



---

## SIMULACIÓN Y CONTROL DE UN PROCESO DE ADSORCIÓN POR OSCILACIÓN DE PRESIÓN PARA DESHIDRATAR ETANOL

### SIMULATION AND CONTROL OF A PRESSURE SWING ADSORPTION PROCESS TO DEHYDRATE ETHANOL

J.Y. Rumbo-Morales\*, G. Lopez-Lopez<sup>2</sup>, V.M. Alvarado<sup>2</sup>, J.S. Valdez-Martinez<sup>1</sup>,  
F.D.J. Sorcia-Vázquez<sup>3</sup>, J.A. Brizuela-Mendoza<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Universidad Tecnológica Emiliano Zapata. Av. Universidad Tecnológica, C.P. 62760, Emiliano Zapata, Morelos.

<sup>2</sup>Tecnológico Nacional de México, TecNM/CENIDET, Int. Internado Palmira S/N, Col. Palmira, Cuernavaca C.P. 62490, México.

<sup>3</sup>Universidad de Guadalajara. Centro Universitario de los Valles. Carretera Guadalajara-Ameca Km.45.5 C.P. 46600, Ameca, Jalisco, México.

Recibido: 27 de febrero de 2018; Aceptado: 23 de abril de 2018.

---

#### Resumen

La adsorción con tamices moleculares utilizando oscilación de presión para adsorber la molécula de agua es uno de los nuevos procesos que existen para producir etanol deshidratado cumpliendo con los estándares internacionales de pureza (99% etanol). El presente trabajo aborda la simulación y control de un proceso de adsorción por oscilación de presión (PSA) utilizando el simulador Aspen Adsorption y Simulink. Para definir el lazo de control primario se realiza un análisis de sensibilidad que permite conocer los efectos de algunas variables (entradas) sobre la pureza del etanol obtenido (salida). Esto permite identificar un modelo reducido (Hammerstein-Wiener) utilizando los datos de entrada y salida del modelo riguroso PSA con el objetivo de, posteriormente, realizar el diseño del controlador predictivo óptimo (MPC Óptimo) utilizando el modelo reducido. Para validar la robustez y estabilidad del controlador aplicado al modelo riguroso PSA, se presentan simulaciones ante cambios (perturbaciones) de temperatura, tiempos de purga y cambios en la composición de alimentación. Los resultados más relevantes de este trabajo dan lugar a que al aplicar un controlador y definiendo una variable continua a lo largo de todos los pasos del proceso, el control rápidamente logra mantener la pureza deseada en un menor número de ciclos ante diferentes cambios.

*Palabras clave:* modelo riguroso PSA, MPC óptimo, modelo identificado Hammerstein-Wiener, adsorción por oscilación de presión.

---

#### Abstract

Adsorption with molecular sieves using pressure oscillation to adsorb the water molecule is one of the new processes that exist to produce dehydrated ethanol complying with international purity standards (99% ethanol). In this study, the pressure swing adsorption process (PSA) was simulated and controlled using the Aspen Adsorption and Simulink simulator. To define the primary control loop, a sensitivity analysis was carried out that allowed to know the effects of some variables (inputs) on the purity of the obtained ethanol (output), this helped to identify a reduced model (Hammerstein-Wiener) using the input and output data of the rigorous PSA model. Subsequently the optimal predictive controller (Optimal MPC) design was made using the reduced model. To validate the robustness and stability of the controller, it was applied to the rigorous PSA model, testing it in simulations before changes (perturbations) of temperature, purge times and changes in the feed composition. The most relevant results of this work give rise to the fact that when applying a controller and defining a variable continues along all the steps of the process, the control quickly manages to maintain the desired purity in a smaller number of cycles before different changes.

*Keywords:* rigorous model PSA, optimal MPC, identified model Hammerstein-Wiener, pressure swing adsorption.

---

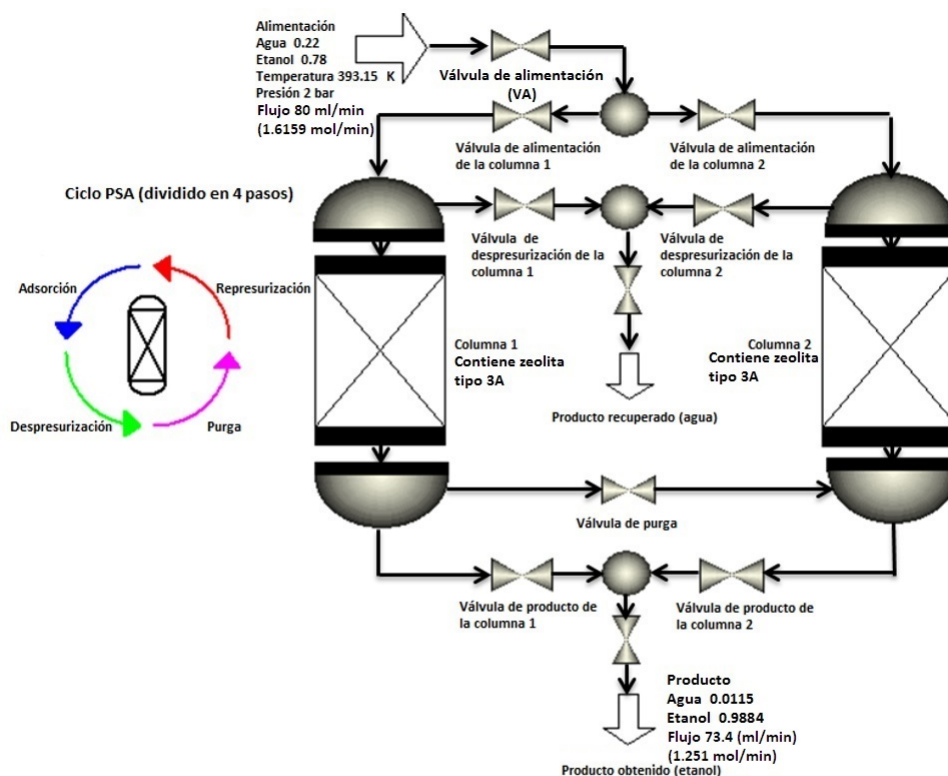
\* Corresponding author. E-mail: jjrumbo@hotmail.com  
Tel. 777-564-73-45  
doi: 10.24275/uam/izt/dcbi/revmexingquim/2018v17n3/Rumbo  
issn-e: 2395-8472

## 1 Introducción

La adsorción por oscilación de presión (PSA) es un proceso de separación en el que se transfieren ciertos componentes de una fase fluida (gaseosa) hacia la superficie de un sólido (zeolitas) (Wang y col., 2010; Chang y col., 2006; Morales y col., 2014; Pérez y col., 2018; San Pedro y col., 2015; Corral y col., 2017), donde son retenidos físicamente. El PSA utiliza dos o más columnas que trabajan en paralelo y contienen zeolita (natural o sintética) (Al-Asheh y col., 2009). El proceso se compone de dos etapas generales que forman un ciclo (Jeong y col., 2010; Latifi y col., 2008; Simo y col., 2008; Arumugam y col., 1999; Kumar y col., 2010): la producción de etanol (adsorción) y la regeneración de la columna empacada con zeolita (despresurización, purga y represurización). Dichas etapas operan de manera cíclica en cada columna, es decir mientras la primera columna produce etanol, la segunda columna se regenera liberando las moléculas de agua adsorbidas. Después de un cierto tiempo, las operaciones se invierten hasta completar un ciclo. El modelo matemático del PSA está conformado por ecuaciones diferenciales parciales (EDP) asociadas con la cantidad de materia adsorbida en la columna, caídas de presión e incrementos de temperaturas (Carreño y col., 2017; Waldron y Sircar, 2000; Shin, 1995; Macron y col., 2010). Para resolver las EDP se cuentan con condiciones iniciales y de frontera las cuales permiten enlazar los cuatro pasos. El PSA se ha convertido en una solución flexible, aunque sigue siendo un proceso de separación muy complejo por su naturaleza cíclica. Esto se debe al cambio de operación (oscilación de presión) de una columna a otra, que es controlado con la ayuda de las válvulas que abren y cierran a ciertos tiempos establecidos para la duración de las etapas del proceso. Pocos trabajos relacionados con el control PSA se han publicado en la literatura a pesar de la eficiencia, rapidez con que el proceso alcanza un alto grado de pureza y de bajo costo energético comparado con otros procesos de separación. En el trabajo de (Khajuria y Pistikopoulos, 2011; Khajuria y Pistikopoulos, 2013) se identifica un modelo lineal en espacio de estados utilizado para el diseño del controlador. En este trabajo se diseña un controlador predictivo (MPC) que tiene como objetivo el seguimiento de una trayectoria deseada para la pureza a partir de un modelo con una salida y una entrada. El modelo matemático que determina el comportamiento dinámico del proceso

PSA, se estipula en términos de la variable manipulada (entrada) considerada como el tiempo de adsorción y como variable controlada (salida) la pureza. El trabajo realizado por (Bitzer, 2005), por su parte, propone un modelo Hammerstein que incluye dos secciones; un modelo no lineal (estático) que no consideraba la dinámica cíclica del proceso y un modelo lineal tipo 'wavelet' que caracteriza la dinámica cíclica del proceso. El modelo lineal se utiliza para el diseño del controlador, proponiendo un control primario (realimentado) de seguimiento de trayectoria de la pureza de etanol y, con el objetivo de asegurar la estabilización en puntos de operación específicos manteniendo la pureza en presencia de perturbaciones, se aplica un control proporcional-integral. (Peng y col., 2011), finalmente, aborda un modelo Hammerstein con un controlador  $H^\infty$  robusto ante perturbaciones en la composición de alimentación.

En este trabajo, la Fig. 1 muestra el diagrama de flujo a partir del cual se realiza la simulación y el control del proceso PSA, considerando un único lazo de control. Se adopta como variable manipulada la apertura de la válvula de alimentación (VA) del proceso y como variable de salida la pureza obtenida de las dos columnas empacadas con zeolita. Así mismo, se utiliza el modelo Hammerstein-Wiener, basado en el hecho de que este modelo captura las dinámicas importantes del modelo riguroso (PSA) identificado con los datos de entrada y salida del modelo riguroso PSA. En este estudio, la utilización de la variable manipulada presenta un tiempo continuo en todos los pasos o etapas del proceso PSA, permitiendo que la señal de control se aplique de igual manera en cada paso o etapa del proceso con una sincronización adecuada del programa Aspen Adsorption y Simulink. La aportación de este trabajo se centra en el diseño e implementación del control predictivo óptimo (MPC óptimo) que optimiza la señal de control, permitiendo alcanzar la pureza deseada en un menor número de ciclos del proceso PSA. El MPC Óptimo (Sorcia y col., 2015; Rossiter y col., 1998) se basa en el modelo lineal en espacio de estados estándar sin perturbaciones, considerando predicciones en modo dual y el paradigma de lazo cerrado. Al realizar las predicciones en lazo cerrado se garantiza la estabilidad del sistema a partir de la inclusión de la cola de predicción como posible predicción del siguiente instante de muestreo. El sistema se regula mediante una ley de control basada en una ganancia de retroalimentación de estados óptima tipo LQ.



Columna	Pasos del proceso PSA			
	1	Adsorción (345 s)		
2	Despresurización 210 (s)	Purga 15 (s)	Represurización 120 (s)	Represurización 120 (s)
	Adsorción (345 s)			

Fig. 1: Diagrama de flujo del proceso PSA.

El presente trabajo se organiza de la siguiente manera: en la sección 2 se presenta el modelo matemático (Modelo riguroso PSA) utilizado para simular el proceso PSA, generado mediante el programa Aspen Adsorption. Dicho modelo se estipula en términos de EDPs que describen las caídas de presión, incrementos de temperatura, balance de materia, equilibrio termodinámico y cinético. En la sección 3 se establece el modelo reducido identificado a partir de los datos de entrada y salida del modelo riguroso PSA. El modelo simplificado se utiliza para el diseño del controlador MPC óptimo. En la sección 4 se diseña e implementa el controlador MPC óptimo en el modelo riguroso PSA para verificar su rendimiento y robustez ante perturbaciones, también se discuten los resultados obtenidos. Finalmente, la sección 5 contiene las conclusiones del presente trabajo.

## 2 Configuración y simulación del proceso PSA a través del programa Aspen-Adsorption

Existen varios estudios sobre los procesos PSA con dos, tres o hasta cuatro columnas rellenas de zeolita para la deshidratación de etanol (Liu y *col.*, 2011; Yang y *col.*, 2008; Jeong y *col.*, 2012; Morales y *col.*, 2014; Yamamoto y *col.*, 2012). Dichos estudios se comparan obteniéndose ventajas y desventajas de diferentes métodos operacionales. (Bastidas y *col.*, 2010; Balat y *col.*, 2008), partiendo desde esos estudios, utilizan dos columnas que contienen zeolita tipo 3A (sintética), configurada con 4 pasos: Adsorción (producción de etanol) y despresurización, purga y represurización (regeneración del tamiz molecular). El trabajo estipula

un tiempo para cada paso hasta completar un ciclo equivalente de 690 s, como se muestra en la Fig. 1. La presión de adsorción es de 2 bar (Pruksathorn y Vitidsand, 2010; Arumugam y col., 1999; Delgado y col., 2012), observándose que a mayor presión las zeolitas presentan mayor atracción sobre las moléculas de agua; y la presión para la etapa de regeneración es menor que la presión atmosférica (0.134 bar). Esto se debe a que presiones bajas es posible romper fácilmente el enlace débil que se ha formado entre el adsorbente (zeolita 3A)-adsorbato(molécula de agua). Por otra parte la temperatura de alimentación es de 393.15 K, la cual debe mantenerse constante y superior a los 373.15 K basado en el hecho de que el proceso trabaja en fase vapor, ayudando como resultado a liberar las moléculas de agua adsorbidas por la zeolita en el paso de regeneración (Jain y col., 2003). Así mismo, la composición de alimentación de la mezcla etanol-agua tendrá una concentración cercana al punto azeotrópico (10 % en peso de agua y 90 % en peso de etanol) con un flujo de alimentación de 80 ml/min (1.6159 mol/min) (Pruksathorn y Vitidsant, 2010).

## 2.1 Modelo riguroso PSA

El modelo matemático describe y proporciona una comprensión esencial de la dinámica del proceso cíclico y los efectos que presentan las variables (presión, temperatura, composición, flujos) involucradas en este proceso PSA. Así, el modelo riguroso PSA se compone de lo siguiente:

### 2.1.1 Balance de materia

Con el objetivo de determinar los datos de concentración presentados a lo largo de la columna se establece la Ec. (1) (Cantidad adsorbida de la molécula de agua en cada columna).

$$\frac{\partial(c_i v_g)}{\partial z} + \epsilon_i \frac{\partial c_i}{\partial t} + J_i = 0 \quad (1)$$

Término de convección:

$$\frac{\partial(c_i v_g)}{\partial z} \quad (2)$$

Término de acumulación de materia en la fase gaseosa:

$$\epsilon_i \frac{\partial c_i}{\partial t} \quad (3)$$

Flujo sobre la superficie del solido:

$$J = -\rho \frac{\partial W_i}{\partial t} \quad (4)$$

donde:

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} = MTC_{s_i}(W_i^* - W_i) \quad (5)$$

Simplificación: La parte dispersiva (dispersión axial) es insignificante (nula) comparada con la parte convectiva, razón por la cual no se considera en el modelo planteado.

A fin de establecer el balance de energía Ec.(6), se adopta una operación no isotérmica con conducción de gas, además de la definición del calor de adsorción y coeficiente de transferencia constantes.

