



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA QUÍMICA – INGENIERÍA DE PROCESOS

CONTROL DE UNA COLUMNA EMPACADA DE ABSORCIÓN

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:
I.Q. GABRIEL GAY TORRES

TUTOR PRINCIPAL
Dr. JESÚS ÁLVAREZ CALDERÓN-PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN
INGENIERÍA

MÉXICO, D. F. JULIO 2015



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Luis A. Álvarez-Icaza Longoria

Secretario: Ing. Celestino Montiel Maldonado

Vocal: Dr. Ángel Enrique Chávez Castellanos

1^{er.} Suplente: Dr. Eduardo Castellanos Sahagún

2^{do.} Suplente: Dr. Jesús Álvarez Calderón

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: Facultad de Química, UNAM
Instituto de Ingeniería, UNAM

TUTOR DE TESIS:

Dr. Jesús Álvarez Calderón

FIRMA

(Segunda hoja)

Agradecimientos

A Dios, por permitirme superarme y darme fortaleza para concluir una etapa más en mi vida y por llenarme de bendiciones.

A mis padres, Leonor y Gabriel, por brindarme todo el apoyo necesario (y más allá de él) para estudiar la maestría, por sus consejos y guía, por ser mi soporte y sobre todo por aguantar mis frustraciones.

A mis hermanos, Claudia y Alberto, que porque sin ellos y sin su apoyo, el camino a lo largo de este periodo hubiera sido difícil de vencer.

A mis sobrinos, Sofía, Diego y Alonso, por llenarme de sonrisas con sus ocurrencias.

A mis primos, Oswaldo y Daniel, que desde donde se encuentren, sé que me cuidaron y apoyaron en todo este tiempo.

A mis amigos, Joseph, Rodrigo y Saúl, por todas las experiencias buenas que hemos pasado juntos. Por darme consejos de vida y sobre todo por impulsarme siempre hacia adelante.

A mis amigos, Claudia, Regina, Manolo, Carlos, Flori, Ivar y Memo, que a través de estos más de diez años de conocernos seguimos unidos. Gracias por todos los consejos y palabras de aliento para continuar esforzándome en la maestría en cada aspecto de mi vida.

A mis amigos Edgar, José Manuel (Nano) y MariOH, por todo su apoyo personal y por todas las retroalimentaciones académicas que siempre fueron de gran ayuda.

Al Dr. Jesús Álvarez Calderón, por haber compartido toda su sabiduría y que, además de haberme dejado una guía a seguir para mi vida académica y profesional, también lo hizo para mi vida personal.

Al CONACYT, siendo yo el becario con Número de Registro CVU 420661, que sin su apoyo económico hubiera sido imposible estudiar una maestría.

Y por último, y no por eso menos importante, gracias a todas aquellas personas que hicieron de este lapso de mi vida digno de recordar.

¡Gracias!

Resumen

En la presente tesis se aborda el problema de diseñar un sistema de control para una columna de absorción de lecho empacado que, a través de mediciones de temperatura, regule en el gas efluente la concentración de contaminantes. Con el fin de atenuar el efecto invernadero, la motivación para este trabajo de tesis es mejorar índices de desempeño ecológico relacionados al secuestro de CO₂. El problema de control se aborda con nociones, herramientas y conceptos de Ingeniería Química (específicamente en los ramos de ingeniería de reactores, fenómenos de transporte, cinética química y operaciones unitarias), dinámica de sistemas no lineales y teoría de control de procesos químicos. Como resultado se obtiene una metodología para diseñar un controlador de una columna empacada de absorción en la cual:

1. Se aproxima el comportamiento dinámico del sistema distribuido (descrito por ecuaciones diferenciales parciales, EPD) mediante un número reducido (2 a 5) de tanques CSTR, en este caso en particular sin retromezclado (ver Capítulo 3)
2. Se obtiene un control no lineal ideal accionado por retroalimentación de estados (CRE) basado en el modelo simplificado de la columna empacada de absorción
3. Se aproxima razonablemente el control anterior mediante un Control por Retroalimentación de Salidas, CRS, (de cuya estructura se obtiene el control PI convencional, Control más observador lineal), accionado por mediciones de temperaturas, presentando guías de sintonización y garantía de estabilidad con base en los parámetros del CRS

El modelo reducido se valida con datos experimentales reportados previamente por Paitoon [14] y el control es validado mediante simulación numérica haciendo una comparación con dichos datos.

Índice General

Resumen	i
Nomenclatura	iv
Capítulo 1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Antecedentes	2
1.2.1 Modelado de columnas de absorción	2
1.2.2 Control de columnas de absorción	3
1.2.3 Aportaciones del grupo de trabajo	5
1.3. Justificación	6
1.4. El problema de control	8
1.5. Objetivos	8
1.6. Aportación	9
1.7. Organización de la Tesis	10
Capítulo 2. El problema de control	12
2.1. La columna empacada de absorción	12
2.2 El modelo distribuido	15
2.3. Conclusiones	19
Capítulo 3. Modelo de etapas	20
3.1. Similitud entre la discretización de las EDP con las EDO de los CSTR	20
3.1.1. Discretización mediante tanques	21
3.2. Validación del modelo por etapas (CSTR)	23
3.3. Conclusiones	30
Capítulo 4. Dinámica y resolubilidad	32
4.1. Análisis dinámico del modelo de dos CSTRs	32
4.1.1. Bifurcación	33
4.1.2. Calor generado y removido	33
4.2. Estabilidad	35
4.3. Controlabilidad y solución al problema de control para el conjunto de CSTR	40
4.3.1. Pasividad del par de CSTR	40
4.3.1.1. Grado Relativo 1 (G.R.1)	41

4.3.1.2. Dinámica Cero (ZD).....	44
4.4. Conclusiones	46
Capítulo 5. Control estabilizante de temperatura para la columna de absorción.....	50
5.1. Criterios de ubicación del sensor de temperatura en la columna empacada de absorción	50
5.2. Comportamiento a lazo abierto ante perturbaciones en el flujo de alimentación de gas	52
5.3. Control no lineal por retroalimentación de estados (CRE).....	55
5.4. Control por Retroalimentación de Salidas (CRS).....	57
5.5. Desempeño de los controladores en el conjunto de CSTR ante perturbaciones en el flujo de alimentación de gas	62
5.5.1. Desempeño del CRE.....	62
5.5.2. Desempeño del CRS	70
5.6. Comparación del desempeño del CRE y CSR frente a un control PI convencional industrial.....	76
5.6.1. Comparación de controladores a lazo cerrado ante perturbaciones tipo escalón ...	76
5.7. Conclusiones	85
Capítulo 6. Conclusiones y Trabajo Futuro.....	87
6.1. Conclusiones	87
6.2. Trabajo Futuro.....	88
APÉNDICE A: Características de la columna del caso de estudio.....	90
APÉNDICE B: Cinética de reacción del sistema CO ₂ -MEA.....	93
APÉNDICE C: Transporte	99
APÉNDICE D: Hidráulica	100
APÉNDICE E: Balances de materia y energía	103
APÉNDICE F: Comparación de la discretización espacial de la columna empacada de absorción por nodos internos con la discretización por CSTR's	110
APÉNDICE G: Estudio de Grado Relativo 1 (G.R.1) con respecto a la entrada de control (<i>qle</i>)-salida regulada ($z = Dg$) y Dinámica Cero (ZD)	116
Índice de Figuras	123
Índice de Tablas.....	125
Bibliografía y Referencias	126

Nomenclatura

Símbolos

a , área específica de contacto $\left[\frac{\text{longitud}^2}{\text{longitud}^3}\right]$

A , área $[\text{longitud}^2]$

\mathbf{A} , matriz de estados

α, β , coeficientes del polinomio característico

C_{gi} , concentración de CO₂ en la interfase gas-líquido $\left[\frac{\text{masa}}{\text{volumen}}\right]$

C , concentración de CO₂ $\left[\frac{\text{masa}}{\text{volumen}}\right]$

C_p , capacidad calorífica $\left[\frac{\text{energía}}{\text{masa temperatura}}\right]$

d , entrada de perturbación

D , coeficiente de dispersión de masa $\left[\frac{\text{longitud}^2}{\text{tiempo}}\right]$

D_{sub} , coeficiente de difusión $\left[\frac{\text{longitud}^2}{\text{tiempo}}\right]$

ΔH , entalpía de absorción con reacción química $\left[\frac{\text{energía}}{\text{masa}}\right]$

EA , Energía de activación (sobre cte., universal de los gases) $[\text{Temperatura}]$

ε , fracción de volumen de fase (subíndice); fracción de huecos

f, g , función

Γ , coeficiente de dispersión de energía $\left[\frac{\text{longitud}^2}{\text{tiempo}}\right]$

h ,	coeficiente de transferencia de energía $\left[\frac{\text{energía}}{\text{longitud}^2 \text{ tiempo temperatura}} \right]$
He ,	constante de Henry $\left[\frac{\text{Presión volumen}}{\text{masa}} \right]$
k ,	coeficiente de transferencia de masa $\left[\frac{\text{longitud}}{\text{s}} \right]$; constante
k_c ,	constante proporcional
k_{ci} ,	constante integral
L ,	longitud empacada de la columna [<i>distancia</i>]
L/D ,	relación Longitud/Diámetro
M ,	concentración de MEA $\left[\frac{\text{masa}}{\text{volumen}} \right]$
n ,	número de estados
N ,	dependiendo el contexto: número de tanques; flux de masa $\left[\frac{\text{masa}}{\text{longitud}^2 \text{ tiempo}} \right]$
P ,	concentración de carbamato $\left[\frac{\text{masa}}{\text{volumen}} \right]$
q ,	flujo volumétrico $\left[\frac{\text{volumen}}{\text{tiempo}} \right]$
r ,	rapidez de reacción (cinética) $\left[\frac{\text{masa}}{\text{tiempo}} \right]$
R ,	rapidez de absorción con reacción química (término fuente) $\left[\frac{\text{masa}}{\text{tiempo}} \right]$
RT ,	constante universal de los gases multiplicada por temperatura
ρ ,	densidad $\left[\frac{\text{masa}}{\text{volumen}} \right]$
t ,	tiempo
T ,	temperatura
u ,	variable de control

- U , coeficiente global de transferencia de energía $\left[\frac{\text{energía}}{\text{longitud}^2 \text{ tiempo temperatura}} \right]$
- V , volumen [longitud^3]
- ω , ganancia del observador
- x , estados
- y , variable medible
- z , dirección axial [longitud]; salida regulada o variable controlada

Superíndices

- \sim , error de estimación
- Λ , estimado
- , Referente al estado estacionario (valor fijo)

Subíndices

- 0, inicial
- amb , ambiente
- abs , absorción con reacción química
- C , CO_2
- e , entrada
- g , gas
- i , i ésimo objeto; interfase
- l , líquido
- m , masa
- rx , reacción química (cinética)

s, sólido

T, transversal

Acrónimos

CO₂, Dióxido de Carbono

CRE, Control por Retroalimentación de Entradas

CRS, Control por Retroalimentación de Salidas

CSTR, Reactor de Tanque Continuo Agitado (en inglés)

cte, Constante

EDO, Ecuación Diferencial Ordinaria

EDP, Ecuación Diferencial Parcial

EE, Estado Estacionario

G.R.1, Grado Relativo 1

MEA, mono etanol amina

MIMO, Múltiples Entradas-Múltiples Salidas (en inglés)

PI, Proporcional Integral (control)

SISO, Una Entrada-Una Salida (en inglés)

ZD, Dinámica Cero

Capítulo 1. Introducción

En este capítulo se dan las razones por las cuales se aborda el problema de diseñar un sistema de control que regule la concentración de CO₂ en el efluente gaseoso, el cómo se aborda y qué es lo que se obtiene, además de una descripción general de cómo está estructurada la tesis.

1.1. Motivación

En las últimas décadas los efectos negativos provenientes del uso desmedido de combustibles fósiles como fuentes energéticas se ha visto reflejado en el acelerado deterioro del ambiente, lo que ha ocasionado que la normatividad existente relacionada a la emisión de gases de efecto invernadero, que en un principio era laxa, sea cada vez más severa. Es por esto que ha habido un renovado interés en el secuestro de dióxido de carbono (CO₂) y por ende en mejorar el índice de desempeño de los dispositivos de absorción acoplados a procesos industriales últimamente enfocados a cumplir con las normas ambientales¹. Una muestra de esto es que, a pesar de que los estudios del sistema reaccionante entre la mono etanol amina (MEA) con el CO₂ en fase acuosa no son nuevos (Danckwerts, Astarita; [1-3]), en los últimos diez años ha aumentado la cantidad de artículos científicos publicados que están relacionados con el modelado (frecuentemente enfocado a la optimización de este proceso) [4-7,35-42] y control [33,45-49] de columnas de absorción y para sistemas de remoción de gases de efecto invernadero en general, todos ellos codificados matemáticamente como sistemas de parámetros distribuidos (ecuaciones diferenciales parciales), es decir, que los perfiles de temperatura y concentración de cualquiera de las especies involucradas dentro de la columna cambian con la posición y con el tiempo.

La importancia de controlar a una columna empacada de absorción radica en mejorar los índices de desempeño de la misma, es decir, garantizar que la composición de la corriente gaseosa de salida cumpla con las especificaciones, ya sea por condiciones de proceso [48,49] o por la imposición de una norma ambiental.

¹ En la actualidad la tarea de los aparatos de absorción se centra en garantizar que la concentración de los contaminantes liberados a la atmósfera cumpla con las normas ambientales establecidas. Sin embargo, también son utilizados para el proceso de endulzamiento de gases, el cual ha sido empleado desde el siglo pasado para separar gases ácidos de una corriente gaseosa y cumplir con requerimientos de proceso.

1.2. Antecedentes

Debido a cuestiones ambientales relacionadas al secuestro de CO₂ por ser un gas de efecto invernadero, como ya fue comentado, el interés en este tipo de equipos ha resurgido y es reflejado en los trabajos de investigación de las últimas décadas, principalmente en dos vertientes que son de interés para la realización de este trabajo de tesis. El primero es en cuanto al modelado de la dinámica de la columna empacada de absorción, mientras que el segundo es relacionado a esquemas de control diseñados para las mismas. Con respecto al segundo rubro, es importante mencionar las aportaciones que se han ido generando en el grupo de trabajo (lo cual es utilizado como base para el trabajo de esta tesis), en el que se han diseñado controladores para sistemas (que generalmente son descritos con un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales, EDP), como reactores tubulares [9], a través de la representación de estos sistemas distribuidos por medio de modelos de celdas homogéneas [10,11].

1.2.1. Modelado de columnas de absorción

Es importante recalcar que los estudios y trabajos mostrados en este apartado, son basados en modelos matemáticos de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales y son resueltos mediante software especializado para este propósito.

En los últimos años han surgido una gran cantidad de trabajos sobre modelado de columnas de absorción por las consideraciones ambientales antes mencionadas. Por ejemplo, en los años comprendidos entre 2003 y 2011 Abu-Zahra et al. [35]; Alie et al., [36]; Freguia y Rochelle [5] estudiaron la optimización de las variables de operación presentes en el proceso de remoción de CO₂ con mono etanol amina, mientras que investigadores como Oyenekan y Rochelle [37]; Van Wagener y Rochelle [38]; Ziaii et al. [39] propusieron nuevos diseños (basados en modelos en estado estacionario del proceso de generación de energía) para minimizar el gasto energético y las pérdidas de eficiencia de plantas generadoras de energía que es de donde vienen (en mayor medida) las corrientes gaseosas suministradas a las columnas de absorción. Por otro lado, en el mismo periodo, algunos investigadores como Greer et al. [7]; Kvamsdal et al [40]; Lawal et al., [41]; Ziaii et al., [42] se enfocaron en modelar y simular (con software especializado) el comportamiento dinámico de la columna empacada de absorción por separado de la planta generadora de energía (tomando en cuenta la reacción química entre el CO₂ y la amina) con base en un conjunto de ecuaciones diferenciales

parciales, esto con el objetivo de poder acoplar su trabajo, en específico, sus modelos, al proceso completo de absorción (planta generadora de energía más columna de absorción). También en este ámbito, Kvamsdal et al., [6,40] presenta trabajos en dónde además de proporcionar un modelo para la columna empacada de absorción con reacción química, muestra diferentes correlaciones obtenidas por él y por otros investigadores para las propiedades físicas del sistema (densidad de las fases, capacidades caloríficas, coeficientes de transferencia de masa y de energía, etc.) en función de la temperatura y de características de la columna (entre otros) por lo que concluye que la elección de una u otra correlación para un mejor desempeño en el modelado y simulación de una columna depende principalmente del sistema reaccionante y características de columna en si.

Por otro lado, Baratti [43], considerando que el enfoque estándar de modelado de columnas empacadas de absorción, mediante el concepto de etapas de equilibrio (las cuales son definidas en estado estacionario), puede resultar no apropiado cuando se busca modelar la dinámica de una columna de esta clase, propone un modelo de alto orden (100 puntos de discretización o segmentos en la columna empacada de absorción) para describir el comportamiento dinámico de dicho tipo de columnas, mostrando que al aumentar el número de segmentos de discretización espacial para la columna empacada de absorción cuando es modelada como EDP, se muestra un mejor compromiso entre la dinámica y el estado estacionario de las variables presentes en el sistema.

1.2.2. Control de columnas de absorción

La idea de que el comportamiento dinámico de un sistema naturalmente distribuido (como columnas de destilación, reactores tubulares, intercambiadores de calor, columnas empacadas de absorción, etc.) pueda ser representado como un sistema por etapas (celdas homogéneas, por ejemplo) fue usada en un principio por Levenspiel [8]. A partir de entonces, muchos trabajos en el área de estudio de las operaciones unitarias se vieron influidas por este enfoque, el cual fue usado para describir el estado transitorio de este tipo de equipos. Muestra de esto es el trabajo doctoral de J. E. Crosby en 1974 [33], quien basado en los trabajos anteriores de John Brasington [34] de describir la dinámica de una columna empacada de absorción (sin reacción química) mediante el modelo de celdas con

retromezclado² (“backflow cell model”) diseña un procedimiento para controlar la columna bajo dicho esquema. Con base en este modelo, Crosby [33], diseñó un control de variables de estado para regular la concentración de contaminante a la salida de la columna empacada. El esquema de control propuesto por Crosby fue para regular la concentración de CO₂ en el efluente gas (variable regulada) con el suministro de agua (líquido purificante) a la misma, la cual es su variable de control. Debido a que se consideró operación isotérmica y caída de presión despreciable, solamente se enfocó en los perfiles y evolución de concentración de CO₂ en ambas fases (líquida y gas) y del ion hidrógeno en la fase líquida (variables de estado) formado por la disolución del CO₂ en el agua. Ya que hizo este trabajo considerando una columna empacada de absorción que tenía en el laboratorio en donde realizaba sus investigaciones, la ley de control que obtuvo fue para una válvula que regulaba el flujo de agua a la columna de acuerdo con variaciones en voltaje producido por las diferencias de concentración de CO₂ (concentración medida usando celdas de conductividad térmica) frente a una concentración de CO₂ deseada (punto de ajuste o “set point”). El control que diseñó lo pudo implementar con éxito ya que a lazo cerrado éste era capaz de mantener en una concentración deseada el CO₂ a la salida de la columna en presencia de perturbaciones en el flujo de alimentación de gas.

Posteriormente, en 1988, Nassehzadeh Tabrizi et al. [44, 45], muestra un trabajo en el cual una columna de destilación (por platos) es representada con tanques (parámetros concentrados) para poder formular una ley de control. Para ello, teniendo en mente que estos tanques representan una capacitancia per se, genera una matriz de funciones de transferencia en el dominio de la frecuencia para dichos tanques con las cuales obtiene los parámetros necesarios para diseñar su controlador (un control proporcional) y con el que encontró que se mejora el desempeño del sistema bajo condiciones de lazo cerrado.

Por otro lado, Najim [46] modela y soluciona el problema de control para una columna empacada de absorción. Para lograrlo, modela el comportamiento dinámico de la columna empacada mediante ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas. En cuanto al problema de control, busca regular la concentración de CO₂ a la salida de la columna empacada manipulando el flujo de líquido purificante, el cual es una solución de dietanolamina (DEA). Para resolver este problema, implementó un control autoajutable el cual manda una señal de control para mantener la concentración de CO₂ cerca de un valor deseado (“set point”) ante perturbaciones en los flujos de entrada tanto de gas como de líquido

² Este fue de los últimos trabajos (al menos de los que fueron encontrados) en los que fue empleado el modelo de celdas homogéneas para describir el comportamiento dinámico de un sistema originalmente distribuido y, en específico, de una columna empacada de absorción.

purificante (temperatura, concentraciones, etc.). Cuatro años más tarde, en 1995, Najim en colaboración con Ruiz [47], proponen un control predictivo de amplio rango, el cual consiste en un modelo lineal de bajo orden (funciones de transferencia), para el mismo sistema obteniendo como resultado que la implementación de este control mejora la eficiencia y desempeño de la columna a lazo cerrado.

En los últimos años, Eduardo et al., [48], propone el desarrollo de controladores de prealimentación-retroalimentación (“feedforward-feedback”) no lineales, basados en modelos inversos de redes neurales, que manipulan el flujo del líquido absorbente para mantener baja la concentración de etanol en el efluente gas de una columna de absorción (por etapas, no empacada), y para reducir la concentración de agua residual en el efluente gas de la columna de tratamiento de CO₂ en el proceso de obtención de bioetanol por medio de la fermentación de caña de azúcar. Posteriormente, compararon el desempeño del controlador propuesto con un PID convencional sintonizado con la técnica ampliamente conocida de Cohen-Coon. Finalmente probaron que el control propuesto es superior al PID convencional ya que suprime el error de manera más rápida.

Finalmente, Govindaraja et al., [49] proponen un control en cascada para regular la caída de presión en una columna empacada de absorción, a diferencia de los investigadores antes citados, para los cuales no es importante este efecto ya que no consideran a la caída de presión dentro de la columna en sus modelos debido a que en el intervalo de operación en el caso de ellos es despreciable. El control propuesto por Govindaraja consta de dos controles. El primero de ellos regula la caída de presión manipulando y determinado el flujo de aire que funcionará como punto de ajuste (“set point”) para el segundo control. El segundo control manipula la válvula para mantener el flujo de aire en el “set point”. Finalmente concluye que su esquema de control presenta adaptabilidad a las no linealidades en la caída de presión debidas a perturbaciones en los flujos de aire que a su vez pueden ser debidas (o no) a la posición de la válvula del flujo de aire.

1.2.3. Aportaciones del grupo de trabajo

El grupo de trabajo formado entre el instituto de ingeniería (ii-UNAM) y UAM unidad Iztapalapa, se ha trabajado sobre la línea, de entre otros aspectos, de la representación de sistemas de parámetros distribuidos (conjunto de ecuaciones diferenciales parciales), a través de modelos de celdas homogéneas, para la futura implementación de sistemas de monitoreo y control. En particular, hay

tres trabajos pertenecientes a este grupo que sirvieron como punto de partida metodológico y que fueron aplicados a este trabajo de tesis.

Badillo [10] modeló un reactor tubular de gasificación de lecho fluidizado a través de un tren de reactores de tanque continuo agitado (CSTR, por sus siglas en inglés) de volúmenes variables, con el cual puedo mantener las características dinámicas, las multiplicidades y estudios de bifurcación presentes en el reactor de gasificación tubular. Con este modelo de bajo orden (tres CSTR en serie), Badillo obtuvo resultados similares a los obtenidos por otros autores con modelos complejos para este tipo de reactores.

Canales [11], por otra parte, trabajó sobre esta mismo tipo de reactores pudiendo sistematizar esta técnica de discretización (volúmenes o mallado variable), logrado así reducir el orden para modelos de gasificación.

Finalmente, Nájera [9], logró capturar, de manera confiable, la esencia dinámica de un reactor tubular por medio de tres reactores CSTR en serie con retromezclado de volúmenes iguales (mallado uniforme), conservando las multiplicidades del reactor, haciendo estudios de bifurcación y pudiendo caracterizar la estabilidad de los puntos de equilibrio del sistema distribuido original con dicha representación (modelo de bajo orden). Posteriormente, pudo implementar un sistema de control que, con base en mediciones de temperatura y acoplando un observador de bajo orden, pudo mantener operando al reactor, de manera estable, en el estado estacionario que es inestable a lazo abierto (LA).

1.3. Justificación

En los antecedentes (estado del arte) que se muestran en la sección anterior, y de lo que es del conocimiento del autor de esta tesis, existen aún nichos en el modelado y control de este tipo de sistemas, y en específico en columnas empacadas de absorción, que pueden ser atendidos ya que en la mayoría de las publicaciones y trabajos antes mencionados:

- Usan EDP para modelar el comportamiento dinámico de una columna empacada de absorción
- No muestran pruebas de resolubilidad fundamentadas físicamente del sistema de caso de estudio
- La complejidad en las técnicas de control empleada es alta
- No muestran pruebas formales de Controlabilidad

- No presentan guías de sintonización
- No están enfocados en la implementación de observadores al sistema de control

De los puntos anteriores se puede comentar que la totalidad de los artículos consultados publicados en revistas internacionales, sobre columnas de absorción reactiva (específicamente para los sistemas CO₂-amina) usan modelos de parámetros distribuidos para realizar los estudios dinámicos³ de tales columnas. Sin embargo, aunque existe software especializado para resolver estos sistemas, enfrentar el problema de esta manera puede traer problemas de rigidez y un número de estados dependiente del método numérico a usar, lo que se traduce en tiempo de cálculo y gasto de memoria elevados.

Por lo tanto, el apoyarse en aproximaciones basadas en nociones y conceptos de un tren de reactores de tanque continuo agitado (CSTR, por sus siglas en inglés), ofrece la ventaja de que los estados presentes en el modelo⁴ son finitos y además, de que es un tema ampliamente conocido en Ingeniería Química por la sencillez de los modelos matemáticos que los describen, aunado a que es posible representar otros equipos de naturaleza distribuida (reactores tubulares, columnas empacadas de absorción, etc.), como un tren de CSTR lo cual fue tomado de las referencias [9-11] como base para la solución del problema de control de esta tesis.

Por otro lado, dado que lo que se busca controlar es la concentración de CO₂ en el efluente gas de la columna empacada de absorción, lo cual es muy difícil de medir en tiempo real, es necesario implementar un observador (en este caso un observador lineal de orden reducido) para este estado con lo que se obtendrá un control pasivo no lineal accionado por retroalimentación de salidas. Por lo tanto, la representación de la columna de absorción como un conjunto de CSTR ofrece una sencilla interpretación de en qué lugar debe ser ubicado el sensor de temperaturas, lo que puede ser traducido posteriormente en una localización espacial en la columna empacada de absorción al momento de colocar el controlador estabilizante de temperatura.

Además, estudios en columnas de destilación han mostrado que es posible controlar sistemas de parámetros distribuidos complejos con esquemas de control sencillos. Aunque existen diferencias sustanciales entre una columna empacada de absorción y una columna de destilación, ambos son

³ En la presente tesis se referirá a la dinámica como al estado transitorio y estacionario del sistema en conjunto

⁴ El modelo es un medio para alcanzar el fin, el cual es la obtención de un control para la columna empacada de absorción. Es por ello que se le presta la atención necesaria en el presente trabajo.

sistemas de este tipo de parámetros y por lo tanto, los mismos esquemas de control pueden ser implementados.

Por último, existen trabajos recientes que vinculan al control no lineal con el control (comúnmente usado en la industria) Proporcional Integral (PI) (Díaz-Salgado y colaboradores, [27]), haciendo uso de las características intrínsecas de un tren de CSTR que puede, posteriormente, trasladarse a la columna de absorción debido a la representación de la misma por medio del conjunto de tanques propuesto en esta tesis.

1.4. El problema de control

Los puntos expuestos en las secciones de motivación y de antecedentes permiten definir el problema que se aborda en esta tesis, el cual es diseñar un sistema de control (midiendo temperatura y manipulando la dosificación de líquido purificante) que regule la concentración del contaminante en el gas efluente con estabilidad robusta, incluyendo guías de sintonización de los parámetros del controlador y criterios de ubicación del sensor de temperatura con base en la aproximación del par de CSTR de la columna empacada de absorción.

1.5. Objetivos

Para darle solución al problema de control, se debe de cumplir con los siguientes objetivos, los cuales son una adaptación de la metodología mostrada en los trabajos de Nájera [9], Badillo-Hernández et al., [10], Canales [11], Fernández et al., [50, 51], de Díaz Salgado [13,22] y González et al., [52]:

- Aproximar el comportamiento de la columna empacada de absorción con un conjunto de tanques CSTR sin retromezclado el cual fue modelado en colaboración con Obregón [21].
- Diseñar un controlador no lineal ideal estabilizante bajo los criterios de pasividad accionado por retroalimentación de estados para el par de CSTR.
- Aproximar el control no lineal ideal estabilizante mediante un control accionado por retroalimentación de salidas.

- Proporcionar criterios de selección de tanque para medición de temperatura y trasladarlo a una posición espacial en la columna empacada de absorción y dar guías de sintonización del controlador.
- Validar con simulación numérica del comportamiento de la representación de la columna empacada de absorción con la implementación de los controladores de temperatura a lazo cerrado bajo perturbaciones para determinar si los perfiles de los estados pueden ser estabilizados.

De los puntos anteriores, es importante mencionar que en el presente trabajo de tesis se retoma una vieja idea de la década de 1950 propuesta por Levenspiel [8] y partiendo de los trabajos Badillo, Nájera y Canales [9-11] la columna empacada de absorción, que originalmente es un sistema distribuido, es aproximada mediante reactores de tanque continuo agitado en serie, el cual es un sistema por etapas que captura la dinámica de la columna empacada de absorción sin perder el sentido físico de la misma. El modelo de celdas homogéneas obtenido en este trabajo de tesis como un medio para la representación del comportamiento de la columna empacada de absorción fue desarrollado en colaboración con Obregón [21], por lo tanto es un modelo que es compartido y presentado en ambas tesis.

Siguiendo la metodología de Nájera aplicada al modelado de un reactor tubular mediante un tren de tanques CSTR [9] y adaptándola a la representación por etapas de la columna empacada de absorción, se hacen análisis de multiplicidad y estabilidad local a lazo abierto, ya que proporciona la pauta para obtener la ley de control no lineal ideal estabilizante con base en criterios de pasividad (Grado Relativo 1 y Dinámica cero), la cual, es una condición matemática de resolubilidad del problema de control.

Finalmente se recupera el comportamiento del control no lineal ideal estabilizante con un control CRS (estructuralmente similar a un control proporcional integral, PI) de temperatura (Control más Observador) haciendo uso de los trabajos de Álvarez y Díaz Salgado [12, 13].

1.6. Aportación

Como se comentó en secciones anteriores, el control de columnas de absorción no es tema nuevo y a menudo es resuelto aplicando técnicas de control avanzado que en ocasiones es difícil de aplicar en la industria. Por lo tanto, este trabajo de tesis se obtienen tres aportaciones principalmente:

- *Garantía de confiabilidad y operabilidad:* los criterios de resolubilidad (grado relativo 1 y dinámica cero) con fundamento físico mostrado en este trabajo de tesis permite asegurar que se obtiene un control de temperatura robusto (ante errores de modelado e incertidumbre de parámetros físicos) para mantener la concentración del contaminante (CO_2) en el efluente gaseoso, en un punto de operación cercano al deseado y, al controlar concentración a través de mediciones de temperatura (control indirecto), se paga un sesgo en dicha concentración. Por otro lado, se garantiza el correcto funcionamiento del equipo ya que la simulación muestra que la columna no opera “seca” ni en el punto de inundación. Además, el control propuesto logra regular a la columna ante perturbaciones en el flujo de entrada de gas y concentración de entrada del contaminante ya que, a lazo cerrado, estabiliza al sistema en un tiempo menor y los sesgos obtenidos para la concentración del contaminante son reducidos prácticamente a la mitad del que se presenta a lazo abierto.
- *Sencillez en la técnica de control:* por su poca dependencia en un modelo matemático y por su estructura, el control por retroalimentación de salidas (CRS) obtenido en este trabajo puede ser considerado como un control PI convencional, ya que a partir de los parámetros de sintonización del CRS (control más observador) se puede obtener los parámetros de sintonización de un control PI convencional, con la ventaja de que el CRS muestra un mejor desempeño ante su contraparte industrial en cuanto a tiempo de asentamiento se refiere.
- *Sintonización metodizada:* se aplican guías de sintonización a lazo cerrado que permiten conocer a priori y con certeza que el control propuesto funciona, ya que no está basado en métodos de “prueba y error” o en análisis de respuesta del sistema ante perturbaciones.

En resumen, la metodología y los resultados obtenidos son una aportación a la ingeniería de columnas empacadas de absorción y para sistemas de separación reactiva en general.

1.7. Organización de la Tesis

La tesis consta de seis capítulos. En el presente capítulo, como se ha visto hasta el momento, se explica el problema a abordar, la motivación del por qué se toma ese problema y el cómo es resuelto.

En el capítulo dos se plantea formalmente el problema de control mostrándose los balances de materia y energía correspondientes al sistema distribuido (EDP) que describe a la columna empacada de absorción.

En el capítulo tres, se obtiene el modelo de celdas homogéneas y se valida mediante la comparación con datos experimentales reportados por Paitoon Tontiwawuthikul [14], determinándose así que dos CSTR es el número suficiente para capturar la esencia de la columna empacada.

En el capítulo cuatro se prueba la resolubilidad del sistema a lazo abierto dando sustento analítico, determinando así si el problema de control tiene solución.

En el capítulo cinco se construye un control de temperatura por retroalimentación de salidas (pasivo). En este capítulo, además, se prueban controles con una perturbación de tipo escalón en el flujo de entrada de gas para comparar desempeños (tiempos de asentamiento y sesgos principalmente).

Para concluir, en el capítulo seis se muestran las conclusiones obtenidas a lo largo de este trabajo.

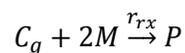
Capítulo 2. El problema de control

*En este capítulo se plantea el problema de control de una columna empacada de absorción. Para ello, primero se **describe** la operación de la columna con identificación de los estados, entradas y salidas (estados endógenos estáticos y dinámicos, entrada de control y perturbaciones, variables medidas y variable regulada). Partiendo de los balances de materia y energía del sistema espacialmente distribuido se obtiene **el modelo** en ecuaciones diferenciales parciales (EDPs). Finalmente, se plantea **el problema de control**: regular indirectamente la concentración efluente de CO₂ manipulando el flujo de alimentación de MEA con base en mediciones de temperatura (en ubicación a ser determinada).*

2.1. La columna empacada de absorción

En esta sección se describe la operación de la columna. En dicha descripción se identifican los estados, las entradas y salidas (estados endógenos estáticos y dinámicos, entrada de control y perturbaciones, variables medidas y variable regulada) del sistema espacialmente distribuido y son representados como un diagrama de bloques.

Considérese la columna mostrada en la Figura 2.1. En esta clase de columnas una fase líquida es puesta en contacto a contracorriente con una fase gaseosa sobre un soporte sólido inerte que incrementa el área de contacto líquido-gas y por el cual la fase líquida genera una película descendente. Si se trata de una absorción reactiva (como es en este caso), el componente absorbido en la fase líquida reacciona selectivamente con alguno de los componentes presentes en dicha fase, todo con la finalidad de remover especies químicas indeseadas de la fase gaseosa. Para la absorción de CO₂ en una solución líquida de MEA, la reacción entre el CO₂ (C_g) y la MEA (M) para formar carbamato (P), todo en la fase líquida es:



En la región empacada de estos aparatos, el volumen del líquido, concentraciones de reactantes, temperatura (estados) y el flujo de solvente son dependientes de la posición axial y del tiempo, es decir, muestran perfiles espaciales dinámicos dentro de la columna empacada.

Como el objetivo principal de estos dispositivos es retener o capturar contaminantes o componentes no deseados de alguna corriente de proceso para cumplir con normas ambientales o de operación, generalmente son contraladas a través de lazos sencillos de control (aunque también con lazos de control en cascada, avanzados) midiendo concentración de salida de la impureza, o concentración de salida del solvente, o calor suministrado al rehervidor (cuando se presentan en conjunto con un “stripper”), manipulando generalmente el flujo de alimentación de solvente, en este caso el flujo de alimentación de MEA. Para este caso, como ya fue mencionado, el volumen del líquido, la concentración de MEA y la temperatura dentro de la región empacada son los estados (\mathbf{x}), la concentración de CO_2 es la variable controlada (z), la temperatura dentro de la zona empacada es la variable medible (y), el flujo de alimentación de MEA, q_{le} , es la variable de control (u) y la temperatura de entrada del líquido, la concentración de entrada de MEA, el flujo de alimentación de gas, la concentración de entrada de CO_2 y la temperatura de alimentación del gas son las entradas exógenas al sistema (\mathbf{d}). La Figura 2.2 es la representación con bloques de la columna empacada de absorción mostrando las variables antes mencionadas.

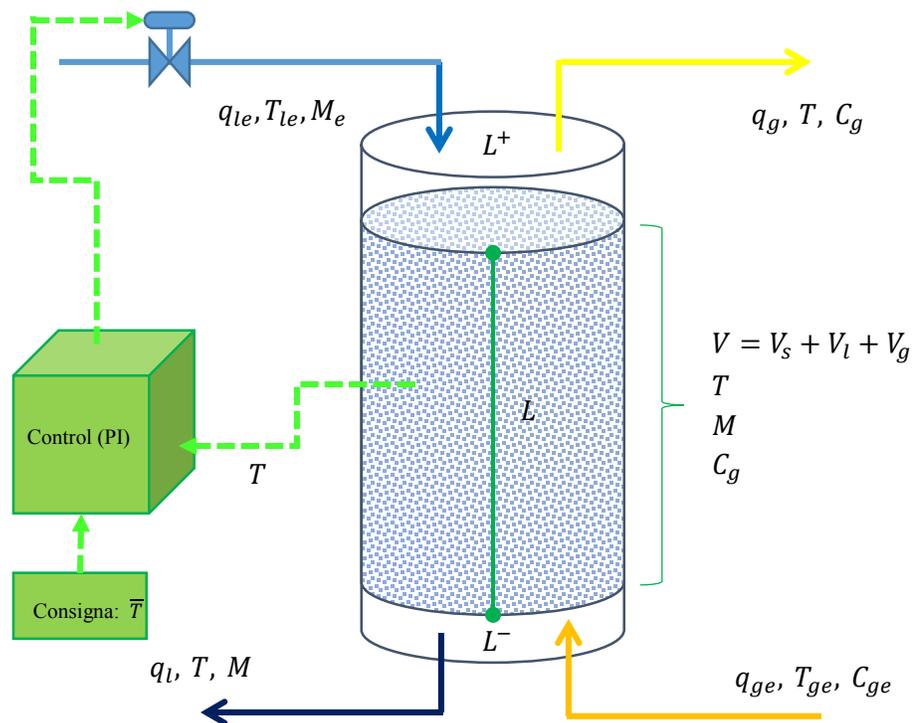


Figura 2.1. Columna empacada de absorción y sistema de control (verde).

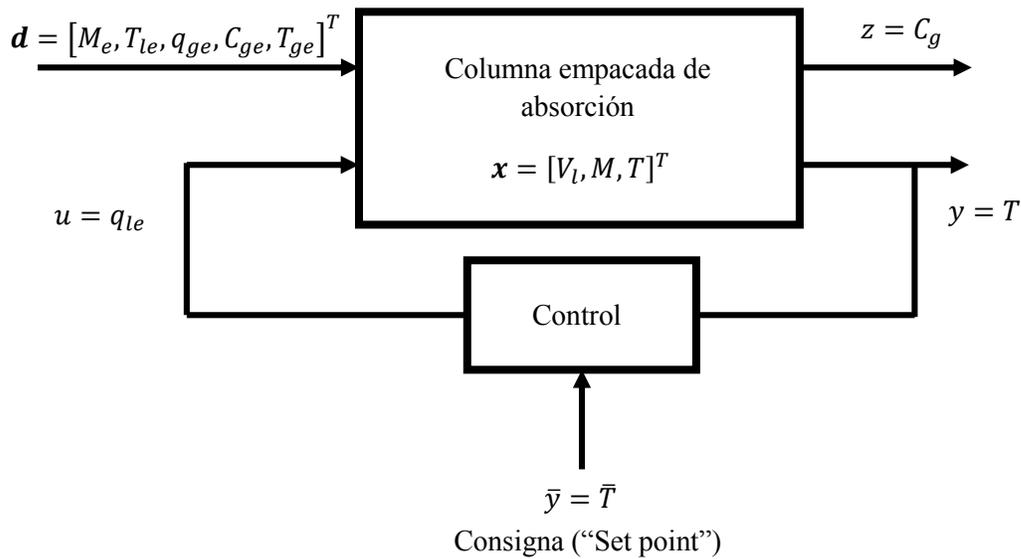


Figura 2.2. Representación con bloques de la columna empacada de absorción.

En el apéndice A, el lector interesado puede encontrar tablas con información de la columna que sirvió de caso de estudio, cómo son números característicos de la operación de la columna empacada de absorción, los tiempos de retención de las fases en este sistema y los resultados obtenidos del estudio dispersivo-convectivo del mismo, los cuales son importantes tener en mente para conocer a priori las características de los fenómenos de transporte inherentes a la columna, con el objetivo de la obtención de un modelo simplificado de ésta.

Habiendo explicado el funcionamiento de la columna de absorción y el cómo es generalmente regulada, considerando nuevamente las Figuras 2.1 y 2.2, el problema de control radica en diseñar un controlador que, con base en mediciones de temperatura, garantice que la concentración de contaminante, CO_2 (C_g), en el gas que abandona la columna se mantenga en un valor deseado manteniendo a T en su "set point", \bar{T} , o en su defecto en las cercanías de este.

2.2. El modelo distribuido

Partiendo de los balances de materia y energía del sistema espacialmente distribuido, la cual es la representación estándar de este tipo de sistemas, y bajo un conjunto de hipótesis pertinentes debidamente sustentadas, se obtiene el modelo en ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) que involucran a la cinética del sistema reaccionante, los fenómenos de transporte dentro de la zona empacada y la hidráulica de los flujos de solvente dentro de ella. El lector interesado puede dirigirse a los apéndices A hasta E para consultar la obtención de cada término de los balances de materia y energía.

Considérese ahora la representación por bloques de la columna empacada (Figura 2.2). Dicho sistema cuenta con perfiles dinámicos (estados, \mathbf{x}) y dos tipos de entradas: la de control (u), que es el flujo de alimentación de solvente; y las perturbaciones exógenas (\mathbf{d}) que son las características de las corrientes de entrada al sistema. Además, cuenta con una variable medible (y), que es la temperatura de la región empacada, y una variable de interés (z) que es la concentración efluente de CO_2 .

