

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON

FACULTAD DE INGENIERIA MECANICA Y ELECTRICA
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSTGRADO



MODELACION, CONTROL Y DIAGNOSTICO DE FALLAS
PARA UNA COLUMNA DE DESTILACION
MOLECULAR DE TRAYECTO CORTO

TESIS
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN INGENIERIA ELECTRICA

PRESENTA:
CARLOS MARTINEZ CHITTOY

MONTERREY, N. L.

AGOSTO 1996

TD

Z5853

.M2

FIME

1996

M37



1020119970



UANL

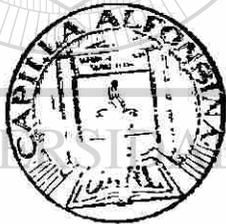
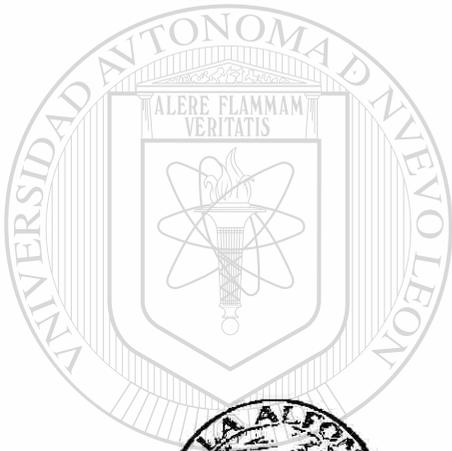
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

TD
Z5853
.M2
FIME
1996
M37

0119-29260



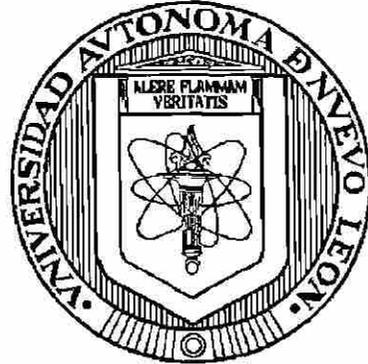
UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

FONDO TESIS

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEON
FACULTAD DE INGENIERIA MECANICA Y ELECTRICA
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSTGRADO



**MODELACION, CONTROL Y DIAGNOSTICO DE FALLAS PARA UNA
COLUMNA DE DESTILACION MOLECULAR DE TRAYECTO CORTO**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DOCTOR EN INGENIERIA ELECTRICA

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Presenta

CARLOS MARTINEZ CHITÓY

Monterrey, N.L.

Agosto, 1996

MODELACION, CONTROL Y DIAGNOSTICO DE FALLAS PARA UNA COLUMNA DE DESTILACION MOLECULAR DE TRAYECTO CORTO

Los miembros del Comité aprueban la Tesis
Doctoral de Carlos Martínez Chitoy

Dr. Jesús de León Morales
ASESOR

Dr. Joaquín Collado Moctezuma





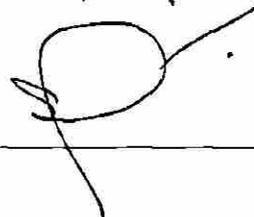
Dr. Rogelio Soto Rodríguez

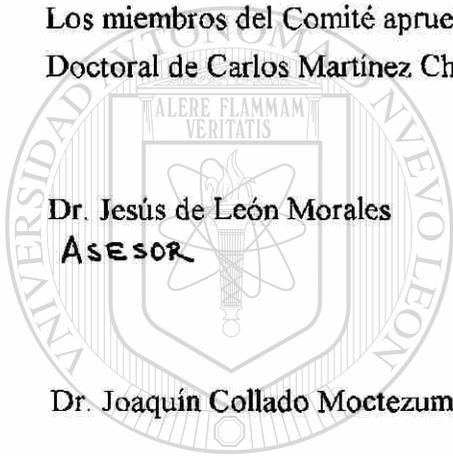


Dr. Oscar Leonel Chacón Mondragón



Dr. Salvador Acha Daza





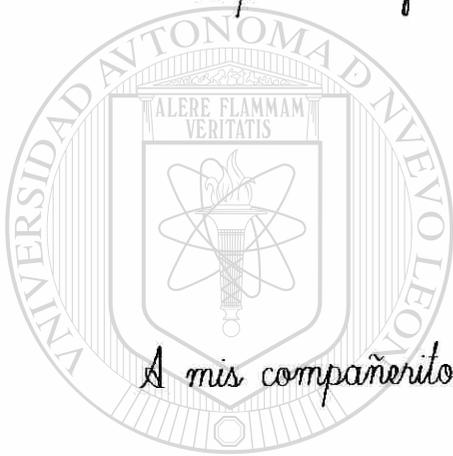
UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



"A pesar de que este Postgrado no lo hicieron nada sencillo..."

...Con orgullo de su influencia.



A mis compañeritos queridos... Carlos, Ricardo, Belinda y Dante

A mi compañera en la vida... Mercedes,

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer al Dr. **Jesús de León Morales**, director de esta tesis, por su asesoría y orientación proporcionados desde el inicio de la misma, sobre todo por su motivante interés en la consecución a buen término y extensión a futuro del presente trabajo.

Un agradecimiento muy especial al Dr. **Joaquín Collado Moctezuma**, profesor responsable de más del 40% de mi preparación en el programa doctoral. A mis sinodales del examen de grado: Dr. **Salvador Acha Daza**, Dr. **Oscar L. Chacón Mondragón**, y Dr. **Rodrigo Soto Rodríguez** por sus atinadas sugerencias previo a mi examen de grado y durante el mismo.

Doy gracias a la empresa **PYOSA, S.A.**, por procurarme con su equipo e información relativa al proceso de destilación molecular de trayecto corto, instalado en su planta de Unidad Químicos, proceso que fué objeto de estudio en mi tesis. En especial, quiero agradecer al Ing. **Moisés García B.**, y al Ing. **Gabriel Morales**, por las facilidades y la confianza concedida para el logro de los objetivos propuestos.

Quedo también agradecido al Programa Doctoral de ésta Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica (**FIME**), y a la Facultad de Ciencias Químicas (**FCQ**), ambas de la Universidad Autónoma de Nuevo León, por su decidido apoyo en mi preparación de postgrado. A mis hoy compañeros de postgrado, futuros colegas, por contagiarme de su entusiasmo estudiantil, y por su invitación a conformar con ellos un grupo de investigación.

Finalmente, y sin restar importancia por ello, quiero expresar mi reconocimiento, tanto a la misma Universidad Autónoma de Nuevo León (**UANL**), como al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (**CONACYT**), por el esfuerzo realizado para sostener económicamente mi estadía como estudiante de postgrado.

RESUMEN

MODELACION, CONTROL Y DIAGNOSTICO DE FALLAS PARA UNA COLUMNA DE DESTILACION MOLECULAR DE TRAYECTO CORTO

Publicación No. _____

Carlos Martínez Chitoy, Dr. en Ing.

Universidad Autónoma de Nuevo León, 1966.

Profesor Asesor: Dr. Jesús de León Morales.

En el presente trabajo de investigación, se aborda el problema del diseño de una estrategia de control para un proceso de purificación no convencional conocido con el nombre de "destilación molecular de trayecto corto" (DMTC). Este caso de estudio es un proceso en operación industrial.

En la primer etapa de la investigación se obtiene un modelo matemático, con objetivo de control. La construcción del modelo de la columna de destilación molecular se basó en la aplicación de las leyes de conservación de la masa, momentum y energía. A partir del método denominado compartamentalización, se obtiene un modelo matemático descrito en ecuaciones diferenciales ordinarias, que es una discretización especial del originalmente propuesto en ecuaciones diferenciales parciales. El modelo matemático resultante es validado mediante datos experimentales obtenidos del equipo asociado a la destilación molecular.

La determinación de las propiedades estructurales del modelo, así como el diseño de una estrategia de control, son tratados mediante conceptos y/o técnicas de la teoría de control lineal.

Finalmente, se presenta un panorama sobre los factores de seguridad requeridos en la operación del proceso y los aspectos relacionados con el diagnóstico de fallas. Además, se diseña una estrategia para la detección e identificación de fallas ubicadas en los sensores de la columna de destilación molecular.

INDICE

AGRADECIMIENTOS.....	iv
RESUMEN.....	v
CAPITULO 1	
INTRODUCCION.....	1
1.1 Antecedentes.....	1
1.2 Contenido de la Tesis.....	2
CAPITULO 2	
MODELADO DE LA COLUMNA DE DESTILACION MOLECULAR DE TRAYECTO CORTO (DMTC) AL ALTO VACIO.....	5
2.1 Preliminares.....	6
2.2 Teoría de la Destilación Molecular.....	9
2.3 Descripción de la Operación.....	17
2.4 Mecanismos Internos del Proceso.....	20
2.5 Velocidad de Vaporización.....	22
2.6 Distribución del Líquido en el Evaporador.....	24
2.6.1 Ecurrimiento de líquido en Paredes Verticales.....	25
2.6.2 Espesor de la Película Descendente en la Columna de Destilación Molecular.....	29
2.6.3 Representación de la Distribución de Flujos en la Columna.....	31
2.7 Balances de Masa y Energía en el Evaporador.....	33
2.7.1 Balance de Masa Global.....	34
2.7.2 Balance de masa del componente A.....	36
2.7.3 Balance de Energía.....	36
2.7.4 Flujo de calor a Través de la Pared del Evaporador.....	38
2.7.5 Resumen de Ecuaciones.....	40
2.8 Balances de Masa y Energía en el Condensador.....	43
2.9 Conclusiones.....	45

INDICE (continuación)

CAPITULO 3

EVALUACION EXPERIMENTAL DEL MODELO DE LA COLUMNA

DE DMTC.....	47
3.1 Unidad Experimental.....	48
3.2 Datos Experimentales.....	49
3.3 Simulación del Modelo en Lazo Abierto.....	51
3.4 Conclusiones.....	57

CAPITULO 4

CONTROLABILIDAD, OBSERVABILIDAD Y CONTROL

DE LA COLUMNA DE DMTC.....	58
4.1 Linealización, Controlabilidad y Observabilidad.....	59
4.2 Resultados de la Linealización del Modelo de la Columna de DMTC.....	61
4.3 Control del Sistema Linealizado.....	66
4.3.1 Estabilización.....	66
4.3.2 Retroalimentación del Estado.....	68
4.3.3 Retroalimentación del Estado Estimado.....	69
4.4 Control de la Columna de DMTC.....	71
4.4.1 Resultados de los Experimentos de Simulación.....	72
4.5 Conclusiones.....	79

CAPITULO 5

DIAGNOSTICO DE FALLAS EN LA COLUMNA DE DMTC.....

5.1 Fundamento del Diagnóstico de Fallas.....	81
5.1.1 El Problema de la Detección de Fallas.....	82
5.1.2 Formulación del Problema.....	83
5.1.3 Detección de Fallas en Base a Identificación de Parámetros.....	84
5.1.4 Detección de Fallas en Base al Espacio Paridad.....	86
5.1.5 Detección de Fallas en Base a Estimadores de Estado.....	90
5.1.6 Formulación para Sistemas Lineales.....	92
5.1.7 Formulación para Sistemas No Lineales.....	98
5.2 Lógica para la Identificación de Fallas.....	103
5.3 Evaluación de Falla.....	104

INDICE (continuación)

5.3.1	Evaluación de Falla para Sistemas Lineales.....	105
5.3.2	Evaluación de Falla para Sistemas no Lineales.....	106
5.4	Identificación de Fallas en la Columna de DMTC.....	109
5.4.1	Conformación del Esquema de Detección de Fallas para la Columna de DMTC.....	109
5.4.2	Experimentos de Simulación del Diagnóstico de una Falla.....	110
5.5	Conclusiones.....	114

CAPITULO 6

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....		115
6.1	Conclusiones y Aportaciones.....	115
6.2	Trabajos Futuros Recomendados.....	117

REFERENCIAS.....	118
------------------	-----

APENDICE A

DATOS DEL SISTEMA DE DESTILACION MOLECULAR.....	120
---	-----

APENDICE B

RESULTADOS DE LA LINEALIZACIÓN DEL MODELO NO LINEAL DE LA COLUMNA DE DMTC.....	122
---	-----

APENDICE C

GLOSARIO.....	127
---------------	-----

LISTA DE FIGURAS

2.1	Equipo básico de DMTC al alto vacío.....	8
2.2	Colisión molecular y trayecto libre medio.....	11
2.3	Evaporación molecular desde una superficie plana.....	14
2.4	Comparación de trayectos moleculares desde superficies geométricamente diferentes.....	16
2.5	Destilación molecular y equipo básico.....	18
2.6	Agitador (wiper). Vista de sus ranuras.....	20
2.7	Relación entre las variables para modelar el proceso.....	22
2.8	Formación de la película descendente.....	25
2.9	Elemento diferencial de altura Δz de fluido descendiendo en una pared vertical.....	26
2.10	Película descendente. Elemento diferencial de volumen donde se define el balance de momentum.....	27
2.11	Película formada a partir de un "anillo" de fluido.....	30
2.12	Representación de la evaporación en compartimentos.....	32
2.13	Relación de Flujos entre compartimentos de columna.....	33
2.14	Conducción de calor a través de la pared del evaporador.....	39
2.15	Evaporación-condensación en el destilador.....	44
3.1	Espesor de película de líquido sobre la superficie interna de la columna.....	54
3.2	Distribución de la composición del fluido en la superficie del evaporador y del destilado.....	54
3.3	Distribución de la temperatura de la pared exterior del evaporador.....	55
3.4	Flujos de destilado y residuo.....	55
3.5a	Flujo de energía hacia el evaporador.....	56
3.5b	Flujo de energía hacia el fluido.....	56
4.1	Composición del fluido en la película descendente, no lineal (azul), linealizado (rojo).....	64
4.2	Temperatura de la pared del evaporador, no lineal (azul), linealizado (rojo).....	64
4.3	Espesor de película, no lineal (azul), linealizado (rojo). Acercamiento (gráfica inferior).....	65

LISTA DE FIGURAS (continuación)

4.4	Sistema de control en base a un estimador de estado.....	70
4.5	Composición del producto. Control mediante retroalimentación de salida.....	75
4.6a	Composición del producto. Control mediante retroalimentación del estimado de la composición.....	75
4.6b	Ampliación que muestra la convergencia del observador.....	76
4.7	Temperatura de la pared del evaporador.....	77
4.8	Flujos de residuo y destilado.....	77
4.9	Señales de control: (arriba) flujo de alimentación; (en medio) velocidad del agitador; (abajo) flujos de calor al evaporador (mantas superior e inferior).....	78
5.1	Esquema de un sistema de control con fallas y entradas desconocidas.....	82
5.2	Proceso de detección e identificación de fallas.....	83
5.3	Configuración básica de generación de residuo en base a un observador.....	91
5.4	Esquema de bancos de observadores para el aislamiento de falla.....	95
5.5	Señales de Temperatura Tp 2 y 3. Falla inducida en el sensor de la temperatura de pared en la sección no.3, Tp 3.....	113
5.6	Espesor de película en el fondo de la columna. Falla inducida en el sensor de la temperatura de pared en la sección no.3, Tp 3.....	113

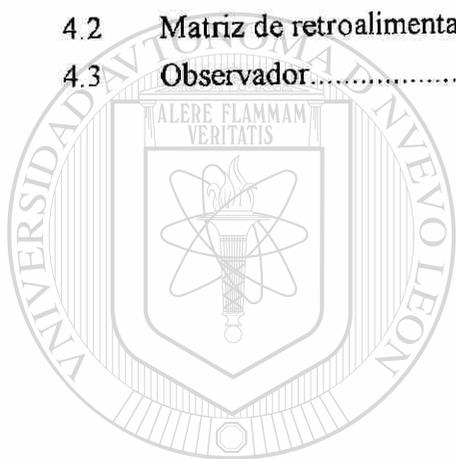
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



LISTA DE TABLAS

2.1	Especificaciones del equipo Evaporador de película delgada.....	7
2.2	Resumen de ecuaciones del modelo de la evaporación en la columna de DMTC Obtenido de las ecs. (2.34), (2.38), (2.43) y (2.47).....	41
2.3	Definición de las variables de entrada, estado y salida del proceso.....	43
3.1	Resumen de resultados experimentales: Reportes de purificación.....	50
3.2	Resumen de resultados de simulación.....	52
4.1	Controlabilidad y observabilidad del modelo linealizado del proceso.....	62
4.2	Matriz de retroalimentación de salida.....	72
4.3	Observador.....	73



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

CAPITULO 1

INTRODUCCION

1.1.- Antecedentes

El trabajo en esta tesis es parte de un proyecto de cooperación con la empresa PYOSA, S.A., para tratar el caso de estudio de una operación unitaria de purificación denominada "destilación molecular de trayecto corto" (DMTC). El objetivo general del estudio ha sido el desarrollar un modelo matemático y el diseño de una técnica de control que son de interés potencial a la empresa. Inicialmente el interés se limita a las derivaciones teóricas pertinentes y a su evaluación a través de simulaciones, además de una validación con los datos experimentales que son generados en el proceso actual.

Las operaciones de purificación siempre están presentes en los procesos industriales como un medio de alcanzar especificaciones de pureza. La destilación es una operación de purificación que en un sentido amplio, es la conversión a vapor de un líquido constituido por más de un componente, procurando separar algunos de sus componentes. De los diversos propósitos industriales para los que sirve la destilación, es de interés señalar la obtención, en su forma más útil, de materiales térmicamente sensibles, tales como los fármacos, los alimentos, los cosméticos, algunos catalizadores, etc. La técnica de destilación molecular de trayecto corto (DMTC) es una operación desarrollada para ése tipo de separaciones.

En general, los principales requerimientos de los destiladores son: (1) la transferencia de grandes cantidades de calor al líquido para efectuar la evaporación necesaria, (2) la separación eficiente del vapor generado, y (3) efectuar 1 y 2 con el menor consumo de energía justificable, los cuales son peculiarmente logrados en los equipos de DMTC. Estos equipos son usados primariamente para procesar sustancias que no pueden ser procesadas en otros destiladores. Este tipo de destilador está constituido de un solo tubo recto de gran diámetro como superficie calefactora, el cual, además de emplear la energía térmica para la evaporación, usa energía mecánica del sistema de agitación para promover la transferencia de calor. Esto último, por la formación sobre su superficie interna de una película delgada de líquido mediante el mecanismo de agitación.

El incremento de aplicaciones industriales para separar productos sensibles y valiosos ha hecho crecer la importancia de los procesos de DMTC, para los cuales, la economía de mercado exige que este tipo de operaciones costosas sean manejadas más económicamente, con mayor seguridad y con aseguramiento de calidad. De ahí que el control tradicionalmente manual de este tipo de aparatos tienda a cambiar hacia algún tipo de control automático.

Lo especializado que resulta la DMTC así como lo peculiar de su operación explican la casi nula existencia en la literatura técnica de resultados respecto al control de destiladores como éstos. Los trabajos reportados en la literatura, relativa a la DMTC, revelan la existencia de investigaciones que versan únicamente en algunos aspectos fisicoquímicos aplicados a equipos de destilación molecular y prácticamente sin información en lo relacionado con el control de los mismos.

El problema que se plantea en esta tesis es uno que integra, por un lado, la formulación de un modelo matemático que describe la dinámica del proceso, y por el otro, la incorporación de un esquema de control adecuado.

El estudio correspondiente adoptará la metodología siguiente: (1) Modelación, (2) Validación del modelo, (3) Especificaciones de control y análisis de las propiedades estructurales del modelo matemático, (4) diseño de un sistema apropiado de control, y (5) especificación de un método para el diagnóstico, respecto a las mediciones, de la integridad del sistema de control. Esta última parte se incluye para satisfacer la exigencia de seguridad en el esquema de control.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

1.2.- Contenido de la Tesis

En el Capítulo 2, una gran parte del objetivo de la tesis se traduce a un problema de modelado de la dinámica del proceso. En esta tesis se emplea la modelación a partir de principios físicos fundamentales para llegar a un modelo matemático, con componentes físicamente significativos y que incorporen la complejidad del detalle físico interno. De las diferentes representaciones matemáticas, como: ecuaciones diferenciales, funciones de transferencia, mapeos entrada-salida, y espacio estado, el concepto de espacio estado aparece como un principio unificador para la descripción de la dinámica para el caso de estudio de esta tesis. Para ello se emplean los principios de conservación de materia, momentum y energía

aplicados a un entorno arbitrariamente definido. Estas leyes pueden expresarse genéricamente como:

$$\left(\begin{array}{c} \text{Entradas de} \\ \text{Masa / Energía} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{Salidas de} \\ \text{Masa / Energía} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{Transformación de} \\ \text{Masa / Energía} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Acumulación de} \\ \text{Masa / Energía} \end{array} \right)$$

Cada uno de los términos anteriores son substituidos por expresiones matemáticas lo más rigurosas posibles y a la vez conteniendo el menor número de parámetros desconocidos como sea posible. Si durante el modelado matemático se tiene en cuenta el conjunto de ecuaciones y se escriben en una secuencia lógica de causa-efecto, entonces la solución del modelo resulta computacionalmente estable. Esta secuencia de orden "natural" presenta con claridad las relaciones entre las variables que describen el mecanismo interno del proceso.

Con frecuencia el modelo resultante para un proceso no se le puede manipular fácilmente con las técnicas de cálculo actuales. Este es el caso de los modelos dinámicos que describen los procesos de separación en multi-etapas, los cuales están constituidos por balances de materia y energía en cada etapa y llegan a formar cientos de ecuaciones diferenciales.

La columna de DMTC puede ser considerada como un proceso en multi-etapas, y para evitar la formación de un modelo de alta dimensión se emplea una técnica de seccionamiento conocida como compartamental (ver glosario), con la que es posible derivar modelos de orden reducido. Es de notarse que las características de estado estacionario de los modelos de orden elevado y del reducido coinciden exactamente y las características transitorias del modelo de orden reducido se aproximan bastante a la dinámica de la de orden elevado. Aún más, los parámetros del modelo reducido retienen su significado físico, permitiendo un amplio uso del modelo.

En el Capítulo 3 se presentan los resultados de la validación del modelo matemático de la columna de DMTC, con el propósito de confirmar en base a datos experimentales los resultados obtenidos por simulación. Esto garantiza que las siguientes etapas de análisis y diseño se basen en un modelo que describe apropiadamente al proceso.

El objetivo de control, que es la regulación de la composición del destilado, se precisa en el Capítulo 4. Además, se determinan las propiedades estructurales del modelo que

justifican la estrategia de control propuesta en este trabajo de tesis. En la práctica industrial el estudio y diseño del control en esta clase de equipos ha sido implementado por métodos empíricos. El personal de la planta lo más que llega a hacer es efectuar mediciones sobre variables de la operación y a ajustar manualmente algunos de sus parámetros para mejorar su desempeño. Este es un diseño basado en la experiencia (cuando la hay) para posteriormente proceder por prueba y error. Este método es insatisfactorio si se hace una especificación más restrictiva y precisa de la operación.

La teoría de control moderna incorpora un modelo matemático del proceso en sus resultados. Por un lado, una teoría así puede producir estrategias de control satisfactorias, pero por otro, las limitaciones de las técnicas empleadas para manejar modelos de alta dimensión no-lineales, hace necesario el emplear versiones simplificadas del modelo (linealizaciones). Se demuestra, sin embargo, que la estrategia de control propuesta en base al modelo linealizado, alrededor de un punto de equilibrio, produce resultados satisfactorios en cuanto a la regulación precisa de la composición alrededor de un punto de operación.

Finalmente, en el Capítulo 5 se asume que el sistema de control de la columna de DMTC está sujeto a fallas en los instrumentos de medición o en los actuadores. Se propone un esquema de diagnóstico de fallas en prevención de las complicaciones operativas que puedan presentarse. En la primera parte de este capítulo se presenta el fundamento y las principales técnicas existentes del diagnóstico de fallas. De acuerdo a las ventajas y requisitos que presenta cada método en esta investigación, se propone un método que está basado en la estimación del estado. La estimación es realizada mediante un conjunto de observadores, y su factibilidad se demuestra mediante resultados de simulación basada en el modelo no-lineal del proceso.

CAPITULO 2

MODELADO DE LA COLUMNA DE DESTILACION MOLECULAR DE TRAYECTO CORTO (DMTC) AL ALTO VACIO

En este capítulo se presenta la modelación del comportamiento dinámico de una columna de destilación molecular de trayecto corto (DMTC) al alto vacío. Como es sabido, la modelación matemática propuesta es la primer etapa en el análisis y diseño de una estrategia de control. El modelo matemático que se requiere se formula en base a principios básicos. La formulación se hace de manera que la descripción incluye toda información fenomenológica posible, pero sin dejar de lado que el proceso debe ser modelado con fines de control.

El comportamiento dinámico y el desempeño de esta operación de destilación especial dependen grandemente de las particularidades del diseño del equipo. Este equipo de DMTC bajo estudio es de una clase denominada Short Path Mechanically Wiped Film Distillation o destilación molecular de trayecto corto con agitación pelicular.

Existe muy poca información acerca de los destiladores peliculares con agitación. La revisión bibliográfica en textos de ingeniería química y otra literatura técnica, aún el Manual del Ingeniero Químico de Perry, reporta muy poca información, lo cual es una situación desafortunada, pues es una operación unitaria que está creciendo en importancia. El resultado de la investigación bibliográfica en destilación molecular indica que el estudio de esta técnica de separación termina prácticamente en 1975, pues poco se ha escrito desde entonces. Algunos de los mejores artículos fueron escritos por Hickman, desafortunadamente en esos estudios se usaba centrifugas en lugar de agitadores de barrido. Una de las referencias que mejor describe los fundamentos de este tipo de destilación es la de Burrows [B].

Primeramente se define y describe la operación de DMTC para posteriormente, y de acuerdo a los fundamentos de la destilación molecular, proponer los mecanismos para la evaporación y la formación de la película descendente. A partir de dichos mecanismos y mediante un método de compartimentalización, se define un conjunto de secciones de la columna, a cada una de las cuales se le aplican los principios de conservación de materia y energía. Las ecuaciones resultantes forman el modelo de la columna de DMTC.

2.1.-Preliminares

El proceso más familiar de destilación consiste en la vaporización de una mezcla líquida, simultáneamente con la condensación del vapor producido. Para que la destilación sea efectiva, la composición del vapor condensado (destilado) debe ser diferente de la del líquido original; obteniéndose una separación mayor o menor, de uno o más de los componentes de la mezcla original. Esta operación de purificación pretende aprovechar los diferentes grados de volatilidad de las sustancias que constituyen la mezcla. Por otro lado, la volatilidad que posee cada sustancia depende fuertemente de la naturaleza propia de la misma, e.g. calor de vaporización, capacidad calorífica, viscosidad, etc., así como de las condiciones con las que se efectúa la separación, e.g.: composición, temperatura, presión. En general, dada una presión de operación, una sustancia se volatiliza más que otra según la temperatura a la que se encuentra, de esa manera, los componentes más volátiles se separan en cada una de las etapas sucesivas de evaporación; teniendo cada etapa condiciones de operación que le favorecen.

Existen varios tipos de destilación con respecto a la presión de operación de la columna: la destilación normal, la destilación de película descendente, y la DMTC. Para enfatizar las particularidades de la DMTC se describe brevemente a continuación cada uno de los tipos de destilación mencionados:

- **Destilación Normal.-** En esta operación los componentes más volátiles se les evapora de la mezcla inicial para luego condensarlos en un condensador externo. El máximo vacío producido es moderado, hasta 50 mbar. Este límite es resultado de considerar, además del vacío, a la carga hidrostática del líquido retenido en la columna y la caída de presión debida al flujo de vapores.
- **Destilación de Película Descendente.-** La alimentación desciende a lo largo de paredes calientes como una película, evitando la acumulación del material; durante su recorrido genera un vapor que es conducido hacia un condensador externo. La calidad de la destilación depende de la calidad de la película descendente formada: fuerza gravitacional, viscosidad del producto, flujo de alimentación.
- **Destilación Molecular de Trayecto Corto.-** La alimentación desciende a lo largo de paredes calientes como una película delgada. La parte más relevante de la técnica es el uso de un condensador interno que acorta la trayectoria de los vapores hacia el condensador,

pudiendo operar a presiones tan bajas como 0.001 mbar, y que resulta en temperaturas de proceso significativamente más bajas. El mecanismo de distribución pelicular contribuye a la transferencia de calor y a la eficiencia de la evaporación.

El equipo de destilación molecular en el que está basada esta tesis es un evaporador de película delgada marca Pope Scientific⁽¹⁾, con las especificaciones que se anotan en la Tabla 2.1:

Tabla 2.1.- Especificaciones del Equipo Evaporador de Película Delgada.

Area de evaporación:	2.36 pies ² .
Fuente de calor:	Eléctrica.
Potencia de calentamiento:	8,400 watts.
Materiales de construcción:	Vidrio (evaporador y condensador interno). Acero inoxidable (tanques, líneas y bombas).
Bomba de vacío:	Rotary vane, sello de aceite, 30 pie ³ /min.
Presión de operación:	Hasta 300 μ Hg. presión absoluta.
Temperatura de operación:	Hasta 240 °C.

El cuerpo principal del destilador molecular tiene forma cilíndrica, es calentado mediante una manta eléctrica, y es alimentado continuamente con producto crudo. La Figura 2.1 muestra una fotografía del equipo y sus principal componenetes, las cuales son:

- (1) El cuerpo de la columna de destilación.
- (2) El condensador y recipiente que actúan como trampa de vapores en la línea del vacío.
- (3) Mecanismo del agitador.
- (4) Recipiente de alimentación por lotes. Actualmente sustituido por una línea de alimentación continua.
- (5) Recipientes de residuo (derecha) y destilado (izquierda), adaptados para la extracción semicontinua de los productos.
- (6) Bomba de vacío. Con capacidad para producir vacío menor de 0.1 torr.
- (7) Manta de calefacción eléctrica. Actualmente particionada en dos.
- (8) Entrada y salida del fluido para enfriamiento.

(1) Pope Scientific, Inc.
N90 W14337 Commerce Drive
Menomonee Falls, Wisconsin 53051, USA.

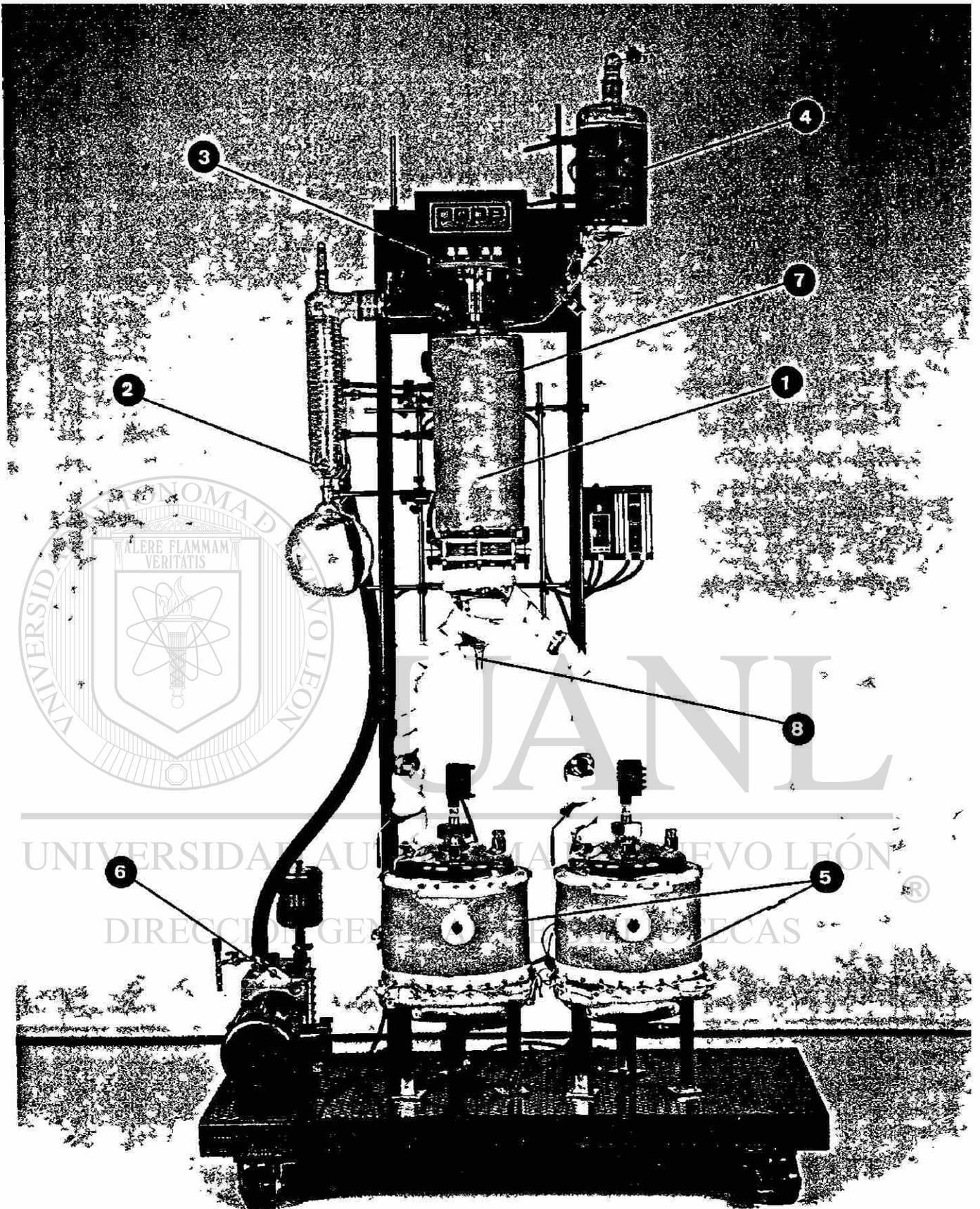


Fig.2.1. Equipo básico de DMTC al alto vacío.

2.2.-Teoría de la Destilación Molecular

La destilación molecular se considera una forma simplificada de la destilación ordinaria que se explica en términos de la teoría cinética de los gases; por consiguiente, para expresar e interpretar la destilación molecular, se aplica el mismo razonamiento termodinámico

De acuerdo a la teoría cinética de gases, si se administra energía a un líquido de manera que su vaporización ocurra a una temperatura y presión constante, el número de gramos mol en fase vapor que tienen una energía promedio ΔE cuando se alcanza el equilibrio, es aproximadamente proporcional a $e^{-\Delta E/RT}$, donde ΔE es el calor latente de vaporización; R es la constante de los gases ideales; y RT es la energía que debe administrarse por gramo mol para hacer el trabajo externo contra la presión encima del líquido. Si los vapores se comportan idealmente, el número de moléculas en la fase vapor bajo condiciones de equilibrio es proporcional a p/T , donde p es la presión de vapor de equilibrio; esta condición puede escribirse como $\ln(p) + \ln(1/T) = \Delta E / RT + c$, donde c es una constante. Diferencialmente se reduce a la conocida ecuación de Clausius-Clapeyron [GL] con $\Delta H = \Delta E + RT$,

$$\frac{d(\ln p)}{d(1/T)} = -\frac{\Delta H}{R} \quad (2.1)$$

de donde se deduce que la velocidad de evaporación del líquido, depende de la tasa de aplicación de calor ΔH , de la temperatura del líquido, y de la presión sobre el mismo.

El mecanismo con que se desarrolla la destilación depende de la combinación de los factores anteriores. El mecanismo es por ebullición si el calor de suministro es alto; por evaporación difusional si la presión no es baja; y por evaporación molecular si la presión es baja, en la cuál la combinación de condiciones controla la velocidad de escape de las moléculas de la superficie libre del líquido. Se alcanza un máximo de flujo de destilado en el proceso cuando las moléculas vaporizadas alcanzan al condensador sin obstrucción alguna.

El interés de esta investigación se centra únicamente en el mecanismo de evaporación molecular. Bajo estas condiciones, la velocidad de evaporación depende grandemente de las colisiones intermoleculares que suceden durante la evaporación, y en particular de la

frecuencia con que suceden estas colisiones, o más bien de la distancia que pueden recorrer las moléculas en el vapor sin chocar con alguna otra.

Hipótesis 2.1: Las colisiones intermoleculares son descritas por la teoría cinética de los gases. Es decir: (a) Una molécula se le considera como una esfera lisa elástica; (b) El tamaño de la molécula es despreciable comparado con el espacio en el que se mueve; (c) Las moléculas se mueven en forma aleatoria con varias velocidades y chocan unas con otras; (d) Bajo condiciones de equilibrio la energía cinética media, de las moléculas que forman al gas, es proporcional a su temperatura absoluta. \diamond

Como consecuencia de esta hipótesis, la velocidad de evaporación estará definida en términos de la frecuencia de colisión, como sigue:

Definición 2.1: El trayecto libre medio es la distancia promedio λ (cm), que recorre una molécula dada entre colisiones sucesivas. \diamond

Según esta definición, si c (cm/seg) es la velocidad media de la molécula, entonces c/λ es el número de choques que tiene dicha molécula por segundo por molécula. En términos probabilísticos, si una colisión sucede una vez en λ cm, la probabilidad de que no ocurra en r cm, está dado por $e^{-r/\lambda}$. En otras palabras, la fracción de moléculas del vapor en equilibrio que viajan una distancia r , o más sin un impacto, es $e^{-r/\lambda}$. Cuando las moléculas viajan una distancia igual a su trayecto libre medio ($r = \lambda$), el 37% de las moléculas viajarán esta distancia sin impacto alguno, y el 63% colisionarán. Por tanto, la probabilidad de colisión es $(1 - e^{-r/\lambda})$. \textcircled{R}

En la práctica es imposible satisfacer la condición de que las moléculas alcancen al condensador sin colisión intermolecular, puesto que si r es finito, entonces el trayecto libre medio debe tender a infinito para tener una probabilidad de colisión cero. El valor del trayecto libre medio es determinado esencialmente por el número de moléculas presentes en un volumen dado de gas, y por una propiedad de las moléculas conocida como diámetro de colisión.

Definición 2.2: El diámetro de colisión σ es la distancia entre centros de dos moléculas en el punto de mayor cercanía. \diamond

Es decir, cuando dos moléculas se aproximan una a otra se alcanza un punto en el cual la repulsión mutua es tan grande que causa una inversión en la dirección de movimiento. El trayecto libre medio se calcula considerando que todas, excepto una de las moléculas, están estacionarias. Si λ' es el trayecto libre medio bajo estas condiciones, entonces la molécula en movimiento, en promedio, colisionará con otra después de haber viajado esa distancia. Resulta evidente que sólo hay una molécula en el volumen cilíndrico de longitud λ' y diámetro 2σ , (Figura 2.2). Cada molécula existe en un volumen promedio de $\pi\sigma^2\lambda'$, de manera que el número de moléculas por unidad de volumen es $\nu = 1 / \pi\sigma^2\lambda'$.

El trayecto libre medio λ , cuando todas las moléculas están en movimiento, es menor que λ' , por un factor de $\sqrt{2}$, es decir, $\lambda = 1 / \sqrt{2}\pi\nu\sigma^2$. Si se fijan la temperatura T y la presión P del gas, entonces ν , λ deben ser constantes con la consideración de que el número de moléculas es constante, así como el diámetro de colisión. Aplicando el concepto de gas ideal, el trayecto libre medio en el equilibrio se expresa como:

$$\lambda_E = \frac{2.3 \times 10^{-20} T}{p_{\text{mm}} \sigma^2}$$

donde T está dado en °K, p_{mm} es la presión de equilibrio en mm Hg, y el subíndice E señala condiciones de equilibrio.

