parameter systems. *Control and Dynamic Systems*, S.T. Leondes, Ed. Academic Press, 18, 361-421.
- [11] Chen, C.C., & Chang, P.C. (1992). Accelerated disturbance damping of an unknown distributed system by nonlinear feedback. *A.I.Ch.E. Journal*, 38, 1461-1476.
- [12] Christofides, P.D., & Daoutidis, P. (1998). Robust control of hyperbolic PDE systems. *Chemical Engineering Science*, 53, 85-105.
- [13] Christofides, P.D. (1998). Robust control of parabolic PDE systems. *Chemical Engineering Science*, 53, 2949-2965.
- [14] Christofides, P.D. (2001). Control of nonlinear distributed process systems: Recent developments and challenges. *A.I.Ch.E. Journal*, 47, 514-518.
- [15] Chiu, T., & Christofides, P. (1999). Nonlinear control of particulate processes. *A.I.Ch.E. Journal*, 45, 1279-1290.
- [16] Kalani, A., & Christofides, P.D. (2000). Modeling and control of a titania aerosol reactor. *Aerosol Science & Technology*, 32, 369.
- [17] Alonso, A.A., & Ydstie, B.E. (2001). Stabilization of distributed systems using irreversible thermodynamics. *Automatica*, 37, 1739-1755.
- [18] Alonso, A.A., Banga, J.R., & Sanchez, I. (2000). Passive control design for distributed process systems: Theory and applications. *A.I.Ch.E. Journal*, 46, 1593-1606.
- [19] Olivei, A. (1974). Boundary modal control of the temperature of the melt for crystal-growing in crucibles. *International Journal of Control*, 20, 593-600.
- [20] Hanczyc, E.M., & Palazoglu, A. (1996). Use of symmetry groups in sliding mode control of nonlinear distributed parameter systems. *International Journal of Control*, 63, 1149-1166.

- [21] Olmstead, W.E., & Schmitendorf, W.E. (1997). Optimal control of the end-temperature in a semi-infinite rod. *Journal of Applied Mathematical Physics*, 28, 697-706.
- [22] Chakravarti, S., & Ray, W.H. (1999). Boundary identification and control of distributed parameter systems using singular functions. *Chemical Engineering Science*, 54, 1181-1204.
- [23] Lasiecka, I. (1995). Control of systems governed by partial differential equations: a historical perspective. *Proceedings of the 34th CDC*, New Orleans, L.A., 2792-2796.
- [24] Perlmutter, D.D. (1972). *Stability of Chemical Reactors*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J.
- [25] Jensen, K.F., & Ray, W.H. (1982). The bifurcation behavior of tubular reactors. *Chemical Engineering Science*, 37, 199-222.
- [26] Straughan B. (1992). *The Energy Method, Stability, and Nonlinear Convection*. New York, Springer-Verlag.
- [27] Hoppensteadt, F. (1974). Asymptotic stability of singular perturbation problems. II: Problems having matched asymptotic expansion solutions. *Journal of Differential Equations*, 15, 510-521.
- [28] Rhee, H.K., Aris, R., & Amundson, N.R. (1986). *First Order Partial Differential Equations: Vol. I & II*. Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall.
- [29] Shareefdeen, Z., & Baltzis, B.C. (1994). Biofiltration of toluene vapor under steady-state and transient conditions: Theory and experimental results. *Chemical Engineering Science*, 49, 4347-4360.
- [30] Temam, R. (1988). *Infinite-Dimensional Systems in Mechanics and Physics*. New York, Springer.
- [31] Luyben, W.L. (1973). Parallel cascade control. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 12, 463.
- [32] Tervo, J., & Nihtila, M. (2000). Exponential stability of a nonlinear distributed parameter system. *Journal for Analysis and its Applications*, 19, 77-93.
- [33] Winkin, J.J., Dochain, D., & Ligarius, Ph. (2000). Dynamical analysis of distributed parameter tubular reactors. *Automatica*, 36, 349-361.

- [34] Froment, G.F., & Bischoff, K.B. (1990). *Chemical Reactor Analysis and Design*. New York, J. Wiley & Sons.
- [35] Alvarez, J., Romagnoli, J.A., & Stephanopoulos, G. (1981). Variable measurement structures for the control of a tubular reactor. *Chemical Engineering Science*, 36, 1695-1712.
- [36] Yu, Ch-Ch, & Luyben, W.L. (1985). Conditional stability in cascade control design. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 25, 171.
- [37] Morari, M., & Zafiriou, E. (1989). *Robust Process Control*. New York, Prentice-Hall.
- [38] Wu, F.F., & Desoer, C.A. (1972). Global inverse function theorem. *IEEE Transactions on Circuit Theory*, March, 199-201.
- [39] Balas, M.J. (1986). Exponential stabilizing finite-dimensional controllers for linear distributed parameter systems: galerkin approximation of infinite dimensional controllers. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 117, 358-384.
- [40] Belanger, P.W., & Luyben, W.L. (1997). Design of low-frequency compensators for improvement of plantwide regulatory performance. *Industrial and Engineering Chemical Research*, 36, 5339-5347.
- [41] Smirnov, M.M. (1966). *Problems on the Equations of Mathematical Physics*. Groningen, The Netherlands, Noordhoff.
- [42] Castilla, P., Meraz, M., Monroy, O., & Noyola, A. (2000). Anaerobic treatment of low concentration waste water in an inverse fluidized bed reactor, *Water Science Technology*, 41, 245-251.
- [43] Tchobanoglous, G., & Burton, F. (1991). *Wastewater Engineering-Treatment, Disposal and Reuse*. NY, Metcalf & Eddy, Inc., 3rd. edn, McGraw-Hill Series in Water Resources and Environmental Engineering.

Capítulo 12

Conclusiones Generales y Perspectivas

En esta tesis se han estudiado las propiedades de estabilidad del control lineal en dos clases de reactores químicos continuos; CSTR y reactores tubulares (DPS). Para cada clase de reactor a lazo cerrado estudiado, se proporciona una prueba formal de la capacidad de estabilización global del control lineal. El calificativo global significa que la estabilización de la variable controlada se alcanza sin importar las condiciones iniciales del sistema (localizadas dentro del dominio físico de la existencia del sistema). El análisis de estabilidad proporciona un entendimiento sobre las posibilidades y limitaciones del retroalimentado lineal con acción integral para las dos clases de reactores químicos estudiados. Además, la propuesta de esta tesis proporciona un marco para estudiar los efectos del control integral en la presencia de no linealidades.

La incorporación de los siguientes puntos en el marco de análisis desarrollado en esta tesis permitirían extender el área de aplicabilidad de los resultados que se obtienen en esta tesis a procesos reales.

1. Control lineal PI saturado en el CSTR. El estudio de la estabilidad del control PI en CSTR se realizó bajo la consideración de que el control no se satura. La saturación del control induce una no linealidad adicional que se debe incluir en un análisis de estabilidad más completo. El problema fundamental del control lineal con saturación se puede asociar a la presencia de dinámicas complejas que se inducen por la saturación, lo cual puede conducir a un comportamiento inestable y/o caótico del sistema en lazo cerrado.

2. Control lineal PI del CSTR con análisis de incertidumbres. Con el fin de identificar criterios de estabilidad robusta en CSTR, que permitan asegurar la estabilidad de un CSTR real,

la incertidumbre del modelo matemático se debe considerar en el análisis de estabilidad. En CSTR las incertidumbres surgen debido a las fluctuaciones en las condiciones del flujo de entrada, mezclado imperfecto y el conocimiento pobre de los mecanismos de reacción.

