

Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico

Subdirección Académica

Departamento de Ingeniería Electrónica

TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS

Control en un Reactor de Biodiesel

presentada por

Ing. Juan Pablo Castillo González

como requisito para la obtención del grado de
Maestro en Ciencias en Ingeniería Electrónica

Director de tesis
Dr. Manuel Adam Medina

Codirectora de tesis
Dra. Peggy Elizabeth Álvarez Gutiérrez

Cuernavaca, Morelos, México. Diciembre de 2015.

SEP

SECRETARÍA DE
EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO NACIONAL DE MÉXICO
Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico

"2015, Año del Generalísimo José María Morelos y Pavón"

Cuernavaca, Mor., 23 de noviembre de 2015

OFICIO No. DIE/157/2015

Asunto: Aceptación de documento de tesis

DR. GERARDO VICENTE GUERRERO RAMÍREZ
SUBDIRECTOR ACADÉMICO
PRESENTE

Por este conducto, los integrantes de Comité Tutorial del **C. Juan Pablo Castillo González** con número de control **M13CE067** de la Maestría en Ciencias en Ingeniería Electrónica, le informamos que hemos revisado el trabajo de tesis profesional titulado "**CONTROL EN UN REACTOR DE BIODIESEL**" y hemos encontrado que se han realizado todas las correcciones y observaciones que se le indicaron, por lo que hemos acordado aceptar el documento de tesis y le solicitamos la autorización de impresión definitiva.

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Manuel Adam Medina
Doctor en Ciencias en Ingeniería Electrónica
Cédula profesional 5992003

CODIRECTOR DE TESIS

Dra. Peggy Elizabeth Álvarez Gutiérrez
Doctorado en Ciencias en la ESP: de Biotecnología
de Plantas
Cédula Profesional 09263995

REVISOR 1

Dr. Alejandro Rodríguez Pálacios
Doctor en Ciencias en Ingeniería Electrónica
Cédula profesional 3461613

REVISOR 2

Dr. Ricardo Fabricio Escobar Jiménez
Doctor en Ciencias en Ingeniería Electrónica
Cédula profesional 7534115

C.p. Lic. Guadalupe Garrido Rivera.- Jefa del Departamento de Servicios Escolares.
Estudiante
Expediente

CMAZ/lrr

cenidet[®]
Centro Nacional de Investigación
y Desarrollo Tecnológico

Interior Internado Palmira S/N, Col. Palmira. C.P. 62490 Cuernavaca, Mor.
Tels. (01)777 362-77-70 Ext. 4106, e-mail: direccion@cenidet.edu.mx
www.cenidet.edu.mx



"2015, Año del Generalísimo José María Morelos y Pavón"

Cuernavaca, Mor., 24 de noviembre de 2015
OFICIO No. SAC/216/2015

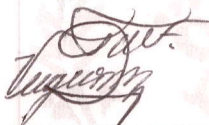
Asunto: Autorización de impresión de tesis

ING. JUAN PABLO CASTILLO GONZÁLEZ
CANDIDATO AL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS
EN INGENIERÍA ELECTRÓNICA
PRESENTE

Por este conducto, tengo el agrado de comunicarle que el Comité Tutorial asignado a su trabajo de tesis titulado **"Control en un Reactor de Biodiesel"**, ha informado a esta Subdirección Académica, que están de acuerdo con el trabajo presentado. Por lo anterior, se le autoriza a que proceda con la impresión definitiva de su trabajo de tesis.

Esperando que el logro del mismo sea acorde con sus aspiraciones profesionales, reciba un cordial saludo.

ATENTAMENTE
"CONOCIMIENTO Y TECNOLOGÍA AL SERVICIO DE MÉXICO"



DR. GERARDO VICENTE GUERRERO RAMÍREZ
SUBDIRECTOR ACADÉMICO



CENTRO NACIONAL DE
INVESTIGACIÓN Y
DESARROLLO
TECNOLÓGICO
SUBDIRECCIÓN
ACADÉMICA

C.p. Lic. Guadalupe Garrido Rivera.- Jefa del Departamento de Servicios Escolares.
Expediente

GVGR/mcr

Dedicatoria

A mis padres

A quienes les debo todo lo que tengo y todo lo que soy en la vida.

A mis abuelitos, Luvia y Galdino

Quienes me han amado, cuidado y educado como a un hijo.

A mi madrina Bedi

Quien me ama, me cuida y me consiente mejor que como lo haría con un hijo.

A mis hermanos

Quienes siempre han sido un apoyo incondicional en cada etapa de mi vida.

Agradecimientos

A Dios por permitirme alcanzar este logro tan importante en mi vida, por nunca abandonarme y por hacerse presente en cada día de mi vida.

A mi madre por el amor, el respeto y la humildad que ha tenido conmigo todos los días de mi vida. Gracias por la educación, el apoyo, los consejos y el afecto que me han guiado por la vida hasta el día de hoy.

A mi padre por su educación, cariño y respeto que me han ayudado en cada etapa de mi vida

A mis abuelitos, Luvia y Galdino por recibirme en su hogar como a un hijo, por brindarme su educación y su sabiduría en mi proceso de formación personal.

A mi madrina Bedi por ser uno de los más grandes apoyos en mi vida, gracias por ser siempre una amiga dispuesta a escuchar y a ayudar, por siempre preocuparse por mí y por todas las consideraciones que ha tenido conmigo durante toda mi vida.

A mis hermanos por cuidarme, protegerme, guiarme y apoyarme frente a las adversidades de la vida.

A Gaby y Laura Guadalupe por llegar a mi vida y la de toda mi familia y llenarlas con de alegría y felicidad.

Al Dr. Manuel Adam Medina por su esfuerzo y dedicación, por sus conocimientos, sus orientaciones, su paciencia, y motivación, que han sido fundamentales para la culminación de este trabajo. Pero sobre todo gracias por su amistad.

A la Dra. Peggy Elizabeth Álvarez Gutiérrez por compartir sus conocimientos, por su paciencia, por sus consejos y por su apoyo, que resultaron fundamentales durante este trabajo. Pero sobre todo por su amistad.

A mis revisores, el Dr. Ricardo Fabricio Escobar Jiménez y el Dr. Alejandro Rodríguez Palacios por sus valiosos comentarios, observaciones, disponibilidad y ayuda que contribuyeron al buen desarrollo de esta investigación. Dr. Alejandro gracias por la amistad brindada.

A Betty por su ayuda y apoyo durante el curso de esta investigación, pero más

aún por su valiosa amistad.

*A **Diego y Moises** por ser excelentes amigos desde la universidad y durante todo este proceso de formación profesional. Además por recibirme en su casa cuando lo necesité.*

*A **Leo (Chopipo)** por haberse convertido en un excelente amigo en tan poco tiempo y por recibirme en su casa cuando lo necesité.*

*A **todos mis amigos y compañeros de CENIDET** porque gracias a su presencia esta ha sido una de las mejores etapas de mi vida.*

*A **Lorena** porque siempre se preocupó por mi bienestar y seguridad, y siempre me apoyó tanto académica como personalmente.*

*A **Dulce** por siempre regalarme una sonrisa, tu cariño y tu apoyo en los momentos más difíciles de esta etapa de mi formación profesional, muchas gracias.*

*Al **CENIDET** por permitirme crecer profesionalmente; y a todo el personal que labora en el centro, por todas las atenciones prestadas durante mi estancia.*

*A **CONACYT** por el apoyo económico brindado para el desarrollo de esta tesis.*

Resumen

Esta tesis presenta los resultados en simulación de un sistema de control predictivo implementado al proceso de producción de biodiésel en un reactor por lotes, para el control de la concentración de metil éster. La simulación del sistema de control tiene como objetivo optimizar el proceso y producir biodiésel de calidad.

El desarrollo de este trabajo se centra en tres partes fundamentales: la obtención y el análisis del modelo matemático, la obtención de un modelo lineal del sistema a partir del modelo original, y finalmente, el diseño e implementación de un sistema de control predictivo para la reacción de transesterificación.

El modelo matemático del sistema se basa en la reacción de transesterificación que se realiza en el reactor y que produce biodiésel a partir de aceite de soya. El análisis del modelo se centra en el estudio del efecto que la variable de entrada (temperatura) tiene sobre el estado del sistema.

Para el diseño del controlador predictivo fue necesario generar un modelo lineal del sistema, el cual demostró predecir de manera satisfactoria la evolución del modelo no lineal en un amplio rango de actuación. Este modelo fue obtenido mediante la linealización del modelo de la reacción de transesterificación por el método de serie de Taylor.

El diseño del sistema de control predictivo contempla las restricciones impuestas por la naturaleza del sistema. Con la implementación de sistema de control se busca lograr que los productos de la simulación de la reacción cumplan con el requerimiento en éster establecido por la norma europea EN 14214. La variable manipulada en el lazo de control corresponde a la temperatura de la reacción.

Se evaluó el desempeño del sistema de control predictivo frente al desempeño de un sistema de control proporcional integral y el control predictivo tuvo un mejor desempeño. Por otra parte, el control predictivo logró realizar la optimización del proceso en términos del tiempo de producción y el gasto energético.

Abstrac

In this thesis, the simulation results of a predictive control system applied to the process of production biodiesel in a batch reactor are presented. The control system is applied to the metil ester concentration. The goal of the predictive control system is both to optimize the process and to produce quality biodiesel in simulation. This research is focuses on three main parts: the analysis of math model, the obtention of a linear model of system and the development and implementation of the control sistem.

The math model of system is based on the transesterification reaction, which is carried out in the reactor and it produces biodiesel from soybean oil. Analysis of model is focused in the temperature effect over the reaction.

A linear model was obtained to design the predictive control system. The linear approximation of system was generated from Taylor series method. The linear model predicted the evolution of nonlinear system in a appropriate manner, even on an large actuation range.

The restrictions of system were contemplated in the predictive control system design and to produce quality biodiesel, in simulation, according the european standard EN 14214 is the main goal of the control system. The reaction temperature was selected as the manipulated variable. The performance of the predictive control system was evaluated versus performance of a proportional-integral control system. The predictive control decreases the operation time more than proportional-integral system. Also, it has better performance.

Índice general

Índice de figuras	XI
Índice de tablas	XIII
Acrónimos	XV
1. Introducción	1
1.1. Planteamiento del problema	2
1.2. Hipótesis	3
1.3. Justificación	3
1.4. Objetivo general	3
1.5. Objetivos específicos	3
1.6. Alcances y limitaciones	4
1.6.1. Alcances	4
1.6.2. Limitaciones	4
1.7. Estado del arte	4
1.7.1. Biodiésel	4
1.7.2. Transesterificación	6
1.7.3. Control en la producción de biodiésel	7
1.8. Metodología	7
2. Modelo del sistema	9
2.1. Reactor por lotes	9
2.2. Reacción de transesterificación	10
2.3. Modelo de la reacción, modelo del sistema	11
2.3.1. Variables y parámetros del modelo	14
2.3.2. Modelo en espacio de estado	14
2.3.3. Expresión de Arrhenius	15
2.3.4. Puntos de equilibrios	16
2.4. Linealización del modelo	16
2.5. Conclusiones	19
3. Simulación y análisis del sistema	21
3.1. Análisis de controlabilidad	21
3.2. Evaluación del modelo del sistema	25
3.3. Efecto de la temperatura sobre la reacción	26
3.3.1. Estado final de la reacción a diferentes temperaturas	27

3.3.2. Tiempo de reacción a diferentes temperaturas	27
3.4. Norma EN 14214	29
3.5. Evaluación del modelo lineal	30
3.6. Conclusiones	32
4. Control predictivo de la Transesterificación	35
4.1. Descripción general del control predictivo	35
4.2. Formulación básica	36
4.2.1. Modelo de predicción	36
4.2.2. Función costo	37
4.2.3. Restricciones	38
4.2.4. Estrategia de predicción	38
4.3. Diseño del control predictivo de la reacción	40
4.3.1. Modelo de predicción	40
4.3.2. Parámetros del controlador predictivo	41
4.3.3. Referencia del controlador	43
4.3.4. Restricciones del controlador	43
4.4. Solución del problema de control sin restricciones	44
4.4.1. Formulación como un problema de mínimos cuadrados	47
4.5. Solución del problema de control con restricciones	48
4.5.1. Formulación como un problema QP	48
4.6. Conclusiones	51
5. Resultados	53
5.1. Implementación del control predictivo sin restricciones	53
5.1.1. Caso I. Sin restricciones	53
5.2. Implementación del control predictivo con restricciones	56
5.2.1. Caso II. Restricción en $u(k+i)$	56
5.2.2. Caso III. Restricciones en $u(k+i)$ y $\Delta u(k+i)$	58
5.3. Conclusiones	59
6. Conclusiones generales	61
6.1. Aportaciones	63
6.2. Trabajos futuros	63
6.3. Publicaciones	64
Anexo	66
A. Condiciones para la simulación de la reacción	69
B. Determinación de los parámetros del modelo	71
C. Calculo de matrices de la solución del control predictivo sin restricciones	73
Bibliografía	75

Índice de figuras

2.1. Reactor por lotes típico equipado con un intercambiador de calor de tipo chaqueta para el control de la temperatura.	10
3.1. Cinética de la reacción a 50 °C.	26
3.2. Resultados de la simulación de la reacción de transesterificación a diferentes temperaturas.	28
3.3. Cambios en la temperatura de la reacción para la evaluación del modelo lineal.	30
3.4. Resultados de la simulación del modelo no lineal y lineal.	31
4.1. Ideal básica del control predictivo.	36
4.2. Estructura del controlador predictivo sin restricciones.	48
4.3. Estructura del controlador predictivo con restricciones	51
5.1. Respuesta del sistema en lazo abierto	54
5.2. Respuestas del control predictivo sin restricciones, del control proporcional integral y del sistema en lazo abierto	55
5.3. Señales de control para el control predictivo sin restricciones y el control proporcional integral	55
5.4. Respuesta del control predictivo con restricción en $u(k+i)$, el control proporcional integral y del sistema en lazo abierto	57
5.5. Señales de control para el control predictivo con restricción en $u(k+i)$ y el control proporcional integral	57
5.6. Respuesta del control predictivo con restricciones en $u(k+i)$ y $\Delta u(k+i)$ y del sistema en lazo abierto.	58
5.7. Señal de control del control predictivo con restricciones en $u(k+i)$ y $\Delta u(k+i)$	59

*

Índice de tablas

3.1. Tiempo de formación de metil éster durante la simulación de la reacción de transesterificación a diferentes temperatura.	29
3.2. Porcentaje másico final de metil éster a diferentes temperatura	30
3.3. Error relativo del modelo lineal para los componentes de la reacción	32
3.4. Error cuadrático medio del modelo lineal para los componentes de la reacción	33
4.1. Parámetros del controlador predictivo	42
5.1. Resultados de la implementación del control predictivo sin restricciones y el control proporcional integral	54
5.2. Resultados de la implementación del control predictivo con restricción en $u(k + i)$ y el control proporcional integral con saturación	56
5.3. Resultados finales de la implementación del control predictivo.	59
A.1. Condiciones para la simulación de la reacción	69
B.1. Coeficientes de velocidad a 50 °C	71
B.2. Energías de activación para la reacción de transesterificación	71
B.3. Factores de frecuencia de las colisiones a 50 °C	72

Acrónimos

Español

AL	—	Alcohol o metanol.
DG	—	Diglicéridos.
EMC	—	Error cuadrático medio.
GL	—	Glicerina.
ME	—	Metil éster.
MG	—	Monoglicéridos.
TG	—	Triglicéridos.

Inglés

ASTM	—	Sociedad americana de pruebas y materiales
FAME	—	Ésteres metílicos de ácidos grasos.
IAE	—	Integral del error absoluto.
MBPC	—	Control predictivo Basado en modelo .
MPC	—	Modelo o control predictivo.
NMPC	—	Control predictivo no lineal.
NREL	—	Laboratorio nacional de energías renovables

Nomenclatura

Mayúsculas

A_i	—	Factor de frecuencia de las colisiones del i -ésimo componente de la reacción ($1/s$).
C_i	—	Concentración química del i -ésimo componente de la reacción.
Ea_i	—	Energía de activación del i -ésimo componente de la reacción ($\frac{J}{mol}$).
R	—	Constante universal de los gases ideales ($\frac{J}{Kmol}$).
T	—	Temperatura ($^{\circ}C$).
V	—	Volumen de (m^3).
X_i	—	Porcentaje másico del componente del i -ésimo componente de la reacción (%).

Minúsculas

k_i	—	Coefficiente de velocidad del i -ésimo componente de la reacción ($1/s$).
u	—	Vector de variables de entrada.
u_i	—	i -ésima variable de entrada.
u_n	—	Entrada de operación nominal.
x	—	Vector de variables de estado.
x_i	—	i -ésima variable de estado del sistema.
x_n	—	Estado de operación nominal del sistema.
\dot{x}_i	—	Derivada con respecto a la variable de tiempo, de la i -ésima variable de estado
y	—	Vector de variables de salida.

Letras griegas mayúsculas

ε	—	error relativo.
Θ	—	Matriz de predicción.
Υ	—	Matriz de predicción.
Ψ	—	Matriz de predicción.

Capítulo 1

Introducción

A partir de la década de los 80's se han realizado progresos importantes en la evaluación de algunos aceites de bajo grado, así como de residuos y desechos de la producción de petróleo, como combustibles para motor [1].

Sin embargo, el uso directo de aceites provoca una serie de problemas en el motor, debido a su alta viscosidad y a los excesivos depósitos carbonosos que quedan en los cilindros y en las boquillas de los inyectores [2].

Actualmente se emplean métodos para reducir la viscosidad de los aceites vegetales y eliminar estos problemas. Las cuatro técnicas aplicadas para ello son la dilución, la microemulsión, la pirólisis, y la transesterificación. Particularmente en los procesos industriales, se utiliza el proceso de transesterificación para reducir la viscosidad y el punto de ebullición de los aceites vegetales [2].

Generalmente, los aceites vegetales de cadena de carbono con longitud de entre 16 y 22 átomos de carbono están en forma de triglicéridos. Estos componentes, tras la transesterificación con metanol, producen ésteres metílicos de ácidos grasos (FAME por sus siglas en inglés) y glicerina [2].

Los ésteres metílicos son candidatos prominentes como alternativa al combustible diésel [3]. Los ésteres metílicos producidos a partir de la transesterificación han recibido el nombre biodiésel, para describir su uso como un combustible diésel [4]. Por otra parte estos ésteres para poder ser vendidos como biodiésel y utilizados en motores diésel, debe cumplir con una de las normas: EN 14214 o ASTM D6751 [2].

El proceso de producción convencional de biodiésel se lleva a cabo en un reactor por lotes. Los reactores por lotes se utilizan para operaciones de pequeña y mediana escala, tales como pruebas de procesos nuevos, la fabricación de productos caros, y los procesos que son difíciles de llevar a cabo en operaciones continuas. Este tipo de reactor es apropiado para procesos químicos, tecnológicos y farmacéuticos en los cuales la calidad y cantidad de los productos desempeñan un papel importante en el proceso [5].

El control automático se ha vuelto una parte importante e integral de los procesos industriales y de manufactura modernos. Debido a los avances en la teoría y la práctica, el control automático aporta los medios para obtener un desempeño óptimo de los sistemas dinámicos, mejorar la productividad, aligerar la carga de muchas operaciones manuales, repetitivas y rutinarias, así como de otras actividades [6].

Así, el control automático de la producción de biodiésel en un reactor por lotes,

tiene un papel muy importante en la optimización del proceso, la reducción de los costos de producción y para garantizar la calidad del producto.

Existen una gran variedad de estrategias de control automático, pero el control predictivo es la única técnica de control avanzada que ha tenido un impacto significativo y generalizado en los procesos de control industriales [7]. Esto se debe a que trabaja de una manera rutinaria y sistemática con las restricciones del equipo y de seguridad, permitiendo operar al sistema cerca de las ellas, además de que permite el control de sistemas multivariables con relativa facilidad.

1.1. Planteamiento del problema

Actualmente, el mundo se encuentra en un periodo de crisis energética. Dentro de algunos años, la producción mundial de petróleo convencional empezará a disminuir, debido a que actualmente se ha alcanzado el límite de producción, mientras que la demanda mundial no deja de aumentar.

El petróleo es la fuente de energía fósil que tiene mayores probabilidades de agotarse [8], debido a la dependencia que se tiene sobre él como fuente de energía y a que es un recurso no renovable. De acuerdo con el estudio internacional de energía 2013 [9], el consumo mundial de energía aumentará de 524 cuatrillones de BTU en 2010 a 820 cuatrillones de BTU en 2040, y la mayor parte de la energía utilizada en el mundo seguirá siendo obtenida de combustibles fósiles (al rededor del 80 %).

Por otro lado, la dependencia y el uso excesivo de los combustibles derivados del petróleo como fuente de energía ha provocado grandes daños ambientales que se están convirtiendo en irreversibles. Los gases producto de la combustión de los combustibles fósiles son los principales causantes del llamado “efecto invernadero”. El cambio climático, el adelgazamiento de la capa de ozono y la pérdida de biodiversidad son algunas de las consecuencias del uso excesivo y desmedido de los combustibles fósiles.

Es por todo lo anterior, que el uso de fuentes alternativas de energía, más limpias y renovables, se ha convertido en un aspecto prioritario en la actualidad.

El biodiésel representa una alternativa viable para hacer frente a estos problemas, ya que, a diferencia de los combustibles derivados del petróleo, los efectos de su combustión no provocan grandes daños al ambiente, además, es un producto renovable. Así, la producción de biodiésel se ha convertido en una necesidad actual y el método más utilizado para ello es el proceso de transesterificación en un reactor por lotes.

Actualmente, la mayor parte del biodiésel se produce a partir de aceite de soya, metanol, y un catalizador alcalino. Sin embargo, el alto valor del aceite de soya, al ser un producto comestible, hace muy desafiante la producción de un combustible económico [3]. Por lo que el desarrollo de estrategias que permitan reducir los costos de producción de biodiésel a partir de aceite de soya, ha adquirido un gran interés.

Por otra parte, si bien el proceso de producción de biodiésel en un reactor por lotes resulta efectivo, no siempre es eficiente si se tienen en cuenta los aspectos económicos y energéticos.

Además, las normas establecidas para la comercialización y el uso de biodiésel en un motor diésel, han provocado una mayor atención al control de los procesos utilizados para su producción.

Así, a partir de esta problemática surge la necesidad de la implementación de estrategias de control automático que permitan optimizar los procesos de producción de biodiésel en reactores por lotes, y que garanticen la calidad del producto en relación con las normas internacionales existentes.

1.2. Hipótesis

La implementación en simulación de un control predictivo para la reacción de transesterificación en un reactor por lotes, a partir de la manipulación de la variable de temperatura, permite reducir el tiempo de producción en al menos un 20% y lograr que los productos de la simulación de la reacción cumplan con la norma europea EN 14214.

1.3. Justificación

La producción no automatizada de biodiésel en un reactor por lotes ocasiona un alto costo de producción y la variabilidad de la calidad del producto. Por lo tanto, el desarrollo y la implementación de una técnica de control automático al proceso de producción es una parte fundamental para su optimización, para mejorar la productividad y para garantizar la calidad del biodiésel.

Debido a los problemas ambientales ocasionados por el uso excesivo y desmedido de los combustibles fósiles, el uso de fuentes alternativas de energía más limpias es una necesidad actualmente. Sin embargo, la producción actual de biodiésel es mucho menor en relación con la demanda de combustible para motores diésel. Es por ello que el desarrollo de estrategias que permitan una mejora de la productividad en los procesos de producción de biodiésel, representa una aportación muy valiosas en la lucha contra los problemas ambientales actuales.

1.4. Objetivo general

Implementar en simulación una estrategia de control automático, basada en la representación matemática de la reacción de transesterificación, que permita la optimización del proceso y la producción de biodiésel que cumpla con la norma EN 14214.

1.5. Objetivos específicos

- Obtener de la literatura el modelo matemático del proceso de producción en el reactor.
- Analizar el sistema con base en el estudio de modelo matemático de la reacción.
- Linealizar el modelo no lineal.
- Diseñar un sistema de control predictivo para la producción de biodiésel a partir de la manipulación de la temperatura.

- Implementar el controlador en simulación.

1.6. Alcances y limitaciones

1.6.1. Alcances

En este trabajo de investigación se desarrolló e implementó un sistema de control predictivo para el proceso de producción de biodiésel en un reactor por lotes. El proceso de producción se realiza a través de la reacción de transesterificación de aceite vegetal con alcohol.

Para el análisis del sistema de control se estudiaron tres casos: el caso sin restricciones, el caso con una restricción en el rango del actuador y, el caso con restricciones en la velocidad de respuesta y el rango del actuador.

La estrategia de predicción empleada en el control predictivo requirió de un modelo de predicción lineal e invariante en el tiempo, por lo tanto se realizó la linealización del modelo matemático de la reacción y se obtuvo su representación en espacio de estado.

