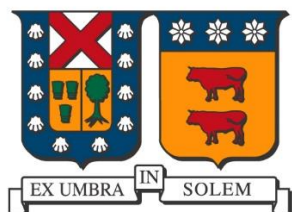


Universidad Técnica Federico Santa María
Departamento de Ingeniería Química y Ambiental
Campus Casa Central, Valparaíso



Memoria Ingeniería Civil Química

**IMPLEMENTACIÓN Y EVALUACIÓN DEL CONTROL
EXPERTO-DIFUSO, APOYADO POR MODELO PLS EN LINEA
(DIGITAL TWINS), DE UN REACTOR CSTR PILOTO**

Autor:

Matías Lagos

Profesor Guía: Dr. Luis Bergh O.

Profesor Correferente: Dr. Claudio Acuña P.

Línea de investigación: Automatización y control de procesos

Valparaíso, Chile

Abril, 2024

RESUMEN

En el presente trabajo se implementó y evaluó un controlador experto-difuso apoyado por un gemelo digital (PLS en línea) de un reactor híbrido. Primeramente, se realizó un reconocimiento de la planta piloto del laboratorio de control de la Universidad Técnica Federico Santa María la cual cuenta esencialmente con un tanque de almacenamiento de agua con 50 [L] de capacidad y con dos recipientes cilíndricos de acrílico de 4,25 [L] conectados en serie, ambos cuentan con rebases, un sistema de calefacción por medio de una placa calefactora y un sistema de agitación por medio de un agitador electrónico, sin embargo, el segundo recipiente (TK-102) presenta además un sistema de refrigeración mediante un intercambiador de calor sumergido del tipo serpentín por donde fluye un refrigerante. Con el fin de asegurar el correcto funcionamiento del proceso fue necesario calibrar los sensores (Pt-100) y actuadores (bombas peristálticas), revisar las conexiones eléctricas del PLC y sus módulos, programar la lógica de inicio, establecer las comunicaciones con el servidor OPC para finalmente crear la Interfaz Gráfica del proceso (HMI) la cual permitió monitorear y controlar las variables operacionales más importantes del proceso. La planta piloto únicamente opera con agua tanto para alimentar a los recipientes como para el refrigerante, por lo tanto para poder emular el funcionamiento de un reactor se realizó una simulación de una reacción de primer orden en estado estacionario la cual se implementó sobre la planta piloto permitiendo la simulación de reactor híbrido, el cual tiene la particularidad de emplear dos tipos de variables las reales y las virtuales, las primeras son variables presentes en la planta piloto y que son medibles por los sensores, mientras que las segundas son variables simuladas a través del registro de los valores de las variables reales. Además, dado que la simulación se realiza con el supuesto de estado estacionario en el proceso es necesario acoplar un detector de estado estacionario para validar los valores simulados de las variables virtuales.

Posteriormente, se procede con el desarrollo del controlador del proceso, dado el alto grado de no linealidad se optó por un controlador experto-difuso, el cual basa su funcionamiento en imitar las decisiones que tomaría un experto mediante el empleo de la lógica difusa. Se construye un controlador con 4 entradas y una salida, para las entradas se seleccionan el flujo de alimentación F , flujo de refrigerante W , concentración de entrada C_{A0} y concentración de salida C_A , mientras que la salida corresponde al flujo de refrigerante F . Se evalúa el controlador experto construido mediante 5 casos distintos en donde se generan condiciones iniciales aleatorias para que el controlador genere los cambios necesarios para desplazar la concentración de salida de A hacia el rango objetivo establecido, cumpliendo el objetivo en 4 de los 5 casos en un número de iteraciones reducido, en torno a las 2 o 3 iteraciones lo cual se traduce en tiempos de espera de más de una hora. Los cambios que efectúa el controlador son conservadores debido a la selección de parámetros con los que fue construido este, por lo que se concluye que el número de iteraciones obtenidas se puede reducir debido a esto se optó por apoyar el controlador experto con un gemelo digital.

Para la construcción del gemelo digital del proceso se utilizó la metodología PLS, por lo que fue necesario diseñar y realizar experimentos. El diseño experimental considera 3 variables; flujo de alimentación, flujo de refrigerante y potencia calefactora, cada una con 3 niveles (alto, medio y bajo), resultando en un total de 27 experimentos más 6 replicados en los puntos extremos. Los resultados de las variables reales obtenidos en cada experimento se utilizaron para simular las variables virtuales y en base a ello se generó una regresión PLS de la concentración de salida mediante el empleo del software comercial *SOLO*.

Para evaluar el nuevo controlador experto (con gemelo digital) se efectúan los mismos casos utilizados para evaluar el controlador experto anterior (sin gemelo digital), observando que el nuevo controlador experto reduce el número de iteraciones consiguiendo llegar al objetivo en 4 de 5 casos con un número de iteraciones en torno a 1 o 2 iteraciones en promedio, reduciendo el tiempo de espera considerablemente.

En base a los resultados obtenidos, se puede concluir que la implementación del controlador experto-difuso apoyado por un gemelo digital (PLS en línea) en el control del reactor híbrido ha resultado en una mejora respecto a la implementación de únicamente un controlador experto-difuso, en gran parte porque el modelo PLS puede predecir de buena manera los resultados obtenidos por la simulación híbrida.

ÍNDICE DE CONTENIDO

RESUMEN	2
ÍNDICE DE FIGURAS	6
ÍNDICE DE TABLAS	8
1. INTRODUCCIÓN.....	9
1.1. CONTEXTO	9
1.2. OBJETIVOS	10
1.2.1 Objetivo general	10
1.2.2 Objetivos específicos	10
1.3. ALCANCE DEL PROYECTO	11
2. EQUIPO EXPERIMENTAL	12
2.1. ANTECEDENTES	12
2.2. PLANTA PILOTO	13
2.2.1. Tanque de almacenamiento de agua (TK-103).....	14
2.2.2. Tanque calefaccionado (TK-101).....	14
2.2.3. Tanque calefaccionado con refrigeración (TK-102)	14
2.2.4. Diagrama P&ID del proceso.....	14
2.3. SIMULACIÓN REACCIÓN.....	15
2.3.1. Balances de masa y energía	15
2.3.2. Variables de la simulación.....	21
2.4. REACTOR HÍBRIDO	23
2.5. FUNCIONAMIENTO DEL CONTROLADOR	26
3. IMPLEMENTACION CONTROL EXPERTO-DIFUSO	27
3.1. SISTEMA EXPERTO-DIFUSO.....	27
3.2. CONSTRUCCIÓN DEL CONTROLADOR EXPERTO-DIFUSO.....	28
3.2.1. Reglas del sistema Experto-Difuso.....	33
3.3. EVALUACIÓN DEL CONTROLADOR EXPERTO-DIFUSO	34
4. IMPLEMENTACION CONTROL EXPERTO-DIFUSO APOYADO POR GEMELO DIGITAL.....	38
4.1. METODOLOGÍA PLS	38
4.1.1. Algoritmo regresión PLS.....	39

4.1.2.	Diagnóstico de datos.....	40
4.2.	DISEÑO DEL GEMELO DIGITAL	43
4.3.	CONSTRUCCIÓN DEL MODELO PLS.....	46
4.4.	CONTROLADOR EXPERTO-DIFUSO APOYADO GEMELO DIGITAL	52
4.5.	EVALUACIÓN DEL CONTROLADOR EXPERTO-DIFUSO APOYADO POR GEMELO DIGITAL (PLS)	52
5.	RESULTADOS.....	55
5.1.1.	Comparativa de los controladores	55
5.1.2.	Recomendaciones	55
6.	CONCLUSIONES.....	56
7.	BIBLIOGRAFIA.....	57
8.	ANEXOS	¡Error! Marcador no definido.
8.1.	ANEXO A: CURVAS DE CALIBRACIONES	¡Error! Marcador no definido.
8.2.	ANEXO B: EQUIPOS DE LA PLANTA PILOTO	¡Error! Marcador no definido.
8.3.	ANEXO C: LÓGICA LADDER DEL KEPSERVERX	¡Error! Marcador no definido.
8.4.	ANEXO D: SISTEMA DE CONTROL DISTRIBUIDO (DCS).....	¡Error! Marcador no definido.
8.4.1.	Controlador lógico programable (PLC).....	¡Error! Marcador no definido.
8.4.2.	Servidor KepServerEX	¡Error! Marcador no definido.
8.4.3.	Interfaz humano-máquina (HMI)	¡Error! Marcador no definido.
8.5.	ANEXO E: DETECTOR DE DESTADO ESTACIONARIO ...	¡Error! Marcador no definido.
8.6.	ANEXO F: REGLAS DEL SISTEMA EXPERTO-DIFUSO	¡Error! Marcador no definido.
8.7.	ANEXO G: DISEÑO EXPERIMENTAL DEL GEMELO DIGITAL	¡Error! Marcador no definido.
8.8.	ANEXO H: MEDIAS Y DESVIACIONES DE LAS VARIABLES DEL PROCESO	¡Error! Marcador no definido.

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 Planta Piloto Reactor CSTR de la Universidad Técnica Federico Santa María.	13
Figura 2.2 Diagrama P&ID del proceso.	15
Figura 2.3 Esquema del serpentín refrigerante del proceso.	20
Figura 2.4 Composición del Reactor híbrido.	23
Figura 2.5 Diagrama de bloques de la simulación del reactor CSTR.	25
Figura 2.6 Diagrama de bloques del controlador experto-difuso del reactor híbrido.	26
Figura 3.1 Sistema experto con lógica Difusa del reactor híbrido	29
Figura 3.2 Ejemplo de función de membresía trapezoidal.	30
Figura 3.3 Sistema experto difuso del reactor CSTR.	30
Figura 3.4 Funciones de membresía de W (entrada).	31
Figura 3.5 Funciones de membresía de F.	31
Figura 3.6 Funciones de membresía de C_{A0} .	32
Figura 3.7 Funciones de membresía de C_A .	32
Figura 3.8 Funciones de membresía de W (Salida).	32
Figura 3.9 Superficie de respuesta W vs C_A .	33
Figura 3.10 Superficie de respuesta W vs C_A y F.	34
Figura 3.11 Superficie de respuesta W vs C_A y C_{A0} .	34
Figura 3.12 Ejemplo de función de membresía triangular.	37
Figura 4.1 Representación de un problema de 3 variables usando métodos de proyección (Gomez, 2008).	39
Figura 4.2 Variables de la simulación.	43
Figura 4.3 Diagrama de bloques de la simulación DT.	44
Figura 4.4 RMSECV y RMSEC.	48
Figura 4.5 Varianza acumulada de X e Y.	48
Figura 4.6 Estadígrafo T2 y Q del set de datos.	49
Figura 4.7 Modelo PLS para la concentración de salida de A.	50
Figura 4.8 Residuos del modelo.	51
Figura 4.9 VIP's score de C_A .	51
Figura 4.10 Diagrama del controlador experto-difuso apoyado por gemelo digital.	52
Figura A.1 Curva de calibración bomba de alimentación	¡Error! Marcador no definido.
Figura A.2 Curva de calibración bomba refrigerante.	¡Error! Marcador no definido.

