Casa abierta al tiempo

Universidad Autónoma Metropolitana

Azcapotzalco

Estudio de los esquemas de control de cascada basados en múltiples mediciones de temperatura.

Maestría en Ingeniería de Procesos

*Ing. Carlos Eduardo Ramírez Castelán.
m.03.26/05/2014*

*Director de tesis:
Dr. Héctor Fernando Puebla Núñez.
Departamento de energía, UAM-A*

*Co-director de tesis:
Dr. Eliseo Hernández Martínez.
Facultad de Ciencias Químicas, UV-Xalapa.*

*Comité de Estudios
CEPIP.01.09/02/2013*

Trabajos derivados de esta tesis

Derivado de este trabajo se generaron los siguientes reportes:

1. **Ramirez-Castelan, E.**, Moguel, J., Puebla, H., Hernandez-Martinez, E. (2014). Temperature sensor location analysis for cascade control design in tubular reactors. Artículo en preparación.
2. **Ramirez-Castelan, E.**, Hernandez-Martinez, E., Puebla, H. (2014). Sensor location analysis for cascade control in tubular reactors. CHISA 2014, Praga, Republica Checa, 23-27 Agosto 2014.
3. **Ramírez-Castelán, C.E.**, Puebla, H., Hernandez-Martinez, E. (2014). Análisis fractal en reactores tubulares para determinar sensibilidad paramétrica. Memorias del XXXV Encuentro Nacional de la AMIDIQ, Vol. 1, 3491-3495, Puerto Vallarta, México.
4. Moguel-Castañeda, J.G., **Ramírez-Castelán, C.E.**, Puebla, H., Hernandez-Martinez, E. (2014). Localización de sensores de temperatura para el diseño de controladores composición-temperatura en reactores tubulares. Memorias del XXXV Encuentro Nacional de la AMIDIQ, Vol. 1, 3696-3699, Puerto Vallarta, México.
5. **Ramírez-Castelán, C.E.** (2014). Reporte de estancia de movilidad en CAPEC de la Universidad Técnica de Dinamarca.

Agradecimientos

Se agradece la Beca para estudios de posgrado CONACyT y la beca mixta de movilidad CONACyT.

Índice.

Capítulo 1. Introducción.....	8
1.1 Motivación.....	8
1.2 Estado del arte.....	10
1.2.1 Control de Reactores tubulares.....	11
1.2.2 Colocación de sensores.....	13
1.2.3 Aplicación del análisis fractal a procesos químicos.....	14
1.3 Hipótesis de trabajo.....	15
1.4 Objetivos.....	16
1.4.1 Objetivo general.....	16
1.4.2 Objetivos particulares.....	16
1.5 Estructura de la tesis.....	16
Capítulo 2. Marco teórico.....	18
2.1 Reactores tubulares.....	18
2.1.1 Modelado.....	19
2.2 Control de procesos.....	21
2.2.1 Configuración de control.....	22
2.2.2 Algoritmo PID.....	24
2.2.5 Problemas de control de procesos: perturbaciones, muestreo y ruido de medición.....	27
2.2.6 No linealidades en los sistemas de control.....	27
2.3 Colocación de sensores.....	28
2.5 Análisis fractal.....	29
2.6 Análisis de sensibilidad paramétrica.....	31
Capítulo 3. Control en cascada de reactores tubulares.....	33
3.1 Caso de estudio 1: Modelo de reactor tubular adimensional de cama fija.....	33
3.2 Caso de estudio 2: Modelo de producción de anhídrido maléico a partir de oxidación parcial de benceno.....	36
3.3 Diseño de control convencional.....	39
3.3.1 Implementación de control PI con un sensor de temperatura.....	40
3.4 Diseño de control en cascada.....	45
3.4.1 Diseño de controladores en cascada.....	45

Capítulo 4. Colocación de sensores para control en cascada de reactores tubulares.....	48
4.1 Barrido	48
4.2 Análisis fractal.	53
4.3 Análisis de sensibilidad.....	57
Capítulo 5. Conclusiones.	60
5.1 Resumen del trabajo de tesis.....	60
5.2 Conclusiones principales.....	61
5.3 Trabajo futuro.....	62
Referencias.....	63
Anexos.	67

Índice de Figuras.

Figura 2.1. Diagrama de bloques de control en cascada..	25
Figura 3.1a. Perfil dinámico <i>Hot spot</i> Caso1.....	35
Figura 3.1b. Perfil de temperatura tipo <i>Hot spot</i> Caso 1..	35
Figura 3.1c. Perfil dinámico cuasi lineal Caso1..	35
Figura 3.1d. Perfil de temperatura cuasi lineal Caso 1..	35
Figura 3.1e. Perfil dinámico oscilatorio Caso1.	36
Figura 3.1f. Perfil de temperatura oscilatorio Caso 1.	36
Figura 3.2a. Perfil dinámico de concentración de benceno. Caso 2.	39
Figura 3.2b. Perfil dinámico de concentración de anhídrido maléico. Caso 2.....	39
Figura 3.2c. Perfil dinámico de temperatura de la fase gaseosa Caso 2....	39
Figura 3.2d. Perfil dinámico de temperatura de la fase sólida del Caso 2.	39
Figura 3.3. Diagrama de bloques del controlador PI	40
Figura 3.4. perfil de concentración y temperatura tipo <i>Hot spot</i> con perturbaciones en concentración y temperatura de entrada.	41
Figura 3.5. Perfil de concentración y temperatura para el Caso 2 con perturbaciones en las condiciones de entrada.	41
Figura 3.6a. gráfica de error acumulado para perfil <i>Hot spot</i> con medición de temperatura a distintas posiciones del reactor Caso 1	42

Figura 3.6b. Gráficas de error acumulado para el Caso 2 con medición de temperatura a distintas posiciones del reactor.	42
Figura 3.7a. Error acumulado del controlador para el caso 1 <i>Hot spot</i> con un sensor de temperatura para las posiciones $\xi = 0.4, 0.5, 0.6$	43
Figura 3.7b. Error acumulado del controlador para el caso 2 con un sensor de temperatura para las posiciones $\xi = 0.3, 0.4, 0.7$	44
Figura 4.1a Error acumulado para pruebas de ponderación (a), (b), (c), (d) para el Caso 1.....	49
Figura 4.1b Error acumulado para pruebas de ponderación (e), (f), (g), (h) para el Caso 1.....	50
Figura 4.1c Error acumulado para pruebas de ponderación (i), (j), (k), (l) para el Caso 1..	50
Figura 4.2a Error acumulado para pruebas de ponderación (a), (b), (c), (d) para el Caso 1.....	51
Figura 4.2b Error acumulado para pruebas de ponderación (e), (f), (g), (h) para el Caso 2.....	52
Figura 4.2c Error acumulado para pruebas de ponderación (i), (j), (k), (l) para el Caso 2..	52
Figura 4.3a. Temperatura entrada del reactor con perturbaciones aleatorias para el comportamiento con <i>Hot spot</i> , Caso 1	54
Figura 4.3b Perfil dinámico de concentración y temperatura para el reactor tubular Caso 1 con <i>Hot spot</i> y perturbaciones a la temperatura de entrada.	54
Figura 4.4a. Temperatura de la camisa de enfriamiento del reactor con perturbaciones aleatorias para el comportamiento con <i>Hot spot</i> , Caso 1	54
Figura 4.4b Perfil dinámico de concentración y temperatura para el reactor tubular Caso 1 con <i>Hot spot</i> y perturbaciones a la temperatura de la camisa de enfriamiento.....	54
Figura 4.5a Perturbaciones aleatorias en la temperatura de la camisa de enfriamiento para el Caso 2.	55
Figura 4.5b. Perfil de temperatura dinámico para las posiciones $\xi = 0.2, 0.5, 0.8$ con perturbaciones en la temperatura de la camisa de enfriamiento.	55

Figura 4.6a Perturbaciones aleatorias en la temperatura de entrada para el Caso 2.	55
Figura 4.6b. Perfil de temperatura dinámico para las posiciones $\xi = 0.2, 0.5, 0.8$ con perturbaciones en la temperatura de entrada.	55
Figura 4.7a Exponente de Hurst contra posición ξ para el comportamiento <i>Hot spot</i> con perturbaciones a la temperatura de entrada.	56
Figura 4.7b Exponente de Hurst contra posición ξ para el comportamiento <i>Hot spot</i> con perturbaciones a la temperatura de la camisa de enfriamiento.	56
Figura 4.8a Exponente de Hurst contra posición ξ para el comportamiento cuasi lineal con perturbaciones a la temperatura de entrada.....	56
Figura 4.8b Exponente de Hurst contra posición ξ para el comportamiento cuasi lineal con perturbaciones a la temperatura de la camisa de enfriamiento.	56
Figura 4.9a Análisis fractal para la temperatura y concentración del Caso 2 con perturbaciones en la temperatura de entrada.	57
Figura 4.9b Análisis fractal para la temperatura y concentración del caso 2 con perturbaciones en la temperatura de la camisa de enfriamiento.....	57
Figura 4.10a Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el perfil <i>Hot spot</i> del Caso 1 con perturbaciones en la temperatura de la camisa de enfriamiento.	58
Figura 4.10b Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el perfil <i>Hot spot</i> del Caso 1 con perturbaciones en la temperatura de entrada.	58
Figura 4.11a Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el perfil <i>Hot spot</i> del Caso 1 con perturbaciones en la temperatura de la camisa de enfriamiento	58
Figura 4.11b Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el perfil <i>Hot spot</i> del Caso 1 con perturbaciones en la temperatura de entrada.....	58
Figura 4.12a Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el Caso 2 con perturbaciones en la temperatura de la camisa de enfriamiento..	59
Figura 4.12b Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el Caso 2 con perturbaciones en la temperatura de entrada.....	59

Acrónimos y símbolos.

Símbolo	Descripción
CEPIP	Comité de Estudios del Posgrado en Ingeniería de Procesos.
DCBI-A	División de Ciencias Básicas e Ingeniería Azcapotzalco.
UAM-A	Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco..
UV	Universidad Veracruzana.
UEA	Unidad de Enseñanza Aprendizaje.
CSTR	Reactor continuo de tanque agitado.
PFTR	Reactor de flujo tipo pistón.
P	Proporcional.
PI	Proporcional Integral.
PID	Proporcional Integral Derivativo.
PDE	Ecuaciones diferenciales parciales.
ODE	Ecuaciones Diferenciales Ordinarias.
DF	Diferencias finitas.
HS	<i>Hot spot</i> (Punto caliente).
QS	Cuasi lineal.
IMC	Internal Model Control (Control de modelo interno).

Resumen

Los reactores tubulares son difíciles de operar debido al acoplamiento entre los fenómenos de transporte, cinética no-lineal y su naturaleza distribuida. El objetivo esencial del control de reactores tubulares es la regulación de la concentración a la salida. Dado que las mediciones de composición generalmente conllevan retardos considerables debido a restricciones como el tiempo de respuesta de los equipos de medición y el transporte interno, un lazo cerrado de control basado únicamente en la composición puede sufrir un pobre desempeño e incluso inestabilidades. Para contrarrestar esta situación, un esquema de control en cascada de composición-temperatura es propuesto. El control en cascada propuesto se compone de una configuración anidada que consiste en un lazo interno de control de temperatura dirigido a cumplir el objetivo de estabilización y un lazo externo de composición con el objetivo de regular la concentración a la salida.

En las configuraciones de control en cascada de reactores tubulares, el número apropiado además de la localización de sensores es un problema abierto. Diversos estudios demuestran que los sensores pueden ser colocados en las posiciones más sensibles, es decir la posición del punto más caliente del reactor (*Hot spot*). En este trabajo se estudió el problema de la localización de sensores para una configuración de control en cascada simple empleando dos métodos. El primero utilizando series de tiempo obtenidas a partir de condiciones de entrada del reactor forzadas aleatoriamente para las cuales se realiza un análisis fractal con el objetivo de localizar las zonas más sensibles del reactor. Por otra parte se realiza un análisis de sensibilidad numérica local aproximada. Dos casos de estudio son tratados que consisten en modelos de reactor tubular de dispersión axial exhibiendo comportamientos tipo *Hot spot* y cuasi lineal.

Capítulo 1. Introducción.

En este primer capítulo se presenta una introducción al tema de estudio que consiste en la motivación del trabajo seguido por un panorama general del estado del arte sobre el control en cascada en reactores tubulares, localización de sensores en procesos distribuidos y la aplicación de análisis fractal para procesos químicos. Asimismo se define el problema, los objetivos generales y particulares del trabajo así como la estructura general de la tesis.

1.1 Motivación.

La industria química en la actualidad es uno de los principales motores de la economía del mundo, no solamente generando empleos, sino también productos que se vuelven de primera necesidad para las personas, así como alimentos y medicamentos, además de satisfacer la demanda en toda clase de mercados e industrias. La industria química tiene como equipos principales los reactores químicos y torres de destilación o absorción. Por esta razón una de las tareas más importantes de los ingenieros de procesos es mejorar la operación y desempeño de estos equipos con la finalidad de operar en forma óptima los mismos.

En años recientes, con el desarrollo de la tecnología, la demanda y la calidad de estos productos ha ido en aumento, por lo tanto, surge una constante necesidad de mejorar los procesos para incrementar la eficacia sin dejar de lado sus beneficios económicos. Tomando en cuenta que cada vez se requiere que los procesos se efectúen de acuerdo a las actuales regulaciones, como ingenieros de procesos se debe asegurar que los productos cumplan satisfactoriamente con las disposiciones establecidas de calidad manteniendo al mínimo los costos.

Desde el punto de vista de proceso, determinar las mejores condiciones de operación y asegurar el cumplimiento de estas condiciones corresponden a la optimización y el control del proceso. Esta es la principal razón para investigar sobre nuevas alternativas o implementar técnicas de control y optimización e incluso mejorar las opciones ya existentes para satisfacer los requerimientos del mercado sin acrecentar las repercusiones ambientales.

Con la finalidad de mejorar la operación de un proceso, actualmente se cuenta con herramientas cuyos resultados han sobresalido por el aporte al desarrollo de la industria como son: *i)* catálisis y diseño de reactores, *ii)* modelado y simulación, *iii)* control y optimización de procesos.

Capítulo 1. Introducción.

- i) Catálisis y diseño de reactores. El desarrollo de nuevos agentes catalizadores ayudan a reducir costos y mejorar el rendimiento general de los procesos aumentando la eficacia de las reacciones químicas, disminuyendo los tiempos de reacción, aprovechando de mejor manera las materias primas o recursos energéticos, entre otras ventajas. Por otro lado, el diseño de reactores se ocupa de determinar las dimensiones y condiciones de operación apropiadas para alcanzar la conversión deseada de un producto de interés industrial.
- ii) Modelado y simulación. La formulación de modelos y la simulación numérica correspondiente de un proceso representan una alternativa muy conveniente para estudiar el proceso y realizar inferencias sin recurrir físicamente al proceso. Esta opción resulta más favorable, por ser mucho más económico realizar una simulación y proponer distintas configuraciones del proceso para evaluar la respuesta del sistema, que hacerlo con los equipos físicos. Esto último representaría un costo muy elevado sin ninguna clase de remuneración a corto plazo. Además otra de las ventajas es que facilita la optimización del proceso y proponer e implementar esquemas de control.
- iii) Control y optimización: La determinación de las mejores condiciones de operación es una tarea de la optimización de procesos. La formulación de un problema de optimización puede incluir costos asociados al proceso a optimizar y restricciones de operación. Una vez determinadas las mejores u óptimas condiciones de operación, la tarea del control de procesos es asegurar que estas condiciones de operación se alcancen y mantengan a pesar de cambios en variables que conducen a cambios en el punto de operación óptimo. El control de procesos tiene una amplia gama de campos de aplicación pero su utilidad solo se observa a través de ser usada directamente en los procesos industriales. El control necesariamente interacciona con otras disciplinas para generar y aplicar tecnologías a situaciones reales que involucran problemas de calidad, seguridad y disposición de residuos.