1.6.2. Limitaciones

El modelo matemático del sistema es el modelo del reactor por lotes. Generalmente el modelo de un reactor consta de dos ecuaciones fundamentales, un balance de materia y un balance de energía. Sin embargo, en este trabajo el modelo del reactor consiste solamente del balance de materia de la reacción que se lleva a cabo en el reactor. No se tomó en cuenta el balance de energía debido a que ello aumentaría en demasía la complejidad del trabajo.

El modelo basado en la ecuación de balance de materia no se desarrolló durante este trabajo, sino que se obtuvo de [10], a partir de una revisión bibliográfica.

1.7. Estado del arte

1.7.1. Biodiésel

El biodiésel es un combustible obtenido a partir de aceites vegetales o grasas animales que funciona en cualquier motor diésel. El término biodiésel no tiene una definición estricta, sino que hace referencia a los aceites vegetales o grasas animales, y sus ésteres metílicos los cuales son utilizados como combustibles. Sin embargo, el término es aplicado cada vez más frecuentemente a los ésteres alquílicos de aceites vegetales o grasas animales utilizados como combustible en los motores diésel, y no a los aceites o grasas puras.

En este sentido la Sociedad Americana de Pruebas y Materiales (ASTM por sus siglas en inglés) define al combustible biodiésel como: ésteres monoalquílicos de ácidos grasos de cadena larga, derivados de materias primas de lípidos renovables tales como aceites vegetales o grasa de animales [11]. Estos ésteres son obtenidos a partir de la reacción de transesterificación de aceite vegetal.

En 1893 Rudolph Diesel en su libro titulado “Teoría y construcción de un motor térmico racional” [12], publicó una detallada descripción del primer modelo del motor que el día de hoy lleva su nombre.

El primer antecedente del uso de un biocombustible data de 1900 cuando Rudolph Diesel presentó su motor en la Exposición Mundial de París, el cual era alimentado con aceite de cacahuete. Diesel quería que el uso de un combustible obtenido de la biomasa (biocombustible) fuese el verdadero futuro de su motor y en 1913 escribió: “El uso de aceites vegetales como combustibles puede parecer insignificante hoy, pero con el tiempo pueden convertirse en combustibles tan importantes como el petróleo o el carbón lo son en nuestros días” [13].

Sin embargo, durante los años veinte, los fabricantes de motores diésel adaptaron sus propulsores a la menor viscosidad del combustible fósil (gasóleo) en comparación con la del aceite vegetal. La industria petrolera amplió así su hueco en el mercado de los carburantes, pues sus productos eran más económicos de producir que la alternativa extraída de la biomasa. El resultado fue, por muchos años, la casi completa desaparición de la producción de combustibles a partir de biomasa.

A pesar del increíble uso de los derivados del petróleo como combustibles, durante los años veinte, treinta y la posguerra mundial, varios países (entre ellos Argentina) informaron el uso de aceites como sustituto del diésel. Sin embargo, se detectaron problemas por la diferencia de viscosidad entre el aceite y el diésel. Esta diferencia de viscosidad producía depósitos dentro de la cámara de combustión y los inyectores. Algunos intentos para superar estos problemas fueron: aplicar una pirólisis y craqueo al aceite, mezclarlo con diésel de petróleo o etanol, o calentarlo.

El 31 de agosto de 1937, G. Chavanne de la Universidad de Bruselas, Bélgica, obtuvo la patente por “transformar aceites vegetales para su uso como combustible” [14]. La patente describía la transesterificación del aceite usando etanol o metanol para separar la glicerina de los ácidos grasos y reemplazarla con alcoholes de cadenas cortas. Esta fue la primera producción de biodiésel.

Uno de los primeros usos del aceite vegetal transesterificado fue la alimentación de vehículos pesados en Sudáfrica antes de la segunda guerra mundial. Así, el aceite vegetal transesterificado recibió el nombre de “biodiésel”, para describir su uso como combustible diésel [8].

Posteriormente, durante la segunda guerra mundial, en Europa fueron utilizados por primera vez ésteres metílicos obtenidos a partir de la técnica de transesterificación, ante la escasez de derivados del petróleo [15].

Sin embargo, fue hasta finales de la década de los 70’s y principios de los 80’s que la preocupación por los altos precios del petróleo promovió una extensa experimentación de la técnica de obtención de biodiésel de una gran variedad de aceites vegetales y grasas animales, en la búsqueda de fuentes alternativas de energía [16]. Así, en 1977, Expedito Parente, científico brasileño, inventó y patentó el primer proceso industrial de producción de biodiésel [17].

Entre 1978 y 1996, el Laboratorio Nacional de Energías Renovables (NREL por sus siglas en inglés), de Estados Unidos, experimentó con el uso de algas como fuente de biodiésel. Así mismo, en 1979 se iniciaron en Sudáfrica investigaciones sobre cómo transesterificar aceite de girasol.

Finalmente en 1983, el proceso de como producir biodiésel de calidad fue comple-

tado y publicado internacionalmente. Gaskoks, una industria austriaca, obtuvo esta tecnología y estableció la primera planta piloto productora de biodiésel en 1987 y una industrial en 1989. Durante la década de los 90's, se abrieron muchas plantas en muchos países europeos, entre ellos la República Checa, Alemania y Suecia.

Durante esa misma época, Francia comenzó una producción local de biodiésel, obtenido de la transesterificación del aceite de colza. El biodiésel se utilizaba mezclado en un 5 % con el combustible diésel convencional, y en un 30 % para el caso de algunas flotas de transporte público. Renault, Peugeot y otros productores certificaron sus motores para la utilización parcial de biodiésel (alrededor del 50 %). Así, para el año 1998, se identificaban ya 21 países con proyectos comerciales de biodiésel.

En septiembre del año 2005, Minnesota fue el primer estado estadounidense que obligaba un uso de, al menos, un 2 % de biodiésel y en 2008, la ASTM publicó los estándares y especificaciones de mezcla de biodiésel.

Actualmente existen dos normas para regular la calidad del biodiésel; la norma EN 14214 que son estándares europeos que describen los requerimientos para FAME (ésteres de metanol), y; la norma ASTM D6751 que establece un nivel mínimo de calidad para los productores y los usuarios de biodiésel.

1.7.2. Transesterificación

Como se vio en la sección anterior la idea de utilizar un aceite vegetal, es decir un biocombustible, en un motor diésel es tan antigua como el motor mismo.

Pero, el uso directo de aceites vegetales provoca una serie de problemas en el motor, debido a su alta viscosidad y a los excesivos depósitos carbonosos que quedan en los cilindros y en las boquillas de los inyectores [2].

Por lo tanto resulta necesario aplicar alguna técnica para eliminar los problemas relacionados con la alta viscosidad de los aceites vegetales. A la conversión química de aceite es sus correspondientes ésteres grasos se le denomina “transesterificación” [18] o “alcoholisis”. Este proceso se aplica con el fin de reducir las viscosidades y los puntos de inflamación de los aceites vegetales.

La aparición de la transesterificación se remonta a inicios de 1846, cuando Rochieder describe la preparación de glicerol a través de la etanolisis de aceite de ricino [19]. Posteriormente, la técnica de la transesterificación fue desarrollada por los británicos E. Duffy y J. Patrick, en 1853, con el principal objetivo de obtener glicerina y utilizarla como materia prima en la producción de jabón [20]. En 1937, G. Chavanne obtuvo la patente del proceso de transesterificación utilizado actualmente. Desde entonces este proceso ha sido ampliamente investigada en todo el mundo.

Así, por ejemplo, los parámetros y las condiciones importantes de la transesterificación de aceites de pescado, sebo, soya, colza, algodón, girasol, cártamo, maní y lino fueron investigados en [21]-[26].

Mientras que las variables que afectan al proceso de la transesterificación; la relación molar de alcohol-aceite, el tipo de catalizador, la temperatura y la presencia de impurezas; fueron investigados en [27]-[31].

Un aspecto importante para el estudio de la transesterificación de aceite vegetal es el análisis de la cinética de la reacción. Un estudio de la cinética de transesterificación proporciona parámetros que pueden utilizarse para predecir la extensión de la reacción

en cualquier momento, bajo algunas condiciones particulares [32].

Actualmente existen numerosos estudios cinéticos publicados sobre la transesterificación de ésteres grasos de aceite vegetal, para diferentes tipos de materias primas, tales como [33]-[42].

1.7.3. Control en la producción de biodiésel

A partir de finales de los 80's, con la construcción de la primer planta industrial para la producción de biodiésel, ha sido necesario el desarrollo de estrategias que garanticen el mejor desempeño de los sistema de producción. Además, actualmente con las regularizaciones y la normatividad establecidas para el uso y venta del biodiésel dicha necesidad se ha venido incrementado.

En este sentido el control automático de los procesos de producción de biodiésel representa una alternativa eficiente para hacer frente a esta necesidad.

Así por ejemplo, en [43] se implementó una estrategia de control predictivo basado en un modelo no lineal (NMPC por sus siglas en inglés) al proceso de producción de biodiésel en un reactor semi continuo, permitiendo generar biodiésel en cumplimiento con la normativa de calidad establecida para los ésteres metílicos de ácidos grasos utilizados en motores diésel.

En [5] y [44] se estudiaron dos sistema de control óptimo para la reacción transesterificación, y se logró una disminución significativa del tiempo de producción y un elevado incremento en la productividad del proceso.

Además, en [45] se logró la optimización de la producción de biodiésel en un reactor por lotes a partir de la aplicación de un nuevo algoritmo de control no lineal para la temperatura del proceso.

Existen una serie de publicaciones en las que se estudian diferentes estrategias de control, para el proceso de producción de biodiésel, tales como: el control óptimo [5],[44]; el control no lineal [46]; el control robusto [45]; el control difuso [47]; el control no lineal basado en redes neuronales [48].

Sin embargo la estrategia de control más empleada es el control predictivo [43],[46],[49]-[52]. Esto se debe a que esta estrategia de control se basan en la solución de un problema de optimización del proceso. Además, dicha estrategia trata con las restricciones, del equipo y de seguridad, de manera sistemática permitiendo que el sistema pueda operar cerca de las restricciones y ocasionando una mejora de la productividad.

1.8. Metodología

La metodología empleada en el desarrollo de este trabajo de investigación fue la siguiente:

1. Se realizó un estudio del estado del arte sobre el biodiésel, la producción de biodiésel vía transesterificación de aceite vegetal y sobre las técnicas de control automático aplicadas a la producción de biodiésel.
2. A partir de la investigación del estado del arte, se obtuvo un modelo matemático del la reacción de transesterificación que se lleva a cabo en un reactor. Además, se eligió como estrategia de control a implementar en el sistema al control predictivo.

3. Con el modelo matemático definido, fue posible realizar su evaluación en simulación, la cual se realizó con datos de experimentos reales reportados en [10].
4. Posteriormente, se realizó el análisis del modelo matemático a partir del efecto que la temperatura tiene sobre él.
5. Se obtuvo una representación lineal del sistema a partir de la linealización del modelo matemático, debido a que la estrategia de control predictivo hace uso de un modelo lineal. El modelo lineal fue evaluado contra el modelo original del sistema para determinar su exactitud.
6. A partir del modelo lineal, se diseñó un sistema de control, basado en un controlador predictivo, para la reacción de transesterificación que se lleva a cabo en un reactor por lotes.
7. Se implementó, en simulación por computadora, el sistema de control del proceso de producción de biodiésel vía transesterificación de aceite de soya. Se analizaron tres casos de estudio: el primero sin restricciones, el segundo con una sola restricción y el tercero con ambas restricciones del sistema.
8. Finalmente, se reportaron los resultados generados de esta investigación en el actual documento de tesis.
9. Adicionalmente, con base en los resultados obtenidos se generaron un serie de publicaciones científicas, presentadas en la sección 6.3.

Capítulo 2

Modelo del sistema

En este capítulo se presenta el modelo matemático del sistema. Este modelo consiste en el modelo de la reacción de transesterificación que se lleva a cabo en un reactor por lotes, la cual produce biodiésel. El modelo se emplea en la parte final de este capítulo para generar un modelo de predicción lineal que será utilizado en el diseño del control predictivo, y en el capítulo 3 para analizar el fenómeno de transesterificación.

Al principio del capítulo, la sección 2.1 presenta una descripción general de un reactor por lotes. Después, la sección 2.2 expone el marco teórico básico acerca de la reacción de transesterificación. A continuación, la sección 2.3 establece el modelo matemático de sistema obtenido de la literatura, además se analizan algunos aspectos importantes del modelo. Finalmente, la sección 2.4 presenta un modelo lineal obtenido mediante el método de linealización por series de Taylor.

2.1. Reactor por lotes

Un reactor por lotes es un reactor químico que posee la característica de no tener flujos de materia hacia y desde el sistema. Este tipo de reactores trabajan por cargas (lotes), es decir se introduce una alimentación antes del inicio del proceso, y se espera un tiempo dado, que está determinado por la cinética de la reacción, tras el cual se saca el producto. Por esta razón estos reactores también son conocidos como reactores intermitentes o discontinuos.

Generalmente los reactores por lotes se emplean en operaciones a pequeña escala, para probar procesos nuevos que aún no se han desarrollado en su totalidad, para fabricar productos costosos y para procesos difíciles de convertir en operaciones continuas. Este tipo de reactor permite una alta conversión que puede obtenerse dejando el reactivo dentro del reactor por periodos prolongados, pero también cuenta con la desventaja del alto costo de mano de obra por lote, la variabilidad del producto de un lote a otro y la dificultad para producción a gran escala [53].

En un reactor por lotes el reactante se carga en el tanque por la parte superior del reactor y los productos de la reacción son obtenidos por la parte inferior del tanque (ver Figura 2.1). Dentro del reactor, conforme el tiempo transcurre, se llevan a cabo reacciones consecutivas de primer orden [54]. Esto ocasiona que la cantidad de materia de cada componente en la reacción cambie con respecto al tiempo, en otras palabras la materia dentro del sistema presenta una evolución dinámica.

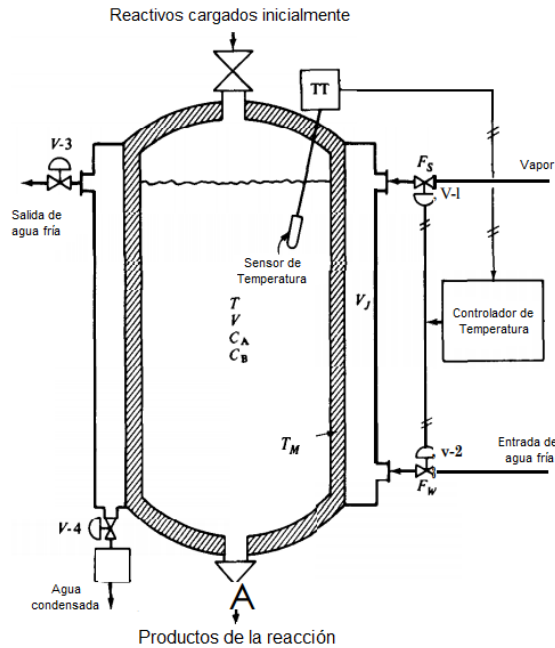


Figura 2.1: Reactor por lotes típico equipado con un intercambiador de calor de tipo chaqueta para el control de la temperatura.

Por otra parte, los reactores por lotes poseen un sistema transferencia de calor para poder controlar la temperatura a la cual se lleva a cabo la reacción (ver Figura 2.1), ya que por lo general las reacciones se llevan a cabo a una temperatura determinada o presentan un perfil de temperatura óptimo. El sistema de transferencia de calor le permite también al reactor eliminar el exceso de calor generado por reacciones exotérmicas. Como consecuencia de lo anterior, la energía del sistema tendrá una evolución temporal mientras transcurre el proceso.

De esta manera la dinámica del sistema está definida por la evolución de la materia y la energía dentro del reactor durante el proceso. Por tal motivo el modelado de un reactor por lotes se lleva a cabo con base en dos principios fundamentales de la física y la química: el principio de conservación de la masa (balance de materia) y la primera ley de la termodinámica (balance de energía).

No obstante, en este trabajo se hace uso de un modelo basado solamente en el balance de materia del sistema. Dicho balance se aplica a la reacción que se lleva a cabo en el reactor, con lo que se tiene finalmente que la dinámica del sistema esta definida por el modelo de la reacción de transesterificación.

2.2. Reacción de transesterificación

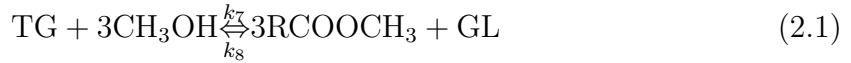
Los aceites vegetales están compuestos principalmente por triglicéridos. Por ejemplo, el aceite de soya refinado está constituido en un 99 % por estos compuestos [55]¹. Durante el proceso de transesterificación los triglicéridos del aceite vegetal se combinan

¹Se utilizará indistintamente el término triglicéridos o aceite para hacer referencia a los triglicéridos presentes en la mezcla de la reacción.

con un alcohol para originar una reacción química que produce ésteres de ácidos grasos, como el metil éster, y glicerina [8]. Y son precisamente estos ésteres lo que actualmente se conoce como biodiésel. Además, durante la reacción de transesterificación se generan dos productos intermedios, que son los diglicéridos y los monoglicéridos.

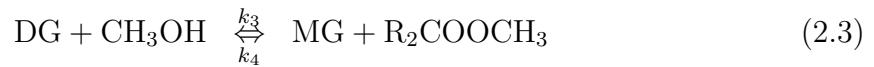
En (2.1) se presenta la reacción general de transesterificación. De (2.1) se tiene que la reacción de una molécula de triglicéridos con tres moléculas de metanol (CH_3OH), producirá tres moléculas de metil éster (3RCOOCH_3) y una molécula de glicerina.

Reacción general de transesterificación:



La reacción general (2.1) se divide en las tres reacciones reversibles y simultáneas presentadas en (2.2)-(2.4). Estas tres reacciones describen el comportamiento paso a paso de la reacción general de transesterificación [10]. De (2.2) se tiene que a partir de una molécula de triglicéridos y una de metanol se producen una molécula de diglicéridos y una de metil éster; de (2.3) se sabe que una molécula de diglicéridos y una de metanol producirán una molécula de monoglicéridos y una de metil éster; Finalmente, de (2.4) se tiene que una molécula de monoglicéridos y una de alcohol producirán una molécula de glicerina y otra de metil éster.

Reacción de transesterificación paso a paso:



Así, en la transesterificación de aceite vegetal con alcohol intervienen los siguientes componentes o elementos: los triglicéridos (TG) del aceite de soya, los diglicéridos (DG), los monoglicéridos (MG), el metil éster (ME) o biodiésel, el alcohol (AL) que en este caso es metanol, y la glicerina (GL). En este trabajo el término “componentes de la reacción” se utilizará para hacer referencia al conjunto de todos estos elementos.

Las principales variables o condiciones que afectan al proceso de transesterificación son: la relación molar alcohol-aceite, el tipo de alcohol y de aceite, el tipo y la cantidad del catalizador, la temperatura, la intensidad de mezclado y la presencia de impurezas tales como ácidos grasos libres o humedad [10]. Cada una de estas variables afecta de manera distinta a la reacción. Sin embargo, en esta investigación la variable de interés es la temperatura pues esta funge como variable de entrada del modelo y como variable manipulable en el lazo de control.

2.3. Modelo de la reacción, modelo del sistema

El principio de conservación de la masa aplicado a un sistema dinámico dice [54]

$$\left[\begin{array}{l} \text{Rapidez de cambio de la} \\ \text{masa dentro del sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Flujo másico entrando} \\ \text{al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Flujo másico} \\ \text{saliendo del sistema} \end{array} \right] \quad (2.5)$$

Para el caso de un reactor por lotes, debido a que no se tienen flujos de entrada ni salida de material, se tiene que la ecuación de continuidad para la masa es:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Rapidez de cambio de la} \\ \text{masa dentro del sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Flujo másico entrando} \\ \text{al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Flujo másico,} \\ \text{saliendo del sistema} \end{array} \right] \quad (2.6)$$

en términos matemáticos

$$\frac{dm}{dt} = 0 - 0 = 0 \quad (2.7)$$

donde m es la masa dentro del reactor (kg). Además, ya que $m = \rho V$, donde ρ representa la densidad (kg/l) y V el volumen de la mezcla de la reacción (l), ahora se tiene que

$$\frac{d(\rho V)}{dt} = 0 \quad (2.8)$$

Suponiendo una densidad constante entonces se puede sacar a ρ de la derivada, y dividiendo a (2.8) entre ρ se tiene $dV/dt = 0$ y por lo tanto el volumen en el reactor es constante.

Cuando en un sistema dinámico existe una reacción química, para su modelado se utiliza un balance de materia por cada componente en la reacción. En una reacción química el número de moles de un componente individual incrementará si este es un producto de la reacción o decrecerá si es un reactante. Por lo tanto la ecuación de continuidad por componente para el j -ésimo componente de la mezcla de la reacción dice [54]

$$\left[\begin{array}{l} \text{Rapidez de cambio} \\ \text{de los moles del} \\ \text{j-ésimo componente} \\ \text{dentro del sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Flujo molar del} \\ \text{j-ésimo componente} \\ \text{entrando al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Flujo molar del} \\ \text{j-ésimo componente} \\ \text{saliendo del sistema} \end{array} \right] \\ + \left[\begin{array}{l} \text{Velocidad de} \\ \text{formación de moles} \\ \text{del j-ésimo componente} \\ \text{de la reacción química} \end{array} \right] \quad (2.9)$$

Debido a que en el reactor por lotes no existen flujos de entrada ni de salida de componentes la ecuación de continuidad para cada componente del sistema es

$$\left[\begin{array}{l} \text{Rapidez de cambio} \\ \text{de los moles del} \\ \text{j-ésimo componente} \\ \text{dentro del sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Flujo molar del} \\ \text{j-ésimo componente} \\ \text{entrando al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Flujo molar del} \\ \text{j-ésimo componente} \\ \text{saliendo del sistema} \end{array} \right] \\ + \left[\begin{array}{l} \text{Velocidad de} \\ \text{formación de moles} \\ \text{del j-ésimo componente} \\ \text{de la reacción química} \end{array} \right] \quad (2.10)$$

Estableciendo que el número de moles del componente j es $mol_j = VC_j$, donde C_j es la concentración molar del componente j de la reacción (mol/l) y aplicando la ecuación de continuidad (2.10) a cada uno de los componentes en las reacciones (2.2)-(2.4) se tiene que

$$\begin{aligned}
\frac{d(VC_{TG})}{dt} &= -k_1VC_{TG}C_{AL} + k_2VC_{DG}C_{ME} \\
\frac{d(VC_{DG})}{dt} &= k_1VC_{TG}C_{AL} - k_2VC_{DG}C_{ME} - k_3VC_{DG}C_{AL} + k_4VC_{MG}C_{ME} \\
\frac{d(VC_{MG})}{dt} &= k_3VC_{DG}C_{AL} - k_4VC_{MG}C_{ME} - k_5VC_{MG}C_{AL} + k_6VC_{GL}C_{ME} \\
\frac{d(VC_{ME})}{dt} &= k_1VC_{TG}C_{AL} - k_2VC_{DG}C_{ME} + k_3VC_{DG}C_{AL} - k_4VC_{MG}C_{ME} \\
&\quad + k_5VC_{MG}C_{AL} - k_6VC_{GL}C_{ME} \\
\frac{d(VC_{AL})}{dt} &= -\frac{dVC_{ME}}{dt} \\
\frac{d(VC_{GL})}{dt} &= k_5VC_{MG}C_{AL} - k_6VC_{GL}C_{ME}
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Recordando que el volumen de la mezcla es constante, entonces se puede sacar a V de las derivadas en (2.11). Así dividiendo entre V a cada una de las ecuaciones en (2.11), finalmente se tiene el sistema de ecuaciones diferenciales (2.12), el cual describe paso a paso las reacciones involucradas en la transesterificación de triglicéridos. Este modelo fue obtenido de [10].

$$\begin{aligned}
\frac{dC_{TG}}{dt} &= -k_1C_{TG}C_{AL} + k_2C_{DG}C_{ME} \\
\frac{dC_{DG}}{dt} &= k_1C_{TG}C_{AL} - k_2C_{DG}C_{ME} - k_3C_{DG}C_{AL} + k_4C_{MG}C_{ME} \\
\frac{dC_{MG}}{dt} &= k_3C_{DG}C_{AL} - k_4C_{MG}C_{ME} - k_5C_{MG}C_{AL} + k_6C_{GL}C_{ME} \\
\frac{dC_{ME}}{dt} &= k_1C_{TG}C_{AL} - k_2C_{DG}C_{ME} + k_3C_{DG}C_{AL} - k_4C_{MG}C_{ME} \\
&\quad + k_5C_{MG}C_{AL} - k_6C_{GL}C_{ME} \\
\frac{dC_{AL}}{dt} &= -\frac{dC_{ME}}{dt} \\
\frac{dC_{GL}}{dt} &= k_5C_{MG}C_{AL} - k_6C_{GL}C_{ME}
\end{aligned} \tag{2.12}$$

donde k_i con $i = 1 \dots, 6$ representa la velocidad (o cinética) de cada una de las reacciones simultáneas y reversibles presentes en (2.2)-(2.4). Además, dicha velocidad esta definida por la expresión (2.13) conocida como la expresión de Arrhenius.

$$k_i(T) = A_i e^{-Ea_i/RT} \tag{2.13}$$

donde:

k_i : coeficientes de velocidad de cada una de las reacciones, ($1/s$);

A_i : factores de frecuencia de colisiones en cada reacción ($1/s$);

Ea_i : energía de activación para cada reacción (J/mol);

R : constante de los gases ideales ($J/(K mol)$);

T : temperatura de la reacción (K).

