



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Control Predictivo para un Reactor por Lotes de Policondensación

Juan Esteban Castaño Velásquez

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Minas, Departamento de Procesos y Energía
Medellín, Colombia

2014

Control Predictivo para un Reactor por Lotes de Policondensación

Juan Esteban Castaño Velásquez

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ingeniería- Ingeniería Química

Director

Prof. Ing. Jairo José Espinosa Oviedo. M.Sc. Ph.D

Codirector:

Ing. Alejandro Marquez Ruiz. M.Sc. Ph.D. (c)

Línea de Investigación:

Matemáticas Avanzadas para el Control y los Sistemas Dinámicos.

Grupo de Investigación:

Grupo de Automática de la Universidad Nacional (Gaunal)

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Minas, Departamento de Procesos y Energía

Medellín, Colombia

2014

Pero yo y mi destino no hablamos al hoy, y tampoco al nunca. Para hablar tenemos paciencia, y tiempo, y más que tiempo. Pues un día tiene él que venir, y no le será lícito pasar de largo.

Así habló Zarathustra, IV, "La ofrenda de la miel". F. Nietzsche

Agradecimientos

Este trabajo fue desarrollado con el apoyo de la beca pasantía del Programa de Jóvenes Investigadores e Innovadores “Virginia Gutiérrez de Pineda”- Convocatorias 510 y 525 del Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación de la Republica de Colombia - Colciencias.

Al director del trabajo, el Profesor Jairo José Espinosa Oviedo por su paciencia, dedicación y apoyo a la realización de este trabajo.

Un especial agradecimiento a mi codirector, compañero de trabajo y amigo Alejandro Marquez .

A César Augusto Gómez por el apoyo académico en el desarrollo de esta tesis.

A los integrantes de la Línea de Matemáticas Avanzadas para el Control y los Sistemas Dinámicos del Grupo de Automática de la Universidad Nacional (Gaunal).

Resumen

En este trabajo se presenta un Control Predictivo (MPC) para un reactor por lotes de policondensación para la producción de Polietilentereftalato (PET). Se utilizó como modelo de predicción un modelo no lineal híbrido del proceso. El objetivo de control del MPC es seguir la trayectoria óptima de referencia. Esta trayectoria óptima se obtuvo maximizando la conversión en el reactor al final del lote. El desempeño del MPC se compara con controladores PI y PID.

Palabras clave: Control Predictivo (MPC), Modelamiento Híbrido, Procesos por Lotes, Policondensación, Polietilentereftalato (PET).

Abstract

This research presents a predictive control (MPC) for a batch polycondensation reactor for the production of polyethylene terephthalate (PET). A hybrid nonlinear process model is used as prediction model. The control objective is tracking the optimal temperature profile. The optimal path is obtained by maximizing the conversion in the reactor at the end of batch. MPC performance is compared with PI and PID controllers

Keywords: Model Predictive control, Hybrid Modeling, Batch Process, Polycondensation, Polyethylene Terephthalate (PET).

Contenido

	Pág.
Resumen	IX
Lista de figuras	XIII
Lista de tablas	XV
1. Introducción	1
1.1 Objetivos.....	4
1.1.1 Objetivo general	4
1.1.2 Objetivos específicos	4
1.2 Estructura de la tesis capítulo a capítulo.....	4
2. Proceso de Policondesación	7
2.1 Proceso de producción de PET	7
2.2 Descripción del caso de estudio	8
2.3 Modelo del proceso	11
2.4 Respuesta del sistema en lazo abierto.	16
2.5 Obtención de la trayectoria óptima de temperatura de operación.	19
3. Modelo híbrido reducido del proceso de policondensación	27
3.1 Componente fenomenológico de los modelos híbridos.....	29
3.1.1 Estructura del modelo fenomenológico para el Modelo Híbrido A	31
3.1.2 Estructura del modelo fenomenológico para el Modelo Híbrido B	31
3.2 Estructura del modelo Empírico.	32
3.2.1 Obtención del modelo que representa la pérdida/generación de calor en el reactor	33
3.2.2 Estimación de la conversión.....	35
3.3 Modelos híbridos	38
3.4 Validación del modelo.....	39
3.4.1 Validación del Modelo Híbrido A.	40
3.4.2 Validación del Modelo Híbrido B.	43
3.4.3 Selección del modelo híbrido	45
4. Control Predictivo (MPC)	51
4.1 Metodología utilizada por el Control Predictivo	52
4.2 Modelo de predicción.....	54
4.2.1 Clasificación según la naturaleza del modelo.....	54
4.2.2 Otras clasificaciones.	55
4.3 Función objetivo.....	55
4.4 Obtención de la ley de control.....	56

4.5	NMPC con modelo de predicción híbrido para un reactor de policondensación de producción de PET	57
5.	Conclusiones y recomendaciones	65
5.1	Conclusiones.....	65
5.2	Recomendaciones.....	68
	Bibliografía.....	71

Lista de figuras

	Pág.
Figura 2-1: Mecanismos de obtencion de PET [27].	8
Figura 2-2: Diagrama de flujo del proceso de producción de PET.	9
Figura 2-3: Representacion esquemática del proceso de estudio.	12
Figura 2-4: Detalle de los compartimientos del reactor.	15
Figura 2-5: Dinámica de las especies involucradas en la reacción para el sistema en lazo abierto para $Q_r = 600\text{W}$ y $q_c = 0\text{L/min}$.	18
Figura 2-6: (a) Respuesta de Temperatura y (b) conversión para el sistema en lazo abierto para $Q_r = 600\text{W}$ y $q_c = 0\text{L/min}$.	18
Figura 2-7: moles en la unidad de separación para el sistema en lazo abierto para $Q_r = 600\text{W}$ y $q_c = 0\text{L/min}$.	19
Figura 2-8: Acciones de control óptimas encontradas para la obtención de la trayectoria óptima.	22
Figura 2-9: Dinámica de las especies involucradas en la reacción para el sistema en lazo abierto aplicando las acciones de control óptimas.	23
Figura 2-10: (a) Perfil óptimo de Temperatura y (b) conversión para el sistema en lazo abierto aplicando las acciones de control óptimas.	24
Figura 2-11: moles en la unidad de separación para el sistema en lazo abierto para el lote óptimo.	24
Figura 3-1: Estrategia de modelamiento híbrido para el reactor de policondensación (Modelo Híbrido A).	28
Figura 3-2: Estrategia de modelamiento híbrido para el reactor de policondensación (Modelo Híbrido B).	29
Figura 3-3: Flujos de calor equivalentes para los compartimientos del reactor.	30
Figura 3-4: Datos para ajustar los parámetros de la estructura del submodelo empírico $f(X, T_r)$ para el Modelo Híbrido A.	34
Figura 3-5: Datos para ajustar los parámetros de la estructura del submodelo empírico $f(X, T_r)$ para el Modelo Híbrido B.	35
Figura 3-6: Predicción de la trayectoria de temperatura por el Modelo Híbrido A comparada con datos obtenidos del modelo completo.	41
Figura 3-7: Predicción de la conversión por el Modelo Híbrido A comparada con datos obtenidos del modelo completo.	41
Figura 3-8: Errores entre los dos modelos: (a) Temperatura, (b) conversión.	42

Figura 3-9:	(a) Comparación entre el calor de reacción en el reactor experimentales con los estimados por $f(X, T_r)$ para el modelo híbrido A. (b) Error.	42
Figura 3-10:	Predicción de la trayectoria de temperatura por el Modelo Híbrido B comparada con datos obtenidos del modelo completo.	43
Figura 3-11:	Predicción de la conversión por el Modelo Híbrido B comparada con datos obtenidos del modelo completo.	44
Figura 3-12:	Errores entre los dos modelos: (a) Temperatura, (b) conversión.	44
Figura 3-13:	(a) Comparación entre los calores de pérdida/generación en el reactor experimentales con los estimados por $f(X, T_r)$ para el modelo híbrido B. (b) Error.	45
Figura 3-14:	Calores generados/perdidos estimados por la función $f(X, T_r)$ del Modelo Híbrido B para distintas condiciones de operación del reactor. ...	46
Figura 3-15:	Cambio en el estado interno z con respecto al tiempo y bajo distintas temperaturas de operación.	47
Figura 3-16:	Comportamiento del modelo dinámico que estima la conversión del modelo híbrido B bajo distintas temperaturas.	47
Figura 3-17:	(a) Mapa de polos para los múltiples modelos lineales obtenido para el Modelo Híbrido B alrededor del punto de operación. (b) Acercamiento alrededor del eje imaginario.	49
Figura 3-18:	(a) Evolución temporal de lo polos para los múltiples modelos lineales obtenido para el Modelo Híbrido B alrededor del punto de operación. (b) Acercamiento alrededor del eje real.	49
Figura 4-1:	Estrategia de control predictivo (modificado de [43]).	52
Figura 4-2:	Diagrama de bloques de un MPC.	54
Figura 4-3:	Comparación de las condiciones de operación de ambos lotes en lazo abierto aplicando las entradas óptimas presentadas en la Figura 2-8	58
Figura 4-4:	Estrategia Split-Range implementada en el controlador.	60
Figura 4-5:	Diagrama de bloques de un NMPC Híbrido con estimación de estados.	61
Figura 4-6:	Respuesta del sistema en lazo cerrado con los distintos controladores descritos, para las condiciones de arranque del lote 2.	63
Figura 4-7:	Acciones de control para los distintos controladores para el lote 2. (a) y (b) MPC, (c) y (d) PI, (e) y (f) PID.	63
Figura 4-8:	Respuesta del sistema en lazo cerrado con los distintos controladores descritos, para las condiciones de arranque del lote 3.	64
Figura 4-9:	Acciones de control para los distintos controladores para el lote 3. (a) y (b) MPC, (c) y (d) PI, (e) y (f) PID.	64

Lista de tablas

	Pág.
Tabla 2-1: Reacciones principales para la producción de PET vía transesterificación.	11
Tabla 2-2: Constantes de velocidad y equilibrio de las reacciones.....	13
Tabla 2-3: Condiciones iniciales del lote a una potencia constante de 600W.....	17
Tabla 2-4: Restricciones de operación de la temperatura en el reactor.....	22
Tabla 2-5: Comparación del lote óptimo con el lote simulado en la Sección 2.4.....	23
Tabla 3-1: Comparación de las estructuras de los submodelos fenomenológicos para los modelos híbridos propuestos.....	32
Tabla 3-2: Comparación de las técnicas para estimar conversión.....	38
Tabla 3-3: Comparación del Modelo Híbrido A y del Modelo Híbrido B.....	38
Tabla 3-4: Comparación del modelo completo con los modelos de predicción híbridos.....	39
Tabla 3-5: Tiempos alrededor de los que se linealiza el Modelo Híbrido.....	48
Tabla 4-1: Condiciones iniciales del lote.....	58
Tabla 4-2: IAE para los controladores implementados para los distintos lotes.....	62

1.Introducción

Los procesos de producción consisten en la transformación de materia, energía e información en productos útiles de mayor valor, que tienen un uso práctico en la sociedad y brindan comodidad al ser humano. Dado que la complejidad y exigencia de los procesos es cada vez mayor, es necesario mejorar tanto su diseño como su operación. Entre las necesidades actuales se encuentra las fluctuaciones de la demanda del mercado, por tal motivo, las plantas de producción deben tener la posibilidad de obtener en un mismo equipo productos con diferentes características y en distintas cantidades. Por esta razón, los procesos por lotes han adquirido una gran popularidad en los últimos años, ya que ofrecen flexibilidad en la producción [1].

Una amplia variedad de productos químicos, productos farmacéuticos, alimentos, productos agrícolas, colorantes, materiales compuestos y polímeros se fabrican en operaciones por lotes [2]. Entre estos productos encontramos los polímeros sintéticos, los cuales pueden ser llamados como los materiales del siglo XX. Desde la Segunda Guerra Mundial el volumen de producción de polímeros se ha incrementado en un factor de 50 a un valor actual de más de 120 millones de toneladas anuales. El consumo per cápita también ha aumentado con los años a un promedio mundial de aproximadamente 20 kg al año [3]. Uno de los polímeros sintéticos más importantes, desde una mirada comercial, es el PET (Polietilentereftalato), su contribución al mercado de las fibras plásticas alcanza demandas del 40% [4].

Desde la mirada del área de Control de Procesos, los procesos por lotes y semilotes¹ representan un reto de diseño de controladores que permitan mantener la calidad deseada de los productos. Entre las particularidades que dificultan el control de este tipo

¹ Los reactores semilotes tienen características similares a los procesos por lotes. Ambos procesos funcionan de forma similar, con la diferencia que los reactivos se van agregando en el transcurso del lote o algunos productos se pueden retirar

de procesos encontramos: no linealidades, interacciones entre sus variables, irreversibilidad del proceso y la carencia de un punto de operación fijo a lo largo de la reacción [2], [5], [6]. Entre las no-linealidades fuertes encontramos [7]:

- En reactores semi-lotes el volumen varía, este efecto se ve reflejado en las ganancias y en las constantes de tiempo de las dinámicas de temperatura (factor ~ 10) a lo largo del lote.
- La conductividad térmica entre las paredes del reactor y la masa reaccionante pueden variar en un factor de 5 entre cada lote.
- Las relaciones entre los flujos de enfriamiento y de calentamiento presentan discontinuidades y saturaciones.

Por las razones mencionadas anteriormente, las técnicas clásicas de control son insuficientes y se hace necesario el uso de técnicas avanzadas de control. La técnica de Control Predictivo (MPC, Model Predictive Control), es la técnica de control que mejor satisface las demandas actuales del control de procesos [8]–[10]. Entre las principales ventajas del MPC se destaca el manejo de restricciones tanto en los estados como en las acciones de control.

La implementación de estas técnicas requiere el uso de modelos que representen las dinámicas e interacciones del proceso en tiempo real a partir de medición de variables del proceso. Algunas de estas variables no se pueden medir de forma directa, como es el caso de los calores de reacción. Por esta razón, se hace necesario el uso de modelos que representen estas variables no medibles a partir de variables de proceso que se puedan medir de forma directa.

Una alternativa es el desarrollo de modelos rigurosos de base fenomenológica. Obtener un modelo de estas características involucra un conocimiento exhaustivo del proceso. Esta tarea involucra cantidades considerables de tiempo y dinero, lo cual resulta ser muy costoso en términos de esfuerzo humano; además, la complejidad del modelo, al estar representado por gran cantidad de variables y parámetros, puede representar inconvenientes a la hora de la implementación de un MPC en tiempo real. Por esta razón, Vandecraen et al. en [11] se planteó que la obtención de un modelo detallado basado en principios fundamentales no resulta ser viable para la implementación de un proyecto de control.

Por otro lado, los modelos caja negra resultan ser una solución atractiva para la obtención de modelos con fines de control si se evalúa la relación precisión/ complejidad [12]. Pero en el caso de los reactores por lotes, los cuales carecen de un punto de operación fijo a lo largo de la reacción [2], Las técnicas clásicas de identificación son insuficientes para caracterizar la dinámica de este tipo de procesos, ya que estas han sido desarrolladas para obtener modelos alrededor de un punto de operación. Por esta razón, es necesario realizar una gran cantidad de experimentos para caracterizar el proceso ante distintas condiciones de operación. Por lo tanto, es imposible el uso de modelos caja negra para este tipo de sistemas, ya que por razones técnicas no es viable económicamente realizar las pruebas necesarias para obtener suficientes datos [11].

Con el fin de aprovechar las fortalezas y mitigar las debilidades de ambas alternativas de modelamiento, han surgido propuestas donde se combinan estructuras fenomenológicas y empíricas. En el caso de procesos continuos en [13], [14] se proponen modelos caja gris (o híbridos) donde se reducen las estructuras fenomenológicas de sistemas a gran escala por proyecciones usando descomposición ortogonal propia (POD, *proper orthogonal decomposition*) y se proponen estructuras empíricas, cuyos parámetros son hallados por estimación de parámetros. Por el lado de los procesos por lotes se tienen las propuestas de [11] y [15], donde la empresa IPCOS propone su controlador MPC INCA, en el cual desarrolla una metodología para la obtención de modelos con fines de control para reactores por lotes. Esta metodología la denominan modelamiento híbrido para procesos por lotes ("*Hybrid batch modeling*"). Está planteada el uso de modelos caja gris no lineales para ser usados como modelos de predicción en el MPC. Se utiliza un submodelo de base fenomenológica para representar dinámicas cuyas variables se pueden obtener mediante mediciones directas del proceso y por medio de datos experimentales se identifican las dinámicas que no se pueden representar por una vía rápida (o no son observables) a partir de la fenomenología, obteniendo una función en términos de variables medibles. Esta metodología ha sido probada con éxito en reactores de poliadición [7], [16], [17].

El propósito de este trabajo es extrapolar la metodología de modelamiento híbrido con fines de control descrita en [11], [15], [16], [18] a un reactor de policondensación. En los trabajos descritos anteriormente proponen para reactores de poliadición estimar a partir

de funciones empíricas los calores de reacción. Si bien desde el punto de vista del calor de reacción, los procesos de policondensación son menos atractivos que los procesos de poliadición [19], los de policondensación presentan retos adicionales como son la generación de subproductos que desfavorecen la conversión como consecuencia de la reversibilidad de las reacciones, razón por la cual se deben contar con unidades de separación integradas al reactor y por lo tanto la presencia de varias fases [20]–[22], haciendo que éstos últimos sean procesos difíciles de controlar. A continuación se presentan los objetivos del trabajo de investigación y se describe la Tesis por capítulos.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo general

Proponer una estrategia de control predictivo para un reactor por lotes de policondensación.

1.1.2 Objetivos específicos

- Describir la técnica de Control Predictivo Basado en Modelo.
- Describir el proceso de policondensación en reactores por lotes.
- Formular un modelo matemático híbrido que represente un proceso de policondensación en un reactor por lotes.
- Implementar en simulación un MPC para el sistema representado por el modelo híbrido obtenido para el reactor.
- Analizar la estabilidad y el desempeño del MPC implementado en simulación bajo diferentes tipos de perturbaciones.

1.2 Estructura de la tesis capítulo a capítulo

Esta tesis está organizada en cinco capítulos. A continuación se describe brevemente el contenido de cada capítulo.

Capítulo 2. En este capítulo se describe el proceso de policondensación. Se muestra el proceso de producción de PET y se presenta un modelo de base fenomenológica de la

producción de PET en un reactor semi-lote. Con este modelo se obtiene un perfil óptimo de temperatura que maximiza la conversión en el reactor. Este modelo representa la planta a lo largo del trabajo y por lo tanto servirá para simular el comportamiento del proceso y de éste se extraerán los datos experimentales.

Capítulo 3. En este capítulo se presentan dos modelos de orden reducido híbridos con fines de control para el proceso del Capítulo 2. Estos modelos poseen dinámicas representadas por la fenomenología y un modelo empírico que representa el calor generado y perdido como consecuencia de las reacciones y del intercambio con la unidad de separación.

Capítulo 4. En este capítulo se presenta una descripción general de la técnica de control predictivo (MPC). Además, se presenta un MPC basado en un modelo de predicción no lineal híbrido para el caso de estudio y se compara su desempeño con controladores clásicos (PI y PID).

Capítulo 5. En este capítulo se presentan las principales conclusiones del trabajo de investigación y se dan unas recomendaciones.

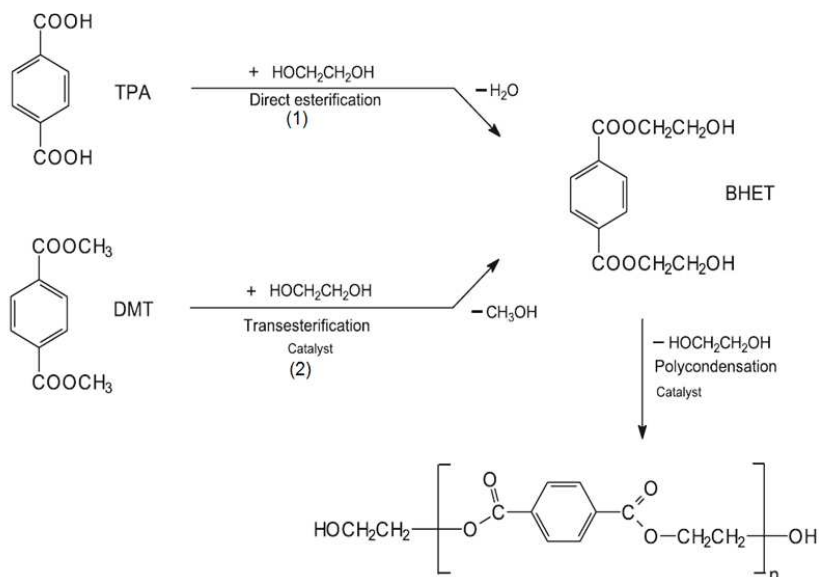
2. Proceso de Policondensación

La policondensación es un proceso de polimerización que se lleva a cabo por etapas (*step-growth polymerizations*). Los polímeros obtenidos por condensación son formados por monómeros compuestos de dos o más grupos funcionales. Estos polímeros se llevan a cabo por reacciones que implican eliminar algunas moléculas más pequeñas [23], [24].

