

UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA

Estudios con reconocimiento de validez por Decreto
Presidencial del 3 de Abril de 1981.



LA VERDAD NOS HARA LIBRES

**ANALISIS DE OPERABILIDAD Y CONTROL
ROBUSTO DE UN REACTOR DE
POLIMERIZACION**

T E S I S

Que Para Obtener el Grado de
**MAESTRO EN
CIENCIAS EN INGENIERIA QUIMICA**

P r e s e n t a
MARIA ANDREA SILVA BEARD

México, D.F.

1998

Contenido

Resumen	ix
1 Antecedentes	1
1.1 Análisis de Conducta no Lineal	1
1.1.1 Reactores Químicos Tanque Agitado	1
1.1.2 Reactores de Polimerización	3
1.2 Control	6
1.2.1 Control de Reactores de Polimerización	7
1.2.2 Control y Matrices de Intervalos	9
1.3 Conclusiones	9
2 Marco Teórico	11
2.1 Teoría de Singularidad, Multiplicidad y Bifurcaciones	11
2.1.1 Diagrama de bifurcación	12
2.1.2 Equivalencia por contacto	12
2.1.3 Diagrama de bifurcación estable	13
2.1.4 Estabilidad	13
2.1.5 Existencia de multiplicidades	14
2.1.6 Número máximo de soluciones locales	14
2.1.7 Tipos de bifurcaciones	15
2.2 Teoría de Control	17
2.2.1 Representación	18
2.2.2 Realización de espacio de estado	19
2.2.3 Incertidumbres	19
2.2.4 Función del controlador	20
2.2.5 Ley de control proporcional	20
2.2.6 Estabilidad robusta paramétrica	20
2.2.7 Robustez en el desempeño	21
2.2.8 Proceso del diseño de un controlador	21
2.3 Teoría de Matrices de Intervalos	22
2.3.1 Matrices de intervalos	22
2.3.2 Condiciones de estabilidad robusta	23
2.3.3 Matrices de intervalos y el control	24
2.3.4 Ejemplos de aplicación	25

3	Definición del Caso de Estudio	29
3.1	Descripción del Proceso	29
3.2	Modelo Matemático	30
3.2.1	Estados estacionarios	32
3.3	Modelo Matemático Adimensional	32
3.3.1	Estados estacionarios del modelo adimensional	34
3.3.2	Reducción del modelo adimensional a una ecuación algebraica	35
4	Análisis de Multiplicidad y Bifurcación	36
4.1	Determinación Analítica de Multiplicidades	36
4.1.1	Multiplicidades de entrada	37
4.1.2	Multiplicidades de salida	39
4.1.3	Islas	40
4.2	Diagramas de Bifurcación	40
4.2.1	XPP	41
4.2.2	Diagramas de bifurcación con multiplicidades de salida	42
4.2.3	Diagramas de bifurcación con multiplicidades de entrada e islas	50
4.3	Conclusiones	54
5	Cambios en el Diseño y en la Operación	57
5.1	Diagramas de Multiplicidad Global	57
5.2	Efectos de Cambios en el Diseño	60
5.2.1	Volumen contra calor de reacción	60
5.2.2	Volumen contra área	61
5.2.3	Damköhler de iniciación contra calor de reacción	63
5.2.4	Damköhler de propagación contra calor de reacción	64
5.3	Efectos de Cambios en la Operación	65
5.3.1	Volumen contra calor de reacción a $T_{wo} + 20\%$	65
5.3.2	Volumen contra calor de reacción a $T_{in} + 20\%$	66
5.3.3	Volumen contra calor de reacción a $F + 20\%$	67
5.3.4	Volumen contra calor de reacción a $F_I + 20\%$	67
5.4	Conclusiones	68
6	Control Robusto del Proceso	70
6.1	Selección de la Ley de Control	70
6.2	Selección de Variables Controladas y Manipuladas	70
6.3	Diseño del Controlador	71
6.4	Evaluación del Controlador	72
6.4.1	Perturbaciones en las entradas	74
6.4.2	Incertidumbres en la planta	77
6.4.3	Incertidumbres en las variables manipuladas	82
6.4.4	Retraso en las mediciones	84
6.5	Conclusiones	89

<i>Contenido</i>	iii
7 Conclusiones Generales y Trabajo Futuro	91
7.1 Conclusiones Generales	91
7.2 Trabajo Futuro	93
A Nomenclatura	94
B Glosario de términos	96
Bibliografía	98

Lista de Figuras

1.1	Problema general de control.	7
2.1	Bifurcación del tipo histéresis.	15
2.2	Bifurcación del tipo isla.	16
2.3	Bifurcación del tipo límite doble.	17
2.4	Esquema de control.	18
2.5	Problema de seguimiento de señales (a) y problema de regulación para la planta central (b), inferior (c) y superior (d) del ejemplo 1.	27
2.6	Problema de seguimiento de señales (a) y problema de regulación para la planta central (b), inferior (c) y superior (d) del ejemplo 2.	28
3.1	Diagrama de flujo del reactor de polimerización.	29
4.1	Programa para emplear XPP.	41
4.2	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de iniciador (F_I) como parámetro de continuación.	42
4.3	Diagrama de continuación esquemático para el ejemplo 1.	43
4.4	Simulación dinámica a diferentes valores del flujo de iniciador (F_I), partiendo del punto de operación óptimo.	44
4.5	Diagrama de continuación esquemático para el ejemplo 2.	44
4.6	Diagrama de bifurcación (a) del punto de bifurcación de Hopf del diagrama de continuación de la temperatura empleando al flujo del iniciador como parámetro de continuación (figura 4.2(a)) y simulaciones dinámicas a lazo abierto (b) partiendo del mismo punto.	45
4.7	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de alimentación del agua de enfriamiento (F_{cw}) como parámetro de continuación.	46
4.8	Ampliación del diagrama de continuación del peso molecular empleando al flujo de alimentación del agua de enfriamiento (F_{cw}) como parámetro de continuación (figura 4.7(b)) para el caso $F_I=0.003$	46
4.9	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando la concentración de alimentación de monómero (C_{min}) como parámetro de continuación.	47
4.10	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando la temperatura de la corriente de alimentación (T_{in}) como parámetro de continuación.	48

4.11	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando la concentración de alimentación del iniciador (C_{In}) como parámetro de continuación.	49
4.12	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando la temperatura de alimentación del agua de enfriamiento (T_{wo}) como parámetro de continuación.	49
4.13	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al área (A) como parámetro de continuación.	50
4.14	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de alimentación de monómero (F) como parámetro de continuación a diferentes flujos de iniciador en la corriente de alimentación.	52
4.15	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de alimentación de monómero (F) como parámetro de continuación a diferentes concentraciones de monómero en la corriente de alimentación.	52
4.16	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de alimentación de monómero (F) como parámetro de continuación a diferentes concentraciones de iniciador en la corriente de alimentación.	53
4.17	Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de alimentación de monómero (F) como parámetro de continuación a diferentes temperaturas de la corriente de alimentación.	54
5.1	Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) (a) y vista ampliada (b).	58
5.2	Diagramas de continuación de la temperatura empleando al flujo del medio de enfriamiento como parámetro de continuación, para las diferentes regiones del diagrama de multiplicidad global de α vs. β (Figura 5.1).	59
5.3	Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el área (A) (a) y vista ampliada (b).	61
5.4	Diagramas de continuación de la temperatura empleando al flujo del medio de enfriamiento como parámetro de continuación, para las diferentes regiones del diagrama de multiplicidad global de α vs. A (Figura 5.3).	62
5.5	Diagrama de multiplicidad global del número de Damköhler de iniciación (Da_I) contra el calor de reacción adimensional (β) (a) y vista ampliada (b).	63
5.6	Diagrama de multiplicidad global del número de Damköhler de propagación (Da_p) contra el calor de reacción adimensional (β) (a) y vista ampliada (b).	64
5.7	Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando se incrementa la temperatura de alimentación del medio de enfriamiento en 20% (a) y vista ampliada (b).	65
5.8	Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando se incrementa la temperatura de la corriente de alimentación en 20% (a) y vista ampliada (b).	66

5.9	Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando se incrementa el flujo de alimentación de monómero en 20% (a) y vista ampliada (b).	67
5.10	Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando se incrementa el flujo de iniciador en la alimentación en 20% (a) y vista ampliada (b).	68
6.1	Variables controladas y manipuladas para el reactor de polimerización.	71
6.2	Problema de seguimiento de señales (a) y problema de regulación para la planta central (b), inferior (c) y superior (d) de la planta linealizada del reactor de polimerización.	73
6.3	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{min} del 10%.	74
6.4	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{min} del -10%.	75
6.5	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{In} del 10%.	76
6.6	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{In} del -10%.	76
6.7	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de E_p del 0.3%.	77
6.8	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de E_p del -0.3%.	78
6.9	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de U del 1%.	79
6.10	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de U del -2%.	79
6.11	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de ΔH del 2%.	80
6.12	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de ΔH del -0.9%.	80
6.13	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de C_p del 10%.	81

6.14	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de C_p del -10%.	82
6.15	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{min} del 10% y una incertidumbre en las variables manipuladas del 10%.	83
6.16	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{In} del 10% y una incertidumbre en las variables manipuladas del 10%.	83
6.17	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{min} del 10% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.	84
6.18	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{In} del 10% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.	85
6.19	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de E_p del 0.3% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.	86
6.20	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de U del 1% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.	87
6.21	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de ΔH del 2% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.	88
6.22	Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de C_p del 10% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.	88

Lista de Tablas

3.1	Información de diseño y operación para el reactor de polimerización.	32
3.2	Estados estacionarios presentes.	33
3.3	Parámetros y grupos adimensionales.	34
3.4	Estados estacionarios del modelo adimensional.	34
4.1	Puntos de nacimiento y muerte de islas.	51
6.1	Simbología empleada en los diagramas de simulaciones dinámicas.	74

Resumen

La industria de los polímeros tiene gran importancia económica a nivel mundial. La producción en 1995 fue de 100 millones de toneladas [20]. Una parte importante del proceso de producción de polímeros son los reactores de polimerización. En estos equipos se lleva a cabo la combinación de compuestos elementales (monómeros), con la ayuda de iniciadores, para formar compuestos con grandes cadenas de bloques elementales (polímeros). Las propiedades finales de este tipo de productos depende de una gran cantidad de factores. Desde el punto de vista de Ingeniería de Procesos tiene gran relevancia la elección del tipo de reactor (diseño), así como de las condiciones de procesamiento (operación).

En muchos casos, la presencia de no linealidades en el proceso ocasiona que las propiedades deseadas en el producto final sean difíciles de obtener. Un ejemplo es la Industria de los Polímeros, ya que en general estos sistemas presentan conducta altamente no lineal (p.e.: histéresis, bifurcación, caos, etc.). Es importante determinar la existencia de este tipo de comportamientos no lineales para lograr un adecuado diseño y control a lazo cerrado del sistema. Esto motiva la necesidad de comprender el efecto de estas no linealidades, para determinar las acciones que se deben tomar, tanto en el diseño como en la operación de los equipos bajo consideración. Dichas acciones pueden tener como objetivo disminuir o remover las no linealidades, o aprovecharlas para satisfacer los requisitos de operación.

Actualmente no está bien entendida la forma como la presencia de las no linealidades afecta el diseño y la operación de equipos de procesamiento químico, en particular los de polimerización. Se han realizado una gran cantidad de trabajos tratando de descubrir la presencia de algunos tipos de no linealidades, sobre todo en reactores tanque agitado. Sin embargo, existen pocos trabajos donde se analiza la forma en la que las no linealidades afectan el diseño y operación de reactores de polimerización.

En este proyecto nos propusimos investigar el impacto de la conducta no lineal de una clase particular de reactores de polimerización sobre el diseño y operación de los mismos, para posteriormente proponer un esquema de control robusto a lazo cerrado del sistema. El problema en estudio consiste de un reactor tanque agitado en el que se lleva a cabo la polimerización en solución del metilmetacrilato vía radicales libres, empleando azo-bis-isobutironitrilo como iniciador y tolueno como solvente. La reacción es exotérmica y se emplea un medio de enfriamiento para remover el calor liberado. Los tipos de comportamientos no lineales que se buscarán serán multiplicidades de entrada, de salida e islas. Nuestro propósito es evaluar la manera como la presencia de estas no linealidades afecta la operación del reactor, y posteriormente determinar cómo manipular estas no linealidades para lograr ciertos objetivos de operación deseados. Con base en los resultados obtenidos en esta fase, propondremos un esquema de control robusto a lazo

cerrado para el sistema.

Objetivos

- Objetivo General

Los objetivos centrales de este trabajo fueron analizar la conducta no lineal del modelo matemático de un reactor tanque agitado en el cual se lleva a cabo la polimerización de metilmetacrilato, y diseñar un controlador robusto adecuado para el sistema.

- Objetivos Particulares

- Aplicar la teoría de singularidad para determinar analíticamente la existencia de multiplicidades de entrada, de salida e islas en estado estacionario y el máximo número de estados estacionarios posibles, en una región cercana al punto de operación económicamente óptimo.
- Realizar análisis de bifurcación para determinar el efecto de cambios en los parámetros de operación y de diseño sobre la operabilidad del sistema.
- Diseñar un sistema de control robusto a lazo cerrado para el reactor de polimerización.

El contenido de este trabajo es el siguiente. En el primer capítulo se presentan los antecedentes y revisión bibliográfica. En el segundo capítulo se presenta el marco teórico necesario para el desarrollo del proyecto y en el tercero se describe el sistema en estudio. En el cuarto capítulo se muestran los resultados del análisis de multiplicidad y bifurcación y en el quinto el efecto de cambios en el diseño y operación del sistema. En el sexto capítulo se muestra el diseño del controlador del proceso y en el último capítulo se presentan las conclusiones y posible trabajo futuro.

Difusión

Los resultados del presente trabajo se han difundido en diferentes medios:

Presentaciones en Congresos Nacionales

- Flores, A., Silva, A. Aplicación de la Teoría de Singularidad para la Determinación de Multiplicidad y Bifurcación. *Congreso Nacional IMIQ 1996*. Monterrey, Nuevo León.
- Silva, A., Flores, A. Análisis de Multiplicidad y Bifurcación en un Reactor de Polimerización. *Congreso Nacional AMIDIQ 1997*. Boca del Río, Veracruz.
- Silva, A., Flores, A. Efecto del Diseño/Operación de Procesos sobre la Operabilidad a Lazo Abierto de un Reactor de Polimerización. *Congreso Nacional AMIDIQ 1998*. Ixtapa, Guerrero.

Presentaciones en Congresos Internacionales

- Flores, A., Silva, A., Fernández, G. Robust Controller Design Using an Interval Matrix Technique. *The Control and its Application. SIAM 1998*. Jacksonville, Florida.
- Silva, A., Flores, A. Effect of Process Design/Operation of the Open-Loop Operability of a Polymerization Reactor. *ESCAPE8 1998*. Brujas, Bélgica.
- Silva, A., Flores, A. Nonlinear Analysis Using XPP. *DYCOPS 1998*. Konfu, Grecia.
- Flores, A., Silva, A., Fernández, G. Robust Control of a Polymerization Reactor Using Linear Interval Matrices Techniques. *Congreso Mundial IFAC 1999*. China. En preparación.

Publicaciones Nacionales

- Flores, A., Silva, A. (1996). Aplicación de la Teoría de Singularidad para la Determinación de Multiplicidad y Bifurcación. *UMBRAL XXI*. **22**, 71-78.
- Silva, A., Flores, A. (1997). Análisis de Multiplicidad y Bifurcación en un Reactor de Polimerización. *Memorias Congreso Nacional AMIDIQ 1997*. Aceptado para publicación.
- Silva, A., Flores, A. (1998). Efecto del Diseño/Operación de Procesos sobre la Operabilidad a Lazo Abierto de un Reactor de Polimerización. *Memorias Congreso Nacional AMIDIQ 1998*. Enviado a revisión.

Publicaciones Internacionales

- Silva, A., Flores, A. (1998). Effect of Process Design/Operation of the Open-Loop Operability of a Polymerization Reactor. *Comp. Chem. Eng.* Aceptado para publicación.
- Flores, A., Silva, A., Fernández, G. (1998). Robust Controller Design Using an Interval Matrix Technique. *J. Proc. Cont.* Enviado para revisión.
- Silva, A., Flores, A. (1998). Nonlinear Analysis Using XPP. *Memorias DYCOPS 1998*. Aceptado para publicación.
- Flores, A., Silva, A., Fernández, G. (1999). Robust Control of a Polymerization Reactor Using Linear Interval Matrices Techniques. *Memorias Congreso Mundial IFAC 1999*. China. En preparación.

Capítulo 1

Antecedentes

Para diseñar el controlador adecuado de un proceso y entender potenciales problemas de operabilidad, es conveniente primero comprender a fondo la conducta no lineal del sistema bajo estudio. En el presente capítulo se discuten los estudios más recientes acerca de la conducta no lineal de sistemas químicos y el control de reactores de polimerización.

1.1 Análisis de Conducta no Lineal

En las últimas tres décadas se han efectuado varios trabajos sobre el comportamiento no lineal de sistemas de reacción. En ésta sección se discuten los avances que se consideran más relevantes en esta área para los propósitos del presente trabajo.

1.1.1 Reactores Químicos Tanque Agitado

Con el propósito de comprender el comportamiento de reactores químicos tanque agitado, se han realizado diversos estudios analizando la conducta no lineal de dichos equipos. Van Heerden, 1953 [47] estudió los problemas de multiplicidad de estados estacionarios e inestabilidades en reactores químicos para la reacción de primer orden exotérmica e irreversible ($A \rightarrow B$). Posteriormente, empleando la teoría de bifurcación para estudiar multiplicidad y estabilidad, Uppal y colaboradores, 1974 [46] estudiaron la dinámica de un reactor químico tanque agitado en el que se lleva a cabo una reacción exotérmica irreversible de primer orden. Usando como variable independiente el número de Damköhler, clasificaron los diferentes tipos de comportamientos dinámicos posibles en el sistema, en función del resto de los parámetros. Desarrollaron criterios analíticos para predecir la existencia y estabilidad de ciclos límite. Los autores fueron los primeros en utilizar la llamada teoría de bifurcación de Hopf para la detección de soluciones periódicas. Aris, 1979 [3] estudió el comportamiento de los estados estacionarios de un reactor tanque agitado en el que se lleva a cabo una reacción exotérmica e irreversible de primer orden. El autor encontró diversos fenómenos de bifurcación (histéresis, ciclos límite) y enfatizó la abundancia de comportamientos complejos aun en el sistema de reacción más simple. A partir de estos trabajos se produjo una rápida expansión de este tipo de estudios en los 70s y 80s, los cuales se enfocaron a estudiar principalmente, pero no únicamente, el sistema de un reactor químico tanque agitado con cinéticas más complicadas.

Balakotaiah y Luss, 1982 [4] aplicaron la teoría de singularidad en sistemas en los que ocurren varias reacciones simultáneamente. Por ejemplo, demuestran que para un sistema de N reacciones paralelas, exotérmicas e independientes, con energías de activación altas e iguales, que ocurren en un reactor tanque agitado, existen $2N + 1$ soluciones en estado estacionario. Posteriormente Balakotaiah y Luss, 1984 [6], emplearon la teoría de singularidad para dividir el espacio global de parámetros en regiones con diferentes diagramas de bifurcación. El propósito de este trabajo fue obtener los diagramas de multiplicidad global del sistema.

Guckenheimer, 1986 [16], en un análisis semejante al realizado por Balakotaiah y Luss [4, 6] presentó una estrategia matemática, que emplea la teoría de singularidad, para explorar el comportamiento dinámico de reactores químicos. Esta estrategia ha sido ampliamente utilizada desde entonces.

Farr y Aris, 1986 [11] emplearon la teoría de singularidad para analizar la conducta no lineal del sistema de dos reacciones consecutivas en un reactor tanque agitado. Los autores encuentran hasta siete estados estacionarios. Ellos mencionan que la teoría de singularidad se ha convertido en una de las herramientas más poderosas para investigar multiplicidades.

Razón y Schmitz, 1987 [35] publicaron una revisión bibliográfica sobre los estudios de multiplicidades e inestabilidades en sistemas de reacción química efectuados hasta 1987. Ellos mencionan los avances que se habían logrado en esta área con la colaboración de investigadores de diferentes disciplinas. Enfatizan la necesidad de continuar con estos estudios para resolver problemas más complejos y reales.

Russo y Bequette, 1985 [36] estudiaron el impacto del diseño del proceso sobre el comportamiento de multiplicidad de reactores químicos tanque agitado para el caso de una reacción de primer orden, irreversible y exotérmica. A pesar de que anteriormente este sistema de reacción había sido muy estudiado, este análisis fue diferente. A diferencia de los estudios anteriores, ellos tomaron en cuenta en el modelo matemático la dinámica de la temperatura del medio de enfriamiento. Generalmente se hace el supuesto que esta dinámica es muy rápida, lo cual no es siempre cierto. Una situación donde resulta posible despreciar la dinámica del medio de enfriamiento es cuando se utilizan gases para este propósito. En ese caso la temperatura del medio de enfriamiento puede controlarse rápidamente (en relación a la dinámica del reactor) manipulando la presión del gas. La dinámica de la temperatura del medio de enfriamiento debe tomarse en cuenta cuando se desea controlar la temperatura del reactor empleando al flujo de agua de enfriamiento como variable manipulada. El balance de energía del medio de enfriamiento proporciona la funcionalidad entre el flujo de agua de enfriamiento y la temperatura del reactor. Ellos demuestran que las características de multiplicidad cambian de manera considerable cuando se incluye esta dinámica en el modelo, y que es importante considerarla para analizar las características de estabilidad a lazo abierto y lazo cerrado. Los autores demuestran teóricamente la posible presencia de multiplicidades de entrada e islas entre el flujo de alimentación y la temperatura del reactor. Sin embargo no realizan análisis de multiplicidad entre el flujo de alimentación y la temperatura del reactor. Demuestran teóricamente la presencia de multiplicidades de entrada y salida entre el flujo de agua de enfriamiento y la temperatura del medio de enfriamiento, para ciertos rangos de parámetros, aunque el análisis de multiplicidad que realizan fue preliminar. Esta conducta

no se presenta en el sistema cuando no se incluye la dinámica del medio de enfriamiento. El estudio lo enfocaron al análisis de multiplicidad entre el flujo de agua de enfriamiento y la temperatura del reactor, para los cuales sólo hay multiplicidades de salida. Mencionan la importancia del análisis de multiplicidad, ya que a partir de éste se obtiene información práctica para manipular regiones de operación asociadas con multiplicidades de entrada y salida.

Russo y Bequette, 1996 [37] analizaron el efecto de cambios en el diseño del proceso sobre el comportamiento, a lazo abierto, del sistema de reacción previamente estudiado (se incluye la dinámica del medio de enfriamiento). En este estudio realizan análisis de multiplicidad entre el flujo de alimentación y la temperatura del reactor. Reportan los puntos en los que se originan y desaparecen las soluciones aisladas (islas). Mediante el uso de diagramas de multiplicidad global demostraron que ciertos cambios en el diseño del reactor pueden resultar en puntos de operación no factibles, y sugieren algunos cambios en las condiciones de operación para evitar estos puntos.

Los avances obtenidos a partir de los estudios sobre el comportamiento no lineal de sistemas de reacción química, motivaron estudios en otros sistemas en los que el comportamiento no lineal es más complejo. Uno de estos sistemas de reacción son las reacciones de polimerización.

1.1.2 Reactores de Polimerización

La producción de polímeros es un segmento muy importante en la industria de procesamiento químico. Los polímeros se producen en diversos tipos de reactores mediante diferentes mecanismos cinéticos. Un método muy importante de producción de polímeros es la polimerización vía radicales libres en reactores tanque agitado.

El comportamiento dinámico de reactores continuos de polimerización vía radicales libres ha sido un área de considerable interés desde las últimas dos décadas. Una de las razones principales, además de la creciente importancia industrial de los polímeros, es la diversidad de estados estacionarios y la conducta dinámica que estos reactores presentan. En varios estudios de modelamiento se ha analizado el comportamiento de polimerizaciones en reactores tanque agitado para una variedad de monómeros de vinilo. En particular Ray y colaboradores, de la Universidad de Wisconsin, han efectuado diversos estudios, tanto teóricos como experimentales, sobre multiplicidad y estabilidad en reactores de polimerización.

Jaisinghani y Ray, 1977 [19] predijeron la posibilidad de multiplicidad de estados estacionarios y bifurcaciones periódicas para el caso de las homopolimerizaciones de metilmetacrilato (MMA) y de estireno empleando azo-bis-isobutironitrilo (AIBN) como iniciador. Ellos no consideraron la influencia del solvente en el efecto gel. Para ambas homopolimerizaciones encontraron tres estados estacionarios, tanto para el caso isotérmico como para el no isotérmico. El único tipo de comportamiento periódico que encontraron fue un ciclo límite inestable.

Schmidt y Ray, 1981 [38] desarrollaron un modelo matemático para la homopolimerización en solución del MMA, pero empleando acetato de etilo como solvente y peróxido de benzoilo como iniciador. Mediante simulaciones matemáticas y experimentaciones analizaron el sistema bajo condiciones isotérmicas y concentraciones bajas de solvente.

Ellos demostraron la presencia de múltiples estados estacionarios del tipo histéresis.

Hamer y colaboradores, 1981 [17] extendieron el trabajo realizado por Jasinghani y Ray [19] a reactores isotérmicos con concentraciones altas de solvente. Ellos estudiaron la homopolimerización de MMA y acetato de vinilo (VA), así como su copolimerización (VA-MMA) empleando acetato de etilo como iniciador. Modificaron la concentración del solvente, la relación de monómeros en la alimentación y la capacidad de enfriamiento del reactor, y mostraron el comportamiento dinámico presente. Mostraron por primera vez la existencia de ciclos límite estables para este tipo de reactores de polimerización. Schmidt y colaboradores, 1984 [39] completaron este estudio proporcionando evidencias de la existencia de multiplicidades para las reacciones de homopolimerización bajo condiciones no isotérmicas. En sus experimentos emplearon terbutanol como solvente y AIBN como iniciador. Determinaron teóricamente la posible existencia de cinco estados estacionarios para la homopolimerización de MMA. Ellos lo atribuyeron al efecto gel. Los autores encontraron experimentalmente la existencia de islas, pero no pudieron demostrar la presencia de fenómenos periódicos.

Rawlings y Ray, 1987 [33] estudiaron la estabilidad de reactores de polimerización en emulsión. Desarrollaron el modelo matemático y lo validaron experimentalmente. El caso de estudio analizado fue la polimerización de MMA en emulsión. Con este modelamiento encontraron multiplicidad del tipo histéresis y bifurcaciones de Hopf. Encontraron que el tiempo de residencia y la velocidad de desorción del radical eran los parámetros clave para la estabilidad del reactor.

Adebekun y colaboradores, 1989 [2] desarrollaron un trabajo teórico sobre la polimerización en solución de MMA, y encontraron hasta cinco estados estacionarios, pero para condiciones de operación diferentes a las reportadas por Schmidt y colaboradores [39].

Teymour y Ray, 1989 [43] estudiaron el comportamiento dinámico de la homopolimerización de VA en solución, empleando un reactor a baja presión, a escala laboratorio. Encontraron evidencia experimental preliminar de la presencia de ciclos límite. Adicionalmente realizaron análisis de bifurcación del modelo matemático del reactor, lo que les permitió clasificar el espacio de parámetros en regiones donde hay diferentes tipos de estados estacionarios y comportamientos dinámicos. Posteriormente, Teymour y Ray, 1992 [44] complementan estos resultados mostrando evidencia de comportamiento tipo ciclo límite para la homopolimerización de VA bajo diferentes condiciones de operación. En un trabajo posterior Teymour y Ray, 1992 [45] efectuaron el análisis del mismo sistema de reacción, pero ahora en un reactor a escala industrial. El modelo matemático empleado fue una adaptación del modelo desarrollado anteriormente. Encontraron comportamientos aun más complejos que los hallados en el reactor a escala laboratorio, como órbitas periódicas estables, islas de soluciones periódicas y soluciones de periodo doble con una ruta hacia el caos.

Pinto y Ray, 1995 [28] analizaron el comportamiento dinámico de reacciones de copolimerización. El último estudio que había sido reportado sobre reacciones de copolimerización fue el realizado por Hamer y colaboradores, 1981 [17]. El sistema que estudiaron fue la copolimerización de VA-MMA en solución, empleando ter-butanol como solvente y AIBN como iniciador. Su objetivo fue analizar el cambio del comportamiento del sistema de homopolimerización de VA al presentarse en la alimentación, aunque en bajas proporciones (rango de 0 a 0.5% en volumen), un segundo monómero (MMA). De-

sarrollaron el modelo matemático y determinaron algunos parámetros cinéticos para el sistema. Elaboraron diagramas de bifurcación en los que encontraron fenómenos oscilatorios. Validaron el modelo matemático experimentalmente y verificaron la gran sensibilidad de estos sistemas a cambios en las concentraciones de alimentación de monómeros (VA y MMA). Posteriormente, Pinto y Ray, 1995 [29] continuaron el trabajo empleando el modelo, ahora validado, para efectuar análisis de bifurcación con respecto a la relación de los monómeros en la alimentación, concentración del iniciador, fracción de solvente y tiempo de residencia. Los autores encontraron soluciones periódicas.

Pinto, 1995 [30] estudió la misma reacción que Pinto y Ray [29] pero en un reactor a escala industrial. Existen tres diferencias entre el modelo matemático del reactor a escala laboratorio y el del reactor industrial. Primero, la pérdida de calor hacia el ambiente es considerable en el sistema experimental por lo que se debe modelar. En el reactor a escala laboratorio se debe considerar la capacidad calorífica de las paredes del reactor ya que tiene una magnitud significativa comparada con la capacidad calorífica del medio de reacción. En el reactor a escala industrial, estos aspectos (pérdida de calor al ambiente y capacidad calorífica de las paredes del reactor) no son significativos. Tercero, en el caso experimental la operación está limitada por la temperatura de ebullición de la mezcla de reacción, ya que el reactor opera a presión atmosférica. En el caso industrial esta restricción no es importante ya que los reactores industriales normalmente están diseñados para operar a altas temperaturas y presiones. El modelo matemático del reactor industrial es más sencillo que el experimental, por lo que se podría esperar que presentara una conducta no lineal más simple. Sin embargo, se demostró que el comportamiento dinámico de reactores a escala industrial es más complejo que los de escala laboratorio. El autor encontró oscilaciones toroidales y caóticas. Se menciona que la diferencia en complejidad de conducta no lineal podría deberse a que los tres aspectos antes mencionados parecen contribuir a la estabilidad global del reactor experimental. Los reactores a escala industrial presentan una conducta no lineal más compleja que los experimentales, ya que al incrementar el tamaño del reactor hay una reducción en la relación entre el área de transferencia de calor y el volumen del reactor (Russo y Bequette, 1996 [37]), ya que se mantiene constante el tiempo de residencia del reactor en el escalamiento.

Pinto y Ray, 1996 [31] estudiaron para el mismo sistema de copolimerización, los efectos de inhibición en la estabilidad del sistema. Modificaron el modelo matemático para incluir la presencia de inhibidores en la reacción. Demostraron tanto teórica como experimentalmente que la presencia de pequeñas cantidades de inhibidores en la corriente de alimentación puede llevar a regiones de operación inestables.

Freitas Filho y colaboradores, 1994 [12] estudiaron la multiplicidad de estados estacionarios para reactores de polimerización en masa. Su principal interés fue demostrar si era posible encontrar cinco estados estacionarios en reactores de polimerización en masa, como se había reportado anteriormente para algunos sistemas [39, 2]. Estudiaron los sistemas de homopolimerización de VA, estireno y MMA. Encontraron que no siempre se encuentran cinco estados estacionarios en los sistemas de polimerización en masa, aunque es factible. Para el caso de la polimerización en masa del MMA encontraron cinco estados estacionarios, aunque únicamente dos fueron estables. Los modelos matemáticos empleados únicamente contemplaron tres estados, la conversión, la temperatura del reactor y la concentración del iniciador. Los autores realizaron los análisis de multiplicidad empleando

el coeficiente de transferencia de calor, la concentración de alimentación del iniciador y el tiempo de residencia como parámetros de continuación.

Kiparissides, 1996 [20] menciona que en los reactores tanque agitado con reacciones de polimerización se puede observar, bajo ciertas condiciones de operación, multiplicidad de estados estacionarios y comportamiento dinámico complejo. Afirma que para una configuración dada de un reactor de polimerización, las propiedades moleculares del polímero dependen de un gran número de variables de control, entre las que se encuentran:

- Variables de reacción (temperatura, concentración y flujo de alimentación del monómero)
- Variables del iniciador (tipo y número de iniciadores, concentración y flujo de alimentación del iniciador)
- Variables de transferencia de calor (temperaturas de las corrientes de alimentación, temperatura y flujo del medio de enfriamiento, área de transferencia de calor, etc.)

Kiparissides, al igual que otros investigadores, afirma que el conocimiento de la conducta no lineal de estos reactores es importante para su diseño, optimización y control. El control de reactores de polimerización es un problema interesante, pero difícil y complejo [9]. Esto se atribuye, entre otras razones, a la sensibilidad extrema de los estados estacionarios a cambios pequeños en valores de parámetros o condiciones de operación, y al comportamiento dinámico altamente no lineal que frecuentemente presentan estos reactores.

De lo anterior puede apreciarse que, principalmente en las últimas dos décadas, ha sido cada vez más importante comprender el efecto de las no linealidades sobre la conducta de los sistemas. Los estudios realizados se han enfocado a la determinación de soluciones múltiples y al surgimiento de soluciones periódicas. También se ha analizado la dependencia de la conducta de los sistemas con respecto a algunos parámetros del sistema. Es importante recalcar que la mayoría de los problemas anteriores no poseen soluciones analíticas. Anterior al empleo de métodos basados en la conducta dinámica no lineal, se empleó la simulación para el mismo propósito. Sin embargo, la información que proporciona la simulación es bastante limitada. Se puede obtener detalle de una o más trayectorias, pero se debe invertir mucho tiempo y un enorme esfuerzo computacional para obtener una idea más clara de la conducta global del sistema. Dicho esfuerzo se ve multiplicado por varios factores cuando se analiza la conducta del sistema en relación a varios parámetros. De esta discusión puede apreciarse que el empleo de la simulación no es el mejor procedimiento a tratar para comprender la conducta no lineal de un sistema.

1.2 Control

El problema general del control para un sistema dado (véase la figura 1.1), consiste en lograr que las salidas (s_1, s_2, \dots, s_n) se comporten de una forma deseada, mediante la manipulación de una o varias entradas (e_1, e_2, \dots, e_m) , aun en presencia de incertidumbres y errores de modelamiento. Es necesario manipular las entradas de una forma tal que se

contrarreste o elimine el efecto de una o varias perturbaciones (d_1, d_2, \dots, d_p) . Por lo común $m \geq n$.

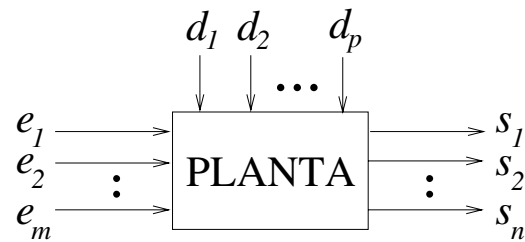


Figura 1.1: Problema general de control.

Koppel, 1982 [21] demostró la importancia de aplicar la teoría de singularidad en el diseño del control no lineal de sistemas multivariables. El autor enfocó su estudio a determinar multiplicidades de entrada, ya que en ese caso, varios valores de las variables manipuladas pueden dar el mismo resultado en las variables a controlar. Menciona que el problema cuando existen multiplicidades de entrada, es que ocurra una transición de un estado estacionario a otro, sin que éste sea detectado por el sistema de medición en virtud de que normalmente las variables manipuladas no son monitoreadas. Esto hace necesario estudiar el comportamiento no lineal del sistema, para detectar cualquier multiplicidad de entrada antes de decidir la estrategia de control a emplear.

1.2.1 Control de Reactores de Polimerización

Congalidis y colaboradores, 1989 [9] diseñaron un sistema de control para un reactor de copolimerización, empleando control retroalimentado y anticipado. El sistema de estudio fue la copolimerización de VA-MMA en un reactor tanque agitado. Ellos afirman que, aunque este sistema de polimerización es muy complejo, el controlador diseñado satisfizo los objetivos de control propuestos en su estudio.

Daoutidis y colaboradores, 1990 [10] emplearon la teoría de control geométrico no lineal para abordar el problema del control de un sistema de polimerización. La estructura de control fue del tipo retroalimentado/anticipado. El sistema en estudio es la polimerización del MMA, empleando tolueno como solvente y AIBN como iniciador. Una característica importante del modelo matemático que ellos emplean es que incluye la dinámica del medio de enfriamiento, aspecto que anteriormente no se había considerado. Para el control, ellos eligen el flujo de iniciador y de agua de enfriamiento como variables manipuladas y a la concentración de monómero en la alimentación y temperatura de alimentación como perturbaciones. Las variables a controlar son la temperatura y el peso molecular promedio del polímero. Cabe mencionar que los autores no realizaron un análisis de operabilidad del sistema.

Alvarez y colaboradores, 1990 [1] emplearon un método geométrico no lineal para controlar la polimerización de MMA en un punto de operación inestable. Mencionan que se debe emplear el flujo del medio de enfriamiento y el flujo del iniciador para controlar la conversión de monómero y temperatura del reactor. Sin embargo, sin justificar la razón del cambio de variables manipuladas, los autores emplearon en sus análisis la temperatura del

medio de enfriamiento y la concentración del iniciador en la alimentación como variables manipuladas. Cabe mencionar que en el modelo matemático no consideran la dinámica del medio de enfriamiento por lo que no hubiesen podido manipular este flujo. Consideran como perturbaciones la concentración de alimentación de monómero y temperatura a la entrada del reactor. Los autores mencionan que el esquema de control a lazo cerrado presentó cierto grado de robustez en presencia de errores de modelamiento. Sin embargo, la robustez no está abordada explícitamente en el procedimiento de diseño del sistema de control a lazo cerrado, por lo cual la robustez antes mencionada no podría garantizarse en otros puntos de operación. Además el procedimiento de diseño es complicado.