Finalmente se tiene que el modelo matemático del sistema es el conjunto de ecuaciones diferenciales (2.12).

2.3.1. Variables y parámetros del modelo

El modelo matemático de la transesterificación describe la velocidad instantánea de la reacción, es decir, el cambio con respecto al tiempo en la concentración de los componentes durante la reacción. Por lo tanto el conjunto de variables que definen el estado de sistema en cada instante del proceso es $X = \{C_{TG}, C_{DG}, C_{MG}, C_{ME}, C_{AL}, C_{GL}\}$. Además, la variable de temperatura representa la única variable de entrada del sistema.

Por otra parte, los parámetros del modelo corresponden a los parámetros de la expresión de Arrhenius (2.13). Estos son el factor de frecuencia de las colisiones, A_i con $i = 1 \dots 6$, y la energía de activación para cada una de las reacciones, Ea_i con $i = 1 \dots 6$.

En este trabajo, se hace la suposición que el estado completo del sistema es medido en cualquier momento del proceso. Por lo tanto el conjunto de variables de salida, denotado por Y es igual al conjunto de variables de estado, es decir, $Y = X = \{C_{TG}, C_{DG}, C_{MG}, C_{ME}, C_{AL}, C_{GL}\}$. Así se tiene la siguiente clasificación:

Parámetros: $\{A_i, Ea_i\}$

Vaiable de entrada: T

Variables del estado: $\{C_{TG}, C_{DG}, C_{MG}, C_{ME}, C_{AL}, C_{GL}\}$

Variables de salida: $\{C_{TG}, C_{DG}, C_{MG}, C_{ME}, C_{AL}, C_{GL}\}$

2.3.2. Modelo en espacio de estado

Para obtener la representación en espacio de estado del modelo del sistema presentado en (2.12), se establecen primero lo siguiente:

Sea $u \in \mathbb{R}$ la variable de entrada y $x \in \mathbb{R}^6$ el vector de estado del sistema tal que

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{TG} \\ C_{DG} \\ C_{MG} \\ C_{ME} \\ C_{AL} \\ C_{GL} \end{bmatrix}, u = T \quad (2.14)$$

Así, el modelo dinámico del sistema (2.12) puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -k_1 x_1 x_5 + k_2 x_2 x_4 \\ \dot{x}_2 &= k_1 x_1 x_5 - k_2 x_2 x_4 - k_3 x_2 x_5 + k_4 x_3 x_4 \\ \dot{x}_3 &= k_3 x_2 x_5 - k_4 x_3 x_4 - k_5 x_3 x_5 + k_6 x_6 x_4 \\ \dot{x}_4 &= k_1 x_1 x_5 - k_2 x_2 x_4 + k_3 x_2 x_5 - k_4 x_3 x_4 + k_5 x_3 x_5 - k_6 x_6 x_4 \\ \dot{x}_5 &= -\dot{x}_4 \\ \dot{x}_6 &= k_5 x_3 x_5 - k_6 x_6 x_4 \end{aligned} \quad (2.15)$$

con

$$k_i = A_i e^{-Ea_i/Ru} \text{ para } i = 1 \dots 6 \quad (2.16)$$

Ahora, reescribiendo a las seis ecuaciones diferenciales en (2.15) en una ecuación diferencial vectorial de primer orden se tiene

$$\dot{x} = f(x, u) \quad (2.17)$$

donde

$$f(x, u) = \begin{bmatrix} -k_1x_1x_5 + k_2x_2x_4 \\ k_1x_1x_5 - k_2x_2x_4 - k_3x_2x_5 + k_4x_3x_4 \\ k_3x_2x_5 - k_4x_3x_4 - k_5x_3x_5 + k_6x_6x_4 \\ k_1x_1x_5 - k_2x_2x_4 + k_3x_2x_5 - k_4x_3x_4 + k_5x_3x_5 - k_6x_6x_4 \\ -\dot{x}_4 \\ k_5x_3x_5 - k_6x_6x_4 \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

La ecuación (2.17) es conocida como la ecuación de estado del sistema. Por otra parte, debido a la suposición de que el estado completo de sistema es medido, entonces la ecuación de salida del sistema denotado por y es $y = h(x) = x$. Por lo tanto se tiene que el modelo en espacio estado del sistema es

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f(x, u) \\ y &= h(x) \end{aligned} \quad (2.19)$$

2.3.3. Expresión de Arrhenius

La expresión de Arrhenius definida en (2.13)

$$k_i(T) = A_i e^{-E_{a_i}/RT}$$

y que está presente en el modelo de la reacción, es una expresión matemática que se utiliza para comprobar la dependencia entre la velocidad de una reacción química y la temperatura a la que se lleva a cabo dicha reacción.

En (2.13) el parámetro k_i , llamado coeficiente de velocidad, representa la velocidad de la i -ésima reacción que ocurre dentro del reactor.

A su vez, el parámetro A_i , llamado factor de frecuencia de las colisiones, determina la probabilidad de que existan colisiones exitosas entre los reactantes de la i -ésima reacción y de que se forme una molécula de los productos.

Por otra parte, el parámetro E_{a_i} , que representa a la energía de activación de la i -ésima reacción, define la cantidad de energía suficiente en las moléculas durante una colisión para romper los enlaces existentes y formar nuevos enlaces, resultando en los productos de la reacción.

La expresión (2.13) indica que el coeficiente de velocidad k_i , y en consecuencia la velocidad de la reacción, es directamente proporcional al factor de frecuencia de las colisiones A_i , y a la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción T . Así mismo define que la velocidad de la reacción es inversamente proporcional a la energía de activación (E_{a_i}) para cada reacción.

El parámetro A_i de la expresión de Arrhenius es característico de cada reacción y depende de la temperatura. Sin embargo, para un intervalo limitado de temperatura dicho parámetro pueden considerarse constantes. En este caso se hace la suposición que en el intervalo de temperatura 50 °C a 65 °C.

2.3.4. Puntos de equilibrios

Un concepto importante al trabajar con ecuaciones de estado es el concepto de punto de equilibrio. Un punto de equilibrio está definido como

Definición 1 (Punto de equilibrio [56]). *Un punto $x = x_e$ en el espacio de estado, se dice que es un punto de equilibrio si tiene la propiedad de que siempre que el estado del sistema comience en x_e , permanecerá en x_e para todo el tiempo futuro.*

Los puntos de equilibrio del sistema se determinan haciendo $\dot{x}_1 = \dot{x}_2 = \dots = \dot{x}_6 = 0$ y resolviendo con respecto a x_1, \dots, x_6 :

$$\begin{aligned}
 0 &= -k_1x_1x_5 + k_2x_2x_4 \\
 0 &= k_1x_1x_5 - k_2x_2x_4 - k_3x_2x_5 + k_4x_3x_4 \\
 0 &= k_3x_2x_5 - k_4x_3x_4 - k_5x_3x_5 + k_6x_6x_4 \\
 0 &= k_1x_1x_5 - k_2x_2x_4 + k_3x_2x_5 - k_4x_3x_4 + k_5x_3x_5 - k_6x_6x_4 \\
 0 &= -\dot{x}_4 \\
 0 &= k_5x_3x_5 - k_6x_6x_4
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

De esta manera los puntos de equilibrio del sistema son las soluciones, con respecto a x_1, \dots, x_6 , del sistema de ecuaciones algebraicas (2.20). Resolviendo el sistema de ecuaciones algebraicas *in silico* [57], se tienen las siguientes soluciones:

$$Sol : \begin{cases} x_{e1} = (a_1, a_2, a_3, 0, 0, a_6) \\ x_{e2} = \left(\frac{a_4^3x_6k_2k_4k_6}{a_5^3k_1k_3k_5}, \frac{a_4^2x_6k_4k_6}{a_5^2k_3k_5}, \frac{a_4x_6k_6}{a_5k_5}, a_4, a_5, a_6 \right) \\ x_{e3} = (a_1, 0, 0, a_4, 0, 0) \\ x_{e4} = (0, 0, 0, 0, a_5, a_6) \end{cases} \tag{2.21}$$

donde a_i para $i = 1, \dots, 6$ son parámetros arbitrarios. Así, el sistema de ecuaciones (2.20) posee una infinidad de soluciones y por lo tanto el sistema tiene un número infinito de puntos de equilibrio. Estos puntos de equilibrio son de la forma de cualquiera de las soluciones en (2.20).

2.4. Linealización del modelo

La expresión de Arrhenius presentada en (2.13)

$$k_i(T) = A_i \exp^{-Ea_i/RT}$$

define las principales relaciones entre las variables del sistema. Es evidente que la expresión (2.13) es no lineal debido a que en ella aparece un término exponencial. Esto provoca la no linealidad del sistema completo.

Entonces debido a que la estrategia de control desarrollada en este trabajo requiere de un modelo de predicción lineal de la forma

$$\begin{aligned}
 \dot{x} &= Ax + Bu \\
 y &= Cx
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

fue necesario llevar a cabo la linealización del modelo del sistema.

La linealización es algo relativamente sencillo. Se realiza obteniendo la expansión en series de Taylor de una función no lineal alrededor de un punto de operación en estado estable, y despreciando todos los términos de la serie después de la primera derivada [54].

El punto alrededor del cual se desea realizar la linealización es $(x_n, u_n) \in \mathbb{R}^6 \times \mathbb{R}$ tal que

$$(x_n, u_n) = \begin{bmatrix} 0.1099 \\ 0.0692 \\ 0.0168 \\ 2.5150 \\ 3.4850 \\ 0.8041 \\ 323.15 \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

Se eligió el punto (x_n, u_n) ya que, como se verá más adelante, en este punto la simulación de la reacción cumple con las condiciones establecidas en la norma para el biodiésel.

Retomando la ecuación de estado del sistema (2.17)

$$\dot{x} = f(x, u)$$

con f definida en (2.18), determinando la expansión en series de Taylor de f y despreciando los términos después de la primera derivada se tiene que

$$\dot{x} = f(x, u) \quad (2.24)$$

$$\approx f(x_n, u_n) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(u_n, x_n)} x + \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{(u_n, x_n)} u \quad (2.25)$$

con

$$f(x_n, u_n) = 0 \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(u_n, x_n)} &= \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right|_{(u_n, x_n)} & \cdots & \left. \frac{\partial f_1}{\partial x_6} \right|_{(u_n, x_n)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left. \frac{\partial f_6}{\partial x_1} \right|_{(u_n, x_n)} & \cdots & \left. \frac{\partial f_6}{\partial x_1} \right|_{(u_n, x_n)} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -0.1742 & 0.2767 & 0 & 0.0076 & -0.0055 & 0 \\ 0.1742 & -1.0259 & 3.0885 & 0.0130 & -0.0094 & 0 \\ 0 & 0.74931 & -3.9318 & -0.0150 & 0.0108 & 0.0176 \\ 0.1742 & 0.4726 & -2.2451 & -0.0339 & 0.0244 & -0.0176 \\ -0.1742 & -0.4726 & 2.2451 & 0.0339 & -0.0244 & 0.0176 \\ 0 & 0 & 0.8434 & -0.0056 & 0.0041 & -0.0176 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.27)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{(u_n, x_n)} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u} \Big|_{(u_n, x_n)} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_6}{\partial u} \Big|_{(u_n, x_n)} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.0003 \\ -0.0010 \\ 0.0015 \\ 0.0014 \\ -0.0014 \\ -0.0002 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.28)$$

donde $x = x + x_n$ y $u = u + u_n$. Denotando a las matrices $\partial f/\partial x|_{(x_n, u_n)}$ y $\partial f/\partial u|_{(x_n, u_n)}$ como A y B respectivamente, finalmente se tiene que la ecuación de estado lineal del sistema es

$$\dot{x} = Ax + Bu \quad (2.29)$$

donde $A \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$ y $B \in \mathbb{R}^{6 \times 1}$. Debido a la suposición de que el estado completo del sistema es medido en cualquier instante de tiempo, se tiene que la ecuación de salida para el modelo de estado lineal es

$$y = Cx \quad (2.30)$$

donde $C \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$ es una matriz identidad. Así se tiene que el modelo de estado del sistema lineal y tiempo continuo es

$$\begin{aligned} \dot{x} &= Ax + Bu \\ y &= Cx \end{aligned} \quad (2.31)$$

con A y B definidos en (2.27) y (2.28), respectivamente y donde C es una matriz identidad.

Sin embargo, la estrategia de predicción del control predictivo requiere un modelo en tiempo discreto. Debido a esto, fue necesario discretizar el modelo (2.31). La discretización de (2.31) se llevó a cabo en el software MATLAB[®] haciendo uso de la función *c2d* y empleando un tiempo de muestreo $T_d = 0.4346 \text{ min}$, así como un retenedor de orden cero.

De esta manera el modelo en espacio de estado lineal y en tiempo discreto para la reacción transesterificación quedó de la siguiente manera

$$\begin{aligned} x(k+1) &= A_d x(k) + B_d u(k) \\ y(k) &= C_d x(k) \end{aligned} \quad (2.32)$$

con

$$A_d = \begin{bmatrix} 0.9311 & 0.0984 & 0.0404 & 0.0033 & -0.0024 & 0.0001 \\ 0.0620 & 0.7431 & 0.5234 & 0.0025 & -0.0018 & 0.0027 \\ 0.0062 & 0.1270 & 0.2490 & -0.0028 & 0.0020 & 0.0039 \\ 0.0765 & 0.0917 & -0.4168 & 0.9877 & 0.0089 & -0.0096 \\ -0.0765 & -0.0917 & 0.4168 & 0.0123 & 0.9911 & 0.0096 \\ 0.0007 & 0.0316 & 0.1873 & -0.0031 & 0.0022 & 0.9933 \end{bmatrix}$$

$$B_d = \begin{bmatrix} -1.3511 \\ -1.3724 \\ 2.9584 \\ 3.8396 \\ -3.8396 \\ -0.2349 \end{bmatrix} \times 10^{-4}, C_d = I_{6 \times 6}$$

2.5. Conclusiones

En este capítulo se describieron el funcionamiento y las características físicas de un reactor por lotes. El modelado de un reactor por lotes se basa en un balance de materia y de energía. Sin embargo, en este trabajo se presentó un modelo basado solamente en el balance de materia de reacción que se lleva a cabo en el reactor, sin considerar el balance de energía para el sistema.

Además, en este capítulo se estudió la reacción de transesterificación, que es la reacción que se lleva a cabo en el reactor y que produce biodiésel a partir de aceite vegetal.

A partir del modelo de la reacción (no lineal) se obtuvo su linealización mediante el método de expansión por series de Taylor.

Capítulo 3

Simulación y análisis del sistema

Este capítulo presentan los resultados de la simulación y el análisis del modelo matemático no lineal de la reacción y su linealización.

La sección 3.1 presenta el análisis de controlabilidad del sistema. Posteriormente, la sección 3.2 presenta la evaluación del modelo no lineal de la reacción contra resultados de experimentos reales reportados en la literatura. A continuación, la sección 3.3 presenta un análisis del efecto que la temperatura tiene sobre el sistema. Después, la sección 3.4 analiza la norma de calidad para el biodiésel. Y finalmente la sección 3.5 expone una evaluación del modelo linealizado de la reacción el cual será utilizado como parte del modelo de predicción en el control predictivo.

3.1. Análisis de controlabilidad

La controlabilidad es una propiedad importante en el análisis de sistemas dinámicos y en el diseño de sistemas de control. Esta propiedad juega un papel crucial en los problemas de control óptimo. La definición de controlabilidad de un sistema dinámico es la siguiente:

Definición 2 (Controlabilidad [6]). *Se dice que un sistema es controlable en el tiempo t_0 si se puede llevar, de cualquier estado inicial x_0 , a cualquier otro estado x , mediante una señal de entrada de control sin restricciones, en un intervalo de tiempo finito.*

El modelo de predicción utilizado por el control predictivo es la forma

$$\begin{aligned} \dot{x} &= Ax + Bu \\ y &= Cx \end{aligned} \tag{3.1}$$

y para el caso de modelos de la forma de (3.1), el siguiente criterio presenta las condiciones para garantizar la controlabilidad del estado.

Teorema 1 (Controlabilidad de estado LTI [58]). *Un modelo en espacio de estado de un sistema LTI con matrices de realización (A, B, C) se dice de estado controlable si y sólo si la matriz de controlabilidad*

$$C = [B \quad AB \quad A^2B \quad \dots \quad A^nB] \tag{3.2}$$

es de rango completo, esto es $\rho\mathcal{C} = n$ donde ρ denota el rango de una matriz.

El modelo linealizado de la reacción de transesterificación definido en (2.31) es

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

con

$$A = \begin{bmatrix} -0.1742 & 0.2767 & 0 & 0.0076 & -0.0055 & 0 \\ 0.1742 & -1.0259 & 3.0885 & 0.0130 & -0.0094 & 0 \\ 0 & 0.7493 & -3.9318 & -0.0150 & 0.0108 & 0.0176 \\ 0.1742 & 0.4726 & -2.2451 & -0.0339 & 0.0244 & -0.0176 \\ -0.1742 & -0.4726 & 2.2451 & 0.0339 & -0.0244 & 0.0176 \\ 0 & 0 & 0.8434 & -0.0056 & 0.0041 & -0.0176 \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} -0.0003 \\ -0.0010 \\ 0.0015 \\ 0.0014 \\ -0.0014 \\ -0.0002 \end{bmatrix}, \quad C = I_{6 \times 6},$$

Calculando la matriz de controlabilidad para el modelo del sistema se tiene

$$\begin{aligned}\mathcal{C} &= [B \quad AB \quad A^2B \quad \dots \quad A^5B] \\ &= \begin{bmatrix} -0.0003 & -0.0002 & 0.0016 & -0.0075 & 0.0345 & -0.1587 \\ -0.0010 & 0.0057 & -0.0268 & 0.1238 & -0.5701 & 2.6236 \\ 0.0015 & -0.0068 & 0.0310 & -0.1424 & 0.6554 & -3.0160 \\ 0.0014 & -0.0040 & 0.0180 & -0.0829 & 0.3814 & -1.7550 \\ -0.0014 & 0.0040 & -0.0180 & 0.0829 & -0.3814 & 1.7550 \\ -0.0002 & 0.0013 & -0.0057 & 0.0260 & -0.1198 & 0.5511 \end{bmatrix}\end{aligned}$$

Ahora, llevando la matriz de controlabilidad a su forma escalonada

$$\mathcal{C} \sim \begin{bmatrix} 1.0000 & 0 & 0 & -0.2351 & 1.2245 & -5.7093 \\ 0 & 1.0000 & 0 & -2.8401 & 14.5559 & -67.7399 \\ 0 & 0 & 1.0000 & -5.2079 & 24.2823 & -111.9042 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

se tiene que en la forma escalonada existen solamente tres filas linealmente independientes. Por lo tanto el rango de la matriz de controlabilidad, que es igual al número de filas linealmente independientes de \mathcal{C} , es $\rho\mathcal{C} = 3$.

Ya que $\mathcal{C} \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$ y $\rho\mathcal{C} = 3$, entonces la matriz de controlabilidad \mathcal{C} no es de rango completo y en consecuencia el sistema es de estado no controlable.

El hecho de que el sistema sea no controlable implica que su estado no puede ser llevado a algún estado deseado (e.g. un punto de operación nominal). En otras palabras,

implica que no se puedan controlar simultáneamente todas las variables del estado. Sin embargo, es posible controlar algún número reducido de variables del estado. En este sentido las variables que son controlables forman el subespacio controlables del sistema, mientras que las que no lo son forman el subespacio no controlable.

Es por lo anterior que fue necesario realizar la descomposición de la ecuación de espacio de estado lineal (2.31), en los subespacios controlable y no controlable. Para exponer la descomposición del estado del sistema en sus partes controlable y no controlables, considérese la siguiente definición y el siguiente teorema.

Definición 3 (Transformación de semejanza [58]). Sea $\bar{x} = Px$, donde P es no singular, $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Entonces se tiene que la ecuación de estado

$$\begin{aligned}\dot{\bar{x}} &= \bar{A}\bar{x} + \bar{B}u \\ y &= \bar{C}\bar{x}\end{aligned}\tag{3.3}$$

donde $\bar{A} = PAP^{-1}$; $\bar{B} = PB$; $\bar{C} = CP^{-1}$, es algebraicamente equivalente a (3.1).

Teorema 2 (Descomposición controlable/no controlable [58]). Considérese la ecuación de n variables de estado (3.1), con la matriz de controlabilidad \mathcal{C} tal que

$$\rho\mathcal{C} = \rho \begin{bmatrix} B & AB & A^2B & \dots & A^{n-1}B \end{bmatrix} = n_1 < n$$

Sea la matriz $n \times n$ de cambio de coordenadas

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \dots & q_{n_1} & \dots & q_n \end{bmatrix}$$

donde las primeras n_1 columnas son n_1 columnas linealmente independientes de la matriz \mathcal{C} , y las restantes columnas se eligen arbitrariamente de forma que P sea no singular. Entonces la transformación de equivalencia $\bar{x} = Px$ o $x = P^{-1}\bar{x}$ lleva a (3.1) a la forma

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} \dot{\bar{x}}_c \\ \dot{\bar{x}}_{\bar{c}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \bar{A}_c & \bar{A}_{12} \\ 0 & \bar{A}_{\bar{c}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_c \\ \bar{x}_{\bar{c}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \bar{B}_c \\ 0 \end{bmatrix} u \\ \bar{y} &= \begin{bmatrix} \bar{C}_c & \bar{C}_{\bar{c}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_c \\ \bar{x}_{\bar{c}} \end{bmatrix}\end{aligned}\tag{3.4}$$

donde $\bar{A}_c \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_1}$ y $\bar{A}_{\bar{c}} \in \mathbb{R}^{(n-n_1) \times (n-n_1)}$. La ecuación de estado de orden n_1

$$\begin{aligned}\dot{\bar{x}}_c &= \bar{A}_c\bar{x}_c + \bar{B}_cu \\ \bar{y} &= \bar{C}_c\bar{x}_c\end{aligned}$$

es controlable y tiene la misma función de transferencia que (3.1).

En la transformación de equivalencia $\bar{x} = Px$, el espacio de estado se descompone en dos subespacios fundamentales:

- el subespacio controlable, generado por todos los vectores en \bar{x} de la forma $\begin{bmatrix} \bar{x}_c \\ 0 \end{bmatrix}$
- y

- el *subespacio no controlable*, generado por todos los vectores en \bar{x} de la forma $\begin{bmatrix} 0 \\ \bar{x}_{\bar{c}} \end{bmatrix}$.

Así la descomposición del modelo de estado de la reacción de transesterificación se llevó a cabo de la siguiente manera:

Recordando que el rango de la matriz de controlabilidad del sistema es $\rho\mathcal{C} = 3 < 6 = n$, entonces, del teorema 2, se sabe que para formar la matriz de cambio de coordenadas se toman tres columnas linealmente independientes de \mathcal{C} como las tres primeras columnas de la matriz de cambio de coordenadas P^{-1} . Las restantes tres columnas de la matriz de cambio de coordenadas se eligen arbitrariamente, tal que P sea no singular. Así se tiene

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} B & AB & A^2B & v_1 & v_2 & v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.0003 & -0.0002 & 0.0016 & 0 & 0 & 0 \\ -0.0010 & 0.0057 & -0.0268 & 1 & 0 & 0 \\ 0.0015 & -0.0068 & 0.0310 & 0 & 1 & 0 \\ 0.0014 & -0.0040 & 0.0180 & 0 & 0 & 0 \\ -0.0014 & 0.0040 & -0.0180 & 0 & 0 & 1 \\ -0.0002 & 0.0013 & -0.0057 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

y

$$P = \begin{bmatrix} -0.0191 & 0 & 0 & 0.1317 & 0 & 0.4128 \\ 0.6663 & 0 & 0 & 0.3345 & 0 & 1.2446 \\ 0.1496 & 0 & 0 & 0.0698 & 0 & 0.2449 \\ 0.0002 & 0.0001 & 0 & 0.0001 & 0 & -0.0001 \\ -0.0001 & 0 & 0.0001 & -0.0001 & 0 & 0.0002 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0001 & 0.0001 & 0 \end{bmatrix} \times 10^4$$

donde $\det(P) = -1.6560 \times 10^9 \neq 0$, y por lo tanto P es no singular.