Gran parte de los polímeros comerciales que gobiernan el mercado son manufacturados vía policondensación. Entre los principales productos encontramos el nylon, los poliésteres y los policarbonatos. Los poliésteres han tenido en las últimas décadas una alta demanda en el mercado por las facilidades de extrusión y moldeo. Entre los poliésteres más comunes encontramos el PET. Este polímero representa cerca del 40% de las fibras sintéticas [25] y el 33% de los envases contenedores de bebidas carbonatadas [26]. Es así, como el PET es el producto más representativo de los procesos de policondensación [27], [28], razón por la cual se eligió éste producto como el objeto de estudio del trabajo de esta investigación.

2.1 Proceso de producción de PET

El PET se produce principalmente por dos vías, en la Figura 2-1 se presentan ambos mecanismos. El mecanismo (1) se realiza a través de Ácido Tereftálico (TPA) y el mecanismo (2) es a partir de Dimetil Tereftalato (DMT). La vía tradicional por medio de la cual se ha elaborado este polímero es a partir de DMT, ya que éste reactivo se puede purificar fácilmente para alcanzar la calidad necesaria para la producción del polímero final y no necesita trabajar a condiciones elevadas de presión y temperatura si se compara con la producción a través de TPA. Por las razones mencionadas, en este trabajo de investigación se sintetizará PET por la vía (2), es decir, a partir de DMT.

Figura 2-1: Mecanismos de obtención de PET [27].

En el mecanismo (2) se hace reaccionar DMT con etilenglicol en una proporción molar de 1:2 a una temperatura inicial entre 140-150°C y a 1 atm de presión, esta etapa es conocida como transesterificación (prepolimerización) y se obtiene el monómero llamado bis(2-hidroxietil)- tereftalato (BHET) y como subproducto se obtiene Metanol, el cual se debe ir evacuando del reactor para favorecer la conversión. Luego se lleva a cabo la reacción de policondensación donde al BHET obtenido en el proceso de transesterificación se va aumentando gradualmente la temperatura y se va llevando a cabo el proceso de polimerización por pasos, obteniendo como subproducto de las reacciones de condensación Etilenglicol (EG), el EG se remueve continuamente del reactor.

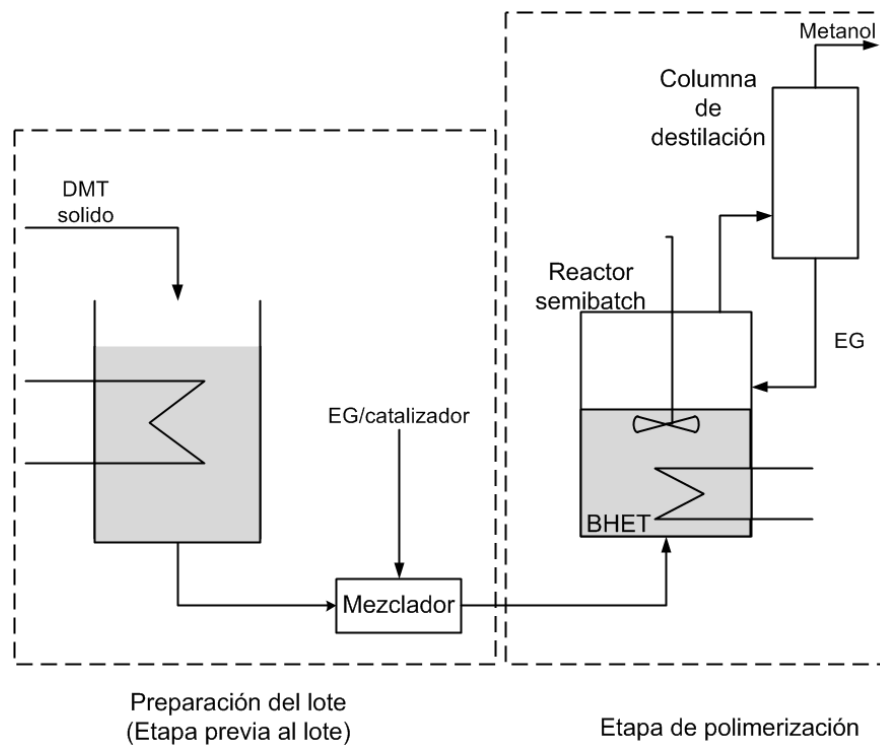
2.2 Descripción del caso de estudio

El proceso de producción de PET que se estudiará es un reactor semilote² a escala de laboratorio que se encuentra en el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Sao Paulo [21], [29]. En la Figura 2-2 se presenta un diagrama de flujo de un proceso industrial de producción de PET. Como se describió en la sección anterior, en

² Inicialmente el reactor opera como un proceso por lotes. Pero como a medida que la reacción avanza se empiezan a retirar los productos volátiles, el reactor opera como un proceso semilote.

el proceso de transesterificación, se produce un prepolimero que contiene principalmente bis(2-hidroxietil)- tereftalato (BHET) a partir de DiMetilTeraftalato (DMT) y EtilenGlicol (EG) para luego llevar a cabo la polimerización por pasos del BHET. Antes de cargar el reactor, se funde el DMT solido (alrededor de los 140°C) y se mezcla con el EtilenGlicol. Debido a la reversibilidad de las reacciones, para mejorar la conversión en el reactor se deben eliminar algunos productos volátiles (subproductos del proceso), en este caso es el Metanol (M). El EG hace parte de los productos volátiles; por esta razón, se debe contar con una unidad de separación, que permita separar el EG y el M y se pueda recircular el EG al reactor. La reacción se da en presencia de un catalizador, normalmente se utiliza el acetato de zinc.

Figura 2-2: Diagrama de flujo del proceso de producción de PET.



A continuación se presentan las reacciones principales del proceso:

Tabla 2-1: Reacciones principales para la producción de PET vía transesterificación.

Reacciones principales para la producción de PET vía transesterificación	
Reacción	Descripción
$E_m + EG \xrightleftharpoons[k_1/K_1]{k_1} E_g + M$	Intercambio de Ester
$E_m + E_g \xrightleftharpoons[k_2/K_2]{k_2} Z + M$	Transesterificación
$2E_g \xrightleftharpoons[k_2/K_2]{k_2} Z + EG$	Policondensación

2.3 Modelo del proceso

En la Figura 2-3 se presenta el diagrama del sistema de estudio. En este caso, la unidad de separación se modela como un tanque donde se almacena una mezcla de las especies volátiles. En las expresiones (2-4) - (2-8) se presentan los balances de moles por componentes para cada especie de interés en el reactor y en (2-9) el balance de masa global para la masa reaccionante M_r . Donde y_{EG} , y_M representan las fracciones molares de EG y M en la corriente de vapor (F_v) que sale del reactor como consecuencia de la evaporación. $x_{EG,N}$, $x_{M,N}$ son las fracciones molares de EG y M en el depósito y L_N la corriente de líquido que retorna de la columna al reactor; PM_{EG} , PM_M representan los pesos moleculares de EG y M , respectivamente. Y por último, R_1, R_2, R_3 son las velocidades de reacción, las cuales están dadas por las expresiones (2-10)-(2-12). Donde k_1, k_2, k_3 representan las constantes de velocidad y K_1, K_2, K_3 las constantes de equilibrio. En la Tabla 2-2 se presentan los valores de estas constantes. $[E_m], [E_g], [Z], [EG]$ y $[M]$ son las concentraciones volumétricas de cada una de las especies y por esta razón se presentan en [].

$$\frac{dE_m}{dt} = V(-R_1 - R_2) \tag{2-4}$$

$$\frac{dE_g}{dt} = V(R_1 - R_2 - R_3) \tag{2-5}$$

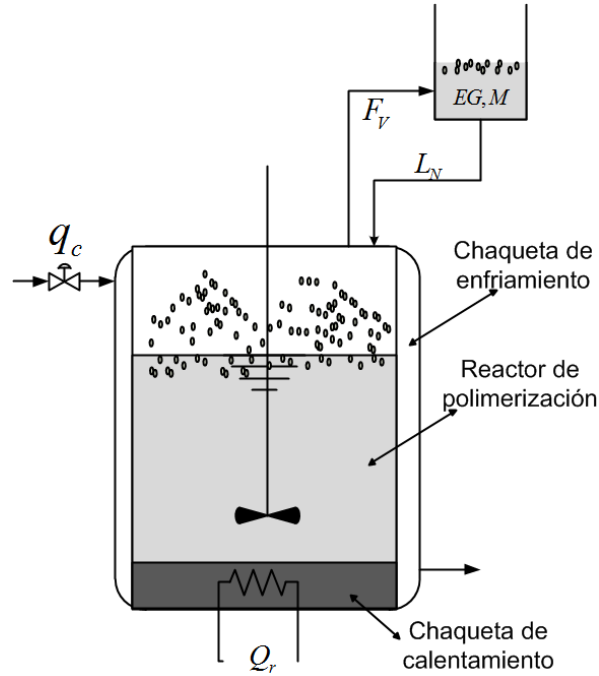
$$\frac{dZ}{dt} = V(R_2 + R_3) \quad (2-6)$$

$$\frac{dEG}{dt} = -y_{EG}F_v + x_{EG,N}L_N + V(-R_1 + R_3) \quad (2-7)$$

$$\frac{dM}{dt} = -y_M F_v + x_{M,N} L_N + V(R_1 + R_2) \quad (2-8)$$

$$\frac{dM_r}{dt} = -F_v (y_{EG} PM_{EG} + y_M PM_M) + L_N (x_{EG,N} PM_{EG} + x_{M,N} PM_M) \quad (2-9)$$

Figura 2-3: Representación esquemática del proceso de estudio.



$$R_1 = k_1 \left(2[E_m][EG] - \frac{[E_g][M]}{K_1} \right) \quad (2-10)$$

$$R_2 = k_2 \left(2[E_m][E_g] - \frac{2[Z][M]}{K_2} \right) \quad (2-11)$$

$$R_3 = k_3 \left([E_g]^2 - \frac{4[Z][EG]}{K_3} \right) \quad (2-12)$$

Tabla 2-2: Constantes de velocidad y equilibrio de las reacciones.

Constantes de velocidad y de equilibrio [4]			
Constante de velocidad $\left(k_j = A_j e^{\frac{-Ea_j}{RT}} \right)$	Factor de frecuencia A_j [kcal/mol]	Energía de activación Ea_j [l/mol/min]	Constante de equilibrio K_j
$j=1$	15	4×10^4	0,30
$j=2$	15	2×10^4	0,15
$j=3$	18,5	$6,8 \times 10^5$	0,50

Las fracciones molares se calculan por la combinación de las leyes de Raoult y Dalton:

$$y_{EG} = K_{EG} \frac{EG}{N_t} \tag{2-13}$$

$$y_M = K_M \frac{M}{N_t}$$

$$y_M + y_{EG} \leq 1 \tag{2-14}$$

K_{EG} y K_M son las constantes de equilibrio líquido-vapor y N_t el número total de moles en el reactor. El modelo representa el sistema desde el arranque, es decir desde que se carga el lote. A la temperatura en la que se carga el DMT, el reactor no ha alcanzado el equilibrio líquido-vapor. Si la suma de las presiones parciales de EG y M son menores a la presión total del sistema, no se ha alcanzado el equilibrio líquido-vapor. Por esta razón se debe chequear la expresión equivalente $y_{EG} + y_M$; si $y_{EG} + y_M < 1$ no se ha alcanzado el equilibrio y por lo tanto no hay generación de vapor ($F_v = 0$) y si $y_{EG} + y_M = 1$ se alcanzó el equilibrio y por lo tanto hay generación de vapor $F_v > 0$. La expresión para el F_v puede ser consultada en [29].

Se asume la unidad de separación como un depósito, al cual llegan los vapores y se condensan, asumiendo que sólo se recircula EG al reactor, por lo tanto el número de moles M retiradas del reactor se acumulan en la unidad de separación. La cantidad de moles de metanol y de etilenglicol que se acumulan en la unidad de separación (EG_v y M_v) están dadas por las siguientes expresiones:

$$\frac{dEG_v}{dt} = y_{EG}F_v - x_{EG,N}L_N \quad (2-15)$$

$$\frac{dM_v}{dt} = y_MF_v - x_{M,N}L_N \quad (2-16)$$

El número de moles totales en la unidad de separación está dado por:

$$U = M_v + EG_v \quad (2-17)$$

Y las fracciones parciales en la fase líquida de la unidad de separación están dadas por:

$$\begin{aligned} x_M &= \frac{M_v}{U}, \\ x_{EG} &= \frac{EG_v}{U}. \end{aligned} \quad (2-18)$$

Para conocer la cantidad de líquido almacenado en el depósito que regresa al reactor, se utiliza la correlación de Billet's, ecuación (2-19), donde U es el total de moles acumuladas en el depósito y $\beta=0,02$. El depósito se encuentra vacío hasta alcanzar el equilibrio líquido- vapor, momento en el cual se empiezan a evaporar las especies más volátiles y ascienden para acumularse en el tanque.

$$L_N = \beta U^3 \quad (2-19)$$

El balance de energía de la masa reaccionante dentro del reactor está definido por la expresión (2-20). Las expresiones para las entalpías $H_R^V, h_R^V, H_N^L, h_N^L$ pueden ser consultadas en [21]. En las ecuaciones (2-21)- (2-26) se presentan los balances de energía que permiten obtener la temperatura para cada uno de los compartimientos que componen el reactor. En la Figura 2-4 se presenta los detalles de los elementos que conforman la estructura física del reactor y sus respectivos flujo de calor (Q) entre los materiales que lo componen. La temperatura de cada compartimiento está representada por un balance de energía. Las temperaturas $T_r, T_{Cu}, T_{Al}, T_{A.inox.base}, T_{A.inox.lateral}, T_{A.inox.Tapa}, T_e$

son respectivamente: la temperatura de la resistencia de cobre, la temperatura en la base de acero inoxidable del reactor, la temperatura en las paredes de acero inoxidable del reactor, la temperatura en la tapa de acero inoxidable del reactor y la temperatura de la chaqueta de enfriamiento.

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{1}{M_r C_{p_r}} \left[(Q_4 - Q_5 - Q_{11}) - \left(V \sum_{j=1}^3 (-\Delta H_{r_j}) R_j \right) - F_v (H_R^v - h_R^v) + L_N (H_N^l - h_N^l) \right] \quad (2-20)$$

$$\frac{dT_{Cu}}{dt} = \frac{1}{M_{Cu} C_{p_{Cu}}} [(Q_r - Q_1)] \quad (2-21)$$

$$\frac{dT_{Al}}{dt} = \frac{1}{M_{Al} C_{p_{Al}}} [(Q_1 - Q_2 - Q_3 - Q_{10})] \quad (2-22)$$

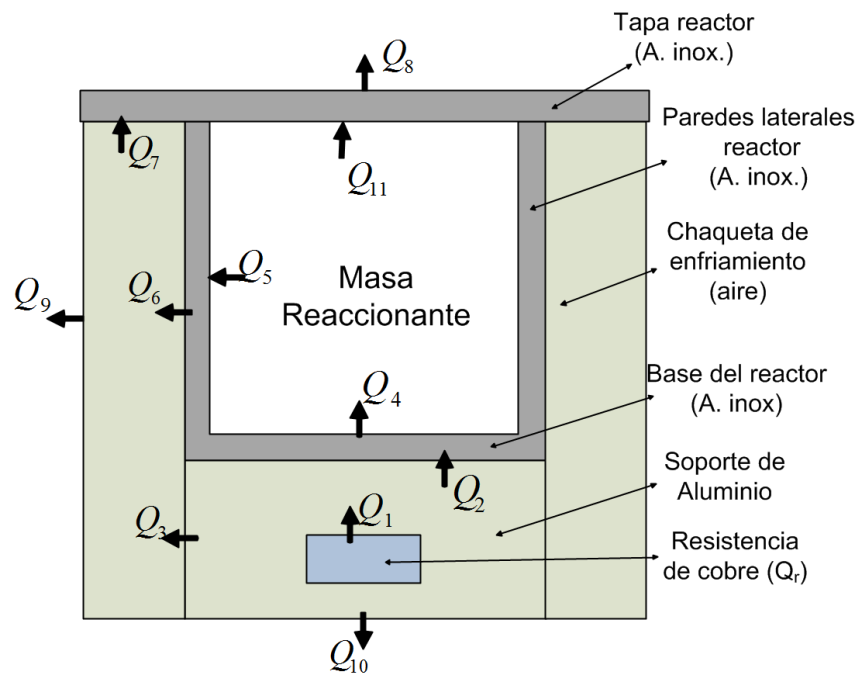
$$\frac{dT_{A.inox.base}}{dt} = \frac{1}{M_{A.inox.base} C_{p_{A.inox.base}}} [(Q_2 - Q_4)] \quad (2-23)$$

$$\frac{dT_{A.inox.lateral}}{dt} = \frac{1}{M_{A.inox.lateral} C_{p_{A.inox.lateral}}} [(Q_5 - Q_6)] \quad (2-24)$$

$$\frac{dT_{A.inox.Tapa}}{dt} = \frac{1}{M_{A.inox.Tapa} C_{p_{A.inox.Tapa}}} [(Q_7 - Q_8 + Q_{11})] \quad (2-25)$$

$$\frac{dT_e}{dt} = \frac{1}{\rho_e V_e C_{p_e}} [(Q_3 + Q_6 - Q_7 - Q_9) - q_c \rho_e C_{p_e} (T_e - T_{ext})] \quad (2-26)$$

Figura 2-4: Detalle de los compartimientos del reactor.



El sistema DAE (*Differential Algebraic equations*) propuesto en [29] tiene un total de 15 ecuaciones diferenciales y 7 ecuaciones algebraicas y esta validado con datos experimentales, razón por la cual representa las dinámicas de los estados del proceso para las condiciones en las que se opera el reactor. A lo largo de este trabajo de investigación este sistema DAE será la planta de estudio.

En resumen, se tiene un modelo DAE no lineal, el cual en adelante se representara de la forma:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f(x, u) \\ 0 &= g(x, u, y) \end{aligned} \quad (2-27)$$

Donde, f representa a las ecuaciones diferenciales (2-4)- (2-9), (2-15)- (2-16) y (2-20)- (2-26) y g las ecuaciones algebraicas (2-13)- (2-14) y (2-17)-(2-19). El vector de estados $x \in R^{15}$, de salidas $y \in R$, y de entradas $u \in R^2$ se presenta a continuación:

$$x = \begin{bmatrix} E_m & E_g & Z & EG & M & M_r & EG_v & M_v & \dots \\ T_r & T_{Cu} & T_{Al} & T_{A.inox.base} & T_{A.inox.lateral} & T_{A.inox.Tapa} & T_e \end{bmatrix}^T, \quad x \in R^{15}; \quad (2-28)$$

$$y = T_r, \quad y \in R \quad ; \quad u = [Q_r \quad q_c]^T, \quad u \in R^2.$$

2.4 Respuesta del sistema en lazo abierto.

Con el fin de conocer el comportamiento en lazo abierto del proceso de policondensación descrito en las secciones 2.1 y 2.2 se simulará el modelo descrito en la sección 2.3. Se carga el lote a una temperatura de 140°C, y se carga el DMT y el EG en una proporción molar de 1:2. Durante todo el lote se mantienen las entradas u definidas en (2-28) de forma constante, con la resistencia eléctrica se actúa con una potencia (Q_r) de 600W y el flujo en la chaqueta de enfriamiento (q_c) de 0 L/min. En la Tabla 2-3 se presentan las condiciones iniciales del lote.

Tabla 2-3: Condiciones iniciales del lote a una potencia constante de 600W.

Condiciones iniciales del lote		
Variable	Descripción	Valor
E_{m0}	Moles iniciales de E_m [mol]	3
E_{g0}	Moles iniciales de E_g [mol]	0
Z_0	Moles iniciales de Z [mol]	0
EG_0	Moles iniciales de EG [mol]	3
M_0	Moles iniciales de M [mol]	0
T_{r0}	Temperatura inicial en el reactor [°C]	140.00
T_{Cu0}	Temperatura inicial de la resistencia de cobre [°C]	199.61
T_{Al0}	Temperatura inicial del soporte de aluminio [°C]	189.65
T_{base0}	Temperatura inicial de la base de acero inoxidable [°C]	194.61
T_{pared0}	Temperatura inicial de las paredes de acero inoxidable [°C]	171.80
$T_{Chaqueta0}$	Temperatura inicial de la chaqueta [°C]	134.89
T_{Tapa0}	Temperatura inicial de la tapa [°C]	130.11

En la Figura 2-5 se presenta la evolución temporal del número de moles de las especies que están presentes en el reactor a lo largo del lote. En la Figura 2-6 se presenta el comportamiento de la temperatura a lo largo del lote y la conversión en el reactor.

Figura 2-5: Dinámica de las especies involucradas en la reacción para el sistema en lazo abierto para $Q_r = 600\text{W}$ y $q_c = 0\text{L/min}$.