Hidalgo y Brosilow, 1990 [18] emplearon control predictivo para abordar el problema del control de la reacción de polimerización de estireno en puntos de operación inestables. El control adecuado de un proceso en un punto de operación inestable requiere suficiente acción de control para mantener al proceso dentro de una pequeña región de operación aun en presencia de perturbaciones. Ellos argumentan que siendo este un sistema no lineal, el emplear una ley de control no lineal resultó en un control adecuado del sistema. Sin embargo, si se esperan perturbaciones pequeñas y se analiza el problema de control regulatorio, una ley de control lineal podría probablemente también satisfacer los requisitos de control a lazo cerrado. Los autores mencionaron que no se puede controlar adecuadamente la temperatura y conversión del reactor en estudio manipulando únicamente el flujo del medio de enfriamiento, se requiere manipular simultáneamente el flujo de agua de enfriamiento y el flujo del monómero en la alimentación.

Soroush y Kravaris, 1994 [41] aplicaron un método de control de linealización global para controlar un sistema de polimerización con una matriz característica singular. El sistema de reacción fue la polimerización del MMA, empleando tolueno como solvente y AIBN como iniciador. El modelo matemático consistió en una modificación del modelo propuesto por Daoutidis y colaboradores [10]. Ellos eligieron dos variables manipuladas para controlar dos variables (temperatura y conversión). La primera variable manipulada fue el flujo de alimentación de monómero y la segunda la definieron como una diferencia entre el calor suministrado y el calor removido del sistema, en donde la variable físicamente manipulada fue el flujo de alimentación del medio de enfriamiento. Mencionan que el problema central del control para este caso, es que la matriz característica del sistema es generalmente singular (todos los elementos de un vector columna de la matriz característica son nulos). Cuando la matriz característica es singular no es posible calcular la linealización estática del sistema, ya que pierde rango.

McAuley y colaboradores, 1995 [25] estudiaron los efectos de las condiciones de operación de un reactor de polimerización de etileno en fase gas, sobre la dinámica y estabilidad del sistema. Demostraron que a lazo abierto, estos reactores son susceptibles a inestabilidades, ciclos límite y excursiones hacia estados estacionarios de temperaturas altas inaceptables, por lo que es indispensable un control adecuado de la temperatura. Ellos emplearon un controlador proporcional-integral retroalimentado y la variable manipulada fue el flujo de alimentación de etileno.

Lewin y Bogle, 1996 [23] efectuaron el análisis de operabilidad lineal para el sistema de polimerización de MMA propuesto por Daoutidis y colaboradores [10], y emplearon las mismas variables manipuladas, controladas y perturbaciones que ellos. En el estudio obtienen el punto de operación óptimo para el sistema, tomando como criterio de

optimización el mínimo flujo de iniciador. Para comprender el efecto de cambios en las variables manipuladas sobre el comportamiento del sistema, únicamente realizan estudios de multiplicidad a diferentes flujos de iniciador, empleando al flujo de agua de enfriamiento como parámetro de continuación. Posteriormente aplican un esquema de control proporcional-integral descentralizado, y concluyen que tiene un buen desempeño en el punto óptimo de este sistema altamente no lineal. Es importante mencionar que los autores no abordaron el problema de la robustez en el diseño del controlador. Comparan la operabilidad del sistema en el punto de operación óptimo y en un punto de operación sub-óptimo. Concluyen que el sistema es fácil de controlar en el punto óptimo, y que es más difícil de controlar en el sub-óptimo. Por lo general es más difícil controlar procesos en los puntos óptimos de operación. En este caso llegaron a la conclusión contraria, probablemente porque el criterio de optimización empleado fue minimizar el flujo de iniciador, a diferencia de maximizar la conversión del monómero (criterio más común). Cabe mencionar que el punto de operación óptimo del sistema difiere del punto de operación alrededor del cual Daoutidis y colaboradores [10] trabajaron; probablemente por esa razón concluyeron que el problema de control es difícil. Es decir, aunque se trata del mismo problema, las regiones de operación elegidas por los autores fueron distintas por lo que es difícil plantear conclusiones generales.

Padilla y Alvarez, 1997 [27] propusieron una técnica para diseñar el control de un sistema dado empleando la teoría de control geométrico y confrontando directamente las no linealidades, interacciones, multiplicidades de entrada y robustez. Ellos prueban la técnica en el sistema de copolimerización VA-MMA empleando acetato de etilo como solvente y AIBN como iniciador. Los autores obtienen un compensador lineal multivariable para controlar el sistema manipulando la temperatura de la corriente de alimentación y los flujos de iniciador, monómeros y solvente. En el modelo matemático no incluyen la dinámica del medio de enfriamiento.

1.2.2 Control y Matrices de Intervalos

Recientemente, Wang y colaboradores, 1997 [48] reportaron una serie de condiciones suficientes para la estabilidad robusta en matrices de intervalos. Ellos sugieren que la teoría desarrollada podría aplicarse al control de procesos. No se encontró ninguna publicación en la que dicha teoría se aplicara al control de procesos.

1.3 Conclusiones

Con base en la revisión bibliográfica realizada, se pueden mencionar las siguientes conclusiones:

- Para lograr un diseño adecuado del esquema de control a lazo cerrado, es necesario comprender el comportamiento no lineal del sistema alrededor de la región de operación seleccionada. Hay evidencias publicadas que indican diferencias en el grado de dificultad de controlar un sistema, dependiendo del punto de operación elegido. Por tanto, es importante determinar las regiones de operación en las que el problema de control parece ser más difícil.

- La teoría de singularidad es una herramienta matemática que permite predecir analíticamente multiplicidades de entrada y salida, y diversos comportamientos no lineales [5, 11, 14, 15, 22].
- Los sistemas de polimerización han adquirido cada vez mayor importancia a nivel industrial. Son sistemas muy complejos y cuentan con un gran número de parámetros de operación y diseño. Esto hace que el problema de análisis de la conducta no lineal sea complicado. Se han reportado, para algunos sistemas de polimerización, hasta cinco estados estacionarios [2, 12, 39], conducta oscilatoria, ciclos límite, bifurcaciones de Hopf y hasta soluciones de periodo doble con ruta hacia el caos.
- Estudios en reactores químicos tanque agitado para reacciones de primer orden han demostrado que al incluir la dinámica del medio de enfriamiento, el comportamiento no lineal del sistema es considerablemente más complejo. Esto sugiere emplear modelos matemáticos que incluyan la dinámica del medio de enfriamiento, ya que al despreciarla, se pueden omitir conductas no lineales relevantes para el control.
- Son escasos los estudios reportados a la fecha, que analicen los efectos de cambios en el diseño de reactores sobre su conducta no lineal; no se ha reportado ninguno que estudie estos efectos en reactores de polimerización.
- El modelo matemático del sistema de polimerización de MMA que incluye la dinámica del medio de enfriamiento (Daoutidis y colaboradores [10]), no ha sido ampliamente estudiado. Se han reportado pocos estudios relacionados a este problema, siendo la última publicación el análisis de multiplicidad realizado por Lewin y Bogle [23], que fue un análisis limitado.
- Los resultados sobre estabilidad de matrices de intervalos reportados por Wang y colaboradores [48] puede emplearse para el control robusto de procesos no lineales en puntos cercanos a la región nominal de operación.

Capítulo 2

Marco Teórico

En este capítulo se presentan los conceptos más relevantes empleados a lo largo del trabajo. Se presentan en dos grupos principales: conceptos de multiplicidad y conceptos de control.

2.1 Teoría de Singularidad, Multiplicidad y Bifurcaciones

Con frecuencia los sistemas de procesamiento químico presentan conducta altamente no lineal. Algunas de las formas en las que la conducta no lineal se manifiesta es a través del surgimiento de múltiples estados estacionarios, histéresis, bifurcaciones e incluso conducta caótica. Toda esta información es relevante para propósitos de diseño, o rediseño, y control de procesos a lazo cerrado. Por ejemplo, usando esta información el diseñador estaría en una mejor posición de entender las potenciales dificultades que implica el seleccionar una cierta estrategia de control, o bien seleccionar una región de operación donde el control del proceso pueda no ser tan difícil.

El uso de la llamada teoría de singularidad ha sido sugerido [5, 11, 14, 15, 22] como un medio sistemático de abordar dos de los problemas no lineales más importantes que surgen en sistemas de procesamiento químico: la determinación de múltiples estados estacionarios, y la variación de la respuesta de la planta al modificar el valor de algún parámetro.

La teoría de singularidad proporciona un marco teórico para determinar:

- El máximo número posible de soluciones locales que puede presentar la ecuación algebraica no lineal

$$F(x, \varphi, \mathbf{p}) = 0 \quad (2.1)$$

donde x representa el estado del sistema, φ es un parámetro del sistema, y \mathbf{p} es un vector que contiene el resto de los parámetros del sistema. La diferencia entre φ y \mathbf{p} es que φ puede tomar cualquier valor en el intervalo $[\varphi_l, \varphi_u]$, mientras que los parámetros representados por \mathbf{p} permanecen constantes. φ_l, φ_u representan las cotas inferior y superior de φ respectivamente.

- El o los diagramas de bifurcación locales del sistema $F(x, \varphi, \mathbf{p})$ alrededor de un punto singular.

La teoría de singularidad sólo es aplicable a sistemas en estado estacionario, por lo cual no puede ser usada, en la forma descrita en este trabajo, para abordar problemas relacionados a la conducta dinámica de sistemas no lineales. Una limitación importante de la teoría de singularidad es que sus resultados son válidos sólo de manera *local*. Es decir, con esta teoría podemos determinar el número máximo de soluciones del problema $F(x, \varphi, \mathbf{p})$ alrededor de algún punto $\mathbf{p} = \mathbf{p}^o$ donde \mathbf{p}^o representa el valor de los parámetros alrededor de los cuales se determinó la singularidad del sistema $F(x, \varphi, \mathbf{p})$.

2.1.1 Diagrama de bifurcación

Considere el problema de bifurcación planteado por la ecuación algebraica no lineal dada por la ecuación 2.1. Tanto φ como \mathbf{p} representan parámetros del sistema; sin embargo, en nuestro análisis φ toma valores en un cierto intervalo definido *a priori*, mientras que \mathbf{p} representa a todos aquellos parámetros que permanecen constantes durante todo el análisis. Por esta razón reescribiremos la ecuación anterior como,

$$F(x, \varphi) = 0 \quad (2.2)$$

Mediante algún cambio de coordenadas (p.e. adimensionalización) la ecuación anterior puede reescribirse como,

$$F(0, 0) = 0 \quad (2.3)$$

donde se supone que $F \in C^\infty$.

Supongamos que la ecuación 2.2 la resolvemos para una serie de valores $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ donde $\varphi_i \in [\varphi_l, \varphi_u]$ siendo φ_l, φ_u los límites inferior y superior de φ , respectivamente. Entonces para cada φ_i existirá alguna solución de la ecuación 2.2 denotada por x_i . A la gráfica de x_i contra φ_i se le denomina el diagrama de bifurcación del sistema representado por la ecuación 2.2. El diagrama de bifurcación se llama *local* si la gráfica de x_i contra φ_i se analiza en una pequeña vecindad alrededor de algún punto de esta gráfica. Si el análisis se efectúa en todo el espacio de solución, dentro del rango de posibles valores de x y φ , el diagrama de bifurcación se llama *global*. Los diagramas de bifurcación también se conocen como diagramas de multiplicidad [4, 15].

2.1.2 Equivalencia por contacto

Se dice que dos diagramas de bifurcación $F(x, \varphi) = 0$ y $G(y, \mu) = 0$ son equivalentes por contacto si un diagrama de bifurcación se puede transformar en el otro mediante un cambio suave e invertible de coordenadas,

$$(y, \mu) \rightarrow (x(y, \mu), \varphi(\mu)) \quad (2.4)$$

donde se supone que el cambio de coordenadas es tal que las propiedades cualitativas del mapa original y del mapa nuevo son idénticas en el interior de una pequeña vecindad alrededor del origen. Para completar la transformación entre los mapas se emplea un factor o función de escalamiento $T(y, \mu)$. Por lo tanto la transformación de $T(y, \mu)$ en $G(y, \mu)$ puede realizarse mediante,

$$G(y, \mu) = T(y, \mu)F(x(y, \mu), \varphi(\mu)) \quad (2.5)$$

Nótese que el cambio suave de coordenadas entre $F(x, \varphi)$ y $G(y, \mu)$ implica dos cosas:

1. Tanto F como G tienen el mismo número de soluciones en estado estacionario alrededor del origen.
2. Los diagramas de bifurcación de F y G son los mismos alrededor del origen.

Para que estas dos afirmaciones sean válidas se deben cumplir las siguientes condiciones,

$$x(0, 0) = 0 \quad (2.6)$$

$$\varphi(0) = 0 \quad (2.7)$$

$$T(0, 0) = 0 \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial x(0, 0)}{\partial y} = 0 \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial \varphi(0)}{\partial \mu} = 0 \quad (2.10)$$

La idea de definir y utilizar funciones equivalentes por contacto es que, en muchos casos, resulta más fácil el analizar las propiedades de bifurcación del mapa $F(x, \varphi) = 0$ empleando la transformación $G(y, \mu)$ en vez del mapa original dado por $F(x, \varphi)$ [4, 15].

2.1.3 Diagrama de bifurcación estable

Se dice que el diagrama de bifurcación de la función $F(x, \varphi)$ es estable si se cumple que la función $F(x, \varphi) + g(x, \varphi, \epsilon)$ es equivalente por contacto a $F(x, \varphi)$ en el interior de una pequeña región alrededor del origen. Estabilidad en este sentido significa que tanto el número de soluciones, como los diagramas de bifurcación, son los mismos si la función $F(x, \varphi)$ se analiza lo suficientemente cerca del origen.

2.1.4 Estabilidad

La estabilidad del sistema dinámico lineal $\dot{x} = Ax + Bu$ se determina a partir del cálculo de los valores singulares o eigenvalores (λ_i) de la matriz A [26, 40]. Para que el sistema sea estable se debe cumplir que:

$$\operatorname{Re}[\lambda_i(A)] < 0 \quad (2.11)$$

Dicho de otra manera, esto implica que todos los eigenvalores se encuentran en el lado izquierdo del plano complejo. Esto también se conoce como estabilidad del tipo *Hurwitz*.

La estabilidad de un punto singular de un sistema dinámico no lineal $dx/dt = f(x)$, donde $f(x)$ es una función continua y para la que existen derivadas continuas de todos los órdenes, se determina mediante la linealización del sistema en ese punto. Si el sistema lineal indica estabilidad del estado estacionario, entonces el sistema no lineal será estable en la vecindad de ese punto singular [26].

Por lo tanto, la estabilidad de un punto singular (x, φ) del sistema no lineal $F(x, \varphi) = 0$ se determina a partir del cálculo de los valores singulares o eigenvalores (λ_i) del jacobiano A de la función F evaluada en ese punto singular. El estado estacionario será estable si todos los eigenvalores tienen parte real negativa.

2.1.5 Existencia de multiplicidades

La solución (x, φ, \mathbf{p}) de la ecuación $F(x, \varphi, \mathbf{p}) = 0$ es un punto singular. Se dice que existen multiplicidades si en el punto singular se cumple que:

$$\frac{\partial F(x, \varphi, \mathbf{p})}{\partial z} = 0 \quad (2.12)$$

Si $z = x$, implica que hay multiplicidad de salida; si $z = \varphi$, se refiere a que hay multiplicidad de entrada.

- *Multiplicidad de entrada.* Si un sistema presenta multiplicidades de entrada significa que para varios valores del parámetro de continuación (φ) se presenta el mismo valor de el estado (x) .
- *Multiplicidad de salida.* Si un sistema presenta multiplicidades de salida significa que para un mismo valor del parámetro de continuación (φ) se presentan varios valores para el estado (x) .

El conjunto de todos los puntos singulares en el espacio (x, φ, \mathbf{p}) forma el conjunto singular. A la proyección del conjunto singular en el espacio (φ, \mathbf{p}) se le llama el conjunto catástrofe [4]. En Ingeniería a un punto singular se le conoce como estado estacionario.

2.1.6 Número máximo de soluciones locales

Los puntos de máxima singularidad en el espacio de parámetros \mathbf{p} , son puntos \mathbf{p}^o alrededor de los cuales surgen diversos tipos de diagramas de bifurcación. Estos puntos se caracterizan por el hecho de que varios términos de la expansión en series de Taylor de $F(x, \varphi)$ se anulan. Esto significa que en estos puntos singulares se cumple que:

$$F(0, 0, \mathbf{p}^o) = 0 \tag{2.13}$$

$$\frac{\partial^i F(0, 0, \mathbf{p}^o)}{\partial x^i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, r \tag{2.14}$$

$$\frac{\partial^{r+1} F(0, 0, \mathbf{p}^o)}{\partial x^{r+1}} \neq 0 \tag{2.15}$$

$$\frac{\partial F(0, 0, \mathbf{p}^o)}{\partial \varphi} \neq 0 \tag{2.16}$$

Entonces en una pequeña vecindad alrededor de \mathbf{p}^o siempre existirá una función $G(y, \mu)$ la cual es equivalente por contacto a $F(x, \varphi, \mathbf{p}^o)$ y que está dada por:

$$G(y, \mu) = y^{r+1} \pm \mu \tag{2.17}$$

Este enunciado significa que si existe un punto singular \mathbf{p}^o , entonces el máximo número de soluciones en estado estacionario del mapa $F(x, \varphi, \mathbf{p})$ en una vecindad pequeña alrededor del punto \mathbf{p}^o , es $r + 1$. Además de obtener el máximo número de soluciones locales, este resultado también nos permite obtener todos los posibles diagramas de bifurcación locales [4, 15].

2.1.7 Tipos de bifurcaciones

Se puede demostrar que un diagrama de bifurcación cambia cualitativamente cuando el vector de parámetros \mathbf{p} cruza alguna de las siguientes superficies:

- Histéresis

En la figura 2.1 se muestra la secuencia de pasos que experimenta un diagrama de bifurcación para que surja la bifurcación del tipo histéresis.

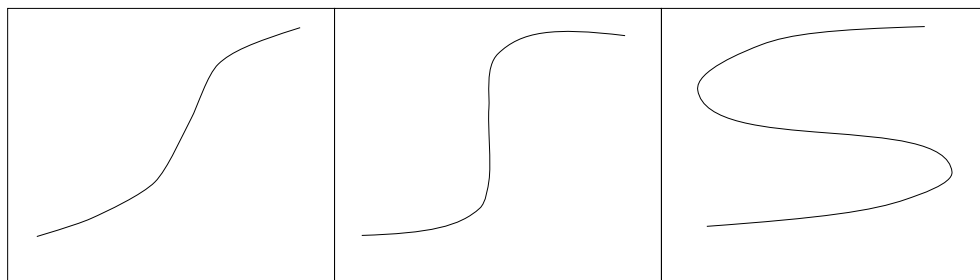


Figura 2.1: Bifurcación del tipo histéresis.

Estos diagramas de bifurcación están formados por todos los puntos (x, φ) en el espacio de parámetros \mathbf{p} que satisface la ecuación 2.1:

$$F(x, \varphi, \mathbf{p}) = 0$$

y las ecuaciones:

$$\frac{\partial F(x, \varphi, \mathbf{p})}{\partial x} = 0 \tag{2.18}$$

$$\frac{\partial^2 F(x, \varphi, \mathbf{p})}{\partial x^2} = 0 \tag{2.19}$$

En la bifurcación de tipo histéresis existe multiplicidad de salida.

- Islas

La bifurcación del tipo de isla está formada por el conjunto de valores (x, φ) en el espacio de parámetros \mathbf{p} que satisfacen las ecuaciones 2.1 y 2.18:

$$\begin{aligned} F(x, \varphi, \mathbf{p}) &= 0 \\ \frac{\partial F(x, \varphi, \mathbf{p})}{\partial x} &= 0 \end{aligned}$$

además de:

$$\frac{\partial F(x, \varphi, \mathbf{p})}{\partial \varphi} = 0 \tag{2.20}$$

En la bifurcación de tipo isla existe tanto multiplicidad de entrada como multiplicidad de salida. En la figura 2.2 se muestran dos formas en las que puede surgir este tipo de bifurcación.

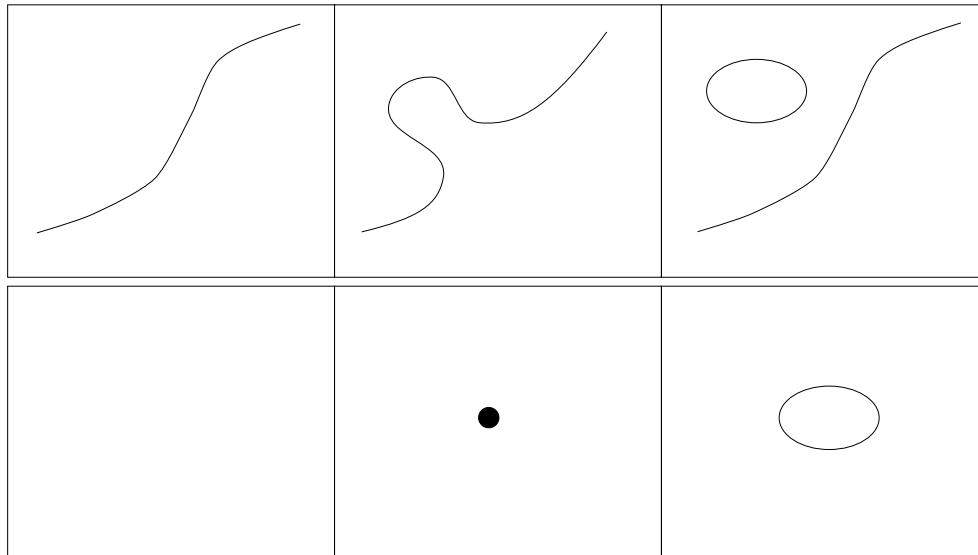


Figura 2.2: Bifurcación del tipo isla.

- Límite doble

En la bifurcación de tipo ciclo límite existe multiplicidad de salida. Posibles patrones de formación de la bifurcación del tipo límite doble se muestran en la figura 2.3.

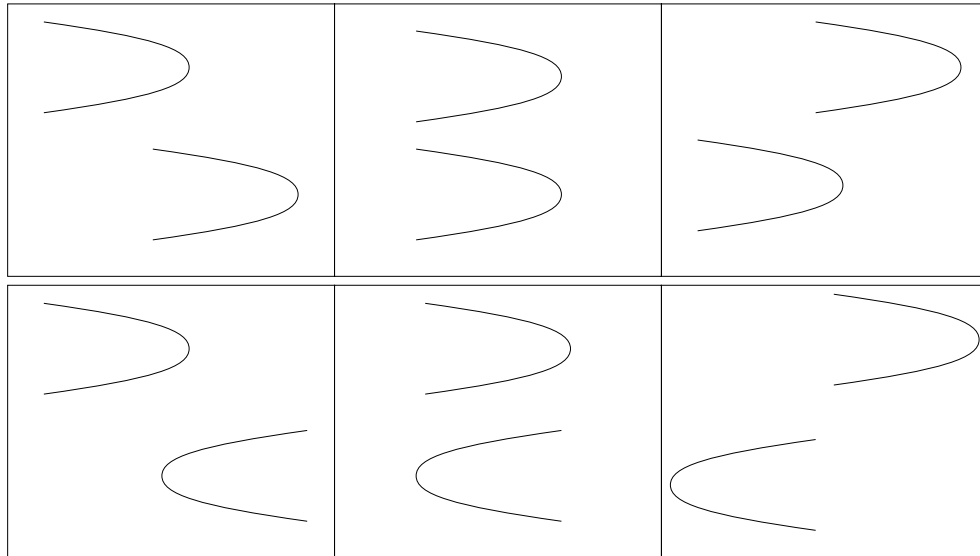


Figura 2.3: Bifurcación del tipo límite doble.

Este tipo de diagrama de bifurcación está formado por todos los puntos (x, φ) en el espacio de parámetros \mathbf{p} que satisfacen las siguientes ecuaciones:

$$F(x_1, \varphi, \mathbf{p}) = 0 \tag{2.21}$$

$$F(x_2, \varphi, \mathbf{p}) = 0 \tag{2.22}$$

$$\frac{\partial F(x_1, \varphi, \mathbf{p})}{\partial x_1} = 0 \tag{2.23}$$

$$\frac{\partial F(x_2, \varphi, \mathbf{p})}{\partial x_2} = 0 \tag{2.24}$$

donde $x_1 \neq x_2$.

2.2 Teoría de Control

El objetivo central del sistema de control por retroalimentación k , es asegurar que la(s) salida(s) y de la planta G se comporte(n) de la manera deseada mediante la manipulación de la(s) entrada(s) u a la planta G . Esto significa que el controlador deberá manipular u para contrarrestar el efecto de una perturbación d y/o d' de tal forma que la planta opere en el punto de operación deseado r , aun en presencia de incertidumbres en las salidas y/o en la planta (véase la figura 2.4).

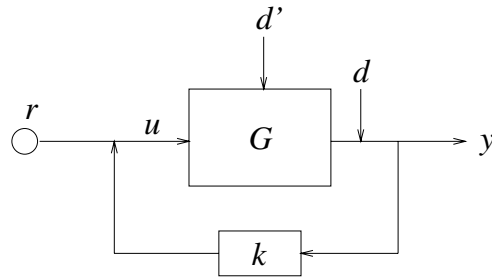


Figura 2.4: Esquema de control.

2.2.1 Representación

La planta G con u entradas y y salidas, en términos del modelo linealizado, puede representarse matemáticamente de dos formas generales [40]:

- **Espacio de estado (dominio del tiempo):**

$$\begin{aligned} \dot{x} &= Ax + Bu \\ y &= Cx + Du \end{aligned} \tag{2.25}$$

en donde A y B se definen como:

$$A = \frac{\partial F}{\partial x}, \quad B = \frac{\partial F}{\partial u}$$

suponiendo que todos los estados del sistema son salidas de la planta ($x = y$), el término C se define como:

$$C = I$$

y para la mayoría de los sistemas en Ingeniería Química:

$$D = 0$$

- **Función de transferencia (dominio de Laplace):**

Para un sistema con una entrada y una salida:

$$\frac{u(s)}{y(s)} = G(s) \tag{2.26}$$

La planta G puede representarse en el dominio de Laplace en forma de polinomios:

$$G(s) = \frac{s^n + as^{n-1} + \dots}{s^m + bs^{m-1} + \dots} \quad (2.27)$$

Las raíces del numerador de la ecuación 2.27 se conocen como los ceros de la planta y son una medida del desempeño del sistema. Las raíces del denominador se conocen como los polos o eigenvalores (λ_i) y como se mencionó en la sección 2.1.4 son una medida de la estabilidad del sistema y el comportamiento en estado estacionario.

2.2.2 Realización de espacio de estado

Para cambiar del dominio de Laplace al dominio del tiempo se tiene que:

$$G(s) = \frac{u(s)}{y(s)} = C(sI - A)^{-1}B + D \quad (2.28)$$

Lo anterior también se representa como:

$$G(s) = \left[\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline C & D \end{array} \right] \quad (2.29)$$

lo que significa que la función $G(s)$ tiene una realización de espacio de estado dada por (A, B, C, D) .

2.2.3 Incertidumbres

De forma general se pueden tener tres tipos de incertidumbres:

- *Incertidumbres en las entradas.* Las incertidumbres en las variables manipuladas se deben a que los equipos de control (p.e. válvulas) no reaccionan exactamente de la forma en la que fueron diseñados ni de manera inmediata (tienen retrasos).
- *Incertidumbres en las salidas.* Las incertidumbres en las variables controladas son errores de medición en los instrumentos.
- *Incertidumbres en el modelo.* Las incertidumbres de la planta representan los errores en el modelo matemático desarrollado para describir al sistema y los errores en la estimación de los parámetros involucrados. Los errores en el modelo matemático se deben a que los modelos no siempre describen el proceso real de una manera precisa. Para simplificar la deducción del modelo, se hacen algunos supuestos acerca del proceso ocasionando que el modelo se aleje de la realidad. Los errores en la estimación de parámetros se deben a que los valores estimados no siempre son exactos y, adicionalmente, muchos parámetros cambian con el tiempo. Esto es, algunos parámetros que se consideraron constantes en el modelo matemático cambian de valor conforme se opera el equipo (p.e. área de transferencia de calor).

En los esquemas de control es común representar la incertidumbre como Δ . En algunos casos no hay una forma precisa de determinar la magnitud de la incertidumbre. El diseñador del controlador deberá determinar un valor razonable (generalmente en forma de porcentajes) y tratar de sintetizar algún controlador que cumpla con los objetivos de control.

2.2.4 Función del controlador

El controlador tiene la función de lograr que la planta opere en el punto deseado bajo cualquiera de los escenarios para los que fue diseñado. Para propósitos de diseño del sistema de control, el controlador se agrega al modelo linealizado de la planta original (ecuación 2.25) para formar el sistema de control a lazo cerrado; los eigenvalores del sistema a lazo cerrado deben ser menores a cero para asegurar estabilidad. Sin embargo existen otros compromisos, como la robustez del sistema, que también deben ser tomados en cuenta durante la síntesis del controlador.

2.2.5 Ley de control proporcional

La ley de control más simple es la que requiere que las s variables manipuladas u , cambien proporcionalmente al cambio de los n estados x ($u \in R^{s \times 1}, x \in R^{n \times 1}$):

$$\Delta u = k \Delta x \tag{2.30}$$

Esta ley se conoce como control proporcional y el parámetro k ($k \in R^{s \times n}$) se denomina la ganancia del controlador.

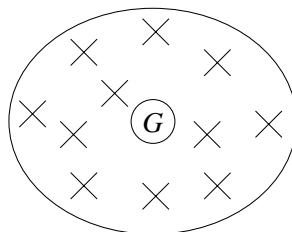
Comúnmente la expresión 2.30 se escribe como [40]:

$$u = kx \tag{2.31}$$

dado por entendido que u y x representan desviaciones con respecto a algún estado.

2.2.6 Estabilidad robusta paramétrica

Se dice que un controlador presenta características de estabilidad robusta si mantiene la estabilidad en un cierto rango de variación de los parámetros del sistema. Esto significa que el compensador será capaz de controlar, además de la planta G en estudio (*planta central*), una serie de plantas X . Las plantas X representan todas las plantas que resultan de aplicar las distintas incertidumbres a la planta original G .



Se desea que el conjunto de plantas sea lo suficientemente grande como para incluir las variaciones de los parámetros que son de interés. Sin embargo a medida que se incrementa la incertidumbre, la probabilidad de encontrar al controlador capaz de controlar a ese conjunto de plantas será menor. Se puede llegar al punto que no exista un controlador para ese conjunto de plantas [40].

2.2.7 Robustez en el desempeño

Se dice que un controlador presenta características de robustez en el desempeño si el sistema cumple con las especificaciones de desempeño preestablecidas, aun en presencia de incertidumbres en el modelo, en las entradas y/o en las salidas para las que fue diseñado el controlador. Las especificaciones de desempeño pueden ser [40]:

- El tiempo que le toma a la salida llegar al 90% del valor final. Generalmente se requiere que sea pequeño.
- El tiempo después del cual la salida se mantiene en $\pm 5\%$ del valor final. Generalmente se requiere que sea pequeño.
- La relación entre el valor máximo y el valor final. Generalmente se requiere que sea 1.2 o menos.
- La relación entre el segundo y primer valor máximo. Generalmente se requiere que sea 0.3 o menos.
- La diferencia entre el valor final obtenido y el valor final deseado. Generalmente se requiere que sea pequeño.

Las dos primeras especificaciones son medidas de la velocidad de la respuesta del sistema a lazo cerrado, mientras que las últimas tres se relacionan a la calidad de la respuesta del sistema a lazo cerrado.

2.2.8 Proceso del diseño de un controlador

El proceso de diseño de un sistema de control requiere generalmente que se realicen al menos las siguientes actividades:

1. *Estudiar el sistema (planta) a controlar.* Definir con claridad el problema en estudio y conocer al sistema lo mejor posible para identificar las variables y parámetros más relevantes.
2. *Desarrollar el modelo matemático del sistema.* Asegurar que el modelo matemático reproduzca la conducta relevante, para propósitos de control, del modelo real. Es valioso simplificar el modelo al máximo.
3. *Analizar el modelo y determinar sus propiedades.* Comprender el efecto de los parámetros involucrados, conocer el punto de operación, la estabilidad en ese punto, la presencia de multiplicidades, etc. y las repercusiones que éstos tienen sobre el control.

4. *Decidir las variables a controlar y manipular.* Determinar, con base en la información adquirida acerca del modelo, cuáles son las variables relevantes a controlar y las variables adecuadas para ser manipuladas.
5. *Decidir la configuración del control.* Linealizar la planta original (en caso de usar control lineal) y determinar el efecto de las variables a manipular sobre la respuesta del sistema.
6. *Decidir el tipo de controlador a usar.* Seleccionar la ley de control a emplear. Determinar las incertidumbres y/o perturbaciones del sistema.
7. *Diseñar el controlador.* Sintetizar el modelo matemático del controlador.
8. *Simular el sistema de control a lazo cerrado.* Comprobar que el controlador diseñado es capaz de estabilizar a lazo cerrado al sistema en presencia de las perturbaciones y/o incertidumbres para las que fue diseñado.

2.3 Teoría de Matrices de Intervalos

En este trabajo se emplearon los resultados sobre la estabilidad de matrices de intervalos reportados por Wang y colaboradores [48], aplicados al control de procesos para diseñar el control del problema en estudio. Se eligió esta técnica ya que con ella se asegura la estabilidad robusta del sistema a lazo cerrado y se deseó probar su eficacia en el control de un proceso químico con una conducta altamente no lineal. A continuación se exponen los conceptos más relevantes de esta área de estudio.

2.3.1 Matrices de intervalos

Una matriz de intervalos real A_I de dimensiones $n \times n$ es una serie de matrices reales definidas como:

$$A_I = [\underline{A}_I, \overline{A}_I] = \left\{ [a_{ij}] \mid \underline{a}_{ij} \leq a_{ij} \leq \overline{a}_{ij}, 1 \leq i, j \leq n \right\} \quad (2.32)$$

donde la matriz A_I inferior es $\underline{A}_I = [\underline{a}_{ij}]$ y la matriz A_I superior es $\overline{A}_I = [\overline{a}_{ij}]$. La matriz A_I se puede reescribir como:

$$A_I = A_o + \Delta A \quad (2.33)$$

donde la matriz central A_o y la matriz de incertidumbre ΔA se definen como:

$$A_o = \left(\frac{\overline{A}_I + \underline{A}_I}{2} \right) \quad (2.34)$$

$$\Delta A = \sum_{i,j=1}^n \epsilon_{ij} E_{ij}, \quad E_{ij} = \frac{\overline{a_{ij}} - a_{ij}}{2} U_{ij}, \quad U_{ij} = e_i^T e_j \quad (2.35)$$

siendo los parámetros de incertidumbre $|\epsilon_{ij}| \leq 1$, e_i y e_j son vectores unitarios con sólo los elementos i -ésimo y j -ésimo iguales a la unidad respectivamente. U_{ij} es una matriz con todos los elementos cero excepto los (ij) que son la unidad. También se tiene que:

$$E = \sum_{i,j=1}^n E_{ij} = \left(\frac{\overline{A_I} - A_I}{2} \right) \quad (2.36)$$

Es evidente que la serie de matrices en 2.33 es equivalente a la de 2.32. Así, el problema de estabilidad de la matriz de intervalos 2.32 se puede describir como el problema de estabilidad robusta del sistema de matrices de incertidumbre 2.33 con la matriz central A_o descrita en 2.34 y la matriz de incertidumbre ΔA descrita en 2.35.

2.3.2 Condiciones de estabilidad robusta

El problema de estabilidad de la matriz de intervalos A_I fue estudiada recientemente por Wang y colaboradores [48]. Considérese un sistema de intervalos lineal dinámico:

$$\dot{x} = A_I x \quad (2.37)$$

donde $x \in R^n$ es el estado y $A_I \in R^{n \times n}$ es una matriz de intervalos como la expuesta en 2.32.

Ellos reportaron una serie de condiciones que se deben cumplir para asegurar estabilidad robusta del tipo Hurwitz en matrices de intervalos, esto es, encontraron condiciones suficientes tales que la parte real de todos los eigenvalores de la matriz de intervalos A_I en 2.37 sea negativa. Las condiciones reportadas por Wang y colaboradores son más simples y mejores que las reportadas anteriormente [48].

Los autores demostraron que la matriz A_I tendrá estabilidad del tipo Hurwitz si se cumplen la condición 1 y al menos una de las tres condiciones expuestas en la condición 2, y que se muestran a continuación:

- Condición 1.

$$Re \left[\lambda(\hat{A}) \right] \leq 0 \quad (2.38)$$

- Condición 2.

$$i) \quad n^2 \overline{\sigma}(He) < c \quad (2.39)$$

$$ii) \quad \sum_{i,j=1}^n \overline{\sigma}(H_{ij}) < c \quad (2.40)$$

$$iii) \quad \overline{\sigma} \left(\sum_{i,j=1}^n |H_{ij}| \right) < c \quad (2.41)$$

donde

$$\hat{A} = \left(\frac{A_o + A_o^T}{2} \right), \quad c = -\bar{\lambda}(\hat{A}), \quad H_{ij} = \left(\frac{E_{ij} + E_{ij}^T}{2} \right) \quad (2.42)$$

$$He = [H_{11}H_{12} \dots H_{nn}], \quad i, j = 1, \dots, n \quad (2.43)$$

En las expresiones anteriores $\bar{\lambda}$ es el eigenvalor con la mayor parte real y $\bar{\sigma}$ es el máximo valor singular.