El modelo de la columna empacada de absorción se obtiene a partir de los balances de materia y energía, cinética de reacción, e hipótesis pertinentes estándar hechas para esta clase de sistemas [17] y de las tablas a.1, a.2 y a.3 del apéndice A las cuales son listadas a continuación:

- Operación adiabática
- Caída de presión despreciable
- Efectos dispersivos tanto de materia como de energía despreciables (ver Peclets de la tabla a.2)
- Transporte sólo en dirección axial
- Estado cuasiestacionario para la fase gas
- Domina la transferencia de masa (ver tabla b.1 para aclaración)
- La magnitud de los coeficientes de transferencia de energía permiten considerar un sistema pseudocontinuo para el balance energético ($T_s \approx T_g \approx T_l \approx T$)

Bajo estas hipótesis, los perfiles dinámicos de las Figuras 2.1 y 2.2 que pertenecen a los flujos de solvente, $q_l(s, t)$, y a los estados, $V_l(s, t)$, $M(s, t)$, $C_g(s, t)$, $T(s, t)$, satisfacen las siguientes EDPs dinámico-estáticas:

• **Balance dinámico de materia total**

$$\frac{\partial V_l}{\partial t} = Lk_h \frac{\partial V_l}{\partial s}, \quad V_l(s, 0) = V_{l0}(s), \quad k_h V_l(L, t) = q_{le}(t) := u; \quad q_l(s, t) = k_h V_l(s, t) \quad (2a-b)$$

• **Balance dinámico de materia del reactante líquido (MEA)**

$$\frac{\partial MV_l}{\partial t} = L \frac{\partial (q_l M)}{\partial s} - 2VR, \quad M(s, 0) = M_o(s), \quad M(L, t) = M_e(t) := d_{Me} \quad (2c)$$

• **Balance cuasiestático de materia del reactante gas (CO₂)**

$$0 = Lq_{ge} \frac{\partial C}{\partial s} - VR, \quad C(s, 0) = C_o(s), \quad C(0, t) = C_e(t) := d_{Ce}(t), \quad (2d)$$

• **Balance dinámico de energía (psuedomedio continuo)**

$$\frac{\partial T}{\partial t} = - \left(L \frac{q_{ge} \rho_g(T) c_{pg} + \rho_l c_{pl} q_l}{\mathfrak{C}} \right) \frac{\partial T}{\partial s} + \left[\frac{(-\Delta H)V}{\mathfrak{C}} \right] R, \quad T(s, 0) = T_o(s), \quad T(0, t) := T_{ge}(t) := d_{Te}, \quad (2e)$$

• **Balance de calor en L^+ (a la entrada del líquido, sobre L) L^- (a la salida del líquido, bajo 0)**

$$T_{gs} = T(L, t) + \left(\frac{q_l \rho_l c_{pl}}{q_{ge} \rho_g [T(L, t)] c_{pg}} \right) [T_{le} - T(L, t)], \quad T_{ls} = T(0, t) + \frac{q_{ge} \rho_g [T(0, t)] c_{pg}}{q_l \rho_l c_{pl}} [T_{le} - T(0, t)] \quad (2f-g)$$

• **Salidas medida y regulada**

$$y = T(l_m, t), \quad z = C(l_m, t) \quad (2h-i)$$

Con $\mathbf{d} := (q_{ge}, C_{ge}, T_{ge}, T_{le})^T$

En donde

V , es el volumen total de la zona empacada [*longitud*³]

V_l , es el volumen del líquido [*longitud*³]

q_l , es el flujo de solvente, deducido en el apéndice D ecuación (d.6), [$\frac{\text{longitud}^3}{\text{tiempo}}$]

q_g , es el flujo de gas [$\frac{\text{longitud}^3}{\text{tiempo}}$]

M_e , es la concentración de entrada de MEA [$\frac{\text{masa}}{\text{longitud}^3}$]

M , es la concentración de MEA [$\frac{\text{masa}}{\text{longitud}^3}$]

T , es la temperatura del sistema

T_{le} , es la temperatura de entrada del líquido

C_{p_l}, C_{p_g} , es la capacidad térmica de la fase líquida y la fase gas respectivamente $\left[\frac{\text{energía}}{\text{masa temperatura}} \right]$

ρ_l, ρ_g , es la densidad de la fase líquida y de la fase gaseosa respectivamente $\left[\frac{\text{masa}}{\text{longitud}^3} \right]$

k_h , es una constante de la ecuación de la hidráulica $[\text{tiempo}^{-1}]$

L , es la dirección axial $[\text{longitud}]$

l_m , es la localización de la medición en dirección axial (a determinarse) $[\text{longitud}]$

t , es el tiempo

s , es la dirección axial $[\text{longitud}]$

C_g , es la concentración de CO_2 (ecuación b.18 del apéndice B) $\left[\frac{\text{masa}}{\text{longitud}^3} \right]$

$R := f_R(M, T, C_g)$, es la rapidez de reacción (ecuación b.16 del apéndice B) $\left[\frac{\text{masa}}{\text{tiempo}} \right]$

$\mathfrak{C} := f_{\mathfrak{C}}(V_l)$, es una capacitancia térmica ponderada en masa (ecuación e.9 del Apéndice E) $\left[\frac{\text{energía}}{\text{temperatura}} \right]$

El sistema de EDPs formados de las ecuaciones 2a a 2i forma el modelo de parámetros distribuidos y está formado por:

- nueve incógnitas o variables: $q_l(s, t)$, $V_l(s, t)$ (2a), $M(s, t)$ (2c), $C_g(s, t)$ (2d), $T(s, t)$ (2e), T_{gs} (2f), T_{ls} (2g), y (2h), z (2i)
- nueve ecuaciones
 - 4 EDPs
 - 3 dinámicas: $V_l(s, t)$ (2a), $M(s, t)$ (2c), $T(s, t)$ (2e)
 - 1 quiasistática: $C_g(s, t)$ (2d)
 - 5 EAlgebraicas:
 - Una desacoplada: $q_l(s, t)$ (2b)
 - 4 desacoplada a las anteriores: $T_{gs}(t)$ (2f), T_{ls} (2g), $y(t)$ (2h), $z(t)$ (2i)

Es importante resaltar que las ecuaciones (2f) y (2g) son solo para fines informativos ya que no son parte del alcance de este trabajo de tesis y su cálculo o falta de él no afecta en la solución del problema de control.

La ubicación espacial del sensor es un grado de libertad importante que debe contestarse, ya que los criterios para la solución del problema de control dependen de la localización del sensor de temperatura. Habiendo resaltado esto, el problema radica en diseñar un controlador, lo más simple posible, que con base en mediciones de temperatura, y (ubicación a ser determinada), y ante perturbaciones, d , lleve al sistema a un punto de referencia previamente establecido, \bar{y} , en el menor tiempo posible y, además, que lleve a la concentración de CO₂ (variable controlada, z), en un tiempo menor al que lleva a la columna hacerlo a lazo abierto, y estando ahí (o lo más cerca posible a su estado de referencia, \bar{z}), que la mantenga controlada de manera robusta, es decir, minimizando el error entre estos valores. La tabla 2.1 resume las variables involucradas en el problema de control.

Tabla 2.1. Variables del problema de control.

Variable de Control	u	Flujo de entrada de purificador $\left[\frac{\text{volumen}}{\text{tiempo}} \right]$	q_{le}
Variable Medible	y	Temperatura $[Temperatura]$	T
Variable Controlada	z	Concentración de CO ₂ en la fase gas $\left[\frac{\text{masa}}{\text{volumen}} \right]$	C_g
Variable exógenas	d	Propiedades de entrada al sistema $\left[\frac{\text{volumen}}{\text{tiempo}} \right], \left[\frac{\text{masa}}{\text{volumen}} \right]$ y Temperatura	$q_{ge}, T_{ge}, C_{ge}, M_e, T_{le}$
Variabes de estado	x	Volumen, Concentraciones $\left[\frac{\text{materia}}{\text{volumen}} \right]$ y Temperatura	V_l, M, T

2.3. Conclusiones

En este capítulo se dio una introducción sobre el funcionamiento de una columna empacada de absorción, en donde se identificaron los estados, entradas y salidas (estados endógenos estáticos y dinámicos, entrada de control y perturbaciones, variables medidas y variable regulada) del sistema además de mostrarse a la columna empacada de absorción en su forma de diagrama de bloques con el cual es más sencillo localizar las variables antes mencionadas.

Además, se obtuvo el modelo matemático de la columna, como un conjunto de EDPs, a partir de los balances de materia y energía del sistema espacialmente distribuido y de acuerdo con hipótesis fundamentadas y ampliamente usadas en el ámbito de la ingeniería química.

Finalmente se planteó formalmente el problema de control, el cual consiste, grosso modo, en diseñar un controlador, lo más simple posible, que con base en mediciones de temperatura (cuya ubicación del sensor de temperatura es un grado de libertad importante que debe contestarse) y manipulando la dosificación de purificante (flujo de MEA), establezca al sistema en menor tiempo en comparación a lazo abierto y mantenga en un valor de referencia (o cercano a este) la concentración del contaminante CO_2 en el efluente gas, reduciendo el error entre mediciones y los valores de referencia. Este modelo sirve como punto de partida ya que, en específico, las ecuaciones 2a a 2e son usadas en el próximo capítulo, aplicando la metodología presentada en los trabajos de Nájera [9], Badillo [10] y Canales [11], principalmente, para obtener el modelo matemático (más sencillo) que captura la esencia dinámica de la columna empacada de absorción como un conjunto de CSTR en serie, sobre el cual se diseñará el sistema de control mencionado en el problema.

Capítulo 3. Modelo de etapas

En este capítulo se obtiene el modelo de parámetros concentrados de la columna empacada de absorción. Como primer paso, tomando como base aportaciones del grupo de trabajo, se muestra un modelo de “N” agregados que captura la esencia dinámica del modelo distribuido. Como paso subsecuente, se comparan los perfiles estáticos provenientes del modelo de agregados con 1, 2, 3, 4, 5 y 10 tanques CSTR con datos experimentales (y con información de su estado transitorio) reportados por el autor [14]. Finalmente, se determina cual es el número de tanques suficiente que describe a la columna empacada.

3.1. Similitud entre la discretización de las EDP con las EDO de los CSTR

En esta sección se muestra un modelo de “N” tanques CSTR con los que se representa al modelo distribuido de la columna empacada de absorción.

Como se comentó anteriormente, la forma en que generalmente es representada la columna empacada de absorción es mediante un conjunto de EDP. Cabe recalcar que este conjunto de EDP sólo es una aproximación de la realidad al igual que la aproximación por tanques que es con la que se piensa modelar la columna en este trabajo de tesis. Considerando esta disyuntiva, sabiendo que el empaque de la columna del caso de estudio cabe 516 veces colocándolo uno tras otro en la región empacada, esto sugeriría discretizar espacialmente la zona empacada en 516 particiones, lo que sería prácticamente lo mismo que si se resolviera el sistema de ecuaciones diferenciales parciales mediante software especializado, o bien, tener un modelo de alto orden (muchos estados, muchos cálculos). Por otra parte, se tiene como antecedente el trabajo que se ha desarrollado en el grupo de trabajo [10,11], en especial el trabajo de Nájera [9] en el que fueron conservadas las no linealidades y multiplicidades presentes en un reactor tubular (parámetros distribuidos) con un modelo simplificado de tres CSTR con retromezclado. Por lo tanto, siendo el sistema de esta tesis más sencillo al no presentarse multiplicidades y poderse considerar un flujo tipo pistón por el número de Peclet del sistema, se puede aplicar de forma segura el enfoque del grupo de trabajo a la columna empacada de absorción de esta tesis (representación de la misma con dos CSTR sin retromezclado) teniendo seguridad que se conservará la esencia de la columna de absorción. En aras de encontrar un método

simple que satisfaga el propósito de esta tesis, resulta conveniente usar el enfoque del grupo de trabajo [9-11], es decir, la representación de la columna empacada de absorción como un conjunto de CSTR, los cuales son capaces de dar información característica de la sección de la columna que representan.

En seguida se muestran la discretización del modelo de la columna como un conjunto de ecuaciones EDP del capítulo anterior como un CSTR y posteriormente con " N " CSTR. Es importante tener en mente que al discretizar las EDP estas se vuelven EDO que son más sencillas de resolver.

3.1.1. Discretización mediante tanques

En esta sección se busca encontrar un modelo que describa el comportamiento dinámico de la columna empacada de absorción mediante un conglomerado de tanques CSTR. Para ello, se discretiza a la columna en una sección, es decir, con un tanque CSTR y se obtendrán las EDO que lo describen.

Considérense las ecuaciones (2a-e) del modelo matemático del problema de control mostrado en el capítulo 2. Dichas EDP al ser discretizadas espacialmente se convierten en un conjunto de EDO (dependientes únicamente de una condición inicial), cuya cantidad varía en relación del número segmentos, en este caso tanques, de discretización.

Considerando el trabajo de Badillo [10] y Canales [11], es bien sabido que una discretización o partición volumétrica ofrece mejores resultados frente a un mallado uniforme, sin embargo, para el presente trabajo de tesis, una partición isocórica resulta ser suficiente ya que, además de la sencillez de discretización que ofrece, se conserva la dinámica del sistema, tal como lo muestra los resultados obtenidos con el modelo de dos CSTR (lo cual se muestra más adelante) y se satisfacen las necesidades en cuanto a modelado y a la solución del problema de control.

Para esta sección, la columna empacada de absorción, específicamente la zona empacada que es dónde se lleva a cabo el proceso, se considera que se comporta como un tanque CSTR sin retromezclado (debido a efectos dispersivos despreciables y a que la operación contracorriente en sí simula este efecto). Para ello considérese la Figura 3.1. Los balances de materia y energía para este son sencillos de deducir, simplemente es definido cómo la acumulación de una propiedad dentro del tanque debido a lo que entra al tanque menos lo que sale de éste más lo que es formado o consumido por reacción química. Al hacer los balances de materia y de energía se obtiene el conjunto de ecuaciones 3.6 que describen el comportamiento de la columna como un tanque CSTR.

- Balance dinámico de materia total

$$\dot{V}_l = q_{le} - q_l(s, t), \quad V_l(s, 0) = V_{lo}(s), \quad (3a)$$

- Balance dinámico de materia del reactante líquido (MEA)

$$\dot{M} = \frac{q_{le}}{V_l}(M_e - M) - 2\frac{V}{V_l}R, \quad M(s, 0) = M_e \quad (3b)$$

- Balance cuasiestático de materia del reactante gas (CO₂)

$$C_g = \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V}{q_{ge}}k_{abs}}, \quad C_g(s, 0) = C_{ge}(s), \quad (3c)$$

- Balance dinámico de energía (psuedomedio continuo)

$$\dot{T} = \frac{q_g \rho_g C_{pg}}{\mathfrak{C}}(T_{ge} - T) + \frac{q_{le} \rho_l C_{pl}}{\mathfrak{C}}(T_{le} - T) + \frac{1}{\mathfrak{C}}(-\Delta H)VR, \quad T(s, 0) = T_{le}(s) \quad (3d)$$

En dónde k_{abs} está definido en el Apéndice B y los términos presentes en este conjunto de ecuaciones ya fueron definidos en la sección 2.2 del capítulo 2.

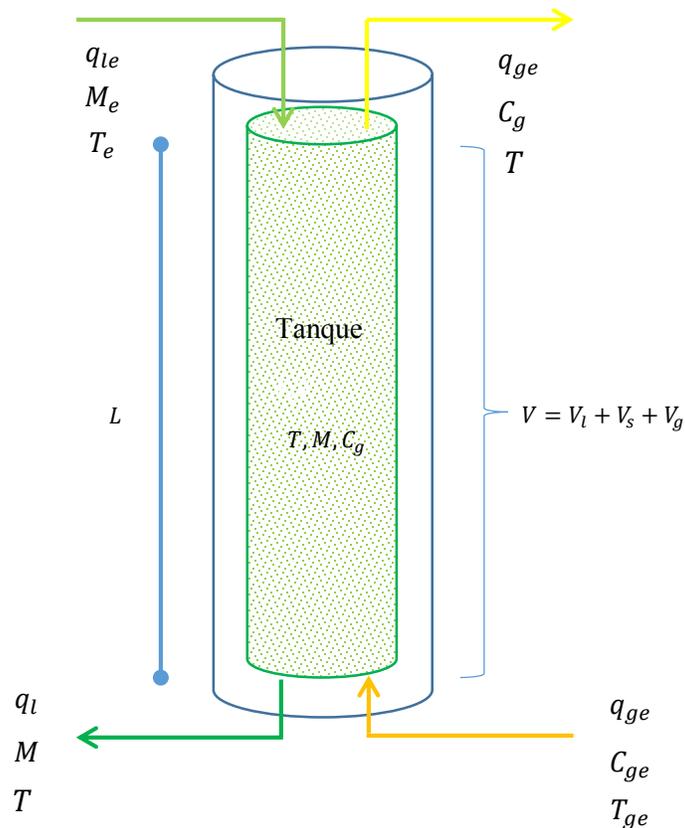


Figura 3.1. Representación de la columna empacada de absorción como un tanque CSTR.

Este CSTR abarca una región específica de la zona empacada y proporcionan información característica tanto de la fase transitoria como del estado estacionario de esta.

Finalmente, generalizando para " N " tanques, los balances de materia y energía para el i ésimo tanque corresponden a los mostrados en el conjunto de ecuaciones (3.a-d).

• **Balance dinámico de materia total**

$$\dot{V}_l = q_{l_{i+1}}(s, t) - q_{l_i}(s, t), \quad V_l(s, 0) = V_{l0}(s), \quad (3a)$$

• **Balance dinámico de materia del reactante líquido (MEA)**

$$\dot{M}_l = \frac{q_{l_{i+1}}(s, t)}{V_{l1}} (M_{i+1} - M_l) - 2 \frac{V_i}{V_{li}} R_i, \quad M(s, 0) = M_0 \quad (3b)$$

• **Balance cuasiestático de materia del reactante gas (CO₂)**

$$C_{g_i} = \frac{C_{g_{i-1}}}{1 + \frac{V_i}{q_{ge}} k_{absi}}, \quad C_g(s, 0) = C_{g0}(s), \quad (3c)$$

• **Balance dinámico de energía (psuedomedio continuo)**

$$\dot{T}_l = \frac{q_g \rho_g C_{pg}}{\epsilon_i} (T_{i-1} - T_l) + \frac{q_{l_{i+1}}(s, t) \rho_l C_{pl}}{\epsilon_i} (T_{i+1} - T_l) + \frac{(-\Delta H) V_i R_i}{\epsilon_i}, \quad T(s, 0) = T_{le}(s) \quad (3d)$$

En el Apéndice "F" se muestra la discretización espacial de la columna empacada con uno dos y tres CSTR al igual que una comparación entre discretización espacial con nodos y discretización con tanques para que el lector interesado pueda observar que ambas desratizaciones espaciales son equivalentes.

3.2. Validación del modelo por etapas (CSTR)

El modelo basado en la representación de la columna empacada como un conjunto de tanques CSTR obtenido de las EDP del Capítulo 2 es validado en esta sección con datos experimentales del trabajo de Paitoon del año 1992 [14]. Dichos datos muestran el perfil de concentraciones de CO₂ y temperatura a lo largo de la columna en estado estacionario, proporcionando también información del estado transitorio del sistema.

Dado que lo que se pretende obtener es una representación sencilla de la columna empacada de absorción, se busca un modelo por etapas de baja dimensión, es decir, que el número de tanques que conforma el tren de CSTR sean pocos (menor a 10). La figura 3.3 muestra, a manera de ejemplo,

las temperaturas representativas obtenidas al modelar la columna empacada de absorción con dos, tres, cuatro, cinco y diez tanques CSTR en serie sin retromezclado, mientras que en las figuras 3.4 se puede observar una comparación de los perfiles espaciales de concentración de CO₂ y Temperatura los cuales fueron obtenidos al unir con interpolaciones cúbicas los valores procedentes de modelar la columna empacada de la manera antes mencionada. Dichos puntos de interpolación son mostrados en esta figura como las marcas pertenecientes a la línea de cada representación. Por otro lado, en la tabla 3.1 se muestra que el comportamiento en estado estacionario de la columna empacada de absorción puede ser representada mediante el modelo obtenido de la representación con dos CSTR en serie (menor error frente a las representaciones de más tanques), teniendo en cuenta que se le da mayor importancia a que el perfil de temperaturas (propiedad que puede ser leída y no inferida o estimada), obtenido de la simulación es más cercano al que proporciona los datos experimentales, los cuales fueron tomados por el autor en siete puntos equidistantes en la columna.

Para determinar el tiempo en que tarda la columna empacada en llegar al estado estacionario, Paitoon primero dejó que el flujo de MEA que pasa a través de la columna se estabilizara y cuando ocurrió esto le suministró la mezcla gaseosa que contiene el CO₂. Habiendo hecho esto, Paitoon encontró que la columna empacada de absorción alcanza el estado estacionario en un tiempo de entre 30 y 40 minutos (tiempo de asentamiento), definiendo este tiempo como el necesario para que la evolución del perfil de temperatura sea estable.

Tabla 3.1. Errores frente a datos experimentales de temperatura [°C] con el modelo de 2 y 3 CSTR.

$error\% = \left(\frac{x_{exp} - x_{sim}}{x_{exp}} \right) * 100$	2 CSTR		3 CSTR	
Experimental [°C]	Simulación [°C]	error %	Simulación [°C]	error %
19	19	0	19	0
19	19.01	0.05	19	0
19.5	19.49	0.05	19.49	0.05
20	20.7	3.5	19.85	0.75
23	24.35	5.9	21.45	6.74
29	29	0	27.35	5.69
34	33.75	0.74	33.75	0.74
Error promedio [%]	1.46		2	

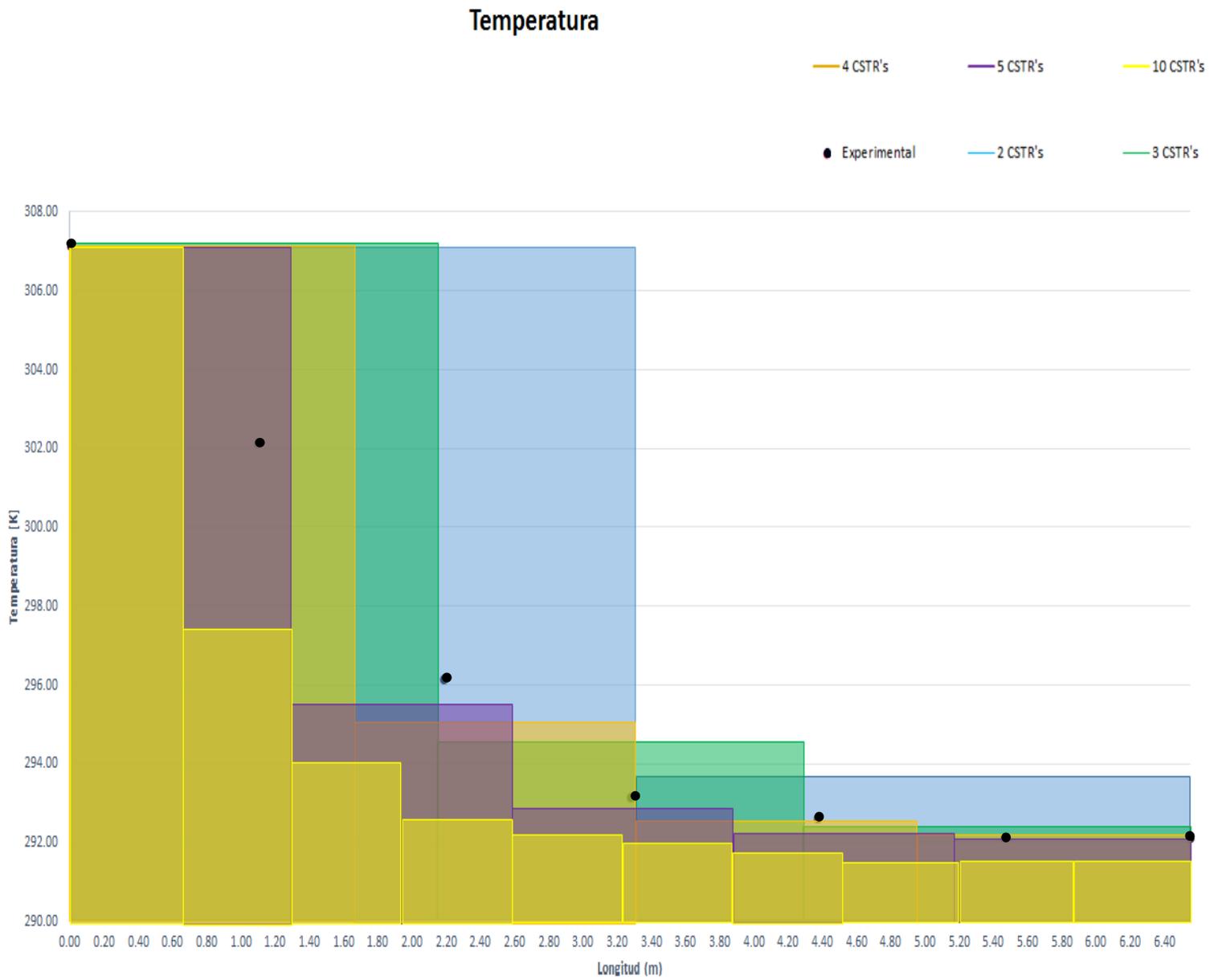
Simulando y partiendo del mismo procedimiento usado por Paitoon para alcanzar el estado estacionario, la Figura 3.3 muestra que, ejemplificando con un solo tanque CSTR, dicho estado estacionario para temperatura es alcanzado dentro del intervalo de tiempo reportado en el trabajo de

Paitoon, es decir, se alcanza en aproximadamente 2000 s (33 minutos), mientras que para el caso de la representación del conjunto de CSTR con dos unidades se llega en 1700 s (28 minutos).

Cabe mencionar que, aunque es bien sabido que la exactitud de la solución de una ecuación diferencial es mejor al aumentar el número de particiones usadas en un método numérico, para este caso en particular es diferente ya que sucedió lo contrario. Como puede observarse en las Figuras 3.3, al aumentar el número de particiones (o tanques) en el método numérico se obtienen datos más alejados de los datos experimentales y esto puede ser debido a múltiples factores que, si bien no es parte del alcance de este trabajo de tesis, pueden ser la falta de retromezclado entre los tanques del modelo simplificado (lo cual fue sustentado con el número de Peclet), o bien, porque los parámetros físicos (y sus incertidumbres asociadas) que describen al sistema en sus totalidad (cinética, transporte, etc.) no son los mejores. Sin embargo, dichos parámetros usados y las consideraciones hechas para la simplificación del modelo fueron los indicados para este trabajo de tesis ya que, con el modelo obtenido y con base en datos experimentales e información mostrada en el trabajo de Paitoon [14], se pudieron reproducir de manera satisfactoria los estados transitorio y estático (dinámica) del caso de estudio.

Por limitaciones gráficas, si se considera que los datos proporcionados por el modelo por etapas presentan una desviación del $\pm 15\%$ por incertidumbres asociadas a parámetros físicos, las bandas/perfiles estáticos generados a partir de estos modelos de celdas se traslapan en ciertas regiones, por lo tanto, la disyuntiva entre elegir el modelo de tres tanques o el de dos tanques se desvanece. Por lo anterior, se puede asumir que el modelo de dos tanques es suficiente para describir a la columna empacada de absorción.

Figura 3.2. Valores característicos de Temperatura para 2, 3, 4, 5 y 10 tanques frente a datos experimentales.



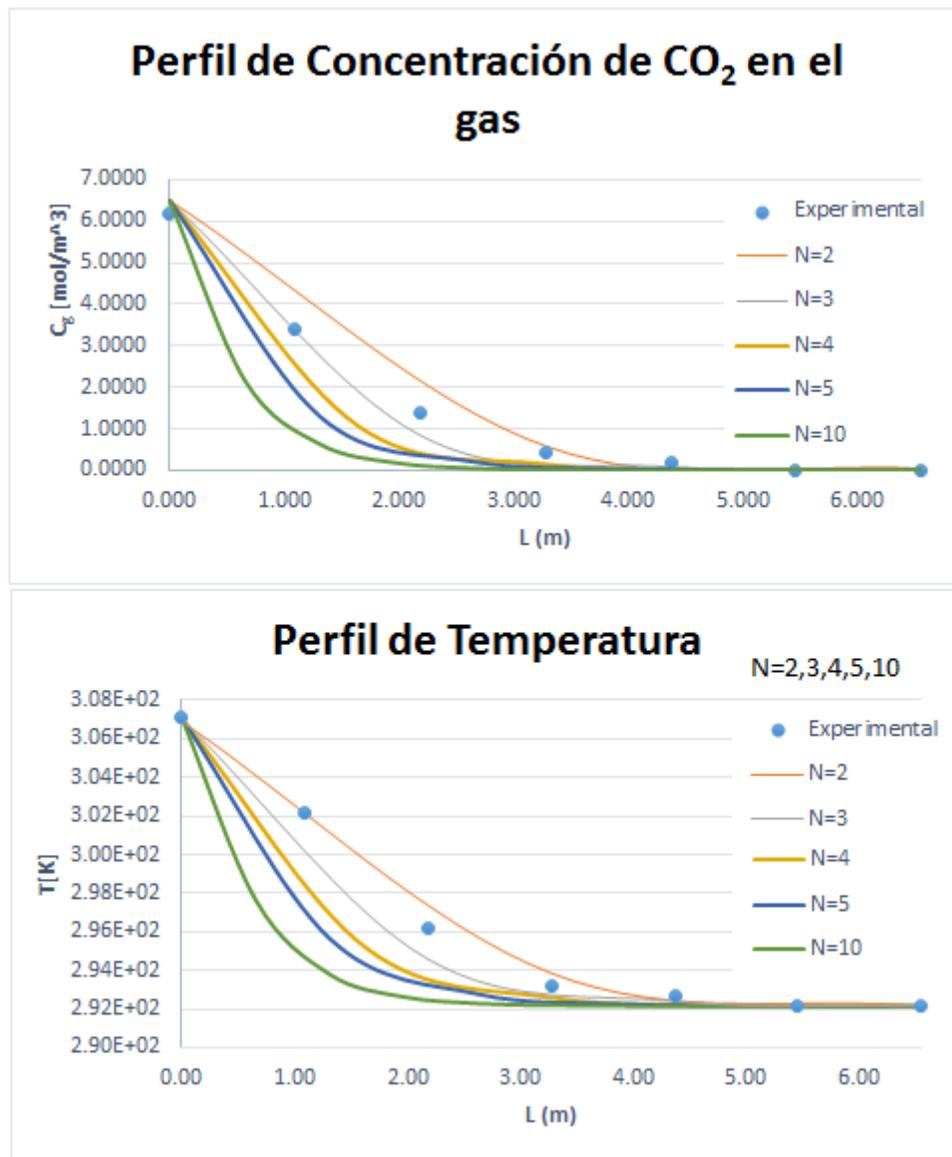


Figura 3.3. Comparación de perfiles de concentración de CO₂ y Temperatura para 2, 3, 4, 5 y 10 tanques frente a datos experimentales.

Es importante mencionar que, aunque al aumentar el número de tanques y por ende la disminución en el volumen de cada uno de ellos (tanques con partición volumétrica constante) y el tiempo de transitoriedad disminuya, hay un tiempo “límite” al cual siempre tienden a llegar las evoluciones de temperatura para alcanzar el estado estacionario. Para este caso de estudio se alcanza este estado estacionario en un intervalo de tiempo de entre (ver figura 3.5) 1500 y 2000 segundos (entre 25 a 33 minutos).

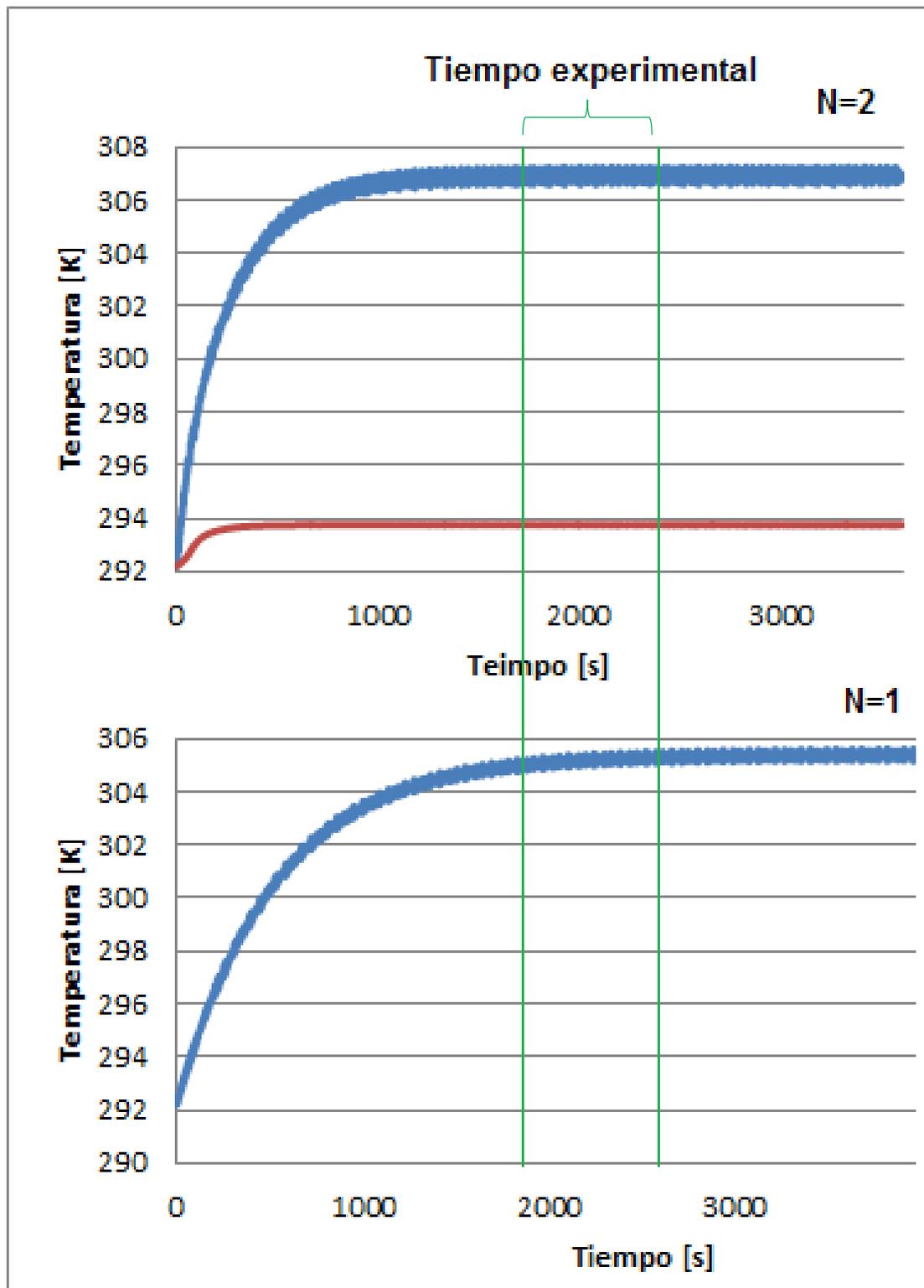


Figura 3.4. Evolución de la temperatura para el caso de dos CSTR's en serie y para un solo CSTR.

El modelo que sirven para la descripción de la columna empacada de absorción como dos tanques CSTR y que es el usado para resolver el problema de control es mostrado a continuación en las ecuaciones (3e-p):

• **Balance dinámico de materia total**

$$\dot{V}_{l1} = q_{l2}(s, t) - q_{l1}(s, t), \quad V_{l1}(s, 0) = V_{l1o}(s), \quad (3e)$$

$$\dot{V}_{l2} = q_{le}(s, t) - q_{l2}(s, t), \quad V_{l2}(s, 0) = V_{l2o}(s), \quad (3f)$$

• **Balance dinámico de materia del reactante líquido (MEA)**

$$\dot{M}_1 = \frac{q_{l2}(s, t)}{V_{l1}}(M_2 - M_1) - 2 \frac{V_1}{V_{l1}} R_1, \quad M_1(s, 0) = M_e \quad (3g)$$

$$\dot{M}_2 = \frac{q_{le}(s, t)}{V_{l2}}(M_e - M_2) - 2 \frac{V_2}{V_{l2}} R_2, \quad M_2(s, 0) = M_e \quad (3h)$$

• **Balance cuasiestático de materia del reactante gas (CO₂)**

$$C_{g1} = \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V_1}{q_{ge}} k_{abs1}} \quad C_g(s, 0) = C_{ge}(s), \quad (3i)$$

$$C_{g2} = \frac{C_{g1}}{1 + \frac{V_2}{q_{ge}} k_{abs2}} \quad C_g(s, 0) = C_{ge}(s), \quad (3j)$$

• **Balance dinámico de energía (psuedomedio continuo)**

$$\dot{T}_1 = \frac{q_g \rho_g C_{pg}}{\mathfrak{C}_1} (T_{ge} - T_1) + \frac{q_{l2}(s, t) \rho_l C_{pl}}{\mathfrak{C}_1} (T_2 - T_1) + \frac{(-\Delta H) V_1 R_1}{\mathfrak{C}_1}, \quad T(s, 0) = T_{le}(s) \quad (3k)$$

$$\dot{T}_2 = \frac{q_g \rho_g C_{pg}}{\mathfrak{C}_2} (T_1 - T_2) + \frac{q_{le}(s, t) \rho_l C_{pl}}{\mathfrak{C}_2} (T_{le} - T_2) + \frac{(-\Delta H) V_2 R_2}{\mathfrak{C}_2}, \quad T(s, 0) = T_{le}(s) \quad (3l)$$

• **Su entradas de control y exógenas**

$$u = q_{le}(t), \quad \mathbf{d} = [q_{ge}, C_{ge}, T_{ge}, M_e, T_{le}] \quad (3m-n)$$

• **Salidas medida y regulada**

$$y = T_2(l_m, t), \quad z = C_{g2}(l_m, t) \quad (3o-p)$$

Dicho sistema está compuesto de 13 variables y 13 ecuaciones (6 dinámicas, 7 algebraicas). Es importante mencionar que los estados de este sistema (\mathbf{x}) son los volúmenes de líquido, las concentraciones de MEA y temperaturas en cada tanque. La tabla 3.2 muestra las variables antes mencionadas y la figura 3.5 muestra la representación de la zona empacada de la columna de absorción cómo 2 CSTR's.

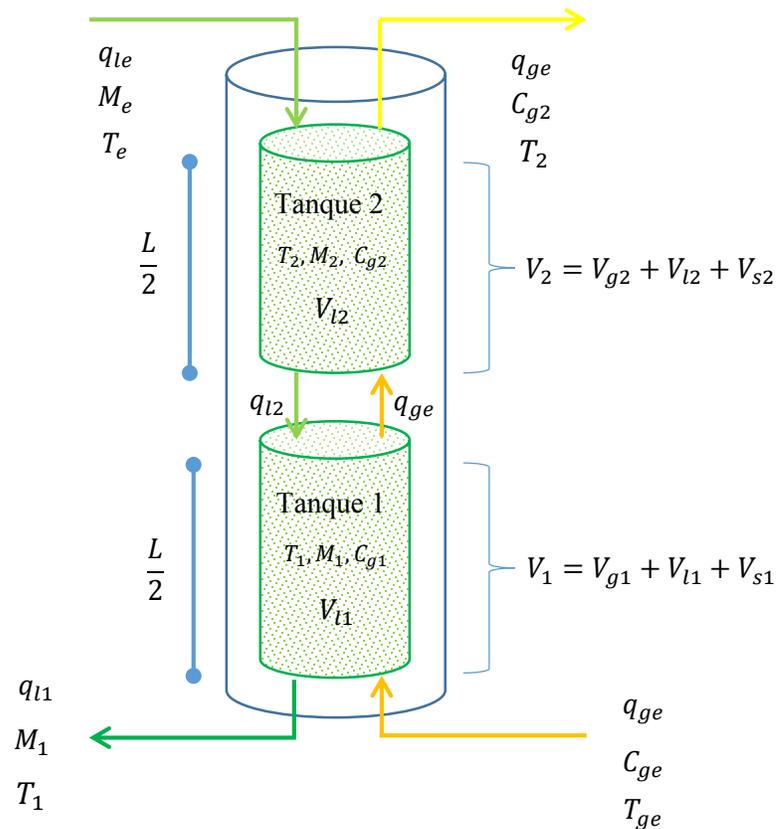


Figura 3.5. Representación de la columna empacada de absorción como dos tanques CSTR.

3.3. Conclusiones

En la primera sección de este capítulo se mostró que, con base en las aportaciones de Nájera [9], Badillo [10] y Canales [11], un sistema de parámetros distribuidos puede ser discretizado espacialmente con tanques de volúmenes constantes, lo cual es equivalente a discretizar espacialmente usando algún método matemático específico para dicho fin. Además, se concluye que para describir el comportamiento dinámico de la columna empacada de absorción, y considerando desviaciones en el modelado de $\pm 15\%$ debido a incertidumbre de parámetros físicos, basta con representarla con un modelo conformado por dos tanques CSTR en serie (figuras 3.3 3.4), ya que la información proporcionada por los tanques de este modelo son congruentes con los datos experimentales reportados por Paitoon en su trabajo.

Dicho modelo obtenido está formado por 13 variables las cuales son satisfechas mediante 6 EDO y 7 ecuaciones algebraicas. El conjunto de ecuaciones antes mencionado, perteneciente al

conjunto de ecuaciones (3e-p), fue usado para realizar las pruebas y análisis necesarios para poder determinar la resolubilidad del problema de control. En el siguiente capítulo se realiza un estudio dinámico del modelo por etapas obtenido en este capítulo.

Tabla 3.2. Variables del modelo por etapas de la columna de absorción y del problema de control.

Tipo de Variable	Representación	Definición	Unidades
Variables de estado (\mathbf{x})	$x_1 = V_{11}$	Volumen de líquido del Tanque 1	m^3
	$x_2 = V_{12}$	Volumen de líquido del Tanque 2	
	$x_3 = M_1$	Concentración de MEA Tanque 1	$\left[\frac{mol}{m^3}\right]$
	$x_4 = M_2$	Concentración de MEA Tanque 2	
	$x_5 = T_1$	Temperatura del Tanque 1	K
	$x_6 = y = T_2$	Temperatura del Tanque 2	
Variable Medible y Controlada (y)	$y = x_6 = T_2$	Temperatura del Tanque 2	K
Variable de Interés (z)	$z = C_{g2}$	Concentración de CO_2 a la salida de la columna	$\left[\frac{mol}{m^3}\right]$
Entrada de Control (u)	$u = q_{te}$	Flujo de alimentación de MEA a la columna	$\left[\frac{m^3}{s}\right]$
Entradas Exógenas (\mathbf{d})	$d_1 = q_{ge}$	Flujo de alimentación de gas a la columna	$\left[\frac{m^3}{s}\right]$
	$d_2 = C_{ge}$	Concentración de entrada de CO_2	$\left[\frac{mol}{m^3}\right]$
	$d_3 = M_e$	Concentración de entrada de MEA	
	$d_4 = T_{ge}$	Temperatura de entrada del gas	K
	$d_5 = T_{le}$	Temperatura de entrada del líquido	

Capítulo 4. Dinámica y resolubilidad

*En este capítulo se tratan dos temas: la dinámica del sistema por etapas y la resolubilidad del problema de control. Como primer parte, el modelo por etapas es analizado para determinar si el sistema presenta multiplicidad (varios estados estacionarios) al manipularse la entrada de control, es decir, se hace un análisis de bifurcación. Posteriormente, como segunda parte, se determina si el estado o estados estacionarios, de existir, son estables o no. Finalmente se estudia la resolubilidad del problema de control para conocer si el sistema de dos CSTR es **controlable** a la luz de las propiedades de Grado Relativo 1 (GR.1) y Dinámica Cero (ZD), es decir, bajo el criterio de Pasividad.*

4.1. Análisis dinámico del modelo de dos CSTRs

En esta sección se determina si el sistema por etapas presenta multiplicidad haciéndose dos pruebas. Una de ellas es un análisis de bifurcación, el cual consiste, en grandes rasgos, en variar el parámetro de bifurcación y resolver el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias al equilibrio (ecuaciones igualadas a cero) para posteriormente verificar, de manera matemática o visual, cuantas veces el valor nominal del parámetro de bifurcación, (una línea totalmente vertical perpendicular al eje de las abscisas) corta a las curvas generadas de los balances de materia y energía en estado estacionario. El número de veces que las corte será el número de estados estacionarios presentes en el sistema.

Una prueba análoga son las curvas de van Heerden, también conocidas como curvas de calor generado y calor removido o como curvas de ignición-extinción. En esta prueba se varía la temperatura de alguno de los dos tanques y se resuelven los balances de materia de ambos tanques y el balance de energía del tanque que no se está variando. Posteriormente son graficados los valores de calor generado y calor removido que conforman el balance de energía del tanque que se eligió para variar la temperatura contra dicha temperatura y el número de veces que se intersectan las curvas de los calores generados y removidos es el número de estados estacionarios que existen en el sistema.