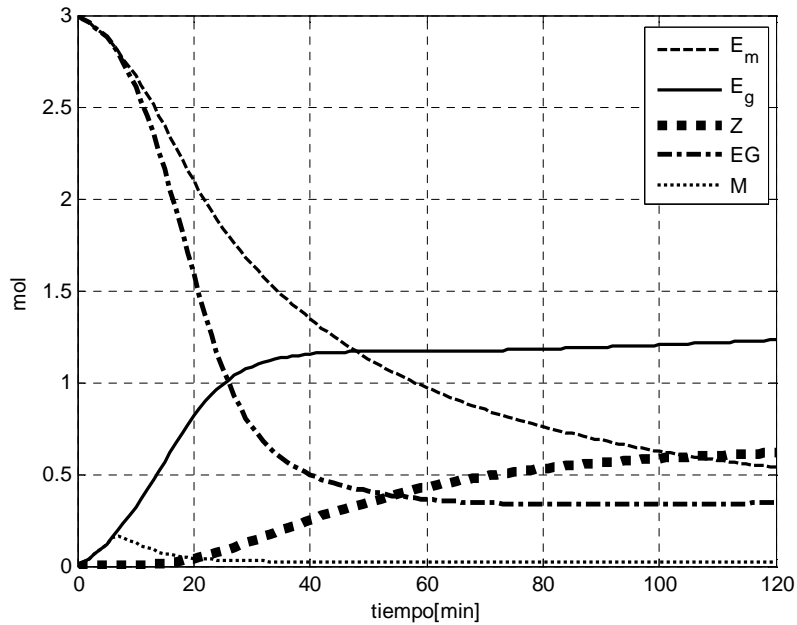
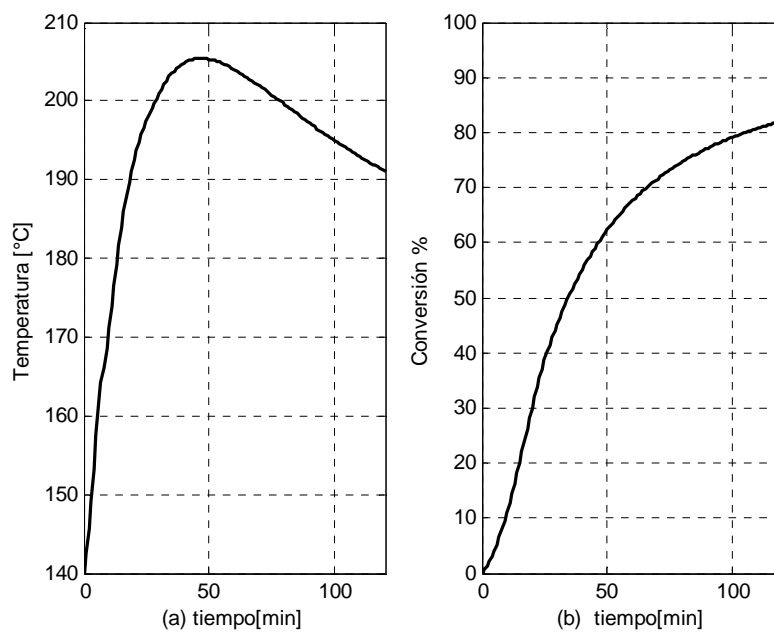
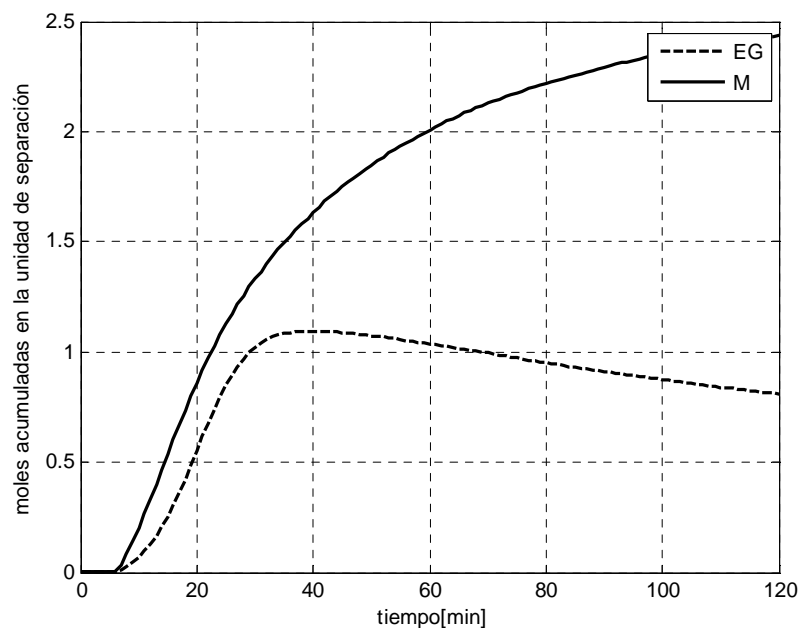


Figura 2-6: (a) Respuesta de Temperatura y (b) conversión para el sistema en lazo abierto para $Q_r = 600\text{W}$ y $q_c = 0\text{L/min}$.



Para el tiempo en el cual se corre el lote, se logra ver que se llega a un número de moles final del polímero $Z = 0,62 \text{ mol}$, alcanzando una conversión final de $X = 82\%$. Aproximadamente a los 6 minutos se alcanza el equilibrio Líquido- Vapor, por lo tanto se comienza a generar una corriente de vapor que se dirige a la unidad de separación, la cual contiene EG y M . En la unidad de separación se deben separar estas dos especies y se debe retornar al reactor el EG , ya que este favorece la conversión, por esta razón en la Figura 2-5 se observa que la concentración de M comienza a aumentar en el reactor y luego de alcanzar el equilibrio Líquido- Vapor se disminuye ya que se separa del EG gracias a la unidad de separación. Y en la Figura 2-7 se observa como aproximadamente a los 40 minutos se comienza a disminuir la concentración de EG en la columna, ya que éste se retorna al reactor.

Figura 2-7: moles en la unidad de separación para el sistema en lazo abierto para $Q_r = 600\text{W}$ y $q_c = 0\text{L}/\text{min}$.



2.5 Obtención de la trayectoria óptima de temperatura de operación.

Para hacer control de seguimiento en procesos por lotes, el primer paso es obtener la trayectoria por la cual se van a guiar las variables de interés del proceso, esta trayectoria

debe ser tal que cumpla con los requerimientos que se imponen bajo el criterio del ingeniero de procesos y las restricciones de operación, esta trayectoria óptima tiene asociadas una cierta secuencia de entradas manipuladas del sistema. Luego el problema de la obtención de la trayectoria se vuelve un problema de optimización en donde las variables de decisión son conformadas principalmente por el vector de acciones de control [33].

En nuestro caso nos interesa maximizar la conversión (X) en el reactor para un lote de $t_f = 120$ min, por lo tanto se busca maximizar el número de moles de la cadena polimérica Z , cumpliendo con las restricciones de operación del proceso. En las expresiones (2-29)- (2-33) se presenta el problema de optimización.

$$J = \min_u \int_{t_0}^{t_f} (X - 1)^2 dt \quad (2-29)$$

Sujeto a:

$$\dot{x}(t) = f(x(t), u(t)) \quad (2-30)$$

$$y(t) = g(x(t), u(t))$$

$$y_{EG} + y_M \leq 1 \quad (2-31)$$

$$T \leq T_{\max} \quad (2-32)$$

$$u_{\min} \leq u \leq u_{\max} \quad (2-33)$$

La variable de decisión es el vector de entradas $u = [Q_r \quad q_c]^T$, estas acciones de control son las que me permiten extraer o ingresar calor al reactor para obtener la temperatura deseada, es decir, la trayectoria de temperatura que me permite obtener las condiciones deseadas del producto final. El sistema se discretizó temporalmente en 20 partes, es decir se cambia la acción de control cada 6 minutos, en ese espacio de tiempo la acción de control se mantiene constante.

En la Figura 2-3 se presenta el diagrama esquemático del proceso, donde se observa que en el reactor se manipula la potencia Q_r , de la resistencia de calentamiento y el flujo

de aire q_c que circula por la chaqueta de enfriamiento. En el caso que se necesite enfriar el reactor, se necesita extraer calor de éste, en la optimización equivale a tener $u < 0$ y corresponde a enfriar el reactor, por lo tanto se tendría que actuar con q_c . Cuando la masa reaccionante necesita recibir calor para favorecer la conversión se debe calentar y por lo tanto manipular la potencia Q_r a través de la chaqueta de calentamiento y la optimización entrega como resultado $u > 0$. Por lo tanto, en la expresión (2-33) el límite inferior del parámetro de restricción es $u_{\min} = -q_{c\max}$ y corresponde al flujo de aire máximo que se puede hacer circular por la chaqueta de enfriamiento $q_{c\max} = 120 \text{ L / min}$ y el límite superior $u_{\max} = Q_{r\max}$ es la potencia máxima de la resistencia eléctrica $Q_{r\max} = 2000 \text{ W / min}$.

La optimización está sujeta al modelo dinámico (2-30), éste se describe en la Sección 2.3 y representado por (2-27)- (2-28). Las condiciones iniciales son las especificadas en la Tabla 2-3 de la sección 2.4. En la expresión (2-31) y_{EG} y y_M representan las fracciones de vapor de EG y M , esta expresión define las condiciones del equilibrio Líquido- Vapor en el reactor, cuando esta expresión es mayor que 1, el modelo pierde su rango de validez y por lo tanto se toma como una restricción. La expresión (2-32) define la temperatura máxima a la cual puede operar el reactor, esta temperatura está limitada por las condiciones establecidas en la Tabla 2-4, se tienen tres condiciones de temperatura que limitan la operación del reactor, en este caso se seleccionó una $T_{\max} = 260^\circ\text{C}$, ya que ésta garantiza que no se formará Acetaldehído, que el polímero producido no se degradará y que el DMT no se evaporará.

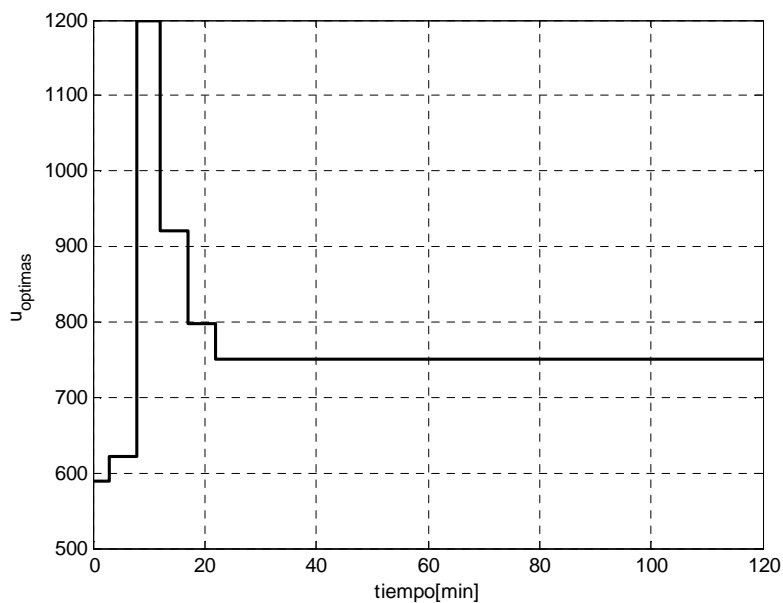
El problema de optimización es un problema de optimización no lineal y se solucionó en Matlab por el método del punto interior [34], [35]. La secuencia de entradas óptimas que se obtuvieron se presenta en la Figura 2-8. Como se observa en la figura sólo se obtuvieron acciones positivas, por lo tanto sólo se necesitó calentar para obtener la máxima conversión en el reactor. También se observa que después de los 30 minutos la entrada se mantiene constante hasta el final del lote, por lo tanto se puede concluir que los primeros 30 minutos es la etapa decisiva del lote y es en la que definen las características finales del lote, ya que en el tiempo restante la temperatura en el reactor

es autorregulada por efecto del equilibrio Líquido-Vapor. Este comportamiento también es descrito por Teixeira en [21].

Tabla 2-4: Restricciones de operación de la temperatura en el reactor.

Restricción de operación	Valor de Temperatura (T_x)	Explicación del fenómeno
Temperatura de formación de Acetaldehído.	$T_x > 270^\circ C$	El Acetaldehído es un producto secundario que se forma en la obtención del PET. Este compuesto afecta la calidad del polímero, razón por lo cual no es deseada su producción en el proceso.
Temperatura inicial de degradación del PET.	$T_x = 300^\circ C$	Temperatura en la cual el polímero comienza a degradarse y pierde sus propiedades.
Punto de ebullición del DMT.	$T_x = 282^\circ C$	El DMT es el reactivo principal, razón por la cual no se debe permitir que se evapore del reactor hacia la columna. Además puede causar ahogamiento y ensuciamiento de la unidad de separación si se adhiere a sus paredes

Figura 2-8: Acciones de control óptimas encontradas para la obtención de la trayectoria óptima.



En la Figura 2-9 se presenta la evolución temporal de las moles de las especies de interés que intervienen en la reacción. En la Figura 2-10 (a) se presenta la trayectoria de temperatura óptima y en la Figura 2-10 (b) la máxima conversión que se obtiene en el reactor para las condiciones de operación establecidas. Se logra llegar a una concentración molar final del polímero de $Z = 0,81 \text{ mol}$, alcanzando una conversión final de $X = 86,2\%$. En la Tabla 2-5 se compara el lote simulado en la Sección 2.4 con el lote óptimo. Se observa que se logró maximizar la conversión y por lo tanto la concentración final de la cadena polimérica.

Tabla 2-5: Comparación del lote óptimo con el lote simulado en la Sección 2.4.

Comparación del lote óptimo con el lote simulado en la Sección 2.4.		
	Número de moles de la cadena polimérica Z [mol]	Conversión X [%]
Lote con entradas constantes (Capítulo 2.4)	0,62	82
Lote con entradas óptimas (Capítulo 2.5)	0,81	86,2

Figura 2-9: Dinámica de las especies involucradas en la reacción para el sistema en lazo abierto aplicando las acciones de control óptimas.

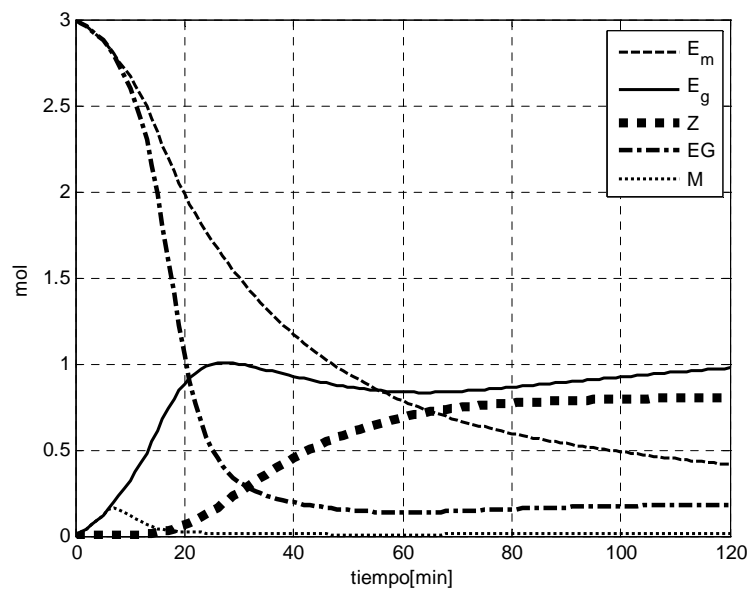


Figura 2-10: (a) Perfil óptimo de Temperatura y (b) conversión para el sistema en lazo abierto aplicando las acciones de control óptimas.

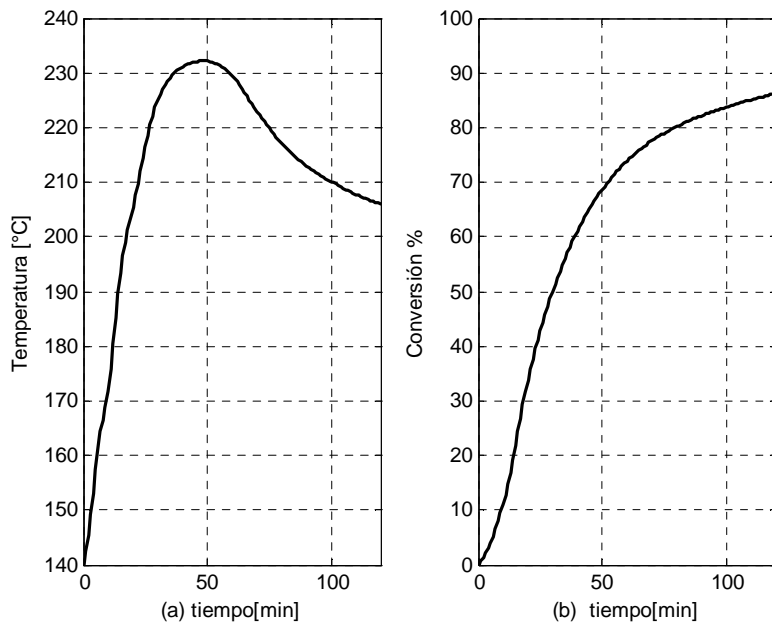
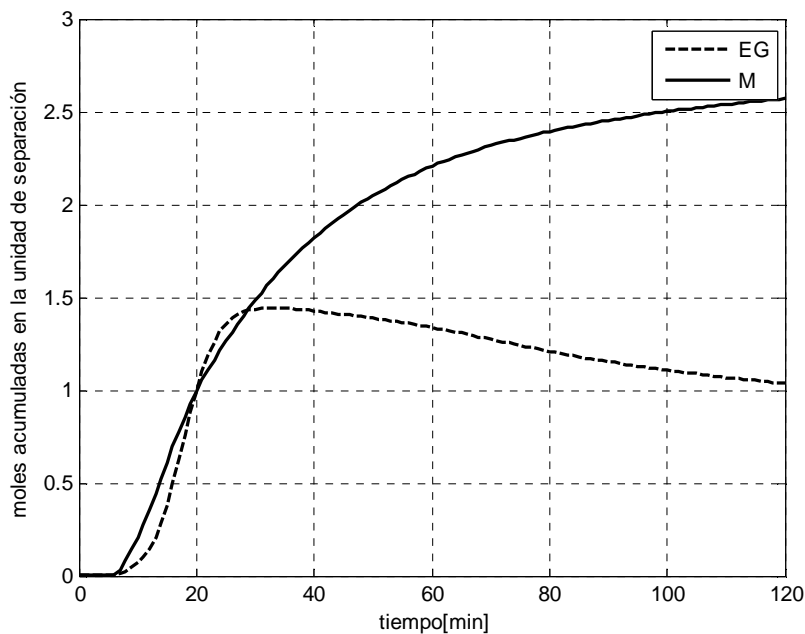


Figura 2-11: moles en la unidad de separación para el sistema en lazo abierto para el lote óptimo.



Al igual que en el lote simulado en la sección anterior a los 6 minutos se alcanza el equilibrio Líquido- Vapor, por lo tanto se comienza a generar una corriente de vapor que se dirige a la unidad de separación. En la Figura 2-9 se observa que la concentración de *M* comienza a aumentar en el reactor y luego de alcanzar el equilibrio Líquido- Vapor se disminuye ya que se separa del *EG* gracias a la unidad de separación. Y en la Figura 2-11 se observa como aproximadamente a los 30 minutos se comienza a disminuir la concentración de *EG* en la columna, ya que éste se retorna al reactor, mientras en el lote anterior se comenzaba a retornar a los 40 minutos, esta es la mejora que se realiza con las acciones óptimas, ya que al retornar el *EG* al reactor se favorece la formación de *Z* ; razón por la cual, se favorece la conversión.