2.3.3 Matrices de intervalos y el control

Es posible aplicar la serie de condiciones expuestas por Wang y colaboradores [48] para asegurar estabilidad robusta en un sistema de control dado.

Supongamos que se emplea un controlador proporcional como el representado por la expresión 2.31: $u = kx$, para controlar la planta G representada por la expresión lineal 2.25:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= Ax + Bu \\ y &= Cx + Du \end{aligned}$$

Sustituyendo u en el modelo de la planta se tiene que:

$$\dot{x} = Ax + Bkx = (A + Bk)x \quad (2.44)$$

Comparando la expresión 2.44 con la expresión 2.37 podemos concluir que, para aplicar las condiciones de estabilidad, es necesario que el producto $(A + Bk)$ sea una matriz de intervalos. Si se define la incertidumbre en las matrices A y B como Δ , tenemos que:

$$\bar{A} = A(1 + \Delta), \quad \underline{A} = A(1 - \Delta) \quad (2.45)$$

$$\bar{B} = B(1 + \Delta), \quad \underline{B} = B(1 - \Delta) \quad (2.46)$$

y las matrices \underline{A}_I y \bar{A}_I quedan como:

$$\underline{A}_I = \underline{A} + \underline{B}k \quad (2.47)$$

$$\bar{A}_I = \bar{A} + \bar{B}k \quad (2.48)$$

Así tenemos que la matriz de intervalos A_I de la expresión 2.37 para el problema de control del sistema descrito por las expresiones 2.25 y 2.31 queda como:

$$A_I = [\underline{A} + \underline{B}k, \bar{A} + \bar{B}k] \quad (2.49)$$

con una matriz central A_o :

$$A_o = A + Bk \quad (2.50)$$

De esta forma se tiene la manera de aplicar las condiciones derivadas por Wang y colaboradores [48] para el diseño de un sistema de control asegurando que éste tenga propiedades de estabilidad robusta. El controlador k se obtiene mediante cualquiera de los siguientes criterios de optimización:

$$i) \quad \underset{k}{Min} \{n^2 \bar{\sigma}(He) - c\} \quad (2.51)$$

$$ii) \quad \underset{k}{Min} \left\{ \sum_{i,j=1}^n \bar{\sigma}(H_{ij}) - c \right\} \quad (2.52)$$

$$iii) \quad \underset{k}{Min} \left\{ \bar{\sigma} \left(\sum_{i,j=1}^n |H_{ij}| \right) - c \right\} \quad (2.53)$$

2.3.4 Ejemplos de aplicación

Con el objeto de ejemplificar la aplicación de los conceptos expuestos en la sección anterior, se muestran a continuación dos casos.

• Ejemplo 1.

Se tiene un sistema de dos estados y una entrada. El objetivo es determinar el valor del compensador k que satisfaga la condición 2.38 y al menos una de las condiciones 2.39-2.41. La planta linealizada está dada por:

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 4 \\ 7 & -3 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Definiendo una incertidumbre del $\pm 30\%$ ($\Delta = 0.3$) tenemos que las matrices A y B superiores e inferiores son:

$$\begin{aligned} \underline{A} &= \begin{bmatrix} -0.7 & 2.8 \\ 4.9 & -2.1 \end{bmatrix} & \underline{B} &= \begin{bmatrix} 2.1 \\ 1.4 \end{bmatrix} \\ \overline{A} &= \begin{bmatrix} -1.3 & 5.2 \\ 9.1 & -3.9 \end{bmatrix} & \overline{B} &= \begin{bmatrix} 3.9 \\ 2.6 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Para sintetizar el controlador k , se empleó el módulo de optimización del programa `Matlab` [24] por medio de programación cuadrática, utilizando como función objetivo cualquiera de los tres criterios de optimización 2.51, 2.52 ó 2.53. El valor de k empleado para iniciar la minimización fue:

$$k_o = [1 \quad 1]$$

El valor de la variable de decisión k obtenido mediante la optimización fue:

$$k = [-2.1539 \quad -2.2308]$$

Para este valor de k , se cumple la condición 2.38 siendo negativos todos los eigenvalores de la matriz \hat{A} resultante:

$$\lambda_i(\hat{A}) = \begin{bmatrix} -7.4616 \\ -7.4615 \end{bmatrix}$$

La constante c adquiere un valor de 7.4615, así que se cumplen las condiciones 2.40 y 2.41 (aunque no se cumple la condición 2.39):

$$\begin{aligned} i) \quad n^2 \bar{\sigma}(He) &= 9.24 \not< 7.46 \\ ii) \quad \sum_{i,j=1}^n \bar{\sigma}(H_{ij}) &= 5.28 < 7.46 \\ iii) \quad \bar{\sigma}\left(\sum_{i,j=1}^n |H_{ij}|\right) &= 2.24 < 7.46 \end{aligned}$$

Con estos resultados se asegura que el sistema a lazo cerrado será estable aun con una incertidumbre del $\pm 30\%$ en las matrices A y B .

Se analizó el problema de seguimiento de señales empleando el programa `Matlab`. En la figura 2.5(a) se muestra la respuesta del sistema cuando se modifica el punto de operación (set-point), y puede observarse que el sistema responde adecuadamente a este cambio.

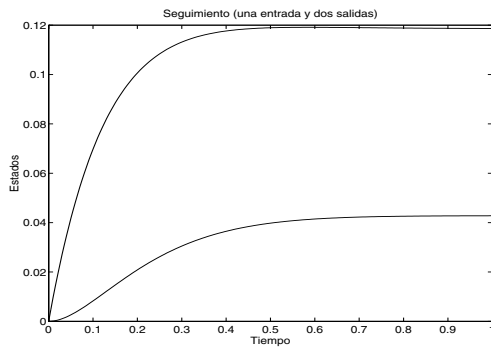
También se analizó el problema de regulación empleando el programa `Matlab`. En la figura 2.5(b) se muestra la respuesta dinámica de la planta central cuando el sistema se encuentra originalmente en un punto de operación diferente al deseado. En las figuras (c) y (d) se muestran las respuestas de la planta inferior y superior, respectivamente. En los tres casos puede apreciarse que el sistema regresa al punto deseado de forma satisfactoria. Con base en los resultados obtenidos puede afirmarse que el controlador proporciona estabilidad robusta al sistema.

• **Ejemplo 2.**

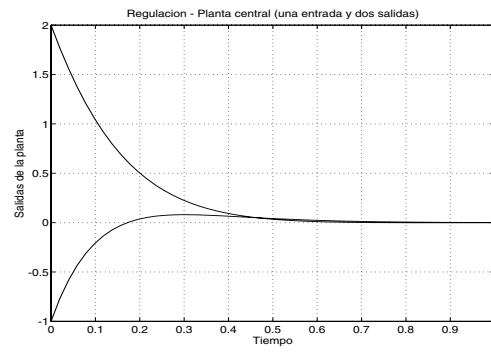
Se tiene ahora un sistema con cuatro estados y una entrada. La planta linealizada está dada por:

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 4 & 3 & 9 \\ 7 & -3 & 1 & 5 \\ 7 & 5 & -9 & -3 \\ 6 & 5 & 9 & -3 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix}$$

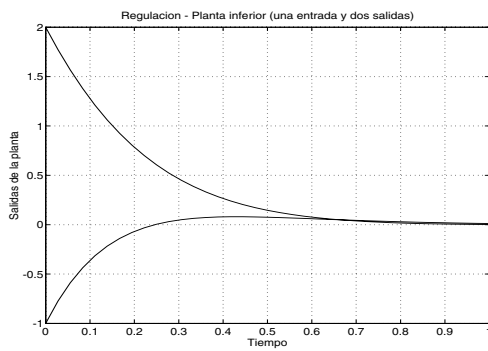
Siguiendo el mismo procedimiento que el empleado en el ejemplo 1, partiendo de un valor inicial $k_o = [1 \ 1 \ 1 \ 1]$ y considerando una incertidumbre del $\pm 30\%$ en las matrices A y B se obtuvo el siguiente controlador:



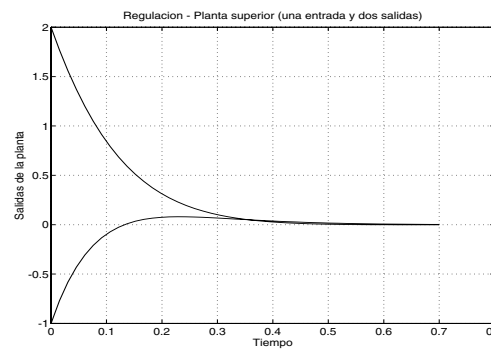
(a)



(b)



(c)



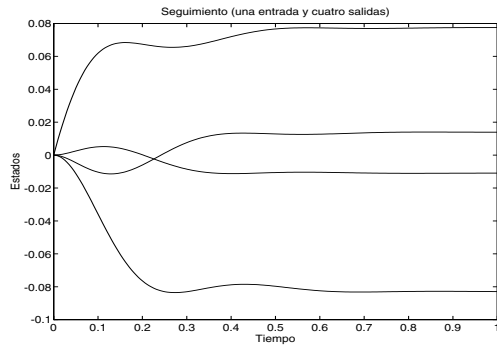
(d)

Figura 2.5: Problema de seguimiento de señales (a) y problema de regulación para la planta central (b), inferior (c) y superior (d) del ejemplo 1.

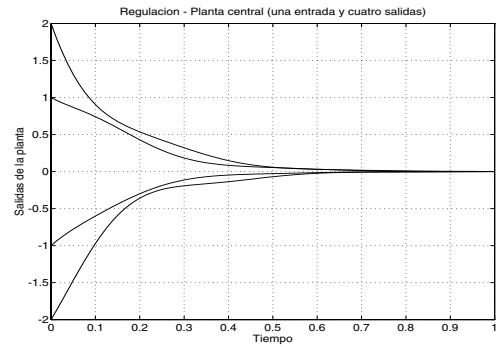
$$k = [-1.8201 \quad -1.2099 \quad 0.1912 \quad -0.4572]$$

En este caso usando este controlador se cumplen las condiciones 2.38 y 2.41. Los resultados de problemas de seguimiento de señales y de regulación analizados se muestran en la figura 2.6. Se puede apreciar que el sistema es estable a lazo cerrado.

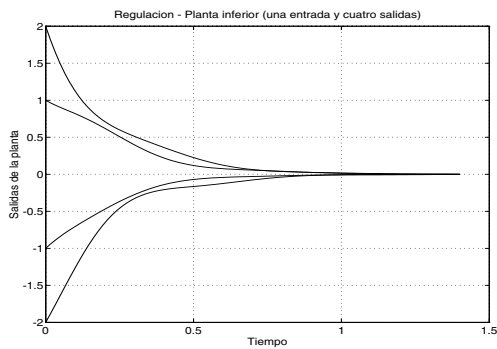
Con base en estos dos ejemplos puede comprobarse que empleando las condiciones reportadas por Wang y colaboradores [48] puede diseñarse un controlador que garantice estabilidad robusta en un sistema lineal. La aplicación de esta técnica para diseñar controladores de sistemas no lineales dependerá del grado de no linealidad que esos sistemas presenten.



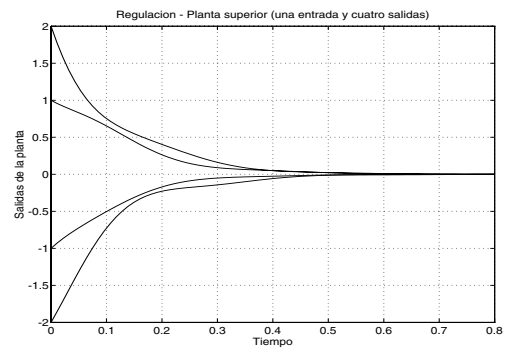
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 2.6: Problema de seguimiento de señales (a) y problema de regulación para la planta central (b), inferior (c) y superior (d) del ejemplo 2.

Capítulo 3

Definición del Caso de Estudio

En el presente capítulo se describe brevemente el proceso en estudio y se muestra el modelo matemático del sistema en forma dimensional y adimensional.

3.1 Descripción del Proceso

El sistema en estudio fue la polimerización en solución del metilmetacrilato, vía radicales libres, que se lleva a cabo en un reactor tanque agitado (veáse la figura 3.1), empleando azo-bis-isobutironitrilo como iniciador y tolueno como solvente. La reacción es exotérmica y el reactor tiene medio de enfriamiento para remover el calor.

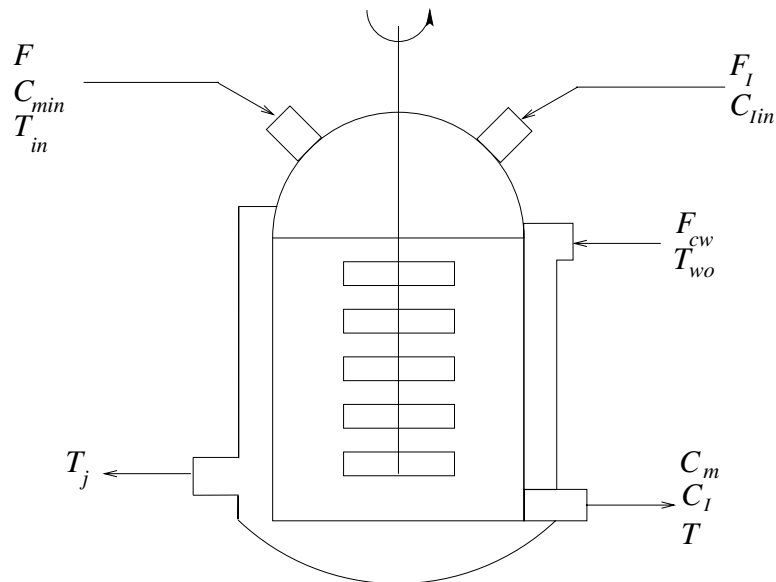
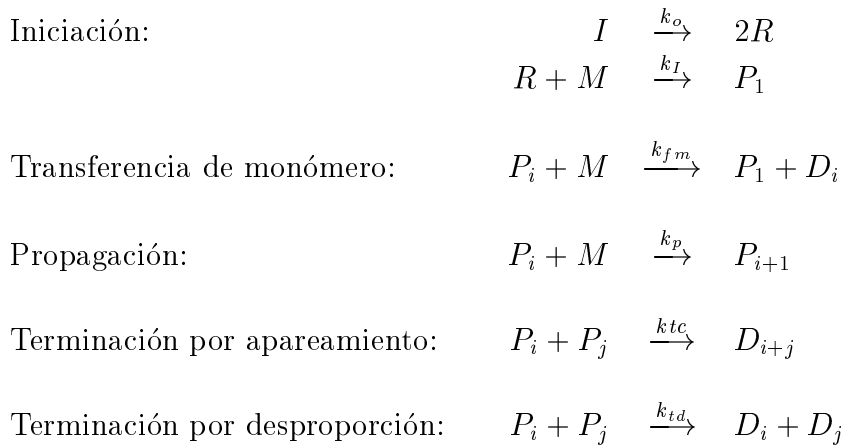


Figura 3.1: Diagrama de flujo del reactor de polimerización.

El mecanismo de reacción de la polimerización vía radicales libres está constituido por las siguientes etapas principales [19]:



Donde: I Iniciador
 P Polímero
 M Monómero
 R Radicales
 D Polímero muerto

3.2 Modelo Matemático

El modelo matemático del sistema fue propuesto por Daoutidis y colaboradores [10]. Los supuestos realizados para desarrollar el modelo matemático fueron:

- Mezclado perfecto en el reactor. Las concentraciones y la temperatura son homogéneas en todo el reactor.
- Densidad constante de la mezcla de reacción. No hay reducción del volumen del reactor debido a la producción de monómero.
- Capacidad específica de la mezcla de reacción y, densidad y capacidad calorífica del enfriante se mantienen constantes.
- Temperatura del medio de enfriamiento uniforme. La temperatura del enfriante es homogénea en todo el sistema de enfriamiento.
- No hay pérdidas de calor al exterior. El reactor y el sistema de enfriamiento se encuentran perfectamente aislados.
- Las reacciones sólo ocurren en el reactor. No ocurren reacciones en las corrientes de alimentación por lo que no hay polímero en la alimentación.

- No hay efecto gel. La conversión de monómero es muy baja y la proporción de solvente en el medio de reacción es muy alta.
- Volumen del reactor constante. El flujo volumétrico del monómero en la alimentación es constante.
- Los mecanismos cinéticos contemplados son los mecanismos estándar de la polimerización vía radicales libres. Las leyes de velocidades de reacción fueron tomadas de la literatura (p.e. [9], [34], [38]).

Tomando en cuenta los supuestos anteriores, el modelo matemático del sistema está dado por [10]:

$$\frac{dC_m}{dt} = -(k_p + k_{fm}) C_m P_o + \frac{F(C_{min} - C_m)}{V} \quad (3.1)$$

$$\frac{dC_I}{dt} = -k_I C_I + \frac{(F_I C_{Iin} - F C_I)}{V} \quad (3.2)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-\Delta H)k_p C_m P_o}{\rho C_p} - \frac{UA}{\rho C_p V}(T - T_j) + \frac{F(T_{in} - T)}{V} \quad (3.3)$$

$$\frac{dD_o}{dt} = (0.5k_{tc} + k_{td})P_o^2 + k_{fm}C_m P_o - \frac{FD_o}{V} \quad (3.4)$$

$$\frac{dD_1}{dt} = M_m(k_p + k_{fm}) C_m P_o - \frac{FD_1}{V} \quad (3.5)$$

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{F_{cw}(T_{wo} - T_j)}{V_o} + \frac{UA}{\rho_w C_{pw} V_o}(T - T_j) \quad (3.6)$$

donde,

$$P_o = \sqrt{\frac{2f^* C_I k_I}{k_{td} + k_{tc}}} \quad (3.7)$$

$$k_r = A_r e^{\frac{-E_r}{RT}}, \quad r = p, fm, I, td, tc \quad (3.8)$$

El peso molecular promedio del polímero se define como la relación D_1/D_o .

Analizando el modelo matemático se puede observar que consiste de seis estados ($C_m, C_I, T, D_o, D_1, T_j$) y seis ecuaciones diferenciales no lineales. La no linealidad se encuentra en el término P_o y en las expresiones de velocidad de reacción (k_r). Cabe mencionar que los estados D_o y D_1 únicamente aparecen en sus respectivos balances (expresiones 3.4 y 3.5) lo que hace que los demás estados del sistema sean independientes al cambio de cualquiera de éstos dos estados.

En el apéndice A se encuentra la descripción de los parámetros involucrados en el modelo. Los valores de los parámetros empleados por Daoutidis y colaboradores [10] se muestran en la tabla 3.1.

Tabla 3.1: Información de diseño y operación para el reactor de polimerización.

F	= 1.0	m^3/h	M_m	= 100.12	kg/kgmol
F_I	= 0.0032	m^3/h	f^*	= 0.58	
F_{cw}	= 0.1588	m^3/h	R	= 8.314	$\text{kJ}/(\text{kgmol}\cdot^\circ\text{K})$
C_{min}	= 6.4678	kgmol/m^3	$-\Delta H$	= 57800	kJ/kgmol
C_{Iin}	= 8.0	kgmol/m^3	E_p	= 1.8283×10^4	kJ/kgmol
T_{in}	= 350	$^\circ\text{K}$	E_I	= 1.2877×10^5	kJ/kgmol
T_{wo}	= 293.2	$^\circ\text{K}$	E_{fm}	= 7.4478×10^4	kJ/kgmol
U	= 720	$\text{kJ}/(\text{h}\cdot^\circ\text{K}\cdot\text{m}^2)$	E_{tc}	= 2.9442×10^3	kJ/kgmol
A	= 2.0	m^2	E_{td}	= 2.9442×10^3	kJ/kgmol
V	= 0.1	m^3	A_p	= 1.77×10^9	$\text{m}^3/(\text{kgmol}\cdot\text{h})$
V_o	= 0.02	m^3	A_I	= 3.792×10^{18}	$1/\text{h}$
ρ	= 866	kg/m^3	A_{fm}	= 1.0067×10^{15}	$\text{m}^3/(\text{kgmol}\cdot\text{h})$
ρ_w	= 1000	kg/m^3	A_{tc}	= 3.8223×10^{10}	$\text{m}^3/(\text{kgmol}\cdot\text{h})$
C_p	= 2.0	$\text{kJ}/(\text{kg}\cdot^\circ\text{K})$	A_{td}	= 3.1457×10^{11}	$\text{m}^3/(\text{kgmol}\cdot\text{h})$
C_{pw}	= 4.2	$\text{kJ}/(\text{kg}\cdot^\circ\text{K})$			

3.2.1 Estados estacionarios

Al resolver el sistema de ecuaciones algebraicas no lineales del modelo matemático, resulta que el sistema presenta tres estados estacionarios (multiplicidad de salida). El estado estacionario que se empleó como punto de referencia a lo largo de este estudio, corresponde al punto de operación definido como *óptimo* por Lewin y Bogle [23]. En la tabla 3.2 se muestran los estados estacionarios presentes y sus respectivos eigenvalores. Como puede apreciarse de los tres estados estacionarios, dos son estables y el intermedio es inestable.

3.3 Modelo Matemático Adimensional

El trabajar con modelos matemáticos adimensionales es recomendable ya que generalmente se pueden reducir y hasta evitar problemas numéricos. Adicionalmente se pueden agrupar varios parámetros que de forma individual no sean tan relevantes en el estudio o cuyo efecto sobre el sistema se pueda analizar de forma conjunta con otros parámetros (p.e. número de Reynolds).

Para efectuar la adimensionalización de un modelo matemático dado es necesario elegir ciertos parámetros del modelo que servirán para definir las variables y los parámetros en forma adimensional. Por ejemplo, para adimensionalizar las concentraciones se deberán dividir entre algún parámetro (o relación de parámetros) con unidades de concentración. Si no se desea analizar el efecto del cambio de alguna de las concentraciones del modelo original, entonces se selecciona dicha concentración para realizar la adimensionalización ya que permanecerá constante a lo largo de los análisis posteriores.

Por el contrario, si se desea analizar el efecto del cambio de cualquiera de las concentraciones del modelo de forma individual, entonces es necesario definir un nuevo parámetro

Tabla 3.2: Estados estacionarios presentes.

		Punto óptimo	Estado 2	Estado 3
		Estado 1		
C_m ,	kgmol/m ³	5.9651	5.8897	2.3636
C_I ,	kgmol/m ³	0.0249	0.0247	1.7661E-4
T ,	°K	351.41	353.40	436.20
D_o ,	kgmol/m ³	0.0020	0.0025	0.4213
D_1 ,	kg/m ³	50.329	57.881	410.91
T_j ,	°K	332.99	334.34	390.93
X	%	7.8	8.9	63.5
PM	kg/kgmol	25000	23000	975
	λ_1	-30.49	-30.15	-1397.8
	λ_2	-0.48	0.80	-21 + 4i
	λ_3	-10 + 0.12i	-10 + 0.14i	-21 - 4i
	λ_4	-10 - 0.12i	-10 - 0.14i	-16.05
	λ_5	-10.0	-10.0	-10.0
	λ_6	-10.0	-10.0	-10.0

para realizar la adimensionalización, *parámetro base*, que tenga las dimensiones necesarias y cuyo valor se mantenga siempre constante. Así se podrá analizar el efecto de cambios de cualquiera de concentraciones del modelo en forma independiente.

En nuestro caso, se desea analizar el efecto de cambios en cualquiera de las concentraciones, flujos y temperaturas de entrada al reactor, ya que son posibles variables manipuladas o perturbaciones. Así para efectuar la adimensionalización del modelo original (3.1-3.6) se definieron tres parámetros base. Se seleccionaron el flujo de alimentación, la concentración de iniciador en la alimentación y la temperatura del agua de enfriamiento a la entrada, con los valores correspondientes al punto de operación óptimo. Así:

$$F_o = F, \quad C_o = C_{Iin}, \quad T_o = T_{wo}$$

Los parámetros y grupos adimensionales resultantes están contenidos en la tabla 3.3. El modelo matemático adimensional obtenido se muestra a continuación:

$$\frac{dx_1}{d\tau} = q(x_{1in} - x_1) - (Da_p e^b + Da_{fm} e^{\gamma_{fm} b}) x_1 w \quad (3.9)$$

$$\frac{dx_2}{d\tau} = x_{2in} q_I - x_2 q - Da_I e^{\gamma_I b} x_2 \quad (3.10)$$

$$\frac{dx_3}{d\tau} = q x_{3in} + \delta x_6 - x_3 (\delta + q) + \gamma_p \beta Da_p e^b x_1 w \quad (3.11)$$

$$\frac{dx_4}{d\tau} = w^2 [0.5Da_{tc}e^{\gamma_{tc}b} + Da_{td}e^{\gamma_{td}b}] + wx_1Da_{fm}e^{\gamma_{fm}b} - qx_4 \quad (3.12)$$

$$\frac{dx_5}{d\tau} = x_1w(Da_p e^b + Da_{fm}e^{\gamma_{fm}b}) - x_5q \quad (3.13)$$

$$\frac{dx_6}{d\tau} = \alpha q_{cw}x_{6in} + \delta_w x_3 - x_6(\alpha q_{cw} + \delta_w) \quad (3.14)$$

Tabla 3.3: Parámetros y grupos adimensionales.

$x_1 = \frac{C_m}{C_o}$	$b = \frac{\gamma_p x_3}{x_3 + \gamma_p}$	$\alpha = \frac{V}{V_o}$
$x_{1in} = \frac{C_{min}}{C_o}$	$Da_p = \frac{A_p e^{-\gamma_p V C_o}}{F_o}$	$\beta = \frac{(-\Delta H_p) C_o}{\rho C_p T_o}$
$x_2 = \frac{C_I}{C_o}$	$Da_I = \frac{A_I e^{-\gamma_p \gamma_I V}}{F_o}$	$\delta = \frac{U}{\rho C_p F_o}$
$x_{2in} = \frac{C_{Iin}}{C_o}$	$Da_{fm} = \frac{A_{fm} e^{-\gamma_p \gamma_{fm} V C_o}}{F_o}$	$\delta_w = \frac{UAV}{\rho_w C_{pw} F_o V_o}$
$x_3 = \left(\frac{T - T_o}{T_o}\right) \gamma_p$	$Da_{tc} = \frac{A_{tc} e^{-\gamma_p \gamma_{tc} V C_o}}{F_o}$	$\gamma_p = \frac{E_p}{RT_o}$
$x_{3in} = \left(\frac{T_{in} - T_o}{T_o}\right) \gamma_p$	$Da_{td} = \frac{A_{td} e^{-\gamma_p \gamma_{td} V C_o}}{F_o}$	$\gamma_I = \frac{E_I}{E_p}$
$x_4 = \frac{D_o}{C_o}$	$q = \frac{F}{F_o}$	$\gamma_{fm} = \frac{E_{fm}}{E_p}$
$x_5 = \frac{D_1}{C_o M m}$	$q_{cw} = \frac{F_{cw}}{F_o}$	$\gamma_{tc} = \frac{E_{tc}}{E_p}$
$x_6 = \left(\frac{T_i - T_o}{T_o}\right) \gamma_p$	$q_I = \frac{F_I}{F_o}$	$\gamma_{td} = \frac{E_{td}}{E_p}$
$x_{6in} = \left(\frac{T_{wo} - T_o}{T_o}\right) \gamma_p$	$w = \frac{P_o}{C_o}$	$\tau = \frac{t F_o}{V}$

3.3.1 Estados estacionarios del modelo adimensional

Los estados estacionarios y la estabilidad del sistema no cambian con la adimensionalización. Los valores de los estados en forma adimensional correspondientes a los tres estados estacionarios se muestran en la tabla 3.4.

Tabla 3.4: Estados estacionarios del modelo adimensional.

	Punto óptimo		
	Estado 1	Estado 2	Estado 3
x_1	0.7456	0.7362	0.2954
x_2	3.115E-3	3.092E-3	2.208E-5
x_3	1.4891	1.5398	3.6580
x_4	2.517E-4	3.213E-4	0.0527
x_5	0.0628	0.0723	0.5130
x_6	1.0177	1.0524	2.5001

3.3.2 Reducción del modelo adimensional a una ecuación algebraica

Si el sistema se encuentra en estado estacionario ($F(x) = 0$), el conjunto de ecuaciones que forman el modelo matemático se pueden combinar para obtener una ecuación algebraica. La ecuación resultante queda en función de uno de los estados, así como de los demás parámetros del modelo (\mathbf{p}). En este caso el estado independiente es la temperatura ya que es la variable más importante desde el punto de vista del control y, adicionalmente, se observó que era la única variable presente en todas las ecuaciones del modelo matemático. Combinando las ecuaciones 3.9-3.14 en estado estacionario de tal forma que x_3 sea la variable de salida (temperatura adimensional) obtenemos la siguiente ecuación algebraica no lineal:

$$F(x_3, \mathbf{p}) = qx_{3in} + \frac{\alpha\delta q_{cw}x_{6in}}{\alpha q_{cw} + \delta_w} + \left(\frac{\delta\delta_w}{\alpha q_{cw} + \delta_w} - \delta - q \right) x_3 + \frac{x_{1in}wq\gamma_p\beta Da_p e^b}{q + w(Da_p e^b + Da_{fm} e^{\gamma_{fm} b})} = 0 \quad (3.15)$$

Capítulo 4

Análisis de Multiplicidad y Bifurcación

En este capítulo se presentan los análisis de multiplicidad y bifurcación realizados. En la primera sección se presenta la determinación analítica de presencia de multiplicidades y en la segunda sección se presentan los diagramas de multiplicidad realizados.

4.1 Determinación Analítica de Multiplicidades

Para determinar multiplicidades analíticamente, empleando la teoría de singularidad, es necesario reducir el modelo matemático del sistema a una ecuación algebraica de la forma

$$F(x, \mathbf{p}) = 0 \quad (4.1)$$

donde F es la ecuación algebraica que se obtiene combinando entre si las ecuaciones que representan el modelo matemático del sistema, x es uno de los estados del sistema y \mathbf{p} es el vector de los parámetros del sistema. Los demás estados del modelo matemático original quedan en función de x y \mathbf{p} .

En la sección 3.3.2 se obtuvo la ecuación algebraica no lineal $F(x, \mathbf{p})$ para el modelo matemático adimensional en función de x_3 (ecuación 3.15):

$$F(x_3, \mathbf{p}) = qx_{3in} + \frac{\alpha\delta q_{cw}x_{6in}}{\alpha q_{cw} + \delta_w} + \left(\frac{\delta\delta_w}{\alpha q_{cw} + \delta_w} - \delta - q \right) x_3 + \frac{x_{1in}wq\gamma_p\beta Da_p e^b}{q + w(Da_p e^b + Da_{fm} e^{\gamma_{fm} b})} = 0$$

El modelo matemático planteado, como se puede observar, presenta una gran cantidad de parámetros adimensionales. Se identificaron como parámetros relevantes para los estudios de multiplicidad y control, el flujo de alimentación de monómero (q), el flujo de alimentación de iniciador (q_I), el flujo de alimentación del medio de enfriamiento (q_{cw}), la concentración del monómero en la alimentación (x_{1in}), la concentración del iniciador en la alimentación (x_{2in}), la temperatura de entrada de la corriente de alimentación (x_{3in}) y la temperatura de entrada del medio de enfriamiento (x_{6in}).

4.1.1 Multiplicidades de entrada

De acuerdo a la teoría de singularidad las condiciones matemáticas necesarias y suficientes para que un sistema dado presente multiplicidades de entrada (sección 2.1.5) está dada por las condiciones 2.1 y 2.20. Ya que \mathbf{p} representa a todos aquellos parámetros que permanecen constantes podemos reescribir esas condiciones como:

$$F(x, \varphi) = \frac{\partial F(x, \varphi)}{\partial \varphi} = 0 \quad (4.2)$$

donde φ es el parámetro del sistema con respecto al que se desea analizar la posible existencia de multiplicidades de entrada. En este trabajo se analizaron los casos en que el parámetro φ es:

$$\varphi = \{x_{1in}, x_{2in}, x_{3in}, x_{6in}, q, q_I, q_{cw}\}$$

Este análisis se realiza a continuación.

- Concentración adimensional de alimentación de monómero (x_{1in})

$$\frac{\partial F}{\partial x_{1in}} = \frac{wq\gamma_p\beta Da_p e^b}{q + w(Da_p e^b + Da_{fm} e^{\gamma_{fm} b})} \quad (4.3)$$

Para que $\partial F/\partial x_{1in} = 0$ se debe cumplir que $wq\gamma_p\beta Da_p e^b = 0$, lo cual es físicamente infactible. Por esa razón podemos concluir que no pueden existir multiplicidades de entrada con respecto a la concentración de alimentación de monómero.

- Concentración adimensional de alimentación de iniciador (x_{2in})

$$\frac{\partial F}{\partial x_{2in}} = \frac{x_{1in}\sqrt{x_{2in}}q^2\gamma_p\beta Da_p e^b}{2x_{2in}[q + w(Da_p e^b + Da_{fm} e^{\gamma_{fm} b})]^2} \sqrt{\frac{2f^*q_I Da_I e^{\gamma_I b}}{(q + Da_I e^{\gamma_I b})(Da_{td} e^{\gamma_{td} b} + Da_{tc} e^{\gamma_{tc} b})}} \quad (4.4)$$

Para que se cumpla la condición $\partial F/\partial x_{2in} = 0$, algún parámetro de operación o diseño debe ser nulo, lo cual es físicamente infactible. Así se concluye que no pueden existir multiplicidades de entrada con respecto a la concentración de alimentación de iniciador.

- Temperatura adimensional de la corriente de alimentación (x_{3in})

$$\frac{\partial F}{\partial x_{3in}} = q \quad (4.5)$$

Para que esta parcial sea igual a cero se debe cumplir que no haya flujo de alimentación al reactor, lo cual es físicamente imposible.

- Temperatura adimensional de alimentación del agua de enfriamiento (x_{6in})

$$\frac{\partial F}{\partial x_{6in}} = \frac{\alpha \delta q_{cw}}{\alpha q_{cw} + \delta_w} \quad (4.6)$$

Puede notarse con facilidad que, de acuerdo al rango de valores factibles de los parámetros, esta derivada no puede ser igual a cero.

- Flujo de alimentación de monómero (q)

$$\frac{\partial F}{\partial q} = x_{3in} - x_3 + \frac{x_{1in} w \gamma_p \beta D a_p e^b}{[q + w(D a_p e^b + D a_{fm} e^{\gamma_{fm} b})]^2} \left[w(D a_p e^b + D a_{fm} e^{\gamma_{fm} b}) - \frac{q^2}{2(q + D a_I e^{\gamma_I b})} \right] \quad (4.7)$$

Analizando esta expresión se puede observar que existe la posibilidad, bajo ciertas combinaciones del valor de los parámetros, que la derivada sea igual a cero. Por lo anterior concluimos que puede existir multiplicidad de entrada con respecto al flujo de alimentación de monómero.

- Flujo de alimentación de iniciador (q_I)

$$\frac{\partial F}{\partial q_I} = \frac{x_{1in} w q^2 \gamma_p \beta D a_p e^b}{2 q_I [q + w(D a_p e^b + D a_{fm} e^{\gamma_{fm} b})^2]} \quad (4.8)$$

Puede notarse que no existen multiplicidades de entrada con respecto a q_I , ya que $x_{1in} w q^2 \gamma_p \beta D a_p e^b \neq 0$. Por tanto no pueden existir multiplicidades de entrada con respecto al flujo de alimentación de iniciador.

- Flujo de alimentación del agua de enfriamiento (q_{cw})

$$\frac{\partial F}{\partial q_{cw}} = \frac{\delta \delta_w \alpha (x_{6in} - x_3)}{(\alpha q_{cw} + \delta_w)^2} \quad (4.9)$$

Esta derivada es igual a cero únicamente cuando la temperatura de operación del reactor es igual a la temperatura de alimentación del medio de enfriamiento ($x_{6in} = x_3$). Esta situación no es físicamente deseable, por lo que no hay multiplicidades de entrada con respecto a la temperatura de alimentación del agua de enfriamiento.

Con base en los análisis realizados en esta sección es claro que de los parámetros analizados, el único para el que podrían existir multiplicidades de entrada es el flujo de alimentación de monómero (q).

4.1.2 Multiplicidades de salida

Para determinar la existencia de multiplicidades de salida empleando la teoría de singularidad (sección 2.1.5) se deben satisfacer las condiciones 2.1 y 2.18. Nuevamente, ya que \mathbf{p} permanece constante en el análisis, las condiciones se pueden reescribir como:

$$F(x, \varphi) = \frac{\partial F(x, \varphi)}{\partial x} = 0 \quad (4.10)$$

Para determinar si existen multiplicidades de salida con respecto a la variable independiente del modelo reducido (x_3) tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x_3} = & \frac{\delta\delta_w}{\alpha q_{cw} + \delta_w} - \delta - q + \frac{x_{1in} b^2 w q \gamma_p \beta D a_p e^b}{x_3^2 [q + w(D a_p e^b + D a_{fm} e^{\gamma_{fm} b})]^2} \left\{ \frac{q^2 \gamma_I}{2(q + D a_I e^{\gamma_I b})} \right. \\ & \left. - \frac{q(\gamma_{td} D a_{td} e^{\gamma_{td} b} + \gamma_{tc} D a_{tc} e^{\gamma_{tc} b})}{2(D a_{td} e^{\gamma_{td} b} + D a_{tc} e^{\gamma_{tc} b})} + q + w D a_{fm} e^{\gamma_{fm} b} (1 - \gamma_{fm}) \right\} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Observando la expresión 4.11 se puede concluir que es posible que existan multiplicidades de salida, es decir, es posible que la parcial sea igual a cero para cierta combinación de valores de los parámetros.