3. Control lineal de DPS distribuido. El estudio de la estabilidad del control lineal en reactores tubulares con acciones de control distribuidas en el dominio espacial es un problema que requiere un análisis de estabilidad formal. Este caso es particularmente importante en algunos reactores químicos no isotérmicos donde el controlar la temperatura a la salida del reactor no necesariamente implica que la temperatura dentro el reactor se mantenga dentro de límites seguros. En varios reactores industriales, la existencia de fluctuaciones importantes de temperatura dentro del reactor pueden desactivar catalizadores o causar daño estructural al reactor. Debido a esto, el problema de control se puede plantear en el control adecuado de los estados dentro y fuera del reactor, lo cual conduce a un problema de control distribuido espacialmente.

4. Análisis del control discreto PI en reactores químicos continuos. Desde una perspectiva practica, en muchos procesos químicos, el control lineal se implementa en dispositivos digitales, los cuales hacen uso de la versión discreta del control lineal PI. El equivalente discreto del controlador continuo PI que emplea un esquema de integración rectangular es:

$$m_n = K_c \left[e_n + \frac{\tau}{\tau_I} \sum_{k=0}^n e_k \right]$$

Los parámetros K_c y τ_I son la ganancia del controlador y la constante de tiempo integral. La elección del tiempo de muestreo τ es un aspecto importante en el diseño de los algoritmos de control discreto.

Apéndice A

Material Complementario

A.1 Análisis lineal de estabilidad del CSTR

Linealización, función de transferencia, y localización de raíces del CSTR

El proceso de linealizar sistemas no lineales es importante, debido a que esto permite aplicar numerosos métodos de análisis lineal que proporcionan información acerca del comportamiento de sistemas no lineales. Un sistema no lineal

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

se puede reducir a un sistema lineal

$$\dot{\bar{x}}(t) = A(t)\bar{x}(t) + B(t)\bar{u}(t)$$

donde $A(t)$ y $B(t)$ son las matrices Jacobianas que se calculan a lo largo de las dos funciones en el tiempo $x_0(t)$ y $u_0(t)$.

Linealización del CSTR Para el CSTR se tiene

$$\begin{aligned}f_1 &= \dot{c} = \theta(c_{in} - c) + Ek_0c \exp(-\mathcal{E}_a/R_gT) \\ f_2 &= \dot{T} = \theta(T_{in} - T) + \Delta Hk_0c \exp(-\mathcal{E}_a/R_gT) + \gamma(u - T)\end{aligned}$$

y las matrices Jacobianas son

$$\begin{bmatrix} \partial f_1/\partial c & \partial f_1/\partial T \\ \partial f_2/\partial c & \partial f_2/\partial T \end{bmatrix}_{0.5,400} = \begin{bmatrix} -2 & -0.03125 \\ 200 & 4.25 \end{bmatrix}_{0.5,400}$$

$$\begin{bmatrix} \partial f_1/u \\ \partial f_2/u \end{bmatrix}_{0.5,400} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_{0.5,400}$$

el sistema linealizado es

$$\dot{x} = \begin{bmatrix} -2 & -0.03125 \\ 200 & 4.25 \end{bmatrix}_{0.5,400} x + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} u$$

Función de transferencia del CSTR La función de transferencia del sistema en lazo abierto es

$$\frac{\Delta T}{\Delta u} = \frac{s + 2}{s^2 - 2.25s - 2.25}$$

Las raíces del denominador de la función de transferencia se denominan los polos de la función de transferencia. Para el CSTR bajo control proporcional puro, el polinomio característico en lazo cerrado es

$$s^2 + (K_p - 2.25)s + (2K_p - 2.25) = 0.$$

Un sistema de control es estable si y solo si los polos en lazo cerrado se encuentran en el semiplano izquierdo del plano complejo. Un criterio simple, conocido como el criterio de estabilidad de Routh, permite determinar la cantidad de polos en lazo cerrado que se encuentran en el semiplano derecho del plano complejo. El criterio de estabilidad de Routh para el CSTR en lazo cerrado es

$$\begin{array}{ccc} s^2 & 1 & 2K_p - 2.25 \\ s^1 & K_p - 2.25 & 0 \\ s^0 & 2K_p - 2.25 & \end{array}$$

Para que el CSTR sea estable (*i.e.*, todas las raíces de la ecuación característica se encuentran en el semiplano izquierdo del plano complejo) todos los términos de la primer columna deben de ser

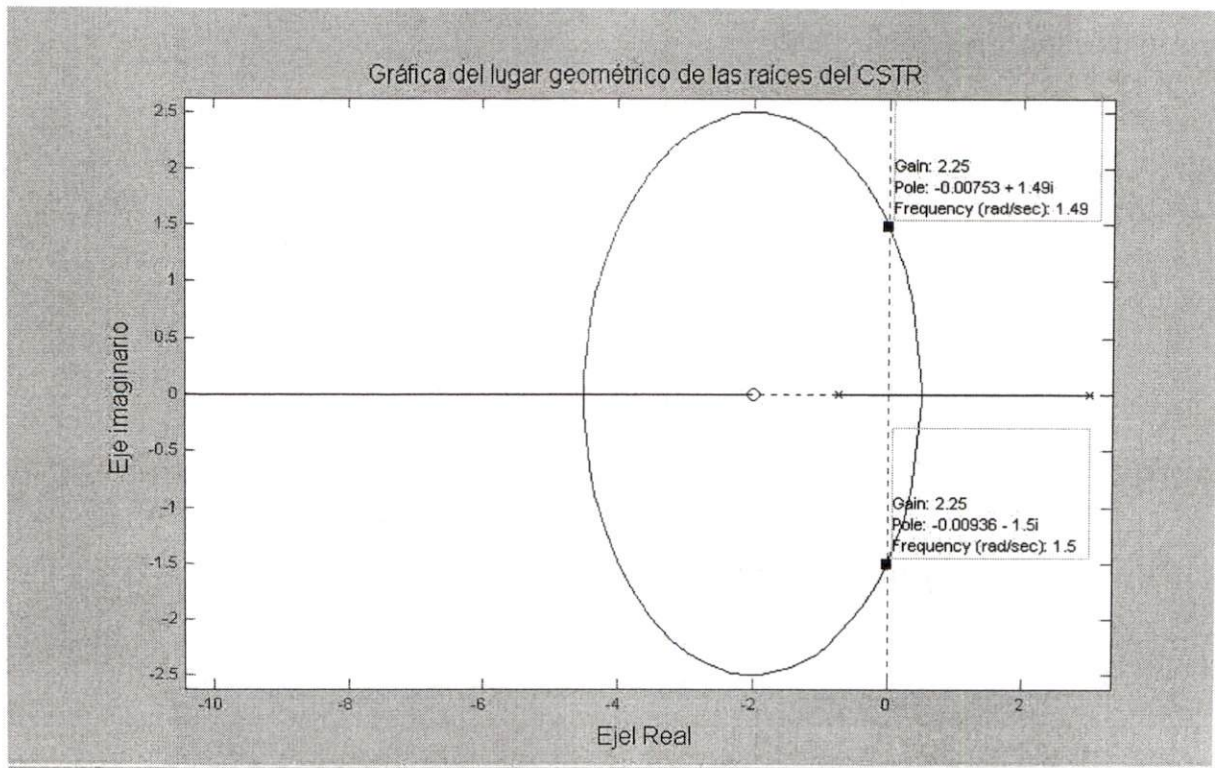


Figura A-1: Gráfica del lugar geométrico de las raíces del CSTR en lazo cerrado.

positivos. Por lo tanto

$$K_p > 2.25$$

Localización de raíces Uno de los métodos de diseño retroalimentado mas importantes del control automático clásico es la teoría de localización de raíces, que se basa en la observación que en el dominio en frecuencia los polos a lazo cerrado de un sistema varían desde los polos a lazo abierto a los ceros a lazo abierto conforme la ganancia se incrementa desde cero a infinito. La Figura A.1 muestra el diagrama de localización de raíces que se obtiene con la función de transferencia del CSTR en lazo cerrado.