3. Modelo híbrido reducido del proceso de policondensación

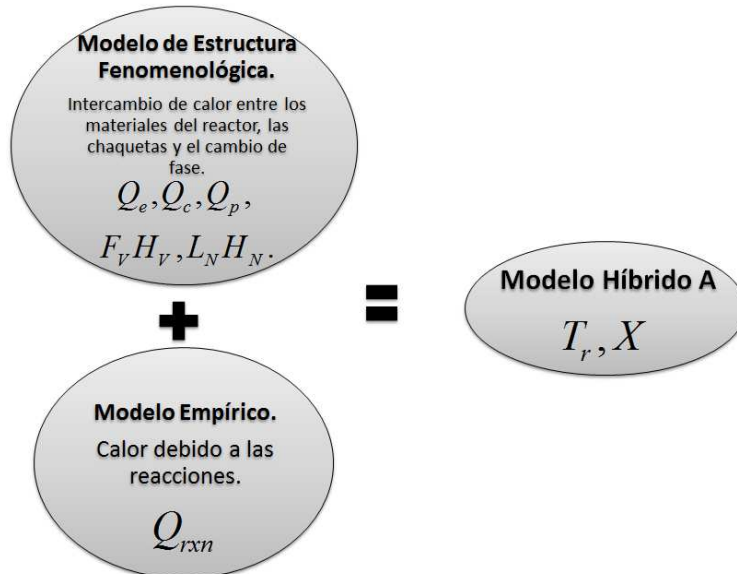
Con el fin de implementar una estrategia de control basada en modelo para el caso de estudio, en esta sección se formulará el modelo de predicción que se utilizará para predecir las salidas futuras del sistema para que el proceso siga el perfil de temperatura encontrado en la Sección 2.5. Éste modelo tiene que ser un modelo simple y que esté en función de las variables medibles del proceso, con el fin de implementarse en una optimización en tiempo real. El modelo se encuentra a partir de una reducción que se realiza al modelo completo del proceso descrito en el Capítulo 2

El modelo reducido que se busca desarrollar en este capítulo es un modelo híbrido [15], [16], el cual permitirá al controlador predecir los valores futuros de la temperatura en el reactor T_r . La característica de esta metodología de modelamiento es que aprovecha las ventajas del modelamiento fenomenológico (caja blanca) y del modelamiento empírico (caja negra), donde la física del reactor se modela haciendo uso de los balances de energía y el calor que no se puede medir de forma directa se estima con una función empírica no lineal que es función de las variables medibles del proceso [11],[36]. En este trabajo se plantean dos modelos híbridos, con estos se logró una reducción del modelo completo de $R^{15} \rightarrow R^4$. Las características de estos modelos se describen a continuación:

En el **Modelo Híbrido A** se realiza una aproximación similar a la propuesta de [16], éste contiene un modelo de estructura fenomenológica que representa el intercambio de calor entre la chaqueta de calentamiento Q_c y de enfriamiento Q_e con la masa reaccionante, y las pérdidas Q_p del reactor con el ambiente; además, en la estructura fenomenológica se tiene en cuenta el calor debido a la pérdida/generación que se da en el reactor por fenómenos de vaporización/condensación de los componentes volátiles que ingresan/retiran a la unidad de separación $(F_v H_v, L_N H_N)$. El modelo A también contiene

una función empírica que representa el calor generado por las reacciones Q_{rxn} . En la Figura 3-1 se presenta la estrategia de modelamiento utilizada.

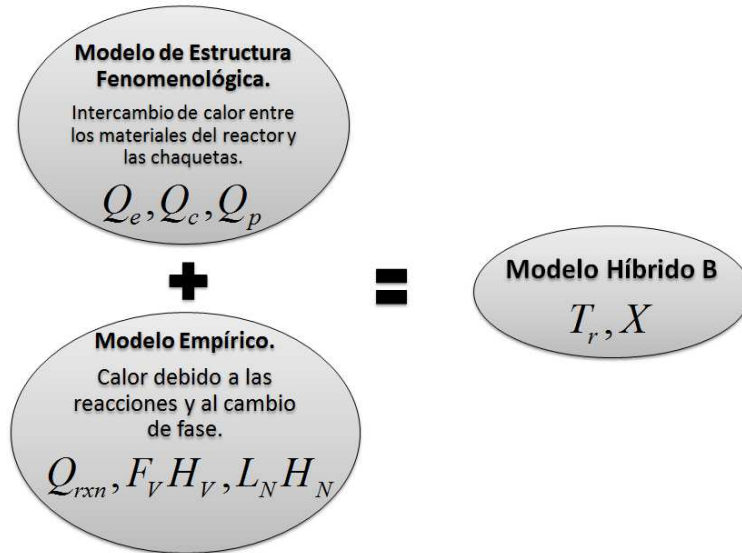
Figura 3-1: Estrategia de modelamiento híbrido para el reactor de policondensación (Modelo Híbrido A).



En el **Modelo Híbrido B**, al igual que en el Modelo Híbrido A, se representa con un modelo de estructura fenomenológica el intercambio de calor entre la chaqueta de calentamiento Q_c y de enfriamiento Q_e con la masa reaccionante, y las pérdidas Q_p del reactor con el ambiente. A diferencia del Modelo A, en este caso el modelo empírico además de representar el calor generado por las reacciones Q_{rxn} , también representa la pérdida/generación debida a la evaporización/condensación de los componentes volátiles ($F_v H_v, L_N H_N$), las cuales en el Modelo A se incluían en la estructura fenomenológica. En la Figura 3-2 se presenta la estrategia de modelamiento utilizada.

En las siguientes secciones se describirán los modelos mencionados, sus acoplamientos y los experimentos realizados para encontrar los parámetros de los modelos híbridos.

Figura 3-2: Estrategia de modelamiento híbrido para el reactor de policondensación (Modelo Híbrido B).



3.1 Componente fenomenológico de los modelos híbridos.

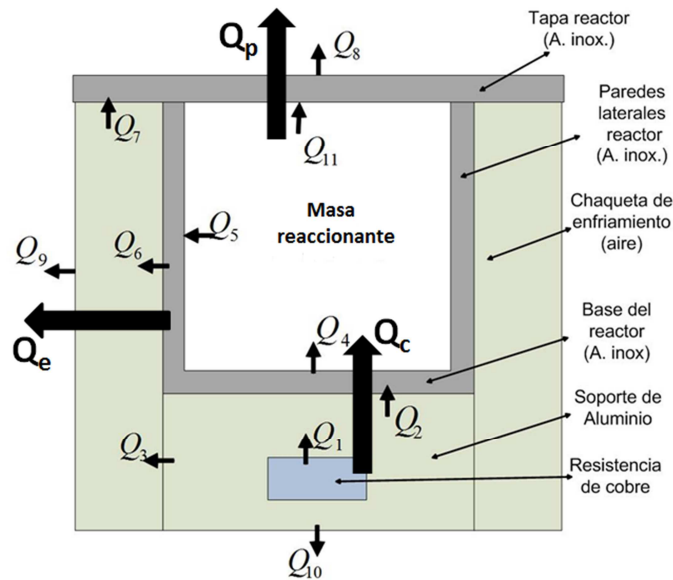
El modelo de base fenomenológica planteado consiste en aplicar los balances de energía para representar la transferencia de calor entre las variables manipuladas y la masa reaccionante. Como se mencionó en el Capítulo 2 el reactor está compuesto por distintos materiales y la temperatura de cada uno de éstos está representada por una ecuación diferencial, con el fin de reducir el número de ecuaciones diferenciales y de medidas en el reactor se redujo el modelo completo por truncación de estados [37], [38], encontrando las resistencias equivalentes [39], [40] para los flujos de calor de enfriamiento (Q_e), calentamiento (Q_c) y de pérdidas con el ambiente (Q_p). En la Figura 3-3 se representan los flujos mencionados, éstos están representados por (3-1)-(3-3) y el balance de energía para la masa reaccionante se presenta en (3-4). Donde T_r, T_c, T_e, T_{ext} representan las temperaturas de la masa reaccionante, de la chaqueta de calentamiento, de la chaqueta de enfriamiento y la temperatura ambiente.

$$Q_c = (UA)_c (T_c - T_r) \tag{3-1}$$

$$Q_e = -(UA)_e (T_r - T_e) \tag{3-2}$$

$$Q_p = -(UA)_p (T_r - T_{ext}) \quad (3-3)$$

Figura 3-3: Flujos de calor equivalentes para los compartimientos del reactor.



$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_r} \left[\underbrace{(UA)_c (T_c - T_r)}_{Q_c} - \underbrace{(UA)_e (T_r - T_e)}_{Q_e} - \underbrace{(UA)_p (T_r - T_{ext})}_{Q_p} \pm Q_{\text{generación/ pérdida}} \right] \quad (3-4)$$

Las pérdidas al ambiente (Q_p) se desprecian ya que el reactor y la unidad de separación están debidamente aislados. Entonces se pasó de tener 11 flujos de calor que se describían en el modelo completo del Capítulo 2 a tener sólo 2 flujos de calor para describir el intercambio calórico entre los compartimientos del reactor y la masa reaccionante. A continuación se describen los balances de energía para cada uno de los modelos híbridos.

3.1.1 Estructura del modelo fenomenológico para el Modelo Híbrido A

La estructura del modelo fenomenológico para el Modelo Híbrido A está representado por las expresiones (3-5)- (3-7). Las temperaturas T_r, T_c, T_e se pueden medir directamente del proceso. Q_r representa el flujo de calor entregado por la resistencia eléctrica para calentar el reactor³ y q_c el flujo de aire que se hace pasar por la chaqueta de enfriamiento, el termino $F_v H_v$ es el flujo de calor extraído del reactor como consecuencia de la vaporización de los productos volátiles hacia la unidad de separación y $L_N H_N$ es el flujo de calor que ingresa al reactor como consecuencia del retorno de los fondos de la unidad de separación los cuales están ricos en EG . Los parámetros del modelo se toman de las propiedades térmicas de los materiales. Estos parámetros también se pueden identificar con datos extraídos del proceso cuando la masa esté inerte, es decir, que no esté reaccionando y que no se generen cambio de fase.

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_r} \left[((UA)_c (T_c - T_r) - (UA)_e (T_r - T_e)) - F_v H_v + L_N H_N + Q_{rxn} \right] \quad (3-5)$$

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_c} \left[Q_r - (UA)_c (T_c - T_r) \right] \quad (3-6)$$

$$\frac{dT_e}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_e} \left[(UA)_c (T_c - T_r) - q_c \rho_c (T_e - T_{ext}) \right]. \quad (3-7)$$

3.1.2 Estructura del modelo fenomenológico para el Modelo Híbrido B

La estructura del modelo fenomenológico para el Modelo Híbrido B está representado por las expresiones (3-8)- (3-10). Al igual que en el Modelo Híbrido A, las temperaturas T_r, T_c, T_e se pueden medir directamente del proceso. Q_r representa el flujo de calor

³ No confundir Q_r con Q_{rxn} . Q_r hace referencia al calor entregado por la resistencia eléctrica al reactor, con el fin de aumentar la temperatura e iniciar la reacción; mientras Q_{rxn} se refiere al calor generado por las reacciones.

entregado por la resistencia eléctrica para calentar el reactor y q_c el flujo de aire que se hace pasar por la chaqueta de enfriamiento. En este caso, la estructura del submodelo fenomenológico no contiene los términos que representan los flujos de calor debidos a la vaporización/condensación de los productos más volátiles ($F_v H_v, L_N H_N$).

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_r} \left[((UA)_c (T_c - T_r) - (UA)_e (T_r - T_e)) + Q_{\text{generación/ pérdida}} \right] \quad (3-8)$$

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_c} [Q_r - (UA)_c (T_c - T_r)] \quad (3-9)$$

$$\frac{dT_e}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_e} [(UA)_c (T_c - T_r) - q_c \rho_c (T_e - T_{ext})]. \quad (3-10)$$

En la Tabla 3-1 se presenta una comparación de los submodelos fenomenológicos de los Modelos Híbridos A y B.

Tabla 3-1: Comparación de las estructuras de los submodelos fenomenológicos para los modelos híbridos propuestos.

Estructura Fenomenológica del Modelo Híbrido A. (Ecuaciones (3-5)-(3-7)).	Estructura Fenomenológica del Modelo Híbrido B. (Ecuaciones (3-8)-(3-10)).
$\frac{dT_r}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_r} \left[((UA)_c (T_c - T_r) - (UA)_e (T_r - T_e)) - F_v H_v + L_N H_N + Q_{rxn} \right]$	$\frac{dT_r}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_r} \left[((UA)_c (T_c - T_r) - (UA)_e (T_r - T_e)) + Q_{\text{generación/ pérdida}} \right]$
$\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_c} [Q_r - (UA)_c (T_c - T_r)]$	$\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_c} [Q_r - (UA)_c (T_c - T_r)]$
$\frac{dT_e}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_e} [(UA)_c (T_c - T_r) - q_c \rho_c (T_e - T_{ext})].$	$\frac{dT_e}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_e} [(UA)_c (T_c - T_r) - q_c \rho_c (T_e - T_{ext})].$

3.2 Estructura del modelo Empírico.

En los modelos de estructura fenomenológica descritos en la sección anterior sólo se puede conocer el intercambio de calor (conducción y convección) entre los diferentes materiales que conforman el reactor, ya que están en función de las temperaturas

medidas, pero no se puede medir de forma directa el calor generado por las reacciones Q_{rxn} y en el caso del Modelo Híbrido B no se podría medir el calor perdido por el cambio de fase más el calor de reacción $Q_{generación/perdida}$. Estos calores que no se representan por la fenomenología del proceso, ni se pueden medir directamente, se estiman mediante una función empírica. Esta función se ajusta extrayendo datos de temperatura del proceso y restándole los datos representados por la fenomenología simulada del proceso [15]. En la expresión (3-11) se representa el procedimiento. $f(X, T_r)$ es función de la conversión X y de la temperatura de la masa reaccionante T_r [16].

$$\left(\begin{array}{c} \text{Modelo} \\ \text{Empírico} \end{array} \right) = f(X, T_r) \approx \frac{dT_r}{dt} - \left(\begin{array}{c} \text{Modelo} \\ \text{Fenomenológico} \end{array} \right) \quad (3-11)$$

En el caso del Modelo Híbrido A se tiene que:

$$f(X, T_r) = Q_{rxn} \quad (3-12)$$

Y en el caso del Modelo Híbrido B:

$$f(X, T_r) = Q_{generación/perdida} = -F_v H_v + L_N H_N + Q_{rxn} \quad (3-13)$$

3.2.1 Obtención del modelo que representa la pérdida/generación de calor en el reactor

Analizando la estructura del modelo completo descrito en la sección 2.3 se encontró que los calores que se buscan representar por $f(X, T_r)$ están fuertemente ligados a la velocidad de reacción, la cuales están gobernadas por la ley de Arrhenius. Por esta razón se selecciona una estructura en función de la conversión, de exponenciales en función de la temperatura en el reactor y se seleccionan funciones tangentes inversas, las cuales se comportan como un interruptor (suave), que permiten al modelo representar el comportamiento del proceso antes y después de alcanzar el equilibrio Líquido-Vapor. A continuación se presenta la estructura propuesta:

$$f(X, T_r) = k_1 \cdot e^{-\frac{k_2}{T_r}} \cdot X^{k_3} \frac{1}{\tan^{-1}(X - k_4)} + k_5 \cdot e^{-\frac{k_6}{T_r}} \cdot X^{k_7} \tan^{-1}(X - k_8) \quad (3-14)$$

En (3-14) los parámetros del modelo, $[k_1, \dots, k_8]$, se ajustan a los datos experimentales por medio de mínimos cuadrados no lineales [41]. Los datos por medio de los cuales se ajustaron estos submodelos empíricos, para los Modelos Híbridos A y B, son tomados del modelo completo que representa el proceso. Se hicieron varios experimentos, en los cuales se variaban las condiciones iniciales de los lotes y las entradas al proceso, esto se realizó con el fin de obtener conjuntos de datos de conversión, temperatura y calores de generación/pérdida para distintas condiciones de operación. En la Figura 3-4 se presentan la superficie con los datos con los cuales se ajustaron los parámetros para el caso del Modelo Híbrido A y en la Figura 3-5 se presentan la superficie con los datos para el Modelo Híbrido B. Tanto en la Figura 3-4 como en la Figura 3-5 se presenta una línea continua de color negro, esta línea es la trayectoria de operación óptima, y como se puede observar en las figuras está alcanza la mayor conversión posible en el reactor. Esta trayectoria se obtuvo en la Sección 2.5.

Figura 3-4: Datos para ajustar los parámetros de la estructura del submodelo empírico

$f(X, T_r)$ para el Modelo Híbrido A.

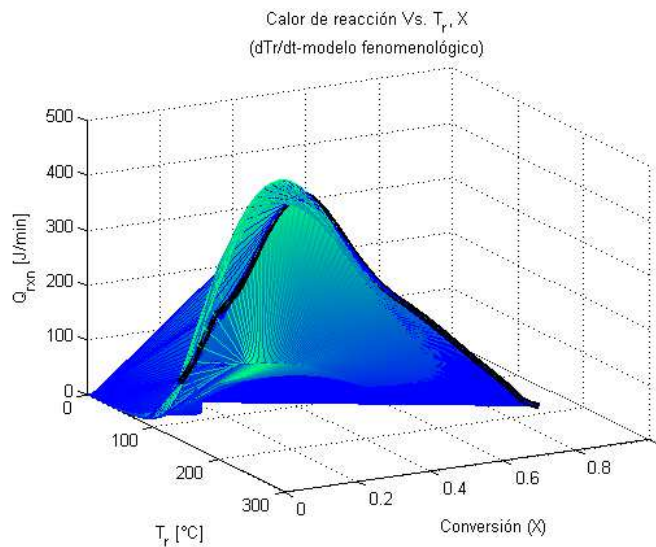
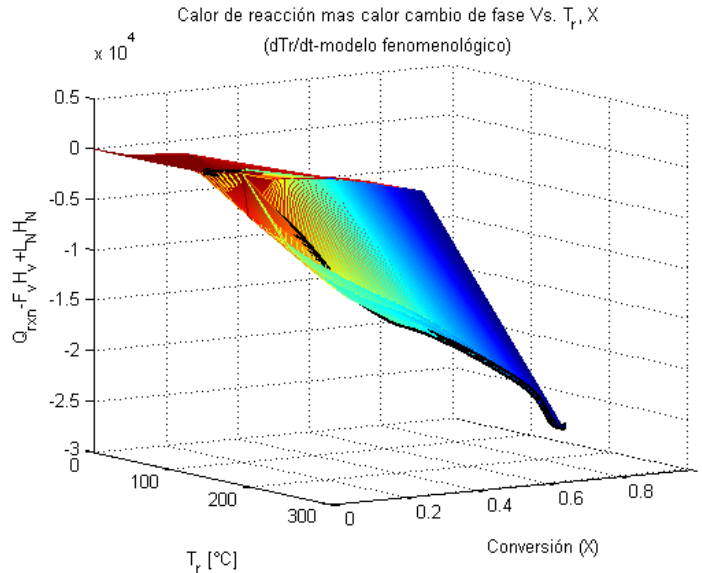


Figura 3-5: Datos para ajustar los parámetros de la estructura del submodelo empírico $f(X, T_r)$ para el Modelo Híbrido B.



3.2.2 Estimación de la conversión.

La conversión (X) no se puede medir de forma directa y como se mencionó en las secciones anteriores, se debe conocer el valor de la conversión para obtener el valor de $f(X, T_r)$ y así calcular los calores de generación/evaporación. A continuación se describe como se estima la conversión en el reactor para cada uno de los modelos híbridos.

- **Caso del Modelo Híbrido A:**

Para estimar la conversión, se encontró en la literatura que IPCOS [16] para reactores por lotes de poliadición sin cambio de fase mide la conversión con un modelo dinámico. Esta aproximación también se puede usar en nuestro caso de estudio ya que la reacción también es exotérmica y se puede medir su evolución siguiendo el calor que genera y teniendo en cuenta que cuando la reacción alcanza su máxima conversión deja de generar calor. Este modelo está en función del calor generado por la reacción mediante el siguiente desarrollo:

Se tiene que la conversión está dada en términos del reactivo limitante (C_{RL}):

$$X = \frac{C_{RL0} - C_{RL}}{C_{RL0}} \quad (3-15)$$

Donde C_{RL0} es la concentración inicial. La derivada de la conversión es:

$$\frac{dX}{dt} = -\frac{1}{C_{RL0}} \cdot \frac{dC_{RL}}{dt} \quad (3-16)$$

Además, se tiene que en un reactor por lotes con reacción irreversible el balance de moles para el reactivo limitantes está dado por:

$$\frac{dC_{RL}}{dt} = -V \cdot r \quad (3-17)$$

Donde V es el volumen y r es la velocidad de reacción. El calor generado por la reacción Q_{rxn} es el siguiente:

$$Q_{rxn} = -\Delta H_{rxn} \cdot r \cdot V \quad (3-18)$$

Donde ΔH_{rxn} es el calor de reacción. Despejado r de (3-18) y reemplazando en (3-17) y luego reemplazando en (3-16), se llega a la siguiente expresión:

$$\frac{dX}{dt} = -\frac{1}{C_{RL0}} \cdot \frac{Q_{rxn}}{\Delta H_{rxn}} \quad (3-19)$$

▪ **Caso del Modelo Híbrido B:**

En este caso, además del calor generado por las reacciones se tiene un calor que se pierde/gana como consecuencia de los cambios de fase que se dan debidos a la vaporación/condensación de los productos volátiles obtenidos en las reacciones de condensación. En este caso $f(X, T_r)$ representado en la ecuación (3-14) representa el calor total que se gana/pierde tanto por las reacciones como por los cambios de fase. En este caso, al igual que en el desarrollo de IPCOS presentado en [16], [18], la conversión se estimará con un modelo dinámico en función del calor ganado/perdido en la reacción $f(X, T_r)$, pero en este caso, además del calor debido a la reacción también se tiene en cuenta el calor por el cambio de fase. Por esta razón la expresión (3-19) que estima la conversión para el caso del Modelo Híbrido A pierde validez y para este caso se propone un modelo dinámico lineal empírico.