En el área industrial se ha observado que la mejora de procesos no necesariamente proviene del hecho de usar nuevas tecnologías, más bien del diseño de técnicas de control y en ocasiones el conjunto entre ambos recursos. En la industria química actual se presentan objetivos que involucran mejoras de calidad en los productos, reducción de costos de producción, disminución de la contaminación, mayor flexibilidad de los procesos sujetos a cambios de mercado y de tecnología. De manera que el reto es lograr lo anterior contando con una industria ya cimentada que en

Capítulo 1. Introducción.

algunas ocasiones tiene varios años de antigüedad. Bajo esta situación el control es capaz de cubrir estos aspectos al hacer un análisis propio de cada proceso y diseñar una técnica de control adecuada que cubra dichos objetivos. Si se diseña un buen control, lo que significa que se mantendrán los valores de referencia dados en las variables de control, a bajos márgenes de variación, entonces, se mejorara la calidad y se reducirán costos de producción.

Un gran número de reacciones químicas de suma importancia se producen en reactores de lecho empacado, por ejemplo en reactores tubulares empacados con material catalítico. Comúnmente este tipo de reactores están acoplados a un intercambiador de calor cuya función es calentar el flujo de entrada con la energía del flujo de salida. En los reactores empacados, el transporte convectivo de calor y masa ocurre a diferentes velocidades y causa inestabilidades convectivas que pueden resultar en una amplificación de las perturbaciones en la temperatura de entrada del proceso, es así, como surge una necesidad de implementar esquemas de control.

El control de reactores tubulares es un problema complejo debido a la naturaleza espacio-temporal de la evolución de sus variables de operación. Muchos diseños de esquemas de control para reactores tubulares comúnmente hacen uso de múltiples mediciones a lo largo del reactor y de esquemas de control en cascada que aprovechan la respuesta más rápida de estas mediciones para mejorar la respuesta de esquemas de control con retroalimentación simple de la variable a controlar.

El problema de interés de este trabajo de tesis es el diseño de esquemas de control en cascada y el estudio de la colocación de sensores en reactores tubulares a través de técnicas convencionales (barrido simple, sensibilidad analítica aproximada numéricamente) y no convencionales (aplicación de análisis fractal para determinar regiones de operación más sensibles).

1.2 Estado del arte.

El estado del arte del control de reactores tubulares y la colocación de sensores es amplio. Por otro lado, la aplicación del análisis fractal a procesos químicos es un área que ha crecido fuertemente en años recientes. A continuación se discuten algunas de las referencias más relevantes en los temas relacionados al trabajo de esta tesis.

Capítulo 1. Introducción.

1.2.1 Control de Reactores tubulares.

A diferencia del reactor continuo de tanque agitado (CSTR), la literatura sobre control de reactores tubulares no es tan extensa, sin embargo algunos autores han indagado en técnicas de control de reactores tubulares logrando avances importantes. El objetivo del control en reactores tubulares generalmente consiste en regular la concentración del producto a la salida del reactor o la temperatura del reactor mismo.

El problema de control en la composición en reactores tubulares se ha estudiado extensamente con esquemas de control lineal y no lineal. Uno de los primeros trabajos reportados en 1970, Strangeland y Foss diseñaron un esquema de control para un modelo de reactor de flujo pistón heterogéneo adiabático mediante técnicas de control lineal. El control estuvo basado en ecuaciones linealizadas alrededor del estado estacionario deseado, obteniendo la función de transferencia que relacionaba las desviaciones en composición y temperatura con las condiciones de entrada del reactor. Más adelante, mediante técnicas de control lineal Alvarez-Ramirez et al., (2001) estudian la regulación de la concentración del sustrato a la salida de un bio-reactor tubular de tratamiento de aguas residuales mediante un controlador retroalimentado en la frontera. La estructura del controlador se basa en modelos de entrada-salida, la estructura del controlador es un compensador clásico PI.

Uno de los problemas más fuertes en la implementación de esquemas de control en reactores tubulares es el retardo en la medición de composición, dada la respuesta tardía de los dispositivos de medición. Debido al retardo en la medición de composición, un diseño de control con un lazo de retroalimentación basado únicamente en la medición de composición puede conducir a los controladores a un pobre desempeño e incluso inestabilidades. Por otro lado la medición de la temperatura puede realizarse en línea, sin retrasos. Entonces, para compensar los efectos de retardo en la literatura se ha propuesto el uso de esquemas de control en cascada composición-temperatura.

El control en cascada es una de las herramientas más útiles para el diseño de controles avanzados. Comúnmente el control en cascada se utiliza para mejorar la respuesta de un controlador de un solo lazo cuando las perturbaciones están asociadas con la variable manipulable o cuando el elemento final de control presenta un comportamiento no-lineal. Su utilidad radica en su capacidad para rechazar perturbaciones y mejorar el desempeño de los controladores (Krishnaswamy et. al. 1990). Este tipo de estrategia es usada en los procesos químicos debido a que existen

Capítulo 1. Introducción.

variables con medidas retardadas o procesos de gran capacitancia como las columnas de destilación. La implementación de una técnica de control convencional, como el uso de controladores con estructura proporcional e integral implica, retardos en las acciones de control y mal desempeño de los controladores, ya que las perturbaciones y los ruidos de medición no serán detectados al tiempo que ocurren y por lo tanto el control tardará en corregir la acción de control.

La idea de usar control en cascada se originó con el problema de rechazo de perturbaciones cuyos efectos se detectan más rápidamente en una salida de control secundaria que en la variable controlada. Entonces, el uso de control en cascada es recomendado para aquellos procesos en los cuales la dinámica de un lazo de control secundario es más rápida que la dinámica del proceso primario (Luyben, 1990). En estas condiciones la interacción entre los dos esquemas de control es prácticamente nula, debido a la diferencia en sus dinámicas y por la cual se dice que no se presentan problemas de sintonizado en el esquema de control en cascada.

En este sentido Hua y Jutan (2000) desarrollaron un esquema de control no lineal inferencial en cascada para reactores tubulares con lecho empacado, el objetivo del control es mantener fija la concentración a la salida del reactor mediante la manipulación de la temperatura de la camisa que es manipulada por los requerimientos de la temperatura del reactor y plantean una discretización mediante colocación ortogonal. Por otro lado, el control basado en técnicas de backstepping (que se basa en ideas del control en cascada), fue aplicado por Boskovic y Krstic (2002) para estabilizar globalmente la salida de un reactor tubular con dispersión axial.

Posteriormente, Urrea et al., (2006) proponen un esquema de control lineal PI (Proporcional-Integral) en cascada de composición-temperatura. El esquema de control en cascada se basa en la medición de la temperatura en un punto del reactor, debido a que el lazo de temperatura tiene una respuesta más rápida que el lazo de composición el esquema de control tiene la característica de anticiparse a perturbaciones. Sin embargo, la respuesta del controlador en cascada frente a perturbaciones depende en gran medida de la localización del sensor de temperatura a lo largo del reactor, es decir, que si el sensor de temperatura está localizado en el centro del reactor la respuesta del controlador frente a un cambio en la composición no será la misma si el sensor está localizado en la entrada o salida del reactor.

Más tarde, para complementar los resultados anteriores Urrea et. al. (2008), proponen un esquema de control en cascada empleando, para el

Capítulo 1. Introducción.

lazo de temperatura, una temperatura promedio ponderada de dos mediciones de temperatura localizadas en antes y después del Hot-Spot para el caso de estudio abordado, este esquema de control en cascada mejora la respuesta del controlador frente a perturbaciones, sin embargo la posición de los sensores se decide de manera arbitraria al igual que la ponderación de la temperatura promediada. Lo anterior da pie a desarrollar una técnica que permita determinar las posiciones óptimas al igual que el número y ponderación de los sensores.

1.2.2 Colocación de sensores.

A pesar de que los controladores en cascada basados en múltiples mediciones de temperatura han mostrado ser más eficientes que los esquemas tradicionales, existen situaciones que no han quedado totalmente claras, tales como la selección más conveniente del número de sensores, su distribución espacial y los parámetros óptimos de ponderación.

Los métodos para determinar las posiciones óptimas de los sistemas de sensores de parámetros distribuidos son especialmente útiles en investigación e ingeniería. Este es un problema esencial, especialmente para fines de estimación de parámetros. Por desgracia, todavía existe cierta distancia entre investigadores teóricos, que exploran modelos de sistemas e investigadores experimentales. Esto incentiva la mejora de los métodos que permiten la identificación de técnicas de medición óptimas de localización que representan la naturaleza espacial cambiante del sistema. Además, la práctica dicta que estos métodos deben utilizar la información recopilada en el proceso por simples procedimientos experimentales. Por tal razón en esta propuesta de investigación se propone la determinación las condiciones necesarias para el óptimo desempeño de los controladores en cascada aplicados en reactores tubulares. Para ello se implementaran análisis de sensibilidad en conjunto con técnicas fractales de las señales de temperatura perturbadas.

La localización de sensores de temperatura en los equipos es importante para tener un mejor conocimiento del comportamiento de los procesos con el fin de perfeccionar el diseño de los equipos y optimizar los procesos existentes y así incrementar la eficiencia del sistema, lo cual se traduce como mejor aprovechamiento de materias primas, menor impacto ambiental y beneficios económicos. Se emplean distintas técnicas para estudiar la apropiada colocación espacial de los sensores de temperatura. Entre las más importantes se encuentra el análisis de sensibilidad

Capítulo 1. Introducción.

paramétrica. Por ejemplo, Van den Berg et. al. (2000) proponen resolver el problema de la localización de sensores para un reactor tubular recurriendo a observadores de estado, obteniendo resultados aceptables para un modelo de oxidación parcial de benceno para producir anhídrido maléico. No obstante, el diseño se basa en la consideración de un modelo perfecto y de tiempos de retardo en la medición, además de no considerar perturbaciones. Aunque los resultados son satisfactorios para el modelo idealizado, este trabajo sirve como referencia para futuros estudios que lo complementen.

Por su parte, Orantes et al., (2007) propusieron una metodología para la localización de sensores utilizando la entropía del proceso como el parámetro que se asocia a la sensibilidad de los equipos del proceso, sin embargo esta metodología apunta a la localización de fallas en los equipos principalmente en el reactor de tanque agitado y la columna de rectificación de una planta de producción de propilenglicol. Así mismo, Alaña & Theodoropoulos (2010) propusieron un procedimiento donde la localización de sensores se plantea como un problema de optimización para la estimación de parámetros en sistemas distribuidos. Se establece una equivalencia entre el método de descomposición ortogonal óptima y las funciones de sensibilidad comparando distintos métodos de optimización, sin embargo afirman que entre más complejo sea el modelo, requiere de tratamientos matemáticos extensivos para lograr resolver satisfactoriamente la determinación de las regiones más sensibles.

Este trabajo propone una metodología alternativa al análisis de sensibilidad paramétrica para encontrar las zonas de mayor sensibilidad empleando el análisis fractal propuesto por Hurst en 1951. Una de las cuestiones más recurrentes en la literatura es el estudio de fenómenos con dependencia a largo plazo, usualmente se presentan en procesos naturales, sociales y financieros. A la fecha, gran cantidad de estos estudios se basan en la determinación del parámetro conocido como exponente de Hurst para analizar series de tiempo.

1.2.3 Aplicación del análisis fractal a procesos químicos.

El análisis fractal aplicado a procesos químicos ha sido recientemente introducido con resultados importantes. Por ejemplo Paglianti et al. (2000) diseñan una técnica para el estudio del ciclo de carga y llenado de un reactor de tanque agitado de modo que pudiesen identificar la transición líquido-gas de manera no intrusiva. Para ello recurren al análisis de series en tiempo introduciendo mínimas perturbaciones al modelo. El

Capítulo 1. Introducción.

procedimiento basado en el análisis de series de tiempo fue satisfactorio para el modelo y posteriormente fue corroborado en un reactor a escala laboratorio y sugiere la pauta para el control de sistemas multifásicos de mezclado y aeración para reactores y biorreactores gas-líquido. Para procesos donde se presentan fenómenos de corrosión, Amaya et. al. (2003) Realizan un análisis fractal al ruido electroquímico generado por un sistema de biocorrosión y logran comprobar las fluctuaciones en el potencial en el ruido electroquímico no es completamente aleatorio y que en realidad siguen un comportamiento auto similar que pudiese escapar a análisis estadísticos tradicionales. En procesos biotecnológicos, Méndez-Acosta et al. (2013) y Hernández-Martínez et al. (2014) aplican el análisis de rango re-escalado de Hurst en señales de pH de digestores anaerobios tipo secuencia lote y continuos, respectivamente. Los resultados muestran que es posible correlacionar variables clave de operación de los digestores con el exponente de Hurst.

Este tipo de análisis también se ha aplicado a imágenes de la evolución temporal de algunos procesos, tal es el caso de Velazquez-Camilo et al. (2010), quienes realizaron la caracterización para la cristalización de la caña de azúcar usando análisis fractal de micrografías. Lograron establecer una técnica para monitorear el proceso de cristalización a partir de imágenes tomadas directamente del compuesto acuoso de azúcar, actividad que hasta la fecha era realizada por el operario de manera visual. El análisis fractal provee índices que pueden ser recuperados de las imágenes que, a su vez, revelan el grado de homogeneidad de los cristales de azúcar. Es así que la dimensión fractal puede emplearse para detectar cambios en el proceso de cristalización.

1.3 Hipótesis de trabajo.

Con base al contexto que se discute previamente se identifican tres hipótesis de trabajo principales:

1. El uso de esquemas de control en cascada composición-temperatura mejoran el desempeño de los esquemas de control convencionales de composición o temperatura.
2. El desempeño de esquemas de control en cascada composición-temperatura existentes para el control de reactores se puede mejorar a través de estudios de colocación de sensores basados en análisis de sensibilidad.

Capítulo 1. Introducción.

3. El análisis fractal permitirá determinar las regiones más sensibles de un reactor tubular.

1.4 Objetivos.

1.4.1 Objetivo general.

Determinar la mejor colocación de sensores en los esquemas de control en cascada basados en múltiples mediciones de temperatura aplicados a reactores tubulares con base a técnicas convencionales y no convencionales.

1.4.2 Objetivos particulares.

- Estudiar las propiedades de los procesos que permitan la implementación de algoritmos de control en cascada.
- Seleccionar y resolver numéricamente diferentes modelos de reactores tubulares.
- Estudiar los efectos de incorporar múltiples mediciones de temperatura en los controladores en cascada clásicos.
- Estudiar la sensibilidad de los casos de estudio mediante técnicas de análisis fractal para determinar las posiciones adecuadas para colocación de sensores.
- Verificar la robustez del controlador propuesto mediante el análisis del comportamiento del sistema a lazo cerrado en presencia de perturbaciones.