### 2.1.2 Balance de energía

$$-K_{sa} \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} + C_{ps} \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} + \rho_s \sum_{i=1}^n (C_{pai} W_i) \frac{\partial T_s}{\partial t} + \rho_s \sum_i^n \left( \Delta H_i \frac{\partial W_i}{\partial t} \right) - MTC a_p (T_g - T_s) = 0 \quad (6)$$

Conductividad térmica axial en el sólido que depende de la conductividad de la zeolita:

$$-K_{sa} \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \quad (7)$$

Acumulación de energía en el sólido:

$$C_{ps} \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (8)$$

Calor del adsorbente:

$$\rho_s \sum_{i=1}^n (C_{pai} W_i) \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (9)$$

Calor de adsorción:

$$\rho_s \sum_i^n \left( \Delta H_i \frac{\partial W_i}{\partial t} \right) \quad (10)$$

Transferencia de calor solido-gas en función del coeficiente de transferencia de calor y del área de transferencia de calor:

$$MTC a_p (T_g - T_s) \quad (11)$$

Las relaciones de los equilibrios cinético y termodinámico se presentan en las ecs. (12)-(13), definidas para la zeolita 3A. Se asume un modelo lineal a partir del modelo de Langmuir (adsorción que se presenta una mono-capa formulado en función de la presión parcial o de la concentración) presentado a continuación.

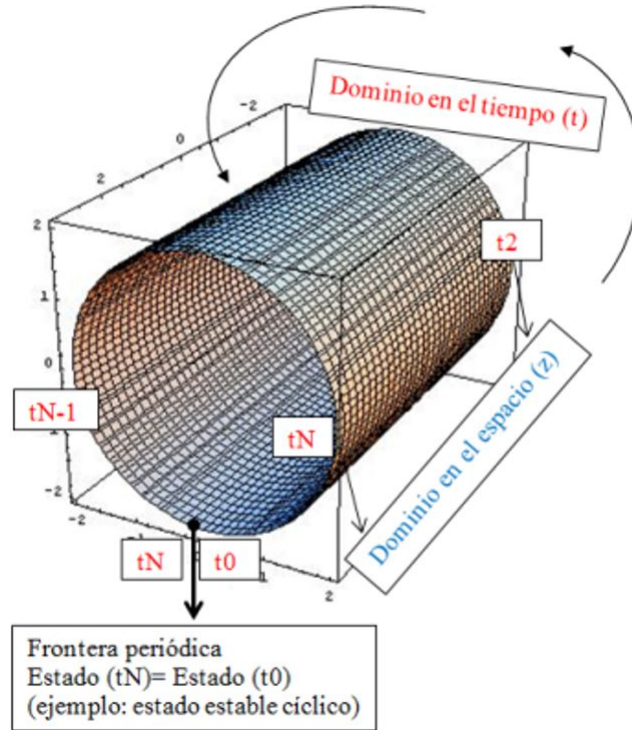


Fig. 2: Dominio del espacio (z) y tiempo (t) sobre una columna PSA.

2.1.3 Langmuir (modelo termodinámico)

$$W_i = \frac{IP_1 e^{IP_2/T_s} P_i}{1 + IP_3 e^{IP_4/T_s} P_i} \quad (12)$$

Donde:

$P_i$  Es la presión parcial.

$IP_1, IP_2, IP_3$  son los parámetros de la isoterma.

$T_s$  Es la temperatura del adsorbente.

2.1.4 Modelo cinético (LDF)

El modelo de fuerza motriz lineal (LDF), ampliamente utilizado para operaciones de adsorción, se empleó en el presente trabajo para caracterizar la cinética, i.e. la rapidez con la que adsorbe la zeolita tipo 3A). Si se considera que la principal resistencia a la transferencia de masa se presenta en el interior de las partículas, el coeficiente global se relaciona directamente con la difusividad del agua en el adsorbente. La Ec. (13) muestra la forma empleada para calcular el coeficiente de transferencia, considerando los parámetros de (Simo y col., 2008) (aquellas únicas dependientes de la temperatura).

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} = MTC_{si} (W_i^* - W_i) \quad (13)$$

$$MTC_{si} = \frac{\Omega D_{ei}}{r_p^2} \quad (14)$$

Donde:

$D_{ei}$  es la difusividad efectiva y  $\Omega$  es el parámetro en la expresión glueckauf.

Con  $\Omega = 15$  (Tanaka y Otten, 1987) se ha demostrado que se desprecia la magnitud del coeficiente de transferencia de masa para tiempos cortos de adsorción. Suponiendo que una columna de adsorción está en el paso de adsorción durante aproximadamente la mitad del tiempo total del ciclo de adsorción, este valor se puede calcular con la Ec. (15):

$$\theta = 0.5 \frac{D_{ei}}{r_p^2} t_{Cycle} \quad (15)$$

El parámetro  $\Omega$  es una función de  $\theta$ .

$$\begin{aligned} \theta \geq 0.1 & : \Omega = 15. \\ 0.001 \leq \theta < 0.1 & : \Omega = \frac{5.14}{\sqrt{\theta}} \\ \theta \leq 0.001 & : \Omega = 162.5 \end{aligned}$$

Table 1: Modelo PSA con algunas consideraciones.

Balance de materia	$\frac{\partial(c_i v_g)}{\partial z} + \epsilon_i \frac{\partial c_i}{\partial t} + J_i = 0$
Balance de energía	$-K_{sa} \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} + C_{ps} \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} + \rho_s \sum_{i=1}^n (C_{pai} W_i) \frac{\partial T_s}{\partial t} + \rho_s \sum_i^n \left( \Delta H_i \frac{\partial W_i}{\partial t} \right) - MTC a_p (T_g - T_s) = 0$
Caída de presión	$\frac{\partial P}{\partial z} = - \left( \frac{150 \times 10^{-3} (1 - \epsilon_i)^2}{(2r_p \psi)^2 \epsilon_i^3} \mu v_g + 1.75 \times 10^{-5} M \rho_g \frac{(1 - \epsilon_i) v_g^2}{2r_p \psi \epsilon_i^3} \right)$
Modelo cinético (LDF)	$\frac{\partial W_i}{\partial t} = MTC_{si} (W_i^* - W_i)$
Langmuir	$W_i = \frac{IP_{1i} e^{IP_{2i}/T_s} P_i}{1 + IP_{3i} e^{IP_{4i}/T_s} P_i}$

Table 2: Condiciones iniciales y de frontera para el modelo riguroso PSA.

Pasos del ciclo	Siguiente ciclo
<b>I. Adsorción</b>	
t = 0	$y = W = 0, T = T_F, P = P_F$ $y = y^{(IV)}, W = W^{(IV)}, T = T^{(IV)}, P = P^{(IV)}$
z = 0	$y = y_F, T = T_F, P = P_F, F = F_F$
z = L	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$
<b>II. Despresurización</b>	
t = 0	$y = y^{(I)}, W = W^{(I)}, T = T^{(I)}, P = P^{(I)}$
z = 0	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$
z = L	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0, F = F(\text{válvula})$
<b>III. Purga</b>	
t = 0	$y = y^{(II)}, W = W^{(II)}, T = T^{(II)}, P = P^{(II)}$
z = 0	$Y = Y_P, T = T_P, F = F_P$
z = L	$P = P_P, \frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$
<b>IV. Represurización</b>	
t = 0	$y = y^{(III)}, W = W^{(III)}, T = T^{(III)}, P = P^{(III)}$
z = 0	$y = y_P, T = T_P, F = F(\text{válvula})$
z = L	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$

Como los tiempos de adsorción son cortos (la mitad del tiempo de ciclo) los resultados presentados en el presente trabajo se obtienen considerando  $\Omega = 15$ .

### 2.1.5 Caída de presión

Se utiliza la Ec. (16) de Ergun para estimar las caídas de presión, datos obtenidos a partir del trabajo realizado por (Simo y col., 2008):

$$\frac{\partial P}{\partial z} = - \left( \frac{150 \times 10^{-3} (1 - \epsilon_i)^2}{(2r_p \psi)^2 \epsilon_i^3} \mu v_g + 1.75 \times 10^{-5} M \rho_g \frac{(1 - \epsilon_i) v_g^2}{2r_p \psi \epsilon_i^3} \right) \quad (16)$$

En general, las ecuaciones del modelo matemático PSA predicen los perfiles de presión, temperatura, carga de saturación y flujos en función del tiempo y/o espacio a lo largo de la columna (ver Fig. 2).

A fin de solucionar el sistema de ecuaciones diferenciales parciales que describen el proceso PSA mostradas en la tabla 1, se establecen las condiciones iniciales y de frontera mostradas en la tabla 2.

El método numérico empleado para la solución de las EDPs fue el denominado Colocación Ortogonal sobre Elementos Finitos de Segundo Orden (OCFE2). La simulación del proceso fue realizada en el programa Aspen-Adsorption. A través de este programa se configura el modelo matemático presentado anteriormente de acuerdo con las suposiciones de modelado establecidas y conforme

Table 3: Parámetros de la columna para adsorber agua y producir etanol.

<b>Alimentación</b>	<b>Valor</b>
Fracción molar del agua $y_w$	0.22
Fracción molar del etanol $y_e$	0.78
Temperatura de producción $T_F$	393.15 K
Presión de producción $P_F$	2 bar
Presión de purga $P_p$	0.1379 bar
Longitud de la columna $l$	0.5 m
Diámetro de la columna $D$	0.2m
Vacío inter-partícula $\epsilon_i$	0.4
Vacío intra-partícula $\epsilon_p$	0.63
Densidad del adsorbente $\rho_p$	729.62 kg/m <sup>3</sup>
Coefficiente de transferencia de masa (e) $MTC$	1.99605 1/s
Coefficiente de transferencia de masa (w) $MTC$	2.941 1/s
Difusividad molecular(e) $D_m$	2.1796 e <sup>-5</sup> m <sup>2</sup> /s
Difusividad molecular (w) $D_m$	3.728e-6 e <sup>-6</sup> m <sup>2</sup> /s
Calor del adsorbente en la fase adsorbida (e) $C_{pa}$	118720.0 J/kmol/K
Calor del adsorbente en la fase adsorbida (w) $C_{pa}$	37470.0 J/kmol/K
Calor específico del adsorbente $C_{ps}$	1260 J/kg/K
Constante de calor de adsorción (e) $\Delta H$	-3.93 e <sup>7</sup> J/kmol
Constante de calor de adsorción (w) $\Delta H$	-51.9e <sup>7</sup> J/kmol
Constante para el coeficiente de transferencia de calor $HTC$	1.e <sup>6</sup> J/s/m <sup>2</sup> /K
Conductividad de calor de la fase gaseosa $k_s$	41.26 W/m/K
Área de la superficie específica del adsorbente $a_p$	1133.86 1/m
Radio de la partícula adsorbente $r_p$	0.0015875 m
Parámetro de isoterma (e) ( $IP_1$ )	0.0 n/a
Parámetro de isoterma (w) ( $IP_1$ )	1.9064e <sup>-7</sup> n/a
Parámetro de isoterma (e) ( $IP_2$ )	0.0 n/a
Parámetro de isoterma(w) ( $IP_2$ )	6242.13 n/a
Parámetro de isoterma (e) ( $IP_3$ )	0.0 n/a
Parámetro de isoterma (w) ( $IP_3$ )	1.7874e <sup>-5</sup> n/a
Parámetro de isoterma (e) ( $IP_4$ )	0.0 n/a
Parámetro de isoterma (w) ( $IP_4$ )	6242.13 n/a
<b>Parámetros computacionales</b>	
Nodos (axial)	20
Método de discretización axial	OCFE2 (Colocación ortogonal sobre elementos finitos)

a las reacciones que se consideran presentes (Simo y col., 2008; Kupiec y col., 2009; Doong y Propsner, 1998; Liu y col., 1998; Wang y col., 2018). Se debe tener en cuenta que algunos datos son importantes para que el proceso PSA pueda ser simulado correctamente, por lo tanto los datos y especificaciones de la presión, temperatura, flujo, concentración y dimensionamiento de las columnas requeridas, se presentan en la tabla 3.

## 2.2 Análisis y simulación del proceso PSA

En la presente sección se muestran los resultados de las simulaciones hasta el Estado Estable Cíclico (traducido del inglés CSS-Cyclic Stable State), definiendo ciertas variables a observar que se presentan cuando se realiza el enlace de un paso a otro, como son: presión, temperatura y composición en función de t (tiempo) y z coordenada axial (largo de la columna o nodos).

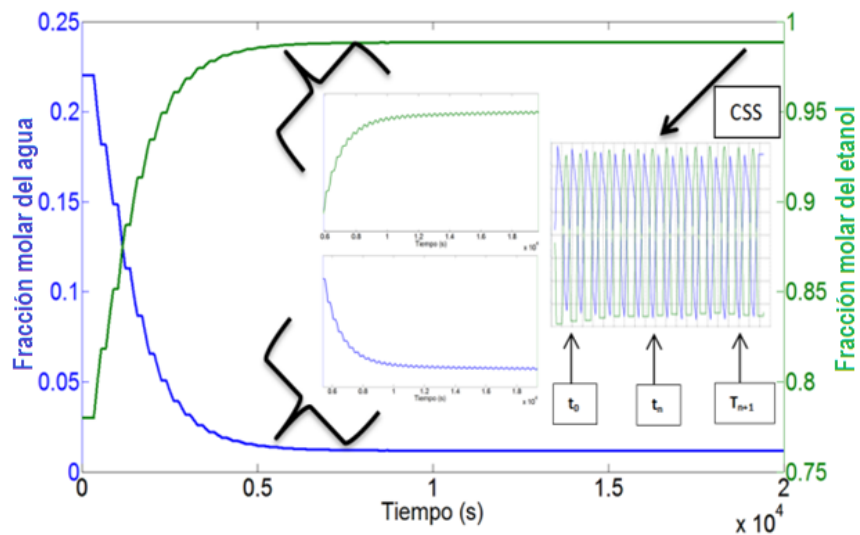


Fig. 3: Perfiles de la pureza de etanol y agua desde el arranque hasta alcanzar el CSS.

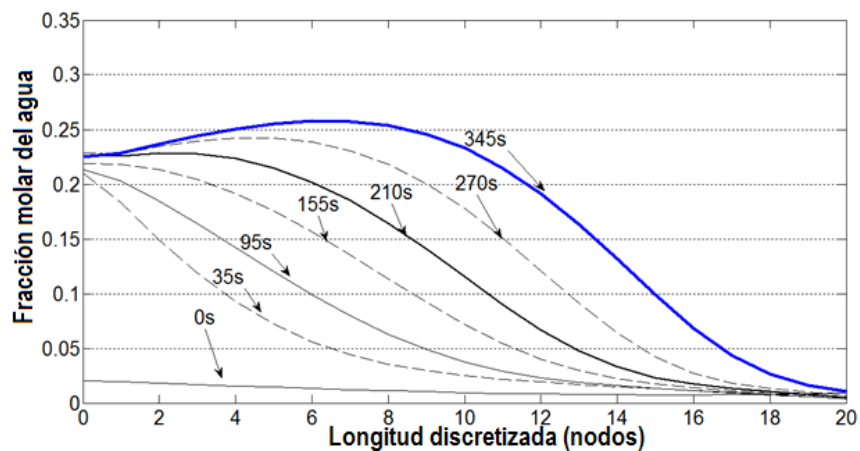


Fig. 4: Perfiles de concentración de agua a diferentes tiempos en función de la dirección axial (nodos).