El modelo se presenta en (3-20), éste es un sistema algebraico- diferencial y se calcula A , B y C utilizando técnicas de identificación por subespacios, en este caso bastó con un modelo de orden 1. Se utilizó el algoritmo N4SID desarrollado en [12]. z es un estado interno del modelo y no tiene significado físico, el modelo está en función de $f(X, T_r)$, el cual es calculado en (3-14). La salida es la conversión X . Es importante resaltar que la forma como se estima la conversión en este trabajo no difiere en gran medida del método propuesto por IPCOS [16] ya que en ambas aproximaciones se cuenta con ecuaciones diferenciales de estructura similar. En la Tabla 3-2 se presenta la comparación de las dos técnicas.

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dt} &= A \cdot z + B \cdot f(X, T_r) \\ X &= C \cdot z \end{aligned} \tag{3-20}$$

$$A, B, C, z, X \in R$$

Tabla 3-2: Comparación de las técnicas para estimar conversión.

Caso del Modelo Híbrido A (Propuesta de IPCOS)	Caso del Modelo Híbrido B (Propuesta de este trabajo)
$\frac{dX}{dt} = k_c Q_{rxn}$ $Q_{rxn} = f(X, T_r)$ $k_c = -\frac{1}{C_{RL0} \Delta H_{rxn}}$	$\frac{dz}{dt} = A \cdot z + B \cdot f(X, T_r)$ $X = C \cdot z$

3.3 Modelos híbridos

Para el Modelo Híbrido A el submodelo de base fenomenológica está representado por las ecuaciones (3-5)- (3-7) y la conversión se calcula con la ecuación (3-19). En el caso del Modelo Híbrido B el submodelo empírico está representado por (3-8)- (3-10) y la conversión con (3-20). En ambos casos, la función $f(X, T_r)$ tiene la estructura presentada en (3-14). T_r, T_c, T_e representan las temperaturas medidas en el reactor, en la chaqueta de calentamiento y de enfriamiento, respectivamente. En la Tabla 3-3 se presentan los modelos híbridos descritos en las secciones anteriores.

Tabla 3-3: Comparación del Modelo Híbrido A y del Modelo Híbrido B.

Modelo Híbrido A	Modelo Híbrido B
$\frac{dT_r}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_r} \left[((UA)_c (T_c - T_r) - (UA)_e (T_r - T_e)) - F_v H_v + L_N H_N + f(X, T_r) \right]$ $\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_c} [Q_r - (UA)_c (T_c - T_r)]$ $\frac{dT_e}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_e} [(UA)_c (T_c - T_r) - q_c \rho_c (T_e - T_{ext})]$ $\frac{dX}{dt} = k_c Q_{rxn}$ $Q_{rxn} = f(X, T_r)$ $k_c = -\frac{1}{C_{RL0} \Delta H_{rxn}}$	$\frac{dT_r}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_r} \left[((UA)_c (T_c - T_r) - (UA)_e (T_r - T_e)) + f(X, T_r) \right]$ $\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_c} [Q_r - (UA)_c (T_c - T_r)]$ $\frac{dT_e}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_e} [(UA)_c (T_c - T_r) - q_c \rho_c (T_e - T_{ext})]$ $\frac{dz}{dt} = A \cdot z + B \cdot f(X, T_r)$ $X = C \cdot z$

En resumen, tanto para el Modelo Híbrido A como para el Modelo Híbrido B, se tiene un modelo de orden reducido híbrido no lineal, el cual en adelante se representara de la forma:

$$\begin{aligned} \dot{x}_h &= f_h(x_h, u) \\ 0 &= g_h(x_h, u, y_h) \end{aligned} \tag{3-21}$$

Donde, f_h representa a las ecuaciones diferenciales, g_h las ecuaciones algebraicas. El vector de estados x_h , de salidas y_h , y de entradas u se presenta a continuación:

$$x_h = [z \quad T_r \quad T_c \quad T_e]^T ; \quad x_h \in R^4 ; \tag{3-22}$$

$$y_h = T_r \quad , \quad y_h \in R \quad ; \quad u = [Q_r \quad q_c]^T \quad , \quad u \in R^2.$$

3.4 Validación del modelo.

En la Tabla 3-4 se comparan los dos modelos híbridos que se han descrito en este capítulo con el modelo completo del Capítulo 2. Para validar la capacidad de predicción de los modelos obtenidos en esta sección se compara con datos obtenidos del modelo completo descrito en el Capítulo 2, el cual representa el proceso. La simulación se corre para un lote de 120 minutos, actuando con las acciones de control óptimas encontradas en la sección 2.5 y reportadas en Figura 2-8 y con las condiciones iniciales en la Tabla 2-3, es decir, con la trayectoria óptima de operación.

Tabla 3-4: Comparación del modelo completo con los modelos de predicción híbridos.

Comparación de modelos			
	# de ecuaciones diferenciales	# de ecuaciones algebraicas	Objetivo del modelo
Modelo descrito en el Capítulo 2.	15	7	Simular el comportamiento del proceso real.
Modelos Híbridos obtenidos en el Capítulo 3 (Modelo Híbrido A y B)	4	1	Modelo con fines de control. Permite predecir los estados de interés del proceso en función de estados medibles.

3.4.1 Validación del Modelo Híbrido A.

En la Figura 3-6 se presenta el perfil de temperatura obtenido por el modelo Híbrido A y se compara con el modelo del proceso, como se observa en la figura el modelo predice el comportamiento de la temperatura para el proceso antes del equilibrio, pero después de que se alcanza el equilibrio líquido-vapor, se presenta un error que alcanza hasta 12°C como se observa en la Figura 3-8 (a), aunque el modelo sigue la tendencia de los datos experimentales, lo cual es importante para el diseño de controladores basados en modelo.

En la Figura 3-7 se presenta la conversión (X) estimada por el Modelo Híbrido A y se compara con datos obtenidos del proceso. Como se observa en la Figura 3-8 (a) el modelo sigue la tendencia de los datos con una desviación máxima del 8% si se compara con los datos obtenidos del proceso, esta máxima desviación se observa entre los 60- 70 minutos del lote. La mayor desviación se logra apreciar justo cuando el error en la dinámica de temperatura es mayor, la desviación al final del lote de la conversión estimada fue de 5%. Por último, en la Figura 3-9 (a) se presenta el calor de reacción calculado con la función empírica $f(X, T_r)$ comparada con los datos experimentales y en la Figura 3-9 (b) se presenta el error normalizado. En este caso se puede observar que el calor de reacción que se predice con el Modelo Híbrido A es muy aproximado al experimental antes del equilibrio, presentado errores cercanos a cero, luego del equilibrio líquido-vapor se obtiene errores mayores, aunque se sigue la tendencia.

Figura 3-6: Predicción de la trayectoria de temperatura por el Modelo Híbrido A comparada con datos obtenidos del modelo completo.

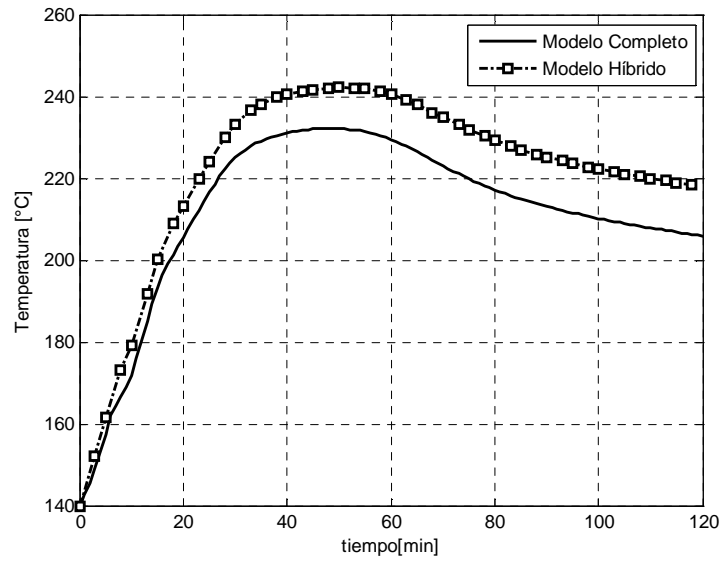


Figura 3-7: Predicción de la conversión por el Modelo Híbrido A comparada con datos obtenidos del modelo completo.

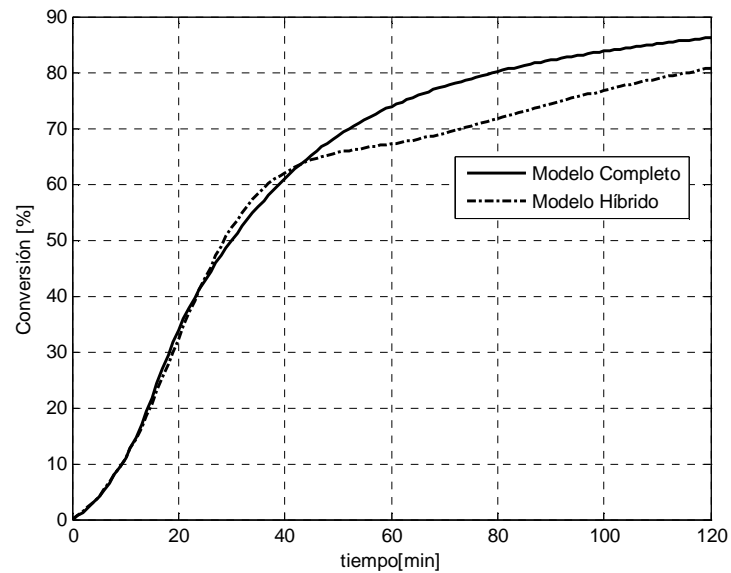
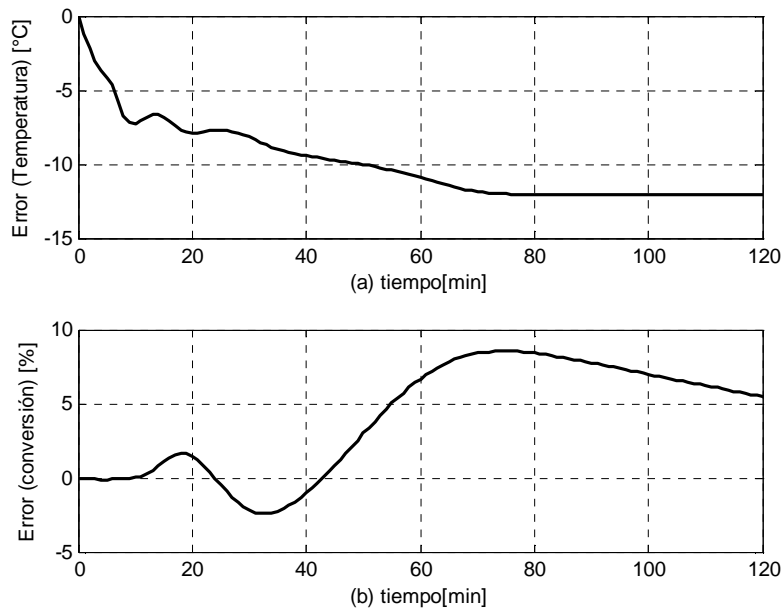
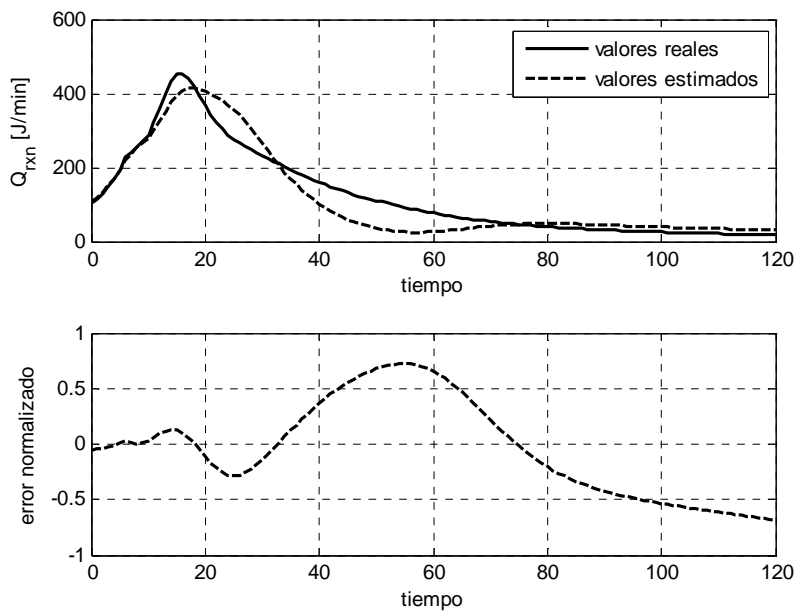


Figura 3-8: Errores entre los dos modelos: (a) Temperatura, (b) conversión.**Figura 3-9:** (a) Comparación entre el calor de reacción en el reactor experimentales con los estimados por $f(X, T_r)$ para el modelo híbrido A. (b) Error.

3.4.2 Validación del Modelo Híbrido B.

En la Figura 3-10 se presenta el perfil de temperatura obtenido por el modelo Híbrido B y se compara con el modelo del proceso, como se observa en la figura el modelo predice el comportamiento de la temperatura para el proceso, el modelo está en la capacidad de predecir no- linealidades fuertes del proceso como lo es el equilibrio Líquido-Vapor, la cual representa la generación de vapor en el reactor. En la Figura 3-12 (a) se presenta el error entre el modelo de predicción y los datos del proceso para la temperatura, en la figura se observan errores inferiores a $0,6^{\circ}\text{C}$.

Figura 3-10: Predicción de la trayectoria de temperatura por el Modelo Híbrido B comparada con datos obtenidos del modelo completo.

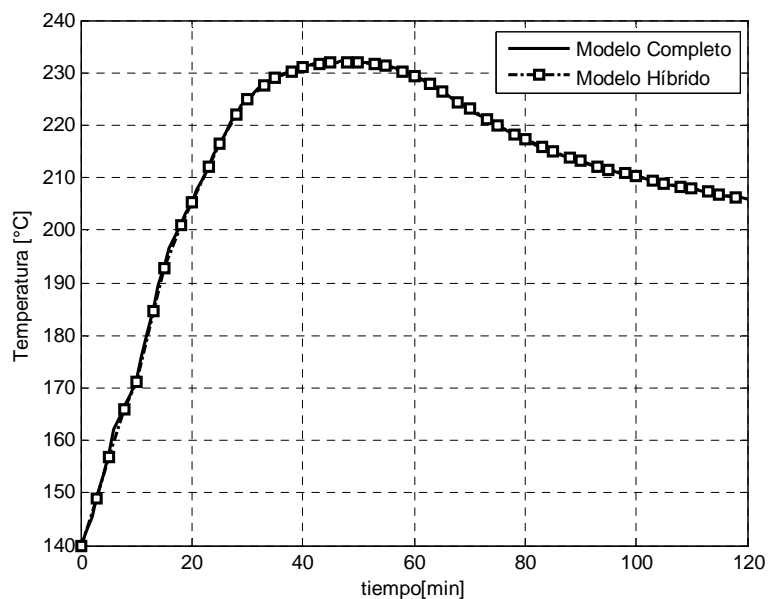


Figura 3-11: Predicción de la conversión por el Modelo Híbrido B comparada con datos obtenidos del modelo completo.

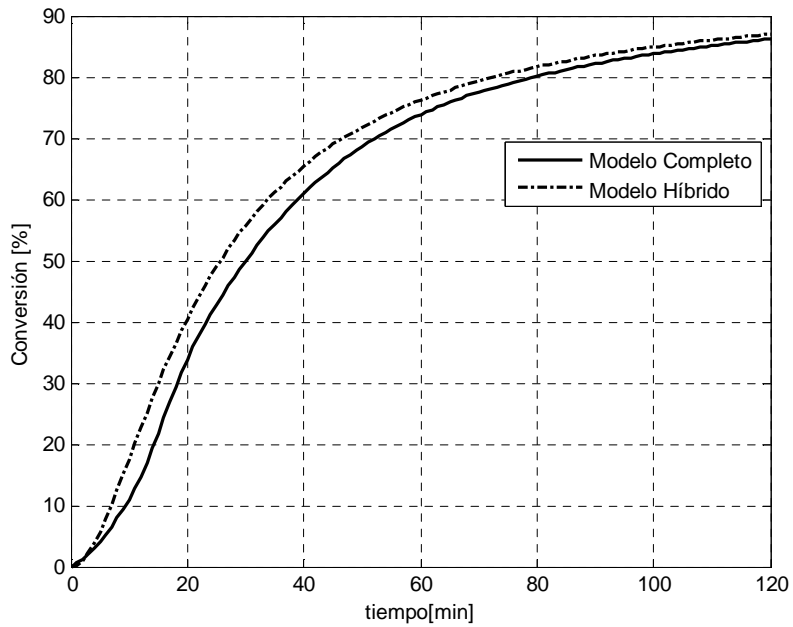


Figura 3-12: Errores entre los dos modelos: (a) Temperatura, (b) conversión.

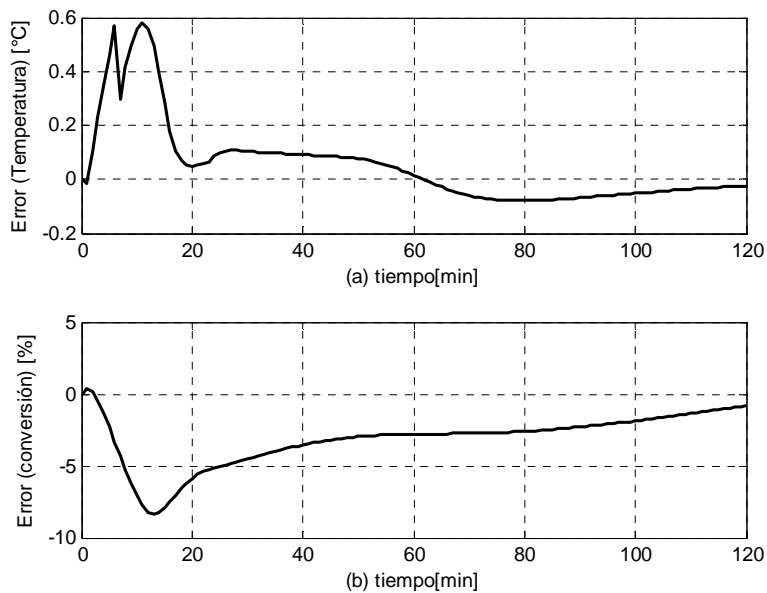
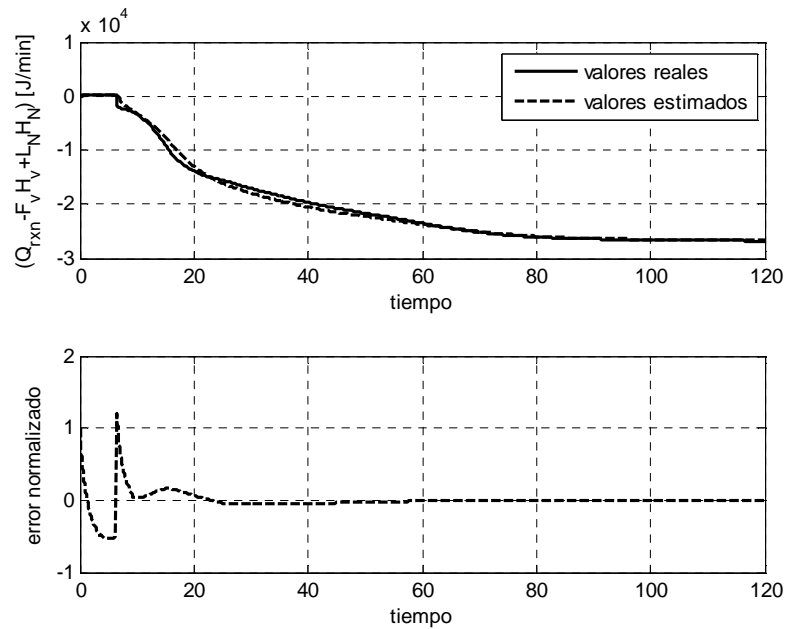


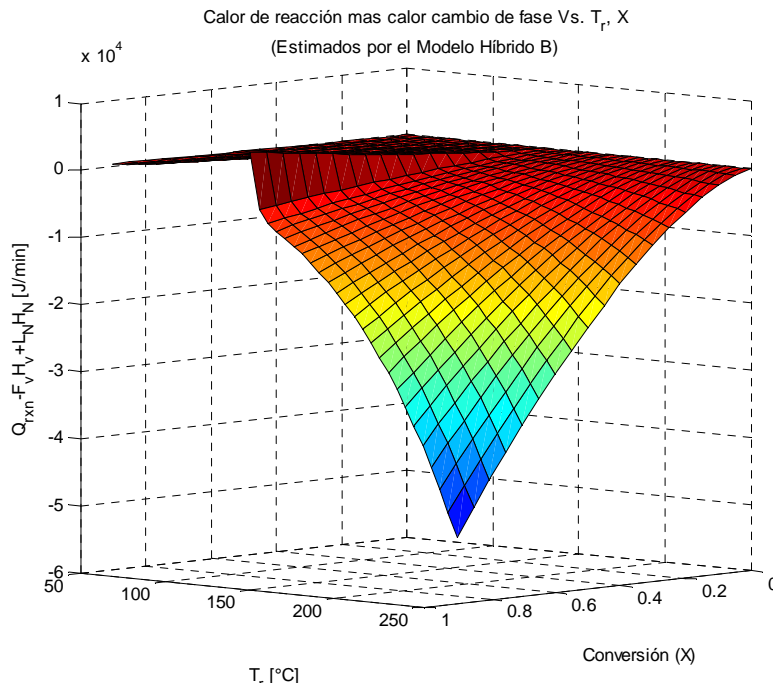
Figura 3-13: (a) Comparación entre los calores de pérdida/generación en el reactor experimentales con los estimados por $f(X, T_r)$ para el modelo híbrido B. (b) Error.