A.2 Desigualdades en el método de energía de DPS

Intercambiador de calor

Al usar la variable de desviación $\tilde{c}(z, t) = c(z, T) - \bar{c}(z)$, la solución cero $\tilde{c}(z, t) = 0$ es una solución a las siguientes ecuaciones que describen la dinámica del intercambiador

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} &= -V \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} + D_c \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial z^2} + f(\tilde{c}) \\ \tilde{c}(0, t) &= \tilde{c}(L, t) = 0\end{aligned}\tag{A1}$$

En este caso, $V = (v_p, \tilde{u})^T$, $D_c = (D_1, D_2)^T$, $\bar{c}(z) = (\bar{T}_1(z), \bar{T}_2(z))^T$ y $f(\tilde{c}) = -A\tilde{c}$.

El método de energía (Apéndice B) se utiliza para investigar la estabilidad de la solución cero. Considere la función de energía $E = \frac{1}{2} \|\tilde{c}\|^2$, al multiplicar la Ec. (A1) por \tilde{c} e integrando sobre $(0, L)$ se obtiene:

$$\frac{dE}{dt} = \int_0^L \tilde{c} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} dz = -V \int_0^L \tilde{c} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} dz + D_c \int_0^L \tilde{c} \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial z^2} dz - A \int_0^L \tilde{c}^2 dz\tag{A2}$$

Al integrar por partes

$$\begin{aligned}-V \int_0^L \tilde{c} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} dz &= -V \frac{1}{2} [\tilde{c}^2(L) - \tilde{c}^2(0)] = 0 \\ D_c \int_0^L \tilde{c} \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial z^2} dz &= -D_c \left\| \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} \right\|^2 \\ A \int_0^L \tilde{c}^2 dz &= A \|\tilde{c}\|^2\end{aligned}$$

Por lo tanto la Ec. de energía sera

$$\frac{dE}{dt} = -D_c \left\| \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} \right\|^2 - A \|\tilde{c}\|^2\tag{A3}$$

al usar la desigualdad de Poincaré

$$\left\| \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} \right\|^2 \geq \pi^2 \|\tilde{c}\|^2$$

para \tilde{c} con $\tilde{c} = 0$ en $z = 0, L$. Al usar esta expresión en (A3) y con $E = \frac{1}{2} \|\tilde{c}\|^2$ conduce a

$$\frac{dE}{dt} \leq -2(\pi^2 D_c + A)E$$

utilizando el hecho que $\lambda_{\min}(A) = 0$, y tomando el valor mínimo de $D_{c\min} = \min\{D_1, D_2\} > 0$ la derivada se puede acotar como

$$\frac{dE}{dt} \leq -2\pi^2 D_{c\min} E$$

Entonces, $\|\tilde{c}\| \rightarrow 0$ al menos exponencialmente y la solución cero del sistema (x) es estable.

Reactor Bio-químico

Considere el sistema

$$\frac{\partial \tilde{c}(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial \tilde{c}(z, t)}{\partial z} + D_c \frac{\partial^2 \tilde{c}(z, t)}{\partial z^2} - \mu \tilde{c} \quad (\text{A4})$$

con condiciones frontera

$$\tilde{c}(0, t) = \tilde{c}(L, t) = 0$$

Al usar la variable de desviación $\tilde{c}(z, t) = c(z, T) - \bar{c}(z)$, la solución cero $\tilde{c}(z, t) = 0$ es una solución al sistema (A4).

Considere la función de energía $E = \frac{1}{2} \|\tilde{c}\|^2$, al multiplicar la Ec. (A4) por \tilde{c} e intergrando sobre $(0, L)$ se obtiene:

$$\frac{dE}{dt} = \int_0^L \tilde{c} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} dz = -v \int_0^L \tilde{c} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} dz + D_c \int_0^L \tilde{c} \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial z^2} dz - \mu \int_0^L \tilde{c}^2 dz \quad (\text{A5})$$

Integrando por partes

$$\begin{aligned} -v \int_0^L \tilde{c} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} dz &= -v \frac{1}{2} [\tilde{c}^2(L) - \tilde{c}^2(0)] = 0 \\ D_c \int_0^L \tilde{c} \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial z^2} dz &= -D_c \left\| \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} \right\|^2 \\ \mu \int_0^L \tilde{c}^2 dz &= \mu \|\tilde{c}\|^2 \end{aligned}$$

Por lo tanto la Ecuación de energía (A5) se reduce a

$$\frac{dE}{dt} = -D_c \left\| \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} \right\|^2 - \mu \|\tilde{c}\|^2 \quad (\text{A6})$$

al usar la desigualdad de Poincaré

$$\left\| \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} \right\|^2 \geq \pi^2 \|\tilde{c}\|^2$$

para \tilde{c} con $\tilde{c} = 0$ en $z = 0, L$. Al usar esta expresión en (A6) y con $E = \frac{1}{2} \|\tilde{c}\|^2$ conduce a

$$\frac{dE}{dt} \leq -2(\pi^2 D_c + \mu)E$$

donde $D_c > 0$ y como $\mu = \mu_{\max}/K_s$ y μ_{\max} y K_s son constantes positiva, $\|\tilde{c}\| \rightarrow 0$ al menos exponencialmente y la solución cero del sistema (A4) es estable.

Apéndice B

Material Matemático Útil

El propósito de este apéndice es dar una breve guía de las técnicas y conceptos que se utilizan en el desarrollo de las pruebas que se presentan en esta tesis.

B.1 Estabilidad de sistemas dinámicos

Considere el sistema

$$\dot{x} = f(t, x), \quad x(t_0) = x_0 \tag{B1}$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$, $t \geq 0$.

El sistema definido por (B1) se dice que es autónomo, o invariante en tiempo, si f no depende de t , y no-autónomo, o variante en tiempo, al contrario. Se dice que es lineal si $f(t, x) = A(t)x$ para alguna $A(\cdot) : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ y no lineal de lo contrario.

Sea B_h la bola cerrada de radio h centrada en 0 en \mathbb{R}^n . Las siguientes propiedades se dice que son ciertas:

- *localmente*, si se cumple para toda x_0 en alguna bola B_h .
- *globalmente*, si se cumple para toda $x_0 \in \mathbb{R}^n$.
- *uniformemente*, si se cumple para toda $t \geq 0$.

Condición de Lipschitz

La función f se dice que es *Lipschitz* en x si, para algún $h > 0$, existe un l tal que

$$\|f(t, x_1) - f(t, x_2)\| \leq l \|x_1 - x_2\| \quad (\text{B2})$$

para toda $x_1, x_2 \in B_h, t \geq 0$. La constante l se denomina *constante de Lipschitz*. Las funciones *Globalmente Lipschitz* satisfacen (B2) para toda $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^n$. Las funciones que son *Lipschitz* en alguna bola cerrada satisfacen (B2) para toda $x_1, x_2 \in B_h$, con l dependiendo posiblemente de h .