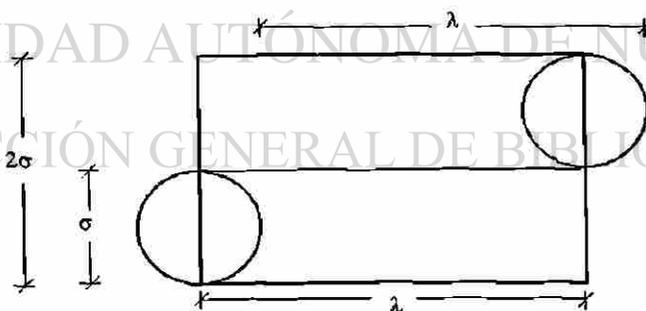


Fig. 2.2. Colisión molecular y trayecto libre medio.

El valor de λ_E es aproximadamente 10^{-5} cm a T y P normales, lo que implica que es necesario disminuir la presión hasta 10^{-5} atm para que λ_E sea aproximadamente de 1 cm.

Cuando no se tienen condiciones de equilibrio, todas las moléculas tienen una componente inicial de velocidad que se aleja de la superficie, y en estas circunstancias la trayectoria libre media será mayor que con el vapor en equilibrio. Aún más, cuando la evaporación tiene lugar en una superficie convexa, la trayectoria libre media será mayor que la de una superficie plana.

Definición 2.3: (a) La **Velocidad de vaporización** es la velocidad total absoluta a la que las moléculas de vapor dejan la superficie del líquido. (b) La **Velocidad de evaporación** es la velocidad neta de pérdida de moléculas, tomando en cuenta las moléculas de vapor que regresan al líquido. (c) La **Velocidad de destilación** es la velocidad a la cuál condensan las moléculas en la superficie del condensador sin que éstas se reevaporen. \diamond

Hipótesis 2.2: Se asume que (a) El líquido está quiescente y sin burbujas de gas; (b) Las moléculas escapan sin restricción hacia un espacio libre de otras moléculas; (c) La velocidad de escape de las moléculas del líquido permanece constante. \diamond

Es decir, el área de evaporación permanece constante, y la velocidad de escape de las moléculas es influida solo por su temperatura. La velocidad a la que las moléculas dejan la superficie del líquido es igual a la velocidad con la que se impactan en el condensador.

Bajo las condiciones anteriores se puede deducir la velocidad teórica a la que sucede la destilación, Burrows [B]. El número de moléculas por segundo δn que pasan de un elemento de volumen δv del espacio de vapor, hacia un elemento de superficie δA de líquido, son aquellas que viajan la distancia r entre δv y δA sin impacto alguno, es decir, $e^{-r/\lambda}$. El total de moléculas que chocan la superficie δA por segundo desde todo el espacio por encima de dicha superficie, se obtiene integrando sobre r desde todos los ángulos posibles, es decir, $v\bar{c}\delta A/4$, moléculas por segundo, donde \bar{c} es la velocidad media de una molécula típica, y v es el número de moléculas por cm^3 . Entonces la velocidad de vaporización será $v\bar{c}/4$, moléculas/seg. $\cdot\text{cm}^2$, es decir,

$$\frac{\rho\bar{c}}{4} \quad \text{g/seg}\cdot\text{cm}^2 \quad (2.2)$$

donde ρ es la densidad de vapor correspondiente.

Por otro lado, de acuerdo a la distribución de velocidades moleculares (J.C. Maxwell, 1860),

$$\frac{1}{v} \frac{dv}{dc} = 4\pi c^2 \left(\frac{M}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-\frac{Mc^2}{2RT}} \quad (2.3)$$

que en teoría de probabilidades representa la fracción de moléculas con una cierta velocidad, la velocidad más probable de una molécula se obtiene diferenciando (2.3) respecto a la velocidad c e igualando a cero para obtener un máximo; es decir, $c = \sqrt{2RT/M}$. Por la Hipótesis 2.1, $\rho = PM/RT$, y si la velocidad media cuadrática $c = (c_1 + c_2 + \dots + c_v)/v =$

$\frac{1}{v} \int_0^{\infty} cdv = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}}$, entonces la combinación de (2.2) y (2.3) proporciona la expresión para la **velocidad de vaporización**

$$p \sqrt{\frac{M}{2\pi RT}} \quad \text{g/seg cm}^2 \quad (2.4)$$

donde p es la presión de vapor, en dinas/cm² a la temperatura absoluta T , en °K; M es el peso molecular de la sustancia, y R es la constante de los gases ideales, que con otras unidades

$$0.0583 p_{\text{mm}} \sqrt{\frac{M}{T}}, \quad \text{g/seg cm}^2 \quad (2.5)$$

donde p_{mm} es la presión de equilibrio en mm Hg correspondiente a las v moléculas por cm³ y a la velocidad media cuadrática.

Si (2.5) representa correctamente la velocidad de evaporación desde una superficie plana, entonces debe existir un condensador a una distancia menor que el trayecto libre medio, para atrapar las moléculas vaporizadas sin que existan colisiones intermoleculares.

La velocidad de vaporización se mide esencialmente por la velocidad de pérdida de líquido; sin embargo, la **velocidad de destilación** se mide por la velocidad de ganancia de producto en el condensado. La evidencia experimental, Burrows [B], respalda la idea de que no hay tendencia de las moléculas a ser reflejadas cuando impactan la superficie de un líquido del mismo material. Los factores que afectan la velocidad de destilación son principalmente

geométricos. De acuerdo a esta apreciación, (2.2) representa el número de moléculas que pasan a través de un elemento de área δA hacia un espacio vacío, ver Figura 2.3. La fracción de moléculas que viajan dentro del ángulo sólido $\delta\omega$ formado por el ángulo θ con la normal y que alcanzan al condensador sin colisión alguna es

$$e^{-r/\lambda_0} (2\text{sen}\theta \cos\theta\delta\theta) \quad (2.6)$$

donde λ_0 es la trayectoria libre media de las moléculas.

De (2.6) se tiene que la velocidad a la que salen las moléculas de δA a lo largo de $\delta\theta$ es proporcional a $\cos\theta$, pero a medida que θ aumenta, la longitud de la trayectoria r desde el evaporador al condensador aumenta también. Entonces, a medida que aumenta θ , también aumentará la tendencia de las moléculas a regresar al evaporador después de las colisiones.

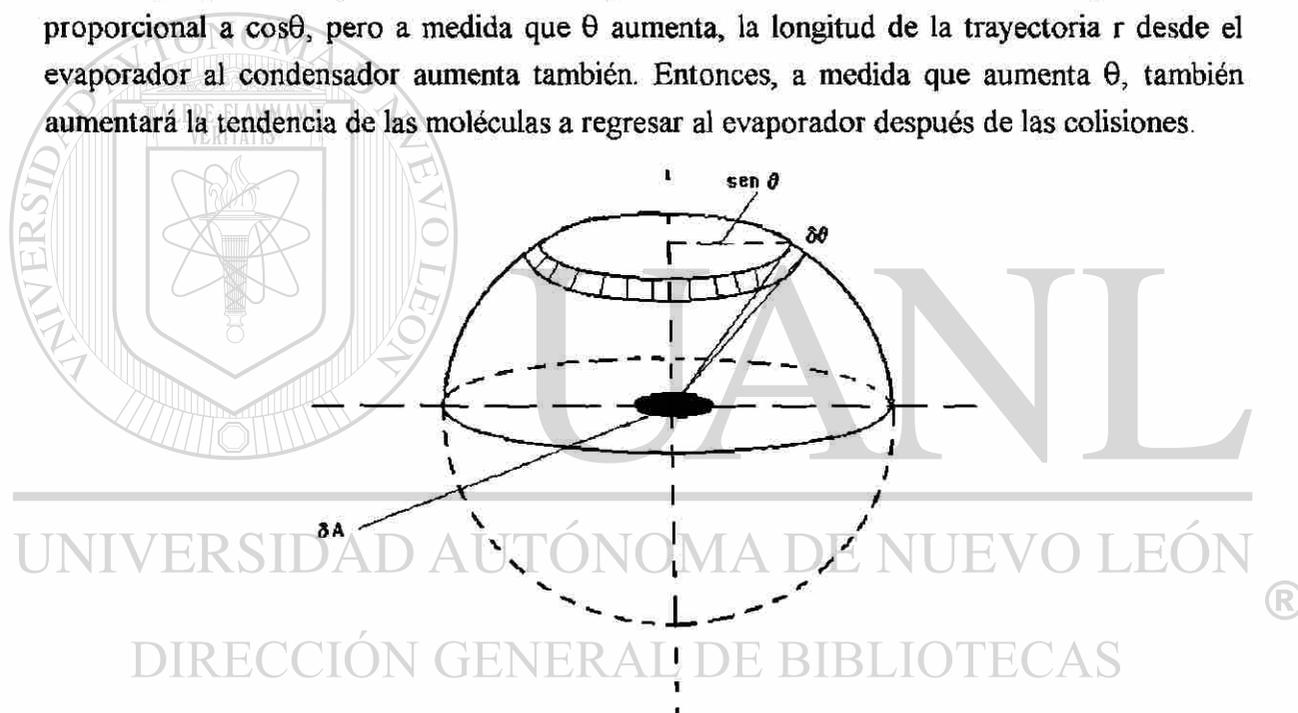


Fig. 2.3. Evaporación molecular desde una superficie plana.

Tomando en cuenta las condiciones promedio en el espacio de separación, la trayectoria de las moléculas dependerá de las formas relativas del evaporador y condensador; entonces, r/λ puede expresarse, por simplicidad, como un factor apropiado K . La fracción total f de moléculas evaporadas que llegan al condensador es la suma de la fracción de moléculas que alcanza al condensador sin colisión e^{-K} , la fracción de moléculas que colisionan es $(1-e^{-K})$, y la fracción de moléculas que después de múltiples colisiones pierden su movimiento coordinado

y se mueven al azar con igual oportunidad de alcanzar al condensador o al evaporador es F . Si F expresa la tasa de área de condensación respecto al área total, entonces la tasa de área de evaporación respecto al total es $(1-F)$. Por lo tanto, la fracción de tales moléculas que alcanzan al condensador después de múltiples colisiones está dada por $F(1-e^{-K})(1-e^{-K})$, es decir:

$$f = e^{-K} + e^{-K}(1-e^{-K}) + F(1-e^{-K})(1-e^{-K}) \quad (2.7)$$

o bien

$$f = F + (1-F)(2e^{-K} - e^{-2K}) \quad (2.8)$$

El valor de F puede determinarse de la geometría del aparato si se dispone de un valor apropiado de K .

Tomando en cuenta la fracción de moléculas f que no regresa al evaporador, se puede reescribir la velocidad de vaporización (2.5) como:

$$0.0583 p_{\text{mm}} \sqrt{\frac{M}{T}} f \quad \text{g/seg cm}^2 \quad (2.9)$$

expresión que representa la velocidad de evaporación, siempre que el condensador se mantenga suficientemente frío para prevenir la reevaporación del condensado.

La manera en que varía el valor de K con la forma de las superficies se puede apreciar cualitativamente en la Figura 2.4. Para un ángulo $\theta=60^\circ$ entre la normal de la superficie y la dirección de dos moléculas que imaginariamente chocan en el punto C, en cada caso, antes de chocar, viajan la misma distancia, pero el ángulo ψ es menor en las superficies convexas, lo cual señala que el punto de colisión está apreciablemente más cercano al condensador. Se espera entonces que el valor de K sea menor cuando la evaporación es desde superficies convexas; con lo cual el coeficiente de evaporación f tenderá a tomar el valor de la unidad.

Hasta ahora no es posible proponer un método simple de evaluar directamente el factor K , a partir de principios básicos, para las diferentes formas y tamaños de superficies de evaporador, entonces K debe estimarse a partir de la experimentación, práctica muy difícil por el efecto de autoenfriamiento, lo inaccesible de la superficie, y la variación del trayecto libre medio con la temperatura.

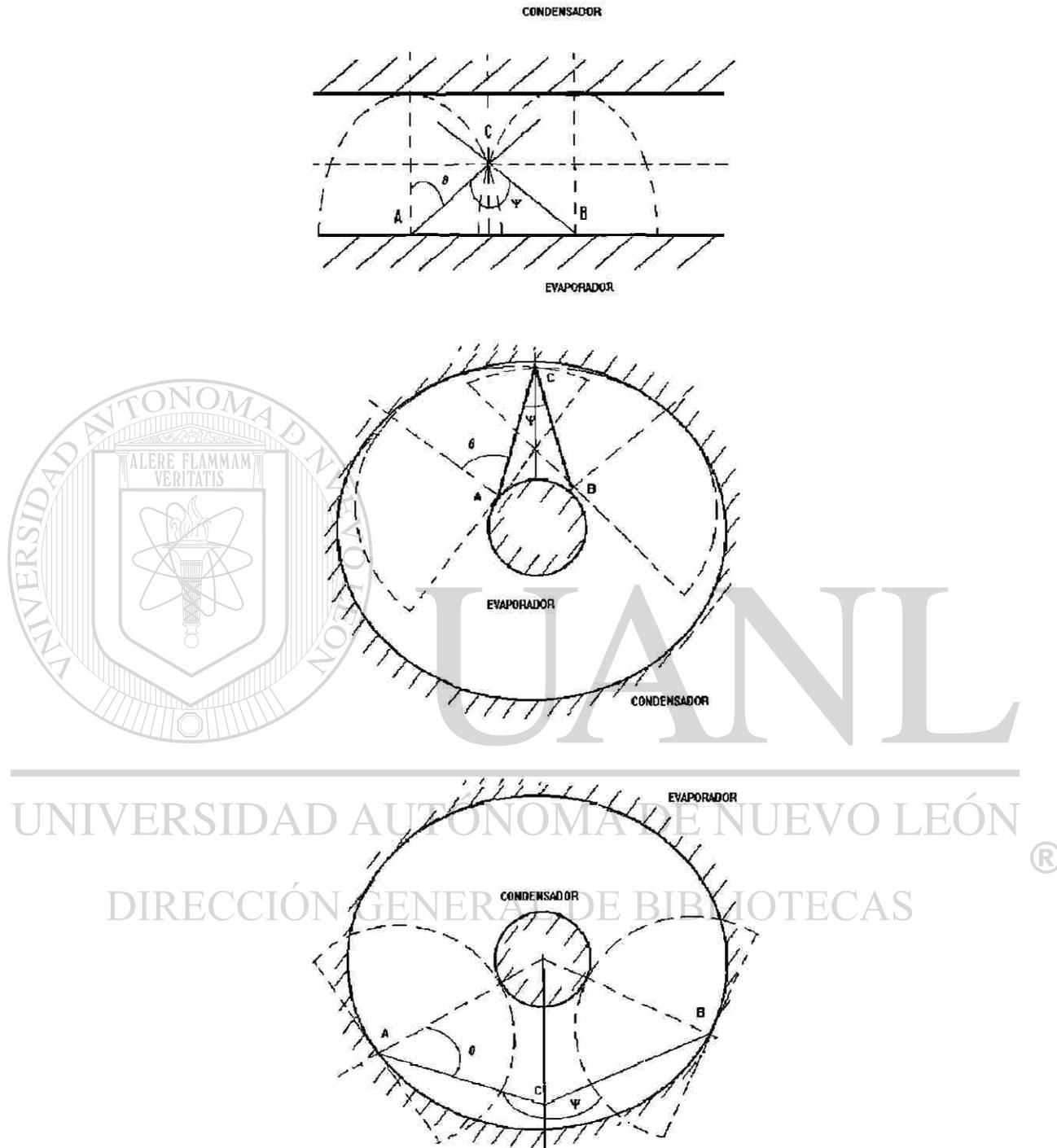


Fig. 2.4. Comparación de trayectorias moleculares desde superficies geoméricamente diferentes.

Si las condiciones impuestas en las Hipótesis 2.1 y 2.2 se cumplen, entonces la expresión (2.9) representa correctamente la velocidad de evaporación bajo condiciones de destilación molecular. Para satisfacer las condiciones se requiere principalmente operar a bajas presiones, y tener la superficie de evaporación próxima a la de condensación. Por regla general, la evaporación al alto vacío se efectúa mejor a partir de películas delgadas, evitando así gradientes de temperatura innecesarios. De acuerdo a lo anterior, se está en condiciones de definir la destilación molecular de trayecto corto al alto vacío.

Definición 2.4: La destilación de trayecto corto, es aquella en la cual la distancia entre las superficies de evaporación y de condensación es menor que el trayecto medio libre de las moléculas involucradas a la presión de operación. ◇◇

Esta definición limita artificialmente al proceso puesto que la superficie de condensación debe estar a tal distancia de la superficie de evaporación, que las moléculas de vapor puedan alcanzar al condensador sin colisiones intermoleculares, proceso poco probable en la práctica.

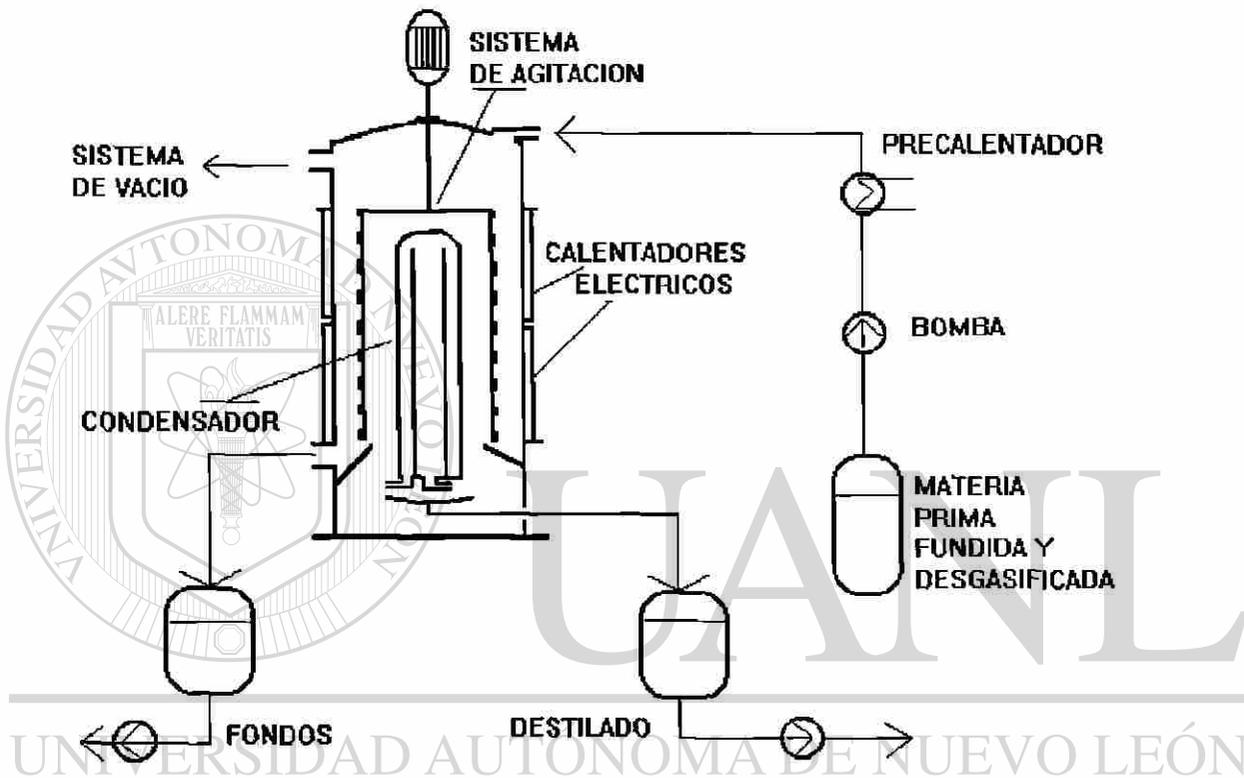
Definición 2.5: La destilación molecular de trayecto corto (DMTC) es una destilación de trayecto corto al alto vacío, tal que las moléculas de gas residual no obstruyen el paso de las moléculas de vapor. Al mismo tiempo la superficie del condensador está localizada de manera que las moléculas de vapor la alcancen sin chocar con otras superficies. ◇◇

Las condiciones de diseño (cercanía de la superficie del condensador) y operación (presión, formación pelicular) son tales que la DMTC se acerca a los términos en que se le define. A continuación se describirá la operación de una columna de DMTC.

2.3.- Descripción de la Operación

La operación que se va a describir corresponde al equipo que se utilizará en la experimentación. La Figura 2.5 muestra un esquema del DMTC e incluye sus componentes básicos. En este equipo los vapores producidos en la pared de la columna cruzan a través de un deflector contra salpicaduras, para luego viajar hacia un condensador interno a través de una gran área de sección transversal. El equipo físico se describirá en el siguiente capítulo de la tesis.

Recorrido de las Substancias. - El destilador molecular de trayecto corto con barrido de película, Figura 2.5, consiste de un cuerpo cilíndrico calentado externamente, al cual se alimenta la sustancia a destilar por su extremo superior. El fluido alimentado es inmediatamente distribuido en forma de una película delgada a lo ancho y largo de la pared de la columna, mediante un cuerpo de cuatro hojas raspadoras que giran a alta velocidad.



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

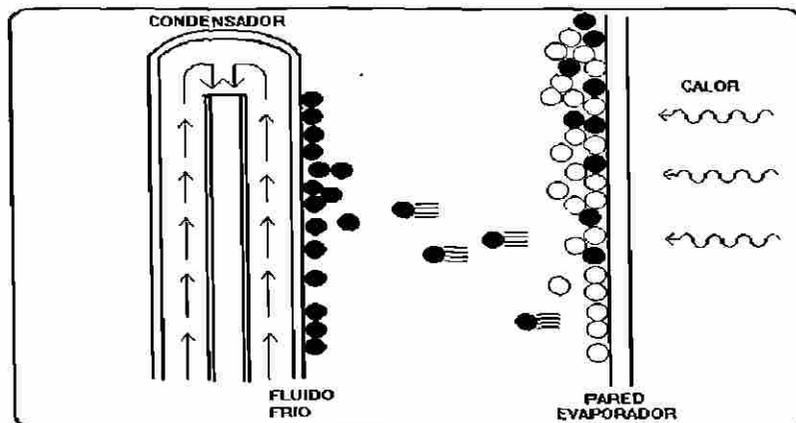


Fig.2.5. Destilación molecular y equipo básico.(● Destilado, ○ Residuo.)

La Figura 2.6 muestra en detalle la superficie de las aspas del agitador. La película resultante está constituida en parte por el fluido que pasa entre la pared del evaporador y el cuerpo del agitador, y en parte por el microflujo forzado mecánicamente, proveniente de la acción de las ranuras del agitador. Concretamente, la película descendente se forma por la acción combinada de la gravedad y la del agitador.

La evaporación de las sustancias ocurre en la superficie de la película descendente durante el curso del flujo a lo largo de la pared caliente; ver recuadro de la Figura 2.5. Por un lado, el fluido no evaporado conforma continuamente el producto del fondo de la columna, y por otro lado el vapor formado se le condensa para conformar el producto destilado. En una destilación molecular usualmente el producto deseado es el destilado.

El fluido de alimentación previamente desgasificado, se bombea al destilador a través de un precalentador para mantener su condición de temperatura constante. Los fondos y el destilado se extraen continuamente mediante bombeo. El sistema de vacío está constituido por la bomba de vacío, y una trampa refrigerada para detener cualquier flujo no gaseoso hacia la bomba.

Formación de Película. - Cuando un fluido perimetralmente distribuido desciende libremente por una pared vertical cilíndrica, forma una película de un determinado espesor. La velocidad que adquiere el fluido al descender forma una distribución de velocidades que es función del espesor y de la posición a lo largo de la columna. Sin embargo, por la acción del agitador, sus hojas ranuradas promueven un flujo "tapón", es decir que la velocidad del flujo deja de ser dependiente del espesor. Esto implica que, a una altura dada en la columna, las propiedades del fluido son uniformes en todo el volumen delimitado por el espesor de la película y la circunferencia de la columna.

Así, con poco retromezclado, el agitador asegura una exposición uniforme a las condiciones del proceso; la turbulencia creada por el movimiento rápido del agitador asiste a la transferencia de calor, disminuyendo la temperatura requerida en la pared del evaporador, (que minimiza la degradación del producto). Aún más, se genera una área superficial máxima por unidad de volumen de flujo, facilitando una rápida evaporación y controlando el tiempo de exposición mediante la velocidad angular del mecanismo de agitación.

El Condensador.- El diseño del destilador es tal que la superficie de condensación está situada dentro del cuerpo del evaporador, suficientemente cerca de la superficie de evaporación, para minimizar las colisiones de las moléculas evaporadas en su trayecto hacia el condensador. Este condensador interno es un intercambiador de calor de doble tubo con suficiente fluido (aire) enfriante.

Dimensiones.- El equipo de destilación objeto de este estudio está construido de vidrio borosilícico; las hojas ranuradas del agitador de teflón; la escala de su tamaño es de laboratorio: 6 pulgadas. de diámetro; 2,194. cm² de área de evaporación.

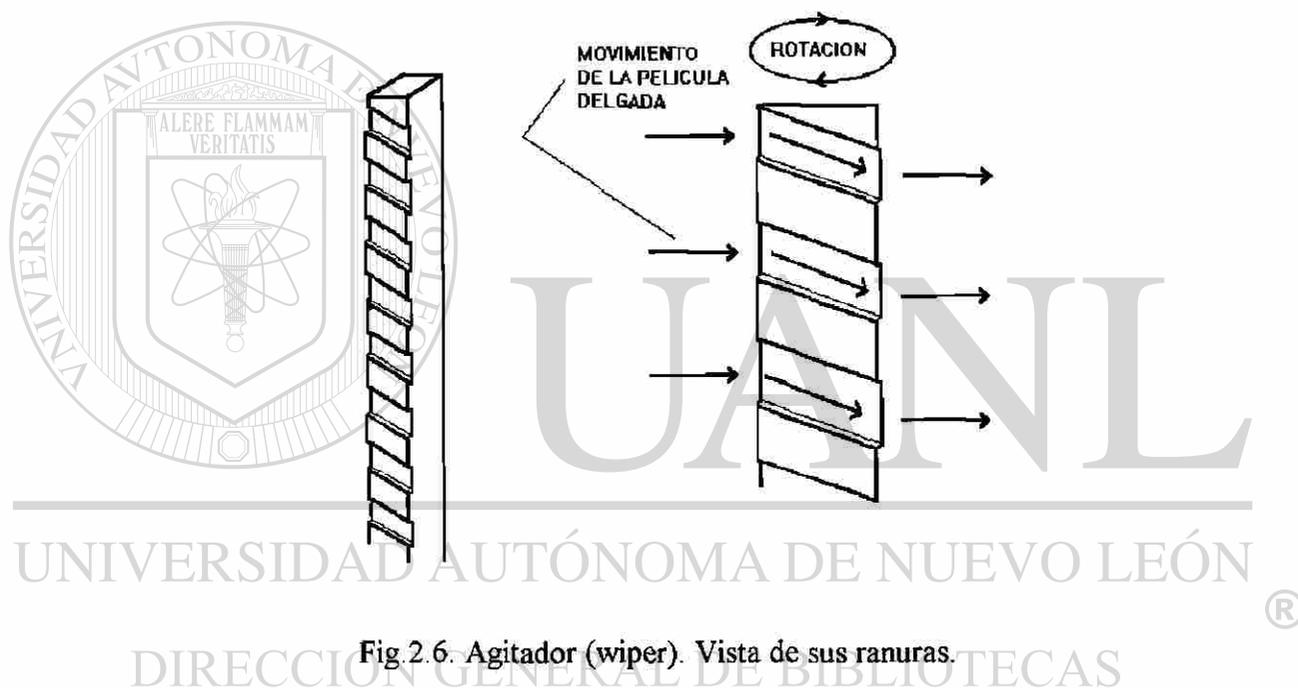


Fig. 2.6. Agitador (wiper). Vista de sus ranuras.

2.4.- Mecanismos Internos del Proceso

Las técnicas analíticas de control modernas exigen una gran cantidad de información acerca de la dinámica del proceso y para ello es indispensable una representación matemática basada en principios fundamentales. Este tipo de modelos tiene el nivel de descripción para representar matemáticamente los procesos reales, incorporando la complejidad del detalle físico interno con información de las características propias del sistema. Así, la forma general del modelo matemático de la columna de DMTC dependerá de los mecanismos internos del proceso.

De acuerdo a la fenomenología de la evaporación se discuten a continuación los mecanismos mediante los cuales puede ser representada la destilación, que se puede entender como la manera en que se distribuye el flujo de materiales en el interior de la columna.

Sean las siguientes consideraciones:

1. En la columna de DMTC se distinguen dos zonas, una de evaporación y otra de condensación. A mayor velocidad de condensación, más cerca se está al concepto de destilación molecular. Si se provee suficiente condensación se minimiza el retorno del destilado hacia la superficie de evaporación.
2. Por la evidencia experimental, Burrows [B], bajo condiciones de destilación molecular, la tasa de constituyentes en el destilado se aproxima a una relación inversa de la raíz cuadrada del peso molecular de los constituyentes y en forma directa respecto a su presión parcial. Un concepto básico de la química-física establece que la presión parcial de un componente es función de su composición y de su temperatura.
3. La renovación del material en la superficie donde sucede la evaporación, es necesaria para mantener constante la relación de componentes durante la vaporización, la cuál es provista por la agitación de barrido de la película.
4. El resultado de suministrar energía a un fluido se manifiesta como un cambio en la temperatura del mismo.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

Implicaciones:

- (1) ⇒ Sólo la zona de evaporación es relevante a la modelación.
- (2) ⇒ A medida que ocurre la evaporación del líquido, cambian la composición y temperatura del líquido. Las principales características que determinan la vaporización (y con ello gran parte de la operación), son la presión del sistema, y la composición y temperatura del fluido.
- (3) ⇒ Las dimensiones de la película descendente dependen de la velocidad de agitación y de la magnitud de evaporación.
- (4) ⇒ El flujo de calor hacia la película descendente gobierna directamente la temperatura, e indirectamente la magnitud de la evaporación.

En resumen, la distribución de fluido en la columna depende de las contribuciones y emanaciones de material, estas entradas y salidas están influidas por las características del sistema de agitación y la velocidad de suministro de energía. Si los fluidos se describen mediante la composición, el flujo y la temperatura, entonces estas variables deberán estar relacionadas a la velocidad de vaporización. Como se estableció en §2.2, la vaporización es función de las condiciones de presión, la forma de la película de líquido y de la transferencia de calor.

Por tanto, los factores relevantes en la caracterización del proceso son la velocidad de vaporización, y la distribución de flujos en el interior de la columna. Las variables (sus distribuciones) a considerar para la modelación del proceso son: la temperatura, el flujo interno, el espesor, la composición, la velocidad de agitación, y el flujo de energía. Esquemáticamente se tiene una relación como la dada en la Figura 2.7.

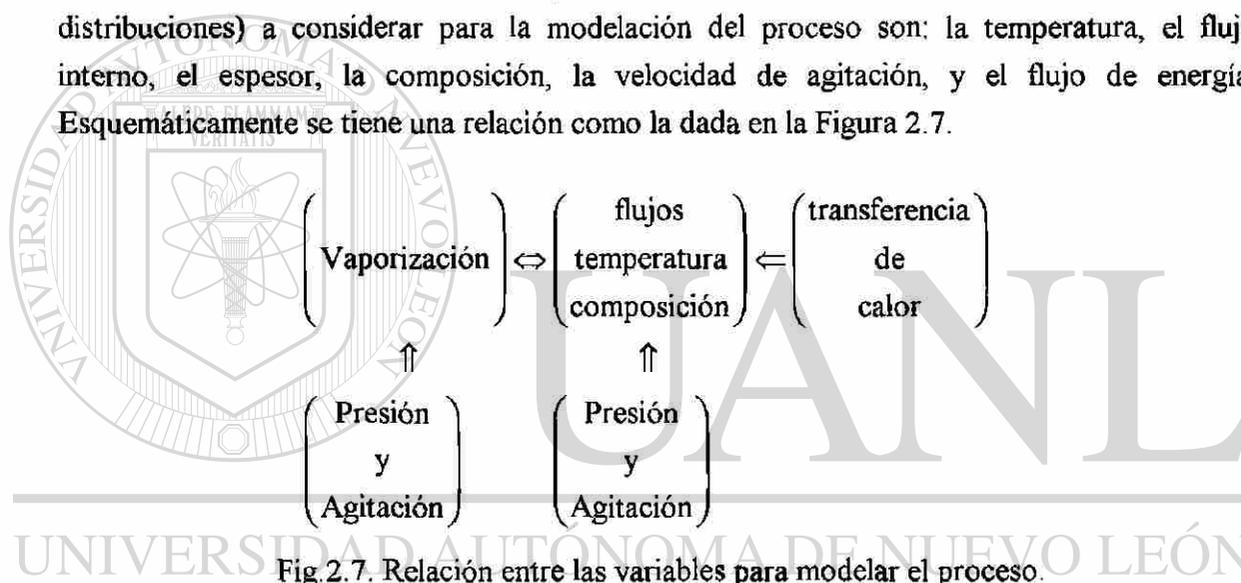


Fig. 2.7. Relación entre las variables para modelar el proceso.

En las siguientes secciones se detallan los mecanismos de la destilación.

2.5.- Velocidad de Vaporización

De acuerdo con §2.2, la velocidad de vaporización bajo condiciones de destilación molecular se representa por (2.9); es decir:

$$N^{\circ} = 0.0583 f P \sqrt{\frac{M}{T}} \quad (2.10)$$

donde $N^{\circ} = \{ \text{gr/seg-cm}^2 \}$ densidad de flujo másico de componente evaporado.

- $P =$ {mm Hg} presión de saturación.
 $M =$ {gr/mol} peso molecular.
 $T =$ {°K} temperatura absoluta del destilando.
 $f =$ factor que toma en cuenta la geometría del equipo.

Hipótesis 2.3: El producto a destilar es una mezcla pseudo-binaria formada por los componentes A y B, donde A es la sustancia principal y B es un pseudocomponente que incluye todos los componentes presentes en menor proporción. ∞

Para una mezcla binaria, (2.10) se reescribe como la suma de las velocidades individuales de evaporación $N^0 = N_A^0 + N_B^0$, con

$$N_A^0 = 0.0583 f p_A \sqrt{\frac{M_A}{T}} \quad (2.11)$$

$$N_B^0 = 0.0583 f p_B \sqrt{\frac{M_B}{T}} \quad (2.12)$$

donde p_A es la presión parcial del componente A en la fase vapor.

La presión parcial de una sustancia es el producto de la composición molar de A en el líquido, x_{mA} , por la presión de vapor del mismo componente puro, P_{vA} , a la temperatura T del líquido, Glasstone [GL], es decir,

$$\left\{ \begin{array}{l} p_A = x_{mA} P_{vA} \\ x_{mA} = \frac{x_A}{x_A + (1 - x_A) \frac{M_A}{M_B}} \\ P_{vA} = k \exp\left(-\frac{\lambda_{vA}}{RT}\right) \end{array} \right. \quad (2.13)$$

donde λ es el calor latente de vaporización del componente, x_A es la fracción en peso del componente A, R es la constante de los gases ideales y k es una constante que depende del material.

Por tanto, cuando se establecen las características del fluido, se define la dinámica de la vaporización, i.e. el flujo másico de evaporación es una función de la composición del componente principal y de la temperatura de la mezcla:

$$N^0 = N^0(x_A, x_B, T) \quad (2.14)$$

2.6.- Distribución del Líquido en el Evaporador

La separación de las sustancias tiene un máximo cuando se tiene una relación máxima de área-volumen de fluido a las condiciones de operación del interior de la columna. Este máximo puede ser alcanzado si el fluido a destilar forma una película lo más delgada posible en la superficie de calentamiento del evaporador. De aquí la importancia que de la distribución del líquido en la columna, en el modelo de la columna. La distribución del líquido en el interior de la columna está definida por dos factores: a) La relación área-volumen de fluido; y b) la velocidad de vaporización. El primero queda definido por el diseño del sistema de agitación, y el flujo de alimentación; el segundo, por las condiciones de operación.

Para determinar cómo se relacionan la distribución de flujo con la velocidad de evaporación se determina la forma en que la película desciende a lo largo de la pared de la columna. Las siguientes observaciones experimentales describen la distribución del flujo:

1. En el extremo superior de la columna, se alimenta el fluido sobre la superficie interna de la misma. En seguida y después de iniciar su descenso, el agitador en movimiento captura al líquido y lo distribuye a lo largo de la circunferencia de la columna.
2. Una vez distribuido, el fluido desciende a lo largo del agitador y siempre en contacto con la pared.
3. Estando el agitador en movimiento, el líquido que arrastra, desciende y fluye por entre las ranuras del agitador y por el claro entre el agitador y la pared.
4. En cada giro el agitador va dejando tras de sí una estela, formada por una serie de "anillos" de líquido sobre la pared del evaporador.
5. Los "anillos" de líquido escurren entre cada giro del agitador, produciendo en apariencia una película descendente de fluido.

La acción centrífuga del agitador proporciona la acción motriz para hacer fluir al líquido por entre sus ranuras, que están inclinadas respecto a su movimiento. Esto explica en gran medida la distribución "anular"; por otro lado, la acción de la gravedad genera la película descendente a partir de los "anillos" de líquido. El mecanismo se ilustra esquemáticamente en la Figura 2.8.

De esta manera, la película inducida por el agitador está constituida realmente por una serie descendente de "anillos de fluido" sobre la pared de la columna. Se produce además, un mezclado vigoroso en cada "anillo".

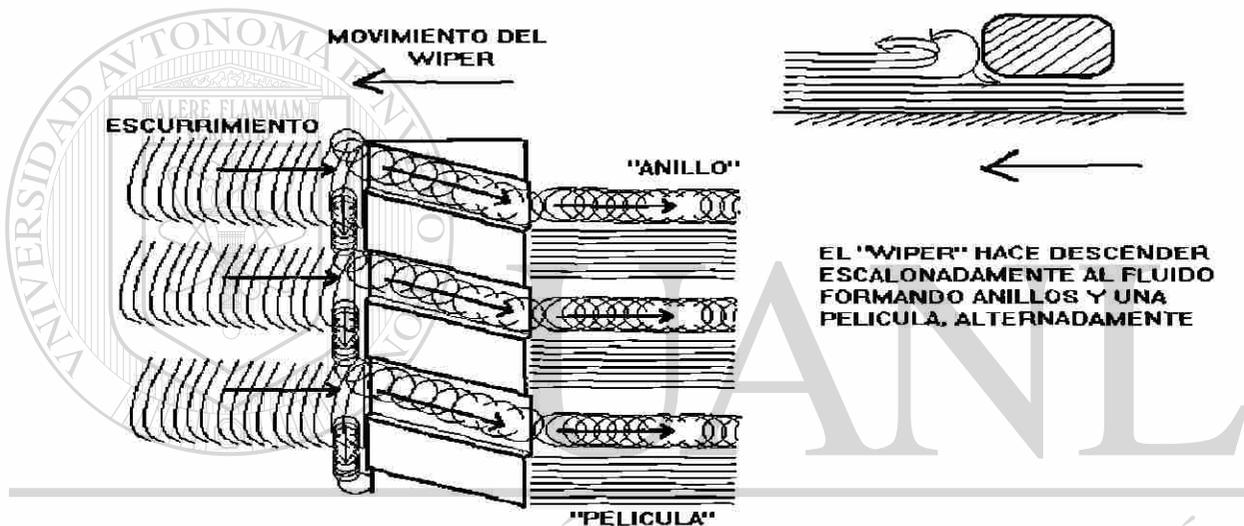


Fig.2.8. Formación de la película descendente.