3.4.3 Selección del modelo híbrido

En las secciones anteriores se describieron dos modelos híbridos, como se mencionó anteriormente, los modelos se hallaron con fines de predicción para implementarse en un controlador basado en modelo. Por esta razón, el modelo seleccionado será el Modelo Híbrido B, ya que es él que presenta errores menores en la predicción de la temperatura en el reactor, y esta es la variable que nos interesa controlar y por lo tanto predecir sus valores futuros para encontrar acciones de control óptimas. En adelante, siempre que se mencione el modelo de predicción, se está haciendo referencia al Modelo Híbrido B descrito en la Sección 3.3. En la Figura 3-14 se presenta los calores estimados por la función $f(X, T_r)$ del Modelo B para distintas condiciones de operación, se puede observar como la figura presenta similitud con la Figura 3-5, la cual representa los datos experimentales del proceso.

Figura 3-14: Calores generados/perdidos estimados por la función $f(X, T_r)$ del Modelo Híbrido B para distintas condiciones de operación del reactor.



También es importante analizar el comportamiento y la estabilidad del modelo dinámico que se encontró para estimar la conversión y que se presenta en la expresión (3-20). Por esta razón, se simuló dicho modelo bajo distintas temperaturas de operación. En la Figura 3-15 se presenta el cambio del estado interno z , el cual representa el comportamiento dinámico de la conversión en función del calor estimado por la función empírica, como se observa en la figura este estado no presenta cambios muy elevados y por lo tanto se puede garantizar la estabilidad del sistema. En la Figura 3-16 se presenta la evolución temporal de la conversión bajo distintas condiciones de temperatura, se puede observar que la conversión se encuentra dentro de un rango de 0 a 1.

Figura 3-15: Cambio en el estado interno z con respecto al tiempo y bajo distintas temperaturas de operación.

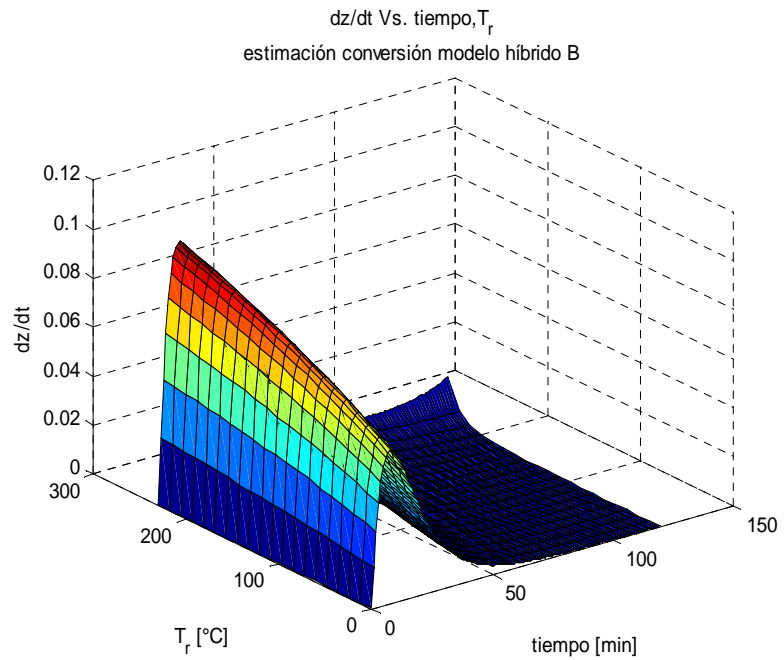
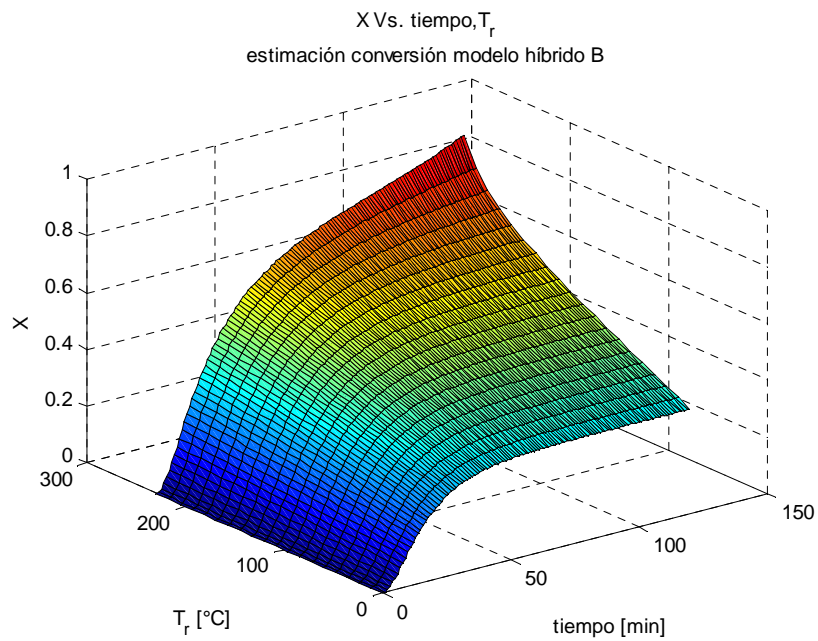


Figura 3-16: Comportamiento del modelo dinámico que estima la conversión del modelo híbrido B bajo distintas temperaturas.



Por último, se obtienen múltiples modelos lineales continuos del Modelo Híbrido B de la Tabla 3-1. Estos modelos se hallan con el fin de analizar la estabilidad del modelo de predicción. Se obtuvieron 10 modelos a lo largo de la trayectoria de temperatura de operación óptima que se presenta en la Figura 2-10 y sus respectivas acciones de control óptimas presentadas en la Figura 2-8. En la Tabla 3-5 se presentan los tiempos donde se linealiza el Modelo Híbrido B. Estos tiempos se seleccionaron teniendo en cuenta rangos de operación donde las acciones de control óptimas de la Figura 2-8 son constantes. Cada modelo lineal está conformado por 4 estados (T_r, T_c, T_e y z), por dos entradas (Q_r y q_c) y una salida (T_r).

Tabla 3-5: Tiempos alrededor de los que se linealiza el Modelo Híbrido.

Modelo	Linealización del Modelo Híbrido alrededor del tiempo:
mod ₁	$t = 0$ min .
mod ₂	$t = 6$ min .
mod ₃	$t = 12$ min .
mod ₄	$t = 18$ min .
mod ₅	$t = 25$ min .
mod ₆	$t = 31$ min .
mod ₇	$t = 50$ min .
mod ₈	$t = 75$ min .
mod ₉	$t = 100$ min .
mod ₁₀	$t = 120$ min .

En la Figura 3-17 (a) se presentan los polos para los múltiples modelos. Los modelos 1 y 2 (mod₁ y mod₂) presentan un polo en el semiplano derecho, en este caso el sistema es inestable, lo cual es un comportamiento esperado considerando las características inherentes de los procesos por lotes y más aun tratándose de una reacción exotérmica. Los modelos restantes presentan los polos en el semiplano izquierdo, en este caso, estos sistemas son estables. En la Figura 3-18 se presenta como evolucionan la parte real de del polo dominante del sistema en el tiempo, es decir, a medida que nos vamos moviendo en la trayectoria óptima de operación como se comporta la estabilidad del sistema.

Figura 3-17: (a) Mapa de polos para los múltiples modelos lineales obtenido para el Modelo Híbrido B alrededor del punto de operación. (b) Acercamiento alrededor del eje imaginario.

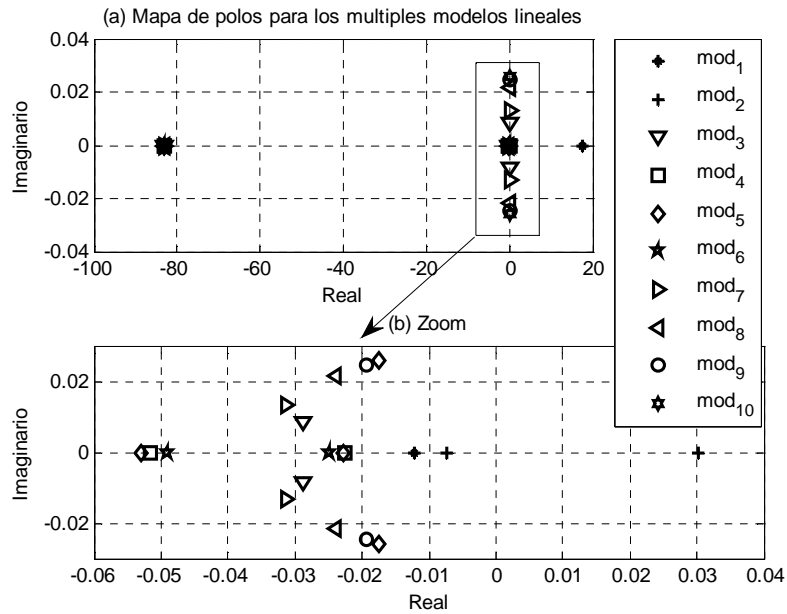
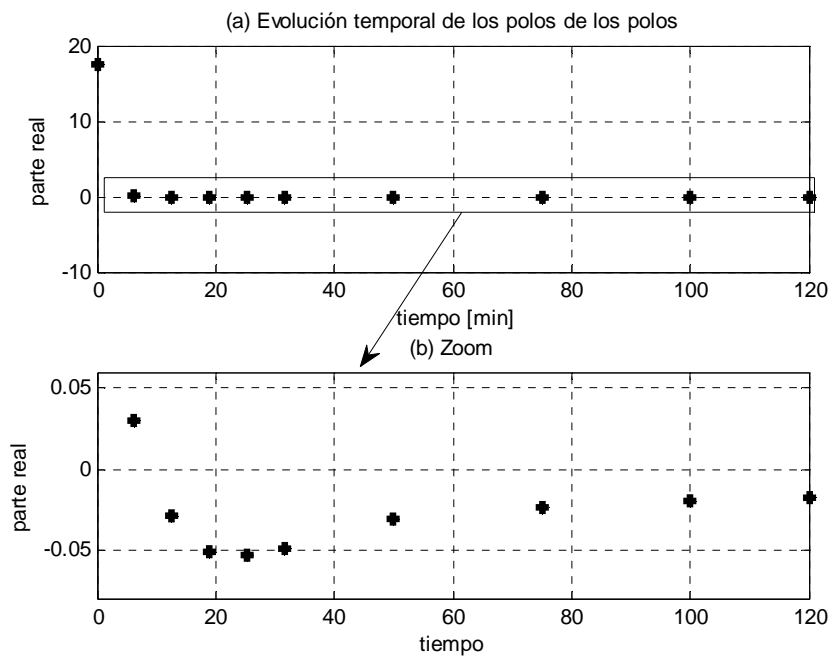


Figura 3-18: (a) Evolución temporal de lo polos para los múltiples modelos lineales obtenido para el Modelo Híbrido B alrededor del punto de operación. (b) Acercamiento alrededor del eje real.



Con respecto a la estabilidad del sistema se puede concluir analizando la Figura 3-18 que el sistema es inestable antes de alcanzar el equilibrio líquido- vapor, esto lo confirmamos observando que la parte real de los polos del mod_1 y mod_2 (los cuales se obtienen para condiciones donde el sistema no está en equilibrio y no se han comenzado a volatilizar los subproductos) se encuentran en el semiplano derecho, es decir que toman valores positivos. Luego de alcanzado el equilibrio líquido-vapor y por lo tanto empezar a volatilizar algunos productos, se encuentra que el sistema es estable, ya que la parte real de los polos de los modelos mod_3 a mod_{10} es negativa, por lo tanto se confirma que los procesos de policondensación al generar vapor, liberan energía y las reacciones son autorreguladas. Este hecho confirma que la parte crítica en los procesos de policondensación es el arranque del lote y por lo tanto es vital controlar y supervisar esta etapa del proceso.

4. Control Predictivo (MPC)

El Control Predictivo (MPC, *Model Predictive Control*) más que una técnica de control en sí misma, son un conjunto de métodos de control que hacen uso explícito de un modelo del proceso para obtener la señal de control minimizando una función objetivo. Las principales características de estos métodos son las siguientes [42]:

- Uso explícito de un modelo para predecir la salida del proceso en futuros instantes de tiempo (horizonte).
- Cálculo de las señales de control minimizando una cierta función objetivo.
- Estrategia deslizante, de forma que en cada instante el horizonte se va desplazando hacia el futuro, lo que implica aplicar la primera señal de control en cada instante y desechar el resto, repitiendo el cálculo en cada instante de muestreo.

El MPC presenta una serie de ventajas y desventajas sobre otros métodos, entre las principales se destacan [42]:

Ventajas:

- Puede ser usado para controlar una gran variedad de procesos, desde aquellos con dinámica relativamente simple hasta otros más complejos incluyendo sistemas con grandes retardos, de fase no mínima o inestables.
- Permite tratar con facilidad el caso multivariable.
- Posee intrínsecamente compensación para tiempos muertos (retardo).
- Resulta conceptualmente simple la extensión al tratamiento de restricciones, que pueden ser incluidas de forma sistemática durante el proceso de diseño.
- Es muy útil cuando se conocen las futuras referencias (robótica o procesos batch).

- Posee un control prealimentado (feedforward) que permite compensar las perturbaciones medibles.
- Es una metodología completamente abierta basada en algunos principios básicos que permite futuras extensiones.

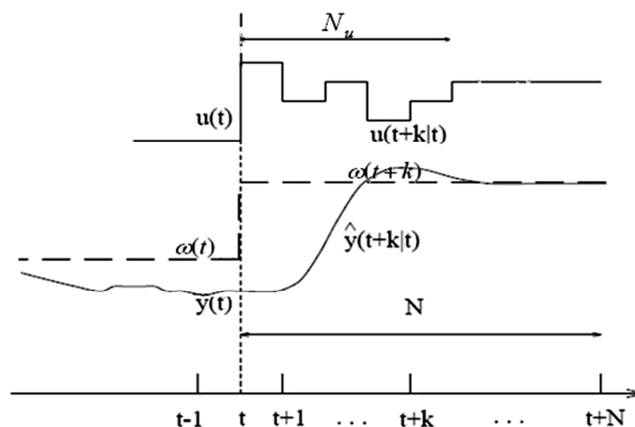
Desventajas:

- La necesidad de un modelo apropiado, que capture al máximo la dinámica del proceso.
- La carga computacional para realizar algunos casos (MPC no lineal).
- Sintonización. No existe una clara relación entre los parámetros de sintonía y el comportamiento del sistema.
- La garantía de estabilidad, sobre todo cuando existen restricciones.

4.1 Metodología utilizada por el Control Predictivo

En la Figura 4-1 se presenta la forma como opera un MPC. En cada instante de muestreo, se toma como tiempo actual a t , siguiendo la trayectoria de referencia $\alpha(t+k)$ en un horizonte de predicción N y un horizonte de control N_u .

Figura 4-1: Estrategia de control predictivo (modificado de [43]).

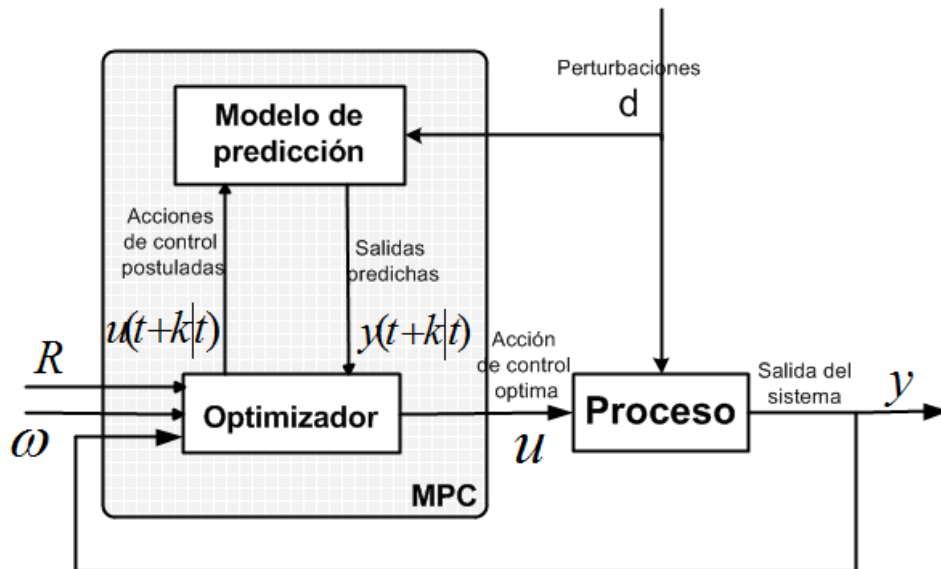


A continuación se describe el algoritmo utilizado para seleccionar las acciones de control óptimas para seguir la referencia:

1. En cada instante de muestreo t y haciendo uso del modelo del proceso se predicen las salidas futuras para un determinado horizonte N , llamado horizonte de predicción. Estas salidas predichas, $y(t+k|t)$ para $k=1,\dots,N$ dependen de los valores de las entradas y salidas pasadas conocidos hasta el instante t (entradas y salidas pasadas) y de las señales de control futuras $u(t+k|t)$, $k=0,\dots,N-1$, que son las que se quieren calcular para aplicar al sistema.
2. Se generan conjuntos de señales de control futuras $u(t+k|t)$, y se evalúa en una función de costo (esta función suele tomar una forma cuadrática de los errores entre la salida predicha y la trayectoria de referencia) y se selecciona aquella secuencia que minimice el valor de la función de costo, es decir la secuencia de control que mantenga la salida del proceso lo más cercana posible a la trayectoria de referencia $w(t+k)$. La variación de la acción de control está determinada por el horizonte de control N_u , para los instantes superiores a N_u la acción de control será igual a la anterior.
3. La señal de control $u(t|t)$ es enviada al proceso, mientras las siguientes señales de control son descartadas, al siguiente instante de muestreo se actualizan los valores y se repite el paso 1, este concepto es conocido como horizonte deslizante.

En la Figura 4-2 se presenta el diagrama de bloques de la estructura básica del MPC. Todos los controladores predictivos poseen tres elementos comunes, un modelo de predicción, una función objetivo y una metodología para obtener la ley de control. Por ser una metodología de control abierta, para cada uno de estos elementos se pueden elegir diversas opciones. A continuación se definen estos tres elementos.

Figura 4-2: Diagrama de bloques de un MPC.



4.2 Modelo de predicción

Se utiliza un modelo del sistema para predecir las salidas futuras de la planta, basándose en los valores pasados de las entradas y salidas del sistema. Es por ello que el modelo del sistema constituye un elemento fundamental en el desempeño del controlador, y es conveniente seleccionar un modelo lo más representativo posible de las dinámicas de interés del sistema real con el objeto de lograr una estimación exacta de las salidas futuras del sistema. Los modelos se pueden clasificar de la siguiente manera [44]:

4.2.1 Clasificación según la naturaleza del modelo.

- Fenomenológicos o de caja blanca:

Son obtenidos a partir de los principios fenomenológicos o leyes físicas, por lo tanto su estructura y sus parámetros tienen significado físico, y el valor de estos es hallado por observación del sistema real, teorías existentes reflejadas en leyes. Los modelos fenomenológicos están compuestos por ecuaciones de balance (masa, energía y cantidad de movimiento) y ecuaciones constitutivas.

- Empíricos o caja negra:

Son obtenidos completamente por información extraída del proceso, su estructura ya está predefinida y tanto su estructura como sus parámetros no tienen significado físico. La estructura y los parámetros se ajustan a datos numéricos obtenidos del proceso.

- Híbridos o caja gris:

Son una combinación de los anteriores. Donde se usan estructuras fenomenológicas dadas por las leyes de la conservación de energía y se combinan con estructuras empíricas, la cuales son ajustadas por datos entrada-salida extraídos del proceso.

4.2.2 Otras clasificaciones.

- Estocásticos y determinísticos:

Si los elementos se basan en relaciones causa efecto (determinísticos) y si las relaciones son de naturaleza probabilística (estocásticos).

- Según la variación espacial de las variables:

Si las variables son dependientes de la posición espacial son modelos de parámetros distribuidos y si no dependen de la posición espacial son de parámetros concentrados.

- Lineales y no lineales.

- Continuos y discretos.