1.5 Estructura de la tesis.

Capítulo 1. Introducción.

Este trabajo está organizado en cinco capítulos, incluyendo la introducción general del mismo que se discute en este Capítulo. El Capítulo 2 presenta el marco teórico que se utiliza en el desarrollo del trabajo de tesis. En particular se presentan conceptos y herramientas generales sobre reactores tubulares, control de procesos, análisis de sensibilidad, y análisis fractal. En el Capítulo 3 se describen primero dos casos de estudio de reactores tubulares. Después se presenta el diseño de los esquemas de control en cascada para los dos casos de estudio. El Capítulo 4 se presenta la aplicación del análisis fractal para determinar las regiones de mayor sensibilidad en los casos de estudio. En este Capítulo se presenta además la aplicación de dos técnicas convencionales (barrido, sensibilidad numérica aproximada) para determinar regiones de mayor sensibilidad de los casos de estudio. En el Capítulo 5 se presenta una breve recapitulación del trabajo desarrollado en esta tesis, conclusiones generales, y se identifican líneas de investigación abiertas. Finalmente, en la sección de anexos se presentan ejemplos de los códigos utilizados en un caso de estudio.

Capítulo 2. Marco teórico.

En este capítulo se presenta el marco teórico que soporta las técnicas y herramientas de control de procesos, estudios de sensibilidad y análisis fractal que se utilizan en este trabajo de tesis. Además se presentan las características generales de los reactores tubulares.

2.1 Reactores tubulares.

Los principales reactores en la industria química son el reactor tanque agitado y el reactor tubular. Para algunas reacciones químicas los reactores tubulares son más eficientes que los reactores tanque agitado, especialmente cuando los volúmenes son iguales (Froment et al. 1990). Además el reactor tubular puede operarse a largos tiempo sin necesidad de mantenimiento y usualmente produce mejores conversiones por unidad de volumen que cualquier reactor de flujo continuo. El reactor tubular, en general, es cualquier reactor de operación continua en el que hay movimiento constante de uno o de todos los reactivos en la dirección promedio (los reactivos entran en un extremo del sistema y salen por el otro) y en el cual no se hace intento alguno por inducir el mezclado entre los elementos del fluido en algún punto a lo largo de la dirección del flujo (Froment et al. 1990).

El uso de los reactores tubulares se aplica a una gran cantidad de reacciones en fase gas y algunas en fase líquida. Por ejemplo la destilación fraccionada térmica de hidrocarburos para obtener etileno, la sulfonación de olefinas, entre otras. En estas reacciones homogéneas el reactor contiene solo el fluido reaccionante. Los reactores tubulares se emplean de igual forma para reacciones catalíticas. En este caso, el reactor se encuentra empacado con partículas de catalizador sólido y es por esta razón que se le conoce como reactor de cama empacada (Froment et al. 1990).

Los reactores tubulares en ocasiones funcionan en condiciones adiabáticas y otras con transferencia de calor a través de la pared. En el primer caso la temperatura se eleva naturalmente a lo largo de la dirección del flujo si la reacción es exotérmica y decae si la reacción es endotérmica. En muchos casos es necesario calentar los reactivos antes de que entren a la zona de reacción ya que de otra manera la reacción sería demasiado lenta, pero una vez iniciada la reacción, con frecuencia es necesario eliminar calor a través de la pared para evitar que la temperatura aumente de forma excesiva (Froment et al. 1990).

Capítulo 2. Marco teórico.

En el caso no adiabático la temperatura tiende a elevarse inicialmente a pesar del enfriamiento externo debido a la elevada rapidez inicial de la reacción. Sin embargo la temperatura de fluido reaccionante empieza a disminuir con el tiempo, que es resultado de que la rapidez de desprendimiento de calor caiga por debajo de la rapidez inicial de la reacción. También se presentan variaciones radiales en temperatura, en especial si el fluido reaccionante y el catalizador tiene bajas conductividades térmicas. En las reacciones exotérmicas se producen temperaturas más altas, naturalmente en aquellas partes del reactor que están más apartadas de la superficie en que se elimina calor. En general, la presencia de una zona o punto caliente en el reactor puede tener efectos adversos como la aparición de reacciones no deseadas. Para dispersar de manera efectiva el calor, es evidente que el diámetro de un reactor tubular cilíndrico debe ser pequeño, con el fin de reducir la distancia a través de la cual se conduce el calor hasta la pared. Sin embargo, cuando existen razones de otra índole que obligan a seleccionar un diámetro grande o a colocar el catalizador en grandes charolas, puede ser necesario colocar serpentines de enfriamiento en el seno del catalizador (Froment et al. 1990).

2.1.1 Modelado.

Antes de realizar cualquier análisis, el modelo de concentración y temperatura debe ser derivado, en este caso se parte de los balances de masa y energía en un volumen de control. El mecanismo por el cual el calor o la masa se dispersan en una cama empacada a través de la cual un fluido está fluyendo ha sido objeto de una gran atención (Amundson & Aris, 1980, Froment et al. 1990). Se ha supuesto que la dispersión de calor y masa en la dirección axial y radial es un proceso difusional superpuesto al flujo convectivo de esta forma el efecto global se describe por un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales parabólicas (por ejemplo segunda derivada en el término dispersivo de calor y de masa). Estas ecuaciones se simplifican por lo general para el caso simétrico en la dirección radial. La dispersión radial de masa y calor en reactores catalíticos sólido-gas de cama fija se expresa usualmente por los números de Peclet para transporte de masa y calor. En muchos casos la dispersión radial es despreciable si el reactor es adiabático debido a que no existe una fuerza motora para gradientes elevados en la dirección radial. Para reactores no adiabáticos, el coeficiente de transferencia de calor en la pared entre la mezcla reactante y el medio de enfriamiento se debe especificar.

Capítulo 2. Marco teórico.

La reacción general que ocurre en un reactor de cama fija exotérmica de primer orden puede ser descrita como:

donde A es el reactante, B es el producto de reacción. La velocidad de reacción de A está dada por:

Con las siguientes consideraciones (Bilous & Amundson, 1955):

- Perfil de velocidad plano v_z
- Dispersión de masa D_L , conductividad térmica K_L , capacidades caloríficas C_{ps} y C_{pf} , densidades ρ_s , ρ_f y calor de reacción $-\Delta H$ constantes.
- El término de reacción tiene dependencia de la temperatura tipo Arrhenius.

Bajo tales consideraciones, las ecuaciones del modelo de dispersión axial pseudo-homogéneo son dos ecuaciones diferenciales parciales parabólicas no-lineales acopladas para la concentración del reactante y la temperatura.

$$\epsilon_p \frac{\partial c(z, t)}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c(z, t)}{\partial z^2} v_z \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} - k_0(1 - \epsilon_p)c(z, t)e^{-E_A/RT(z, t)} \quad (2.1a)$$

$$\begin{aligned} [\epsilon_p \rho_f C_{pf} + (1 - \epsilon_p) \rho_s C_{ps}] \frac{\partial T(z, t)}{\partial t} = & K_L \frac{\partial^2 T(z, t)}{\partial z^2} - \rho_f C_{pf} v_z \frac{\partial T(z, t)}{\partial t} \\ & + (-\Delta H)k_0(1 - \epsilon_p)T(z, t)e^{\frac{-E_A}{RT(z, t)}} - \frac{4}{d_r} U_\omega (T(z, t) - T_\omega(z, t)) \end{aligned} \quad (2.1b)$$

donde c y T representan la concentración y temperatura D_L y K_L son los coeficientes de dispersión longitudinal v_z es la velocidad del gas. Los subíndices f , s , ω , denotan la fase del fluido, del sólido y de la pared del reactor respectivamente. ϵ_p y d_r es la porosidad de la cama y el diámetro. k_0 y E_A son los parámetros de la expresión de Arrhenius. U_ω es el coeficiente de transferencia de calor global entre el reactor y el medio de enfriamiento. El efecto de la dispersión de calor radial puede incluirse en

Capítulo 2. Marco teórico.

U_ω realizando una aproximación en un punto de la colocación al perfil de temperatura radial.

Las condiciones iniciales y de frontera para resolver el problema en particular son:

$$c(z, 0) = c_{in}(z), \quad T(z, 0) = T_{in}(z) \quad (2.2)$$

$$D_L \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} \Big|_0 = v_z [c_o(t) - c(0, t)] \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial c(z, t)}{\partial z} \Big|_\ell = 0 \quad (2.4)$$

$$K_L \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \Big|_0 = \rho_f C_{pf} [T_o(t) - T(0, t)] \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \Big|_\ell = 0 \quad (2.6)$$

La simulación del modelo de reactor tubular 2.1 consiste en resolver el sistema de ecuaciones. Aunque existen diversas metodologías para hacerlo, en este trabajo se recurre al método de discretización por diferencias finitas debido a la simplicidad del método. Consiste en la representación de las derivadas en una función en términos de series de Taylor finitas, con puntos específicos dentro de un dominio denominado puntos malla. El dominio está dividido en puntos equidistantes cuya principal ventaja es la fácil implementación sin embargo en algunos casos es necesario un gran número elevado de puntos de malla para obtener una alta precisión.

2.2 Control de procesos.

El control es una herramienta utilizada en muchos campos, sin embargo, una de las áreas que se ven mayormente beneficiadas es particularmente es el área de procesos industriales. No obstante el control necesariamente interactúa con otras disciplinas para generar y mejorar tecnologías a problemas reales, por ejemplo, asegurar la calidad del producto final,

Capítulo 2. Marco teórico.

mantener el proceso dentro de los límites de seguridad, cumplir con las normatividades ambientales, entre otros.

El control de procesos ofrece múltiples ventajas, pues, además de ayudar a generar y diseñar nuevos procesos, ofrece la ventaja de mejorar los ya existentes que llevan un largo tiempo operando con el objetivo de mejorar constantemente la calidad de los productos, reducir costos de producción, aminorar el impacto ambiental, dar mayor flexibilidad a los procesos que son especialmente susceptibles a cambios del mercado. Bajo esta premisa, el control es capaz de cubrir estos aspectos al ofrecer un tratamiento específico para cada proceso y diseñar una estrategia adecuada para cumplir los objetivos.

El control de procesos en el ámbito industrial involucra el control de variables tales como temperatura, presión, flujo, etc., particularmente útil en procesos continuos que van desde procesamiento de minerales y de refinación, hasta procesamiento de alimentos y productos farmacéuticos.

Los procesos químicos generalmente presentan distintas características como comportamiento dinámico no lineal, interacción entre variables manipuladas y controladas, variables no medibles, perturbaciones frecuentes y no detectables, restricciones sobre variables manipuladas, parámetros que varían con el tiempo, entre muchas otras.

2.2.1 Configuración de control.

La configuración de control consiste en la selección y colocación de los actuadores y sensores sobre el sistema a ser controlado y es el ingeniero de control debe definir qué señales en el sistema serán medidas y con qué sensor. En un proceso industrial, por ejemplo, el ingeniero de control debe decidir cuáles son las variables críticas (temperaturas, velocidades de flujo, presiones, concentraciones, etc.). Además de elegir el tipo de transductor y el hardware para la adquisición de datos, entre otros elementos.

El propósito de un sistema de control es construir un controlador de manera que el sistema a lazo cerrado cumpla con ciertas características deseadas mediante la adición de sensores, procesadores de control y actuadores. Los sensores miden las señales en el sistema, los actuadores se emplean para manipular alguna de las variables de entrada que afecte a la variable que se desea controlar y la función del controlador es: dada una medición y una especificación del valor deseado, calcular una señal de salida del control adecuada que logre que el desempeño del sistema se cumpla. El controlador (o ley de control) describe el algoritmo que utiliza el

Capítulo 2. Marco teórico.

procesador de control para generar señales al actuador a partir de las mediciones del sensor y de las señales que recibe.

En general el procedimiento pasa el diseño de un sistema de control puede enunciarse como sigue:

1. Seleccionar los actuadores y los sensores además de especificar el comportamiento deseado.
2. Modelar el comportamiento del proceso real por un conjunto de ecuaciones diferenciales.
3. Diseñar una ley de control para el sistema.
4. Analizar y simular el esquema de control resultante.
5. Implementar el esquema de control.

La principal meta del diseño de control, por ejemplo para una planta química industrial, es cumplir con ciertas especificaciones de desempeño. La medida en que el controlador realice su función correctamente se le conoce como robustez. Las especificaciones de desempeño describen cómo debe comportarse el sistema a lazo cerrado.

La robustez cuantifica el efecto de las incertidumbres del modelo sobre las propiedades de un sistema a lazo cerrado tales como la estabilidad y desempeño. Debido a que siempre existe una diferencia entre el modelo y el proceso verdadero, la robustez debe ser una parte integral del diseño de control. Tales perturbaciones pueden ser por ejemplo características del sistema que pueden cambiar, o imprecisiones en el modelado o identificación del modelo e incluso fallas ordinarias tales como fallas en actuadores y sensores.

Por otra parte el sistema de control puede sufrir problemas potenciales durante operación anormal o en puntos de operación que no son los mismos del diseño. Por ejemplo, las ganancias del proceso y constantes de tiempo pueden cambiar drásticamente haciendo necesario el re-sintonizado del controlador.

Las especificaciones de robustez pueden tomar varias formas, por lo general está dada por márgenes garantizados. Es decir, el sistema de control debe tener la capacidad para lograr alguna especificación de desempeño a pesar de algún conjunto de perturbaciones.

Capítulo 2. Marco teórico.

Además de la meta y de las especificaciones mencionadas en los párrafos anteriores, existen muchas restricciones sobre la ley de control misma. Estas especificaciones de la ley de control se relacionan generalmente con la implementación del controlador. (i.e., el controlador tiene una forma específica, como PID, y/o el controlador es lineal e invariante en el tiempo).

2.2.2 Algoritmo PID.

Existen muchos tipos de controladores diferentes, pero el controlador retroalimentado más ampliamente utilizado es el algoritmo proporcional integral y derivativo (PID). Existen muchas variaciones pero la definición del algoritmo PID es:

$$m(t) = K_p e(t) + K_i \int_0^t e(t) dt + K_d [de(t)/dt] \quad (2.1)$$

donde $e(t) = y_{ref} - y(t)$ el término $K_p e(t)$ proporciona una acción de control proporcional al error. El término integral ajusta la salida del controlador en forma continua hasta que el error llega a cero. El término derivativo proporciona un tipo de predicción que permite al controlador anticipar errores futuros. Al aplicar la transformada de Laplace de la ecuación (PID), ésta toma la forma:

$$m(s) = \left[K_p + \frac{K_i}{s} + K_p s \right] e(s) \quad (2.2)$$

El término entre corchetes se denomina función de transferencia y la salida se calcula siempre como el producto de la función de transferencia por la entrada. Una de las tareas del ingeniero de control es definir la forma del controlador (por ejemplo PID) y elegir los valores apropiados para las constantes del controlador. Mediante un análisis de estabilidad para sistemas con controladores PID se puede mostrar que un controlador pobremente definido puede resultar en un sistema inestable.