Adicionalmente de la sección 2.1.6 sabemos que si se cumplen las condiciones:

$$\frac{\partial^k F(x, \varphi)}{\partial x^k} = 0 \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial^{k+1} F(x, \varphi)}{\partial x^{k+1}} \neq 0 \quad (4.13)$$

entonces el máximo número de multiplicidades de salida es k .

Para determinar si podrían existir al menos tres estados estacionarios para el sistema es necesario obtener la expresión 4.12 para $k = 2$.

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_3^2} = (J + L + \gamma_{fm} w N + H N) \frac{b^2 K}{x_3^2} + \left\{ b^2 H \left(\frac{q}{w} - A \right) + M + Q \right\} \quad (4.14)$$

donde:

$$\begin{aligned} A &= D a_p e^b + D a_{fm} e^{\gamma_{fm} b} \\ B &= x_{1in} \gamma_p \beta D a_p e^b \\ D &= D a_I e^{\gamma_I b} \\ E &= D a_{td} e^{\gamma_{td} b} + D a_{tc} e^{\gamma_{tc} b} \\ G &= \frac{2f^* x_{2in} D}{E(q + D)} \\ H &= \frac{w [\gamma_I q E - P(q + D)]}{2E(q + D)} \\ I &= \frac{K}{x_3^2 (A w + q)} \left(O - \frac{q P}{2E} + q + w N \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 J &= \frac{-\gamma_I D^2 O}{q + D} \\
 K &= \frac{b^2 w q B}{x_3^2 (Aw + q)^2} \\
 L &= \frac{-q}{2E^2} (\gamma_{td}^2 E D a_{td} e^{\gamma_{td} b} + \gamma_{tc}^2 E D a_{tc} e^{\gamma_{tc} b} - P^2) \\
 M &= (Aw + q)(2 + b^2 - 2x_3) \\
 N &= D a_{fm} e^{\gamma_{fm} b} (1 - \gamma_{fm}) \\
 O &= \frac{\gamma_I q^2}{2(q + D)} \\
 P &= \gamma_{td} D a_{td} e^{\gamma_{td} b} + \gamma_{tc} D a_{tc} e^{\gamma_{tc} b} \\
 Q &= -2wb^2 (D a_p e^b + \gamma_{fm} D a_{fm} e^{\gamma_{fm} b})
 \end{aligned}$$

Observando la expresión 4.14 se puede concluir que es posible que existan al menos tres estados estacionarios para el sistema, ya que dicha expresión podría equivaler a cero para cierta combinación de valores de los parámetros. Esta posibilidad se confirmó al haberse encontrado numéricamente hasta tres estados estacionarios para el sistema (véase la sección 3.2.1) empleando los parámetros proporcionados por Daoutidis y colaboradores [10]. No se determinó analíticamente cuál es el máximo número de estados estacionarios que podría presentar el sistema. De la expresión 4.14 se puede anticipar la complejidad de la tercera derivada de la función (expresión 4.12 para $k = 3$).

4.1.3 Islas

Un sistema dado presentará regiones de operación *aisladas*, denominadas islas, si presenta simultáneamente multiplicidades de entrada y de salida. Esto es, si se cumplen las condiciones 4.2 y 4.10:

$$F(x, \varphi) = \frac{\partial F(x, \varphi)}{\partial \varphi} = \frac{\partial F(x, \varphi)}{\partial x} = 0 \quad (4.15)$$

donde φ es el parámetro con respecto al cual se presentan multiplicidades de entrada y x es el estado con respecto al cual existen multiplicidades de salida.

En nuestro caso, de los parámetros analizados, el único para el que pueden existir multiplicidades de entrada es el flujo de monómero y sabemos que pueden existir multiplicidades de salida con respecto a x_3 . Por lo tanto podrían existir soluciones aisladas cuando $\varphi = q$ y $x = x_3$.

4.2 Diagramas de Bifurcación

En esta sección se obtuvieron los diagramas de bifurcación para el sistema empleando como parámetros de continuación aquellos considerados relevantes para el control.

4.2.1 XPP

Los diagramas de bifurcación se obtuvieron mediante un paquete computacional para análisis no lineal desarrollado por G. Bard [7] denominado XPP, el cual incluye el paquete AUTO para el análisis de continuación. Las siglas del paquete se derivan del nombre *Phase Portrait* y del hecho que opera en el ambiente X-Windows. XPP puede emplearse para realizar estudios de continuación y bifurcación y también para analizar el comportamiento dinámico de procesos químicos.

El paquete trabaja bajo el sistema operativo UNIX. Su funcionamiento es muy sencillo. El usuario debe escribir un programa que contenga el modelo matemático del problema en estudio. En la figura 4.2.1 se muestra el programa empleado en este trabajo el cual contiene el modelo matemático en su forma original (dimensional) dado por las líneas 3-8.

```
# Este archivo contiene el modelo matemático del reactor de polimerización

# El modelo matemático ...
dx1/dt = -(Rp+Rfm)*x1*Po+F*(Cmin-x1)/V
dx2/dt = -Ri*x2+(Fi*Ciin-F*x2)/V
dx3/dt = Rp*x1*alfa*Po-beta*(x3-x6)+F*(Tin-x3)/V
dx4/dt = (0.5*Rtc+Rtd)*(Po^2)+Rfm*x1*Po-F*x4/V
dx5/dt = Mm*(Rp+Rfm)*x1*Po-F*x5/V
dx6/dt = Fcw*(Two-x6)/Vo+gama*(x3-x6)

# Los valores iniciales ...
x1(0) = 5.9651
x2(0) = 0.024918
x3(0) = 351.41
x4(0) = 0.0020132
x5(0) = 50.329
x6(0) = 332.999

# Los valores de los parámetros ...
param Fcw=0.1588, Fi=0.0032
param delH=57800, Ro=866, Cp=2.0, U=720, A=2.0, V=0.1, Row=1000, Cw=4.2
param Vo=0.02, F=1.0, Ciin=8.0, Cmin=6.4678, Tin=350, Two=293.2
param Zp=1.77e9, Zfm=1.0067e15, Zi=3.792e18, Ztd=3.1457e11, Ztc=3.8223e10
param Ep=1.8283e4, Efm=7.4478e4, Ei=1.2877e5, Etd=2.9442e3, Etc=2.9442e3
param R=8.314, ff=0.58, Mm=100.12

# Definiendo algunos términos ...
alfa = delH/(Ro*Cp)
beta = (U*A)/(Ro*Cp*V)
gama = (U*A)/(Row*Cw*Vo)
Rp = Zp*exp(-Ep/(R*x3))
Rfm = Zfm*exp(-Efm/(R*x3))
Ri = Zi*exp(-Ei/(R*x3))
Rtd = Ztd*exp(-Etd/(R*x3))
Rtc = Ztc*exp(-Etc/(R*x3))
Po = ((2*ff*x2*Ri)/(Rtd+Rtc))^(1/2)

done
```

Figura 4.1: Programa para emplear XPP.

Para realizar diagramas de continuación es necesario primero calcular el punto singular (estado estacionario) a partir del cual el programa realizará el diagrama de continuación.

Este punto lo determina XPP a partir de los valores iniciales proporcionados por el usuario. Una vez obtenido el estado estacionario, se debe indicar cuál es el parámetro de continuación así como algunos parámetros del paquete (p.e. rango del diagrama, tamaño de paso, número máximo de iteraciones, etc.). Con esta información el paquete realiza el análisis de continuación mostrando gráficamente el diagrama conforme se va generando y tabularmente proporciona información sobre puntos importantes del diagrama (p.e. puntos límite, puntos de bifurcación de Hopf, etc.).

Los diagramas obtenidos empleando XPP se muestran a continuación en dos grupos: diagramas que presentan multiplicidades de salida y diagramas que presentan multiplicidades de entrada e islas.

4.2.2 Diagramas de bifurcación con multiplicidades de salida

Empleando como parámetros de continuación a los distintos parámetros previamente seleccionados, se obtuvieron varios diagramas de multiplicidad. En los diagramas de continuación las curvas sólidas (—) representan estados estacionarios estables y las curvas punteadas (---) corresponden a estados estacionarios inestables. El punto de operación óptimo se encuentra marcado con el símbolo “o” y los puntos marcados con “•” son puntos de bifurcación de Hopf. A continuación se presentan estos diagramas.

• Flujo de alimentación del iniciador

Los diagramas de multiplicidad obtenidos empleando el flujo de alimentación de iniciador (F_I) como parámetro de continuación se muestran en la figura 4.2.

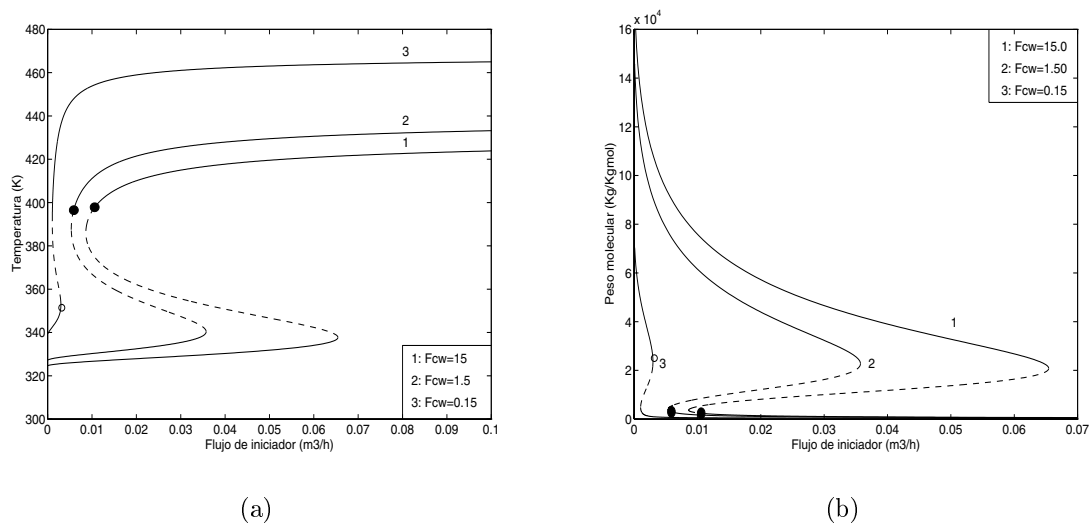


Figura 4.2: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de iniciador (F_I) como parámetro de continuación.

De estos diagramas se puede apreciar con claridad que la bifurcación presente es del tipo histéresis. Las distintas curvas corresponden a diferentes valores del flujo de agua

de enfriamiento (F_{cw}). Ninguna de las curvas generadas corresponde a la del punto de operación óptimo ($F_{cw} = 0.1588$), aunque es prácticamente igual a la curva 3.

Es importante recalcar que el punto de operación óptimo prácticamente corresponde a un punto límite; esto es, se encuentra localizado prácticamente justo antes de que la pendiente de la curva de continuación cambie de signo y de estabilidad.

De la figura 4.2 se puede deducir el efecto que tendría sobre la operación del sistema un cambio en el flujo de iniciador, en el flujo de agua de enfriamiento o en ambos. Se puede apreciar que a medida que aumenta el flujo de agua de enfriamiento, la región de histéresis también incrementa. Es claro que la histéresis está presente para valores pequeños del flujo de iniciador. A medida que el flujo de iniciador aumenta, el sistema presenta únicamente un estado estacionario.

Supongamos que el sistema se encuentra operando en un punto localizado en la curva 2 de la figura 4.2(a), con un flujo de iniciador de $0.03 \text{ m}^3/\text{h}$. Este punto corresponde al punto "A" de la figura 4.3.

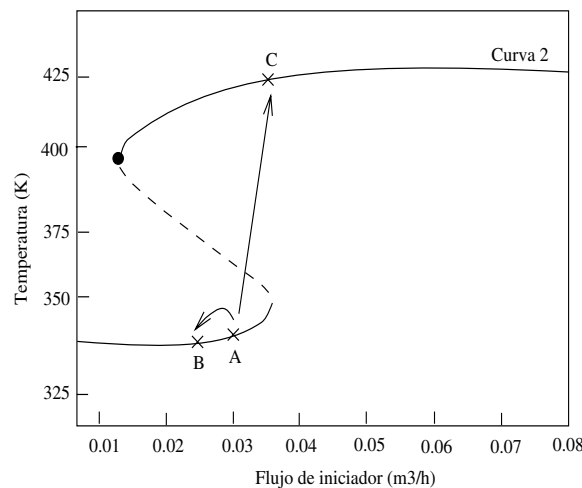


Figura 4.3: Diagrama de continuación esquemático para el ejemplo 1.

El punto de operación sería estable a lazo abierto. Si el flujo de iniciador se redujera a $0.025 \text{ m}^3/\text{h}$ (punto "B") entonces el sistema se encontraría operando prácticamente a la misma temperatura. Por el contrario, si el flujo del iniciador aumentara a $0.035 \text{ m}^3/\text{h}$ entonces el sistema cambiaría radicalmente a operar en una región de alta temperatura de la curva 2 (punto "C").

Lo descrito anteriormente también sucedería si originalmente el sistema estuviese operando en el punto óptimo. En la figura 4.4 se muestra la respuesta dinámica del sistema a lazo abierto iniciando del punto de operación óptimo en presencia de pequeños incrementos y disminuciones del flujo de iniciador.

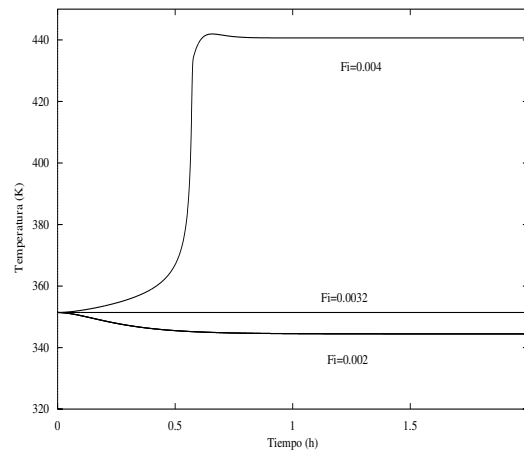


Figura 4.4: Simulación dinámica a diferentes valores del flujo de iniciador (F_I), partiendo del punto de operación óptimo.

Para continuar con el ejemplo anterior, véase la figura 4.5. El sistema se encontraba operando en la curva 2 en la región de altas temperaturas (punto “C”). La acción lógica para tratar de regresar al punto inicial “A” sería disminuir el flujo de iniciador a su valor original. Esta acción produciría un movimiento hacia la izquierda en la parte superior de la curva 2 (punto “D”). Al notar que la temperatura del reactor no disminuye, una acción de control lógica sería aumentar el flujo de agua de enfriamiento. Esta acción provocaría que el sistema siguiera operando en la región de alta temperatura, aunque ahora el nuevo punto de operación se encontraría localizado en la curva 1 (punto “E”). Si se decide reducir aún más el flujo de iniciador entonces el sistema podría operar en un punto de bifurcación de Hopf (punto “F”).

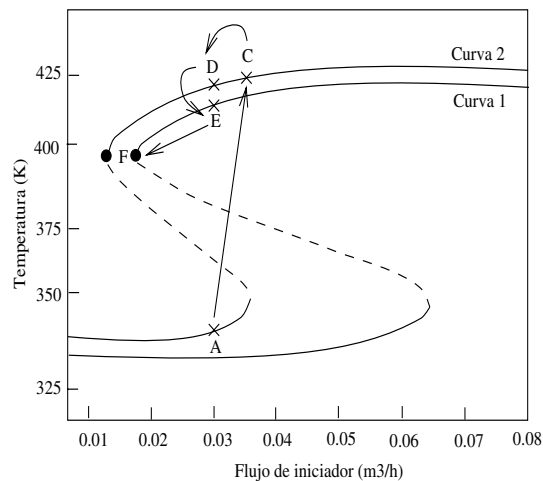


Figura 4.5: Diagrama de continuación esquemático para el ejemplo 2.

El operar en un punto de bifurcación de Hopf tendría como resultado que el reactor comenzara a oscilar. En la figura 4.6(a) se muestra el diagrama de bifurcación obtenido a partir del punto de bifurcación de Hopf del diagrama generado empleando a F_I como

parámetro de continuación y $F_{cw} = 1.5$ (curva 2 de la figura 4.2). En la figura 4.6(b) se muestra la respuesta dinámica del sistema a lazo abierto partiendo del punto de bifurcación de Hopf.

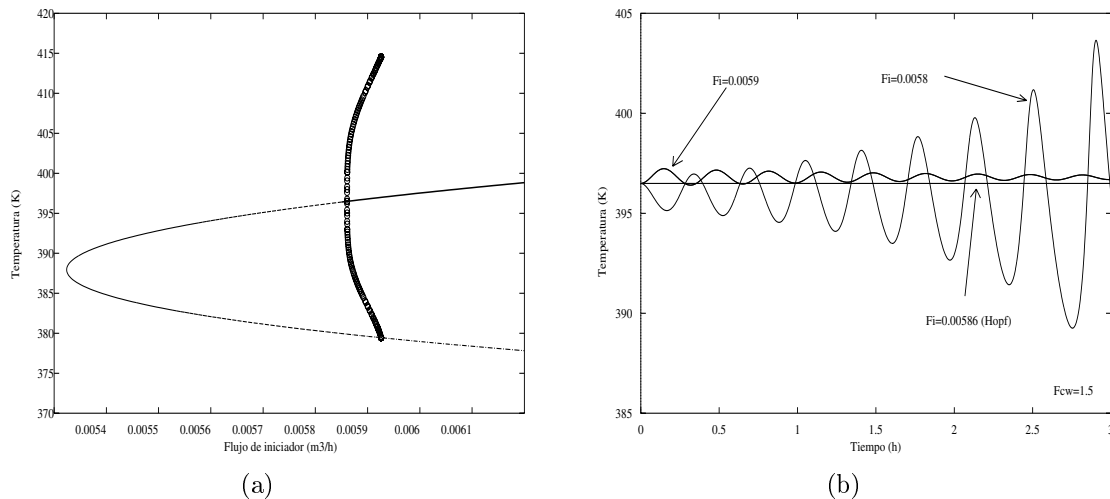


Figura 4.6: Diagrama de bifurcación (a) del punto de bifurcación de Hopf del diagrama de continuación de la temperatura empleando al flujo del iniciador como parámetro de continuación (figura 4.2(a)) y simulaciones dinámicas a lazo abierto (b) partiendo del mismo punto.

• Flujo de alimentación del medio de enfriamiento

Empleando al flujo de alimentación del medio de enfriamiento (F_{cw}) como parámetro de continuación se obtuvieron diagramas de multiplicidad a diferentes valores del flujo de iniciador (F_I). Estos diagramas se muestran en la figura 4.7.

Los diagramas de continuación presentan, al igual que en el caso anterior, bifurcación del tipo histéresis. Sin embargo, se muestra en la figura únicamente la sección de baja temperatura y bajo peso molecular de una forma ampliada. Esto se realizó con objeto de apreciar con mayor detalle los diagramas de continuación para el peso molecular del polímero. Se puede apreciar que a medida que aumenta el flujo de iniciador el área entre las curvas estable e inestable disminuye. A medida que aumenta este flujo, las dos curvas continúan acercándose hasta que se fusionan en una sola. Esto se comprueba con los diagramas de continuación de la figura 4.2, en los que se aprecia que a medida que aumenta el flujo de iniciador desaparece la histéresis y hay únicamente un estado estacionario. Se puede apreciar que cuando se emplea al flujo de alimentación del medio de enfriamiento como parámetro de continuación no se detectó algún punto de bifurcación de Hopf para los valores del flujo de iniciador analizados.

Analizando la figura 4.7(b) parecería que todos los puntos de la curva 3 son estables. Sin embargo esto no es cierto. La curva cambia de estabilidad, al igual que el caso de la curva 3 de la figura 4.7(a). Lo que sucede es que los puntos están muy cercanos y

visualmente, a pesar de que es una región ampliada, dan la impresión de ser una línea continua. En la figura 4.8 se puede apreciar la curva en cuestión con mayor ampliación.

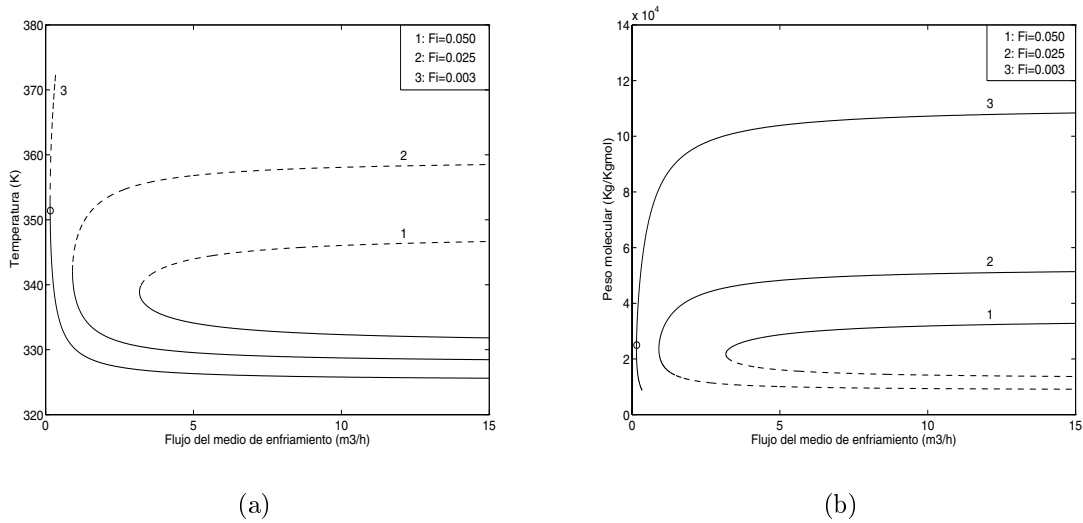


Figura 4.7: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de alimentación del agua de enfriamiento (F_{cw}) como parámetro de continuación.

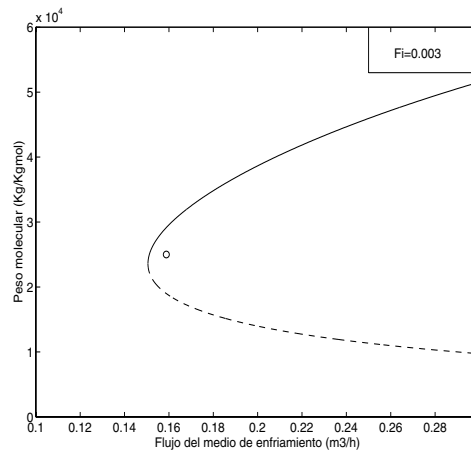


Figura 4.8: Ampliación del diagrama de continuación del peso molecular empleando al flujo de alimentación del agua de enfriamiento (F_{cw}) como parámetro de continuación (figura 4.7(b)) para el caso $F_I=0.003$.

• **Concentración de alimentación del monómero**

Empleando la concentración de alimentación de monómero como parámetro de continuación se obtuvieron diagramas de bifurcación para la temperatura y el peso molecular

a diferentes valores de temperatura de alimentación. En la figura 4.9(a) puede apreciarse que la región de multiplicidad se encuentra en un rango de temperatura de alimentación entre 320 y 375 °K. En este caso se encontraron hasta tres estados estacionarios. La curva 2 corresponde al diagrama de continuación del punto de operación óptimo.

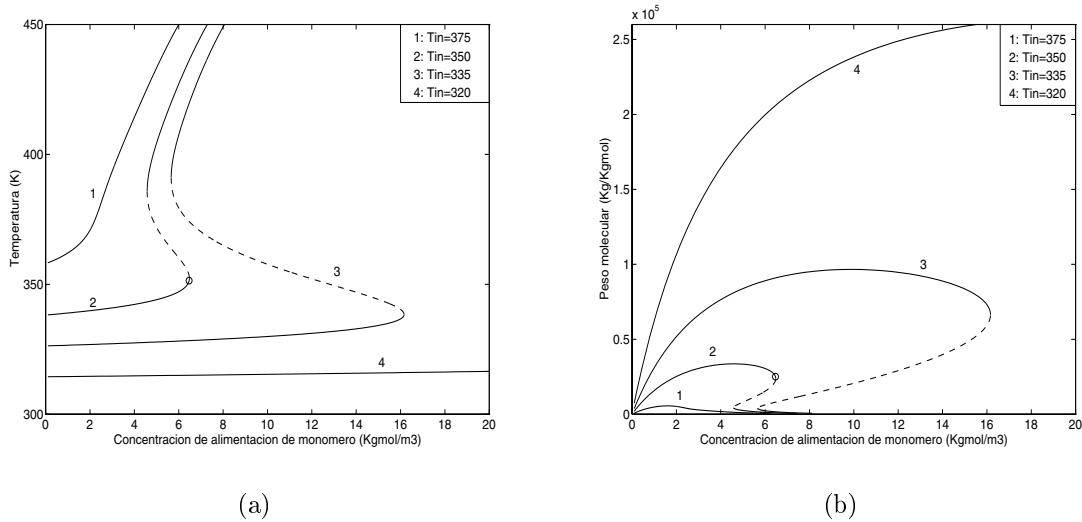


Figura 4.9: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando la concentración de alimentación de monómero (C_{min}) como parámetro de continuación.

Observando la figura 4.9(a) es claro que únicamente existen multiplicidades de salida con respecto a la temperatura; sin embargo de la figura 4.9(b) podría concluirse que existen multiplicidades de entrada y de salida con respecto al peso molecular. Esto parecería contradictorio ya que si existen multiplicidades en el sistema esto se debe reflejar en todos los estados del sistema. Hay que recordar que las multiplicidades se definen en función de los estados del sistema y el peso molecular no es un estado, es una relación de estados. Los diagramas de continuación del peso molecular se obtuvieron a partir de los valores de los estados D_o y D_1 en cada punto de la continuación. La información de multiplicidades de los diagramas de continuación no es del sistema sino únicamente de la relación de esos dos estados.

• **Temperatura de la corriente de alimentación**

En la figura 4.10 se muestran los diagramas de continuación para la temperatura y el peso molecular empleando la temperatura de alimentación como parámetro de continuación. Los diagramas se obtuvieron a diferentes concentraciones de monómero en la alimentación. Puede apreciarse una región en la que se obtiene el mismo estado estacionario (temperaturas bajas) independientemente de la concentración del monómero en la alimentación. Adicionalmente se observa que al aumentar la concentración del monómero alimentado se presenta conducta del tipo histéresis. En este caso se encontró un máximo de tres estados estacionarios.

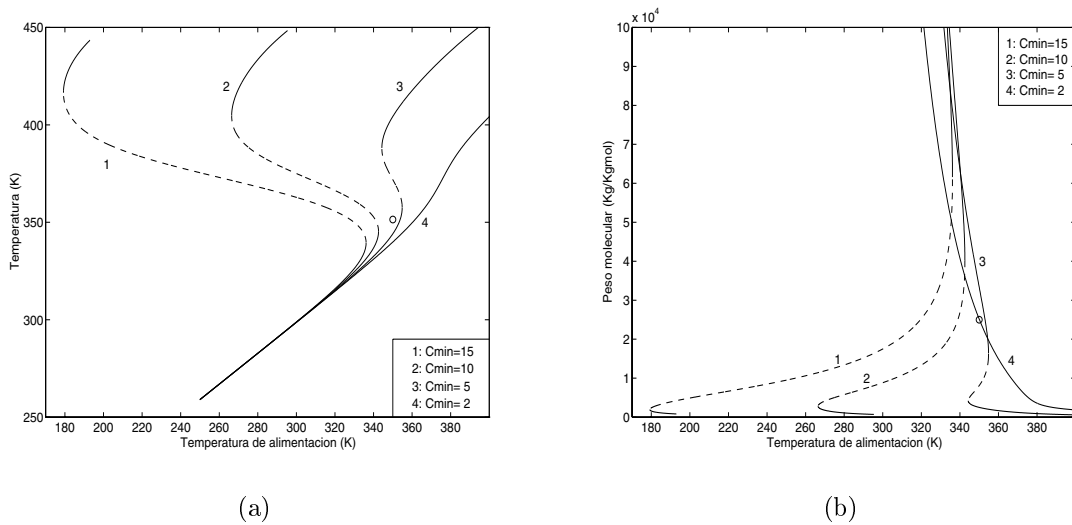


Figura 4.10: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando la temperatura de la corriente de alimentación (T_{in}) como parámetro de continuación.

• **Concentración de alimentación del iniciador**

En los diagramas de bifurcación de la temperatura y peso molecular empleando la concentración del iniciador en la corriente de alimentación como parámetro de continuación a diferentes flujos de alimentación de monómero se observa nuevamente conducta de tipo histéresis. A diferencia de los diagramas anteriores, en la figura 4.11 no se observa un patrón en función del incremento/decremento del valor del parámetro secundario y se presenta cruce de las curvas de estados estacionarios para diferentes flujos de alimentación. Se encontró una solución de tipo Hopf en la curva correspondiente al flujo de alimentación menor (curva 3) mientras que el punto de operación óptimo se encuentra en la curva 2.

• **Temperatura de alimentación del medio de enfriamiento**

En la figura 4.12 se muestran los diagramas de bifurcación para la temperatura y peso molecular empleando la temperatura de alimentación del agua de enfriamiento como parámetro de continuación. Puede observarse comportamiento del tipo histéresis para diferentes flujos de alimentación. En este caso no se aprecia un patrón definido al cambiar el valor del flujo de alimentación, y se observa cruce de las diferentes curvas. Se puede observar que, para los valores del flujo de alimentación de monómero analizados, a temperaturas de alimentación del agua de enfriamiento mayores a 330 °K el sistema presenta sólo un estado estacionario. Se detectó una solución del tipo Hopf para el valor menor del flujo de alimentación (curva 3) y el punto óptimo de operación pertenece a la curva 2.

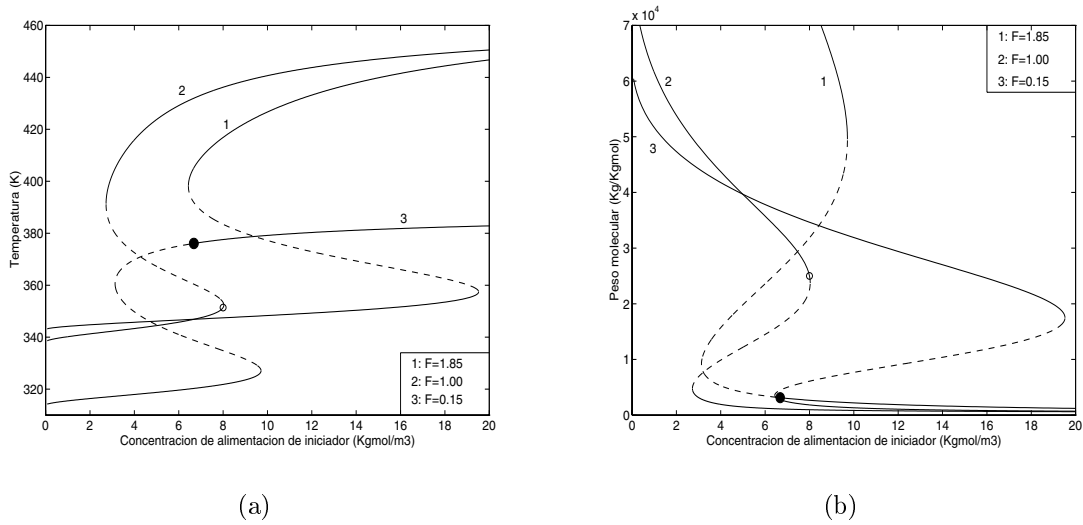


Figura 4.11: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando la concentración de alimentación del iniciador (C_{In}) como parámetro de continuación.

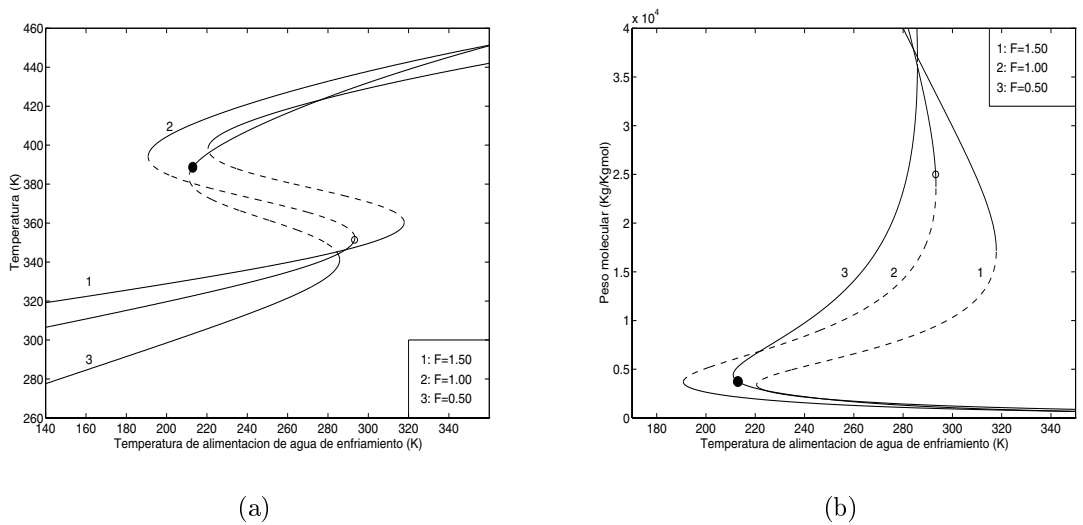


Figura 4.12: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando la temperatura de alimentación del agua de enfriamiento (T_{wo}) como parámetro de continuación.

• Area

El diagrama de continuación empleando al área de transferencia como parámetro de continuación se muestra en la figura 4.13. Se detecta una región de operación con estados estacionarios inestables, pero que carece de significado físico ($A \leq 0$). Se detecta otra

región de operación ($A > 0$) en el que se aprecian tres estados estacionarios. En este caso se nota que para áreas mayores a 5 m^2 , se tienen prácticamente los mismos tres estados estacionarios en el sistema, siendo el intermedio inestable. Así podemos afirmar que para $A > 5 \text{ m}^2$ el sistema es prácticamente independiente del área de transferencia de calor ya que los tres estados estacionarios no cambian conforme aumenta el área. En esta figura se puede apreciar con claridad que el punto de operación óptimo prácticamente es un punto límite, por lo que si se redujera un poco el área de transferencia (sin que ningún otro parámetro cambiara) el sistema necesariamente tendría que operar en la curva superior correspondiente a la región de alta temperatura.

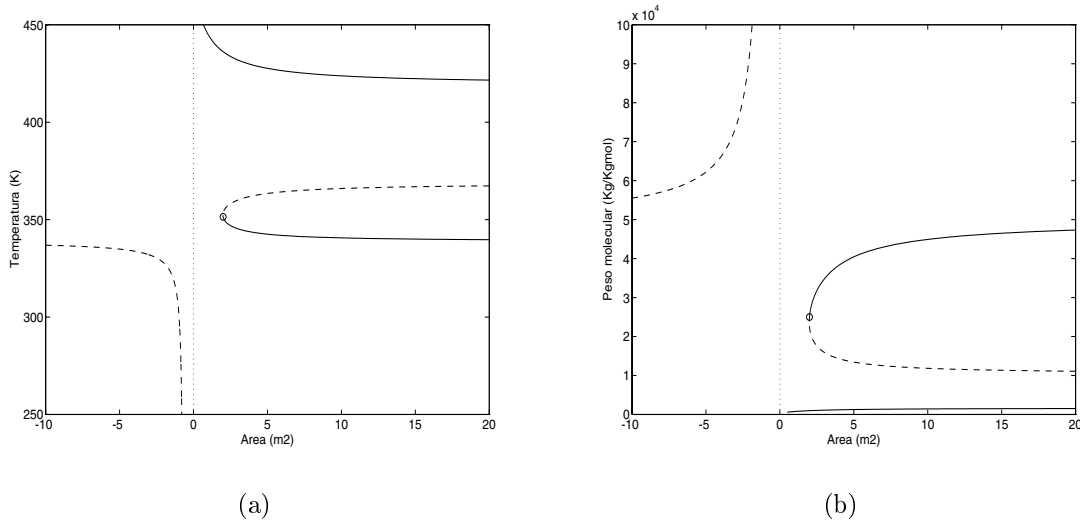


Figura 4.13: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al área (A) como parámetro de continuación.

4.2.3 Diagramas de bifurcación con multiplicidades de entrada e islas

En la sección 4.1.3 se encontró analíticamente que podrían existir soluciones aisladas cuando el parámetro φ era el flujo de alimentación de monómero. Al observar la expresión 4.7:

$$\frac{\partial F}{\partial q} = x_{3in} - x_3 + \frac{x_{1in} w \gamma_p \beta D a_p e^b}{[q + w(D a_p e^b + D a_{fm} e^{\gamma_{fm} b})]^2} \left[w(D a_p e^b + D a_{fm} e^{\gamma_{fm} b}) - \frac{q^2}{2(q + D a_I e^{\gamma_I b})} \right]$$

se puede notar que $\partial F / \partial q$ depende únicamente de x_3 , q y de cuatro de los parámetros del sistema que se consideraron relevantes para el control: q_I , x_{1in} , x_{2in} y x_{3in} .