Haciendo la transformación $\bar{x} = Px$, se obtiene el modelo de estado equivalente

$$\begin{aligned} \dot{\bar{x}} &= \bar{A}\bar{x} + \bar{B}u \\ &= \begin{bmatrix} \bar{A}_{\mathcal{C}} & \bar{A}_{12} \\ 0 & \bar{A}_{\bar{\mathcal{C}}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_{\mathcal{C}} \\ \bar{x}_{\bar{\mathcal{C}}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \bar{B}_{\mathcal{C}} \\ 0 \end{bmatrix} u \\ \bar{y} &= \bar{C}\bar{x} \\ &= \begin{bmatrix} \bar{C}_{\mathcal{C}} & \bar{C}_{\bar{\mathcal{C}}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_{\mathcal{C}} \\ \bar{x}_{\bar{\mathcal{C}}} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.5)$$

donde

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -0.2351 & \vdots & 569.5778 & 524.8212 & 50.0100 \\ 1.0000 & 0 & -2.8401 & \vdots & 3423.9089 & 2987.4254 & 95.7223 \\ 0 & 1.0000 & -5.2079 & \vdots & 743.5334 & 499.2945 & 18.7899 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \vdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \vdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \vdots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\bar{B} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{C} = \begin{bmatrix} -0.0003 & -0.0002 & 0.0016 & \vdots & 0 & 0 & 0 \\ -0.0010 & 0.0057 & -0.0268 & \vdots & 1.0000 & 0 & 0 \\ 0.0015 & -0.0068 & 0.0310 & \vdots & 0 & 1.0000 & 0 \\ 0.0014 & -0.0040 & 0.0180 & \vdots & 0 & 0 & 0 \\ -0.0014 & 0.0040 & -0.0180 & \vdots & 0 & 0 & 1.0000 \\ -0.0002 & 0.0013 & -0.0057 & \vdots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Ya que $\bar{A}_C \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, entonces $\bar{x}_C \in \mathbb{R}^3$ y por lo tanto existen tres variables de estado controlables en el sistema equivalente (3.5). Finalmente, a partir de la transformación $x = P^{-1}\bar{x}$, se obtienen los tres estados controlables en el sistema original los cuales son una combinación lineal solamente de las variables de estado controlables del sistema equivalente (3.5). Así las variables de estados controlables en la reacción de transesterificación son $x_C = (C_{TG}, C_{MG}, C_{GL})$.

En este trabajo de investigación no es de interés la controlabilidad del estado completo del sistema, si no solamente de aquellas variables que se utilizan en la norma europea para medir la calidad del biodiésel. De estas variables, únicamente son controlables las concentraciones de triglicéridos, C_{TG} , y de biodiésel, C_{ME} .

Además, debido a que el control proporcional integral es una estrategia de control monovariante y se desea evaluar el desempeño del control predictivo contra el de un controlador de este tipo, de las dos variables controlables, se seleccionó a la concentración de metil éster, C_{ME} en el sistema de control.

3.2. Evaluación del modelo del sistema

La evaluación del modelo matemático (no lineal) del sistema se realizó a partir de la comparación entre los resultados de la simulación de la reacción a 50 °C, y resultados de experimentos reales reportados en [10], que corresponden a la reacción de transesterificación de aceite de soya con metanol a dicha temperatura.

La simulación del sistema consiste en la solución numérica del conjunto de ecuaciones diferenciales (2.12) que define a su modelo. Esta se realizó en el software MATLAB[®] de MathWorks[®] utilizando la función *ode45*, la cual lleva a cabo la integración numérica de sistemas de ecuaciones diferenciales de la forma $y' = f(t, y)$ con condiciones iniciales y_0 .

Las condiciones de la reacción para la simulación se establecen en el anexo A. Por su parte, los valores para los parámetros del modelo se presentan en el anexo B.

Las condiciones iniciales para la simulación de la reacción a 50 °C, se establecieron tal que $x_0 = (0.8, 0, 0, 0, 4.8, 0)$ en correspondencia con [10]. Estas condiciones iniciales garantizan una relación molar alcohol:aceite de 6:1.

La Figura 3.1 presenta, en *a*) la gráfica de los resultados de la simulación, y en *b*) los resultados reportados en [10]. Las curvas de concentración en ambos casos son semejantes, a excepción de un pequeño retardo que se presenta al inicio de la reacción del experimento real (fig. 3.1 *b*). Sin embargo, este retardo es pequeño y transitorio,

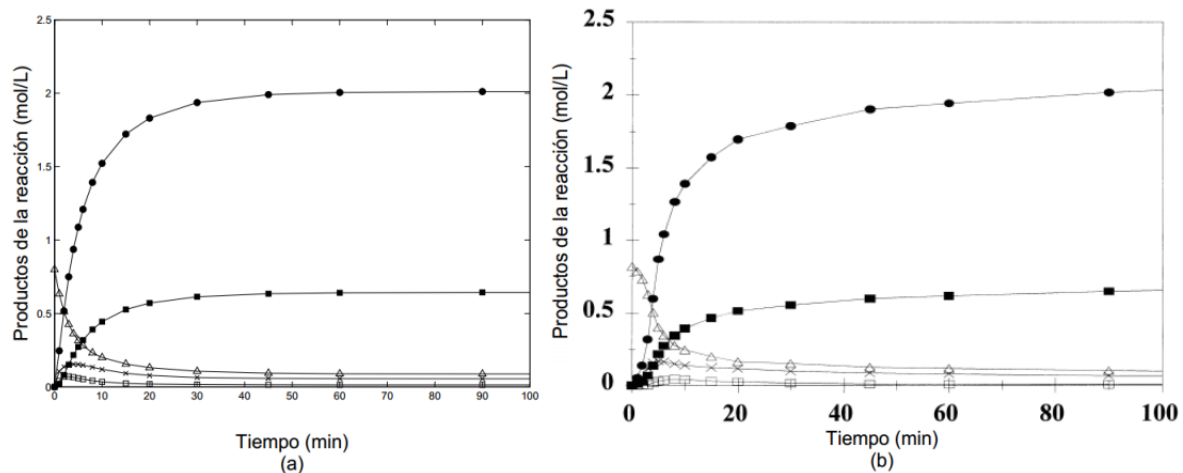


Figura 3.1: Cinética de la reacción durante la transesterificación a 50 °C, a) simulación y b) datos reportados en [10]. TG:(Δ), DG (\times), MG (\square), ME (\bullet) y GL (\blacksquare).

comienza en el tiempo $t = 0$ y para el tiempo $t = 5$ minutos las curvas de concentración en ambos modelos son prácticamente iguales. Por otra parte, dicho retardo se presenta en la parte transitoria de la reacción, siendo que los resultados más significativos son los del estado final de la reacción. Por lo tanto, la dinámica de este retardo es despreciable.

Adicionalmente, la Figura 3.1 muestra que en ambos casos los valores en estado estable para los componentes de la reacción son prácticamente los mismos. Así, por ejemplo para la concentración de metil éster, el valor en estado estable para ambas gráficas es aproximadamente 2 mol/l. De este modo se tiene que el modelo predice de manera aceptable la dinámica de la reacción.

No fue posible llevar a cabo una evaluación del modelo con base en un análisis numérico de los resultados de la simulación debido a que en [10] solamente se presenta la gráfica de los resultados del experimento y no los datos numéricos.

Además, si bien en la literatura existen otros trabajos en los que se estudia la reacción de transesterificación de aceite de soya, como por ejemplo en [5] y [44], los resultados de los experimentos son obtenidos en simulación y utilizan como fuente de información a [10].

Se llevaron a cabo experimentos propios en un prototipo de reactor por lotes, propiedad del Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez Chiapas, con el fin poder evaluar el modelo con los resultados numéricos de dichos experimentos. Sin embargo, debido a la falta de equipos especializados para la medición de las concentraciones no se pudieron obtener los resultados requeridos.

3.3. Efecto de la temperatura sobre la reacción

La variable de temperatura afecta significativamente la concentración final y el tiempo de formación del metil éster (biodiésel) durante el proceso de transesterificación de aceite de soya [33], [10]. Por lo tanto, ya que la temperatura es la variable de entrada en el modelo y la variable manipulable en el lazo de control, se realizó un análisis del efecto que dicha variable tiene sobre el estado final de la reacción de transesterificación.

El análisis se hizo con base en la simulación de la reacción a temperatura constante, para diferentes temperaturas. Las temperaturas a las cuales se simuló la reacción son:

- 30 °C (303.15 K),
- 40 °C (313.15 K),
- 50 °C (323.15 K),
- 60 °C (333.15 K),
- 70 °C (343.15 K).

El análisis del efecto que la variable de temperatura tiene sobre la reacción se dividió en dos partes: el efecto que tiene sobre el estado final de la reacción y el efecto que tiene sobre el tiempo de reacción. A continuación se presentan ambos análisis.

3.3.1. Estado final de la reacción a diferentes temperaturas

La Figura 3.2 presenta los resultados de la simulación de la reacción a las diferentes temperaturas a las que se llevó a cabo y en ella se puede observar el efecto que la temperatura tiene sobre la reacción. Conforme aumenta la temperatura de la reacción, las concentraciones finales de triglicéridos y alcohol son menores (Figura 3.2a y 3.2e), mientras que las concentraciones finales de metil éster y glicerina son mayores (Figura 3.2d y 3.2f). Esto se debe a que un incremento en la temperatura representa un mayor nivel de energía en las moléculas del alcohol y los triglicéridos (reactantes), lo que ocasiona una mayor número de colisiones fructíferas entre ellas y una mayor generación de moléculas de metil éster y glicerina (productos) [53].

La temperatura afecta también a las concentraciones de los productos intermedios de la reacción: los diglicéridos y monoglicéridos. Para la reacción a las temperaturas más altas, la concentración final de diglicéridos es menor (Figura 3.2b), mientras la concentración final de monoglicéridos es mayor (Figura 3.2c). Este fenómeno es ocasionado por las energías de activación de cada una de las reacciones en el proceso de transesterificación. En general con múltiples reacciones, una alta temperatura favorece la reacción de energías de activación altas, mientras que una baja temperatura favorecen la reacción de energías de activación bajas [10].

La Tabla B.2 presenta las energías de activación para cada una de las reacciones. Las energías de activación Ea_1 (TG→DG) y Ea_3 (DG→MG) son altas y por ello se tienen mayores cantidades de monoglicéridos a temperaturas altas. Así mismo, ya que Ea_3 (DG→MG) es mayor que Ea_1 (TG→DG), se tiene que temperatura favorece más el consumo que la formación de diglicéridos y por lo tanto las concentraciones finales de este componente son menores a mayor temperatura.

3.3.2. Tiempo de reacción a diferentes temperaturas

De igual manera, la temperatura influye en el tiempo necesario para que se lleve a cabo la reacción. Esto puede observarse en la curva de formación del metil éster (Figura 3.2d) pues conforme la transesterificación se lleva a cabo a una temperatura más alta,

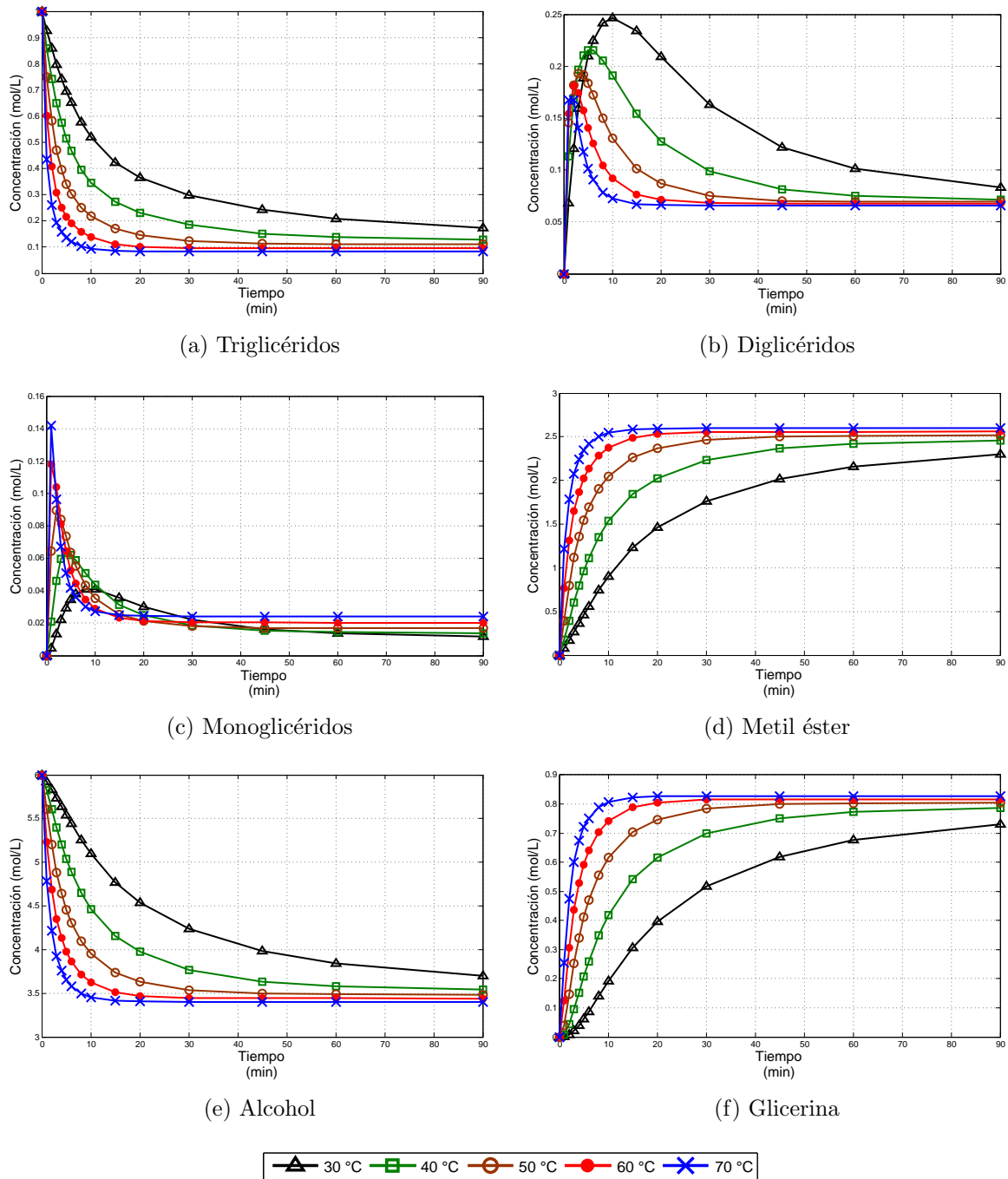


Figura 3.2: Resultados de la simulación de la reacción de transesterificación a diferentes temperaturas.

el tiempo de formación de metil éster se reduce. La Tabla 3.1 presenta los tiempos de formación de este componente (tiempo de estabilización, criterio del 2%) durante la simulación de la reacción a las diferentes temperaturas a las que se llevó a cabo. Para la simulación a 30 y 70 °C, el tiempo de formación se redujo en más de 7 veces.

Los demás componentes de la reacción presentan el este mismo comportamiento. Por lo tanto se tiene que la variación en la temperatura de la reacción es inversamente proporcional al tiempo de la reacción.

Tabla 3.1: Tiempo de formación de metil éster durante la simulación de la reacción de transesterificación a diferentes temperatura.

Temperatura (°C)	Tiempo (min)
30	77.3
40	54.8
50	30.1
60	16.8
70	10

3.4. Norma EN 14214

La norma EN 14214 establece los requisitos estándares para los ésteres metílicos de ácidos grasos (FAME, por sus siglas en inglés) para motores diésel. Esta norma tiene por objeto especificar los requerimientos de calidad y los métodos de prueba para los FAME destinados a usarse en motores diésel [59]. La norma establece, entre otras cosas, que los productos finales de la producción de biodiésel deben poseer un contenido en éster mínimo del 96.5%. Y precisamente uno de los propósitos de esta investigación es garantizar en simulación la producción de biodiésel que cumpla la especificación de contenido en éster de la norma.

Suponiendo una separación perfecta de la glicerina y el alcohol en la mezcla final de la reacción, el contenido en éster se determina a partir del contenido másico de metil éster calculado solamente en relación a la masa de los triglicéridos, diglicéridos, monoglicéridos y el metil éster, como se muestra en (3.6) [43]

$$X_{ME} = \frac{m_{ME}}{m_{TG} + m_{DG} + m_{MG} + m_{ME}} \times 100\% \quad (3.6)$$

donde X_{ME} es el porcentaje másico de metil éster y m_j es la masa del componente j en la reacción.

Se calculó el contenido másico de metil éster a partir de (3.6), para la simulación de la reacción a las diferentes temperaturas y los resultados se muestran en la Tabla 3.2. El contenido másico final de metil éster aumenta conforme lo hace la temperatura, sin embargo, después de de los 50 °C la variación se hace mínima. Por otro lado, a partir de los 50 °C el contenido másico final de metil éster es mayor que el requerimiento mínimo del 96.5% establecido en la norma. Por lo tanto, esta temperatura fue seleccionada como la temperatura nominal de operación, además el estado final de la reacción a

50 °C se eligió como estado nominal de operación y como de referencia en el lazo de control.

3.5. Evaluación del modelo lineal

La evaluación del modelo lineal del sistema se realizó a partir de análisis de los resultados de su simulación y la simulación del modelo no lineal. La simulación de ambos modelos se realizó ante cambios en la señal de entrada, como se muestra en la Figura 3.3. La temperatura de la reacción cambia desde 50 °C al inicio de la reacción hasta 60 °C al minuto 10. Posteriormente, del minuto 10 hasta el minuto 30 la temperatura decrece de 60 a 40 °C. Finalmente entre el minuto 30 y 40 la temperatura incrementa nuevamente a 50 °C y permanece así hasta el final de la simulación. Los cambios en la temperatura se hacen de manera gradual a razón 1 °C/min.

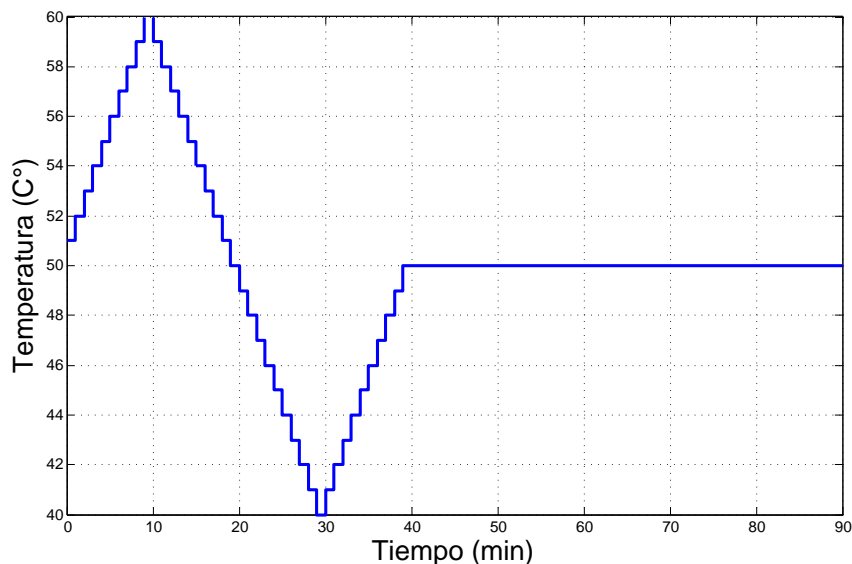
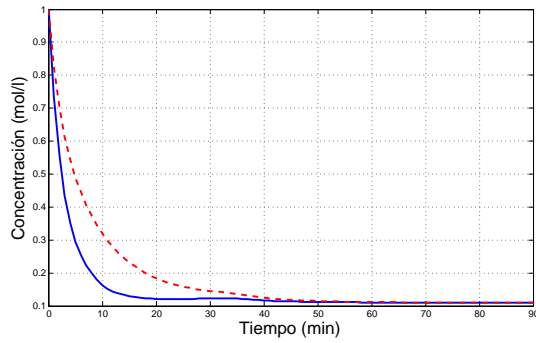


Figura 3.3: Cambios en la temperatura de la reacción para la evaluación del modelo lineal.

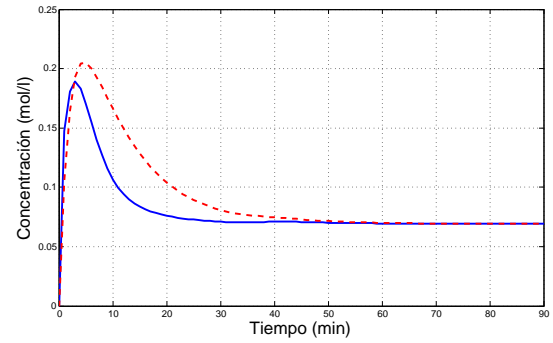
La Figura 3.4 presenta los resultados de la simulación entre ambos modelos. Al inicio de la simulación, el error entre ambos modelos es mayor para cada uno de los componentes, sin embargo, en estado estable el error se hace despreciable.

Tabla 3.2: Porcentaje másico final de metil éster a diferentes temperatura

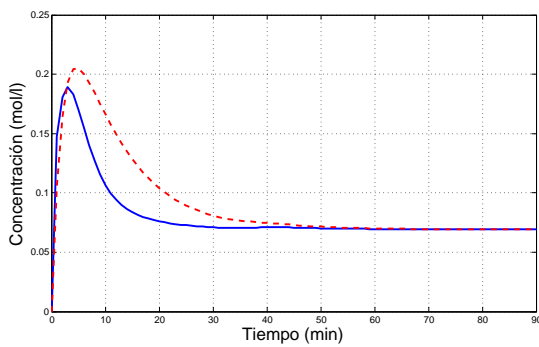
Temperatura (°C)	X_{ME} (%)
30	95.43
40	96.45
50	96.71
60	96.87
70	96.98



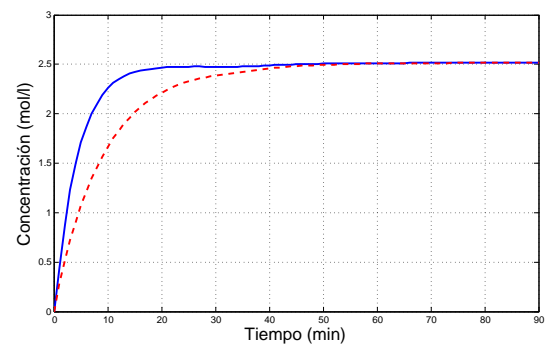
(a) Triglicéridos



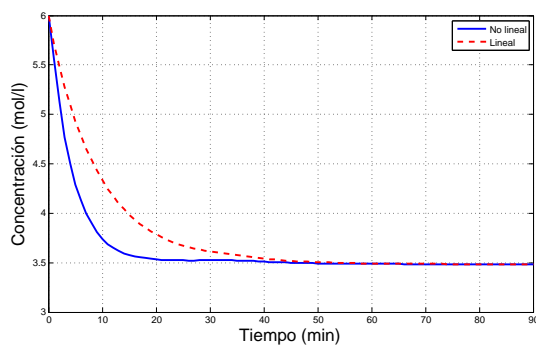
(b) Diglicéridos



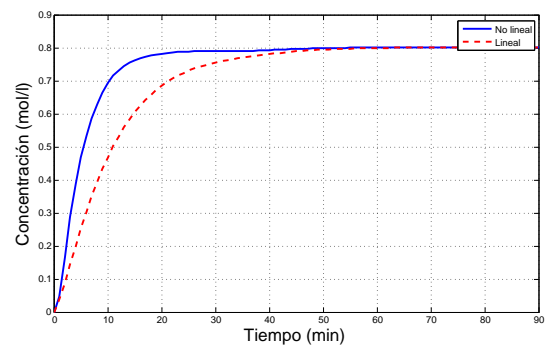
(c) Monoglicéridos



(d) Metil éster



(e) Alcohol



(f) Glicerina

Figura 3.4: Resultados de la simulación del modelo no lineal y lineal.