4.3 Función objetivo

En los diferentes tipos de MPC se usa una función de costo para obtener las futuras acciones de control. Una de las funciones objetivo más típica es aquella en la cual el objetivo es que la salida futura $y(t+k|t)$ ⁴ siga la señal de referencia $w(t+k)$, al mismo

⁴ Indica la predicción de la variable, en este caso y , en el instante k calculada a partir del instante t .

tiempo que se penaliza la acción de control buscando que se cumplan las especificaciones del sistema cumpliendo con las restricciones.

En (4-1) se presenta la expresión general la función objetivo, donde N_1 y N_2 corresponden a los horizontes mínimo y máximo, N_u corresponde al horizonte de control, $\delta(j)$ y $\lambda(j)$ son secuencias de pesos que consideran el comportamiento futuro. Además pueden aparecer restricciones adicionales sobre algunas variables del sistema; estas restricciones pueden ser debidas tanto a especificaciones de funcionamiento como a limitaciones físicas, como es el caso de los actuadores que tienen niveles máximos y mínimos de operación.

$$J(N_1, N_2, N_u) = \sum_{j=N_1}^{N_2} \delta(j) [y(k+j) - \omega(k+j)]^2 + \sum_{j=1}^{N_u} \lambda(j) [\Delta u(k+j-1)]^2 \quad (4-1)$$

4.4 Obtención de la ley de control

Finalmente el MPC se convierte en un problema de optimización, en el cual para obtener $u(t+k|t)$ se debe minimizar la función objetivo (4-1). Para ello se calculan las salidas $\hat{y}(t+k|t)$ en función de los valores pasados de las entradas y las salidas y de acciones de control futuras, haciendo uso del modelo de predicción. Decimos que el MPC es lineal cuando el modelo de predicción es lineal, el funcional de costo es cuadrático y no existen restricciones. En este caso se puede encontrar una solución analítica y se puede solucionar usando la teoría de control clásica. Mientras que cuando el modelo de predicción es no lineal y se usan restricciones estamos hablando de MPC no lineal y la obtención de la acción de control se debe calcular por métodos iterativos. En (4-2) se presenta el problema de optimización, donde $f_k(x(k), u(k))$ y $g_k(x(k), u(k))$ son las representaciones discretas de las funciones continuas que representan el modelo dinámico $f(x(t), u(t))$ y $g(x(t), u(t))$, respectivamente.

$$J(N_1, N_2, N_u) = \sum_{j=N_1}^{N_2} \delta(j) [\hat{y}(k+j|t) - \omega(k+j)]^2 + \sum_{j=1}^{N_u} \lambda(j) [\Delta u(k+j-1)]^2$$

Sujeto a:

$$\left. \begin{aligned} x(k+1) &= f_k(x(k), u(k)) \\ y(k) &= g_k(x(k), u(k)) \end{aligned} \right\} \text{Modelo de predicción discreto del proceso} \quad (4-2)$$

$$\left. \begin{aligned} y_{\min} &\leq y(k) \leq y_{\max} \\ u_{\min} &\leq u(k) \leq u_{\max} \\ \Delta y_{\min} &\leq \Delta y(k) \leq \Delta y_{\max} \\ |\Delta u(k)| &\leq \Delta u_{\max} \end{aligned} \right\} \text{Restricciones de operación}$$

4.5 NMPC con modelo de predicción híbrido para un reactor de policondensación de producción de PET

En los procesos por lotes y especialmente en los procesos de polimerización, la calidad del producto final debe ser medida mediante análisis en laboratorio y estas medidas no están disponibles en tiempo real para permitir cerrar un lazo de control en el tiempo en el que se corre el lote. Por esta razón, el objetivo de control en este tipo de procesos es seguir una trayectoria de temperatura, la cual se obtiene previamente mediante una optimización cuyo objetivo es cumplir con los requerimientos del producto final [11] [45]. Razón por la cual en este capítulo se diseñará un MPC No Lineal basado en un modelo de predicción híbrido que sigue la trayectoria de referencia óptima de temperatura obtenida en la Sección 2.5.

En [46] Yakubi et al. cuenta sus experiencias en el control de la calidad final de los productos en la industria de los procesos semilotes. En esta investigación encuentran que las mayores variaciones de calidad que se dan entre lote y lote (Batch-to-batch) son generadas por cambios en las condiciones iniciales y demuestran que para condiciones iniciales similares se obtienen, bajo las mismas condiciones de operación, trayectorias de temperatura similares y como consecuencia calidades finales del producto similares. Por lo mencionado anteriormente, se puede señalar que en los procesos por lotes las condiciones iniciales son las principales perturbaciones que se pueden encontrar. Por tal razón, en este trabajo el controlador se prueba perturbando las condiciones iniciales del lote. Se tendrán tres lotes: el lote 1 es el lote sin perturbar, en el lote 2 se aumenta las

condiciones iniciales de temperatura en 50°C y en el lote 3 se disminuye las condiciones iniciales de temperatura del lote en 50°C. En la Tabla 4-1 se presentan las condiciones iniciales para los distintos lotes. En la Figura 4-3 se presentan los perfiles de temperatura obtenidos para los distintos lotes, aplicando las entradas óptimas encontradas en el Capítulo 2.5 y presentadas en la Figura 2-8. Claramente se observa que la temperatura se desvía con respecto al lote 1 (perfil de temperatura óptimo). Lo que provoca desviaciones en la calidad final del producto y aumentos de temperatura que pueda ocasionar daños a los equipos y a la materia prima.

Figura 4-3: Comparación de las condiciones de operación de ambos lotes en lazo abierto aplicando las entradas óptimas presentadas en la Figura 2-8 .

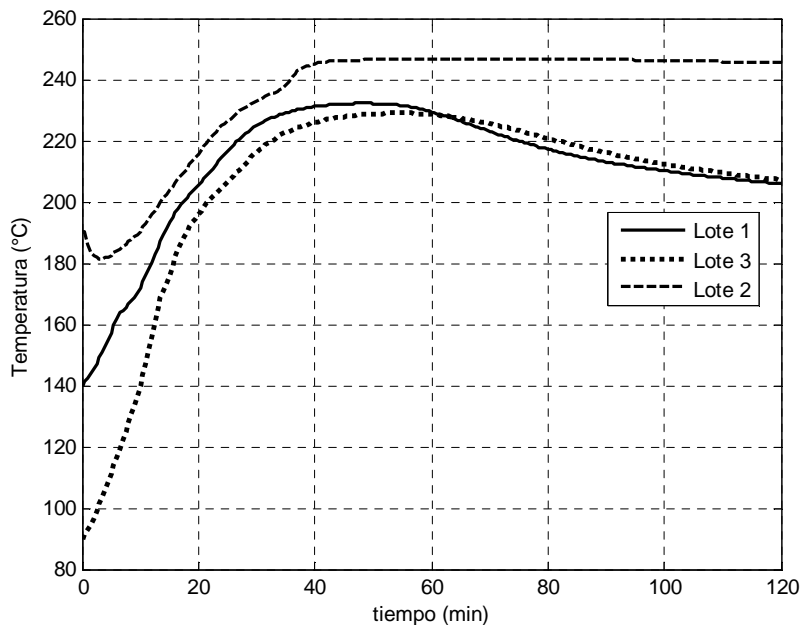
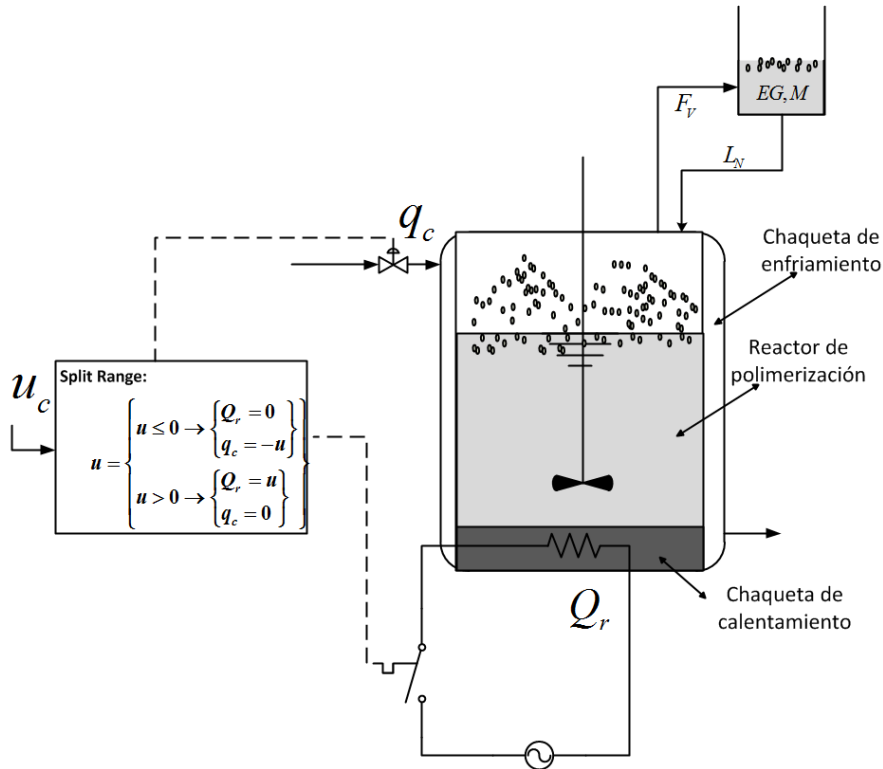


Tabla 4-1: Condiciones iniciales del lote.

Variable	Descripción	Lote 1 Valor	Lote 2 Valor	Lote 3 Valor
E_{m0}	Moles iniciales de E_m [mol]	3	3	3
E_{g0}	Moles iniciales de E_g [mol]	0	0	0
Z_0	Moles iniciales de Z [mol]	0	0	0
EG_0	Moles iniciales de EG [mol]	3	3	3

		Lote 1	Lote 2	Lote 3
Variable	Descripción	Valor	Valor	Valor
M_0	Moles iniciales de M [mol]	0	0	0
T_{r0}	Temperatura inicial en el reactor [°C]	140.00	190.00	90.00
T_{Cu0}	Temperatura inicial de la resistencia de cobre [°C]	199.61	249.61	149.61
T_{Al0}	Temperatura inicial del soporte de aluminio [°C]	189.65	239.65	139.65
T_{base0}	Temperatura inicial de la base de acero inoxidable [°C]	194.61	244.61	144.61
T_{pared0}	Temperatura inicial de las paredes de acero inoxidable [°C]	171.80	221.80	121.80
$T_{Chaqueta0}$	Temperatura inicial de la chaqueta [°C]	134.89	184.89	84.89
T_{Tapa0}	Temperatura inicial de la tapa [°C]	130.11	180.11	80.11

El controlador manipula el flujo de calor de la resistencia (chaqueta de calentamiento) y el flujo de aire que se hace circular a través de la chaqueta de enfriamiento del reactor (el cual entra a temperatura ambiente). En este caso se implementa una estrategia Split-range [47]. Aunque se tienen dos variables manipuladas, la optimización sólo entrega un valor. Cuando la acción de control u_c es negativa, se debe retirar calor del reactor, por lo tanto se manipula el flujo de la válvula de aire q_c (chaqueta de enfriamiento) y cuando u_c es positivo se debe ingresar calor al reactor, por lo tanto se debe manipular la potencia de la resistencia eléctrica Q_r (chaqueta de calentamiento). En la Figura 4-4 se presenta la estrategia descrita.

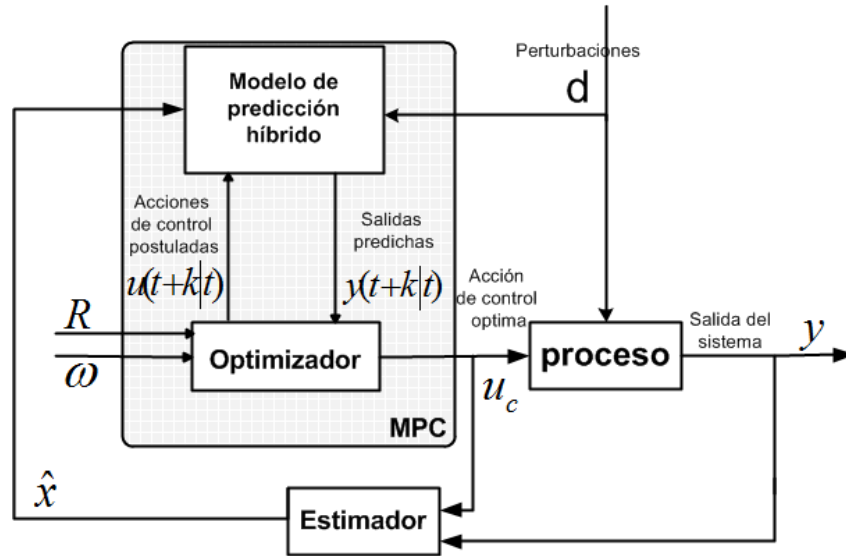
Figura 4-4: Estrategia Split-Range implementada en el controlador.

Teniendo en cuenta que las únicas variables medidas son las temperaturas en el reactor (T_r), la temperatura en la chaqueta de enfriamiento (T_e) y la temperatura en la chaqueta de calentamiento (T_c), se construye un observador de estado con el fin de tener información de los estados que no son medibles directamente, el observador se presenta en (4-3), éste se construyó a partir del Modelo Híbrido B descrito en la Sección 3.3. Como se mencionó en el capítulo anterior para el modelo de predicción también se hará uso del Modelo Híbrido B. En la Figura 4-5 se presenta el diagrama de bloques del sistema en lazo cerrado con el MPC implementado y con el observador de estados.

$$\begin{aligned}\dot{\hat{x}}_h &= f_h(\hat{x}_h, u) + K(y - \hat{y}_h) \\ \hat{y}_h &= g_h(\hat{x}_h, u).\end{aligned}\tag{4-3}$$

K es la ganancia del observador

Figura 4-5: Diagrama de bloques de un NMPC Híbrido con estimación de estados.



El NMPC queda de la siguiente forma:

$$\min_{u_c(t)} J = \int_{t_0}^{t_f} \left[\|T_r(t) - T_r^{ref}(t)\|_2^2 + Q_{\Delta u} du(t)^2 \right] dt$$

Sujeto a:

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_r} \left[((UA)_c (T_c - T_r) - (UA)_e (T_r - T_e)) + f(X, T_r) \right]$$

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_c} \left[Q_r - (UA)_c (T_c - T_r) \right]$$

$$\frac{dT_e}{dt} = \frac{1}{(MC_p)_e} \left[(UA)_c (T_c - T_r) - q_c \rho_c (T_e - T_{ext}) \right]$$

(4-4)

$$f(X, T_r) = k_1 \cdot e^{\frac{k_2}{T_r}} \cdot X^{k_3} \frac{1}{\tan^{-1}(X - k_4)} + k_5 \cdot e^{\frac{k_6}{T_r}} \cdot X^{k_7} \tan^{-1}(X - k_8)$$

$$\frac{dz}{dt} = A \cdot z + B \cdot f(X, T_r)$$

$$X = C \cdot z$$

$$T_r \leq 260^\circ C$$

$$-150 \leq u_c \leq 2000$$

El desempeño del controlador MPC se compara con un controlador PI y un controlador PID. Se utilizó la función de desempeño IAE (Integral del valor absoluto del error) descrito en [48] y representado por la ecuación (4-5), donde $e(t)$ es el error entre la temperatura de referencia y la temperatura medida en el instante t . En la Tabla 4-2 se presenta el índice IAE para cada controlador y para cada lote simulado. Como se observó en la optimización realizada en la Sección 2.5, la etapa que gobierna el proceso está dada por los primeros 30 minutos, ya que luego de este tiempo la temperatura se autorregula. Por esta razón analizaremos el comportamiento de nuestro sistema en lazo cerrado para este rango de tiempo.

$$IAE = \int_0^{t_f} |e(t)| dt \quad (4-5)$$

Tabla 4-2: IAE para los controladores implementados para los distintos lotes.

IAE para los controladores implementados para los distintos lotes		
	Lote 2	Lote 3
Controlador MPC	184,2	225
Controlador PI	486,6	468,9
Controlador PID	420,6	567,7

En la Figura 4-6 se presenta la respuesta del sistema en lazo cerrado con el controlador predictivo no lineal (NMPC) para las condiciones de arranque del lote 2, El controlador es capaz de seguir la trayectoria de referencia óptima de la temperatura. El controlador se compara con un PI y un PID. Como se presenta en la Tabla 4-2, el MPC presenta el mejor desempeño de los tres controladores y aproximadamente a los 7 minutos el controlador lleva el proceso a la referencia, sin presentar desviaciones significativas en el resto del lote. En la Figura 4-7 se presentan las entradas encontradas por cada uno de los controladores. De igual forma En la Figura 4-8 se presenta las respuestas del sistema en lazo cerrado para cada uno de los controladores implementados, pero en este caso para las condiciones de arranque del lote 3. Al igual que en el caso anterior, se observa en la Tabla 4-2 que el MPC presenta el mejor desempeño. En la Figura 4-9 se presenta las respectivas acciones de control entregadas por cada controlador para las condiciones de arranque del lote 3.

Figura 4-6: Respuesta del sistema en lazo cerrado con los distintos controladores descritos, para las condiciones de arranque del lote 2.

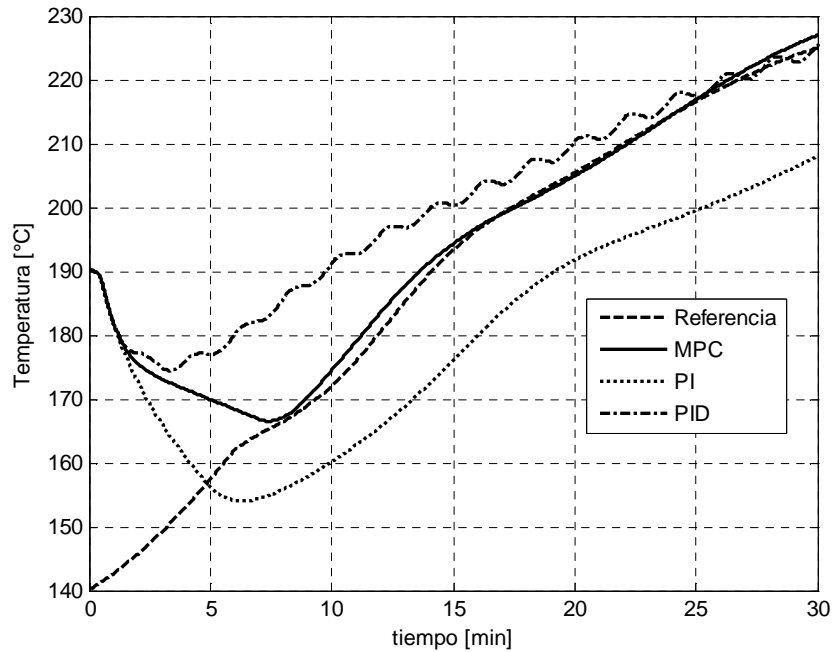


Figura 4-7: Acciones de control para los distintos controladores para el lote 2. (a) y (b) MPC, (c) y (d) PI, (e) y (f) PID.

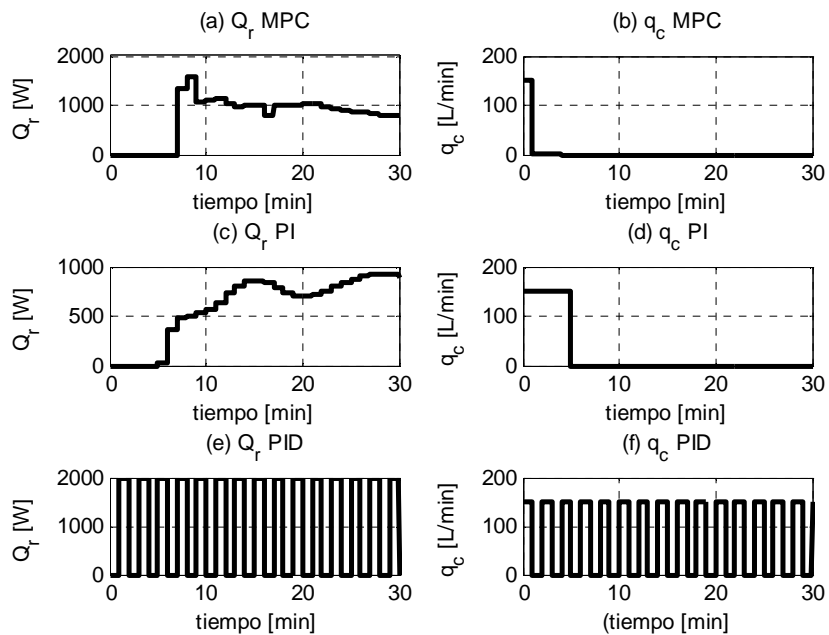


Figura 4-8: Respuesta del sistema en lazo cerrado con los distintos controladores descritos, para las condiciones de arranque del lote 3.