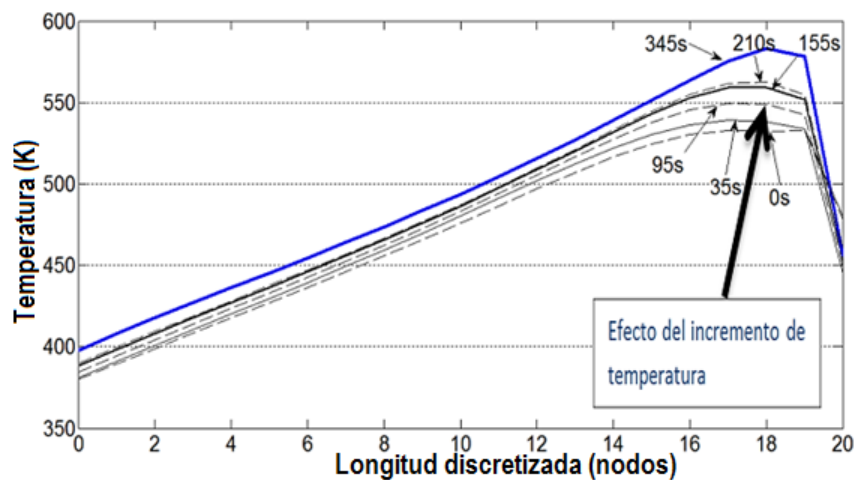


Fig. 5: Perfiles de temperatura en función de la dirección axial (nodos) en la etapa de adsorción.



Inicialmente la cantidad adsorbida en la columna 1 es de 0 ml (0 mol), totalmente regenerado, presurizado a 2 bar y con una temperatura de 393.15 K, con el objetivo de alimentar el vapor de etanol-agua con un flujo de 80 ml/min (1.6159 mol/min). Se tiene una composición de 0.22 en fracción mol de agua (10% en peso de agua) y 0.78 en fracción mol de etanol (90% en peso de etanol). En cuanto el vapor de etanol-agua entra en contacto con las zeolitas, una adsorción rápida se presenta acompañada por el calor, denominada energía exotérmica. Después de cierto tiempo, realizando varios ciclos con sus respectivos pasos (adsorción, despresurización, purga y represurización) se aprecia en la Fig. 3 el comportamiento dinámico del proceso PSA cuando llega al CSS obteniendo una pureza que cumple con los estándares internacionales de pureza de etanol (CEN EN 15376:2014). Es importante notar que se alcanza el CSS después de 28980 segundos de funcionamiento (42 ciclos).

Posteriormente se muestra en la Fig. 4 el comportamiento del perfil de concentración (fracción molar del agua) en la etapa de adsorción en función de la coordenada axial o longitud discretizada ( $z$  o nodos) para diferentes valores de tiempo de operación.

Se pueden observar líneas continuas y discontinuas a diferentes segundos durante la etapa de adsorción cuando se está en el CSS, la columna empacada es saturada (línea color azul) con agua después de 345 s. Así mismo, se presenta el perfil de temperatura en función la coordenada axial o longitud discretizada ( $z$  o nodos) a diferentes segundos como se muestra en la Fig. 5. Se observa el incremento de la temperatura al final de la columna, debido a la energía exotérmica que se presenta. El efecto de la temperatura provoca que exista una mala adsorción al final de la columna.

Además se presenta en la Fig. 6 el perfil de la concentración (fracción molar del agua) en función de la coordenada axial o longitud discretizada ( $z$  o nodos) en el paso de regeneración de la columna, cuando se está en el CSS.

Al disminuir la presión en la columna, parcialmente la zeolita comienza a liberar el agua adsorbida y la concentración del vapor de agua aumenta en la parte superior de la columna (nodo 0). El perfil en 0 s de la Fig. 6 corresponde con el último perfil de la Fig. 4 equivalente a los 345 s de la etapa de adsorción. En los primeros segundos de la etapa de regeneración una parte pequeña de agua es liberada, como se observa en los perfiles de los 35 s. A medida que se aproximan a un valor menor a la presión atmosférica, estos perfiles axiales

de la concentración gaseosa de agua presentan un valor mínimo, mostrando que el agua que existía en el adsorbente ha sido retirada en su totalidad. Estos perfiles son descritos en los tiempos 270 y 345 s. Los perfiles axiales de concentración de agua comienzan a estar cercanos a 0, esto es a medida que se presente una pequeña purga. Por otro lado, la etapa de regeneración es un proceso endotérmico y por consiguiente la temperatura en la columna está disminuyendo en la parte final, como se observa en la Fig. 7. Una vez más los perfiles de temperatura se mueven, llevándola de un valor elevado a uno bajo, en donde el punto caliente es finalmente reducido.

Los perfiles de presión y temperatura en función del tiempo estando en el CSS se muestran en la Fig. 8.

Se puede observar que existen incrementos en el perfil de temperatura como se muestra en la Fig. 5, esto es debido a la energía que se desprende. Por lo tanto es importante poder controlar esos incrementos debido a que no favorecen la adsorción dentro de la columna. La comprensión de la dinámica de la columna y la interpretación de los perfiles del ciclo CSS es muy útil para entender el rendimiento del proceso.

### 3 Identificación de un modelo reducido (Hammerstein-Wiener)

El desempeño de estos procesos se representa matemáticamente con modelos complejos, altamente no lineales, de parámetros distribuidos (Simo y col., 2008; Kupiec y col., 2009). Estos modelos no son adecuados para el diseño de los controladores, ya que implican altos costos computacionales para realizar el diseño del controlado MPC Óptimo. Es importante entonces identificar un modelo reducido o simplificado, que sea adecuado para el diseño de controladores. Existen diferentes propuestas en la literatura sobre el modelado orientado al control del proceso PSA, en los que se utiliza el método de identificación para obtener un modelo lineal que relaciona la variable de controlada (pureza del producto obtenido) con la variable manipulada (tiempo de adsorción). (Bitzer y col., 2005) presenta un modelo Hammerstein para el diseño del controlador, el cual se compone por dos bloques conectados en serie; un bloque no lineal (ganancia estática) obtenido por el método de ajuste de curvas y

Table 4: Análisis de sensibilidad

Simulación	$T_F$ K	$t$ (s)	$Y_w$	$P_F$ (bar)	$P_p$ (bar)	Apertura de la válvula (VA) $Kmol/s/hr$	Pureza <sub>e</sub> (wt%)	Ciclos	Sensibilidad
1	393.15	15	0.22	2	0.1379	0.3	99.546	42	
2	373.49	15	0.22	2	0.1379	0.3	99.560	30	-0.002
3	412.80	15	0.22	2	0.1379	0.3	99.482	30	0.012
4	393.15	14	0.22	2	0.1379	0.3	99.530	11	0.003
5	393.15	16	0.22	2	0.1379	0.3	99.550	10	-0.0008
6	393.15	15	0.22	2	0.1379	0.3	99.503	19	0.008
7	393.15	15	0.23	2	0.1379	0.3	99.588	17	-0.008
8	393.15	15	0.21	1.9	0.1379	0.3	99.523	23	0.004
9	393.15	15	0.22	2.1	0.1379	0.3	99.506	22	0.007
10	393.15	15	0.22	2	0.131	0.3	99.501	12	0.009
11	393.15	15	0.22	2	0.144	0.3	99.582	13	-0.007
12	393.15	15	0.22	2	0.1379	0.315	99.493	20	0.005
13	393.15	15	0.22	2	0.1379	0.285	99.590	21	-0.008

Simulación 1: Presenta los valores nominales de la operación desde el arranque hasta llegar al CSS.

un bloque lineal (parte dinámica) obtenido mediante el toolbox de MatLab. (Khajuria y Pistikopoulos, 2011; Khajuria y Pistikopoulos, 2013) utilizó señales de amplitud aleatoria aplicadas a la entrada (tiempo de adsorción) para perturbar el sistema en lazo abierto y obtener la salida correspondiente a la entrada. Estos datos (entrada y salida) fueron utilizados para obtener un modelo lineal (espacio de estados) utilizando la herramienta de identificación de MatLab.

Para este caso en particular se realizó un estudio paramétrico (simulación en lazo abierto). Este análisis de sensibilidad permitió analizar la influencia de las siguientes variables sobre la pureza del producto obtenida al llegar al CSS (Cantero y col., 2017; Vargas y col., 2011): temperatura de producción, tiempo de purga, composición de alimentación, presión de producción, presión de purga, y apertura de la válvula de alimentación (VA). El proceso se simuló con variaciones de  $\pm 5\%$  (una entrada escalón). En las entradas citadas fue registrada la pureza del etanol, el número de ciclos necesarios para alcanzar el nuevo CSS y la sensibilidad calculada, de acuerdo con la expresión:

$$S = \frac{\text{Cambio en variable medida}(\%)}{\text{Cambio en variable manipulada}(\%)} \quad (17)$$

A partir de este estudio paramétrico se definió la variable manipulada (entrada) a cargo del control de la pureza deseada (salida).

Los resultados del estudio paramétrico se resumen

en la tabla 4.

En donde se observó que a través de un análisis el índice de sensibilidad son del mismo promedio. El coeficiente de sensibilidad resultó mayor para variaciones de la apertura de la válvula de alimentación (VA), indicando una influencia más importante de esta entrada sobre la pureza; sin embargo, también se observó que al cambiar el valor de la apertura de la válvula de alimentación (VA) el estado pseudo-estacionario se alcanza con un mayor número de ciclos y además la pureza aumenta cuando la apertura de la válvula disminuye. La temperatura, el tiempo de purga y la composición de alimentación tienen una influencia muy similar en la pureza del producto, y alcanzan el nuevo estado pseudo-estacionario en un menor número de ciclos. También se observaron variaciones pequeñas con la presión de producción comparadas con la presión de purga que presenta un mayor efecto sobre la pureza del producto y logra llegar en menos ciclos que la apertura de la válvula (VA), sin embargo en este trabajo se utilizó el programa Aspen-Adsorption enlazado con MatLab/Simulink para simular y hacer el control del proceso PSA. Para algunos casos se observó que al compilar los dos programas no es posible simular el proceso ya que al utilizar las variables que no tienen un tiempo continuo como: presión de purga y tiempo de purga, estas presentan un error de sincronización por el tiempo de muestreo ya que Aspen-Adsorption debe compilar por lo menos un tiempo de alguno de los pasos (adsorción, despresurización, purga y

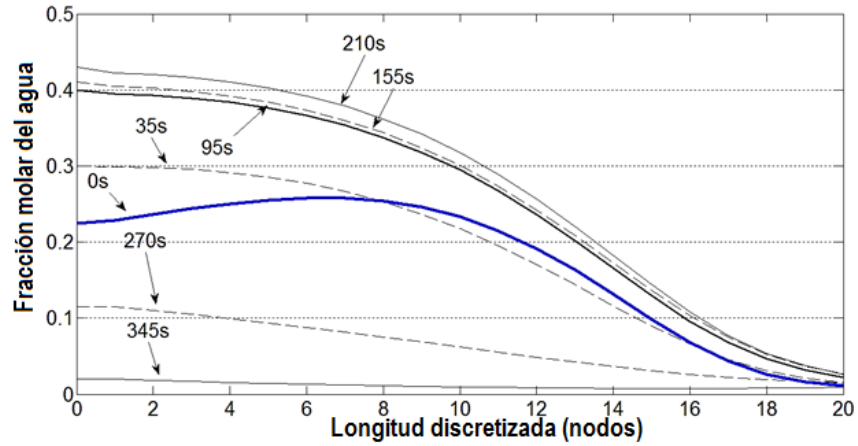


Fig. 6: Perfiles de concentración en función de la coordenada axial (nodos) durante la etapa de regeneración.

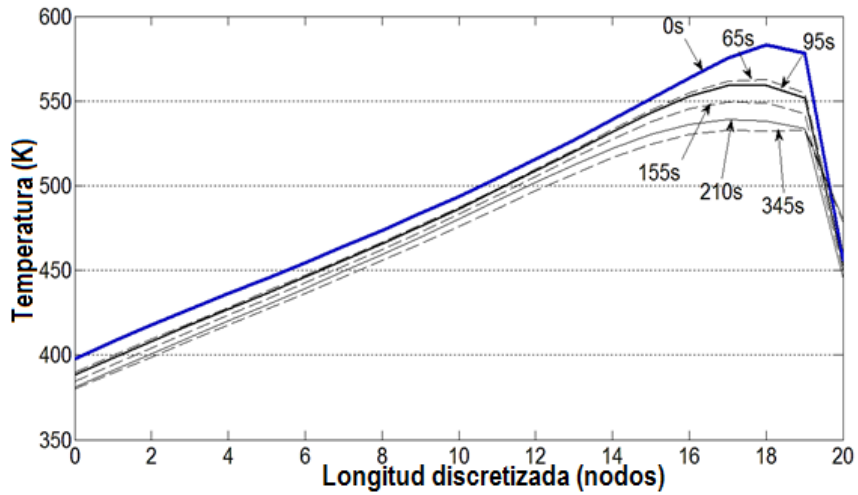


Fig. 7: Perfiles de temperatura a diferentes tiempos, en la etapa de regeneración.

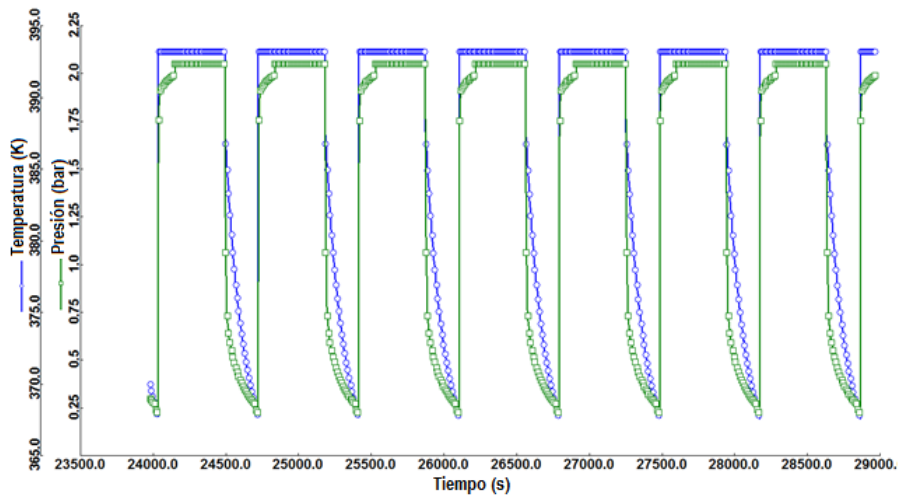


Fig. 8: Perfiles de presión y temperatura en función del tiempo estando en el CSS.

represurización) continuamente.

Por lo tanto, en este trabajo se definió como variable manipulada la apertura de la válvula de alimentación (VA) a partir del análisis de sensibilidad debido a que es una variable continua en cada paso o etapa del proceso y puede llevar el mismo tiempo de muestreo que MatLab/Simulink. Se utilizó una PRBS de 7 bits para excitar el modelo riguroso PSA, en el cual se tomaron algunas consideraciones importantes:

Por lo tanto, en este trabajo se definió como variable manipulada la apertura de la válvula de alimentación (VA) a partir del análisis de sensibilidad debido a que es una variable continua en cada paso o etapa del proceso y puede llevar el mismo tiempo de muestreo que MatLab/Simulink. Se utilizó una PRBS de 7 bits para excitar el modelo riguroso PSA, en el cual se tomaron algunas consideraciones importantes:

- Se deben aplicar escalones con un valor por encima del 68%, ya que con un porcentaje menor el modelo identificado no captura las dinámicas importantes del modelo riguroso PSA. Sin embargo, al utilizar porcentajes arriba del 20 % perturba (excita) demasiado al modelo PSA y se genera una mala identificación.
- Para generar la PRBS es necesario determinar el tiempo en que el sistema alcanza nuevamente el CSS, después de haber aplicado el escalón del 68% como se muestra en la Fig. 9. La PRBS debe contener al menos un escalón del 68% con el tiempo de establecimiento en que llega nuevamente al CSS.