Para determinar numéricamente los puntos en los que las soluciones aisladas surgen y desaparecen, es necesario resolver simultáneamente las tres ecuaciones de la expresión 4.15:

$$F(x, \varphi) = \frac{\partial F(x, \varphi)}{\partial \varphi} = \frac{\partial F(x, \varphi)}{\partial x} = 0$$

Por tanto se tiene un sistema de tres ecuaciones y tres incógnitas. Las incógnitas son x_3 , q y alguno de los parámetros q_I , x_{1in} , x_{2in} y x_{3in} , de tal forma que podrían existir soluciones aisladas para cada uno de éstos parámetros secundarios. Los puntos de nacimiento y muerte de islas se muestran en la tabla 4.1.

Tabla 4.1: Puntos de nacimiento y muerte de islas.

φ_2	x_3	q	Valor φ_2	T (°K)	F (m ³ /h)	Valor φ_2	(unidades)
q_I	2.1903	0.3670	0.0006	378.83	0.3670	0.0006	(m ³ /h)
	1.2653	0.4521	0.0021	342.66	0.4521	0.0021	(m ³ /h)
x_{1in}	2.0542	0.4883	0.5090	373.50	0.4883	4.0720	(kgmol/m ³)
	1.2806	0.4578	0.6694	343.26	0.4578	5.3552	(kgmol/m ³)
x_{2in}	2.1903	0.3670	0.1796	378.83	0.3670	1.4368	(kgmol/m ³)
	1.2653	0.4521	0.6540	342.66	0.4521	5.2320	(kgmol/m ³)
x_{3in}	1.1575	0.4098	1.3478	338.45	0.4098	345.89	(°K)
	2.1712	0.3737	0.2994	378.08	0.3737	304.90	(°K)

De esta manera se comprueba matemáticamente la presencia de islas para los cuatro parámetros. Esto implica que, ya que el sistema presenta soluciones aisladas, necesariamente presenta multiplicidades de entrada. A continuación se presentan los diagramas de bifurcación empleando al flujo de alimentación de monómero como parámetro de continuación para cada uno de los cuatro parámetros secundarios.

En la figura 4.14 se muestra el diagrama de bifurcación empleando como parámetro de continuación al flujo de alimentación de monómero a diferentes valores del flujo de iniciador. Puede apreciarse que para valores del flujo de iniciador en el rango 0.0006-0.0021 kgmol/m³ (rango de nacimiento-muerte de islas) se presentan soluciones aisladas (véanse las curvas 3 y 4). Para valores del flujo de iniciador mayores a 0.0021 kgmol/m³, las soluciones aisladas desaparecen y existen multiplicidades de entrada y de salida (curvas 1 y 2). Puede notarse que a medida que se incrementa el flujo de alimentación de monómero el sistema presenta únicamente un estado estacionario, siendo prácticamente independiente del flujo de iniciador. La curva 2 corresponde al punto de operación óptimo. Cabe mencionar que éste es el único caso en el que se encontró que la curva correspondiente al punto de operación óptimo presentara puntos de bifurcación de Hopf.

En los diagramas de bifurcación para la temperatura y el peso molecular empleando el flujo de alimentación de monómero como parámetro de continuación, a diferentes condiciones de concentraciones de iniciador, concentraciones de monómero y temperatura de agua de enfriamiento en la corriente de alimentación, se puede apreciar un comportamiento similar al observado en la figura 4.14.

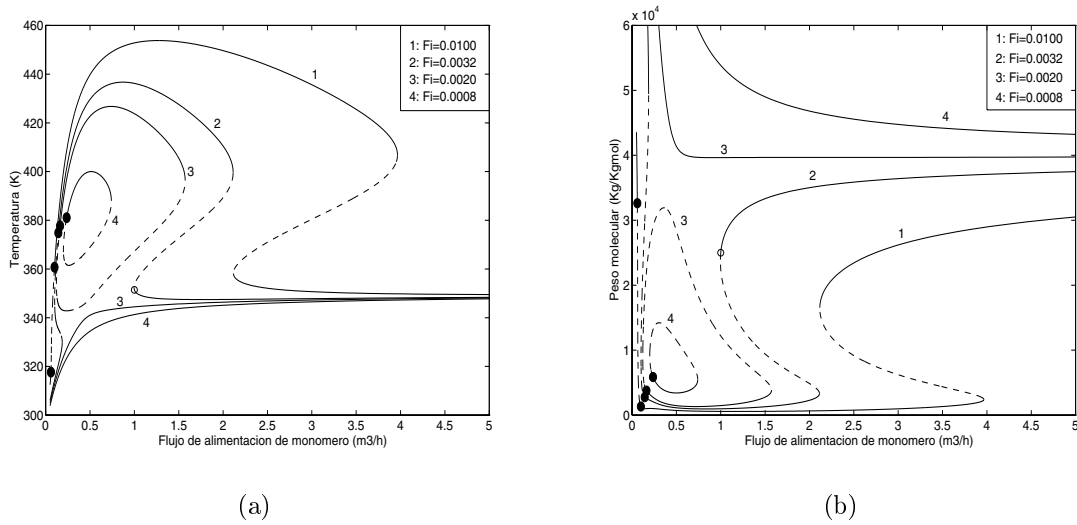


Figura 4.14: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de alimentación de monómero (F) como parámetro de continuación a diferentes flujos de iniciador en la corriente de alimentación.

En las figuras 4.15, 4.16 y 4.17 puede apreciarse que para los valores de los parámetros de operación dentro de los rangos de nacimiento-muerte de islas se presentan soluciones aisladas. Para valores de los parámetros superiores a esos rangos se presentan multiplicidades de entrada y de salida.

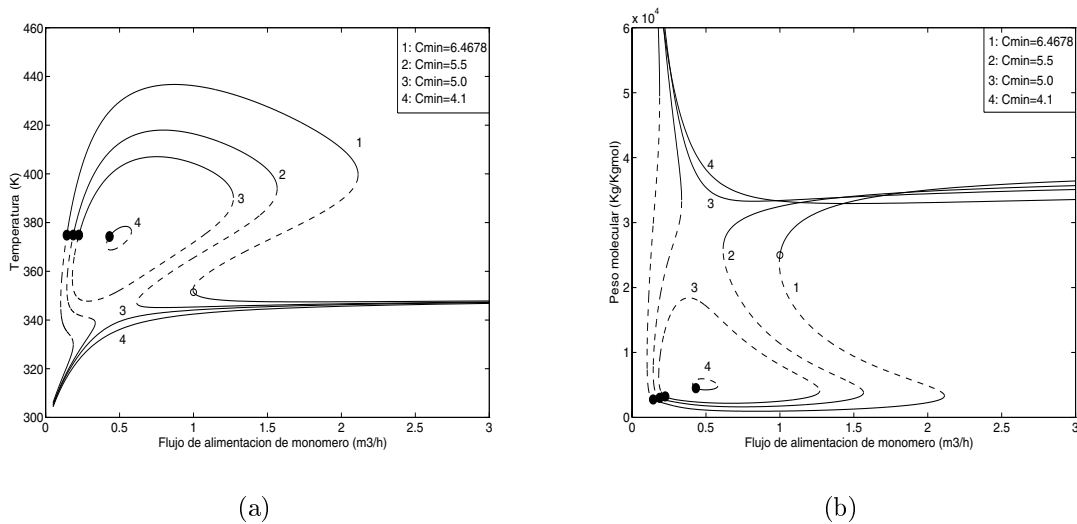


Figura 4.15: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de alimentación de monómero (F) como parámetro de continuación a diferentes concentraciones de monómero en la corriente de alimentación.

En las curvas correspondientes al punto de operación óptimo se observa una región

de unicidad para valores del flujo de alimentación de monómero mayores al valor óptimo (1 kgmol/m^3). En los cuatro casos estudiados se detectó un máximo de tres estados estacionarios y diversas soluciones periódicas del tipo Hopf.

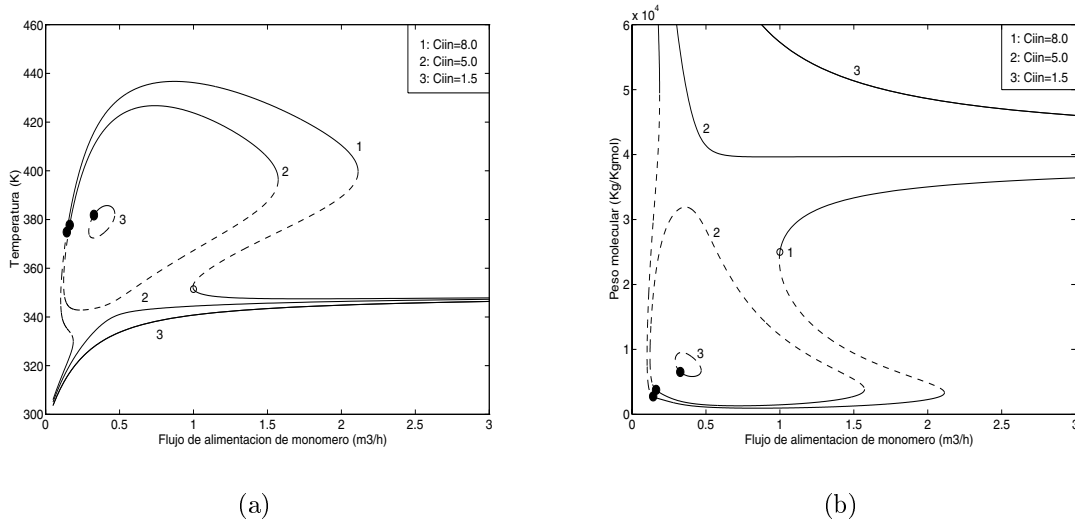


Figura 4.16: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de alimentación de monómero (F) como parámetro de continuación a diferentes concentraciones de iniciador en la corriente de alimentación.

Es importante recalcar que para que el sistema presente soluciones aisladas es necesario que simultáneamente se modifiquen el flujo de alimentación de monómero y alguno de los cuatro parámetros secundarios. Analizando la tabla 4.1 puede notarse que los valores de los parámetros secundarios en los puntos de nacimiento/muerte de islas son menores a los valores de estos parámetros en el punto de operación óptimo. También puede apreciarse que el valor de q en los puntos de nacimiento/muerte de islas es similar en los cuatro casos ($0.36 \leq q \leq 0.49$). Esto representa una reducción en el flujo de alimentación de monómero de más del 50% con respecto al valor nominal. Así, para que surjan soluciones aisladas en el sistema es necesario que simultáneamente disminuya el flujo de alimentación de monómero y alguno de los parámetros secundarios. Por ejemplo, para que surjan soluciones aisladas cuando el parámetro secundario es la concentración de alimentación de iniciador se requiere que el flujo de alimentación de monómero disminuya en 55% y que la concentración de iniciador en la alimentación disminuya en 35%; estos cambios con respecto a los valores nominales de los parámetros. Podemos notar que esto implicaría cambios bastante significativos en el sistema.

La situación anterior tiene un resultado similar para los casos en que el parámetro secundario es el flujo de alimentación de iniciador o la concentración de alimentación de monómero. Esto es, la probabilidad de que los dos cambios sucedan simultáneamente es relativamente baja. El único caso en el que el surgimiento de islas es más factible es cuando el parámetro secundario es la temperatura de la corriente de alimentación. En este caso se requiere una disminución considerable en el flujo de alimentación del monómero (-60%)

pero una disminución muy pequeña en la temperatura de la corriente de alimentación (-1.5%).

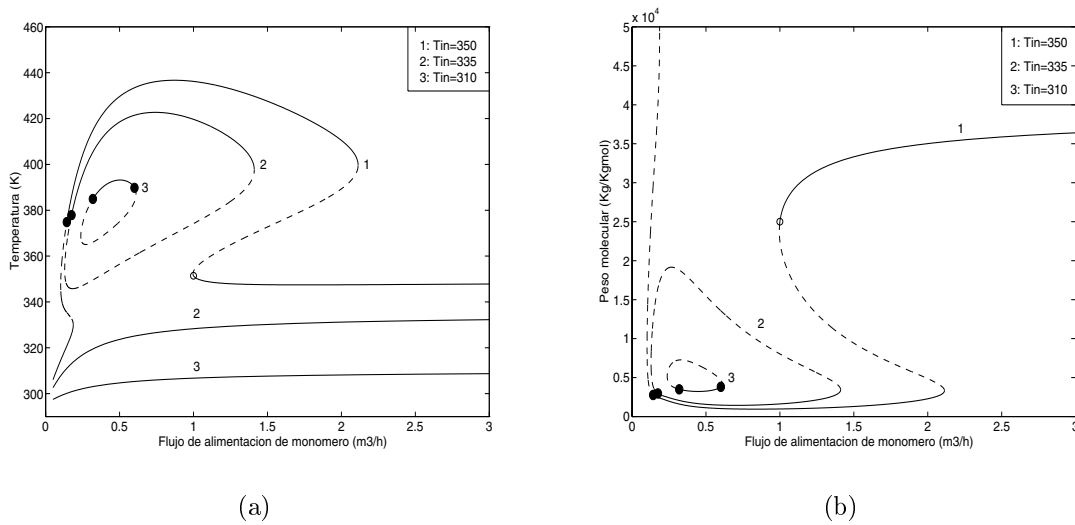


Figura 4.17: Diagrama de continuación de la temperatura (a) y el peso molecular (b) empleando al flujo de alimentación de monómero (F) como parámetro de continuación a diferentes temperaturas de la corriente de alimentación.

4.3 Conclusiones

La teoría de singularidad es una herramienta muy útil en el análisis de multiplicidad. Nos permite detectar analíticamente la posible existencia de multiplicidades de entrada, salida e islas en un sistema dado. Esto es, proporciona información sobre la posibilidad de que existan o no multiplicidades. Adicionalmente nos permite encontrar el máximo número de estados estacionarios que el sistema podría presentar.

Sin embargo, el uso de la teoría de singularidad tiene limitaciones. El análisis se realiza alrededor de un punto singular. Esto es, el sistema se encuentra en estado estacionario. Por tal motivo esta herramienta no es aplicable a sistemas dinámicos. Adicionalmente, para emplear la teoría de singularidad se requiere reducir el sistema de ecuaciones del modelo matemático a una ecuación algebraica. Existen muchos sistemas cuyos modelos matemáticos no se pueden reducir a una sola ecuación, en cuyo caso no se puede aplicar ésta teoría de la forma descrita en este trabajo. Recientemente se ha propuesto el empleo de la teoría de singularidad de manera numérica para esos casos [13]. Este enfoque se caracteriza por no requerir soluciones analíticas sin perder rigurosidad matemática, y se emplean métodos computacionales de intervalos.

En este estudio fue posible reducir el modelo matemático del sistema a una ecuación algebraica para emplear la teoría de singularidad. Se encontró analíticamente que era posible la presencia de multiplicidades de salida y que podrían existir al menos tres estados estacionarios. Se seleccionaron siete parámetros que se consideraron relevantes para el

control ya que podrían ser variables manipuladas o posibles perturbaciones. Se aplicó la teoría de singularidad para determinar la posible existencia de multiplicidades de entrada con respecto a esos siete parámetros. Analíticamente se encontró que el único parámetro para el que podrían existir multiplicidades era el flujo de alimentación de monómero (q). Adicionalmente se encontró que podrían existir soluciones aisladas entre x_3 y q .

La teoría de singularidad proporciona información sobre la *posible existencia* de multiplicidades. Los diagramas de bifurcación confirman esta existencia. Los diagramas de bifurcación son un medio de información relevante para la operación y el control de procesos. Permiten detectar el tipo y número de estados estacionarios que un sistema presenta en un rango dado de parámetros.

Se realizaron los diagramas de continuación para el sistema empleando como parámetros de continuación a los siete parámetros del sistema seleccionados con anterioridad. A pesar de que no se verificó analíticamente el máximo número de soluciones en estado estacionario del modelo matemático del reactor de polimerización, por medio de los diagramas de bifurcación se encontraron hasta tres estados estacionarios. Se comprobó que existen multiplicidades de entrada únicamente cuando el parámetro de continuación es el flujo de alimentación de monómero.

De los diagramas de continuación se puede notar que el punto óptimo de operación definido por Lewin y Bogle [23] es estable a lazo abierto. Sin embargo pequeños cambios impuestos sobre la operación pueden causar serios problemas de control, ya que prácticamente es un punto límite.

De las figuras 4.2-4.13, referentes a multiplicidades de salida, uno esperaría intuitivamente problemas de operabilidad. Por ejemplo, como se observa de la figura 4.2(a), un aumento pequeño en el flujo del iniciador causará un salto repentino en la temperatura de operación del reactor. Por otra parte un incremento en el flujo del medio de enfriamiento (curva 2), para contrarrestar el anterior aumento de temperatura, podría dar lugar a un régimen de operación oscilatorio tal como se muestra en la figura 4.4. Conductas semejantes a la descrita se observan en el resto de los diagramas de multiplicidades de salida.

Se determinaron los puntos de nacimiento y muerte de islas, mismos que se comprobaron numéricamente. Las multiplicidades de entrada e islas también representan problemas operacionales. Por ejemplo de la figura 4.14(a) observamos que una pequeña reducción del flujo de alimentación de monómero causará un salto en la temperatura del reactor (curva 2). Reduciendo aún más dicho flujo el reactor presentará multiplicidades de entrada. Una reducción en el flujo de iniciador causará la aparición de regiones de operación aisladas. Las figuras restantes de multiplicidades de entrada e islas muestran conductas semejantes a la discutida antes (figuras 4.15-4.17). Es importante notar que el diagrama de continuación correspondiente al punto de operación óptimo, empleando al flujo de alimentación de monómero como parámetro de continuación, presenta multiplicidades de entrada.

Con base en los diagramas de continuación obtenidos se puede detectar el sentido de los cambios en los parámetros que resultan en problemas operacionales. Estos cambios son:

- Incremento del flujo de alimentación de iniciador.

- Disminución del flujo de alimentación del medio de enfriamiento.
- Incremento en la concentración de alimentación de monómero.
- Incremento en la temperatura de la corriente de alimentación.
- Incremento en la concentración de alimentación de iniciador.
- Incremento en la temperatura de alimentación del medio de enfriamiento.
- Disminución en el área de transferencia de calor.
- Disminución en el flujo de alimentación de monómero.

Lo anterior implica que cambios muy pequeños en esos sentidos no son deseables ya que provocarían cambios radicales en el punto de operación del sistema. Cambios pequeños de los parámetros en el sentido opuesto prácticamente no modificarían el punto de operación.

Con los resultados obtenidos en este capítulo podemos concluir que el problema de control a lazo cerrado, en el punto óptimo de operación, será difícil, independientemente de la ley de control empleada. La presencia de regiones de operación inestables no deberían presentar serios problemas de control. Sin embargo, la presencia de multiplicidades de entrada puede dar lugar al surgimiento de ceros positivos en la función de transferencia del sistema, lo cual implica limitaciones en la velocidad de respuesta del sistema a lazo cerrado. Adicionalmente, ya que el punto de operación es prácticamente un punto límite, un cambio pequeño de algún parámetro en un sentido (aumento/diminución dependiendo del parámetro en cuestión) puede pasar desapercibido, mientras que si el cambio pequeño es en el sentido opuesto puede resultar en regiones de operación de altas temperaturas. Una posible forma de remover algunos de los problemas operacionales discutidos antes, y mejorar la operabilidad del sistema, consiste en modificar los parámetros de diseño y/u operación del sistema.

Capítulo 5

Cambios en el Diseño y en la Operación

El estudio de la conducta no lineal de un sistema dado es importante para su operación y control ya que se pueden detectar las distintas regiones de operación presentes y es posible predecir el efecto del cambio de los parámetros del sistema sobre su operación. En el capítulo anterior se presentó el análisis del efecto de cambios en algunos parámetros por medio de los diagramas de bifurcación. En este capítulo se presenta este análisis por medio del empleo de distintos diagramas de multiplicidad global del sistema.

5.1 Diagramas de Multiplicidad Global

Los diagramas de multiplicidad global proporcionan información sobre el tipo de diagramas de multiplicidad o continuación que se pueden presentar con respecto a dos parámetros dados.

Los diagramas de multiplicidad se obtienen empleando la teoría de singularidad. El primer paso es seleccionar un parámetro que tenga valores limitados por cuestiones físicas y para el que se desee conocer los tipos de diagramas de continuación presentes. Un parámetro empleado con frecuencia es el flujo de alimentación del medio de enfriamiento, ya que es una variable importante en el control del sistema porque comúnmente es una variable manipulada. Es claro que los límites físicos del flujo del medio de enfriamiento son $[0, \infty]$.

El siguiente paso es determinar los puntos a partir de los que surgen múltiples estados estacionarios. Como se mencionó en la sección 4.1.2 para que exista histéresis es necesario que se cumpla la condición 4.10 y la condición 4.12 para $k = 2$. Así se tiene un sistema de tres ecuaciones:

$$F(x, \varphi) = \frac{\partial F(x, \varphi)}{\partial x} = \frac{\partial^2 F(x, \varphi)}{\partial x^2} = 0 \quad (5.1)$$

Para evaluar alguna solución de un sistema de ecuaciones es necesario, en principio, tener el mismo número de ecuaciones y de incógnitas. En nuestro caso, el estado x es x_3 y es necesario seleccionar dos parámetros (φ_1 y φ_2).

El procedimiento es entonces resolver el sistema de ecuaciones (condiciones 5.1) para diferentes valores de q_{cw} dentro del rango factible de operación. Con esta información se tienen los puntos que dividen el espacio de parámetros $\varphi_1 - \varphi_2$ entre la región de unicidad y la región de multiplicidad (región donde existe histéresis).

Para generar el primer diagrama de multiplicidad global se seleccionaron al volumen adimensional (α) y al calor de reacción adimensional (β) como los parámetros (φ_1 y φ_2). En la figura 5.1 se muestra el diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β). La curva sólida (—) representa la división del espacio $\alpha - \beta$ entre la región de unicidad (denominada región I) y la de multiplicidades.

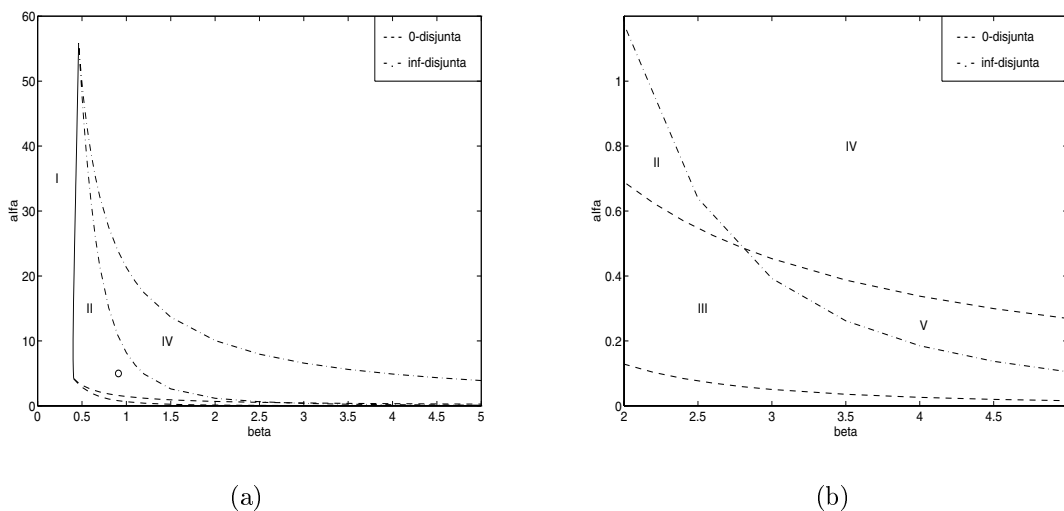
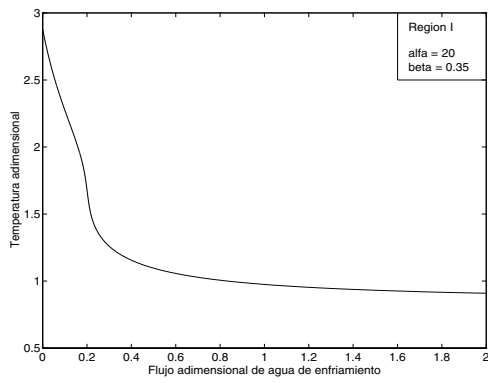


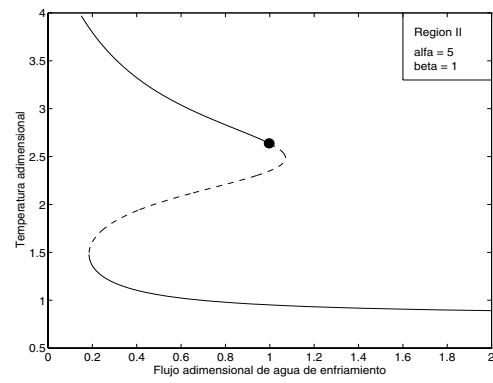
Figura 5.1: Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) (a) y vista ampliada (b).

El siguiente paso es determinar las distintas regiones presentes dentro del área de multiplicidades para las que se tendrán los distintos tipos de diagramas de bifurcación. Para delimitar las regiones presentes se resuelve la función y la primera derivada del sistema para $q_{cw} = 0$ dividiendo el área de multiplicidades en dos regiones (---). Se resuelve el mismo sistema para $q_{cw} = \infty$ dividiendo el área de multiplicidades en otras dos regiones (-.-). Esto resulta en cuatro regiones distintas dentro del área de multiplicidades (regiones II, III, IV y V) cada una de las cuales tendrá un diagrama de continuación particular. El punto de operación óptimo pertenece a la región II y está marcado en la figura 5.1 por el símbolo “o”.

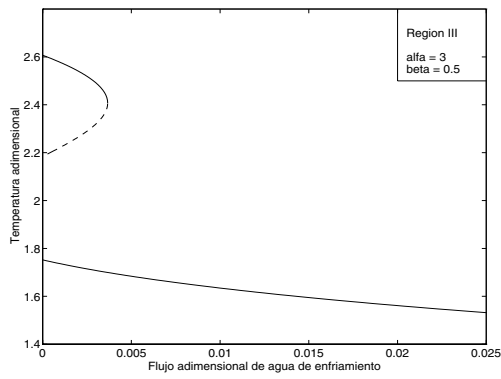
Los diagramas de continuación del flujo de alimentación del medio de enfriamiento correspondientes a cada una de las regiones de operación del diagrama de multiplicidad global de la figura 5.1 se muestran en la figura 5.2.



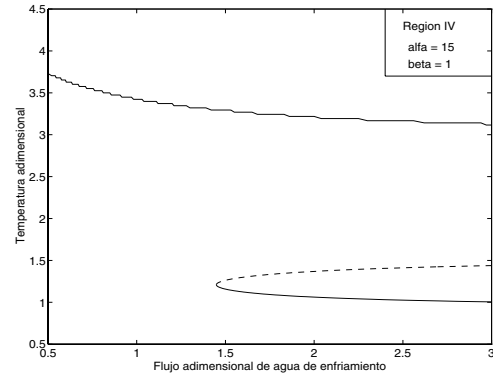
(a)



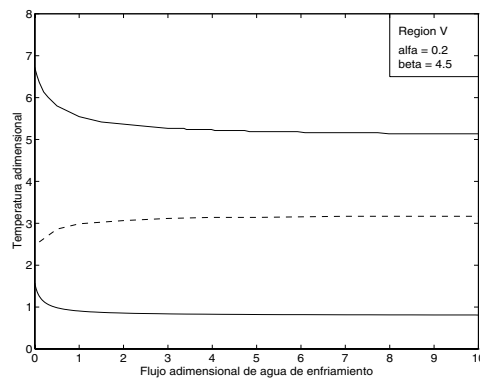
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 5.2: Diagramas de continuación de la temperatura empleando al flujo del medio de enfriamiento como parámetro de continuación, para las diferentes regiones del diagrama de multiplicidad global de α vs. β (Figura 5.1).

Un aspecto interesante de los estudios de multiplicidad es la aparición de bifurcaciones disjuntas [36, 37]. Las bifurcaciones disjuntas resultan en regiones de operación infactibles ya que se tienen ramas de soluciones de estado estacionario que están desconectadas (véanse los diagramas (c), (d) y (e) de la figura 5.2). Este comportamiento surge cuando hay límites en los valores físicos de los parámetros o estados. Así se tendrán regiones de operación infactibles 0-disjuntas cuando el flujo de agua de enfriamiento tiende a cero y ∞ -disjuntas cuando el flujo tiende a infinito.

El diagrama (a) de la figura 5.2 corresponde a la región I (región de unicidad). El diagrama (b) es la región de histéresis y se denomina región II. En esta región existen tres estados estacionarios y la curva de multiplicidad es continua. Puede observarse que el diagrama de continuación de la región II es similar a los diagramas encontrados previamente para los valores de α y β en el punto de operación óptimo (véase la figura 4.7(a)). El diagrama de continuación (c) es el de la región III. Esta región es el área entre las curvas derivadas de resolver el sistema cuando $q_{cw} = 0$. Esta región presenta tres estados estacionarios pero la curva de multiplicidad es discontinua para valores de $q_{cw} = 0$. En esta región aparecen bifurcaciones 0-disjuntas. El diagrama (d) corresponde a la región IV. Esta región es el área entre las curvas derivadas al resolver el sistema cuando $q_{cw} = \infty$ y corresponde a la presencia de bifurcaciones ∞ -disjuntas. Esta región también presenta tres estados estacionarios pero la curva es discontinua cuando $q_{cw} = \infty$. El diagrama de la figura (e) corresponde a la región V. En esta región se presentan tanto bifurcaciones 0-disjuntas como ∞ -disjuntas. La región V es la intersección de las curvas derivadas al resolver el sistema para $q_{cw} = 0$ y $q_{cw} = \infty$. Se observan tres estados estacionarios pero la curva es discontinua tanto cuando $q_{cw} = 0$ como para cuando $q_{cw} = \infty$.

Se empleó el procedimiento descrito anteriormente para generar diagramas de multiplicidad global para distintos pares de parámetros. A continuación se presenta el análisis del efecto de cambios en los parámetros de operación, de diseño y errores de modelamiento sobre la operación del sistema mediante los diagramas de multiplicidad global.

5.2 Efectos de Cambios en el Diseño

Los efectos de cambios de parámetros de diseño y/o errores de modelamiento se estudiaron mediante varios diagramas de multiplicidad global. Los diagramas y su análisis se muestran a continuación.

5.2.1 Volumen contra calor de reacción

En la figura 5.1 se encuentra el diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β).

A partir de este diagrama puede apreciarse el efecto de cambios en el volumen del reactor (α) y/o en el calor de reacción (β) sobre la respuesta del sistema. El punto de operación óptimo correspondiente a $\alpha = 5.0$ y $\beta = 0.91$ pertenece a la región II. La región de unicidad (región I) se presenta a valores de β pequeños independientemente del valor de α , o a valores muy altos del volumen adimensional, prácticamente para cualquier valor de β . Esto es consistente con la regla heurística que establece que “los

problemas de multiplicidades pueden reducirse al incrementar el volumen del reactor”. Para eliminar multiplicidades en el problema en cuestión modificando únicamente un parámetro se debería emplear un volumen adimensional al menos cinco veces mayor al nominal, o un calor de reacción adimensional equivalente al 40% del calor de reacción nominal. Cualquiera de esas medidas colocarían al sistema en la región de unicidad.

5.2.2 Volumen contra área

En la figura 5.3 se puede apreciar el diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el área de transferencia de calor (A).

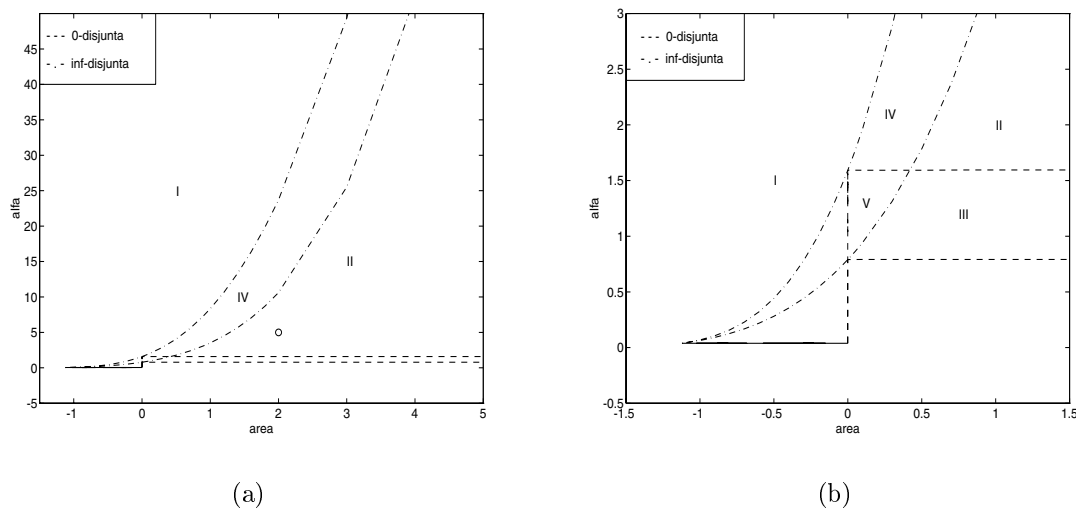
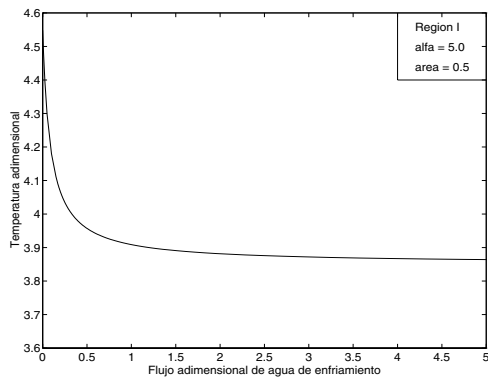


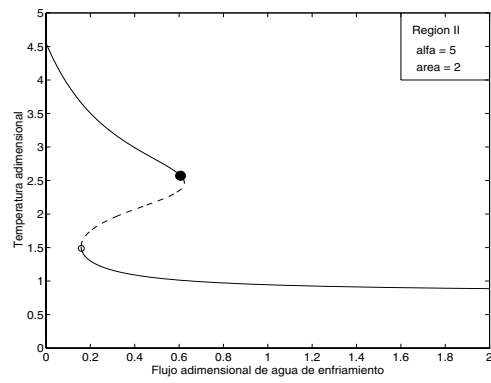
Figura 5.3: Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el área (A) (a) y vista ampliada (b).

Este diagrama resulta muy interesante. La división entre histéresis y unicidad se encuentra en una región infactible (áreas negativas). Se detecta una región de unicidad factible para valores muy pequeños del área y muy altos de α . La forma de este diagrama resultó diferente al diagrama de α contra β . En este caso las curvas que delimitan la región III son rectas. La región V es una pequeña zona correspondiente a valores de α y área muy pequeños. Con este diagrama se vuelve a demostrar la heurística que establece que “las multiplicidades se pueden reducir incrementando la dimensión del reactor” ya que para eliminar multiplicidades es necesario incrementar el volumen adimensional del reactor (α). Se puede apreciar que modificando el área no se pueden eliminar multiplicidades. Esta información complementa lo encontrado en el diagrama 4.13 en el que se observó que para $A > 5 \text{ m}^2$ los estados estacionarios eran independientes a los cambios del área de transferencia.

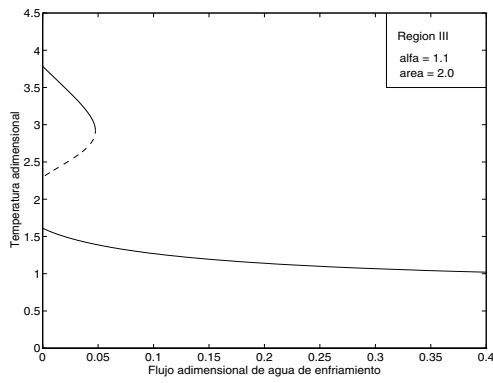
En la figura 5.4 se presentan los diagramas de continuación correspondientes a cada una de las cinco regiones de operación mostradas en el diagrama de multiplicidad global de α contra área (figura 5.3).



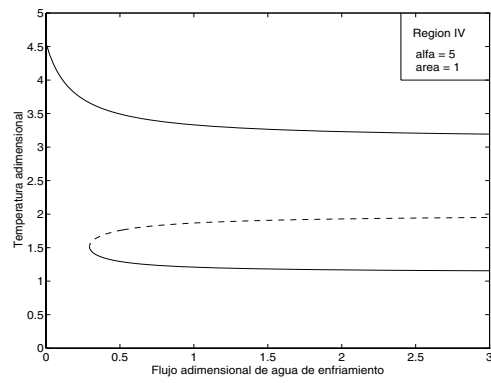
(a)



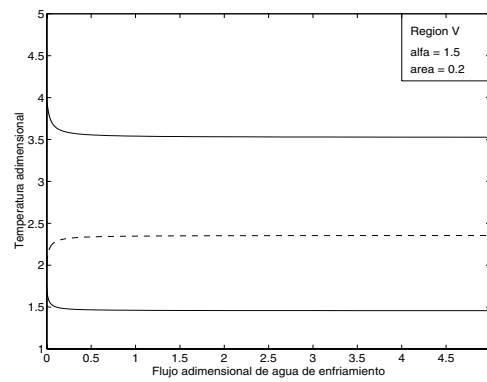
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 5.4: Diagramas de continuación de la temperatura empleando al flujo del medio de enfriamiento como parámetro de continuación, para las diferentes regiones del diagrama de multiplicidad global de α vs. A (Figura 5.3).

Puede apreciarse que aunque los diagramas de multiplicidad global 5.1 y 5.3 son diferentes, los diagramas de continuación de cada área son similares. El diagrama de continuación de la región II (figura 5.4(b)) es el diagrama de continuación de la temperatura adimensional contra q_{cw} empleando las condiciones de área y α en el punto óptimo de operación. En el diagrama se denota el punto de operación óptimo usando el símbolo “o” mientras que el símbolo “•” denota un punto de bifurcación de Hopf.