Si f es *Lipschitz* en x , entonces esta es continua en x . Por otra parte, si f tiene derivadas parciales continuas y acotadas en x , entonces esta es *Lipschitz*. De la teoría de ecuaciones diferenciales ordinarias, se sabe que si f esta acotada localmente, y f es localmente *Lipschitz* en x implica la existencia y unicidad de las soluciones de (B1) en algún intervalo de tiempo (siempre y cuando $x \in B_h$).

Definiciones de estabilidad

Informalmente, x se denomina un punto de equilibrio *estable*, si la trayectoria $x(t)$ permanece cercana a 0 si la condición inicial x_0 es cercana a 0. Algunas definiciones mas precisas se presentan a continuación.

Definición (Punto de equilibrio). x se denomina un *punto de equilibrio* de (B1) si $f(t, x) = 0$ para toda $t \geq 0$.

Definición (Matriz Hurwitz). (i) Una matriz A se dice que es Hurwitz si todos sus eigenvalores tienen parte real negativa. (ii) Un sistema lineal $\dot{x} = Ax + b$ se dice que es estable asintóticamente alrededor del punto de equilibrio $x_{eq} = -A^{-1}b$ si $\|x(t) - x_{eq}\| \rightarrow 0$ conforme $t \rightarrow \infty$. Si la matriz A es Hurwitz, el sistema lineal $\dot{x} = Ax + b$ es estable asintóticamente. (iii) Considere el sistema lineal $\dot{x} = Ax + F(t)$. La siguiente expresión es una solución para el sistema anterior

$$x(t) = \exp(At)x(0) + \int_0^t \exp(A(t-s))F(s)ds$$

Si la matriz A es Hurwitz, existen dos números positivos κ y Λ tal que $\|\exp(At)x(0)\| \leq \kappa \|x(0)\| \exp(-\Lambda t)$

Definición (Estabilidad en el sentido de Liapunov). $x = 0$ se denomina un punto de

equilibrio *estable* de (B1), si, para todo $t_0 \geq 0$ y $\epsilon > 0$, existe $\delta(t_0, \epsilon)$ tal que

$$\|x_0\| < \delta(t_0, \epsilon) \implies \|x(t)\| < \epsilon \quad \text{para todo } t \geq t_0.$$

Donde $x(t)$ es la solución de (B1) iniciando desde x_0 en t_0 .

Definición (Estabilidad uniforme). $x = 0$ se denomina un punto de equilibrio *uniformemente estable* de (B1), si, en la definición anterior, δ se puede elegir independientemente de t_0 .

Definición (Estabilidad asintótica). $x = 0$ se denomina un punto de equilibrio *asintóticamente estable* de (B1), si

- (a) $x = 0$ es un punto de equilibrio estable de (B1),
- (b) $x = 0$ es atractivo, esto es, para todo $t_0 \geq 0$, existe $\delta(t_0)$, tal que

$$\|x_0\| < \delta \implies \lim_{t \rightarrow \infty} \|x(t)\| = 0$$

Definición (Estabilidad asintótica uniforme). $x = 0$ se denomina un punto de equilibrio *uniforme asintóticamente estable* de (B1), si

- (a) $x = 0$ es un punto de equilibrio uniformemente estable de (B1),
- (b) la trayectoria $x(t)$ converge a 0 uniformemente en t_0 . Más precisamente, existe $\delta > 0$ y una función $\gamma(\tau, x_0) : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_+$ tal que $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \gamma(\tau, x_0) = 0$ para todo x_0 y

$$\|x_0\| < \delta \implies \|x(t)\| \leq \gamma(t - t_0, x_0) \quad \text{para todo } t \geq t_0 \geq 0$$

Definición (Estabilidad asinótica global). $x = 0$ se denomina un punto de equilibrio *asinótica globalmente estable* de (B1), si este es estable asintóticamente y $\lim_{t \rightarrow \infty} \|x(t)\| = 0$ para todo $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

Definición (Estabilidad exponencial, velocidad de convergencia). $x = 0$ se denomina un punto de equilibrio *exponencialmente estable* de (B1), si existen $m, \alpha > 0$ tal que la solución $x(t)$ satisface

$$\|x(t)\| \leq m \exp(-\alpha(t - t_0)) \|x_0\| \tag{B3}$$

para toda $x_0 \in B_h$, $t \geq t_0 \geq 0$. La constante α se denomina la velocidad de convergencia.

La estabilidad exponencial global significa que (B3) se satisface para cualquier $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

Estabilidad de Liapunov y el Principio de Invarianza de LaSalle

Teorema (Estabilidad de Liapunov). Sea $x = 0$ un punto de equilibrio de (B1) y $D \subset \mathbb{R}^n$ un dominio que contiene a $x = 0$. Sea $V : D \rightarrow \mathbb{R}$ una función diferenciable continuamente, tal que

$$V(0) = 0 \quad y \quad V(x) > 0 \quad en \quad D - \{0\}; \quad \dot{V}(x) \leq 0 \quad en \quad D$$

entonces $x = 0$ es estable. Además, si

$$\dot{V}(x) < 0 \quad en \quad D$$

entonces $x = 0$ es estable asintóticamente.

La condición $\dot{V}(x) \leq 0$ implica que cuando una trayectoria cruza una superficie de Liapunov $V(x) = c$, esta se mueve dentro el conjunto $\Omega_c = \{x \in \mathbb{R}^n | V(x) \leq c\}$ y no puede salir nuevamente. Cuando $\dot{V}(x) < 0$ la trayectoria se mueve desde una superficie de Liapunov a una superficie de Liapunov con menor c , es decir, la función disminuye hasta el origen. Una función $V(x) > 0$ ($V(x) < 0$) se dice que es positiva definida (negativa definida). Si esta satisface $V(x) \geq 0$ ($V(x) \leq 0$) para $x \neq 0$, se dice que es positiva semidefinida (negativa semidefinida). Así, el origen es estable si existe una función positiva definida continuamente diferenciable $V(x)$ tal que $\dot{V}(x)$ sea negativa semidefinida, y este es estable asintóticamente si $\dot{V}(x)$ es negativa definida.

Del teorema anterior, se observa que una función que satisface la condición de estabilidad asintótica sobre un dominio D , y si $\Omega_c = \{x \in \mathbb{R}^n | V(x) \leq c\}$ esta acotado y contenido en D , entonces cada trayectoria que inicia en Ω_c permanece en Ω_c (trayectoria invariante) y se aproxima al origen conforme $t \rightarrow \infty$. Entonces Ω_c es un estimado de la región de atracción.

Teorema (Radialmente no acotado). Sea $x = 0$ un punto de equilibrio de (B1) y $D \subset \mathbb{R}^n$ un dominio que contiene a $x = 0$. Sea $V : D \rightarrow \mathbb{R}$ una función diferenciable continuamente, tal que

$$V(0) = 0 \quad y \quad V(x) > 0 \quad en \quad D - \{0\}$$

$$\|x(t)\| \rightarrow \infty \implies V(x) \leq \rightarrow \infty$$

$$\dot{V}(x) < 0 \quad \text{para toda } x \neq 0$$

entonces $x = 0$ es estable asintótico globalmente.

Si $\dot{V}(x) \leq 0$, no se puede asegurar que la trayectoria se aproxime al origen, para entender la estabilidad de las trayectoria en este caso, se introduce el Principio de Invarianza de LaSalle.