En este trabajo se presentan dos tipos de entradas uno escalón del 20% y otro del 68% (apertura de la válvula de alimentación) aplicados al llegar al CSS las cuales se muestran en las Figs. (10)-(12), la simulación se realizó en lazo abierto utilizando el modelo riguroso PSA con un tiempo de muestreo de 1 s, con el objetivo de obtener un modelo reducido que capture las dinámicas importantes del modelo riguroso PSA. Las Figs. (11b)-(13b) muestran la respuesta de las salidas en función de las entradas (PRBS de 7 bits) empleadas que se muestran en las Figs. (11a)-(13a). La variable de entrada seleccionada en este estudio no presenta las consideraciones que establecen en (Bitzer y col., 2005; Khajuria y Pistikopoulos, 2011; Peng y col., 2011) donde se considera una variable que no es continua y por lo tanto en cada nuevo ciclo tienen que ser actualizada o hacer un ajuste del tiempo de adsorción que presenta su entrada establecida, ya que

el intervalo de muestreo no es fijo o continuo para el proceso PSA. Por lo tanto ese problema conlleva a aumentar el costo computacional (medición) y el tiempo empleado en el análisis de las muestras de la pureza.

El escalón de la Fig. 10 se aplicó después de haber llegado al CSS, con un tiempo de convergencia de 9960 s (14 ciclos) para utilizarlo en la PRBS que se presenta en la Fig. 11a.

Se puede observar en la Fig. 11b la respuesta de salida (utilizando la PRBS de 7 bits que involucra el escalón del 20%).

El escalón de la Fig. 12 se aplicó después de haber llegado al CSS, con un tiempo de convergencia de 14490 s (21 ciclos) para utilizarlo en la PRBS que se presenta en la Fig. 13a.

Se puede observar en la Fig. 13b la respuesta de salida (utilizando la PRBS de 7 bits que involucra el escalón del 68%).

Los datos de entrada y salida obtenidos a partir del modelo riguroso PSA se utilizaron para la identificación de un modelo reducido. En este trabajo se utilizó el Toolbox de identificación de MatLab, dando como resultado una buena identificación para el caso del escalón del 68% con un ajuste del 86.9 % como se observa en la Fig. 14. Para el caso del escalón del 20%, la identificación del modelo reducido obtenido tuvo una aproximación menor del 60% sobre el modelo riguroso PSA y no es suficiente ya que no captura las dinámicas importantes, por lo tanto el modelo reducido que se utilizará en este trabajo será el que se obtuvo con el escalón del 68%.

### 3.1 Modelo reducido (Hammerstein-Wiener)

El modelo reducido identificado que se utilizó fue un Modelo Hammerstein-Wiener, el cual está conformado por 3 bloques como son: entrada no-lineal (ganancia estática) marcado con líneas punteadas color rojo, bloque lineal (parte dinámica), salida no-lineal (ganancia estática) marcado con líneas punteadas color azul, estos están conectados en serie como se observa en la Fig. 15.

Los valores o puntos de quiebre de los bloques de entrada y salida no lineales (ganancias estáticas) son dados por el toolbox de MatLab así como también la función de transferencia del bloque lineal.

- Entrada no lineal (ganancias estáticas con 5 puntos de quiebre)

Table 5: Funciones del bloque no lineal de entradas.

Entrada, $U_t$	valor no-lineal estático, $U_L$
0.065	-0.0754
0.267	-0.0222
0.280	-0.0231
0.293	-0.0247
0.542	0.0054

Table 6: Funciones del bloque no lineal de salidas.

Entrada, $Y_L$	valor no-lineal estático, $Y_t$
-13.584	0.98843
-7.008	0.98849
-1.963	0.98846
3.160	0.98842
10.212	0.98837

- Salida no lineal (ganancias estáticas con 5 puntos de quiebre)
- Bloque lineal (zeros=2 y polos=3)

$$\frac{B(q)}{F(q)} = \frac{q^{-1} - 0.8944q^{-2}}{1 - 0.933q^{-1} + 0.8689q^{-2} - 0.9349q^{-3}} \quad (18)$$

Para validar el modelo identificado (Hammerstein-Wiener) se aplicó el mismo escalón del 68% que se utilizó al modelo riguroso PSA y se observó que el comportamiento del modelo reducido mostrado en la Fig. 16 es similar al del modelo riguroso PSA mostrada en la Fig. 12.

El modelo Hammerstein-Wiener representa el comportamiento dinámico del modelo riguroso PSA de manera adecuada. Por lo tanto a partir de este modelo, se prosiguió a realizar el diseño del controlador MPC óptimo.

#### 4 MPC Óptimo basado en un modelo Hammerstein-Wiener

El objetivo principal del controlador MPC Óptimo es regular la pureza establecida como referencia

a 0.9884 de fracción molar (99.50% en peso de etanol), rechazando perturbaciones de entrada como son; Temperatura de alimentación, Composición de alimentación y el tiempo de purga. Para hacer el diseño del controlador se obtuvieron las funciones inversas de los 2 bloques no lineales estáticos (entrada y salida) del modelo Hammerstein-Wiener como se muestra en la siguiente Fig. 17. En donde ahora el bloque de entrada (ganancia estática) pasara a ser la salida (función inversa del bloque de entrada) y el bloque de salida (ganancia estática) pasara a ser la entrada (función inversa del bloque de salida) del modelo Hammerstein-Wiener.

Las funciones inversas de los bloques de entrada y salida no lineales estáticos son una relación construida por segmentos de rectas que, combinadas, aportan la relación no lineal entre dos variables. Cada señal se reproduce con 3 diferentes ecuaciones de rectas, dependiendo del valor de la señal de entrada se toma sólo una de las ecuaciones de recta. Las funciones inversas calculadas que representan los bloques de entrada y salida no lineal son las que se muestran en las tablas (7)-(8), respectivamente. El bloque de entrada no-lineal representa la relación que existe entre la señal  $U_t$  y  $U_L$  del modelo Hammerstein-Wiener como se observa en la Fig. 18. Estas funciones inversas fueron calculadas tomando en cuenta el rango de variación de  $U_t$  y  $Y_t$  presente en los datos de la simulación.

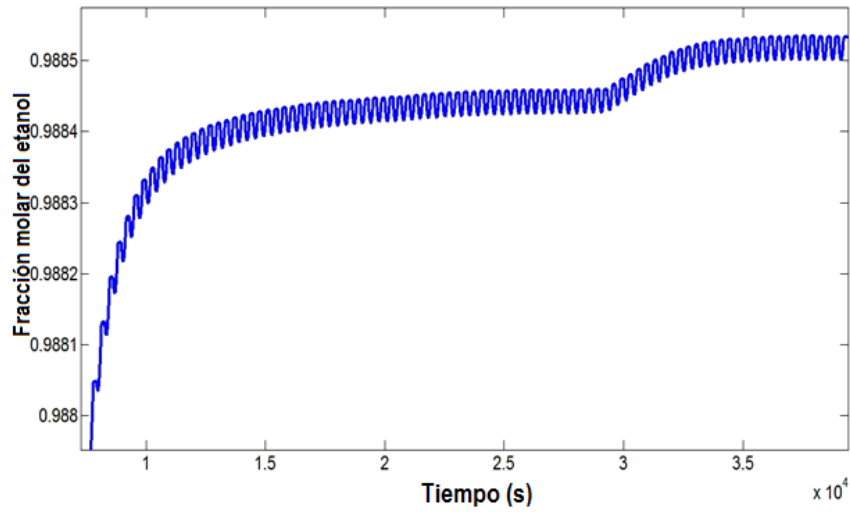


Fig. 9: Simulación dinámica de la fracción molar del etanol desde el arranque de la planta, hasta llegar al CCS.

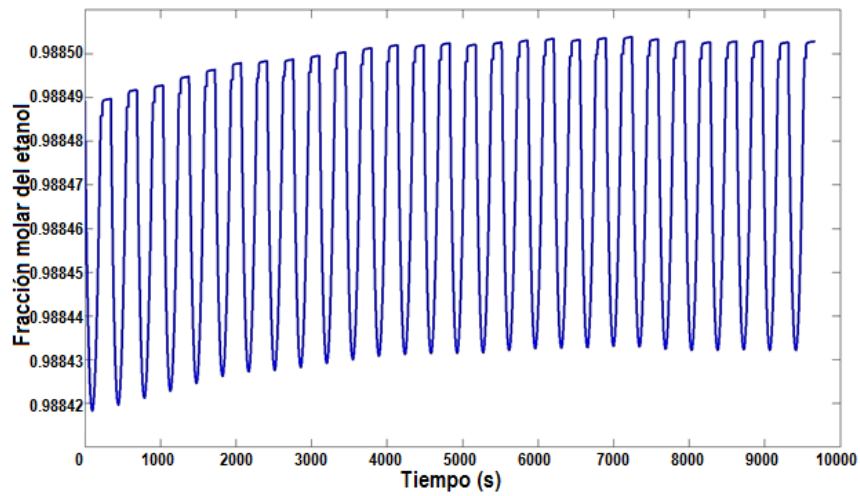


Fig. 10: Vista aumentada de la pureza obtenida a través del modelo riguroso PSA después de aplicar un escalón del 20 %.

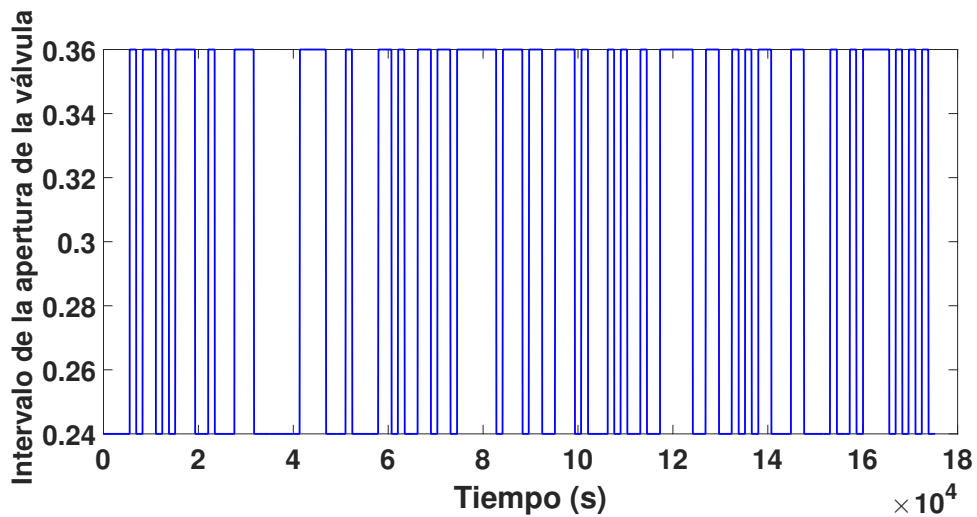


Fig. 11: PRBS de 7 bits con un periodo de muestreo de 1380 s.

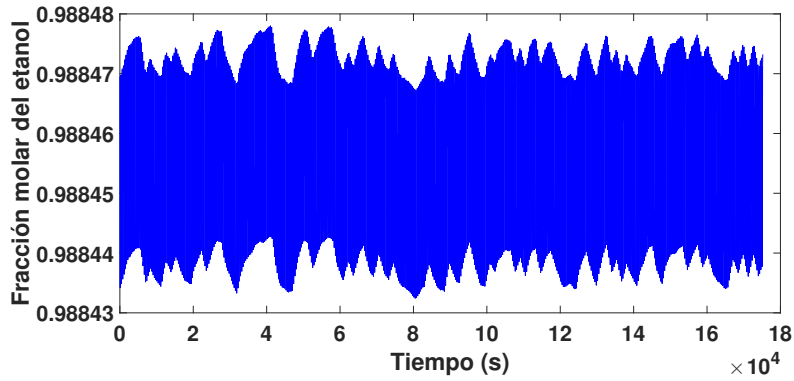


Fig. 12: Respuesta de salida (Utilizando la PRBS de 7 bits que involucra el escalón del 20%).

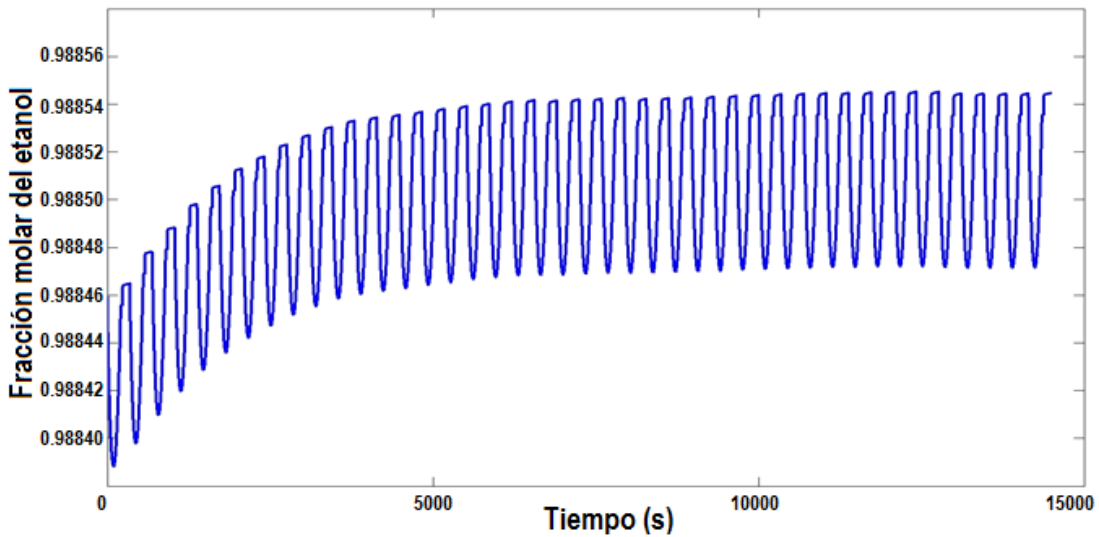


Fig. 13: Vista aumentada de la pureza obtenida a través del modelo riguroso PSA después de aplicar un escalón del 68%.

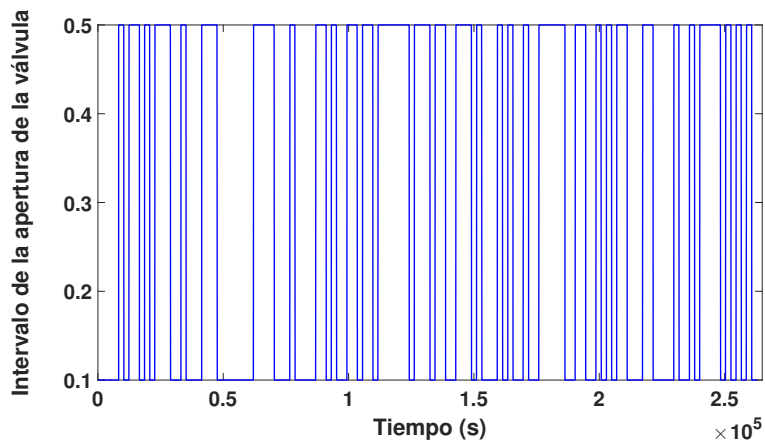


Fig. 14: PRBS de 7 bits con un periodo de muestreo de 2070 s.