Figura A.3 Curva de calibración sensor de temperatura TI-1.; **Error! Marcador no definido.**

Figura A.4 Curva de calibración sensor de temperatura TI-2.; **Error! Marcador no definido.**

Figura A.5 Curva de calibración sensor de temperatura TI-3.; **Error! Marcador no definido.**

Figura A.6 Curva de calibración sensor de temperatura TI-4.; **Error! Marcador no definido.**

Figura A.7 Curva de calibración sensor de temperatura TI-5.; **Error! Marcador no definido.**

Figura B.1 Tanque TK-103.; **Error! Marcador no definido.**

Figura B.2 Válvula solenoide de TK-103.....; **Error! Marcador no definido.**

Figura B.3 Alarmas de nivel de TK-103.; **Error! Marcador no definido.**

Figura B.4 Bomba de alimentación P-101.....; **Error! Marcador no definido.**

Figura B.5 Agitador electrónico de TK-101.....; **Error! Marcador no definido.**

Figura B.6 Recipiente TK-101.; **Error! Marcador no definido.**

Figura B.7 Recipiente TK-102.; **Error! Marcador no definido.**

Figura B.8 Agitador electrónico del reactor.; **Error! Marcador no definido.**

Figura B.9 Sensor resistivo de temperatura Pt-100.; **Error! Marcador no definido.**

Figura C.1 Lógica placa calefactora de TK-101 y TK-102..; **Error! Marcador no definido.**

Figura C.2 Lógica del encendido y control de bombas y lectura de los sensores de temperaturas.....; **Error! Marcador no definido.**

Figura C.3 Lógica del control de nivel del tanque de almacenamiento. ...; **Error! Marcador no definido.**

Figura D.1 Rack del PLC GE SERIES 90-30 junto con sus módulos. ; **Error! Marcador no definido.**

Figura D.2 Configuración del KepServerEX del proceso. ...; **Error! Marcador no definido.**

Figura D.3 Ventana principal.; **Error! Marcador no definido.**

Figura D.4 Ventana de sensores.; **Error! Marcador no definido.**

Figura D.5 Ventana Estado estacionario.; **Error! Marcador no definido.**

Figura D.6 Ventana del sistema experto-Difuso.; **Error! Marcador no definido.**

Figura D.7 Ventana de la simulación CSTR.; **Error! Marcador no definido.**

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 3.1 Caso 1 del sistema experto.	35
Tabla 3.2 Caso 2 del sistema experto.	35
Tabla 3.3 Caso 3 del sistema experto.	35
Tabla 3.4 Caso 4 del sistema experto.	36
Tabla 3.5 Caso 5 del sistema experto.	36
Tabla 4.1 Diseño experimental del gemelo digital	45
Tabla 4.2 Rangos de operación de las variables reales.....	45
Tabla 4.3 Regresión PLS para C_A	50
Tabla 4. 4 Control experto-difuso sin Gemelo Digital.	54
Tabla 4.5 Control experto-difuso con Gemelo Digital.	54
Tabla B.1 Especificaciones del recipiente TK-101.	¡Error! Marcador no definido.
Tabla B.2 Especificaciones del recipiente TK-102.	¡Error! Marcador no definido.
Tabla D.1 Componentes del PLC.	¡Error! Marcador no definido.
Tabla E.1 Parámetros Detector estado estacionario para cada variable. ...	¡Error! Marcador no definido.

Tabla F.1 Reglas del controlador experto-difuso.**¡Error! Marcador no definido.**

Tabla G.1 Variables reales.....**¡Error! Marcador no definido.**

Tabla G.2 Variables virtuales de concentración de entrada y salida.**¡Error! Marcador no definido.**

Tabla H.1 Desviaciones y medias de las variables utilizadas para el gemelo digital.. **¡Error! Marcador no definido.**

1. INTRODUCCIÓN

1.1. CONTEXTO

En los últimos años, la industria química ha experimentado un gran avance, tanto en términos de volúmenes de producción como en la tecnología aplicada a los procesos productivos, (Thormann et al., 2023). Esto conlleva la necesidad de aumentar y mejorar los niveles de automatización, control y supervisión en los procesos industriales.

Actualmente, se está observando una tendencia hacia la automatización de los procesos, que antes eran realizados manualmente por operarios de planta, mediante el uso de sensores y actuadores automáticos supervisados desde una sala de control, lo que aumenta la seguridad de los procesos y disminuye los costos de personal (Papulová *et al.*, 2022). Sin embargo, la tarea de automatizar dichos sistemas es sumamente difícil cuando los modelos dinámicos son altamente no-lineales. Una solución frecuentemente utilizada en la industria de procesos son los denominados sistemas expertos.

Un controlador de sistema experto es un tipo de controlador que utiliza técnicas de inteligencia artificial y conocimientos expertos para tomar decisiones y controlar un sistema en función de reglas y heurísticas específicas (Acedo, 2006). En particular, se emplean los sistemas expertos basados en lógica binaria y aplicados en estado estacionario, no obstante, dado las crecientes necesidades de mejorar la eficiencia de los procesos y sumado con los

avances tecnológicos, estos sistemas han sido mejorados con la incorporación de lógica difusa o también llamada *fuzzy logic* por su nombre en inglés. Sin embargo, al implementar un controlador de este tipo, rara vez se alcanza el valor objetivo en una sola iteración. Para procesos rápidos esto no es importante, pero representa un inconveniente para todos aquellos procesos en que el tiempo de estabilización es del orden de varios minutos y/o horas. Se entiende por tiempo de estabilización como el tiempo que se demora el proceso en alcanzar el estado estacionario tras aplicarse un cambio en una o varias variables operacionales.

Dado esta limitación de los sistemas expertos, en estado estacionario, una alternativa interesante para abordar el problema es mediante la metodología de los gemelos digitales (*digital twin*) la cual consiste en generar réplicas digitales del proceso a controlar. Dichas replicas son modelos que permiten simular el proceso, por ende, su comportamiento en tiempo real y en diferentes condiciones, es decir, es una representación virtual del proceso físico que se actualiza constantemente con información en tiempo real del sistema. Se puede afirmar que esta tecnología está en auge, pues según estudios realizados por Researchandmarkets, más del 42% de ejecutivos, en una amplia gama de sectores industriales, comprenden los potenciales beneficios de implementar gemelos digitales en sus procesos y el 59% de ellos planean incorporarlo en sus operaciones para el año 2028 (Researchandmarkets, 2022).

Es importante tener en cuenta que existen muchos métodos de construcción de un *digital twin*, la elección dependerá de las necesidades específicas y del tipo de sistema que se desee replicar. Algunas de las formas más comunes incluyen: Modelado basado en fenomenología, en datos, híbridas, etc. En este trabajo en particular, se desarrolla un gemelo digital a partir de un modelo PLS (*Partial Least Squares*), el cual corresponde a un método estadístico de regresión utilizado para modelar la relación entre dos conjuntos de variables: variables independientes y variables dependientes. Una de las principales ventajas del modelo PLS es que puede manejar conjuntos de datos con un gran número de variables independientes, y que estas variables pueden estar altamente correlacionadas entre sí, lo que dificulta la interpretación de los resultados con otros métodos estadísticos. Además, el modelo PLS puede manejar datos ruidosos y faltantes, lo que es común en aplicaciones industriales. (Roggo *et al.*, 2007). Otra ventaja importante del modelo PLS es que puede ser utilizado para la estimación de variables críticas, lo que puede ser útil en el control de procesos y la optimización del proceso. Al identificar las variables más importantes que afectan a la variable de respuesta, el modelo PLS puede ayudar a definir los esfuerzos en mejorar esas variables para lograr un mejor desempeño del proceso.

Combinando ambas metodologías se busca obtener un controlador igual o más eficaz que un sistema experto-difuso, pero con un número menor de iteraciones para lograr los objetivos. La implementación resulta en lo siguiente; las entradas en estado estacionario del proceso son capturadas por el controlador experto-difuso. Las salidas del controlador se entregan al

gemelo digital, el cual simula las respuestas del sistema y entrega dichas respuestas como entradas al sistema experto, generando un proceso iterativo hasta alcanzar el valor objetivo.

1.2. OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo general

Construir, implementar y evaluar un sistema de control experto difuso de la concentración de salida, ayudado en línea por un modelo PLS (*digital twin*), de un reactor piloto CSTR.

1.2.2 Objetivos específicos

- Implementar un simulador de Arrhenius híbrido estacionario de un reactor CSTR.
- Desarrollar e implementar un controlador experto-difuso para el proceso.
- Diseñar y construir un gemelo digital del proceso.
- Implementar controlador experto-difuso acoplado al gemelo digital del proceso.
- Evaluar controlador experto-difuso con y sin gemelo digital acoplado.

1.3. ALCANCE DEL PROYECTO

En este trabajo se estudia la aplicación de la metodología *digital twin*, basada en un modelo PLS en línea, para predecir la conversión en un reactor CSTR a fin de disminuir los tiempos de iteraciones sucesivas generadas por el sistema experto-difuso, para alcanzar los objetivos de un estado estacionario a otro. Se dispone de un reactor CSTR refrigerado, acoplado a un modelo fenomenológico, que permite predecir la conversión en estado estacionario, a partir de una especificación de las propiedades de la alimentación, de las características físicas de reactor y de las condiciones de operación. El reactor tiene incorporado un sistema de control distribuido para la temperatura.