La naturaleza no intuitiva de la ecuación (2.1) y los problemas asociados con la elección adecuada de las constantes del controlador son las principales ventajas del algoritmo PID. La ventaja obvia del controlador PID es su simplicidad. Entonces existe una necesidad para diseñar mejores técnicas y estrategias de control que reduzcan la necesidad de una experiencia extensiva y de iteraciones de prueba y error. Los controladores simples P o PI consisten en pocos parámetros a especificar los cuales pueden ser definidos empíricamente, sin embargo el esquema conocido

Capítulo 2. Marco teórico.

como control en cascada es especialmente útil para diseñar sistemas de control más complejos (Bequette, 2003).

2.2.3 Control en cascada.

Una de las grandes ventajas que ofrece el control en cascada es la capacidad de rechazar perturbaciones y mejorar el desempeño de los controladores. Esta estrategia es recurrente en procesos industriales principalmente porque las variables regularmente conllevan un retraso en la medición o procesos de gran capacitancia como columnas de destilación en las cuales el control convencional, por ejemplo P o PI implica retardos en las acciones de control y un mal desempeño de los controladores individuales debido a que las perturbaciones y ruido en las mediciones no serían detectados al tiempo que ocurren y por lo tanto la acción de control será demorada.

La idea de usar control en cascada se originó con el problema de rechazar perturbaciones cuyos efectos se detectan más rápidamente en una salida de control secundaria que en la variable controlada. Entonces, el uso de control en cascada es recomendado para aquellos procesos en los cuales la dinámica de un lazo de control secundario es más rápida que la dinámica del proceso primario (Luyben, 1990):

Figura 2.1. Diagrama de bloques de control en cascada

En estas condiciones la interacción entre los dos esquemas de control es prácticamente nula, debido a la diferencia en sus dinámicas y por la cual se dice que no se presentan problemas de sintonizado en el esquema de control en cascada. Por otra parte Hua y Jutan (2000) desarrollaron un esquema de control no lineal inferencial en cascada para reactores tubulares con lecho empacado, el objetivo del control es mantener fija la concentración a la salida del reactor mediante la manipulación de la

Capítulo 2. Marco teórico.

temperatura de la camisa que es manipulada por los requerimientos de la temperatura del reactor y plantean una discretización mediante colocación ortogonal.

Poco después, mediante técnicas de control lineal Alvarez-Ramirez et. al. (2001) estudian la regulación de la concentración del sustrato a la salida de un bio-reactor tubular de tratamiento de aguas residuales mediante un controlador retroalimentado en la frontera. La estructura del controlador se basa en modelos de entrada-salida, la estructura del controlar es un compensador clásico PI.

2.2.4. Sintonizado.

Existe un gran número de métodos de sintonizado para los controles retroalimentados aunque probablemente un 80% de los lazos de control se sintonizan experimentalmente. Sin embargo en este trabajo se emplea las reglas de sintonizado IMC propuestas por Morari et. al., 1989.

$$k_c = \frac{\tau_p}{k_p \lambda} \qquad \tau_I = \tau_p \qquad (2.3)$$

donde k_c es la ganancia del controlador, τ_p es la constante de tiempo del proceso, τ_I es la constante de tiempo integral y λ es el parámetro de sintonizado. El procedimiento de diseño de un PID basado en IMC para un proceso de primer orden, resulta en una ley de control PI. La principal diferencia es que ya no existen dos grados de libertad en el sintonizado en los parámetros k_c y τ_I , el procedimiento muestra que únicamente las ganancias proporcionales necesitan ser ajustadas. El tiempo integral simplemente se define igual a la constante de tiempo del proceso. Nótese que la ganancia proporcional es inversamente proporcional a λ . Lo cual tiene sentido si λ es pequeño (lazo cerrado “rápido”) la ganancia del controlador debe ser grande. De igual manera si λ es grande (lazo cerrado “lento”) la ganancia del controlador debe ser pequeña. Este procedimiento puede emplearse para obtener un controlador PID + tiempo muerto equivalente (Bequette, 2003).

Capítulo 2. Marco teórico.

2.2.5 Problemas de control de procesos: perturbaciones, muestreo y ruido de medición.

Para mejorar el entendimiento acerca del control de procesos, una serie de conceptos básicos deben ser introducidos con el objetivo de diseñar esquemas de control de procesos dinámicos (Bequette, 2003).

Perturbaciones: El rechazo a las perturbaciones es un aspecto importante de cualquier sistema de control, y en muchos casos es el principal objetivo. Habitualmente las perturbaciones típicas consisten en perturbaciones de carga, errores de medición y variaciones en los parámetros del sistema. Las perturbaciones de carga pueden deberse a las variaciones en la calidad del flujo de entrada o incluso a variaciones a la demanda de flujo. En sistemas isotérmicos las perturbaciones de carga pueden deberse a variaciones en la temperatura del ambiente. Por lo general las perturbaciones de carga varían lentamente.

Errores de medición: los errores de medición se localizan en los sensores. Éstos errores pueden deberse a una mala calibración del sensor en el estado estacionario o causado por la dinámica del sensor si el sistema se encuentra en estado no estacionario.

Las variaciones en los parámetros: el ruido de medición y las perturbaciones en la teoría lineal se consideran que aparecen aditivamente. Sin embargo, los sistemas reales no son lineales, lo cual implica que las perturbaciones ingresan de manera más compleja al sistema. El proceso de linealización del modelo no lineal puede conducir a perturbaciones que aparecen como variaciones en los parámetros del modelo lineal.

2.2.6 No linealidades en los sistemas de control.

Las no linealidades se pueden presentar en cualquier parte de un sistema de control conduciendo a un sistema de control no lineal. Las no linealidades pueden clasificarse en continuas y discontinuas o “duras” debido a que no pueden aproximarse localmente por funciones lineales. Algunas no linealidades frecuentes en los sistemas de control son saturación, zonas muertas, muestreo y ruidos de medición (Bequette, 2003).

Saturación: Se presenta principalmente cuando se incrementa la entrada a un instrumento físico. Si la entrada es pequeña, conduce a un incremento proporcional a la salida generalmente, cuando la entrada logra un cierto nivel, un incremento adicional no produce un incremento en la salida, lo

Capítulo 2. Marco teórico.

cual hace que la salida se quede en un valor máximo. En tanto que un decremento en la entrada conduce a un valor mínimo. Cuando esto sucede se dice que ocurre una saturación. Una no linealidad de saturación es, por lo general, provocada por los límites, las propiedades del material y el poder disponible de algún componente. La mayoría de los actuadores despliegan algunas características de saturación.

Zonas muertas: en la mayoría de los instrumentos físicos, la salida es cero hasta que la magnitud de la entrada excede cierto valor. Tal relación entrada-salida se denomina zona muerta. Estas zonas muertas pueden conducir a inestabilidades en el sistema debido a la ausencia de respuesta en esta zona.

Muestreo y ruidos de medición: en sistemas de control que usan las computadoras digitales como procesadores de control, las señales se muestran a intervalos regulares, los cuales pueden diferir para señales diferentes. En algunos casos estos intervalos son suficientemente cortos que las señales muestreadas son buenas aproximaciones de las señales continuas, pero en muchos casos los efectos del muestreo deben ser considerados en el diseño de control. Por lo general el desempeño de un controlador digital mejora con el incremento de la velocidad de muestreo, pero el costo puede aumentar con un muestreo más veloz. Un decremento en la velocidad de muestreo implica más tiempo disponible para los cálculos de control y por lo tanto es posible disponer de computadoras más pequeñas para una función de control específica o bien mayor capacidad de control está disponible para la computadora.

Efecto del ruido de la medición: La presencia de ruido en las mediciones conduce a un problema de control más difícil, pero es una característica inherente en las aplicaciones de procesos. En algunas aplicaciones el ruido es insignificante o puede removerse por filtros simples. Sin embargo en muchas otras aplicaciones debe tratarse directamente.

2.3 Colocación de sensores.

La localización de sensores consiste en determinar la posición adecuada de los equipos de medición sobre el sistema para alimentar esta información a los sistemas de monitoreo y control. Los procesos químicos requieren sistemas de supervisión automatizados con el objetivo de detectar comportamientos anormales. Es así que, la eficiencia de diagnóstico del sistema depende del número de sensores del sistema y la selección de las variables del proceso más importantes para ser monitoreadas.

Capítulo 2. Marco teórico.

Incrementar el número de sensores incrementaría la cantidad de información obtenida del sistema, sin embargo, el costo de instrumentación asociado a las mediciones del sistema también se incrementa (Orantes et al. 2007) además de que toda la información recabada podría no resultar útil y dificultar la operación de los sistemas de monitoreo (Orantes et al. 2008). El problema de la colocación óptima de sensores es de crucial importancia dado que la calidad del producto se ve afectada debido a la capacidad del sistema de obtener información del proceso y responder, por ejemplo, con una acción de control pertinente.

Algunas de las técnicas propuestas recurren al uso de observadores de estimación de estados para sistemas de parámetros distribuidos (Vande Wouwer et al., 1999), análisis de entropía (Orantes et al., 2008) como referencia para posicionar los sensores en procesos industriales con el fin de diagnosticar fallas en los equipos. Sin embargo aún no queda perfectamente elucidada una metodología específicamente diseñada para estudiar la apropiada colocación espacial de los sensores de temperatura en un reactor tubular con el fin de alimentar un esquema de control en cascada.

El análisis de sensibilidad paramétrica es una de las herramientas más recurrentes para la determinación de posibles zonas donde los sensores de temperatura pueden ser localizados en procesos. Éste trabajo propone una metodología alternativa al análisis de sensibilidad paramétrica para encontrar las zonas de mayor sensibilidad empleando el análisis fractal propuesto por Hurst en 1951.

2.5 Análisis fractal.

Los fenómenos físicos están descritos por modelos matemáticos o por observaciones realizadas secuencialmente en intervalos predeterminados y de igual o aproximadamente igual duración. Y pueden estar regidos por una variable o múltiples variables. El comportamiento de los sistemas puede ser descrito en el análisis de series de tiempo como procesos determinísticos o procesos estocásticos. Se le llama proceso determinístico a aquel en donde las entradas producirán invariablemente las mismas salidas, éste es el caso de los modelos matemáticos. En cambio en el proceso determinístico las variables evolucionan en función de otra variable, usualmente el tiempo, en forma total o parcialmente aleatoria. Es común ver este tipo de sistemas en variadas clases de procesos, algunos ejemplos de ello son procesos naturales, industriales hasta procesos financieros (Cajueiro & Tabak, 2005).

Capítulo 2. Marco teórico.

El análisis fractal pertenece a los métodos no convencionales para el análisis de series de tiempo. En la literatura existen principalmente dos métodos, el primero de ellos aborda el problema desde un enfoque paramétrico, el cual consiste en determinar un parámetro conocido como exponente de Hurst o relacionarlo con algún otro parámetro del sistema (Hurst, 1951). El segundo consiste en desarrollar estadística para probar hipótesis.

El análisis de series en tiempo nos permite identificar patrones de comportamiento de una sucesión de observaciones que evoluciona a lo largo del tiempo, es decir si siguen una tendencia o un comportamiento sistemático. Si existe un patrón es posible caracterizar el comportamiento del fenómeno, predecir su comportamiento en tiempo futuro o extraer componentes no observables o señales que reflejan más fielmente la evolución de la variable de interés.

El cálculo del exponente de Hurst se realiza evaluando el cálculo conocido como R/S el cual es el rango de las sumas de las desviaciones estándar a la media, re-escalado por la desviación estándar. Cuya metodología se ilustra a continuación (Hurst, 1951). Si se tiene una serie de tiempo, por ejemplo $X = \{x_1, x_2, x_3 \dots x_n\}$ con $n > 2000$:

- 1) Se calcula la media:

$$m = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

- 2) Se crea una media ajustada:

$$Y_t = x_t - m$$

para $t = 1, 2, 3, \dots, n$.

- 3) Serie de desviación estándar acumulada:

$$Z_t = \sum_{i=1}^n Y_i$$

para $t = 1, 2, 3, \dots, n$.

- 4) Cálculo del rango:

$$R(n) = \max(Z_1, Z_2, Z_3, \dots Z_n) - \min(Z_1, Z_2, Z_3, \dots Z_n)$$

5) Cálculo de la desviación estándar:

$$S(n) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - m)^2}$$

6) Rango re-escalado: $R(n)/S(n)$

Finalmente Hurst en 1951 manifestó que el rango re-escalado para una gran cantidad de datos con respecto al tiempo, puede describirse bien por la siguiente relación empírica:

$$\left(\frac{R}{S}\right)_n = \left(\frac{n}{2}\right)^H$$

en donde H puede determinarse graficando $(R/S)_n$ contra n en una gráfica log-log y obteniendo la pendiente de la línea recta lo cual corresponde directamente a la dimensión fractal del proceso. Dependiendo del valor de H , puede clasificarse el comportamiento del sistema, es decir si $H = 1$ el sistema es completamente determinístico, con $H = 0.5$ se dice que el comportamiento del sistema es completamente estocástico.

En este trabajo se estudian series de tiempo en las cuales se introduce una variación de magnitud aleatoria a parámetros del sistema, por ejemplo, una variable de interés como la temperatura de la camisa de enfriamiento, pues es la variable idónea que se ajusta para controlar la temperatura del reactor y ésta a su vez la concentración a la salida del reactor. Es así que se recurre al análisis del exponente de Hurst para relacionarlo con la sensibilidad del reactor, lo cual nos permitiría determinar las mejores posiciones, así como el número adecuado, de sensores de temperatura a lo largo del reactor.

2.6 Análisis de sensibilidad paramétrica.

El análisis de sensibilidad en distintos puntos del reactor se emplea para lograr extraer información pertinente para lograr determinar el número de sensores más conveniente y la ubicación espacial. Es posible determinar las zonas de mayor sensibilidad a lo largo del reactor y de esta manera

Capítulo 2. Marco teórico.

seleccionar los puntos donde sea más adecuado colocar sensores de temperatura.

El método de sensibilidad local relativa (Zeng et al. 2005) es empleado para evaluar los cambios en la concentración en la salida del reactor al igual que la temperatura debido a cambios en los parámetros del modelo. El método consiste en la siguiente ecuación:

$$T_{ij} = \frac{\partial C_i(t, p_j) / C_i(t, p_j)}{\partial p_j / p_j} = \frac{\partial \ln C_i(t, p_j)}{\partial \ln p_j}$$

donde T_{ij} es el elemento ij de la función de sensibilidad adimensional y denota a) la concentración y b) la temperatura del reactor a la salida a cualquier tiempo del proceso, y p_j es el elemento j de un parámetro del sistema. En la práctica la aproximación por diferencias finitas es usada para evaluar T_{ij} como se describe a continuación donde el factor de perturbación δ se establece en 5% para todos los cálculos. El valor de δ es elegido de manera que las diferencia en la respuesta en la función de sensibilidad sea detectable.

$$T_{ij} \approx \frac{C_i(t, p_j + \delta p_j) - C_i(t, p_j)}{\delta p_j} \times \frac{p_j}{C_i(t, p_j)}$$

Capítulo 3. Control en cascada de reactores tubulares.

En este capítulo se presenta el modelo y comportamiento dinámico de dos casos de estudio: (i) Un modelo adimensional con reacción irreversible de primer orden y (ii) un modelo que describe la producción de anhídrido maléico por medio de la oxidación parcial de benceno. Se presenta además el diseño de esquemas de control en cascada composición-temperatura para los dos casos de estudio.