4.1.1. Bifurcación

Ya que u , al ser la variable de control varía en función de una perturbación, para este análisis se utilizó al flujo de alimentación de MEA, q_{le} , como parámetro de bifurcación. Siguiendo la metodología de Nájera descrita en el “Apéndice A” de la referencia [9], que es la que se comentó en los párrafos anteriores, básicamente el flujo de alimentación de MEA se varió en un intervalo de $70 \frac{L}{h}$ a $200 \frac{L}{h}$ (valor nominal $110 \frac{L}{h}$) y se resolvieron las ecuaciones diferenciales ordinarias del conjunto de ecuaciones (3e-1). Con esto se encontró que todo el sistema solo presenta un estado estacionario, lo que es reflejado en la figura 4.1.

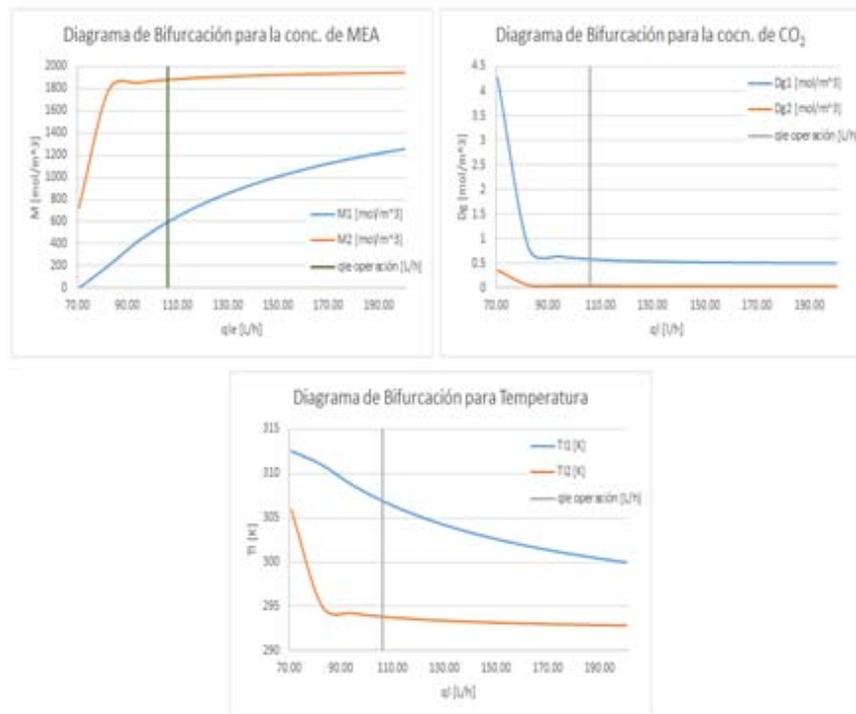


Figura 4.1. Diagramas de bifurcación para el par de CSTR teniendo como variable de bifurcación a q_{le} .

4.1.2. Calor generado y removido

Las curvas de calor generado y calor removido, o curvas van Heerden, son un recurso ampliamente utilizado en ingeniería de reactores para determinar el número de estados estacionarios

presentes en un tanque CSTR. Para este caso se hizo el estudio para cada tanque (sólo con fines académicos). Para determinar si hay multiplicidad en los tanques se varió la temperatura de 100 K a 1000 K. Se eligió este intervalo de temperaturas (aunque comprende temperaturas poco probables en la realidad) sólo para conocer la topología de las curvas y para confirmar que el sistema no presenta multiplicidad en un amplio rango de temperaturas. Ya que se eligió un tanque para realizarle el estudio, se varía su temperatura en el intervalo antes mencionado y, considerando que las ecuaciones dinámicas de la variación de volumen del líquido por su forma sólo llegan a un único estado estacionario, y que están desacopladas de los balances de materia y energía, se resuelven las ecuaciones (3e-1) igualadas a cero, la cuales son mostradas nuevamente a continuación:

• **Balance dinámico de materia total**

$$0 = q_{l_2}(s, t) - q_{l_1}(s, t) \quad (\text{tanque 1})$$

$$0 = q_{l_e}(s, t) - q_{l_2}(s, t) \quad (\text{tanque 2})$$

• **Balance dinámico de materia del reactante líquido (MEA)**

$$0 = \frac{q_{l_2}(s, t)}{V_{l1}} (M_2 - M_1) - 2 \frac{V_1}{V_{l1}} R_1 \quad (\text{tanque 1})$$

$$0 = \frac{q_{l_e}(s, t)}{V_{l2}} (M_e - M_2) - 2 \frac{V_2}{V_{l2}} R_2 \quad (\text{tanque 2})$$

• **Balance cuasiestático de materia del reactante gas (CO₂)**

$$C_{g_1} = \frac{C_{g_e}}{1 + \frac{V_1}{q_{g_e}} k_{abs1}} \quad C_g(s, 0) = C_{g_e}(s) \quad (\text{tanque 1})$$

$$C_{g_2} = \frac{C_{g_1}}{1 + \frac{V_2}{q_{g_e}} k_{abs2}} \quad C_g(s, 0) = C_{g_e}(s) \quad (\text{tanque 2})$$

• **Balance dinámico de energía (psuedomedio continuo)**

$$0 = \frac{q_g \rho_g C_{p_g}}{\mathcal{C}_1} (T_{g_e} - T_1) + \frac{q_{l_2}(s, t) \rho_l C_{p_l}}{\mathcal{C}_1} (T_2 - T_1) + \frac{(-\Delta H) V_1 R_1}{\mathcal{C}_1} \quad (\text{tanque 1})$$

$$0 = \frac{q_g \rho_g C_{p_g}}{\mathcal{C}_2} (T_1 - T_2) + \frac{q_{l_{i+1}}(s, t) \rho_l C_{p_l}}{\mathcal{C}_2} (T_{l_e} - T_2) + \frac{(-\Delta H) V_2 R_2}{\mathcal{C}_2} \quad (\text{tanque 2})$$

En la sección 3.2 del Capítulo 3 ya fueron mencionadas todas las variables que se muestran en este conjunto de ecuaciones. Los resultados obtenidos en este estudio también muestran que sólo se tiene un estado estacionario para cada tanque y esto es mostrado en la figura 4.2.

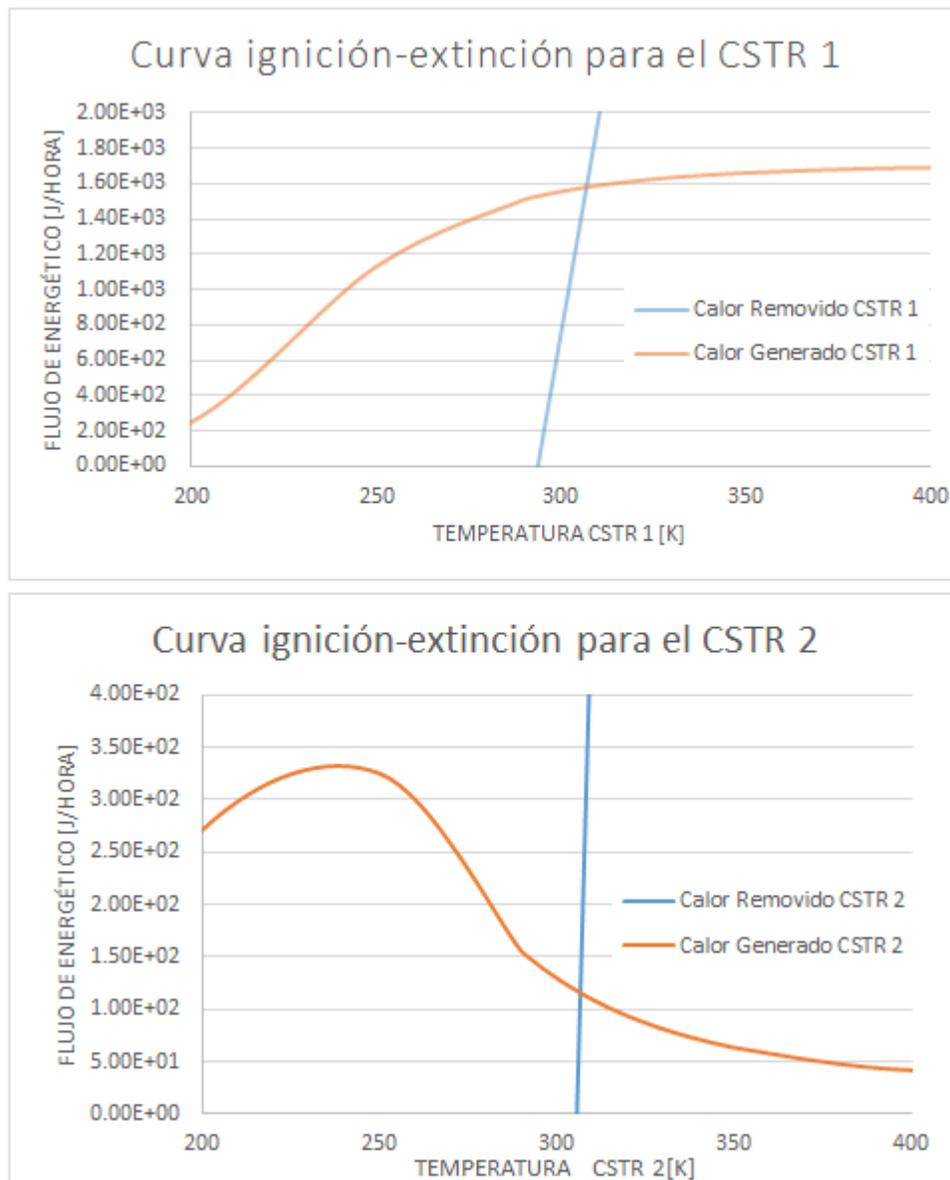


Figura 4.2. Curvas de ignición-extinción para el par de CSTR.

4.2. Estabilidad

Dado que el CO_2 se encuentra en estado cuasiestacionario en relación a la fase líquida en su totalidad, y con base en que las ecuaciones dinámicas del volumen de la fase líquida están desacopladas de los balances de materia y energía para cada tanque, se escoge estudiar la dinámica de la concentración de MEA y de la temperatura para los análisis dinámicos y de estabilidad, bajo el entendido de que al conocer estos estados es posible inferir el perfil y la evolución de CO_2 (y del flujo

de alimentación de MEA , q_{le} , cuando se trata como variable de control) mediante ecuaciones algebraicas.

Las ecuaciones que describen el comportamiento transitorio de la representación de la columna empacada de absorción como dos tanques CSTR son las mostradas en el conjunto de ecuaciones (3e-1). Un análisis de estabilidad hecho al **sistema completo** muestra que el estado estacionario de cada uno de los tanques son asintóticamente estables, lo cual es mostrado en la tabla 4.1.

Tabla 4.1. Estados estacionarios (EE) para el par de CSTR (completo).

EE $(M_1, T_1, V_{I1}, M_2, T_2, V_{I2})$	(597.8,306.9,0.0029, 1882.2,293.8,0.0029)
Eigenvalores	[-0.004,-0.004,-0.008,-0.01,-0.01,-0.13]
Condición local	Asintóticamente estable

Como puede ser visto en la tabla 4.1, el sistema posee un solo estado estacionario que, de acuerdo al valor de los eigenvalores (y según el primer método de Lyapunov), es asintóticamente estable.

La figura 4.3 muestra la evolución temporal de la temperatura y concentración de MEA a lazo abierto para cada uno de los tanques CSTR. Como se puede observar, los tanques se estabilizan asintóticamente en el estado estacionario mostrado en la tabla 4.1.

Cabe resaltar que los estados estacionarios a los que llegan los CSTR en la evolución temporal de cada estado, para cada tanque, también corresponde a los puntos de estabilidad (puntos de equilibrio) presentes en la figura 4.4, la cual muestra los perfiles de concentración y temperatura a lo largo de la columna empacada de absorción. Para la creación de estos perfiles, como se mencionó con anterioridad, se toman las concentraciones de MEA y temperaturas estacionarias de cada uno de los dos tanques que conforman el sistema (cuyo error en temperatura no sobrepasa el 6% para la representación con dos CSTR mientras que para una representación de tres tanques se tiene un error en temperatura del 12%, ver tabla 4.2) y se traducen, mediante ecuaciones algebraicas, a una posición

espacial en la columna empacada y posteriormente estos puntos son unidos con interpolaciones cúbicas.

Tabla 4.2. Errores frente a datos experimentales[14] de temperatura [°C] con el modelo de 2 CSTR

Experimental [°C]	Simulación [°C]	error %
19	19	0
19	19.01	0.05
19.5	19.49	0.05
20	20.7	3.5
23	24.35	5.9
29	29	0
34	33.75	0.74

Es importante recalcar que las figuras 4.3 fueron obtenidas siguiendo el procedimiento usado por Paitoon para determinar el tiempo que tardaba la columna en alcanzar el estado estacionario. Dicho procedimiento fue esperar a que el flujo de MEA se estabilizara (llegar al estado estacionario) y posteriormente, cuando el flujo de MEA es estable, suministrar el gas a la columna. Como ya fue mencionado, la columna alcanza el estado estacionario cuando la temperatura es estable.

Para concluir con esta sección, se obtuvo que el sistema solo llega asintóticamente a un solo estado estacionario estable. Además, cabe mencionar que el perfil de concentraciones de CO₂, para dos CSTRs, se obtuvieron errores de hasta el 50%, sin embargo, la representación de dos tanques capturan la esencia dinámica de la columna empacada de absorción y basta con estos tanques para resolver el problema de control.

En la siguiente sección se dará el criterio de resolubilidad y Controlabilidad usado para este trabajo de tesis, el cual también servirá para poder resolver el problema de control ya que se determinará de cuál tanque es conveniente tomar las mediciones de temperatura para poder regular la concentración de salida de CO₂.

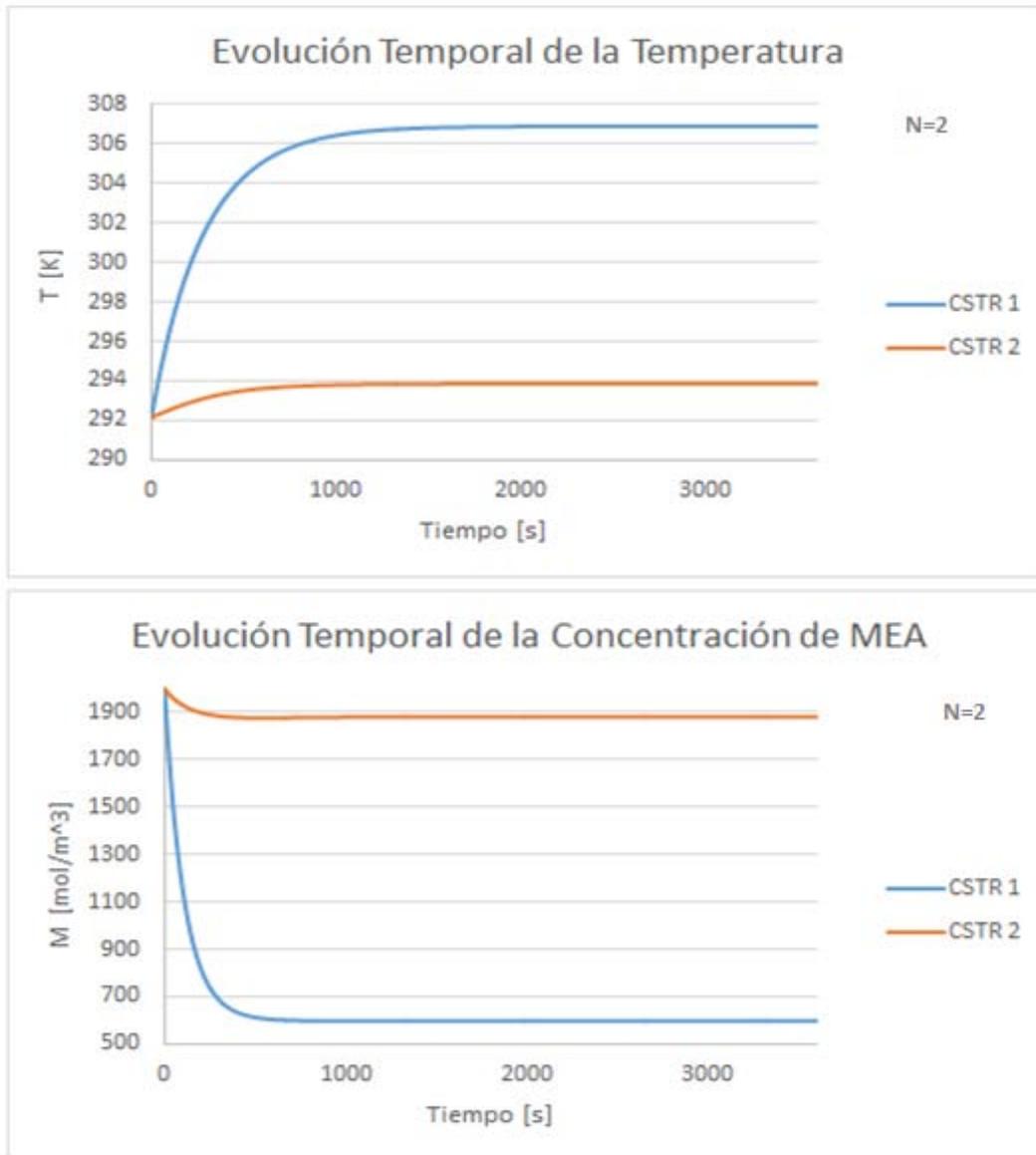


Figura 4.3. Evolución Temporal para concentración de MEA y temperatura para el tren de CSTR a lazo abierto.

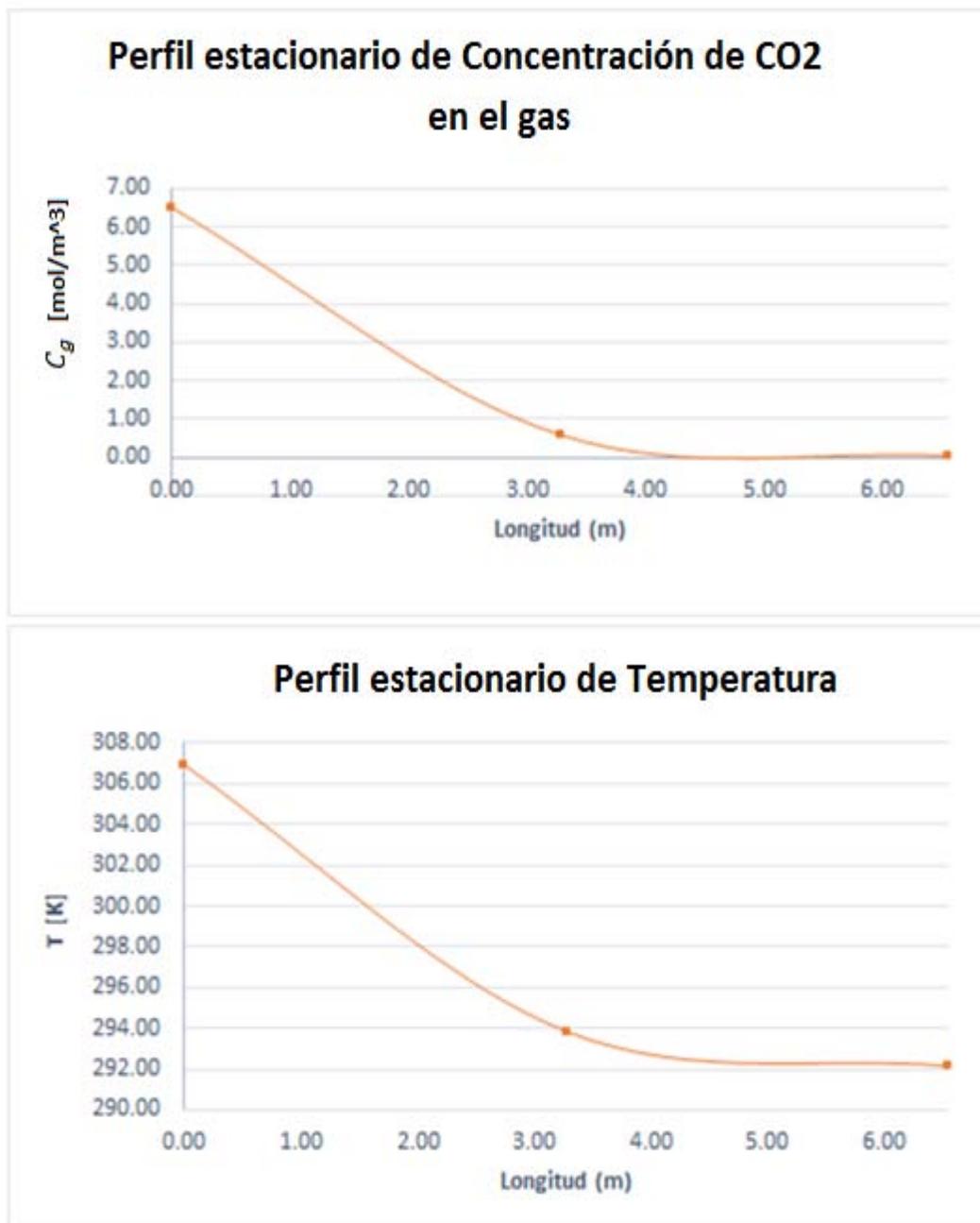


Figura 4.4. Perfiles de temperatura y concentración de CO₂ a lo largo de la columna en estado estacionario (longitud numerada desde el fondo).

4.3. Controlabilidad y solución al problema de control para el conjunto de CSTR

En esta sección se estudia la resolubilidad del problema de control para conocer si el sistema de dos CSTR es controlable a la luz de las propiedades de Grado Relativo 1 (GR.1) y Dinámica Cero (ZD), es decir, bajo el criterio de Pasividad.

Según Skogestad [20] la Controlabilidad para sistemas lineales puede definirse de la siguiente manera:

“El sistema dinámico $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}u(t)$, o equivalentemente el par (\mathbf{A}, \mathbf{B}) , se dice que es controlable sí, para cualquier estado inicial $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$, para cualquier tiempo $t > 0$ y para cualquier estado final \mathbf{x}_1 , existe una entrada de control $u(t)$ tal que $\mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1$. De otra forma se dice que el sistema no es controlable”

Por otro lado, el sistema que forman los dos tanques CSTR debe de satisfacer el principio de Controlabilidad de sistemas no lineales para que el problema de control pueda tener solución, por lo tanto, el conjunto de CSTR con el que se capturó la esencia dinámica de la columna de absorción debe ser pasivo, es decir, tiene que cumplir con dos propiedades que se definen más adelante: Grado Relativo 1 (G.R.1) y Dinámica Cero (ZD, por sus siglas en inglés). Ya que una parte del problema de control es determinar qué salida será regulada, se seleccionó a la temperatura como dicha salida por su accesible y fácil medición. Como el conjunto de tanques consta de dos CSTR se tienen dos salidas candidatas a ser escogidas pero sólo cuenta con una entrada de control q_{le} , por lo que se seleccionará la que haga pasivo al par de CSTR.

4.3.1. Pasividad del par de CSTR

Para que un sistema no lineal (como el del caso de estudio) sea pasivo por medio de retroalimentación de estados es necesario que cuente con dos condiciones [25] [26]: i) que el par de entrada de control-salida regulada del sistema presente G.R. 1 y, ii) que la ZD relacionada al sistema tenga un único punto de equilibrio global y que este sea asintóticamente estable.

Para el caso de estudio, como se puede observar en las secciones anteriores de este capítulo, los dos CSTR presentan un solo estado estacionario (punto de equilibrio) el cual es asintóticamente

estable, por lo tanto, al fijar la concentración de MEA o temperatura (por ejemplo) de un tanque en su valor correspondiente del punto de equilibrio hará que los otros estados del tanque al que pertenece lleguen también a su estado estacionario y además, automáticamente, hará que los estados del otro tanque permanezcan en su estado estacionario con lo que se cumple con la propiedad de ZD como se muestra más adelante. Sin embargo, para el caso de G.R. 1, es necesario hacer un análisis más detallado ya que hay que recordar que para el problema de control se cuenta con una entrada de control q_{le} y dos salidas a escoger para regular, temperatura, T , de cada tanque.

4.3.1.1. Grado Relativo 1 (G.R.1)

Tomando como base los trabajos de Isidori [25-26], teniendo un sistema dinámico no lineal de la forma de la ecuación 4a:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) + \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{d})u; \quad \mathbf{y} = \mathbf{h}(\mathbf{x}) \quad (4a)$$

En donde para este caso \mathbf{x} son los estados (concentración de MEA, temperatura y volumen del líquido de cada tanque), \mathbf{d} son las entradas exógenas (para este caso sólo se considera al flujo de gas aunque pueden ser también concentraciones de entrada, temperaturas de entrada, etc.), u es la entrada de control q_{le} y y es la variable medible (temperatura), por lo tanto, el Grado Relativo es el número de veces que es necesario derivar a la variable medible para que aparezca explícitamente la entrada de control, por lo tanto, en este caso, un CSTR tendrá G.R. 1 si al derivar una sola vez a la temperatura (variable medible) de ese tanque aparece directamente el flujo de entrada de purificante.

Retomando el modelo de los dos tanques CSTR del conjunto de ecuaciones (3e-1) en la forma de la ecuación (4a), se eligieron como variables de estado:

$$\begin{aligned} x_i &= V_{lj} & i &= 1,2 & j &= 1,2 \\ x_i &= M_j & i &= 3,4 & j &= 1,2 \\ x_i &= T_j & i &= 5,6 & j &= 1,2 \end{aligned} \quad (4b)$$

Como entrada de control $u = q_{le}$. Y como salida medible

$$y = \mathbf{h}(\mathbf{x}) = T_i ; i = 1,2 \quad (4c)$$

En donde i dependerá del tanque que se elija para tomar la variable medible. Por lo tanto y recordando que $q_{li}(s, t) = k_h V_{li}(s, t) \therefore q_{li}(s, t, x_i)$ en donde $i = 1,2$:

$$f(x, d) = \begin{bmatrix} f_1(x, d) \\ f_2(x, d) \\ f_3(x, d) \\ f_4(x, d) \\ f_5(x, d) \\ f_6(x, d) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{l2}(s, t, x_2) - q_{l1}(s, t, x_1) \\ \frac{q_{l2}(s, t, x_2)}{x_1} (x_4 - x_3) - 2 \frac{V}{x_1} R_1 \\ \frac{dCp_g \rho_g}{\mathfrak{C}_1(x_1)} (T_{ge} - x_5) + \frac{q_{l2}(s, t, x_2) Cp_l \rho_l}{\mathfrak{C}_1(x_1)} (x_6 - x_5) + \frac{(-\Delta H)V}{\mathfrak{C}_1(x_1)} R_1 \\ -q_{l2}(s, t, x_2) \\ -2 \frac{V}{x_2} R_2 \\ \frac{dCp_g \rho_g}{\mathfrak{C}_2(x_2)} (x_5 - x_6) + \frac{(-\Delta H)V}{\mathfrak{C}_2(x_2)} R_2 \end{bmatrix} \quad (4d)$$

$$g(x, d) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \frac{(M_e - x_4)}{x_2} \\ \frac{Cp_l \rho_l}{\mathfrak{C}_2(x_2)} (T_e - x_6) \end{bmatrix} \quad (4e)$$

Habiendo definido G.R. 1, se aplicará un análisis a los dos CSTR del conjunto de tanques. Considerando que los tanques ocuparían la formación de la figura 4.5 en la columna empacada de absorción (siguiendo la numeración con base en la dirección del gas), los balances de energía para cada tanque son mostrados en las ecuaciones (4f) y (4g).

Ya que la temperatura es la propiedad del sistema que puedes ser medida, para el Tanque 1 la variable medible es la temperatura en ese tanque, $x_5 = T_1$, por lo tanto hay que derivarla una vez para ver si la variable de control, $u = q_{le}$, aparece explícitamente en dicha derivación. La ecuación 4.7 muestra esta prueba.

$$y = x_5 = T_1; \dot{y} = \dot{x}_5 = \frac{d_1 Cp_g \rho_g}{\mathfrak{C}_1(x_1)} (T_{ge} - x_5) + \frac{q_{l2}(s, t, x_2) Cp_l \rho_l}{\mathfrak{C}_1(x_1)} (x_6 - x_5) + \frac{(-\Delta H)V}{\mathfrak{C}_1(x_1)} R_1 \quad (4f)$$

Como puede apreciarse, este tanque no cumple la propiedad de G.R. 1 ya que en la derivada de la temperatura de ese tanque **no aparece la entrada de control (q_{le})**.

Para el Tanque 2 la ecuación (4g) muestra el análisis para ese CSTR.

$$y = x_6 = T_2; \quad \dot{y} = \dot{x}_6 = \frac{d_1 c_p \rho_g \rho_g}{\mathfrak{C}_2(x_2)} (x_5 - x_6) + \frac{u c_p \rho_l \rho_l}{\mathfrak{C}_2(x_2)} (T_{1e} - x_6) + \frac{(-\Delta H)V}{\mathfrak{C}_2(x_2)} R_2 \quad (4g)$$

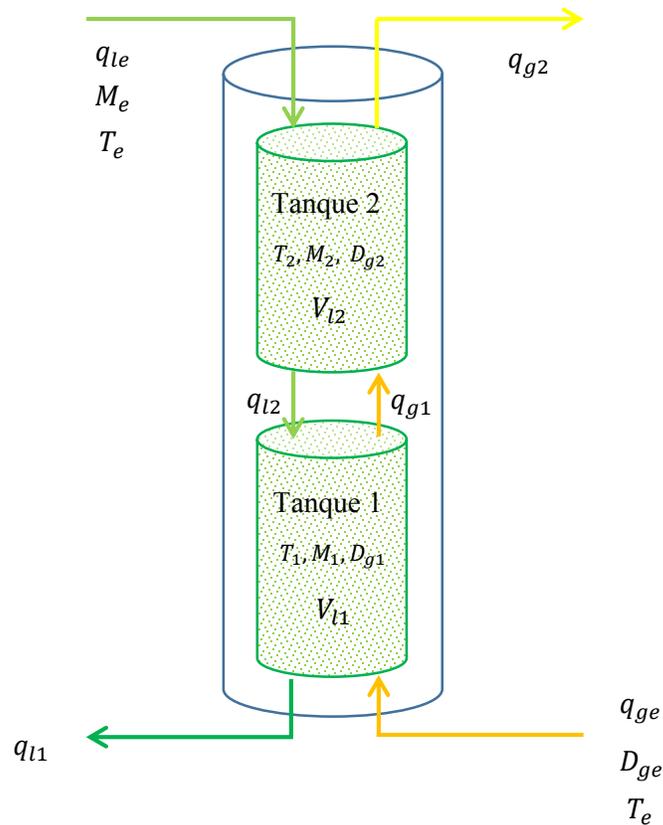


Figura 4.5. Distribución espacial de los CSTR en la columna empacada de absorción.

El Tanque 2 posee la propiedad de G.R. 1 ya que la variable de control, q_{1e} , está contenida en la expresión de la derivada de la salida medible, es decir, en el balance energético para este tanque. Por lo tanto, el Tanque 2 es el candidato para colocar el sensor de temperatura. Por otro lado, para garantizar que este tanque (o sección de la columna empacada de absorción) tenga G.R. 1 es necesario que se cumplan las condiciones de resolubilidad:

$$T_2 \neq T_{1e}$$

$$\mathfrak{C}_2(V_l) = \rho_g c_p \rho_g V_{g2} + \rho_l c_p \rho_l V_{l2} + \rho_s c_p \rho_s V_s > 0$$

Ya que si esto no se cumple:

- el término convectivo de la ecuación (4.2) desaparece $\left(\frac{q_{le}}{\mathfrak{C}_2(V_{l2})}(T_{le} - T_{l2}) = 0\right)$ o,
- se indetermina $\left(\frac{q_{le}}{\mathfrak{C}_2(V_{l2})}(T_{le} - T_2) \rightarrow \infty \therefore T_2 \rightarrow \infty\right)$

respectivamente y la variable de control no aparecería explícitamente en la ecuación (4.g). Las condiciones de resolubilidad siempre son cumplidas ya que: i) en el Tanque 2 ocurre una reacción y por lo tanto la temperatura en ese tanque será mayor a la temperatura de alimentación del solvente y ii) el término $\mathfrak{C}_2(V_l)$ siempre será mayor a cero ya que es la suma de propiedades físicas.

Por lo tanto, para que el par de tanques tenga G.R.1, la salida que debe escogerse es la temperatura del Tanque 2, para que al derivar esta salida aparezca explícitamente la variable de control q_{le} .

4.3.1.2. Dinámica Cero (ZD)

La dinámica cero relacionada a una salida, y , resulta de fijar a la salida regulada, en este caso T , en su valor nominal y hacer nula la ecuación dinámica de dicha salida, es decir:

$$y = \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \bar{y} \therefore \dot{\bar{y}} = f_T(\mathbf{x}, \mathbf{d}, u) = 0 \quad (4h)$$

Al eliminarse la dinámica de la salida regulada por haber fijado esa variable en su valor nominal (de estado estacionario), un sistema de dimensión n se convierte en uno $n - 1$ -dimensional [9], es decir, que la variable regulada que se ha fijado puede ser sustituida directamente como un valor en las ecuaciones del sistema dependientes de ella. Además, de la ecuación dinámica nula puede ser despejada la variable de control, q_{le} , la cual debe ser sustituida en las ecuaciones dinámicas restantes en la que se encuentre ésta implícitamente.

Si este nuevo sistema reducido tiene como estado estacionario único y estable al punto de equilibrio que tenía el sistema n -dimensional, aunado a que el sistema cuenta con la propiedad de G.R.1, será pasivo en relación a la salida elegida.

Ya que se eligió a la temperatura del CSTR número dos por cumplir con la propiedad de G.R.1, se fija el valor de esta temperatura en su valor de estado estacionario y se sustituye el despeje del flujo de alimentación de MEA, q_{le} , en las ecuaciones dinámicas pertinentes para posteriormente

probar que los puntos de equilibrio de los CSTR alcancen los mismos valores que fueron obtenidos a partir de los análisis de estabilidad de las secciones anteriores.

El sistema n -dimensional para el caso de estudio está dado por el conjunto de ecuaciones (3e-p) visto en el capítulo anterior, mientras que el sistema $n - 1$ -dimensional está mostrado a continuación:

Tabla 4.3. Estabilidad del sistema $n - 1$ -dimensional con $\bar{T}_2 = \bar{x}_6$ y $q_{le} = u(x_3, x_4, x_5)$.

EE ($M_1, T_1, V_{l1}, M_2, V_{l2}$) con \bar{T}_2	(597.8,306.9,0.0029, 1882.2,0.0029)
Eigenvalores	[-0.003,-0.006,-0.01-0.004i,-0.01+0.004i,-0.1]
Condición local	Estable

Al fijar a $T_2 = x_6 = \bar{x}_6$ y hacerla nula $\dot{x}_6 = \dot{y} = 0$, el sistema $n - 1$ -dimensional es

$$\dot{x}_1 = q_{l2}(s, t, x_2) - q_{l1}(s, t, x_1) \quad (4i)$$

$$\dot{x}_3 = \frac{q_{l2}(s, t, x_2)}{x_1} (M_e - x_4) - 2 \frac{V_1}{x_1} R_1 \quad (4j)$$

$$\dot{x}_5 = \frac{d_1 \rho_g c_{pg}}{\mathcal{C}_1(x_1)} (d_4 - x_5) + \frac{q_{l2}(s, t, x_2) \rho_l c_{pl}}{\mathcal{C}_1(x_1)} (\bar{x}_6 - x_5) + \frac{(-\Delta H) V_1 R_1}{\mathcal{C}_1(x_1)} \quad (4k)$$

$$\dot{x}_2 = u - q_{l2}(s, t, x_2) \quad (4l)$$

$$\dot{x}_4 = \frac{u}{x_2} (M_e - x_4) - 2 \frac{V_2}{x_2} \bar{R}_2 \quad (4m)$$

$$C_{g1} = \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V}{d_1} k_{abs1}(x_3, x_5)} \quad (4n)$$

$$z = C_{g2} = \frac{C_{ge}}{\left(1 + \frac{V_1}{d_1} f_{kabs1}(x_3, x_5)\right) \left(1 + \frac{V_2}{d_1} f_{kabs2}(x_4, \bar{x}_6)\right)} \quad (4o)$$

$$u(x_3, x_4, x_5) = q_{le} = - \left[\frac{dC_{pg}\rho_g}{C_{pl}\rho_l} \frac{(x_5 - \bar{x}_6)}{(d_5 - \bar{x}_6)} + \frac{(-\Delta H)Vf_{R2}(x_4, \bar{x}_6)}{C_{pl}\rho_l(d_5 - \bar{x}_6)} \right] \quad (4p)$$

Con $\frac{(-\Delta H)Vf_{R_2}(x_4, \bar{x}_6)}{c_{p_l}\rho_l(d_5 - \bar{x}_6)} \neq 0$ y $\frac{(-\Delta H)Vf_{R_2}(x_4, \bar{x}_6)}{c_{p_l}\rho_l(d_5 - \bar{x}_6)} \neq \frac{dc_{p_g}\rho_g(x_5 - \bar{x}_6)}{c_{p_l}\rho_l(d_5 - \bar{x}_6)}$ para que el problema de control tenga solución.

En donde $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6$ son el volumen del líquido en el Tanque 1, el volumen del líquido en el Tanque 2, la concentración de MEA en el Tanque 1, la concentración de MEA en el Tanque 2, la temperatura en el Tanque 1 y la temperatura en el Tanque 2 respectivamente; $y = x_6$ es la variable medible, o sea, la temperatura del Tanque 2; z es la concentración de CO₂ a la salida de la columna; u es el flujo de alimentación de MEA y d_1, d_2, d_3, d_4, d_5 son la entrada de flujo de alimentación de gas, concentración a la entrada de CO₂, concentración de entrada de MEA, temperatura de entrada del gas y temperatura de entrada del líquido respectivamente, aunque para el caso del problema de control sólo se perturbará a d_1 .

Con la herramienta numérica Solver® de Excel se determinó que el sistema cuenta con dinámica cero ya que los estados estacionarios resultantes de fijar a la temperatura del Tanque 2 (y hacer nula a la dinámica de esta temperatura) fueron los mismos que se obtuvieron al resolver el sistema n -dimensional. La tabla 4.3 resume estos resultados y muestra que el sistema $n - 1$ -dimensional es estable lo cual también fue verificado gráficamente (ver figuras 4.6 y 4.7)

Los perfiles y evoluciones obtenidas para temperatura y concentración después de haber fijado la temperatura del Tanque 2 son los mostrados en la figuras 4.6 y 4.7. Como puede apreciarse, los tanques alcanzan el mismo estado estacionario, después de haber aplicado el análisis de ZD, que al que llegan a lazo abierto como un sistema n -dimensional, recalando que independientemente de si se está estudiando el sistema completo o el sistema reducido en una ecuación, en ambos casos alcanzan el estado estacionario dentro de un tiempo aproximado de 28 min (como fue mencionado anteriormente).

Después de estos análisis, escogiendo a la temperatura del Tanque 2 como la salida regulada por cumplir con la propiedad de G.R.1, el par de CSTR es pasivo.

4.4. Conclusiones

En este capítulo se pudo encontrar que el sistema que se está estudiando, como las pruebas de bifurcación y las curvas de ignición-extinción lo indican, cuenta con un solo estado estacionario el cual **es asintóticamente estable** ya que los eigenvalores[23,24] obtenidos de la prueba del primer

método de Lyapunov son negativos. De acuerdo a criterios de Pasividad (Dinámica Cero y Grado Relativo 1), se encontró que **el sistema es resoluble y controlable** si la variable medible, y , es la temperatura del Tanque 2, x_6 , ya que al derivar esta una vez aparece de manera explícita la variable de control $u = q_{le}$, y además si:

$$T_2 \neq T_{le}$$

$$\mathfrak{C}_2(V_l) = \rho_g C p_g V_{g_2} + \rho_l C p_l V_{l_2} + \rho_s C p_s V_s > 0$$

Las condiciones de resolubilidad siempre son cumplidas ya que: i) en el Tanque 2 ocurre una reacción y por lo tanto la temperatura en ese tanque será mayor a la temperatura de alimentación del solvente y ii) el término $\mathfrak{C}_2(V_l)$ siempre será mayor a cero ya que es la suma de propiedades físicas.

En el siguiente capítulo se obtendrá el control para la columna empacada de absorción, el cual será concebido y sintonizado con base en el Control accionado por Retroalimentación de Estados (CRE) y en la identidad matemática del PI, es decir, se obtendrá un Control accionado por Retroalimentación de Salidas (Control más Observador), CRS, quien además muestra el vínculo existente entre la teoría y la práctica con los controles PI convencionales.

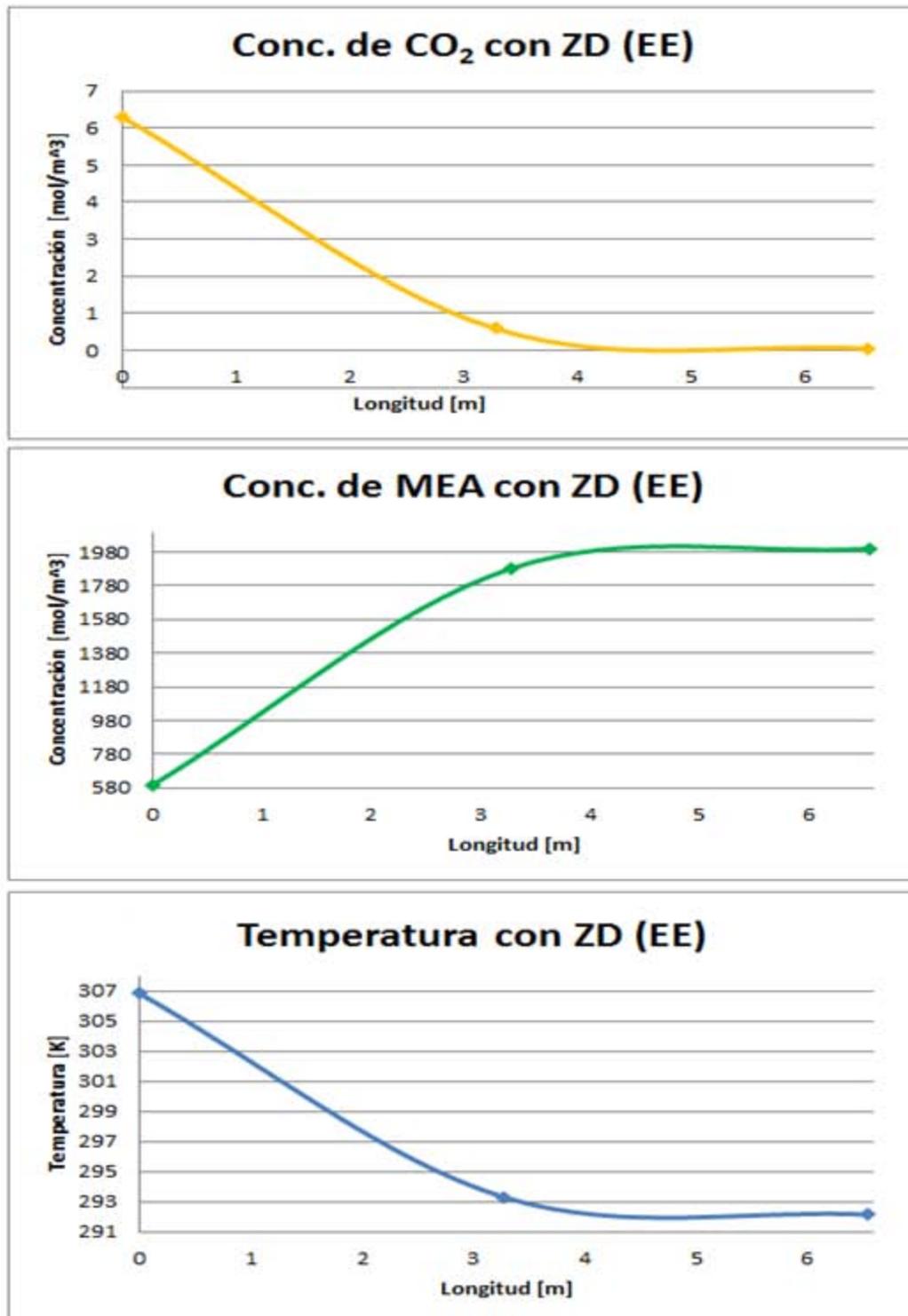


Figura 4.6. Perfil de concentraciones y temperatura en estado estacionario en la columna empacada de absorción después de aplicar el análisis de ZD.