5.2.3 Damköhler de iniciación contra calor de reacción

En la figura 5.5 se puede apreciar el diagrama de multiplicidad global del número adimensional de Damköhler de iniciación (Da_I) contra el calor de reacción adimensional (β).

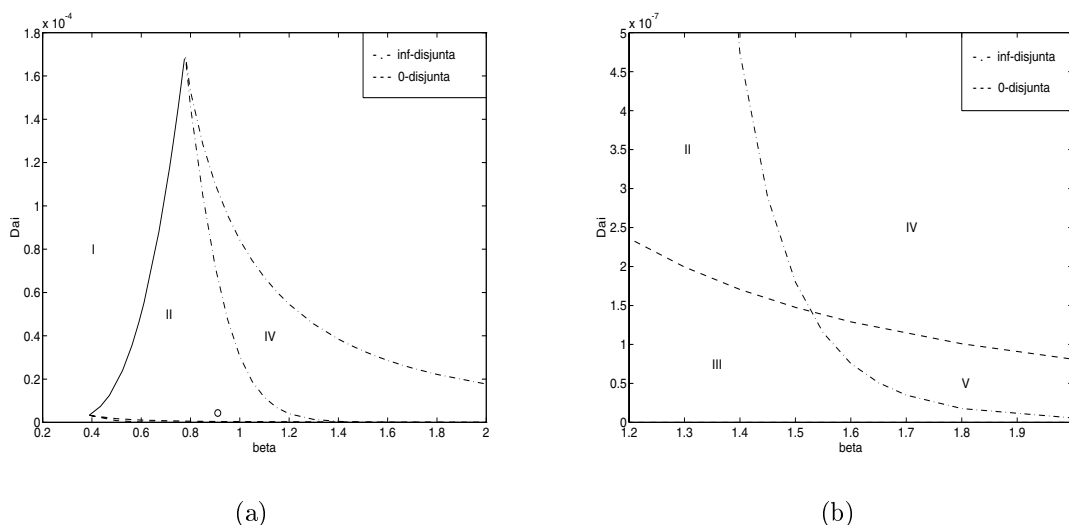


Figura 5.5: Diagrama de multiplicidad global del número de Damköhler de iniciación (Da_I) contra el calor de reacción adimensional (β) (a) y vista ampliada (b).

Los parámetros Da_I y β son parámetros cinéticos, por lo que realmente no se modifican con el diseño del reactor. El propósito de este análisis fue determinar el efecto de errores de modelamiento en la velocidad de reacción de iniciación (representado de forma adimensional como Da_I) y/o del calor de reacción adimensional (β) sobre la operación del sistema. El punto de operación óptimo se encuentra marcado por el símbolo “o” y corresponde a un valor de Da_I de 4.337×10^{-6} . En este diagrama se aprecia que para que el sistema cambie de región de operación el número adimensional de Damköhler de iniciación debería tener un valor diez veces mayor al valor nominal (5×10^{-5}). Esto implicaría tener errores de modelamiento de Da_I muy grandes. Con respecto al calor de reacción adimensional del diagrama podemos notar que éste debería tener un valor 50% mayor al valor nominal para que el sistema cambiara de región de operación. Con base en lo anterior podemos concluir que si se tienen errores de modelamiento de Da_I y β dentro de rangos aceptables ($\pm 20 - 30\%$) y hasta mayores, el punto de operación

del sistema continuaría en la región II. Este diagrama nos dice que el comportamiento tipo histéresis no se modificará aun en presencia de incertidumbres relativamente altas en éstos parámetros.

5.2.4 Damköhler de propagación contra calor de reacción

En la figura 5.6 se puede apreciar el diagrama de multiplicidad global del número adimensional de Damköhler de propagación (Da_p) contra el calor de reacción adimensional (β).

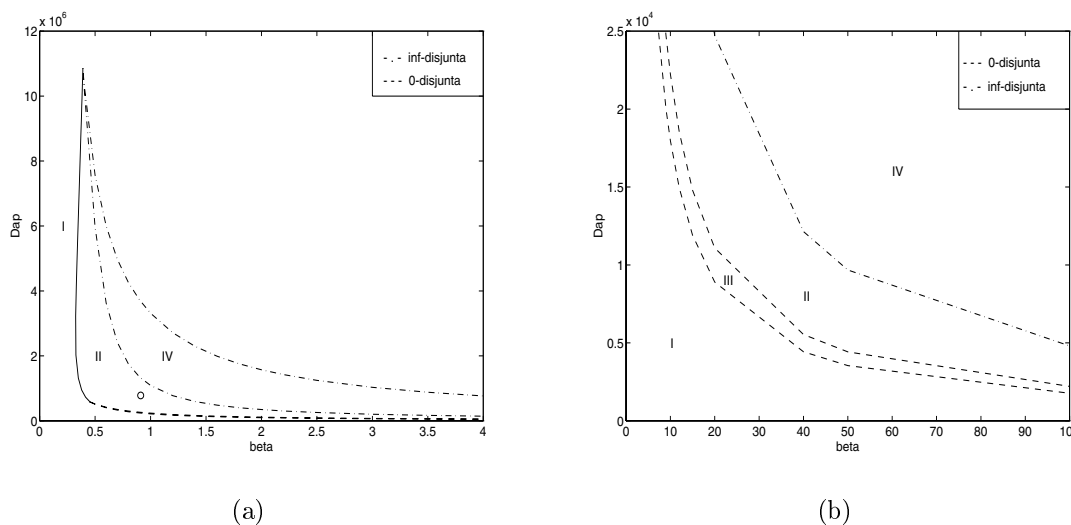


Figura 5.6: Diagrama de multiplicidad global del número de Damköhler de propagación (Da_p) contra el calor de reacción adimensional (β) (a) y vista ampliada (b).

El propósito de este análisis, al igual que en el caso del Damköhler de iniciación, fue determinar el efecto de errores de modelamiento. Se estudió el efecto de errores en la velocidad de reacción de la propagación, representado en forma adimensional como Da_p , con un valor de 7.83×10^5 en el punto óptimo (denotado en la figura con el símbolo "o"). En este diagrama se puede apreciar que la región II tiene un área menor a la del diagrama 5.5. En este caso si Da_p y/o β tienen errores de modelamiento aceptables ($\pm 20 - 30\%$) el sistema se mantendría operando en la región II. Sin embargo, si los errores fuesen mayores ($> \pm 50\%$) el punto de operación cambiaría de la región II a la región III ó IV dependiendo del sentido del error.

Como puede apreciarse en la figura 5.6(b), en este diagrama no se encontró una región V de operación, esto es, no existe una región en la que conjuntamente existan bifurcaciones 0-disjuntas y ∞ -disjuntas.

5.3 Efectos de Cambios en la Operación

Se analizaron los efectos de cambios de algunos parámetros de operación sobre los diagramas de multiplicidad global. Se tomó como punto de referencia el diagrama de multiplicidad global de α contra β (figura 5.1). Los cambios que se analizaron fueron cambios en los flujos de alimentación de iniciador y monómero, y en las temperaturas de alimentación del medio de enfriamiento y de la corriente de alimentación. Es claro que en los diagramas de multiplicidad global resultantes no es posible localizar el punto de operación óptimo ya que se modificó el valor de algún parámetro del sistema que se encuentra implícito en el valor del punto óptimo de operación.

5.3.1 Volumen contra calor de reacción a $T_{wo} + 20\%$

En la figura 5.7 se puede apreciar el diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando la temperatura de alimentación del medio de enfriamiento se incrementa en 20%.

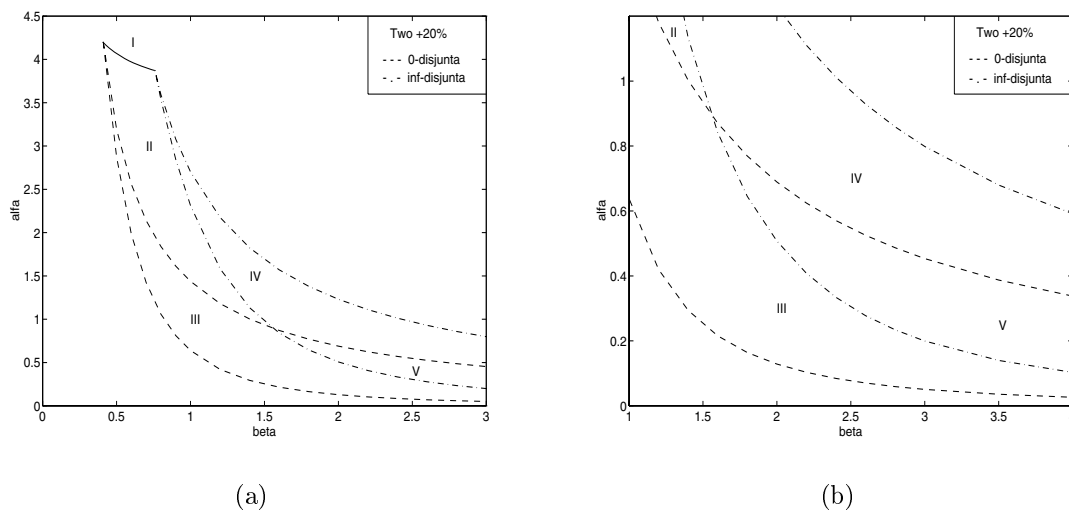


Figura 5.7: Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando se incrementa la temperatura de alimentación del medio de enfriamiento en 20% (a) y vista ampliada (b).

Puede apreciarse que el diagrama de multiplicidad global es muy sensible a cambios en la temperatura de alimentación del agua de enfriamiento. El diagrama obtenido al incrementar el agua de enfriamiento en 20% (figura 5.7) presenta una morfología diferente a la del diagrama original (figura 5.1). La pendiente de la curva de histéresis es completamente diferente y se aprecia una disminución en las escalas. Se observa que al incrementar la temperatura de alimentación del agua de enfriamiento se reduce la región de multiplicidades.

Puede apreciarse que si se emplearan los valores de α y β correspondientes al punto óptimo de operación (5.0 y 0.91, respectivamente), el nuevo estado estacionario perte-

nerería a la región de unicidad. Esto concuerda con lo encontrado en el diagrama de continuación empleando la temperatura de alimentación del agua de enfriamiento como parámetro de continuación (véase la curva 2 de la figura 4.12(a)). En ese diagrama se aprecia que si $T_{wo}=351.8$ °K (incremento del 20%) el sistema tendría únicamente una solución localizada en la región de altas temperaturas.

El emplear una temperatura de alimentación de agua de enfriamiento mayor a la temperatura de alimentación de monómero es ilógico en un sistema exotérmico. Evidentemente el medio de enfriamiento contribuiría a incrementar la temperatura de reactor en lugar de reducirla. Este diagrama nos sirve para comprender cómo se modifica el diagrama de multiplicidad global cuando se cambia algún parámetro de operación del sistema, en este caso la temperatura de alimentación del medio de enfriamiento.

5.3.2 Volumen contra calor de reacción a $T_{in} + 20\%$

En la figura 5.8 se puede apreciar el diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando la temperatura de la corriente de alimentación se incrementa en 20%.

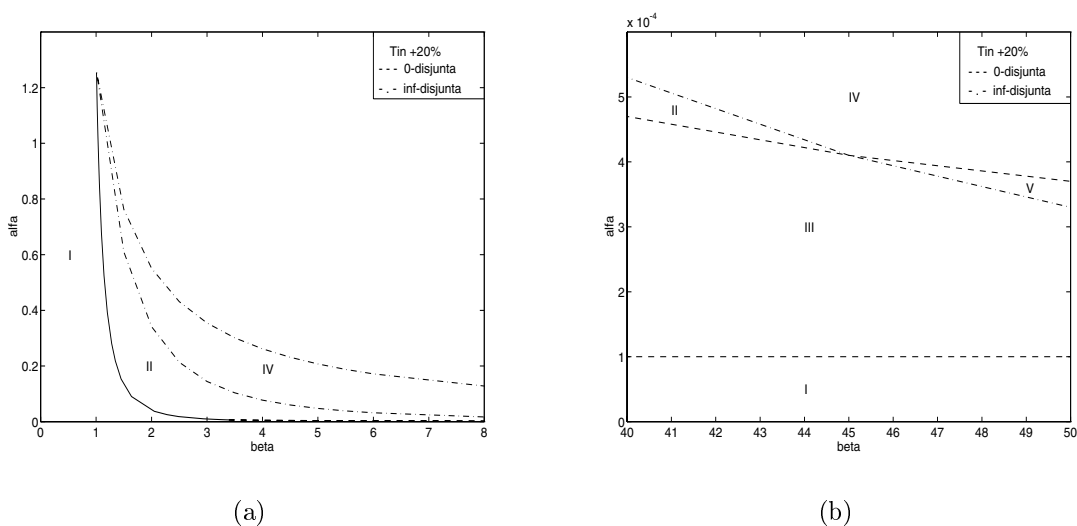


Figura 5.8: Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando se incrementa la temperatura de la corriente de alimentación en 20% (a) y vista ampliada (b).

El diagrama de multiplicidad global de α contra β se modifica al incrementar 20% el valor de la temperatura de la corriente de alimentación ($T_{in}=420$ °K). La forma es similar, pero se aprecia un cambio en las escalas de los diagramas. En este caso la zona de operación con multiplicidades es muy reducida, únicamente una pequeña parte de las regiones II y IV pertenecen a esta zona. Para que se presentaran las demás regiones (III y V) el valor del volumen del reactor tendría que ser menor al volumen del medio de enfriamiento (α debería ser muy pequeño). Si el sistema estuviese operando con los

valores de α y β en el punto óptimo, el nuevo estado estacionario pertenecería a la región de unicidad.

5.3.3 Volumen contra calor de reacción a $F + 20\%$

En la figura 5.9 se puede apreciar el diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando el flujo de alimentación de monómero se incrementa en 20%.

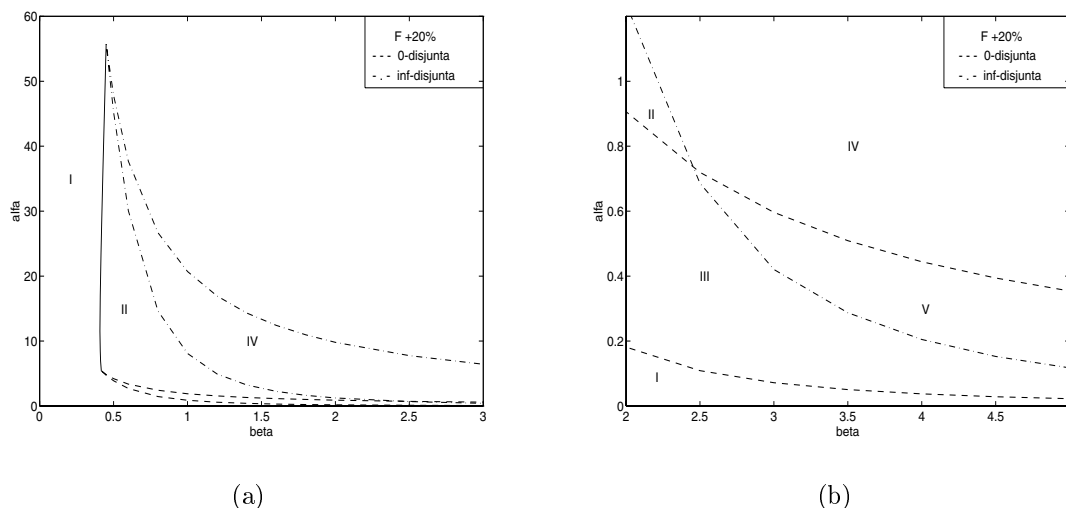


Figura 5.9: Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando se incrementa el flujo de alimentación de monómero en 20% (a) y vista ampliada (b).

El efecto del cambio de 20% en el flujo de alimentación de monómero sobre el diagrama de multiplicidad global de α contra β es muy limitado. La forma del diagrama es prácticamente igual y se detectaron únicamente pequeños cambios en las áreas de las distintas regiones y en sus puntos de cruce.

Si el sistema operara con los valores de α y β correspondientes al punto óptimo, el nuevo punto de operación se localizaría en la región II. Esto se comprueba con el diagrama de continuación cuando el parámetro de continuación es el flujo de alimentación de monómero (véase la curva 1 de la figura 4.17(a)), en donde se observa que si $F=1.2 \text{ kgmol/m}^3$, el sistema se encontraría operando en la región de histéresis.

5.3.4 Volumen contra calor de reacción a $F_I + 20\%$

En la figura 5.10 se puede apreciar el diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando el flujo de iniciador se incrementa en 20%.

El efecto del cambio de 20% en el flujo de iniciador en la alimentación sobre el diagrama de multiplicidad global de α contra β es prácticamente igual al encontrado en el caso

anterior (incremento de 20% en el flujo de alimentación de monómero). Los diagramas son muy similares. Nuevamente, si se operara con los valores de α y β en el punto óptimo y un flujo de alimentación de iniciador de 0.0038 kgmol/m^3 , el nuevo punto de operación estaría localizado en la región II. Esto se comprueba con los diagramas de bifurcación empleando al flujo de alimentación de iniciador como parámetro de continuación (véase la figura 4.2).

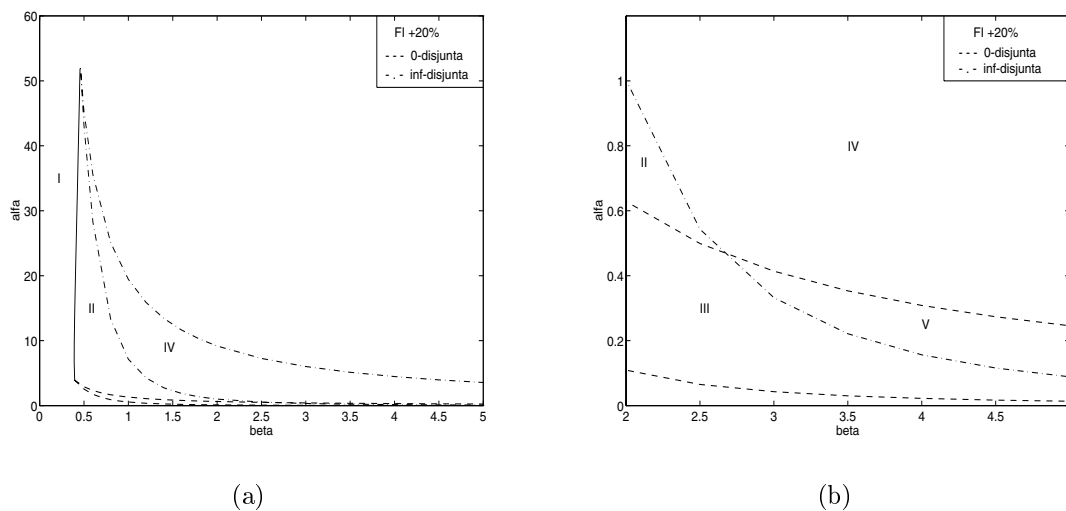


Figura 5.10: Diagrama de multiplicidad global del volumen adimensional (α) contra el calor de reacción adimensional (β) cuando se incrementa el flujo de iniciador en la alimentación en 20% (a) y vista ampliada (b).

5.4 Conclusiones

Los diagramas de multiplicidad global permiten detectar las distintas regiones de multiplicidad presentes en el espacio de parámetros $\varphi_1 - \varphi_2$ de un sistema dado y el tipo de diagramas de continuación que se tendrán en cada región. Estos diagramas son una herramienta importante para la operación y control de procesos ya que permiten detectar regiones de operación factibles y no factibles. Esto es relevante ya que permite detectar los puntos en los que se tienen ramas de soluciones desconectadas por limitantes físicas y en los que el sistema no podrá operar.

Por medio de estos diagramas se pueden determinar los cambios que deben realizarse en los parámetros φ_1 y/o φ_2 para cambiar de una región de operación a otra. Sin embargo, a diferencia de los diagramas de continuación o bifurcación, estos diagramas no proporcionan información sobre la estabilidad y/o el valor del estado estacionario resultante.

En este capítulo se obtuvieron varios diagramas de multiplicidad global para el reactor de polimerización a partir de cuales se comprendió el efecto de cambios en distintos parámetros de diseño y operación sobre la operación del sistema.

Con base en los resultados obtenidos en este capítulo se puede concluir que los diagramas de multiplicidad global proporcionan información *general* sobre la operación del

sistema. Lo más relevante es que permiten detectar las regiones en las que existen bifurcaciones 0-disjuntas y ∞ -disjuntas.

Los diagramas de multiplicidad global proporcionan información complementaria a la información que proporcionan los diagramas de continuación. Los diagramas de bifurcación proporcionan información más completa que la que proporcionan los diagramas de multiplicidad global. Adicionalmente, los diagramas de bifurcación se obtienen de una manera más directa y sencilla que los diagramas de multiplicidad global. En resumen, se considera que los diagramas de continuación son más valiosos que los de multiplicidad global y se recomienda su empleo para los análisis de conducta no lineal de sistemas.

Capítulo 6

Control Robusto del Proceso

En el presente capítulo se presenta el diseño del control robusto del reactor de polimerización en estudio y la evaluación de su desempeño.

6.1 Selección de la Ley de Control

Para sintetizar el controlador del proceso se usaron matrices de intervalos ya que es una técnica relativamente sencilla de usar y, bajo ciertas condiciones, asegura la estabilidad robusta del sistema [48]. En la forma que se emplea en este trabajo, el controlador corresponde a una ley de control proporcional (véase la sección 2.3).

Con base en los análisis de conducta no lineal realizados en los capítulos anteriores se puede esperar que el control del proceso no será sencillo. Adicionalmente, ya que el controlador no contempla acción integral, se pueden esperar desviaciones en relación al punto deseado de control.

6.2 Selección de Variables Controladas y Manipuladas

La selección de las variables a controlar y manipular se realizó con base en los resultados obtenidos del análisis de operabilidad realizado con anterioridad y de las restricciones de la aplicación de la teoría de matrices de intervalos.

Con respecto a las variables controladas, es necesario tener un sistema cuadrado para emplear los resultados de Wang y colaboradores [48]. Esto es, todos los estados del sistema deben ser variables controladas. El modelo matemático del problema en estudio consiste de seis ecuaciones diferenciales no lineales y seis estados ($C_m, C_I, T, D_o, D_1, T_j$). Sin embargo, como se mencionó con anterioridad, los estados D_o y D_1 únicamente aparecen en sus respectivos balances (expresiones 3.4 y 3.5) lo que hace que los demás estados del sistema sean independientes del cambio de cualquiera de éstos dos estados. Por tal motivo, para propósitos del control del proceso, se pueden emplear únicamente cuatro estados como variables controladas.

Con respecto a las variables manipuladas se seleccionaron aquellos parámetros del sistema que son entradas y cuya manipulación fuese sencilla. Se seleccionaron el flujo de ali-

mentación de monómero (F), flujo de alimentación de iniciador (F_I), flujo de alimentación del medio de enfriamiento (F_{cw}) y la temperatura de la corriente de alimentación (T_{in}).

Así se tiene definido el sistema a controlar (véase la figura 6.1). Se controlarán cuatro estados (C_m, C_I, T, T_j) con la manipulación de cuatro variables (F, F_I, F_{cw}, T_{in}).

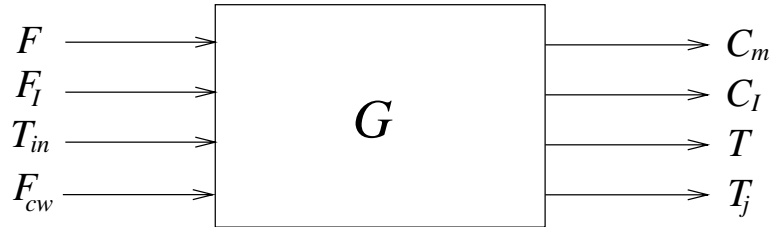


Figura 6.1: Variables controladas y manipuladas para el reactor de polimerización.

6.3 Diseño del Controlador

El procedimiento empleado para diseñar el controlador fue similar al expuesto en la sección 2.3.4. El objetivo es determinar el valor del compensador k (que en este caso es una matriz de 4×4) que satisfaga la condición 2.38 y al menos una de las condiciones 2.39-2.41. La planta nominal linealizada alrededor del punto de operación óptimo está definida por las matrices A y B :

$$A = \begin{bmatrix} -10.8 & -100.9 & -0.4 & 0.0 \\ 0.0 & -10.3 & 0.0 & 0.0 \\ 28.1 & 3357.8 & -5.1 & 8.3 \\ 0.0 & 0.0 & 17.1 & -25.1 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 5.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ -0.2 & 80.0 & 0.0 & 0.0 \\ -14.1 & 0.0 & 0.0 & 10.0 \\ 0.0 & 0.0 & -1989.3 & 0.0 \end{bmatrix}$$

Para generar el modelo se empleó una incertidumbre del $\pm 99\%$. Se tomó esta cifra ya que es el máximo cambio real que puede sufrir la planta central. Si se tomara una incertidumbre del 100% o mayor, la planta inferior sería nula o negativa. Es muy importante enfatizar que esta incertidumbre se aplica al modelo linealizado del sistema y por tanto no contempla directamente las no linealidades presentes en el modelo. Con esta incertidumbre se tienen las matrices A y B superiores e inferiores:

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} -0.11 & -1.01 & -0.00 & 0.00 \\ 0.00 & -0.10 & 0.00 & 0.00 \\ 0.28 & 33.58 & -0.05 & 0.08 \\ 0.00 & 0.00 & 0.17 & -0.25 \end{bmatrix} \quad \underline{B} = \begin{bmatrix} 0.05 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\ -0.00 & 0.80 & 0.00 & 0.00 \\ -0.14 & 0.00 & 0.00 & 0.10 \\ 0.00 & 0.00 & -19.89 & 0.00 \end{bmatrix}$$

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} -21.6 & -200.7 & -0.8 & 0.0 \\ 0.0 & -20.4 & 0.0 & 0.0 \\ 55.8 & 6681.9 & -10.1 & 16.5 \\ 0.0 & 0.0 & 34.1 & -49.9 \end{bmatrix} \quad \bar{B} = \begin{bmatrix} 10.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ -0.5 & 159.2 & 0.0 & 0.0 \\ -28.1 & 0.0 & 0.0 & 19.9 \\ 0.0 & 0.0 & -3958.7 & 0.0 \end{bmatrix}$$

Para sintetizar el controlador k , se empleó el módulo de optimización del programa `Matlab` [24] empleando cualquiera de los tres criterios de optimización 2.51, 2.52 ó 2.53. El valor de la variable de decisión k obtenido fue:

$$k = \begin{bmatrix} -1.6441 & 7.1343 & -0.1278 & 0.0064 \\ 0.8075 & -0.0882 & 40.0860 & 0.0052 \\ 0.0000 & 0.0002 & 0.0177 & -0.0030 \\ -5.0239 & -5.0113 & -1.5832 & -0.9910 \end{bmatrix}$$

Para este valor de k , se cumple la condición 2.38 siendo negativos todos los eigenvalores de la matriz \hat{A} resultante:

$$\lambda_i(\hat{A}) = \begin{bmatrix} -19.1072 \\ -19.1072 \\ -19.1073 \\ -19.1074 \end{bmatrix}$$

La constante c adquiere entonces un valor de 19.11, por lo que se cumple la condición 2.41 (aunqu no se cumplen las condiciones 2.39 y 2.40):

$$\begin{aligned} i) \quad n^2 \bar{\sigma}(He) &= 35927.0 \not< 19.1 \\ ii) \quad \sum_{i,j=1}^n \bar{\sigma}(H_{ij}) &= 3334.0 \not< 19.1 \\ iii) \quad \bar{\sigma}\left(\sum_{i,j=1}^n |H_{ij}|\right) &= 18.9 < 19.1 \end{aligned}$$

Con estos resultados se asegura que el sistema será robustamente estable a lazo cerrado aun con una incertidumbre global del $\pm 99\%$. No hay que olvidar que esa incertidumbre se refiere a la planta linealizada. Es importante enfatizar que esta incertidumbre implica que el controlador será capaz de rechazar cualquier cambio en cualquier parámetro del modelo que implique un cambio en las matrices A y/o B dentro del rango $\pm 99\%$. Así el % de variación real de algún parámetro que el controlador podrá rechazar, dependerá del parámetro en cuestión.

Se analizaron los problemas de seguimiento de señales y de regulación para la planta linealizada del problema en cuestión a lazo cerrado (véase la figura 6.2). Los resultados obtenidos demuestran que el controlador proporciona estabilidad robusta y estabilidad en el desempeño al sistema linealizado.

6.4 Evaluación del Controlador

En la sección anterior se evaluó el controlador suponiendo que la planta tiene una conducta lineal alrededor del punto óptimo de diseño. Con base en los estudios de multiplicidad del sistema realizados con anterioridad es claro que el problema en estudio es altamente no lineal. En esta sección se evaluó el desempeño del controlador por medio de simulaciones

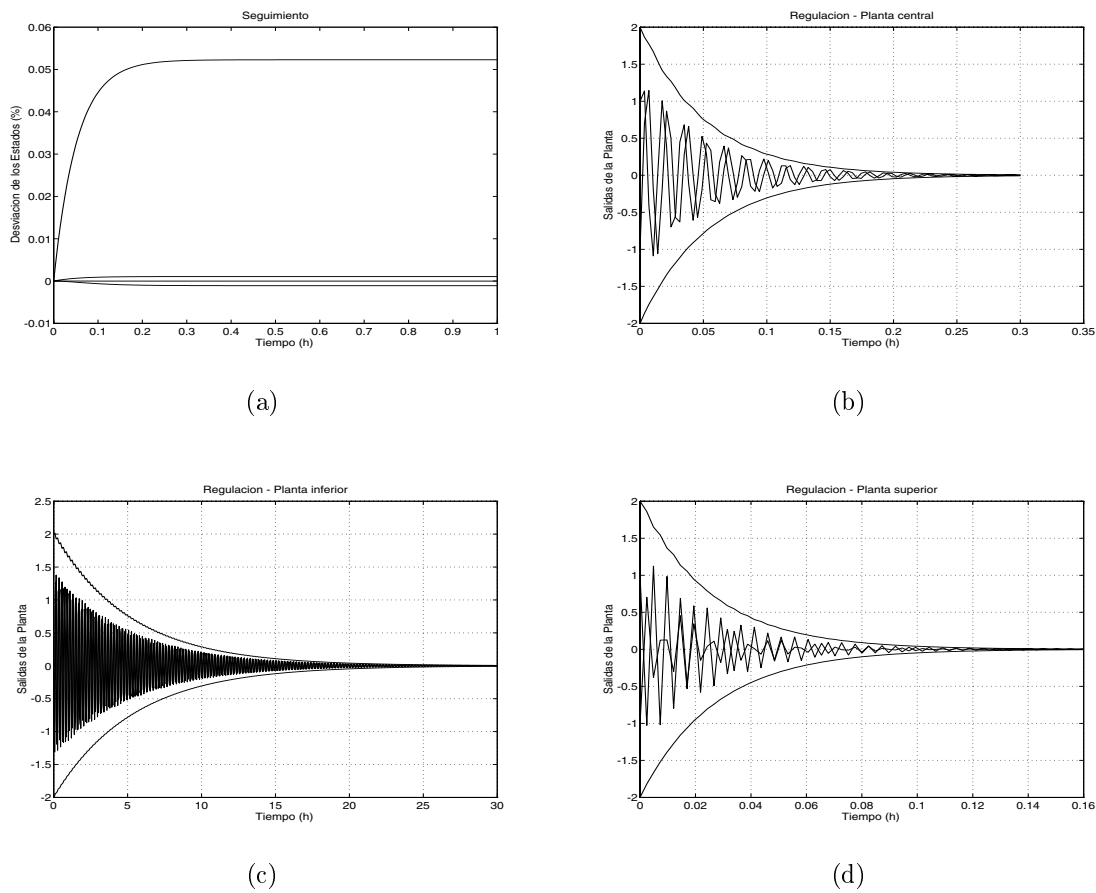


Figura 6.2: Problema de seguimiento de señales (a) y problema de regulación para la planta central (b), inferior (c) y superior (d) de la planta linealizada del reactor de polimerización.

dinámicas del sistema no lineal original. Las simulaciones se efectuaron empleando el simulador orientado a ecuaciones Speedup [42].

Se evaluó el desempeño del controlador en presencia de:

- Perturbaciones en las entradas
- Incertidumbres en la planta
- Incertidumbres en las variables manipuladas
- Retrasos en las mediciones de las concentraciones de monómero e iniciador
- Algunas combinaciones de los casos anteriores.

En la tabla 6.1 se muestra la simbología empleada en los diagramas de las simulaciones dinámicas a lazo cerrado realizadas. Los valores en los diagramas representan % de desviación relativa para cada variable o parámetro.

Tabla 6.1: Simbología empleada en los diagramas de simulaciones dinámicas.

Salidas		Entradas	
ΔC_m	ΔF	_____
ΔC_{Iin}	- - - - -	ΔF_I
ΔT	ΔF_{cw}	- - - - -
ΔT_j	- - - - -	ΔT_{in}
ΔPM	_____		

6.4.1 Perturbaciones en las entradas

Para analizar el desempeño del controlador ante perturbaciones en las entradas se modificaron las concentraciones de alimentación de monómero y de iniciador.

- **Perturbaciones en la concentración de alimentación de monómero**

En la figura 6.3 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando la concentración de alimentación de monómero aumenta 10%.

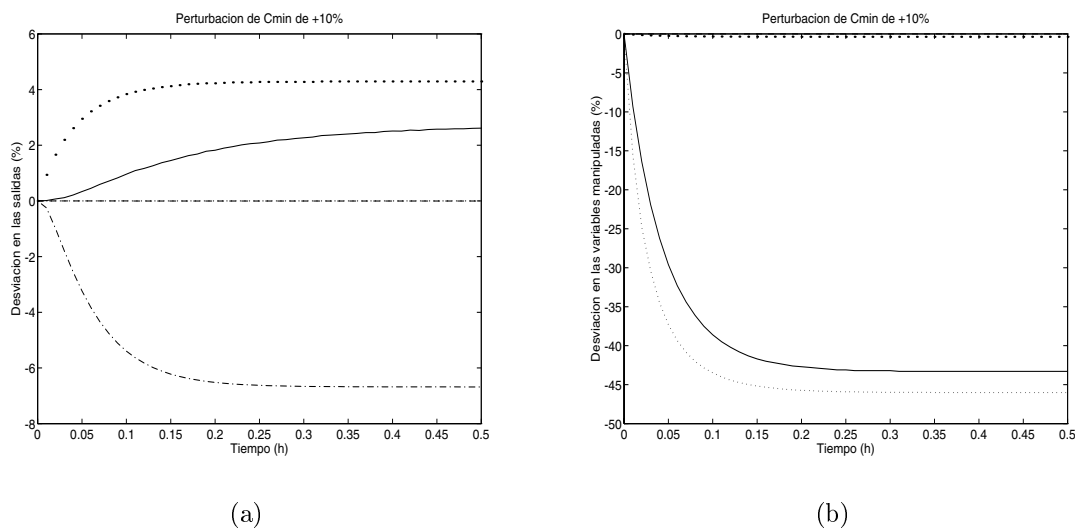


Figura 6.3: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{min} del 10%.

Puede apreciarse que la acción de control es bastante grande. Fue necesario reducir el flujo de alimentación de monómero 42% (ΔF -42%) y el flujo de alimentación de iniciador 46% (ΔF_I -46%). Con esta medida el sistema se estabiliza después de 0.5 horas, aunque el estado estacionario difiere del óptimo. Las mayores desviaciones se presentan en los valores de las concentraciones en el estado estacionario (ΔC_m +4% y ΔC_I -6%), mientras que el peso molecular promedio presenta una desviación pequeña (ΔPM +2%).

Las temperaturas del reactor y del medio de enfriamiento se mantienen en los valores correspondientes al punto óptimo.

Es importante notar que el valor nominal del flujo de alimentación de iniciador es muy pequeño ($0.0032 \text{ m}^3/\text{h}$), por lo que cualquier cambio en esta variable manipulada implica una desviación muy grande con respecto al valor nominal. Adicionalmente, la máxima reducción de cualquiera de los flujos manipulados es 100%, ya que no pueden tomar valores negativos (restricción física). Esto implica, físicamente, que la válvula se cierra por completo.

En la figura 6.4 se muestra la simulación a lazo cerrado cuando la concentración de alimentación de monómero disminuye 10%. En este caso puede apreciarse que la acción de control, como era de esperarse, fue en la dirección opuesta ($\Delta F +65\%$ y $\Delta F_I +35\%$). Se estabiliza el sistema en un menor tiempo (al cabo de 0.25 horas) y tanto las temperaturas como el peso molecular promedio se mantienen en los valores del estado estacionario óptimo. Sin embargo las desviaciones en las concentraciones de monómero e iniciador son mayores que en el caso anterior ($\Delta C_m -7\%$ y $\Delta C_I -17\%$).