2. EQUIPO EXPERIMENTAL

2.1. ANTECEDENTES

A fin de evaluar la viabilidad del trabajo a llevar a cabo se realiza un levantamiento bibliográfico de investigaciones científicas con características parecidas encontrando que; la simulación de procesos es una herramienta importante para la ingeniería química, típicamente se utilizan simulaciones basadas en fenomenología, es decir, simulaciones centradas en capturar y reproducir los patrones y resultados observables. Para el caso de un reactor CSTR la fenomenología se caracteriza por la cinética de reacción y los balances de materia y energía del sistema. En este contexto, la simulación de reacciones para predecir y controlar un CSTR ya ha sido estudiada y ha demostrado ser una forma de control válida. (Wahlgreen *et al.*, 2020).

En el caso particular de este trabajo, se implementa una simulación híbrida, la cual consiste en realizar mediciones físicas para un determinado set de variables y en base a estos datos simular el resto de las variables, esto permite tener un mayor conocimiento de los sistemas además de otorgar una mayor adaptabilidad al momento de simular. Se ha realizado más de un estudio donde se controlan procesos mediante sistemas expertos acoplados a simuladores híbridos. Cortés (2016) implementa un simulador metalúrgico estacionario de una planta piloto de flotación RCS además de elaborar un sistema experto, el cual permite encontrar puntos de operación en los que se obtienen mejores resultados metalúrgicos. Este caso

permite concluir que la simulación híbrida puede ser una herramienta válida para el control de procesos.

Por otra parte, el control mediante el análisis de datos operacionales también ha sido estudiado ampliamente, en particular, Gómez (2008) simuló un reactor CSTR con una reacción exotérmica utilizando un estanque agitado con sistemas de calefacción y refrigeración reales. Se implementan balances de masa y energía en línea para monitorear y controlar el sistema. Se utiliza una planta piloto con un estanque agitado donde se calienta y enfría agua como reactor piloto. Además, se desarrolla una interfaz gráfica de usuario (HMI) que permite observar la operación del reactor y modificar las condiciones de entrada, como el flujo y la concentración de alimentación, y el flujo de refrigerante. También se muestra la concentración final calculada, la conversión del reactante y la temperatura del producto. También se implementa un modelo en estado estacionario, y se construye un detector de fallas virtuales mediante el análisis de componentes principales, concluyendo que fue posible detectar fallas en la calibración de una bomba peristáltica y descalibraciones en el sensor de concentración de la alimentación (Gomez, 2008). El caso expuesto, deja un antecedente bastante claro sobre la posibilidad de analizar la operación de un reactor CSTR, con modelos PCA (y por consiguiente un modelo PLS) a partir de datos obtenidos experimentalmente y la utilidad de dichos modelos para la predicción de la respuesta del sistema dado determinados cambios en las variables operacionales.

2.2. PLANTA PILOTO

Se entiende por planta piloto al apartado físico del proceso, es decir, los equipos, instrumentos de medición, controladores del proceso y equipos de soporte.

Al tratarse de una simulación híbrida existen variables reales medibles y variables virtuales que son simuladas a partir de los valores medidos de las variables reales. Obteniendo una simulación a priori más realista que una simulación convencional dado que es sensible a perturbaciones reales.

En la Figura 2.1 se presenta la planta piloto, la cual se encuentra ubicada en el laboratorio de control de la Universidad Técnica Federico Santa María. Esta planta cuenta con dos recipientes cilíndricos de acrílico con rebalse conectados en serie, ambos cuentan con agitadores electrónicos, placas calefactoras y medidores de temperatura en su interior. Se cuenta con dos bombas peristálticas, la primera se encarga de impulsar el fluido de trabajo y la otra de impulsar el fluido refrigerante. Cabe mencionar que dado que tanto el fluido de alimentación como de refrigerante corresponde a agua a presión y temperatura ambiente.



Figura 2.1 Planta Piloto Reactor CSTR de la Universidad Técnica Federico Santa María.

La planta piloto consta de 3 secciones principales: Tanque de almacenamiento de agua (TK-103), tanque calefaccionado (TK-101) y tanque calefaccionado con refrigeración (TK-102). A continuación, se detallan las 3 secciones mencionadas.

2.2.1. Tanque de almacenamiento de agua (TK-103)

Esta sección está compuesta por un tanque de plástico de aproximadamente 50 [L] de capacidad, que tiene por función alimentar con agua a la bomba de alimentación (P-101) y la bomba del refrigerante (P-102). Además, posee un sensor de temperatura Pt-100 (TI-4) inmerso que se encarga de entregar la temperatura de entrada al sistema. Además de contar con una válvula solenoide que conecta la entrada del tanque con la matriz de agua del laboratorio, junto con dos flotadores sumergibles dentro del tanque. Ver Anexo B.1 para más detalles.

2.2.2. Tanque calefaccionado (TK-101)

Consta de un recipiente cilíndrico de acrílico de aproximadamente de 4,25 [L] de capacidad, que tiene la función de generar pequeñas perturbaciones en la temperatura de entrada al proceso para ello se cuenta con una placa calefactora (XIS-1) instalada en la zona inferior del recipiente, para lograr que la temperatura del recipiente sea homogénea se emplea un agitador electrónico con RPM variable. Además, se utilizan 2 sensores de temperatura Pt-100: TI-1 y TI-5 para medir la temperatura interna del recipiente y la temperatura ambiente

respectivamente, además el flujo de alimentación es impulsado por una bomba peristáltica (P-101) desde el tanque TK-103 hasta el recipiente TK-101 y por rebalse ingresa al recipiente TK-102. Ver Anexo B.2 para más detalles.

2.2.3. Tanque calefaccionado con refrigeración (TK-102)

Esta sección es un replicado de la sección anterior con el detalle que se cuenta con un intercambiador de calor de tipo serpentín dentro del recipiente, esto con la finalidad disminuir o aumentar la temperatura dentro del recipiente sin necesidad de variar la potencia de la placa calefactora. Se cuenta con los siguientes elementos: una bomba peristáltica (P-102) para el impulsar el fluido refrigerante por el serpentín, un agitador electrónico para homogenizar la temperatura dentro del recipiente, dos sensores de temperatura Pt-100: TI-2 y T-3 para medir la temperatura dentro del recipiente y la temperatura de salida del refrigerante respectivamente y por último una placa calefactora (XIS-2). El flujo de alimentación ingresa al recipiente por el rebalse del recipiente TK-101 y el flujo de salida se dirige al desagüe del laboratorio. Ver Anexo B.3 para más detalles.

2.2.4. Diagrama P&ID del proceso

En la Figura 2.2 se muestra el diagrama P&ID de la planta piloto.

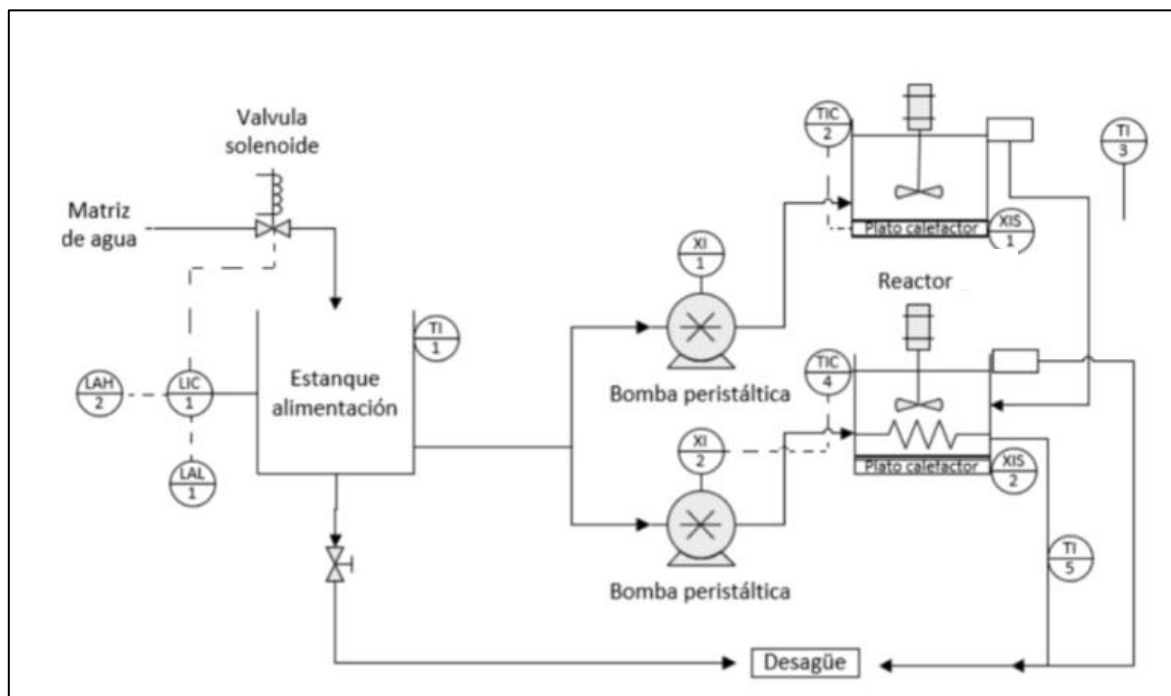


Figura 2.2 Diagrama P&ID del proceso.

Para asegurar el correcto funcionamiento de la planta piloto se calibran los sensores y actuadores, vale decir, los 5 medidores de temperatura y las 2 bombas peristálticas. Además, es necesario crear una rutina de iniciación para poder operar la planta piloto. Para no perder el hilo narrativo se opta por entregar los detalles de estos aspectos en la sección de Anexos.

Las calibraciones se detallan en el Anexo A, las especificaciones de los equipos en el Anexo B y la lógica de inicio del proceso en el Anexo C.

2.3. SIMULACIÓN REACCIÓN

En el punto anterior se deja en claro que en la planta piloto no hay reactores como tal solo recipientes que están calefaccionados y en caso del TK-102 se cuenta con un sistema de refrigeración. Para poder asemejar el funcionamiento de un reactor se requiere simular una reacción, esta simulación, como se menciona anteriormente, es de carácter híbrida, es decir, existen variables reales las cuales se miden y en base a sus valores se simulan las variables de reacción. En este apartado se detalla la simulación de la reacción.

2.3.1. Balances de masa y energía

La reacción simulada corresponde a una de tipo exotérmica, es decir, la entalpía de reacción es negativa por lo que se libera calor a medida que avanza la reacción esto es debido a las diferencias de energía entre los productos inicial y final. Además, de ser de primer orden, sin reacciones competitivas y de únicamente dos compuestos (A y B). Luego, esquemáticamente se representa como se ve en la ecuación (1).