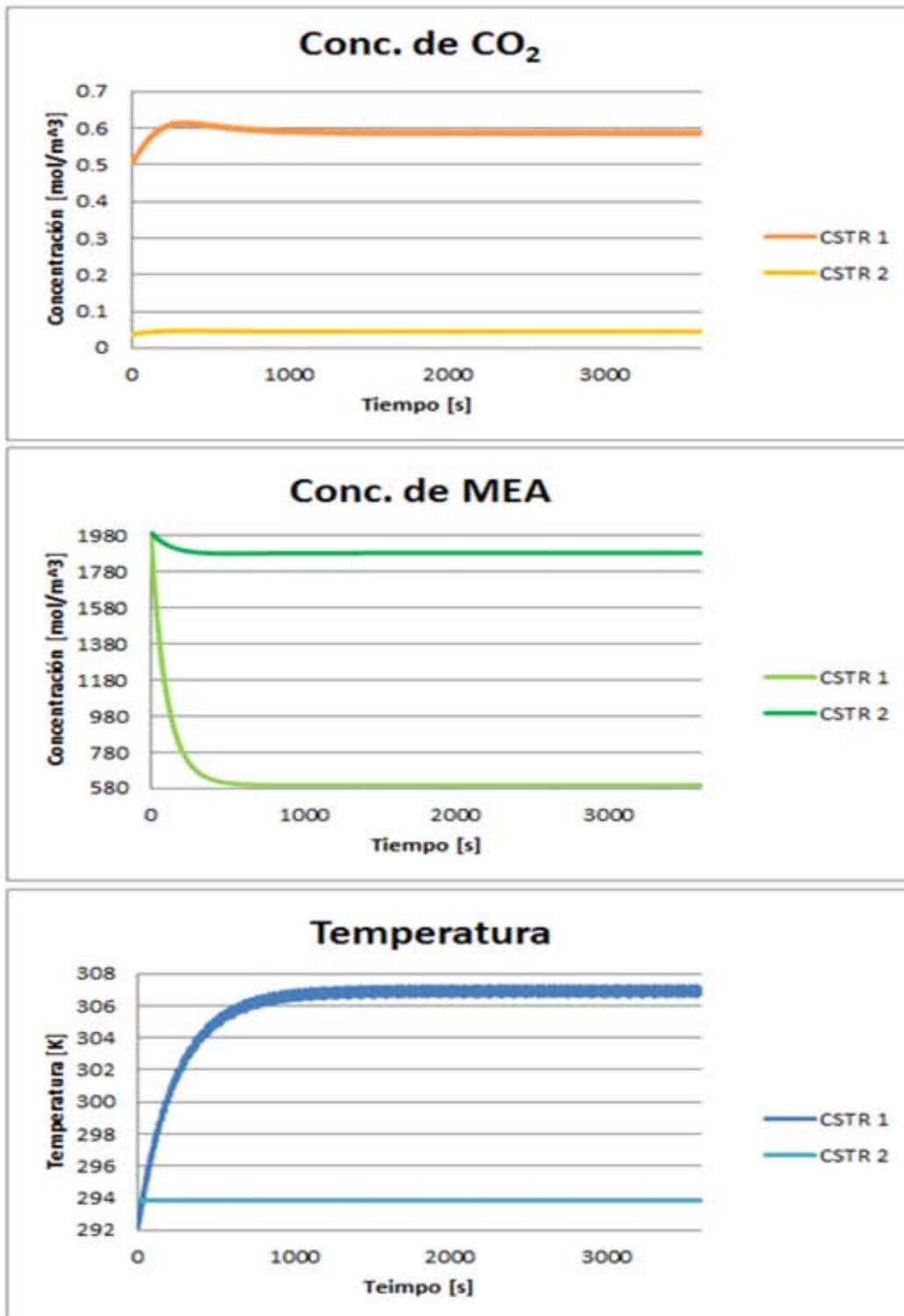


Figura 4.7. Evoluciones temporales de concentraciones y temperaturas de la ZD asociada a la regulación de la temperatura del Tanque 2.

Capítulo 5. Control estabilizante de temperatura para la columna de absorción

En este capítulo se propone la ubicación del sensor de temperatura para el controlador con base en los criterios establecidos en el Capítulo 4 que hacen que el sistema sea pasivo. Como paso siguiente, se somete el modelo a un análisis de respuesta para observar la dinámica y comportamiento del sistema a lazo abierto ante una perturbación tipo escalón en el flujo de alimentación de gas. Posteriormente, se construyen dos controladores para este sistema: 1) El control por retroalimentación de estados (feed-forward state feed-back, control ideal no lineal) y 2) El control por retroalimentación de salidas (control lineal, propuesto). Después, el sistema, a lazo cerrado, es sometido a perturbaciones tipo escalón en el flujo de alimentación de gas para comprar su desempeño (tiempo de asentamiento y reducción de sesgo en concentración de CO_2 a la salida) ante un punto de ajuste establecido para concentración de CO_2 , con las respuestas obtenidas lazo abierto y, a su vez, comparar el desempeño de dichos controladores con un control PI convencional.

5.1. Criterios de ubicación del sensor de temperatura en la columna empacada de absorción

En esta sección se determina la ubicación (con base en criterios físicos y de pasividad) que debe ocupar el sensor de temperatura para que el problema de control pueda ser resuelto.

La representación de la columna empacada de absorción como dos CSTR en serie ayudó a simplificar el modelo que la describe de un sistema de EDP a uno de EDO. Con base en este modelo se hicieron estudios de G.R.1 y ZD para determinar cuál de los tanques hacía pasivo al par de CSTR. El resultado de este estudio fue que el conjunto sería pasivo (y por ende resoluble el problema de control) si se controlaba el Tanque 2 en relación a sus mediciones de temperatura, lo cual es posible sólo si las temperaturas de cada fase son iguales entre sí como lo fue en este caso.

Ya que la partición volumétrica de los tanques fue uniforme, al menos un sensor de temperaturas debe ser colocado en la parte superior de la columna, es decir, en la mitad superior de la misma, antes de que la rapidez de reacción total presente un cambio de pendiente pronunciado, es decir, en una zona cercana a la mitad de la columna ya que, cómo se comentó anteriormente, esta zona pertenece al Tanque 2 el cual, según los criterios de Grado Relativo 1 y Dinámico Cero, hacen pasivo al conjunto de tanques.

Resumiendo, el sensor de temperaturas que enviará señales al controlador deberá ser situado en la zona superior lo más cercanamente posible a la mitad de la columna empacada, en dónde el cambio en la pendiente del perfil (isotónico [9]) de temperatura (ver figura 5.1) es más evidente.

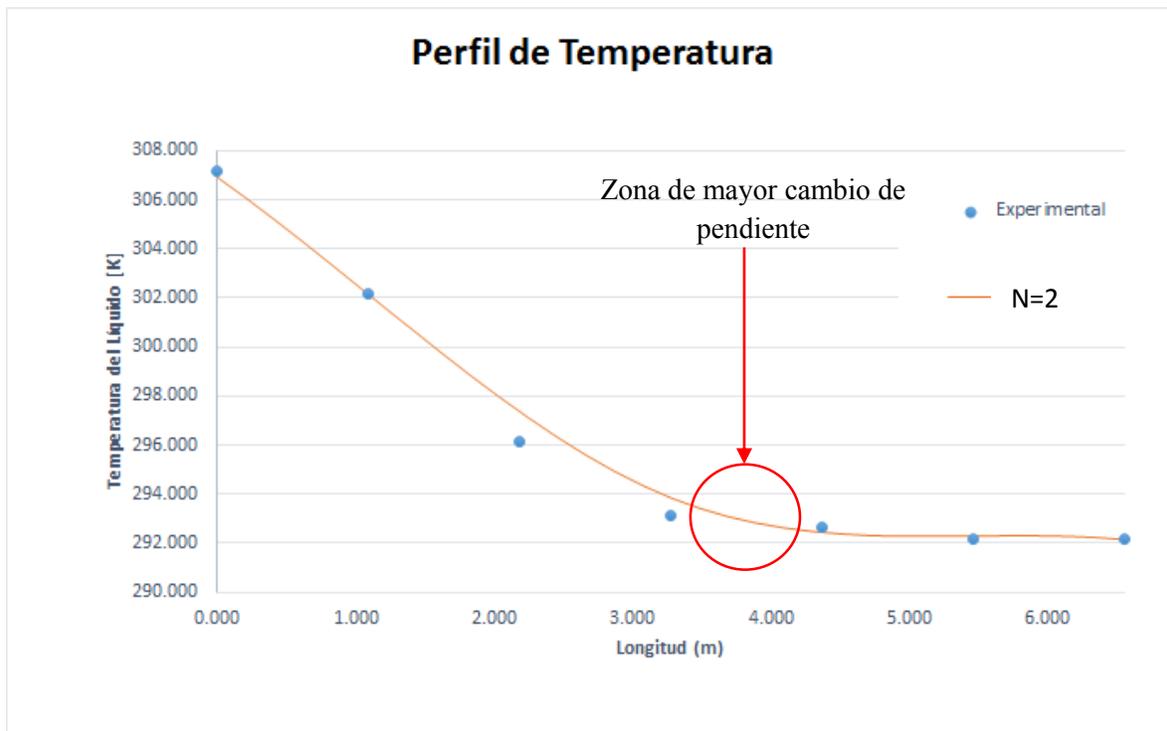


Figura 5.1. Perfil (isotónico) de temperatura en la columna empacada de absorción.

5.2. Comportamiento a lazo abierto ante perturbaciones en el flujo de alimentación de gas

En esta sección se muestra el efecto que tiene una perturbación tipo escalón en el flujo de alimentación de gas sobre el sistema a lazo abierto. Esto, con el propósito de conocer la dinámica del sistema y saber que tan sensible es este a dichas perturbaciones, con lo cual se puede tener un criterio de comparación al momento de implementar los controladores a la columna (lazo cerrado).

Como se mencionó en el Capítulo 3, según Paitoon, el tiempo en que la columna alcanza el estado estacionario (temperatura constante) después de suministrar el gas con el contaminante al sistema es de alrededor de 30 minutos. Para hacer el estudio dinámico de la representación de la columna como dos CSTR, se le suministró una perturbación del tipo escalón como la ecuación (5a), ya que al simular este tipo de perturbación se mostró un mayor impacto en el desempeño de la columna, lo cual será mostrado más adelante.

$$q_{ge,pert} = q_{ge} + Amp * q_{ge}; Amp \in [0.1 - 0.3] \quad (5a)$$

En la figura 5.2 se muestra los resultados obtenidos para al sistema a lazo abierto sometido a la perturbación de la ecuación (5a) en el tiempo $t = 100 s$ desde el estado estacionario. Como puede ser apreciado, repercute de manera significativa en la operación a lazo abierto del sistema ya que, como se nota en la figura antes mencionada, aunque el sistema tiene un tiempo de asentamiento de 30 minutos aproximadamente (similar al que se necesita para llegar al estado estacionario en ausencia de perturbación), se alcanza un nuevo estado estacionario el cual se desvía de manera significativa de los valores deseados de las variables, lo cual puede ser observado en la tabla 5.1

Tabla 5.1. Desviaciones del EE por una perturbación en escalón el flujo de gas del 10%.

Variable	EE Original		EE Nuevo		Desviación		%	
	CSTR1	CSTR2	CSTR1	CSTR2	CSTR1	CSTR2	CSTR1	CSTR2
Volumen [L]	2.9	2.9	2.9	2.9	-	-	-	-
Temperatura [K]	306.9	293.8	308.3	294.3	1.4	0.5	0.47	0.16
Cocn. MEA [$\frac{mol}{m^3}$]	597.8	1882.2	460.6	1849.3	137.2	32.9	23	1.75
Conc. CO ₂ [$\frac{mol}{m^3}$]	0.587	0.045	0.688	0.057	0.101	0.012	17.2	27.6

Aunque el sistema es estable a lazo abierto y la dinámica del líquido hace que llegue a un solo estado estacionario, es necesario diseñar un control que ayude a mitigar o nulificar el efecto de las perturbaciones antes mencionadas en el sistema para permanecer, o en su defecto, operar en las cercanías del estado estacionario de referencia. La tabla 5.2 muestra las desviaciones del estado estacionario original cuando una perturbación del diez por ciento más en la concentración de CO₂ de entrada es suministrada al sistema en $t = 100$ s y además muestra que el Tanque 1 es más sensible también a dicha perturbación.

Tabla 5.2. Desviaciones del EE por una perturbación en escalón en la concentración de CO₂ de entrada del 10%.

Variable	EE Original		EE Nuevo		Desviación		%	
	CSTR1	CSTR2	CSTR1	CSTR2	CSTR1	CSTR2	CSTR1	CSTR2
Volumen [L]	2.9	2.9	2.9	2.9	-	-	-	-
Temperatura [K]	306.9	293.8	308.4	294.1	1.5	0.3	0.5	0.1
Cocn. MEA [$\frac{mol}{m^3}$]	597.8	1882.2	458.5	1860.5	139.3	21.7	23.3	1.15
Conc. CO ₂ [$\frac{mol}{m^3}$]	0.587	0.045	0.688	0.057	0.101	0.012	17.2	27.3

Es importante mencionar que la respuesta del sistema a una perturbación escalón de 10% en la concentración de entrada de CO₂ es similar (topológicamente hablando) al mostrado en la figura 5.2.

En las secciones 5.3 y 5.4 se da una breve explicación del control ideal no lineal (CRE) y del control propuesto que se obtiene con base en este control y el cual es el resultado de esta tesis.

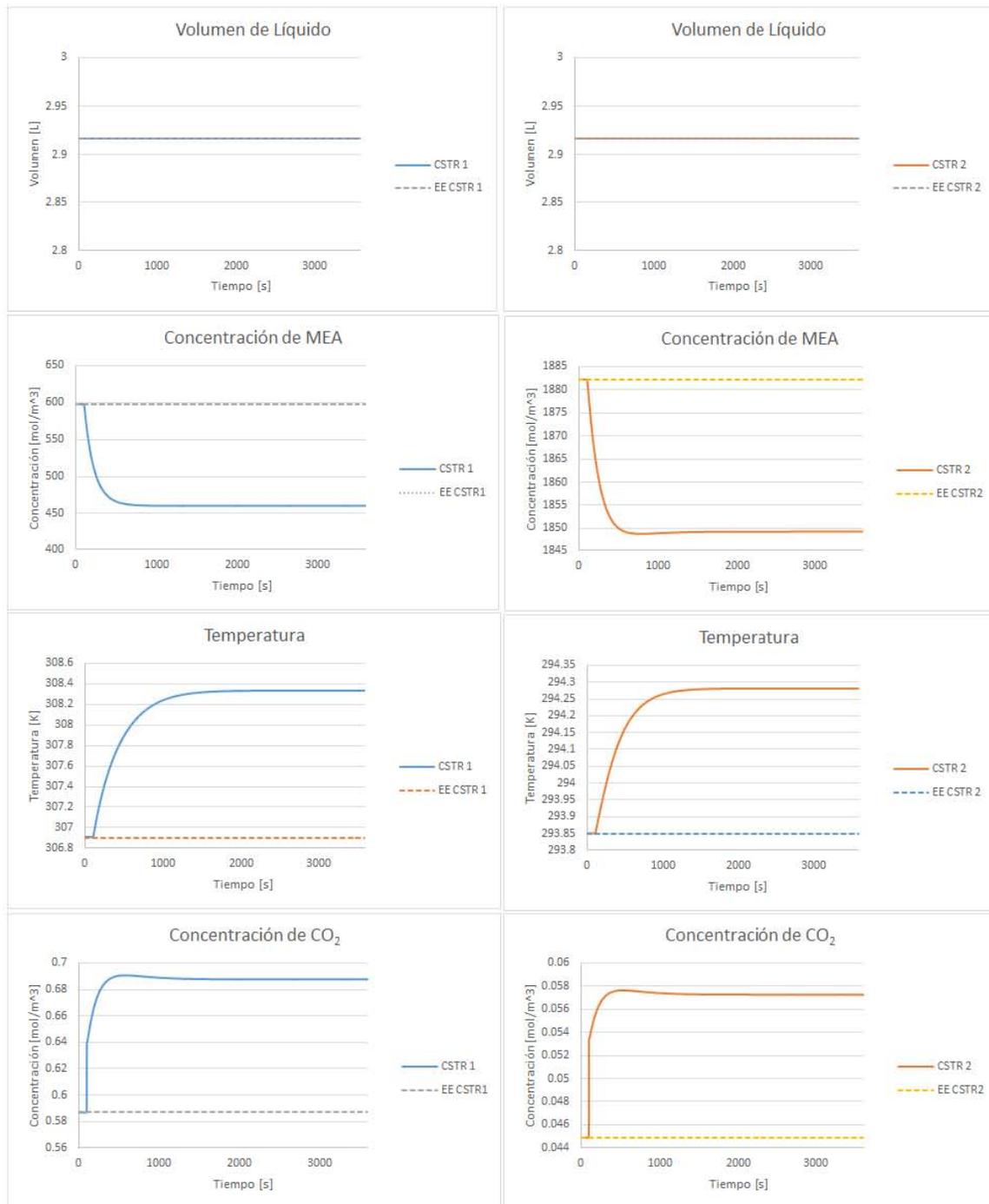


Figura 5.2. Respuesta a lazo abierto del sistema ante perturbación escalón en el flujo de entrada de gas de +10% en $t = 100$ s.

5.3. Control no lineal por retroalimentación de estados (CRE)

En esta sección se obtiene un control (con base en criterios de pasividad con respecto a la temperatura del Tanque 2) no lineal, ideal, fuertemente dependiente del modelo matemático (columna representada como dos CSTR) para mantener operando a la columna en o alrededor del estado estacionario deseado y para mitigar el efecto no deseado de dichas perturbaciones sobre la columna. Todo lo que se ha mostrado hasta ahora en los capítulos anteriores, y que ha sido tomado principalmente de las aportaciones del grupo de trabajo, es de utilidad para la construcción de este control no lineal accionado por retroalimentación de estados (CRE), el cual también es conocido como control de inventarios.

El CRE consta de una variable de control (q_{le}) que es el flujo de purificante, una variable medida y una variable regulada, que en este caso es la misma (T_2) (ver figura 5.3); mientras que su objetivo es el de garantizar que, incluso en presencia de perturbaciones al sistema (conocidas o no), las concentraciones y temperatura se mantengan a lo largo del tiempo en el estado estacionario establecido.

La dinámica del error de regulación (temperatura del segundo CSTR frente a un punto de operación establecido, $y = x_6 = T_2$), para esta representación, está definida como:

$$(\dot{y} - \dot{\bar{y}}) = -k_c(y - \bar{y}) \quad (5b)$$

En donde $\bar{y} = \bar{T}_2$ es la temperatura de operación deseada. La ecuación (5b) se impondrá, como será visto más adelante, al balance energético del Tanque 2.

Ya que \bar{T}_2 no cambia con el tiempo, entonces la ecuación (5b) queda:

$$\dot{T}_2 = \dot{y} = -k_c(y - \bar{y}) \quad (5c)$$

Para obtener la ley de control, ecuación (5d), se iguala la ecuación del balance energético del segundo CSTR (ecuación 3l) con (5c) y se hace álgebra.

$$u = q_{le} = \frac{-[k_c(y - \bar{y})f_{\mathcal{G}_2}(x_2) + d_1\rho_g C p_g(x_5 - y) + (-\Delta H)V_2 f_{R_2}(x_4, y)]}{\rho_l C p_l (T_{le} - y)} \quad (5d)$$

En dónde k_c es la ganancia del controlador y la cual será evaluada de acuerdo a las guías de sintonización mostradas la sección 5.4.

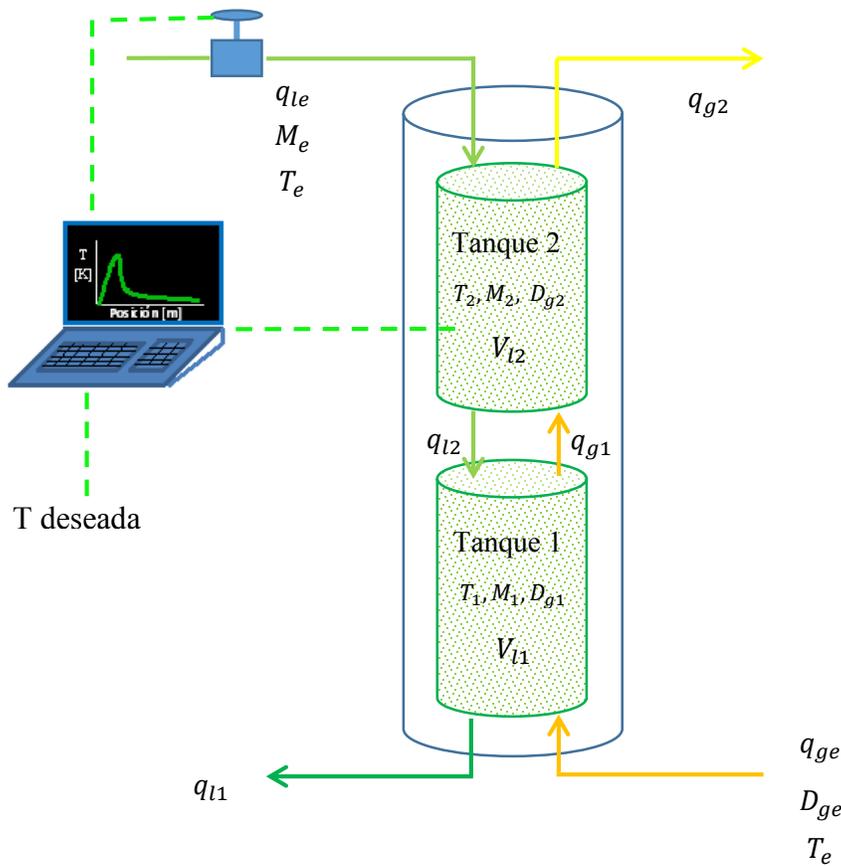


Figura 5.3. Esquema de lazo de control para la representación de la columna empacada de absorción como 2 CSTR en serie.

Cuando se implementa este control al sistema (lazo cerrado), las concentraciones y la temperatura de ambos tanques llegan al estado estacionario (en ausencia de perturbaciones) mostrado en el Capítulo 4 y esto es debido a que el control ideal no lineal está constituido de dos partes principalmente: una parte de prealimentación (o parte feed-forward, en inglés), que corresponde precisamente a los términos del balance energético (mostrado en la ecuación 31) presentes en la ecuación (5d), que hace que el controlador se “anticipe” a las perturbaciones que están por entrar al sistemas y; una parte de retroalimentación (o parte feed-back, en inglés), que corresponde a la dinámica del error, la cual hace, precisamente, una comparación entre la lectura que obtiene del tanque en cuestión con la temperatura que previamente se haya fijado como punto de ajuste, en este caso la correspondiente al estado estacionario deseado. Para aclarar este punto se muestra a continuación la ecuación (5.4) con su parte de prealimentación en azul y su parte de retroalimentación en rojo.

$$u = q_{le} = \frac{-[k_c(y - \bar{y})f_{\mathbb{C}_2}(x_2) + d_1\rho_g C p_g(x_5 - y) + (-\Delta H)V_2 f_{R_2}(x_4, y)]}{\rho_l C p_l (T_{le} - y)}$$

Es importante mencionar que para los controladores expuestos en esta tesis (CRE, CRS y PI industrial), la saturación de los mismo está considerado en el intervalo de $0 < q_{le} < 2q_{le}$.

Utilizando las guías de sintonización de la sección 5.4 (tomadas de la tesis de maestría de Nájera [9]) se encontró que la ganancia proporcional que mantiene estable al sistema debe ser cinco veces el inverso del tiempo de residencia del líquido (en estado estacionario) es decir,

$$k_c = 5 \frac{q_{le}}{V_{l2}} \approx 0.05 \text{ s}^{-1}$$

5.4. Control por Retroalimentación de Salidas (CRS)

En esta sección se obtiene un control lineal, para temperaturas, con base en criterios de pasividad previamente comentados, el cual presenta una menor dependencia en el modelo matemático de la columna empacada de absorción como dos CSTR en serie. El objetivo de este control, al igual que el del anterior, es mitigar los efectos no deseados de la perturbación en el flujo de entrada de gas a la columna y mantener en el punto deseado la concentración de CO₂ efluente.

En la práctica, la medición de concentraciones en tiempo real no se lleva a cabo principalmente porque es una actividad muy complicada que, para poderse realizar, se necesitan dispositivos sofisticados de alto costo. Por lo tanto, un control de tipo inventarios como el mostrado en la sección 5.3 es poco probable que pueda ser usado en la vida real, es decir, su dependencia con un modelo detallado, con una cinética de reacción altamente conocida y con la necesidad de lecturas de concentración en línea (entre otros) dificulta y en muchos casos imposibilita su implementación. La medición de temperatura (en tiempo real) es sencillo y común, por lo tanto, es necesario recuperar el comportamiento del CRE, que está apoyando en un modelo detallado, con un CRS, que depende de un modelo simple y de mediciones de temperatura [9]. Al igual que el CRE que depende de la dinámica de los estados del sistema para llevar a cabo la acción de control, el CRS es un control estático que depende en este caso de la dinámica de su observador.

Tomando la idea y metodología mostradas en las tesis de maestría de Nájera [9], de doctorado de J. Díaz [22] y de los trabajos de J. Álvarez-Ramírez y J. Álvarez (entre otros) [12] y aplicándolos

a esta tesis, se construye un Control por Retroalimentación de Salidas (CRS) con base en los mismos criterios de pasividad que para el control del modelo exacto (CRE).

Ya que este tipo de controles se basa en acoplar un observador de orden reducido con un control ideal, se busca que ahora la dinámica de la temperatura del CSTR a controlar (para este caso Tanque 2) sea de la forma de la ecuación (5e):

$$\dot{y} = T_2 = b_2 + au; \quad y = T_2; \quad b_2 = \zeta_2(\mathbf{x}, u, \mathbf{d}) \quad (5e)$$

En donde a es una aproximación de la diferencia de la temperatura de entrada del líquido purificante y la temperatura del Tanque 2, multiplicado por la densidad y la capacidad calorífica del líquido dividido entre el término de capacitancia térmica, \mathfrak{C}_2 (definido en el Apéndice E, ecuación e.9), del Tanque 2 (tomados en estado estacionario como primera aproximación), es decir:

$$a = \frac{\rho_l C_{pl}}{\mathfrak{C}_2} (T_{le} - \bar{x}_6) \quad (5f)$$

Por otro lado, b_2 es una entrada exógena no medible (observable) que depende de ζ_2 la cual está definida como:

$$\zeta_2 = \frac{d_1 \rho_g C_{pg}}{f_{\mathfrak{C}_2}(x_2)} (x_5 - x_6) + \left[\frac{\rho_l C_{pl}}{f_{\mathfrak{C}_2}(x_2)} (T_{le} - x_6) - \frac{\rho_l C_{pl}}{f_{\mathfrak{C}_2}(x_2)} (T_{le} - \bar{x}_6) \right] u + \frac{(-\Delta H)}{f_{\mathfrak{C}_2}(x_2)} V_2 f_{R_2}(x_4, x_6) \quad (5g)$$

Cabe resaltar que si se sustituyen a las ecuaciones (5f) y (5g) en la ecuación (5e) se obtiene la ecuación dinámica original para la temperatura en el segundo CSTR del conjunto, por lo tanto, se cumple el G.R. 1 al igual que para la dinámica de temperatura del segundo tanque del modelo detallado. De la misma forma que para la ecuación dinámica original de la temperatura para el Tanque 2, en esta ecuación simplificada (ec. 5e), además de la entrada exógena b_2 que ya fue mencionada, se cuenta con una entrada de control $u = q_{le}$ y una variable medible, $y = x_6 = T_2$, que para esta representación en particular es la misma que la variable regulada z (para ambos casos T_2).

Al igual que para el CRE, se requiere que la dinámica del error de regulación siga la forma de la ecuación (5b). Por lo tanto, al igualar (5b) con la ecuación (5e) se obtiene la ley de control con base en este modelo simplificado.

$$u = q_{le} = \frac{-[k_c(y - \bar{y}) + b_2]}{a} \quad (5h)$$

$$b_2 = \zeta_2(\mathbf{x}, u, \mathbf{d}) = \frac{d_1 \rho_g C p_g}{\mathfrak{C}_2} (x_5 - x_6) + \left[\frac{\rho_l C p_l}{\mathfrak{C}_2} (T_{le} - x_6) - \frac{\rho_l C p_l}{\mathfrak{C}_2} (T_{le} - \bar{x}_6) \right] u + \frac{(-\Delta H)}{\mathfrak{C}_2} V_2 R_2 \quad (5i)$$

Es importante dejar claro que, nuevamente, si se sustituyen las ecuaciones (5f) y (5g) en las ecuaciones (5h-i) se obtiene la ley de control que se obtuvo en el modelo detallado.

Como b_2 está definido por la función mostrada en la ecuación (5g), la cual depende de la entrada de control y la temperatura medible, este parámetro puede ser estimado con un observador de orden reducido, cuyo error de estimación está definido cómo:

$$\widetilde{b}_2 = b_2 - \widehat{b}_2 \quad (5j)$$

En dónde \widehat{b}_2 es el estimado de b_2 . Al igual que para el caso de la dinámica del error de regulación, la dinámica del error de estimación está definido por:

$$\dot{\widetilde{b}}_2 = -\omega \widetilde{b}_2 \quad (5k)$$

En dónde $\dot{\widehat{b}}_2 = \dot{b}_2 - \dot{\widehat{b}}_2$ y ω es la ganancia del observador. De la ecuación (5e) puede despejarse b_2 , obteniéndose:

$$b_2 = \dot{T}_2 - a q_{le} \quad (5l)$$

De (5k), si $\dot{\widetilde{b}}_2 \approx 0$ (considerando que la dinámica del observador es mucho más rápida que la del sistema), y teniendo en cuenta a la ecuación (5l), se obtiene la expresión para la dinámica de la estimación de b_2 .

$$\dot{\widehat{b}}_2 = \omega [\dot{T}_2 - (a q_{le} + \widehat{b}_2)] \quad (5m)$$

O bien

$$\dot{\widehat{b}}_2 - \omega \dot{T}_2 = -\omega a q_{le} - \omega \widehat{b}_2 \quad (5n)$$

Sumando y restando $\omega^2 T_2$

$$\dot{\widehat{b}}_2 - \omega \dot{T}_2 = -\omega a q_{le} - \omega (\widehat{b}_2 - \omega T_2) - \omega^2 T_2 \quad (5o)$$

Tomando a $\chi_2 = \widehat{b}_2 - \omega T_2$ y realizando el cambio de variable en la ecuación (5o) se llega a la expresión del observador de orden reducido:

$$\dot{\chi}_2 = -\omega\chi_2 - \omega(aq_{le} + \omega T_2), \quad \chi_2(0) = \chi_{2_0} \quad (5p)$$

Despejando al estimado de b_2 de $\chi_2 = \widehat{b}_2 - \omega T_2$, y sustituyendo a b_2 por su estimado en la ecuación (5e) se obtiene la ley de control para regular la temperatura del Tanque 2.

$$u = q_{le} = \frac{-[k_c(T_2 - \overline{T}_2) + \chi_2 + \omega T_2]}{a}; \quad \dot{\chi}_2 = -\omega\chi_2 - \omega(aq_{le} + \omega T_2) \quad (5q-r)$$

En dónde k_c y ω son las ganancias del controlador y del observador respectivamente y las cuales son evaluadas siguiendo las guías de sintonización propuestas en los trabajos de J. Álvarez e I. Nájera, entre otros [9] [12] [27]. Por similitud de sistemas de estudio (ambos son sistemas de parámetros distribuidos y presentan reacción química, etc.), las siguientes guías son tomadas de la tesis de maestría de I. Nájera [9]:

- Fijar la ganancia del controlador en aproximadamente la tasa de dilución del sistema, es decir, $k_c \approx \frac{q_{le}}{V_l}$
- Fijar la ganancia del observador de 3 a 5 veces más rápida que la tasa de dilución del inverso del sistema $\omega \approx \beta \frac{q_{le}}{V_l}$; $\beta \in [3,5]$, dependiendo del ruido del instrumento de medición
- Incrementar, gradual y proporcionalmente, la ganancia del observador, ω , hasta un valor último, ω^* , en dónde la respuesta del controlador sea excesivamente oscilatoria. Dar marcha atrás y fijar el valor de la ganancia cómo: $\omega = \frac{\omega^*}{\alpha}$; $\alpha \in [2,3]$
- Sintonizar la ganancia del controlador, hacia arriba y hacia abajo, y seleccionar el valor que ofrezca la mejor respuesta.

Como fue mencionado con anterioridad, la sintonización de un PI industrial puede llevarse a cabo tomando como base los parámetros de este control CRS, ya que este tipo de esquema de control (Control con Observador) es una identidad matemática del control PI convencional. Las ecuaciones (5s-t) muestran los parámetros de sintonización de un control PI industrial en términos de los parámetros del CRS.

El control PI convencional está definido cómo:

$$u = K_p \left[e - \frac{1}{\tau} \int_0^t e \, d\xi \right]; \quad e = \bar{y} - y \quad (5s-t)$$

Por lo tanto, la relación de los parámetros de dicho controlador con los de un CRS se establece de la siguiente manera. La ganancia proporcional está definida como:

$$K_p = \frac{k_c + \omega}{a} \quad (5u)$$

Y el tiempo integral como:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\omega k_c}{k_c + \omega} \quad (5v)$$

En el trabajo de Nájera [9] se muestra la relación entre este control por retroalimentación de salidas con el PI industrial, con lo que se muestra el vínculo existente entre dichas expresiones y se explica por qué un control PI industrial presenta un buen desempeño en la vida cotidiana.

Al igual que para el CRE, las mediciones en la que se apoya el CRS son las provenientes del Tanque 2. Como este control se basa en un modelo más simple (sin dependencia en el modelo matemático ideal no lineal), se necesita de un observador que infiera las propiedades que utiliza el CRE, es por esto que el observador hace estimados de este mismo tanque como un conglomerado de datos, no por separado, es decir, manda un conjunto de estimados que incluyen a la velocidad de reacción, concentraciones, diferencias de temperaturas si fuera el caso, etc., todo en un solo parámetro y se lo alimenta al control.

A lazo cerrado y en ausencia de perturbaciones, el CRS no tiene efecto negativo sobre el desempeño de la columna empacada de absorción.

Finalmente, usando las guías de sintonización mostradas en al inicio de esta sección se obtuvieron los siguientes valores para las ganancias del controlador y del observador respectivamente:

$$k_c \approx 0.03 \text{ s}^{-1}; \quad \omega \approx 0.25 \text{ s}^{-1}$$

Cabe mencionar que el estado inicial de este controlador es $\chi_2(0) = \chi_{20} = 74.61 \left[\frac{K}{s} \right]$, el cual fue fijado sustituyendo los valores en estado estacionario de las variables del sistema que constituyen la expresión de χ_2 .

5.5. Desempeño de los controladores en el conjunto de CSTR ante perturbaciones en el flujo de alimentación de gas

Aunque existen diferentes maneras por las que la columna de absorción puede recibir perturbaciones, esta sección se somete al sistema a una perturbación tipo escalón en el flujo de alimentación de gas contaminante (perturbación más común y efecto sobre la columna más evidente) con el fin de comparar la dinámica del sistema a lazo cerrado (control implementado) y a lazo abierto (sin control), además de poder evaluar el desempeño de estos controles tomando como criterios de comparación tiempos de asentamiento y reducción del sesgo. Este estudio ayuda a visualizar el desempeño de los controladores ante dichas perturbaciones y su finalidad es demostrar que pueden mantener al sistema en el estado estacionario deseado o al menos en sus vecindades.

Para realizar este estudio, cómo ya fue mencionado, se sometió el modelo a la perturbación (grandes magnitudes, difícilmente reales, sólo para fines académicos) que corresponden a la ecuación (5a) es decir, una perturbación del tipo escalón definida como un incremento del 10% al 30% del flujo nominal de entrada (q_{ge}) o sea (retomando las ecuación 5a):

$$d_{1pert} = q_{ge,pert} = q_{ge} + Ampq_{ge}; Amp \in [0.1 - 0.3] \quad (5a)$$

Dicha perturbación fue introducida al sistema en $t = 100$ s desde el estado estacionario.

Con el fin de que las simulaciones reflejaran mejor la realidad ya que siempre existe ruido en las señales mandadas por los sensores, se consideró que existe este en la medición de temperatura, el cual sigue la forma de la ecuación (5v):

$$y = T_2 + a \text{ seno}(\omega t) \quad (5v)$$

En dónde a es la amplitud de la onda, en este caso un Kelvin y $\omega = 0.005s^{-1}$ es la frecuencia, en este caso el inverso del tiempo de residencia para la fase líquida.

5.5.1. Desempeño del CRE

El desempeño del CRE en esta prueba fue satisfactoria ya que mantiene a la temperatura del Tanque 2 en su estado estacionario deseado (controlado) después de la perturbación y por lo tanto la

concentración de MEA como de CO_2 también permanecen en las cercanías de su estado estacionario nominal correspondiente. Además, es importante señalar que, aunque regula a la variable leída y controlada (temperatura del Tanque 2) de manera prácticamente instantánea, estabiliza a las variables del Tanque 1 y a las concentraciones del Tanque 2 aproximadamente 1.5 veces más rápido, es decir, alcanzan el estado estacionario en un menor tiempo (tiempo de asentamiento) que el que requieren para hacerlo a lazo abierto. La figura 5.5a y 5.5b muestra la respuesta del control y el comportamiento de las concentraciones y temperatura en cada tanque ante una perturbación tipo escalón del +10% en el flujo de entrada de gas sin ruido en la medición y con ruido en la medición respectivamente.

Como puede observarse, el CRE mantiene en el valor del punto de ajuste, “set point”, la temperatura del Tanque 2, mientras que a las variables restantes las conserva cercanas a su valor nominal de estado estacionario en comparación con su respuesta a lazo abierto (LA) cuando hubo una perturbación del tipo escalón. La figura 5.5a (sin ruido en la medición), además, permite ver el efecto de la acción de control reflejado en las variables del sistema ya que se puede apreciar que al producirse la perturbación, la variable de control reacciona ante dicho estímulo y este repercute directamente en la respuesta de las variables del sistema. La tabla 5.3 muestra el porcentaje de desviación del estado estacionario original para los tres valores de la perturbación tipo escalón en el de flujo de gas de entrada. Como puede apreciarse, el margen de error es bajo, a excepción del correspondiente para la concentración de CO_2 , lo cual, como se mostrará más adelante, es un problema recurrente con todos los controladores basados en lecturas de temperatura que se usaron en este trabajo de tesis.

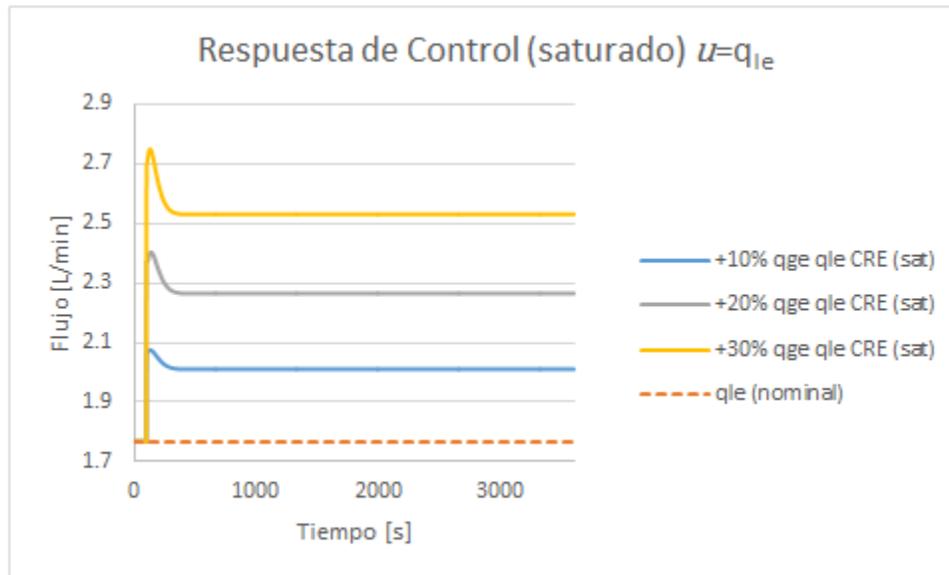


Figura 5.4. Respuesta de la variable de control (sin ruido en la medición de temperatura) con saturación a lazo cerrado y ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (CRE).

Tabla 5.3. Desviaciones del estado estacionario original para las variables del sistema ante perturbaciones del tipo escalón en el flujo de alimentación de gas de entrada.

Escalón	Desviación (%)						
	V_{11} y V_{12} [m ³]	M_1 [mol/m ³]	M_2 [mol/m ³]	T_1 [K]	T_2 [K]	C_{g1} [mol/m ³]	C_{g2} [mol/m ³]
10%	6.6	8	0.16	0.16	~0	6.9	16.8
20%	13.3	15.5	0.3	0.31	~0	13.7	34.6
30%	20.1	22.5	0.43	0.46	~0	20.6	53.5

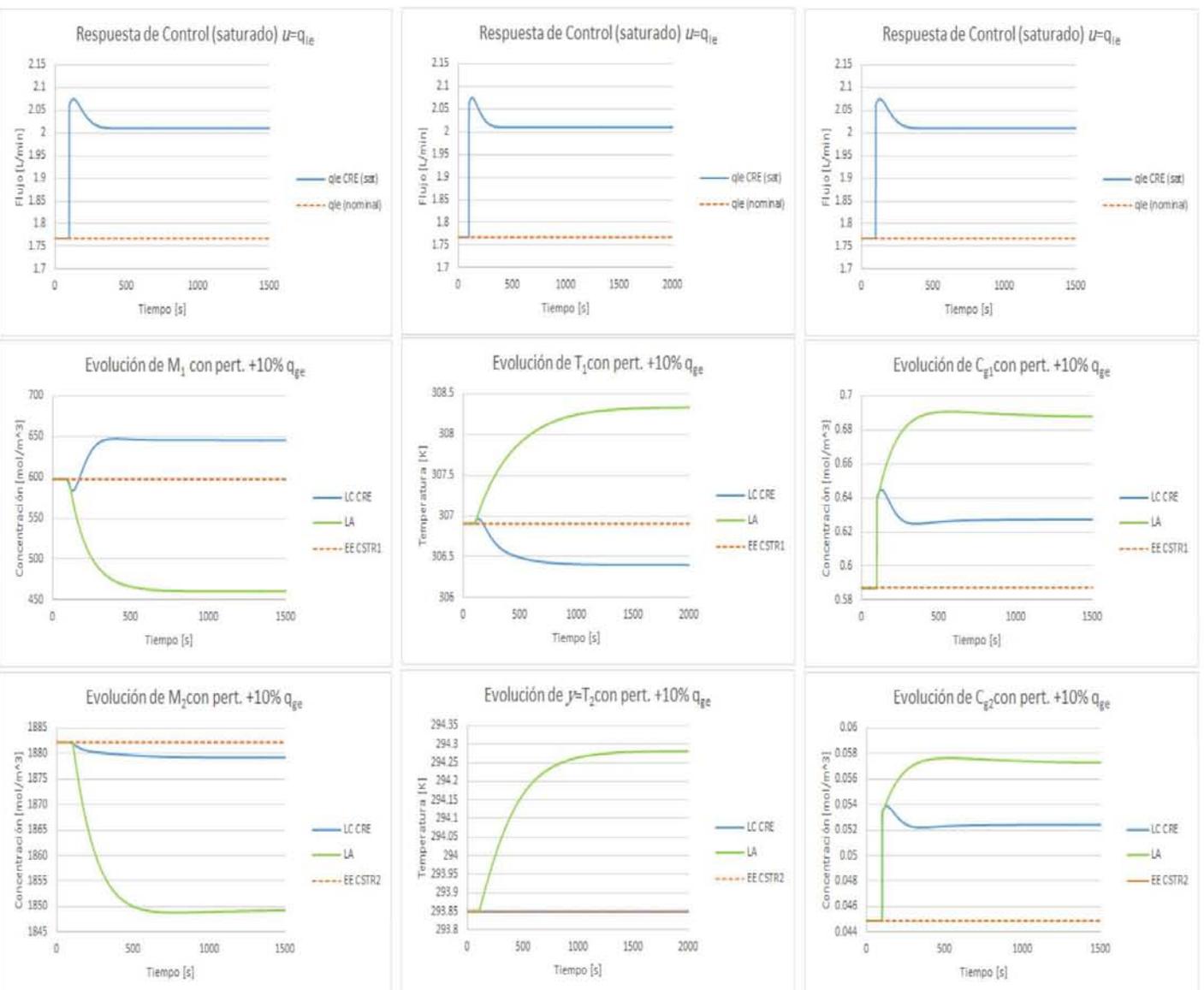


Figura 5.5a. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO_2 y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRE ($k_c \approx 0.05 \text{ s}^{-1}$) (sin ruido en T_2).