2.6.1.- Escorrimento de Líquido en Paredes Verticales

Se procede ahora a determinar la velocidad de descenso y el espesor de la película. Considérese la siguiente situación análoga, sea la pared vertical de un recipiente cilíndrico, lleno inicialmente de líquido y que en un momento dado se le da salida por la parte inferior. En las paredes del recipiente resultará una película descendente cuyo espesor variará con el tiempo y la altura en la pared. Esta variación estará determinada por los balances transitorios de masa y de momentum, Bird [BSL].

Balance de Masa. El balance de materia en un elemento de volumen $\Delta x \Delta y \Delta z$, relaciona el espesor $\delta(z,t)$ de la película descendente en función del tiempo y la posición z , ver Figura 2.9.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \Delta x \Delta y \Delta z) = (\rho v_z \Delta x \Delta y)_z - (\rho v_z \Delta x \Delta y)_{z+\Delta z} \quad (2.15)$$

donde ρ es la densidad del fluido considerada constante, v_z es la velocidad del fluido en la dirección z .

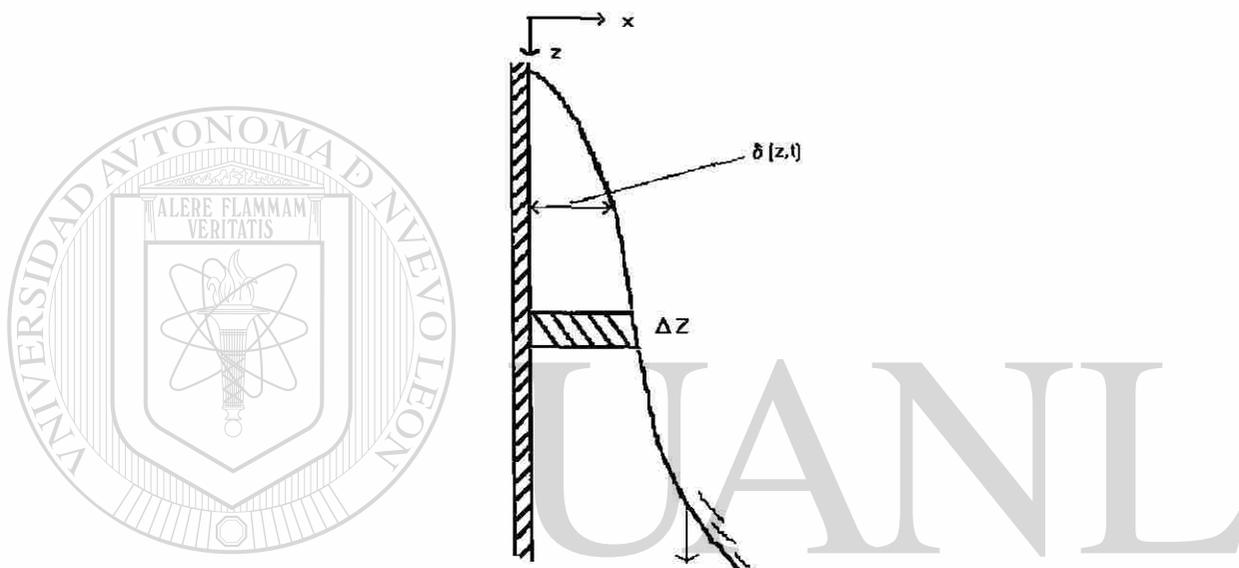


Fig.2.9. Elemento diferencial de altura Δz de fluido descendiendo en una pared vertical.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Dividiendo (2.15) entre $(\Delta y \Delta z)$ constantes, definiendo $\Delta x \equiv \delta(z,t)$, y tomando el límite $\Delta z \rightarrow 0$, queda expresada como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\delta(z,t)) = -\frac{\partial}{\partial z}(v_z \delta(z,t)) \quad (2.16)$$

Balance de Momentum.- El balance de la cantidad de movimiento se realiza en la misma película descendente, pero en un elemento de volumen $\Delta x W L$, donde W es el ancho del elemento y L es su longitud total. El origen de coordenadas (x,z) se coloca ahora sobre la superficie del líquido, el espesor y las propiedades físicas del fluido se consideran constantes, ver Figura 2.9.

Hipótesis 2.4: Bajo un régimen de flujo laminar en estado estacionario la velocidad $v_z(x)$ del elemento $\Delta x WL$ es función sólo del espesor x . \diamond

El balance representa la conservación de la cantidad de movimiento

$$LW(\tau_{xz})_x - LW(\tau_{xz})_{x+\Delta x} + W\Delta x(\rho v_z^2)_{z=0} - W\Delta x(\rho v_z^2)_{z=L} + LW\Delta x\rho g = 0 \quad (2.17)$$

donde τ_{xz} es el esfuerzo cortante por unidad de área $\Delta x\Delta z$ en la dirección x .

Si se divide (2.17) entre $LW\Delta x$ y en el límite, cuando $\Delta x \rightarrow 0$, el balance de momentum será:

$$\frac{d\tau_{xz}}{dx} = \rho g \quad (2.18)$$

que integrado con condiciones frontera $x=0, \tau_{xz}=0$, resulta en:

$$\tau_{xz} = \rho g x \quad (2.19)$$

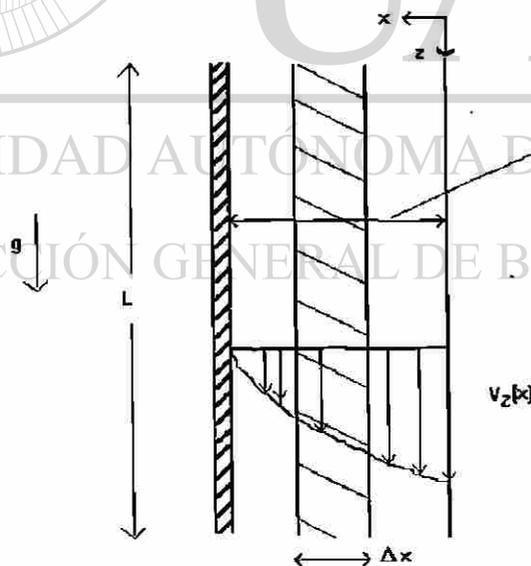


Fig.2.10. Película descendente. Elemento diferencial de volumen donde se define el balance de momentum.

Si se considera un fluido newtoniano, i.e., $\tau_{xz} = -\mu \frac{dv_z}{dx}$, donde μ es la viscosidad del fluido, entonces (2.19), es ahora una ecuación diferencial de la velocidad del fluido respecto al espesor.

$$\frac{dv_z}{dx} = -\frac{\rho g x}{\mu} \quad (2.20)$$

Integrando (2.20) con $x = \delta$, $v_z = 0$, se obtiene que la velocidad del fluido respecto al espesor está dada por la expresión siguiente:

$$v_z = \frac{\rho g \delta^2}{2\mu} \left(1 - \left(\frac{x}{\delta} \right)^2 \right) \quad (2.21)$$

La velocidad máxima se encuentra en $x=0$. Si se define la velocidad media como

$$\langle\langle v_z \rangle\rangle = \frac{\int_0^w \int_0^\delta v_z dx dy}{\int_0^w \int_0^\delta dx dy}, \text{ entonces}$$

$$\langle\langle v_z \rangle\rangle = \frac{\rho g \delta^2}{3\mu} \quad (2.22)$$

Hipótesis 2.5: Todo el fluido que forma la película descendente viaja con una velocidad media $\langle\langle v_z \rangle\rangle$, independientemente de la distancia a la pared del evaporador. $\diamond \text{ (R)}$

Substituyendo (2.22) en (2.16) se obtiene la ecuación diferencial parcial cuya solución define la dependencia del espesor de película respecto a la altura z y al tiempo.

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} + \frac{\rho g \delta^2}{\mu} \frac{\partial \delta}{\partial z} = 0 \quad (2.23)$$

Este tipo de ecuaciones diferenciales parciales tiene solución, Wylie [W], si $\delta(z,t)$ puede ser separada como un producto de dos funciones independientes de $Z(z)$ y $T(t)$, es decir,

$$\frac{\partial \delta}{\partial z} = \frac{dZ}{dz} T, \quad \frac{\partial \delta}{\partial t} = Z \frac{dT}{dt} \quad (2.24)$$

Se aplica el método de separación de variables a (2.23) con lo que se obtiene

$$-\frac{\rho g}{\mu} z \frac{dz}{dz} = k, \quad \frac{dT}{dt} = kT^3 \quad (2.25)$$

donde k =constante, y su integración permite conocer la función del espesor de la película.

$$\delta(z, t) = \sqrt{\frac{\mu}{\rho g} \left(\frac{B - kz}{A - kt} \right)} \quad (2.26)$$

Si $z=0, \forall t > 0 \Rightarrow (\delta = 0; t = 0), \forall z \geq 0 \Rightarrow \delta = \delta_*$; donde δ_* es una cantidad finita de fluido inicial, entonces (2.26) se reduce a

$$\delta(z, t) = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\delta_*} + \frac{\rho g t}{\mu z}}} \quad (2.27)$$

que para cantidades iniciales δ_* relativamente grandes de fluido, el espesor resultante es

$$\delta(z, t) = \sqrt{\frac{\mu z}{\rho g t}} \quad (2.28)$$

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

2.6.2.- Espesor de la Película Descendente en la Columna de Destilación Molecular

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

En su recorrido, las aspas del agitador producen un conjunto de "anillos" de líquido, que por gravedad descienden sobre la pared interior formando una película. El escurrimiento transcurre sólo mientras vuelve a pasar el agitador por el mismo lugar de la columna. Durante ese intervalo de tiempo se habrá formado una película de espesor variable respecto a la altura del escurrimiento, como se esquematiza en la Figura 2.11.

Hipótesis 2.6: El espesor de la película descendente es aproximadamente el promedio

$$\langle\langle \delta \rangle\rangle = \int_0^{z_f} \delta(z, t) dz / \int_0^{z_f} dz, \text{ durante un intervalo de tiempo } [0, t_f]. \quad \infty$$

De acuerdo con la anterior hipótesis y la expresión (2.28), el espesor promedio de la película descendente durante un intervalo de tiempo $[0, t_f]$ es

$$\langle\langle \delta \rangle\rangle = \sqrt{\frac{\mu}{\rho g t_f}} \int_0^{z_f} \sqrt{z} dz / z_f \quad (2.29)$$

donde t_f es el período del agitador. Si el agitador posee 4 aspas simétricas, entonces el período del agitador se relaciona con la velocidad de agitación como $t_f = 1/4\Omega$.

La máxima cantidad inicial de líquido que contiene este "anillo" es $\pi D b \delta_*$, donde D es el diámetro de la columna, b es el ancho de la ranura del agitador, y δ_* , es su espesor inicial. Este volumen inicial se asume constante para intervalos cortos de tiempo.

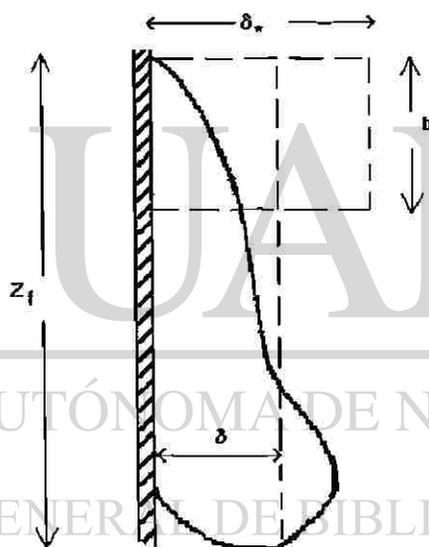


Fig.2.11. Película formada a partir de un "Anillo" de fluido.

Si se distribuye el líquido inicialmente contenido en el volumen del "anillo", se obtiene un volumen uniforme de altura z_f y un espesor $\langle\langle \delta \rangle\rangle$, entonces este volumen será de $\pi D z_f \langle\langle \delta \rangle\rangle$

Análogamente a (2.28), con el espesor promedio $\langle\langle \delta \rangle\rangle = \frac{2}{3} \delta(z_f, t_f)$ introducido en (2.29), se obtiene la altura de descenso máxima alcanzable por el "anillo" en un $t \in [0, t_f]$:

$$z_f = \sqrt[3]{\frac{9b^2 \delta^2 \rho g}{4\mu 4\Omega}} \quad (2.30)$$

Se concluye entonces que si las características de diseño y operación del proceso son las apropiadas, entonces el escurrimiento del líquido no sobrepasará nunca la posición de la ranura contigua corriente abajo del agitador.

El estudio en §2.2 demuestra que la cantidad de vaporización, bajo condiciones de destilación molecular, depende más bien de la cantidad de superficie expuesta a las condiciones del proceso que del volumen (espesor) de la película. Por ello, la variación del espesor de la película sólo es relevante para definir el flujo de líquido en la columna.

La conclusión anterior acerca del escurrimiento permite obtener una representación simple de la distribución del flujo interno y con ella formular un modelo menos complicado.

2.6.3.- Representación de la Distribución de Flujos en la Columna

La distribución de flujos, determinada en el párrafo precedente, sugiere hacer una subdivisión de la columna en compartimentos (secciones) de altura Δz . Bajo condiciones normales de operación el proceso de destilación molecular se representa como una serie de "tanques" (compartimentos) en cascada no interaccionados (ver glosario) como se muestra en la Figura 2.12, donde cada "tanque" corresponde a una sección de columna de altura $\Delta z \geq b$, y b es la distancia entre ranuras del agitador. En dicha figura, los compartimentos se han hecho coincidir con la distancia entre ranuras.

Si se considera una sección i cualquiera, de altura $\Delta z = b$, las aspas ranuradas del agitador a su paso sobre la pared del evaporador, producen:

- (1) Una película delgada de espesor δ_0 de líquido presionado por las aspas contra la pared.
- (2) Un anillo de fluido que instantáneamente forma una película de espesor $\delta_i(t)$ uniforme.

De acuerdo a ésto, los siguientes flujos se intercambian en cada sección i con las secciones adyacentes $(i-1)$, $(i+1)$:

- (1) Un flujo F_{i-1} por escurrimiento que proviene de la película de espesor δ_o de la sección $(i-1)$.
- (2) Un flujo $F_{\delta_{i-1}}$ mecánicamente arrastrado por el agitador que proviene de la película de espesor $(\delta_{i-1}-\delta_o)$ de la sección $(i-1)$.
- (3) Un flujo F_i por escurrimiento de la película de espesor δ_i que sale de la sección i .
- (4) Un flujo F_{δ_i} mecánicamente arrastrado por el agitador que se le extrae de la película de espesor $(\delta_i-\delta_o)$ y que sale de la sección i .
- (5) Un flujo por vaporización N_i que sale de la sección i en dirección al condensador.

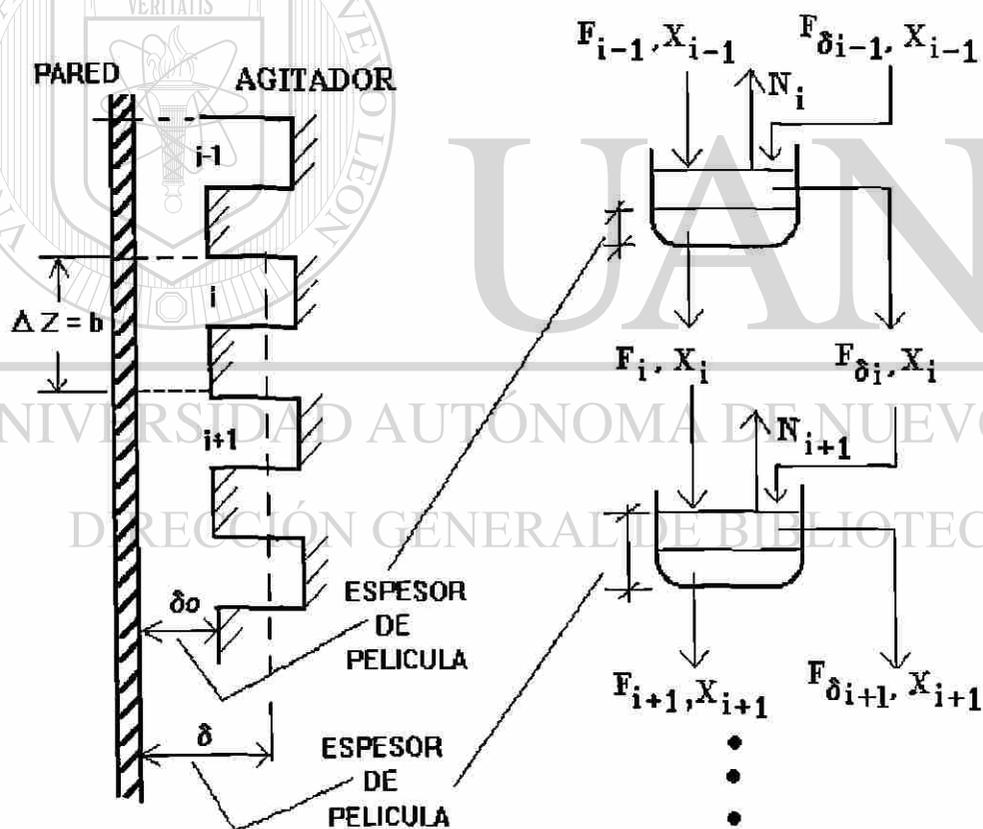


Fig.2.12. Representación de la evaporación en compartimentos.

2.7.- Balances de Masa y Energía en el Evaporador

El comportamiento dinámico de la columna de DMTC, y por tanto su desempeño, es masa-energía intensivo, por lo que el modelo que lo describe deberá generarse a partir de la ley de conservación de masa y energía, expresada como

$$\left(\begin{array}{c} \text{Entradas de} \\ \text{Masa / Energía} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{Salidas de} \\ \text{Masa / Energía} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{Transformación de} \\ \text{Masa / Energía} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Acumulación de} \\ \text{Masa / Energía} \end{array} \right) \quad (2.31)$$

El entorno más conveniente para aplicar esta ley es un compartimento de columna, que esquemáticamente se representa como sigue

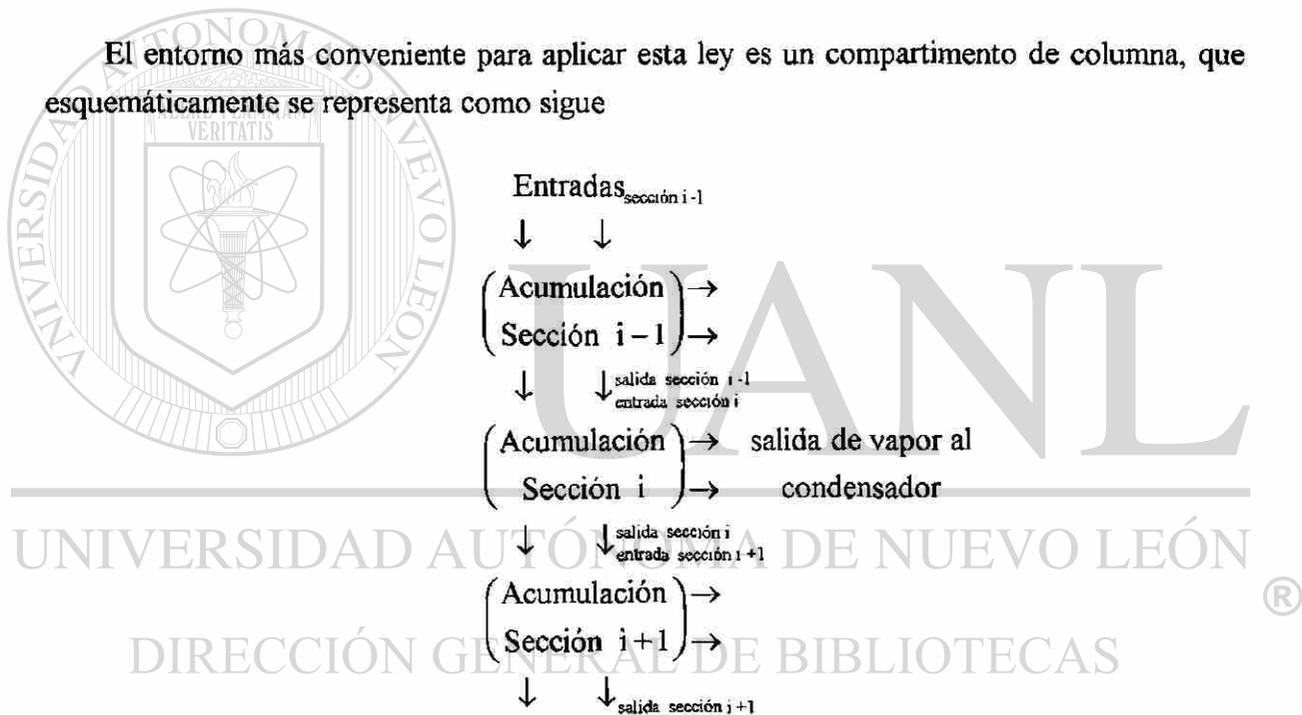


Fig.2.13.- Relación de flujos entre compartimentos de columna.

A cada aplicación de la ley de conservación a una sección o compartimento i se le denominará **balance compartamental** (ver glosario), Benallou, Seborg [BSM]. La característica más relevante de este enfoque es la suposición de homogeneidad del fluido al interior de cada compartimento.

Hipótesis 2.7: El fluido contenido en cada sección i de la columna tiene propiedades fisico-químicas, composición x_i y temperatura T_i , homogéneas en todo el volumen contenido en la altura Δz y espesor δ_i . \diamond

2.7.1.- Balance de Masa Global

Se aplican los balances compartimentales a una sección i de altura Δz de la columna de DMTC. De acuerdo al diagrama de flujo de la Figura 2.12 y empleando (2.11), (2.12), (2.13), y (2.22) se obtiene el balance siguiente:

$$\frac{dm_i}{dt} = F_{i-1} - F_i + F_{\delta_{i-1}} - F_{\delta_i} - N_i \quad i = 2, \dots, n \quad (2.32)$$

donde:

n

$$m_i = (\pi D \Delta z \delta_i) \rho_i$$

$$F_i = (\pi D \delta_o) v_i \rho_i$$

$$F_{i-1} = (\pi D \delta_o) v_{i-1} \rho_{i-1}$$

$$F_{\delta_i} = (\pi D b) 4 \Omega (\delta_i - \delta_o) \rho_i$$

Número total de compartimentos.

Masa contenida en la sección i de espesor δ_i .

Flujo de salida de la película de espesor δ_o .

Flujo de entrada de la película de espesor δ_o .

Flujo de salida por arrastre mecánico del agitador.

$$F_{\delta_{i-1}} = (\pi D b) 4 \Omega (\delta_{i-1} - \delta_o) \rho_{i-1}$$

Flujo de entrada por arrastre mecánico del agitador.

$$N_i = (\pi D \Delta z) (x_{mi} N_{Ai} + (1 - x_{mi}) N_{Bi}) \quad \text{Flujo másico por evaporación.}$$

$$x_{mi} = \frac{x_i}{x_i + (1 - x_i) \frac{M_A}{M_B}}$$

Fracción molar de A, donde x_i es la fracción peso.

$$N_{Ai} = 0.0583 P_{vAi} f \sqrt{\frac{M_A}{T_i}}$$

Flux de evaporación de A por unidad de fracción molar.

$$N_{Bi} = 0.0583 P_{vBi} f \sqrt{\frac{M_B}{T_i}}$$

Flux de evaporación de B por unidad de fracción molar.

$$P_{vAi} = k_a e^{-\lambda_{vA}/RT_i} \quad \text{Presión de vapor de A a la temperatura } T_i.$$

$$P_{vBi} = k_b e^{-\lambda_{vB}/RT_i} \quad \text{Presión de vapor de B a la temperatura } T_i.$$

$$v_i = \frac{g\rho_i\delta_0^2}{3\mu_i} \quad \text{Velocidad de descenso de la película.}$$

Las propiedades físicas⁽¹⁾ del fluido y otras constantes son: ρ la densidad; μ la viscosidad; M el peso molecular; λ_v el calor de vaporización del componente puro; R es la constante de los gases ideales; g es la aceleración de la gravedad; D es el diámetro interno de la columna (evaporador); y Ω es la velocidad de giro del agitador.

Observación: Todos estos parámetros y variables son expresadas en el sistema de unidades cgs, excepto donde se indique. ∞

La ecuación (2.32) en términos del espesor de película δ

$$(\pi D \Delta z) \frac{d(\delta_i \rho_i)}{dt} = (\pi D \delta_0) (v_{i-1} \rho_{i-1} - v_i \rho_i) + \pi D b 4 \Omega ((\delta_{i-1} - \delta_0) \rho_{i-1} - (\delta_i - \delta_0) \rho_i) - N_i$$

para $i = 2, \dots, n$ (2.33)

equivalentemente

$$\frac{d\delta_i}{dt} = -\frac{\delta_i}{\rho_i} \frac{d\rho_i}{dt} + \frac{\delta_0 v}{\Delta z} \frac{\rho_{i-1} - \rho_i}{\rho_i} + \frac{4b\Omega}{\Delta z \rho_i} ((\delta_{i-1} - \delta_0) \rho_{i-1} - (\delta_i - \delta_0) \rho_i) - \frac{1}{\rho_i} (x_{mi} N_{Ai} + (1 - x_{mi}) N_{Bi})$$

para $i = 2, \dots, n$ (2.34)

donde δ_i representa el espesor⁽²⁾ de la película descendente en la sección i , válida para toda sección, excepto la de alimentación.

⁽¹⁾ Las propiedades físicas de una mezcla son en realidad dependientes de su composición y temperatura. Sin embargo, debido a los cambios graduales y relativamente pequeños, se puede asumir inicialmente que son constantes y que no influyen en los resultados.

⁽²⁾ El espesor δ_i , ($i=1, \dots, n-1$), no es medible, excepto el de la última sección, $i=n$, que se deduce en base al flujo de fondos F_B .

2.7.2.- Balance de la Masa del Componente A

Similar a §2.7.1, pero aplicado a un sólo componente, es decir,

$$\left(\begin{array}{c} \text{masa del componente} \\ \text{más volátil} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{masa global} \times \\ \text{fracción peso del componente} \end{array} \right) \quad (2.35)$$

que con (2.32) resulta en

$$\frac{d(x_i m_i)}{dt} = x_{i-1} F_{i-1} - x_i F_i + x_{i-1} F_{\delta_{i-1}} - x_i F_{\delta_i} - (\pi D \Delta z) x_{mi} N_{Ai} \quad (2.36)$$

o en forma equivalente para $i = 2, \dots, n$,

$$\begin{aligned} (\pi D \Delta z) \frac{d(x_i \delta_i \rho_i)}{dt} &= (\pi D \delta_0) (x_{i-1} v_{i-1} \rho_{i-1} - x_i v_i \rho_i) + \\ &+ \pi D b 4 \Omega ((\delta_{i-1} - \delta_0) x_{i-1} \rho_{i-1} - (\delta_i - \delta_0) x_i \rho_i) - (\pi D \Delta z) x_{mi} N_{Ai} \end{aligned} \quad (2.37)$$

que se reescribe como:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{\delta_i} \left(-x_i \frac{d\delta_i}{dt} + \frac{\delta_0 v}{\Delta z} \frac{x_{i-1} \rho_{i-1} - x_i \rho_i}{\rho_i} + \frac{4b\Omega}{\Delta z \rho_i} ((\delta_{i-1} - \delta_0) x_{i-1} \rho_{i-1} - (\delta_i - \delta_0) x_i \rho_i) - \frac{x_{mi} N_{Ai}}{\rho_i} \right) \quad (2.38)$$

donde x_i es la composición homogénea de la sustancia A en la sección i. Válida para toda sección, excepto la de alimentación, es decir, para $i = 2, \dots, n$.

2.7.3.- Balance de Energía

La energía para efectuar la evaporación es obtenida a partir de una resistencia eléctrica (manta de calentamiento), la cual se transmite por conducción a través de la pared del evaporador. El número de mantas de calentamiento instaladas son dos, de igual tamaño e independientes entre sí, y cada una puede proporcionar una energía máxima q_{\max} cal/seg. Por homogeneidad, el fluido que sale de cada sección i, se encuentra a la misma temperatura T_i que el fluido que se encuentra en el interior de cada compartimento.

Hipótesis 2.8: La columna de DMTC está térmicamente muy bien aislada. ∞

Aplicando la ley de conservación de energía a una sección i , para $i = 2, \dots, n$

$$\frac{d(h_i M_i)}{dt} = h_{i-1} F_{i-1} - h_i F_i + h_{i-1} F_{\delta_{i-1}} - h_i F_{\delta_i} - h_i N_i + q_{i,j} \left(\frac{\Delta z}{L} \right) \quad (2.39)$$

donde, h_i , es la entalpía sensible por unidad de masa y el término $q_{i,j}(\Delta z/L)$, es la entrada de energía de la manta de calentamiento $j = 1, 2$ según sea la manta superior o inferior en la columna y L es la longitud de calentamiento que cubre cada manta j ; ver Figura 2.5.

Como las sustancias manejadas se encuentran en estado sólido a la temperatura ambiente, y después sufre un cambio de estado, entonces la entalpía h del material debe incluir el contenido entálpico proveniente de la energía de cada cambio de fase. En general, las sustancias químicas industriales no sufren otros cambios importantes que dependan de la temperatura. Entonces:

$$h_i = C_{p_s}(T_f - T^0) + \lambda_f + C_{p_L}(T_i - T_f), \quad (2.40)$$

$$h_{N_i} = C_{p_s}(T_f - T^0) + \lambda_f + C_{p_L}(T_{i-1} - T_f) + \lambda_v, \quad \text{para } i = 2, \dots, n \quad (2.41)$$

donde T_f , es la temperatura de fusión del material; T^0 es la temperatura estándar de referencia, T_i es la temperatura del material en la sección i ; C_{p_s} es la capacidad calorífica⁽³⁾ del sólido; C_{p_L} la capacidad calorífica de líquido; λ_f es el calor de fusión del material; y λ_v es su calor de vaporización.

Considerando esto último, (2.39) se expresa como sigue:

$$\begin{aligned} (\pi D \Delta z) \frac{d(h_i \delta_i \rho_i)}{dt} &= (\pi D \delta_0) (h_{i-1} v_{i-1} \rho_{i-1} - h_i v_i \rho_i) \\ &+ \pi D b 4 \Omega ((\delta_{i-1} - \delta_0) h_{i-1} \rho_{i-1} - (\delta_i - \delta_0) h_i \rho_i) - h_{N_i} N_i + q_{j,i} \frac{\Delta z}{L} \end{aligned} \quad i = 2, \dots, n \quad (2.42)$$

⁽³⁾ Por la nota de pie de página (1), $C_p = x C_{p_A} + (1-x) C_{p_B}$.

efectuando las operaciones señaladas:

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{1}{\delta_i C_{pL}} \left(-h_i \frac{d\delta_i}{dt} + \frac{\delta_0 v}{\Delta z} \frac{h_{i-1} \rho_{i-1} - h_i \rho_i}{\rho_i} + \frac{4b\Omega}{\Delta z \rho_i} ((\delta_{i-1} - \delta_0) h_{i-1} \rho_{i-1} - (\delta_i - \delta_0) h_i \rho_i) - \frac{h_{M_i}}{\rho_i} (x_{mi} N_{Ai} + (1 - x_{mi}) N_{Bi}) + \frac{1}{\pi D \Delta z \rho_i} q_i \frac{\Delta z}{L} \right) \quad (2.43)$$

expresión que es válida para toda sección, excepto la de alimentación, es decir, $i = 2, \dots, n$

2.7.4.- Flujo de calor a través de la Pared del Evaporador

En este punto se tratará del flujo de energía desde el exterior de la columna de DMTC hasta el líquido que constituye a la película descendente en el interior de la columna. El mecanismo de transferencia de energía es por conducción a través de un sólido y una capa de líquido quasi-estacionario.

Definición 2.6: La conducción de calor en un sólido homogéneo opaco es el transporte de calor desde un punto a otro, bajo la influencia de un gradiente de temperatura, sin el desplazamiento apreciable de partículas. ∞

La conducción va desde la pared en contacto con la manta eléctrica hasta el líquido en evaporación. De acuerdo con Necati-Özsisik [N], el número de Biot, $Bi = h\varepsilon/k$, es menor de 0.1, donde h es el flujo de calor por unidad de área, ε es el espesor, k es la conductividad del material, por lo que la temperatura en el medio de transporte es considerada esencialmente uniforme en cualquier instante de tiempo dado. De modo que la variación espacial de la temperatura, así como la forma geométrica del medio, se pueden despreciar y por tanto la variación de la temperatura en el medio será sólo función del espesor.

De acuerdo a la Figura 2.14, el balance de energía entre la chaqueta de calentamiento y el fluido en el interior de la columna queda definido como

$$\frac{d}{dt} (m_v c_{pv} (T_v - T^0)) = q_e \left(\frac{\Delta z}{L} \right) - q_i \left(\frac{\Delta z}{L} \right) \quad i = 1, \dots, n \quad (2.44)$$

donde m_v es la masa del vidrio, c_{pv} su calor específico y T_{vi} la temperatura de la pared del vidrio en la sección i .

Las temperaturas del fluido y la de la pared están relacionadas por la ley de enfriamiento de Newton, Necati-Özsisik [N]:

$$q_i \left(\frac{\Delta z}{L} \right) = UA(T_{vi} - T_i) \quad i = 1, \dots, n \quad (2.45)$$

donde $A = \pi D \Delta z$ es el área de transferencia de calor, U es el coeficiente de transferencia de calor por conducción en el vidrio y en la película.

El coeficiente U está definido por una expresión del tipo

$$1/U = \delta_v/k_v + \delta_o/k \quad (2.46)$$

donde δ_v es el espesor de la pared; δ_o es el espesor de la película quasi-estática de fluido; k y k_v son las conductividades del líquido y de la pared respectivamente.

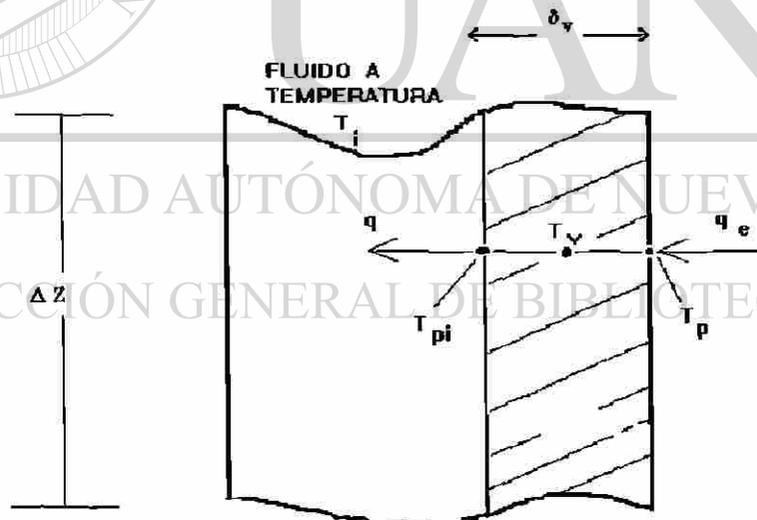


Fig.2.14. Conducción de calor a través de la pared del evaporador.

Hipótesis 2.9: La temperatura del vidrio en la superficie exterior de la pared se asume igual al valor de la temperatura en el centro del espesor del vidrio, es decir, $T_{pi} = T_{vi}$. \diamond

Esta suposición, aunque no se cumple en la realidad, permite simplificar grandemente la expresión del transporte de energía. El error inducido puede ser compensado mediante un ajuste pequeño de alguno de sus parámetros, como por ejemplo en la conductividad térmica del material. Por lo que (2.28) se expresa en términos de la temperatura T_{pi} como

$$\frac{dT_{pi}}{dt} = \frac{1}{\pi DL \delta_v \rho_v C_{pv}} q_e - \frac{k_v / \delta_v}{\delta_v \rho_v C_{pv}} (T_{pi} - T_i) \quad i = 1, \dots, n \quad (2.47)$$

en donde se ha despreciado el valor de la resistencia del líquido en el coeficiente global U .

2.7.5.- Resumen de ecuaciones

A continuación se presenta en la Tabla 2.2 un resumen del conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales obtenidas en los párrafos anteriores y que describen el comportamiento dinámico en la zona de evaporación de la columna de DMTC.

Comentario.- Las ecuaciones obtenidas para n compartimentos, equivalen a n ranuras en el agitador. De acuerdo a esto, la forma del modelo permanece igual independientemente del valor de n . ◇◇

El número de secciones n se escoge de acuerdo con la precisión que se desea del modelo, balanceando este número con la carga computacional requerida para el análisis del sistema de ecuaciones. De cualquier forma, el máximo número de estos compartimentos tiene un límite físico dado por el número de ranuras que tiene el agitador, en este caso estudio, 70. Para fines de análisis es suficiente un número mucho menor. Los compartimentos i de la columna pueden tener distinta longitud según la relevancia de cada uno, e.g., la sección de alimentación.

El resumen representa el modelo de la dinámica de la columna de DMTC y está constituido por cuatro variables de estado por cada compartimento. Para la sección $i=1$ de alimentación las ecuaciones se modificaron para incluir el flujo de alimentación. El producto de fondo de la destilación es caracterizado de acuerdo a la Hipótesis 2.7, por la dinámica de la sección $i = n$, i.e. la composición y temperatura de ese producto de fondos son los mismos que de la última sección, i.e., x_n y T_n .

Tabla 2.2.- Resumen de ecuaciones del modelo de la evaporación en la columna de DMTC.
Obtenido de (2.34), (2.38), (2.43) y (2.47).