3.1 Caso de estudio 1: Modelo de reactor tubular adimensional de cama fija.

El primer caso que se estudia es el modelo de un reactor tubular de cama fija pseudo-homogéneo al introducir las variables adimensionales de la Tabla 3.1 con $Le = 1$ obtenemos el modelo adimensional con reacción de primer orden e irreversible (Varma & Aris, 1977). El modelo considera gradientes de concentración y asume que no existe velocidad radial, las propiedades de la mezcla de reacción está caracterizada por valores promediados, el mecanismo de mezcla axial se describe por un modelo de un solo parámetro y una cinética de primer orden.

Tabla 3.1 Valor de las variables adimensionales.

$c = \frac{c - c_0}{c_0}$	$\lambda = \frac{E_A}{RT_0}$	$Pe_m = \frac{v_z \ell}{D_L}$	$Le = \frac{\epsilon_p \rho_f C_{pf} + (1 - \epsilon_p) \rho_s C_{ps}}{\epsilon_p \rho_f C_{pf}}$
$T = \frac{T - T_0}{T_0} \frac{E_A}{RT_0}$	$t = \frac{tv_z}{\epsilon_p \ell}$	$Pe_h = \frac{v_z \ell \rho_f C_{pf}}{K_L}$	$B = \frac{(-\Delta H)c_0}{\epsilon_p \rho_f C_{pf}}$
$T_j = \frac{T_\omega - T_0}{T_0} \frac{E_A}{RT_0}$	$z = \frac{z}{\ell}$	$Da = \frac{\ell(1 - \epsilon_p)k_0 e^{-\lambda}}{v_z}$	$\sigma = \frac{4U_\omega}{v_z d_r \rho_f C_{pf}}$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{Pe_m} \frac{\partial^2 c}{\partial^2 \xi} - \frac{\partial c}{\partial \xi} + Da(1 - c)e^{\left(\frac{T}{1+T/\lambda}\right)} \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{Pe_h} \frac{\partial^2 T}{\partial^2 \xi} - \frac{\partial T}{\partial \xi} + BDa(1 - c)e^{\left(\frac{T}{1+T/\lambda}\right)} + \sigma(T_j - T) \quad (3.1b)$$

Capítulo 3. Control en cascada.

donde $c = c(\xi, t)$ y $T = T(\xi, t)$. Las condiciones iniciales son:

$$c(\xi, 0) = 0$$

$$T(\xi, 0) = 0$$

y las condiciones de frontera:

$$\frac{dc(0, t)}{d\xi} = Pe_m c(0, t)$$

$$\frac{dT(0, t)}{d\xi} = Pe_h T(0, t)$$

$$\frac{dc(1, t)}{d\xi} = 0$$

$$\frac{dT(1, t)}{d\xi} = 0$$

donde Da es el número de Damköler, Pe_m y Pe_h son los números de Péclet para transferencia de masa y calor respectivamente, σ es el coeficiente de transferencia de calor adimensional. B es el coeficiente adimensional del incremento de temperatura adiabático y λ es la energía de activación adimensional.

Este modelo de reactor tubular tiene la peculiaridad de exhibir distintos comportamientos según el valor de los parámetros adimensionales y así poder proponer distintos casos de estudio, por ejemplo, comportamiento cuasi lineal, *Hot spot* u oscilaciones periódicas. Al realizar el análisis numérico se estudia la influencia de parámetros como Damköler y el número de Peclet. Esto es, cuando Da es alto, el proceso es dominado por la reacción, al contrario, si el Da es bajo el proceso está dominado por el transporte. Por otra parte cuando el número de Peclet es pequeño o tiende a cero, el transporte está dominado por la difusión, a su vez si Pe es alto el transporte es dominado por la convección.

A continuación se muestran las simulaciones de distintos casos de estudio con el modelo de reactor tubular con la finalidad de ilustrar que el mismo modelo puede presentar distintos comportamientos de acuerdo a los parámetros del sistema. Los valores de los parámetros son los propuestos por Varma & Aris (1977). La Tabla 3.2 muestra los valores de los parámetros adimensionales que generan un comportamiento tipo *Hot spot*, cuasi lineal y oscilaciones periódicas.

Capítulo 3. Control en cascada.

Tabla 3.2 Valores de los parámetros adimensionales para el modelo de reactor tubular.

	Da	λ	Pe_m	Pe_h	σ	B	T_j
<i>Hot spot</i>	0.875	20	5	5	5	5	0.1
Cuasi lineal	0.174	20	5	5	2.25	11	0.1
Oscilaciones	0.185	20	5	5	3	14	0.1

Figura 3.1a. Perfil dinámico *Hot spot* Caso1.

Figura 3.1b. Perfil de temperatura tipo *Hot spot* Caso 1.

Figura 3.1c. Perfil dinámico cuasi lineal Caso1.

Figura 3.1d. Perfil de temperatura cuasi lineal Caso 1.

Figura 3.1e. Perfil dinámico oscilatorio Caso 1.

Figura 3.1f. Perfil de temperatura oscilatorio Caso 1.

La figura 3.1a y 3.1b muestran la dinámica tipo *Hot spot*, seguidas por la dinámica cuasi lineal y por último el comportamiento oscilatorio periódico 3.1f y 3.1f. Puede observarse que a medida que el proceso está dominado por la reacción, el sistema tiende a producir un *Hot spot*, también puede observarse que si el coeficiente adimensional de transferencia de calor tiende a producir un comportamiento cuasi lineal, en cambio valores intermedios para ambos parámetros conducen a un comportamiento oscilatorio. Las figuras anteriores tienen el objetivo de ilustrar los distintos comportamientos que puede adquirir el sistema de acuerdo al valor de los parámetros del modelo.

3.2 Caso de estudio 2: Modelo de producción de anhídrido maléico a partir de oxidación parcial de benceno.

El segundo caso de estudio consiste en un reactor tubular de lecho fijo que describe la producción de anhídrido maléico mediante la oxidación parcial de benceno (Ramírez & Calderbank, 1977). Tres reacciones exotérmicas e irreversibles en fase gaseosa ocurren sobre partículas de catalizador de $V_2O_5 \cdot MoO_3 \cdot P_2O_5$ empacadas en un tubo de 1 pulgada de diámetro:

Capítulo 3. Control en cascada.

La reacción (3.2a) es la ruta deseada para la formación de anhídrido maléico (producto) a partir de benceno. Las reacciones (3.2b) y (3.2c) representan reacciones no deseadas de oxidación de reactante y producto respectivamente. La corriente de alimentación al reactor se compone de benceno y oxígeno en exceso, por esto, todas las reacciones son consideradas como pseudo primer orden. Se recurre a la ecuación de Arrhenius para describir la velocidad de reacción en (3.2a) a (3.2c).

$$k_i(\xi, \tau) = A_i e^{(-E_i/RT_s(\xi, \tau))}$$

Los factores de frecuencia, energías de activación y calores de reacción se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 3.2: Parámetros para la velocidad de reacción

Reacción	$A_i \text{ (s}^{-1}\text{)}$	$E_i \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$	$\Delta H_i \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$
(3.2a)	86760	71711.7	-1490000
(3.2b)	37260	71711.7	-2322000
(3.2c)	149.4	36026.3	-832000

Dos balances de materia y dos balances de energía denominados, concentración de benceno $c_b(x, t)$, concentración de ácido maléico $c_m(x, t)$, temperatura de la fase líquida $T_f(x, t)$ y $T_s(x, t)$ la temperatura de la fase sólida fija. El sistema de PDE es el siguiente:

$$\frac{\partial c_b}{\partial t} = D_{eff} \frac{\partial^2 c_b}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_b}{\partial x} - k_1 c_b - k_2 c_b \quad (3.3a)$$

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = D_{eff} \frac{\partial^2 c_m}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_m}{\partial x} - k_1 c_b - k_3 c_m \quad (3.3b)$$

$$\frac{\partial T_f}{\partial t} = K_{eff} \frac{\partial^2 T_f}{\partial x^2} - v \frac{\partial T_f}{\partial x} - U_{fw}(T_f - T_w) - U_{sf}(T_s - T_f) \quad (3.3c)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = -U_{fw}(T_f - T_j) + c_s(\Delta H_1 k_1 c_b + \Delta H_2 k_2 c_b + \Delta H_3 k_3 c_m) \quad (3.3d)$$

Capítulo 3. Control en cascada.

Para simplificar la notación $c_b = c_b(x, t)$, $c_m = c_m(x, t)$, $T_f = T_f(x, t)$, $T_s = T_s(x, t)$. Los parámetros se dan en la Tabla 3.3.

Tabla 3.3 Parámetros de la oxidación parcial de benceno a anhídrido maléico.

Parámetro	Valor (unidades)
Velocidad lineal del gas v	2.48 ($m\ s^{-1}$)
Coeficiente de difusión de masa efectivo D_{eff}	0.0317 ($m^2\ s^{-1}$)
Coeficiente de difusión de calor efectivo K_{eff}	0.0317 ($m^2\ s^{-1}$)
Coeficiente transferencia de calor efectivo en la fase fluida desde las paredes U_{fw}	96 (s^{-1})
Temperatura de la pared T_w	733 (K)
Coeficiente de transferencia de calor efectivo para la fase sólido-líquido U_{sf}	84 (s^{-1})
Constante de balance de calor para la fase sólido-líquido c_s	0.729 ($s\ KJ^{-1}$)

Dada la naturaleza distribuida del sistema, es de esperarse que la temperatura de la camisa de enfriamiento (T_w) varíe a lo largo del reactor. Nótese que esto no se considera en el modelo, pues modifica la dinámica del reactor. Para simplicidad en la presentación, se asume que la temperatura de la camisa de enfriamiento es uniforme a lo largo del reactor. Esta consideración es aplicable para sistemas con camisas perfectamente mezcladas y para casos con flujo de enfriamiento alto. Para casos con camisas de temperatura no uniforme, un modelo de la camisa debe ser considerado.

Las figuras 3.2 muestran los perfiles de concentración de reactante y producto, los perfiles de temperatura. Las Figuras 3.2c y 3.2d muestran claramente la presencia de un punto de mayor temperatura, lo cual denominamos como *Hot spot*.

Figura 3.2a. Perfil dinámico de concentración de benceno. Caso 2.

Figura 3.2b. Perfil dinámico de concentración de anhídrido maléico. Caso 2.

Figura 3.2c. Perfil dinámico de temperatura de la fase gaseosa Caso 2.

Figura 3.2d. Perfil dinámico de temperatura de la fase sólida del Caso 2.

3.3 Diseño de control convencional.

En esta sección se realiza la implementación de controladores en cascada con múltiples mediciones de temperatura. Se recurre al controlador de tipo PI por ser de fácil implementación y regularmente buenos resultados. Además el controlador de tipo PI es actualmente de los más utilizados a nivel industrial y es de fácil comprensión para los operarios.

$$u(y) = kp * e(y) + \frac{kp}{\tau_i} \int e(y) dy \quad (3.4)$$

Capítulo 3. Control en cascada.

donde $u(y)$ es la concentración a la salida del reactor, $e(y)$ es el error que se define por la diferencia entre el valor de referencia y_{ref} y la medición actual y_i , kp es constante proporcional al error, τ_i es la constante de tiempo de la parte integral del control.

El sintonizado del controlador se realiza siguiendo las reglas IMC de Morari & Zafiriou, 1989. En la Figura 3.3 puede apreciarse el diagrama de bloques que representa el problema de control del reactor tubular. Para cuantificar el desempeño del controlador emplea el error integral acumulado (E^2) el cual está dado por:

$$E^2 = \int_0^t |y_{ref} - y(t)|^2 dt \quad (3.5)$$

Figura 3.3. Diagrama de bloques del controlador PI

3.3.1 Implementación de control PI con un sensor de temperatura.

En esta sección se realiza un barrido del controlador para evaluar la respuesta del sistema, la cual está cuantificada con el error acumulado del controlador (Ec. 3.5). Es decir, se simula el sistema con un solo sensor de temperatura a distintas localizaciones en la posición axial del reactor para el perfil *Hot spot*. Se realizan incrementos en la posición de 0.1 con respecto a la posición anterior. La siguiente Figura muestra los perfiles de temperatura y concentración además de la gráfica del error acumulado del controlador al agregar las perturbaciones de

Capítulo 3. Control en cascada.

concentración y temperatura de entrada al reactor, $t = 20$, $C_{in} + 5\%$, $t = 40$, $C_{in} - 5\%$, $t = 60$, $T_{in} + 10\%$, $t = 80$, $T_{in} - 10\%$ para los casos 1 y 2.

Figura 3.4. Perfil de concentración y temperatura tipo *Hot spot* con perturbaciones en concentración y temperatura de entrada.

Figura 3.5. Perfil de concentración y temperatura para el Caso 2 con perturbaciones en las condiciones de entrada.

Figura 3.6a. Gráfica de error acumulado para perfil *Hot spot* con medición de temperatura a distintas posiciones del reactor
Caso 1.

Figura 3.6b. Gráficas de error acumulado para el Caso 2 con medición de temperatura a distintas posiciones del reactor.

Capítulo 3. Control en cascada.

Puede observarse que el error acumulado es menor conforme se acerca el sensor a la sección media del reactor. Lo cual coincide con el *Hot spot* del reactor en ambos casos de estudio. Lo cual puede apreciarse de mejor manera si observamos únicamente el error acumulado de colocar los sensores en $\xi = 0.4, 0.5, 0.6$ para el Caso 1 y $\xi = 0.4, 0.5, 0.6$ para el Caso 2.

Figura 3.7a. Error acumulado del controlador para el Caso 1 *Hot spot* con un sensor de temperatura para las posiciones $\xi = 0.4, 0.5, 0.6$.

Figura 3.7b. Error acumulado del controlador para el caso 2 con un sensor de temperatura para las posiciones $\xi = 0.3, 0.4, 0.5$

En las Figuras 3.6 se puede observar que si el sensor está localizado muy cerca de la entrada del reactor, el error acumulado es mayor y por lo tanto menos eficiente. Esto puede deberse a que los reactivos cerca de la entrada no han comenzado a reaccionar completamente, por esta misma causa, la temperatura es muy parecida a la temperatura del flujo de entrada al reactor. Es así, que, el controlador, más allá de esa posición no tiene manera de percibir lo que ocurre con la reacción y por lo tanto el error acumulado es mayor.

Alrededor de la posición de $\xi=0.5$, el controlador parece mucho más eficiente al prestar atención a la Figura 3.6. La región media del reactor corresponde al *Hot spot* este primer caso. Siendo $\xi=0.5$ la posición del sensor cuyo error es el mínimo de todos los casos. En $\xi=0.8$, el error se mantiene bajo aunque no es el mínimo. Este punto se encuentra más lejano del *Hot spot* del reactor pero puede resultar ser un buen indicador para el controlador de manera que, si existe alguna diferencia entre la medición y la referencia, aún tiene cierta capacidad de corregir la temperatura de la camisa de enfriamiento para asegurar que se alcance la concentración de referencia a la salida del reactor.