Teorema (Principio de Invarianza de LaSalle). Sea $\Omega_c \subset D$ un conjunto compacto que es invariante positivamente con respecto a (B1). Sea $V : D \rightarrow \mathbb{R}$ una función diferenciable continuamente tal que $\dot{V}(x) \leq 0$ en $\dot{V}(x) \leq 0$. Sea E el conjunto de todos los puntos en Ω_c donde $\dot{V}(x) = 0$. Sea M el conjunto invariante mas grande de E . Entonces cada solución que inicia en Ω_c se aproxima a M conforme $t \rightarrow \infty$.

Corolario (Estabilidad asintótica del origen). Sea $x = 0$ un punto de equilibrio de (B1). Sea $V : D \rightarrow \mathbb{R}$ una función diferenciable continuamente sobre un dominio D que contiene al origen, tal que $\dot{V}(x) \leq 0$ en D . Sea $S = \{x \in \mathbb{R}^n | V(x) = 0\}$ y suponer que ninguna solución puede ser idéntica, mas que la solución trivial. Entonces el origen es estable asintóticamente.

Corolario (Estabilidad asintótica global del origen). Sea $x = 0$ un punto de equilibrio de (B1). Sea $V : D \rightarrow \mathbb{R}$ una función diferenciable continuamente, radialmente no acotada, positiva definida tal que $\dot{V}(x) \leq 0$ en \mathbb{R}^n . Sea $S = \{x \in \mathbb{R}^n | V(x) = 0\}$ y suponer que ninguna solución puede ser idéntica, mas que la solución trivial. Entonces el origen es estable asintótico globalmente.

Lema de Bellman-Gronwall

Sea $x(\cdot), a(\cdot), u(\cdot) : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$. Sea $T \geq 0$. Si

$$x(t) \leq \int_0^t a(\tau)x(\tau)d\tau + u(t) \quad \text{para toda } t \in [0, T]$$

Entonces

$$x(t) \leq \int_0^t a(\tau)u(\tau) \left(\exp \int_\tau^t a(\sigma)d\sigma \right) d\tau + u(t) \quad \text{para toda } t \in [0, T]$$

Cuando $u(\cdot)$ es diferenciable

$$x(t) \leq u(0) \exp \int_0^t a(\sigma)d\sigma + \int_0^t \dot{u}(\tau) \left(\exp \int_\tau^t a(\sigma)d\sigma \right) d\tau \quad \text{para toda } t \in [0, T]$$

Teorema del Mapeo de Contracción

El *teorema del mapeo de contracción* (o teorema del punto fijo de Banach), se presenta usualmente en dos formas: la versión global y la versión local. La versión local considera hipótesis más débiles que la versión global, y correspondientemente conduce a conclusiones más débiles.

Teorema del Mapeo de Contracción Global. Sea $(X, \|\cdot\|)$ un espacio de Banach, y sea $T : X \rightarrow X$. Suponer que existe una constante fija $\rho < 1$ tal que

$$\|Tx - Ty\| \leq \rho \|x - y\|, \quad \text{para toda } x, y \in X \quad (\text{B4})$$

Bajo estas condiciones, existe exactamente un $x^* \in X$ tal que $Tx^* = x^*$. Para cada $x_0 \in X$, la secuencia $\{x_n\}$ en X definida por

$$x_{n+1} = Tx_n$$

converge a x^* . Además,

$$\|x^* - x_n\| \leq \frac{\rho^n}{1 - \rho} \|Tx_0 - x_0\| \quad (\text{B5})$$

Un operador T que satisface la condición (B4) se conoce como una contracción, debido que las imágenes de dos elementos cualquiera x y y están más cercanos a x y y . Además, T es una contracción global, debido a que (B4) se cumple para todo x, y en el espacio completo X . Un elemento $x \in X$ tal que $Tx = x$ se denomina un punto fijo del mapeo T , debido a que x permanece fijo cuando el mapeo T se aplica a este. El Teorema del mapeo de contracción asegura que cada contracción tiene exactamente un punto fijo en X . Además, este punto fijo se puede determinar simplemente al tomar cualquier punto arbitrario de inicio $x_0 \in X$ y aplicar repetidamente el mapeo T a este. Finalmente, (B5) proporciona un estimado de la velocidad de convergencia de esta secuencia al punto fijo.

Funciones y teorema sobre funciones

Funciones, composición de funciones y biyección. Una función es algo que asocia a cada elemento de un conjunto con un elemento de otro conjunto. La relación dada por una función f entre a y b (donde a es un elemento en el conjunto A y b un elemento del conjunto B) representada por el par ordenado $\langle a, b \rangle$ se denota como $f(a) = b$, y b se denomina la imagen de a bajo f . Una función f se dice que es uno a uno (inyectiva), si y solo si $f(x) = f(y)$, $x = y$. Una función

f , desde un conjunto A al conjunto B se dice que es sobre (suryectiva), si y solo si para cada elemento y de B , existe un elemento x en A tal que $f(x) = y$, esto es, f es sobre si y solo si $f(A) = B$. Una biyección es una función que es sobre y uno a uno. Además, cada biyección tiene una función llamada la función inversa. Si f es una biyección desde el conjunto A al conjunto B , entonces la función g se llama la función inversa de f , y se denota por f^{-1} , si para cada elemento y de B , $g(y) = x$, donde $f(x) = y$. La composición de funciones f y g , denotada por $f \circ g$, donde g es una función desde el conjunto A al conjunto B , y f es una función desde el conjunto B al conjunto C , es la función desde A a C que satisface $f \circ g(x) = f(g(x))$ para todo x en A .

El teorema de función inversa considera el problema de n ecuaciones en n incógnitas.

Teorema de la Función Inversa. Suponer que la función

$$F : \mathbb{R}^n \ni x := (x_1, \dots, x_n) \rightarrow F(x) := (F_1(x), \dots, F_n(x)) \in \mathbb{R}^n$$

es C^1 en una vecindad de un punto x_0 . Además suponer que

$$F(x_0) = p_0$$

y

$$\frac{\partial F}{\partial x}(x_0) := \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1}(x_0) & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial x_n}(x_0) \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \frac{\partial F_n}{\partial x_1}(x_0) & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial x_n}(x_0) \end{pmatrix}$$

es no singular. Entonces, existe una vecindad N_x de x_0 y una vecindad N_p de p_0 tal que $F : N_x \rightarrow N_p$ es uno a uno; *i.e.*, para cada $p \in N_p$ la ecuación

$$F(x) = p$$

tiene una solución única.

B.2 Método de energía

Con el método de energía se pueden obtener estimados para la solución sin resolver la ecuación original. Esto se hace al derivar una desigualdad diferencial que describe el crecimiento de esta energía (*e.g.*, la norma L_2). Las funciones de energía tienen mucho en común con el método de Liapunov. El método de Liapunov es básicamente una generalización de la idea que si “alguna medida de la energía” asociada con el sistema es decreciente, entonces el sistema tenderá a su equilibrio. Los pasos básicos del método de energía son:

1. Diferenciar la energía:

$$\frac{d}{dt} \|u(\cdot, t)\|_2^2 = (u_t, u) + (u, u_t)$$

2. Substituir u_t con la ecuación diferencial.
3. Aplicar integración por partes y las condiciones frontera para simplificar y cancelar términos.

Ejemplo. Sea u una solución a la ecuación de difusión

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{B6}$$

donde $-\infty < x < \infty$, $t > 0$, y suponer que se desea investigar el comportamiento de u sujeto a la condición inicial

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad -\infty < x < \infty \tag{B7}$$

y las condiciones frontera

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \tag{B8}$$

La solución cero $u = 0$ es una solución a (B6), y se desea investigar su estabilidad. La clave del procedimiento es que para que una solución (en este caso $u = 0$) sea estable, ésta debe ser estable contra cualquier perturbación a la cual esta pueda estar expuesta. De hecho, se debe sobreentender que la estabilidad sea en el sentido de la estabilidad asintótica, de forma que la solución cero (B6) estable, implica que todas las perturbaciones decaen a cero conforme progresa el tiempo. Desde un punto de vista práctico es necesario que las perturbaciones se desvanezcan rápidamente. En este sentido, el método de energía es muy útil debido a que usualmente garantiza un decremento exponencial.