Dado que la reacción ocurre a una determinada velocidad, la cual es limitada por la concentración de A y la temperatura del reactor T, se establece un parámetro de velocidad de reacción k [1/min], cuyo valor aumenta con la temperatura según la relación de Arrhenius modificada:

$$k(T) = A \cdot T^n \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{R \cdot T}\right) \quad (2)$$

Donde A corresponde al factor de frecuencia, que representa la probabilidad de que ocurra una colisión efectiva entre las moléculas o los reactivos, n un parámetro adimensional obtenido de forma arbitraria para poder visualizar de mejor manera los efectos de la temperatura, por su parte E_A es la energía de activación, es decir la energía requerida para iniciar la reacción, por último, R corresponde a la constante de los gases ideales.

Dada las limitaciones estructurales presentadas por el acrílico, el material de construcción de TK-101 y TK-102, a medida que la temperatura alcanza los valores de 50[°C] y superiores, en la Tabla 2.1 se muestra la selección de parámetros de Arrhenius que permiten apreciar un cambio en el valor de la constante de Arrhenius para los rangos de temperatura de operación.

Tabla 2.1 Parámetros de Arrhenius de la reacción simulada.

Parámetros Arrhenius

A	0.0000008	[1/min]
-E/R	-100	[K]
n	5	[-]

Dado que la planta piloto opera únicamente con agua, es necesario simular la reacción dentro de TK-102 para poder simular un reactor híbrido. Para esto se requiere implementar un algoritmo que dado un cierto valor de concentración inicial de un reactivo A emule el comportamiento de un reactor CSTR y obtenga el valor de concentración de salida de A , para ello se debe definir las propiedades termodinámicas del reactivo A y el orden de la reacción para que con ayuda de los balances de materia y energía obtener los valores de concentraciones y temperatura de las corrientes de salida del reactor CSTR en estado estacionario.

Para el caso de un CSTR continuo, el balance de materia puede escribirse en función del componente de entrada A como:

$$Acumulación_A = Entrada_A - Salida_A + Generación_A - Consumo_A \quad (3)$$

Dado que se simula una reacción de primer orden se puede escribir el consumo como:

$$Consumo_A = C_A \cdot k \quad (4)$$

Donde C_A es la concentración de A y k la constante cinética de la reacción.

Además, se asume que no hay reacciones compitiendo, por tanto, no hay generación de A , luego el balance de materia para este caso queda:

$$\frac{dn_A}{dt} = n_{A,in} - n_{A,out} - C_A \cdot k \quad (5)$$

Asumiendo que el volumen del sistema y la densidad del flujo son constantes se puede reescribir como:

$$V \cdot \frac{dC_A}{dt} = F \cdot C_{A0} - F \cdot C_A - C_A \cdot k \quad (6)$$

Donde V corresponde al volumen de reactor y F al flujo que ingresa TK-101 y TK-102. Despejando la acumulación y definiendo el término de tiempo de residencia nominal τ como:

$$\tau = \frac{V}{F} \quad (7)$$

Se obtiene lo siguiente:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{C_{A0}}{\tau} - C_A \cdot \left(\frac{1}{\tau} + k \right) \quad (8)$$

Es importante recordar que la simulación se realiza bajo el estado estacionario, por lo que el término de acumulación es nulo, por lo que se puede escribir la concentración de A como:

$$C_A = \frac{C_{A0}}{1 + k \cdot \tau} \quad (9)$$

Otra parte fundamental de la simulación es el balance de energía, de forma general el balance puede expresarse como:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Acumulación} \\ \text{de energía} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Calor entregado} \\ \text{al sistema por} \\ \text{los alrededores} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Trabajo realizado} \\ \text{por el sistema} \\ \text{sobre los} \\ \text{alrededores} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Energía de la} \\ \text{corriente de} \\ \text{entrada} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Energía de la} \\ \text{corriente de} \\ \text{salida} \end{array} \right] \quad (10)$$

Mientras que para el caso particular del sistema el balance queda expresado como:

$$\frac{dE}{dt} = Q - W + F_{in} \cdot E_{in} - F_{out} \cdot E_{out} \quad (11)$$

Donde:

$\frac{dE}{dt}$: es la acumulación de energía del sistema [W]

Q: Calor externo al sistema [W]

F_{in} : Flujo de entrada molar [mol/s]

E_{in} : Energía molar de entrada [J/mol]

F_{out} : Flujo de salida molar [mol/s]

E_{out} : Energía molar de salida [J/mol]

El término de trabajo global W puede ser evaluado en términos de la presión, volumen y trabajo de eje del sistema, mediante la siguiente ecuación:

$$W = W_s + F_{out} \cdot P \cdot V_{out} - F_{in} \cdot P \cdot V_{in} \quad (12)$$

Donde:

P : Presión del sistema [Pa]

W_s : Trabajo de eje [m^3/mol]

V_{out} : Volumen específico de salida [m^3/mol]

V_{in} : Volumen específico de entrada [m^3/mol]

Dado que, en este caso particular, la agitación está provista por un agitador mecánico de baja potencia se puede despreciar el trabajo de eje W_s por lo que la ecuación del balance de energía se puede describir como:

$$\frac{dE}{dt} = Q + F_{in} \cdot (E_{in} + P \cdot V_{in}) - F_{out} \cdot (E_{out} + P \cdot V_{out}) \quad (13)$$

O bien

$$\frac{dE}{dt} = Q + F_{in} \cdot H_{in} - F_{out} \cdot H_{out} \quad (14)$$

Además, al considerar estado estacionario, el término de acumulación se vuelve cero, luego la expresión queda:

$$0 = Q + F_{in} \cdot H_{in} - F_{out} \cdot H_{out} \quad (15)$$

Es importante recordar, que para este caso se tienen dos componentes A y B, siendo A el componente que reacciona para convertirse en B. Por lo tanto, los términos de entalpía se pueden escribir en función de dichos componentes como:

$$F_{in} \cdot H_{in} = F_{A,in} \cdot H_{A,in} + F_{B,in} \cdot H_{B,in} \quad (16)$$

$$F_{out} \cdot H_{out} = F_{A,out} \cdot H_{A,out} + F_{B,out} \cdot H_{B,out} \quad (17)$$

Se decide trabajar en función del componente A en la alimentación, pues al ser de primer orden la reacción los términos asociados a B y a la salida de A pueden ser descritos mediante la conversión X del sistema.

$$F_{B,in} = 0 \quad (18)$$

$$F_{A,out} = F_{A,in} \cdot \left(1 - \frac{X}{100}\right) \quad (19)$$

$$F_{B,out} = F_{A,in} \cdot \frac{X}{100} \quad (20)$$

Donde la conversión X viene dada por la siguiente ecuación:

$$X = 100 \cdot \left(\frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \right) \quad (21)$$

Luego se puede evaluar los términos de las entalpías de entrada y salida como:

$$F_{in} \cdot H_{in} - F_{out} \cdot H_{out} = F_{A,in} \cdot (H_{A,in} - H_{A,out}) - \frac{(H_{B,out} - H_{A,out}) \cdot F_{A,in} \cdot X}{100} \quad (22)$$

Donde la parte $(H_{B,out} - H_{A,out})$ corresponde a la definición de entalpia de reacción (ΔH_{rx}) .

Por otra parte, asumiendo que el flujo de alimentación posee un calor específico constante (C_p) el término de $(H_{A,in} - H_{A,out})$ puede reescribirse como:

$$F_{A,in} \cdot (H_{A,in} - H_{A,out}) = F \cdot C_p \cdot (T_{A,in} - T_{A,out}) \quad (23)$$

Por lo que al reemplazar esta expresión en el balance de energía queda:

$$0 = Q + F \cdot C_p \cdot (T_{A,in} - T_{A,out}) - \frac{\Delta H_{rx} \cdot F_{A,in} \cdot X}{100} \quad (24)$$

Se sabe además que:

$$F_{A,in} \cdot X = F \cdot C_{A0} \cdot \left(100 \cdot \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \right) = 100 \cdot F \cdot (C_{A0} - C_A) \quad (25)$$

Por lo que reemplazando en el balance de energía:

$$0 = Q + F \cdot C_p \cdot (T_{A,in} - T_{A,out}) - \Delta H_{rx} \cdot F \cdot (C_{A0} - C_A) \quad (26)$$

Reemplazando C_{A0} en términos de C_A nos queda:

$$0 = Q + F \cdot C_p \cdot (T_{A,in} - T_{A,out}) - \Delta H_{rx} \cdot V \cdot k \cdot C_A \quad (27)$$

Para el sistema existen dos tipos de calores, además del calor de reacción claro está, dichos calores son el calor asociado a la transferencia de calor hacia los alrededores del sistema, es decir, la perdida de calor hacia el ambiente (Q_{perd}) y el calor transferido hacia el flujo de refrigerante (Q_{refr}). Luego el término de Q puede considerarse como la suma de dichos calores.

$$Q = Q_{perd} + Q_{refr} \quad (28)$$

Los experimentos que más adelante se detallan, muestran que las pérdidas hacia el ambiente se pueden asumir constantes y con un valor aproximado del 9% del calor de reacción.

$$0.09 \cdot Q_{RX} = Q_p \quad (29)$$

En la Figura 2.3 se presenta el esquema del serpentín de TK-102, de este esquema es posible obtener la ecuación que relaciona las temperaturas del refrigerante con el calor transferido.

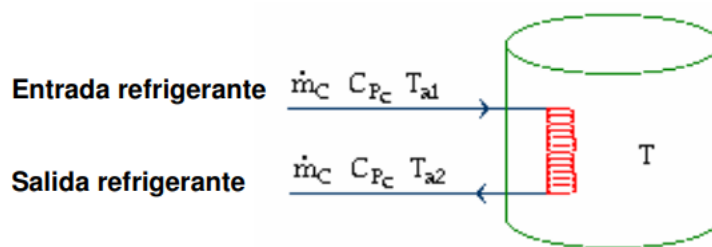


Figura 2.3 Esquema del serpentín refrigerante del proceso.

$$Q_{refr} = W \cdot C_p \cdot (T_{W0} - T_W) \quad (30)$$

Por lo que el balance de energía del sistema queda como:

$$0 = W \cdot C_p \cdot (T_{W0} - T_W) + F \cdot C_p \cdot (T_{A,in} - T_{A,out}) - \Delta H_{rx} \cdot V \cdot k \cdot C_A + Q_{perd} \quad (31)$$

También es posible, agrupar el término de variación de temperatura de la entrada y salida del reactor como calor sensible.

$$Q_{sens} = F \cdot C_p \cdot (T_{A,in} - T_{A,out}) \quad (32)$$

Resultando en el balance de energía de la siguiente forma:

$$0 = Q_{refr} + Q_{sens} + Q_{RX} + Q_{perd} \quad (33)$$

O bien,

$$0 = W \cdot C_p \cdot (T_{W0} - T_W) + Q_{sens} - \Delta H_{rx} \cdot V \cdot k \cdot C_A + Q_{perd} \quad (34)$$

2.3.2. Variables de la simulación

De los balances de materia y energía se obtienen las variables a implementar en la simulación, como se esperaba al ser una simulación híbrida, existen variables reales (y por tanto medibles) y otras virtuales (su valor depende de las variables medibles). La Tabla 2.2 muestra las variables reales del proceso, mientras que la Tabla 2.3 las variables virtuales.