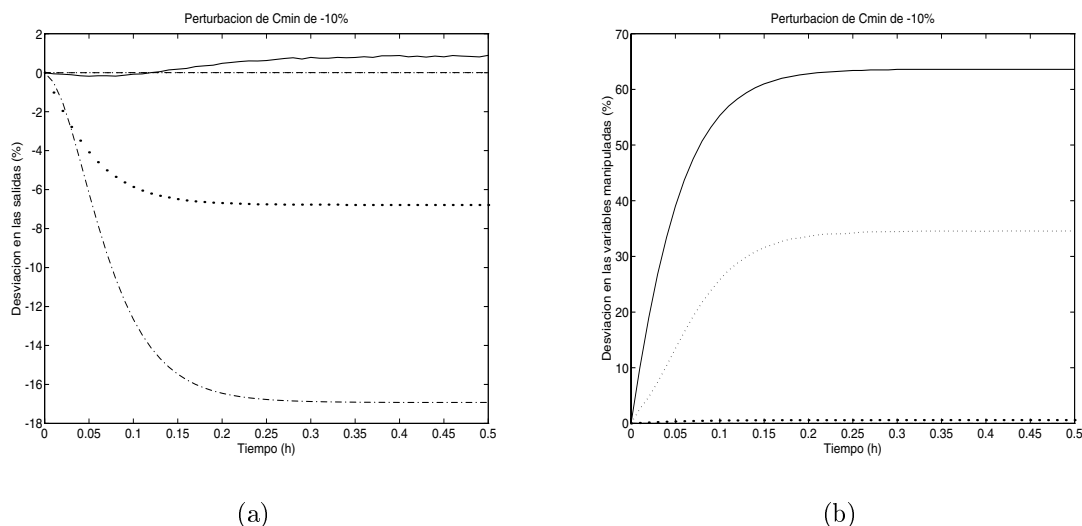


Figura 6.4: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{min} del -10%.

Puede apreciarse en ambos casos que las desviaciones son pequeñas y, sobre todo, que el peso molecular promedio del polímero se mantuvo prácticamente en el valor deseado (valor en el punto óptimo). Esto se puede atribuir a que la temperatura del reactor se mantuvo prácticamente constante. Recordemos que el peso molecular promedio es la relación de dos estados y del modelo matemático del sistema puede apreciarse que los estados D_o y D_1 tienen una dependencia mayor de la temperatura que de las concentraciones.

• **Perturbaciones en la concentración de alimentación de iniciador**

En las figuras 6.5 y 6.6 se muestran las simulaciones dinámicas a lazo cerrado cuando la concentración de alimentación de iniciador se modifica en +10% y -10% respectivamente.

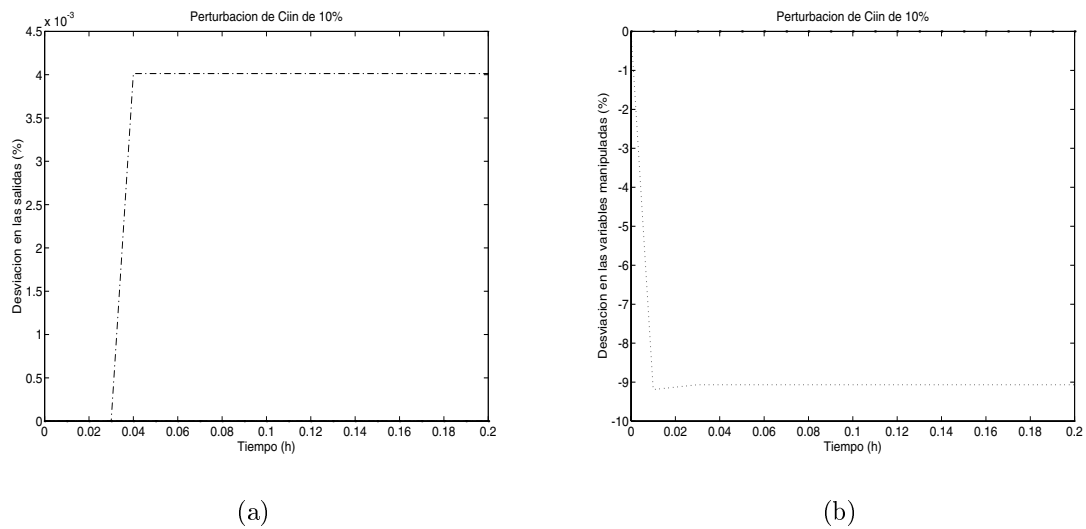


Figura 6.5: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{Iin} del 10%.

En ambos casos puede notarse que el controlador es capaz de rechazar perturbaciones en la concentración de alimentación de iniciador, manteniendo a todos los estados del sistema prácticamente en el punto de operación óptimo. En los dos casos la acción de control fue pequeña (ΔF_I -9% y +11% respectivamente) y prácticamente de la misma magnitud que la perturbación pero con signo opuesto.

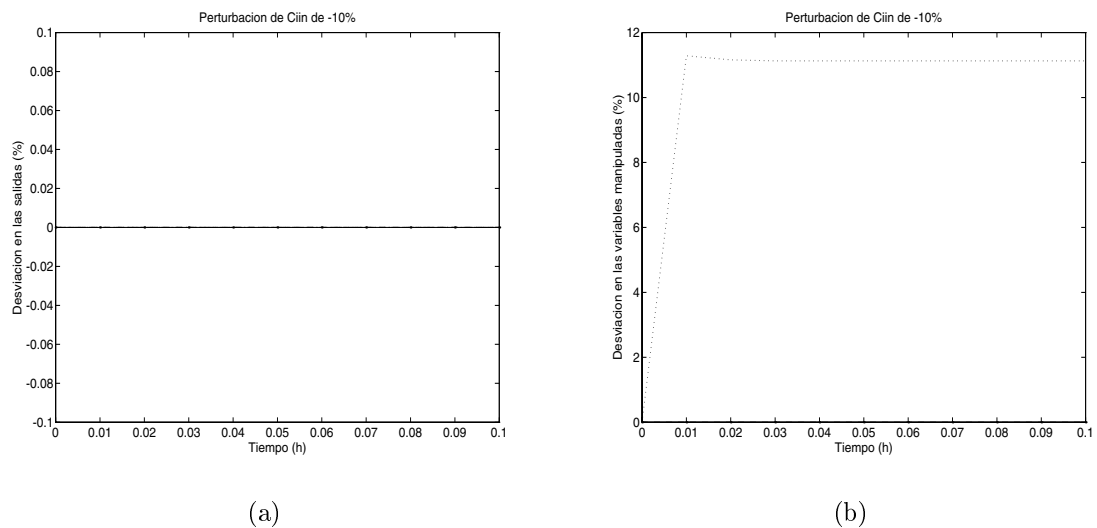


Figura 6.6: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{Iin} del -10%.

Estos resultados son los esperados. Del modelo matemático del sistema puede apreciarse que el parámetro C_{Iin} aparece únicamente en la expresión de la concentración

de iniciador (expresión 3.2) y es directamente proporcional al flujo de alimentación de iniciador. Por tanto, si la concentración de alimentación de iniciador aumenta, el flujo de alimentación de iniciador debe disminuir en la misma magnitud para contrarrestar la perturbación.

6.4.2 Incertidumbres en la planta

Para analizar el desempeño del controlador ante incertidumbres en la planta se modificaron algunos parámetros de diseño del proceso.

- **Incertidumbres en la energía de activación de la reacción de propagación**

En la figura 6.7 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando la energía de activación de la reacción de propagación aumenta 0.3%. Puede apreciarse que la acción de control es drástica y podría provocar problemas de saturación, aun cuando la incertidumbre es muy pequeña. El flujo de iniciador aumenta 190% en 0.02 horas. El sistema se estabiliza con un flujo de iniciador 4% mayor al nominal, aunque hay pequeñas desviaciones con respecto al punto óptimo para el peso molecular promedio (-2.5%) y la concentración de iniciador (+4%).

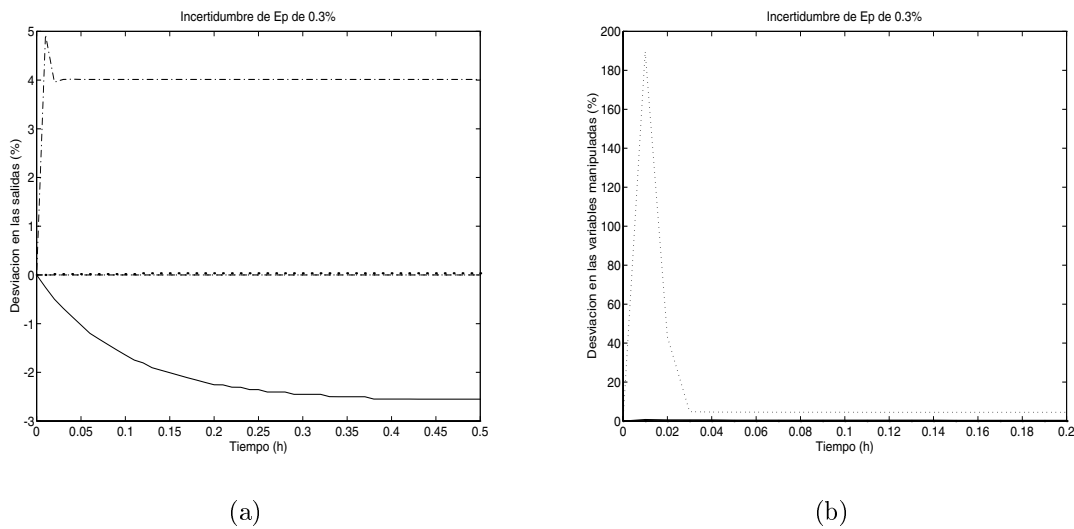


Figura 6.7: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de E_p del 0.3%.

En la figura 6.8 se muestra la simulación a lazo cerrado cuando la energía de activación de la reacción de propagación disminuye 0.3%. En este diagrama se observa que la acción de control fue en el sentido opuesto que el caso anterior y un poco menor en magnitud (ΔF_I -100%). En este caso también se estabiliza el sistema pero con un flujo de iniciador 4% menor que el nominal y se tienen pequeñas desviaciones en el peso molecular (+2.5%) y en la concentración de iniciador (-4%) con respecto al punto óptimo de operación.

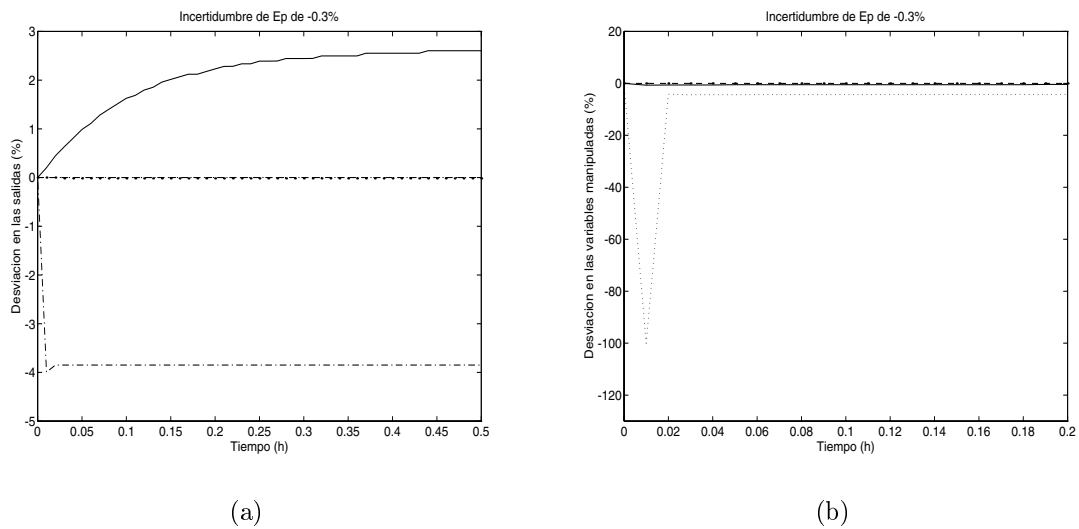


Figura 6.8: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de E_p del -0.3%.

Se puede apreciar que en ambos casos el compensador rechaza la incertidumbre en la energía de activación de la reacción de propagación, logrando que el sistema continúe operando prácticamente en el punto de operación óptimo. Es importante mencionar que si se consideran incertidumbres mayores (o menores) en la energía de activación de la reacción de propagación, el simulador *Speedup* no es capaz de resolver el sistema de ecuaciones debido a la presencia de discontinuidades fuertes. Por tal motivo no se puede afirmar si el controlador es capaz de rechazar perturbaciones mayores a las consideradas.

• **Incertidumbres en el coeficiente global de transferencia de calor**

En la figura 6.9 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando el coeficiente global de transferencia de calor aumenta 1% y en la figura 6.10 se muestra la simulación cuando el coeficiente disminuye 2%. Puede notarse que el sistema es muy sensible a esta incertidumbre, aun siendo tan pequeña. En el primer caso el controlador logra mantener al sistema prácticamente en el punto de operación óptimo. Se presentan desviaciones muy pequeñas para la concentración de iniciador (-1.75%) y para el peso molecular promedio (+0.4%). Sin embargo la acción de control necesaria fue muy grande; se requirió aumentar inicialmente 300% el flujo de iniciador y posteriormente se redujo a aproximadamente -4%. Esto podría indicar que se requiere un esquema de “anti-windup reset” para este caso con objeto de evitar saturación de las válvulas de control.

En el segundo caso (figura 6.10), aun cuando la incertidumbre tiene el doble de la magnitud del caso anterior, la acción de control necesaria es menor. En este caso el flujo de iniciador debe sufrir una reducción inicial del 100% (recordemos la restricción física) y posteriormente un aumento (+4%) para que el sistema continúe operando en el punto óptimo. Se detectaron desviaciones muy pequeñas en la concentración de iniciador (+4%) y en el peso molecular promedio (-0.6%).

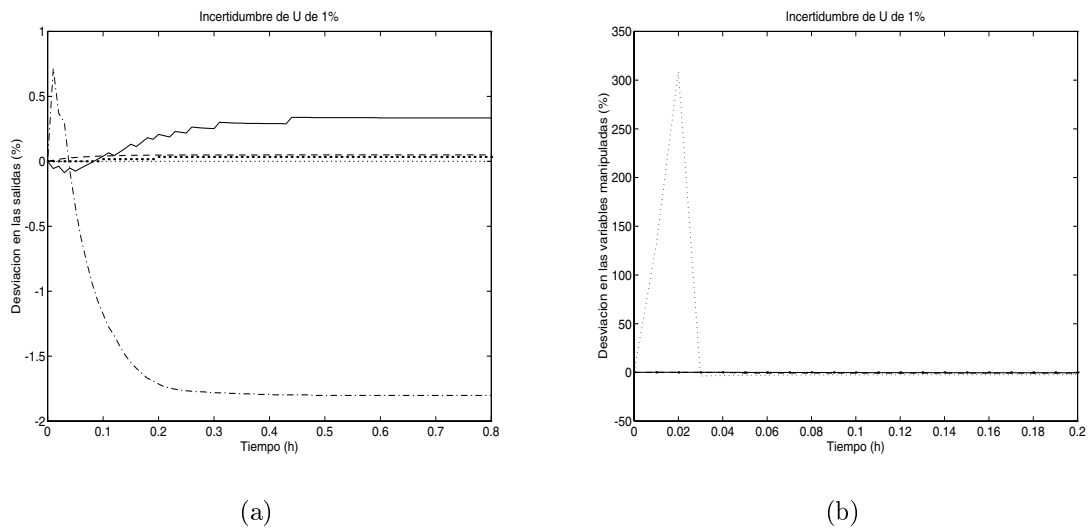


Figura 6.9: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de U del 1%.

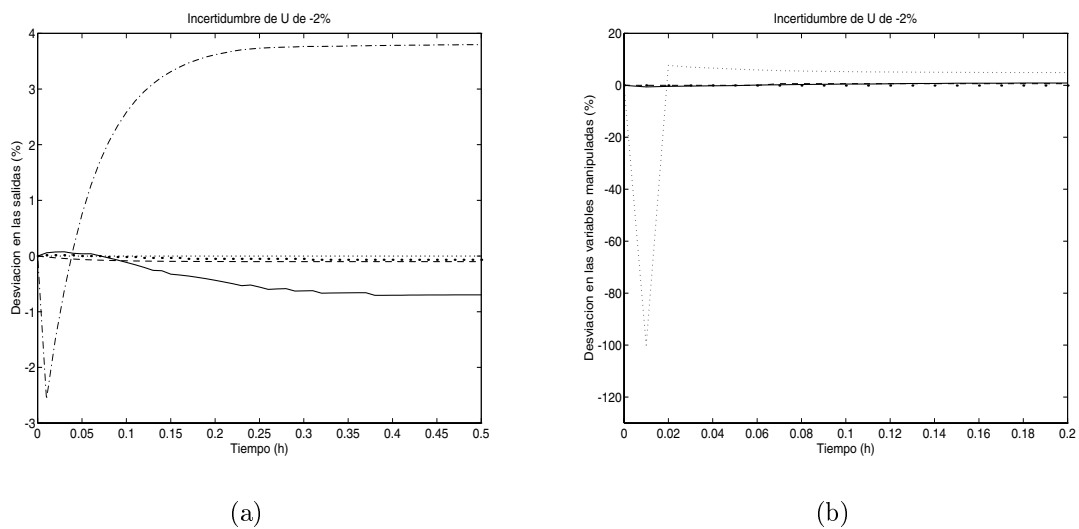


Figura 6.10: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de U del -2%.

• Incertidumbres en el calor de reacción

En la figura 6.11 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando el calor de reacción aumenta 2%. En este caso se estabiliza el sistema con un aumento del flujo de iniciador de casi 200% en los primeros minutos, reduciéndose radicalmente a un valor menor al correspondiente al punto óptimo (aproximadamente -5%). El valor de las salidas del sistema en el estado estacionario es prácticamente igual al del punto óptimo.

Se detectan pequeñas desviaciones en la concentración de iniciador (-4%) y en el peso molecular (+0.9%).

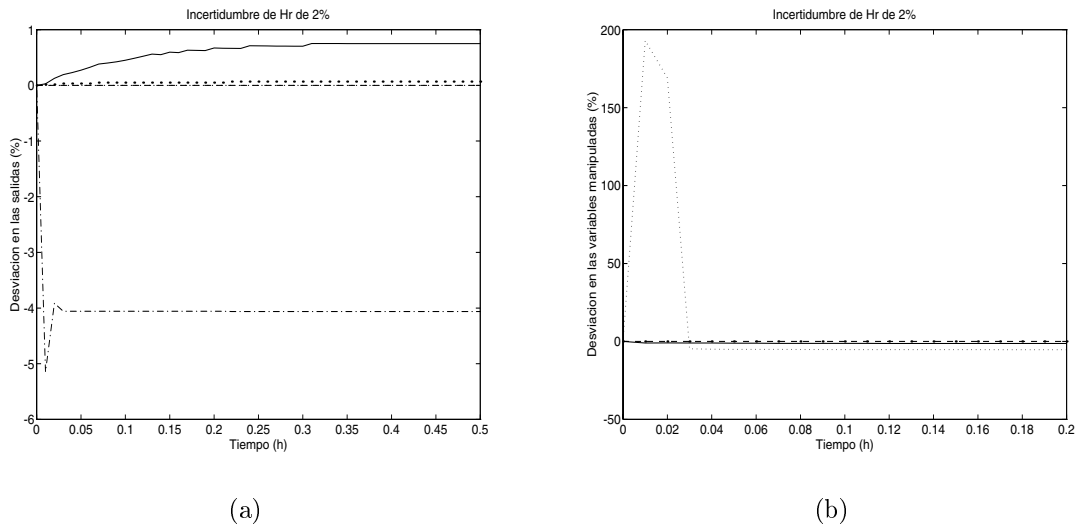


Figura 6.11: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de ΔH del 2%.

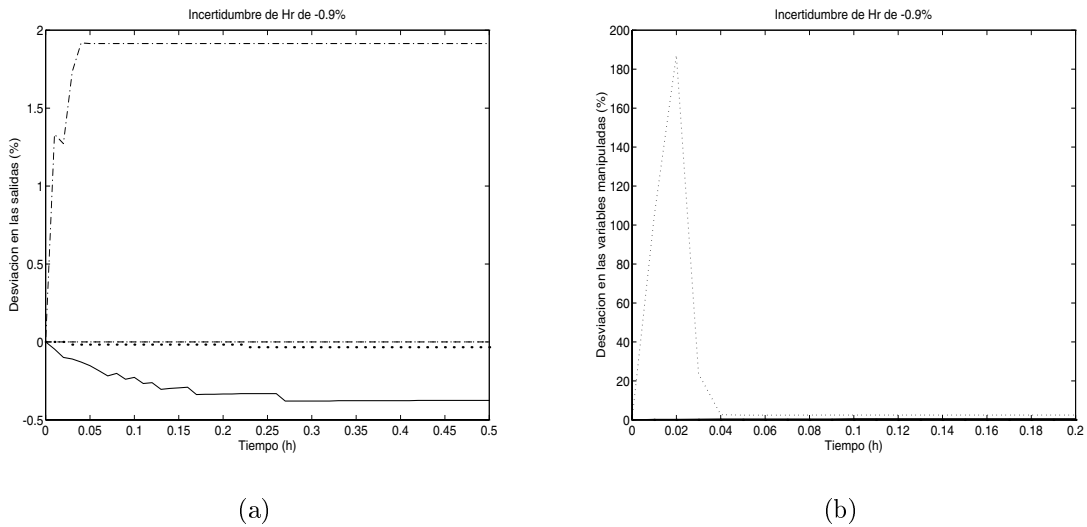


Figura 6.12: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de ΔH del -0.9%.

En la simulación del sistema a lazo cerrado cuando el calor de reacción disminuye 0.9% (figura 6.12) se aprecia una situación similar al caso anterior. En los primeros minutos el flujo de iniciador aumenta 190% y radicalmente se reduce a un valor cercano al valor nominal (+5%). Con esta acción de control se estabiliza el sistema prácticamente

en el punto óptimo. Se aprecian desviaciones pequeñas en la concentración de iniciador (+1.9%) y en el peso molecular promedio (-0.4%).

En ambos casos puede apreciarse que aun cuando las incertidumbres consideradas son pequeñas, el sistema es muy sensible a cambios en el calor de reacción.

• Incertidumbres en el calor específico de la mezcla

En la figura 6.13 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando el calor específico de la mezcla aumenta 10% y en la figura 6.14 se muestra la simulación cuando el calor específico disminuye 10%.

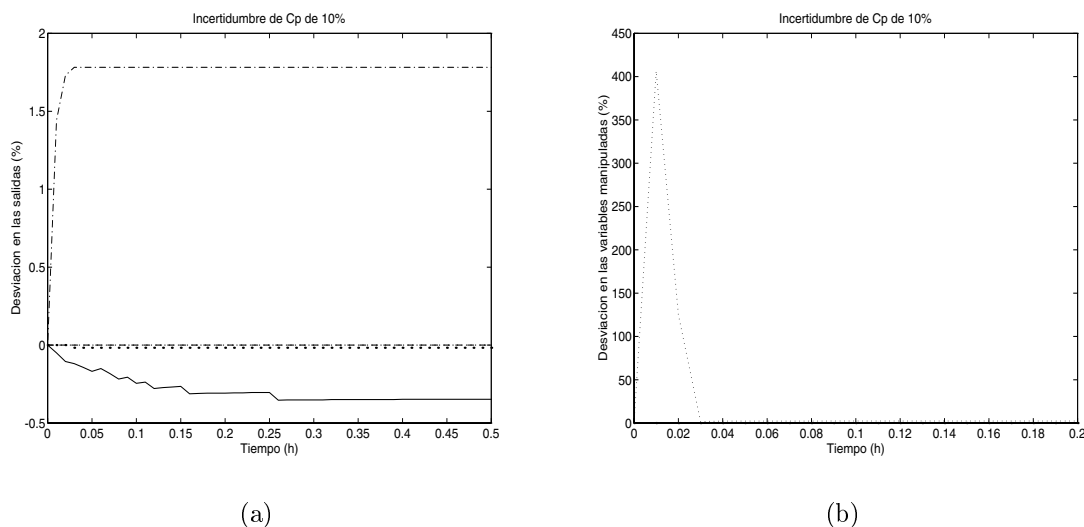


Figura 6.13: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de C_p del 10%.

Puede apreciarse que la acción de control para compensar el aumento del calor específico de la mezcla fue incrementar radicalmente el flujo de iniciador en los primeros minutos (+400%) y posteriormente regresarlo a su valor nominal. El estado estacionario una vez que se estabiliza el sistema, es prácticamente igual al punto de operación óptimo. La concentración del iniciador y el peso molecular promedio presentan pequeñas desviaciones con respecto al punto óptimo (+1.8% y -1.4% respectivamente).

Para el caso en el que disminuye el calor específico de la mezcla (figura 6.14), la acción de control consiste de la combinación de dos variables manipuladas. En los primeros minutos se reduce el flujo de iniciador (-85%). Posteriormente se incrementa hasta un valor menor al nominal (-2%) y simultáneamente se incrementa el flujo del medio de enfriamiento (+1%). El estado estacionario es prácticamente el punto óptimo; se detectan pequeñas desviaciones en la concentración de iniciador (-1.8%) y en el peso molecular promedio (+0.3%).

Es importante notar que, aunque en ambos casos la magnitud del cambio del calor de reacción fue el mismo, el sistema es más sensible al aumento del C_p que a la disminución.

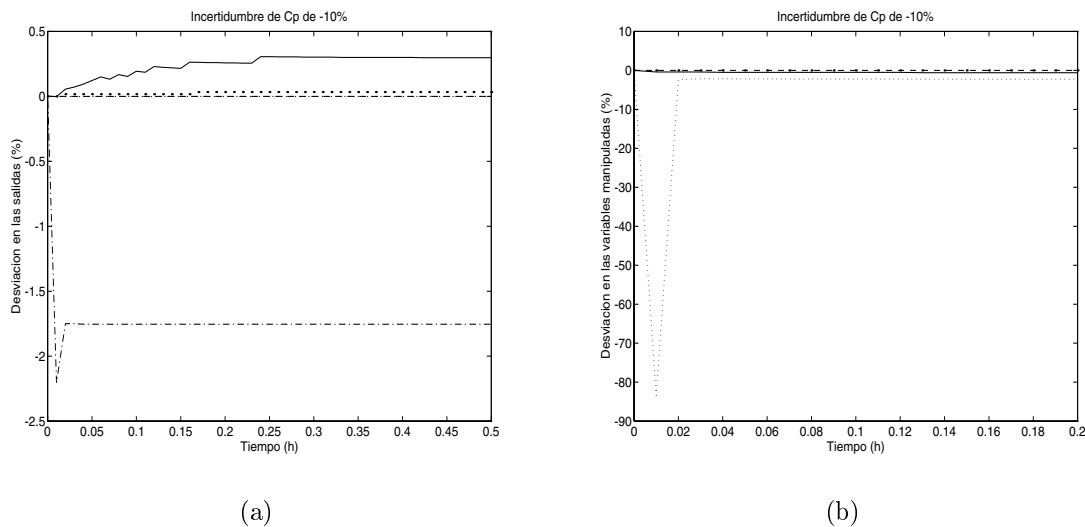


Figura 6.14: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de C_p del -10%.

Con base en los resultados de esta sección podemos concluir que el controlador es capaz de rechazar incertidumbres en el modelo, manteniendo al sistema prácticamente en el punto de operación óptimo. Es importante notar que para la mayoría de los casos estudiados, la acción de control inicial necesaria es extrema. Esto es, se requieren cambios iniciales muy grandes en las variables manipuladas para controlar el proceso, en particular el flujo de alimentación de iniciador.

6.4.3 Incertidumbres en las variables manipuladas

Para analizar el desempeño del controlador ante incertidumbres en las variables manipuladas se modificaron simultáneamente las variables manipuladas y alguna de las concentraciones de alimentación. Se consideró que la acción de control que realmente se aplica es 10% mayor a la acción que calcula el controlador.

• Incertidumbres en las variables manipuladas y perturbación en la concentración de alimentación de monómero

En la figura 6.15 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando la concentración de alimentación de monómero aumenta 10% y las cuatro variables manipuladas aumentan 10%. En esta figura puede apreciarse que las desviaciones son prácticamente iguales a las del caso en el que únicamente aumenta la concentración de alimentación de monómero (véase la figura 6.3). Se aprecia que las desviaciones en las salidas de la planta son un poco mayores, sin embargo el cambio es despreciable. Así, aun en presencia de incertidumbres en las variables manipuladas el compensador es capaz de controlar el sistema prácticamente en el punto de operación óptimo.

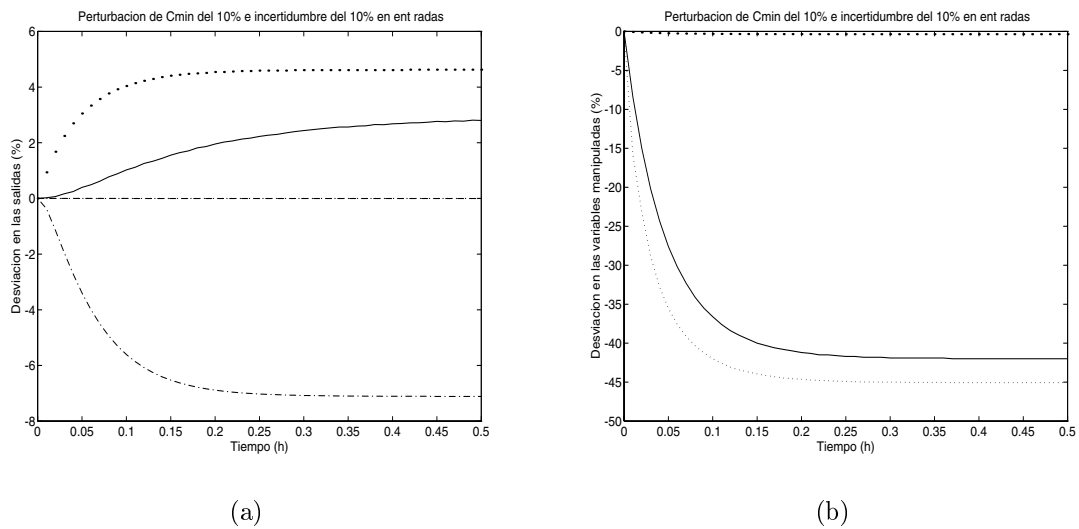


Figura 6.15: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{min} del 10% y una incertidumbre en las variables manipuladas del 10%.

• **Incertidumbres en las variables manipuladas y perturbación en la concentración de alimentación de iniciador**

En la figura 6.16 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando la concentración de alimentación de iniciador aumenta 10% y las cuatro variables manipuladas aumentan 10%.

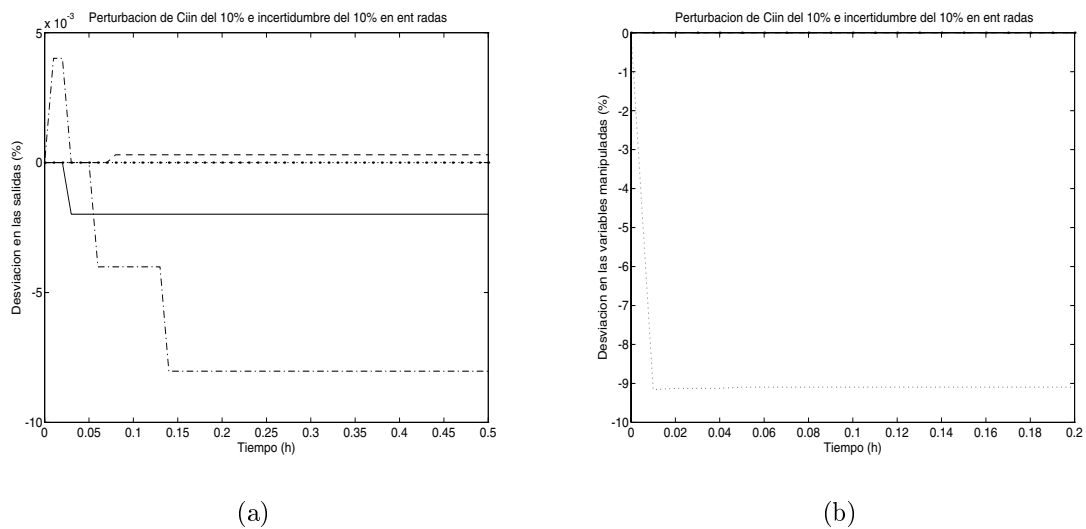


Figura 6.16: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{Iin} del 10% y una incertidumbre en las variables manipuladas del 10%.

Puede apreciarse que los resultados son prácticamente iguales al caso en el que únicamente aumenta la concentración de alimentación de iniciador (figura 6.5). El efecto del cambio en las variables manipuladas se refleja en la desviación de la concentración de iniciador. Se puede observar que en este caso la gráfica es escalonada. En este caso, como en el anterior, podemos afirmar que el controlador mantiene al sistema en el punto de operación óptimo, aun en presencia de incertidumbres en las variables manipuladas y perturbaciones en las entradas.

6.4.4 Retraso en las mediciones

Para analizar el efecto de retrasos en las mediciones se seleccionaron las concentraciones de monómero e iniciador ya que generalmente su medición tiene retrasos. Esto se debe a que las mediciones no son directas; se debe tomar una muestra y posteriormente realizar el análisis de composición. No se consideraron retrasos en las mediciones de la temperatura del reactor y del medio de enfriamiento ya que generalmente su medición es rápida (por medio de termostatos). Se analizó el efecto de retrasos en las mediciones simultáneamente con la presencia de perturbaciones o incertidumbres. Es importante recalcar que, aunque se está pidiendo mucho del controlador, generalmente los cambios en los procesos reales se llevan a cabo simultáneamente. Este análisis se presenta a continuación.

• **Perturbación en la concentración de alimentación de monómero y retraso en la medición de las concentraciones**

En la figura 6.17 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando la concentración de alimentación de monómero aumenta 10% y hay un retraso de 10 minutos en la medición de las concentraciones de monómero e iniciador en el reactor.

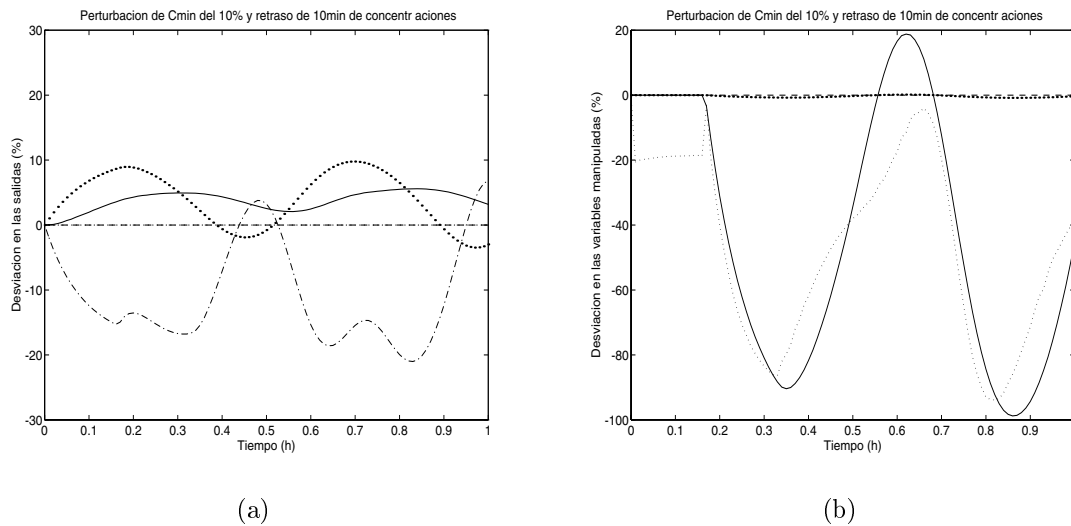


Figura 6.17: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{min} del 10% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.

Pueden apreciarse oscilaciones en las desviaciones de la concentración de monómero, de iniciador y en el peso molecular promedio en un rango de +10% a -15%. Las desviaciones son aproximadamente el doble de las del caso en el que únicamente existe perturbación en la concentración de alimentación de monómero (figura 6.3(a)).

Las acciones de control también son oscilatorias. En este caso se requiere reducir el flujo de monómero casi un 100%, mientras que en el caso en el que no hay retrasos en las mediciones (figura 6.3(a)) la máxima disminución fue del -46%.

Así, a pesar de incluir simultáneamente perturbaciones en una entrada y retrasos en las mediciones de las concentraciones, el compensador logra controlar el proceso manteniendo el peso molecular con una desviación máxima de 5%.

• **Perturbación en la concentración de alimentación de iniciador y retraso en la medición de las concentraciones**

En la figura 6.18 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando la concentración de alimentación de iniciador aumenta 10% y hay un retraso de 10 minutos en la medición de las concentraciones de monómero e iniciador en el reactor.

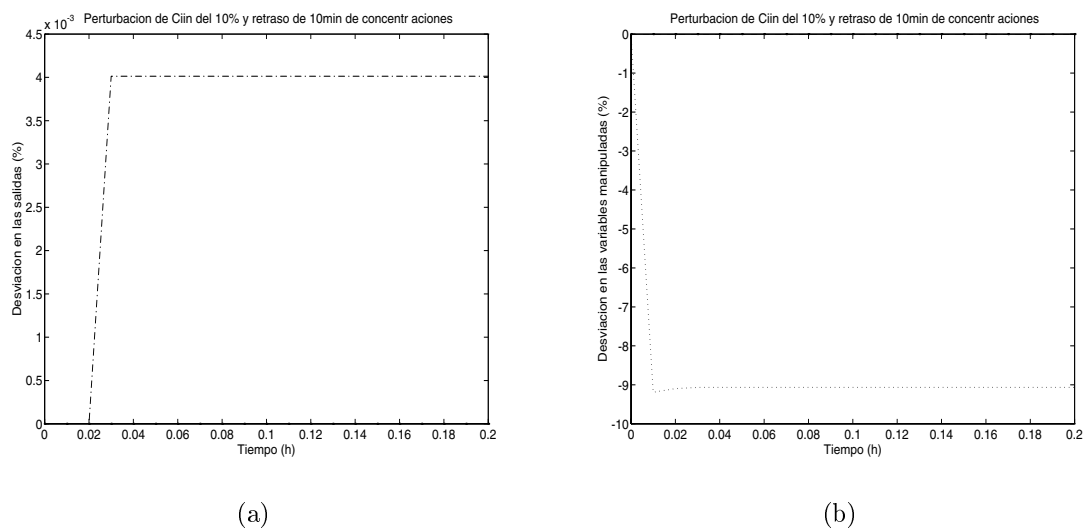


Figura 6.18: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una perturbación de C_{in} del 10% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.