Sea u una solución a (B6), (B8) que satisface el dato inicial arbitrario $u_0(x)$. Se define una energía $E(t)$ por

$$E(t) = \frac{1}{2} \|u(t)\|^2 \quad (\text{B9})$$

donde $\|\cdot\|$ denota la norma sobre $L^2(0, 1)$, *i.e.*,

$$\|f\|^2 = \int_0^1 f^2 dx$$

Al diferenciar $E(t)$ y usar (B6),

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{\partial}{\partial t} u^2 dx \\ \frac{dE}{dt} &= \int_0^1 u \frac{\partial u}{\partial t} dx = \int_0^1 u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx \end{aligned}$$

Integrando por partes,

$$\int_0^1 u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx = - \int_0^1 \frac{\partial u^2}{\partial x} dx + u \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_0^1 = - \left\| \frac{\partial u}{\partial x} \right\|^2$$

Por lo tanto, la ecuación de energía es

$$\frac{dE}{dt} + \left\| \frac{\partial u}{\partial x} \right\|^2 = 0 \quad (\text{B10})$$

Al usar la desigualdad de Poincaré

$$\left\| \frac{\partial u}{\partial x} \right\|^2 \geq \pi^2 \|u\|^2$$

para u con $u = 0$ en $x = 0, 1$. Al usar esta ecuación en (B10) conduce a

$$\frac{d}{dt} \|u\|^2 + 2\pi^2 \|u\|^2 \leq 0$$

o, equivalentemente,

$$\frac{d}{dt} (\exp(2\pi^2 t) \|u\|^2) \leq 0$$

lo cual conduce a

$$\|u(t)\|^2 \leq \exp(-2\pi^2 t) \|u_0\|^2 \quad (\text{B11})$$

Entonces, $\|u(t)\| \rightarrow 0$ al menos exponencialmente y la solución a (B6), (B8) es estable.

B.3 Sistemas perturbados singularmente

El método de perturbaciones singulares¹ es valioso en el análisis de sistemas en los cuales el orden dinámico cambia como el resultado de despreciar algunos elementos, o hacer algunas simplificaciones. Para un punto de equilibrio dado se puede establecer estabilidad asintótica, si el sistema original cumple algunas condiciones.

Considere el sistema

$$\begin{aligned}\dot{x} &= f(x, y) \\ \varepsilon \dot{y} &= g(x, y)\end{aligned}\tag{B12}$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$, $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$, $g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$. Observar que para cualquier ε distinto de cero, el sistema (B12) consiste de $n + m$ ecuaciones diferenciales. Sin embargo, si $\varepsilon = 0$, el sistema (B12) será un conjunto de n ecuaciones diferenciales, y m ecuaciones algebraicas,

$$\begin{aligned}\dot{x} &= f(x, y) \\ 0 &= g(x, y)\end{aligned}\tag{B13}$$

Suponer que es posible resolver las m ecuaciones algebraicas en (B13) para obtener una expresión explícita para y en términos de x , de la forma

$$y = h(x)\tag{B14}$$

donde $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. Entonces, se puede substituir (B14) en (B13) para obtener el conjunto de ecuaciones diferenciales

$$\dot{x} = f(x, h(x))\tag{B15}$$

Al colocar $\varepsilon = 0$ en (B12) conduce a una perturbación singular, debido a que este cambia el orden del sistema. El sistema (B12) se denomina el sistema completo u original, en tanto que (B15) se denomina el sistema reducido.

¹Esta parte se toma de la referencia; M. Vidyasagar, *Nonlinear Systems Analysis*, Second Edition, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1993.

Los resultados de sistemas no lineales perturbados singularmente se presentan a continuación:

Teorema (Perturbación singular). *Considere el sistema*

$$\begin{aligned}\dot{x} &= f(x, y) \\ \varepsilon \dot{y} &= g(x, y)\end{aligned}\tag{B16}$$

donde $f : R^n \times R^m \rightarrow R^n$, $g : R^n \times R^m \rightarrow R^m$ son diferenciables continuamente y satisfacen $f(0, 0) = 0$, $g(0, 0) = 0$. Definir

$$\begin{aligned}A_{11} &= \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{(0,0)} & A_{12} &= \left[\frac{\partial f}{\partial y} \right]_{(0,0)} \\ A_{21} &= \left[\frac{\partial g}{\partial x} \right]_{(0,0)} & A_{22} &= \left[\frac{\partial g}{\partial y} \right]_{(0,0)}\end{aligned}$$

y suponer que A_{22} es no singular. Bajo estas condiciones, existe una función C^1 $h : R^n \rightarrow R^m$ tal que, en alguna vecindad de $(0, 0)$,

$$y = h(x)$$

es la solución única de

$$g(x, y) = 0$$

Aun más,

1. Si A_{22} y $A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21}$ son Hurwitz, entonces, existe un ε_0 tal que $(0, 0)$ es un equilibrio estable asintóticamente del sistema (B16) siempre que $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$.
2. Si al menos un eigenvalor de A_{22} o $A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21}$ tiene parte real positiva, entonces existe un ε_0 , tal que $(0, 0)$ es un equilibrio inestable del sistema (B16) siempre que $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$.

En el lenguaje de la teoría de perturbación singular la matriz A_{22} se dice que representa la dinámica rápida, en tanto que $A_0 = A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21}$ se dice que representa la dinámica lenta. Por lo tanto, y es comúnmente referida como la variable de estado rápida y x como la variable de estado lenta, y su evolución en el tiempo esta gobernada por la matriz A_0 .

Para los ingenieros de control, los métodos de perturbación singular legitiman las simplificaciones ad-hoc de los modelos dinámicos. Una de tales simplificaciones es despreciar algunas

constantes de tiempo “pequeñas” y parámetros “parásitos” que incrementen el orden dinámico del modelo. Sin embargo, el diseño que se basa en un modelo simplificado puede resultar en un sistema lejos del desempeño deseado o en un sistema inestable. Si esto pasa, se necesita una herramienta que ayude a mejorar el diseño simplificado. Esto es, encontrar un diseño simplificado que capture los fenómenos dominantes. Los fenómenos que se desprecian, si son importantes, se analizan en un segundo paso. Esto conduce a que las expansiones asintóticas en series capa limite (“internas”) y reducidas (“externas”), las cuales son la característica principal de las técnicas de perturbación singular, coinciden con las etapas de diseño iniciales. Debido a que la mayoría de los sistemas de control son dinámicos, la descomposición en etapas se dicta por una separación de escalas de tiempo. Típicamente, el modelo reducido representa los fenómenos (promedio) más “lentos”, los cuales en la mayoría de las aplicaciones son dominantes. Los modelos de capa limite involucran las escalas en tiempo más rápidas y representan desviaciones del comportamiento lento predicho. Las etapas de diseño posteriores es hacer que las capas limite sean estables asintóticamente, de forma que tales desviaciones se amortiguen rápidamente.