Tabla 2.2 Variables reales de la simulación.

Variable real	Símbolo
---------------	---------

Temperatura entrada	T_0
Flujo de alimentación	F
Flujo de refrigeración	W
Temperatura refrigerante entrada	T_{w0}
Temperatura refrigerante salida	T_w
Potencia plato calefactor	P
Temperatura reactor	T

Tabla 2.3 Variables virtuales de la simulación.

Variable simulada	Símbolo
Concentración entrada	C_{A0}
Concentración salida	C_A
Constante cinética	K
Calor de reacción	Q_{RX}
Conversión	X
Calor sensible	Q_{sens}
Calor perdidas	Q_{perd}
Tiempo de residencia	T
Calor de refrigeración	Q_{refr}

Para el caso del calor de reacción, este valor se simula mediante la placa calefactora XIS-2 de TK-102, por tanto, la variable real encargada de simular la reacción será la potencia P de la placa calefactora, la cual posee una potencia máxima de 1500 [W] por lo tanto, el valor límite de calor de reacción que se puede generar es 1500[W].

Además, el balance de energía escrito en términos de las variables de la simulación resulta:

$$0 = W \cdot C_p \cdot (T_{w0} - T_w) + F \cdot C_p \cdot (T_{in} - T) - \Delta H_{rx} \cdot V \cdot k \cdot C_A \quad (35)$$

Además, dado que se trata de agua el fluido a emplear y que los parámetros cinéticos son configurados por quien realiza la simulación, se puede asumir las siguientes propiedades constantes. En la Tabla 2.4 Se muestra el valor de dichas propiedades.

Tabla 2.4 Propiedades Fisicoquímicas del proceso.

Datos		
V	4,25	[L]
C _P	4,18	[J/mLK]
H _{RX}	-62	[kJ/mol]
Densidad	1000	[kg/m ³]

2.4. REACTOR HÍBRIDO

Se denomina reactor híbrido a la implementación de la simulación de la reacción sobre la planta piloto. La combinación de ambas partes permite simular el funcionamiento y operación de un reactor híbrido CSTR en estado estacionario con una reacción de primer orden, sin embargo, dado que la simulación solo es válida en estado estacionario es de vital importancia que se incorpore un detector de estado estacionario para validar los valores que se obtengan en la simulación. En la Figura 2.4 se observa la representación del reactor híbrido mediante las partes que lo componen, es decir, la planta piloto, simulador y detector de estado estacionario, donde el término u se refiere a los valores de entrada, d hace alusión a las perturbaciones presentes en el sistema y por último y son las salidas del sistema.

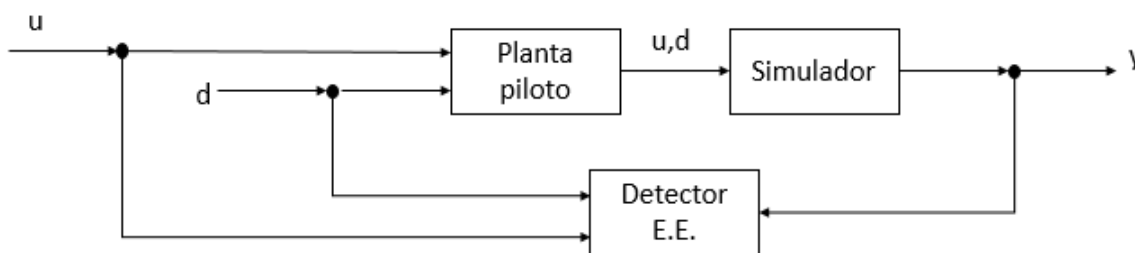


Figura 2.4 Composición del Reactor híbrido.

Para no perder el hilo del trabajo, no me detalla los aspectos de configuración y conexiones de los equipos encargados de la lógica y el control del proceso, sin embargo, dicha información se encuentra en el Anexo D. Por la misma razón el detalle del detector de estado estacionario se encuentra en el anexo E.

La implementación de la simulación del CSTR se realiza mediante un algoritmo en un *script* en *InTouch* el cual se basa en los balances y de materia y energía mencionados y detallados anteriormente. Se construye un HMI en el cual el usuario puede ingresar el valor de la concentración inicial de A en [mol/L] y en base a los valores de flujo de alimentación, refrigeración y las temperaturas registradas por los sensores de temperatura, se obtienen el valor de las demás variables virtuales.

La implementación del calor de reacción resultante se realiza mediante la placa calefactora de TK-102, a través de la siguiente ecuación se puede convertir el calor de reacción en potencia eléctrica a suministrar por la placa calefactora.

$$P [\%] = \frac{100}{1500} \cdot (-Q_{RX} [W]) \quad (36)$$

Existen varias limitaciones a la hora de implementar la simulación, una de las más notorias es la ya mencionada del calor de reacción, por tanto, se deben seleccionar parámetros cinéticos y de reacción acorde a esta limitante.

En la Figura 2.5. se presenta el diagrama de bloques del funcionamiento de reactor híbrido donde primeramente se registran los valores de entrada los cuales son flujo de alimentación, concentración de entrada, flujo de refrigeración, temperatura de entrada del reactor híbrido, temperatura de entrada del refrigerante y potencia para que una vez alcanzado el estado estacionario se registren las salidas reales del proceso: Temperatura del reactor y temperatura de salida del refrigerante. Con estos valores y los valores de las entradas es posible obtener los valores de las variables virtuales: Tiempo de residencia, constante cinética, calor de reacción, calor de pérdidas, concentración de salida y potencia calefactora, este último valor se sobrescribe al valor de potencia entregado en un principio. Esto último genera un problema dado que una vez se suministre el calor requerido al reactor híbrido, se debe esperar hasta que el sistema se encuentre nuevamente en estado estacionario, donde los valores de temperatura del reactor, refrigerante de salida pueden haber cambiado respecto a su valor original, en dicho caso se debe volver a realizar la simulación hasta que estos valores no cambien. Esto evidentemente puede llevar varias iteraciones y como cada repetición necesita un tiempo determinado para alcanzar el estado estacionario, se puede requerir de un tiempo considerable, solo para implementar la simulación.

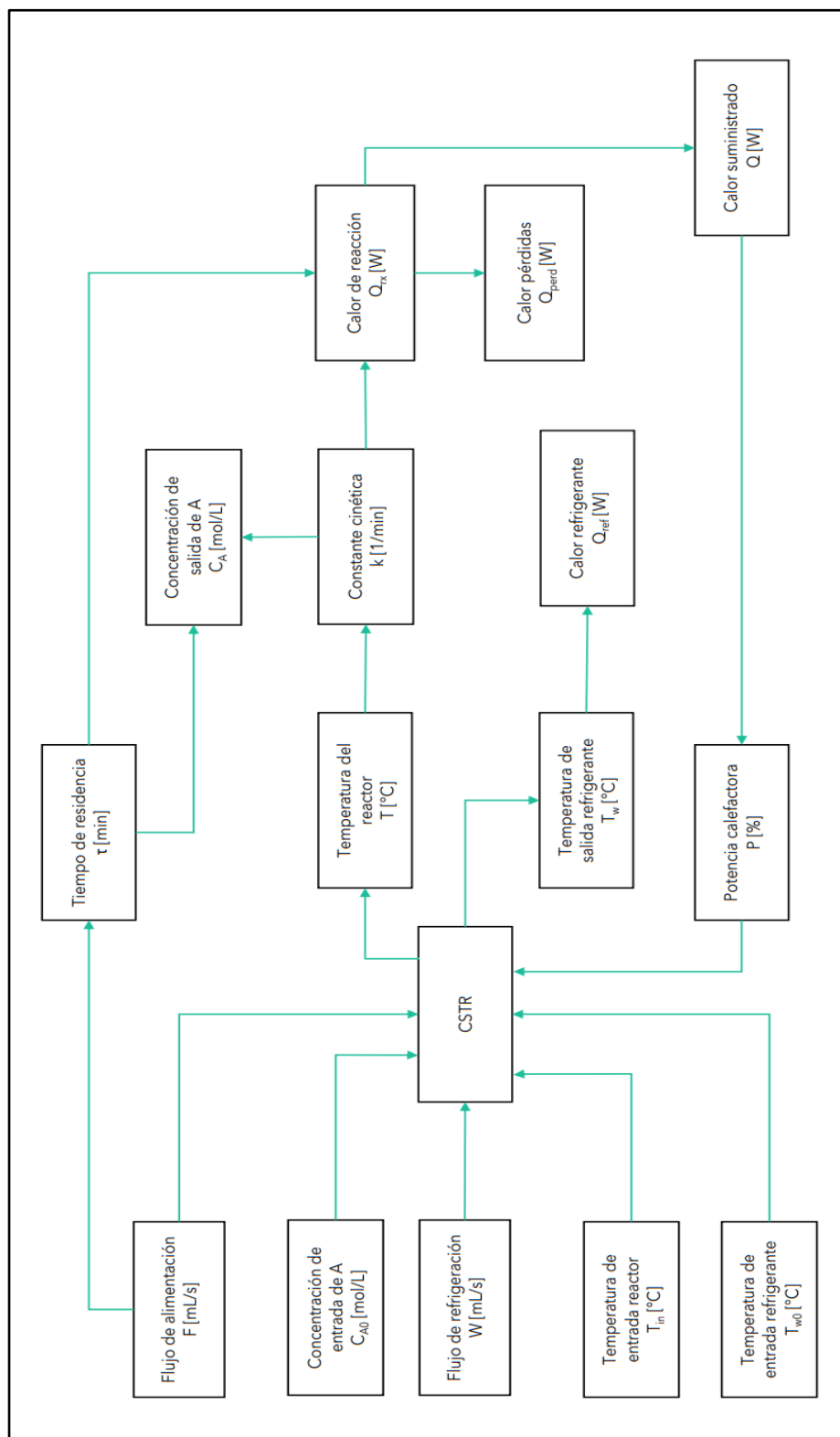


Figura 2.5 Diagrama de bloques de la simulación del reactor CSTR.