En el segundo caso ocurre una situación similar al modelo adimensional, en este caso el *Hot spot* se encuentra en la posición

Capítulo 3. Control en cascada.

cercana a $\xi = 0.3$ de acuerdo a la Figura 3.7b, que coincide con el menor error integral acumulado del controlador con un solo sensor de temperatura, el cual proporciona la primera referencia al implementar el esquema de controlador en cascada en un reactor tubular.

3.3 Diseño de control en cascada.

El esquema de control en cascada puede ser razonablemente bien manejado con diseños de control lineal convencionales (e.g. PID e IMC) y sensores de temperatura distribuidos basados en modelos de entrada-salida de bajo orden. Para el diseño de control se considera un modelo de primer orden de entrada-salida + tiempo muerto calculado a partir de cambios escalón en la temperatura del refrigerante. ($\omega = T_j$)

$$\frac{y(s)}{\omega(s)} = G_{\omega y}(s) = \frac{K_{\omega y}}{\tau_{\omega y}s + 1} \exp(-\varepsilon_{\omega y}s) \quad (3.6)$$

$$\frac{w_i(s)}{\omega(s)} = G_{\omega w_i}(s) = \frac{K_{\omega w_i}}{\tau_{\omega w_i}s + 1} \quad (3.7)$$

donde w_i es una medición de temperatura en una posición del reactor, y es la concentración del producto a la salida del reactor, $\varepsilon_{\omega y}$ es el retardo de tiempo debido a la medición y el transporte interno, $K_{\omega y}$ y $K_{\omega w_i}$ son las ganancias del proceso en estado estacionario y $\tau_{\omega y}$, $\tau_{\omega w_i}$ son las constantes de tiempo del proceso.

3.4.1 Diseño de controladores en cascada.

El diseño del controlador en cascada de composición-temperatura se conforma por un lazo de composición, en el cual un lazo primario es regido por una medición de composición y calcula la temperatura del reactor requerida en un punto del reactor, y un lazo de temperatura que manipula la temperatura del refrigerante (ω) para rastrear el punto de referencia w_{ref} variable en el tiempo transmitido por el lazo de composición primario.

Capítulo 3. Control en cascada.

Lazo de composición.

La función de transferencia que describe la relación entre la composición y la temperatura está dada por el siguiente cociente.

$$\frac{y(s)}{w_i(s)} = \frac{G_{\omega y}(s)}{G_{\omega w_i}(s)} = G_{w_i y}(s) \quad (3.8)$$

es así que,

$$G_{w_i y}(s) = K_{w_i y} \frac{\tau_{\omega w_i} s + 1}{\tau_{\omega y} s + 1} \exp(-\varepsilon_{\omega y} s) \quad (3.9)$$

donde $K_{w_i y} = K_{\omega y} / K_{\omega w_i}$. Para condiciones cercanas al estado estacionario se puede hacer la aproximación $(\tau_{\omega w_i} s + 1) / (\tau_{\omega y} s + 1) \approx 1$, de esta forma la dinámica de retraso $\exp(-\varepsilon_{\omega y} s)$ domina la dinámica global. Entonces

$$G_{w_i y}(s) \approx K_{w_i y} \exp(-\varepsilon_{\omega y} s) \quad (3.10)$$

Como consecuencia la tarea de regulación puede conseguirse con una retroalimentación integral.

$$C_{yw_i}(s) = \frac{K_{I,y}}{s}, K_{I,y} = \frac{1}{K_{w_i} \tau_{I,y}} \quad (3.11)$$

Con la ganancia integral $K_{I,y}$ determinada por las reglas de sintonizado del control interno de modelo. $\tau_{I,y}$ es alrededor de 1.5 a 2 veces $\varepsilon_{\omega y}$ (Morari & Zafiriou, 1989).

Lazo de temperatura.

El lazo secundario está basado en un modelo Entrada-Salida. Para procesos de primer orden, un compensador PI generalmente es suficiente para alcanzar la referencia. De esta forma si el error de temperatura es $e(s) = w_{i,ref}(s) - w_i(s)$ y la variable manipulable es ω , entonces el compensador PI correspondiente es:

Capítulo 3. Control en cascada.

$$C_{w_i\omega}(s) = K_{C,w_i} \left(1 + \frac{1}{\tau_{I,w_i}} s \right), K_{C,w_i} = \frac{1}{K_{\omega w_i}} \frac{\tau_{\omega w_i}}{\tau_{w_i}^*} \quad (3.12)$$

donde $\tau_{I,w_i} = \tau_{\omega w_i}$, con ganancia proporcional K_{C,w_i} y tiempo integral $\tau_{w_i}^*$. De acuerdo con las reglas de sintonizado de Morari & Zafiriou (1989), $\tau_{w_i}^*$ es alrededor de 0.75 a 1.5 veces $\tau_{\omega w_i}$. El lazo de temperatura promedio ponderada es un compensador PI de primer orden. El modelo de primer orden para w_{av} está dado por

$$\frac{w_{av}(s)}{\omega(s)} = G_{\omega w_{av}}(s) = \frac{K_{\omega w_{av}}}{\tau_{\omega w_{av}} s + 1} \quad (3.13)$$

En comparación con un esquema de control en cascada de una sola medición de temperatura, el esquema de tres sensores presenta una mejor tolerancia y respuesta más rápida a las perturbaciones de temperatura, o de manera equivalente, mejor comportamiento a lazo cerrado. Este esquema de controlador en cascada ha sido puesto a prueba agregando perturbaciones al sistema tanto de temperatura como de concentración.

Se han realizado diversos estudios sobre el control en cascada con múltiples mediciones de temperatura (Urrea et al. 2008). Hernandez-Martinez, 2010, expuso que múltiples mediciones de temperatura mejoran el desempeño del controlador alimentando una temperatura promediada de tres sensores colocados arbitrariamente en el reactor. Propuso hacer la medición de temperatura con tres sensores colocados equidistantemente en las posiciones $\xi=0.2, 0.5, 0.8$ y ponderando cada uno de ellos con distintos valores de la siguiente forma:

$$w_{av} = \alpha w(\xi_{in}, t) + \beta w(\xi_c, t) + \gamma w(\xi_{out}, t) \quad (3.14)$$

donde ξ_{in} es la posición cercana a la alimentación, ξ_c es la posición central y ξ_{out} es la posición cercana a la salida del reactor. α , β y γ son los parámetros de ponderación. La suma de los parámetros debe ser la unidad ($\alpha + \beta + \gamma = 1$). Es necesario encontrar la combinación de posición y ponderación adecuada para ello, en este trabajo se propone encontrar una relación entre el análisis fractal por medio del exponente de Hurst y alguno de los parámetros del sistema que pueda ser correspondido a la sensibilidad del reactor.

Capítulo 4. Colocación de sensores para control en cascada de reactores tubulares.

Este capítulo se presenta los resultados de la aplicación de las técnicas para determinar la mejor colocación de sensores en el control en cascada de reactores tubulares para los dos casos de estudio. Las técnicas son la aproximación numérica de sensibilidad paramétrica y el análisis de rango re-escalado de Hurst. Se muestran además los resultados de las pruebas del controlador con distintas ponderaciones para cada uno de los tres sensores de temperatura a través de una técnica simple de barrido. Los resultados del comportamiento del sistema controlado se analizan con base al error acumulado para evaluar el efecto de agregar perturbaciones en la concentración y la temperatura de entrada como resultado del barrido en distintas posiciones del reactor.

4.1 Barrido

El barrido consiste en cambiar la posición de los sensores de temperatura a distintas longitudes del reactor tubular. Inicialmente se coloca un solo sensor de temperatura y se prueba el controlador con el fin de evaluar el error acumulado del sistema al someterlo a perturbaciones tanto en la concentración en la corriente de alimentación como en la temperatura de entrada. Así en esta sección muestra algunos de los resultados de las pruebas del controlador con distintas ponderaciones para cada uno de los tres sensores de temperatura. Para cuantificar el desempeño del controlador frente a perturbaciones se calcula el error acumulado. Las perturbaciones se agregan mediante los cambios en escalón en la concentración y la temperatura de entrada.

Se realizaron múltiples pruebas de localización de sensores de temperatura variando la posición de cada uno de los tres sensores evaluando el error. El resultado tras múltiples pruebas de barrido concluye que las posiciones en las que el desempeño del controlador es mejor son similares a las presentadas por Hernandez-Martinez, 2010. De acuerdo a estas pruebas de barrido, las posiciones más apropiadas para la colocación de sensores y evaluando el error acumulado son:

Tabla 4.1. Posición de los sensores de temperatura

	ξ_{in}	ξ_c	ξ_{out}
Caso 1	0.3	0.4	0.7
Caso 2	0.2	0.4	0.6

Capítulo 4. Colocación de sensores.

Es de notarse que las posiciones de los sensores de temperatura se encuentran focalizadas en la cercanía al *Hot spot* del reactor. El barrido que se muestra a continuación consiste en la variación de los parámetros de ponderación. Las perturbaciones son las mismas que en el caso de tener un solo sensor de temperatura, $t = 20$, $C_{in} + 5\%$, $t = 40$, $C_{in} - 5\%$, $t = 60$, $T_{in} + 10\%$, $t = 80$, $T_{in} - 10\%$ para los casos 1 y 2.

Figura 4.1a Error acumulado para pruebas de ponderación (a), (b), (c), (d) para el Caso 1.

Figura 4.1b Error acumulado para pruebas de ponderación (e), (f), (g), (h) para el Caso 1.

Figura 4.1c Error acumulado para pruebas de ponderación (i), (j), (k), (l) para el Caso 1.

Capítulo 4. Colocación de sensores.

Tabla 4.2 Valores de ponderación de los sensores de temperatura para el Caso 1.

	α	β	γ
a)	0.1	0.2	0.7
b)	0.2	0.3	0.5
c)	0.2	0.4	0.4
d)	0.3	0.4	0.3
e)	0.5	0.3	0.2
f)	0.7	0.2	0.1
g)	0.1	0.4	0.5
h)	0.2	0.5	0.3
i)	0.2	0.6	0.2
j)	0.3	0.6	0.1
k)	0.4	0.5	0.1
l)	0.1	0.8	0.1

Figura 4.2a Error acumulado para pruebas de ponderación (a), (b), (c), (d) para el Caso 1.

Figura 4.2b Error acumulado para pruebas de ponderación (e), (f), (g), (h) para el Caso 2.

Figura 4.2c Error acumulado para pruebas de ponderación (i), (j), (k), (l) para el Caso 2.

Capítulo 4. Colocación de sensores.

Tabla 4.3 Valores de ponderación de los sensores de temperatura para el Caso 2.

	α	β	γ
a)	0.2	0.6	0.2
b)	0.3	0.6	0.1
c)	0.4	0.5	0.1
d)	0.1	0.8	0.1
e)	0.1	0.2	0.7
f)	0.2	0.3	0.5
g)	0.2	0.4	0.4
h)	0.3	0.4	0.3
i)	0.5	0.3	0.2
j)	0.7	0.2	0.1
k)	0.1	0.4	0.5
l)	0.3	0.4	0.3

Al observar estas pruebas de ponderación, se afirma que si la ponderación favorece al sensor más cercano al *Hot spot* en el reactor, el error acumulado del esquema de control en cascada es más eficiente. Las cuales varían prácticamente nada con respecto al caso anterior. Se realiza un barrido de los parámetros de ponderación y se encuentra que una vez más los sensores ubicados en la vecindad del *Hot spot* proveen un menor error acumulado.

4.2 Análisis fractal.

Una vez puesto a prueba el esquema de control en cascada con múltiples mediciones de temperatura, un análisis de dimensión fractal es realizado para conocer las zonas que podrían brindar mayor información sobre el sistema y darnos un panorama sobre las regiones que pudiesen ser más sensibles de modo que los sensores de temperatura serían colocados y a su vez estos parámetros alimentarían el controlador.

Para comenzar con el análisis fractal se agregan perturbaciones de tipo aleatorias a alguno de los parámetros del sistema y a partir de la respuesta se genera el análisis de la dimensión fractal. Para ambos casos de estudio, se agregaron perturbaciones aleatorias a la temperatura de entrada, generando series de tiempo de 10,000 datos a los cuales se realizará el análisis fractal mediante el cálculo del exponente de Hurst. A continuación se muestra el perfil de temperatura con respecto al tiempo.

Figura 4.3a. Temperatura entrada del reactor con perturbaciones aleatorias para el comportamiento con *Hot spot*, Caso 1.

Figura 4.3b Perfil dinámico de concentración y temperatura para el reactor tubular Caso 1 con *Hot spot* y perturbaciones a la temperatura de entrada.

Las Figuras 4.3a, 4.4a, 4.5a, ilustran la generación de series de datos en tiempo para realizar el análisis fractal. El ruido agregado es ruido aleatorio sumado directamente en las condiciones de entrada, por ejemplo la temperatura de entrada y la temperatura de la camisa de enfriamiento respectivamente.

Figura 4.4a. Temperatura de la camisa de enfriamiento del reactor con perturbaciones aleatorias para el comportamiento con *Hot spot*, Caso 1.

Figura 4.4b Perfil dinámico de concentración y temperatura para el reactor tubular Caso 1 con *Hot spot* y perturbaciones a la temperatura de la camisa de enfriamiento.

Figura 4.5a Perturbaciones aleatorias en la temperatura de la camisa de enfriamiento para el Caso 2.

Figura 4.5b. Perfil de temperatura dinámico para las posiciones $\xi = 0.2, 0.5, 0.8$ con perturbaciones en la temperatura de la camisa de enfriamiento.

De igual manera se muestra el perfil dinámico con respecto a la posición del reactor en las Figuras 4.3a, 4.4a en las cuales pueden apreciarse las perturbaciones a lo largo de la posición del reactor con respecto al tiempo para el Caso de estudio 1 para la temperatura de entrada como para la temperatura de la camisa de enfriamiento para el reactor con *Hot spot*.

Figura 4.6a Perturbaciones aleatorias en la temperatura de entrada para el Caso 2.

Figura 4.6b. Perfil de temperatura dinámico para las posiciones $\xi = 0.2, 0.5, 0.8$ con perturbaciones en la temperatura de entrada.

En el Caso 2, se presentan los perfiles en posiciones específicas $\xi = 0.2, 0.5, 0.8$ de manera que las perturbaciones en la respuesta del sistema sean más fácilmente apreciables Figuras 4.5b y 4.6b. El efecto de agregar ruido a las condiciones de entrada se ve reflejado con una respuesta del sistema visualmente más notoria si la temperatura de la camisa de enfriamiento es perturbada.

Capítulo 4. Colocación de sensores.

El siguiente paso consiste en realizar el cálculo del exponente de Hurst para todas las series de tiempo generadas para ambos casos de estudio de acuerdo con el procedimiento de Hurst (1951).

Figura 4.7a Exponente de Hurst contra posición ξ para el comportamiento *Hot spot* con perturbaciones a la temperatura de entrada.

Figura 4.7b Exponente de Hurst contra posición ξ para el comportamiento *Hot spot* con perturbaciones a la temperatura de la camisa de enfriamiento.

Figura 4.8.a Exponente de Hurst contra posición ξ para el comportamiento cuasi lineal con perturbaciones a la temperatura de entrada.

Figura 4.8b Exponente de Hurst contra posición ξ para el comportamiento cuasi lineal con perturbaciones a la temperatura de la camisa de enfriamiento.