B.4 Sistemas de dimensión infinita y espacios de Hilbert

En sistemas de dimensión finita de ODE, es estándar considerar el “espacio fase” y tal vez espacios de dimensión mayores, cuyas coordenadas están dadas por el conjunto de variables dependientes del tiempo. Una propiedad matemática importante de un espacio de dimensión finita E es que cualquier subconjunto acotado cerrado X de E sera compacto, y esto se explota frecuentemente en el análisis de ODE. La caracterización mas útil de compactez en este contexto es que cualquier secuencia en X posee una secuencia convergente.

Una de la primeras dificultades a primera vista en el análisis de PDE es que el espacio fase es de dimensión infinita y no tiene la propiedad que cualquier subconjunto cerrado acotado es compacto. La solución a una PDE a cualquier tiempo t es una función $f(x) = u(x, t)$, de modo que las soluciones se mueven en un espacio de funciones, o simplemente “una función espacio”.

Los espacios de funciones típicas son, por ejemplo: el espacio C^0 , que consiste de todas las funciones continuas; el espacio C^1 , que consiste de todas las funciones que son diferenciables y

tiene primer derivada continua, y en general

$$C^r = \{f : d^n f/dx^n \text{ existe y es continua para } 0 \leq n \leq r\}$$

Por ejemplo, una elección natural para el espacio fase de una PDE difusión-reacción debería ser el espacio de funciones dos veces diferenciables C^2 , debido a que esta ecuación involucra segundas derivadas de u . Sin embargo, para facilitar la comparación con la teoría de ODE, es más útil extender un espacio de funciones suaves, a un espacio de Hilbert, el cual comparte muchas características en común con los espacios en \mathbb{R}^n .

Muchos de los espacios abstractos en el análisis funcional, surgen al generalizar las propiedades de \mathbb{R}^n . Por ejemplo, un espacio métrico se basa en ideas de distancia, y un espacio normado en ideas de longitud. El concepto de un espacio topológico surge de las nociones de conjuntos abiertos y cerrados dentro un espacio métrico. Un espacio de Hilbert se basa sobre las nociones matemáticas del producto escalar (punto) y la completitud de los espacios Euclidianos. El análogo del producto escalar es el producto interno (u, v) , y el módulo o norma de u , denotado por $\|u\|$, se deriva (como para \mathbb{R}^n) del producto interno vía $\|u\|^2 = (u, u)$. La completitud significa que cualquier secuencia de Cauchy en \mathcal{H} (una secuencia $\{x_n\}$ tal que dado $\epsilon > 0$ existe un $n_0(\epsilon)$ con $\|x_n - x_m\| \leq \epsilon$ para todo $n, m \geq n_0$) converge a un punto en \mathcal{H} .

El producto interno más obvio de dos funciones es la integral del su producto,

$$(u, v) = \int_{\Omega} u(x)v(x)dV$$

la cual genera la norma correspondiente L^2 ,

$$\|u\|_2 = \left(\int_{\Omega} \|u\|^2 dV \right)^{\frac{1}{2}}$$

el espacio de funciones que son de cuadrado integrable, es el espacio de Hilbert fundamental para el estudio de PDE. Para un dominio Ω , acotado suavemente en R^n , $L^2(\Omega)$ se define por

$$L^2(\Omega) = \left\{ u \mid \int_{\Omega} \|u\|^2 dV < \infty \right\}$$

y es un espacio de Hilbert cuando se equipa con el producto interno y la norma correspondiente

antes descritos.

B.5 Algunos teoremas útiles

Teorema de deficiencia cero

Para cualquier red de reacción de deficiencia cero los siguientes enunciados se cumplen:

(i) Si la red no es débilmente reversible entonces, para cinéticas arbitrarias (no necesariamente de acción de las masas), las ecuaciones diferenciales para el sistema de reacción correspondiente no pueden admitir un estado estacionario positivo (i.e., un estado estacionario en el ortante positivo de \mathbb{R}^n).

(ii) Si la red no es débilmente reversible entonces, para cinéticas arbitrarias (no necesariamente de acción de las masas), las ecuaciones diferenciales para el sistema de reacción correspondiente no pueden admitir una trayectoria de composición cíclica a lo largo de las cuales todas las concentraciones de las especies sean positivas.

(iii) Si la red es débilmente reversible entonces, para cinética de acción de las masas (sin tomar en cuenta los valores positivos de las constantes de velocidad), las ecuaciones diferenciales para el sistema de reacción correspondiente tienen las siguientes propiedades: existe dentro de cada clase compatible estequiométrica positiva un estado estacionario, el cual es estable asintóticamente, y no existe una trayectoria de composición cíclica no trivial a lo largo de la cual todas las concentraciones de las especies sean positivas.

Teorema 2 de Hoppensteadt

En Hoppensteadt [16], se estudia la estabilidad de ODE de la forma

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(t, x, y, \epsilon) \\ \epsilon \frac{dy}{dt} &= g(t, x, y, \epsilon) \end{aligned} \tag{B17}$$

donde ϵ es un parámetro real cercano a cero. En el Teorema 2, se muestra que si el sistema reducido

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= f(t, x, y, 0) \\ 0 &= g(t, x, y, 0)\end{aligned}\tag{B18}$$

es estable, entonces para $\epsilon > 0$ pequeño, el sistema completo (B17) es también estable. Además, el dominio de estabilidad para el sistema completo esta determinado esencialmente por el sistema reducido (B18) y otro problema auxiliar de orden cero.

Existen dos condiciones de estabilidad las cuales se imponen sobre el sistema (B17). La primera trata con la estabilidad del problema reducido (B18).

S1. *El sistema lineal*

$$\frac{dz}{dt} = A(t)z$$

donde $A(t) = (f_x - f_y g_y^{-1} g_x)(t, x_0(t), y_0(t), 0)$, es estable asintótico exponencialmente. La notación f_x , etc., se usa para denotar la matriz Jacobiana $(\partial f_i / \partial x_j)$, etc.

La condición **S1** garantiza que la solución $x = x_0(t)$ de

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x, \phi(t, x), 0)$$

es asintóticamente estable. La segunda condición de estabilidad garantiza que las soluciones del sistema (B17) tienen límite conforme $\epsilon \rightarrow 0$.

S11. *Los eigenvalores de la matriz Jacobiana $g_y(t, x_0(t), y_0(t), 0)$ todos tienen parte real menor que algún número negativo fijo para todo $0 \leq t < \infty$.*

Sea el dominio de atracción denotado por D . Así, si $\xi \in D$, existe una solución única de (B17) que tiene a ξ como valor inicial. Además, esta solución se aproxima a $x_0(t)$ conforme $t \rightarrow \infty$. Si es necesario se restringe el dominio D de forma que los eigenvalores de la matriz

$$g_y(0, \xi, \phi(t, \xi), 0)$$

tengan parte real negativa para $\xi \in D$. Ahora, considere el sistema “rápido” el cual se obtiene del

sistema (B17) al colocar $t = \epsilon\tau$ y con $\epsilon \rightarrow 0$:

$$\frac{dY}{d\tau} = g(0, \xi, \phi(0, \xi) + Y, 0)$$

La condición SII y la restricción sobre D aseguran que para cada $\xi \in D$, la solución cero de este sistema es estable asintóticamente. Sea su dominio de atracción denotado por E_ξ .