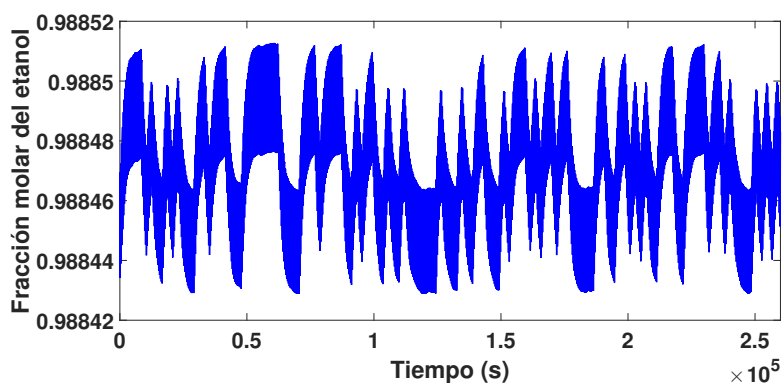


Fig. 15: Respuesta de salida (Utilizando la PRBS de 7 bits que involucra el escalón del 68%).

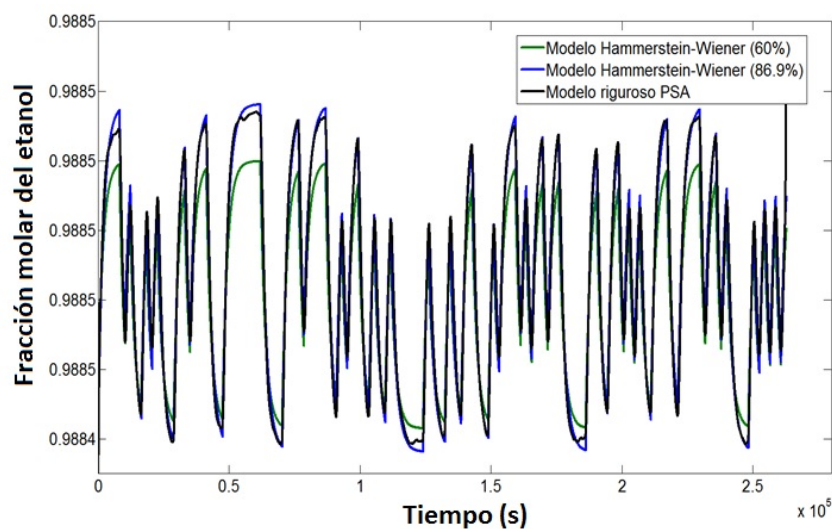


Fig. 16: Comparación del modelo riguroso PSA con los modelos identificados con un ajuste de 86.9% y 60%.

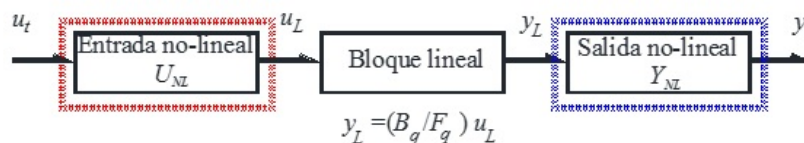


Fig. 17: Estructura a bloques del modelo Hammerstein-Wiener.

Table 7: Funciones inversas del bloque no lineal de entradas.

Entrada, $U_L$	Funciones, $U_t$
$-0.022 > U_L \geq -0.079$	$U_t = 3.951 * U_L + 0.354$
$-0.022 > U_L \geq -0.023$	$U_t = 13.908 * U_L - 0.041$
$-0.023 > U_L \geq -0.024$	$U_t = 0.078 * U_L - 8.710$
$8.339 > U_L \geq -0.024$	$U_t = 8.064 * U_L + 0.492$



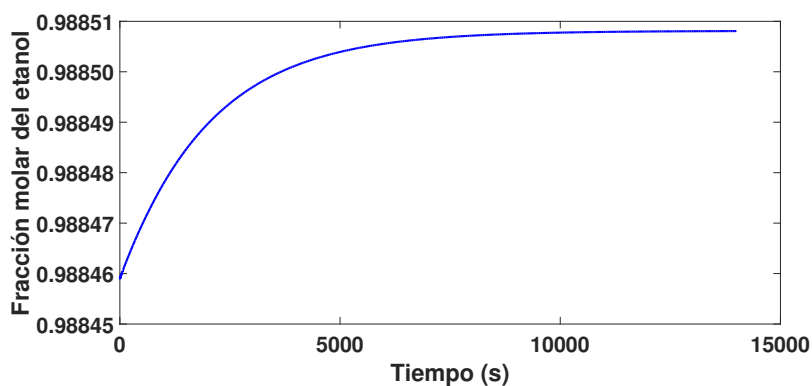


Fig. 18: Validación del modelo Hammerstein-Wiener identificado, aplicando un escalón del 68 % en la entrada.

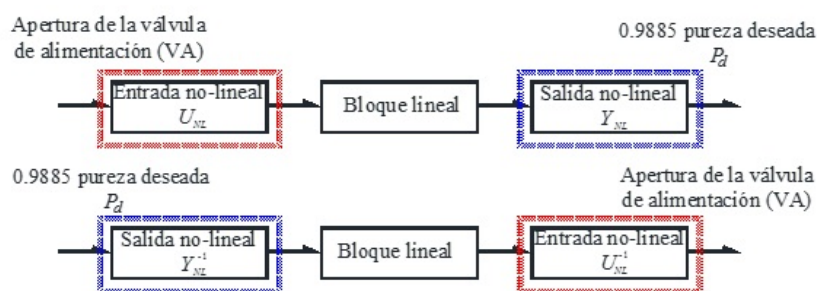


Fig. 19: Modelo Hammerstein-wiener con las funciones inversas de los bloques no-lineales (ganancias estáticas).

Table 8: Funciones inversas del bloque no lineal de salidas.

Entrada, $Y_t$	Funciones, $Y_L$
$0.98844 > Y_t \geq 0.98849$	$Y_L = 87943.012 * Y_t - 86940.462$
$0.98849 > Y_t \geq 0.98846$	$Y_L = 137583.518 - 139191.381 * Y_t$
$0.98846 > Y_t \geq 0.98842$	$Y_L = 140298.083 - 141937.630 * Y_t$
$0.9883 > Y_t \geq 0.98842$	$Y_L = 95376.894 - 96515.780 * Y_t$

Para el bloque de salida no-lineal las funciones que relacionan las señales  $Y_L$  y  $Y_t$  del modelo Hammerstein-Wiener se evidencian en la Fig. 19 y en la tabla 8 se muestran las 3 diferentes ecuaciones de rectas que se forman entre los puntos.

Como  $U_{NL}$  actúa en el puerto de entrada del bloque lineal, esta función se denomina no linealidad de entrada. Similarmente, como  $Y_{NL}$  actúa en el puerto de salida del bloque lineal, esta función se denomina no linealidad de salida. Si el sistema contiene varias entradas y salidas, se definen las funciones  $U_{NL}$  y  $Y_{NL}$  para cada señal de entrada y salida. No siempre es necesario incluir bloques no lineales tanto en la entrada como en la salida en la estructura del modelo.

La parte del bloque lineal se transformó la función de transferencia representada por la Ec. (18) a espacio de estados quedando de la siguiente manera:

$$A = \begin{bmatrix} 0.933037058976218 & -0.868926731888269 & & & \\ & 1 & & 0 & \\ & 0 & & 1 & \\ & & & & 0.934902098772051 \\ & & & & 0 \\ & & & & 0 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; C = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -0.89438323391294 \end{bmatrix}$$

(19)

Donde  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $u \in \mathbb{R}^m$ ,  $y \in \mathbb{R}^p$ ,  $k$  representan: los estados, las entradas de control, las salidas del sistema y el instante de muestreo (1 segundo), respectivamente.

#### 4.1 Diseño del controlador MPC Óptimo

El control MPC Óptimo es una variación del control predictivo en espacio de estado, el cual se basa en el uso de predicciones en modo dual (Rossiter y col., 1998) y el paradigma de lazo cerrado (Rossiter, 2003). El paradigma de lazo cerrado se basa en el diseño de una ganancia de retroalimentación de estado  $\mathbf{K}$  con el objetivo de poder realizar las predicciones en lazo cerrado. Al realizar las predicciones en lazo cerrado se garantiza la estabilidad del sistema al poder incluir la cola de la predicción como posibles predicciones en el siguiente instante de muestreo, además, se garantiza que la función costo sea una función de Lyapunov

(Sorcia y col., 2015). En (Rossiter, 2003) se muestra el concepto de predicciones en modo dual y el concepto de predicciones en lazo cerrado.

El diseño del control MPC Óptimo se basa en el modelo lineal en espacio de estado en tiempo discreto sin considerar perturbaciones, en este caso, de la forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{A}\mathbf{x}_k + \mathbf{B}\mathbf{u}_k \\ \mathbf{y}_k &= \mathbf{C}\mathbf{x}_k, \end{aligned} \quad (20)$$

donde  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ ,  $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$  y  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$ , son el estado, las entradas de control y las salidas del sistema.

Se aplica al sistema una ley de control basada en una ganancia de retroalimentación de estados óptima tipo LQ. Dicha ley de control tiene la forma:

$$\mathbf{u}_k - \mathbf{u}_{ss} = -\mathbf{K}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{ss}), \quad (21)$$

donde  $\mathbf{x}_{ss}$  y  $\mathbf{u}_{ss}$  son los valores de estado estable del sistema, en (Muske y col., 1993) se dan los detalles para la obtención de  $\mathbf{P}_x$  y  $\mathbf{P}_u$ , los cuales se obtienen mediante:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{ss} &= \mathbf{P}_x \mathbf{r}_k \\ \mathbf{u}_{ss} &= \mathbf{P}_u \mathbf{r}_k, \end{aligned} \quad (22)$$

donde  $\mathbf{r}_k \in \mathbb{R}^p$  es la referencia.

En función de la ganancia de retroalimentación  $\mathbf{K}$ , se establecen las predicciones de la entrada de control sobre el horizonte  $n_c$  de la manera siguiente:

$$\mathbf{u}_{k+i} - \mathbf{u}_{ss} = \begin{cases} -\mathbf{K}(\mathbf{x}_{k+i} - \mathbf{x}_{ss}) + \mathbf{c}_{k+i} & i = 0, \dots, n_c - 1 \\ -\mathbf{K}(\mathbf{x}_{k+i} - \mathbf{x}_{ss}) & i \geq n_c \end{cases}, \quad (23)$$

donde  $\mathbf{c}_{k+i}$  es una señal de compensación que se añade a la entrada de control, la cual garantiza el cumplimiento de las restricciones del control predictivo. El modelo ha utilizado en las ecuaciones de predicción las siguientes:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{k+i,k} &= \Phi \mathbf{x}_{k+i} + \mathbf{B}\mathbf{u}_{k+i} \\ \mathbf{u}_{k+i} &= -\mathbf{K}\mathbf{x}_{k+i} + \mathbf{P}_r \mathbf{r}_{k+i} + \mathbf{c}_{k+i}, \end{aligned} \quad (24)$$

donde  $\Phi = \mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{K}$  y  $\mathbf{P}_r = \mathbf{K}\mathbf{P}_x + \mathbf{P}_u$ . Con este modelo se realizan las predicciones de los estados y de las entradas de control. Las ecuaciones de predicción, definidas en el horizonte de predicción  $n_y$ , están dadas por:

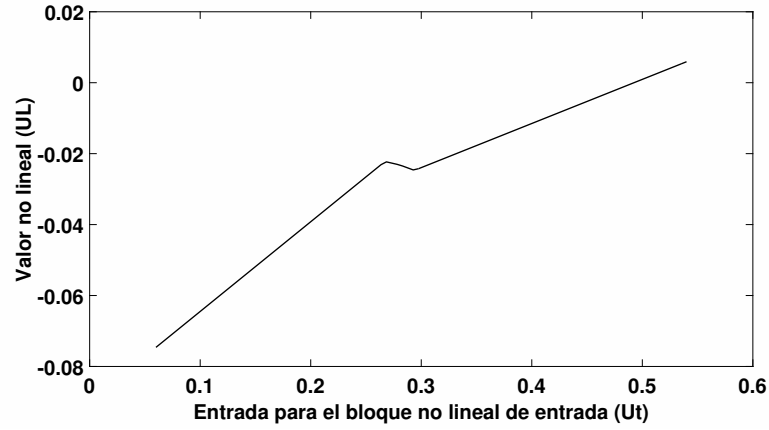


Fig. 20: Bloque no lineal estático para la entradas.

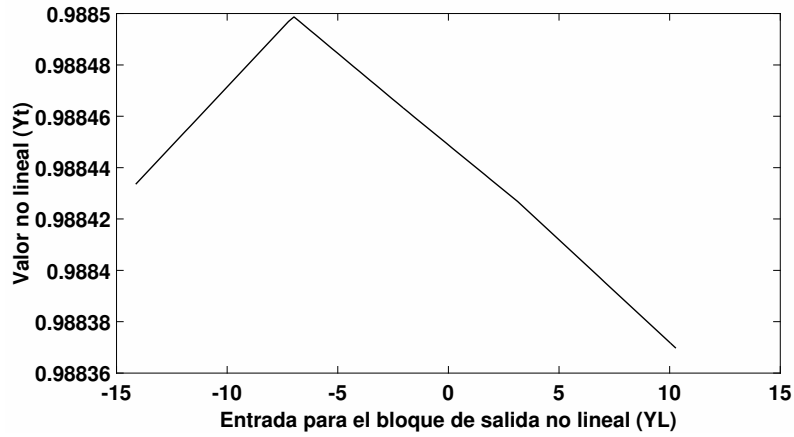


Fig. 21: Bloque no lineal estático para la salidas.

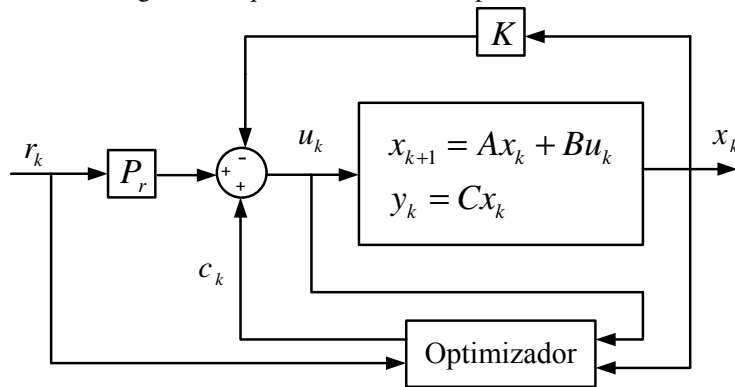


Fig. 22: Esquema del MPC óptimo.