Tabla 3.3: Error relativo del modelo lineal para los componentes de la reacción

Componente	ε promedio (%)	ε en estado estable (%)
TG	20.7341	0.0186
DG	12.8321	0.0264
MG	11.5745	0.0466
ME	6.7066	0.0036
AL	3.3881	0.0026
GL	7.8969	0.0026

La Tabla 3.3 presenta el error relativo promedio y en estado estable entre ambos modelos. Estos errores fueron calculados a partir de (3.7) y (3.8), respectivamente. El error relativo promedio es mayor al 10% para los triglicéridos, diglicéridos y monoglicéridos, y es menor al 7% para los demás componentes. En estado estable este error disminuye y es menor al 0.1% en todos los caso. Esto representa que en general el modelo lineal no predice de manera aceptable la dinámica no lineal para algunos componentes. No obstante, como se estableció en la sección 3.1 el lazo de control solamente toma en cuenta la dinámica de la concentración de metil éster y para este componente el error relativo es solamente del 6.43%. Además, estableciendo un horizonte de predicción lo suficientemente grande en el control predictivo, de tal manera que la predicción se realice sobre buena parte del estado estacionario de la reacción, se logra mitigar el efecto de este error.

$$\varepsilon_p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\left| \frac{x_i^{nl} - x_i^l}{x_i^{nl}} \right| \times 100 \right) \quad (3.7)$$

$$\varepsilon_{ee} = \left| \frac{x_{ee}^{nl} - x_{ee}^l}{x_{ee}^{nl}} \right| \times 100 \quad (3.8)$$

Por su parte, la Tabla 3.4 presenta el error cuadrático medio (ECM) del modelo lineal calculado a partir de (3.9). Este tipo de error se utiliza para determinar la medida en la que el modelo no se ajusta a la información. Un ECM mínimo indica un buen estimador y en este caso el error cuadrático medio para la señal de concentración de metil éster es de 0.0571, por lo que el modelo lineal resulta ser un buen estimador.

$$ECM = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i^{nl} - x_i^l)^2 \quad (3.9)$$

3.6. Conclusiones

El análisis de controlabilidad demostró que el sistema no es controlable. No obstante, es posible controlar un número reducido de variables de estado. Por tal motivo fue necesario realizar la descomposición del modelo del sistema en su parte controlable y no controlable. Esta descomposición puso de manifiesto que existen tres variables controlables, sin embargo se eligió solamente a la concentración de metil éster como variable controlada.

Tabla 3.4: Error cuadrático medio del modelo lineal para los componentes de la reacción

Componente	Error cuadrático medio (mol^2/l^2)
TG	0.0046
DG	0.0005
MG	0.0001
ME	0.0571
AL	0.0571
GL	0.0074

Por otra parte, la evaluación de modelo lineal determinó que el modelo predice de manera aceptable la dinámica no lineal de proceso, sin embargo esta evaluación fue cuantitativa. Además, solamente se realizó sobre un punto de operación del sistema.

La simulación de la reacción a diferentes temperaturas determinó que la temperatura es inversamente proporcional al tiempo necesario para que la reacción se lleve a cabo, y directamente proporcional a la concentración de metil éster (variable controlada).

Finalmente, un análisis de la norma EN 14214 y la simulación de la reacción a las diferentes temperaturas demostró que a partir de la simulación de la reacción a 50 °C los productos de la reacción tienen la característica de la norma de contenido en éster.

Capítulo 4

Control predictivo de la Transesterificación

En este capítulo se presenta el diseño del sistema de control predictivo implementado en el proceso de transesterificación. Al inicio del capítulo, en la sección 4.1, se presenta la descripción general del control predictivo. Posteriormente, en la sección 4.2 se presenta la formulación básica del control predictivo. Después, en la sección 4.3 se presenta el diseño del control predictivo desarrollado en este trabajo. A continuación, en la sección 4.4 se presenta la solución del problema de control sin restricciones. Y finalmente, en la sección 4.5 se presenta el algoritmo de solución para el problema de control con restricciones.

4.1. Descripción general del control predictivo

El control predictivo (MPC por sus siglas en inglés), control predictivo basado en modelo (MBPC por sus siglas en inglés) o control por horizonte deslizante se enmarca dentro de los controladores óptimos. El criterio a optimizar, o función costo, está relacionado con el comportamiento futuro del sistema. Este comportamiento futuro se predice a partir de un modelo dinámico denominado modelo de predicción. El intervalo de tiempo futuro que se considera en la predicción y la optimización se denomina horizonte de predicción (Figura 4.1).

En el problema de optimización que implica el control predictivo, la variables de decisión es la entrada del sistema. Sin embargo, la aplicación de la entrada óptima sobre el sistema conducen a un control en lazo abierto, pero mediante la técnica de horizonte deslizante se proporciona al sistema de control una retroalimentación del mismo.

La técnica de horizonte deslizante consiste en aplicar la entrada obtenida de la predicción y la optimización, solamente durante un instante de tiempo. Después de dicho instante, se muestrea el estado del sistema y se resuelve nuevamente el problema de optimización. De esta manera el horizonte de predicción se va deslizando a lo largo del tiempo.

El control predictivo es la única técnica de control avanzada que ha tenido un impacto significativo y generalizado en los procesos de control industriales [7]. La principal razón de esto se debe a que es la única tecnología de control genérica que trata rutinariamente con las restricciones del equipo y de seguridad. Así mismo, otras razones que

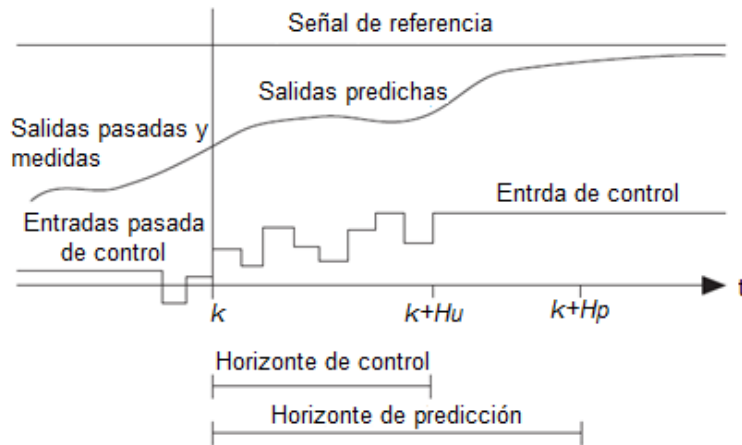


Figura 4.1: Ideal básica del control predictivo.

han ayudado a la inclusión del MPC en la práctica industrial son:

- Su idea es fácil de entender.
- Su formulación básica se extiende a los sistemas multivariables con casi ninguna modificación.
- Es mucho más poderoso que el control PID, incluso para lazos simples sin restricciones sin llegar a ser mucho más difícil de sintonizar, e incluso en lazos «difíciles» tales como aquellos que contienen grandes tiempos de retraso.

4.2. Formulación básica

Para la formulación del control predictivo se hacen con base en las siguientes suposiciones: el modelo de la planta es lineal e invariante en el tiempo, además se considera un modelo su representación en espacio de estado y en tiempo discreto; la función costo es cuadrática y no penaliza valores particulares del vector de entrada $u(k)$, si no cambios en el vector de de entrada $\Delta u(k)$; las restricciones están en forma de desigualdades lineales.

Bajo las suposiciones anteriores, el control predictivo está formado por los siguientes elementos [60]:

4.2.1. Modelo de predicción

El modelo de predicción es el modelo matemático que describe la dinámica del sistema. Este modelo es usado para predecir el comportamiento futuro de la planta. La predicción comienza a partir del tiempo actual, y se realiza a lo largo del horizonte de

predicción. El modelo de predicción es de la forma (4.2)

$$\begin{aligned} x(k+1) &= Ax(k) + Bu(k) \\ y(k) &= C_y x(k) \\ z(k) &= C_z x(k) \end{aligned} \quad (4.1)$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$ es el vector de variables de estado del sistema, $u \in \mathbb{R}^l$ es un vector variables de entrada del sistema, $y \in \mathbb{R}^{m_y}$ es un vector de variables de salida medidas y $z \in \mathbb{R}^{m_z}$ es un vector de variables de salida controladas. Generalmente, las variables en el vector y y z son las mismas. En ese caso se asume que $y \equiv z$, y entonces C denotará a C_y y C_z , y además, m denotará a m_y y m_z . El índice k identifica el “instante de tiempo”.

4.2.2. Función costo

La función costo es una función que indica el criterio a optimizar y es definida positiva. Normalmente se denota por V y penaliza las desviaciones de las salidas controladas predichas $\hat{z}(k+i|k)$ de una trayectoria de referencia $r(k+i|k)$, así como cambios en el vector de entrada $\Delta\hat{u}(k+i|k)$ ¹. La función costo está definida de la siguiente manera²:

$$V(k) = \sum_{i=H_w}^{H_p} \|\hat{z}(k+i|k) - r(k+i|k)\|_{Q(i)}^2 + \sum_{i=0}^{H_u-1} \|\Delta\hat{u}(k+i|k)\|_{R(i)}^2 \quad (4.2)$$

donde H_p denota la longitud del horizonte de predicción y H_u la longitud del horizonte de control. El horizonte de predicción representa el intervalo de tiempo en el futuro sobre el cual se hace la predicción de la salida del sistema, mientras que el horizonte de control representa el intervalo de tiempo en el futuro sobre el cual se desea llevar a cabo la acción de control. Además, $Q(i)$ y $R(i)$ son matrices simétricas semidefinidas positivas llamadas matrices de ponderación, la cuales penalizan el error y los cambios en la señal de control, respectivamente.

La función costo no necesariamente debe penalizar al error $(\hat{z}(k+i|k) - r(k+i|k))$ inmediatamente, ya que puede existir algún retardo entre la aplicación de la señal de entrada y la aparición de algún efecto. Para lograr esto se establece el parámetro $H_w > 1$ en la función costo.

Por otra parte, el horizonte de control debe ser menor o igual que el horizonte de predicción, esto es, $H_u \leq H_p$. Además, una vez transcurrido el horizonte de control, la señal de control permanece constante, es decir, $\forall i \geq H_u, \Delta\hat{u}(k+i|k) = 0$, o lo que es equivalente, $\forall i \geq H_u, \hat{u}(k+i|k) = \hat{u}(k+H_u-1|k)$.

La forma de la función costo implica que el vector de error, $\hat{z}(k+i|k) - r(k+i|k)$, es penalizado por la matriz $Q(i)$ en cada punto del horizonte de predicción, sobre el intervalo $H_w \leq i \leq H_p$. Éste es el caso más común para el control predictivo.

¹La notación $(k+i|k)$ indica el estado predicho de variable en cuestión en el instante $k+i$, estimado a partir de las mediciones del estado de dicha variable en el instante k .

²Las expresiones de la forma $\|x\|_Q^2$ y $\|u\|_R^2$, en la función costo, son formas cuadrática definidas por $x^T Q x$ y $u^T R u$ donde x, u son vectores y Q, R son matrices simétricas.

Pero es posible penalizar el error solo en algunos puntos del horizonte de predicción, haciendo $Q(i) = 0$ para algunos valores de i . Además, también es posible penalizar a diferentes componentes del vector de error, sobre diferentes puntos del horizonte de predicción. Esto se consigue estableciendo apropiadamente a los elementos de las matrices de ponderación $Q(i)$. Es por ello que se tiene $Q(i) \geq 0$ y no que $Q(i) > 0$.

De la misma manera se tiene que $R(i) \geq 0$, ya que existen casos en que no se penaliza a la señal de control. Las matrices de ponderación $R(i)$ algunas veces son llamadas factores de supresión del movimiento, ya que el incremento de estas penaliza más fuertemente cambios en el vector de variables de entrada.

4.2.3. Restricciones

Las restricciones indican los límites dentro de los cuales debe discurrir la evolución de las variables del sistema. Estos límites son definidos, ya sea por los límites físicos del sistema o bien por motivos de seguridad. Las restricciones deben establecerse de la siguiente manera:

$$E (\Delta\hat{u}(k|k), \dots, \Delta\hat{u}(k + H_u - 1|k), 1) \leq 0 \quad (4.3)$$

$$F (\hat{u}(k|k), \dots, \hat{u}(k + H_u - 1|k), 1) \leq 0 \quad (4.4)$$

$$G (\hat{z}(k + H_w|k), \dots, \hat{z}(k + H_p|k)) \leq 0 \quad (4.5)$$

donde E , F y G son matrices de dimensiones adecuadas. En el diseño del control predictivo se pueden establecer restricciones para la velocidad de respuesta del actuador (4.3), el rango del actuador (4.4) y sobre las variables controladas (4.5).

Las restricciones deben establecerse en forma de desigualdades lineales y se mantendrán así sobre los horizontes de control y predicción. Para la solución del problema de optimización en el control predictivo, todas las desigualdades serán transformadas en desigualdades en función de $\Delta\hat{u}(k + i|k)$, sin embargo, permanecerán lineales incluso después de esta transformación.

4.2.4. Estrategia de predicción

Para solucionar el problema del control predictivo, existe una forma para calcular los valores predichos de las variables controladas, $\hat{z}(k + i|k)$, a partir de la medición del estado actual del sistema, $x(k|k)$, la última entrada, $u(k - 1)$, y los cambios en la entrada asumidos, $\Delta u(k + i|k)$. La forma en que se hacen las predicciones tiene un gran efecto en el rendimiento del sistema en lazo cerrado. Por lo tanto, la elección de la estrategia de predicción es un parámetro de sintonización para el control predictivo.

Para el desarrollo de la estrategia de predicción se asume que el vector de estado completo es medido, esto es $x(k) = y(k)$ y entonces $C_y = I$. También, se asume que no existe perturbación o ruido de medición en el sistema. De esta manera, la predicción

del estado del sistema se hace iterando el modelo (4.2), tal que

$$\hat{x}(k+1|k) = Ax(k) + B\hat{u}(k|k) \quad (4.6)$$

$$\hat{x}(k+2|k) = A\hat{x}(k+1|k) + B\hat{u}(k+1|k) \quad (4.7)$$

$$= A^2x(k) + AB\hat{u}(k|k) + B\hat{u}(k+1|k) \quad (4.8)$$

$$\vdots$$

$$\hat{x}(k+H_p|k) = A\hat{x}(k+H_p-1|k) + B\hat{u}(k+H_p-1|k) \quad (4.9)$$

$$= A^{H_p}x(k) + A^{H_p-1}B\hat{u}(k|k) + \dots + B\hat{u}(k+H_p-1|k) \quad (4.10)$$

Se utiliza $\hat{u}(k|k)$ en lugar de $u(k)$ debido a que en el instante de tiempo en el que se calculan las predicciones aún no se conoce a $u(k)$.

Ya que la entrada solo cambiará en los instantes $k, k+1, \dots, k+H_u-1$, y permanecerá constante después de esto, entonces se tiene que $\hat{u}(k+i|k) = \hat{u}(k+H_u-1|k)$ para $H_u \leq i \leq H_p-1$.

Puesto que $\Delta\hat{u}(k+i|k) = \hat{u}(k+i|k) - \hat{u}(k+i-1|k)$, y que en el instante de tiempo k se conoce a $u(k-1)$. Entonces se tiene que

$$\hat{u}(k|k) = \Delta\hat{u}(k|k) + u(k-1) \quad (4.11)$$

$$\hat{u}(k+1|k) = \Delta\hat{u}(k+1|k) + \Delta\hat{u}(k|k) + u(k-1) \quad (4.12)$$

$$\vdots$$

$$\hat{u}(k+H_u-1|k) = \Delta\hat{u}(k+H_u-1|k) + \dots + \Delta\hat{u}(k|k) + u(k-1) \quad (4.13)$$

y por lo tanto

$$\hat{x}(k+1|k) = Ax(k) + B[\Delta\hat{u}(k|k) + u(k-1)]$$

$$\hat{x}(k+2|k) = A^2x(k) + AB[\Delta\hat{u}(k|k) + u(k-1)] \\ + B \underbrace{[\Delta\hat{u}(k+1|k) + \Delta\hat{u}(k|k) + u(k-1)]}_{\hat{u}(k+1|k)}$$

$$= A^2x(k) + (A+I)B\Delta\hat{u}(k|k) + B\Delta\hat{u}(k+1|k) \\ + (A+I)Bu(k-1)$$

$$\vdots$$

$$\hat{x}(k+H_u|k) = A^{H_u}x(k) + (A^{H_u-1} + \dots + A + I)B\Delta\hat{u}(k|k) \\ + \dots + B\Delta\hat{u}(k+H_u-1|k) + (A^{H_u-1} + \dots + A + I)Bu(k-1)$$

$$\hat{x}(k+H_u+1|k) = A^{H_u+1}x(k) + (A^{H_u} + \dots + A + I)B\Delta\hat{u}(k|k) + \dots + \\ (A+I)B\Delta\hat{u}(k+H_u-1|k) + (A^{H_u} + \dots + A + I)Bu(k-1)$$

$$\vdots$$

$$\hat{x}(k+H_p|k) = A^{H_p}x(k) + (A^{H_p-1} + \dots + A + I)B\Delta\hat{u}(k|k) + \dots + \\ (A^{H_p-H_u} + \dots + A + I)B\Delta\hat{u}(k+H_u-1|k) + \\ (A^{H_p-1} + \dots + A + I)Bu(k-1)$$

Finalmente, escribiendo a la predicción del estado en forma de matriz-vector se

tiene

$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} \hat{x}(k+1|k) \\ \vdots \\ \hat{x}(k+H_u|k) \\ \hat{x}(k+H_u+1|k) \\ \vdots \\ \hat{x}(k+H_p|k) \end{bmatrix} &= \underbrace{\begin{bmatrix} A \\ \vdots \\ A^{H_u} \\ A^{H_u+1} \\ \vdots \\ A^{H_p} \end{bmatrix} x(k) + \begin{bmatrix} B \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_u-1} A^i B \\ \sum_{i=0}^{H_u} A^i B \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_p-1} A^i B \end{bmatrix} u(k-1)}_{\text{Pasado}} \\
 &\quad \underbrace{\begin{bmatrix} B & \cdots & 0 \\ AB+B & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_u-1} A^i B & \cdots & B \\ \sum_{i=0}^{H_u} A^i B & \cdots & AB+B \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_p-1} A^i B & \cdots & \sum_{i=0}^{H_p-H_u} A^i B \end{bmatrix}}_{\text{Futuro}} \begin{bmatrix} \Delta\hat{u}(k|k) \\ \vdots \\ \Delta\hat{u}(k+H_u-1|k) \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Ahora, las predicciones para las salidas controladas z se obtienen simplemente como

$$\hat{z}(k+1|k) = C_z \hat{x}(k+1|k) \tag{4.15}$$

$$\hat{z}(k+2|k) = C_z \hat{x}(k+2|k) \tag{4.16}$$

$$\vdots \tag{4.17}$$

$$\hat{z}(k+H_p|k) = C_z \hat{x}(k+H_p|k) \tag{4.18}$$

o nuevamente en forma matriz-vector

$$\begin{bmatrix} \hat{z}(k+1|k) \\ \vdots \\ \hat{z}(k+H_p|k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_z & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & C_z & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & C_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x}(k+1|k) \\ \vdots \\ \hat{x}(k+H_p|k) \end{bmatrix} \tag{4.19}$$

4.3. Diseño del control predictivo de la reacción

4.3.1. Modelo de predicción

En la sección 4.2.1 se estableció que el modelo de predicción en el control predictivo debe ser de la forma de (4.2), el cual es un modelo lineal y en tiempo discreto. Por lo tanto, el modelo linealizado y discretizado del sistema presentado en (2.32) será utilizado para formar el modelo de predicción.

Por otra parte, en la sección 3.1 se definió como única variable controlable a la concentración de metil éster, C_{ME} . Por lo tanto la matriz de salidas controladas en el

modelo de predicción del control predictivo es ³

$$C_z = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

Así, el modelo de predicción para el control predictivo es

$$\begin{aligned} x(k+1) &= Ax(k) + Bu(k) \\ y(k) &= C_y x(k) \\ z(k) &= C_z x(k) \end{aligned} \quad (4.21)$$

con

$$A = \begin{bmatrix} 0.9311 & 0.0984 & 0.0404 & 0.0033 & -0.0024 & 0.0001 \\ 0.0620 & 0.7431 & 0.5234 & 0.0025 & -0.0018 & 0.0027 \\ 0.0062 & 0.1270 & 0.2490 & -0.0028 & 0.0020 & 0.0039 \\ 0.0765 & 0.0917 & -0.4168 & 0.9877 & 0.0089 & -0.0096 \\ -0.0765 & -0.0917 & 0.4168 & 0.0123 & 0.9911 & 0.0096 \\ 0.0007 & 0.0316 & 0.1873 & -0.0031 & 0.0022 & 0.9933 \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

$$B = \begin{bmatrix} -1.3511 \\ -1.3724 \\ 2.9584 \\ 3.8396 \\ -3.8396 \\ -0.2349 \end{bmatrix} \times 10^{-4}, \quad C_y = I_{6 \times 6} \quad (4.23)$$

y C_z definida en (4.20)

4.3.2. Parámetros del controlador predictivo

La función costo a minimizar en el control predictivo, presentada en (4.2), es

$$V(k) = \sum_{i=H_w}^{H_p} \|\hat{z}(k+i|k) - r(k+i|k)\|_{Q(i)}^2 + \sum_{i=0}^{H_u-1} \|\Delta\hat{u}(k+i|k)\|_{R(i)}^2$$

La longitud del horizonte de predicción se estableció $H_p = 100$, que representa una predicción de 83.92 minutos hacia el futuro⁴. Se determinó este intervalo de tiempo para que la predicción del modelo lineal tome en cuenta la dinámica en estado estable que es donde el modelo presenta menor error relativo (ver sección 3.5).

³Se eliminó el subíndice “ d ” en las matrices del modelo de predicción para evitar confusión con los subíndice “ y ” y “ z ”, sin embargo estas matrices siguen correspondiendo al modelo del sistema en tiempo discreto.

⁴Los 83.92 minutos se debe a que el tiempo de muestreo se definió como $T_s = 0.4346$ minutos, en correspondencia con el tiempo de discretización del modelo.

El horizonte de control se estableció $H_u = 100$ (43 minutos). La determinación de este parámetros se hizo mediante la sintonización del control a prueba y error. El objetivo de la sintonización fue lograr que la salida del sistema alcance a la señal de referencia lo antes posible, pero sin que se presentara un sobrepaso. Las condiciones iniciales de la reacción establecen un exceso de alcohol en la mezcla de la reacción (relación molar 6:1) para facilitar la conversión de los triglicéridos en metil éster y para evitar la transformación inversa. Es por ello que no se desea tener un sobrepaso en la respuesta del sistema (curva de concentración del metil éster) pues ello implicaría precisamente una transformación inversa.

Así mismo, el error es penalizado sobre todo el horizonte de predicción, por lo tanto se estableció $H_w = 1$. Así finalmente, la Tabla 4.1 presenta el valor para los parámetros H_p , H_w , H_u y T_s , antes mencionados.

Tabla 4.1: Parámetros del controlador predictivo

Parámetro	Especificación
T_s	0.4346 s
H_p	200 (83.92 min)
H_u	100 (43.46 min)
H_w	1 (0.4346 min)

Por otra parte, ya que la única variable controlable en el lazo de control es la concentración de metil éster, entonces solamente se penaliza el error de este componente de la reacción. Esto se logró estableciendo a la matriz de ponderación del error de la siguiente manera:

$$Q(i) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.24)$$

donde a es un valor arbitrario. Debido a las condiciones iniciales de la reacción que establecen que la concentración de metil éster comienza en cero. El vector de error en la función costo, $\hat{z}(k+i|k) - r(k+i|k)$, será muy grande al inicio del proceso. Si se penaliza fuertemente dicho error desde el primer instante, la señal de control será muy agresiva al comienzo ocasionando un sobretiro. Debido a que se pretenden evitar un sobrepaso en la respuesta del sistema, el error se penaliza poco hasta el minuto 24 ($i = 1, \dots, 57$), y a partir de ese minuto se penaliza fuertemente. Es por ello que la matriz de ponderación del error quedó definida como en (4.24), con $a = 2 \forall i = 1, \dots, 57$ y $a = 5 \times 10^5 \forall i = 58, \dots, H_p$.

El parámetro de ponderación para los cambios en la señal de control se estableció igual sobre todo el horizonte de control, de tal manera que $R(i) = 60 \forall i = 1, \dots, H_p$. Este parámetro se sintonizó a prueba y error, nuevamente buscando la respuesta del sistema no presentara un sobrepaso.

4.3.3. Referencia del controlador

En la sección 3.4 se estableció que los productos finales de la simulación de la reacción a 50 °C, cumplen con el requerimiento del contenido en éster establecido en la norma EN 14214. Por lo tanto, el estado final de la reacción a 50 °C, se estableció como vector de referencia en el sistema de control predictivo. Ya que la referencia no variará con respecto al tiempo, entonces se tiene un problema de control de regulación.

De esta manera el vector de referencia es:

$$r(k+i) = x_n = \begin{bmatrix} 0.1099 \\ 0.0692 \\ 0.0168 \\ 2.5150 \\ 3.4850 \\ 0.8041 \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

4.3.4. Restricciones del controlador

Al comienzo de esta investigación se pretendía implementar el controlador en un prototipo de reactor por lotes, sin embargo esto no fue posible. No obstante, para establecer las restricciones del controlador se utilizaron las restricciones físicas que este prototipo tiene, además de las restricciones que presenta la reacción.