$i=1$

$$\frac{d\delta_1}{dt} = -a_1 + a_2 F_0 + a_3 \Omega(a_4 - \delta_1) - \frac{a_5 x_1}{a_6 + (1-a_6)x_1} \frac{e^{-a_7/T_1}}{\sqrt{T_1}} - \frac{a_8(1-x_1)}{a_6 + (1-a_6)x_1} \frac{e^{-a_9/T_1}}{\sqrt{T_1}}$$

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{1}{\delta_1} \left(a_2 F_0 (x_0 - x_1) - \frac{a_5 x_1 (1-x_1)}{a_6 + (1-a_6)x_1} \frac{e^{-a_7/T_1}}{\sqrt{T_1}} + \frac{a_8 x_1 (1-x_1)}{a_6 + (1-a_6)x_1} \frac{e^{-a_9/T_1}}{\sqrt{T_1}} \right)$$

$$\frac{dT_1}{dt} = \frac{1}{\delta_1} \left(a_2 F_0 (T_0 - T_1) - \frac{a_5 a_{10} x_1}{a_6 + (1-a_6)x_1} \frac{e^{-a_7/T_1}}{\sqrt{T_1}} - \frac{a_8 a_{10} (1-x_1)}{a_6 + (1-a_6)x_1} \frac{e^{-a_9/T_1}}{\sqrt{T_1}} + a_{12} (T_{pi} - T_1) \right)$$

$$\frac{dT_{pi}}{dt} = a_{13} q_{e1} - a_{14} (T_{pi} - T_1)$$

$n \geq i > 1$

$$\frac{d\delta_i}{dt} = a_3 \Omega(\delta_{i-1} - \delta_i) - \frac{a_5 x_i}{a_6 + (1-a_6)x_i} \frac{e^{-a_7/T_i}}{\sqrt{T_i}} - \frac{a_8(1-x_i)}{a_6 + (1-a_6)x_i} \frac{e^{-a_9/T_i}}{\sqrt{T_i}}$$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{\delta_i} \left(a_1 (x_{i-1} - x_i) + a_3 \Omega(\delta_{i-1} - a_4) (x_{i-1} - x_i) - \frac{a_5 x_i (1-x_i)}{a_6 + (1-a_6)x_i} \frac{e^{-a_7/T_i}}{\sqrt{T_i}} + \frac{a_8 x_i (1-x_i)}{a_6 + (1-a_6)x_i} \frac{e^{-a_9/T_i}}{\sqrt{T_i}} \right)$$

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{1}{\delta_i} \left(a_1 (T_{i-1} - T_i) + a_3 \Omega(\delta_{i-1} - a_4) (T_{i-1} - T_i) - \frac{a_5 a_{10} x_i}{a_6 + (1-a_6)x_i} \frac{e^{-a_7/T_i}}{\sqrt{T_i}} - \frac{a_8 a_{10} (1-x_i)}{a_6 + (1-a_6)x_i} \frac{e^{-a_9/T_i}}{\sqrt{T_i}} + a_{12} (T_{pi} - T_i) \right)$$

$$\frac{dT_{pi}}{dt} = a_{13} q_{e1,2} - a_{14} (T_{pi} - T_i)$$

Tabla 2.2...Continuación.

$a_1 = \frac{\delta_0 v}{\Delta z_1}$	$a_8 = \frac{0.0583 f k_b a_6 \sqrt{M_b}}{\rho}$
$a_2 = \frac{1}{\pi D \Delta z \rho}$	$a_9 = \frac{\lambda_{vb}}{R}$
$a_3 = \frac{4b}{\Delta z}$	$a_{10} = \frac{\lambda_v}{C_{pl}}$
$a_4 = \delta_0$	$a_{12} = \left(\frac{k_v}{\delta_v} \right) \left(\frac{1}{\rho C_{pl}} \right)$
$a_5 = \frac{0.0583 f k_a \sqrt{M_a}}{\rho}$	$a_{13} = \frac{1}{\pi D L_{1,2} \delta_v \rho_v C_{pv}}$
$a_6 = \frac{M_a}{M_b}$	$a_{14} = \left(\frac{k_v}{\delta_v} \right) \left(\frac{1}{\rho_v C_{pv} \delta_v} \right)$
$a_7 = \frac{\lambda_{va}}{R}$	

donde n es el número de secciones seleccionada, L_1 , y L_2 son las longitudes de la columna que corresponden a las dos partes de calentamiento del evaporador. En a_{12} , a_{13} , a_{14} el subíndice v designa el material de que está hecha la pared de la columna, en este caso, el vidrio.

El flujo del residuo está determinado por el espesor, δ_n , con la expresión siguiente:

$$F_B = \pi D b 4 \Omega (\delta_n - \delta_0) + \pi D \delta_0 \rho v \quad (2.48)$$

finalmente, las variables que intervienen en el proceso, §2.4, se renombran como variables de entrada, de estado y de salida, como se muestran en la Tabla 2.3.

La aplicación de la ley de conservación a cada sección i produce cuatro ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales que describen las variaciones de su masa, composición y temperatura. De esta manera, el modelo completo de la columna de DMTC está constituido por un conjunto de $4 \times i$ ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales.

Tabla 2.3.- Definición de las variables de entrada, estado y salida del proceso.

VARIABLES DE ENTRADA:	F_o (flujo de alimentación), Ω (velocidad del agitador) q_{e1} , q_{e2} . (flujos de calor hacia las dos secciones de columna)
VARIABLES DE ESTADO:	δ (espesor de película), x (composición), T (temperatura del fluido), T_p , temperatura de la pared
VARIABLES DE SALIDA:	Dos temperaturas de pared: T_p , flujo de residuos o indirectamente el espesor δ_n , y la composición del residuo.
VARIABLES DE PERTURBACIÓN:	Composición y temperatura de la alimentación.

2.8.- Balances de Masa y Energía en el Condensador

Como se expresó en §2.2, si se provee suficiente enfriamiento al condensador, la dinámica de la columna de DMTC se hará independiente de la dinámica del evaporador. A continuación se formula la dinámica del condensador para justificar esta hipótesis.

Hipótesis 2.10: Las moléculas evaporadas en un medio evacuado, bajo condiciones de destilación molecular, viajan en línea recta en cualquier dirección espacial alejándose de la superficie del fluido en evaporación. ∞

Por hipótesis las moléculas evaporadas viajan en línea recta hacia cualquier parte del condensador; entonces, todo el líquido en la superficie del condensador consiste de material que proviene de cualquier parte del evaporador, como se esquematiza en la Figura 2.15. Por ello, sería imposible obtener una expresión que relacione una-a-una cada sección en la zona de evaporación con alguna zona del condensador. Por lo anterior, los balances de masa y energía son efectuados considerando como entorno al condensador completo. El líquido en el condensador tiene una composición y temperatura homogéneas que corresponden al promedio de todas las contribuciones de material provenientes de la zona de evaporación.

La aplicación de la ley de conservación de masa y de energía en el condensador produce las expresiones que relacionan la composición, el flujo y la temperatura del condensado. Las entradas al entorno son las emanaciones de vapor que provienen de todas las zonas del evaporador, y la única salida es el condensado.

$$\begin{aligned}\frac{dM_c}{dt} &= \sum_i N_i - F_D \\ \frac{d(x_D M_c)}{dt} &= \sum_i N_{Ai} - x_D F_D \\ \frac{d(h_D M_c)}{dt} &= \sum_i h_{Ni} N_i - h_D F_D - q_c\end{aligned}\quad (2.49)$$

donde $M_c = (\pi D_c \delta_c L_c) \rho_c$ es la masa de condensado contenida en la película de condensador; δ_c es su espesor; D_c y L_c son el diámetro y longitud del condensador; ρ_c es la densidad del destilado; x_c es la composición homogénea del componente A en todo el condensador; h es a la entalpía del líquido en el condensador; y q_c es el calor retirado por el refrigerante, definido como

$$q_c = V_a \rho_a C_{p_a} (T_{as} - T_{ae}) \quad (2.50)$$

donde V_a es el flujo volumétrico de refrigerante que entra al condensador a una temperatura T_{ae} y sale a una temperatura T_{as} . Las propiedades físicas del aire son prácticamente constantes.

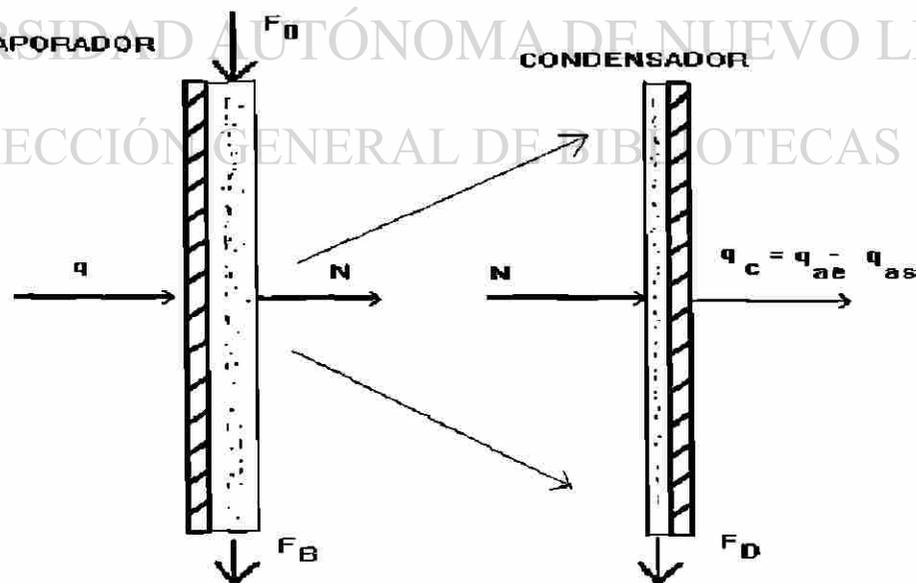


Fig.2.15. Evaporación-condensación en el destilador.

La temperatura del condensado se relaciona a la temperatura del refrigerante con la ley de enfriamiento de Newton,

$$q_c = U_c (\pi D_c L_c) \left(\frac{T_{as} - T_{ae}}{\ln \frac{T_c - T_{ae}}{T_c - T_{ac}}} \right) \quad (2.51)$$

donde T_c es la temperatura de rocío del vapor condensante; U_c es el coeficiente de transferencia de calor, bien establecido en los textos de transferencia de calor, e.g. Bird [BSL].

Es evidente que si se provee suficiente medio enfriante, las ecuaciones del condensador, (2.49) a (2.51) serán independientes de las del evaporador.

2.9.- Conclusiones

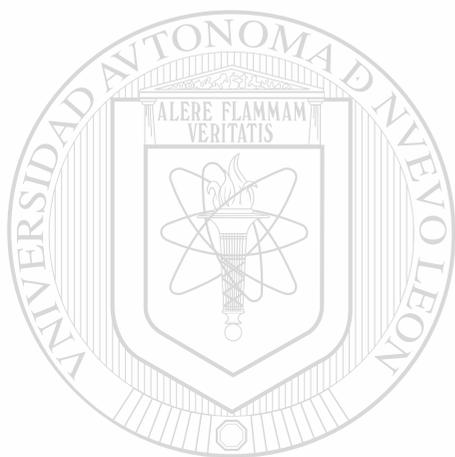
En este capítulo se ha revisado la teoría de evaporación para fundamentar las hipótesis necesarias para desarrollar un modelo matemático representativo de la columna de DMTC.

La ley de conservación de la masa y de la energía aplicada a un entorno compartamental fue la base para generar el modelo. Para ello, las hipótesis usadas más relevantes son aquellas que consideran que la vaporización es descrita por argumentación de la teoría cinética de los gases, y la suposición de homogeneidad por compartimento.

El modelo resultante está constituido por $4 \times n$ ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales, donde n es un número apropiado de secciones de la columna. La solución del modelo, representa la distribución de valores del espesor, composición y temperatura de la película descendente, y la temperatura de la pared exterior del destilador, respecto al tiempo y a la altura de la columna. El modelo incluye el efecto de las variables de manipulación actuales y de las principales variables de perturbación, ver Tabla 2.2.

Se obtuvieron 2 conjuntos distintos de ecuaciones, uno para la sección de entrada y otro para el resto de las secciones de la columna. Se ha descartado un tercer tipo de ecuaciones, aquel que corresponde a la sección final de la columna, porque las variables de estado de esta última sección, se ven fuertemente influenciadas por las condiciones de las variables de dicha sección y por las condiciones de la sección anterior, en comparación con las condiciones en la salida.

En el siguiente capítulo se procederá a efectuar una validación del modelo matemático de la columna de DMTC.



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



CAPITULO 3

VALIDACION EXPERIMENTAL DEL MODELO DE LA COLUMNA DE DMTC

Aunque en principio es posible obtener un modelo que proporcione una representación fiel del proceso real, en general ésto resulta muy complejo. Esta situación es más bien indeseable por la conveniencia de tener un modelo simple. Por otro lado, un modelo demasiado simplificado tampoco resulta conveniente, porque parte de la fenomenología importante puede quedar fuera de la representación matemática del proceso.

Si un modelo matemático reproduce el comportamiento de un proceso, entonces el modelo puede ser utilizado convenientemente como una abstracción del proceso para fines de análisis y para el diseño de alguna estrategia de control. Un modelo así, es con seguridad, muy complejo. Esta complejidad puede ser disminuida, de manera apreciable, cuando se le construye para representar al proceso real dentro de un rango limitado de operación.

Con el fin de asegurar los resultados del análisis y diseño de la estrategia de control, en este capítulo se presenta un estudio sobre la validación del modelo matemático de la columna de DMTC. La validación consiste en confrontar, en igualdad de condiciones, los valores de las variables del modelo matemático con los datos experimentales obtenidos del proceso real. Específicamente para la columna de DMTC, se trata de comparar los valores obtenidos por simulación del flujo y composición de productos y dos de las temperaturas superficiales del evaporador con los obtenidos vía experimentación.

En general una validación considera el estado estacionario y el estado transitorio del modelo del proceso. El procedimiento de validación de la parte estacionaria requiere que el experimento se efectúe bajo condiciones de operación constantes, y que las mediciones se realicen en condiciones estacionarias durante un lapso de tiempo lo más grande posible. En particular, para la columna de DMTC, el conjunto de mediciones resultantes fueron promediadas respecto al intervalo de tiempo que dura el estado estacionario.

El estado transitorio de procesos, como el de la columna de DMTC, se valida experimentalmente mediante pruebas bien conocidas como la respuesta al escalón (o al

impulso). En particular, para este proceso, las entradas que se someten a los cambios escalón (impulso) son: el flujo de alimentación, la velocidad del agitador, y los flujos de calor a las mantas de calentamiento. Variables todas que corresponden a las de manipulación del proceso.

En esta tesis, el estudio experimental fue limitado a la validación de únicamente la parte estacionaria del modelo, en un único punto de operación. La principal causa de la limitación es la deficiencia del instrumental necesario para realizar mediciones en línea, particularmente de la composición. Situación que se agrava por el hecho de que el proceso se encuentra casi siempre en operación comercial, limitando con ello la disponibilidad del proceso para la experimentación. El desempeño transitorio de la columna de DMTC fue valorado sólo cualitativamente por la misma razón.

En este capítulo, primeramente se describirá la unidad real de DMTC así como su capacidad de experimentación. Posteriormente se presenta un resumen de los datos experimentales obtenidos. Finalmente se hace la comparación con los resultados obtenidos por simulación.

3.1.- Unidad Experimental

El equipo de destilación molecular en el cuál está basada esta tesis se encuentra instalado en la empresa **PYOSA, S.A. de C.V.**⁽¹⁾, donde se le utiliza como equipo de purificación de uno de sus productos. El equipo de destilación molecular posee actualmente un conjunto básico de instrumentos, dedicados únicamente a mantener constantes las condiciones de operación. Dichas condiciones son ajustadas manualmente por el operario. Con este esquema tratan de controlar la composición del producto manteniendo las temperaturas del evaporador suficientemente bajas como para evitar que el producto resulte afectado térmicamente.

Los instrumentos de medición y control empleados actualmente para controlar el proceso son:

⁽¹⁾ PYOSA, S.A. de C.V.
Ave. Industrias 1200 Pte.
Monterrey, N.L. MEX.

- (1) Dos controladores on-off de temperatura, uno por cada calefactor eléctrico.
Máxima salida de 240 VAC, 20 A, a 240 °C
- (2) Dos termopares para medir la temperatura exterior de la pared del evaporador.
- (3) Un regulador de velocidad para el agitador.
Rango: 90 a 260 rpm, que equivale aprox. a 9–26 rad/seg.
- (4) Un regulador de velocidad (flujo volumétrico) para la bomba de alimentación.
Rango: 1 a 40 rpm que equivale aprox. a 1–5 cm³/seg de alimentación.
- (5) Un indicador de presión en la bomba de vacío. Rango: 100 µHg – 5 mmHg.

con los dispositivos anteriores se regula automáticamente la velocidad de rotación del agitador y la velocidad de alimentación de la materia prima, en los valores establecidos por el operario. También se regula automáticamente la temperatura en dos puntos de la pared del evaporador utilizando el controlador on-off de las mantas de calentamiento. El flujo de alimentación se calcula a partir de la velocidad de la bomba de alimentación. La presión no se regula, pero se compensa manualmente los cambios de ésta mediante el ajuste de las demás variables de entrada.

Debido a las limitaciones en instrumentación y equipos de medición en las que se encuentra actualmente el proceso, las siguientes mediciones son efectuadas fuera de línea.

(6) La determinación de la composición del producto (destilado).

(7) El flujo de material purificado (destilado y residuo).

3.2.- Datos Experimentales

A continuación se presentan las condiciones de operación y las mediciones obtenidas durante tres corridas experimentales de purificación.

En éstos experimentos las variables de entrada, Tabla 2.3, como el flujo de alimentación, la velocidad del agitador, y la composición y temperatura de la alimentación se les reguló en un valor constante. La composición de la materia prima fue siempre homogénea y conocida como resultado del tratamiento de desgasificación previo a la destilación. Las variaciones de la presión (vacío) en la columna de destilación, son producto de una desgasificación deficiente. Estas variaciones se compensaron manualmente por el operario, quien hacía variar

temporalmente las condiciones de operación hasta que desaparecía la condición de perturbación.

La Tabla 3.1 resume las mediciones efectuadas durante las pruebas de purificación. Esta información experimental está contenida en los reportes siguientes de purificación de PYOSA:

- (1) lote # 6, Mayo 29 de 1995.
- (2) lote # 7a, Junio 3 de 1995.
- (3) lote # 7a, Junio 6 de 1995.
- (4) lote # 8, Julio 15 de 1995.

Tabla 3.1.- Resumen de resultados experimentales: reportes de purificación.

Experimento	lote #6	lote #7a	lote #7b	lote #8
Duración, hrs.	53:50	22:25	32:25	60:75
Entradas:				
Flujo de alim, F_0 gr/seg.	2.81	3.27	2.10	2.15
Comp. de alim., x_0 %peso.	92.31	95.49	92.41	95.8
Velocidad de agitación, Ω rpm ⁽¹⁾ .	130.00	130.00	130.00	130.00
Temperatura de alim., T_0 °C.	127.00	127.00	127.00	127.00
Presión del sistema, P mmHg.	1.40	3.20	0.90	1.10
Salidas:				
Flujo de destilado, F_D gr/seg.	2.33	3.03	1.63	1.86
Flujo de residuo, F_B gr/seg.	0.52	0.31	0.47	0.33
Comp. de destilado, $(1-x_8)$ %peso.	95.35	95.77	96.31	96.32
Comp. de residuo, x_8 %peso.	78.68	54.50	78.93	79.50
Temperatura superior, T_{p3} °C ⁽²⁾ .	214.00	208.00	220.00	220.00
Temperatura inferior, T_{p7} °C.	214.00	208.00	220.00	220.00

(1) Multiplicar por 0.10472 para convertir a rad/seg.

(2) Termopar colocado a 1/3 de altura y el termopar inferior está colocado a 2/3 de altura de la columna.

Los renglones de la tabla 3.1, correspondientes al flujo de destilado, el flujo de residuo, la composición del destilado y la composición del residuo, presentan los valores promedio respecto a toda la operación, e.g. se toman muestras de producto purificado y se les analiza en el laboratorio. Las demás variables son valores promedio de las mediciones en línea durante el experimento.

La siguiente información cualitativa de la dinámica del proceso fue obtenida por observación de la operación de la columna de DMTC.

- El tiempo de respuesta durante algunos transitorios del proceso es de 10–15 min.
- Las variaciones dinámicas de la velocidad del agitador se manifiestan casi de inmediato en el flujo de salida del residuo, alrededor de 3–6 seg.

3.3.- Simulación del Modelo en Lazo Abierto

El desempeño del modelo matemático del destilador se determina mediante simulación. Para lo cual se emplea el software SIMNON[®] para la solución de ecuaciones diferenciales no lineales en computadora PC-compatible.

Las ecuaciones del modelo, programadas en el simulador, son las que se muestran en la Tabla 2.2. De acuerdo al diseño del equipo es posible tener un modelo de hasta 280 ecuaciones diferenciales ordinarias, es decir, 4 ecuaciones por ranura del agitador para un máximo de 70 ranuras. Por representatividad del proceso⁽¹⁾, se prefiere un modelo compartimentalizado con el mayor número de ecuaciones. Sin embargo, las limitaciones en los paquetes de cómputo empleados permiten un número máximo de operaciones que corresponden, en el caso de la simulación en lazo abierto, a un modelo para 8 secciones de columna. Un modelo así, constituido por $n = 8 \times 4$ ecuaciones, permite el cálculo de la dinámica de la composición, temperaturas y flujo a cada 10 cm de altura en la columna.

(1) En general, se desean modelos de orden reducido por diversas razones, que incluyen la evaluación de estrategias alternativas de control, el desarrollo de aplicaciones en línea de esquemas avanzados de control y el entrenamiento de personal.

Para obtener respuestas equivalentes entre la simulación y los experimentos, se programó la simulación en forma análoga a los experimentos. Por ejemplo, el programa de simulación debe incluir el control on-off de las dos temperaturas de pared.

Observación: Todos los parámetros del modelo que determinan la respuesta dinámica del destilador, Tabla 2.2, fueron calculados a partir de los parámetros físicos del sistema, ver apéndice A. Se calcularon los parámetros físicos a las condiciones de la experimentación. ◇◇

La Tabla 3.2 muestra los resultados de las simulaciones con que se que se comparan los experimentos de la Tabla 3.1. La comparación de valores estacionarios en estas tablas demuestra una buena concordancia entre el modelo matemático y la experimentación,, puesto que. únicas desviaciones observadas son menores al 2%, excepto en dos de los valores experimentales, uno correspondiente al lote #7a, con un 40% de desviación en el flujo del residuo, y el otro con un 28% en la composición del residuo. A este respecto se encontró que la causa más probable de tales desviaciones era la deficiencia en el tratamiento de desgasificación de la materia prima.

Tabla 3.2.- Resumen de resultados de la simulación.

Simulación	lote #6	lote #7a	lote #7b	lote #8
Salidas:				
Flujo de destilado, F_D gr/seg.	2.336	3.08	1.63	1.85
Flujo de residuo, F_B gr/seg.	0.512	0.18	0.47	0.30
Comp. de destilado, $(1-x_8)$ %peso.	95.56	96.70	95.79	97.41
Comp. de residuo, x_8 %peso.	77.45	75.80	79.86	84.67
Temperatura superior, T_{p3} °C.	214.01	208.03	219.90	220.01
Temperatura inferior, T_{p7} °C.	214.02	208.00	219.70	220.01

Las Figuras 3.1 a 3.5 muestran los resultados de simulación de un modelo de 8 secciones en lazo abierto respecto a la composición, con control on-off de las temperaturas de pared en las secciones 3 y 7. En estas gráficas la convención para denominarlas es:

- Cada curva representa la dinámica en una sección del evaporador, e.g., la curva denominada "sección 1" representa la dinámica de la variable en los primeros 10 cms. de columna tomados desde su extremo de alimentación en la parte superior. Ver las Figuras 3.1 a 3.3.
- Las señales que corresponden a las secciones 3 y 7, cuyas temperaturas estuvieron bajo control se denotan con color rojo.
- En la Figura 3.5a, las líneas de color azul corresponden a los impulsos de energía producidos por la manta eléctrica superior, y en rojo a la manta inferior.

Las Figuras 3.4 y 3.5 muestran las gráficas del flujo de productos y el flujo de energía hacia el evaporador. Esta última requiere de la siguiente explicación: el equipo de calentamiento está constituido por dos mantas eléctricas colocadas una en la mitad superior de la columna y la otra en la mitad inferior. El flujo de calor se origina en la manta de calentamiento, y llega al fluido a través de la pared del evaporador. Este flujo de calor, entre la manta de calentamiento y la pared del evaporador, cambia intermitentemente entre cero y un flujo máximo (por el control on-off), como se muestra en la Figura 3.5a; sin embargo, por la presencia de la pared este flujo de calor es suavizado a una forma continua con variaciones suaves, Figura 3.5b.

La simulación produjo los siguientes resultados:

1. El valor de estado estacionario de las variables de salida se resumen en la Tabla 3.2. La distribución de valores de cada variable a lo largo de la columna es gradual, excepto en la de temperatura, la cuál es influida por la existencia de más de una manta de calentamiento.
2. El transitorio de la temperatura de la pared, de aproximadamente 10 min, es más lento que la dinámica del proceso. En realidad, la dinámica del proceso está definida principalmente por la resistencia de la pared al transporte de calor.
3. El control on-off regula correctamente las temperaturas en la sección 3 y 7 de la pared (214°C).
4. El flujo de los producto de residuo y destilado cumplen correctamente con la ley de conservación de la materia.

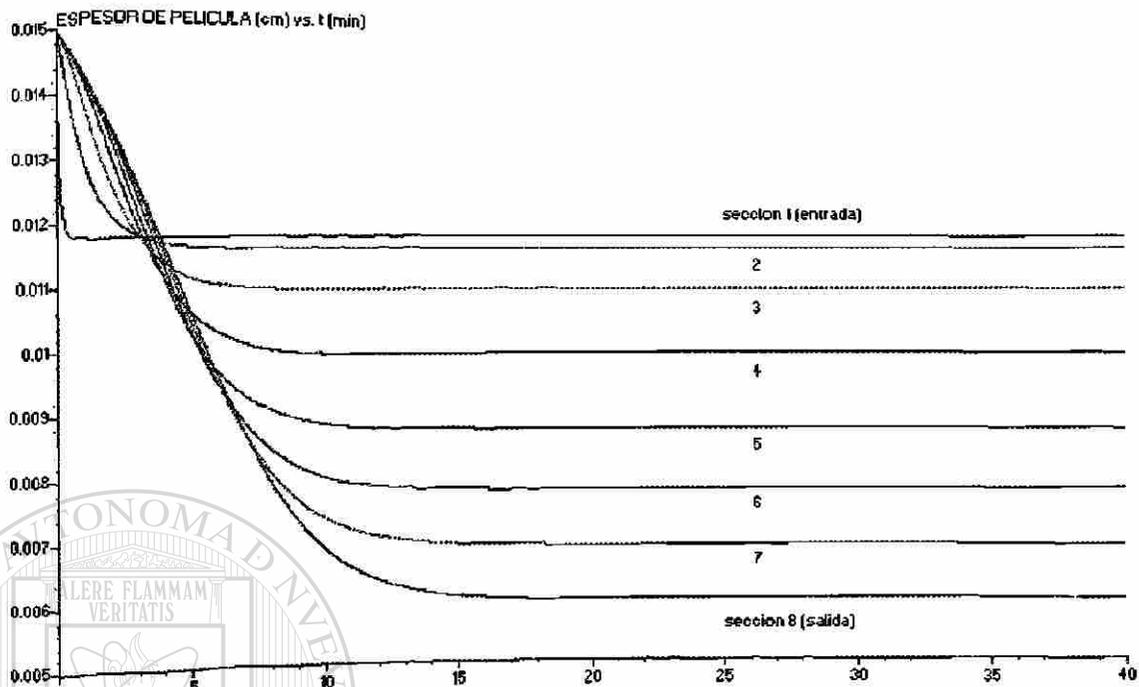


Fig. 3.1 Espesor de película de líquido sobre la superficie interna de la columna.

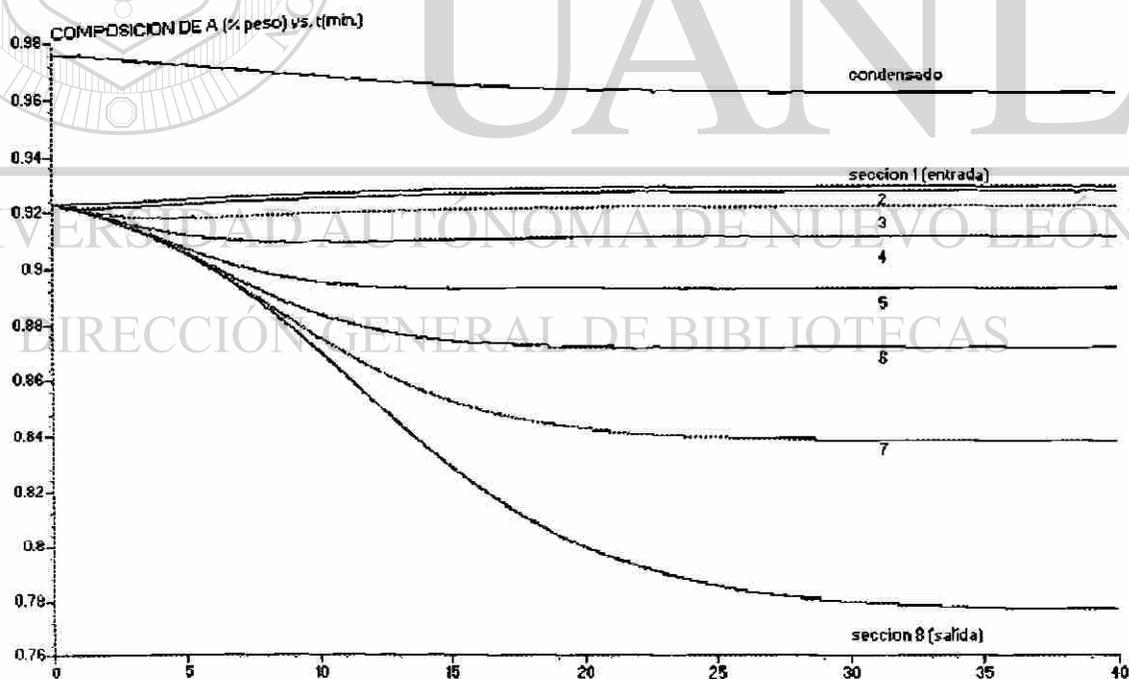


Fig. 3.2. Distribución de la composición del fluido en la superficie del evaporador y del destilado.

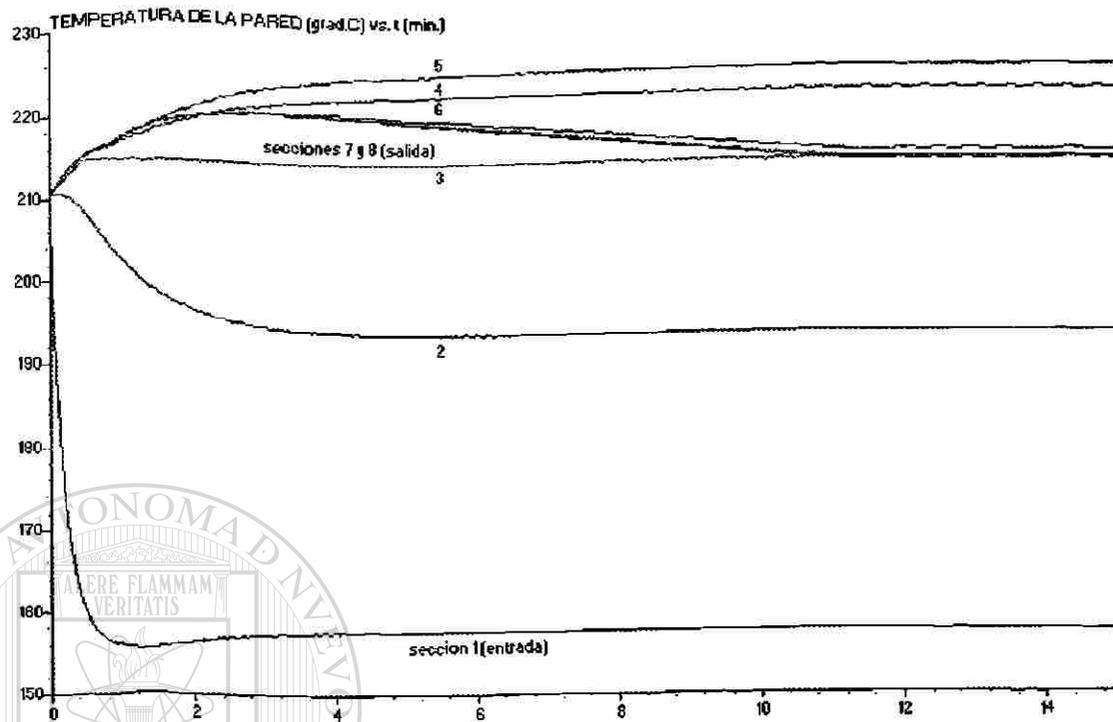


Fig. 3.3. Distribución de la temperatura de la pared exterior del evaporador.

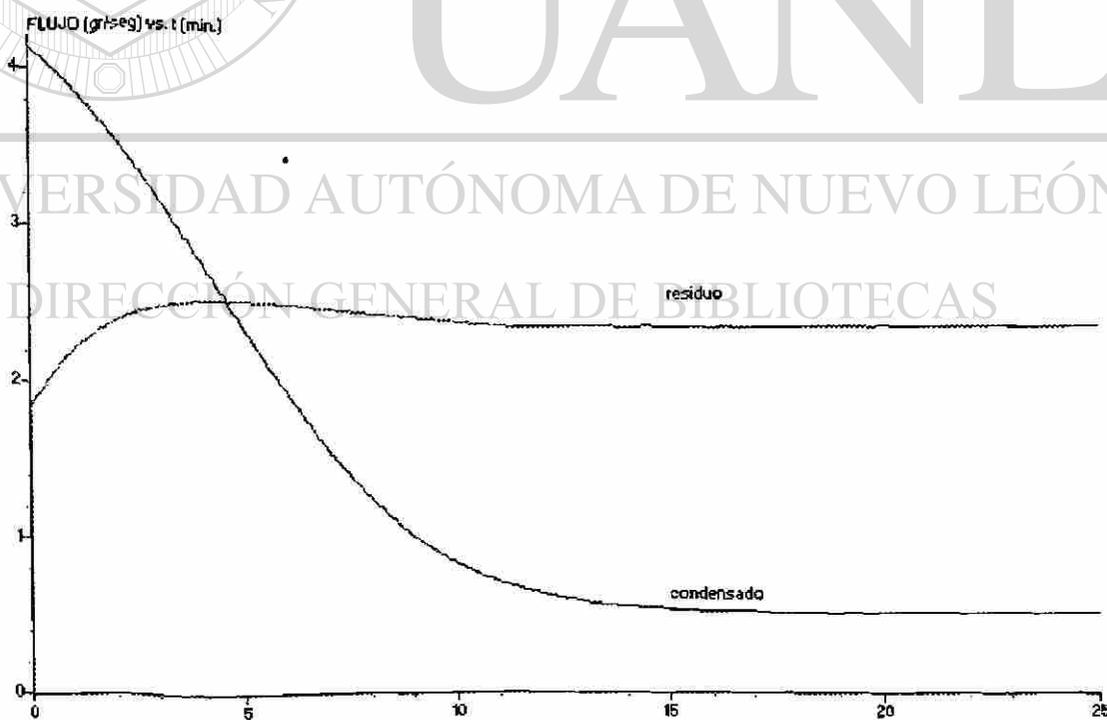


Fig.3.4. Flujos de destilado y residuo.

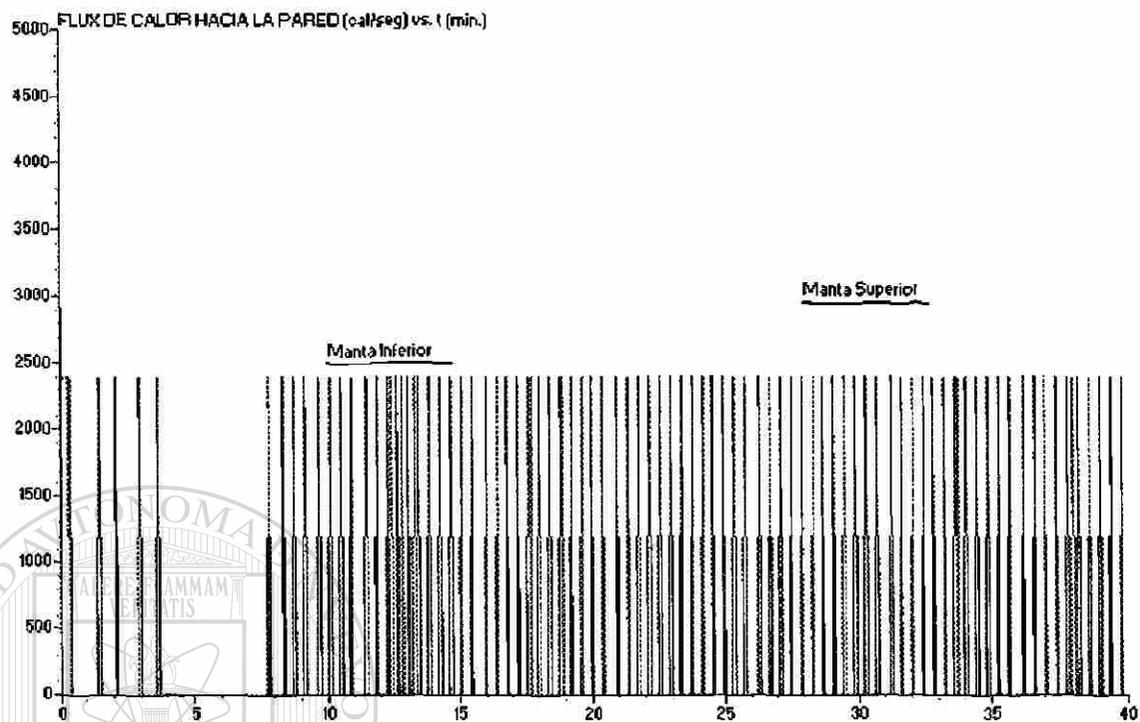


Fig. 3.5a. Flujo de energía hacia el evaporador.

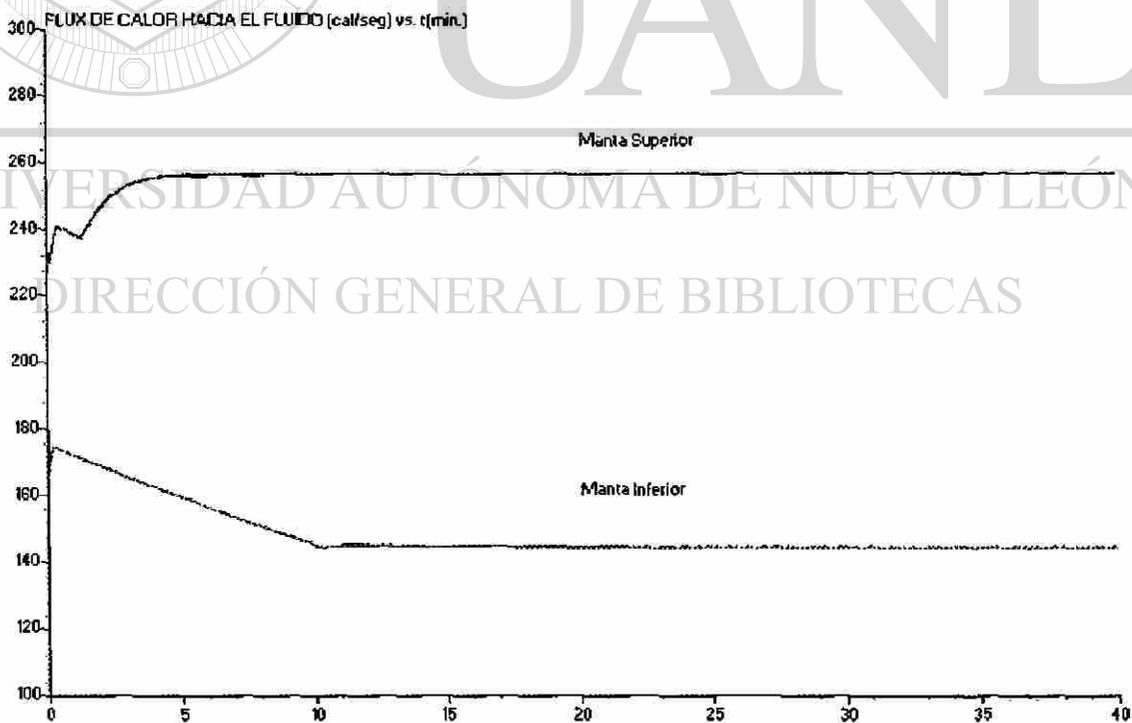


Fig. 3.5b. Flujo de energía hacia el fluido.