2.5. FUNCIONAMIENTO DEL CONTROLADOR

El funcionamiento del control del proceso a implementarse es el siguiente; el operador del reactor híbrido selecciona el estado de las variables de flujo de alimentación y refrigeración y la concentración de entrada de A para que a través de los valores de temperatura (alimentación, reactor y refrigerante) y el simulador incorporado, obtener el valor de concentración de salida de A solo cuando se verifique el estado estacionario del proceso. El control de la concentración de salida viene dado por el sistema experto, el cual en base a los valores de los recursos decide los cambios a efectuar en algún o algunos valores de las entradas para cumplir el objetivo de concentración de salida del reactor, como se menciona anteriormente este proceso es iterativo y por ende requiere tiempo, mientras más iteraciones se realicen más tiempo se requerirá por lo que se desea que el controlador cumpla el objetivo en el menor número de iteraciones posibles.

A continuación, en la Figura 2.6 se presenta un diagrama resumen del funcionamiento del controlador experto-difuso del proceso. Donde el término u_{sp} se refiere a los valores de entrada registrados por el operador del reactor híbrido, d hace alusión a las perturbaciones presentes en el sistema, y son las salidas del sistema, u' es la cuantificación de los cambios sobre u_{sp} que el sistema experto-difuso estima convenientes para cumplir el objetivo establecido, u son los valores resultantes de las entradas u_{sp} al efectuarse los cambios u' finalmente y y_{sp} son los valores objetivos que desea obtener en el sistema experto.

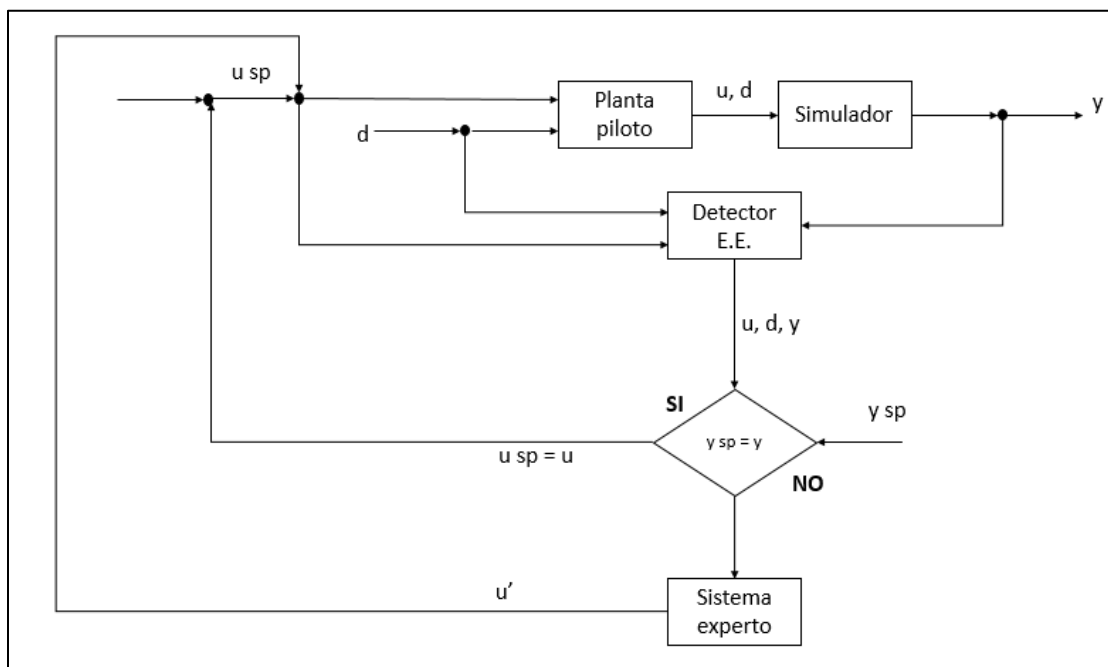


Figura 2.6 Diagrama de bloques del controlador experto-difuso del reactor híbrido.

3. IMPLEMENTACION CONTROL EXPERTO-DIFUSO

Los sistemas expertos se denominan así dado que se basan en modelos de conocimiento previamente definidos por expertos en el dominio del sistema que se está controlando. El controlador de sistema experto emplea un conjunto de reglas lógicas y algoritmos para analizar y procesar la información del sistema en tiempo real. Estas reglas están diseñadas para capturar el conocimiento y la experiencia de los expertos en el dominio, y se utilizan para determinar las acciones o ajustes necesarios para mantener el sistema en un estado óptimo. El controlador de sistema experto puede utilizar diversas técnicas de inteligencia artificial, como la lógica difusa, sistemas basados en reglas, redes neuronales, entre otras, dependiendo de la naturaleza del problema y los requisitos del sistema. Estas técnicas permiten al controlador adaptarse y aprender del comportamiento del sistema, mejorando así su desempeño y capacidad de toma de decisiones a lo largo del tiempo (Acedo, 2006).

Los controladores expertos más típicos de los de lógica binaria, estos controladores son algoritmos que emplean reglas de decisión codificadas en lógica binaria, es decir, totalmente verdadero (1) o totalmente falso (0). Estos controladores actúan de buena forma cuando el problema a resolver es de carácter lineal o bien lineal por tramos.

Dada el alta grado de no linealidad del proceso los controladores expertos del tipo binario no permiten caracterizar el proceso de buena manera sino es con un elevado número de reglas, es por ello que el controlador experto que se selecciona es uno de tipo experto-difuso o *fuzzy logic*, por su nombre en inglés, en el siguiente apartado se explica con mayor profundidad este tipo de controlador experto.

3.1. SISTEMA EXPERTO-DIFUSO

Para el caso de los controladores expertos-difusos se emplea la lógica difusa (*fuzzy logic*) la cual es un enfoque del campo de la inteligencia artificial y la matemática que se utiliza para modelar y tratar la incertidumbre y la imprecisión en los sistemas y las tomas de decisiones. A diferencia de la lógica binaria, que se basa en valores de verdad absolutos (verdadero o falso), la lógica difusa permite la representación de valores de verdad parciales o grados de pertenencia, lo que es más adecuado para situaciones en las que las fronteras entre categorías son borrosas.

Según Zadeh (2004), los conceptos clave para entender el funcionamiento de lógica difusa son:

- Conjuntos difusos: En lugar de tener conjuntos con límites definidos, la lógica difusa trabaja con conjuntos difusos en los que los elementos pueden pertenecer parcialmente a un conjunto. Cada elemento se caracteriza por un grado de membresía, que es un número entre 0 y 1 que indica el grado en que el elemento pertenece al conjunto.

- Funciones de membresía: Cada conjunto difuso está definido por una función de membresía que asigna un grado de pertenencia a cada elemento en función de su relación con el conjunto. Estas funciones pueden ser de diferentes formas, como triángulos, trapecios o curvas sigmoideas. Las funciones de membresía afectan directamente el comportamiento del sistema experto por ello es de vital importancia seleccionar las funciones que mejor reflejen el comportamiento del sistema, para ello se debe utilizar la mayor información que se tenga del proceso.
- Operaciones difusas: La lógica difusa incluye operaciones difusas que permiten combinar conjuntos difusos y realizar operaciones lógicas difusas, como conjunción (*AND*) y disyunción (*OR*), de manera que los resultados sean también valores difusos.
- Reglas difusas: En un sistema de lógica difusa, las decisiones se basan en reglas difusas que expresan relaciones entre variables difusas. Estas reglas suelen tener una estructura *IF-THEN* y se utilizan para determinar cómo afecta una variable a otra. Las reglas junto con las funciones de membresía son los elementos que definen la superficie de respuesta del sistema experto de lógica difusa y por ende las salidas que obtenidas.
- Inferencia difusa: La inferencia difusa es el proceso de aplicar las reglas difusas para tomar decisiones o realizar cálculos basados en las variables difusas de entrada (Zadeh, 2004).

3.2. CONSTRUCCIÓN DEL CONTROLADOR EXPERTO-DIFUSO

El sistema en cuestión depende de numerosas variables, sin embargo, no todas presentan un efecto significativo como para ser tomado en cuenta por el controlador, algunas variables tienen un efecto tan reducido que para fines práctico pueden despreciarse. Además, existen variables que es muy difícil o prácticamente imposibles de controlar, por ejemplo, la temperatura ambiente, dichas variables en caso de incluirse deben ser en forma de perturbaciones del sistema, pero no como variables a controlar. Una vez, seleccionadas las variables a emplear en el sistema experto se deben dividir en entradas y salidas. Se considera como entradas de un sistema experto a los datos, la información o las preguntas que un usuario o un sistema de software proporciona al sistema para que lo procese. Las entradas o antecedentes se utilizan para consultar el conocimiento del sistema experto y solicitar recomendaciones o respuestas basadas en ese conocimiento. Las salidas por otra parte son las respuestas, recomendaciones o conclusiones que el sistema experto proporciona como resultado de procesar las entradas. Estas salidas se basan en el conocimiento experto que ha sido codificado en el sistema y en la lógica de inferencia utilizada para razonar sobre las entradas. Las salidas pueden variar en forma y contenido según la aplicación del sistema experto.

Para el caso particular de este trabajo, se desea controlar la concentración de salida de A, por tanto, obligatoriamente esa es una de las entradas del sistema experto. A su vez dicha

concentración viene delimitada por las condiciones bajo las cuales se opera el sistema, por lo que también hay que agregar a las entradas al flujo de alimentación F , el flujo de refrigeración W y la concentración de entrada C_{A0} . A su vez la temperatura de la alimentación y del refrigerante podrían agregarse como entradas, sin embargo, en este caso en particular estas variables cambian muy poco por lo que se pueden considerar perturbaciones del sistema.