La variación de la temperatura de la reacción está limitada a un intervalo definido por: la menor temperatura que puede alcanzar el reactor y; la temperatura de ebullición del componente con punto de ebullición más bajo presente en la mezcla de la reacción. En este sentido ya que el reactor, no posee ningún sistema de enfriamiento, la menor temperatura a la que está limitada la reacción es la temperatura promedio del ambiente en el que opera el reactor, la cual es de 33 °C. Por otra parte, el alcohol, en este caso metanol, es el componente de la reacción que posee el punto de ebullición más bajo, que es de 64.7 °C. Entonces, por motivos de seguridad, la mayor temperatura que podrá alcanzar el reactor es de 62 °C.

Además del rango de la temperatura, la velocidad de cambio de ésta variable también está limitada por la infraestructura del reactor. El cambio en la temperatura de la reacción está restringido a dos velocidades distintas, una cuando ésta aumenta y otra cuando disminuye. Ya que el reactor no posee un sistema de enfriamiento la velocidad en la variación de la temperatura cuando ésta disminuye está limitada a la velocidad de intercambio de calor entre la reacción y el ambiente de operación, cuando se apaga la resistencia calentamiento. Esta velocidad fue determinada mediante experimentos en el reactor y es de 0.5 °C/min. Por otro lado, la velocidad de cambio en la señal de control cuando dicha señal aumenta está restringida a la velocidad del calentamiento de la mezcla por parte de la resistencia. Mediante pruebas en el reactor se estableció que esta velocidad es 2 °C/min.

De esta forma, las restricciones utilizadas en el diseño del controlador predictivo quedaron de la siguiente manera:

$$-0.2173 \leq \Delta u(k+i) \leq 0.8692 \quad (4.26)$$

$$33 \leq u(k+i) \leq 62 \quad (4.27)$$

Sin embargo, en la formulación del control predictivo se establecieron a las restricciones del controlador en forma estándar como en (4.3)-(4.5). Para lograr esto, en el caso de la restricción (4.26), se hace lo siguiente:

$$-0.217 \leq \Delta u \iff -\Delta u \leq 0.217 \iff -1/0.217\Delta u - 1 \leq 0 \iff [-1/0.217 \quad -1] \begin{bmatrix} \Delta u \\ 1 \end{bmatrix} \leq 0$$

$$\Delta u \leq 0.8692 \iff 1/0.8692\Delta u - 1 \leq 0 \iff [1/0.8692 \quad -1] \begin{bmatrix} \Delta u \\ 1 \end{bmatrix} \leq 0$$

Ahora reescribiendo las dos desigualdades juntas y reemplazando Δu por $\Delta \hat{u}(k+1|k)$ para $i = 0, \dots, H_u - 1$ se tiene que

$$\begin{bmatrix} -1/0.2173 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ 1/0.8692 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ 0 & -1/0.2173 & \dots & 0 & -1 \\ 0 & 1/0.8692 & \dots & 0 & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & -1/0.2173 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1/0.8692 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \hat{u}(k|k) \\ \Delta \hat{u}(k+1|k) \\ \vdots \\ \Delta \hat{u}(k+H_u-1|k) \\ 1 \end{bmatrix} \leq 0 \quad (4.28)$$

La nueva restricción (4.26) ya está en la forma de (4.3). Procediendo de manera semejante para la restricción es (4.27), se tiene que

$$\begin{bmatrix} 1/33 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ 1/62 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ 0 & 1/33 & \dots & 0 & -1 \\ 0 & 1/62 & \dots & 0 & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1/33 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1/62 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}(k|k) \\ \hat{u}(k+1|k) \\ \vdots \\ \hat{u}(k+H_u-1|k) \\ 1 \end{bmatrix} \leq 0 \quad (4.29)$$

Con lo que se tiene que (4.26) esta en forma estándar.

4.4. Solución del problema de control sin restricciones

La función costo a minimizar es

$$V(k) = \sum_{i=H_w}^{H_p} \|\hat{z}(k+i|k) - r(k+i|k)\|_{Q(i)}^2 + \sum_{i=0}^{H_u-1} \|\Delta \hat{u}(k+i|k)\|_{R(i)}^2$$

La cual se puede describir como

$$V(k) = \|\mathcal{Z}(k) - \mathcal{T}(k)\|_{\mathcal{Q}}^2 + \|\Delta \mathcal{U}(k)\|_{\mathcal{R}}^2 \quad (4.30)$$

donde

$$\mathcal{Z}(k) = \begin{bmatrix} z(k + H_w|k) \\ \vdots \\ z(k + H_p|k) \end{bmatrix}, \mathcal{T}(k) = \begin{bmatrix} \hat{r}(k + H_w|k) \\ \vdots \\ \hat{r}(k + H_p|k) \end{bmatrix}, \Delta\mathcal{U}(k) = \begin{bmatrix} \Delta\hat{u}(k|k) \\ \vdots \\ \Delta\hat{u}(k + H_u - 1|k) \end{bmatrix}$$

y las matrices de ponderación \mathcal{Q} y \mathcal{R} están dadas por

$$\mathcal{Q} = \begin{bmatrix} Q(H_w) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & Q(H_w + 1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & Q(H_p) \end{bmatrix} \quad (4.31)$$

$$\mathcal{R} = \begin{bmatrix} R(0) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & R(1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & R(H_u - 1) \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

A partir de (4.14) y (4.19) se puede escribir a \mathcal{Z} de la siguiente manera

$$\mathcal{Z}(k) = \Psi x(k) + \Upsilon u(k - 1) + \Theta \Delta\mathcal{U}(k) \quad (4.33)$$

con

$$\Psi = \begin{bmatrix} C_z A \\ \vdots \\ C_z A^{H_u} \\ C_z A^{H_u+1} \\ \vdots \\ C_z A^{H_p} \end{bmatrix} \quad (4.34)$$

$$\Upsilon = \begin{bmatrix} C_z B \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_u-1} C_z A^i B \\ \sum_{i=0}^{H_u} C_z A^i B \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_p-1} C_z A^i B \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

$$\Theta = \begin{bmatrix} C_z B & \cdots & 0 \\ C_z AB + C_z B & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_u-1} C_z A^i B & \cdots & C_z B \\ \sum_{i=0}^{H_u} C_z A^i B & \cdots & C_z AB + C_z B \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{H_p-1} C_z A^i B & \cdots & \sum_{i=0}^{H_p-H_u} A^i B \end{bmatrix} \quad (4.36)$$

Por otra parte definiendo

$$\mathcal{E}(k) = \mathcal{T}(k) - \Psi x(k) - \Upsilon u(k - 1) \quad (4.37)$$

que representa el “error de seguimiento” en el sentido que es la diferencia entre la trayectoria de referencia y la “respuesta libre” del sistema, es decir, el comportamiento que el sistema tendría sobre el horizonte de predicción si no se hicieran cambios en la entrada. A partir de lo anterior se tiene que la función costo es

$$V(k) = \|\Theta\Delta\mathcal{U}(k) - \mathcal{E}(k)\|_{\mathcal{Q}}^2 + \|\Delta\mathcal{U}(k)\|_{\mathcal{R}}^2 \quad (4.38)$$

$$= [\Delta\mathcal{U}(k)^T \mathcal{Q} \mathcal{E}(k)] \mathcal{Q} [\Theta\Delta\mathcal{U}(k) - \mathcal{E}(k)] + \Delta\mathcal{U}(k)^T \mathcal{R} \Delta\mathcal{U}(k) \quad (4.39)$$

$$= \mathcal{E}(k)^T \mathcal{Q} \mathcal{E}(k) - 2\Delta\mathcal{U}(k)^T \Theta^T \mathcal{Q} \mathcal{E}(k) + \Delta\mathcal{U}(k)^T [\Theta^T \mathcal{Q} \Theta + \mathcal{R}] \Delta\mathcal{U}(k) \quad (4.40)$$

Pero (4.40) tiene la forma

$$V(k) = \text{constante} - \Delta\mathcal{U}(k)^T \mathcal{G} + \Delta\mathcal{U}(k)^T \mathcal{H} \Delta\mathcal{U}(k) \quad (4.41)$$

donde

$$\mathcal{G} = 2\Theta^T \mathcal{Q} \mathcal{E}(k) \quad (4.42)$$

y

$$\mathcal{H} = \Theta^T \mathcal{Q} \Theta + \mathcal{R} \quad (4.43)$$

además, \mathcal{G} y \mathcal{H} no dependen de $\Delta\mathcal{U}(k)$

De esta manera para encontrar el vector óptimo de entradas de control $\Delta\mathcal{U}(k)$, se debe encontrar el gradiente de $V(k)$ e igualarlo a cero. De (4.41) se tiene

$$\nabla_{\Delta\mathcal{U}(k)} V = -\mathcal{G} + 2\mathcal{H}\Delta\mathcal{U}(k) \quad (4.44)$$

Entonces el conjunto óptimo de cambios futuros en la entrada es

$$\Delta\mathcal{U}(k)_{opt} = \frac{1}{2} \mathcal{H}^{-1} \mathcal{G} \quad (4.45)$$

Así finalmente se tiene que la ley de control para el control predictivo es (4.45). Sin embargo, debido a la estrategia de “horizonte deslizante”, de la solución anterior solamente se utilizará la parte correspondiente al primer instante de tiempo. Por lo tanto, si el número de variables de entrada de la planta es l entonces solamente se usan las primeras l filas del vector $\Delta\mathcal{U}(k)_{opt}$. Esto puede ser representado por

$$\Delta u(k)_{opt} = [I_l, \underbrace{0_l, \dots, 0_l}_{(H_u-1)\text{ veces}}] \Delta\mathcal{U}(k)_{opt} \quad (4.46)$$

donde I_l es una matriz identidad de $l \times l$, y 0_l es una matriz de ceros de $l \times l$.

Ahora, si bien (4.45) garantiza un punto estacionario en la dinámica de la función costo, no es suficiente para garantizar un mínimo. Diferenciando el gradiente $\nabla_{\Delta\mathcal{U}(k)} V$ nuevamente con respecto a $\Delta\mathcal{U}(k)$, se obtiene la segunda derivada, o *Hessiano* de la función costo $V(k)$:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial \Delta\mathcal{U}(k)^2} = 2\mathcal{H} = 2(\Theta^T \mathcal{Q} \Theta + \mathcal{R}) \quad (4.47)$$

Ya que en este caso de estudio, $Q(i) \geq 0$ para cada i , debido a que no se penaliza el error de todas las variables del estado, se tiene que $\Theta^T \mathcal{Q} \Theta \geq 0$. Además como $\mathcal{R} > 0$

debido a que se penalizan a los cambios en la señal de control sobre todo el horizonte de control, entonces el Hessiano es definido positivo, lo que garantiza que (4.45) es un mínimo de la función costo.

La solución óptima presentada en (4.45) no debe calcularse mediante la inversa de \mathcal{H} debido a que la matriz Θ a menudo está mal condicionada, lo que implica que \mathcal{H} esté mal condicionado. Por lo tanto, la solución del problema de optimización sin restricciones debe encontrarse por un algoritmo numérico. La mejor forma de encontrar la solución numérica al problema de control predictivo es resolviéndolo como un problema de mínimos cuadrados, como sigue a continuación.

4.4.1. Formulación como un problema de mínimos cuadrados

Ya que $\mathcal{Q} \geq 0$ y $\mathcal{R} \geq 0$, se pueden encontrar matrices $S_{\mathcal{Q}}$ y $S_{\mathcal{R}}$ las cuales sean sus “raíces cuadradas”:

$$S_{\mathcal{Q}}^T S_{\mathcal{Q}} = \mathcal{Q} \quad S_{\mathcal{R}}^T S_{\mathcal{R}} = \mathcal{R}$$

Ahora considerando el vector

$$\begin{bmatrix} S_{\mathcal{Q}}\{\Theta\Delta\mathcal{U}(k) - \mathcal{E}(k)\} \\ S_{\mathcal{R}}\mathcal{U}(k) \end{bmatrix} \quad (4.48)$$

se tiene que la norma o “longitud” al cuadrado del vector (4.48) es igual a la función costo $V(k)$. Entonces $\Delta\mathcal{U}(k)_{opt}$ es el valor de $\Delta\mathcal{U}(k)$ que minimiza la longitud de (4.48).

$$\left\| \begin{bmatrix} S_{\mathcal{Q}}\{\Theta\Delta\mathcal{U}(k) - \mathcal{E}(k)\} \\ S_{\mathcal{R}}\mathcal{U}(k) \end{bmatrix} \right\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} S_{\mathcal{Q}}\{\mathcal{Z}(k) - \mathcal{T}(k)\} \\ S_{\mathcal{R}}\mathcal{U}(k) \end{bmatrix} \right\|^2 \quad (4.49)$$

$$= [\mathcal{Z}(k) - \mathcal{T}(k)]^T S_{\mathcal{Q}}^T S_{\mathcal{Q}} [\mathcal{Z}(k) - \mathcal{T}(k)] \quad (4.50)$$

$$+ \Delta\mathcal{U}(k)^T S_{\mathcal{R}}^T S_{\mathcal{R}} \Delta\mathcal{U}(k) \quad (4.51)$$

$$= \|\mathcal{Z}(k) - \mathcal{T}(k)\|_{\mathcal{Q}}^2 + \|\Delta\mathcal{U}(k)\|_{\mathcal{R}}^2 \quad (4.52)$$

$$= V(k) \quad (4.53)$$

Por lo que $\Delta\mathcal{U}(k)_{opt}$ es la solución de la ecuación

$$\begin{bmatrix} S_{\mathcal{Q}}\{\Theta\Delta\mathcal{U}(k) - \mathcal{E}(k)\} \\ S_{\mathcal{R}}\mathcal{U}(k) \end{bmatrix} = 0 \quad (4.54)$$

o equivalentemente, la solución de:

$$\begin{bmatrix} S_{\mathcal{Q}}\Theta \\ S_{\mathcal{R}} \end{bmatrix} \Delta\mathcal{U}(k) = \begin{bmatrix} S_{\mathcal{Q}}\mathcal{E}(k) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.55)$$

Ecuaciones de la forma $A\theta = b$ pueden resolverse en el sentido de mínimos cuadrados usando el algoritmo ‘QR’. La solución por mínimos cuadrados fue obtenida en MATLAB[®] haciendo uso del operador “barra invertida”, de la siguiente manera

$$\Delta\mathcal{U}(k)_{opt} = \begin{bmatrix} S_{\mathcal{Q}}\Theta \\ S_{\mathcal{R}} \end{bmatrix} \setminus \begin{bmatrix} S_{\mathcal{Q}}\mathcal{E}(k) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.56)$$

Recordando que de la solución anterior solamente se aplicará la parte correspondiente al primer instante de muestreo, finalmente se tiene que la ley de control calculada

en cada instante de tiempo para el problema de control predictivo de la reacción de transesterificación sin restricciones es

$$\Delta u(k)_{opt} = [I_l, \underbrace{0_l, \dots, 0_l}_{(H_u-1) \text{ veces}}] \begin{bmatrix} S_Q \Theta \\ S_{\mathcal{R}} \end{bmatrix} \setminus \begin{bmatrix} S_Q \mathcal{E}(k) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.57)$$

donde las matrices constantes Υ , Ψ , Θ , $S_{\mathcal{R}}$, S_Q se calcularon en MATLAB[®] con el programa presentado en el anexo C. Mientras que el error de seguimiento $\mathcal{E}(k)$ que depende del tiempo, es determinado en cada instante de tiempo durante la simulación de sistema de control como se muestra en la Figura 4.2.

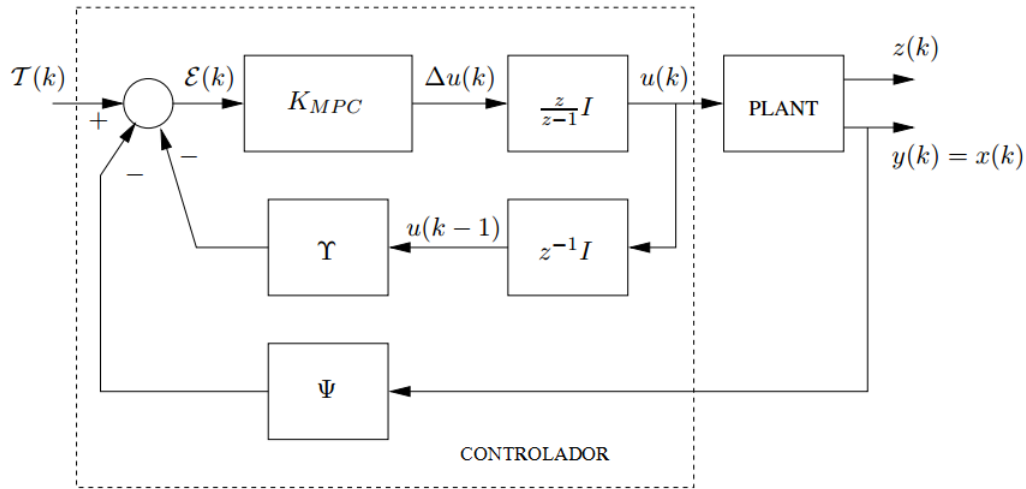


Figura 4.2: Estructura del controlador predictivo sin restricciones.

4.5. Solución del problema de control con restricciones

4.5.1. Formulación como un problema QP

Las restricciones para el sistema de control predictivo de la reacción de transesterificación fueron establecidas en (4.3)-(4.5) y son

$$\begin{bmatrix} -1/0.2173 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ 1/0.8692 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ 0 & -1/0.2173 & \dots & 0 & -1 \\ 0 & 1/0.8692 & \dots & 0 & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & -1/0.2173 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1/0.8692 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \hat{u}(k|k) \\ \Delta \hat{u}(k+1|k) \\ \vdots \\ \Delta \hat{u}(k+H_u-1|k) \\ 1 \end{bmatrix} \leq 0$$

$$E \begin{bmatrix} \Delta \mathcal{U} \\ 1 \end{bmatrix} \leq 0 \quad (4.58)$$

$$\begin{bmatrix} 1/33 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ 1/62 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ 0 & 1/33 & \dots & 0 & -1 \\ 0 & 1/62 & \dots & 0 & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1/33 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1/62 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}(k|k) \\ \hat{u}(k+1|k) \\ \vdots \\ \hat{u}(k+H_u-1|k) \\ 1 \end{bmatrix} \leq 0$$

$$F \begin{bmatrix} \Delta \mathcal{U} \\ 1 \end{bmatrix} \leq 0 \quad (4.59)$$

Estas restricciones se encuentran en forma estándar, si embargo, para el problema de control con restricciones se necesita expresar a dichas restricciones en función de $\Delta \mathcal{U}$. Para tal motivo se procede de la siguiente manera.

La restricción (4.58) ya se encuentra expresada en función de $\Delta \mathcal{U}$, por lo que solamente debe ser expresada de la siguiente manera

$$W \Delta \mathcal{U}(k) \leq w \quad (4.60)$$

donde W que es de $H_p \times H_u$ esta definida por

$$W = \begin{bmatrix} -1/0.2173 & 0 & \dots & 0 \\ 1/0.8692 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1/0.2173 & \dots & 0 \\ 0 & 1/0.8692 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & -1/0.2173 \\ 0 & 0 & 0 & 1/0.8692 \end{bmatrix} \quad (4.61)$$

y donde w que es de $H_p \times l$ esta definida por

$$w = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.62)$$

Por otra parte, la matriz F tiene la forma

$$F = [F_1, F_2, \dots, F_{H_u}, f]$$

donde cada F_i es de tamaño $H_u \times l$ y f tiene tamaño de $H_u \times l$. De este modo puede reescribirse a (4.59) como

$$\sum_{i=1}^{H_u} F_i \hat{u}(k+i-1|k) + f \leq 0$$

Además, ya que

$$\hat{u}(k+i-1|k) = u(k-1) + \sum_{j=0}^{i-1} \Delta \hat{u}(k+j|k)$$

se puede escribir (4.59) como

$$\sum_{j=1}^{H_u} F_j \Delta \hat{u}(k|k) + \sum_{j=2}^{H_u} F_j \Delta \hat{u}(k+1|k) + \dots + F_{H_u} \Delta \hat{u}(k+H_u-1|k) + \sum_{j=1}^{H_u} F_j u(k-1) + f \leq 0$$

Ahora, definiendo $F_i = \sum_{j=1}^{H_u} F_j$ y $F = [F_1, \dots, F_{H_u}]$. Entonces (4.59) puede ser escrita como

$$F \Delta \mathcal{U}(k) \leq -F_1 u(k-1) - f \quad (4.63)$$

donde F que es de $H_p \times H_u$ esta definido como

$$F = \begin{bmatrix} 1/33 & 0 & 0 & 0 \\ 1/62 & 0 & 0 & 0 \\ 1/33 & 1/33 & 0 & 0 \\ 1/62 & 1/62 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1/33 & 1/33 & 1/33 & 0 \\ 1/62 & 1/62 & 1/62 & 0 \\ 1/33 & 1/33 & 1/33 & 1/33 \\ 1/62 & 1/62 & 1/62 & 1/62 \end{bmatrix} \quad (4.64)$$

y f que es de $H_p \times l$ esta definido como

$$f = \begin{bmatrix} -1 \\ \vdots \\ -1 \end{bmatrix} \quad (4.65)$$

Con esto se tiene que la desigualdad (4.59) fue convertida en (4.63) que es una desigualdad en función de $\Delta \mathcal{U}(k)$.

De esta manera, las desigualdades (4.60) y (4.63) pueden reescribirse como una simple desigualdad

$$\begin{bmatrix} F \\ W \end{bmatrix} \Delta \mathcal{U}(k) \begin{bmatrix} -F_1 u(k-1) - f \\ w \end{bmatrix} \quad (4.66)$$

La función costo $V(k)$ para el caso del control predictivo con restricciones permanece como en el caso sin restricciones. Entonces de (4.41), se tiene el siguiente problema de optimización con restricciones

$$\text{minimizar } \Delta \mathcal{U}(k)^T \mathcal{H} \Delta \mathcal{U}(k) - \mathcal{G}^T \Delta \mathcal{U}(k) \quad (4.67)$$

sujeto a las restricciones (4.66), con las matrices \mathcal{G} y \mathcal{H} definidas en (4.42) y (4.43) respectivamente.

La solución de (4.67) genera el vector de entrada control óptimo, $\Delta \mathcal{U}$, para el controlador predictivo de la reacción de transesterificación. Esta solución se obtiene en cada instante de tiempo durante la simulación a partir de la función *quadprog* de MATLAB[®]. Esta función resuelve problemas de programación cuadrática de la forma

$$\text{mín } \frac{1}{2} \theta^T \Phi \theta + \phi^T \theta \quad (4.68)$$

sujeto a

$$\Omega\theta \leq \omega \quad (4.69)$$

Mientras todas las restricciones permanezcan inactivas, la solución del controlador predictivo es la misma que en el caso sin restricciones y el sistema de control es lineal. Pero si las restricciones se activan, entonces el controlador se convierte en no lineal y su nueva estructura es la que se presenta en la Figura 4.3.

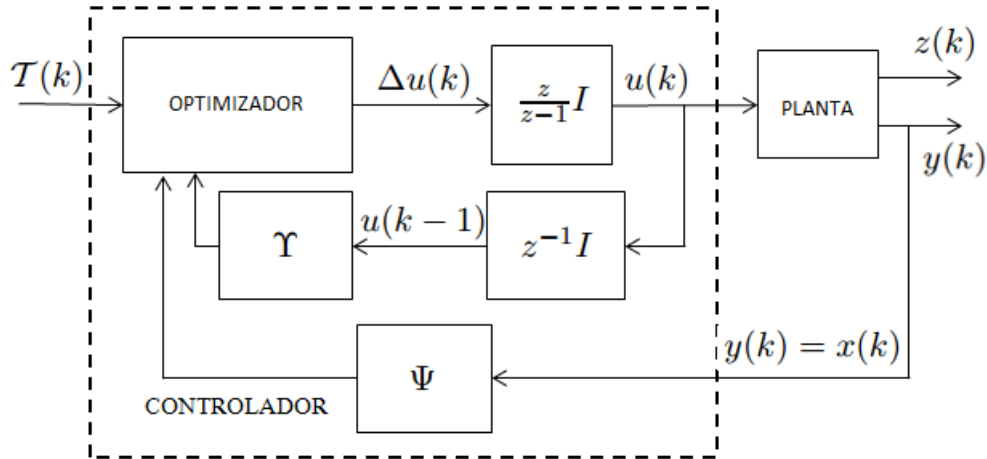


Figura 4.3: Estructura del controlador predictivo con restricciones

4.6. Conclusiones

En este capítulo se presentó la estrategia de control predictivo utilizada en este trabajo de investigación. Se presentó también, el diseño del controlador basado en dicha estrategia, el cual fue implementado en simulación sobre el proceso de transesterificación. El control predictivo admite el establecimiento de restricciones en las variables del sistema de control. Esta característica permite operar a un sistema cerca de sus restricciones con seguridad. Esto representa una gran ventaja ya que el proceso de producción de biodiésel posee dos restricciones físicas.

Además, el operar a los sistemas industriales cerca de las restricciones muchas veces tiene como consecuencia una mejora de la productividad. Ya que en esta investigación se busca una optimización del proceso, este hecho resulta enormemente conveniente.