3.4.- Conclusiones

El propósito de este capítulo fue determinar si el modelo matemático de la columna de DMTC obtenido en el capítulo anterior predice satisfactoriamente el estado estacionario del proceso real. El estado estacionario calculado mediante simulación está dentro del 2% de los valores obtenidos vía experimentación. Por lo anterior se concluye que el modelo matemático tiene un buen desempeño respecto al estado estacionario.

En lo referente al estado transitorio: la respuesta transitoria del modelo matemático es cualitativamente semejante a la de los experimentos, particularmente en la duración del transitorio y en su forma sobreamortiguada. El principal parámetro que afecta la magnitud del atraso dinámico de la respuesta es la resistencia térmica de la pared del evaporador. Para hacer una evaluación cuantitativa de la respuesta transitoria del modelo, se requiere de experimentos con una mejor instrumentación para medir en línea la composición de los productos, así como de una mayor cantidad de sensores de temperatura en la pared del evaporador.

El diseño de la estrategia de control puede basarse en un modelo más completo, por ende más complicado, que incluya el efecto de perturbaciones, como la presión. Sin embargo, una modelación más detallada, requeriría de estudios fisicoquímicos acerca de la influencia de la presión (vacío) en algunos de los parámetros.

Se requiere mayor cantidad de experimentación para incluir el efecto de un diferente punto de operación (linealización), el efecto de la variación de las perturbaciones incluidas en el modelo, tales como el flujo y composición de la alimentación, y el ruido en la medición.

CAPITULO 4

CONTROLABILIDAD, OBSERVABILIDAD Y CONTROL DE LA COLUMNA DE DMTC

El objetivo de control de un proceso depende, por lo general, del propósito de la operación en el entorno de la planta completa. Para una columna de DMTC cuyo propósito es la purificación de sustancias sensibles a la temperatura, la **meta del control** es regular la concentración del producto de la destilación, manteniendo a la operación dentro de un rango aceptable de temperatura.

En este capítulo se determinan las condiciones bajo las cuales es posible el diseño de un algoritmo de control que permita dicha regulación de la composición de los productos. Estas condiciones se determinan a través del análisis de propiedades del sistema dinámico como la controlabilidad, la observabilidad y la estabilización por retroalimentación de estado.

Existe una variedad de técnicas desarrolladas para el diseño del control, desde el convencional como el PID, hasta las técnicas modernas como el control por retroalimentación de estado, por retroalimentación no lineal, el adaptivo, el control robusto, el control óptimo, etc. Varias de las técnicas de diseño basadas en el control moderno asumen que los valores de las variables de estado del proceso están disponibles. Sin embargo, en la mayoría de las situaciones prácticas, no es factible medir todo el estado, y además, las mediciones disponibles siempre contienen ruido aleatorio.

La medición del estado completo en el proceso de DMTC es imposible, y además, la variable principal que se desea controlar, la composición del producto de la destilación, tampoco está disponible en línea.

Para lograr la meta de control de regular la composición del destilado, cumpliendo con las dos restricciones mencionadas (temperaturas limitantes, no existencia del sensor en línea de la composición), se propone un esquema de control por retroalimentación estática del estado de la columna de DMTC. Para ello se especifica, además, un sistema observador que permite estimar el estado de la columna, principalmente de la concentración de los productos.

En el capítulo 2 se propuso un modelo en ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales (EDONL). Por la dimensión y complejidad resultante de este tipo de ecuaciones, se hace muy difícil la aplicación de las técnicas de diseño mencionadas con anterioridad. En lugar del modelo original, para fines de análisis y de diseño, se utiliza su linealización, que resulta en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias lineales (EDOL).

En primer lugar se determinan las propiedades de controlabilidad y observabilidad del modelo de la columna de DMTC. Posteriormente, se discutirá el control presente actualmente en la columna de DMTC y finalmente se probará la efectividad del esquema de control propuesto, a través de pruebas en simulación.

4.1.- Linealización, Controlabilidad y Observabilidad

En la teoría de control moderno existen dos áreas de estudio importantes: la teoría de sistemas lineales y la teoría de control no lineal. Los modelos matemáticos que representan la dinámica de un proceso pueden ser descritos en EDO de la forma siguiente:

En la teoría de sistemas lineales:

$$(\Sigma_L): \begin{cases} \dot{x}(t) = A x(t) + B u(t) \\ y(t) = C x(t) \end{cases} \quad (4.1)$$

En la teoría de sistemas no lineales el modelo general es:

$$(\Sigma_{NL}): \begin{cases} \dot{x}(t) = F(x(t), u(t)) \\ y(t) = h(x(t)) \end{cases} \quad (4.2)$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$, $u \in \mathbb{R}^p$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $F: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^n$, $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. En adelante se omitirá la variable tiempo t a menos que se le requiera.

En cada teoría se requieren herramientas matemáticas diferentes. Por ejemplo, en la teoría de sistemas lineales se utilizan el análisis matricial, la transformación de Laplace, etc. Mientras que en la teoría de control no lineal se emplea la geometría diferencial y el álgebra diferencial, por mencionar algunas. Al analizar las propiedades estructurales de estos sistemas, como: la

estabilidad, la controlabilidad y la observabilidad, se obtienen resultados que son particulares a cada una de las teorías y, que sin embargo, son equivalentes.

El estudio de las propiedades estructurales de un modelo no-lineal implica un gran esfuerzo analítico y computacional. En particular, si (4.2) representa el modelo de la columna de DMTC, y si se toma en cuenta la gran dimensión de este modelo no lineal, la búsqueda de formas canónicas requiere de transformaciones que resultan difíciles de encontrar para dicho modelo.

Cuando en un cierto dominio, un sistema no lineal se comporta similarmente a su aproximación linealizada, muchas de sus propiedades pueden ser deducidas a partir de su representación lineal. Por lo tanto, si un modelo linealizado es estable, controlable u observable, entonces el sistema no lineal, del que proviene, también lo es.

Sea por ejemplo el sistema Σ_{NL} no autónomo con entrada de control u , y sea el equilibrio (x_e, u_e) , entonces el sistema linealizado alrededor del punto de equilibrio puede escribirse como:

$$\dot{x} = F(x_e, u_e) + \left. \frac{\partial F(x, u)}{\partial x} \right|_{x=x_e, u=u_e} (x - x_e) + \left. \frac{\partial F(x, u)}{\partial u} \right|_{x=x_e, u=u_e} (u - u_e) + \mathfrak{G}(x, u) \quad (4.3)$$

donde $\mathfrak{G}(x, u)$ son términos de orden superior al lineal.

Si F es continuamente diferenciable y cuando se suprimen todos los términos de orden superior, entonces (4.1) proporciona la aproximación lineal deseada. Además, si x_e es un punto de equilibrio, entonces $F(x_e, u_e) = 0$. Por lo que el Σ_{NL} puede ser reescrito como el sistema Σ_L , y las matrices A , B , C , de dimensiones apropiadas, estarán definidas por las matrices Jacobianas:

$$A = \left. \frac{\partial F(x, u)}{\partial x} \right|_{x=x_e, u=u_e}; \quad B = \left. \frac{\partial F(x, u)}{\partial u} \right|_{x=x_e, u=u_e}; \quad C = \left. \frac{\partial h(x)}{\partial x} \right|_{x=x_e} \quad (4.4)$$

En consecuencia, el sistema Σ_L es referido como el **sistema linealizado** alrededor del punto de equilibrio (x_e, u_e) asociado al sistema no-lineal Σ_{NL} .

Por lo dicho, es posible determinar las propiedades locales estructurales del modelo de la columna de DMTC si se considera la teoría de sistemas lineales. En base a esta teoría, el análisis de sus propiedades, como la controlabilidad y la observabilidad, es más simple de manejar y la información resultante es suficiente para el diseño de un algoritmo de control para la columna de DMTC, así como para la construcción de un observador que permita la estimación del estado no medible del modelo.

Definición 4.1 Chen [Ch]: El sistema dinámico Σ_L se dice que es **controlable** a tiempo t_0 , si existe un $t_1 > t_0$ finito, tal que para toda $x(t_0)$ y para toda x_1 , ambas en el espacio estado, existe una entrada $u_{[t_0, t_1]}$ que transferirá el estado $x(t_0)$ al estado x_1 en un tiempo t_1 . \diamond

Definición 4.2 Chen [Ch]: Un sistema dinámico Σ_L se dice que es **observable** a tiempo t_0 , si existe un $t_1 > t_0$ finito, tal que para todo estado x_0 a tiempo t_0 , el conocimiento de la entrada $u_{[t_0, t_1]}$ y de la salida $y_{[t_0, t_1]}$ sobre el intervalo de tiempo $[t_0, t_1]$ es suficiente para determinar el estado x_0 . \diamond

El par (A, B) , del modelo linealizado, Σ_L , de la columna de DMTC, se dice controlable si $\text{rango}[B \dots A^k B \dots A^{n-1} B] = n$. El par (C, A) del mismo sistema linealizado se dice observable si

$$\text{rango} \begin{bmatrix} C \\ CA \\ \vdots \\ CA^{n-1} \end{bmatrix} = n$$

La realización (A, B, C) de la función transferencia del sistema linealizado, es una realización mínima si el par (A, B) es controlable y el par (C, A) es observable.

4.2.- Resultado de la Linealización del Modelo de la Columna de DMTC

De acuerdo a lo dicho en §4.1, se aplicó al modelo de la columna de DMTC la linealización por Taylor alrededor de un punto de operación, cuyos valores se dan en el apéndice B. Los valores numéricos correspondientes a cada matriz fueron obtenidos a través

del software de cálculo simbólico **Maple**[®] y las propiedades de controlabilidad y observabilidad se verificaron en el mismo punto de linealización mediante el software de álgebra lineal **Matlab**[®]. El cálculo de los valores propios de A demuestra que en el punto de operación el modelo matemático linealizado es estable, y siendo estable, sus propiedades estructurales pueden ser extendidas localmente al sistema no lineal.

El modelo linealizado de la columna de DMTC fue restringido por limitación del software a sólo 4 secciones (compartimentos) de igual longitud, con un total de 16 variables de estado: cuatro espesores de película, cuatro composiciones, cuatro temperaturas de fluido, y cuatro temperaturas de pared del evaporador. Respecto a la estructura del modelo, aunque algunos de los coeficientes del modelo de DMTC no puedan ser estimados con exactitud, el sistema se considerará que tiene una estructura fija. La Tabla 4.1 resume los resultados obtenidos, y en el apéndice B se da la lista completa de los valores numéricos.

Tabla 4.1.- Controlabilidad y observabilidad del modelo linealizado del proceso.

Variables de estado	16
Variables de salida	4
Variables de entradas	4
Los 16 valores propios de A tienen parte real negativa:	
Matriz de controlabilidad del sistema linealizado:	
rango 16	
número de condición $> 10^{13}$	
número de valores singulares con misma magnitud = 4 a 6	
Matriz de observabilidad del sistema linealizado:	
rango 16.	
número de condición $> 10^{12}$	
número de valores singulares con misma magnitud = 4 a 6	

El número de condición de las matrices de controlabilidad y de observabilidad indican que el número de estados que tiene el mismo "grado" de controlabilidad y de observabilidad está entre 4 y 8. Por tanto, aunque en principio es posible controlar y observar todo el estado, existen modos que son "casi " no controlables y/o observables en la columna de DMTC. El control por retroalimentación del estado en realidad equivale a un control por retroalimentación parcial del estado.

La eficacia de la linealización se puede apreciar por los resultados de simulación mostrados en las Figuras 4.1, 4.2 y 4.3, que representan la dinámica de la composición, la temperatura de la pared y el espesor de la película descendente.

Las condiciones de simulación son idénticas para ambos modelos no lineal y linealizado:

- Control on-off de dos temperaturas de la pared.
- Mismas condiciones iniciales.
- Después del transitorio inicial, se aplica un cambio escalón en la entrada de calor de una de las mantas de calentamiento, $\pm 20\%$ a tiempo de 13 min. y 25 min.

Cada Figura muestra dos conjuntos de curvas de distinto color para diferenciar la respuesta del sistema no lineal (azul) del linealizado (rojo). Cada curva representa la dinámica de cada uno de los 4 compartimentos de la columna. En estas Figuras se observa que el estado estacionario de los modelos en EDONL y el linealizado en EDOL coinciden exactamente en el punto de linealización. Fuera de dicho punto se tiene únicamente una aproximación del modelo linealizado al modelo en EDONL, y las respuestas del estado transitorio son diferentes pero aceptables.

Aunque en general un aumento en la dimensión de un modelo no implica mayor precisión con respecto al proceso real, las diferencias entre el modelo linealizado y el modelo en EDONL de la columna de DMTC se pueden reducir si se emplea un mayor número de compartimentos en el modelo matemático.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Una vez que se ha determinado que el sistema linealizado en EDOL es de realización mínima, es conducente discutir ahora el control actualmente practicado en la operación de la columna de DMTC, y proponer alguna otra alternativa. En la siguiente sección se propone un esquema de control por retroalimentación que cumple con los requisitos deseados para la operación de destilación.

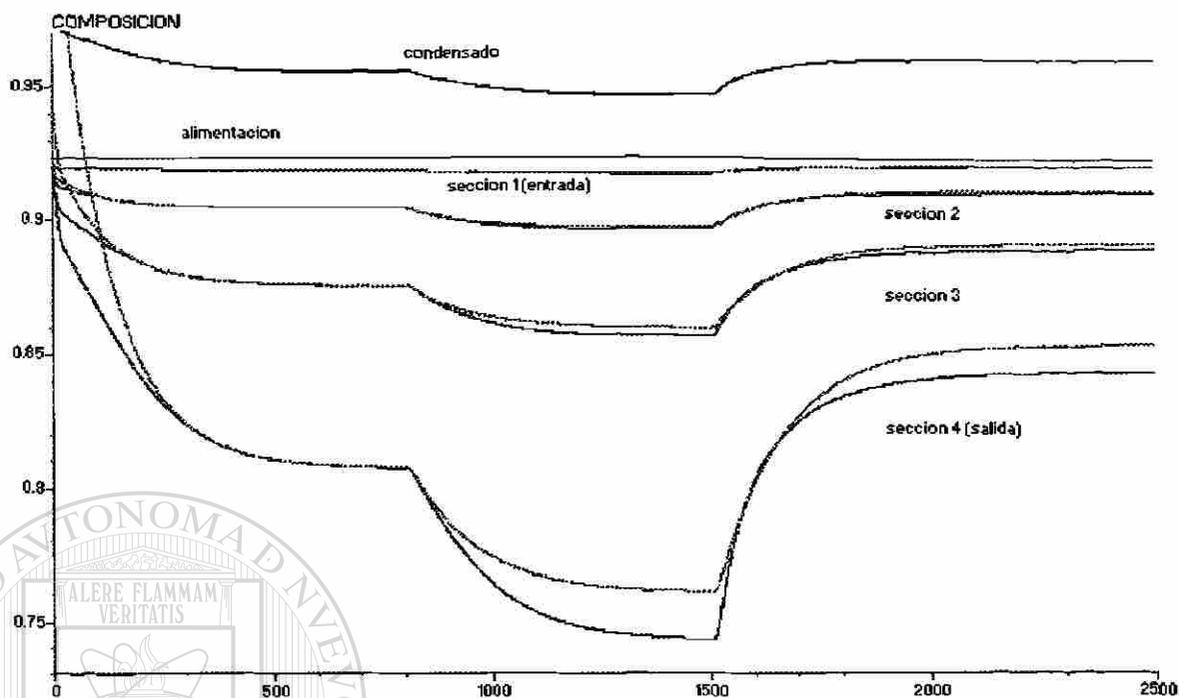


Fig. 4.1. Composición del fluido en la película descendente: no lineal (azul), linealizado (rojo), vs. t(seg)

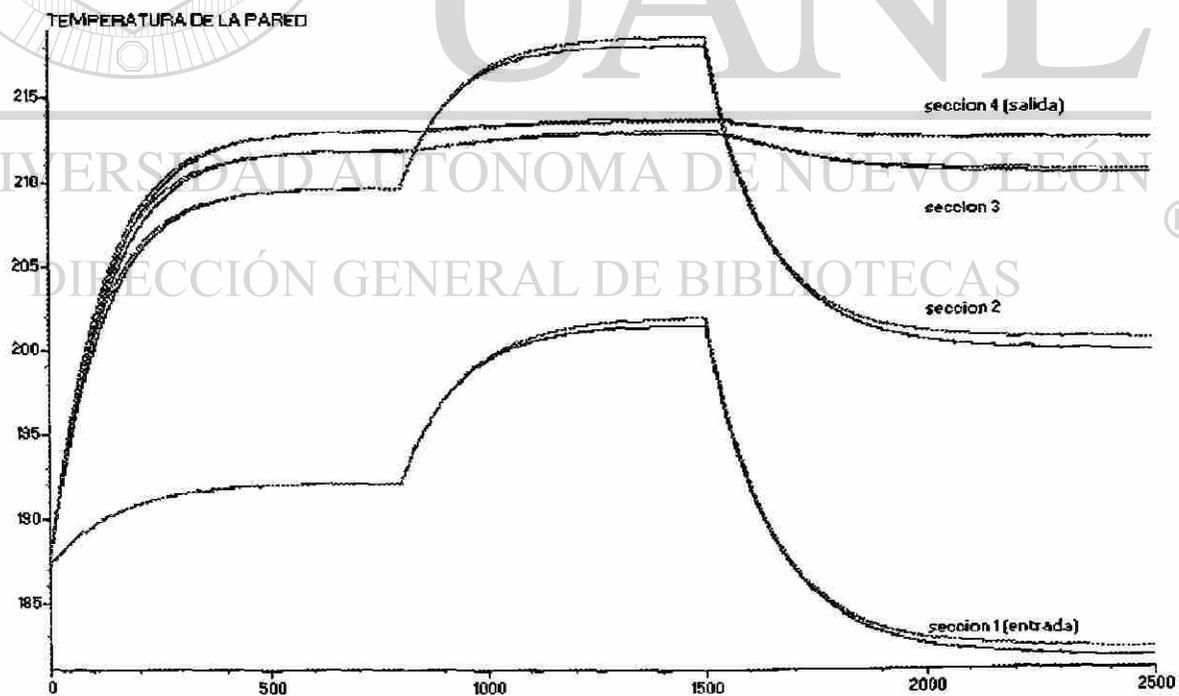


Fig. 4.2. Temperatura de la pared del evaporador: no lineal (azul), linealizado (rojo), vs. t(seg)

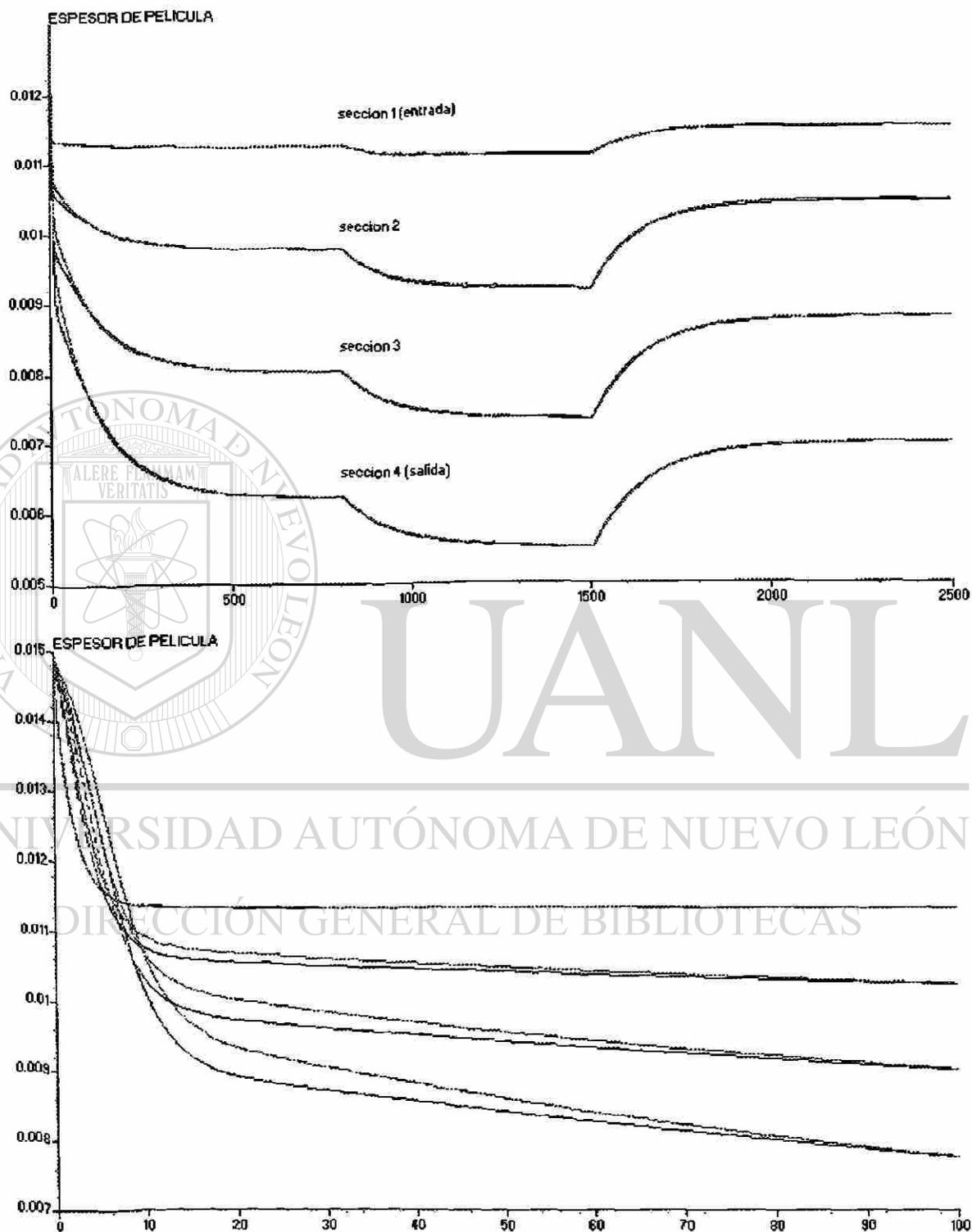


Fig. 4.3. Espesor de película: no lineal (azul), linealizado (rojo). Acercamiento (gráfica inferior), vs. t (seg)

4.3.- Control del Sistema Linealizado

En PYOSA, la meta de control en la columna de destilación es obtener un producto con una composición mayor que la composición de la alimentación, procurando a la vez mantener las temperaturas de evaporación lo más bajas posibles con el fin de evitar daños térmicos al producto. Para este fin, en la operación práctica de la columna, se utiliza un control manual combinado con uno del tipo **on-off**. Este controlador regula la temperatura de la pared del evaporador en dos puntos de la columna, mediante el prendido-apagado de las fuentes de calor al evaporador; mientras que manualmente se ajustan las otras entradas al proceso, como: la velocidad de alimentación, la velocidad de agitación y el set point de las temperaturas mencionadas.

El esquema de control mencionado es realmente de lazo abierto respecto a la composición, puesto que el control no utiliza el valor de la composición del producto que se pretende controlar. Este control es bastante simple pero requiere de una gran participación de la intuición del operador, lo que resulta poco satisfactorio ante la presencia de perturbaciones tales como la variación en la temperatura de alimentación y otros imprevistos.

En la literatura técnica actual podemos encontrar esquemas de control muy bien elaborados [Vi] (teoría de control no lineal, Isidori, perturbaciones singulares, etc.) aplicados a los sistemas no lineales. En la mayoría de ellos se hace uso de retroalimentación estática del estado, en forma adaptiva, linealizante, etc. Sin embargo, por las características del modelo, no es evidente su aplicación al proceso de la columna de DMTC. A continuación se propone un esquema de control basado en la retroalimentación estática del estado, estimado éste por un observador del sistema linealizado.

4.3.1.- Estabilización

El sistema (4.2) representa el modelo de la columna de DMTC, y el sistema (4.1) representa la aproximación lineal asociada al modelo no lineal original. Si el sistema de lazo cerrado que se desea obtener debe poseer un punto de equilibrio (x_e, u_e) asintóticamente estable, entonces, para determinar la ley de control que permita obtener dicho equilibrio se debe considerar lo siguiente:

La selección de una ley de control de la forma $u=u(x)$ (con $u(0)=u_e$) transforma al sistema no autónomo original en un sistema autónomo de lazo cerrado, con $x=x_e$ como punto de equilibrio. Si se aproxima linealmente la ley de control como

$$u \cong \left(\frac{du}{dx} \right)_{x=x_e} x = Kx \quad (4.5)$$

entonces, la dinámica no lineal de lazo cerrado original se puede aproximar linealmente como

$$\dot{x} = F(x, u(x)) \cong (A + BK)x \quad (4.6)$$

es decir

$$\dot{x} = A_{LC}x \quad (4.7)$$

Definición 4.3 Shina [S]: El sistema dinámico (4.1) es **estabilizable** mediante retroalimentación del estado sólo si sus valores propios no controlables son asintóticamente estables. \diamond

Teorema 4.1 Vidyasagar [Vi]: El estado cero del sistema de lazo cerrado (4.7) es **asintóticamente estable** si y sólo si todos los valores propios de A_{LC} tienen parte real negativa. \diamond

En términos de la función de transferencia, se dice que el polinomio característico del sistema de lazo cerrado, $\det(sI - A_{LC})$, es **Hurwitz**, si tiene todas sus raíces en la parte real negativa del plano complejo. \textcircled{R}

Aun más, el sistema (4.2) es local y exponencialmente estabilizable si el sistema linealizado (4.1) alrededor de x_e , es estabilizable. Por tanto, como el modelo linealizado de la columna de DMTC es de realización mínima (Tabla 4.1), entonces basta una ley de control con retroalimentación estática del estado para estabilizar al proceso como se explica en seguida.

4.3.2.-Retroalimentación del estado

Si el espacio de estado de un sistema contiene toda la información esencial para el sistema, y si se hace que el control dependa de ese estado, entonces se podrá obtener un control razonablemente bueno. Es posible entonces, introducir una retroalimentación lineal de la forma $u = r + Kx$, bajo suposición de controlabilidad del proceso. En otras palabras, dado el sistema (4.1), el problema es encontrar una ley de control por retroalimentación de la forma $u = u(x)$, tal que el equilibrio x_c , o más bien el cero, resulte en un sistema de lazo cerrado $\dot{x} = F(x, u(x))$, que sea asintóticamente estable.

Teorema 4.2 Vidyasagar [Vi]: Dado el sistema no autónomo (4.2). Suponer que F es C^1 , que $F(0,0) = 0$, y que A y B están definidas como en (4.4):

$$A = \left[\frac{\partial F}{\partial x} \right]_{x=0, u=0} \quad B = \left[\frac{\partial F}{\partial u} \right]_{x=0, u=0} \quad (4.8)$$

Se supone además que $\exists K \in \mathbb{R}^{p \times n}$, es una matriz tal que todos los valores propios de $A+BK$ tienen partes reales negativas. Bajo estas condiciones, si en (4.2) se aplica la ley de control

$$u = Kx \quad (4.9)$$

entonces, el cero es un equilibrio asintóticamente estable del sistema resultante. \diamond

Demostración: Considerar el Σ_{NL} definido en (4.2), en donde se ha substituído (4.9). Considerar que el sistema resultante $F(x, Kx): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, es continuamente diferenciable. Definir

A_{LC} como $\left[\frac{\partial F(x, -Kx)}{\partial x} \right]_{x=0} = A + BK$. Si $F_1(x) = F(x, Kx) - A_{LC}x$. Asumir que (i)

$\lim_{\|x\| \rightarrow 0} \frac{\|F_1(x)\|}{\|x\|} = 0$ se cumple, y que (ii) todos los valores propios de A_{LC} tienen partes reales

negativas. Bajo estas condiciones, si 0 es un punto de equilibrio estable del sistema lineal (4.1) asociado al sistema no-lineal (4.2), entonces $x = 0$ también es un equilibrio estable del sistema no-lineal (4.2). Y como el polinomio característico $\det(sI - A_{LC})$, es Hurwitz por suposición, entonces se obtiene la conclusión deseada \diamond

La conclusión anterior no se modifica si se agrega a (4.9) un término de referencia constante.

$$u(t) = r + K x(t) \quad (4.10)$$

donde $r \in \mathbb{R}^p$ es la señal de referencia.

La ley de control por retroalimentación estática del estado (4.10) presupone la disponibilidad del espacio de estado del modelo. En el caso de la columna de DMTC el estado no es completamente medible. Para resolver este problema se adopta una solución que consiste en retroalimentar un estimado del estado, a partir de la salida de un sistema observador.

4.3.3.- Retroalimentación del estado estimado.

Para los sistemas no lineales de la síntesis de observadores para la estimación del estado es un problema complejo. En el caso de los sistemas lineales de dimensión finita, es un problema resuelto. En efecto, si un sistema lineal es observable, lo es para toda entrada, y con esta condición se puede construir un observador, independientemente de la entrada aplicada al sistema.

Definiendo el error de estimación del estado como $e(t) = \hat{x}(t) - x(t)$, donde $\hat{x}(t)$ es la variable de estado estimada, se dice que el observador es exponencial si $\|e(t)\| \leq k(x_0, \hat{x}_0, u)e^{-\alpha t}$, con $\alpha > 0$ y $k(x_0, \hat{x}_0, u) > 0$. Además, un observador de buena calidad es aquel que no depende de la inicialización, que tiene una convergencia a cero del error de estimación suficientemente rápida, y que funciona con la clase más amplia de entradas posible.

Definición 4.4: El **observador** que reconstruye el estado de un sistema, como el dado por la ec.(4.1), es un sistema dinámico cuyas entradas son los vectores de entrada $u(t)$, y de salida $y(t)$ del sistema a observar, y cuyo vector de salida, $\hat{x}(t)$, es el estado estimado (ver Figura 4.4). ◇◇

Una condición necesaria para la construcción de un observador con las propiedades mencionadas se apoya en el siguiente teorema:

Teorema 4.3 Vidyasagar [Vi]: Sea el sistema linealizado (4.1), y suponiendo un par (A,C) observable. Entonces el siguiente sistema

$$\dot{\hat{x}} = A\hat{x} + Bu + L(y - C\hat{x}) \quad (4.11)$$

es un observador para (4.1), donde $L \in \mathbb{R}^{n \times m}$ es la matriz ganancia de estimación y \hat{x} es el estimado de x . Además $e = \hat{x} - x$, el error de estimación, converge hacia cero al $t \rightarrow \infty$.

∞

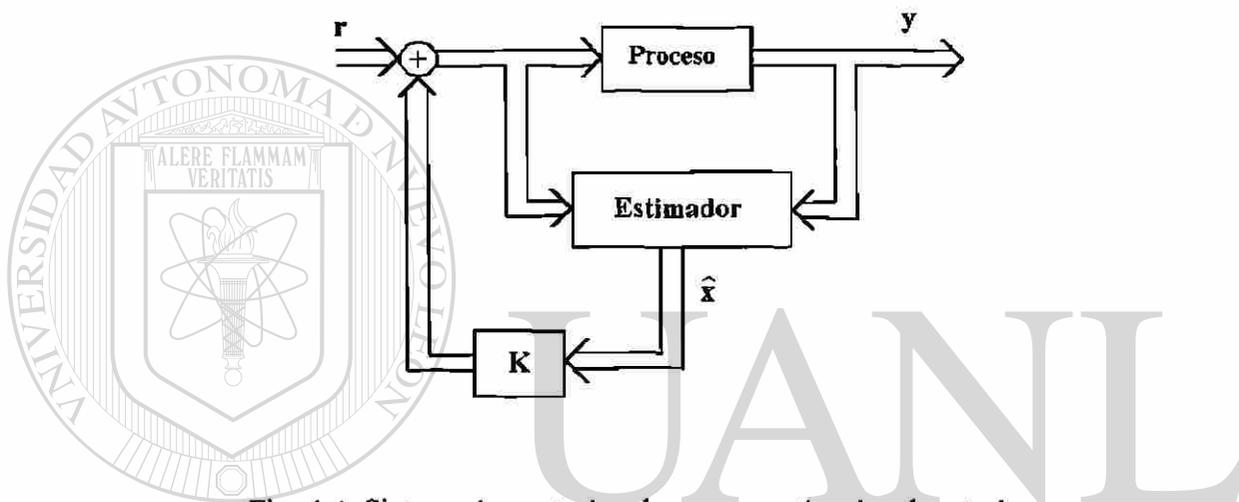


Fig. 4.4. Sistema de control en base a un estimador de estado.

La asignación de los valores propios de $(A+BK)$ se efectúa independientemente de la asignación de los valores propios de $(A-LC)$, debido a una propiedad denominada **propiedad de separación**. Esta propiedad consiste en combinar la síntesis del control y de la observación en forma independiente. Considerando los sistemas (4.1), (4.11) y la ley de control $u(t) = r(t) + K\hat{x}(t)$, entonces:

$$\begin{cases} \dot{x} = Ax + Br + BK\hat{x} \\ \dot{\hat{x}} = (A + BK - LC)\hat{x} + LCx + Br \end{cases} \quad (4.12)$$

o en forma compuesta,

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{\hat{x}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & BK \\ LC & (A + BK - LC) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \hat{x} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B \\ B \end{bmatrix} r \quad (4.13)$$

y al efectuar un cambio de variable de la forma
$$\begin{bmatrix} x \\ e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ -I & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \hat{x} \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

se transforma en:

$$\begin{cases} \begin{bmatrix} \dot{\hat{x}} \\ \dot{e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A+BK & BK \\ 0 & A-LC \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ e \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix} r \\ y = [C \quad 0] \begin{bmatrix} x \\ e \end{bmatrix} \end{cases} \quad (4.15)$$

donde los valores propios de (4.15) son la unión de los de (A+BK) y los de (A-LC). Los valores propios del estimador de estado no son afectados por los de la retroalimentación de estado, permitiendo de esta manera diseñar el observador tal que su transitorio sea más breve que el de la retroalimentación. Por lo anterior no habrá diferencia entre el estado x y el estado estimado \hat{x} .

4.4.- Control de la Columna de DMTC

La concentración del producto es generalmente la salida del sistema que se controla en los procesos químicos. En la práctica, la salida puede no medirse fácilmente, como en el caso de la columna de DMTC, donde se emplea la espectrometría en forma discontinua y fuera de línea. La medición de la concentración en línea puede lograrse si se le determina indirectamente mediante un estimador y a partir de otras mediciones permitiendo, en consecuencia, aplicar el algoritmo de control basado en el observador del estado.

En el diseño del control de la columna de DMTC, el primer paso es calcular la ganancia de retroalimentación como si la salida completa estuviera disponible, y en seguida determinar la ganancia del estimador de la composición. La ganancia de retroalimentación se calculó en base al sistema linealizado (4.1) y utilizando el software Matlab[®]. Los resultados se muestran en la Tabla 4.2.

El observador para estimar la composición del producto de la DMTC, emplea las siguientes mediciones: flujo de producto y dos temperaturas de la pared del evaporador. La

matriz ganancia del observador fue calculada usando el software **Matlab**[®], cuyos resultados se muestran en la Tabla 4.3.

Tabla 4.2.- Matriz de retroalimentación de salida.

Dimensiones del Estado, Salida y Control:			
$x \in \mathbb{R}^{16}, y \in \mathbb{R}^4, u \in \mathbb{R}^4$			
Polos de lazo cerrado seleccionados:			
$[-9.3, -4.3, -3.8, -3.3, -2.6, -1.8, -0.79, -0.4+0.33i, -0.4-0.33i, -0.5,$ $-0.19+0.04i, -0.19-0.04i, -0.32+0.034i, -0.32-0.034i, -0.0096, -0.008]$			
Matriz de retroalimentación de salida:			
$H =$	$\begin{bmatrix} -1.381 & 1.123 & 0.0218 & 16.609 \\ -1.545 & 0.969 & 0.0383 & 22.968 \\ 3595.1 & -2095.4 & -30.3 & -24279.1 \\ -402.5 & 2076.1 & 0.448 & 1145.6 \end{bmatrix}$		

4.4.1.- Resultados de los Experimentos de Simulación

Los experimentos de simulación fueron efectuados aplicando el observador lineal al modelo original en EDONL. Las simulaciones se realizaron en una computadora PC-compatible, empleando el **Simnon**[®], software de solución de ecuaciones diferenciales no-lineales.

Las **condiciones de simulación** fueron las siguientes (ver §4.3):

1. El punto de control y el punto de linealización del modelo corresponden a un punto de operación típico del proceso (Apéndice B).
2. La simulación consistió en someter al modelo no lineal del destilador, a un "arranque" del sistema a partir de una condición inicial dada, hasta su estabilización en el punto de operación deseado. Después del transitorio, a $t=8$ min., se somete al sistema a un cambio escalón en la referencia de la composición, desde 0.85 a 0.8.

3. El modelo de la columna de DMTC (ver Tabla 2.2) está constituido por un sistema de 16 EDONL, correspondientes a 4 compartimentos en que se seccionó la columna.
4. Las constantes y parámetros físicos del modelo se listan en el Apéndice A.
5. Las variables de entrada son: el flujo de alimentación, la velocidad del agitador, y el flujo de calor de las 2 mantas de calefacción (ver Tabla 2.3).

Tabla 4.3.- Observador.

Polos del observador:

$[-100.5, -20.1, -4.2, -3.6, -2.8, -0.38+2.2i, -0.38-2.2i, -0.52+0.64i, -0.52-0.64i, -0.67+0.42i, -0.67-0.42i, -0.31+0.14i, -0.31-0.14i, -0.0096, -0.18, -0.034]$

Matriz Ganancia del Observador:

L =

0.001	0.001	10.0	1.0
0.01	0.01	1.0	0.1
1000.0	100.0	100000.0	10000.0
10.0	1.0	1000.0	100.0
0.001	0.01	100.0	1.0
0.01	0.01	1.0	0.1
10.0	10.0	1000.0	100.0
10.0	10.0	1000.0	100.0
0.001	0.001	10.0	1.0
0.01	0.01	1.0	0.1
10.0	10.0	1000.0	100.0
10.0	10.0	1000.0	100.0
0.001	0.001	100.0	1.0
0.01	0.01	1.0	0.1
10.0	10.0	1000.0	100.0
10.0	10.0	1000.0	100.0

Se programaron dos experimentos de simulación:

- El sistema bajo control de salida asumiendo que la composición del producto estaba disponible y en línea (*), ver las Figura 4.5.
- Otra simulación, donde la concentración estimada de producto se retroalimenta para fines de control, ver las Figuras.4.6 a 4.9.

Se utiliza la siguiente convención para interpretar las gráficas resultantes de la simulación.

- Cada curva representa la dinámica en una sección del evaporador, e.g., la curva denominada "sección 1" representa la dinámica de la variable en los primeros 17.5 cms. de columna, tomados desde su extremo de alimentación en la parte superior. Ver las Figuras 4.5 a 4.7.
- Los grupos de señales que corresponden al proceso controlado son denotados con color azul y las que corresponden al observador con rojo, ver Figuras 4.6 y 4.7.