Figura 4.9a Análisis fractal para la temperatura y concentración del caso 2 con perturbaciones en la temperatura de entrada

Figura 4.9b Análisis fractal para la temperatura y concentración del caso 2 con perturbaciones en la temperatura de la camisa de enfriamiento.

El análisis de series de tiempo muestra cambios que pudiesen ser significativos cuando se trata de asociar la sensibilidad del sistema a los cambios más importantes en el exponente de Hurst, aunque puede notarse que la escala puede resultar demasiado pequeña para poder ser significativa.

Una vez realizado el cálculo del exponente de Hurst, uno puede observar que para el caso en que se perturba la temperatura de entrada el cambio en el exponente no sugiere alguna región de mayor o menor sensibilidad, sin embargo si se realiza el cálculo del exponente de Hurst con respecto a la temperatura de la camisa de enfriamiento, el análisis ofrece cambios mayores en el exponente de Hurst que pueden relacionarse a las regiones más sensibles del reactor lo cual concuerda con las pruebas de barrido en la posición y que corrobora que las regiones más sensibles se encuentran localizadas cerca del *Hot spot*.

Es necesario complementar el barrido y el análisis del exponente de Hurst con un análisis de sensibilidad paramétrica para comprobar la validez del método y probar que el análisis de series en tiempo puede efectuarse como alternativa a un análisis de sensibilidad paramétrica clásico.

4.3 Análisis de sensibilidad.

De acuerdo al análisis fractal, se puede asociar las regiones cercanas al *Hot spot* con la localización de los sensores de temperatura cuya ponderación beneficia al sensor central, presenta un mejor desempeño del controlador en cascada. Sin embargo se recurre al análisis de sensibilidad

Capítulo 4. Colocación de sensores.

numérica local aproximada para validar los resultados. Para tal efecto se realiza una variación de 5% en a) la temperatura de la camisa de enfriamiento, b) la temperatura de entrada del reactor para el Caso 2 y ambos comportamientos particulares para el Caso 1 i) *Hot spot* y ii) Cuasi lineal obteniendo los siguientes resultados de sensibilidad:

Figura 4.10a Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el perfil *Hot spot* del Caso 1 con perturbaciones en la temperatura de la camisa de enfriamiento.

Figura 4.10b Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el perfil *Hot spot* del Caso 1 con perturbaciones en la temperatura de entrada.

Figura 4.11a Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el perfil cuasi lineal del Caso 1 con perturbaciones en la temperatura de la camisa de enfriamiento.

Figura 4.11b Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el perfil cuasi lineal del Caso 1 con perturbaciones en la temperatura de entrada.

Capítulo 4. Colocación de sensores.

Figura 4.12a Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el Caso 2 con perturbaciones en la temperatura de la camisa de enfriamiento.

Figura 4.12b Perfil de concentración y temperatura del reactor tubular y función de sensibilidad numérica para el Caso 2 con perturbaciones en la temperatura de entrada.

Un alto valor de la función de sensibilidad indica la región más sensible del reactor tubular. En el Caso 1 con *Hot spot*, la función de sensibilidad se comporta de manera muy similar a los perfiles de concentración y temperatura indicando que la zona más sensible del reactor es la región central, la cual coincide con el *Hot spot*, al igual que el análisis fractal explícitamente en la figura 4.7b. De igual manera se comporta la función de sensibilidad para el Caso 2 al comparar la función de sensibilidad con respecto a la temperatura con la figura 4.10b. En ambos casos la función de sensibilidad puede asociarse con el análisis del exponente de Hurst siempre y cuando sea dirigida a la función de sensibilidad con respecto a la temperatura. La región más sensible del reactor tubular si presenta un comportamiento tipo *Hot spot* es la región más cercana al mismo. Si el sistema presenta un comportamiento cuasi lineal, la función de sensibilidad indica que la región más sensible del reactor resulta ser la región más cercana a la salida del reactor, lo cual es difícil relacionar con el análisis fractal.

Capítulo 5. Conclusiones.

Este capítulo se presenta un breve resumen del trabajo de tesis, las conclusiones principales, y trabajo futuro que se puede realizar con base a los resultados obtenidos.

5.1 Resumen del trabajo de tesis.

En este trabajo se extienden las ideas de control en cascada de temperatura-concentración basados en compensadores PI/PID recurriendo a múltiples mediciones de temperatura distribuidas a lo largo de la posición axial del reactor. El trabajo consta de distintas fases. En la primera fase, se realiza el diseño del controlador en cascada para dos modelos pseudo-homogéneos representativos con reacción de primer orden irreversibles: *a)* un modelo general adimensional con reacción irreversible de primer orden y *b)* un modelo que describe la producción de anhídrido maléico por medio de la oxidación parcial de benceno. Una vez realizado el diseño de control, es puesto a prueba agregando perturbaciones tanto en la concentración como en la temperatura del flujo de entrada al reactor, además de probar distintas configuraciones de los sensores de temperatura. La fase siguiente consiste en recurrir al análisis fractal como alternativa al análisis de sensibilidad clásico para identificar las zonas más sensibles del reactor con el fin de colocar los sensores de temperatura a lo largo de la posición del reactor tubular. Por último se realiza un análisis de sensibilidad convencional para corroborar la validez del método del análisis fractal como método viable para la colocación de sensores en sistemas de parámetros distribuidos.

5.2 Conclusiones principales.

Derivado del trabajo desarrollado en esta tesis se pueden establecer las siguientes conclusiones principales:

- Relevancia de los reactores tubulares: Los reactores tubulares tienen una amplia gama de aplicaciones en procesos de transformación química y biotecnológica. Estos reactores son difíciles de operar y controlar debido a su naturaleza espacio-temporal y el acoplamiento de fenómenos de transporte y reacción.
- Control en cascada composición-temperatura en reactores tubulares: La aplicación de esquemas de control en cascada composición-temperatura permite mejorar el desempeño de esquemas de control convencionales de lazo simple debido a que se mejora la velocidad de respuesta del controlador con los lazos adicionales.
- Colocación de sensores en esquemas de control en cascada en reactores tubulares: La determinación de colocación y número de sensores adecuados en esquemas de control en cascada se puede abordar identificando regiones de operación más sensibles a lo largo de un reactor.
- Análisis de sensibilidad convencional para localización de sensores: El análisis de sensibilidad paramétrica es útil para identificar regiones de sensibilidad en reactores tubulares. La aplicación de las sensibilidades analíticas no es directa debido al cálculo analítico de las funciones de sensibilidad. Una alternativa a este cálculo es realizar una aproximación numérica a las funciones de sensibilidad. En este trabajo, con la finalidad de determinar las regiones de sensibilidad de los casos de estudio, se aplicó la técnica de sensibilidad numérica aproximada.
- Aplicación del análisis fractal para localización de sensores: El análisis fractal es una herramienta útil para determinar la complejidad contenida en una serie de tiempo de variables de un proceso. Esta complejidad se puede asociar a una sensibilidad importante de los procesos que subyacen en la serie de tiempo debido a que pueden generar cambios importantes en el comportamiento de un proceso. Este análisis se complementa con un barrido simple para los dos casos de estudio.
- Comparación de resultados: Con base a los resultados de la aplicación de sensibilidad numérica y de complejidad de una serie

Capítulo 5. Conclusiones.

de tiempo con base al análisis fractal se propone la colocación de sensores en los casos de estudio. Esta técnica permite identificar la región en la cual existe la presencia de puntos calientes. De no existir puntos calientes, el análisis de sensibilidad convencional identifica que las regiones de menor sensibilidad se ubican en general al inicio de la longitud del reactor y gradualmente se incrementa esta sensibilidad a lo largo del mismo. Por otro lado, resulta difícil asociar la función de sensibilidad numérica a los resultados del análisis fractal si el reactor presenta un comportamiento tipo cuasi lineal dado que los cambios en el valor del exponente de Hurst prácticamente se mantienen sin cambio, es decir con una complejidad homogénea a lo largo del reactor.

5.3 Trabajo futuro.

Se pueden identificar las siguientes líneas de trabajo futuras:

- Estudios de colocación de sensores formulando problemas de optimización: Se refiere a formular un problema de optimización en el cual la función objetivo a minimizar está asociada una medida de desempeño a lazo cerrado (e.g. la integral cuadrada del error) y que las variables de control estén asociadas a la cantidad y ubicación de sensores.
- Estudios de colocación de sensores con base a las propiedades de observabilidad y la sensibilidad de filtros u observadores a lo largo del reactor: Se refiere a calcular la observabilidad en diferentes posiciones a lo largo del reactor y evaluar la sensibilidad de observadores de estado en estas posiciones.
- Aplicación del análisis fractal para determinar condiciones de excursión de temperatura en reactores químicos lote: Se refiere a utilizar el grado de complejidad que se origina en la temperatura perturbada del proceso para asociarlas a la presencia en el tiempo de excursiones de temperatura.
- Aplicación del análisis fractal para determinar el grado de no-linealidad de procesos químicos: Se refiere a utilizar el grado de complejidad que se origina de variables perturbadas de un proceso para clasificar la no-linealidad subyacente en modelos de proceso químicos.

Referencias.

Alaña J., Theodoropoulus C. (2010). "Optimal location of measurements for estimation of distributed parameter systems". Computers and Chemical Engineering 35,106-120.

Alvarez Ramirez J., Puebla H. and Ochoa-Tapia J., (2001), "Linear boundary control for a class of nonlinear PDE process", Systems & Control Letters 44, 395–403.

Amaya M., Sosa E., Romero J.M. (2004). "Multifractality in an electrochemical noise signal by biocorrosion system". World Scientific Publishing Company, Fractals 12, 347.

Amundson, N.R., and Aris, R., (1980). Observations on fixed-bed dispersión models: the role of the interstitial fluid. AIChE J., 26, 529.

Bequette W., (2003). "Process Control. Modeling, Design and Simulation". Prentice Hall.

Bilous, O.G., and Amundson, N.R., (1955). Chemical reactor stability and sensitivity-II: Effect of parameters on sensitivity of empty tubular reactors. AIChE J., 2, 117.

Boskovic D., Krstic M., (2002). "Backstepping control of chemical tubular reactors". Computers & Chemical Engineering 26. 1077-1085.

Cajueiro D.,Tabak B., (2005). "The rescaled variance statistic and the determination of the Hurst exponent". Mathematics and computers in simulation 70, 172-179.

Christofides, P. D., (2001). "Nonlinear and robust control of PDE systems: Methods and applications to transport-reaction processes", Boston: Birkhauser.

Froment, G.F., Bischoff, K.B., De Wilde, J. (1990). "Chemical Reactor Analysis and Design". New York: Wiley.

Referencias.

Hernandez-Martinez E., Puebla H., Mendez-Acosta H.O., Alvarez-Ramirez J. (2014). "Fractality in pH time series of continuous anaerobic bioreactors for vinasses treatment". Chemical Engineering Science 109,17-25.

Hernandez-Martinez E., Puebla, H., Alvarez-Ramirez, J. (2010). "Cascade control scheme for tubular reactors with multiple temperature measurements". International Journal of Chemical Reactor Engineering 8, S3 1542-6580.

Hoo, K., and D. Zheng, (2002). "Low order control relevant models for a class of distributed parameters systems", Chem. Eng. Sci., 56, 6683-6710.

Hua X. and Jutan A., (2000), "Nonlinear Inferential Cascade Control of Exothermic Fixed-Bed Reactors, AIChEJ. 46, No. 5

Hurst, H.E. (1951). "Long-term storage capacity of reservoirs". Trans. Am. Soc. Civil Eng. 116,770.

Krishnaswamy P. R. and Rangaiah G. P. (1990). "When to used cascade control", Ind. Eng Chem. Res. 29, 2163-2166.

Li, M., D. Christofides, (2007). "An input/output approach to the optimal transition control of a class of distributed chemical reactors", Chem. Eng. Sci., 62, 2979-2988.

Luyben, W. L., (1990), "Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers", 2nd Ed. McGraw-Hill, Singapore.

Mendez-Acosta H.O., Hernandez-Martinez E., Jauregui-Jauregui J.A., Alvarez-Ramirez J., Puebla H. (2013). "Monitoring anaerobic sequential batch reactors via fractal analysis of pH time series". Biotechnology and Engineering 8, 2131-2139.

Morari, M., and E. Zafirou, (1989). "Robust Process Control", Prentice Hall, New York.

Orantes A. Kempowsky T., Le Lann M-V., Aguilar-Martin J. (2008). "A new support methodology for the placement of sensores used for fault detection and diagnosis". Chemical Engineering and Processign 47, 330-348.

Referencias.

Orantes A. Kempowsky T., Le Lann M-V., Prat L., Elgue S., Gourdon C., Cabassud M. (2007) "Selection of sensors by a new methodology coupling a classification Technique and entropy criteria". *Trens IChemE.* 85, 825-838.

Paglianti A., Pintus S., Giona M. (2000) "Time-series analysis approach of the identification of flooding/loading transition in gas-liquid stirred tank reactors" *Chemical Engineering Science* 55, 5793-5802.

Pellegrini, L., C.T. Possio, S. Albertoni, and G. Biardi, (1993). "Different scenarios in a controlled tubular reactor with a counter current coolant", *Chaos Solutions and Fractals*, 3 (5), 537-549.

Puebla H., (1999). "Control PI y PID de reactores Tubulares". Tesis de Maestría. UAM-Iztapalapa.

Ramirez, J.F., and P.H. Calderback , (1977). "The oxidation of benzene in packed catalyst beds", *Chem. Eng. J.*, 14, 49-58.

Strangeland B.E., and Foss A.S., (1970). "Control of a fixed-bed chemical reactor" *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 9,, 38-48.

Urrea R., Castellanos-Sahagun E., Alvarez J., and Alvarez-Ramirez J., (2006). "Cascade composition control using a two temperature measurement secondary component", *Ind. Eng. Chem. Res.* 6828-6841

Urrea, R., J. Alvarez, and J. Alvarez-Ramirez, (2008). "Linear PI temperature- composition cascade control for tubular reactor", *Chem. Eng. Comm.*, 195, 7, 803 820.

van den Berg, F.W., H.C. Hoefsloot, H.F. Boelens, and A.K. Smilde, (2000). "Selection of optimal sensor position in a tubular reactor using robust degree of observability criteria", *Chem. Eng. Sci.*, 55, 827-837.

Vande Wouwer, A. et al. (1999). "An approach to the selection of optimal sensor locations in distributed parameter systems" *Journal of process control* 10, 291-300.

Varma, A., and R. Aris, (1977) "Stirred pots and empty tubes", In L. Lapidus and Admunson N. R. *Chemical Reactor Theory*, (pp. 79-154), Prentice Hall.

Referencias.

Velazquez-Camilo O., Bolaños-Reynoso E., Rodriguez E., Alvarez-Ramirez J. (2010). "Characterization of cane sugar crystallization using image fractal analysis": Journal of Food Engineering 100, 77-84.

Wu, W., and M. Huang, (2003). "Nonlinear inferential control for an exothermic packed-bed reactor: Geometric approaches", Chem. Eng. Sci., 58, 2023- 2034.

Zeng Y., Mu S.J., Lou S.J., Tartakovsky B., Guiot S.R., Wu P. (2005). "Hydraulic modeling and axial dispersion analysis of UASB reactor". Biochemical Engineering Journal 25, 113-123.

Anexos.

Código de MatLab.