La estrategia de predicción del control predictivo hace uso de un modelo lineal, el cual debe estar en su representación de espacio estado y en tiempo discreto. Fue por ello que en el capítulo 2.3 llevó a cabo la linealización y discretización del modelo no lineal de la reacción. La predicción se basa en una iteración recursiva del modelo de predicción.

El problema del control predictivo se basa en un problema de optimización por minimización, el cual tiene como variables de decisión a los cambios en la señal de control. Este último aspecto presenta una gran ventaja cuando se busca una reducción de los costos energéticos de producción, como en el caso de esta investigación.

Capítulo 5

Resultados

El objetivo de este capítulo es presentar los resultados obtenidos de la implementación en simulación del control predictivo de la reacción de transesterificación de aceite de soya con metanol. Para la implementación del control predictivo se tienen tres casos de estudio: El caso sin restricciones, el caso con restricción en el rango de la señal de control y el caso con restricción tanto en el rango de la señal de control como en la velocidad de cambio de dicha señal.

Este capítulo se divide en dos secciones. La sección 5.1 presenta el caso de control sin restricciones, y para este caso el controlador predictivo fue evaluado contra un controlador tipo proporcional integral. En la sección 5.2 se presentan los casos con restricciones. En una primera parte se muestra el caso de estudio con una sola restricción y posteriormente el caso con ambas restricciones del sistema. Para el caso con una sola restricción el controlador predictivo nuevamente fue evaluado contra un controlador proporcional integral. Finalmente en el caso con ambas restricciones ya no fue posible evaluar el desempeño del control predictivo contra el del proporcional integral.

5.1. Implementación del control predictivo sin restricciones

5.1.1. Caso I. Sin restricciones

La implementación del sistema de control predictivo sin restricciones en la reacción de transesterificación se realizó en simulación. Las condiciones de la reacción para la implementación de este sistema de control fueron las mismas que se definen para la simulación del modelo en el anexo A.

Además, con el fin de evaluar el desempeño del control predictivo, se implementó un controlador tipo proporcional integral (PI) en el proceso de transesterificación.

La Figura 5.1 muestra la respuesta del sistema en lazo abierto, que corresponde a la curva de concentración del metil éster para la reacción a 50 °C. La concentración alcanza su valor en estado estable en el minuto 31.1 (criterio del 2%).

La Figura 5.2 presenta la respuesta de los sistemas de control y el sistema en lazo abierto, es decir las curvas de concentración de metil éster durante la implementación de las estrategias de control y la simulación del sistema a 50 °C.

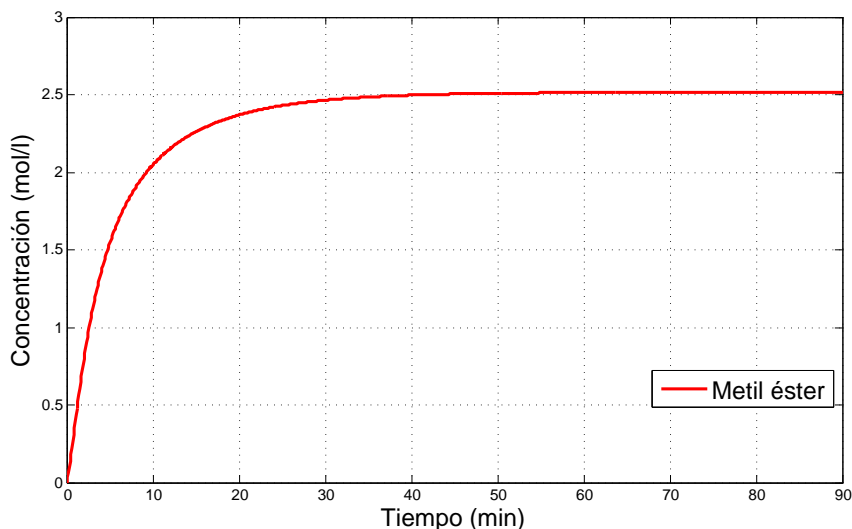


Figura 5.1: Respuesta del sistema en lazo abierto. Curva de concentración de metil éster.

El control predictivo logró una reducción del tiempo de producción de metil éster, con relación al sistema en lazo abierto, de 15.45 minutos lo que representa una optimización del 50.32 %. Por su parte, el PI logró reducir el tiempo de producción a 23 minutos, lo que representó una optimización del 26.05 %.

Además, el porcentajes másico final de metil éster, X_{ME} , en la implementación en simulación de ambos controladores es mayor que el mínimo requerimiento por la norma (ver Tabla 5.1).

La Tabla 5.1 muestra la integral del Error Absoluto (IAE, por sus siglas en inglés) calculada a partir de los resultados de la implementación de ambos sistemas de control. La IAE representa un índice típico de desempeño del error dinámico para sistemas de control. La estrategia de control predictivo demostró un mejor desempeño con respecto al controlador proporcional integral pues tuvo un índice de IAE menor que el de este último. El MPC tuvo un índice IAE de 77.18 mol/l , mientras que el PI tuvo un IAE igual a 82.08 mol/l .

La Figura 5.3 expone las señales de control para ambos controladores. Las dos señales promedian valores muy semejantes. El MPC promedia una señal de control de $53.92 \text{ }^\circ\text{C}$, mientras que el PI utiliza en promedio una señal de $53.17 \text{ }^\circ\text{C}$.

Tabla 5.1: Resultados de la implementación del control predictivo sin restricciones y el control proporcional integral

Estrategia	Tiempo de producción	X_{ME}	IAE	Temperatura promedio
MPC	15.45 min.	96.84 %	77.18	$53.92 \text{ }^\circ\text{C}$
PI	23 min.	96.84 %	82.08	$53.17 \text{ }^\circ\text{C}$

Finalmente, también se tiene que, en la simulación del sistema de control predictivo de la reacción sin restricciones, este permite la optimización del tiempo de producción

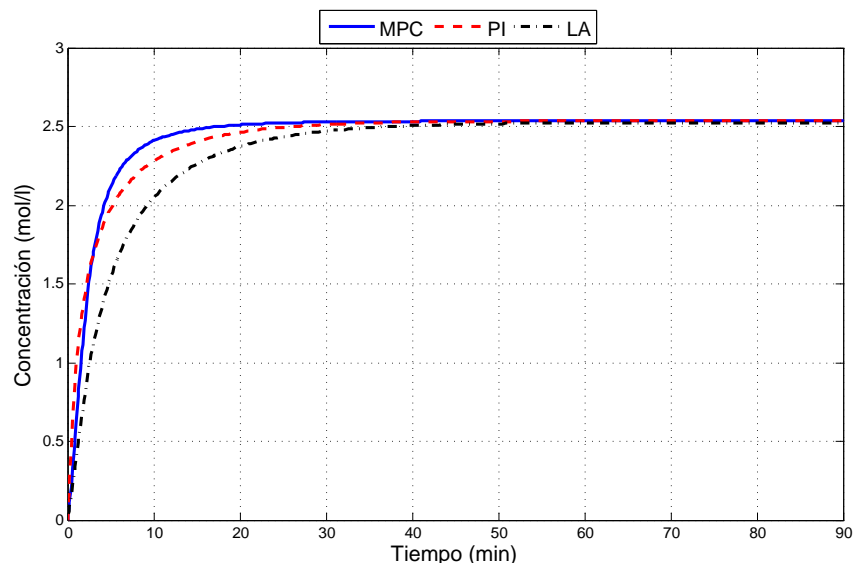


Figura 5.2: Respuestas del control predictivo sin restricciones, el control proporcional integral y del sistema en lazo abierto. Curva de concentración de metil éster.

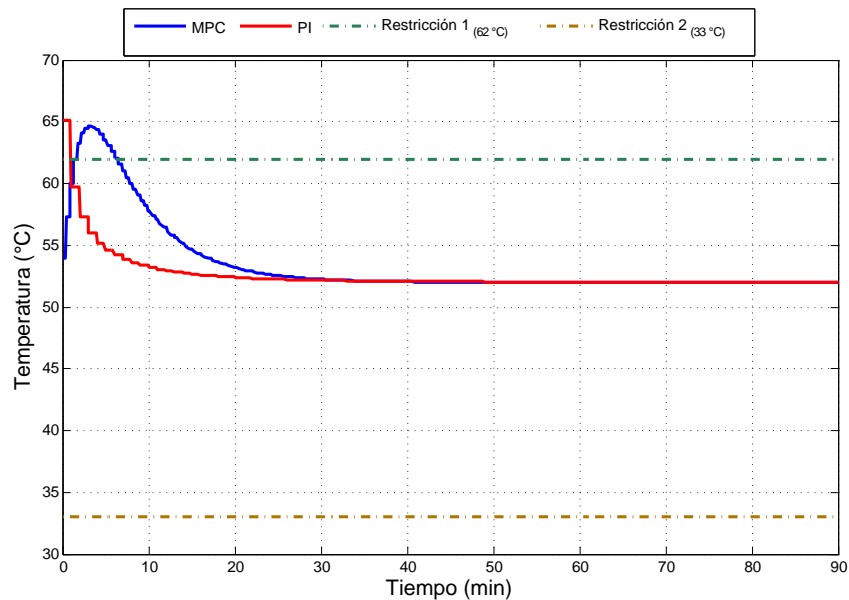


Figura 5.3: Señales de control para el control predictivo sin restricciones y el control proporcional integral. Temperatura de la reacción.

en poco más del 50 %. También posibilita, en simulación, la producción de biodiésel bajo la especificación de contenido en éster establecido en la norma EN 14214.

5.2. Implementación del control predictivo con restricciones

Para el caso con restricciones, se diseñaron dos controladores predictivos: el primero, solamente tomando en cuenta la restricción (4.27) que corresponde a una restricción para el rango de actuación; y el segundo que toma en cuenta la dos restricciones del sistema definidas en (4.26) y (4.27), tanto para el rango como la velocidad de actuación.

La implementación de las dos estrategias sobre la reacción de transesterificación se llevó a cabo en simulación. Nuevamente, las condiciones de la reacción para la implementación fueron las que se definen en el anexo A.

5.2.1. Caso II. Restricción en $u(k+i)$

El sistema de control predictivo basado en la restricción (4.27), se desarrolló con el propósito de evaluar su desempeño contra el de un controlador proporcional integral con saturación. La saturación del PI se estableció de tal manera que la señal de control no pueda superar los límites establecidos para la temperatura de la reacción.

La Figura 5.4 presenta la respuesta de ambos controladores, así como la respuesta del sistema en lazo abierto. El control predictivo redujo el tiempo de reacción de 31.1 a 16 minutos. Esta disminución representa una optimización del tiempo de producción del 48.53 %. Por su parte, el controlador proporcional integral logró una disminución del tiempo de producción de 7.64 minutos, lo que representa una optimización del 32.98 %.

Los porcentajes máxicos finales de la implementación en simulación de ambos controladores cumplen con el requerimiento de la la norma europea para el contenido en éster como se puede observar en Tabla 5.2. Esta Tabla además presenta el índice IEA para cada controlador. De igual manera que en el caso sin restricciones, el control predictivo demostró un mejor desempeño en la simulación. La IAE del control predictivo fue de 80.09 moles/litro, mientras que el controlador PI tuvo un índice de IAE=85.17.

La Figura 5.5 presenta las señales de control para el MPC y el PI con la restricción en el rango de la temperatura. Ambas señales llegan a la restricción superior para la temperatura pero no la rebasan. Además, en promedio, ambos controladores tienen prácticamente el mismo consumo energético (ver Tabla 5.2). La señal del control predictivo es en promedio de 53.63 °C, mientras que la señal del control tipo proporcional integral es en promedio de 53.13 °C.

Tabla 5.2: Resultados de la implementación del control predictivo con restricción en $u(k+i)$ y el control proporcional integral con saturación

Estrategia	Tiempo de producción	X_{ME}	IAE	Temperatura promedio
MPC	16 min	96.84 %	80.09	53.63 °C
PI	23.46 min	96.84 %	85.17	53.13 °C

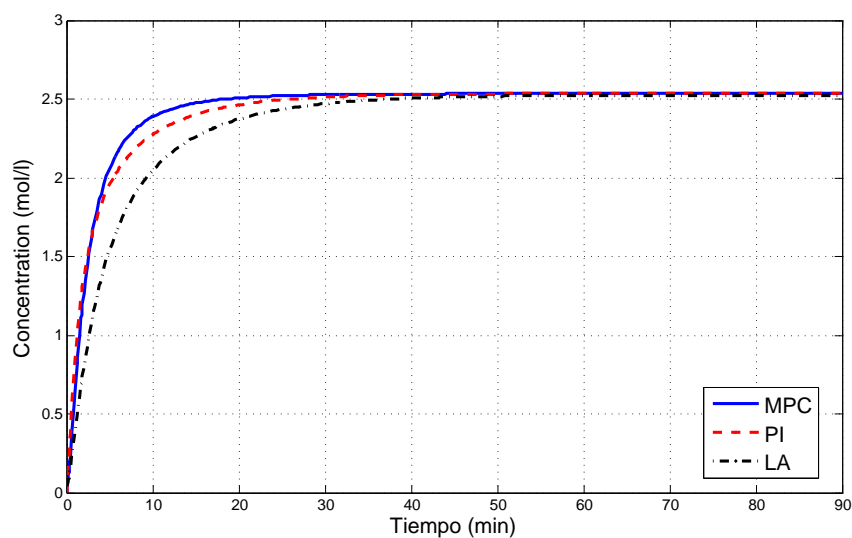


Figura 5.4: Respuesta del control predictivo con restricción en $u(k+i)$, el control proporcional integral y del sistema en lazo abierto. Curva de concentración de metil éster.

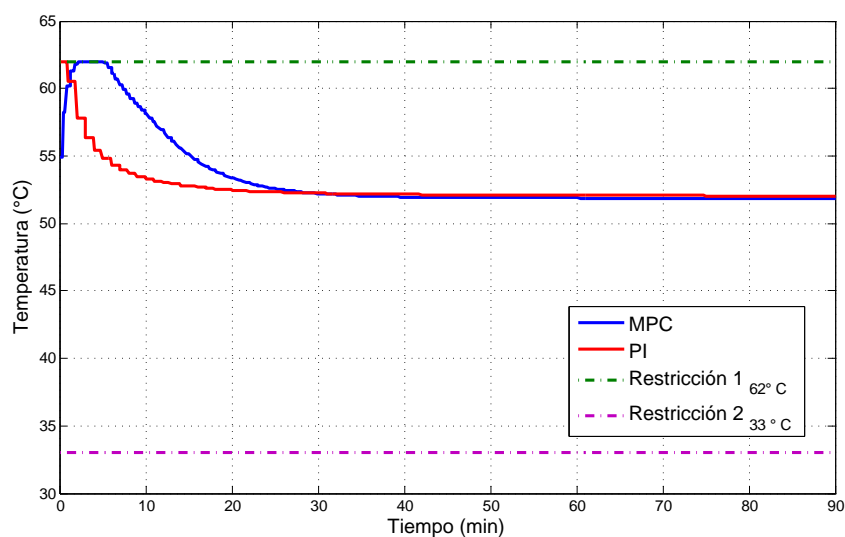


Figura 5.5: Señales de control para el control predictivo con restricción en $u(k+i)$ y el control proporcional integral. Temperatura de la reacción.

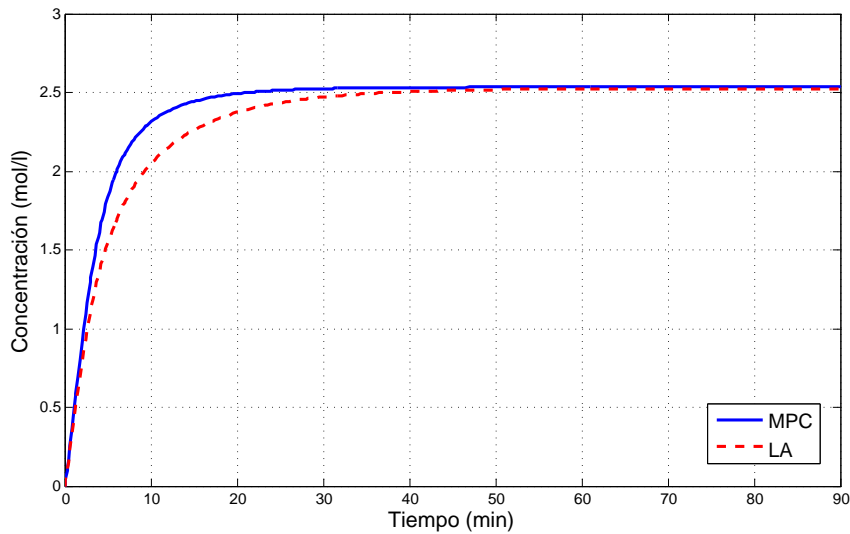


Figura 5.6: Respuesta del control predictivo con restricciones en $u(k+i)$ y $\Delta u(k+i)$ y del sistema en lazo abierto.

Con base en lo anterior, se tiene que para el caso con restricción en el rango de variación de la entrada, $u(k+i)$, el control predictivo en simulación permitió la optimización del tiempo de producción de biodiésel en más del 20%. Además, permite también la producción de este biocombustible que en simulación, cumple la característica de contenido en éster requerido por la norma europea EN14214. Por otra parte, el MPC lleva a cabo la optimización con prácticamente el mismo consumo energético y el mismo desempeño que como el controlador tipo proporcional integral (Tabla 5.2).

5.2.2. Caso III. Restricciones en $u(k+i)$ y $\Delta u(k+i)$

Se implementó un controlador predictivo a la reacción de transesterificación, diseñado con base en las restricciones del sistema (4.27) y (4.26). Este controlador no pudo ser evaluado frente a uno tipo proporcional integral, debido a que la restricción (4.26) establece un límite para la velocidad de cambio en la señal de control y el PI no admite este tipo de restricciones.

La Figura 5.6 presenta la respuesta del sistema de control predictivo con restricciones en $u(k+i)$ y $\Delta u(k+i)$, así como la respuesta del sistema en lazo abierto. En este caso, el control predictivo de la reacción disminuyó el tiempo de producción de biodiésel en un 42.12%.

Además, el control predictivo con ambas restricciones permitió obtener en la simulación biodiésel con el requerimiento mínimo de contenido en éster del 96.5%, establecido por la norma. El contenido másico final de la simulación del sistema de control fue de 98.84%.

El índice IAE para el caso de estudio con ambas restricciones, fue de 77.91 y resultó ser prácticamente igual que en el caso I donde se tuvo un IAE=77.13; e incluso fue mejor que en el caso de estudio II donde se tuvo un IAE=80.09.

Por otra parte, la Figura 5.7 presenta la gráfica de la señal de control del MPC con

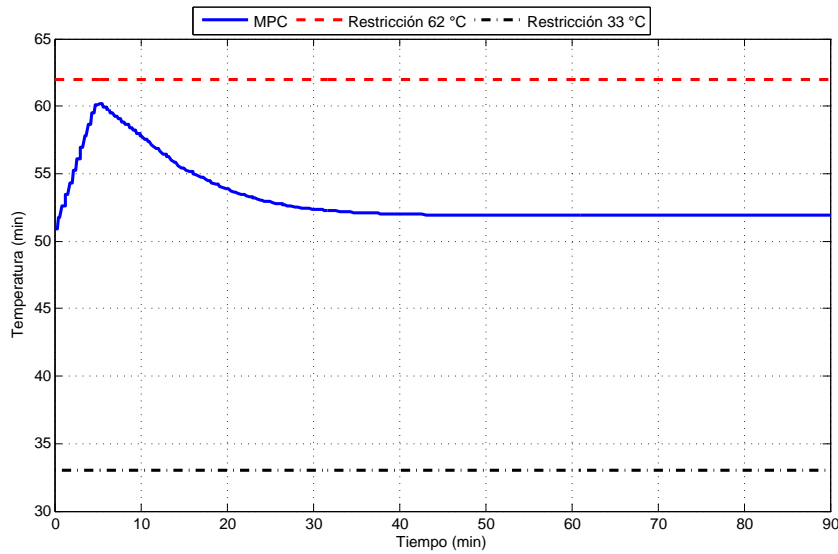


Figura 5.7: Señal de control del control predictivo con restricciones en $u(k+i)$ y $\Delta u(k+i)$.

ambas restricciones. Debido a la limitación en la velocidad del actuador, la señal de control lo alcanza el límite superior de la temperatura, a diferencia del caso I. Además, en la Figura 5.7 se puede apreciar como la velocidad de cambio en la temperatura es diferente cuando aumenta que cuando disminuye, esto se debe a la forma de la restricción (4.26).

Tabla 5.3: Resultados finales de la implementación del control predictivo.

MPC	Tiempo de producción	X_{ME}	IAE	Temperatura promedio
Caso I	15.45 min	96.84 %	77.18	53.92 °C
Caso II	16.00 min	96.84 %	80.09	53.63 °C
Caso II	18.68 min	96.84 %	77.91	53.14 °C

La estrategia de control con ambas restricciones demostró cumplir en simulación con los objetivos de control y lo hizo de una manera aceptable. Además, este controlador en comparación con los controladores predictivos de los casos I y II resultó ser muy similar. Incluso superó al MPC del caso II en un aspecto, el índice IAE.

5.3. Conclusiones

En este capítulo se presentaron los resultados obtenidos de la implementación en simulación del sistema de control predictivo. Los resultados de MPC fueron evaluados contra los resultados de la implementación de un controlador tipo proporcional integral.

Para todos los casos de estudio, el MPC demostró un mejor desempeño que el PI, al mismo tiempo permitió, en la simulación, la obtención de biodiésel bajo la especificación

de contenido en éster de la norma EN 14214. Por otra parte, la implementación del sistema de control predictivo permitió la optimización del tiempo de producción en más del 40 %.

Capítulo 6

Conclusiones generales

En este trabajo de tesis se desarrolló e implementó, en simulación, un sistema de control automático basado en un controlador predictivo y aplicado a la producción de biodiésel en un reactor por lotes. La producción de biodiésel en el reactor se realiza a partir de la reacción de transesterificación de aceite de soya con metanol.

El diseño del sistema de control se centró en tres etapas principales: La obtención del modelo matemático de la reacción de transesterificación que se lleva a cabo en el reactor y la generación de un modelo matemático lineal a partir del modelo no lineal de la reacción; El análisis del sistema a partir del estudio y la simulación de su modelo, y finalmente; el desarrollo y la implementación en simulación, del sistema de control al proceso de transesterificación.

Cada una de estas etapas se desarrolló con el fin cumplir con los objetivos de este trabajo de investigación, los cuales fueron presentados en el capítulo 1. A continuación se presentan las conclusiones generadas del desarrollo de cada una de las etapas.

Obtención del modelo no lineal y del modelo lineal

El modelo matemático que se presentó en este trabajo, solamente considera el balance de materia de la reacción que se lleva a cabo en el reactor. El modelo y sus parámetros se obtuvieron de [10], a partir de una revisión documental bibliográfica.

El modelo se evaluó, cualitativamente contra datos de experimentos reales reportados en la literatura. Sin embargo, no fue posible realizar un análisis cuantitativo de la precisión del modelo.

A partir del modelo matemático de la reacción, que es no lineal, se obtuvo un modelo lineal mediante la linealización por series de Taylor del modelo original.

Simulación y análisis del modelo

El análisis del sistema se centro en la propiedad de controlabilidad y en el estudio del efecto que la temperatura tiene sobre la reacción.

A partir del análisis de controlabilidad, se determinó que el sistema es de estado no controlable y por lo tanto fue necesario realizar su descomposición en las partes controlable y no controlable. De las tres variables controlables, se seleccionó a la concentración de metil éster como variable controlada en el lazo de control.

A partir de la simulación del modelo no lineal de la reacción, se estudió el efecto que la temperatura (variable de entrada) tiene sobre el estado del sistema. Este análisis demostró que el tiempo de reacción es inversamente proporcional a la temperatura, mientras que la concentración final de biodiésel es directamente proporcional a esta variable. Finalmente, con base en los resultados de la simulación del modelo lineal, se llevó a cabo su evaluación contra el modelo matemático no lineal, y el modelo lineal demostró predecir de manera aceptable la dinámica del sistema.

Desarrollo e implementación del MPC

Se desarrolló e implementó un sistema de control automático para la reacción de transesterificación, con el propósito de garantizar en simulación la producción de biodiésel que cumpla la especificación de la norma EN 14214 para el contenido en éster. Además, se busca también, lograr la optimización del proceso de producción en el reactor por lotes.

El sistema de control automático se basa en un controlador predictivo implementado para el control de la concentración de metil éster en la mezcla de la reacción.

Se evaluó el desempeño del sistema de control predictivo contra el desempeño de un controlador proporcional integral, y el desempeño del sistema en lazo abierto. En la evaluación se estudiaron tres casos: Caso I. Sin restricciones; Caso II. Restricción en el rango del actuador y; Caso III. Restricciones en el rango y la velocidad del actuador.