Los resultados de la simulación son:

1. La respuesta transitoria del sistema bajo control por retroalimentación de la concentración estimada es más oscilatoria que con el valor verdadero de esa salida.
2. El estado estacionario de la composición converge a la referencia especificada. Figuras 4.5 y 4.6. Además, el tiempo requerido por el sistema para llegar al estado estacionario es prácticamente el mismo.
3. Las temperatura de pared de las secciones, 2 (200°C) y 3 (210°C) del evaporador, y el flujo de productos –destilado y residuo, presentan una pequeña desviación del valor final (offset). Esta aparece en la respuesta del sistema controlado porque se considera un valor de la referencia distinto al utilizado en los cálculos de la linealización del modelo original.
5. La selección de valores propios se hizo de tal modo que se obtuvo un control de alta ganancia. Figura 4.9.

(*) Simulación para fines de comparación.

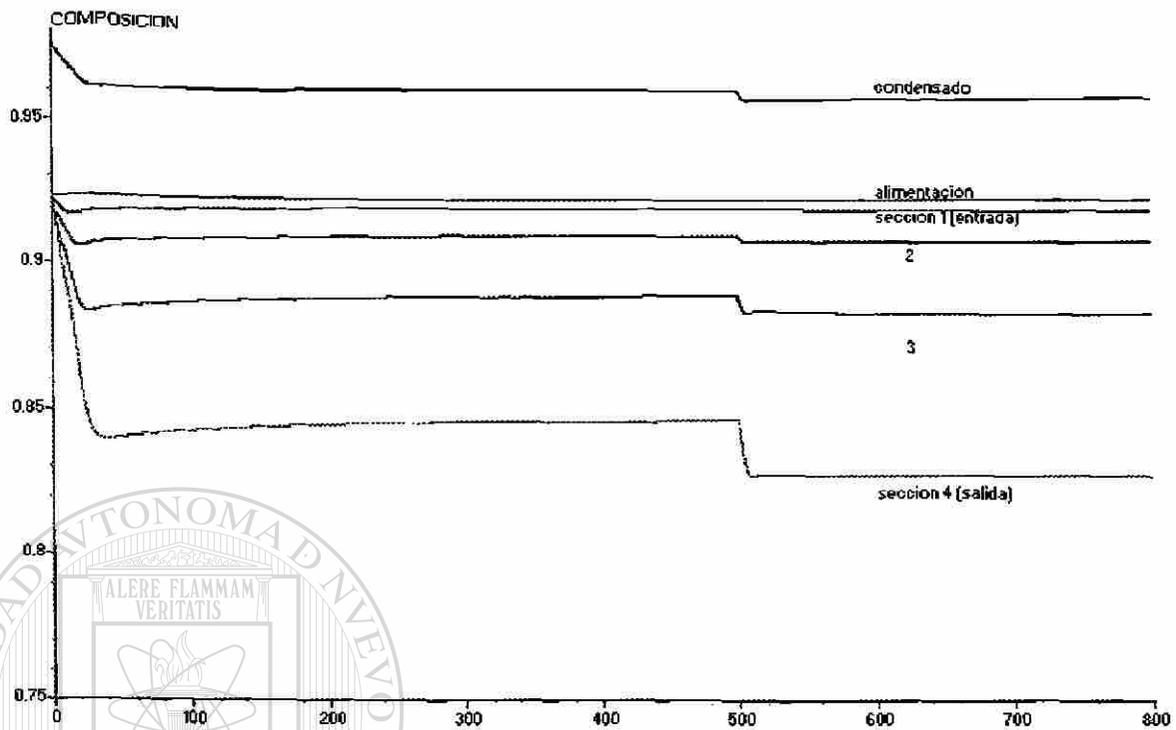


Fig. 4.5. Composición del producto vs t(seg). Control por retroalimentación de salida.

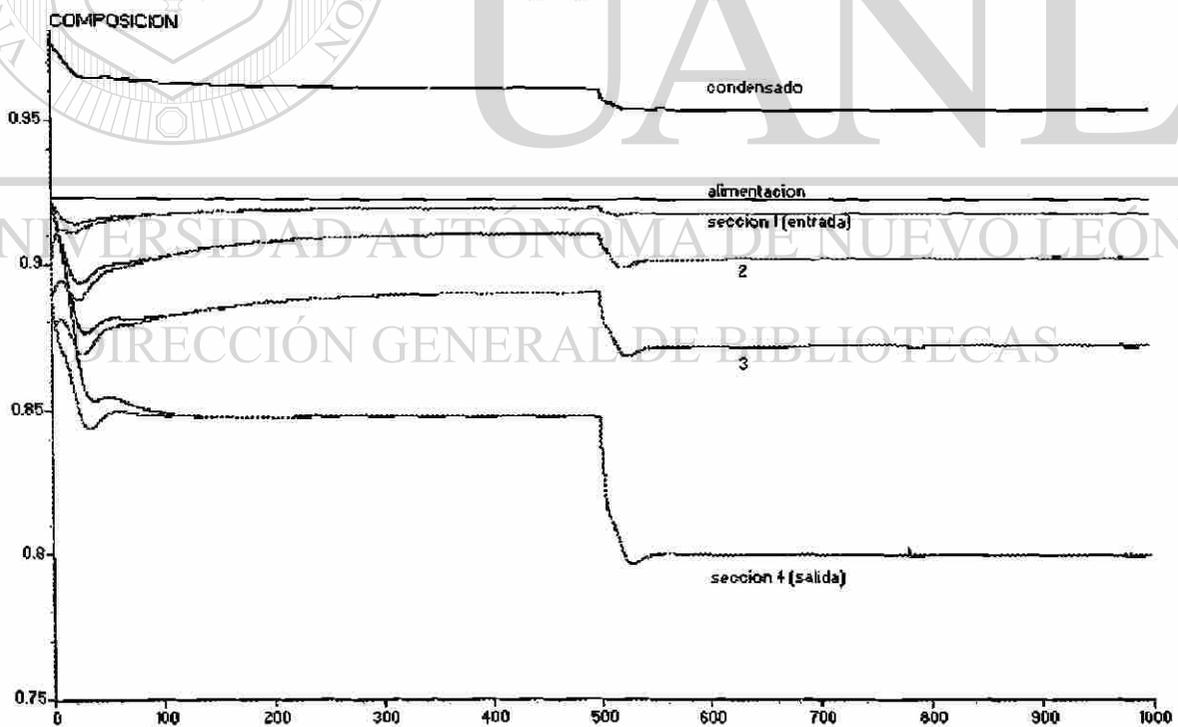


Fig. 4.6a.- Composición del producto vs. t(seg). Control por retroalimentación del estimado de la composición.

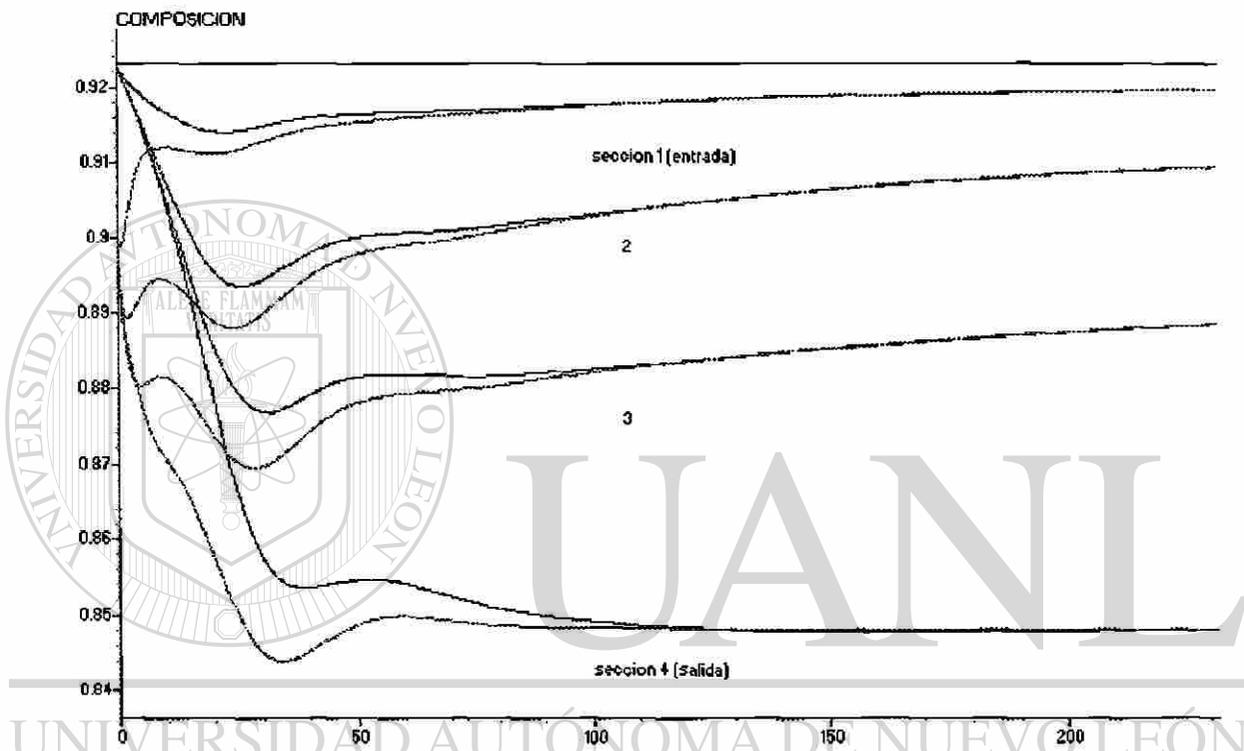


Fig. 4.6b. Ampliación que muestra la convergencia del observador.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

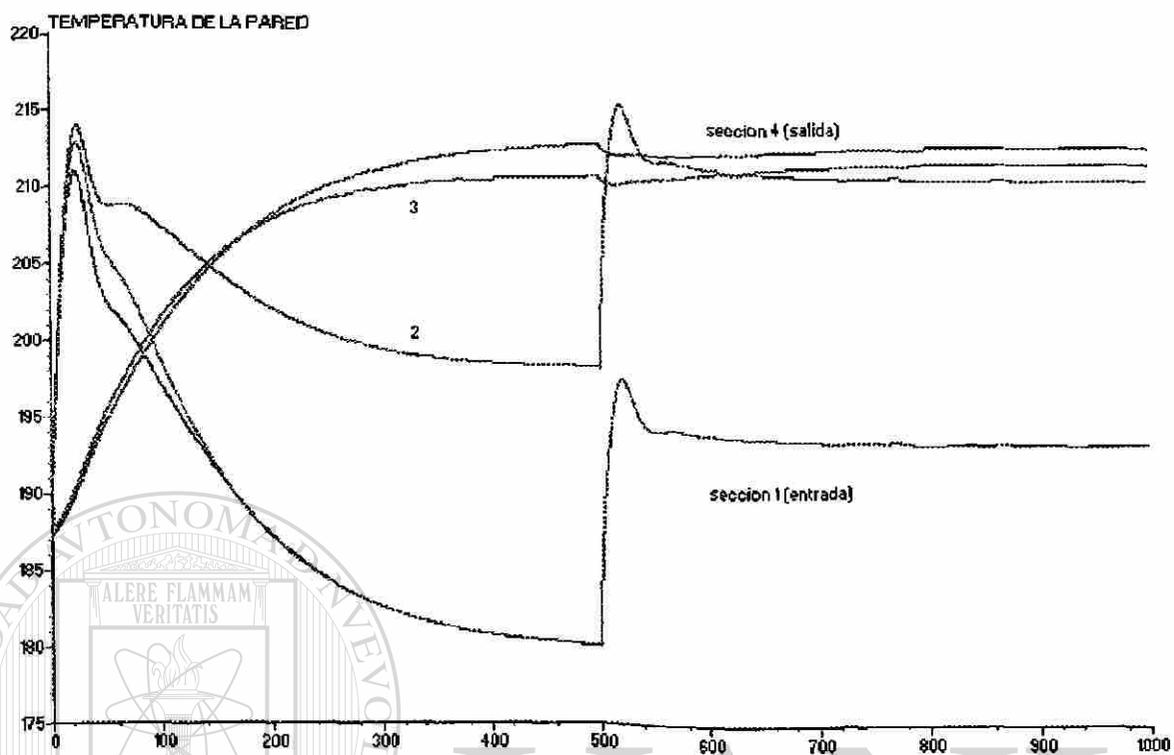


Fig. 4.7. Temperatura de la pared del evaporador vs. t(seg).

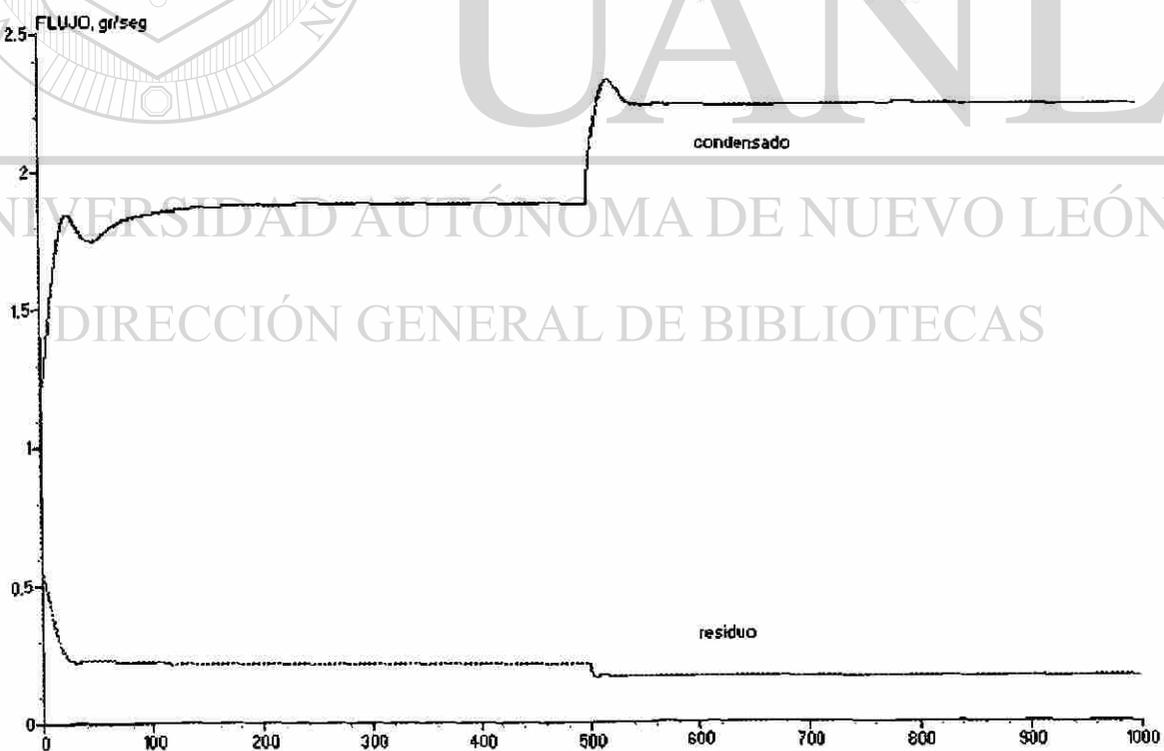


Fig. 4.8. Flujos de residuo y destilado.

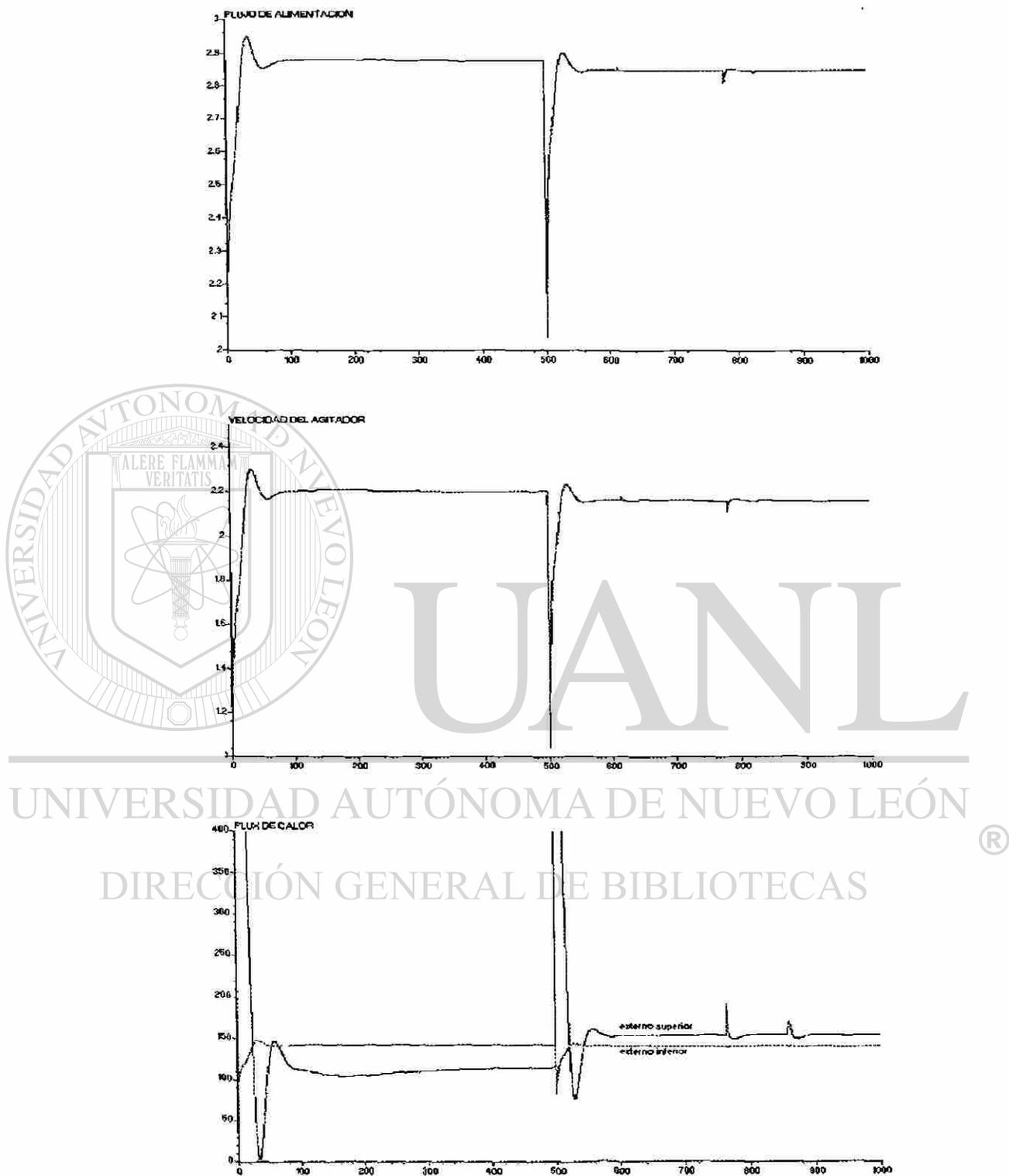


Fig. 4.9. Señales de control: (arriba) flujo de alimentación; (en medio) velocidad del agitador; (abajo) flujos de calor al evaporador (manta superior e inferior): vs. t(seg)

4.5.- Conclusiones

El objetivo de este capítulo fue el diseñar una estrategia de control simple, que a partir del conocimiento de un modelo no lineal de la columna de DMTC permitiera alcanzar los objetivos de control en base a un modelo linealizado del mismo.

El análisis del sistema linealizado del modelo de la columna de DMTC muestra que el proceso es localmente observable y localmente controlable. Estas características permiten asegurar que existe un control simple que le estabiliza asintóticamente, así como de la existencia de un observador que le permite estimar el estado del sistema. El diseño del control resultó relativamente simple por estar basado en técnicas estándar de asignación de polos de lazo cerrado de los sistemas lineales. Sin embargo, existe una dificultad técnica: el cálculo numérico de la ganancia de retroalimentación. Esta dificultad es ocasionada por el diferente "grado" de controlabilidad y de observabilidad del estado (mala condición).

Se demostró la factibilidad del control basado en observador mediante simulaciones del modelo de la columna de DMTC usando retroalimentación de la salida disponible y del estado estimado. El esquema de control resultante es confiable en el punto de operación (linealización). Se ha hecho incapié en que el observador utilizado es lineal; sin embargo, no se le restringe a ello. De hecho, el uso de un observador no lineal debe ser más eficiente para controlar un proceso no lineal en otros puntos de operación. Sin embargo, dicho observador no lineal es innecesario, puesto que la meta primordial del DMTC es efectuar la purificación en un solo punto de operación, y que por la naturaleza misma del proceso, no requiere del seguimiento de trayectorias ó situaciones parecidas.

La aplicación de otros algoritmos de control está limitada por las dificultades de manipular matemáticamente un modelo de la dimensión y la complejidad de este proceso. La teoría matemática para tal manejo de ecuaciones está fuera del alcance del estudio de la presente tesis.

CAPITULO 5

DIAGNOSTICO DE FALLAS EN LA COLUMNA DE DMTC

La importancia del diagnóstico y la detección de fallas en los procesos industriales, tales como una planta química o un reactor nuclear, es obvia. Por ejemplo, en una planta de producción química se mantiene la calidad del producto asegurándose que las variables del proceso fluctúen dentro de un rango permisible. Si las condiciones de operación van más allá de los límites de seguridad, pueden surgir problemas tales como fluctuaciones indeseadas, las cuales llevan a alguna situación peligrosa (explosión, fugas tóxicas, etc.). El diagnóstico de fallas de un proceso es una tarea muy difícil para un operador humano, especialmente si se presentan fallas no anticipadas, o de baja probabilidad de aparición. Claramente, el tiempo de respuesta del operador es crítico en estas situaciones, y el retardo al reaccionar o la toma de una decisión inapropiada puede conducir al desastre.

Los sistemas empleados en la industria pueden estar sujetos a fallas, y en consecuencia, la selección de éstos equipos o procesos deben ser tales que su funcionamiento resulte confiable y seguro. Por lo anterior, es necesario detectar y definir los posibles regímenes de falla antes de que sus consecuencias sean graves. En el caso de la columna de DMTC, la aparición de fallas en los elementos del sistema de control, pueden ocasionar severas pérdidas económicas si se obtienen lotes con producto de baja calidad, y la seguridad de la operación estará en riesgo cuando se manejen sustancias tóxicas o explosivas.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Normalmente el método tradicional para enfrentar las fallas en un sistema de control está basado sólo en un buen plan de mantenimiento. En el mejor de los casos, se instala el equipo clave para la operación por duplicado, es decir, se provee al sistema de control con cierta redundancia física en la instrumentación. Si en lugar de duplicar instrumentos se puede efectuar un diagnóstico de fallas en forma no física, es decir, mediante una redundancia analítica, se tendrá una ventaja económica para los procesos modernos, en particular de aquellas aplicaciones donde es imposible o excesivamente costoso, el tener una redundancia física de los sistemas de control. La teoría del control moderno, proporciona los fundamentos con los que se puede diseñar una herramienta adecuada para detectar y aislar, de manera analítica, una clase de fallas para cierta clase de sistemas.

En este capítulo se presenta un panorama general del problema de detección, el aislamiento (localización) y acomodo (corrección) de fallas. Se plantea el problema de la detección, así como las técnicas empleadas para este fin; se presentan los métodos existentes, tanto para sistemas lineales, así como para el caso no lineal. Además, se hace énfasis en un método basado en "observadores dedicados" para la detección y el aislamiento de una falla.

Se proponen procedimientos para la evaluación de una falla, analizándose los casos lineal y no lineal. En particular, se establecen las condiciones para las cuales es posible determinar la magnitud de la falla. Las ideas propuestas son aplicadas para el caso particular de la columna de DMTC.

5.1.- FUNDAMENTO DEL DIAGNOSTICO DE FALLAS.

La detección de fallas mediante redundancia analítica ha sido reportada desde hace dos décadas, comenzando con los trabajos pioneros de Beard (1971) [Wi] y de Jones (1973) [Wi] en base a filtros de detección. Antes de precisar el problema del diagnóstico de fallas, se procede a definir los conceptos que serán utilizados a lo largo de este capítulo.

Definición 5.1 Frank, et al. [PFC]: La **falla** en un sistema automático, es toda clase de funcionamiento deficiente en el sistema dinámico de una planta, y que conduce a una anomalía inaceptable en el comportamiento global de dicho sistema. ∞

Definición 5.2 Frank, et al. [PFC]: Las señales de perturbación al sistema, las incertidumbres de modelación, el ruido en la medición, y las variaciones de parámetros en el proceso son clasificadas como **entradas desconocidas**. ∞

Definición 5.3 Frank, et al. [PFC]: La **redundancia analítica** consiste en diseñar relaciones dinámicas entrada/salida que incluyen los efectos asociados con la falla. ∞

En otras palabras, una falla es una modificación de las relaciones causa-efecto entre la entrada y la salida de un proceso, así el proceso no responde a los objetivos predefinidos cuando existe dicha falla. La falla se presenta como un cambio abrupto o incipiente del sistema físico, la falla misma puede estar localizada en los sensores, en los actuadores, o en

los componentes del proceso. Un sistema dinámico susceptible a fallas y a entradas desconocidas se puede esquematizar por medio de la Figura 5.1.

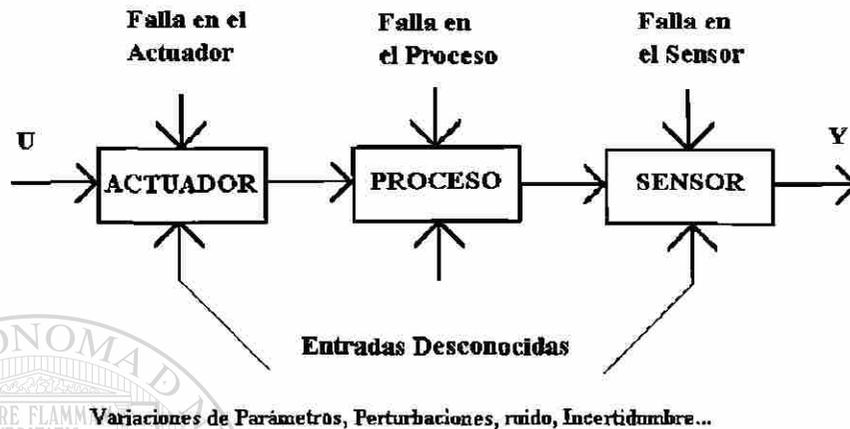


Fig 5.1. Esquema de un sistema de control con fallas y entradas desconocidas.

5.1.1.- El Problema de la Detección de Fallas

La detección oportuna de fallas requiere que éstas sean identificadas en tiempo real, con una velocidad y sensibilidad adecuadas para evitar falsas alarmas por entradas desconocidas. Una vez detectada la condición de falla, se debe poder aislar la componente fallada e intervenir para su corrección.

La confrontación al problema de detección e identificación de fallas (DIF) se presenta en 3 etapas, (ver Figura 5.2):

- (1) Generación de una señal de Residuo.
- (2) Detección e Identificación de la Falla.
- (3) Monitoreo y toma de decisiones o acomodo de la falla.

Definición 5.4: La salida de un generador de residuos, o **residuo** $r(t)$, es una función del tiempo nominalmente cero o cercano a cero cuando no está presente ninguna falla y es sensiblemente diferente de cero cuando falla un componente del sistema. ◇◇

Expresado de otra forma, los residuos son funciones acentuadas, o influidas, por un vector de fallas, que al ser evaluadas correctamente, y mediante alguna lógica de decisiones, pueden proporcionar la información necesaria para determinar el tiempo y la localización de la falla. Si la falla es detectada a tiempo, con la sensibilidad y robustez adecuadas, antes de que las consecuencias sean críticas, se podrá aislar la componente fallado e intervenir con la acción apropiada para corregirla.

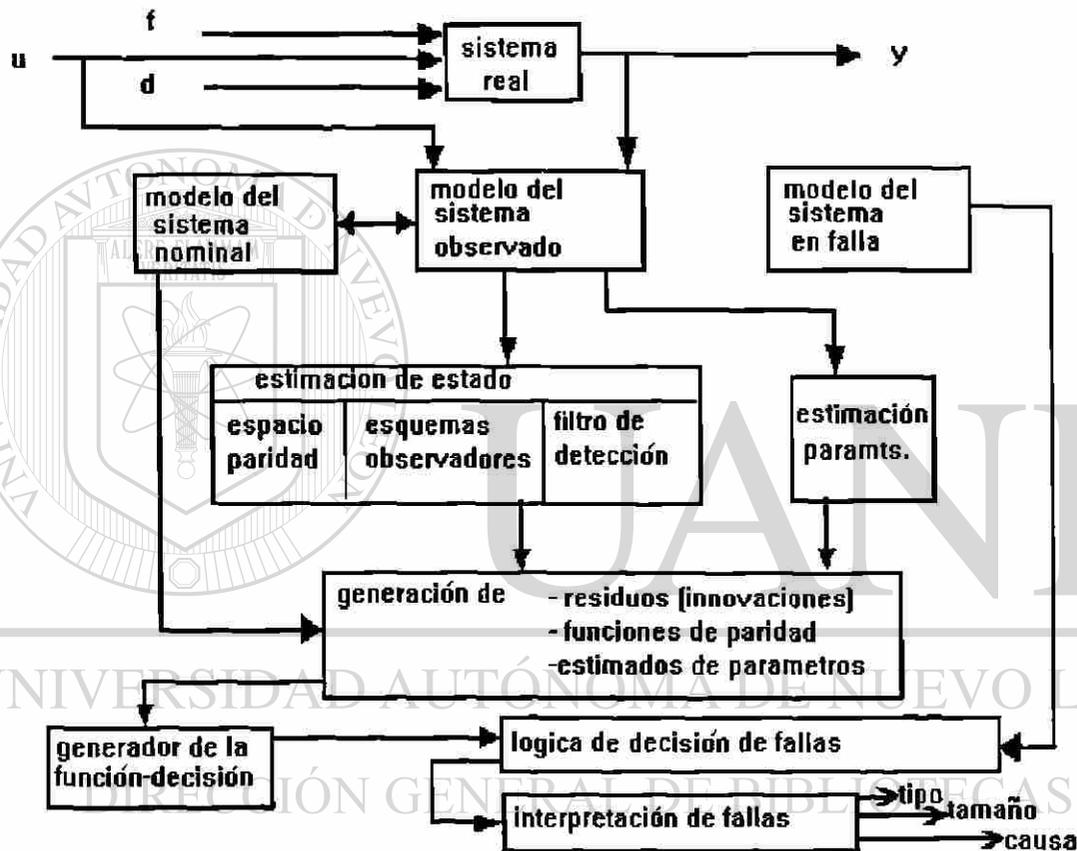


Fig.5.2.- Proceso de detección e identificación de fallas.

5.1.2.- Formulación del Problema

Para un sistema dinámico con una entrada real $u(t)$, un vector de medición $y(t)$, y un vector de fallas f , el problema de la detección de fallas es determinar la existencia de un vector de residuos $r(t)$ que contenga la información relacionada con dicha falla, y proporcionar un método para construir dicho vector de residuos.

Se trata entonces, de modelar al sistema con el fin de precisar la acción de las fallas a partir de modelos analíticos del proceso, de los cuáles se requiere de tres tipos:

- un modelo nominal,
- un modelo real observado, y
- un modelo del sistema con falla.

Nota: El modelo del sistema en falla debe incluir los modelos correspondientes a todas las posibles fallas y por tanto es un modelo de altísima dimensión. ∞

Las técnicas utilizadas para la detección y aislamiento de fallas se clasifican en tres grupos, que de acuerdo al tipo de metodología utilizada para la generación de residuo son:

- (i) La identificación de parámetros.
- (ii) El espacio paridad.
- (iii) La estimación de estado.

las cuáles se describen a continuación.

5.1.3.- Detección de Fallas en Base a Identificación de Parámetros.

Este método hace uso del hecho de que las fallas en un sistema dinámico son caracterizadas como variaciones provocadas por cambios en los parámetros físicos. Por ejemplo, la fricción, la masa, la viscosidad, la capacitancia, etc. La idea de este método es de construir un residuo, o detector de fallas, vía la estimación de los parámetros verdaderos del sistema, e identificarlos dinámicamente. Los trabajos en este dominio fueron realizados, entre otros, por Iserman (1984) [I], aplicado a una bomba centrífuga y a fugas en líneas de bombeo; Rault et al (1985), sobre la identificación en tiempo real de los parámetros de un modelo de intercambiador de calor para detectar las fallas de un actuador; Nowakowski et al (1993) [NDP]; Zhirabok (1994) [ZP] y otros más.

Definición 5.5: Se entiende por **parámetros del proceso** a las constantes o coeficientes del proceso dependientes del tiempo y que aparecen en la descripción matemática de la relación entre las señales de entrada y de salida del proceso. ∞

Se considera un proceso que está representado por un modelo entrada–salida linealizado alrededor de un punto de operación, y está descrito por

$$a_n y^{(n)}(t) + \dots + a_1 \dot{y}(t) + y = b_0 u(t) + \dots + b_m u^{(m)}(t) \quad (5.1)$$

donde a_i y b_j son constantes.

Los parámetros del proceso $\theta^T = [\beta_0 \ \beta_1 \dots] = [a_1 \ \dots \ a_n \ b_1 \dots b_m]$ son, en su mayoría, relaciones no–lineales de varios coeficientes físicos del proceso. El método pretende determinar los cambios que sufren tales parámetros, puesto que es en ellos donde se reflejan los efectos de las posibles fallas del proceso. Como los coeficientes físicos del proceso no son directamente medibles, se intenta su determinación mediante el siguiente procedimiento:

1. Se selecciona o construye un modelo paramétrico del sistema. Normalmente se usan modelos lineales con parámetros concentrados.
2. Se determinan las relaciones entre los parámetros del modelo θ_i y los parámetros o constantes físicas, p_j .

$$\theta = f(p)$$

3. Se estima el vector de parámetros del modelo como resultado de la medición de las señales de entrada y salida del sistema real.
4. Se determina el vector de parámetros físicos.

$$p = f^{-1}(\theta) \quad (5.2)$$

que casi nunca existe puesto que $\dim(p) \gg \dim(\theta)$.

5. Se calcula el vector de desviaciones Δp ; utilizando para ello su valor nominal.
6. Se toman decisiones acerca de la ocurrencia de una falla mediante el uso de relaciones entre éstas y los cambios sobre los parámetros físicos a través de catálogos de fallas.

La justificación de esta clase de métodos es la combinación del modelado teórico y la estimación de parámetros del modelo; el requisito necesario para la aplicación de este procedimiento es la existencia de la transformación inversa (5.2), que restringe el método a modelos bien definidos. Además, como la meta es no sólo detectar, sino también el

diagnosticar las fallas del proceso, el modelo debe expresarse lo mejor posible, en base a leyes y principios físicos (ecuaciones de balance, leyes fisico-químicas, fenómenos irreversibles, etc.).

Por otra parte, una revisión de los métodos de estimación de parámetros en línea puede encontrarse en Young [Y], donde se reporta que el método más robusto es el de mínimos cuadrados, si el ruido superpuesto es pequeño. Sin embargo, el valor estimado de estos parámetros llegan a presentar una variabilidad a causa del ruido, lo cual debe considerarse para su apropiada utilización. Una excepción será en el caso de ruido de medida cero y descorrelacionado de la entrada u y de la salida. Si se desea efectuar la estimación en línea, se deberá reescribir la ecuación de estimación en forma recursiva.

En resumen, para la detección de fallas es importante el poder determinar qué parámetros y cuántos de ellos son posible de estimar bajo la presencia de ruido en las señales. Una vez que los parámetros han sido seleccionados se les debe relacionar matemáticamente de una forma precisa. En lo referente al método de estimación, aún se requiere establecer algoritmos con un menor esfuerzo computacional, considerando el ruido y para sistemas en lazo cerrado.

5.1.4.- Detección de Fallas en Base al Espacio Paridad

El método de espacio paridad es clasificado como una técnica de estimación de estado porque este procedimiento conduce a un tipo especial de observador (dead-beat), como se explica más adelante. Las primeras contribuciones al enfoque mediante el espacio paridad fueron hechas por Potter y Suman (1977) [Wi], Desai y Ray (1981) [DR], y extendido para el caso dinámico por el grupo de Willsky, [ChW], [XWV]. Posteriormente se cuenta con los desarrollos de investigadores como Gertler et al (1990), Staroswieki y Meng (1991), Massoumnia, Verghese, y Willsky (1986, 1989) [MVW], Hamelin (1995) [HST], y Medvedev (1995) [M].

La idea central del método de espacio paridad es probar la consistencia (paridad) de las ecuaciones matemáticas de un sistema (relaciones de paridad), usando mediciones reales. Las relaciones redundantes son básicamente dos: 1) directa (algebraica), y 2) dinámica.

(1) Directa. Es la redundancia que existe entre sensores cuyas salidas están algebraicamente relacionadas; i.e. las salidas del sensor se relacionan de manera que la variable que mide uno de ellos puede ser determinada por la salida instantánea de los otros sensores. Se considera un sistema cuyas salidas están modeladas por

$$y = Cx + \Delta y \quad (5.3)$$

donde $y \in \mathbb{R}^m$ es el vector de las mediciones, $x \in \mathbb{R}^n$ es el valor verdadero de las mediciones, $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$ es la matriz de mediciones de rango n , $\Delta y \in \mathbb{R}^m$ es el vector de error en la medición.

Para la detección del vector (Δy) se combina al vector (y) con un conjunto de ecuaciones (de paridad) linealmente independientes dado por

$$p = Vy \quad (5.4)$$

donde $p \in \mathbb{R}^{(m-n)}$ es un vector de paridad, y $V \in \mathbb{R}^{(m-n) \times m}$ es una matriz de proyección tal que cumple con

$$\begin{cases} VC = 0 \\ V^T V = I_m - C(C^T C)^{-1} C^T \\ VV^T = I_{m-n} \end{cases} \quad (5.5)$$

la primera condición de (5.5) representa el espacio nulo izquierdo de C , la segunda es la proyección en el subespacio ortogonal al subespacio generado por las columnas de V , y la tercera condición precisa la ortogonalidad de las filas de V de modo que las ecuaciones de paridad contengan sólo los errores debido a fallas.

Las columnas de V definen m direcciones distintas de falla asociadas con cada medición. Por ejemplo, la i -ésima columna de V determina la dirección a lo largo de la cual reside (p), es decir, $\Delta y = \Delta y_i = [0 \dots 0 \Delta y_i 0 \dots 0]^T$. Lo que asegura la conclusión de que una falla en la medición i implica un crecimiento de (p) en la i -ésima dirección. Por consiguiente, el vector residuo de dimensión m será:

$$r = y - C\hat{x} \quad (5.6)$$

donde $\hat{x} = (C^T C)^{-1} C^T y$, es el estimado por mínimos cuadrados de x , que con la ec.(4.3) y la 2a. condición de (4.3a), el vector de paridad (p) estará dado por:

$$r = V^T p \quad (5.7)$$

En consecuencia, dadas las m mediciones redundantes y_1, \dots, y_m de una variable del proceso, se puede estimar el vector x a partir del subconjunto más consistente de mediciones. La medición con falla se puede identificar mediante verificación de la paridad.

(2) Redundancia dinámica. El espacio paridad dinámico ha sido definido exclusivamente para sistemas discretos, pero recientemente Medvedev (1995) lo generalizó para el caso continuo.