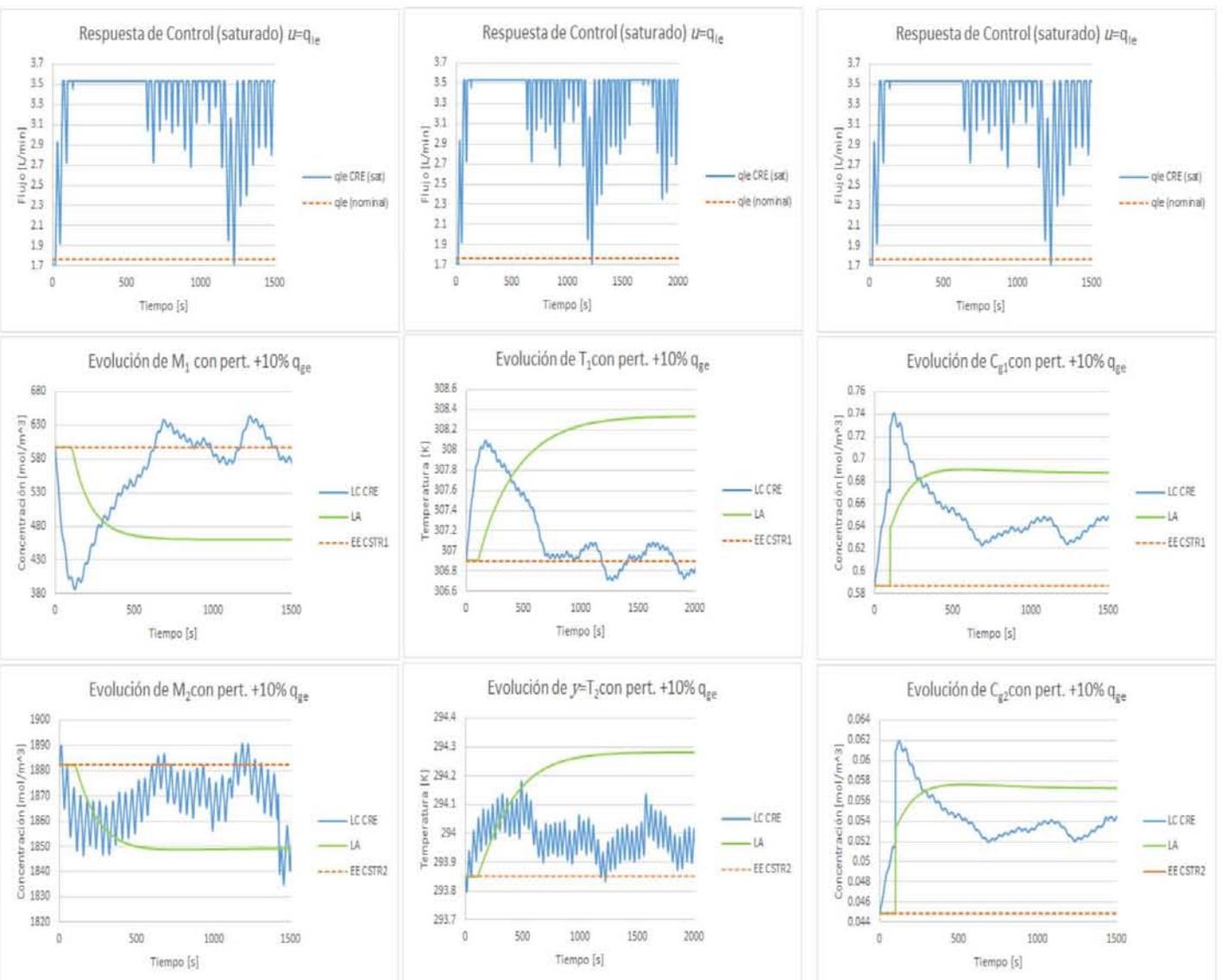


Figura 5.5b. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO_2 y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRE ($k_c \approx 0.05 \text{ s}^{-1}$) (con ruido en T_2).

Es importante mencionar que la acción de control que toma el CRE ante perturbaciones en escalón es más grande al aumentar el tamaño del escalón (mayor flujo de gas con CO₂), es decir, se necesitará un mayor flujo de alimentación de MEA para mitigar el efecto y mantener la temperatura del Tanque 2 en su punto de ajuste (“set point”).

La figura 5.4 muestra la evolución de la variable de control para perturbaciones en escalón en el flujo de alimentación de gas de 10%, 20% y 30% y las figuras 5.6a y 5.6b muestran la comparación entre lazo abierto y lazo cerrado ante las mismas perturbaciones con mediciones sin ruido y con ruido de la temperatura del Tanque 2, respectivamente, en donde nuevamente, al diferir la topología entre cada familia de gráficas debida al ruido en la medición de temperatura, mantiene controlado al sistema. Además es importante mencionar que la actuación del control difiere en presencia de ruido en el sensor de temperatura, pero a grandes rasgos mantiene operando a la columna empaca de absorción en las cercanías del estado estacionario deseado al mitigar el efecto de la perturbación en el flujo de gas de entrada.

Para finalizar, la tabla 5.4 muestra las desviaciones de las variables del sistema del estado estacionario original ante perturbaciones en escalón de la concentración de CO₂ de entrada.

Tabla 5.4. Desviaciones del estado estacionario original para las variables del sistema ante perturbaciones del tipo escalón en la concentración de entrada de CO₂.

Escalón	Desviación (%)						
	V ₁₁ y V ₁₂ [m ³]	M ₁ [mol/m ³]	M ₂ [mol/m ³]	T ₁ [K]	T ₂ [K]	C _{g1} [mol/m ³]	C _{g2} [mol/m ³]
10%	8.2	3.3	0.14	0.07	~0	11	11
20%	16.6	6.1	0.27	0.13	~0	22	22.1
30%	25.1	8.6	0.38	0.18	~0	33.1	33.3

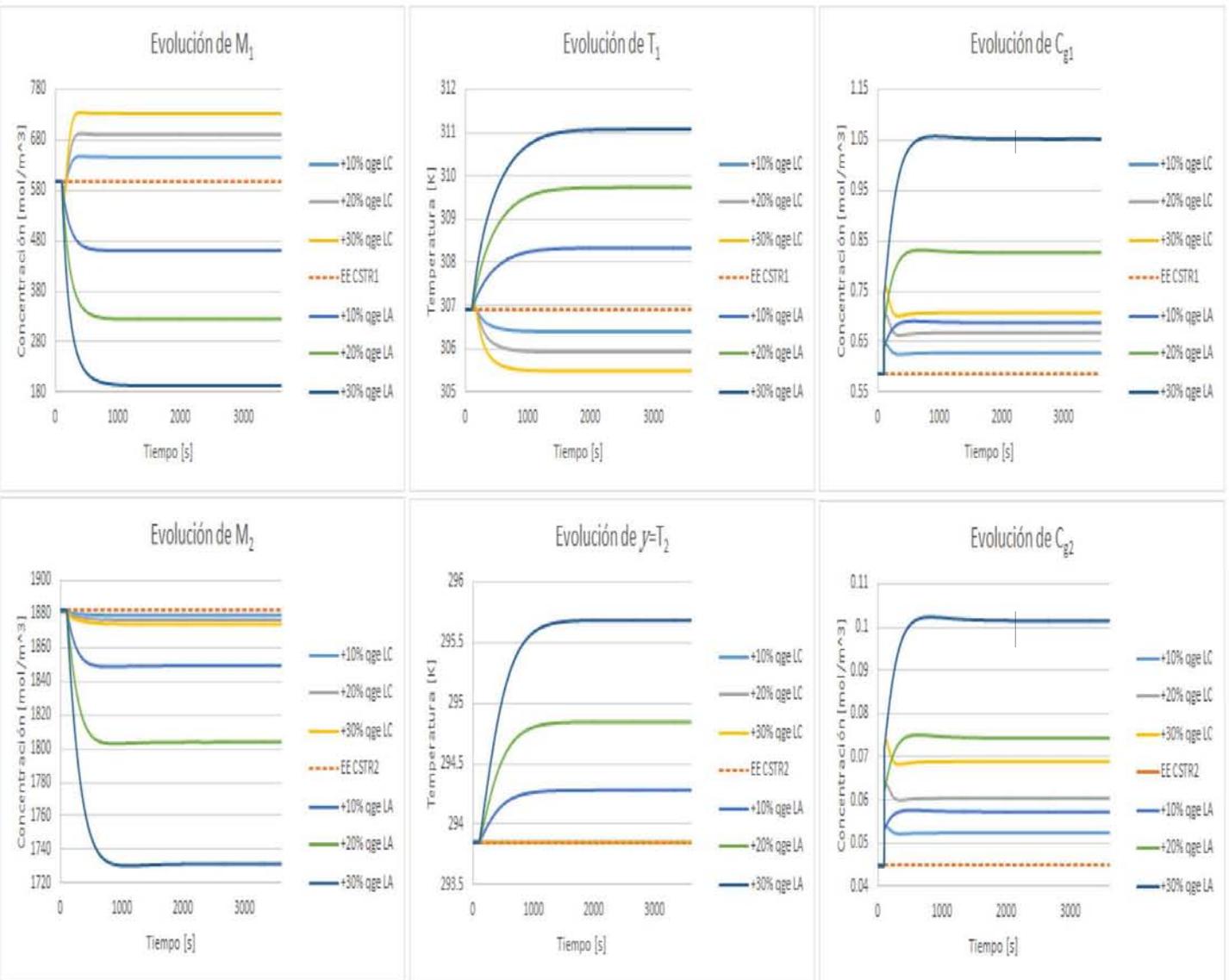
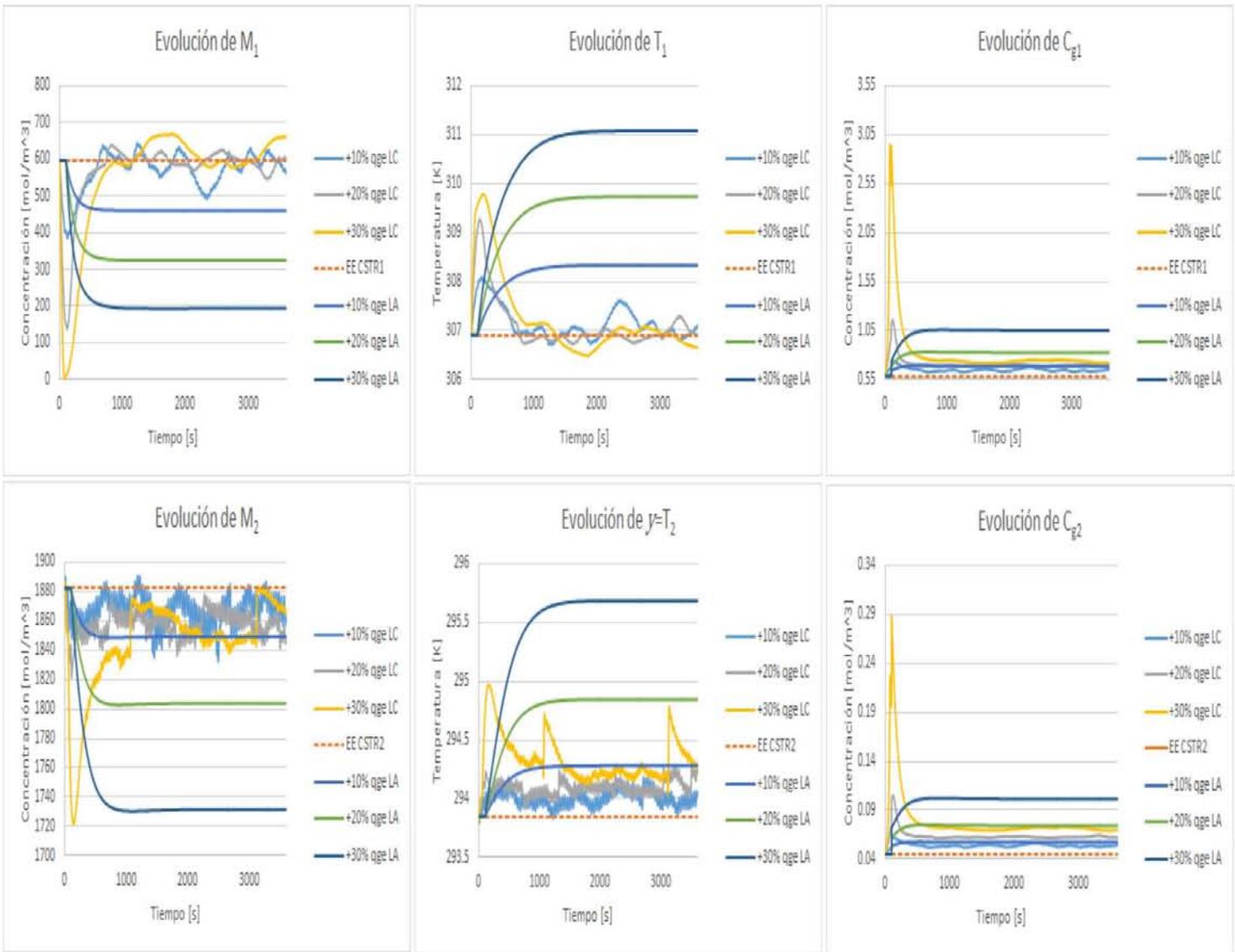


Figura 5.6a. Comparación de las respuestas del sistema a lazo cerrado (CRE) y a lazo abierto ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (sin ruido en la medición de T_2).

Figura 5.6b. Comparación de las respuestas del sistema a lazo cerrado (CRE) y a lazo abierto ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (con ruido en la medición de T_2).



5.5.2. Desempeño del CRS

Al igual que el CRE, el CRS logra controlar al sistema y lo lleva a las cercanías de su estado estacionario nominal con solo tomar mediciones de temperatura del Tanque 2, al existir una perturbación tipo escalón en el influente gaseoso. La figuras 5.7a y 5.7b muestran el comportamiento a lazo cerrado con este controlador de la evolución de las concentraciones y temperatura y de la respuesta de control ante la perturbación antes mencionada sin ruido en la medición de T2 y con ruido en la misma medición.

Al igual que para el caso del CRE, puede notarse en las figuras 5.7a y 5.7b que, a pesar de la diferencia en las topologías de cada familia de figuras debida a la existencia (o ausencia) de ruido en la señal del sensor de temperatura, el Tanque 2 queda controlado ya que la respuesta de la temperatura, al actuar el CRS, llegan al estado estacionario original (al que tienen sin perturbación), sin embargo, para la concentración de MEA en ambos tanques y la temperatura en el Tanque 1 los estados estacionarios alcanzados actuando el CRS se desvían poco en magnitud, dependiendo del tamaño del escalón, claro está, del estado estacionario deseado, mientras que la magnitud del sesgo del CO₂ en los tanques 1 y 2 es considerable (en proporción a su escala de medición) pero es menor al presentado a lazo abierto.

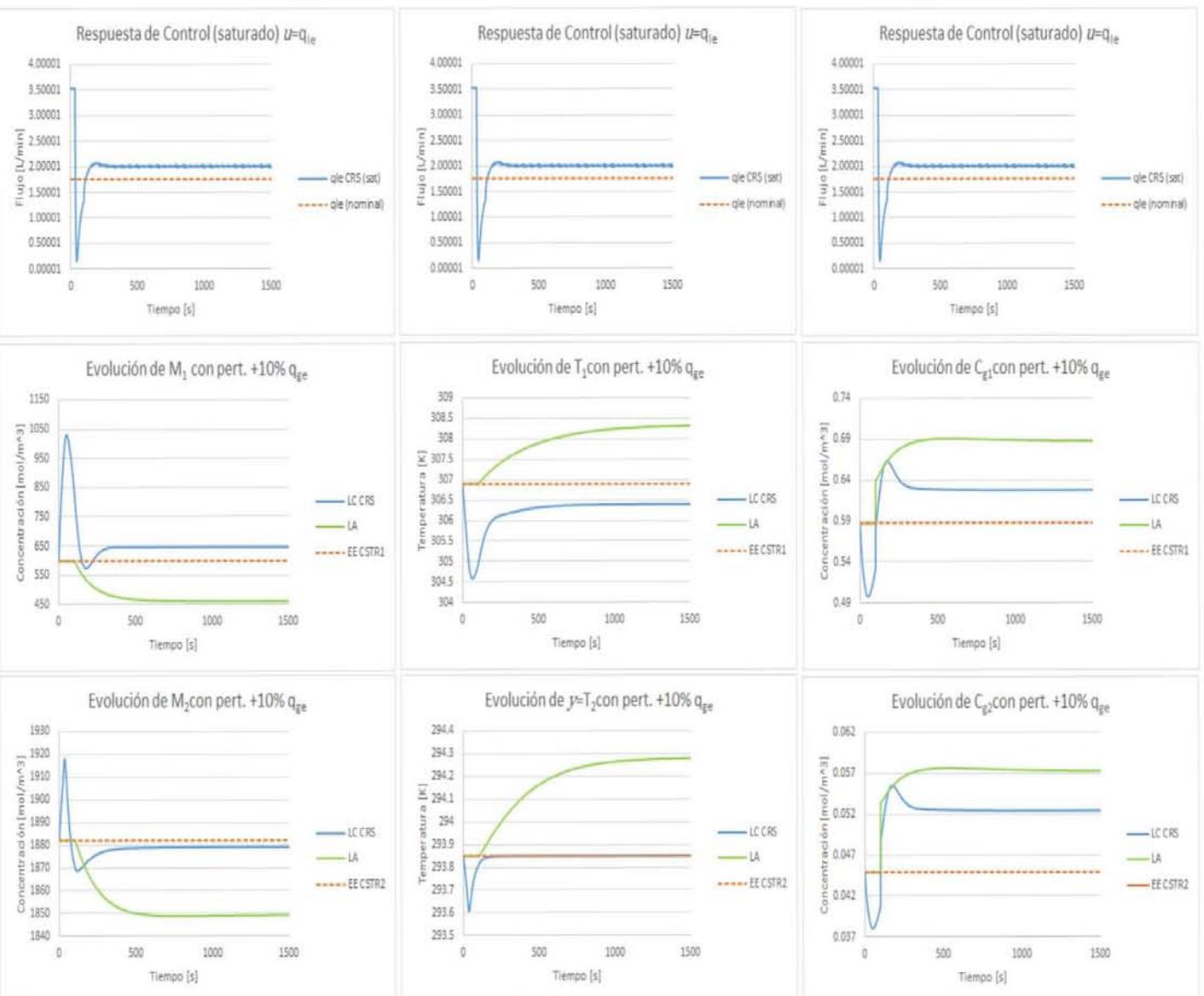


Figura 5.7a. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO_2 y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRS ($k_c \approx 0.03 \text{ s}^{-1}$; $\omega \approx 0.25 \text{ s}^{-1}$) (sin ruido en T_2).

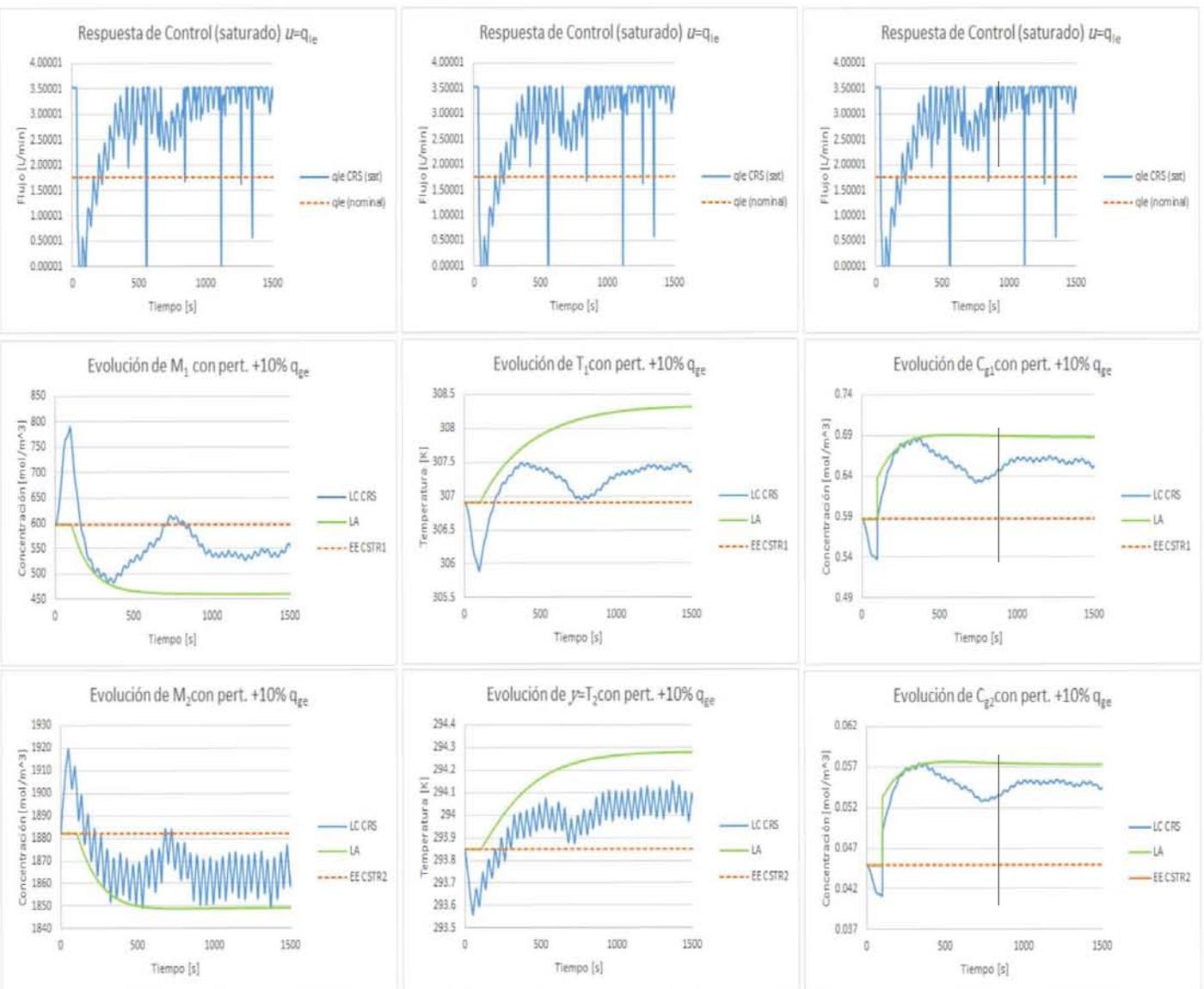


Figura 5.7b. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO_2 y ME4 en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRS ($k_c \approx 0.03 \text{ s}^{-1}$; $\omega \approx 0.25 \text{ s}^{-1}$) (con ruido en T_2).

Los errores o desviaciones obtenidos al implementar este control al sistema son similares a los mostrados en las tablas 5.3 y 5.4 para las perturbaciones tipo escalón en el flujo de entrada de gas y en la concentración de entrada de CO_2 respectivamente. Por otro lado, este control mostró tener un tiempo de asentamiento pequeño ya que estabiliza al sistema de dos a tres veces más rápido a como lo hace el sistema en su dinámica natural para las concentraciones en ambos tanques y la temperatura del Tanque 1, y para la temperatura del Tanque 2 es prácticamente instantáneo. Sin embargo, esta rapidez es pagada con sobretiro en las repuestas de las variables en su parte dinámica (poca duración) con una magnitud considerable en el caso de las concentraciones de las especies químicas.

Nuevamente, en las figuras 5.7a y 5.7b se puede observar las acciones que toma el control para mitigar la perturbación al sistema y las cuales se ven reflejadas en las respuestas de las variables de los tanques.

Finalmente, en las figuras 5.9a y 5.9b se muestra una comparación de las respuestas de las variables del sistema a lazo cerrado y a lazo abierto (sin y con ruido en la señal del sensor de temperatura, respectivamente), pudiéndose observar, a pesar de las diferencias topológicas debido a la señal de temperatura con ruido, el buen desempeño de este controlador, mientras que la figura 5.8 muestra la acción de control (sin ruido en T_2) para el intervalo de magnitud de la perturbación en escalón del flujo de alimentación de gas.

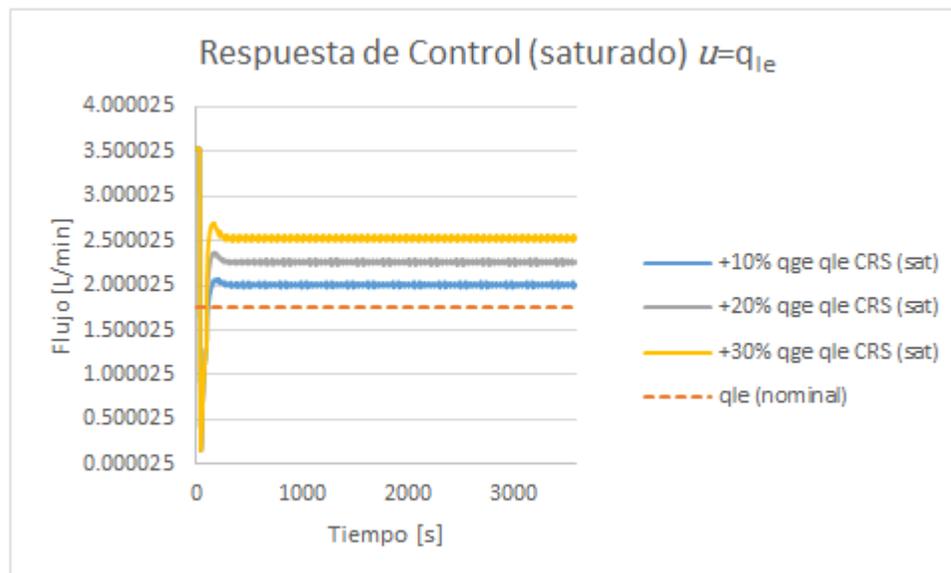


Figura 5.8. Respuesta de la variable de control con saturación a lazo cerrado y ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (CRS).

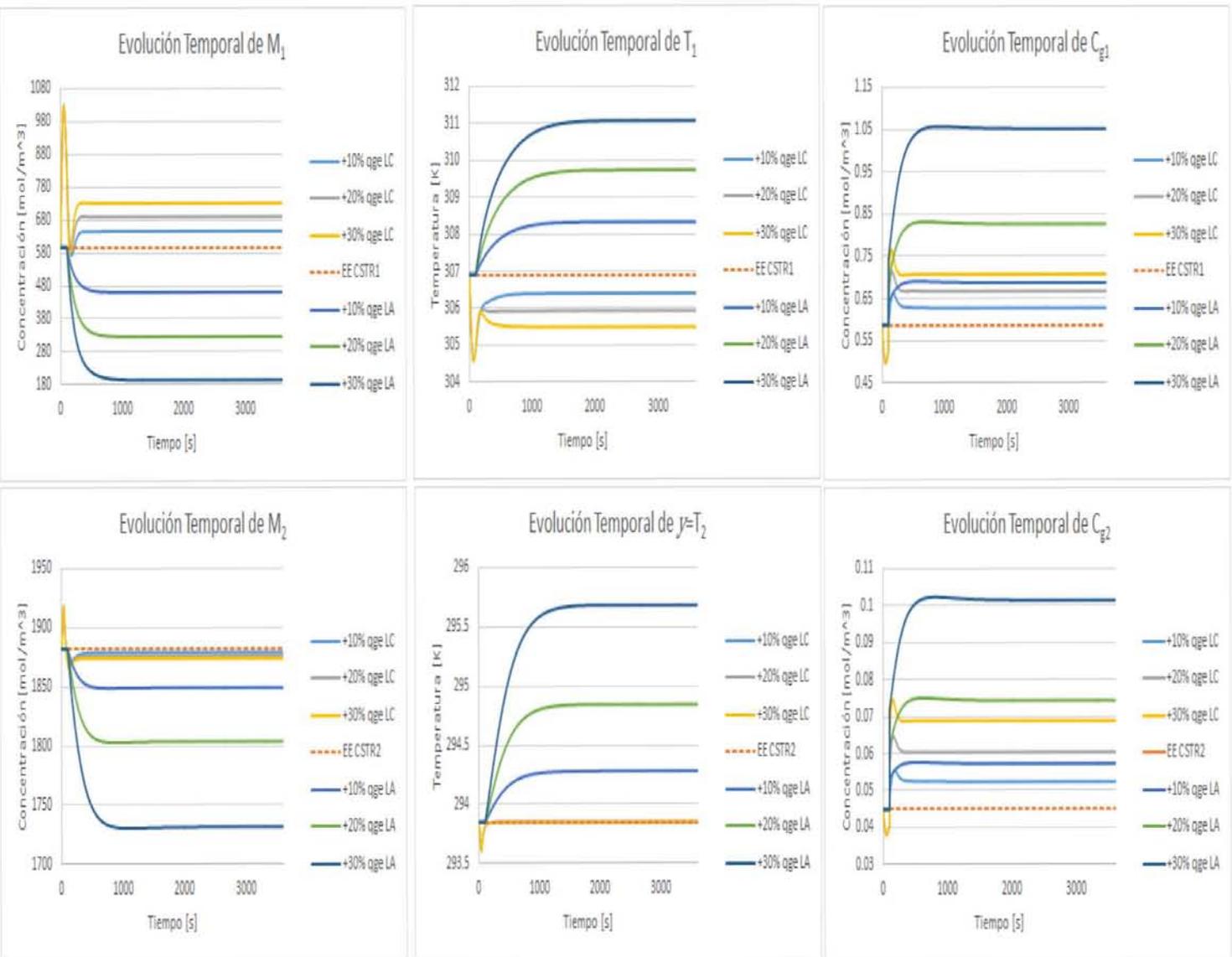


Figura 5.9a. Comparación de las respuestas del sistema a lazo cerrado (CRS) y a lazo abierto ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (sin ruido en T_2).

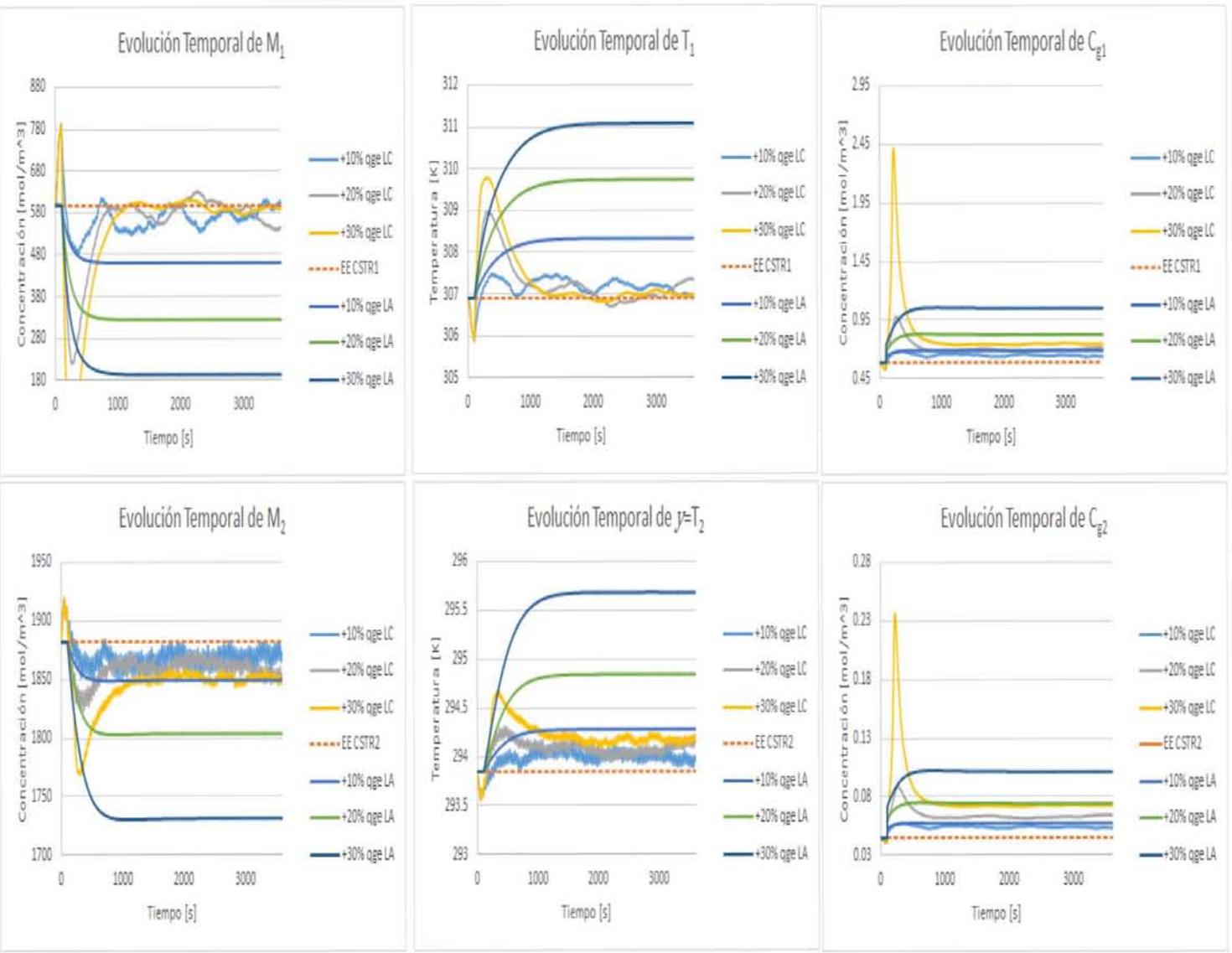


Figura 5.9b. Comparación de las respuestas del sistema a lazo cerrado (CRS) y a lazo abierto ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (con ruido en T_2).

Es importante dejar claro que las oscilaciones mostradas en la figura 5.8 son debidas al método numérico usado para la solución del problema de control.

5.6. Comparación del desempeño del CRE y CSR frente a un control PI convencional industrial

En esta sección se hace una comparación del desempeño (a lazo cerrado) de los controles ideal no lineal (CRE) y el control lineal accionado por retroalimentación de estados (CRS) frente a un control PI industrial de temperatura cuando existe una perturbación tipo escalón en el flujo de alimentación de gas.

Desde hace muchos años, las industrias para mantener controlados sus procesos hacen uso de controles Proporcional-Integral (PI), el cual se ha visto que tiene un buen y confiable desempeño en su tarea. Entonces, ¿por qué un CRE o un CRS para controlar una columna empacada de absorción cuando años de experiencia han demostrado que basta con un control PI industrial (convencional)? La respuesta es simple, el estudio de estos controladores nos dan la base teórica del por qué un control PI funciona apropiadamente aunque no dependa de un modelo matemático detallado del proceso. En el “Apéndice B” de la tesis de maestría de Nájera [9] se muestra la correlación existente entre un PI convencional con un CRS (control ideal con observador), que es una explicación del buen funcionamiento del PI y puede ser consultado para un mejor entendimiento.

5.6.1. Comparación de controladores a lazo cerrado ante perturbaciones tipo escalón

En esta subsección se muestra una comparación entre controladores a lazo cerrado ante una perturbación en la entrada del gas de la forma de la ecuación (5.1).

En términos generales, los tres controladores tienen un buen desempeño ante perturbaciones de estos tipos ya que, para el Tanque 2, que es de donde se toman las mediciones de temperatura, lo mantiene controlado en su “set point”, es decir, en el estado estacionario establecido, mientras que para el Tanque 1, que es por donde entra la perturbación del flujo de gas, se mantienen presentes los efectos de la perturbación y se opera en las cercanías del estado estacionario nominal correspondiente.

Además, las respuestas de control, como se vio con el CRS (en ausencia de ruido en la señal de T_2) y, a excepción del caso del CRE, se saturan en el periodo transitorio para posteriormente trabajar (con desfase dependiente del tamaño de la perturbación) alrededor o en las cercanías del valor establecido del estado estacionario de la variable de control. En la figura 5.10a se muestra una comparación de desempeños entre el control ideal no lineal tipo inventarios (CRE); el control lineal con observador integrado (CRS), que por su estructura puede ser sintonizado (y por ende considerado como tal) un PI convencional y, un control PI industrial (PI ind) sintonizado con técnicas comunes y la figura 5.10b muestra la misma comparación pero con ruido en la señal de temperatura T_2 , ambos casos ante una perturbación de 10% de flujo de alimentación de gas.

Como puede notarse en las figuras 5.10a y 5.10b, el control CRS ofrece notables ventajas sobre su contraparte el PI industrial ya que, si bien, a simple vista su desempeño parece ser el mismo o similar y de que ambos llevan al sistema a las cercanías de su estado estacionario después de una perturbación tipo escalón en el flujo de alimentación de gas, el tiempo de asentamiento que tiene el sistema a lazo cerrado con el CRS implementado es aproximadamente dos veces más rápido que el que tiene el sistema a lazo cerrado con el control PI industrial. Además, aunque aparentemente el comportamiento del PI industrial es igual al del CRE (al menos en ausencia de ruido en la señal de temperatura T_2) el cual es un control ideal como ya fue mencionado, la respuesta de su variable de control se satura a lo largo de toda la simulación, lo cual lo pone en una clara desventaja frente al control CRS, el cual, además de hacer que el sistema tenga un tiempo de asentamiento aproximadamente dos veces más rápido que el que ofrece el control PI sintonizado con técnicas convencionales (como la técnica de análisis de respuesta de Cohe-Coon), sólo se satura en un breve periodo de su estado transitorio para posteriormente estabilizarse en un valor de flujo de alimentación de MEA de 3.3 L/min.

En la tabla 5.5 muestra la comparación hecha para los tres controles ante perturbaciones del 10% al 30% más en el flujo de alimentación de gas.

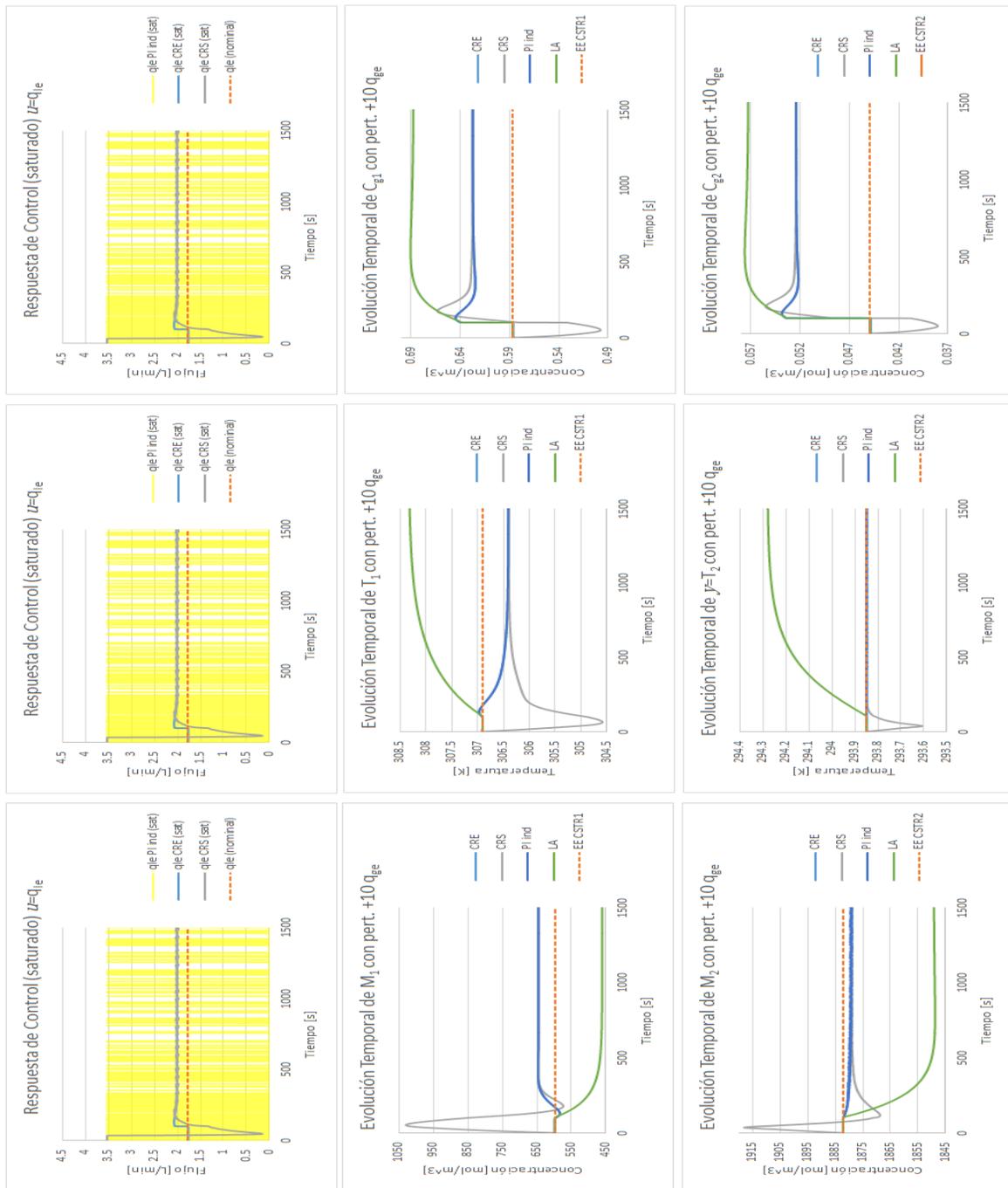


Figura 5.10a. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO_2 y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRE ($k_c \approx 0.05$ s⁻¹), CRS ($k_c \approx 0.03$ s⁻¹; $\omega \approx 0.25$ s⁻¹), PI ind ($K_p \approx 21.9$ s⁻¹; $1/\tau_i \approx 0.02$ s⁻¹) (sin ruido en la señal de T_2).