Modelo adimensional del reactor tubular.

```
function dx=modelo_reactor(t,x)
a=0;    b=1;    h=(b-a)/(N+1);
%   Parametros: perfil Hot spot
Da=0.875;  lambda=20;  Pem=5;  Peh=5;  sigma=5; B=5;    Tj=0.1;
cin=0;  Tin=0;
c=zeros(N,1);  T=zeros(N,1);
for i=1:N
    c(i)=x(i);
    T(i)=x(N+i);
end
% Condiciones iniciales y de frontera
dx=zeros(2*N+2,1);
ca=c(1)-Pem*h*(c(1)+cin);
cb=c(N);
Ta=T(1)-Peh*h*(T(1)+Tin);
Tb=T(N);
h=1/(N+1);

% Modelo adimensional de reactor tubular
% discretizado por diferencias finitas con respecto a la posicion
dx(1) = (c(2)-2*c(1)+ca)/(Pem*h^2)-(c(1)-ca)/(2*h)...
    +Da*(1-c(1))*exp(T(1)/(1+(T(1)/lambda)));
dx(N+1)=(T(2)-2*T(1)+Ta)/(Peh*h^2)-(T(1)-Ta)/(2*h)...
    +B*Da*(1-c(1))*exp(T(1)/(1+(T(1)/lambda)))+sigma*(Tj-T(1));
for i=2:N-1
    dx(i) = (c(i+1)-2*c(i)+c(i-1))/(Pem*h^2)-(c(i+1)-c(i-1))/(2*h)...
        +Da*(1-c(i))*exp(T(i)/(1+(T(i)/lambda)));
    dx(N+i)=(T(i+1)-2*T(i)+T(i-1))/(Peh*h^2)-(T(i+1)-T(i-1))/(2*h)...
        +B*Da*(1-c(i))*exp(T(i)/(1+(T(i)/lambda)))+sigma*(Tj-T(i));
end
dx(N) = (cb-2*c(N)+c(N-1))/(Pem*h^2)-(c(N)-c(N-1))/(2*h)...
```

```
+Da*(1-c(N))*exp(T(N)/(1+(T(N)/lambda)));
dx(2*N)=(Tb-2*T(N)+T(N-1))/(Peh*h^2)-(T(N)-T(N-1))/(2*h)...
+B*Da*(1-c(N))*exp(T(N)/(1+(T(N)/lambda)))+sigma*(Tj-T(N));
```

Simulación del modelo adimensional del reactor tubular.

```
function simulacion_Caso_1
N=50;
%Condicion inicial
x0=zeros(2*N+2,1);
for i=1:N
    x0(i)=0;
    x0(N+i)=0;
end
x0(2*N+1)=0; x0(2*N+2)=0;

%Parametros discretos en el espacio
a=0; b=1; h=(b-a)/(N+1);
x=a+h:h:b-h;

%Parametros discretos en el tiempo
tmax=100;
i=tmax/h;
time=linspace(0,tmax,i);
% Simulacion del modelo
[t,v] =ode23tb(@modelo_reactor,time,x0);

for i=1:N
    c(:,i)=v(:,i);
    T(:,i)=v(:,i+N);
end
% Perfil con respecto al tiempo
figure(1)
plot(t,c(:,N),'r'),xlabel('Tiempo'),ylabel('Concentracion');
plot(t,T(:,N),'m'),xlabel('Tiempo'),ylabel('Temperatura');
% Perfil con respecto a la posicion
figure(2)
plot(x,c(end,:), 'r'),xlabel('Posición'),ylabel('Concentracion');
```

```
plot(x,T(end,:), 'r'),xlabel('Posición'),ylabel('Temperatura');
```

Implementación del esquema de control en cascada.

```
function control_caso_1
global N Cref
N=50;
%Condicion inicial
x0=zeros(2*N+2,1);
for i=1:N
    x0(i)=0;
    x0(N+i)=0;
end
x0(2*N+1)=0; x0(2*N+2)=0;
%Parametros discretos en el espacio
a=0; b=1; h=(b-a)/(N+1);
x=a+h:h:b-h;
%Parametros discretos en el tiempo
tmax=100;
i=tmax/h;
time=linspace(0,tmax,i);
Cref=0.8;

% Simulacion del modelo
[t,v] =ode23tb(@modelo_1er_orden,time,x0);
y=0:1/N:1-1/N;
for i=1:N
    c(:,i)=v(:,i);
    T(:,i)=v(:,i+N);
end
figure(1)
plot(t,c(:,N), 'r'),xlabel('Tiempo'),ylabel('Concentracion');
plot(t,T(:,N), 'm'),xlabel('Tiempo'),ylabel('Temperatura');

% Calculo del Error integral acumulado
hi=0.001;
yi=0:hi:tmax;
ci=spline(t,c(:,N),yi);
ti=20/hi; tt=tmax/hi;
```



```
e3=abs(ci(ti:tt)-Cref); etot=cumsum(e3.^2);

figure(2)
plot(yi(ti:tt),etot,':r'),xlabel('Tiempo'),...
    ylabel('Error integral acumulado E^2')
figure(3)
plot(x,c(end,:), 'r'),xlabel('Posición'),ylabel('Concentracion');
plot(x,T(end,:), 'r'),xlabel('Posición'),ylabel('Temperatura');
function dx=modelo_1er_orden(t,x)
% Variables
global N Cref
a=0;    b=1;    h=(b-a)/(N+1);
% Parametros: PErfil Hot spot
Da=0.875; lambda=20; Pem=5; Peh=5; sigma=5; B=5;    Tj=0.1;
cin=0;    Tin=0;
c=zeros(N,1);    T=zeros(N,1);
for i=1:N
    c(i)=x(i);
    T(i)=x(N+i);
end
dec=x(2*N+1);
deT=x(2*N+2);
% Control en cascada con multiples mediciones de temperatura
tic=11.2497; kct=11.5942; tit=0.1755; To=0.7929;
% Ponderacion de temperatura
alfa=0.2; beta=0.6; gamma=0.2;
%Localizacion de sensores
s1=0.3; s2=0.4; s3=0.7;
% Temperatura ponderada
Tav=alfa*T(N*s1)+beta*T(N*s2)+gamma*T(N*s3);
% Ley de control
t_control=0;
if t >= t_control;
    Tref = To + tic*dec;
    eT = Tref - Tav;
    Tj = Tj + kct*(eT+deT*tit);
end
% Condiciones iniciales y de frontera
```

Anexos

```
dx=zeros(2*N+2,1);
ca=c(1)-Pem*h*(c(1)+cin);
cb=c(N);
Ta=T(1)-Peh*h*(T(1)+Tin);
Tb=T(N);
h=1/(N+1);

% Perturbaciones
if t>=20
    ca=ca*(1+.05);
end
if t>=40
    ca=ca*(1-.05);
end
if t>=60
    Ta=Ta*(1+.1);
end
if t>=80
    Ta=Ta*(1-.1);
end
%Modelo
dx(1) = (c(2)-2*c(1)+ca)/(Pem*h^2)-(c(1)-ca)/(2*h)...
    +Da*(1-c(1))*exp(T(1)/(1+(T(1)/lambda)));
dx(N+1)=(T(2)-2*T(1)+Ta)/(Peh*h^2)-(T(1)-Ta)/(2*h)...
    +B*Da*(1-c(1))*exp(T(1)/(1+(T(1)/lambda)))+sigma*(Tj-T(1));
for i=2:N-1
    dx(i) = (c(i+1)-2*c(i)+c(i-1))/(Pem*h^2)-(c(i+1)-c(i-1))/(2*h)...
        +Da*(1-c(i))*exp(T(i)/(1+(T(i)/lambda)));
    dx(N+i)=(T(i+1)-2*T(i)+T(i-1))/(Peh*h^2)-(T(i+1)-T(i-1))/(2*h)...
        +B*Da*(1-c(i))*exp(T(i)/(1+(T(i)/lambda)))+sigma*(Tj-T(i));
end
dx(N) = (cb-2*c(N)+c(N-1))/(Pem*h^2)-(c(N)-c(N-1))/(2*h)...
    +Da*(1-c(N))*exp(T(N)/(1+(T(N)/lambda)));
dx(2*N)=(Tb-2*T(N)+T(N-1))/(Peh*h^2)-(T(N)-T(N-1))/(2*h)...
    +B*Da*(1-c(N))*exp(T(N)/(1+(T(N)/lambda)))+sigma*(Tj-T(N));
% Error Integral
if t >= t_control
    dx(2*N+1)= (Cref - c(N));
```

```
dx(2*N+2)= (Tref - Tav);  
else  
    dx(2*N+1)=0;  
    dx(2*N+2)=0;  
end
```

Análisis fractal.

```
function fractal_caso_1  
N=50; a=0; b=1; h=(b-a)/(N+1);  
z=a+h:h:b-h;  
x=zeros(2*N,1);  
h=0.001;  
tiempo=10;  
ruido=0;  
nt=tiempo/h;  
t=zeros(nt,1);  
Tin=zeros(nt,1);  
Ti=0.1;  
for i=1:nt  
    t(i)=i*h;  
    if t(i)>3  
        m=0.5;  
        ruido=0.5*m-m*rand(1,1);  
    end  
    Tin(i)=Ti+ruido;  
    k1=h*feval(@rk_modelo_1er_orden,x,N,Tin(i));  
    k2=h*feval(@rk_modelo_1er_orden,x+k1./2,N,Tin(i));  
    k3=h*feval(@rk_modelo_1er_orden,x+k2./2,N,Tin(i));  
    k4=h*feval(@rk_modelo_1er_orden,x+k3,N,Tin(i));  
    for k=1:N  
        x(k)=x(k)+(k1(k)+2*k2(k)+2*k3(k)+k4(k))/6;  
        x(N+k)=x(N+k)+(k1(N+k)+2*k2(N+k)+2*k3(N+k)+k4(N+k))/6;  
        c(i,k)=x(k);  
        T(i,k)=x(N+k);  
    end  
end  
  
tee=3;
```

```
k=tee/h;

c=c(k:end,:);
T=T(k:end,:);
t=t(k:end);
Tin=Tin(k:end);

figure(1)
plot(t,T(:,1),'r',t,T(:,end/2),'k',t,T(:,end),'b'),...
     xlabel('Tiempo'),ylabel('Temperatura');hold on
feval(' analisis_fractal',z,T,c,Tin);

% Modelo Primer orden Runge Kuta
function k=rk_modelo_1er_orden(x,N,Tin)

a=0;  b=1;  h=(b-a)/(N+1);
Pe1=5; Pe2=5; beta=5; B=5; ji=20; Da=0.875;
cin=0.1;
Tw=0.1;
c=x(1:N);  T=x(N+1:2*N);
k=zeros(2*N,1);
x0=c(1)-Pe1*h*(c(1)+cin);
T0=T(1)-Pe2*h*(T(1)+Tin);
R1=Da*(1-c(1))*exp(T(1)/(1+(T(1)/ji)));
R2=B*R1-beta*T(1)+beta*Tw;
k(1)= ((c(2)-2*c(1)+x0)/(h^2*Pe1)) - (c(1)-x0)/h + R1;
k(N+1)=((T(2)-2*T(1)+T0)/(h^2*Pe2)) - (T(1)-T0)/h + R2;

for i=2:N-1
    R1=Da*(1-c(i))*exp(T(i)/(1+(T(i)/ji)));
    R2=B*R1-beta*T(i)+beta*Tw;
    k(i)= ((c(i+1)-2*c(i)+c(i-1))/(h^2*Pe1)) - (c(i)-c(i-1))/h + R1;
    k(N+i)=((T(i+1)-2*T(i)+T(i-1))/(h^2*Pe2)) - (T(i)-T(i-1))/h + R2;
end

R1=Da*(1-c(N))*exp(T(N)/(1+(T(N)/ji)));
R2=B*R1-beta*T(N)+beta*Tw;
k(N)= ((-c(N) + c(N-1))/(h^2*Pe1)) + R1;
```

Anexos

```
k(N+N)=((-T(N) + T(N-1))/(h^2*Pe2)) + R2;
```

```
function analisis_fractal(z,T,c,Tin)
n=length(T(:,1));
m=length(T(1,:));
st=1;
smin=10;
smax=floor(n)/4;
HT=zeros(m,1);
for i=1:m
    q=2;
    dts=T(:,i);
    A=feval('hurst',dts,q,smax,smin,st);
    s=A(:,1);
    rs=A(:,2);
    g=polyfit(log(s),log(rs),1);
    HT(i)=g(1);
end
Hc=zeros(m,1);
for i=1:m
    q=2;
    dts=c(:,i);
    A=feval('hurst',dts,q,smax,smin,st);
    s=A(:,1);
    rs=A(:,2);
    g=polyfit(log(s),log(rs),1);
    Hc(i)=g(1);
end
A=feval('hurst',Tin,q,smax,smin,st);
s=A(:,1);
rs=A(:,2);
g=polyfit(log(s),log(rs),1);
a=0;
Hin=g(1);
```

Exponente de Hurst.

```
function d=hurst(c,q,smax,smin,st)
```

```
N=100;
Nc=length(c);
s=(exp(log(smin):(log(smax)-log(smin))/(N-1):log(smax))));
Ns=length(s);
rs=zeros(1,Ns);
for i=1:Ns
    N=100;
    si=floor(Nc-s(i))/N;
    ni=1:si:Nc;
    clear w r
    r=zeros(1,N);
    for j=1:N
        a=floor(ni(j));
        b=a+floor(s(i));
        w=c(a:b);
        mw=mean(w);
        dw=w-mw;
        daw=cumsum(dw);
        stdw=(sum(abs(w-mw).^q)/length(w))^(1/q);
        r(j)=(max(daw)-min(daw))/stdw;
        if stdw==0
            r(j)=1;
        end
    end
    rs(i)=mean(r);
end
rs=rs/rs(1);
d=[s*st; rs]';
```

Sensibilidad numérica.

```
function sensibilidad_1
N=50;
%Condicion inicial
x0=zeros(2*N,1);
for i=1:N
    x0(i)=0;
    x0(N+i)=0;
```

```
end
%Parametros discretos en el espacio
a=0; b=1; h=(b-a)/(N+1);
x=a+h:h:b-h;
%Parametros discretos en el tiempo
tmax=100;
i=tmax/h;
time=linspace(0,tmax,i);
[~,v1] =ode23tb(@modelo_reactor,time,x0,[],1);
delta=1.05;
[t,v2] =ode23tb(@modelo_reactor,time,x0,[],delta);
Tj=0.1;
par=Tj;
for i=1:N
    c(:,i)=v1(:,i);
    c_delta(:,i)=v2(:,i);
    T(:,i)=v1(:,i+N);
    T_delta(:,i)=v2(:,i+N);
    TTc(:,i)=(c_delta(:,i)-c(:,i))/(delta*par).*(c(:,i)*(1/par));
    TTT(:,i)=(T_delta(:,i)-T(:,i))/(delta*par).*(T(:,i)*(1/par));
end
figure(1)
subplot(2,1,1);plotyy(x,c(end,:),x,TTc(end,:)), ...
    xlabel('Posición, xi'),ylabel('Concentración');
subplot(2,1,2);plotyy(x,T(end,:),x,TTT(end,:)), ...
    xlabel('Posición, \xi'),ylabel('Temperatura');
```