Las salidas deben ser aquellas que se puedan manipular para generar un cambio en el sistema, para el CSTR se tienen 3 variables en concreto: El flujo de alimentación F , el flujo de refrigeración W y la concentración de entrada C_{A0} . Sin embargo, ni la variable de concentración de entrada ni el flujo de alimentación se controlan en los casos industriales reales. Por lo tanto, el sistema experto considera como salida únicamente el flujo de refrigeración W . La Figura 3.1 resumen lo mencionado mediante el diagrama de bloques del sistema experto-difuso del reactor híbrido.

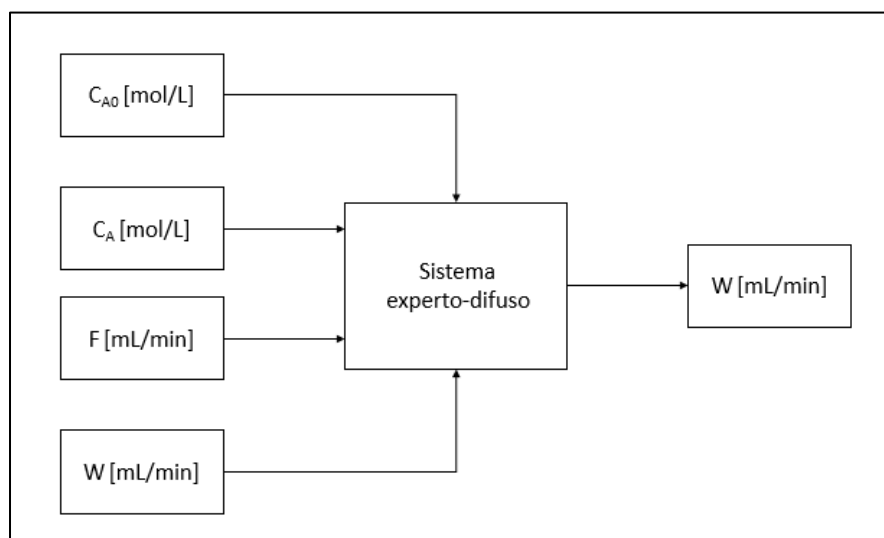


Figura 3.1 Sistema experto con lógica Difusa del reactor híbrido

Una vez se conoce la estructura del controlador experto se define un nivel para cada variable, esto a fin de poder definir el proceso según el estado de las variables, lo que le permitirá tomar decisiones al sistema experto. Se definen 3 estados posibles para cada variable: bajo, medio y alto. En la Tabla 3.1 se presentan los valores límites de cada nivel para cada una de las variables.

Tabla 3.1 Niveles de cada variable.

	F [mL/s]	W [mL/s]	C _{A0} [mol/L]	C _A [mol/L]
Bajo	0-8	10-16	0-0.4	0-0.014
Medio	5-14	13-21	0.2-0.8	0.012-0.016
Alto	11-15	18-25	0.6-1.0	0.014-0.030

Por otra parte, para definir las funciones de membresía normalmente se utiliza la información experimental, dado que no existen antecedentes del proceso, a priori no hay información para definir las funciones de membresía del proceso, por lo que se utilizan funciones de membresía conservadoras, por tanto, se seleccionan funciones de tipo trapezoidal. La Figura 3.2 muestra un ejemplo de dicho tipo de función.

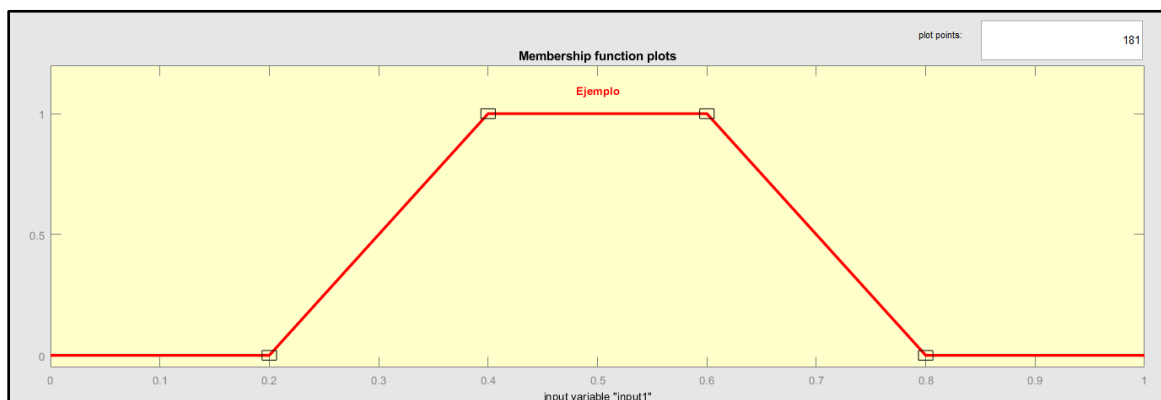


Figura 3.2 Ejemplo de función de membresía trapezoidal.

Se utiliza la *Toolbox de Matlab fuzzy logic* para generar el sistema experto del proceso, se generan funciones de membresía trapezoidales en el rango establecido anteriormente para cada una de las variables y niveles. La Figura 3.3 muestra el sistema experto-difuso del proceso creado con la *Toolbox de Matlab*.

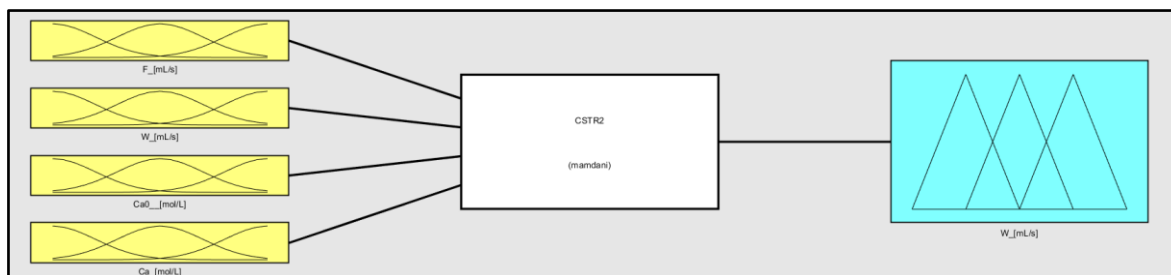


Figura 3.3 Sistema experto difuso del reactor CSTR.

Se destaca que para el caso del flujo refrigerante (tanto para la variable de entrada como para la salida) se crean dos funciones extra de membresía, estas son “Sat 1” y “Sat 2”. Esto con el

fin de saturar el recurso cuando sea necesario, es decir, enviar el flujo W a su valor mínimo o al máximo respectivamente. Ya que dada la distribución no es posible alcanzar dichos valores solo con las 3 funciones de membresía. Además, se define el rango óptimo de la concentración de A (*Setpoint*) como $[0.013-0.015]$, se acota especialmente la función de membresía “Medio” por lo que esta variable la función no suma 1 en todo su rango esto con el fin de hacer más sensible el sistema experto en ese nivel, además como se menciona más adelante las reglas se construyen con el operador lógico de *AND* por lo que el hecho de que no sumen 1 no es un problema a la hora de obtener el resultado de salida ya que para un valor perteneciente a distintos niveles siempre se considera el valor mínimo de la función de pertenencia. Las Figuras 3.4, 3.5, 3.6 3.7 muestran respectivamente las 3 Funciones de membresía de W , F , C_{A0} y C_A las cuales corresponden a las entradas. Mientras que la Figura 3.8 muestra las 3 Funciones de membresía de la salida, vale decir, de W .

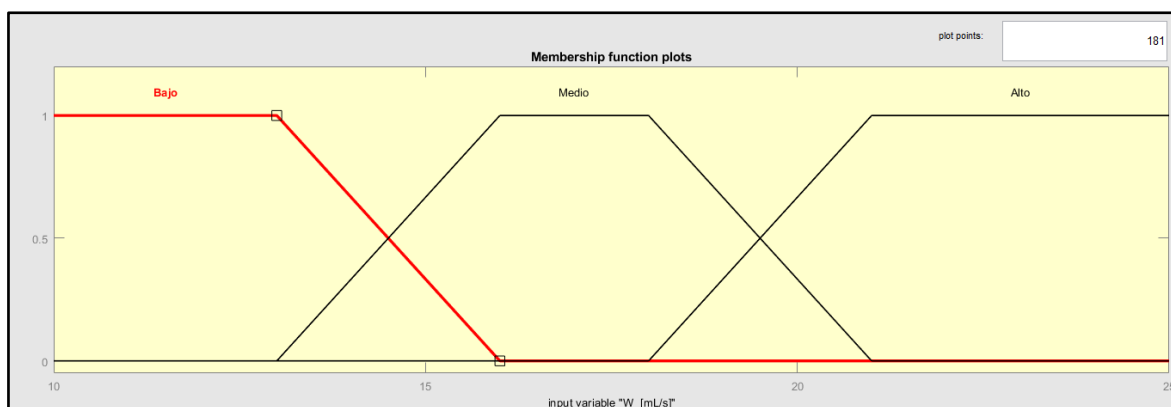


Figura 3.4 Funciones de membresía de W (entrada).

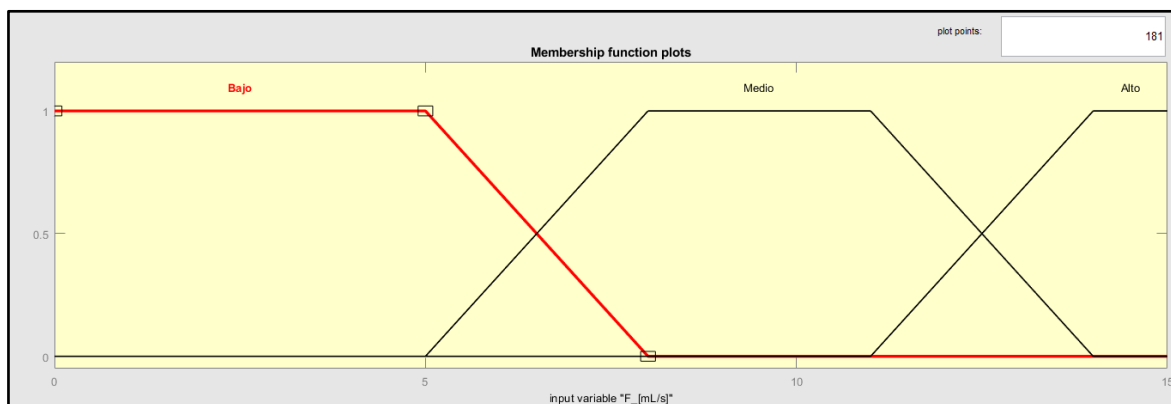


Figura 3.5 Funciones de membresía de F .