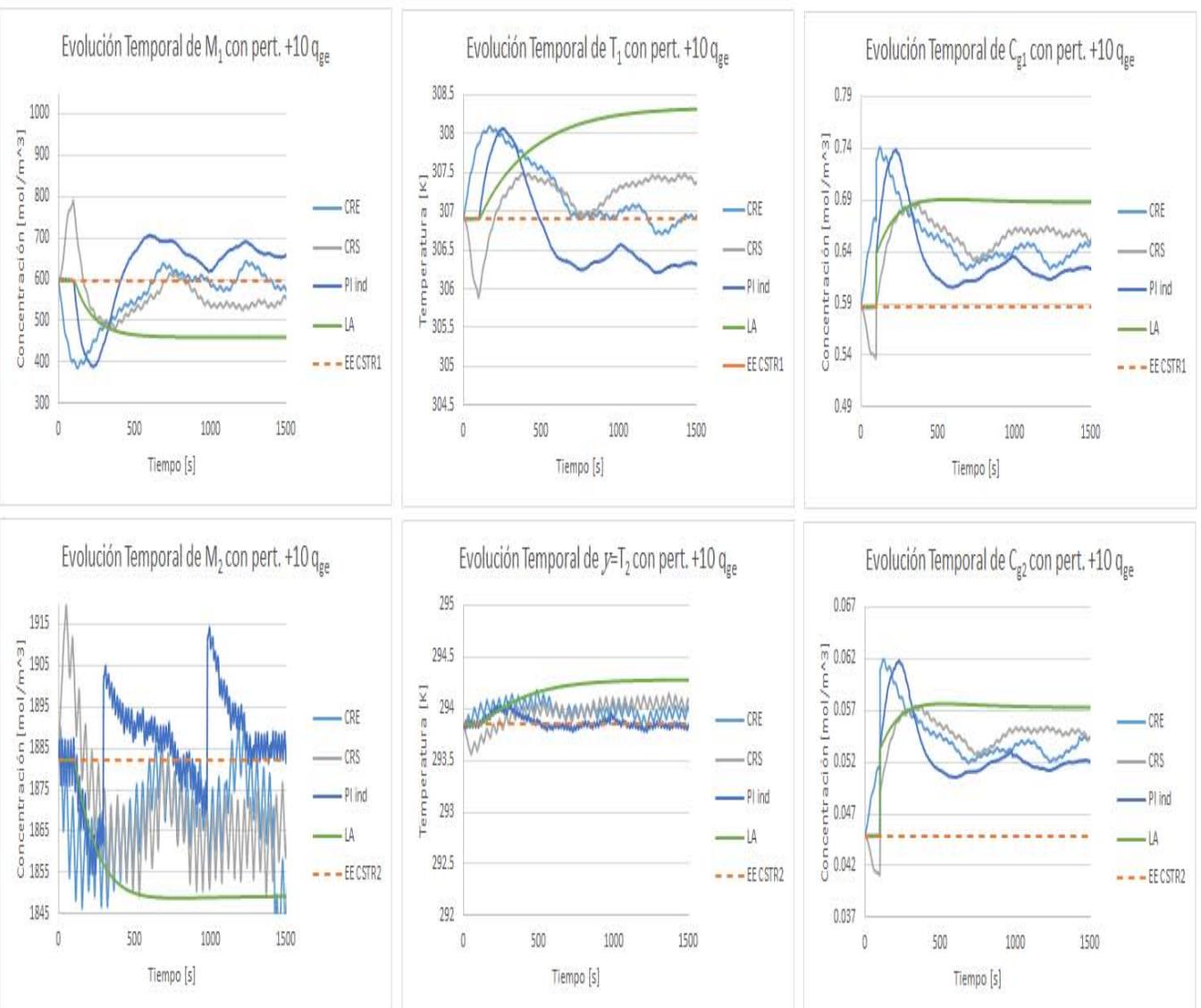


Figura 5.10b. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO_2

y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA)

después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de

gas a lazo cerrado con el CRE ($k_c \approx 0.05 \text{ s}^{-1}$), CRS ($k_c \approx 0.03 \text{ s}^{-1}$; $\omega \approx$

0.25 s^{-1}), PI ind ($K_p \approx 21.9 \text{ s}^{-1}$; $1/\tau_i \approx 0.02 \text{ s}^{-1}$) (con ruido en la señal de T_2).

Como se puede observar en dicha tabla, aunque todos los controles mostrados ofrecen la misma reducción del error o de desfase en relación al estado estacionario deseado para cada variable del sistema, el control propuesto en esta tesis, el CRS, que como ya se mencionó con anterioridad puede ser sintonizado un PI convencional (por su estructura), le proporciona al sistema estabilización en menor tiempo en comparación a como lo hace el sistema a lazo cerrado con los otros controles implementados y la respuesta de la variable de control con el CRS es más sutil, lo cual, en la vida real permite un menor desgaste por fricción de las válvulas de control.

Además, la tabla 5.6 muestra la misma comparación hecha entre los controles antes mencionados cuando existe una perturbación tipo escalón en el mismo intervalo del +10% al +30% en la concentración de entrada de CO₂. Como se puede observar, en este tipo de perturbación, el control PI industrial sintonizado con técnicas convencionales ofrece al sistema un menor tiempo de asentamiento sin embargo, la respuesta de la variable de control sigue presentando saturación a lo largo de toda la simulación.

En las tablas 5.5 y 5.6 se utilizan abreviaciones en algunas de las casillas. Dichas abreviaciones son:

- Pert.: se refiere al nuevo estado estacionario que alcanza la variable en cuestión después de haber suministrado la perturbación al sistema.
- TA [s]: Tiempo de asentamiento. Tiempo que tarda el sistema o variable en alcanzar el estado estacionario después de una perturbación
- # + ra DN: número de veces más rápido que la dinámica natural. Se refiere qué tantas veces es más rápido el sistema a lazo cerrado que a lazo abierto con base en los tiempos de asentamiento

Tabla 5.5. Comparación de desempeños (desfase y tiempo de asentamiento) entre los controles CRE, CRS y PI industrial ante perturbación tipo escalón en el flujo de alimentación de gas.

Perturbación	Control	Parámetros	$V_2 [m^3]$			$M_1 [mol/m^3]$			$M_2 [mol/m^3]$			$T_1 [K]$			$T_2 [K]$			$C_{p1} [mol/m^3]$			$C_{p2} [mol/m^3]$			$q_{in} [m^3/s]$																
			Pert.	Error %	#+ra DN	Pert.	Error %	#+ra DN	Pert.	Error %	#+ra DN	Pert.	Error %	#+ra DN	Pert.	Error %	#+ra DN	Pert.	Error %	#+ra DN	Pert.	Error %	#+ra DN	Pert.	Error %	#+ra DN														
			°	TA [s]		°	TA [s]		°	TA [s]		°	TA [s]		°	TA [s]		°	TA [s]		°	TA [s]		°	TA [s]															
+10%	LA	-	-	0.00291676	0	300	-	0.00291676	0	200	-	480.57	22.85	670	-	1849.11	1.75	1150	-	308.33	0.47	1900	-	294.26	0.16	1700	-	0.6877	17.15	900	-	0.0573	27.55	900	-	2.94E-05	-	-	-	
	CRE	$kc [s^{-1}]$	0.05	0.00311225	6.6	460	0.7	0.00311225	6.6	400	0.5	645.86	8.04	570	1.2	1875.2	0.16	1080	1.1	306.4	0.16	1090	1.7	295.8490	0	140	12.1	0.6274	6.89	660	1.4	0.0524	16.75	590	1.5	3.35E-05	13.77	440	-	
	CRS	$w [s^{-1}]$	0.25	0.00166225	44	250	1.2	0.00166225	44	220	0.9	645.86	8.04	330	2.0	1879.2	0.16	480	2.4	306.4	0.16	620	3.1	295.8490	0	50	34	0.62	6.89	480	1.9	0.0524	16.76	400	2.1	3.35E-05	13.72	230	-	
		$kc [s^{-1}]$	0.03																																					
		$1/\tau_1 [s^{-1}]$	3.703793704																																					
		$K_p [s^{-1}]$	-0.0012																																					
	PIind	$1/\tau_1 [s^{-1}]$	0.02	0.0031155	6.6	500	0.6	0.0031155	6.5	370	0.5	645.12	7.91	590	1.1	1879.12	0.16	900	1.3	306.4	0.16	1470	1.3	295.8490	0	80	21.3	0.6276	6.92	600	1.4	0.0524	16.8	670	1.3	sat	sat	sat	-	
		$K_p [s^{-1}]$	21.9																																					
	+20%	LA	-	-	0.00291676	0	400	-	0.00291676	0	300	-	325.06	45.62	1000	-	1883.88	4.16	1400	-	309.73	0.52	2000	-	294.04	0.36	1600	-	0.8264	40.78	1600	-	0.0743	65.5	1440	-	2.94E-05	-	-	-
		CRE	$kc [s^{-1}]$	0.05	0.00230861	13.31	460	0.9	0.00230861	13.31	390	0.8	690.51	15.51	500	2	1876.46	0.3	970	1.4	305.93	0.31	950	2.05265150	295.8490	0	150	10.7	0.6677	13.75	710	2.3	0.0694	34.61	590	2.4	3.77E-05	20.18	310	-
		CRS	$w [s^{-1}]$	0.25	0.00182861	37.38	300	1.3	0.00182861	37.37	270	1.1	690.5	15.51	320	3.1	1876.47	0.3	380	3.7	305.93	0.31	310	6.451812903	295.8490	0	40	40.0	0.6677	13.75	260	6.2	0.0694	34.61	270	5.3	3.77E-05	20.1	220	-
			$kc [s^{-1}]$	0.03																																				
$1/\tau_1 [s^{-1}]$			3.703793704																																					
$K_p [s^{-1}]$			-0.0012																																					
PIind		$1/\tau_1 [s^{-1}]$	0.025	0.00230813	13.29	350	0.7	0.00230813	13.11	460	0.7	690.02	15.45	490	2.0	1876.29	0.31	380	1.7	30.93	0.31	1050	1.944761905	295.8490	0	30	53.3	0.6677	13.77	700	2.3	0.0694	34.62	570	2.5	sat	sat	sat	-	
		$K_p [s^{-1}]$	30																																					
+30%		LA	-	-	0.00291676	0	460	-	0.00291676	0	360	-	153.16	67.69	1200	-	1731.48	8	1450	-	311.08	1.36	1910	-	295.605	0.64	1590	-	1.05	79.21	1400	-	0.0146	125.97	1500	-	2.94E-05	-	-	-
		CRE	$kc [s^{-1}]$	0.05	0.00250589	20.1	490	0.9	0.00250589	20.1	380	0.9	732.09	22.46	500	2.3	1874.02	0.43	900	1.6	305.49	0.46	940	2.01914894	295.8490	0	120	13.3	0.7077	20.56	580	2.4	0.0689	53.47	590	3.0	4.22E-05	43.32	320	-
		CRS	$w [s^{-1}]$	0.25	0.00182392	30.62	370	1.2	0.00182392	30.62	300	1.2	732.1	22.46	350	3.4	1874	0.43	360	4.0	305.49	0.46	550	3.472727273	295.8490	0	30	53.0	0.7077	20.56	520	2.7	0.0689	53.47	490	3.5	4.22E-05	43.32	240	-
			$kc [s^{-1}]$	0.03																																				
	$1/\tau_1 [s^{-1}]$		3.703793704																																					
	$K_p [s^{-1}]$		-0.0012																																					
	PIind	$1/\tau_1 [s^{-1}]$	0.033	0.00250365	19.99	450	1.0	0.00250365	20.1	400	0.9	729.93	22.1	520	2.3	1873.4	0.47	690	2.1	305.5	0.45	930	2.053763441	295.85	0	60	26.5	0.7083	20.67	780	1.8	0.0689	53.63	53.63	29.5	sat	sat	120	-	
		$K_p [s^{-1}]$	44.1																																					

Tabla 5.6. Comparación de desempeños (desfase y tiempo de asentamiento) entre los controles CRE, CRS y PI industrial ante perturbación tipo escalón en la concentración de CO₂ de entrada.

Perturbación	Parámetros	V ₁ [m ³]				V ₂ [m ³]				M ₁ [mol/m ³]				M ₂ [mol/m ³]				T ₁ [K]				T ₂ [K]				C _{CO2} [mol/m ³]				C _{O2} [mol/m ³]				Q _{in} [m ³ /s]						
		Pert.	Error %	TA [s]	#+ra DN	Pert.	Error %	TA [s]	#+ra DN	Pert.	Error %	TA [s]	#+ra DN	Pert.	Error %	TA [s]	#+ra DN	Pert.	Error %	TA [s]	#+ra DN	Pert.	Error %	TA [s]	#+ra DN	Pert.	Error %	TA [s]	#+ra DN	Pert.	Error %	TA [s]	#+ra DN	Pert.	Error %	TA [s]	#+ra DN			
		LA	CRE	CRS	PI ind	LA	CRE	CRS	PI ind	LA	CRE	CRS	PI ind	LA	CRE	CRS	PI ind	LA	CRE	CRS	PI ind	LA	CRE	CRS	PI ind	LA	CRE	CRS	PI ind	LA	CRE	CRS	PI ind	LA	CRE	CRS	PI ind			
+10% G ^m	LA	-	-	0.00291674	0.25	700	-	0.00290931	0.25	910	-	458.47	23.31	700	-	1860.47	1.15	910	-	308.37	0.48	1740	-	294.12	0.09	1480	-	0.6877	17.15	1020	-	0.0573	27.27	930	-	2.94E-05	-	-	-	
	CRE	kc [s ⁻¹]	0.05	0.00315568	8.19	610	1.2	0.00315568	8.19	620	1.5	578.12	3.29	710	1.0	1878.51	0.14	710	1.3	307.12	0.07	730	2.4	293.8498	0	40	37.0	0.6513	10.95	570	1.8	0.0498	11.02	470	2.0	3.19E-05	8.47	580	-	
	CRS	ω [s ⁻¹]	0.25																																					
		kc [s ⁻¹]	0.03	0.00315568	8.1	790	0.9	0.00315568	8.1	510	1.8	578.11	3.29	690	1.1	1879.49	0.14	600	1.5	307.12	0.07	520	3.3	293.8498	0	40	37.0	0.6513	10.95	580	1.8	0.0498	11.02	500	1.9	3.19E-05	8.47	390	-	
		1/τ _i [s ⁻¹]	3.7037037																																					
		K _p [s ⁻¹]	-0.0012																																					
	PI ind	1/τ _i [s ⁻¹]	0.02	0.00303609	3.98	420	1.7	0.00303804	4	370	2.5	576.97	3.48	430	1.7	1878.51	0.14	420	2.2	307.13	0.07	700	2.5	293.85	0	200	7.4	0.6516	11.01	360	2.8	0.0499	11.08	350	2.7	sat	sat	sat	-	
		K _p [s ⁻¹]	21.9																																					
	+20% G ^m	LA	-	-	0.00291676	0.25	700	-	0.00291676	0.00095	640	-	319.8	46.5	1520	-	1829.71	2.79	1530	-	309.82	0.95	1710	-	294.48	0.23	1320	-	0.8482	44.5	1150	-	0.0765	69.91	1240	-	2.94E-05	-	-	-
		CRE	kc [s ⁻¹]	0.05	0.00340177	16.63	500	1.4	0.00340178	16.63	530	1.2	561.16	6.13	650	2.3	1877.11	0.27	590	2.6	307.3	0.13	750	2.3	293.8498	0	40	33.0	0.7161	21.99	490	2.3	0.0548	22.13	440	2.8	3.44E-05	16.93	590	-
		CRS	ω [s ⁻¹]	0.25																																				
			kc [s ⁻¹]	0.03	0.00340175	16.5	520	1.3	0.00340173	16.5	500	1.3	561.18	6.12	690	2.2	1877.15	0.27	500	3.1	307.3	0.13	580	2.9	293.8498	0	40	33.0	0.7161	21.99	520	2.2	0.0548	22.13	500	2.5	3.44E-05	16.93	420	-
1/τ _i [s ⁻¹]			3.7037037																																					
K _p [s ⁻¹]			-0.0012																																					
PI ind		1/τ _i [s ⁻¹]	0.02	0.00315568	8.1	410	1.7	0.00315334	8.1	320	2.0	560.95	6.16	430	3.5	1877.13	0.27	320	4.8	307.3	0.13	740	2.3	293.8498	0	80	16.5	0.7161	22	340	3.4	0.0548	22.14	340	3.6	sat	sat	sat	-	
		K _p [s ⁻¹]	21.9																																					
+30% G ^m		LA	-	-	0.00290931	0.25	710	-	0.00290931	0.25	510	-	182.92	69.4	900	-	1776.59	5.61	1180	-	311.25	1.42	1430	-	295.07	0.42	1460	-	1.11	89.57	1145	-	0.11	139.83	1470	-	2.94E-05	-	-	-
		CRE	kc [s ⁻¹]	0.05	0.00364782	25.1	570	1.2	0.00364782	25.1	570	0.9	546.47	8.59	650	1.4	1874.97	0.38	640	1.8	307.46	0.18	710	2.0	293.8498	0	40	36.5	0.7813	33.1	500	2.0	0.0599	33.31	590	2.5	3.69E-05	25.38	570	-
		CRS	ω [s ⁻¹]	0.25																																				
			kc [s ⁻¹]	0.03	0.00364782	24.92	540	1.3	0.00364781	24.92	530	1.0	546.43	8.59	630	1.4	1874.91	0.39	450	2.6	307.46	0.18	540	2.6	293.8498	0	30	48.7	0.7813	33.1	530	2.2	0.0598	33.31	530	2.8	3.69E-05	25.39	460	-
	1/τ _i [s ⁻¹]		3.7037037																																					
	K _p [s ⁻¹]		-0.0012																																					
	PI ind	1/τ _i [s ⁻¹]	0.02	0.00327101	12	420	1.7	0.00326956	11.97	370	1.4	546.41	8.59	420	2.1	1874.96	0.38	350	3.4	307.46	0.18	770	1.9	293.8498	0	40	36.5	0.7813	33.1	320	3.6	0.0761	69.41	310	4.7	sat	sat	sat	-	
		K _p [s ⁻¹]	21.9																																					

En general, para el caso de las perturbaciones tipo escalón en el flujo de alimentación de gas, todos las variables de los tanques presentan “offset” o desfase, dependiente del tamaño de escalón, exceptuando, claro está, la temperatura del Tanque 2 la cual llega (sin “offset”) al valor fijado de “set point” o punto de ajuste (ver figuras 5.9a, 5.9b, 5.10a y 5.10b).

Con este tipo de perturbación, las diferencias existentes en cuanto a funcionamiento entre los controles son mínimas con respecto al valor de estado estacionario al que llegan las variables del sistema, por ejemplo, aunque todos los controles mostrados mantiene a la temperatura del Tanque 2 (variable medible) en su “set point” (sin “offset”), para la temperatura del Tanque 1 es un tanto diferente ya que aquí se presenta “offset” por debajo de la temperatura de estado estacionario de referencia de ese tanque dependiente del tamaño del escalón, el cual fue de apenas aproximadamente un Kelvin para el escalón de +30% de flujo de alimentación de gas y aproximadamente medio Kelvin por arriba de la temperatura de estado estacionario original para una perturbación de +30% en la concentración de entrada de CO₂. Es importante mencionar que esta diferencia de temperatura aumenta en ambos casos al aumentar el tamaño del escalón. Este efecto del incremento del “offset” al incrementarse el tamaño del escalón de la perturbación está presente para todas las variables del sistema, exceptuando el volumen del líquido en ambos tanques para los dos tipos de perturbaciones.

En cuanto al tiempo de asentamiento, para la temperatura del Tanque 2, que es la variable medible y regulada, los controladores comparados actúan de manera prácticamente instantánea por lo que no tiene sentido de hablar de un tiempo de asentamiento para esta variable. Sin embargo, para la temperatura del Tanque 1, que es por donde entra la perturbación, el tiempo de asentamiento varia para cada controlador, siendo el más rápido el CRS (control propuesto) ya que su tiempo de asentamiento es tres veces más rápido que el que presenta el sistema a lazo abierto ante dicha perturbación, es decir, estabiliza en aproximadamente 10 minutos a la temperatura de dicho tanque; mientras que el más lento fue el control PI industrial, ya que su tiempo de asentamiento es 1.3 veces más rápido que el que presenta el sistema a lazo abierto.

En el caso de la concentración de MEA y concentración de CO₂ para ambos tanques, la repuesta del control sobre esta variable es más rápida cuando actúa el CRS, es decir, observando la tabla 5.5, el CRS responde aproximadamente dos veces más rápido que la dinámica natural del sistema, mientras que en los otros controles el tiempo de asentamiento es aproximadamente 1.3 veces más rápido. Para el caso de la concentración de CO₂, aunque la topología de las respuestas de esta variable (y de la concentración de MEA) en el estado transitorio es ligeramente diferente entre los controles, el “offset” de la concentración de CO₂ en el Tanque 2 es considerable (la cual es la que se

busca regular en realidad ya que es nuestra variable de interés), esto no es del todo un problema ya que en esencia el problema es resuelto y además la eliminación de este “offset” para esta concentración se convierte en una oportunidad de mejora para trabajos futuros, lo cual es abordado en el Capítulo 6.

Es importante comentar que, si bien, hasta este punto el CRE, que es un control que en teoría conoce todos los estados del sistema, no muestra una notable superioridad frente a los controles mostrados en esta tesis en cuanto al tiempo de asentamiento se refiere, si lo hace en su esfuerzo de control ya que nunca presenta saturación. Este efecto de la ausencia de saturación, que los otros dos controles no presentan, es probablemente debido al mismo hecho de que este control se puede anticipar a los errores por su cualidad de “conocer” todos los estados del sistema y por su estructura de prealimentación-retroalimentación.

Comentando sobre la acción de control ante perturbaciones de tipo escalón en el flujo de alimentación de gas, como puede observarse en las figuras 5.5a, 5.5b y 5.8, y en las tablas 5.5 y 5.6, entre mayor sea el escalón de flujo de gas, mayor será el requerimiento de flujo de alimentación de MEA, lo cual es congruente por que al haber más CO₂ en el sistema, la temperatura aumentará y para mitigar este efecto se necesita suministrar más cantidad de líquido purificante. En cuanto a la topología de la respuesta en sí, es importante notar que, como ya fue mencionado, para el CRE, además de que no presenta saturación, se estabiliza en poco tiempo. Para el CRS, aunque presenta saturación en un breve periodo de su parte transitoria, es el que se estabiliza más rápido en comparación del CRE. Finalmente, aunque el PI industrial sintonizado con técnicas convencionales mostró un buen desempeño en cuanto a la estabilización de las variables del sistema se refiere, su acción de control muestra saturación en todo el periodo de la simulación, lo cual, en la vida real, es dañino para la válvula de control, dejando en desventaja a este controlador frente al CRE y CRS.

Finalmente, cabe mencionar que la adición del controlador a la columna empacada de absorción no sólo mejoró el desempeño de la concentración de CO₂ a la salida de la columna en cuanto a niveles de dicha concentración se refiere, sino que también impactó en las concentraciones MEA y temperaturas de ambos tanques ya que las mantuvo en las cercanías de los estados estacionarios nominales correspondientes (ver figuras 5.9a, 5.9b, 5.10a y 5.10b y tablas 5.5 y 5.6).

Como pudo apreciarse en esta sección, en general, todos los controles actúan bien, ya que estabilizan a los perfiles en las cercanías de los estados estacionarios de referencia de cada uno de los tanques y garantizan que la concentración de CO₂ en el gas efluente esté cercana al valor deseado, es

decir, los controladores mejoran el desempeño de la columna empacada de absorción ya que mantienen cerca del estado estacionario deseado a la concentración de CO_2 en el efluente gaseoso ante perturbaciones a dicho sistema, de lo contrario, si no hubiera un control de por medio, la concentración de CO_2 a la salida de la columna se alejaría significativamente (y cada vez más) a medida que aumenta la magnitud de la perturbación. Además, quedó de manifiesto la correspondencia entre los controladores basados en un modelo con el PI industrial (frecuentemente heurístico) y en especial el CRS (observador con control) con el PI ya que, aunque sus trayectorias en el estado transitorio difirieron un poco, todos llegaron tiempos similares al mismo estado estacionario fijado. Es importante resaltar la importancia del CRS, ya que a partir de este control con observador simple, se tienen las bases para construir y sobre todo sintonizar un control PI convencional y por ende, se puede tener la certeza a priori de que el control va a funcionar adecuadamente con base en una sintonización que no necesita hacer uso de curvas de reacción para obtener un ajuste apropiado de sus parámetros por medio de las técnicas ampliamente conocidas como la de Cohen-Coon o de otras técnicas como la de Ziegler-Nichols. En otras palabras, el CRS es la liga entre la teoría y la práctica y es por eso que el control propuesto (y obtenido) en esta tesis, el control CRS para temperatura, tiene el desempeño mostrado en las figuras 5.9a, 5.9b, 5.10a y 5.10b y puede mantener controlada de manera robusta a la columna empacada de absorción en cuanto a la concentración de salida del CO_2 se refiere teniendo en mente en todo momento que al haberse diseñado este control para que actuase de acuerdo con mediciones de temperatura (controlar indirectamente concentración de CO_2) se pagará un precio, el cual es tener un “offset” en la concentración de CO_2 en el efluente gas (variable regulada).

5.7. Conclusiones

En este capítulo se encontró que, con base en la propiedad de pasividad de la representación por tanques de la columna empacada de absorción, el lugar ideal para colocar al menos un sensor de temperatura para el lazo de control es ligeramente arriba de la mitad de la columna (zona correspondiente al segundo CSTR), ya que es aquí donde el cambio en la pendiente del perfil de temperatura es más notorio (figura 5.1).

En cuanto al desempeño de los controladores, se obtuvo un control CRS con el cual puede ser derivado un control PI convencional, robusto, capaz de mantener al sistema estable ya que estabiliza al sistema en la mitad del tiempo a como se estabiliza a lazo abierto y el sesgo es reducido

prácticamente a la mitad. Dicho control es sintonizado con base en la teoría detrás de un modelo matemático que liga a un control accionado por retroalimentación de salidas, CRS, con el PI industrial. Para poder llegar a este punto primero se obtuvo un control accionado por Retroalimentación de Estados (CRE) el cual, parte de la suposición de que todos los estados del sistema pueden ser conocidos. Al poner a prueba a los controles se observó que el CRE responde ligeramente más sutil en comparación al control PI industrial y al CRS, debido a su fuerte dependencia con un modelo matemático bien conocido, mientras que el PI industrial y el CRS sólo trabajan con base en mediciones de temperatura y en la calidad de los estimados que se tengan del sistema. En general, el CRS funciona bien ya que alcanza el mismo estado estacionario al que llega el CRE, estabiliza al sistema en aproximadamente el doble de tiempo y tiene, en magnitud, el mismo “offset” o desfase que el que presenta el CRE para la concentración de salida del CO₂. Finalmente, para el CRS, con respecto al funcionamiento con ruido en las mediciones de temperatura, el sistema es naturalmente amortiguante de ruido, ya que se necesita fijar ganancias muy altas para obtener poca amplitud en las oscilaciones de las respuestas del sistema.

Las tablas 5.5 y 5.6 y los resultados en sí muestran el por qué es conveniente implementar un control al sistema, ya que se estabiliza a los estados en menor tiempo que a lazo abierto y los “offset” obtenidos son considerablemente menores.

Capítulo 6. Conclusiones y Trabajo Futuro

6.1. Conclusiones

En este trabajo de tesis se resuelve el problema de control para una columna empacada de absorción en donde hay presente una reacción química. Para ello, se siguió una serie de pasos metodológicos que son:

1. Representación de la columna empacada de absorción (sistema distribuido, EDP) mediante un par de CSTR sin retomezclado (parámetros concentrados, EDO)
2. Validación del modelo del punto anterior y dimensionalización mediante datos experimentales de autor
3. Estudio de bifurcación y multiplicidad del sistema completo de tanques y su estabilidad
4. Estudio de pasividad del par de CSTR (Grado Relativo 1 y Dinámica Cero) en relación a la temperatura de cada tanque
5. Obtención de la ley de control para el Control por Retroalimentación de Estados (CRE) y Control por Retroalimentación de Salidas (CRS)
6. Guías de sintonización y sintonización de los controles
7. Validación numérica y comparación del desempeño de los controles obtenidos
8. Criterio de ubicación del sensor de temperaturas en la columna empacada de absorción

Con los puntos anteriores se resuelve el problema de control, el cual fue diseñar un control estabilizante de temperatura para la columna empacada de absorción que regule la concentración del CO_2 (contaminante) en el efluente gas con base en mediciones de temperatura. Para lograr este cometido se capturó el comportamiento dinámico de la columna empacada de absorción mediante dos CSTR en serie y se encontró que este sistema no cuenta con multiplicidad, es decir, cada uno de los tanques cuenta con un estado estacionario global y asintóticamente estable (según los eigenvalores vistos en los estudios de estabilidad).

Además, es importante recordar que no hay resistencia al intercambio energético entre fases debido a la magnitud de los coeficientes de transferencia de energía, es decir, que no importa con que fase esté en contacto el sensor de temperatura ya que el valor registrado de ésta es prácticamente la misma para las tres fases.

Habiendo hecho los estudio de Grado Relativo 1 y Dinámica Cero, se determinó que el par de tanques es pasivo si se toma como variable medible a la temperatura del Tanque 2 ya que es el punto más cercano por donde es suministrada la entrada de control q_{le} .

Se obtuvieron las leyes de control y sus respectivas sintonizaciones para el CRE y el CRS, accionados principalmente por las mediciones de temperatura del Tanque 2. Posteriormente se comparó el desempeño de ambos controladores con un PI convencional y se encontró que en esencia los tres presentan el mismo funcionamiento y desempeño en relación al estado estacionario al que llegan, aunque el esfuerzo de control realizado para lograrlo y el tiempo en que lo alcanzan difieren entre sí.

Finalmente se encontró que la ubicación de al menos un sensor de temperatura, traducida del tanque a controlar (partición volumétrica equitativa) a una posición espacial en la columna empacada de absorción, debe ser colocado cerca de la mitad de la columna, es decir, en la zona que pertenece a la mitad superior de la columna.

De manera general, fuera de los objetivos de esta tesis, la metodología y sobre todo los resultados obtenidos son una aportación a la ingeniería de columnas empacadas de absorción y para sistemas de separación reactiva en general.

6.2. Trabajo Futuro

Para darle solución al problema de control para una columna empacada de absorción sólo fue considerado en este trabajo sistemas de control del tipo “Single Input-Single Output” (SISO) ya que entraba en acción la variable de control, q_{le} , al recibir señales de la variable medible (y regulada en este caso), T_2 .

Aunque bien, lo que se buscó en esta tesis fue resolver el problema de control con elementos sencillos que capturaran la esencia del problema, como trabajo a futuro se pueden realizar los siguientes puntos:

- Las propiedades de las fases pueden ser consideradas dependientes de la temperatura, concentraciones, volúmenes, etcétera (dependientes de los estados)
- Discretizar a la columna mediante CSTR de volúmenes variables
- Implementar un observador no lineal que estime la concentración de CO_2 con base en mediciones de temperatura del Tanque 2 y esta información ser suministrada a un CRE para

realizar un lazo de control formado por un control y un observador (ver apéndice G para factibilidad de este punto), o

- Implementar un esquema de control del tipo “Multiple Input-Multiple Output” (MIMO) en cascada tomándose mediciones de temperatura (para la adición de un “set point” autoajustable) e infiriéndose a través de un observador concentraciones de CO_2
- Extender los análisis a sistemas a ccorriente

APÉNDICE A: Características de la columna del caso de estudio

Los datos presentados en esta sección pertenecen al sistema que sirvió para validar el modelo del conjunto de CSTR y verificar que la ley de control aplicable fuera cumplida, lo cual, es el objetivo general de este trabajo. Por otro lado, es importante hacer un investigación de los números característicos (fenómeno convectivo-dispersivo, tiempos de residencia, mecánica del sistema, hidráulica, etc.) de cualquier sistema de estudio en que se esté trabajando, ya que los datos obtenidos de este tipo de análisis son los fundamentos para realizar simplificaciones al modelo que codifica matemáticamente el comportamiento dinámico de un sistema, que lejos de ser una mera forma de hacer más sencillo un modelo, es una necesidad.

En las tablas a.1, a.2 y a.3 se muestran datos relevantes que permiten realizar un listado de simplificaciones útiles, las cuales es importante que se tengan en mente.

Tabla a.1. Características estructurales de la columna empacada de absorción.

Columna de Empacada de Absorción	
Material	Acrílico
Diámetro Interno [m]	0.1
Altura Empacada [m]	6.55
Fracción de huecos	0.66
L/D	65.5
Empaque	
Tipo	Sillas Berl
Diámetro Nominal [pulgadas]	½
Superficie de contacto (a) [m²/m³]	485

Tabla a.2. Condiciones típicas de operación de la columna empacada de absorción (estado estacionario) y estudio del fenómeno convectivo-dispersivo.

Operación	Contracorriente y adiabática	
Presión	Atmosférica	
Flujo de alimentación (MEA, disolvente) [L/h]	106	
Flujo de alimentación gas [L/h]	11,520	
Concentración CO₂ en el gas de entrada %	~11-19	
Composición absorbente (MEA) [% masa]	~15	
Temperatura de alimentación [°C]	19	
Rango de temperaturas de operación [°C]	19-34 (aprox.)	
Tiempo de residencia [s]	Líquido	187
	Gas	12
$Pe_{Masa} \left(\frac{Lv}{D} \right)$	Líquido	179
	Gas	681
$Pe_{Energía} \left(\frac{Lv \rho Cp}{k} \right)$	Líquido	2.69 E+05
	Gas	2.43 E+05

Tabla a.3. Coeficientes de transferencia de energía.

Coeficiente de transferencia de energía h_{gl} [J/s*m²*K] (Geankoplis 2003) [18]	379.4
Coeficiente de transferencia de energía h_{ls} [J/s*m²*K] (Bird 2006) [19]	1085.2

De las tablas anteriores se obtienen las siguientes consideraciones:

- Efectos dispersivos tanto de materia como de energía despreciables (magnitud de Pe_{masa} y $Pe_{energía}$)
- Transporte sólo en dirección axial ($\frac{L}{D} > 10$)
- Estado cuasi-estacionario para la fase gas (tiempo de residencia de la fase líquida aproximadamente 16 veces mayor que el de la fase gas)
- La magnitud de los coeficientes de transferencia de energía permiten considerar un sistema pseudocontinuo para el balance energético ($T_s \approx T_g \approx T_l \approx T$)

Las hipótesis mostradas arriba son consideradas para la obtención del modelo matemático del Capítulo 2.

APÉNDICE B: Cinética de reacción del sistema CO₂-MEA

Entre los años 1967 y 1970, Danckwerts y Astarita estudiaron el sistema reaccionante formado entre el CO₂ y las aminas en general y desde entonces este tipo de sistemas reaccionantes han sido ampliamente estudiados. Generalmente, la reacción entre el CO₂ y la MEA es descrita mediante dos mecanismos de reacción; uno de ellos es el propuesto por Danckwerts en 1979 llamado mecanismo del Zwitterion y el otro es el llamado mecanismo termolecular introducido por Crooks y Donnellan [53] a finales de la década de 1980.

En el mecanismo del Zwitterion la reacción es descrita por medio de 11 a 12 reacciones [15] en las cuales es formado un complejo llamado Zwitterion y que posteriormente es desprotonizado, mientras que en el mecanismo termolecular esta reacción puede ser llevada a cabo en un solo paso.

Con base en este mecanismo que consta de una reacción la cual puede ser considerada como irreversible por la estabilidad del carbamato [4] (producto), como fue mencionado anteriormente, se propone una rapidez global para el término fuente de los balances de materia y energía que involucra tanto el proceso transferencia de masa (absorción) como a la reacción química que se lleva en la fase líquida. En seguida, se muestra como es obtenida la ecuación del término reactivo del modelo.

Considerando el caso de un proceso estacionario de transferencia de masa (figura B.1), desde la fase gas a la fase líquida atravesando la interfase en equilibrio (Whitman, 1924) [30], se puede establecer el flux de masa para ambas fases como:

$$N_g = k_g RT(C_g - C_{gi}) \quad (b1)$$

$$N_l = k_l(C_i - C) \quad (b2)$$

Como la interfase está en equilibrio

$$C_{gi}RT = HeC_i \quad (b3)$$

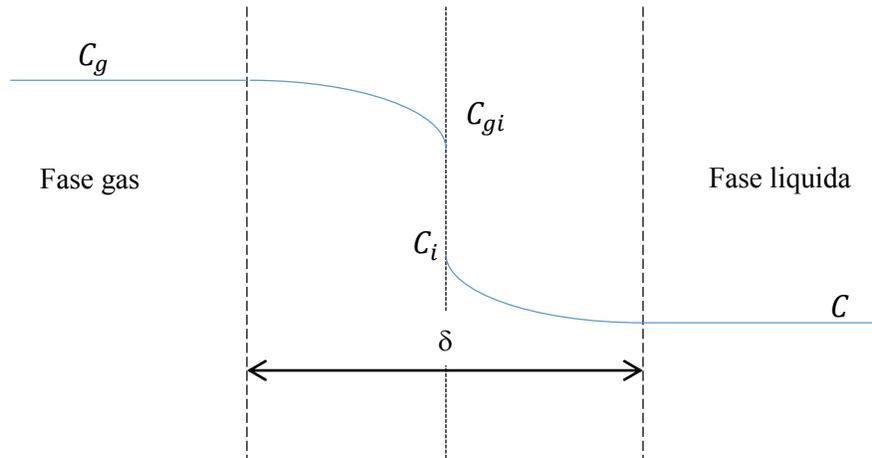


Figura B.1. Transferencia de masa de la fase gas a la fase líquida (Teoría de la doble película).

Sustituyendo (b3) en (b1)

$$N_g = k_g RT \left(C_g - \frac{He}{RT} C_i \right) \quad (b1')$$

Ya que el flux del lado del líquido es igual al del lado del gas $N_g = N_l = N$

$$k_g RT \left(C_g - \frac{He}{RT} C_i \right) = k_l (C_i - C) \quad (b4)$$

Despejando de C_i de (b4)

$$k_g RT C_g - k_g He C_i = k_l C_i - k_l C$$

$$k_l C_i + k_g He C_i = k_g RT C_g + k_l C$$

$$C_i = \frac{k_g RT C_g + k_l C}{k_l + k_g He} \quad (a5)$$

Sustituyendo (b5) en (b2)

$$N = k_l \left(\frac{k_g RT C_g + k_l C}{k_l + k_g He} - C \right)$$

$$N = k_l \left(\frac{k_g RT C_g + k_l C - k_l C - k_g He C}{k_l + k_g He} \right)$$

$$N = \frac{k_l}{k_l + k_g He} (k_g RT C_g - k_g He C)$$

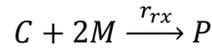
$$N = \frac{k_l}{k_l + k_g He} \left(k_g RT C_g - k_g RT \frac{He}{RT} C \right)$$

$$N = \frac{k_l k_g RT}{k_l + k_g He} \left(C_g - \frac{He}{RT} C \right)$$

$$N = \frac{1}{\frac{1}{k_g RT} + \frac{He}{RT}} \left(C_g - \frac{He}{RT} C \right) \quad (b6)$$

Ya que la reacción solo se presenta en la fase líquida, la rapidez de reacción “ r_{rx} ” tiene que ser igual a la rapidez de transferencia de masa “ aN ” (Danckwerts, 1970).

La reacción entre CO₂ (C) y la MEA (M) para formar carbamato (P) en fase líquida es (Astarita, 1967):



En donde la rapidez de reacción está dada por (Hikita, 1977):

$$r_{rx} = k_{rx} CM \quad (b7)$$

$$k_{rx} = 9.77 \times 10^7 e^{-\frac{4955}{T}} \quad (b8)$$

El término “ aN ” está referido al volumen de la columna, mientras que “ r_{rx} ” al del líquido, por lo tanto:

$$V_{col} a N = V_l r_{rx} \quad (b9)$$

Sustituyendo (b6) y (b7) en (b9)

$$V_{col} a \frac{1}{\frac{1}{k_g RT} + \frac{He}{RT}} \left(C_g - \frac{He}{RT} C \right) = V_l k_{rx} CM$$

$$V_{col} a k_{abs} \left(C_g - \frac{He}{RT} C \right) = V_l k_{rx} CM$$

$$V_{col} a k_{abs} C_g = V_{col} a k_{abs} \frac{He}{RT} C + V_l k_{rx} CM$$

$$V_{col} a k_{abs} C_g = \left(V_{col} a k_{abs} \frac{He}{RT} + V_l k_{rx} M \right) C$$

$$C = \frac{V_{col} a k_{abs}}{V_{col} a k_{abs} \frac{He}{RT} + V_l k_{rx} M} C_g$$

$$C = \frac{1}{\frac{He}{RT} + \frac{V_l k_{rx} M}{V_{col} a k_{abs}}} C_g \quad (b10)$$

Usando (b10) en (b6):

$$N = k_{abs} \left(C_g - \frac{He}{RT} \frac{1}{\frac{He}{RT} + \frac{V_l k_{rx} M}{V_{col} a k_{abs}}} C_g \right)$$

$$N = k_{abs} \left(C_g - \frac{1}{1 + \frac{V_l k_{rx} MRT}{V_{col} a k_{abs} He}} C_g \right)$$

$$N = k_{abs} C_g \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{V_l k_{rx} MRT}{V_{col} a k_{abs} He}} \right)$$

$$N = C_g \left(k_{abs} - \frac{k_{abs}}{1 + \frac{V_l k_{rx} MRT}{V_{col} a k_{abs} He}} \right)$$

$$N = C_g \left(k_{abs} - \frac{k_{abs}}{\frac{V_{col} a k_{abs} He + V_l k_{rx} MRT}{V_{col} a k_{abs} He}} \right)$$

$$N = C_g \left(k_{abs} - \frac{V_{col} a k_{abs} He k_{abs}}{V_{col} a k_{abs} He + V_l k_{rx} MRT} \right)$$

$$N = C_g \left(\frac{V_{col} a k_{abs} He k_{abs} + V_l k_{rx} MRT k_{abs} - V_{col} a k_{abs} He k_{abs}}{V_{col} a k_{abs} He + V_l k_{rx} MRT} \right)$$

$$N = C_g \left(\frac{V_l k_{rx} MRT k_{abs}}{V_{col} a k_{abs} He + V_l k_{rx} MRT} \right)$$

$$N = C_g \left(\frac{1}{\frac{V_{col} a k_{abs} He + V_l k_{rx} MRT}{V_l k_{rx} MRT k_{abs}}} \right)$$

$$N = C_g \left(\frac{1}{\frac{V_{col} a_{He}}{V_l k_{rx} MRT} + \frac{1}{k_{abs}}} \right)$$

$$N = \left(\frac{1}{\frac{V_{col} a_{He}}{V_l k_{rx} MRT} + \frac{1}{k_g RT} + \frac{1}{k_l RT}} \right) C_g \quad (b11)$$

La reacción química tiene efecto sobre el coeficiente de transferencia de masa del lado del líquido, esto se incluye con el factor de mejora “E” (Danckwerts, 1970):

$$k_l = k_l^\circ E \quad (b12)$$

Para el caso del sistema CO₂-MEA (Danckwerts, 1970):

$$E = \frac{\sqrt{D_{D-L} k_{rx} M}}{k_l^\circ} \quad (b13)$$

Usando (b13) en (b12)

$$k_l = \sqrt{D_{D-L} k_{rx} M} \quad (b12')$$

Finalmente, sustituyendo (b12') en (b11):

$$N = \left(\frac{1}{\frac{a_{He}}{\varepsilon_l k_{rx} MRT} + \frac{1}{k_g RT} + \frac{1}{\sqrt{D_{D-L} k_{rx} M}}} \right) C_g \quad (b14)$$

En donde

$$\varepsilon_l = \frac{V_l}{V_{col}} \quad (b15)$$

Dado que la rapidez de reacción es mucho mayor que la de transferencia de masa (ver tabla b1), y teniendo en mente que $R = aN$, la ecuación (b14) puede reescribirse cómo:

$$R := f_R(M, T, C_g) = k_{abs} C_g \quad (b16)$$

Con

$$k_{abs} := f_{k_{abs}}(M, T) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{TM}}}}} \quad (b17)$$

$$C_g := f_{C_g}(C_{ge}, M, T, f_{kabs}(M, T)) = \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V}{q_{ge}} f_{kabs}(M, T)} \quad (\text{b.18})$$

En donde R tiene unidades de $\left[\frac{\text{masa}}{\text{tiempo volumen}} \right]$ y:

$$C_g := f_{C_g}(C_{ge}, M, T), \text{ es la concentración de CO}_2; \left[\frac{\text{masa}}{\text{volumen}} \right]$$

$kabs := f_{kabs}(M, T)$, es la constante de rapidez de absorción con reacción química; $[\text{tiempo}^{-1}]$

$cte1 = \frac{1}{ak_g'}$, es una constante correspondiente al término de la resistencia de transferencia de masa en la fase gas; $[\text{tiempo}]$

$cte2 = \frac{He}{a \sqrt{D_{C-l} k_{rx}^0 RT}}$, es una constante relacionada a la resistencia de transferencia de masa en la

fase líquida; $\left[\frac{\text{tiempo masa}^{\frac{1}{2}}}{\text{volumen}^{\frac{1}{2}}} \right]$

a , es el área específica de contacto; $\left[\frac{1}{\text{longitud}} \right]$

k_g' , es el coeficiente de transferencia de masa; $\left[\frac{\text{longitud}}{\text{s}} \right]$

D_{C-l} , es el coeficiente de difusión del CO₂ en la mezcla líquida; $\left[\frac{\text{longitud}^2}{\text{tiempo}} \right]$

k_{rx}^0 , es el factor pre exponencial de la constante de la rapidez de reacción, $\left[\frac{\text{volumen}}{\text{tiempo materia}} \right]$

Tabla b.1. Resistencias presentes en la función R .