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{x}}_k &= \mathbf{P}_{cl}\underline{\mathbf{x}}_k + \mathbf{H}_c \underline{\mathbf{c}}_k + \mathbf{P}_{rx}\mathbf{r}_k \\ \underline{\mathbf{y}}_k &= \mathbf{P}_{cly}\underline{\mathbf{x}}_k + \mathbf{H}_{cy} \underline{\mathbf{c}}_k + \mathbf{P}_{ry}\mathbf{r}_k \\ \underline{\mathbf{u}}_k &= \mathbf{P}_{clu}\underline{\mathbf{x}}_k + \mathbf{H}_{cu} \underline{\mathbf{c}}_k + \mathbf{P}_{ru}\mathbf{r}_k \\ \underline{\Delta\mathbf{u}}_k &= \mathbf{P}_{\Delta u} \underline{\mathbf{u}}_k - \mathbf{P}_{u_{k-1}} \mathbf{u}_{k-1}. \end{aligned} \quad (25)$$

Un componente esencial del control predictivo es la función costo a optimizar que se deriva de una función costo de horizonte infinito. De aquí se demuestra que con la ganancia  $\mathbf{K}$ , siendo ésta una ganancia de retroalimentación de estado óptima LQ. La función costo es una función de Lyapunov, con lo cual se garantiza la estabilidad del control predictivo (Rossiter, 2003). Por lo tanto la función costo a optimizar en términos de  $\underline{\mathbf{c}}_k$  es:

$$J_c = \|\underline{\mathbf{c}}_k\|_{\mathbf{W}}^2. \quad (26)$$

en donde  $\mathbf{W} = \text{diag}(\mathbf{B}\mathbf{P}\mathbf{B} + \mathbf{R})$ , con  $\mathbf{R} > 0$ ,  $\mathbf{B}\mathbf{P}\mathbf{B} > 0 \Rightarrow \mathbf{W} > 0$ .  $\mathbf{P}$  se obtiene de la solución de la siguiente ecuación de Lyapunov:

$$\Phi^T \mathbf{P} \Phi = \mathbf{P} - \Phi^T \mathbf{Q} \Phi - \mathbf{K}^T \mathbf{R} \mathbf{K}. \quad (27)$$

Las matrices de ponderación  $\mathbf{R}$  y  $\mathbf{Q} \geq 0$ , son las matrices de sintonización del controlador.

Otro componente importante del control predictivo son las restricciones, las cuales mantienen al proceso dentro de los límites de operación deseados. Éstas pueden acotar las entradas de control, los incrementos de las entradas de control, los estados y las salidas del proceso. En forma general las restricciones se definen como:

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{x}} \leq \underline{\mathbf{x}}_k \leq \bar{\mathbf{x}} \quad \underline{\mathbf{u}} \leq \underline{\mathbf{u}}_k \leq \bar{\mathbf{u}} \\ \underline{\mathbf{y}} \leq \underline{\mathbf{y}}_k \leq \bar{\mathbf{y}} \quad \underline{\Delta\mathbf{u}} \leq \underline{\Delta\mathbf{u}}_k \leq \bar{\Delta\mathbf{u}}. \end{aligned} \quad (28)$$

De la sustitución de las ecs. (25) de predicción en las ecs. (28) de las restricciones se obtienen las nuevas restricciones de la forma:

$$\mathbf{M}_c \underline{\mathbf{c}}_k \leq \mathbf{q}_c(\underline{\mathbf{x}}_k, \mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{r}_k). \quad (29)$$

Donde  $\mathbf{M}_c$  es una matriz de coeficientes constantes que se calcula fuera de línea. El problema de programación cuadrática a resolver se plantea a partir de la función costo Ec. (26) y las restricciones Ec. (29):

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{c}}_k^* &= \arg \min_{\underline{\mathbf{c}}_k} J_c \\ \text{s.t. } \mathbf{M}_c \underline{\mathbf{c}}_k &\leq \mathbf{q}_c(\underline{\mathbf{x}}_k, \mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{r}_k). \end{aligned} \quad (30)$$

En la Fig. 20 de forma esquemática la implementación del control MPC Óptimo. Como se observa en esta figura, el optimizador depende de los estados, de la señal de control y de la referencia.

Para sintonizar el controlador MPC óptimo se utilizó el bloque lineal y las funciones inversas de los 2 bloques no lineales estáticos como se observa en la Fig. 21. En este punto se establecieron las restricciones para el controlador, ya que es de gran importancia definir los límites del flujo que logra pasar por la válvula de alimentación y los límites de pureza presentados en fracción molar.

La restricción para la señal de control se definió de la manera siguiente:

$$-0.1 \leq u_k \leq 0.5 \quad (31)$$

Donde  $u_k$  es señal generada por el MPC Óptimo, la cual está restringida en el rango mencionado anteriormente, esta señal que genera el controlador se introduce en el bloque no-lineal (función inversa del bloque de entrada), el cual nos arroja la entrada real (valor de la apertura de la válvula de alimentación). La señal de control aplicada a la válvula debe estar contenida en el rango siguiente:

$$0.1 \text{ (VA)} \leq u_k \leq 1 \text{ (VA)} \quad (32)$$

Otras de las consideraciones que se plantean para el controlador, es la restricción de la salida del modelo lineal, el cual está definida como  $y_L$ , esta debe estar comprendida en este rango:

$$0 \leq y_L \leq -7 \quad (33)$$

Para la salida de la pureza obtenida se estableció la siguiente restricción:

$$y_k \leq 1 \quad (34)$$

Donde  $y_k$  es la salida (fracción molar o pureza obtenida del etanol) del modelo riguroso PSA en la cual la restricción es que no puede ser mayor a 1.

El controlador se sintonizó de tal forma que se lograra llegar a la pureza deseada en menos tiempos de ciclos ante perturbaciones. Los parámetros de sintonización son:  $\mathbf{R}$  (matriz de ponderación de los estados),  $\mathbf{Q}$  (matriz de ponderación de la entrada de control),  $nc$  (horizonte de predicción de la entrada de control) y  $ny$  (Horizonte de predicción de las salidas).



Fig. 23: Esquema de control con el modelo Hammerstein-Wiener.

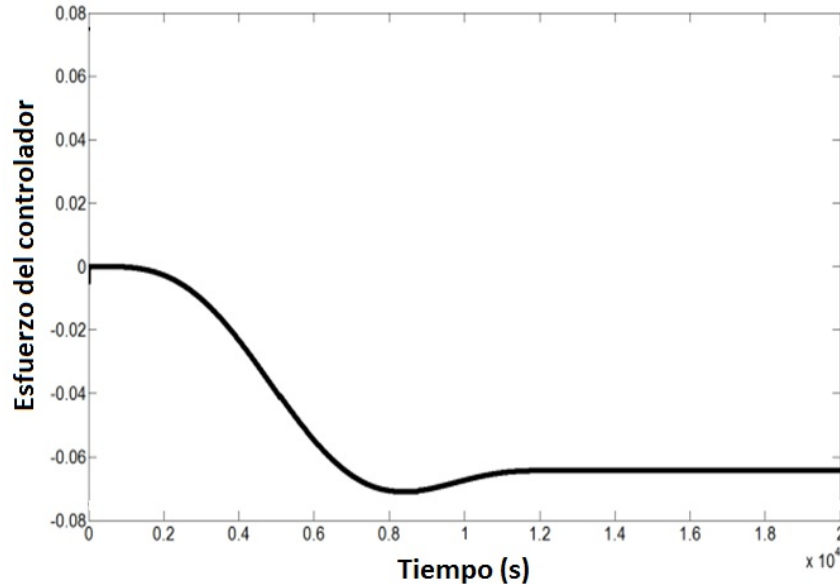


Fig. 24: Señal de control utilizando los parámetros de sintonización adecuados.

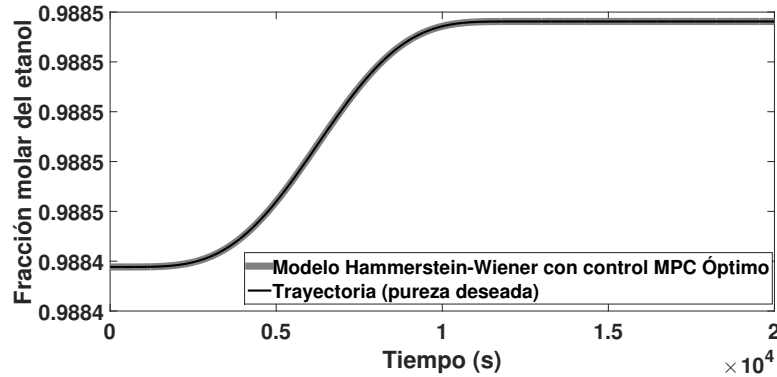


Fig. 25: Trayectoria de la Pureza deseada (Modelo Hammerstein-Wiener).

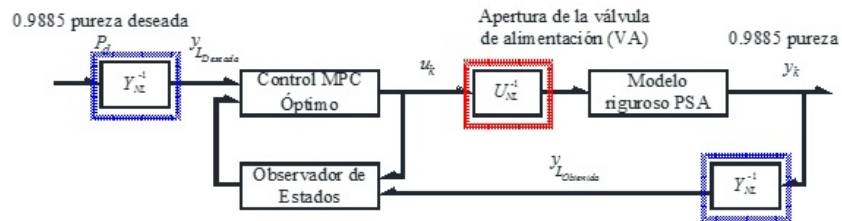


Fig. 26: Control MPC óptimo aplicado al modelo riguroso PSA utilizando la comunicación Aspen/Simulink.

Posteriormente se realizó la simulación utilizando el modelo Hammerstein-Wiener con el controlador MPC Óptimo como se muestra en la Fig. 22 y se observó que estableciendo a las matrices de ponderación:  $R=200$  y  $Q=1000$ , y a los horizontes de predicción y control:  $n_c=2$  y  $n_y=35$ , la señal de control (esfuerzo del controlador) y la evolución de las salidas es lenta pero con pocas oscilaciones o ruido.

Así mismo se visualiza que con la señal de control generada por el MPC Óptimo genera que se pueda regular al valor de pureza establecido, el cual es de 0.9884 a 0.9885 (fracción molar) como se muestra en la Fig. 23.

Después de haber logrado sintonizar los parámetros del controlador MPC Óptimo utilizando el modelo Hammerstein-Wiener se realizó la comunicación entre el programa Matlab/Simulink con Aspen-adsorption para poder simular y controlar el proceso PSA (modelo riguroso PSA). El modelo que se creó en Aspen-Adsorption se transportó como un bloque de funciones en Simulink y poder lograr la sincronización, estos dos programas trabajaron con el mismo periodo de tiempo (1 segundo), efectuando los 4 pasos del proceso PSA sin ningún problema y sin perder información (datos obtenidos al simular y controlar) en cada instante del tiempo de muestreo.

#### 4.2 Implementación del controlador MPC Óptimo al modelo riguroso PSA (lazo cerrado)

Como se mencionó anteriormente, es necesaria la utilización de las funciones inversas de los 2 bloques no lineales (entrada y salida) para implementar el controlador MPC Óptimo quedando el esquema como se muestra en la Fig. 24 de la siguiente forma:

Para evaluar el desempeño del controlador MPC óptimo diseñado, se implementó en el modelo riguroso PSA, donde se observó que sigue la trayectoria deseada (0.9984 a 0.9885), convergiendo en un menor número de ciclos (12420 segundos, equivalentes a 18 ciclos), como se observa en la Fig. 25. Por otra parte la simulación del modelo riguroso PSA sin control que se muestra en la Fig. 12, llega en 14940 segundos que son equivalentes a 21 ciclos.

La señal de control que genero el MPC Óptimo para lograr la pureza deseada cuando se aplicó al modelo riguroso PSA se muestra en la Fig. 26.

En la Fig. 26 se observa la señal de control que se generó, el cual se observa que a pesar del comportamiento dinámico (oscilaciones de presión) del modelo riguroso PSA, el controlador logra seguir

la trayectoria establecida, por lo tanto el modelo Hammerstein-Wiener funcionó adecuadamente para hacer el diseño del controlador MPC Óptimo ya que los resultados claramente demuestran los beneficios potenciales de la identificación obtenida del modelo riguroso PSA.

En un segundo conjunto de pruebas, el esquema de control propuesto fue evaluado por medio de un análisis ante perturbaciones, considerando uno a uno, cambios de la temperatura de alimentación, la fracción molar en la corriente de alimentación y la duración de purga. Las perturbaciones se introdujeron después de llegar al CSS (690 s es equivalente al tiempo de un ciclo y se requieren 42 ciclos para alcanzar el CSS a partir del arranque de la planta). En la Tabla 9 se proporciona la información sobre los cambios realizados en las entradas, así como el número de ciclos que se requirieron para alcanzar el estado pseudo-estacionario después de los cambios. El número de ciclos necesarios para establecer el CSS después de la perturbación se indica tanto para las simulaciones en lazo abierto como para las simulaciones en lazo cerrado. La comparación de la velocidad para alcanzar el CSS es también un indicador de la efectividad del control propuesto para mantener la regulación de la pureza ante las perturbaciones probadas.

En la Fig. 27 se observa el desempeño del controlador MPC óptimo para mantener la pureza de etanol ante una perturbación aplicada en la temperatura de alimentación, una perturbación aplicada en el tiempo de purga y una perturbación aplicada en la composición de alimentación. En general, las perturbaciones son atenuadas, especialmente después de 15000 segundos de operación; sin embargo las variaciones de pureza antes de alcanzar la referencia ocurren en un rango reducido, de 0.987 a 0.983.

Con este desempeño del controlador se logra mantener la pureza deseada dentro de un rango aceptable ante diferentes perturbaciones en la entrada. Las señales de control se muestran en la Fig. 27 b, d y f; en general, se requiere que la apertura de la válvula de alimentación disminuya en lugar de aumentar, pero esto ocasiona que se obtenga poca producción de etanol. Por otro lado, la perturbación que requiere una acción de control con menor amplitud es el cambio del tiempo de purga. Además, aplicando la perturbación la planta PSA en lazo abierto, la pureza baja hasta cerca del 0.95 y aun cuando la señal de control es de menor amplitud para el cambio del tiempo de purga, en lazo abierto, el efecto de la variación del tiempo de purga es más importante como se muestra en la Fig. 28.

Table 9: Condiciones y resultados de las pruebas del controlador con tres tipos de perturbaciones únicas en las entradas.

<b>Variable de entrada y valor nominal</b>	<b>Perturbación (%) (Nuevo valor de entrada)</b>	<b>Establecimiento Número de ciclos (con control)</b>	<b>Establecimiento Número de ciclos (sin control)</b>
Temperatura de alimentación (Valor nominal 393.15 K)	-8 (31 K)	15	100
Fracción molar en la alimentación (Valor nominal 0.22 fracción mol del agua)	15 (0.0462 fracción mol)	14	115
Duración de la purga (Valor nominal 15 s)	30 (4 s)	12	115

Table 10: Condiciones y resultados de las pruebas del controlador con tres tipos de perturbaciones simultáneas en las entradas.

<b>Variable de entrada y valor nominal</b>	<b>Perturbación (%) (Nuevo valor de entrada)</b>	<b>Establecimiento Número de ciclos (con control)</b>	<b>Establecimiento Número de ciclos (sin control)</b>
Temperatura de alimentación y duración de la purga (Valor nominal 393.15 K y 15 s)	-8 (31 K) 30 (4 s)	26	110
Composición de alimentación y temperatura de alimentación (Valor nominal 0.22 y 393.15 K)	15 (0.0462 fracción mol) -8 (31 K)	20	130
Duración de la purga y Composición de alimentación (valor nominal 15s y 0.22 fracción mol)	30(4 s) 15 (0.0462 fracción mol)	19	130

Observando la respuesta de la planta ante una perturbación en la temperatura de alimentación, en la Fig. 27 a, c y e, se hace evidente que la simulación en lazo abierto con este cambio en la entrada (temperatura

de alimentación) implica una desviación menor en la pureza del producto y como consecuencia, la variación de la señal de salida en lazo cerrado es también más suave en comparación con la salida producida en

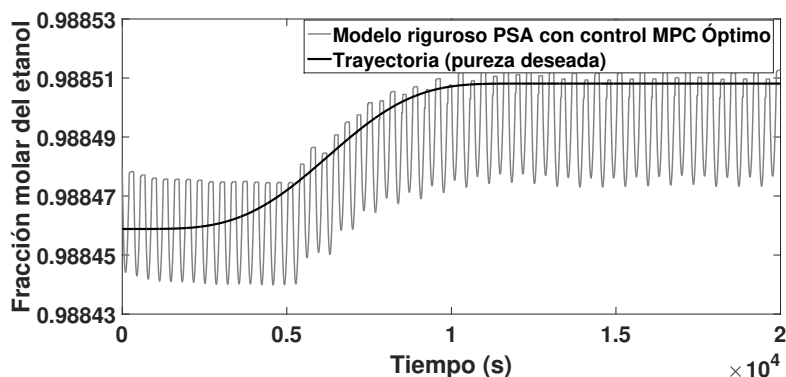


Fig. 27: Validación del modelo Hammerstein-Wiener identificado y comparación con la salida de la planta simulada mediante el modelo riguroso PSA.