Teorema 2. Si $(x(t, \epsilon), y(t, \epsilon))$ y $(\bar{x}(t, \epsilon), \bar{y}(t, \epsilon))$ son soluciones del sistema (B17) tal que $(x(0, \epsilon), y(0, \epsilon))$ y $(\bar{x}(0, \epsilon), \bar{y}(0, \epsilon))$ definen funciones $(\xi(\epsilon), \eta(\epsilon))$ y $(\bar{\xi}(\epsilon), \bar{\eta}(\epsilon))$, respectivamente, las cuales son (i) funciones suaves de ϵ en $\epsilon = 0$, y (ii) satisfacen $\xi_0 = \xi(0)$, $\bar{\xi}_0 = \bar{\xi}(0) \in D$ y $\eta(0) \in E_{\xi_0}$, $\bar{\eta}(0) \in E_{\bar{\xi}_0}$, si las condiciones SI y SII se satisfacen, entonces para un $\epsilon > 0$ pequeño, existen soluciones sobre el intervalo completo $0 \leq t < \infty$, y

$$\lim_{t \rightarrow \infty} [(x(t, \epsilon), y(t, \epsilon)) - (\bar{x}(t, \epsilon), \bar{y}(t, \epsilon))] = 0$$

B.6 Métodos numéricos para PDE

En las últimas 3 décadas se han desarrollado y mejorado diversos métodos para encontrar soluciones aproximadas a las ecuaciones diferenciales parciales. Entre los métodos de aproximación, el método de diferencias finitas, el método de características, y los métodos variacionales han dominado las aplicaciones para los problemas en ingeniería. En los últimos años el método de elemento finito, una derivación de los métodos variacionales clásicos ha ganado una popularidad considerable entre los practicantes de matemáticas aplicadas.

El método de diferencias finitas está dotado con la simplicidad de su principio (*i.e.*, la representación de las derivadas de una función, en términos de series de Taylor finitas), y la facilidad de formulación e implementación sobre computadoras digitales. Las desventajas incluyen: la dificultad en implementar las condiciones frontera sobre fronteras irregulares, y la dificultad en representar con precisión dominios irregulares.

Los métodos variacionales clásicos se basan ya sea en la minimización de una función cuadrática asociada con el problema dado, o en la minimización del error de aproximación. A pesar de su simplicidad y precisión, los métodos variacionales clásicos no se consideran competitivos con el método de diferencias finitas, debido esto a la dificultad en construir funciones de aproximación

para dominios irregulares.

Método de características El uso práctico del método de características se restringe al caso donde coeficientes constantes multiplican los términos diferenciales en un conjunto de ecuaciones diferenciales hiperbólicas. Esto conduce a líneas rectas para las direcciones características. Esto permite que la ecuación diferencial parcial sea representada exactamente por una ecuación diferencial ordinaria a lo largo de la dirección característica.

Método de colocación ortogonal La técnica de colocación ortogonal en su forma más simple fue desarrollada como una modificación de los métodos de colocación. En los métodos de colocación, los coeficientes de la expansión de las funciones prueba son típicamente determinados por principios variacionales o por métodos de residuos pesados. El método de colocación ortogonal está basado sobre la elección adecuada de series de prueba para representar la solución de las ecuaciones diferenciales parciales. Los coeficientes de las series de prueba se determinan al hacer cero la ecuación residual en un conjunto de puntos denominados "puntos de colocación", en el dominio de solución. La característica del método de colocación es que expresa las derivadas en cada punto como una combinación lineal de los valores en todos los puntos de colocación en lugar de solo los puntos vecinos como en el caso de diferencias finitas.

Método de elemento finito El método de elemento finito supera las desventajas de los métodos variacionales clásicos al buscar soluciones aproximadas sobre una colección de subdominios simples (llamados elementos) sobre los cuales las funciones de aproximación pueden generarse sistemáticamente. La colección de elementos, llamados una malla de elemento finito, reemplaza el dominio original a una precisión deseada. Los métodos variacionales, incluyendo el método de elemento finito, están basados en enunciados integrales, los cuales se obtienen al multiplicar la ecuación con una función peso e integrar sobre el dominio. Por lo tanto, no son adecuados para problemas con gradientes pronunciados o discontinuidades debido a que el método tiende a suavizar las discontinuidades, lo cual no es deseable cuando se está interesado en predecir la magnitud del gradiente.

Colocación ortogonal sobre elementos finitos La principal limitación del método de colocación ortogonal se debe a que los puntos malla se localizan en los ceros de los polinomios or-

togonales y éstos no tienen una relación directa sobre el perfil global. Sin embargo, el método puede combinarse convenientemente con elementos finitos para dar un método de solución muy eficiente y flexible. La atracción particular de la colocación ortogonal sobre elementos finitos es que los puntos de colocación pueden ser localizados en las regiones más apropiadas. Sin embargo, mientras es relativamente fácil encontrar una combinación apropiada de elementos finitos y puntos de colocación que dan buenos resultados en estado estacionario, para los sistemas dinámicos no es tan sencillo. Esto se debe al cambio de los perfiles en posición y tiempo de modo que es necesario que los elementos finitos se muevan.

B.6.1 Método de diferencias finitas

El método de diferencias finitas trata con puntos específicos dentro un dominio, denominados puntos malla. El dominio está dividido en intervalos equidistantes, aunque tal consideración de intervalos iguales no es necesaria.

Si se supone que se tiene una función continua $\theta(x)$, al usar una expansión de Taylor se pueden deducir fórmulas en diferencias para la primer y segunda derivada involucrando solamente los valores en x_{i-1} , x_i , y x_{i+1} , donde i indica el punto malla de la discretización. Sea $\theta_i = \theta(x_i)$ al escribir una serie de Taylor para θ_{i+1} , y θ_{i-1} conduce a

$$\theta_{i+1} = \theta_i + \theta'_i \Delta x + \theta''_i \frac{\Delta x^2}{2!} + \theta'''_i \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (\text{B19})$$

$$\theta_{i-1} = \theta_i - \theta'_i \Delta x + \theta''_i \frac{\Delta x^2}{2!} - \theta'''_i \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (\text{B20})$$

al reordenar y dividir por Δx se obtienen dos expresiones para la primer derivada

$$\frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{\Delta x} = \theta'_i + \theta''_i \frac{\Delta x}{2!} + \dots \quad (\text{B21})$$

$$\frac{\theta_i - \theta_{i-1}}{\Delta x} = \theta'_i - \theta''_i \frac{\Delta x}{2!} + \dots \quad (\text{B22})$$

Cada fórmula es correcta hasta el orden de Δx . Alternativamente, se puede abstraer las ecuaciones (B19), y (B20), reordenar, y dividir por Δx para obtener,

$$\frac{\theta_{i+1} - \theta_{i-1}}{2\Delta x} = \theta'_i + \theta'''_i \frac{\Delta x}{3!} + \dots \quad (\text{B23})$$

La cual es correcta hasta el orden de Δx^2 . Al sumar las ecuaciones (B19), y (B20), re-arreglar, y al dividir por Δx^2 se obtiene una expresión para la segunda derivada

$$\frac{\theta_{i+1} - 2\theta_i + \theta_{i-1}}{\Delta x^2} = \theta''_i + \theta''''_i \frac{2\Delta x^2}{4!} + \dots \quad (\text{B24})$$

El método de diferencias finitas tiene la ventaja de su fácil formulación, sin embargo es necesario en algunos casos un elevado número de puntos malla para obtener una alta precisión. Cuando la solución en los puntos malla se conoce, la solución en otra posición se encuentra por interpolación lineal.

Para el caso de los reactores tubulares, las ecuaciones diferenciales parciales se discretizan en la posición espacial, lo cual conduce a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (una para cada punto malla en cada variable dependiente). Estas ecuaciones pueden ser integradas por distintos métodos, por ejemplo, esquemas de integración explícita, tales como los métodos de Runge-Kutta o Euler mejorado pueden utilizarse.