Resistencia	Expresión	Valor [s/m]
Reacción	$\frac{a}{\varepsilon_l} \frac{aHe}{k_{rx} MRT}$	0.166
Fase Gas	$\frac{1}{k_g RT}$	54.92
Fase Líquida	$\frac{He}{\sqrt{D_{D-l} k_{rx} MRT}}$	208.86

APÉNDICE C: Transporte

Debido a simplificaciones derivadas de la operación y de la columna del caso de estudio principalmente, se muestra en este apéndice el efecto de las hipótesis que fueron consideradas para el modelo (sistema de ecuaciones EDP) de la columna.

Como los números de Peclet de la tabla a.1 lo sugieren, los efectos dispersivos dentro de la columna pueden ser considerados despreciables, ya que al ser grande el número de Peclet $Pe = \frac{\text{mecanismo convectivo}}{\text{mecanismo dispersivo}}$, el transporte convectivo es el predominante. Sin embargo, la naturaleza de la operación a contracorriente de la columna hace que exista, por así decirlo, una pseudodispersión, por lo tanto, despreciar el término del transporte debido a efectos dispersivos en los balances de materia y energía no es crítico. Con base en lo anterior, el término de transporte convectivo es el significativo en los balances de materia y energía para este caso de estudio.

Otro aspecto a destacar considerando a la tabla a.2 es que se puede suponer estado cuasi-estacionario para la fase gas en su totalidad debido a que el tiempo de residencia es considerablemente menor (aproximadamente 16 veces más chico) frente al tiempo de residencia de la fase líquida. El hacer esta consideración quita problemas de rigidez en el sistema al momento de simular el proceso.

Finalmente, en cuanto al transporte energético entre fases se refiere, al igual que para el transporte de materia, el número de Peclet mostrado en la tabla a.1 permite no considerar al transporte dispersivo, y debido a la magnitud de los coeficientes de transferencia de energía mostrados en la tabla a.3, no hay resistencia a la transferencia de energía y las temperaturas de las fases son prácticamente las mismas ($T_s \approx T_g \approx T_l \approx T$) como es mostrado en la figura E.1, por lo tanto, un sistema pseudocontinuo puede ser considerado para el balance energético. El efecto de esta consideración en el balance de energía es mostrado en el modelo matemático de la columna (ecs. 2e) mostrado en el capítulo 2.

APÉNDICE D: Hidráulica

Ya que la variable de control, u , es el flujo de alimentación del solvente (q_{le}), MEA, el flujo de líquido dentro de la columna empacada de absorción, q_l , al existir una perturbación, no será constante, por lo tanto es necesario contemplar la dinámica de la fase líquida.

Las publicaciones encontradas correspondientes al modelado de una columna empacada de absorción no consideran en su modelo a la hidráulica relacionada al sistema, mientras que en la presente tesis este punto se trata con el teorema de Torricelli el cual es un caso especial del teorema de Bernoulli [19]. El teorema de Torricelli pone de manifiesto que el flujo de un líquido por el orificio de un costado de la base del recipiente que lo contiene adquiere una velocidad que es precisamente la misma que si cayese libre desde la superficie del líquido al nivel del agujero [54].

La ecuación de Bernoulli, considerando un líquido incompresible no viscoso y que no hay pérdidas por fricción es (ec. d.1):

$$P_1 + \rho gh_1 + \frac{1}{2}\rho v_{l1}^2 = P_0 + \rho gh_0 + \frac{1}{2}\rho v_{l0}^2 \quad (d.1)$$

Si la superficie del recipiente es muy grande en comparación con la del orificio de salida (como es para este trabajo de tesis), y siempre y cuando la superficie del líquido y el orificio de salida no estén muy alejados puede considerarse, según la ecuación de continuidad [19], que la velocidad v_{l1} (en la cima del recipiente) es prácticamente nula, y considerando nuevamente que se trata de un fluido incompresible la ecuación anterior se puede expresar como:

$$gh_1 = gh_0 + \frac{1}{2}v_{l0}^2 \quad (d.2)$$

Ya que para el caso de la columna empacada h_0 es la base de la zona empacada y $h_1 = L$ es la altura de dicha zona (ver figura 2.1), y despejando v_0 de la ec. (d.2) se tiene

$$v_{l0} = \sqrt{2gL} \quad (d.3)$$

Para el caso de estudio de esta tesis, se requiere saber el flujo que pasa a través de una sección de columna en vez de su velocidad. Teniendo en mente que el flujo de líquido de salida es $q_{ls} = v_{ls}A_T\varepsilon_l$, en dónde ε_l es la fracción de líquido, entonces, de la ecuación (d.3) y reacomodando términos se tiene:

$$q_{ls} = \sqrt{2g \frac{V_l^2}{L}} \quad (d.4)$$

Ya que la columna es empacada y que el gas es suministrado por el extremo contrario al que es introducido el líquido, éste no circula libremente por lo que se generan pérdidas por fricción, por lo tanto es necesario incluir un coeficiente de descarga, C_d , que considere estos efectos. Dado que la cantidad de empaques es constante, el flujo de salida del líquido dependerá del flujo de gas que es suministrado a la columna, por lo tanto, el coeficiente de descarga debe ser de la forma $C_d = f_{C_d}(q_{ge})$. Es importante tener en mente que aunque no haya flujo de gas si hay retención de líquido debido a los empaques y aunado a que se opera lejos de la zona de inundación se propone una forma lineal para el coeficiente de descarga cómo es mostrada en la ecuación (d.5).

$$C_d = f_{C_d}(q_{ge}) = cte3 - cte4q_{ge} \quad (d.5)$$

Las constantes de la ecuación (d.5) fueron determinadas mediante simulación numérica con el fin de que el modelo tuviera un mejor desempeño, es decir, se ajustaron para conseguir un mayor acercamiento a los datos experimentales (tanto del estado estacionario cómo del estado transitorio) reportados por Paitoon [14]. La ecuación d.6 muestra la relación del flujo que fue usada en este trabajo de tesis.

$$q_l = f_{q_l}(V_l, q_{ge}) = C_d \sqrt{\frac{2g}{L}} V_l = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_l \quad (d.6)$$

En dónde

q_l , es el flujo de líquido $\left[\frac{m^3}{s}\right]$

q_{ge} , es el flujo de entrada de gas $\left[\frac{m^3}{s}\right]$

$cte3 = 0.0138$ (adimensional) y $cte4 = 3.02 \left[\frac{s}{m^3}\right]$, son constantes de la ecuación

$g = 9.81 \frac{m}{s^2}$, es la constante de la aceleración de la gravedad

L , es la altura de la zona empacada $[m]$

V_l , es el volumen de la fase líquida $[m^3]$

La ecuación anterior fue usada en la simulación de la columna empacada de absorción (con los valores de los parámetros antes mencionados) con la cual se obtuvieron resultados satisfactorios para el estado estacionario y el estado transitorio de la misma.

APÉNDICE E: Balances de materia y energía

Considerando la explicación de la operación de la columna empacada de absorción mostrada en el capítulo 2 (sección 2.1), y teniendo en mente las consideraciones ingenieriles estándar hechas para este tipo de aparatos [17] y las listadas en dicha sección, se toma en cuenta que en el intervalo de operación de la columna empacada de absorción los valores de las propiedades físicas tales como la densidad (ρ) y el calor específico (Cp) no varían de forma significativa, por lo tanto pueden considerarse constantes (para todas las fases), es decir, $\rho_{ge} = \rho$ y $Cp_e = Cp$. Aunque para efectos del modelado las propiedades físicas son consideradas constantes, se utilizaron las ecuaciones mostradas en los trabajos de Kvamsdal [6] y Penttilä [32] para evaluarlas.

En cuanto a funcionamiento, la columna opera de manera adiabática, por lo tanto se considera que no hay intercambio energético con el medio ($U = 0$).

Además, como está explicado en el apéndice B, la rapidez con la que el CO_2 desaparece de la fase gas es igual a la rapidez con la que es absorbido en la fase líquida e igual a la rapidez con la que reacciona, por lo tanto se puede escribir una rapidez global del proceso de absorción con reacción química $R = f_R(M, T, C_g)$ (ver ecuación (b.16)).

Balance de Materia para la fase gas

En la fase gas son considerados dos componentes: uno es el aire que es considerado no reactivo y puede ser cuantificado mediante el balance total de materia de la fase gas y, el otro, es el CO_2 para el cual será obtenido el balance de materia presentado en la ecuación (2d).

Ya que el líquido permanece en la columna en condiciones de estado estacionario 187 s, mientras que el gas sólo permanece en ella alrededor de 10 s, es posible considerarse estado cuasiestacionario para la fase gas ($\frac{\partial V_g C_g}{\partial t} \approx 0$) en relación a la fase líquida y teniendo en mente que el número de Peclet de la tabla A.2 muestra que el transporte convectivo es aproximadamente 680 veces mayor que el transporte difusivo, el término dispersivo puede ser despreciado ($\mathcal{D}_{mg} \frac{\partial^2 V_g C_g}{\partial z^2} \approx 0$), solo se necesita una condición de frontera para el balance de materia del CO_2 .

Por otro lado, para fines prácticos, se puede aproximar que $q_{ge} \cong q_g$ ya que los datos experimentales del trabajo de Paitoon [14] muestran que la diferencia entre dichos flujos es apenas menor del 5%.

Con base en estas suposiciones, el balance de materia para el CO_2 presente en la fase gas queda:

$$0 = Lq_{ge} \frac{\partial c_g}{\partial z} - Vf_R(M, T); \quad \frac{\partial c_g}{\partial z} = 0; \quad \text{en } z = L \quad (\text{e.1})$$

Balance de Materia para la fase líquida

Bajo la consideración de que el efecto de la absorción del CO_2 sobre el volumen del líquido poder ser considerado despreciable $\left(\frac{Vak_l}{\rho_l}(C_{lg} - C) \approx 0\right)$ [48] y que las propiedades físicas como la densidad son constantes, la ecuación de balance total de materia con su condición inicial queda:

$$\frac{\partial V_l}{\partial t} = L \frac{\partial q_l}{\partial z}; \quad V_l(0) = V_{l0}; \quad \frac{\partial q_l}{\partial z} = 0; \quad \text{en } z = 0 \quad (\text{e.2})$$

Dado que la rapidez de reacción es igual a la rapidez de absorción (la transferencia de masa es más lenta que la reacción química), es decir, todo lo que se absorbe reacciona inmediatamente, y aunado al hecho de que no hay concentración de entrada de CO_2 en la fase líquida, el balance de materia para el contaminante en dicha fase puede ser despreciado además de que, desde el punto de vista de la simulación y control del sistema, su cálculo o la falta de él no influye o interfiere con el propósito de esta tesis.

Es importante hacer énfasis en que las variables de interés son la concentración de CO_2 en el gas y de MEA en la fase líquida, por lo que no es necesario resolver los balances de materia del CO_2 en la fase líquida (como ya fue comentado) ni del carbamato (P), lo cual no afecta a la dinámica del sistema puesto que son ecuaciones no acopladas y al quitar sus correspondientes balances de materia también son retiradas dos variables del sistema (incógnitas).

Por otro lado, el influente líquido, como ya fue mencionado, trae una concentración de entrada de MEA (M_e) y debido a que la reacción química sólo ocurre en la fase líquida (donde es formado el carbamato, P) y que, nuevamente, el término dispersivo del balances puede ser considerado despreciable (el transporte convectivo es aproximadamente 180 veces mayor que el transporte dispersivo), el balance de materia para la MEA es mostrado en la ecuación (e.3) sujeto a sus condiciones inicial y frontera.

$$\frac{\partial MV_l}{\partial t} = L \frac{\partial(q_l M)}{\partial z} - 2VR; \quad M(0) = M_e; \quad \frac{\partial M}{\partial z} = 0; \quad \text{en } z = 0 \quad (\text{e.3})$$

Balance de Materia para la fase sólida

Como se explicó con anterioridad, el empaque (fase sólida), el cual es fabricado en un material inerte (es decir, no interactúa químicamente con los componentes presentes en la columna), sólo funciona como un soporte que incrementa el área de contacto entre la fase gas y la fase líquida y que por lo tanto, aunado al hecho de no haber suministro de empaques a la columna durante la operación, no hay incremento ni disminución de masa de esta fase, en otras palabras, su balance de materia en todo momento será igual a cero.

$$\frac{\partial \rho_s V_s}{\partial t} = 0; \quad V_s(0) = T_{le} \quad (\text{e.4})$$

Balance de Energía

Como puede ser visto en la tabla A.3 la magnitud de los coeficientes de transferencia de energía sugieren que la resistencia a la transferencia de ésta entre fases es despreciable, lo que es reforzado en la figura E.1, la cual fue construida modelando los balances dinámicos energéticos para las tres fases por separado para posteriormente ser resueltas numéricamente y mostrando así que el sistema está en equilibrio térmico. Por este motivo es posible considerar una fase pseudocontinua del sistema en cuanto al balance de energía se refiere, es decir, en vez de tener tres temperaturas (tres ecuaciones diferenciales parciales, un balance para cada fase) se puede hacer uso de una sola es decir, $T_s \approx T_g \approx T_l \approx T$. Para conseguir esto, es necesario sumar los balances energéticos de cada fase, los cuales son mostrados en las ecuaciones (e.5-e.7). Es preciso tener en mente que la reacción química sólo ocurre en la fase líquida, que las propiedades físicas de las fases son consideradas constantes, que no hay resistencia al intercambio energético, que el transporte convectivo es mucho mayor que el dispersivo y que se considera que la fase gas se encuentra en estado cuasiestacionario. Para abordar el balance de energía general (sin simplificaciones) para cada fase es necesario tener en mente que el término fuente del balance representa el calor generado por la reacción química entre el CO₂ y la MEA, que es llevada a cabo en la fase líquida y que por ende la transferencia de energía se da de la fase líquida a la fase gas y a la fase sólida. El procedimiento para obtener el balance de energía se muestra a continuación. Los balances de energía de cada fase son:

Para la fase gas

$$\frac{\partial(\rho_g C_p V_g T_g)}{\partial t} = f_{T_g}(T_g) = -L \frac{\partial(q_g \rho_g C_p T_g)}{\partial z} \quad (\text{e.5})$$

Para la fase líquida

$$\frac{\partial(\rho_l C p_l V_l T_l)}{\partial t} = f_{T_l}(C_g, M, T_l) = L \frac{\partial(q_l \rho_l C p_l T_l)}{\partial z} + (-\Delta H)VR \quad (e.6)$$

Para la fase sólida

$$\frac{\partial(\rho_s C p_s V_s T_s)}{\partial t} = 0 \quad (e.7)$$

Sumando las ecuaciones (e.5) a (e.7) y sacando las constantes (densidades $-\rho_g, \rho_l, \rho_s$, capacidades caloríficas $-C p_g, C p_l, C p_s$, volumen del sólido $-V_s$, flujo de gas $-q_g$):

$$\rho_g C p_g \frac{\partial(V_g T_g)}{\partial t} + \rho_l C p_l \frac{\partial(V_l T_l)}{\partial t} + \rho_s C p_s V_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = -L q_g \rho_g C p_g \frac{\partial T_g}{\partial z} + L \rho_l C p_l \frac{\partial(q_l T_l)}{\partial z} + (-\Delta H)VR$$

Considerando que $(T_s \approx T_g \approx T_l \approx T)$:

$$\rho_g C p_g \frac{\partial(V_g T)}{\partial t} + \rho_l C p_l \frac{\partial(V_l T)}{\partial t} + \rho_s C p_s V_s \frac{\partial T}{\partial t} = -L q_g \rho_g C p_g \frac{\partial T}{\partial z} + L \rho_l C p_l \frac{\partial(q_l T)}{\partial z} + (-\Delta H)VR$$

Ya que se considera estado cuasiestacionario para la fase gas entonces $\frac{\partial V_g}{\partial t} = 0$. Desarrollando la derivada del término correspondiente a la fase líquida de ambos lados de la expresión y agrupando los términos comunes se llega a:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -L \frac{q_g}{\mathfrak{C}} \rho_g C p_g \frac{\partial T}{\partial z} + L \rho_l C p_l q_l \frac{1}{\mathfrak{C}} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{1}{\mathfrak{C}} (-\Delta H)VR; \quad T(0) = T_{le}; \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0; \quad \text{en } z = 0 \quad (e.8)$$

$$\mathfrak{C} = \rho_g C p_g V_g + \rho_l C p_l V_l + \rho_s C p_s V_s \quad (e.9)$$

En dónde $\mathfrak{C} = f_{\mathfrak{C}}(V_l) \left[\frac{\text{energía}}{\text{temperatura}} \right]$ es una capacitancia térmica ponderada en masa.

Las ecuaciones (e.1-e.3) y (e.8) constituyen el modelo dinámico de la columna empacada de absorción, lo cual es mostrado en el capítulo 2 con las ecuaciones adicionales que constituyen el problema de control.

La tabla e.1 proporciona la nomenclatura usada en el conjunto de EDP. El estado estacionario de la columna empacada puede ser descrito mediante las ecuaciones (e.2), (e.3) y (e.8) igualándolas a cero con lo que se traduce en un sistema de EDO, es decir:

$$0 = L \frac{dq_i}{dz}$$

$$0 = L \frac{d(q_i M)}{dz} - 2VR$$

$$0 = -L \frac{q_g}{f_c(V)} \rho_g C_p g \frac{dT}{dz} + L \rho_l C_p l q_l \frac{1}{f_c(V)} \frac{dT}{dz} + \frac{1}{6} (-\Delta H) VR$$

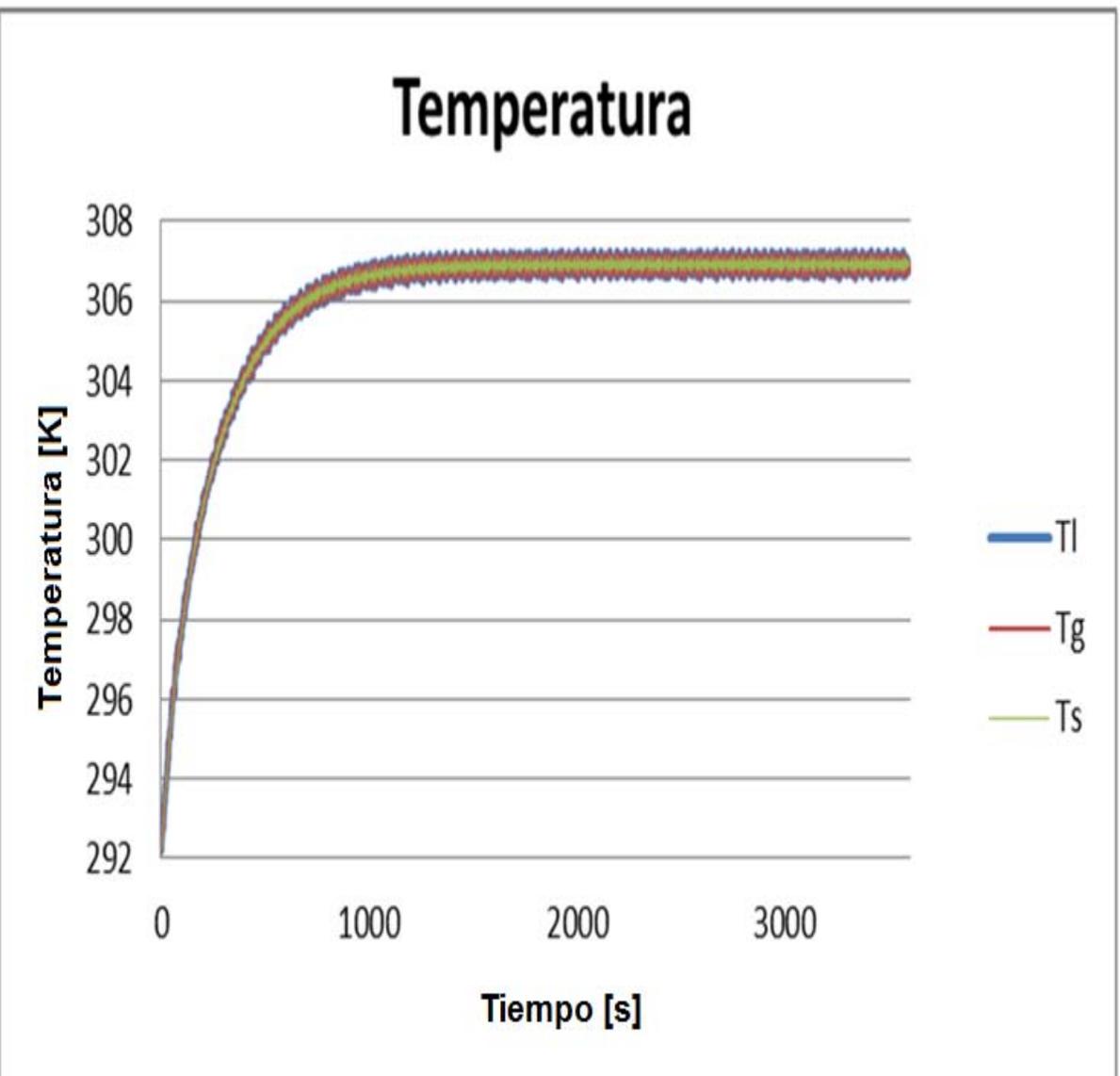


Figura E.1. Comparación de evoluciones de temperatura (a lazo abierto) de la fase sólida, líquida y gas.

Tabla e.1. Nomenclatura del sistema de EDP que describe la dinámica de la columna.

Nomenclatura		
Letra	Descripción	Unidades
a	Área específica	$\text{m}^2 \text{ contacto} / \text{m}^3 \text{ columna}$
C_p	Capacidad calorífica	J/kg K o J/mol K
C	Concentración de CO_2	mol/m^3
\mathcal{D}	Coeficiente de dispersión de masa	m^2/s
D	Coeficiente de difusión	m^2/s
ΔH	Entalpía de transferencia de masa con reacción química	J/mol
EA	Energía de activación sobre constante universal de los gases	T
h	Coeficiente de transferencia de energía	$\text{J/sm}^2\text{K}$
He	Constante de Henry	$\text{Pa m}^3/\text{mol}$
k	Constante	
k_g'	Coeficiente de transferencia de masa	m/s
L	Longitud (Empacada)	M
M	Concentración de MEA	mol/m^3
P	Concentración de Carbamato	mol/m^3
q	Flujo volumétrico	m^3/s
R	Rapidez de transferencia de masa con reacción	$\text{mol/m}^3 \text{ columna s}$
R	Constante Universal de los Gases	$\text{Pa m}^3/\text{mol K}$
r	Rapidez de reacción	$\text{mol/m}^3 \text{ líquido s}$
ρ	Densidad	kg/m^3 o mol/m^3
T	Temperatura	K
U	Coeficiente global de transferencia de energía	$\text{J/sm}^2\text{K}$
V	Volumen	m^3
v	Velocidad	m/s
z	Posición axial	M
Subíndices		
0	Inicial	
$C - l$	Relacionado a la difusión CO_2 -líquido	
e	Entrada	
g, l, s	Fase gas, fase líquida y fase sólida (respectivamente)	
lg	Relacionado a la interfase líquido-gas	
m	Masa	
rx	Relacionado a la reacción química	

Tabla e.1. Nomenclatura del sistema de EDP que describe la dinámica de la columna (continuación).

Acrónimos	
CSTR	Reactor de tanque continuo agitado (por sus siglas en inglés)
EDO	Ecuación Diferencial Ordinaria
EDP	Ecuación Diferencial Parcial
MEA	mono etanol amina
PI	Control Proporcional Integral

APÉNDICE F: Comparación de la discretización espacial de la columna empacada de absorción por nodos internos con la discretización por CSTR's

Tabla f.1. Comparación del conjunto de ecuaciones del sistema de parámetros concentrados obtenido para un nodo interno y para un tanque CSTR.

Mallado Uniforme	Partición Isocórica (CSTR)
$\dot{V}_l = q_{le} - f_{q_l}(V_l, f_{c_d}(q_{ge}))$ $f_{q_l}(V_l, f_{c_d}(q_{ge})) = q_l = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_l$	$\dot{V}_l = q_{le} - f_{q_l}(V_l, f_{c_d}(q_{ge}))$ $f_{q_l}(V_l, f_{c_d}(q_{ge})) = q_l = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_l$
$\dot{M} = \frac{q_{le}}{V_l}(M_e - M) - 2 \frac{V}{V_l} f_R(M, T)$ $f_R(M, T) = R = k_{abs} C_g$ $= \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T}} M}}} \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V}{q_{ge}} f_{kabs}(M, T)}$ $f_{kabsi}(M, T) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T}} M}}}$	$\dot{M} = \frac{q_{le}}{V_l}(M_e - M) - 2 \frac{V}{V_l} f_R(M, T)$ $f_{R_1}(M, T) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T}} M}}} \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V_l}{q_{ge}} f_{kabs}(M, T)}$ $f_{kabs}(M, T) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T}} M}}}$
$\dot{T} = \frac{q_g \rho_g C_p g}{f_{\mathfrak{C}}(V_l)} (T_{ge} - T) + \frac{q_{le} \rho_l C_p l}{f_{\mathfrak{C}}(V_l)} (T_{le} - T)$ $+ \frac{1}{f_{\mathfrak{C}}(V_l)} (-\Delta H) V f_R(M, T)$ $f_R(M, T) = f_{kabsi}(M, T) f_{c_g}(C_{ge}, f_{kabs}(M, T_i))$ $f_{\mathfrak{C}}(V_l) = \mathfrak{C} = \rho_g C_p g V_g + \rho_l C_p l V_l + \rho_s C_p s V_s$	$\dot{T} = \frac{q_g \rho_g C_p g}{f_{\mathfrak{C}}(V_l)} (T_{ge} - T) + \frac{q_{le} \rho_l C_p l}{f_{\mathfrak{C}}(V_l)} (T_{le} - T)$ $+ \frac{1}{f_{\mathfrak{C}}(V_l)} (-\Delta H) V f_R(M, T)$ $f_R(M, T) = f_{kabs}(M, T) f_{c_g}(C_{ge}, f_{kabs}(M, T))$ $f_{\mathfrak{C}_1}(V_l) = \rho_g C_p g V_g + \rho_l C_p l V_l + \rho_s C_p s V_s$
$C_g = f_{c_g}(C_{ge}, f_{kabs}(M, T)) = \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V_l}{q_{ge}} f_{kabs}(M, T)}$	$C_g = f_{c_g}(C_{ge}, f_{kabs}(M, T)) = \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V}{q_{ge}} f_{kabs}(M, T)}$

Tabla f.2. Comparación del conjunto de ecuaciones del sistema de parámetros concentrados obtenido para dos nodos internos y para dos tanques CSTR.

Mallado Uniforme	Partición Isocórica (CSTR)
$\dot{V}_{11} = f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) - f_{q_{11}}(V_{11}, f_{c_d}(q_{ge}))$ $f_{q_{11}}(V_{11}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{11} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{11} ;$ $f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{12} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{12}$	$\dot{V}_{11} = f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) - f_{q_{11}}(V_{11}, f_{c_d}(q_{ge}))$ $f_{q_{11}}(V_{11}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{11} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{11} ;$ $f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{12} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{12}$
$\dot{M}_1 = \frac{f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge}))}{V_{11}} (M_2 - M_1) - 2 \frac{V_1}{V_{11}} f_{R_1}(M_1, T_1)$ $f_{R_1}(M_1, T_1) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_1} M_1}}}} \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V_1}{q_{ge}} f_{kabs1}(M_1, T_1)}$ $f_{kabs1}(M_1, T_1) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_1} M_1}}}}$	$\dot{M}_1 = \frac{f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge}))}{V_{11}} (M_2 - M_1) - 2 \frac{V_1}{V_{11}} f_{R_1}(M_1, T_1)$ $f_{R_1}(M_1, T_1) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_1} M_1}}}} \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V_1}{q_{ge}} f_{kabs1}(M_1, T_1)}$ $f_{kabs1}(M_1, T_1) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_1} M_1}}}}$
$\dot{T}_1 = \frac{q_g \rho_g C p_g}{f_{\bar{v}_1}(V_{11})} (T_{ge} - T_1) + \frac{f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) \rho_l C p_l}{f_{\bar{v}_1}(V_{11})} (T_2 - T_1)$ $+ \frac{1}{f_{\bar{v}_1}(V_{11})} (-\Delta H) V_1 f_{R_1}(M_1, T_1)$ $f_{R_1}(M_1, T_1) = f_{kabs1}(M_1, T_1) f_{c_{g1}}(C_{ge}, f_{kabs1}(M_1, T_1))$ $f_{\bar{v}_1}(V_{11}) = \rho_g C p_g V_{g1} + \rho_l C p_l V_{11} + \rho_s C p_s V_s$	$\dot{T}_1 = \frac{q_g \rho_g C p_g}{f_{\bar{v}_1}(V_{11})} (T_{ge} - T_1) + \frac{f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) \rho_l C p_l}{f_{\bar{v}_1}(V_{11})} (T_2 - T_1)$ $+ \frac{1}{f_{\bar{v}_1}(V_{11})} (-\Delta H) V_1 f_{R_1}(M_1, T_1)$ $f_{R_1}(M_1, T_1) = f_{kabs1}(M_1, T_1) f_{c_{g1}}(C_{ge}, f_{kabs1}(M_1, T_1))$ $f_{\bar{v}_1}(V_{11}) = \rho_g C p_g V_{g1} + \rho_l C p_l V_{11} + \rho_s C p_s V_s$
$\dot{V}_{12} = q_{1e} - f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge}))$ $f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{12} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{12}$	$\dot{V}_{12} = q_{1e} - f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge}))$ $f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{12} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{12}$

$\dot{M}_2 = \frac{q_{le}}{V_{l2}}(M_e - M_2) - 2 \frac{V_2}{V_{l2}} f_{R_2}(M_2, T_2)$ $f_{R_2}(M_2, T_2) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_2}} M_2}}} \frac{C_{g1}}{1 + \frac{V_2}{q_{ge}} f_{kabs2}(M_2, T_2)}$ $f_{kabs2}(M_2, T_2) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_2}} M_2}}}$	$\dot{M}_2 = \frac{q_{le}}{V_{l2}}(M_e - M_2) - 2 \frac{V_2}{V_{l2}} f_{R_2}(M_2, T_2)$ $f_{R_2}(M_2, T_2) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_2}} M_2}}} \frac{C_{g1}}{1 + \frac{V_2}{q_{ge}} f_{kabs2}(M_2, T_2)}$ $f_{kabs2}(M_2, T_2) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_2}} M_2}}}$
$\dot{T}_2 = \frac{q_g \rho_g C p_g}{f_{\bar{v}_2}(V_{l2})} (T_1 - T_2) + \frac{q_{le} \rho_l C p_l}{f_{\bar{v}_2}(V_{l2})} (T_{le} - T_2)$ $+ \frac{1}{f_{\bar{v}_2}(V_{l2})} (-\Delta H) V_2 f_{R_2}(M_2, T_2)$ $f_{R_2}(M_2, T_2) = f_{kabs2}(M_2, T_2) f_{C_{g2}}(C_{g1}, f_{kabs2}(M_2, T_2))$ $f_{\bar{v}_2}(V_{l2}) = \rho_g C p_g V_{g2} + \rho_l C p_l V_{l2} + \rho_s C p_s V_s$	$\dot{T}_2 = \frac{q_g \rho_g C p_g}{f_{\bar{v}_2}(V_{l2})} (T_1 - T_2) + \frac{q_{le} \rho_l C p_l}{f_{\bar{v}_2}(V_{l2})} (T_{le} - T_2)$ $+ \frac{1}{f_{\bar{v}_2}(V_{l2})} (-\Delta H) V_2 f_{R_2}(M_2, T_2)$ $f_{R_2}(M_2, T_2) = f_{kabs2}(M_2, T_2) f_{C_{g2}}(C_{g1}, f_{kabs2}(M_2, T_2))$ $f_{\bar{v}_2}(V_{l2}) = \rho_g C p_g V_{g2} + \rho_l C p_l V_{l2} + \rho_s C p_s V_s$
$C_{g1} = f_{C_g}(C_{ge}, f_{kabs1}(M_1, T_1)) = \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V_1}{q_{ge}} f_{kabs1}(M_1, T_1)}$	$C_{g1} = f_{C_g}(C_{ge}, f_{kabs1}(M_1, T_1)) = \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V}{q_{ge}} k_{abs1}(M_1, T_1)}$
$C_{g2} = \frac{f_{C_{g1}}(C_{g1}, M_2, T_2)}{1 + \frac{V_2}{q_{ge}} f_{kabs2}(M_2, T_2)}$ $= \frac{C_{ge}}{\left(1 + \frac{V_1}{q_{ge}} f_{kabs1}(M_1, T_1)\right) \left(1 + \frac{V_2}{q_{ge}} f_{kabs2}(M_2, T_2)\right)}$	$C_{g2} = \frac{f_{C_{g1}}(C_{g1}, M_2, T_2)}{1 + \frac{V}{q_{ge}} k_{abs2}(M_2, T_2)}$ $= \frac{C_{ge}}{\left(1 + \frac{V_1}{q_{ge}} f_{kabs1}(M_1, T_1)\right) \left(1 + \frac{V_2}{q_{ge}} f_{kabs2}(M_2, T_2)\right)}$

Tabla f.3. Comparación del conjunto de ecuaciones del sistema de parámetros concentrados obtenido para tres nodos internos y para tres tanques CSTR.

Mallado Uniforme	Partición Isocórica (CSTR)
$\dot{V}_{11} = f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) - f_{q_{11}}(V_{11}, f_{c_d}(q_{ge}))$ $f_{q_{11}}(V_{11}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{11} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{11} ;$ $f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{12} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{12}$	$\dot{V}_{11} = f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) - f_{q_{11}}(V_{11}, f_{c_d}(q_{ge}))$ $f_{q_{11}}(V_{11}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{11} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{11} ;$ $f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{12} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{12}$
$\dot{M}_1 = \frac{f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge}))}{V_{11}} (M_2 - M_1) - 2 \frac{V_1}{V_{11}} f_{R_1}(M_1, T_1)$ $f_{R_1}(M_1, T_1) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_1} M_1}}} + \frac{V_1}{q_{ge}} f_{kabs1}(M_1, T_1)} C_{ge}$ $f_{kabs1}(M_1, T_1) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_1} M_1}}}}$	$\dot{M}_1 = \frac{f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge}))}{V_{11}} (M_2 - M_1) - 2 \frac{V_1}{V_{11}} f_{R_1}(M_1, T_1)$ $f_{R_1}(M_1, T_1) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_1} M_1}}} + \frac{V_1}{q_{ge}} f_{kabs1}(M_1, T_1)} C_{ge}$ $f_{kabs1}(M_1, T_1) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_1} M_1}}}}$
$\dot{T}_1 = \frac{q_g \rho_g C p_g}{f_{\bar{c}_1}(V_{11})} (T_{ge} - T_1) + \frac{f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) \rho_l C p_l}{f_{\bar{c}_1}(V_{11})} (T_2 - T_1)$ $+ \frac{1}{f_{\bar{c}_1}(V_{11})} (-\Delta H) V_1 f_{R_1}(M_1, T_1)$ $f_{R_1}(M_1, T_1) = f_{kabs1}(M_1, T_1) f_{c_{g1}}(C_{ge}, f_{kabs1}(M_1, T_1))$ $f_{\bar{c}_1}(V_{11}) = \rho_g C p_g V_{g1} + \rho_l C p_l V_{11} + \rho_s C p_s V_s$	$\dot{T}_1 = \frac{q_g \rho_g C p_g}{f_{\bar{c}_1}(V_{11})} (T_{ge} - T_1)$ $+ \frac{f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) \rho_l C p_l}{f_{\bar{c}_1}(V_{11})} (T_2 - T_1)$ $+ \frac{1}{f_{\bar{c}_1}(V_{11})} (-\Delta H) V_1 f_{R_1}(M_1, T_1)$ $f_{R_1}(M_1, T_1) = f_{kabs1}(M_1, T_1) f_{c_{g1}}(C_{ge}, f_{kabs1}(M_1, T_1))$ $f_{\bar{c}_1}(V_{11}) = \rho_g C p_g V_{g1} + \rho_l C p_l V_{11} + \rho_s C p_s V_s$
$\dot{V}_{12} = f_{q_{13}}(V_{13}, f_{c_d}(q_{ge})) - f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge}))$ $f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{12} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{12} ;$ $f_{q_{13}}(V_{13}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{13} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{13}$	$\dot{V}_{12} = f_{q_{13}}(V_{13}, f_{c_d}(q_{ge})) - f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge}))$ $f_{q_{12}}(V_{12}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{12} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{12} ;$ $f_{q_{13}}(V_{13}, f_{c_d}(q_{ge})) = q_{13} = (cte3 - cte4q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} V_{13}$

$\dot{M}_2 = \frac{f_{q13}(V_{13}, f_{cd}(q_{ge}))}{V_{12}}(M_3 - M_2) - 2 \frac{V_2}{V_{12}} f_{R_2}(M_2, T_2)$ $f_{R_2}(M_2, T_2) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_2} M_2}}}} \frac{C_{g1}}{1 + \frac{V_2}{q_{ge}} f_{kabs2}(M_2, T_2)}$ $f_{kabs2}(M_2, T_2) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_2} M_2}}}}$	$\dot{M}_2 = \frac{f_{q13}(V_{13}, f_{cd}(q_{ge}))}{V_{12}}(M_3 - M_2) - 2 \frac{V_2}{V_{12}} f_{R_2}(M_2, T_2)$ $f_{R_2}(M_2, T_2) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_2} M_2}}}} \frac{C_{g1}}{1 + \frac{V_2}{q_{ge}} f_{kabs2}(M_2, T_2)}$ $f_{kabs2}(M_2, T_2) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_2} M_2}}}}$
$\dot{T}_2 = \frac{q_g \rho_g C p_g}{f_{\mathbb{E}_2}(V_{12})} (T_1 - T_2) + \frac{f_{q13}(V_{13}, f_{cd}(q_{ge})) \rho_l C p_l}{f_{\mathbb{E}_2}(V_{12})} (T_3 - T_2)$ $+ \frac{(-\Delta H) V_2 f_{R_2}(M_2, T_2)}{f_{\mathbb{E}_2}(V_{12})}$ $f_{R_2}(M_2, T_2) = f_{kabs2}(M_2, T_2) f_{C_{g2}}(C_{g1}, f_{kabs2}(M_2, T_2))$ $f_{\mathbb{E}_2}(V_{12}) = \rho_g C p_g V_{g2} + \rho_l C p_l V_{12} + \rho_s C p_s V_s$	$\dot{T}_2 = \frac{q_g \rho_g C p_g}{f_{\mathbb{E}_2}(V_{12})} (T_1 - T_2)$ $+ \frac{f_{q13}(V_{13}, f_{cd}(q_{ge})) \rho_l C p_l}{f_{\mathbb{E}_2}(V_{12})} (T_3 - T_2)$ $+ \frac{1}{f_{\mathbb{E}_2}(V_{12})} (-\Delta H) V_2 f_{R_2}(M_2, T_2)$ $f_{R_2}(M_2, T_2) = f_{kabs2}(M_2, T_2) f_{C_{g2}}(C_{g1}, f_{kabs2}(M_2, T_2))$ $f_{\mathbb{E}_2}(V_{12}) = \rho_g C p_g V_{g2} + \rho_l C p_l V_{12} + \rho_s C p_s V_s$
$V_{13} = q_{1e} - f_{q13}(V_{13}, f_{cd}(q_{ge}))$ $f_{q13}(V_{13}, f_{cd}(q_{ge})) = q_{13} = (cte3 - cte4 q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} \frac{V_{13}}{N}$	$V_{13} = q_{1e} - f_{q13}(V_{13}, f_{cd}(q_{ge}))$ $f_{q13}(V_{13}, f_{cd}(q_{ge})) = q_{13} = (cte3 - cte4 q_{ge}) \sqrt{\frac{2g}{L}} \frac{V_{13}}{N}$
$M_3 = \frac{q_{1e}}{V_{12}} (M_e - M_3) - 2 \frac{V_3}{V_{13}} f_{R_3}(M_3, T_3)$ $f_{R_3}(M_3, T_3) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_3} M_3}}}} \frac{C_{g2}}{1 + \frac{V_3}{q_{ge}} f_{kabs3}(M_3, T_3)}$ $f_{kabs3}(M_3, T_3) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_3} M_3}}}}$	$\dot{M}_3 = \frac{q_{1e}}{V_{12}} (M_e - M_3) - 2 \frac{V_3}{V_{13}} f_{R_3}(M_3, T_3)$ $f_{R_3}(M_3, T_3) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_3} M_3}}}} \frac{C_{g2}}{1 + \frac{V_3}{q_{ge}} f_{kabs3}(M_3, T_3)}$ $f_{kabs3}(M_3, T_3) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{e^{11.71 - \frac{EA}{T_3} M_3}}}}$
$\dot{T}_3 = \frac{q_g \rho_g C p_g}{f_{\mathbb{E}_3}(V_{13})} (T_2 - T_3) + \frac{q_{1e} \rho_l C p_l}{f_{\mathbb{E}_3}(V_{13})} (T_{1e} - T_3)$ $+ \frac{(-\Delta H) V_3 f_{R_3}(M_3, T_3)}{f_{\mathbb{E}_3}(V_{13})}$ $f_{R_3}(M_3, T_3) = f_{kabs3}(M_3, T_3) f_{C_{g3}}(C_{g2}, f_{kabs3}(M_3, T_3))$ $f_{\mathbb{E}_3}(V_{13}) = \rho_g C p_g V_{g3} + \rho_l C p_l V_{13} + \rho_s C p_s V_s$	$\dot{T}_3 = \frac{q_g \rho_g C p_g}{f_{\mathbb{E}_3}(V_{13})} (T_2 - T_3) + \frac{q_{1e} \rho_l C p_l}{f_{\mathbb{E}_3}(V_{13})} (T_{1e} - T_3)$ $+ \frac{1}{f_{\mathbb{E}_3}(V_{13})} (-\Delta H) V_3 f_{R_3}(M_3, T_3)$ $f_{R_3}(M_3, T_3) = f_{kabs3}(M_3, T_3) f_{C_{g3}}(C_{g2}, f_{kabs3}(M_3, T_3))$ $f_{\mathbb{E}_3}(V_{13}) = \rho_g C p_g V_{g3} + \rho_l C p_l V_{13} + \rho_s C p_s V_s$

$C_{g1} = f_{C_{g1}}(C_{ge}, f_{k_{abs1}}(M_1, T_1)) = \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V_1}{q_{ge}} k_{abs1}(M_1, T_1)}$	$C_{g1} = f_{C_{g1}}(C_{ge}, f_{k_{abs1}}(M_1, T_1)) = \frac{C_{ge}}{1 + \frac{V_1}{q_{ge}} k_{abs1}(M_1, T_1)}$
$C_{g2} = \frac{\hat{f}_{C_{g1}}(C_{g1}, M_2, T_2)}{1 + \frac{V_2}{q_{ge}} k_{abs2}(M_2, T_2)}$ $= \frac{C_{ge}}{\left(1 + \frac{V_1}{q_{ge}} k_{abs1}(M_1, T_1)\right) \left(1 + \frac{V_2}{q_{ge}} k_{abs2}(M_2, T_2)\right)}$	$C_{g2} = \frac{\hat{f}_{C_{g1}}(C_{g1}, M_2, T_2)}{1 + \frac{V_2}{q_{ge}} k_{abs2}(M_2, T_2)}$ $= \frac{C_{ge}}{\left(1 + \frac{V_1}{q_{ge}} k_{abs1}(M_1, T_1)\right) \left(1 + \frac{V_2}{q_{ge}} k_{abs2}(M_2, T_2)\right)}$
$C_{g3} = \frac{f_{C_{g2}}(C_{g2}, M_3, T_3)}{1 + \frac{V_3}{q_{ge}} k_{abs3}(M_3, T_3)}$ $= \frac{C_{ge}}{\left(1 + \frac{V_1}{q_{ge}} k_{abs1}(M_1, T_1)\right) \left(1 + \frac{V_2}{q_{ge}} k_{abs2}(M_2, T_2)\right) \left(1 + \frac{V_3}{q_{ge}} k_{abs3}(M_3, T_3)\right)}$	$C_{g3} = \frac{f_{C_{g2}}(C_{g2}, M_3, T_3)}{1 + \frac{V_3}{q_{ge}} k_{abs3}(M_3, T_3)} =$ $= \frac{C_{ge}}{\left(1 + \frac{V_1}{q_{ge}} k_{abs1}(M_1, T_1)\right) \left(1 + \frac{V_2}{q_{ge}} k_{abs2}(M_2, T_2)\right) \left(1 + \frac{V_3}{q_{ge}} k_{abs3}(M_3, T_3)\right)}$

APÉNDICE G: Estudio de Grado Relativo 1 (G.R.1) con respecto a la entrada de control (q_{le})-salida regulada ($z = C_g$) y Dinámica Cero (ZD)

Como fue mostrado en el Capítulo 4 para la salida regulada T_2 , en este apéndice se hace un estudio cuando se desea que la salida regulada z sea la concentración del CO_2 (con ayuda de un estimador). Este estudio será hecho considerando a la columna empacada de absorción como un solo CSTR ($N = 1$), bajo el entendido de que este estudio puede ser extendido a los dos CSTR que conforman al conjunto.