En este caso no hay oscilaciones. Puede apreciarse que los resultados de la simulación son prácticamente iguales a los del caso en el que únicamente se contempla perturbación en la concentración de alimentación de iniciador (figura 6.5). En este caso el compensador también estabiliza al sistema aun en presencia de retrasos en las mediciones.

• **Incertidumbre en la energía de activación de la reacción de propagación y retraso en la medición de las concentraciones**

En la figura 6.19 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando la energía de activación de la reacción de propagación aumenta 0.3% y hay un retraso de 10 minutos en la medición de las concentraciones de monómero e iniciador en el reactor.

En este caso se aprecia una acción de control menos severa que en el caso en el que únicamente se considera la incertidumbre (figura 6.7(b)). En este caso la desviación inicial en el flujo de iniciador es de +130% (mientras que en el otro caso fue +190%) y se reduce a una desviación en este flujo de aproximadamente +4%.

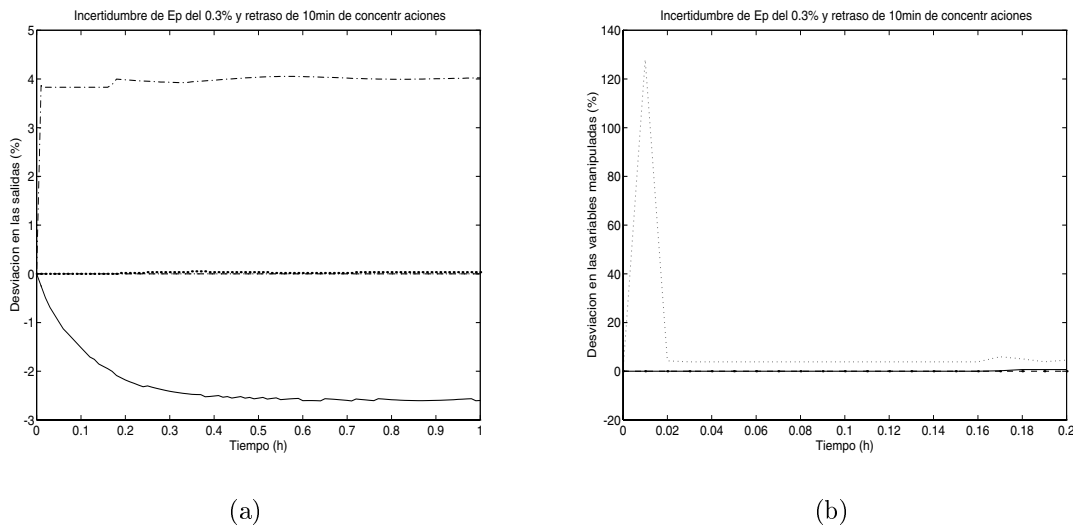


Figura 6.19: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de E_p del 0.3% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.

Con respecto a las salidas de la planta también hay diferencias entre las dos simulaciones. Cuando se consideran retrasos en las mediciones, las salidas presentan desviaciones mayores que en la simulación original (figura 6.7(a)). Sin embargo las desviaciones son pequeñas ($\Delta C_I +4\%$ y $\Delta PM -2.5\%$) y el compensador estabiliza el sistema.

• **Incertidumbre en el coeficiente global de transferencia de calor y retraso en la medición de las concentraciones**

En la figura 6.20 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando el coeficiente global de transferencia de calor aumenta 1% y hay un retraso de 10 minutos en la medición de las concentraciones de monómero e iniciador en el reactor.

En este caso también se observa una acción de control menos severa que en el caso en el que únicamente se considera incertidumbre en el coeficiente global de transferencia de calor (figura 6.9(b)). Sin embargo, las desviaciones en las salidas son prácticamente iguales en ambas simulaciones (figuras 6.9(a) y 6.20(a)). Con base en estos resultados

podemos concluir que el compensador es capaz de estabilizar al sistema aun en presencia de incertidumbre en el coeficiente global de transferencia de calor y retraso de 10 minutos en la medición de las concentraciones.

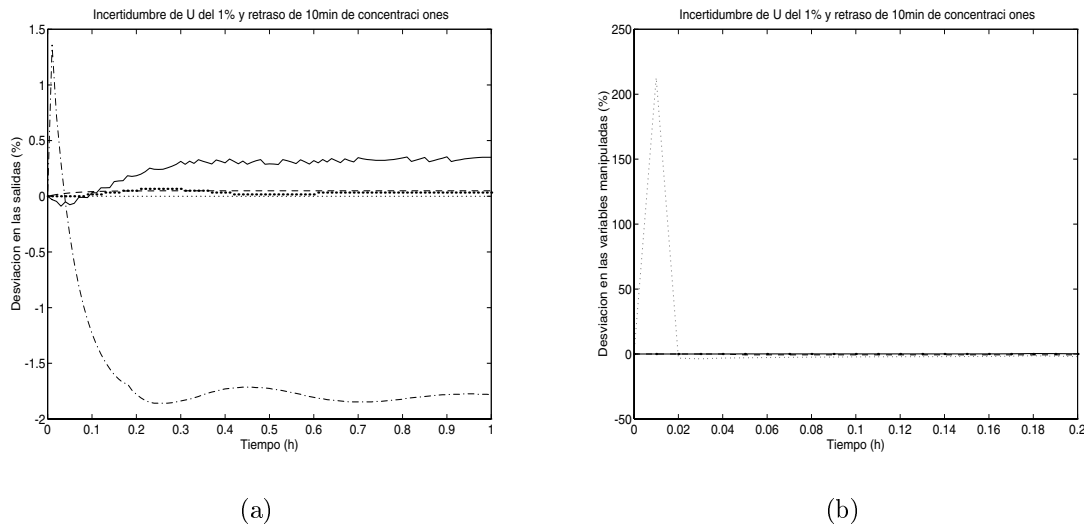


Figura 6.20: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de U del 1% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.

• Incertidumbre en el calor de reacción y retraso en la medición de las concentraciones

En la figura 6.21 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando el calor de reacción aumenta 2% y hay un retraso de 10 minutos en la medición de las concentraciones de monómero e iniciador en el reactor.

Puede apreciarse que la desviación en las salidas es prácticamente igual al caso en que únicamente se contempla incertidumbre en el calor de reacción (figura 6.11(a)). En este caso la acción de control es menos severa (-60%) que en el caso más simple (véase la figura 6.11(b)). En este caso también puede concluirse que el compensador es capaz de controlar el sistema aun en presencia de incertidumbre y retraso en las mediciones.

• Incertidumbre en el calor específico de la mezcla y retraso en la medición de las concentraciones

En la figura 6.22 se muestra la simulación dinámica del sistema a lazo cerrado cuando el calor específico de la mezcla aumenta 10% y hay un retraso de 10 minutos en la medición de las concentraciones de monómero e iniciador en el reactor.

En esta simulación puede apreciarse que la desviación en las salidas es prácticamente igual que en el caso en el que únicamente se considera incertidumbre en el calor específico (figura 6.13(a)). Al igual que en los casos anteriores, cuando se considera un retraso en las mediciones de las concentraciones se observa una acción de control menos severa. En

este caso se requiere que el flujo de iniciador se reduzca 55% mientras que en el caso que no considera retrasos (figura 6.13(b)) se requirió un aumento de 400%. Nuevamente se puede concluir que el compensador controla al sistema aun en presencia de incertidumbre y retrasos en las mediciones.

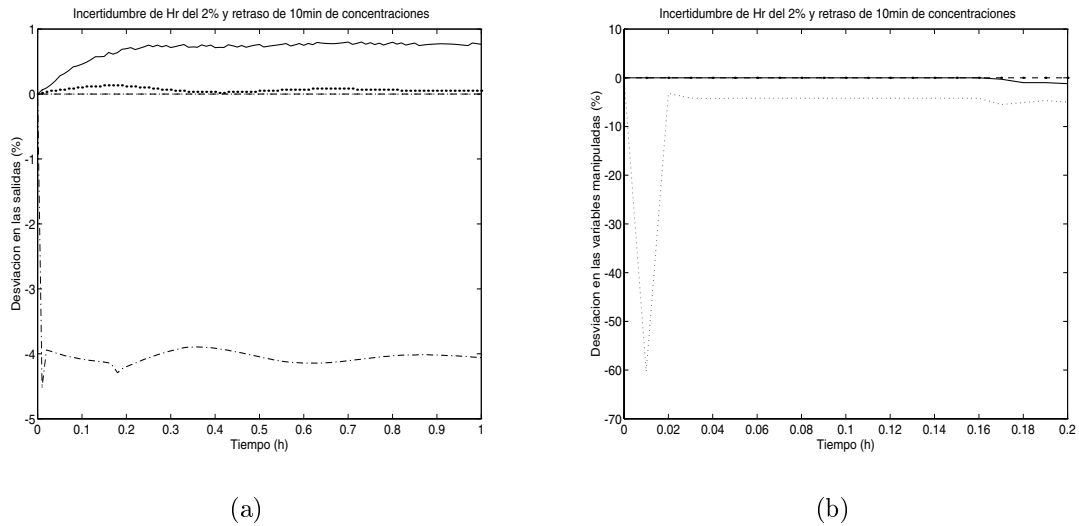


Figura 6.21: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de ΔH del 2% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.

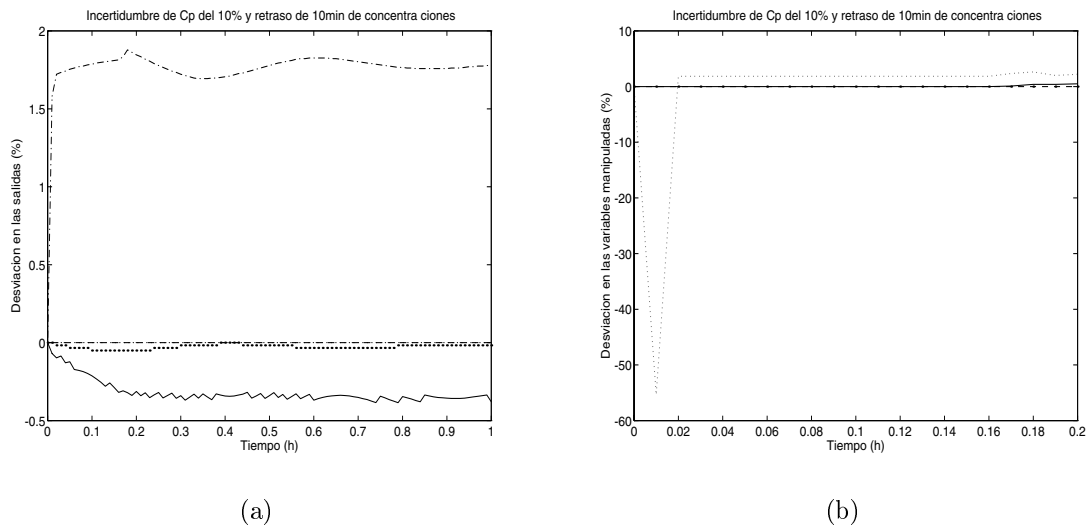


Figura 6.22: Desviaciones en las salidas (a) y en las variables manipuladas (b) del reactor de polimerización a lazo cerrado considerando una incertidumbre de C_p del 10% y un retraso de 10 min. en las concentraciones.

De forma intuitiva se espera que los retrasos en las mediciones afecten el control del proceso. Sin embargo, con los resultados de esta sección se puede concluir que la presencia de retrasos en las mediciones no afecta al sistema y en ocasiones lo beneficia. Estos resultados concuerdan con lo reportado por Psarris y Floudas [32]. Los autores afirman que en ocasiones la presencia de retrasos puede mejorar el desempeño del sistema a lazo cerrado.

6.5 Conclusiones

Con base en los diagramas de multiplicidad realizados en los capítulos anteriores se esperaba que el control del proceso no sería sencillo. Recordemos que el punto de operación óptimo es prácticamente un punto límite.

Se eligieron como variables manipuladas al flujo de alimentación de monómero, de iniciador y del medio de enfriamiento, y la temperatura de la corriente de alimentación para controlar el reactor.

Se empleó un modelo lineal para sintetizar el controlador por medio de los resultados reportados por Wang y colaboradores [48] sobre matrices de intervalos. Se consideró una incertidumbre del $\pm 99\%$ y se comprobó que el controlador obtenido asegura la estabilidad robusta del sistema lineal (véase la figura 6.2). Sin embargo, el problema en estudio es altamente no lineal por lo que no se podía asegurar que el controlador sintetizado para el sistema lineal asegurara estabilidad robusta en el sistema no lineal original a lazo cerrado. Adicionalmente, ya que se empleó sólo una ley de control proporcional, se podían esperar altas desviaciones en las salidas de la planta con respecto al punto de operación óptimo.

Se evaluó el desempeño del controlador mediante simulaciones dinámicas del sistema original a lazo cerrado ante perturbaciones en las entradas, incertidumbres en la planta, incertidumbres en las variables manipuladas y retrasos en las mediciones de concentraciones (véanse las figuras 6.3-6.22). Con base en estas simulaciones se puede afirmar que el controlador obtenido asegura estabilidad robusta, ya que en todos los casos, se estabiliza el sistema manteniendo el punto de operación prácticamente en el punto óptimo. Las desviaciones de las salidas se atribuyen a la carencia de una parte integral en el controlador. Sin embargo, se considera que las desviaciones no son muy grandes.

Por ejemplo, del diagrama de continuación de la temperatura empleando a la concentración de alimentación de monómero como parámetro de continuación (véase la figura 4.9(a)) se sabe que un aumento en esta concentración ocasionará que el sistema opere en una región de altas temperaturas. En la simulación del sistema a lazo cerrado cuando se considera una perturbación en la concentración de alimentación de monómero (figura 6.3) puede apreciarse que el controlador rechaza la perturbación ya que el sistema opera prácticamente en el punto óptimo.

Cabe mencionar que en ninguno de los casos analizados fue necesario modificar la temperatura de la corriente de alimentación. Puede esperarse que sea factible controlar el reactor únicamente con las otras tres variables manipuladas, siendo la más importante el flujo de alimentación de iniciador, ya que es la variable manipulada empleada con mayor frecuencia.

Así, se puede concluir que los resultados reportados por Wang y colaboradores [48]

sobre estabilidad de matrices de intervalos se pueden aplicar al control de este sistema no lineal, asegurando la estabilidad robusta del sistema bajo las condiciones anteriores.

Con respecto a la robustez en el desempeño es importante recalcar que no se abordó este aspecto de forma explícita en el diseño del controlador. Observando las salidas en las simulaciones a lazo cerrado realizadas puede notarse que las temperaturas del sistema prácticamente no sufrieron variación en los casos analizados, mientras que las concentraciones de monómero e iniciador presentaron en varias simulaciones desviaciones altas (mayores a 10%).

A diferencia de otros productos de la industria química, las moléculas de polímeros no pueden separarse con facilidad. Por tanto, el material se debe producir con las especificaciones requeridas desde la fase de reacción [8]. Sabemos que, aun cuando el peso molecular promedio no es un estado del sistema, es una de las características más importantes del polímero. En las simulaciones puede notarse que en prácticamente todos los casos, el peso molecular promedio tiene una variación no mayor a $\pm 2\%$. Por lo tanto, aun cuando no se consideró la robustez en el desempeño durante el diseño del controlador puede concluirse que el controlador tiene un desempeño aceptable. Probablemente el empleo de una acción integral en el controlador reduciría estas desviaciones.

Capítulo 7

Conclusiones Generales y Trabajo Futuro

7.1 Conclusiones Generales

Con base en los resultados obtenidos en este trabajo se pueden mencionar las siguientes conclusiones generales:

1. Es valioso comprender el comportamiento no lineal del sistema alrededor de la región de operación seleccionada para lograr un diseño adecuado del esquema de control a lazo cerrado. La teoría de singularidad, los diagramas de bifurcación y los diagramas de multiplicidad global son herramientas que permiten comprender el comportamiento no lineal de los sistemas.
2. La teoría de singularidad es una herramienta matemática que permite detectar analíticamente la posible existencia de multiplicidades de entrada, salida e islas en un sistema dado. Adicionalmente permite encontrar el máximo número de estados estacionarios locales que el sistema podría presentar. El uso de la teoría de singularidad tiene limitaciones. El análisis se realiza alrededor de un punto singular por lo que esta herramienta no es aplicable a sistemas dinámicos. Adicionalmente, para emplear la teoría de singularidad se requiere reducir el sistema de ecuaciones del modelo matemático a una ecuación algebraica lo cual no siempre es posible. En esos casos se puede emplear un procedimiento numérico para aplicar la teoría de singularidad [13].
3. Los sistemas de polimerización han adquirido cada vez mayor importancia a nivel industrial. Son sistemas complejos y cuentan con un gran número de parámetros de operación y diseño. Se han reportado, para algunos sistemas de polimerización, hasta cinco estados estacionarios [2, 12, 39], conducta oscilatoria, ciclos límite, bifurcaciones de Hopf supercríticas y subcríticas y hasta soluciones de periodo doble con ruta hacia el caos. En este estudio se encontraron hasta tres estados estacionarios para el sistema. Se comprobó que existen multiplicidades de entrada únicamente cuando el parámetro de continuación es el flujo de alimentación de monómero. Se

determinaron los puntos de nacimiento y muerte de islas, mismos que se comprobaron numéricamente. Adicionalmente se encontraron varios puntos de bifurcación de Hopf.

4. El punto óptimo de operación para el sistema, definido por Lewin y Bogle [23], es estable a lazo abierto. Sin embargo pequeños cambios impuestos sobre la operación pueden causar serios problemas de control ya que prácticamente es un punto límite. Por medio de los diagramas de bifurcación se detectó el sentido de los cambios en los parámetros que resultan en problemas operacionales, así como los cambios necesarios para evitar multiplicidades.
5. Los diagramas de multiplicidad global permiten detectar las regiones en las que existen bifurcaciones 0-disjuntas e ∞ -disjuntas. Por medio de los diagramas de multiplicidad global se detectaron las distintas regiones de multiplicidad presentes en el espacio de varios parámetros y el tipo de diagramas de continuación que se tendrían en cada región. Se determinaron los cambios que deben realizarse en distintos parámetros para cambiar de una región de operación a otra. Sin embargo, por medio de los diagramas de multiplicidad global no es posible determinar el valor y la estabilidad del estado estacionario resultante. Los diagramas de multiplicidad global proporcionan información complementaria a la que proporcionan los diagramas de continuación.
6. Los resultados sobre estabilidad de matrices de intervalos desarrollados por Wang y colaboradores [48] puede emplearse exitosamente para el control robusto de procesos no lineales en puntos cercanos a la región nominal de operación.
7. Se sintetizó el controlador empleando una ley de control proporcional, por medio de matrices de intervalos, considerando una incertidumbre del 99% en el modelo lineal. Se eligieron como variables manipuladas al flujo de alimentación de monómero, de iniciador y del medio de enfriamiento, y la temperatura de la corriente de alimentación para controlar el reactor. Puede ser factible controlar el reactor únicamente con los tres flujos, siendo el más importante el flujo de alimentación de iniciador, ya que resultó ser la variable manipulada empleada en mayor proporción en todos los casos analizados.
8. Se evaluó el desempeño del controlador mediante simulaciones dinámicas del sistema no lineal original a lazo cerrado ante perturbaciones en las entradas, incertidumbres en la planta, incertidumbres en las variables manipuladas y retrasos en las mediciones de concentraciones. El controlador obtenido asegura la estabilidad robusta en el sistema. Aun cuando no se consideró la robustez en el desempeño durante el diseño del controlador, puede concluirse que el controlador tiene un desempeño aceptable ya que en la mayoría de los casos analizados el peso molecular promedio del polímero tiene una variación no mayor a $\pm 2\%$. Las desviaciones presentes en algunas salidas, en relación al punto de operación deseado, se atribuyen a la carencia de una parte integral en el controlador.

9. El considerar retrasos en las mediciones de las concentraciones resultó benéfico para el sistema a lazo cerrado, mejorando su desempeño. Esto parece estar en la línea del trabajo de Psarris y Floudas quienes determinaron que, en algunos casos, los retrasos pueden ser benéficos para el desempeño de un sistema de control [32].

7.2 Trabajo Futuro

El posible trabajo futuro en las áreas de análisis de conducta no lineal y control de procesos para el sistema en estudio es amplia. A continuación se mencionan aquellos que se consideran más relevantes.

1. Incorporar en el modelo matemático la dependencia de los distintos parámetros a las concentraciones y/o temperatura. Con el modelo resultante, realizar análisis de conducta no lineal empleando la teoría de singularidad y los diagramas de bifurcación, y comparar las conductas no lineales de ambos modelos.
2. Encontrar analíticamente el máximo número de estados estacionarios posibles para el sistema. Esto es, obtener el grado de la parcial de la función con respecto a la temperatura para la que ya no se cumpla la condición de multiplicidad.
3. Realizar análisis de bifurcación dinámica para el sistema.
4. Probar el desempeño del controlador manipulando únicamente al flujo de alimentación de monómero, flujo de alimentación de iniciador y flujo de alimentación del medio de enfriamiento. Esto es, no incluir la temperatura de la corriente de alimentación como variable manipulada.
5. Modificar las matrices de intervalos para controlar el sistema con menos estados. Esto es, realizar las modificaciones necesarias para que las variables controladas no sean necesariamente todas las salidas de la planta.
6. Sintetizar un nuevo controlador para el sistema empleando matrices de intervalos e incorporando acción integral en la ley de control. Comparar el desempeño de dicho controlador con el sintetizado en el presente trabajo o con el de algún otro controlador sintetizado con otra técnica. Adicionalmente debe buscarse incorporar robustez en el desempeño en la síntesis del controlador.
7. Aplicar la técnica de matrices de intervalos para controlar sistemas más complejos. Estos sistemas pueden ser sistemas de polimerización más complejos o sistemas de destilación reactiva.
8. Estudiar de qué forma cambios en la operación y/o diseño modifican la conducta dinámica de reactores de polimerización.

Apéndice A

Nomenclatura

A	=	Area de transferencia de calor, m^2
A_{fm}	=	Factor de Arrhenius para la reacción de transferencia de monómero, $m^3/(kgmol-h)$
A_I	=	Factor de Arrhenius para la reacción de iniciación, $1/h$
A_p	=	Factor de Arrhenius para la reacción de propagación, $m^3/(kgmol-h)$
A_{tc}	=	Factor de Arrhenius para la reacción de terminación por apareamiento, $m^3/(kgmol-h)$
A_{td}	=	Factor de Arrhenius para la reacción de terminación por desproporción, $m^3/(kgmol-h)$
C_I	=	Concentración de iniciador, $kgmol/m^3$
C_{Iin}	=	Concentración de iniciador en la alimentación, $kgmol/m^3$
C_m	=	Concentración de monómero, $kgmol/m^3$
C_{min}	=	Concentración de monómero en la alimentación, $kgmol/m^3$
C_p	=	Capacidad calorífica de la mezcla, $kJ/(kg-^oK)$
C_{pw}	=	Capacidad calorífica del medio de enfriamiento, $kJ/(kg-^oK)$
D_o	=	Concentración molar de las cadenas muertas de polímero, $kgmol/m^3$
D_1	=	Concentración másica de las cadenas muertas de polímero, kg/m^3
E_{fm}	=	Energía de activación para la reacción de transferencia de monómero, $kJ/kgmol$
E_I	=	Energía de activación para la reacción de iniciación, $kJ/kgmol$
E_p	=	Energía de activación para la reacción de propagación, $kJ/kgmol$
E_{tc}	=	Energía de activación para la reacción de terminación por apareamiento, $kJ/kgmol$
E_{td}	=	Energía de activación para la reacción de terminación por desproporción, $kJ/kgmol$
f^*	=	Eficiencia del iniciador
F	=	Flujo volumétrico de alimentación del monómero, m^3/h
F_I	=	Flujo volumétrico de alimentación del iniciador, m^3/h
F_{cw}	=	Flujo volumétrico de alimentación del medio de enfriamiento, m^3/h
M_m	=	Peso molecular del monómero, $kg/kgmol$
PM	=	Peso molecular promedio del polímero, $Kg/Kgmol$
R	=	Constante de la ley de los gases, $kJ/(kgmol-^oK)$

T	=	Temperatura del reactor, °K
T_{in}	=	Temperatura de las corrientes de alimentación de monómero e iniciador, °K
T_j	=	Temperatura del medio de enfriamiento, °K
T_{wo}	=	Temperatura de alimentación del medio de enfriamiento, °K
t	=	Tiempo, h
U	=	Coficiente global de transferencia de calor, kJ/(m ² -h-°K)
V	=	Volumen del reactor, m ³
V_o	=	Volumen del sistema de enfriamiento, m ³
X	=	Conversión de monómero, %

símbolos griegos

$-\Delta H$	=	Calor de reacción de propagación, kJ/kgmol
ρ	=	Densidad de la mezcla de reacción, kg/m ³
ρ_w	=	Densidad del medio de enfriamiento, kg/m ³

Apéndice B

Glosario de términos

La función que describe a un sistema en estado estacionario es $F(x, \varphi, \mathbf{p}) = \mathbf{0}$, donde x es el estado del sistema, φ es un parámetro del sistema y \mathbf{p} es un vector que contiene al resto de los parámetros del sistema.

- *Bifurcación de Hopf*: Punto en el que dos eigenvalores de la función, con parte real cero, cruzan el eje imaginario.
- *Caos*: Conducta dinámica oscilatoria con patrones irrepetibles, caracterizada por una dependencia del modelo del sistema con respecto a las condiciones iniciales.
- *Ciclo límite*: Trayectoria dinámica periódica.
- *Control robusto*: Control capaz de rechazar hasta la peor perturbación dentro de un conjunto previamente establecido.
- *Diagrama de Bifurcación*: Diagrama en el que se grafican los estados estacionarios de la función $F(x, \varphi) = 0$ para diferentes valores de φ dentro de cierto rango.
- *Diagrama de multiplicidad global*: Diagrama en el que se identifican las diferentes regiones de multiplicidad para diferentes valores de parámetros.
- *Efecto gel*: Autoaceleración durante la etapa de propagación de polimerización a altas conversiones donde la viscosidad es alta. Ocasiona una caída en la velocidad de reacción de la etapa de terminación debido a limitaciones a la transferencia de masa por difusión. También se conoce como efecto Trommsdorff.
- *Estabilidad de un estado estacionario*: Se determina mediante la evaluación de los eigenvalores de la función $F(x, \varphi) = 0$. Si la parte real de todos los eigenvalores es negativa, el estado estacionario será estable. Si alguna es positiva, el estado estacionario será inestable.
- *Estado estacionario*: Valores de los estados que satisfacen la ecuación $F(x, \varphi) = 0$.
- *Histéresis*: Fenómeno en el que la trayectoria de estados estacionarios del diagrama de bifurcación cambia radicalmente de sentido y se presenta un cambio de estabilidad. El diagrama se caracteriza por tener la forma de “S” y existen tres estados estacionarios.

- *Islas*: Condición en la que simultáneamente existen multiplicidades de entrada y de salida. También se conocen como soluciones aisladas.
- *Matriz característica*: Matriz de derivadas direccionales o derivadas de Lie.
- *Multiplicidad*: Condición en la que se presenta más de una solución para un mismo valor de la variable o de un parámetro.
- *Multiplicidad de entrada*: Condición en la que se presenta el mismo estado estacionario para varios valores de un parámetro.
- *Multiplicidad de salida*: Condición en la que se presentan varios estados estacionarios para un valor de un parámetro.
- *Período doble*: Fenómeno en el que, mediante el cambio lento de un parámetro en un punto con trayectoria dinámica periódica estable, se genera una oscilación estable con un período del doble de su precursor. La cascada de esas bifurcaciones es una ruta común al caos.
- *Perturbaciones*: Parámetros que cambian de valor en el sistema y no son controlables.
- *Polimerización vía radicales libres*: Mecanismo de reacción constituido por las etapas de iniciación, propagación, transferencia de monómero, terminación por desproporción y terminación por apareamiento.
- *Teoría de singularidad*: Teoría que proporciona un marco teórico para determinar multiplicidades y los diagramas de bifurcación locales del sistema bajo consideración.
- *Variables controladas*: Variables que se controlan en un sistema. Puede ser uno o todos los estados o salidas de la planta.
- *Variables manipuladas*: Parámetros con los que se controla un sistema. Puede ser una o varias de las entradas a la planta.

Bibliografía

1. Alvarez, J., Suárez, R., Sánchez, A. (1990). Nonlinear Decoupling Control of Free-radical Polymerization Continuous Stirred Tank Reactors. *Chem. Eng. Sci.* **45**, 11, 3341-3357.
2. Adebekun, A.K., Kwalik, K.M., Schork, F.J. (1989). Steady-state Multiplicity during Solution Polymerization of Methyl Methacrylate in a CSTR. *Chem. Eng. Sci.* **44**, 10, 2269-2281.
3. Aris, R. (1979). Chemical Reactors and some Bifurcation Phenomena. *Annals New York Academy of Sciences.* 314-331.
4. Balakotaiah, V., Luss, D. (1982). Structure of the Steady-state Solutions of Lumped-parameter Chemically Reacting Systems. *Chem. Eng. Sci.* **37**, 10, 1611-1623.
5. Balakotaiah, V., Luss, D. (1982). Exact Steady-state Multiplicity Criteria for Two Consecutive or Parallel Reactions in Lumped-parameter Systems. *Chem. Eng. Sci.* **37**, 3, 433-445.
6. Balakotaiah, V., Luss, D. (1984). Global Analysis of the Multiplicity Features of Multi-reaction Lumped-parameter Systems. *Chem. Eng. Sci.* **39**, 5, 865-881.
7. Bard, G. (1996). *XPPAUT. X-Windows Phase Plane plus AUTO*. Department of Mathematics, University of Pittsburgh.
8. Brooks, B.W. (1997). Why are Polymerization Reactors Special? *Ind. Eng. Chem. Res.* **36**, 1158-1162.
9. Congalidis, H.P., Richards, J.R., Ray, W.H. (1989). Feedforward and Feedback Control of a Solution Copolymerization Reactor. *AIChE J.* **35**, 6, 891-907.
10. Daoutidis, P., Soroush, M., Kravaris, C. (1990). Feedforward/Feedback Control of Multivariable Nonlinear Processes. *AIChE J.* **36**, 10, 1471-1484.
11. Farr, W.W., Aris, R. (1986). Yet who would have thought the old man to have so much blood in him? - Reflections on the Multiplicity of Steady States of the Stirred Tank Reactor. *Chem. Eng. Sci.* **41**, 6, 1385-1402.
12. Freitas Filho, I.P., Biscaia Jr, E.C., Pinto, J.C. (1994). Steady-state Multiplicity in Continuous Bulk Polymerization Reactors - A General Approach. *Chem. Eng. Sci.* **49**, 22, 3745-3755.

13. Gehrke, V., Marquardt, W. (1997). A Singularity Theory Approach to the Study of Reactive Distillation. *Comp. Chem. Eng.* **21**, S1001-S1006.
14. Golubitsky, M., Keyfitz, B.L. (1980). A Qualitative Study of the Steady-State Solutions for a Continuous Flow Stirred Tank Chemical Reactor. *SIAM J. Math. Anal.* **11**, 2, 316-339.
15. Golubitsky, M., Schaeffer, D.G. (1985). Singularities and Groups in Bifurcation Theory. *Springer-Verlag*. Vol. I.
16. Guckenheimer, J. (1986). Multiple Bifurcation Problems for Chemical Reactors. *Physica D.* **20**, 1-20.
17. Hamer, J.W., Akramov, T.A., Ray, W.H. (1981). The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors - II. Nonisothermal Solution Homopolymerization and Copolymerization in a CSTR. *Chem. Eng. Sci.* **36**, 12, 1897-1914.
18. Hidalgo, P.M., Brosilow, C.B. (1990). Nonlinear Model Predictive Control of Styrene Polymerization at Unstable Operating Points. *Comp. Chem. Eng.* **14**, 4, 481-494.
19. Jaisinghani, R., Ray, W.H. (1977). On the Dynamic Behaviour of a Class of Homogeneous Continuous Stirred Tank Polymerization Reactors. *Chem. Eng. Sci.* **32**, 811-825.
20. Kiparissides, C. (1996). Polymerization Reactor Modeling: Review of Recent Developments and Future Directions. *Chem. Eng. Sci.* **51**, 10, 1637-1659.
21. Koppel, L.B. (1982). Input multiplicities in Nonlinear, Multivariable Control Systems. *AIChE J.* **28**, 6, 935-945.
22. Kubicek, M., Marek, M. (1983). Computational Methods in Bifurcation Theory and Dissipative Structures. *Springer-Verlag*.
23. Lewin, D.R., Bogle, D. (1996). Controllability Analysis of an Industrial Polymerization Reactor. *Comp. Chem. Eng.* **20**, S871-S876.
24. The Mathworks Inc. *Optimization Toolbox v. 1.5.0*.
25. McAuley, K.B., Macdonald, D.A., McLellan, P.J. (1995). Effects of Operating Conditions on Stability of Gas-Phase Polyethylene Reactors. *AIChE J.* **41**, 4, 868-879.
26. Ogunnaike, B.A., Ray, W.H. (1994). Process Dynamics, Modeling, and Control. *Oxford University Press*.
27. Padilla, S., Alvarez, J. (1997). Control of Continuous Copolymerization Reactors. *AIChE J.* **44**, 2, 448-463.
28. Pinto, J.C., Ray, W.H. (1995). The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors - VII. Experimental Study of a Copolymerization Reactor. *Chem. Eng. Sci.* **50**, 4, 715-736.

29. Pinto, J.C., Ray, W.H. (1995). The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors - VIII. A Full Bifurcation Analysis of a Lab-scale Copolymerization Reactor. 1995. *Chem. Eng. Sci.* **50**, 6, 1041-1056.
30. Pinto, J.C. (1995). The Dynamic Behavior of Continuous Solution Polymerization Reactors - A Full Bifurcation Analysis of a Full Scale Copolymerization Reactor. *Chem. Eng. Sci.* **50**, 21, 3422-3475.
31. Pinto, J.C., Ray, W.H. (1996). The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors - IX. Effects of Inhibition. *Chem. Eng. Sci.* **51**, 1, 63-79.
32. Psarris, P., Floudas, C.A. (1990). Improving Dynamic Operability in MIMO Systems with Time Delays. *Chem. Eng. Sci.* **45**, 12, 3505-3524.
33. Rawlings, J.B., Ray, W.H. (1987). Stability of Continuous Emulsion Polymerization Reactors: A Detailed Model Analysis. *Chem. Eng. Sci.* **42**, 11, 2767-2777.
34. Ray, W.H. (1972). On the Mathematical Modelling of Polymerization Reactors. *J. Macromo. Sci.-Revs. Macromol. Chem.* **C8**, 1, 1-56.
35. Razón, L.F., Schmitz, R.A. (1987). Multiplicities and Instabilities in Chemically Reacting Systems - A Review. *Chem. Eng. Sci.* **42**, 5, 1005-1047.
36. Russo, L., Bequette, W. (1995). Impact of Process Design on the Multiplicity Behavior of a Jacketed Exothermic CSTR. *AIChE J.* **41**, 1, 135-147.
37. Russo, L., Bequette, W. (1996). Effect of Process Design on the Open-Loop Behavior of a Jacketed Exothermic CSTR. *Comp. Chem. Eng.* **20**, 4, 417-426.
38. Schmidt, A.D., Ray, W.H. (1981). The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors - I. Isothermal Solution Polymerization in a CSTR. *Chem. Eng. Sci.* **36**, 1401-1410.
39. Schmidt, A.D., Clinch, A.B., Ray, W.H. (1984). The Dynamic Behavior of Continuous Polymerization Reactors - III. An Experimental Study of Multiple Steady States in Solution Polymerization. *Chem. Eng. Sci.* **39**, 3, 419-432.
40. Skogestad, S., Postlethwaite, I. (1996). Multivariable Feedback Control. Analysis and Design. *John Wiley & Sons*.
41. Soroush, M., Kravaris, C. (1994). Nonlinear Control of a Polymerization CSTR with Singular Characteristic Matrix. *AIChE J.* **40**, 6, 980-990.
42. Speedup. Manual de usuario. (1995) *ASPENTEC v. 5.3*.
43. Teymour, F., Ray, W.H. (1989). The Dynamic Behavior of Continuous Solution Polymerization Reactors - IV. Dynamic Stability and Bifurcation Analysis of an Experimental Reactor. *Chem. Eng. Sci.* **44**, 9, 1967-1982.

44. Teymour, F., Ray, W.H. (1992). The Dynamic Behavior of Continuous Solution Polymerization Reactors - V. Experimental Investigation of Limit-cycle Behavior for Vinyl Acetate Polymerization. *Chem. Eng. Sci.* **47**, 15/16, 4121-4132.
45. Teymour, F., Ray, W.H. (1992). The Dynamic Behavior of Continuous Solution Polymerization Reactors - VI. Complex Dynamics in Full-scale Reactors. *Chem. Eng. Sci.* **47**, 15/16, 4133-4140.
46. Uppal, A., Ray, W.H., Poore, A.B. (1974). On the Dynamic Behavior of Continuous Stirred Tank Reactors. *Chem. Eng. Sci.* **29**, 967-985.
47. Van Heerden, C. (1953). Autothermic Processes: Properties and Reactor Design. *Ind. Eng. Chem.* **45**, 1242-1247.
48. Wang, S., Lin, S.B., Shieh, L.S. (1997). Several Simple Conditions for Hurwitz and Schur Stability of Interval Matrices. *Proceedings of the IASTED International Conference CONTROL'97*. 31-34.