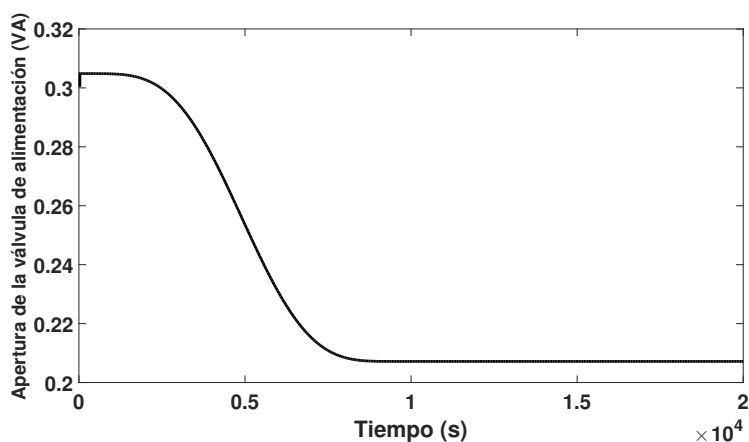


Fig. 28: Señal de control aplicada al modelo riguroso PSA.

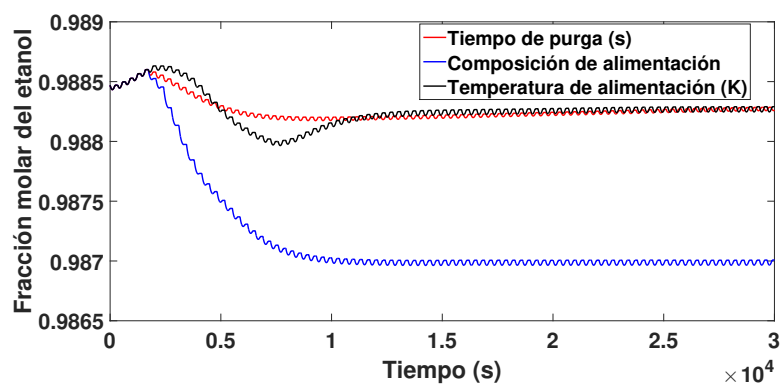


Fig. 29: Control de pureza de etanol expresada en fracción mol, aplicando perturbaciones en la temperatura de alimentación, en el tiempo de purga y en la composición de alimentación.



las otras pruebas; sin embargo, la acción requerida de control es mayor que la acción requerida para compensar el cambio del tiempo de purga. Finalmente, se observa que la desviación más grande en lazo abierto se produce cuando se induce un escalón en la composición de alimentación. Esto significa que la composición de alimentación tiene una influencia importante en la pureza del producto y el efecto que produce también se ve reflejado en la señal de control, ya que implica una entrada de control mayor que en las otras pruebas.

La diferencia entre las relaciones entrada-salida para las pruebas presentadas se debe a la naturaleza no lineal de la planta y se puede concluir que el hecho de usar un modelo identificado no lineal ayuda a obtener buenos resultados de control del proceso y atenuación de las perturbaciones, aun cuando se aplicó un controlador SISO para regulación y seguimiento de trayectoria en un proceso multivariable. De acuerdo con la Tabla 9, el establecimiento de la pureza del producto después de las perturbaciones fue menor para el control ante un escalón en el tiempo de purga, requiriendo 12 ciclos, contra 15 ciclos para regular la pureza ante un cambio en la temperatura de alimentación.

El controlador MPC Óptimo diseñado a partir de del modelo reducido (Hammerstein-Wiener) funciona correctamente logrando seguir y mantener la trayectoria deseada a pesar de que el modelo riguroso PSA es un modelo altamente no lineal, además de su naturaleza cíclica (oscilatoria) al pasar de una etapas a otra del proceso de manera periódica. Se puede concluir que cada una de las perturbaciones que se presentaron, fueron atenuadas logrando mantener la pureza deseada.

Posteriormente para evaluar con mayor exigencia la robustez del controlador, este fue probado ante perturbaciones simultáneas, combinando 2 perturbaciones en la entrada de la planta virtual simulada con el modelo riguroso PSA. Las condiciones de las pruebas y algunos resultados se proporcionan en la Tabla 10.

En la Fig. 29 se muestra el resultado de las pruebas de control con perturbaciones simultáneas. En primer lugar, se aplicaron cambios tipo escalón a la temperatura de alimentación y al tiempo de purga. Los cambios se hicieron en el ciclo 3 (después de 2070 s). Se puede observar como el controlador logra atenuar las dos entradas aplicadas para perturbar el proceso PSA. Para esta primera combinación de cambios en las entradas se requirió el mayor tiempo de establecimiento del sistema; es decir, el número de ciclos necesarios (26 ciclos) fue mayor que en las

otras pruebas (19 y 20 s). En cambio en lazo abierto se requirieron más ciclos para llegar a un nuevo estado pseudo-estacionario (110 ciclos contra 130 y 135 de las otras dos pruebas).

La segunda prueba con perturbaciones simultáneas consistió en aplicar al mismo tiempo un escalón en la composición de alimentación y en la temperatura de alimentación. Estos cambios también fueron inducidos después de 3 ciclos (2070 s). Para esta prueba, la pureza de etanol es regulada con cambios más abruptos y con más desviaciones con respecto a la referencia, pero el tiempo de establecimiento no es tan diferente al de las otras pruebas y las variaciones de pureza se hacen con una diferencia no mayor de 0.005 en fracción mol.(Fig. 29).

De igual manera el sistema fue excitado combinando escalones en el tiempo de purga y en la composición de alimentación. La señal de salida también se presenta en la Fig. 29. Para esta prueba, la pureza controlada presenta una mayor caída en la pureza del producto obtenida comparada a las otras pruebas, pero en un tiempo muy corto; por otro lado, en esta prueba se logra un menor tiempo de establecimiento, ya que el nuevo estado pseudo-estacionario se alcanza en 19 ciclos, contra 26 que se requieren en la primera prueba con perturbaciones simultáneas.

Una observación común en todas las pruebas es que la pureza del etanol en la salida, una vez restablecido el estado pseudo-estacionario tiene una pequeña desviación con respecto a la referencia, a diferencia de las pruebas con una sola perturbación; sin embargo, la desviación es todavía muy pequeña, alrededor de 0.005 fracción mol. En la Fig.29 se aprecian bien estas desviaciones debido a la ampliación de la imagen en un rango muy pequeño de composiciones. La desviación más grande (vista a los 12000 s de simulación) se produce para la tercera prueba (cambio combinado de la composición de alimentación de alimentación y del tiempo de purga), mientras que la menor desviación se produce para la primera prueba (cambio combinado de la temperatura de alimentación y del tiempo de purga).

Por otro lado, como es de esperarse, la apertura de la válvula de alimentación producido como acción de control es hacia la reducción del flujo de alimentación y por consecuencia afecta al flujo de producción, pero para estas pruebas el flujo no disminuyó más allá de 65 ml/min (siendo 80 ml/min el flujo nominal). La señal de entrada para todos los casos se muestra en la Fig. 29 b, d y f, se puede observar que al aplicar

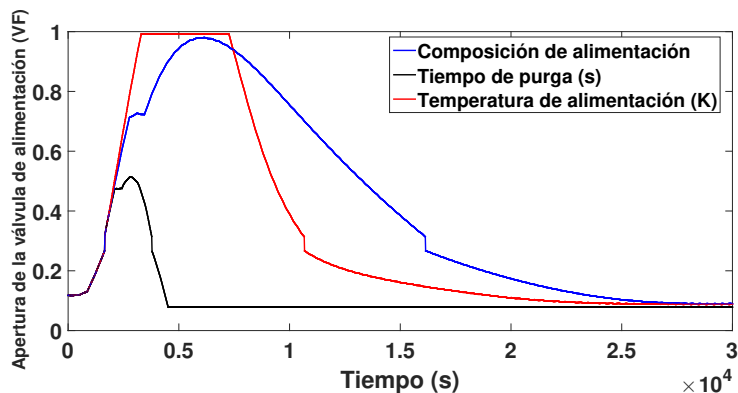


Fig. 30: Señal de control para las pruebas ante perturbaciones escalón en la composición de alimentación, tiempo de purga y temperatura de alimentación.

combinaciones de perturbaciones la señal de control se empieza a saturar llegando a sus límites, sin embargo después de los 6000 segundos el controlador reduce el esfuerzo que se aplica para estas combinaciones que perturban el modelo riguroso PSA. La primera prueba (cambios en el tiempo de purga y temperatura de alimentación) implica el mayor esfuerzo de control, mientras que la segunda prueba (cambios en la composición de alimentación y temperatura de alimentación) implica el menor esfuerzo de control. Para la primera prueba, en la misma Fig. 29b se puede observar que la señal de entrada que se genera para lograr atenuar la perturbación, está cerca de 4000 segundos, en la segunda prueba durante cerca de 2000 segundos y en la tercera prueba cerca de 5000 segundos, pero después oscila en diferentes grados hasta lograr una señal constante. Al final el controlador MPC Óptimo logra mantener la pureza deseada muy cerca del valor nominal en todos los casos.

La simulación del proceso en lazo abierto se presenta en la Fig. 30. Para los tres casos de simulación con perturbaciones simultáneas, la pureza decae hasta valores que difícilmente pueden cumplir los estándares de pureza. La diferencia entre la salida correspondiente a estos tres casos estudiados es mayor que la diferencia observada en la primera serie de pruebas con perturbaciones únicas en las entradas. En la presente serie de pruebas, la primera que implica cambios en la composición de alimentación y en el tiempo de purga es la que produce una desviación mayor con respecto a las condiciones nominales. Con una sola perturbación, la pureza se mantuvo arriba del 95%, en cambio, en pruebas con perturbaciones simultáneas, la pureza disminuyó hasta

el 93%. Las simulaciones en lazo abierto permiten conocer el grado de influencia de las entradas en la pureza de etanol y proporciona una mejor idea de la eficacia del control. El proceso en lazo cerrado presenta variaciones muy pequeñas con relación a la referencia. La fineza del control, sin embargo va a estar limitada por la eficacia del sensado de variables; sin embargo, el controlador MPC Óptimo diseñado tiene el potencial suficiente para lograr la regulación de la pureza de etanol en un proceso de adsorción por oscilaciones en presión con buena robustez ante perturbaciones.

## 5 Conclusiones

Los modelos matemáticos que existen para simular el proceso cíclico de adsorción con oscilaciones en presión (PSA) son sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, no lineales, multivariados y con un alto grado de complejidad para resolverlos. Estos modelos no pueden ser utilizados para diseñar el control de la planta estudiada. Una forma novedosa de abordar el problema de control para este proceso no lineal y multivariable fue desarrollar un modelo no lineal con una estructura capaz de capturar las dinámicas importantes del modelo complejo, conformado por dos partes estáticas no lineales que representan la no linealidad del proceso y una parte lineal que predice la dinámica del mismo. Se usó específicamente un modelo Hammerstein-Wiener. A través de variables intermedias que actúan como entrada y salida de la función lineal del modelo, se

calculó el controlador usando una técnica basada en modelo. El modelo Hammerstein-Wiener se obtuvo a partir de datos de entrada y salida de la planta virtual, desarrollada en la plataforma de Aspen Adsorption. Los datos usados fueron apertura de la válvula de alimentación (VA) y composición de etanol en el producto. La respuesta en espacio y tiempo de la planta virtual incluye los perfiles de composición de agua y de etanol, temperatura y presión; en cambio, el modelo identificado es un modelo reducido en el sentido del número de variables que involucra, ya que como se ha mencionado, solo se representa con este modelo la relación entrada-salida del controlador. El proceso fue simulado con las mismas condiciones de entrada, las misma configuración de la operación que se plantea en esta referencia, pero diferentes dimensiones de las columnas; sin embargo, se hicieron algunas suposiciones para determinar parámetros no especificados, para configurar las válvulas y flujos entre las columnas; además, las suposiciones de modelado variaron en función de las opciones del simulador. En segundo lugar, la validación del modelo reducido, fue validado con diferentes series de datos, obteniendo siempre un ajuste adecuado; por lo tanto se concluye que el modelo identificado para el sistema captura las dinámicas importantes la planta virtual. Este Modelo Hammerstein-wiener se utilizó para el diseño del controlador, y los resultados de la evaluación de su desempeño claramente demuestran los beneficios potenciales de la identificación del sistema representado con un modelo riguroso.

Una decisión importante fue la elección de la entrada de control, la cual se tomó después de estudiar el análisis de sensibilidad que se llevó a cabo para conocer la influencia de diferentes variables de entrada en la pureza de etanol. La variable que fue seleccionada como entrada de control o variable manipulada permite obtener una pureza elevada con un número de ciclos comparable a las otras entradas, pero su manipulación numérica y en la práctica experimental es más sencilla e implica menos tiempo de cómputo. Esta variable que se propuso manipular se puede medir de manera continua, independientemente del paso o etapa del proceso que se esté simulando. Además, es posible usar el mismo tiempo de muestreo que el usado en la plataforma MatLab/Simulink, en donde se calcula el control. Este hecho habilita la sincronización entre las plataformas de Aspen Adsorption y Simulink. Por el contrario, esta sincronización no es posible o requería mayor esfuerzo de cómputo y algunas simplificaciones del simulador del proceso en el caso de usar alguna

de las otras variables presentadas en el análisis de sensibilidad. Esto se debe a que la evolución de variables, como el tiempo de purga que es el más empleado, no es una continua, por lo tanto su valor no podría ser modificado en tiempo real en el simulador del proceso, no podría compilarse Aspen adsorption con Simulink.

Las aportaciones principales de este trabajo fueron (1) el estudio estudio paramétrico del proceso enfocado a apoyar el diseño de control, (2) el modelo identificado, ya que aun cuando se han publicado estructuras similares, no hay reportado un modelo Hammerstein-Wiener para un proceso de adsorción por oscilación de presión que además fue validado con éxito (muy buen ajuste) usando datos provenientes de un simulador de la planta conteniendo un modelo riguroso de parámetros distribuidos que toma en cuenta interacciones entre muchas variables y representa adecuadamente un proceso no lineal, y (3) el diseño de un controlador basado en el modelo lineal obtenido por identificación. Este control propuesto tiene las siguientes características: (3.a) El controlador MPC óptimo diseñado tiene un buen desempeño para seguimiento de trayectoria, permite acelerar cambios requeridos para mejorar la producción o calidad del producto. Con la prueba realizada se logró alcanzar y mantener sin mucho esfuerzo del controlador una pureza superior a la establecida por los estándares dictados por las principales normas internacionales. (3.b) El controlador tiene robustez ante diferentes tipos de perturbaciones y en los casos de evaluación que se presentaron: escalones en la temperatura de alimentación, tiempo de purga o en la composición de alimentación, el controlador atenúa adecuadamente las alteraciones en la alimentación, logrando mantener la pureza deseada. También se observó que cuando se le aplican perturbaciones simultáneas, el controlador sigue logrando el objetivo operacional de rechazarlas o atenuarlas, manteniendo la pureza deseada en un número de ciclos considerablemente menor al tiempo de establecimiento en lazo abierto. (3.c) El controlador permite mantener la pureza en un nivel muy cercano a la referencia, las desviaciones y oscilaciones que se producen tienen una amplitud muy reducida, de orden de 0.005 de fracción molar como máximo. Evidentemente, en la práctica, la precisión del control dependerá de la precisión del sensado de las variables. Sin embargo este aspecto se está dejando como un trabajo futuro porque en el presente estudio no se incluyó trabajo experimental.