Al igual que para el estudio de la estabilidad del sistema, es retomada la consideración de que se puede asumir el estado estacionario para el volumen del líquido de cada tanque ya que no interfiere con la dinámica de la temperatura debido a la estructura que tiene su ecuación dinámica.

Cómo ya fue definido, el Grado Relativo es el número de veces que es necesario derivar a la variable medible para que aparezca explícitamente la entrada de control, por lo tanto, en este caso, un CSTR tendrá G.R. 1 si al derivar una sola vez a la ecuación que describe a la concentración de CO_2 de ese tanque aparece directamente el flujo purificante de entrada q_{le} .

Ya que para este caso de estudio se mostró un comportamiento cuasiestacionario para la fase gas en totalidad (incluyendo la concentración del contaminante), es preciso construir la expresión de la derivada para el CO_2 , lo cual se hace con la “regla de la cadena” y esta es mostrada en la ecuación (c.1).

$$C_g = \frac{c_{ge}}{1 + \frac{V}{q_{ge}} k_{abs}(M,T)}; \quad \dot{z} = \dot{C}_g = \frac{\partial c_g}{\partial M} \dot{M} + \frac{\partial c_g}{\partial T} \dot{T} + \frac{\partial c_g}{\partial q_{ge}} \dot{q}_{ge} \quad (\text{g.1})$$

En dónde

$$k_{abs}(M,T) = \frac{1}{cte1 + \frac{cte2}{\sqrt{M e^{11.71 - \frac{EA}{T}}}}}$$

De la ecuación (g.1) ya son conocidos los balances dinámicos de la concentración de MEA y de la temperatura, por lo tanto, solo falta definir el balance dinámico para el flujo de alimentación de gas q_{ge} , y lo hace la ecuación (g.2) cuando se presenta una perturbación senoidal en el flujo de alimentación de gas.

$$\dot{q}_{ge} = Amp * q_{ge} \left[\cos \left(\frac{q_{ge}}{V_g} t \right) \right] \quad (g.2)$$

Está claro que este término sólo aparecerá en la ecuación (g.1) cuando existe perturbación en el flujo de entrada del gas contaminante, porque, cómo fue definido desde el Capítulo 2, el flujo de entrada de gas es constante ya que no hubo en su flujo cambios apreciables en la entrada y en la salida de la columna (según datos experimentales).

Sustituyendo los balances dinámicos de la concentración de MEA, de la temperatura y la ecuación (g.2) en la ecuación (g.1) se obtiene la ecuación (g.3) la cual es la expresión dinámica para el CO₂.

$$\dot{C}_g = q_{le} * f_{vu}(M, T, d) + f_{vd}(M, T, d) + f_{dp}(M, T, d) \quad (g.3)$$

En dónde $d = q_{ge}$, es decir, la perturbación al sistema y además

$$f_{vu}(M, T, d) = - \frac{V \text{cte}2 f_R(M, T)^2}{2 q_{ge} C_{ge} \sqrt{M e^{11.71 - \frac{Ea}{T}}}} \left[\frac{(M_e - M)}{V_l M} + \frac{\rho_l C p_l Ea (T_{le} - T)}{f_{\infty}(V_l) T^2} \right]$$

$$f_{vd}(M, T, d) = \frac{V \text{cte}2 f_R(M, T)^2}{q_{ge} C_{ge} \sqrt{M e^{11.71 - \frac{Ea}{T}}}} \left[\frac{V f_R(M, T)}{V_l M} - \frac{Ea}{2 f_{\infty}(V_l) T^2} (q_{ge} \rho_g C p_g (T_{ge} - T) - (-\Delta H) V f_R(M, T)) \right]$$

$$f_{dp}(M, T, d) = \left(\frac{Amp \cdot V}{q_{ge} + V k_{abs}(M, T)} \left[\cos \left(\frac{q_{ge}}{V_g} t \right) \right] \right) f_R(M, T)$$

En dónde $f_R(M, T) = R$ ya fue definido con anterioridad y también es mostrado en el apéndice b y el término $\text{cte}2$ es una constante de dicha rapidez de reacción. Es necesario tener claro que si la perturbación al sistema no es dependiente del tiempo el último término de la ecuación (g.3) es omitido, es decir

$$f_{dp}(M, T, d) = 0$$

La ecuación (g.3) muestra que se cumple con la propiedad de G.R.1 en relación de la salida regulada C_g para un tanque ya que en la primera derivada de la salida regulada aparece la variable de control q_{le} . Es preciso mencionar que para la representación de la columna como un par de CSTR el Tanque 2 es el que cumple con la propiedad de G.R.1 en relación a la concentración de CO_2 en el mismo tanque y lo único que hay que hacer para aplicar este estudio al Tanque 2 es usar las propiedades de dicho tanque.

Para garantizar el cumplimiento de G.R.1 es necesario que de la ecuación (c.3) se cumpla que:

$$f_{vu}(M, T, d) \neq 0$$

Lo cual se logra con

$$M \neq M_e \quad \text{y} \quad M > 0$$

$$T \neq T_{le} \quad \text{y} \quad T > 0$$

Además de que

$$q_{ge} \neq 0 \quad \text{y} \quad q_{ge} \ll \infty; \quad C_{ge} > 0$$

Ya que de lo contrario se indeterminaría $f_{vu}(M, T, d)$ o bien, valdría cero y la ecuación (g.3) no presentaría Grado Relativo 1.

Para el caso de estudio siempre son cumplidas estas restricciones ya que, a excepción en $t = 0$, existe una reacción química, no isotérmica y considerada irreversible por la estabilidad del carbamato (producto de la reacción entre el CO_2 y la MEA), por lo tanto, la concentración de la MEA y la temperatura siempre serán diferentes a sus valores en la entrada; mientras que la tercera restricción es cumplida, ya que los valores del flujo de gas y de concentración de CO_2 siempre está en el rango de condiciones normales de operación. De no cumplirse estas restricciones, como ya fue comentado, el término $f_{vu}(M, T, d)$ valdría cero y no se verificaría la propiedad de G.R.1 ya que en la ecuación (g.3) no aparecería la variable de control q_{le} .

Las figuras G.1, y G.2 muestran que el sistema (representado como un tanque y como el Tanque 2 de la representación de la columna de absorción como un par de CSTR) cumple con la propiedad de Grado Relativo 1 ya que operan en las cercanías del estado estacionario mostrado en las mismas y no llegan a la línea en dónde el termino $f_{vu}(M, T, d)$ vale cero.

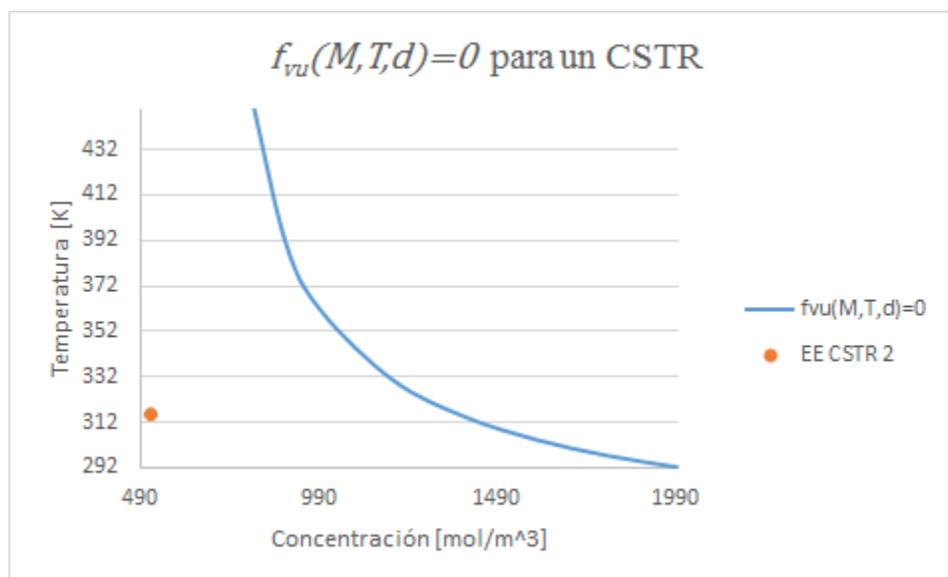


Figura G.1. Verificación gráfica de G.R.1 con respecto a la concentración de CO_2 para la representación de la columna empacada de absorción como un CSTR.

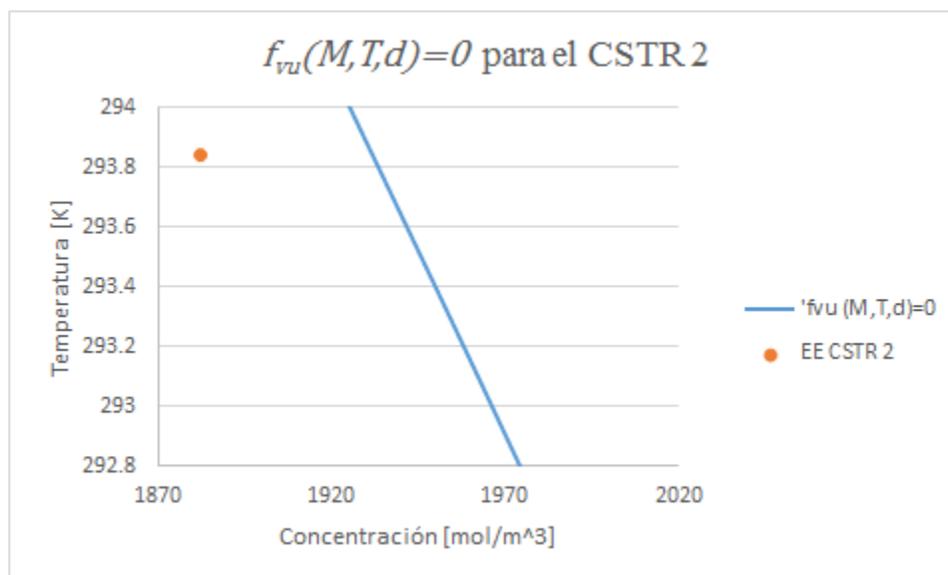


Figura G.2. Verificación gráfica de G.R.1 (para Tanque 2) con respecto a la concentración de CO_2 para la representación de la columna empacada de absorción como dos CSTR.

Para la dinámica cero, a diferencia del caso del Capítulo 4, en esta ocasión la variable que se busca controlar está definida por una ecuación algebraica, por lo tanto hay que agregar la ecuación dinámica de la concentración de CO₂ (g.3) para cada tanque y el modelo $n - 1$ -dimensional (en dónde ahora $n = 8$) está conformado por la ecuaciones diferenciales del Capítulo 3 (ecuaciones (3e-1)), la ecuación dinámica para el CO₂ en el Tanque 1 y la ecuación resultante para la variable de control, q_{le} , proveniente de hacer nula la ecuación dinámica de la concentración de CO₂ en el Tanque 2 y este set de ecuaciones es el que se resuelve en el análisis de ZD para la concentración de CO₂. En la ecuación (g.4-11) se muestra el sistema $n - 1$ -dimensional y la figura G.3 muestra la evolución de las concentraciones de CO₂, MEA y temperatura.

• **Balance dinámico de materia total (x_1, x_2)**

$$\dot{x}_1 = q_{l_2}(s, t) - q_{l_1}(s, t), \quad x_1(s, 0) = x_{1o}(s), \quad (g.4)$$

$$\dot{x}_2 = q_{le}(s, t) - q_{l_2}(s, t), \quad x_2(s, 0) = x_{2o}(s), \quad (g.5)$$

• **Balance dinámico de materia del reactante líquido (MEA) (x_3, x_4)**

$$\dot{x}_3 = \frac{q_{l_2}(s, t)}{x_1} (x_4 - x_3) - 2 \frac{V_1}{x_1} R_1, \quad x_3(s, 0) = M_e \quad (g.6)$$

$$\dot{x}_4 = \frac{q_{le}(s, t)}{x_2} (M_e - x_4) - 2 \frac{V_2}{x_2} R_2, \quad x_4(s, 0) = M_e \quad (g.7)$$

• **Balance cuasiestático de materia del reactante gas (CO₂) (x_7, x_8)**

$$\dot{x}_7 = f_{q_{l_2}} * f_{vu}(x_3, x_5, d_1) + f_{vd}(x_3, x_5, d_1) + f_{dp}(x_3, x_5, d_1); \quad x_7(s, 0) = C_{ge}(s), \quad (g.8)$$

$$\dot{x}_8 = 0 \quad (g.9)$$

• **Balance dinámico de energía (psuedomedio continuo) (x_5, x_6)**

$$\dot{x}_5 = \frac{q_g \rho_g C_{pg}}{\mathfrak{C}_1} (T_{ge} - x_5) + \frac{q_{l_2}(s, t) \rho_l C_{pl}}{\mathfrak{C}_1} (x_6 - x_5) + \frac{(-\Delta H) V_1 R_1}{\mathfrak{C}_1}, \quad x_5(s, 0) = T_{le}(s) \quad (g.10)$$

$$\dot{x}_6 = \frac{q_g \rho_g C_{pg}}{\mathfrak{C}_2} (x_5 - x_6) + \frac{q_{le}(s, t) \rho_l C_{pl}}{\mathfrak{C}_2} (T_{le} - x_6) + \frac{(-\Delta H) V_2 R_2}{\mathfrak{C}_2}, \quad x_6(s, 0) = T_{le}(s) \quad (g.11)$$

• **Variable de control (u)**

$$u = q_{le} = - \frac{f_{vd}(x_4, y=x_6, d_1) + f_{dp}(x_4, y=x_6, d_1)}{f_{vu}(x_4, y=x_6, d_1)} \quad (g.12)$$

En dónde $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8$ son el volumen de líquido del Tanque 1, volumen de líquido del Tanque 2, Concentración de MEA del Tanque 1, Concentración de MEA del Tanque 2, Temperatura del Tanque 1, Temperatura del Tanque 2, Concentración de CO₂ en el Tanque 1 y

Concentración de CO_2 a la salida del Tanque 2; $y = x_6$ es la variable medible que es la Temperatura del Tanque 2; $z = x_8$ la variable a regular es la concentración de CO_2 de salida del Tanque 2; u es la variable de control del flujo de alimentación de MEA y d_1 es el flujo de alimentación de gas.

Después de hacer estas pruebas, se mostró que el conjunto de tanques es pasivo con respecto a la salida regulada C_g y por lo tanto, con base en que es posible controlar al par de CSTR, es posible controlar a la columna empacada de absorción ya que dicho par es una representación de la misma.

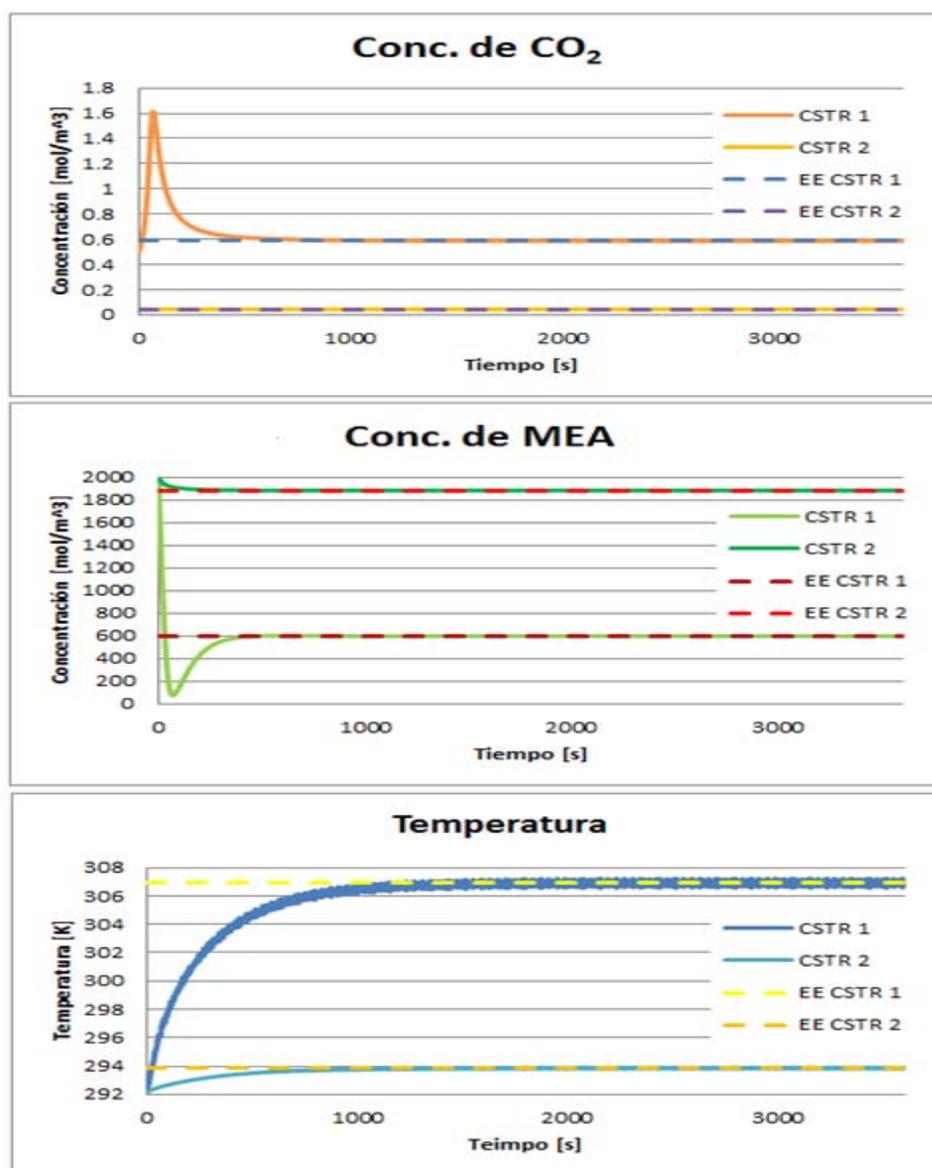


Figura G.3. Evolución de las concentraciones de CO_2 , MEA y temperatura de la ZD asociada a la concentración de CO_2 del Tanque 2.

Finalmente, la figura G.4 muestra la dependencia de la temperatura del Tanque 2 con el flujo de alimentación de gas, es decir, se construyó la gráfica haciendo perturbaciones al sistema (desde el estado estacionario) y viendo a que nuevo estado estacionario llega la temperatura del Tanque 2. La ecuación (g.13) muestra esta dependencia.

$$y = T_2 = 2 \times 10^9 q_{ge}^3 + 4 \times 10^7 q_{ge}^2 - 161655 q_{ge} + 525.68 \quad (\text{g.13})$$

Esta gráfica y esta ecuación son la base para la construcción del control en cascada para la columna empacada de absorción.

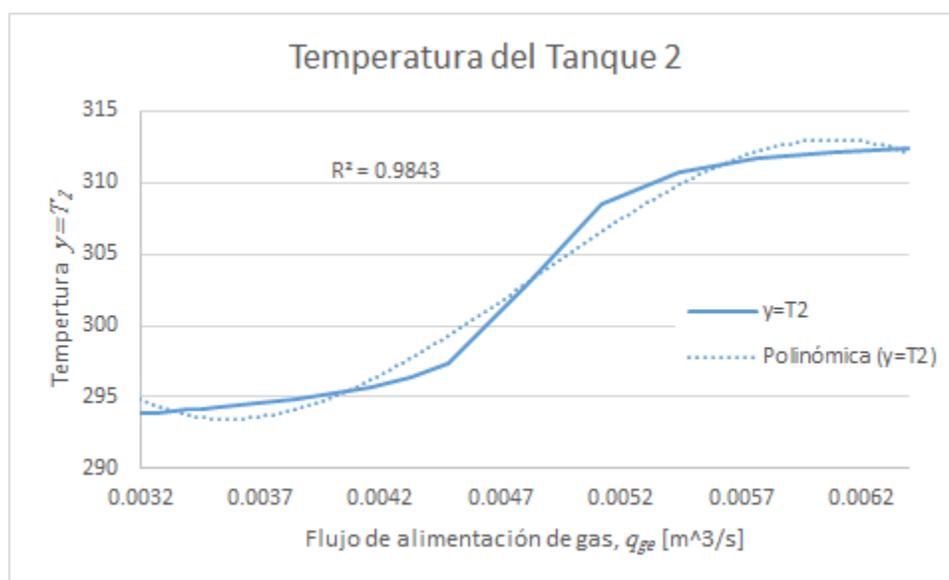


Figura G.4. Respuesta de la temperatura en estado estacionario del Tanque 2 ante perturbaciones escalón en el flujo de alimentación de CO_2 .

Índice de Figuras

<i>Figura 2.1. Columna empacada de absorción y sistema de control (verde).....</i>	<i>13</i>
<i>Figura 2.2. Representación con bloques de la columna empacada de absorción.</i>	<i>14</i>
<i>Figura 3.1. Representación de la columna empacada de absorción como un tanque CSTR.</i>	<i>22</i>
<i>Figura 3.2. Valores característicos de Temperatura para 2, 3, 4, 5 y 10 tanques frente a datos experimentales.</i>	<i>26</i>
<i>Figura 3.3. Comparación de perfiles de concentración de CO₂ y Temperatura para 2, 3, 4, 5 y 10 tanques frente a datos experimentales.</i>	<i>27</i>
<i>Figura 3.4. Evolución de la temperatura para el caso de dos CSTR's en serie y para un solo CSTR.</i>	<i>28</i>
<i>Figura 3.5. Representación de la columna empacada de absorción como dos tanques CSTR.</i>	<i>30</i>
<i>Figura 4.1. Diagramas de bifurcación para el par de CSTR teniendo como variable de bifurcación a qle.</i>	<i>33</i>
<i>Figura 4.2. Curvas de ignición-extinción para el par de CSTR.</i>	<i>35</i>
<i>Figura 4.3. Evolución Temporal para concentración de MEA y temperatura para el tren de CSTR a lazo abierto.</i>	<i>38</i>
<i>Figura 4.4. Perfiles de temperatura y concentración de CO₂ a lo largo de la columna en estado estacionario (longitud numerada desde el fondo).</i>	<i>39</i>
<i>Figura 4.5. Distribución espacial de los CSTR en la columna empacada de absorción.</i>	<i>43</i>
<i>Figura 4.6. Perfil de concentraciones y temperatura en estado estacionario en la columna empacada de absorción después de aplicar el análisis de ZD.</i>	<i>48</i>
<i>Figura 4.7. Evoluciones temporales de concentraciones y temperaturas de la ZD asociada a la regulación de la temperatura del Tanque 2.</i>	<i>49</i>
<i>Figura 5.1. Perfil (isotónico) de temperatura en la columna empacada de absorción.</i>	<i>51</i>
<i>Figura 5.2. Respuesta a lazo abierto del sistema ante perturbación escalón en el flujo de entrada de gas de +10% en t = 100 s.</i>	<i>54</i>
<i>Figura 5.3. Esquema de lazo de control para la representación de la columna empacada de absorción como 2 CSTR en serie.</i>	<i>56</i>
<i>Figura 5.4. Respuesta de la variable de control (sin ruido en la medición de temperatura) con saturación a lazo cerrado y ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (CRE).</i>	<i>64</i>
<i>Figura 5.5a. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO₂ y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en t = 100 s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRE (kc ≈ 0.05 s⁻¹) (sin ruido en T₂).</i>	<i>65</i>

<i>Figura 5.5b. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO₂ y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRE ($k_c \approx 0.05 \text{ s}^{-1}$) (con ruido en T_2).....</i>	<i>66</i>
<i>Figura 5.6a. Comparación de las respuestas del sistema a lazo cerrado (CRE) y a lazo abierto ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (sin ruido en la medición de T_2).....</i>	<i>68</i>
<i>Figura 5.6b. Comparación de las respuestas del sistema a lazo cerrado (CRE) y a lazo abierto ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (con ruido en la medición de T_2).....</i>	<i>69</i>
<i>Figura 5.7a. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO₂ y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRS ($k_c \approx 0.03 \text{ s}^{-1}$; $\omega \approx 0.25 \text{ s}^{-1}$) (sin ruido en T_2).</i>	<i>71</i>
<i>Figura 5.7b. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO₂ y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRS ($k_c \approx 0.03 \text{ s}^{-1}$; $\omega \approx 0.25 \text{ s}^{-1}$) (con ruido en T_2).</i>	<i>72</i>
<i>Figura 5.8. Respuesta de la variable de control con saturación a lazo cerrado y ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (CRS).</i>	<i>73</i>
<i>Figura 5.9a. Comparación de las respuestas del sistema a lazo cerrado (CRS) y a lazo abierto ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (sin ruido en T_2). ..</i>	<i>74</i>
<i>Figura 5.9b. Comparación de las respuestas del sistema a lazo cerrado (CRS) y a lazo abierto ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de gas de entrada (con ruido en T_2). ..</i>	<i>75</i>
<i>Figura 5.10a. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO₂ y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRE ($k_c \approx 0.05 \text{ s}^{-1}$), CRS ($k_c \approx 0.03 \text{ s}^{-1}$; $\omega \approx 0.25 \text{ s}^{-1}$), PI ind ($K_p \approx 21.9 \text{ s}^{-1}$; $1/\tau_i \approx 0.02 \text{ s}^{-1}$) (sin ruido en la señal de T_2).</i>	<i>78</i>
<i>Figura 5.10b. Evolución de la respuesta de control, temperatura y concentraciones de CO₂ y MEA en cada uno de los tanques a lazo cerrado (LC) y a lazo abierto (LA) después de una perturbación en $t = 100$ s escalón en el flujo de alimentación de gas a lazo cerrado con el CRE ($k_c \approx 0.05 \text{ s}^{-1}$), CRS ($k_c \approx 0.03 \text{ s}^{-1}$; $\omega \approx 0.25 \text{ s}^{-1}$), PI ind ($K_p \approx 21.9 \text{ s}^{-1}$; $1/\tau_i \approx 0.02 \text{ s}^{-1}$) (con ruido en la señal de T_2).</i>	<i>79</i>
<i>Figura B.1. Transferencia de masa de la fase gas a la fase líquida (Teoría de la doble película).</i>	<i>94</i>
<i>Figura E.1. Comparación de evoluciones de temperatura (a lazo abierto) de la fase sólida, líquida y gas.</i>	<i>107</i>

<i>Figura G.1. Verificación gráfica de G.R.1 con respecto a la concentración de CO₂ para la representación de la columna empacada de absorción como un CSTR.</i>	<i>119</i>
<i>Figura G.2. Verificación gráfica de G.R.1 (para Tanque 2) con respecto a la concentración de CO₂ para la representación de la columna empacada de absorción como dos CSTR .</i>	<i>119</i>
<i>Figura G.3. Evolución de las concentraciones de CO₂, MEA y temperatura de la ZD asociada a la concentración de CO₂ del Tanque 2.</i>	<i>121</i>
<i>Figura G.4. Respuesta de la temperatura en estado estacionario del Tanque 2 ante perturbaciones escalón en el flujo de alimentación de CO₂.</i>	<i>122</i>

Índice de Tablas

<i>Tabla 2.1. Variables del problema de control.</i>	<i>18</i>
<i>Tabla 3.1. Errores frente a datos experimentales de temperatura [°C] con el modelo de 2 y 3 CSTR.</i>	<i>24</i>
<i>Tabla 3.2. Variables del modelo por etapas de la columna de absorción y del problema de control.</i>	<i>31</i>
<i>Tabla 4.1. Estados estacionarios (EE) para el par de CSTR (completo).</i>	<i>36</i>
<i>Tabla 4.2. Errores frente a datos experimentales[14] de temperatura [°C] con el modelo de 2 CSTR.</i>	<i>37</i>
<i>Tabla 4.3. Estabilidad del sistema $n - 1$-dimensional con $T2 = x6$ y $q_{le} = u(x3, x4, x5)$.</i>	<i>45</i>
<i>Tabla 5.1. Desviaciones del EE por una perturbación en escalón el flujo de gas del 10%.</i>	<i>52</i>
<i>Tabla 5.2. Desviaciones del EE por una perturbación en escalón en la concentración de CO₂ de entrada del 10%.</i>	<i>53</i>
<i>Tabla 5.3. Desviaciones del estado estacionario original para las variables del sistema ante perturbaciones del tipo escalón en el flujo de alimentación de gas de entrada.</i>	<i>64</i>
<i>Tabla 5.4. Desviaciones del estado estacionario original para las variables del sistema ante perturbaciones del tipo escalón en la concentración de entrada de CO₂.</i>	<i>67</i>
<i>Tabla 5.5. Comparación de desempeños (desfase y tiempo de asentamiento) entre los controles CRE, CRS y PI industrial ante perturbación tipo escalón en el flujo de alimentación de gas.</i>	<i>81</i>
<i>Tabla 5.6. Comparación de desempeños (desfase y tiempo de asentamiento) entre los controles CRE, CRS y PI industrial ante perturbación tipo escalón en la concentración de CO₂ de entrada.</i>	<i>82</i>
<i>Tabla a.1. Características estructurales de la columna empacada de absorción.</i>	<i>90</i>
<i>Tabla a.2. Condiciones típicas de operación de la columna empacada de absorción (estado estacionario) y estudio del fenómeno convectivo-dispersivo.</i>	<i>91</i>

<i>Tabla a.3. Coeficientes de transferencia de energía.....</i>	<i>91</i>
<i>Tabla b.1. Resistencias presentes en la función R.</i>	<i>98</i>
<i>Tabla e.1. Nomenclatura del sistema de EDP que describe la dinámica de la columna... 108</i>	
<i>Tabla e.1. Nomenclatura del sistema de EDP que describe la dinámica de la columna (continuación).....</i>	<i>109</i>
<i>Tabla f.1. Comparación del conjunto de ecuaciones del sistema de parámetros concentrados obtenido para un nodo interno y para un tanque CSTR.</i>	<i>110</i>
<i>Tabla f.2. Comparación del conjunto de ecuaciones del sistema de parámetros concentrados obtenido para dos nodos internos y para dos tanques CSTR.</i>	<i>111</i>
<i>Tabla f.3. Comparación del conjunto de ecuaciones del sistema de parámetros concentrados obtenido para tres nodos internos y para tres tanques CSTR.</i>	<i>113</i>

Bibliografía y Referencias

- [1] Danckwerts, P.V., “Gas-liquid reactions”, México, McGraw-Hill, 1970.
- [2] Astarita, Giovanni, “Mass transfer with chemical reaction”, Amsterdam, Elsevier, 1967.
- [3] Astarita, G.; Savage, D. W.; Bistrot, A. “Gas Treating with Chemical Solvents”, New York: John Wiley & Sons, 1983.
- [4] F. M. Khan, V. Krishnamoorthi, T. Mahmud, 2011, “Modelling reactive absorption of CO₂ in packed columns for post-combustion carbon capture applications”. Chemical Engineering Research and Design (89), 1600-1608.
- [5] Freguia, S., Rochelle, G.T., 2003. “Modeling of CO₂ capture by aqueous monoethanolamine”. AIChE Journal 49 (7), 1676–1686.
- [6] Hanne M. Kvamsdal, Magne Hillestad, 2012, “Selection of model parameter correlations in a rate-based CO₂ absorber model aimed for process simulation”. International Journal of Greenhouse Gas Control (11), 11-20.
- [7] Greer, T., Bedelbayev, A., Igreja, J.M., Gomes, J.F., Lie, B., 2010. “A simulation study on the abatement of CO₂ emissions by de-absorption with monoethanolamine”. Environmental Technology 31 (1), 107–115.
- [8] Levenspiel, Octave, “Chemical reaction engineering”, Mexico, Reverte, 1986.

- [9] Nájera Martínez, Tesis de Maestría, UAM, 2012, “Modelado y Control de una Clase de Reactores Tubulares Exotérmicos”
- [10] Ulises Badillo-Hernández, Luis Álvarez-Icaza, Jesús Álvarez, 2013. “Model design of a class of moving-bed tubular gasification reactors”. *Chemical Engineering Science* (101), 674-685
- [11] L. Canales, Tesis de Maestría, UNAM, 2014, “Reducción de orden para modelos de gasificación”
- [12] J. Alvarez-Ramirez, J. Alvarez, A. Morales, (2002), “An adaptive cascade control for a class of chemical reactors”, *Int. J. Adapt. Control Signal Process*, (16), 681
- [13] J. Díaz Salgado, Tesis de maestría, UNAM, 2005. “Estudio del problema de estimación y control de una clase de reactores químicos”
- [14] Paitoon Tontiwawuthikul, Axel Meisen, C. Jim Lim, 1992. CO₂ absorption by NaOH, Monoethanolamine and 2-Amino-2-Methyl-1-Propanol solutions in a packed column. *Chemical Engineering Science* 47, 381-390
- [15] Ahmed Aboudheir, Paitoon Tontiwachwuthikul, Amit Chakma, Raphael Idem, 2003. Kinetics of the reactive absorption of carbon dioxide in high CO₂-loaded, concentrated aqueous monoethanolamine solutions. *Chemical Engineering Science* 58, 5195-5210
- [16] Hikita, H., Asai, S., Ishikawa, H., Honda, M., 1977. The kinetics of reactions of carbon dioxide with monoethanolamine, dithanolamine and triethanolamine by a rapid mixing method. *Chemical Engineering Journal* 13, 7–12
- [17] Noorlisa Harun, Thanita Nittaya, Peter L. Douglas, Eric Croiset, Luis A. Ricardez-Sandoval, 2012. Dynamic simulation of MEA absorption process for CO₂ capture from power plants. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 10, 295-309
- [18] Christie. J. Geankoplis, *Procesos de transporte y operaciones unitarias*, Ed. CECSA, Tercera Edición, 1998.
- [19] R. Byron Bird, Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, Ed. John Wiley & Sons. Segunda edición, 2006

- [20] Sigurd Skogestad, *Multivariable Feedback Control: Analysis and Design*, Ed. John Willey & Sons. Segunda edición, Agosto 2001.
- [21] Obregón Rojas, Edgar, Tesis de maestría, Facultad de Química, UNAM, 2015, “Monitoreo para una columna de absorción”
- [22] J. Díaz Salgado, Tesis de Doctorado, UNAM, 2013. “Control de una clase de reactores químicos y biológicos”
- [23] Stanley I. Grossman, *Álgebra Lineal*. Ed. Mc Graw Hill. Quinta Edición, 1996
- [24] William E. Boyce, Richard C. DiPrima, *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*, Novena edición, Editorial John Wiley & Sons, Inc.
- [25] Byrnes, C.I. and A. Isidori (1991), Passivity, Feedback Equivalence, and the Global Stabilization of Minimum Phase Nonlinear Systems, *IEEE Trans. Automat. Control*, Vol. 36, 1228.
- [26] A. Isidori (2010), Robust feedback design for nonlinear systems: a survey, *Turk J Elec Eng & Comp Sci*, Vol.18, 5, 693.
- [27] Jorge Diaz-Salgado, Jesus Álvarez, Alexander Schaum, Jaime A. Moreno, 2012. Feedforward output-feedback control for continuous exothermic reactors with isotonic kinetics. *Journal of Process Control*, 22, 303-320.
- [28] G. Gay Torres, Tesis de Licenciatura, UNAM, 2012. “Filosofía de Control en la Torre de Absorción PIGNAT”
- [29] Nikolai Kolev, *Packed Bed Columns for absorption, desorption, rectification and direct heat transfer*, Editorial Elsevier.
- [30] Robert E. Treybal, *Operaciones de transferencia de masa*, Segunda edición, Editorial Mc Graw Hill.
- [31] E. J. Henley, J. D. Seader, *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*, Editorial Reverté.
- [32] Anne Penttilä, Claudia Dell’Era, Petri Uusi-Kyyny, Ville Alopaeus, 2011. The Henry’s law constant of N₂O and CO₂ in aqueous binary and ternary amine solutions (MEA, DEA, DIPA, MDEA, and AMP). *Fluid Phase Equilibria*, 311, 59-66.

- [33] Crosby, John Edwin, III, Tesis Doctoral, Texas A&M University, 1974. "Design and application of state variable feedback controllers for a packed trickle bed column with carbon dioxide absorption".
- [34] Brasington, J. R., Ph.D. Dissertation, Texas A&M University 1972.
- [35] Abu-Zahra, M.R.M., Schneiders, L.H.J., Niederer, J.P.M., Feron, P.H.M., Versteeg, G.F., 2007. CO₂ capture from power plants: Part I. A parametric study of the technical performance based on monoethanolamine. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 1 (1), 37–46.
- [36] Alie, C., Backham, L., Croiset, E., Douglas, P.L., 2005. Simulation of CO₂ capture using MEA scrubbing: a flowsheet decomposition method. *Energy Conversion and Management* 46 (3), 475–487.
- [37] Oyenekan, B.A., Rochelle, G.T., 2007. Alternative stripper configurations for CO₂ capture by aqueous amines. *AIChE Journal* 53 (12), 3144–3154.
- [38] Van Wagener, D.H., Rochelle, G.T., 2011. Stripper configurations for CO₂ capture by aqueous monoethanolamine. *Chemical Engineering Research and Design* 89 (9), 1639–1646.
- [39] Ziaii, S., Rochelle, G.T., Edgar, T.F., 2011. Optimum design and control of amine scrubbing in response to electricity and CO₂ prices. *Energy Procedia* 4, 1683–1690.
- [40] Kvamsdal, H.M., Jakobsen, J.P., Hoff, K.A., 2009. Dynamic modeling and simulation of a CO₂ absorber column for post-combustion CO₂ capture. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* 48 (1), 135–144.
- [41] Lawal, A., Wang, M., Stephenson, P., Yeung, H., 2009. Dynamic modelling of CO₂ absorption for post combustion capture in coal-fired power plants. *Fuel* 88 (12), 2455–2462.
- [42] Ziaii, S., Rochelle, G.T., Edgar, T.F., 2009. Dynamic modeling to minimize energy use for CO₂ capture in power plants by aqueous monoethanolamine. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 48 (13), 98–101.
- [43] Roberto Baratti, Massimiliano Errico, Daniele Pinna, Paolo Deiana, Marcella Porru, 2014. Modelling of an Amine Based CO₂ Absorption Plant: an Alternative Approach through the Identification of the Number of Stages. 24th European Symposium on Computer Aided Process Engineering– ESCAPE 24. June 15-18, 2014, Budapest, Hungary. Elsevier B.V.

- [44] M. H. Nassehzadeh Tabrizi, John B. Edwards, 1988. Modelling for Controller Design in Tray Distillation Part I. Development of a parametric, lumped parameter, transfer function model. Proc. Of IEEE Southeastcon, 88, 301-304
- [45] M. H. Nassehzadeh Tabrizi, John B. Edwards, 1988. Modelling for Controller Design in Tray Distillation Part II. Comparison of lumped and distributed parameter model performance. Proc. Of IEEE Southeastcon, 88, 305-308
- [46] K. Najim, 1991. Modelling and self-adjusting control of an absorption column. International Journal of Adaptive Control and Signal Processing, Vol.5, 335-345
- [47] K. Najim, V. Ruiz, 1995. Long-range predictive control of an absorption packed column. Appl. Math. Modelling, Vol. 19, 39-45
- [48] Eynge Eduardo, Fileti Ana M. F., 2010. Control of absorption columns in the bioethanol process: Influence of measurement uncertainties. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 23, 271-282
- [49] Anand Govindarajan, Suresh Kumar Jayaraman, Vijayalakshmi Sethuraman, Pramod R. Raul, R. Russell Rhinehart, 2014. Cascaded process model based control: Packed absorption Column application. ISA Transactions, 53, 391-401
- [50] Carlos Fernández, Jesús Álvarez, Roberto Baratti, Andrea Frau, 2012. Estimation structure design for staged systems. Journal of Process Control, 22, 2038-2056
- [51] Carlos Rubén Fernández Zavala, Tesis Doctoral, UAM, 2009. Estimación de composiciones para columnas de destilación binaria: un enfoque geométrico
- [52] Pablo González, Jesús Álvarez, 2005. Combined Proportional/Integral-Inventory Control of Solution Homopolymerization Reactors. Ind. Eng. Chem. Res., 44, 7147-7163
- [53] Crooks, J.E., Donnellan, J.P., 1989. Kinetics and mechanism of the reaction between carbon dioxide and amines in aqueous solution. Journal of Chemical Society of Perkin Transactions II, 331-333
- [54] Enciclopedia Autodidacta Oceano Color, Dirección de Edición José María Prats, Grupo Editorial Oceano, Volumen 3, Física.