Los índices utilizados para la evaluación de los controladores fueron el tiempo de estabilización del sistema, la integral del error absoluto y el promedio de la magnitud de la señal de control.

Caso I. Sin restricciones

En este caso de estudio se evaluó el desempeño de un controlador predictivo, diseñado sin restricciones, contra el desempeño de un controlador tipo PI.

En la simulación del proceso, los dos sistemas de control disminuyeron el tiempo de producción de biodiésel cumpliendo con la especificación de la norma EN 14214, para el contenido en éster de la mezcla final. Sin embargo, el control predictivo redujo más el tiempo de producción, demostrando un mejor desempeño y con prácticamente el mismo esfuerzo de control que el PI.

Caso II. Restricción en el rango del actuador

Una de las restricciones impuestas por la naturaleza del sistema es la del rango de variación de la temperatura. Por lo tanto, en este caso de estudio, se implementó un controlador predictivo con restricción en el rango del actuador. En este caso, se evaluó el desempeño del controlador contra un PI con saturación.

Nuevamente, el controlador predictivo tuvo una disminución del tiempo de producción y un mejor desempeño en relación al PI, con prácticamente el mismo esfuerzo de control promedio. Además, los resultados de la simulación muestran que el biodiésel cumple con la característica de contenido en éster de la norma EN14214.

Caso III. Restricciones en el rango y la velocidad del actuador

Además de la restricción en el rango de variación de la temperatura, el sistema presenta otra restricción en la velocidad de variación de esta variable. Por tal motivo se diseñó un controlador con estas dos restricciones.

Para este caso de estudio, no fue posible implementar un controlador tipo PI al sistema debido a que el PI no permite restringir la velocidad de variación de la señal de control.

El control predictivo con restricciones demostró un desempeño muy similar a los casos anteriores, he incluso tuvo un IAE menor que en el caso II. Además, los resultados de la simulación nuevamente cumplieron con el requisito de la norma europea.

En todos los casos de estudio la simulación del sistema de control predictivo demostró la optimización del proceso de producción de biodiésel en relación al tiempo de producción y dicha optimización fue mayor al 20 %. Además al final de la simulación el biodiésel demostró cumplir con la especificación de la norma EN 14214 del contenido en éster.

En consecuencia, se concluye que la simulación del control predictivo de la reacción de transesterificación que se lleva a cabo en un reactor por lotes, permite reducir el tiempo de producción de biodiésel en más del 20 % y la producción de biodiésel con la especificación de la norma EN 14214 para los productos finales del biodiésel. Con esto se validó la hipótesis de este trabajo de investigación establecida en el capítulo 1.

6.1. Aportaciones

En el Centro Nacional de Investigación y Desarrollo tecnológico, este trabajo es el primero como tal, que estudia el control automático del proceso de producción de biodiésel. Lo que da cabida a temas futuros de investigación que complementen los resultados obtenidos en este trabajo.

Se realizó la instrumentación del reactor con el fin de, si era posible, validar el modelo con datos de experimentos propios y, realizar la implementación en el reactor. Esta instrumentación facilitará los trabajos futuros derivados de esta investigación.

De la revisión del estado del arte, se tienen no muchos trabajos sobre el control automático del proceso de producción de biodiésel. Y particularmente hablando del proceso en un reactor por lotes se encontraron solamente dos publicaciones. Por lo tanto este trabajo representa una aportación muy importante en el desarrollo de la energías renovables.

Finalmente, no se encontró en la literatura ninguna publicación que presente un modelo linealizado de la reacción de transesterificación de aceite vegetal con alcohol, por lo que el modelo lineal presentado en este trabajo resulta una aportación significativa.

6.2. Trabajos futuros

Debido a que este trabajo de investigación fue el primero en su tipo en el CENIDET y que en la literatura existen poco en su clase, surgen muchas actividades futuras derivadas de los resultados obtenidos durante el desarrollo de esta tesis. Las principales

temáticas a desarrollar para enriquecer los resultados de esta investigación son las siguientes:

1. Una evaluación cuantitativa del modelo matemático presentado en este trabajo con experimentos realizados en un prototipo de reactor de 5 litros que se encuentra en las instalaciones del ITTG.
2. La evaluación del modelo lineal del sistema con datos reales obtenidos de los experimentos en el prototipo del reactor.
3. La obtención y validación de un modelo completo del sistema a partir de la inclusión de un balance de energía para la reacción de transesterificación en el reactor.
4. La implementación del sistema de control predictivo en el prototipo del reactor.
5. El desarrollo de estimadores de estado, basados en un modelo completo del reactor.
6. El diseño, desarrollo e implementación de un sistema de diagnóstico de fallas al proceso de producción de biodiésel en el reactor.
7. El diseño, desarrollo e implementación de un sistema de control tolerante a fallas para el proceso de producción de biodiésel en el reactor.

6.3. Publicaciones

A partir de los resultados obtenidos en esta investigación se generaron las siguientes publicaciones:

En congresos:

1. J. P. Castillo, P. E. Álvarez, M. Adam, B. López-Zapata, and E. Sánchez. Evaluación de un modelo lineal de la transesterificación de aceite de soya a diferentes temperaturas. In *XVI CONVENTION OF ELECTRICAL ENGINEERING, CIE-2015*, 2015
2. J. P. Castillo, M. Adam, P. E. Álvarez, and B. López-Zapata. Control predictivo de la producción de biodiesel en un reactor por lotes por transesterificación de aceite de soya. In *Congreso Nacional de Control Automático 2015*, 2015
3. B. Lopez, J.P. Castillo, , M. Adam, and P.E. Álvarez. Evaluación de un filtro de kalman para la estimación del estado de la producción de biodiesel en un reactor por lotes. In *Congreso Nacional de Control Automático 2015*, 2015
4. B. Lopez, J.P. Castillo, M. Adam, and P.E. Álvarez. Automatización y puesta en operación de un reactor biodiesel. In *Semana Nacional de Ingeniería Electrónica*, 2014

Las siguientes dos publicaciones fueron presentadas en congreso. Pero la aceptación en el congreso implicó automáticamente su evaluación para la revista “Journal of Renewable and Sustainable Energy”

1. J.P. Castillo, P.E. Alvarez, B. López-Zapata, and M. .Adam. Simulation of a controlled system of the transesterification of soybean oil for biodiesel production. In *Tercer Simposio Internacional sobre Energías Renovables y Sustentabilidad*, 2015
2. B. Lopez, M. Adam, L. Torres, P.E. Alvarez, and J.P. Castillo. Virtual sensors for biodiesel production in a batch reactor. In *Tercer Simposio Internacional sobre Energías Renovables y Sustentabilidad*, 2015

Anexo

Anexo A

Condiciones para la simulación de la reacción

En la sección 2.2 se establecieron las variables o condiciones que afectan a la reacción de transesterificación. Para todas las simulaciones, estas condiciones se establecieron como se muestra en la Tabla A.1 y corresponden a las condiciones para la reacción de transesterificación de aceite de soya con metanol reportada en [10].

Tabla A.1: Condiciones para la simulación de la reacción

No.	Condición	Especificación
1	Relación molar alcohol:aceite	6:1
2	Tipo de alcohol	Metanol
3	Tipo de aceite	Soya
4	Tipo de catalizador	Hidróxido de potasio
5	Cantidad de catalizador	0.20 wt % aceite
6	Intensidad de mezclado	300 rpm
7	Contenido de ácidos grasos libres	0.09 %
8	Humedad	Anhidro

La determinación de la condición 8 esta implícita en el modelo matemático, ya que este no toma en cuenta la presencia de humedad en la mezcla de la reacción, con lo que se satisface dicha condición. Por otra parte, las determinaciones para las condiciones 2-7 están implícitas en los valores de los parámetros del modelo, A_i y Ea_i .

De esta manera, para la simulación de la reacción solamente hace falta garantizar una relación molar alcohol:aceite de 6:1. Esto se hace estableciendo adecuadamente las condiciones iniciales para la integración numérica (simulación) del conjunto de ecuaciones diferenciales (2.12) que definen el modelo del sistema, de tal manera que se satisfaga dicha relación.

Anexo B

Determinación de los parámetros del modelo

En las Tablas B.1 y B.2 se presentan los coeficientes de velocidad a 50 °C y las energías de activación, para las reacciones involucradas en la transesterificación de aceite de soya con metanol. Estos datos corresponden a experimentos reales y fueron obtenidos de [10].

Tabla B.1: Coeficientes de velocidad para la transesterificación de aceite de soya con metanol a 50 °C [10].

Reacción	Coefficiente	Valor (1/s)
TG→DG	k_1	0.050
DG→TG	k_2	0.110
DG→MG	k_3	0.215
MG→DG	k_4	1.228
MG→GL	k_5	0.242
GL→MG	k_6	0.007

Tabla B.2: Energías de activación para la transesterificación aceite de soya con metanol [10].

Reacción	Parámetro	Valor (cal/mol)
TG→DG	Ea_1	13 145
DG→TG	Ea_2	9 932
DG→MG	Ea_3	19 860
MG→DG	Ea_4	14 639
MG→GL	Ea_5	6 421
GL→MG	Ea_6	9 588

Con los valores de las Tablas B.1 y B.2 se calculó el factor de frecuencia de las colisiones para cada una de las reacciones presentes en el proceso de transesterificación. El cálculo de este parámetro se realizó a partir del despeje del término A_i en (2.27)

como se muestra en (B.1). La Tabla B.3 presenta los valores del factor de frecuencia de las colisiones calculados de esta manera.

$$A_i = \frac{k_i}{e^{-Ea_i/RT}} \quad (\text{B.1})$$

El factor de frecuencia de las colisiones depende de la temperatura, sin embargo para un intervalo pequeño de variación de la temperatura este parámetro permanece constante. En este trabajo se hace la suposición de que el rango de variación de la temperatura de la reacción es lo suficientemente pequeño y por lo tanto el parámetro A_i se mantiene constante.

Tabla B.3: Factores de frecuencia de las coliciones a 50 °C .

Reacción	Parámetro	Valor (1/s)
TG→DG	A_1	3.8805×10^7
DG→TG	A_2	5.7328×10^5
DG→MG	A_3	5.8035×10^{12}
MG→DG	A_4	9.7612×10^9
MG→GL	A_5	5.3249×10^3
GL→MG	A_6	2.0377×10^4

Anexo C

Calculo de matrices de la solución del control predictivo sin restricciones

```
%%Este programa calcula las matrices involucrada en la ley de control
para
%%el control predictivo de la reacción de transesterificación%%

clear all
clc

%%Horizontes
Hp=200;
Hu=100;
Hw=1;

%%Matrices del modelo en tiempo discreto
Ad=[0.9311,0.0983,0.0403,0.0033,-0.0024,9.8528e-05;
0.0619,0.7430,0.5233,0.0025,-0.0018,0.0027;
0.0061,0.1269,0.24896,-0.0027,0.0020,0.0039;
0.0764,0.0916,-0.4168,0.9877,0.0088,-0.0096;
-0.0764,-0.0916,0.4168,0.0122,0.9911,0.0096;
0.0007,0.0315,0.1872,-0.0030,0.0022,0.9932;];
Bd=[-0.000135109947750059;
-0.000137237650510469;
0.000295842299059487;
0.000383962845211629;
-0.000383962845211629;
-2.34947007989586e-05;];
Cd=diag([1 1 1 1 1 1]);
Dd=zeros(6,1);
Cz=diag([0 0 0 1 0 0]);

%%Determinación de las n variables de estado y las l variables de
entrada entradas
[n l]=size(Bd);
[m n1]=size(Cd);

%%Calculo de la matrices de predicción %%
```

```

Upsilon=Cz*Bd;
% Cálculo de Psi y Upsilon %
for i=Hw:Hp
Psi((i*n)-(n-1):i*n,1:n)=Cz*Ad^i; %
Upsilon(i*n+1:n*i+n,:)=Upsilon((i*n)-(n-1):i*n,:)+Cz*Ad^i*Bd;
end
Upsilon=Upsilon(1:n*(Hp-Hw+1),:);

% Calculo de Tetha %
for j=1:Hu
for i=1:Hp-Hw+1
Theta(((i+(j-1))*n)-(n-1):(i+(j-1))*n,l*j-(l-1):l*j)=Upsilon(i*n-(n-1):i*
n,:);
end
end
Theta=Theta(1:n*(Hp-Hw+1),:);

%%Determinación de matrices de ponderación %%
% matriz Q
q=diag([0 0 0 1 0 0]);
for i=Hw:57
Q((i*n)-(n-1):i*n,(i*n)-(n-1):i*n)=q*2;
end

for i=58:Hp
Q((i*n)-(n-1):i*n,(i*n)-(n-1):i*n)=q*5E5;
end

% Matriz R
r=diag(ones(1,1));
for i=1:Hu
R((i*1)-(l-1):i*1,(i*1)-(l-1):i*1)=r*60;
end

SQ=sqrt(Q);
SR=sqrt(R);

```

Bibliografía

- [1] RW Pryor, MA Hanna, JL Schinstock, and LL Bashford. Soybean oil fuel in a small diesel engine. *Transactions of the ASAE [American Society of Agricultural Engineers]*, 26:1471–1479, 1983.
- [2] Ayhan Demirbas and Muhammet Fatih Demirbas. *Algae energy: algae as a new source of biodiesel*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [3] Ayhan Demirbas. *Biodiesel. A Realistic Fuel Alternative for Diesel Engines*. Springer, 2008.
- [4] Ayhan Demirbaş. Diesel fuel from vegetable oil via transesterification and soap pyrolysis. *Energy Sources*, 24(9):835–841, 2002.
- [5] Pahola T Benavides and Urmila Diwekar. Optimal control of biodiesel production in a batch reactor: Part i: Deterministic control. *Fuel*, 94:211–217, 2012.
- [6] Katsuhiko Ogata. *Ingeniería de control moderna*. Pearson Educación, 2003.
- [7] Jan Marian Maciejowski. *Predictive control: with constraints*. Pearson education, 2002.
- [8] Ayhan Demirbaş. Biodiesel from vegetable oils via transesterification in supercritical methanol. *Energy conversion and management*, 43(17):2349–2356, 2002.
- [9] U. S. Energy Information Administration. Annual energy outlook 2013. Technical report, 2013.
- [10] Hossein Nouredini and D Zhu. Kinetics of transesterification of soybean oil. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 74(11):1457–1463, 1997.
- [11] Yen Zhang, MA Dube, DDI McLean, and M Kates. Biodiesel production from waste cooking oil: 1. process design and technological assessment. *Bioresource technology*, 89(1):1–16, 2003.
- [12] Rudolf Diesel. *Theorie und Konstruktion eines rationellen Wärmemotors*. Berlin, 1893.
- [13] N. Haga. Vegetable oils as fuels in diesel generating. In *10a Conferencia Internacional Ambiental*, 2004.
- [14] G. Chavanne. Procédé de transformation d'huiles végétales en vue de leur utilisation comme carburants, 1937.

- [15] Mustafa Balat and Havva Balat. A critical review of bio-diesel as a vehicular fuel. *Energy conversion and Management*, 49(10):2727–2741, 2008.
- [16] Fangrui Ma and Milford A Hanna. Biodiesel production: a review. *Bioresource technology*, 70(1):1–15, 1999.
- [17] E. J. S. Parente. Processo de produção de combustíveis a partir de frutos ou sementes de oleaginosas, 1980.
- [18] BK Bala. Studies on biodiesels from transformation of vegetable oils for diesel engines. *Energy Education Science and Technology*, 15(1/2):1, 2005.
- [19] Marvin W Formo. Physical properties of fats and fatty acids. *Bailey's industrial oil and fat products*, 1:177–232, 1979.
- [20] Ayhan Demirbas. Biofuels sources, biofuel policy, biofuel economy and global biofuel projections. *Energy conversion and management*, 49(8):2106–2116, 2008.
- [21] J Fuls and FJC Hugo. On-farm preparation of sunflower oil esters for fuel. In *Beyond the energy crisis: opportunity and challenge. Third International Conference on Energy Use Management, Berlin (West), Oct. 26-30, 1981/edited by Rocco A. Fazzolare, Craig B. Smith*. Oxford; New York: Pergamon, 1981., 1981.
- [22] B Freedman and EH Pryde. Fatty esters from vegetable oils for use as a diesel fuel. Technical report, Dept. of Agriculture, Peoria, IL, 1982.
- [23] A IŞi Gigür, F Karaosmanoglu, and HA Aksoy. Methyl ester from safflower seed oil of turkish origin as a biofuel for diesel engines. *Applied biochemistry and biotechnology*, 45(1):103–112, 1994.
- [24] X Lang, Ajay K Dalai, Narendra N Bakhshi, Martin J Reaney, and PB Hertz. Preparation and characterization of bio-diesels from various bio-oils. *Bioresource technology*, 80(1):53–62, 2001.
- [25] M Mittelbach and S Gangl. Long storage stability of biodiesel made from rapeseed and used frying oil. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 78(6):573–577, 2001.
- [26] JW Goodrum. Volatility and boiling points of biodiesel from vegetable oils and tallow. *Biomass and Bioenergy*, 22(3):205–211, 2002.
- [27] BEHP Freedman, EH Pryde, and TL Mounts. Variables affecting the yields of fatty esters from transesterified vegetable oils. *Journal of the American Oil Chemists Society*, 61(10):1638–1643, 1984.
- [28] E Ahn, M Koncar, M Mittelbach, and R Marr. A low-waste process for the production of biodiesel. *Separation Science and Technology*, 30(7-9):2021–2033, 1995.
- [29] Paul F Kusy. Transesterification of vegetable oils for fuels. 1982.

- [30] Okabe A, Tanaka Y. and Ando S. Method for the preparation of a lower alkyl ester or fatty acid, 1981.
- [31] V. Sankaran. Transesterification of triglycerides, 1990.
- [32] D Darnoko and Munir Cheryan. Kinetics of palm oil transesterification in a batch reactor. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 77(12):1263–1267, 2000.
- [33] Bernard Freedman, Royden O Butterfield, and Everett H Pryde. Transesterification kinetics of soybean oil 1. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 63(10):1375–1380, 1986.
- [34] Fadi Ataya, Marc A Dubé, and Marten Ternan. Acid-catalyzed transesterification of canola oil to biodiesel under single-and two-phase reaction conditions. *Energy & Fuels*, 21(4):2450–2459, 2007.
- [35] Olivera S Stamenković, Zoran B Todorović, Miodrag L Lazić, Vlada B Veljković, and Dejan U Skala. Kinetics of sunflower oil methanolysis at low temperatures. *Bioresource Technology*, 99(5):1131–1140, 2008.
- [36] Sulaiman Al-Zuhair, Ali Dowaidar, and Hassan Kamal. Dynamic modeling of biodiesel production from simulated waste cooking oil using immobilized lipase. *Biochemical Engineering Journal*, 44(2):256–262, 2009.
- [37] Dario Frascari, Michele Zuccaro, Alessandro Paglianti, and Davide Pinelli. Optimization of mechanical agitation and evaluation of the mass-transfer resistance in the oil transesterification reaction for biodiesel production. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 48(16):7540–7549, 2009.
- [38] Boštjan Klofutar, Janvit Golob, Blaž Likozar, Cveto Klofutar, Ema Žagar, and Ida Poljanšek. The transesterification of rapeseed and waste sunflower oils: mass-transfer and kinetics in a laboratory batch reactor and in an industrial-scale reactor/separator setup. *Bioresource technology*, 101(10):3333–3344, 2010.
- [39] Xuejun Liu, Xianglan Piao, Yujun Wang, and Shenlin Zhu. Model study on transesterification of soybean oil to biodiesel with methanol using solid base catalyst. *The Journal of Physical Chemistry A*, 114(11):3750–3755, 2009.
- [40] Gemma Vicente, Mercedes Martínez, José Aracil, and Alfredo Esteban. Kinetics of sunflower oil methanolysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 44(15):5447–5454, 2005.
- [41] Gemma Vicente, Mercedes Martinez, and Jose Aracil. Kinetics of brassica c arinata oil methanolysis. *Energy & fuels*, 20(4):1722–1726, 2006.
- [42] Manolito E Bambase, Nobuyuki Nakamura, Junko Tanaka, and Masatoshi Matsumura. Kinetics of hydroxide-catalyzed methanolysis of crude sunflower oil for the production of fuel-grade methyl esters. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 82(3):273–280, 2007.

- [43] Ana SR Brásio, Andrey Romanenko, João Leal, Lino O Santos, and Natércia CP Fernandes. Nonlinear model predictive control of biodiesel production via transesterification of used vegetable oils. *Journal of Process Control*, 23(10):1471–1479, 2013.
- [44] Pahola T Benavides and Urmila Diwekar. Optimal control of biodiesel production in a batch reactor: Part ii: Stochastic control. *Fuel*, 94:218–226, 2012.
- [45] Vishak Sampath, Srinivas Palanki, Juan C Cockburn, and Jean-Pierre Corriou. Robust controller design for temperature tracking problems in jacketed batch reactors. *Journal of Process Control*, 12(1):27–38, 2002.
- [46] Simon Štampar, Saša Sokolič, and Gorazd Karer. Nonlinear control of a hybrid batch reactor. *Strojniški vestnik-Journal of Mechanical Engineering*, 59(2):112–123, 2013.
- [47] AJB Antunes, JAFR Pereira, and Ana Maria Frattini Fileti. Fuzzy control of a pmma batch reactor: Development and experimental testing. *Computers & chemical engineering*, 30(2):268–276, 2005.
- [48] Iqbal M Mujtaba, Norashid Aziz, and MA Hussain. Neural network based modelling and control in batch reactor. *Chemical Engineering Research and Design*, 84(8):635–644, 2006.
- [49] H Bouhenchir, Michel Cabassud, and Marie-Véronique Le Lann. Predictive functional control for the temperature control of a chemical batch reactor. *Computers & chemical engineering*, 30(6):1141–1154, 2006.
- [50] Florence Xaumier, Marie-Véronique Le Lann, Michel Cabassud, and Gilbert Casamatta. Experimental application of nonlinear model predictive control: temperature control of an industrial semi-batch pilot-plant reactor. *Journal of process Control*, 12(6):687–693, 2002.
- [51] Yong Kuen Ho, Farouq S Mjalli, and Hak Koon Yeoh. Centralized vs decentralized adaptive generalized predictive control of a biodiesel reactor. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 8(1):137–143, 2013.
- [52] YK Ho, FS Mjalli, and HK Yeoh. Multivariable adaptive predictive model based control of a biodiesel transesterification reactor. *Journal of Applied Sciences*, 10(12):1019–1027, 2010.
- [53] H. Scott Fogler. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*, chapter Apéndice G, pages 941–944. Prentice Hall, 2004.
- [54] William L Luyben. *Process modeling, simulation and control for chemical engineers*. McGraw-Hill Higher Education, 1989.
- [55] EH Pryde. *Composition of soybean oil*, 1980.
- [56] Hassan K Khalil. *Nonlinear systems*. Prentice hall New Jersey, third edition edition, 1996.

- [57] El Imperio de los Números. Solucionador de ecuaciones, 2015. <http://es.numberempire.com/equationsolver.php>.
- [58] Katalin M Hangos, József Bokor, and Gábor Szederkényi. *Analysis and control of nonlinear process systems*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [59] Pedro Nel Benjumea Hernández, John Ramiro Agudelo Santamaría, and Luis Alberto Rios. *Biodiesel: Producción, calidad y caracterización*. Universidad de Antioquia, 2009.
- [60] Eduardo F Camacho and Carlos Bordons Alba. *Model predictive control*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [61] J. P. Castillo, P. E Álvarez, M. Adam, B. López-Zapata, and E. Sánchez. Evaluación de un modelo lineal de la transesterificación de aceite de soya a diferentes temperaturas. In *XVI CONVENTION OF ELECTRICAL ENGINEERING, CIE-2015*, 2015.
- [62] J. P. Castillo, M. Adam, P. E. Álvarez, and B. López-Zapata. Control predictivo de la producción de biodiesel en un reactor por lotes por transesterificación de aceite de soya. In *Congreso Nacional de Control Automático 2015*, 2015.
- [63] B. Lopez, J.P. Castillo, , M. Adam, and P.E. Álvarez. Evaluación de un filtro de kalman para la estimación del estado de la producción de biodiesel en un reactor por lotes. In *Congreso Nacional de Control Automático 2015*, 2015.
- [64] B. Lopez, J.P. Castillo, M. Adam, and P.E. Álvarez. Automatización y puesta en operación de un reactor biodiesel. In *Semana Nacional de Ingeniería Electrónica*, 2014.
- [65] J.P. Castillo, P.E. Alvarez, B. López-Zapata, and M. .Adam. Simulation of a controlled system of the transesterification of soybean oil for biodiesel production. In *Tercer Simposio Internacional sobre Energías Renovables y Sustentabilidad*, 2015.
- [66] B. Lopez, M. Adam, L. Torres, P.E. Alvarez, and J.P. Castillo. Virtual sensors for biodiesel production in a batch reactor. In *Tercer Simposio Internacional sobre Energías Renovables y Sustentabilidad*, 2015.