Así, como trabajos futuros se proponen los siguientes: El desarrollo de un observador de estado

que actúe como sensor virtual de la pureza de etanol. Este observador puede ser desarrollado en función de mediciones de temperatura, ya que fue constatado en las pruebas de control que la temperatura tiene una gran influencia en la pureza del producto. La medición de temperatura es una medida adecuada porque existen desarrollos avanzados en cuanto a medición de temperatura, un estándar internacional (IEC 60751) que salió para sensores térmicos industriales que usan resistencias de platino específica cuatro clases de precisión, entre estas, la clase AA se refiere a precisiones de  $\pm 0.28^\circ\text{C}$  para temperaturas cercanas a  $104^\circ\text{C}$  (377 K). En el comercio ya se encuentran opciones especiales de sensores. Por ejemplo, el proveedor Reotemp ofrece detectores de temperatura RTD, entre estos, los RTDs de marca Adders han sido concebidos para temperaturas más altas y con rango extendido de precisión. Un ejemplo específico es el sensor Pt/385 A5 que se usa para medir temperaturas arriba de  $226.80^\circ\text{C}$  con una precisión de  $\pm 0.064^\circ\text{C}$  para temperaturas cercanas a  $104^\circ\text{C}$  (377 K) (Cantero y col., 2017). Aun cuando el desarrollo de un observador de estado para estimar la composición de etanol en la salida es conveniente, dados los tiempos de control y la dinámica lenta de la planta, así como el grado de desarrollo de equipos de medición de concentración y composición de mezclas. El diseño del control como se propone en este trabajo pudiera bien llevarse a la práctica, la estimación fuera de línea no representa un problema.

Otro trabajo futuro que se propone es implementar un control MIMO que permita tener en cuenta más entradas y salidas para regular simultáneamente otras variables secundarias que pudieran convertir el sistema de control en uno más robusto ante perturbaciones múltiples y con variaciones más realistas.

### Agradecimientos

El primer autor agradece el apoyo al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por la beca otorgada para cursar el Doctorado en Ciencias en Ingeniería Electrónica dentro del programa de doctorado del Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico.

### Nomenclatura

#### Letras

$a_p$	Superficie de la partícula específica $\text{m}^2/\text{m}^3$
$c_i$	Concentración molar del componente $i$ , $\text{kmol}/\text{m}^3$
$D_{mi}$	Difusividad molecular $i$ , $\text{m}^2/\text{s}$
$D_{ei}$	Difusividad efectiva de la fase adsorbida del componente $i$ , $\text{m}^2/\text{s}$
$C_{ps}$	Capacidad de calor específico del adsorbente $\text{MJ}/\text{kmol}/\text{K}$
$E_{zi}$	Coefficiente de dispersión axial del componente $i$ , $\text{m}^2/\text{s}$
$C_{pai}$	Capacidad de calor específico de la fase adsorbida, $\text{MJ}/\text{kg}/\text{K}$
$H_s$	Coefficiente de transferencia de calor del líquido/sólido, $(\text{J}/\text{s})/\text{m}^2/\text{K}$
$M$	Peso molecular, $\text{kg}/\text{kmol}$
$IP_{1i}, IP_{2i}, IP_{3i}, IP_{4i}$	Parámetros de isoterma del componente $i$
$J_i$	Velocidad de transferencia de masa, $\text{kmol}/\text{m}^3(\text{bed})/\text{s}$
$MTC_s$	Coefficiente de transferencia de masa del sólido, $1/\text{s}$
$k_{sa}$	Conductividad térmica del sólido, $\text{MW}/\text{m}/\text{K}$
$P$	Presión del gas, bar
$W_i$	Cantidad adsorbida del componente, $i$ , $\text{kmol}/\text{kg}$ (adsorbente)
$W_i^*$	cantidad de equilibrio adsorbido del componente, $i$ , $\text{kmol}/\text{kg}$ (adsorbente)
$R$	Constante de gas ( $8.31451e - 3$ ), $\text{MJ}/\text{kmol}/\text{K}$
$r_p$	Radio de la partícula esférica, $m$
$t$	Tiempo $s$
$T_g$	Temperatura del gas, K
$T_s$	Temperatura del sólido, K
$T$	Temperatura, K
$F$	Flujo, $\text{Kmol}/\text{hr}$
$v_g$	Velocidad superficial del gas, $\text{m}/\text{s}$
$z$	Coordenada de la distancia axial, $m$
$y_i$	Fracción molar del gas del componente $i$

### Símbolos griegos

$\epsilon_i$	Vacío de la columna empacada (intraparticular) $m^3(\text{void})/m^3(\text{bed})$
$\epsilon_p$	Vacío interparticular
$\rho_b$	Densidad de la columna empacada, $kg/m^3$
$\rho_s$	Densidad del adsorbente, $kg/m^3$
$\rho_p$	Densidad de la partícula, $kmol/m^3$
$\rho_g$	Densidad molar del gas, $kmol/m^3$
$\Delta H_i$	Calor de adsorción del componente $i$ , $MJ/kmol$
$\psi$	Factor de la partícula
$\mu$	Viscosidad dinámica $Ns/m^2$
$\Omega$	Parámetro en la expresión glueckauf

### Subíndice

$F$	Corriente de alimentación
$i$	Componente del agua ( $w$ ) o etanol ( $e$ )
$g$	fase gas
$s$	Fase solido
$p$	partícula
$b$	bulto o columna empacada

## Referencias

- Al-Asheh S., Banat F. y Abu Fara A. (2009). Dehydration of Ethanol-Water Azeotropic Mixture by Adsorption Through Phillipsite Packed-Column. *Separation Science and Technology*, 44(13). 3170-3188. <https://doi.org/10.1080/01496390903182479>.
- Arumugam B., Banks J. y Wankat P. (1999). Pressure Effects in Adsorption Systems. *Adsorption*, 5(3). 261-278. <https://doi.org/10.1023/A:1008955828900>
- Balat M., Balat H. y Öz C. (2008). Progress in bioethanol processing. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(5). 551-573. <https://doi.org/10.1016/j.peccs.2007.11.001>
- Bastidas P., D Gil I. y Rodriguez G. (2010). Comparison of the main ethanol dehydration technologies through process simulation. *20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE20*. 16.
- Bitzer, M. (2005). Model-based Nonlinear Tracking Control of Pressure Swing Adsorption Plants. *Control and Observer Design for Nonlinear Finite and Infinite Dimensional Systems* 322, 403-418. Berlin/Heidelberg: Springer-Verlag. <http://doi.org/10.1007/11529798>
- Cantero C., López G., Alvarado V., Jimenez R., Morales J., y Coronado E. (2017). Control Structures Evaluation for a Salt Extractive Distillation Pilot Plant: Application to Bio-Ethanol Dehydration. *Energies*, 10(9),1276. <http://doi.org/10.3390/en10091276>
- Carreño M., Solache M., Cosme I., Hernández M. y Flores N. (2017). Adsorption of Cr(VI) by Zea mays rachis. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 16(1). 261-269. <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=62049878025>
- Chang H., Yuan X., Tian H. y Ai-Wu Zeng A. (2006). Experimental Study on the Adsorption of Water and Ethanol by Cornmeal for Ethanol Dehydration. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45(11). 3916-3921. <https://doi.org/10.1021/ie051043x>
- Corral M., Ruiz M., Quintero A., Meléndez C. Lardizabal D. y Campos K. (2017). Use of biomass-derived from pecan nut husks (*carya illinoensis*) for chromium removal from aqueous solutions. column modeling and adsorption kinetics studies. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 16(3). 939-953. <http://rmiq.org/ojs/index.php/rmiq/article/view/39>
- Delgado J., Uguina M., Sotelo J. Águeda V., García A. y Roldán A. (2012). Separation of ethanol-water liquid mixtures by adsorption on silicalite. *Chemical Engineering Journal*, 180. 137-144. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2011.11.026>
- Doong, S. J., y Propsner, P. (1998). Effect of Operation Symmetry on Pressure Swing Adsorption Process. *Adsorption* 4(2), 149-158. <http://doi.org/10.1023/A:1008827218944>
- Jeong, J., Jeon, H., Ko, K., Chung, B., y Choi, G.-W. (2012). Production of anhydrous ethanol using various PSA (Pressure Swing Adsorption) processes in pilot plant. *Renewable Energy* 42, 41-45. <http://doi.org/10.1016/j.renene.2011.09.027>
- Khajuria, H., y Pistikopoulos, E. N. (2011). Dynamic modeling and explicit/multi-parametric MPC control of pressure swing adsorption systems.

- Journal of Process Control* 21(1), 151-163. <http://doi.org/10.1016/j.jprocont.2010.10.021>
- Khajuria, H., y Pistikopoulos, E. N. (2013). Optimization and Control of Pressure Swing Adsorption Processes Under Uncertainty. *AIChE Journal* 59(1), 120-131. <http://doi.org/10.1002/aic.13783>
- Kumar S., Singh N. y Prasad R. (2010). Anhydrous ethanol: A renewable source of energy. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 14(7), 1830-1844. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2010.03.015>
- Kupiec, K., Rakoczy, J., y Lalik, E. (2009). Modeling of PSA separation process including friction pressure drop in adsorbent bed. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* 48(7), 1199-1211. <http://doi.org/10.1016/j.cep.2009.04.009>
- Latifi, M. A., Salhi, D., y Tondeur, D. (2008). Optimisation-based simulation of a pressure swing adsorption process. *Adsorption* 14(4-5), 567-573. <http://doi.org/10.1007/s10450-008-9130-0>
- Liu, Y., Delgado, J., y Ritter, J. A. (1998). Comparison of Finite Difference Techniques for Simulating Pressure Swing Adsorption. *Adsorption* 4(3-4), 337-344. <http://doi.org/10.1023/A:1008898019954>
- Liu Z., Grande C., Li P., Yu J. y Rodrigues A. (2011). Multi-bed Vacuum Pressure Swing Adsorption for carbon dioxide capture from flue gas. *Separation and Purification Technology*, 81(3), 307-317. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2011.07.037>
- Macron J., Roy O., Pierquin J. y Rouchon P. (2010). Purity predictive model-based control of oxygen vacuum swing adsorption process. En: *18th Mediterranean Conference on Control and Automation, MED-10*. 745-749. <http://doi.org/10.1109/MED.2010.5547782>
- Morales, T., Rios L., Aroca G. y Rodríguez J. (2014). Ethanol production by zymomonas mobilis NRRL B-806 from enzymatic hydrolysates of eucalyptus globulus. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 13(3), 779-785. <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=62035738011>
- Muske, K. R. y Rawlings J. B. (1993). Model predictive control with linear models. *American Institute of Chemical Engineers (AIChE) Journal* 39(2), 262-287. <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/aic.690390208/pdf>
- Peng, H., Couenne, F., y Gorrec, Y. Le. (2011). Robust Control of a Pressure Swing Adsorption Process. *IFAC Proceedings* 44, 7310-7315. <http://doi.org/10.3182/20110828-6-IT-1002.02965>
- Pérez R., Medina S., Martínez A., Lizardi M., Espinosa T. y Téllez A. (2018). Effect of concentration of salts in ethanol production from acid hydrolysis of cladodes of *Opuntia ficus indica* var. Atlixco. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 17(1), 349-364. <http://rmiq.org/ojs/index.php/rmiq/article/view/211>
- Pruksathorn, P., y Vitidsant, T. (2010). Production of pure ethanol from azeotropic solution by pressure swing adsorption. *Korean Journal of Chemical Engineering* 26(4), 1106-1111. <http://doi.org/10.1007/s11814-009-0184-9>
- Rossiter, J. A., B. Kouvaritakis y M. J. Price (1998). A numerically robust state-space approach to stable-predictive control strategies. *Automatica* 33(4), 789-797. [https://doi.org/10.1016/S0005-1098\(97\)00171-4](https://doi.org/10.1016/S0005-1098(97)00171-4)
- Rossiter, J. A. (2003). Model-Based Predictive Control: A Practical Approach. CRC PRESS.
- San Pedro L., Méndez R., Rojas M., Barceló M. Castillo E., Sauri M. y Marrufo J. (2015). Evaluation of adsorption and fenton-adsorption processes for landfill leachate treatment. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 14(3), 745-755. <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=62043088015>
- Shin H. (1995). Separation of a binary gas mixture by pressure swing adsorption: Comparison of different PSA cycles. *Adsorption*, 1(4), 321-333. <https://doi.org/10.1007/BF00707355>
- Simo, M., Brown, C. J., y Hlavacek, V. (2008). Simulation of pressure swing adsorption in fuel ethanol production process. *Computers & Chemical Engineering* 32(7), 1635-1649.

- <http://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2007.07.011>
- Sorcía-Vázquez, F. D. J., García-Beltrán, C. D., Valencia-Palomo, G., Guerrero-Ramírez, G., Adam-Medina, M., y Escobar-Jiménez, R. (2015). Control Predictivo Distribuido Óptimo Aplicado al Control de Nivel de un Proceso de Cuatro Tanques Acoplados. *Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial RIAI* 12(4), 365-375. <http://doi.org/10.1016/j.riai.2015.07.002>
- Tanaka B. y Otten L. (1987). *Energy in Agriculture* 6(1), 63-76, [https://doi.org/10.1016/0167-5826\(87\)90023-4](https://doi.org/10.1016/0167-5826(87)90023-4)
- Vargas R., Lopez M. y Quintero E. (2011). Control of an azeotropic distillation process for anhydrous ethanol production. En: *CONIELECOMP 2011, 21st International Conference on Electrical Communications and Computers*. 88-93. <https://doi.org/10.1109/CONIELECOMP.2011.5749345>
- Waldron, W. E., y Sircar, S. (2000). Parametric Study of a Pressure Swing Adsorption Process. *Adsorption* 6(2), 179-188. <http://doi.org/10.1023/A:1008925703871>
- Wang Y., Gong C., Sun J., Gao H., Zheng S. y Xu S. (2010). Separation of ethanol/water azeotrope using compound starch-based adsorbents. *Bioresource technology*, 101(15), 6170-6176. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2010.02.102>
- Wang Y., Li M., Du W., Ji X. y Xu L. (2018). Experimental investigation of a solar-powered adsorption refrigeration system with the enhancing desorption. *Energy Conversion and Management*, 155, 253-261. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2017.10.065>
- Yamamoto T., Han Kim Y., Chul Kim B., Endo A., Thongprachan N. y Ohmori T. (2012). Adsorption characteristics of zeolites for dehydration of ethanol: Evaluation of diffusivity of water in porous structure. *Chemical Engineering Journal*. 181-182:443-448. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2011.11.110>
- Yang, S.-I., Choi, D.-Y., Jang, S.-C., Kim, S.-H., y Choi, D.-K. (2008). Hydrogen separation by multi-bed pressure swing adsorption of synthesis gas. *Adsorption* 14(4-5), 583-590. <http://doi.org/10.1007/s10450-008-9133-x>