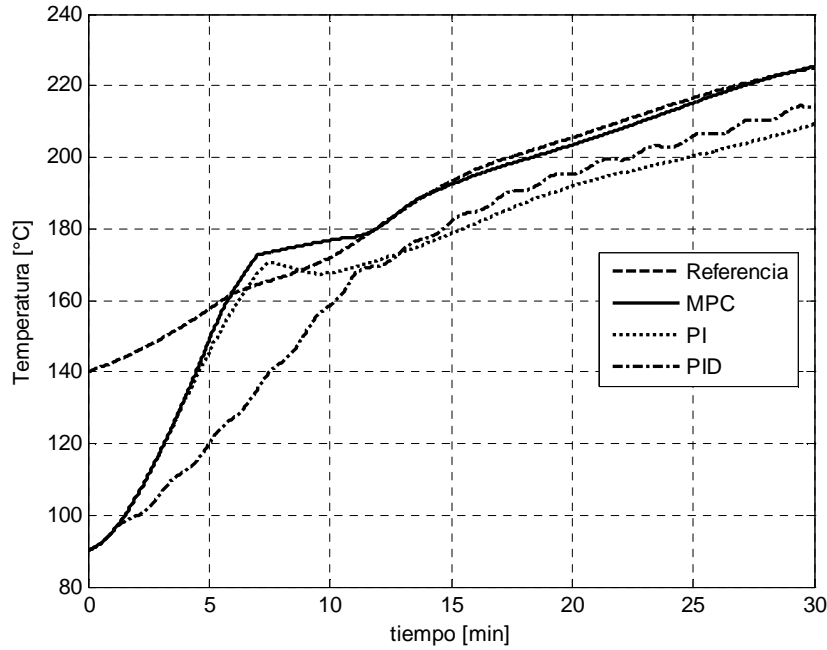
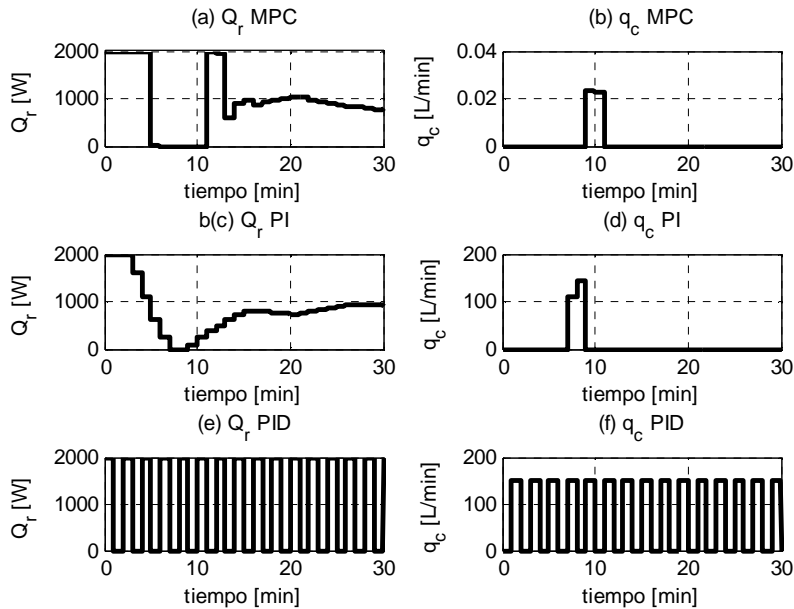


Figura 4-9: Acciones de control para los distintos controladores para el lote 3. (a) y (b) MPC, (c) y (d) PI, (e) y (f) PID.



5. Conclusiones y recomendaciones

5.1 Conclusiones

Teniendo en cuenta que la piedra angular del MPC son los modelos de predicción, esta tesis consideró como tópico de investigación el uso de modelos híbridos en MPC no Lineal. En ese sentido, en este trabajo se expuso que es posible diseñar sistemas de control predictivo no lineales usando modelos híbridos de menor complejidad que el modelo fundamental del proceso para reactores por lotes de policondensación. A continuación se presentan los aportes por cada capítulo.

En el **Capítulo 2** se describe el proceso de producción de PET por el mecanismo de transesterificación y se toma un modelo de la literatura el cual describe fenomenológicamente y de forma detallada las dinámicas de interés del proceso. Con este modelo se realiza una optimización dinámica y se encontraron una secuencia de entradas óptimas que maximizan la calidad del producto final. Con estas entradas óptimas se encontró una trayectoria óptima de temperatura que cumple con las restricciones de operación, la cual será la referencia para los controladores. Como se presenta en la Tabla 2-5 con la optimización se logra un incremento en la conversión y por lo tanto en la concentración final del polímero. Observando la respuesta obtenida del sistema para la optimización, se encuentra que luego de alcanzado el equilibrio Líquido-Vapor, se aumenta la potencia en la resistencia Q_r y por tanto la temperatura, esto con el fin de incrementar el flujo de vapor y retirar en un tiempo menor el metanol (M) que se empieza a acumular en el reactor y el cual desfavorece la conversión como consecuencia de la reversibilidad de las reacciones; además, con las entradas óptimas y la temperatura de operación encontrada se disminuye el tiempo de recirculación del etilenglicol (EG) y de esta forma también se favorece el sentido de la reacción que aumenta la conversión. Por lo tanto se puede concluir, que el rango de operación crítico de este proceso son los

primeros 30 minutos (para el lote óptimo) ya que para el resto del lote la temperatura se autorregula, lo que se busca, es que luego de alcanzado el equilibrio Líquido- Vapor se aumente la temperatura con el fin de aumentar el flujo de vapor y disminuir el tiempo de recirculación del *EG* de la columna al reactor, luego de garantizar el máximo flujo de retorno de la columna al reactor se puede actuar de forma constante sobre el reactor. Este comportamiento se puede observar en las Figura 2-8 y Figura 2-11.

En el **Capítulo 3** se obtuvieron dos modelos de orden reducido con fines de control del proceso de policondensación. En estos modelos se redujo el modelo del Capítulo 2. La transferencia de calor entre los materiales del reactor se redujo por truncación de estados, encontrando dos flujos de calor equivalentes que representan el intercambio de calor entre la masa reaccionante y las chaquetas de intercambio de calor que posee el reactor. El calor que generan las reacciones y el calor que se pierde/gana como consecuencia de la evaporación/condensación antes y después del equilibrio Líquido-Vapor se representa con un modelo empírico. Por lo tanto se encontró un modelo reducido híbrido, ya que posee estructuras dadas por la fenomenología del proceso y una estructura empírica que permite obtener variables no medibles de forma directa en el proceso a partir de medidas de temperatura que se obtienen de forma directa a través de los sensores ubicados en el proceso. En el caso del Modelo Híbrido A se presenta un desarrollo por el cual se llega a que la conversión se puede obtener basado en la fenomenología como función del calor de reacción. Para el Modelo Híbrido B La conversión en el reactor se obtiene a partir de un modelo empírico que es función del calor que se pierde/gana a lo largo de la operación del lote. Se logró reducir el modelo completo a modelos híbridos de orden reducido de 4 ecuaciones diferenciales y 1 ecuación algebraica, mientras el modelo de orden completo está representado por 14 ecuaciones diferenciales y 4 algebraicas. Además, lo que ocurre antes y después del equilibrio Líquido- Vapor es representado por funciones tangentes, la cuales suavizan el comportamiento y favorecen las optimizaciones que se realicen con el modelo, ya que este modelo se obtuvo con fines de control. Los modelos se validaron con los datos obtenidos del modelo completo y se seleccionó el Modelo Híbrido B, ya que con este se obtuvieron errores más pequeños que los obtenidos con el Modelo Híbrido A. Las desviaciones del Modelo B son menores a 0,6 °C en la predicción de la temperatura en el reactor, aunque se debe aclarar que el Modelo A también se puede usar con fines de predicción ya que sigue la tendencia de los datos experimentales.

La ventaja de la metodología de modelamiento empleada en este trabajo para encontrar modelos de predicción con fines de control, es el uso de un modelo que posee una estructura fenomenológica simple donde todas las variables son medibles, y en el caso de las variables que no se pueden medir de forma directa se estiman a partir de una expresión empírica que está en función de las variables que se pueden medir directamente del procesos. La característica principal que posee esta metodología de modelamiento es que permite conservar gran parte de las estructuras fenomenológicas, por lo cual no se pierde la interpretación que se puede obtener del proceso a partir del modelo.

En el caso de los procesos por lotes, desde el punto de vista de control, nos interesa que el producto final no presente variaciones ante cambios en las condiciones iniciales de operación, por lo tanto, nos interesa que así existan cambios en el inicio del lote, el sistema de control siga la trayectoria de operación. En el caso de los procesos de policondensación se tiene que se generan productos volátiles que se deben remover del reactor con la ayuda de unidades de separación; en este sentido, al inicio del lote se tiene que no se ha comenzado a generar vapor y por lo tanto la unidad de separación se encuentra “seca”, con la función empírica que se propone, se modela el comportamiento antes de alcanzar el equilibrio líquido-vapor en el cual domina el calor generado por las reacciones, y el calor que se tiene luego de alcanzar el equilibrio líquido-vapor donde domina el intercambio de calor con la unidad de separación. Consecuentemente, con los modelos de predicción propuestos es posible iniciar el proceso desde temperaturas ambientes y el NMPC es capaz de seguir la trayectoria de referencia.

En [15] y [16] se planteó una metodología de modelamiento híbrido para procesos por lotes y la cual es probada en reactores de poliadición. En este trabajo dicha metodología se extiende a reactores de policondensación y se llega a la conclusión que es posible tomar dos alternativas:

- Sólo incluir en el modelo empírico el calor de reacción y contar con sensores de flujo y de temperatura en la unidad de separación para medir el calor que se pierde/gana como consecuencia de la vaporización/condensación de los productos volátiles. La desventaja de esta metodología es que en el modelo de predicción se debe tomar un calor promedio evaporización/condensación, en este

caso existe una desviación entre el modelo y los datos experimentales, aunque es posible copiar la tendencia de éstos.

- Incluir en el modelo empírico el calor generado por las reacciones y el calor que se pierde/gana como consecuencia de la evaporización/condensación. La desventaja de esta metodología es que la conversión se debe estimar por medio de otro modelo empírico.

Por último, en el **Capítulo 4** se diseñó un MPC basado en el modelo no lineal de orden reducido híbrido con el Modelo Híbrido B encontrado en el Capítulo 3, el objetivo del controlador es seguir la trayectoria de temperatura de referencia, esta temperatura de referencia es el perfil óptimo hallado en el Capítulo 2.5 y presentado en la Figura 2-10 (a). Además, se implementó un controlador PI y un controlador PID, con el fin de comparar el desempeño. Como se puede observar en la Tabla 4-2 el MPC presentó el mejor desempeño de los tres controladores, garantizando que el proceso converja a la trayectoria óptima de referencia cuando es sometido a perturbaciones en las condiciones iniciales.

5.2 Recomendaciones

En este trabajo se probó el desempeño y la estabilidad del sistema de control en lazo cerrado ante cambios en las condiciones iniciales del lote. Si bien en este tipo de procesos son las perturbaciones más comunes y las que más influencia tienen sobre la calidad final del producto en los procesos por lotes, sería interesante probar el desempeño del controlador cuando es sometido a perturbaciones en el intermedio del lote.

Se propone como trabajo futuro incluir estimadores de estado y modelos que permitan obtener propiedades características de los polímeros, como los son: la viscosidad y el peso molecular.

En el caso del Modelo Híbrido B, en este trabajo se propuso un modelo empírico para estimar la conversión, como trabajo futuro se propone plantear una expresión simple

basada en la fenomenología del proceso para estimar la conversión en función del calor de reacción teniendo en cuenta los cambios de fase.

Bibliografía

- [1] D. Bonvin, «Optimal operation of batch reactors—a personal view», *J. Process Control*, vol. 8, n.º 5-6, pp. 355-368, oct. 1998.
- [2] B. Srinivasan y D. Bonvin, «Controllability and stability of repetitive batch processes», *J. Process Control*, vol. 17, n.º 3, pp. 285-295, mar. 2007.
- [3] T. M. Meyer y J. K. Keurentjes, Eds., *Handbook of Polymer Reaction Engineering*. Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005.
- [4] J. Shin, Y. Lee, y S. Park, «Optimization of the pre-polymerization step of polyethylene terephthalate (PET) production in a semi-batch reactor», *Chem. Eng. J.*, vol. 75, n.º 1, pp. 47-55, ago. 1999.
- [5] P. Ramkhelawan, «Modelling and Estimation of Polycondensation Processes», Thesis of Master of Applied Science, Department of Chemical Engineering and Applied Chemistry. University of Toronto, Toronto, Canada, 2000.
- [6] J. R. Richards y J. P. Congalidis, «Measurement and control of polymerization reactors», *Comput. Chem. Eng.*, vol. 30, n.º 10-12, pp. 1447-1463, sep. 2006.
- [7] P. Bert, J. Ludlage, L. Ariaans, y W. Van Brempt, «An Industrial Implementation of a Generic NMPC Controller with Application to a Batch Process», presentado en 17th IFAC World Congress, 2008, 2008, pp. 982-987.
- [8] H. Takatsu, T. Itoh, y M. Araki, «Future needs for the control theory in industries--report and topics of the control technology survey in Japanese industry», *J. Process Control*, vol. 8, n.º 5-6, pp. 369-374, Octubre.
- [9] S. J. Qin y T. A. Badgwell, «A survey of industrial model predictive control technology», *Control Eng. Pract.*, vol. 11, n.º 7, pp. 733-764, jul. 2003.
- [10] M. Kano y M. Ogawa, «The state of the art in chemical process control in Japan: Good practice and questionnaire survey», *J. Process Control*, vol. 20, n.º 9, pp. 969-982, oct. 2010.
- [11] B. Vandecraen, J. Espinosa, B. Pluymers, D. R. Vinson, J. Ludlage, y W. Van Brempt, «An Industrial Approach For Efficient Modeling And Advanced Control Of Chemical Batch Processes», presentado en 8th International Symposium on Dynamics and Control of Process System (DYCPOS'07), Cancun, Mexico, 2007.

- [12] Overschee, Peter Van y B. D. Moor, *Subspace Identification for Linear Systems: Theory, Implementation, Applications*. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 1996.
- [13] W. Marquardt, «Nonlinear model reduction for optimization based control of transient chemical processes», en *AIChE Symposium Series*, 2002, pp. 12-42.
- [14] R. Romijn, L. Özkan, S. Weiland, J. Ludlage, y W. Marquardt, «A grey-box modeling approach for the reduction of nonlinear systems», *J. Process Control*, vol. 18, n.º 9, pp. 906-914, oct. 2008.
- [15] J. Espinosa y W. Van Brempt, «Predictive control of polymerization batch reactors using hybrid models», en *16th European Symposium on Computer Aided Process Engineering and 9th International Symposium on Process Systems Engineering*, vol. Volume 21, Elsevier, 2006, pp. 1329-1334.
- [16] Zollner, Hungenberg, Fernholz, Espinosa, Van Brempt, y Backx, «Dynamic optimization of an industrial suspension polymerization process. IPCOS Internal report.», Leuven-Belgium, 2003.
- [17] F. S. Mjalli y A. S. Ibrehem, «Optimal hybrid modeling approach for polymerization reactors using parameter estimation techniques», *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 89, n.º 7, pp. 1078-1087, jul. 2011.
- [18] P. Van Overschee y W. Van Brempt, «PolyPROMS IPCOS-ISMIC final report, internal report of the polyPROMS european 5th framework research project grd1-2000-25555», 2000.
- [19] W. Harmon Ray y C. M. Villa, «Nonlinear dynamics found in polymerization processes — a review», *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, n.º 2, pp. 275-290, ene. 2000.
- [20] C. Kiparissides, «Polymerization reactor modeling: A review of recent developments and future directions», *Chem. Eng. Sci.*, vol. 51, n.º 10, pp. 1637-1659, may 1996.
- [21] G. A. Carrillo Le Roux y R. A. Teixeira, «Application of Nonlinear Predictive Control to a Semibatch Polycondensation Reactor», *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 43, n.º 23, pp. 7303-7311, nov. 2004.
- [22] D. G. Robertson, S. A. Russell, J. H. Lee, y B. A. Ogunnaike, «Modeling and control of a batch condensation polymerization reactor», en *American Control Conference, 1995. Proceedings of the, 1995*, vol. 3, pp. 1746-1750 vol.3.
- [23] S. K. Gupta y A. Kumar, *Reaction Engineering of Step Growth Polymerization*, 1.^a ed. Springer, 1987.
- [24] G. G. Odian, *Principles of polymerization*. Hoboken, N.J.: Wiley, 2004.

- [25]K. Ravindranath y R. A. Mashelkar, «Polyethylene terephthalate—I. Chemistry, thermodynamics and transport properties», *Chem. Eng. Sci.*, vol. 41, n.º 9, pp. 2197-2214, 1986.
- [26]M. Chanda y S. K. Roy, *Industrial Polymers, Specialty Polymers, and Their Applications*. CRC Press, 2008.
- [27]K. Pang, R. Kotek, y A. Tonelli, «Review of conventional and novel polymerization processes for polyesters», *Prog. Polym. Sci.*, vol. 31, n.º 11, pp. 1009-1037, nov. 2006.
- [28]F. Awaja y D. Pavel, «Recycling of PET», *Eur. Polym. J.*, vol. 41, n.º 7, pp. 1453-1477, jul. 2005.
- [29]R. Teixeira, «Estudo Experimental Do Controle De Um Reator De Policondensação», Doutorado, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008.
- [30]J.-M. Besnoin y K. Y. Choi, «Identification and Characterization of Reaction Byproducts in the Polymerization of Polyethylene Terephthalate», *J. Macromol. Sci. Part C Polym. Rev.*, vol. 29, n.º 1, pp. 55-81, 1989.
- [31]K. Ravindranath y R. A. Mashelkar, «Modeling of poly(ethylene terephthalate) reactors. I. A semibatch ester interchange reactor», *J. Appl. Polym. Sci.*, vol. 26, n.º 10, pp. 3179–3204, 1981.
- [32]K. Ravindranath y R. A. Mashelkar, «Modelling of poly(ethylene terephthalate) reactors. III. A semibatch prepolymerization process», *J. Appl. Polym. Sci.*, vol. 27, n.º 7, pp. 2625–2652, 1982.
- [33]D. Bonvin, «Control and optimization of batch processes», *IEEE Control Syst.*, vol. 26, n.º 6, pp. 34-45, 2006.
- [34]K. J. Beers, *Numerical Methods for Chemical Engineering: Applications in MATLAB*. Cambridge University Press, 2007.
- [35]J. Nocedal y S. J. Wright, *Numerical optimization*. New York: Springer, 2006.
- [36]N. Régnier, G. Defaye, L. Caralp, y C. Vidal, «Software sensor based control of exothermic batch reactors», *Chem. Eng. Sci.*, vol. 51, n.º 23, pp. 5125-5136, dic. 1996.
- [37]S. Gugercin y A. C. Antoulas, «A Survey of Model Reduction by Balanced Truncation and Some New Results», *Int. J. Control*, vol. 77, n.º 8, pp. 748-766, 2004.
- [38]S. Weiland, «Balancing and Hankel norm approximation of dynamical systems», *matrix*, vol. 100, n.º C1, p. C2, 2006.
- [39]F. P. Incropera y D. P. DeWitt, *Fundamentos de transferencia de calor*. Pearson Educación, 1999.

- [40]R. B. Bird, W. E. Stewart, y E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, 2007.
- [41]T. F. Coleman y Y. Li, «An Interior Trust Region Approach for Nonlinear Minimization Subject to Bounds», Cornell University, Technical Report, may 1993.
- [42]E. F. Camacho y C. Bordons, *Model Predictive Control*, 2nd ed. 2004. Corr. 2nd printing. Springer, 2007.
- [43]E. Camacho y C. Bordons, «Control Predictivo: Pasado, Presente y Futuro», *Rev. Iberoam. Autom. E Inform. Ind. RIAI ISSN 1697-7912 Vol 1 N° 3 2004*, 2010.
- [44]I. Cameron y K. Hangos, *Process Modelling and Model Analysis*. London: ACADEMIC PRESS, 2001.
- [45]Z. Weitao, W. Wuqian, S. Zhijiang, Z. Yuyue, y Q. Jixin, «Optimization of an industrial batch polycondensation reactor», en *American Control Conference, 2001. Proceedings of the 2001*, 2001, vol. 1, pp. 368-373 vol.1.
- [46]Y. Yabuki, T. Nagasawa, y J. F. MacGregor, «Industrial experiences with product quality control in semi-batch processes», *Comput. Chem. Eng.*, vol. 26, n.º 2, pp. 205-212, feb. 2002.
- [47]C. L. Smith, «Split-Range Control», en *Advanced Process Control*, John Wiley & Sons, Inc., 2010, pp. 86–125.
- [48]C. A. Smith y A. B. Corripio, *Principles and practice of automatic process control*. Wiley, 2006.
- [49]Z. K. Nagy, B. Mahn, R. Franke, y F. Allgöwer, «Evaluation study of an efficient output feedback nonlinear model predictive control for temperature tracking in an industrial batch reactor», *Control Eng. Pract.*, vol. 15, n.º 7, pp. 839-850, jul. 2007.