La relación de redundancia para un sistema discreto, libre de ruido, es una combinación lineal de valores presentes y pasados de la salida $y(t)$. La relación debe ser idénticamente cero si no ocurre ninguna falla en el sistema. Para un sistema lineal discreto como:

$$\begin{cases} x(k+1) = Ax(k) + Bu(k) \\ y(k) = Cx(k) \end{cases} \quad (5.8)$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$, $u \in \mathbb{R}^p$, y las matrices A , B , C son constantes de dimensiones apropiadas.

Sea el subespacio vectorial de dimensión $(s+1) \times m$ dado por:

$$P: \left\{ V \begin{bmatrix} C \\ CA \\ \vdots \\ CA^s \end{bmatrix} = 0 \right\} \quad (5.9)$$

el cual es llamado espacio paridad de orden s , donde (s) es el tamaño de la ventana de discretización del sistema.

Para cualquier tiempo k , todo vector V_0^T en (5.9), puede ser usado para una comprobación de paridad con el generador de residuos:

$$r_k = V_0^T \begin{bmatrix} y_{k-s} \\ y_{k-s+1} \\ \vdots \\ y_k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 \\ CB & \ddots & \vdots \\ \vdots & & 0 \\ CA^{s-1}B & \dots & CB & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{k-s} \\ u_{k-s+1} \\ \vdots \\ u_k \end{bmatrix} \quad (5.10)$$

el cual es independiente de la señal u_k . Sin embargo, este generador de residuos es afectado por las fallas y las perturbaciones. El espacio paridad (5.9) puede ser visto como el espacio nulo izquierdo de la matriz:

$$\begin{bmatrix} C \\ zI - A \end{bmatrix} \quad (5.11)$$

de acuerdo a

$$[p(z) \quad -q(z)] \begin{bmatrix} C \\ zI - A \end{bmatrix} = 0 \quad (5.12)$$

o en forma equivalente como

$$p(z)C - q(z)(zI - A) = 0 \quad (5.13)$$

Si se define una matriz $T_1 = [M \quad C^R]$, donde M representa una base para el Kernel de C , y C^R una inversa derecha de C , es decir, $CT_1 = [0 \quad I_m]$. entonces al multiplicar T_1 por la izquierda a (5.13), resulta en:

$$\begin{aligned} q(z)(zM - AM) &= 0 \\ p(z) - q(z)(zC^R - AC^R) &= 0 \end{aligned} \quad (5.14)$$

Por tanto, el problema de encontrar una relación temporal se reduce a encontrar una solución para (5.14).

Lo importante en el método del espacio paridad, es hacer que la ecuación de paridad sea ortogonal a una o a un cierto número de fallas, a fin de tener un mecanismo que permita distinguir entre las distintas fallas. También, es de señalarse que la redundancia temporal

relaciona la salida del sensor y las entradas del actuador, por lo que potencialmente puede ser usado para diagnosticar fallas, tanto en el sensor como en el actuador.

5.1.5.- Detección de Fallas en Base a Estimadores de Estado

La idea básica es reconstruir las salidas de un sistema a partir de las mediciones del mismo, con la ayuda de un observador (banco de observadores), así el diagnóstico de fallas en base a estimadores de estado, consiste en generar residuos que contienen los errores de estimación respecto a las salidas reales del sistema.

Se sabe de la teoría de control que para la estimación del estado se puede utilizar observadores lineales (Luenberger), no lineales, de orden reducido, o de orden completo en el caso determinístico, y cuando se considera señales con ruido se utilizan los filtros de Kalman. Son muchos los trabajos de investigación reportados para la detección de fallas basados en observadores, la mayoría de los cuales están referidos en los siguientes artículos: Willsky (1976) [Wi], Isermann (1984) [I], Frank (1990) [F]. Los trabajos más recientes han sido efectuados por investigadores como Frank [F], Khargonekar [KT], Seliger [SF], Ding [DF], Hammouri [HKY], y otros más.

El concepto de detección de fallas usando observadores está basado en un cierto número de suposiciones idealizadas, entre ellas, la principal es que el modelo matemático del proceso utilizado en el observador es conocido. En la práctica, esta suposición no puede ser perfectamente satisfecha, puesto que el modelo matemático exacto de un proceso físico nunca está disponible. Usualmente los parámetros del sistema son inciertos o variantes en el tiempo, y las características de las perturbaciones y del ruido son desconocidas, de manera que no pueden ser modeladas completamente. Debido a esto, siempre hay una diferencia entre el proceso real y su modelo matemático, aún si no ocurre falla alguna. Estas discrepancias pueden causar dificultades metodológicas en la aplicación de los criterios para la detección de fallas, resultando en una fuente de falsas alarmas.

Una formulación más significativa del problema de detección de fallas, es aquella que incluye robustez respecto a los errores de modelado y otras entradas desconocidas, sin perder sensibilidad en la falla. Un esquema de este tipo es llamado **Detección Robusta de Falla**. El problema de robustez ha sido abordado ampliamente (ver por ejemplo: Chow [ChW],

Khargonekar [KT], Wünnenberg et al [WF], Seliger y Frank[SF], Ding y Frank[DF], Hammouri et al [HKY], Frank [Fr].)

La configuración básica del esquema de detección de fallas, mediante la observación del estado, se muestra en la Figura 5.3, donde la parte medular del generador de residuos es un observador. En el esquema, el observador hace uso de mediciones reales (o subconjuntos de ellas) introducidas a un modelo paralelo que es guiado por las mismas entradas que la planta. Por razones de estabilidad y convergencia con respecto a las condiciones iniciales, se retroalimenta el error de observación definido como la diferencia (residuo) entre las salidas del modelo y del sistema real, el cual debe ser nominalmente cero o desviarse cuando sucede una falla.

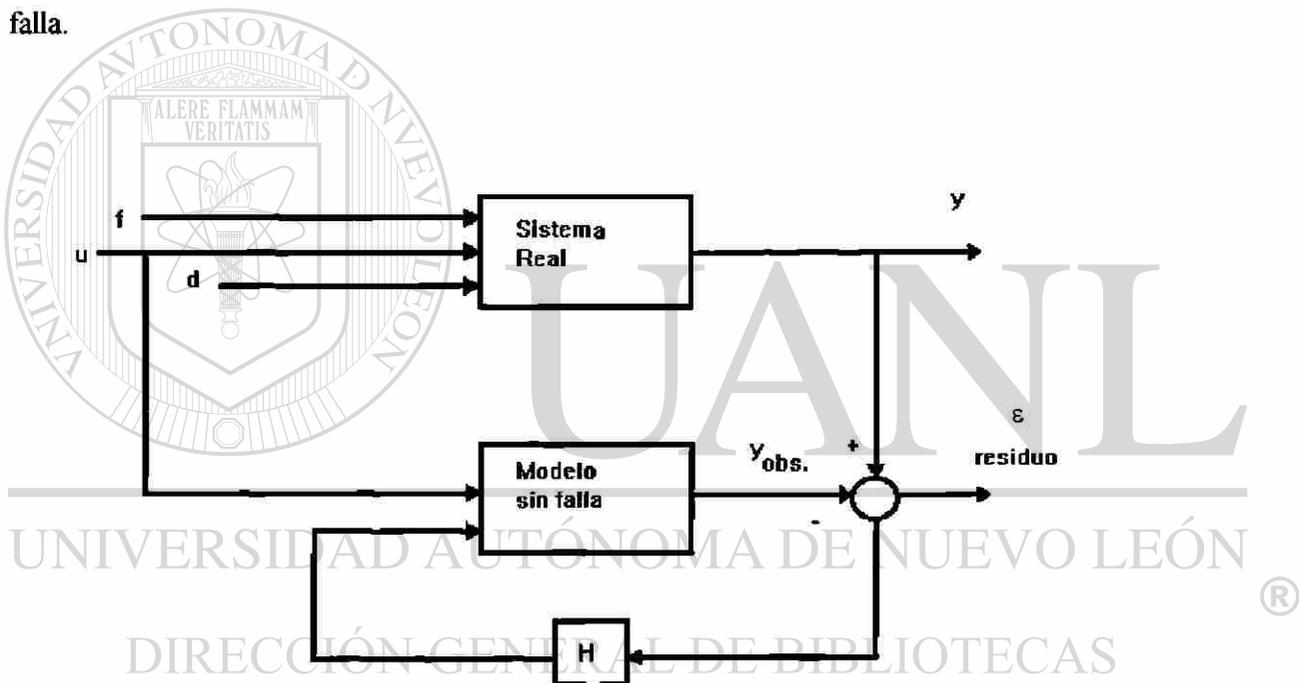


Fig. 5.3.- Configuración básica de generación de residuo en base a un observador.

5.1.6.- Formulación para Sistemas Lineales

El trabajo más desarrollado en lo que respecta a la detección de fallas ha sido efectuado para la clase de sistemas lineales. En esta sección se analiza el problema de la detección de fallas para dicha clase de sistemas.

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = A x(t) + B u(t) + E_1 d(t) + K_1 f(t) \\ y(t) = C x(t) + E_2 d(t) + K_2 f(t) \end{cases} \quad (5.15)$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$, $u \in \mathbb{R}^p$, $f \in \mathbb{R}^q$, son los vectores de estado, de mediciones, de control, y de falla (en actuadores y sensores); las matrices A , B , C , E , K , usualmente son conocidas y de dimensiones adecuadas. El vector $d(t)$ representa la evolución en el tiempo de las entradas desconocidas, y las matrices E_1 y E_2 representan el mapeo correspondiente.

El generador de residuos debe tener propiedades tales que permitan detectar y distinguir diferentes tipos de falla. Se puede definir tales propiedades al reexpresar al sistema (5.15) en el dominio de la frecuencia como:

$$y(s) = G_u(s)u(s) + G_f(s)f(s) + G_d(s)d(s) \quad (5.16)$$

con

$$\begin{cases} G_u(s) = C(sI - A)^{-1}B \\ G_f(s) = C(sI - A)^{-1}K_1 + K_2 \\ G_d(s) = C(sI - A)^{-1}E_1 + E_2 \end{cases}$$

entonces, se tienen las siguientes definiciones,

Definición 5.6 Frank [Fr]: Una falla $f_i(t)$ es **detectable** si el i -ésimo elemento de $C(sI - A)^{-1}K_1 + K_2$ es distinto de cero. $\diamond\diamond$

Definición 5.7 Frank [Fr]: Dadas dos señales f_1 , f_2 , y además $y = G_1(s)f_1(s) + G_2(s)f_2(s)$, entonces la señal f_1 se dice que es **distinguible** (desacoplada) de f_2 , si $\text{Im}[G_1(s)] \not\subset \text{Im}[G_2(s)]$ donde G_1 , y G_2 están definidas de acuerdo a G_f (5.16). $\diamond\diamond$

Lo anterior significa que las señales deben tener diferentes funciones de transferencia para ser separables.

Cuando los vectores $d(t)$ y $f(t)$ del sistema (5.15) son cero, el observador Luenberger correspondiente es

$$\begin{cases} \dot{\hat{x}} = A\hat{x} + Bu + H(y - \hat{y}) \\ \hat{y} = C\hat{x} \end{cases} \quad (5.17)$$

donde $H \in \mathbb{R}^{n \times m}$ es la ganancia del observador tal que $(A - HC)$ es Hurwitz.

A partir de (5.15) y (5.17) se deduce que el error de estimación de la salida y del estado, $\varepsilon = y - \hat{y}$, $e = x - \hat{x}$, estarán gobernados por:

$$\begin{cases} \dot{e} = (A - HC)e + (E_1 - HE_2)d + (K_1 - HK_2)f \\ \varepsilon = Ce + E_2d + K_2f \end{cases} \quad (5.18)$$

donde f es el vector de fallas y d el vector de entradas desconocidas. La ecuación (5.18) muestra que una vez que los transitorios ocasionados por las diferentes condiciones iniciales del sistema y del observador mismo, decaigan exponencialmente hacia cero, el error de salida ε se verá afectado únicamente por el vector de fallas y por el vector de entradas desconocidas.

Teorema 5.1:-Para el sistema (5.15) con $d = 0$, todo vector de fallas, f , en el espacio de estado \mathbb{R}^n es **detectable** si y sólo si (A, C) es observable. $\diamond\diamond$

Prueba: Se concluye directamente del Teorema 4.9 y (5.18). $\diamond\diamond$

Ahora bien, si se considera ε como el residuo del proceso de detección de fallas, y si se asegura que el efecto del vector de perturbaciones d sea reducido o eliminado, entonces el observador se podrá diseñar para que el efecto de las entradas desconocidas sea minimizado respecto al efecto de las fallas.

Cuando el efecto de las entradas desconocidas es apreciable, entonces se puede presentar el problema de falsas alarmas. Como las entradas desconocidas (definición 5.2) no se limitan solamente a entradas de perturbación, su existencia en el sistema plantea el problema conocido como detección robusta de fallas. Puesto que para fines de identificación de fallas se requiere de residuos con propiedades de robustez, se han propuesto en la literatura técnica diversos métodos, que lo aseguran en cierta medida, tales como:

- (1) Bancos de Observadores,
- (2) Observadores con desacoplamiento,
- (3) Técnicas de H_∞ , y sus combinaciones posibles.

A continuación se presenta una descripción de los dos primeros métodos.

Grupos (Bancos) de observadores.- Esta alternativa de solución al problema de robustez está fundamentada en: (1) el incremento de redundancia de las mediciones, (2) lograr un cierto desacoplamiento mediante un procesamiento lógico de la redundancia extra. El incremento de redundancia mediante observadores es lograda con una cierta modificación a su diseño. Considérese la siguiente definición.

Definición 5.8 Frank [PFC]: Un **observador dedicado** es un observador guiado por sólo una de las salidas que están disponibles en el sistema; es decir, para el caso de un observador de Luenberger de un sistema lineal:

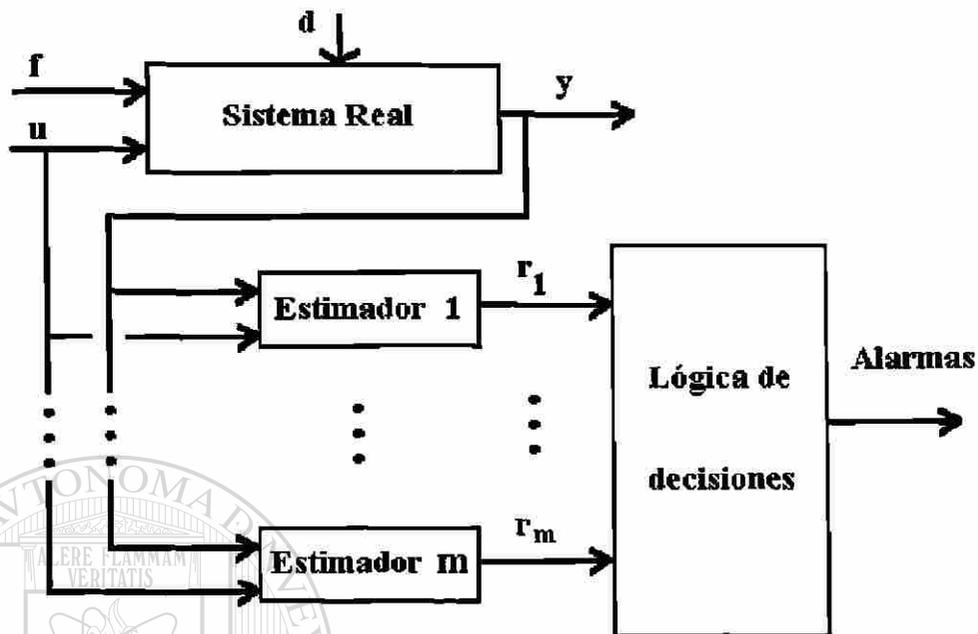
$$\begin{cases} \dot{\hat{x}}^j = A\hat{x}^j + Bu + H_i(y_i - C_i\hat{x}^j) \\ \hat{y}^j = C\hat{x}^j \end{cases} \quad (5.19)$$

donde \hat{x}^j es el vector estado estimado por el j-ésimo observador dedicado (5.19), guiado por la i-ésima salida, y_i , los vectores C_i y H_i corresponden a la i-ésima fila de las matrices C y H .

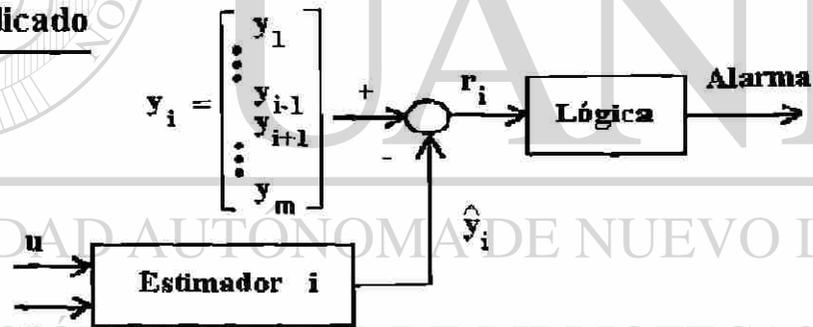
Suponiendo que el sistema descrito por (5.15) es observable desde todas las salidas, i.e. todos los pares (c_i, A) son observables, y que se pueda encontrar una ganancia H_i para el observador, tal que los valores propios de $[A-H_iC_i]$ sean Hurwitz, entonces, cada observador i genera n -estimaciones de las variables de estado, por lo cual un conjunto de m observadores, genera una redundancia extra.

Si cada observador se diseña para ser sensible a ciertas fallas e insensible al resto, entonces cada observador se habrá especificado para la vigilancia de una falla determinada. Este esquema de detección e identificación en base al banco de observadores presenta diversas variantes. Se analizan dos solamente (ver Figura 5.4):

- (i) Un sistema de observadores dedicados; y
- (ii) Un sistema de observadores generalizados.



Observador Dedicado



Observador Generalizado

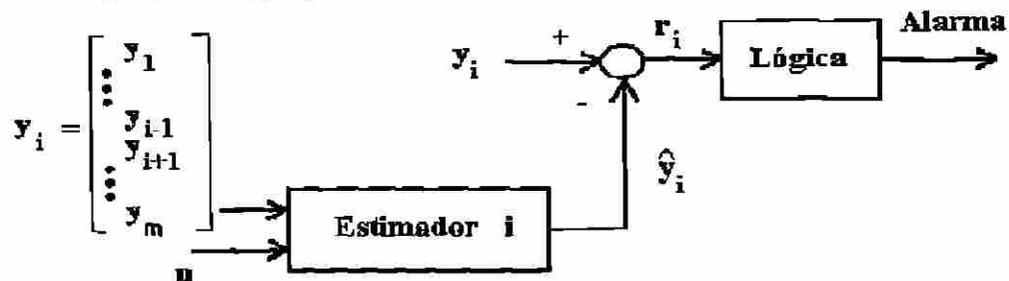


Fig. 5.4. Esquema de bancos de observadores para el aislamiento de falla.

En el sistema de observadores dedicados (i), cada uno es guiado por la entrada u de la planta, y la señal del sensor y_i que se está supervisando. El vector de salida del i -ésimo observador genera el residuo r_i . Con los m residuos es posible el aislamiento de una única falla. Con este esquema la robustez a entradas desconocidas por medio de observadores dedicados, es más bien pobre.

En el llamado sistema de observadores generalizados (ii), se mejora la robustez mediante el incremento de entradas a los observadores, hasta un máximo de $(m-1)$ salidas. En este caso, el i -ésimo observador es guiado por todas las salidas excepto la i -ésima, de manera que una falla en el sensor i afecta a todos los residuos, excepto el i -ésimo. El total de los m observadores permite el aislamiento de una única falla. Este esquema posee mayor grado de bondad, y puede utilizarse para hacerlo más robusto hasta para $(m-2)$ entradas desconocidas.

Observadores con Desacoplamiento a Entradas Desconocidas. Los observadores lineales desacoplados, tratados en la teoría de control lineal [Ch], son aquellos que mediante una transformación de coordenadas y bajo ciertas condiciones, permiten aislar el efecto de entradas desconocidas con respecto al estado estimado verdadero.

Considerando el sistema (5.15) con ausencia de fallas y entradas desconocidas con el siguiente sistema como observador

$$\begin{cases} \dot{z} = Fz + Ju + Gy \\ r = L_1 z + L_2 y \end{cases} \quad (5.20)$$

que estima el estado x , o más precisamente, $z(t)$ estima una combinación lineal del estado, $r(t) = P x(t)$, si existe una matriz $T \in \mathbb{R}^{r \times n}$, con $r < n$, tal que $z(0) = Tx(0)$, y $z(t) = Tx(t) \forall t \geq 0$; $F \in \mathbb{R}^{r \times r}$, $G \in \mathbb{R}^{r \times m}$, $J \in \mathbb{R}^{r \times p}$, $L_1 \in \mathbb{R}^{q \times r}$, $L_2 \in \mathbb{R}^{q \times m}$.

El error de estimación $e = z - Tx$ y el residuo están gobernados por las ecuaciones siguientes

$$\begin{cases} \dot{e} = Fe + FTx + Ju + GCx + GE_2 d_2 + GK_2 f_2 - TAx - TBu - TE_1 d_1 - TK_1 f_1 \\ r = L_1(e + Tx) + L_2 Cx + L_2 E_2 d_2 + L_2 K_2 f_2 \end{cases} \quad (5.21)$$

Si el sistema (5.15) está operando sin falla, es decir, $f_1=0, f_2=0$, a tiempo t_0 , entonces el estado estimado por el observador, $z(t_0) = Tx(t_0) \Rightarrow z(t) = Tx(t), \forall t$, proporciona un estimado de la transformación lineal Tx del estado original x .

Para detectar las fallas f_1, f_2 , a pesar de la presencia de x, u, d_1, d_2 , el residuo r debe cumplir con

$$\begin{cases} f_1 = 0, & f_2 = 0, & \Rightarrow & r(t \rightarrow \infty) = 0 \\ f_1 \neq 0, & f_2 \neq 0, & \Rightarrow & r \neq 0 \end{cases} \quad (5.22)$$

lo cual implica un desacoplamiento perfecto de las entradas desconocidas. Las condiciones que se deben satisfacer para ello están dadas por:

$$\begin{cases} TA - FT = GC \\ J = TB \\ TE_1 = 0 \\ GE_2 = 0 \\ L_2E_2 = 0 \\ L_1T + L_2C = 0 \end{cases} \quad (5.23)$$

Si F contiene sólo valores propios estables y se cumplen las condiciones (5.23), entonces el error y el residuo siguen las ecuaciones:

$$\begin{cases} \dot{e} = Fe + GK_2f_2 - TK_1f_1 \\ r = L_1e + L_2K_2f_2 \end{cases} \quad (5.24)$$

por lo cual el residuo permanece inalterado con respecto a las entradas desconocidas, el estado y el control. Aún más, para evitar las cancelaciones de los diferentes componentes de las señales de falla, basta asegurar que:

$$\text{rango}(TK_1) = \text{rango}(K_1)$$

$$\text{rango}\left(\begin{bmatrix} G \\ L_2 \end{bmatrix} K_2\right) = \text{rango}(K_2) \quad (5.25)$$

con todos éstos requisitos satisfechos, las fallas resultarán reflejadas en el residuo.

El procedimiento de diseño analítico que permite obtener la solución al problema del desacoplamiento completo, entre el efecto de las fallas f y las entradas desconocidas d , requiere de la selección de la transformación adecuada, lo cual se logra convirtiendo al sistema original en una forma canónica diagonal a bloques, llamada de Kronecker [Va], permitiendo con ésto asegurar que $\text{Ker}(T) \cap \text{Ker}(C) \subset \text{Ker}(P)$, donde P está definida por $r(t) = P x(t)$.

Finalmente, para fines de aislamiento robusto de la falla, se combina el observador generalizado en un banco de observadores, para hacer sensible cada uno a ciertas fallas y robusto con respecto al resto.

5.1.7.- Formulación para Sistemas No Lineales

En la gran mayoría de las situaciones prácticas, el sistema a supervisar es no lineal, y contrariamente a los sistemas lineales, que cuando son observables lo son para toda entrada, la noción de observabilidad para los sistemas no lineales está ligada a la naturaleza del control.

Definición 5.9 Vidyasagar [Vi]: Sea el sistema no lineal

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = F(x(t), u(t)) \\ y(t) = h(x(t)) \end{cases} \quad (5.26)$$

dos estados x_0, x_1 se dicen ser **distinguibiles** si existe una función de entrada $u(t)$ tal que

$$y(\cdot, x_0, u) \neq y(\cdot, x_1, u)$$

donde $y(\cdot, x_i, u)$, $i=1,2$ es la función de salida del sistema, dado por (4.16), que corresponde a la función de entrada $u(\cdot)$ y a la condición inicial $x(0) = x_i$. El sistema se dice que es (localmente) **observable** en $x_0 \in X$, (donde $X \subseteq \mathbb{R}^n$ es un conjunto abierto) si existe una vecindad N de x_0 tal que toda $x \in N$ distinta de x_0 es distinguible de x_0 . Finalmente, el sistema se dice ser (localmente) **observable** si es localmente observable en cada $x_0 \in X$. \diamond

El siguiente enfoque se basa en la aproximación lineal por Taylor, sin embargo, esta aproximación puede ser aplicada en distintos momentos del procedimiento de generación de residuos. A continuación se presentan dos de los procedimientos basados en este enfoque.

Sistema no lineal: Linealizado con respecto al estado, Frank [Fr]. Considérese el sistema (5.26) con fallas,

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{y} = \mathbf{h}(\mathbf{x}) + \mathbf{f}_2 \end{cases} \quad (5.27)$$

donde \mathbf{f}_1 , y \mathbf{f}_2 denotan las fallas. El observador identidad no lineal correspondiente está definido por

$$\begin{cases} \dot{\hat{\mathbf{x}}} = \mathbf{F}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}) + \mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u})(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) \\ \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}}) \end{cases} \quad (5.28)$$

donde $\mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u})$ es la ganancia del observador.

Efectuando una aproximación de primer orden por series de Taylor, se puede ver que cuando $\|\mathbf{e}\|$ es suficientemente pequeña, el error de estimación $\mathbf{e} = \hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}$ obedece a

$$\dot{\mathbf{e}} = \mathbf{F}_0 \mathbf{e} - \mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}) \mathbf{f}_2 - \mathbf{f}_1 \quad (5.29)$$

con

$$\mathbf{F}_0 = \left. \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}} - \mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}) \left. \frac{\partial \mathbf{h}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u}}$$

definiendo el residuo $\mathbf{r} = \hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y}$, el cual una vez linealizado alrededor de $\mathbf{e} = 0$, resulta en

$$\mathbf{r} = \left. \frac{\partial \mathbf{h}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\hat{\mathbf{x}}} \mathbf{e} - \mathbf{f}_2 \quad (5.30)$$

donde se tiene que \mathbf{r} depende directamente de \mathbf{f}_2 e indirectamente de \mathbf{f}_1 . La matriz $\mathbf{H}(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{u})$ tiene que ser determinada de manera que $\mathbf{e}=0$, sea un punto de equilibrio asintótico de (5.29). En general, es suficiente seleccionar a \mathbf{H} como una matriz constante. Ver Teorema 5.1 y la ecuación (5.18).

Si el generador de residuo se basa en un modelo linealizado en el punto de operación, y el sistema está operando lejos de las condiciones normales de operación, ocurrirán desviaciones

significativas en los parámetros, debido a que no se consideran las no linealidades en tal modelo linealizado.

Sistema no lineal: linealizado respecto a sus Parámetros Seliger, Frank [SF],[SFr]. El anterior enfoque de linealización puede ser inapropiado, y para evitar los errores de linealización desde un principio, se puede asumir que para el sistema no lineal (5.27), tanto las fallas de los componentes como las incertidumbres del modelo y los errores por linealización se pueden definir vía parámetros de modelo, los cuales pueden ser representados linealmente.

Considérese el sistema afin en la entrada

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x) + g(x)u \\ y = h(x) \end{cases} \quad (5.31)$$

con la consideración de que el conjunto de parámetros matemáticos pueden ser particionados en dos clases, unos sujetos a identificación θ_1 y otros representando las fallas θ_2 , es decir:

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x, \theta_1, \theta_2) \\ g(x) &= g(x, \theta_1, \theta_2) \end{aligned} \quad (5.32)$$

Sí se expande (5.32) en series de Taylor alrededor de un vector de parámetros nominales θ_{1o}, θ_{2o} , entonces las fallas, así como las entradas desconocidas pueden ser representadas linealmente por:

$$\begin{aligned} E(x) &= \left(\frac{\partial f}{\partial \theta_1} \quad \frac{\partial g_1}{\partial \theta_1} \quad \dots \quad \frac{\partial g_p}{\partial \theta_1} \right) \Bigg|_{\theta_{1o}, \theta_{2o}} (x) \\ K(x) &= \left(\frac{\partial f}{\partial \theta_2} \quad \frac{\partial g_1}{\partial \theta_2} \quad \dots \quad \frac{\partial g_p}{\partial \theta_2} \right) \Bigg|_{\theta_{1o}, \theta_{2o}} (x) \\ d &= \left(\Delta \theta_1^T \quad \Delta \theta_1^T u \quad \dots \quad \Delta \theta_1^T u_p \right)^T \Bigg|_{\theta_{1o}, \theta_{2o}} \\ f &= \left(\Delta \theta_2^T \quad \Delta \theta_2^T u \quad \dots \quad \Delta \theta_2^T u_p \right)^T \Bigg|_{\theta_{1o}, \theta_{2o}} \end{aligned} \quad (5.33)$$

donde $g_i(x)$ denota la i -ésima columna de $g(x)$, y u_i la i -ésima señal de entrada medible. Los términos en derivadas parciales denotan las matrices Jacobianas usuales. Los términos con $\Delta \theta$

representan las desviaciones, variantes en el tiempo, de los parámetros con respecto de los valores nominales. Por lo tanto, el modelo con entradas por falla y entradas desconocidas que está asociado al sistema (5.26) puede ser descrito como

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x) + g(x)u + E(x)d + K(x)f \\ y = h(x) \end{cases} \quad (5.34)$$

donde las entradas d, f se asumen completamente desconocidas.

Se aplica al sistema (5.34) una transformación no lineal $z = T(x)$, para obtener la forma de los sistemas afines en el estado, módulo con una inyección de salida.

$$\begin{cases} \dot{z} = A z + J(y, u) + E d + K f \\ y = C z \end{cases} \quad (5.35)$$

La descripción (5.35) del modelo permite el diseño de un observador robusto, Seliger Frank [SF]. El diseño se basa en la teoría de control lineal, mediante una segunda transformación con $w = T_2 z$ la cuál, para efectuar el desacoplamiento de las entradas desconocidas, debe satisfacer las condiciones siguientes:

$$\begin{cases} T_2 A - F T_2 = G C \\ T_2 E = 0 \\ \text{rango}(T_2 K) = \text{rango}(K) \end{cases} \quad (5.36)$$

El observador robusto para el sistema (5.34) está dado por:

$$\begin{cases} \dot{\hat{z}} = F \hat{z} + T_2 J(y, u) + G C y \\ r = L_1 \hat{z} + L_2 y \end{cases} \quad (5.37)$$

requiriéndose adicionalmente que $L_1 T + L_2 C = 0$, por lo que el error de estimación $e = \hat{w} - w$ y el residuo obedecerán las ecuaciones siguientes:

$$\begin{cases} \dot{e} = F e - T_2 K f \\ r = L_1 e \end{cases} \quad (5.38)$$

De donde se concluye que el error de estimación está gobernado por una ecuación diferencial lineal, excitada sólo por los errores iniciales y las fallas. Por tanto, el residuo sólo es afectado por las fallas y no por las entradas desconocidas.

Nota: De acuerdo a Xia y Gao (1989) [SF] y otros autores, la transformación $T_1(x)$ existe sólo para una clase muy reducida de sistemas no lineales. Si la transformación apropiada existiera, ésta sería muy difícil o casi imposible de obtener por la necesidad de resolver ecuaciones diferenciales parciales muy complejas. \diamond

Se puede ampliar la clase de modelos a tratar si, en lugar de efectuar la anterior transformación, se pospone el desacoplamiento y directamente se intenta encontrar una transformación $z = T(x)$ que satisfaga las condiciones:

$$\frac{\partial T(x)}{\partial x} f(x) = F T(x) + \Phi_0(h(x))$$

$$\frac{\partial T(x)}{\partial x} g(x) = \Phi_1(h(x))$$

$$\frac{\partial T(x)}{\partial x} E(x) = 0$$

$$\text{rango}\left(\frac{\partial T(x)}{\partial x} K(x)\right) = \text{rango}(K(x))$$

$$R(T(x), h(x)) = 0 \tag{5.39}$$

Si existe una matriz estable F y una transformación de la salida Φ_0 y Φ_1 tales que el conjunto de ecuaciones diferenciales parciales para $T(x)$ tenga solución, y si además existe la relación $R(T(x), h(x)) = 0$, entonces el observador para el sistema (5.34) estará dado por:

$$\begin{aligned} \dot{\hat{z}} &= F\hat{z} + \Phi_0(y) + \Phi_1(y)u \\ r &= R(\hat{z}, y) \end{aligned} \tag{5.40}$$

con el cual el error de estimación $e = \hat{z} - z$ y el residuo obedecerán las ecuaciones

$$\begin{aligned} \dot{e} &= Fe - \frac{\partial T(x)}{\partial x} K(x) f \\ r &= R(T(x) + e, h(x)) \end{aligned} \tag{5.41}$$

donde el residuo no es afectado por las entradas desconocidas.

5.2.- Lógica para la Identificación de Fallas

Una vez que el residuo ha sido generado, éste contiene la información sobre las posibles fallas. Ahora, para determinar cuál es el elemento fallado a partir de las salidas estimadas, es necesario desarrollar un método para procesar dicha información.

El siguiente es un esquema de procesamiento lógico para aislar una falla en los instrumentos de un sistema. De acuerdo a la Definición 5.3, el residuo r_i se puede especificar como la diferencia entre la salida del sistema real y_i , y la salida estimada por el (los) observador(es) \hat{y}_i :

$$r_i = \hat{y}_i - y_i, \quad \forall i = 1, \dots, m \quad (5.42)$$

Si no se consideran perturbaciones, el residuo será afectado únicamente por las fallas de actuadores, las variaciones anormales en los parámetros y por las fallas de los sensores. Esta falla es detectable si se considera un umbral que considere las no linealidades del proceso, y posiblemente las incertidumbres en los parámetros del sistema.

Considerando que las salidas del sistema lineal (5.15) son estimadas por un sólo observador dedicado (5.19), guiado por la i -ésima salida y_i , los residuos (5.42) correspondientes a todas las demás salidas se podrán agrupar en funciones de decisión con dimensión $(m - 1)$,

$$\Delta'(t) = \begin{bmatrix} r_1(t) \\ r_2(t) \\ \vdots \\ r_{i-1}(t) \\ r_{i+1}(t) \\ \vdots \\ r_m(t) \end{bmatrix} = \{ [y_j - \hat{y}_j] \}, \quad \begin{cases} j = 1, \dots, m \\ j \neq i \end{cases} \quad (5.43)$$

las cuales permiten hacer las siguientes determinaciones:

- a) Sin falla, todos los residuos serán pequeños o cercanos a cero.
- b) Si hay falla en el sensor k , donde $k \neq i$, sólo el residuo r_k se verá afectado por la falla del instrumento k . Sólo la salida y_k es afectada por la falla y ninguna de las otras salidas estimadas se verá afectada, porque el observador (5.19) es guiado por un instrumento normal y_i .
- c) Si la falla ocurre en el instrumento i , entonces todas las señales estimadas \hat{y}_j contendrán error, y por ello todos los residuos resultarán afectados

Suponiendo que si existe una falla, ésta será en los sensores, entonces la función de decisión (5.43), en principio, permite aislar la falla en el instrumento i , con cada observador (5.19) operando sobre una sola señal de instrumento.

5.3.- Evaluación de Falla

El **acomodo** o **tratamiento** automático de un proceso con falla, es el siguiente paso después de la detección e identificación de la falla. Si se presenta una falla lo primero que se debe hacer, antes de intentar la corrección, es calcular la **magnitud de la falla**, puesto que el tipo y rapidez del tratamiento, o la decisión a tomar, dependerá del componente fallado y de la dimensión de la falla.

A continuación se obtendrán las condiciones bajo las cuales es posible determinar la magnitud de la falla, cuando se utiliza un sistema de diagnóstico basado en observadores. Se asume en este desarrollo que la falla ocurre en uno de los actuadores para los sistemas siguientes:

- (a) un sistema lineal invariante en el tiempo (LTI),
- (b) una clase de sistemas no lineales.

5.3.1.- Evaluación de Falla para Sistemas Lineales

Se considerar el sistema LTI real (con o sin falla),

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = Ax(t) + Bu \\ y(t) = Cx(t) \end{cases} \quad (5.44)$$

y un sistema nominal,

$$\begin{cases} \dot{x}_0(t) = Ax_0(t) + B_0u \\ y_0(t) = Cx_0(t) \end{cases} \quad (5.45)$$

con, $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$, $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $y_0 \in \mathbb{R}^m$, $u \in \mathbb{R}$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{R}^n$, $B_0 \in \mathbb{R}^n$, $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Hipótesis 5.1:

- (1) El sistema tiene una sola entrada.
- (2) Sólo se consideran fallas en el actuador.
- (3) El sistema es estable bajo condiciones nominales.
- (4) La falla de actuador se caracteriza con cambios en los elementos de la matriz B. \diamond

Si se construye un nuevo sistema que use sólo información conocida, i.e. una copia del sistema nominal (5.45), y la salida del sistema fallado (5.44), entonces:

$$\dot{\hat{x}}(t) = A\hat{x}(t) + B_0u + H[y(t) - C\hat{x}(t)] \quad (5.46)$$

donde $H \in \mathbb{R}^{n \times m}$, será un observador de (5.44) y (5.45) cuando no exista falla. Sin embargo, deja de serlo para ambos sistemas cuando aparece una falla en el actuador.

Cuando aparece una falla en el actuador, el valor nominal B_0 cambia a un valor real B . La diferencia $B_0 - B$ determina la magnitud de la falla. Si se define el **residuo** (Definición 5.4) como el error de estimación $e(t) = \hat{x}(t) - x(t)$, entonces con (5.46) expresa la dinámica del residuo como

$$\dot{e}(t) = (A - HC)e(t) + (B_0 - B)u \quad (5.47)$$

Para evaluar el residuo en el estado estacionario, en función únicamente de señales conocidas, se toman los estados estacionarios de (5.44) y (5.45); es decir,

$x_0^* = -A^{-1}B_0u$, $x^* = -A^{-1}Bu$, donde la entrada u es constante y diferente de cero, siempre y cuando exista la inversa de la matriz A (sistema exponencialmente estable), entonces:

$$x^* = x_0^* - A^{-1}(B_0 - B)u \quad (5.48)$$

Por otro lado, (5.46) tiene como estado estacionario,

$$\hat{x}^* = -(A - HC)^{-1}(B_0u + HCx^*) \quad (5.49)$$

Combinando las dos últimas ecuaciones se obtiene

$$e^* = \hat{x}^* - x^* = -(A - HC)^{-1}(B_0 - B)u \quad (5.50)$$

La diferencia $e(t) - e^*$ tiende a cero exponencialmente porque $(A - HC)$ es estable ($e^* = 0$ si no hay falla). Consecuentemente, en caso de falla en el actuador, $e(t)$ ya no tenderá a cero, sino al valor del residuo. A partir de (5.50) se obtiene el valor del residuo $B_0 - B$ en el estado estacionario como:

$$B_0 - B = \frac{1}{u} \left[A^{-1} - (A - HC)^{-1} \right]^{-1} (\hat{x}^* - x_0^*) \quad (5.51)$$

que bajo la Hipótesis 4.1, permite conocer la **magnitud de la falla** del actuador, a condición de que:

- (a) $u(t) \neq 0$ es una constante acotada conocida, tal que la solución del sistema esté definida sobre R^+ .
- (b) $(A - HC)$ es invertible.
- (c) La selección de H debe ser tal que $(A - HC)$ sea Hurwitz.

5.3.2.- Evaluación de Falla para Sistemas no Lineales

Considérese ahora la clase de sistemas no lineales con un comportamiento real

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = f(x) + Bu \\ y(t) = h(x) \end{cases} \quad (5.32)$$

y su sistema nominal asociado

$$\begin{cases} \dot{\hat{x}}_0(t) = f(x_0) + B_0 u \\ y(t) = h(x_0) \end{cases} \quad (5.53)$$

donde $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $B \in \mathbb{R}^n$. Asumiendo las mismas Hipótesis 4.1 que en el caso LTI y procediendo de manera semejante, se tiene que el sistema:

$$\dot{\hat{x}}(t) = f(\hat{x}) + B_0 u + H(y(t) - h(\hat{x})) \quad (5.54)$$

es un observador de (5.52) y (5.53) cuando no existe falla, y la ecuación del error de estimación estará dada por:

$$\dot{e}(t) = f(\hat{x}) - f(x) + (B_0 - B)u + H(y(t) - h(\hat{x})) \quad (5.55)$$

donde $H \in \mathbb{R}^{n \times m}$.

Además, a partir del estado estacionario de (5.52) y (5.53),

$$f(x^*) - f(x_0^*) = -(B - B_0)u, \quad (5.56)$$

y tomando sólo los términos lineales de la serie de Taylor de $f(x^*)$, alrededor del equilibrio del estado observado, resulta que:

$$f(x^*) \approx f(\hat{x}^*) + \left. \frac{\partial f(x^*)}{\partial x^*} \right|_{x^* = \hat{x}^*} (x^* - \hat{x}^*) \quad (5.57)$$

Substituyendo en (5.56), se tiene:

$$x^* = \hat{x}^* + \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x^*}^{-1} (f(x_0^*) - f(\hat{x}^*) + (B_0 - B)u) \quad (5.58)$$

Si existe la inversa de la matriz Jacobiana señalada en (5.58), entonces, manipulando la ecuación del error de observación (4.33) y reemplazando el estado estacionario resulta en

$$e^* = \hat{x}^* - x^* = f(\hat{x}^*) - f(x^*) + (B_0 - B)u + H(y^* - h(\hat{x}^*)) \quad (5.59)$$

con la definición

$$\frac{h(x^*) - h(\hat{x}^*)}{x^* - \hat{x}^*} = \left(\frac{\partial h(x^*)}{\partial x^*} \right)_{x^* = \hat{x}^*} \quad (5.60)$$

Entonces, substituyendo (5.57) y (5.60) en (5.55), se obtiene:

$$(B_0 - B) = \frac{1}{u} \left[I - \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x^* = \hat{x}^*} \left[\left(\frac{\partial f(x^*)}{\partial x^*} \right)_{x^* = \hat{x}^*} - H \left(\frac{\partial h(x^*)}{\partial x^*} \right)_{x^* = \hat{x}^*} \right]^{-1} \right]^{-1} (f(x_0^*) - f(\hat{x}^*)) \quad (5.61)$$

Como consecuencia, y bajo la Hipótesis 5.2, es posible determinar la **magnitud de la falla** del actuador para la clase de sistemas no lineales considerada, si las siguientes condiciones son satisfechas:

- (a) $u(t) \neq 0$ es una constante acotada conocida, tal que la solución del sistema esté definida sobre \mathbb{R}^+ .
- (b) $\left[H \left(\frac{\partial h(x^*)}{\partial x^*} \right)_{x^*} \right]$ es invertible.

(c) La selección de H es tal que el error de observación del sistema fallado sea estable.

La condición más restrictiva para aplicar el procedimiento de evaluación de la magnitud de una falla, sea lineal o no lineal, es que se requiere que todo el estado pueda ser observado, es decir, $m = n$, que en el caso lineal significa que $\text{rango}(C) = n$. En general, la evaluación de la falla requiere cierta redundancia (Hamelin [HST]).

A continuación se presentan los resultados de aplicar el diagnóstico de fallas, basado en observadores, a la columna de DMTC.

5.4.- Identificación de Fallas en la Columna de DMTC

De acuerdo a los elementos teóricos de la detección e identificación de fallas ya bosquejados en § 5.3, el modelo de la columna de DMTC tiene características que limitan la aplicación de los esquemas de detección más avanzados, es decir, los esquemas que permiten desacoplamiento de entradas desconocidas debido a las razones siguientes:

- 1.- Conforme a las condiciones, (5.39), el diseño de observadores no lineales de entradas desconocidas para generar residuos sensibles a fallas y a la vez robustos a otras entradas, requiere de la solución analítica de ecuaciones diferenciales parciales no lineales, Seliger-Frank [SF][SFr]. Para los sistemas MIMO de gran dimensión no se garantiza la existencia de un observador no lineal robusto. Lo más que puede decirse, es que la probabilidad de un diseño exitoso aumenta con el número de mediciones independientes.
- 2.- Las características del modelo de la columna de DMTC, ya sea considerado no lineal o bien linealizado, son precisamente las de un modelo de alta dimensión, cuya salida es de dimensión muy pequeña respecto a la dimensión del estado. Aún más, a pesar de que el modelo linealizado es de realización mínima, las matrices de controlabilidad y de observabilidad tienen números de condición muy grandes, i.e., valores singulares muy desbalanceados en escala de magnitud, lo que sugiere que existen modos "casi" no controlables y/o no observables.
- 3.- La combinación no lineal de las diferentes variables del modelo es tal que la transformación del sistema no lineal, mediante los procedimientos conocidos, produce únicamente transformaciones inversas implícitas.

5.4.1.- Conformación del Esquema de Detección de Fallas para la columna de DMTC

Elementos del sistema sujetos a falla:

- Fuentes de energía térmica.
- Tacómetro del agitador.
- Sensores de temperatura en la pared del evaporador.
- Medidor de flujo del producto de la destilación.

Elemento seleccionado con falla:

Un sensor de temperatura.

Detección de falla:

Residuo generado por observadores dedicados (5.19).

Aislamiento de falla:

Un banco de observadores y funciones de decisión, (5.43).

Evaluación de la falla:

no disponible.

Señales de medición :

Temperaturas: 2 a 26¼ y la 3 a 43¼ cm. en la pared del evaporador.

Espesor final de película (indirectamente como flujo del producto de destilación).

Señales de actuadores :

Flujo de alimentación al destilador.

Velocidad del agitador.

Flujo de calor al evaporador (dos).

Entradas desconocidas:

Temperatura y composición de la alimentación al destilador.

Presión de operación.

Temperatura del medio enfriante en el condensador.

Ruido eléctrico en el equipo de medición (termopares).

Incertidumbres del modelo:

Algunos parámetros físicos, e.g. presión de vapor.

Las hipótesis hechas en la deducción del modelo.

5.4.2.- Experimentos de Simulación del Diagnóstico de una Falla

Los experimentos de simulación fueron efectuados vía computadora PC y software de solución de ecuaciones diferenciales no lineales: **Simnon**[®]. Las condiciones de simulación fueron las siguientes:

1. El punto de control y el punto de linealización del modelo corresponden a un punto de operación típico del proceso (Apéndice B).

- 2.-El proceso estuvo sujeto a control por retroalimentación de la composición, estimada por un observador guiado por la salida completa. La ganancia estática de control es la utilizada en el Capítulo anterior, ver Tabla 4.2.
- 3.-El esquema de detección de falla en sensores fué hecha en base a un banco de tres observadores dedicados, cada uno guiado por cada una de las tres distintas salidas: Tp_2 , Tp_3 , δ_4 . La ganancia de cada observador se asignó idénticamente para cada uno. Esta ganancia es la obtenida en el Capítulo anterior, ver Tabla 4.3.
- 4.-La falla representa un "bias" del sensor de temperatura de la pared en la Sección 3, y fue simulada como un escalón de magnitud 1% mayor que la que debería tener. El sistema se encontraba estable y bajo control al momento en que ocurre la falla, a $t=8$ min.
5. El modelo de la columna de DMTC, el valor de los parámetros, y las señales de entrada son como las definidas en § 4.5.1.

Se hace la siguiente convención para interpretar las gráficas resultantes de la simulación.

- Cada curva representa la dinámica en una sección del evaporador, e.g., la curva denominada "sección 1" representa la dinámica de la variable en los primeros 17.5 cm. de columna tomados desde su extremo de alimentación en la parte superior.
- En la Figura 5.5 se muestran dos grupos de señales:
 - (1) Correspondiente a la Tp_2 .
 - (2) Correspondiente a la Tp_3 .
- En la Figura 5.6 se muestra un grupo de señales perteneciente al espesor de película δ_4
- En ambas figuras cada grupo consta de 4 señales:
 - Señal que proviene del modelo no lineal (azul).
 - Señal que proviene del observador guiado por Tp_2 (rojo).
 - Señal que proviene del observador guiado por Tp_3 (magenta).
 - Señal que proviene del observador guiado por δ_4 (negro).
 - (no se muestra la salida del observador guiado por toda la salida).

Los resultados de la simulación se listan en seguida:

1. La respuesta transitoria del sistema bajo control por retroalimentación de la concentración estimada, es la misma que la de los experimentos hechos en § 4.5.1. Por ello, se muestran las respuestas de interés en las Figuras 5.5 y 5.6, con la dinámica de las 3 salidas: T_{p2} , T_{p3} , δ_4 .
2. Cuando el sistema de control está sin falla alguna, la respuesta de la salida del proceso y la respuesta todos los observadores convergen a un mismo valor estacionario.
3. Al momento de ocurrir la falla en el sensor de temperatura de la Sección 3, cada observador responde de manera distinta, puesto que cada uno es guiado por distintas salidas. Por ejemplo, en la Figura 5.6, el observador guiado por este sensor de temperatura se desvía de la respuesta de las demás señales.

La interpretación de las señales provenientes del proceso y los distintos observadores es hecha mediante las funciones de decisión. Mediante (5.43) se determinan los siguientes valores:

Observador guiado por T_{p2} :

$$\begin{cases} r_1^1 = T_{p2} - \hat{T}_{p2} = 0 \\ r_2^1 = T_{p3} - \hat{T}_{p3} = k_1 \\ r_3^1 = \delta_4 - \hat{\delta}_4 = 0 \end{cases}$$

Observador guiado por T_{p3} :

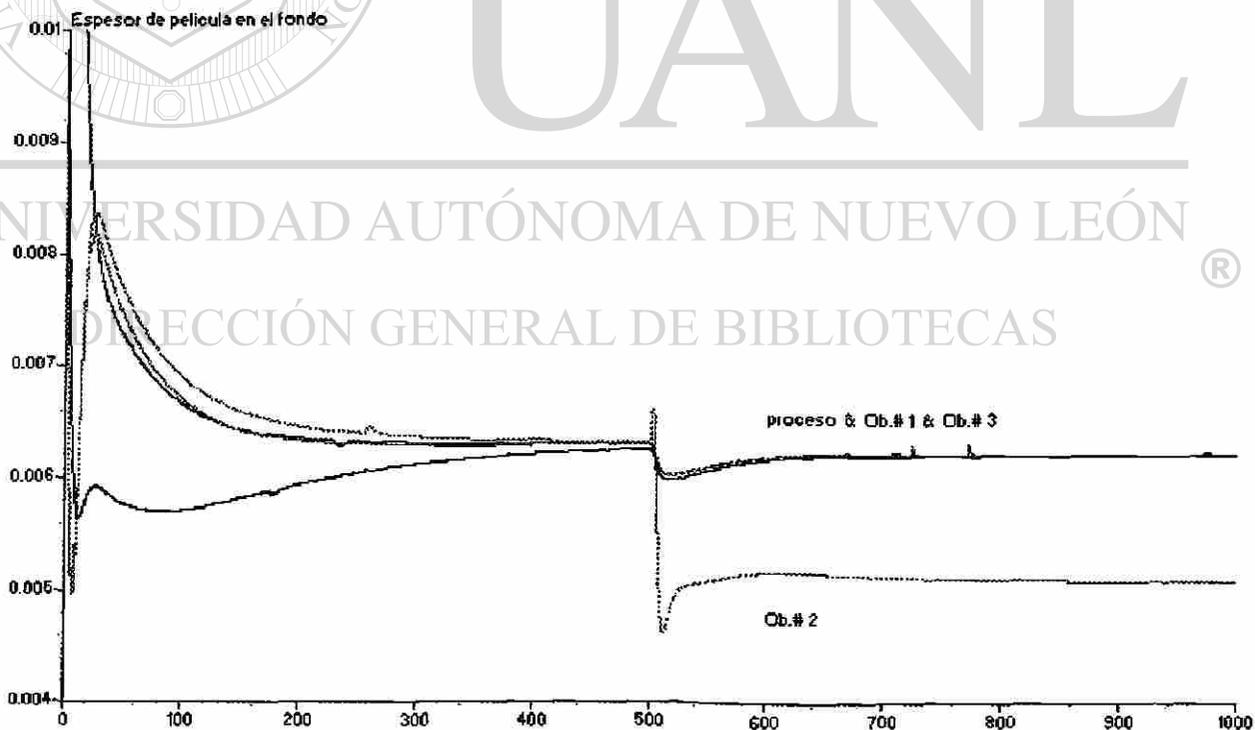
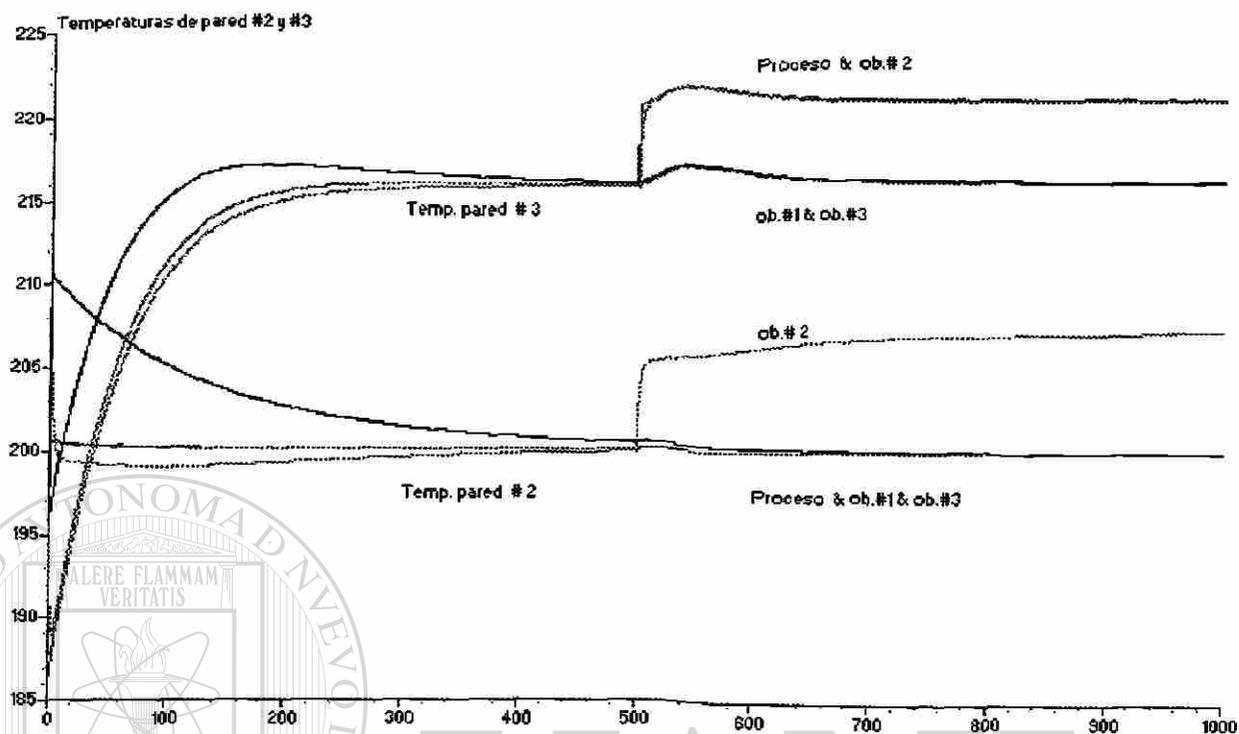
$$\begin{cases} r_1^2 = T_{p2} - \hat{T}_{p2} = k_2 \\ r_2^2 = T_{p3} - \hat{T}_{p3} = 0 \\ r_3^2 = \delta_4 - \hat{\delta}_4 = k_3 \end{cases}$$

Observador guiado por δ_4 :

$$\begin{cases} r_1^3 = T_{p2} - \hat{T}_{p2} = 0 \\ r_2^3 = T_{p3} - \hat{T}_{p3} = k_4 \\ r_3^3 = \delta_4 - \hat{\delta}_4 = 0 \end{cases}$$

donde las constantes k señalan un valor cualquiera distinto de cero.

Estos residuos calculados permiten identificar la falla en el sensor de temperatura de pared en la Sección 3.



5.5.- Conclusiones

La investigación actual en el diagnóstico de fallas presenta resultados relevantes en la robustez para la detección e identificación de fallas en sistemas lineales. Se ha podido extender estos resultados para cierta clase de sistemas no lineales, pero limitados por la existencia de ciertas transformaciones. Aún no se tienen resultados reportados para los sistemas no lineales en general y para los sistemas descritos por ecuaciones diferenciales parciales.

La simplificación del modelo no lineal de la columna de DMTC, presentó alguna ventaja para diseñar un sistema de control basado en la retroalimentación del estado (Cap. 4). Sin embargo, la simplificación de la forma del modelo de la columna llega a ser una desventaja en el diagnóstico de fallas.

Dada la manera como se instrumentan los procesos químicos, éstos generalmente tienen un mínimo de redundancia, la cual limita la detección de fallas. En consecuencia, para poder determinar una falla se requiere de un alto grado de redundancia en la instrumentación, lo cual genera un compromiso entre el costo de la instrumentación asociada y la seguridad de la operación, razón por la cual, la evaluación de la magnitud de la falla es difícil en los procesos químicos que presentan poca redundancia en las mediciones.

Suponiendo que sólo los sensores están sujetos a falla, y con algunas limitaciones, en cuanto a la presencia de entradas desconocidas, se demostró que es posible su detección y aislamiento en el sistema de control de la columna de DMTC.

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

CAPITULO 6

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

6.1.- Conclusiones y Aportaciones

La destilación molecular de trayecto corto al alto vacío, DMTC, es con frecuencia el único método disponible para efectuar una separación de sustancias de alto peso molecular que pueden sufrir descomposición térmica. La separación está basada en principios de operación que estipulan condiciones tales que las moléculas evaporadas puedan viajar sin obstrucción hasta la superficie de condensación. Además de las condiciones de operación, el diseño del aparato permite tener una película de líquido en evaporación expuesta a la temperatura de destilación por unos cuantos segundos, respondiendo rápidamente a la regulación.

Para hacer el mejor uso del proceso de DMTC y tener una regulación adecuada del mismo, es esencial tener un entendimiento apropiado de sus características. Esta meta fue lograda en la tesis mediante la creación de un modelo matemático suficientemente representativo de la dinámica de las principales variables de la columna de DMTC. El modelo fue obtenido a partir de principios fundamentales de conservación de masa y energía, y un conjunto de hipótesis justificadas para las condiciones de operación.

Los elementos funcionales del proceso han sido interconectados a través de técnicas de modelado compartamentalizado. Con base en esta metodología, se obtuvo un modelo en ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales. Este método, sin embargo, generó un modelo de gran dimensión.

Por otro lado, el modelo obtenido para la columna de DMTC reprodujo satisfactoriamente, en un dominio de las condiciones de operación, el estado estacionario del proceso real dentro del 2% de los valores obtenidos vía experimentación. En lo referente al estado transitorio, la respuesta transitoria del modelo matemático es cualitativamente semejante a la obtenida en experimentos.

La complejidad de la manipulación matemática de un modelo de gran dimensión, como el obtenido en esta tesis, forzó a la utilización de la linealización del modelo de la columna de DMTC. El análisis del sistema linealizado muestra que el proceso es localmente observable y localmente controlable, permitiendo con ello el diseño de un control lineal basado en un observador.

Partiendo del modelo linealizado, se demostró que la estrategia de control propuesta produce resultados satisfactorios. Este control, basado en la retroalimentación del estado estimado, se diseñó mediante técnicas estándar de asignación de polos de lazo cerrado de los sistemas lineales.

El sistema de control actualmente practicado en la columna de DMTC es básicamente manual y en lazo abierto respecto a la composición. Comparativamente, la estrategia de control diseñada en esta tesis presenta la ventaja de estimar el valor de la composición en línea. Sin embargo, se requeriría refinar la estrategia de control para incluir una acción robusta respecto a la variación de algunos de los parámetros físicos.

Se incorporó a la tesis un elemento de seguridad respecto a la correcta funcionalidad del sistema de control. Es decir, además de una estrategia de control adecuada, se diseñó un sistema de detección analítica de posibles fallas en los componentes del sistema de control. Un sistema así permite modificar, en línea, la estrategia de control para hacer frente a posibles fallas de los componentes del sistema de control.

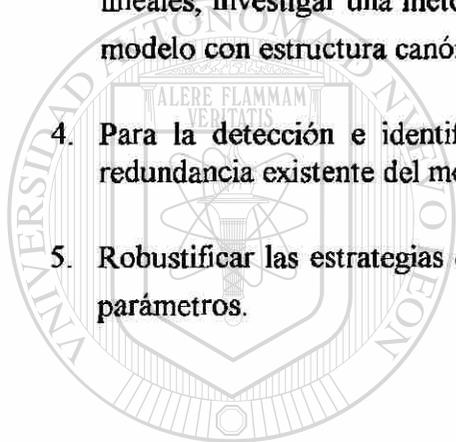
A este respecto se demostró que, mediante un método fundamentado en la estimación del estado con bancos de observadores, es posible la detección y el aislamiento de ciertas fallas del sistema de control en la columna de DMTC. Así mismo, se determinaron las condiciones bajo las cuales es posible evaluar la magnitud de una falla en los actuadores. Estas últimas condiciones resultaron muy restrictivas para este caso de estudio, ya que el proceso cuenta con poca redundancia en las mediciones.

La columna de destilación molecular es un equipo que brinda la oportunidad de producir y manipular un modelo matemático suficientemente complicado para desarrollar una visión clara de la formulación y solución de los problemas asociados con las técnicas del control de los procesos de separación en etapas.

6.2.- Trabajos Futuros Recomendados

A fin de extender los resultados obtenidos en esta tesis se indican a continuación algunas proposiciones de estudio.

1. En base al modelo del proceso, estudiar una estrategia de optimización de la operación.
2. Incluir en el modelo del DMTC el efecto de perturbaciones, como la presión
3. Considerando un modelo de alta dimensión en ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales, investigar una metodología para determinar el difeomorfismo que conduzca a un modelo con estructura canónica observable o controlable.
4. Para la detección e identificación de fallas, estudiar la posibilidad de incrementar la redundancia existente del modelo.
5. Robustificar las estrategias de control y de detección de fallas respecto a la variación de parámetros.



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

REFERENCIAS

- [B] Burrows G. *Molecular Distillation*. Oxford Univ. Press, 1960.
- [BSL] Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N. *Fenómenos de Transporte*". Reverté, 1960.
- [BSM] Benallou A., Seborg D.E., Mellichamp D.A. Dynamical Compartmental Model for Separation Processes. *AIChE J*, 32(7):1607-1078, 1986.
- [Ch] Chen Ch. *Linear System Theory and Design*. Holt, Rinehart & Winston, 1984.
- [ChW] Chow E.Y., Willsky A.S. Analytical Redundancy and the Design of Robust Failure Detection Systems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. AC-29(7):603, 1984.
- [DF] Ding X., Frank P.M. Fault Diagnosis Using Nonlinear Adaptive Observers. *8th. IMEKO Symposium Dresden*, 1992.
- [DR] Desai M., Ray A. A Fault Detection and Isolation Methodology. *IEEE Proc. 20th. Conference on Decision and Control*, p.1363, Dec.1981.
- [F] Frank P.M. Fault Diagnosis in Dynamic Systems Using Analytical and Knowledge Bases Redundancy- A Survey and Some New Results. *Automatica*, 26(3):459, 1990.
- [Fr] Frank P.M. Enhancement of Robustness in Observer-Based Fault Detection. *Int. J. Control*, 56(4):955, 1994.
- [GL] Glasstone S., Lewis D. *Elements of Physical Chemistry*, Van Nostrand, 1960.
- [HKY] Hammouri H., Kinnaert M., El-Yaagoubi E.H. Residual Generator Synthesis for Bilinear Systems Up to Output Injection. Submitted to *IEEE Trans. on Automatic Control*. 1994.
- [HST] Hamelin F., Sauter D., Theilliol D. Some Extentions to the Parity Space Method for FDI Using Alternated Projection Subspaces. *IEEE Proc. 34th. Conf. on Dec. and Control*. p. 2407. (1995).
- [I] Isermann R. Process Fault Detection Based on Modeling and Estimation Methods-A Survey. *Automatica*, 20(4):387, 1984.
- [KT] Khargonekar P.P., Ting T.L. Fault Detection in the Presence of Modeling Uncertainty. *IEEE Proc. of the 32nd Conference on Decision and Control*, p.1716, Dec. 1993.
- [M] Medvedev A. Fault Detection and Isolation by a Continuous Parity Space Method. *Automatica*, 31(7):1039, 1995.
- [MVW] Massoumnia M., Verghese G.C., Willsky A.S. Failure Detection and Identification. *IEEE Trans. on Automatic Control*, 34(3), March 1989.
- [N] Necati-Ozisik M. "*Transferencia de Calor*", Mc-Graw-Hill, 1979.

- [NDP] Nowakowski S., Darouach M., Pierrot P. A New Approach for Failure Detection in Uncertain Systems. *IEEE Proc. of the 32nd Conference on Decision and Control*, p.257, Dec. 1993.
- [PFC] Patton R., Frank P., Clark R. *Fault Diagnosis in Dynamic Systems. Theory and Applications*. Prentice-Hall, 1989.
- [S] Sinha P.K., *Multivariable Control. An Introduction*. Marcel-Dekker, 1984.
- [SF] Seliger R., Frank P.M. Robust Component Fault Detection and Isolation in Nonlinear Dynamic Systems Using Nonlinear Unknown Input Observers. *IFAC/IMACS-SYMPOSIUM, Safe Process*, 1991
- [SFr] Seliger R., Frank P.M. Fault-Diagnosis by Disturbance Decoupled Nonlinear Observers. *IEEE Proc., 30th Conference on Decision and Control*, p.2248, 1991.
- [Va] Van Dooren P. The Computation of Kronecker's Canonical Form of a Singular Pencil. *Linear Algebra and Its Applications*, 27:103-140, 1979.
- [Vi] Vidyasagar M. *Nonlinear Systems Analysis*. Prentice-Hall, 1993.
- [W] Wylie C.R. *Matemáticas Superiores Para Ingeniería*. McGraw-Hill, 1969.
- [Wi] Willsky A.S. A Survey of Design Methods for Failure Detection in Dynamic Systems. *Automatica*, 12: 601, 1976.
- [WF] Wünnenberg J., Frank P.M. Robust Observer-Based Fault Detection for Linear and Nonlinear Systems with Applications to Robots. *MIM-S2'90 Symposium* Brussels, 1990.
- [XWV] Xi-Cheng L., Willsky A.S., Verghese G.C. Failure Detection with Uncertain Models. *American Control Conference*, p.1, March 1983.
- [Y] Young P.C. Parameter Estimation for Continuous-Time Models -A Survey. *Automatica*, 17: 23, 1981.
- [ZP] Zhirabok A.N., Preobrazhenskaya O.V. Nonlinear Methods for Fault Detection and Isolation in Linear Systems. *Proc. 33rd. Conference on Dec. and Control*. p. 3054, 1994.



APENDICE A

DATOS DEL SISTEMA DE DESTILACION MOLECULAR

UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

®

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

APENDICE A

DATOS DEL SISTEMA DE DESTILACION MOLECULAR

b	1.0 cm	δ_o	0.005 cm
C_{pL}	0.4 cal/g-°C	δ_v	0.5 cm
C_{pv}	0.2 cal/g-°C	λ_{vA}	23,800 cal/gmol
D	15.24 cm (6 in)	λ_{vB}	24,900 cal/gmol
F_o	3.33 cm ³ /seg (12 lt/hr)	λ_v	96 cal/g
g	980.665 cm/seg ²	λ_f	40 cal/g
k_v	0.0025 cal/cm-seg-°C	μ	0.015 g/cm-seg (1.5 cp)
k_f	0.0014 cal/cm-seg-°C	ρ_A	1.5 g/cm ³
k_a	0.39E10 mm Hg	ρ_B	2.0 g/cm ³
k_b	0.46E10 mm Hg	ρ	1.535 g/cm ³
L	70.0 cm	ρ_v	2.6 g/cm ³
M_A	236.2 g/gmol	π	3.1415...
M_B	350.0 g/gmol	Ω	3.33 rps (200 rpm)
P	1 a 3 mm Hg		
q	900 cal/seg		
q_{max}	2007.6 cal/seg (total)		
R	1.987 cal/gmol-°K		
T_o	130°C		
T_f	383 °K		
T^o	298 °K		
x_o	0.93 en fracción en peso.		



APENDICE B

RESULTADOS DE LA LINEALIZACION DEL MODELO NO-LINEAL DE LA COLUMNA DE DMTC

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

Los valores de los elementos de la matriz A son:

(1,1)	-0.495	(1,2)	-0.000116	(1,3)	-0.000016
(2,1)	-0.00000243	(2,2)	-0.297	(2,3)	-0.0000793
(3,1)	0.0473	(3,2)	-2.482	(3,3)	-1.801
(3,4)	1.148	(4,3)	0.0192	(4,4)	-0.0192
(5,1)	0.495	(5,5)	-0.495	(5,6)	-0.000305
(5,7)	-0.0000395	(6,1)	0.745	(6,2)	0.332
(6,5)	0.0000337	(6,6)	-0.285	(6,7)	-0.00026
(7,1)	-888.567	(7,3)	0.332	(7,5)	-0.00163
(7,6)	-7.5	(7,7)	-2.621	(7,8)	1.32
(8,7)	0.0192	(8,8)	-0.0192	(9,5)	0.495
(9,9)	-0.495	(9,10)	-0.000372	(9,11)	-0.000463
(10,5)	1.78	(10,6)	0.313	(10,9)	0.0000443
(10,10)	-0.248	(10,11)	-0.000475	(11,5)	-210.949
(11,7)	0.313	(11,9)	-0.25	(11,10)	-11.115
(11,11)	-3.301	(11,12)	1.606	(12,11)	0.0192
(12,12)	-0.0192	(13,9)	0.495	(13,13)	-0.495
(13,14)	-0.000414	(13,15)	-0.0000476	(14,9)	5.401
(14,10)	0.265	(14,13)	0.000275	(14,14)	-0.188
(14,15)	-0.000942	(15,9)	-92.094	(15,11)	0.265
(15,13)	-0.434	(15,14)	-15.921	(15,15)	-4.163
(15,16)	2.068	(16,15)	0.0192	(16,16)	-0.0192

Los valores de los elementos de la matriz B son:

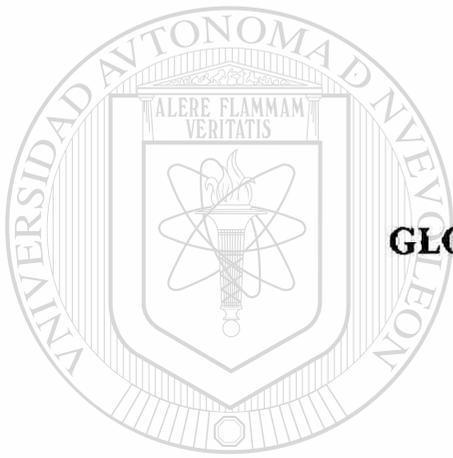
(1,1)	0.00123	(1,2)	-0.00143	(2,1)	0.000482
(3,1)	-5.183	(4,3)	0.0023	(5,2)	0.000335
(6,2)	0.00215	(7,2)	-2.558	(8,3)	0.0023
(9,2)	0.000398	(10,2)	0.000392	(11,2)	-0.465
(12,4)	0.0023	(13,2)	0.000411	(14,2)	0.00756
(15,2)	-0.129	(16,4)	0.023		

Los valores propios de la matriz A son:

-4.177
-3.312
-2.632
-1.813
-0.496
$-0.495 + 0.000555 i$
$-0.495 - 0.000555 i$
-0.495
-0.246
-0.184
-0.284
-0.00978
-0.00948
-0.00946
-0.296
-0.00691

Los valores singulares de las matrices A, de controlabilidad y de observabilidad obtenidos mediante *Maple*, son:

	A	Controlabilidad	Observabilidad
1	$0.889 \cdot 10^3$	$0.314 \cdot 10^9$	$0.651 \cdot 10^8$
2	$0.211 \cdot 10^3$	$0.163 \cdot 10^8$	$0.109 \cdot 10^8$
3	$0.937 \cdot 10^2$	$0.644 \cdot 10^6$	$0.257 \cdot 10^7$
4	$0.329 \cdot 10^1$	$0.142 \cdot 10^5$	$0.165 \cdot 10^2$
5	$0.150 \cdot 10^1$	$0.993 \cdot 10^{-1}$	$0.195 \cdot 10^1$
6	$0.490 \cdot 10^0$	$0.255 \cdot 10^{-1}$	$0.115 \cdot 10^1$
7	$0.470 \cdot 10^0$	$0.123 \cdot 10^{-1}$	$0.107 \cdot 10^1$
8	$0.303 \cdot 10^0$	$0.719 \cdot 10^{-2}$	$0.100 \cdot 10^1$
9	$0.120 \cdot 10^0$	$0.545 \cdot 10^{-2}$	$0.385 \cdot 10^0$
10	$0.290 \cdot 10^{-1}$	$0.317 \cdot 10^{-2}$	$0.143 \cdot 10^0$
11	$0.270 \cdot 10^{-1}$	$0.963 \cdot 10^{-3}$	$0.380 \cdot 10^{-1}$
12	$0.266 \cdot 10^{-1}$	$0.633 \cdot 10^{-3}$	$0.241 \cdot 10^{-1}$
13	$0.580 \cdot 10^{-2}$	$0.357 \cdot 10^{-3}$	$0.215 \cdot 10^{-1}$
14	$0.350 \cdot 10^{-2}$	$0.175 \cdot 10^{-3}$	$0.150 \cdot 10^{-1}$
15	$0.940 \cdot 10^{-3}$	$0.662 \cdot 10^{-4}$	$0.768 \cdot 10^{-3}$
16	$0.360 \cdot 10^{-3}$	$0.141 \cdot 10^{-4}$	$0.457 \cdot 10^{-4}$
número de condición	10^6	10^{13}	10^{12}



APENDICE C

GLOSARIO DE TERMINOS.

UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

APENDICE C

GLOSARIO DE TERMINOS.

Balance compartamental (anglismo): Técnica de modelado para los procesos multietapa de separación mediante la cual se considera al proceso como compuesto de secciones que agrupan un cierto número de etapas reales de separación. Cada sección o compartimento es tratada como si formara una etapa real equivalente. *sinónimo:* balance seccional.

Calor Latente de Vaporización: Cantidad de energía calorífica necesaria para evaporar completamente una unidad másica de sustancia, estando ésta sujeta a la temperatura de ebullición correspondiente a la presión del sistema.

Coefficiente de Transferencia de Calor: Parámetro que define la velocidad de transporte de calor, que depende de las condiciones en que sucede, de las propiedades de transporte de calor, y del régimen de flujo en caso de tratarse de un fluido.

Composición, Molar y en Peso: Cantidad relativa de un componente en una mezcla. (a) si la cantidad es considerada en gramos mol, (b) en gramos.

Condensación: Proceso de cambio de fase vapor a fase líquida de una sustancia, la cual ocurre al disminuir su temperatura. Esta temperatura de condensación corresponde a la composición y presión de la mezcla de que se trate.

Desgasificación: Tratamiento dado a una sustancia para eliminar cualquier gas incondensable atrapado en su interior.

Destilación: Operación unitaria utilizada en la purificación de mezclas, que se basa en la diferencia de volatilidad relativa entre los distintos componentes de la mezcla.

Destilación Molecular: Operación de destilación especial en la cual la presión de operación es de alto vacío, y la mezcla a destilar se forma en el interior como una película.

Destilación Molecular de Trayecto Corto: Destilación molecular en la que la superficie del condensador se localiza muy cerca de la superficie del evaporador.

Entalpía sensible: Contenido de energía de una sustancia correspondiente a su capacidad calorífica relativo a una temperatura estándar. Se considera únicamente la fase en que se encuentra.

Fluido Newtoniano: Sustancia fluida cuyas propiedades de transporte (viscosidad) son constantes, i.e. independientes del régimen de flujo al que está sometido dicho fluido.

Gas ideal: Gas cuyas moléculas se comportan como si fuesen pequeñas esferas completamente elásticas, sin interacción alguna entre ellas. Esta condición de idealidad se aproxima a bajas presiones y altas temperaturas.

Gas incondensable: Gas constituido por sustancias cuya temperatura de condensación es muy baja a la presión en que se encuentran.

Mezcla pseudobinaria: Mezcla de múltiples sustancias, que por su composición, puede considerarse constituida por sólo dos componentes principales.

No interaccionado: Conexión de subsistemas en cascada, de manera que las salidas de un subsistema con las entradas del siguiente subsistema en la cascada. De esta forma, un subsistema afecta únicamente al siguiente y no al antecesor.

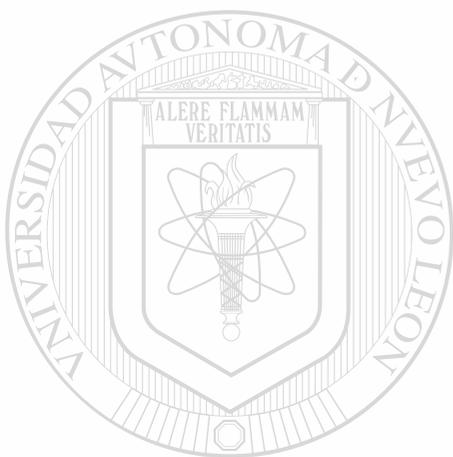
~~**Operación Unitaria:** Clasificación de los equipos que integran procesos químicos complejos, separados en operaciones tales como intercambiadores de calor, filtros, reactores químicos, destiladores, etc.~~

Presión parcial de una sustancia: Presión ejercida por el vapor de una sustancia pura bajo condiciones que corresponden al vapor de una mezcla, de la cual forma parte.

Quiescente: Quieto, en reposo.

Retromezclado: (i) Inversión de la dirección del flujo de un fluido ocasionado por obstrucción mecánica. (ii) Fenómeno de difusión de una sustancia en dirección contraria al del flujo que forma parte, ocasionado por diferencias de concentración a lo largo de la trayectoria del fluido.

Volatilidad: Propiedad que indica la facilidad que tiene una sustancia de evaporarse respecto a otra.



UANL

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