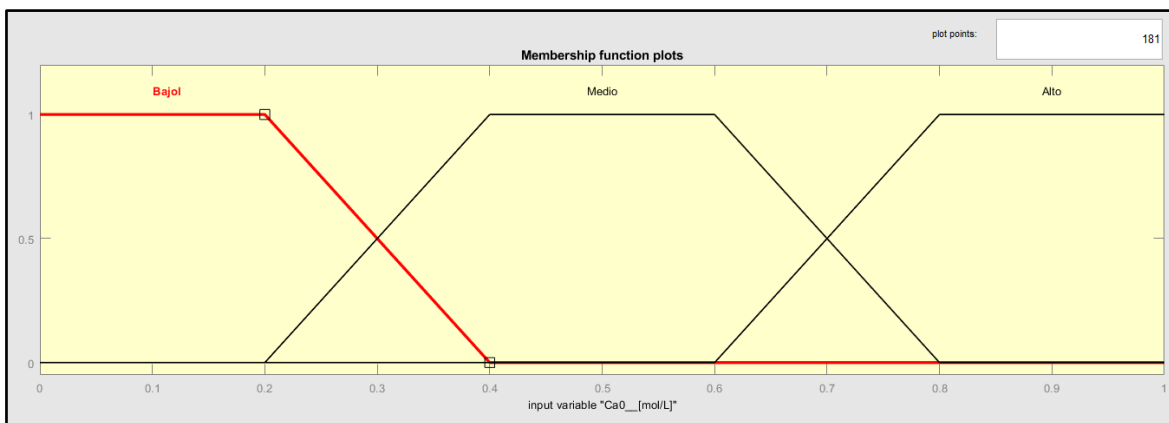


Figura 3.6 Funciones de membresía de Ca_0 .

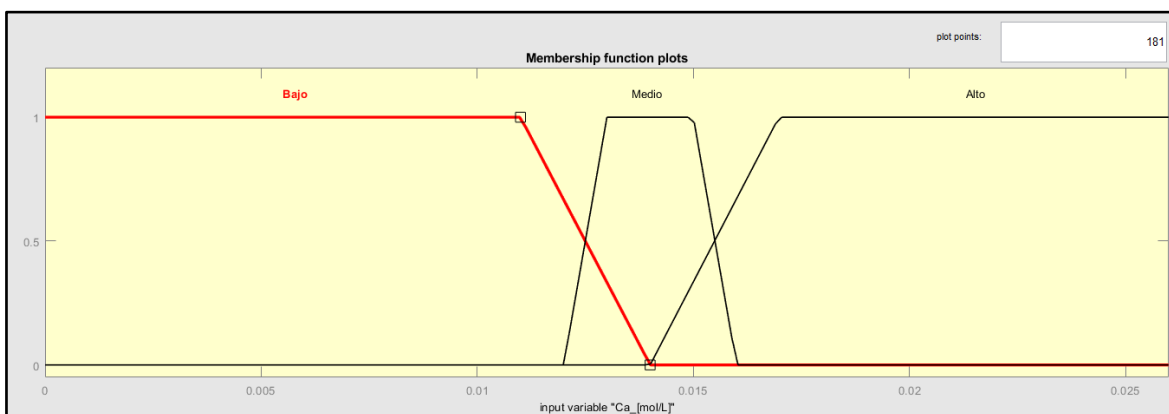


Figura 3.7 Funciones de membresía de Ca .

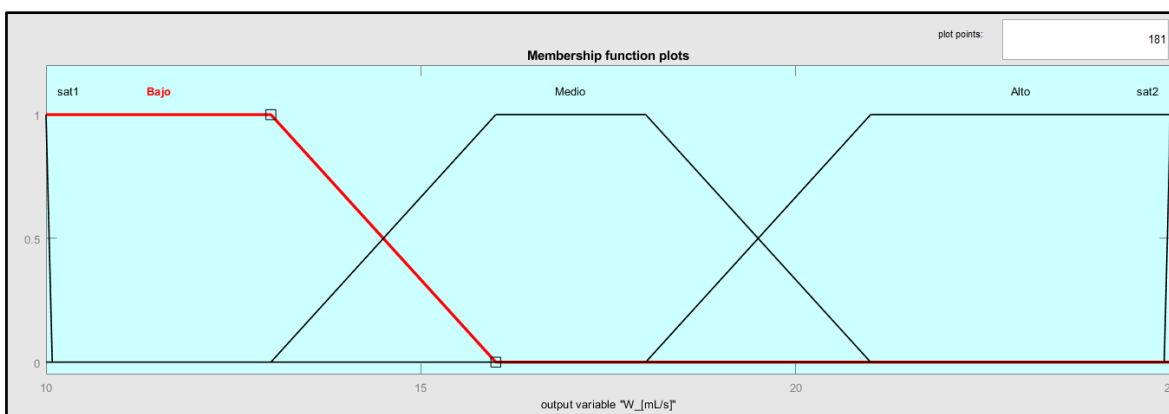


Figura 3.8 Funciones de membresía de W (Salida).

3.2.1. Reglas del sistema Experto-Difuso

Se define una regla para cada estado posible, dado que hay 4 variables con 3 niveles cada una, luego la cantidad de reglas equivale a 3^4 , es decir, 81 reglas (ver Anexo F).

La *Toolbox* de *Matlab* permite obtener las superficies de respuesta de la salida en base a las entradas, donde la más importante es mostrada en la Figura 3.9 la cual corresponde a la superficie W vs C_A en donde se observar que los cambios ocurren entre 0.012 y 0.016 aproximadamente, esto es lo esperado ya que en esta región se definieron las actuaciones y por tanto las reglas del sistema experto. Adicionalmente se tienen las curvas de nivel de la salida para 2 entradas, en la Figura 3.10 se presenta la superficie de respuesta W vs C_A y F y por su parte en la Figura 3.11 se muestra la superficie de respuesta W vs C_A y C_{A0} . Observando que las variables F y C_{A0} efectivamente poseen un efecto en el cambio del flujo de refrigerante, pero este efecto es menor respecto a los cambios generados por la concentración de salida A donde el flujo W es muy sensible a los cambios en la concentración de salida de A .

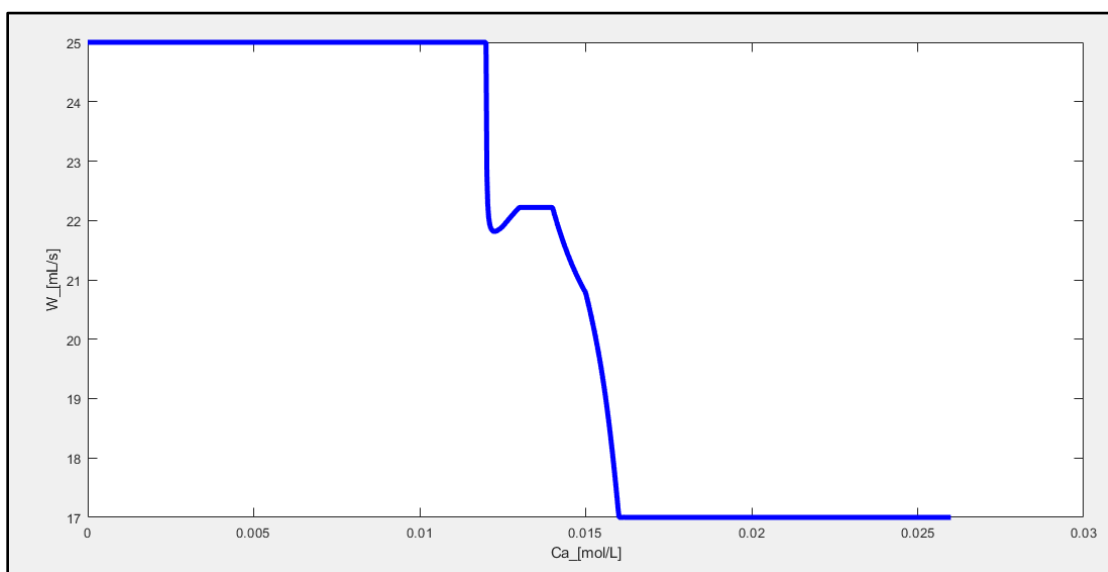


Figura 3.9 Superficie de respuesta W vs C_A .

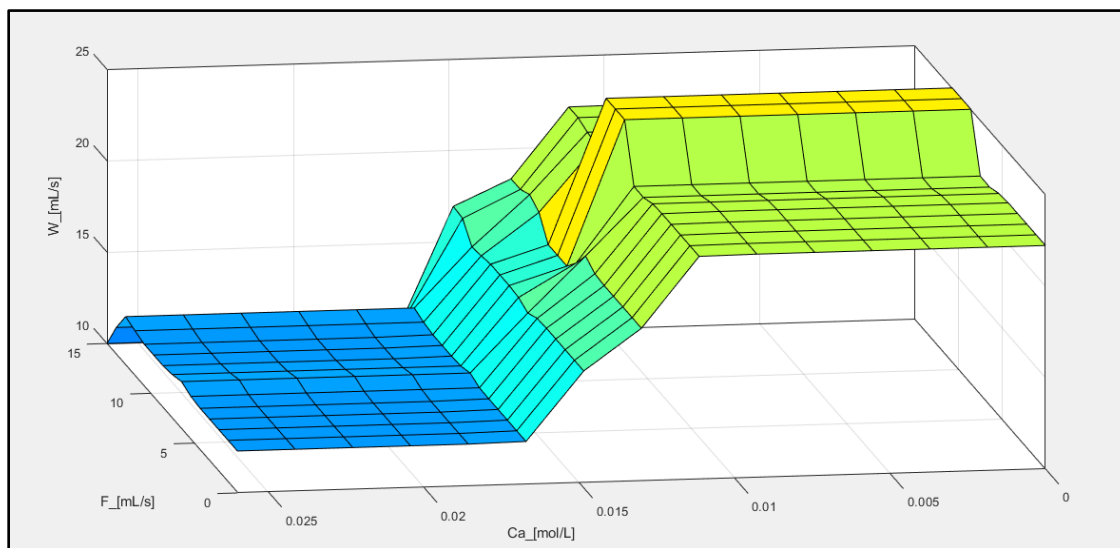


Figura 3.10 Superficie de respuesta W vs C_A y F .

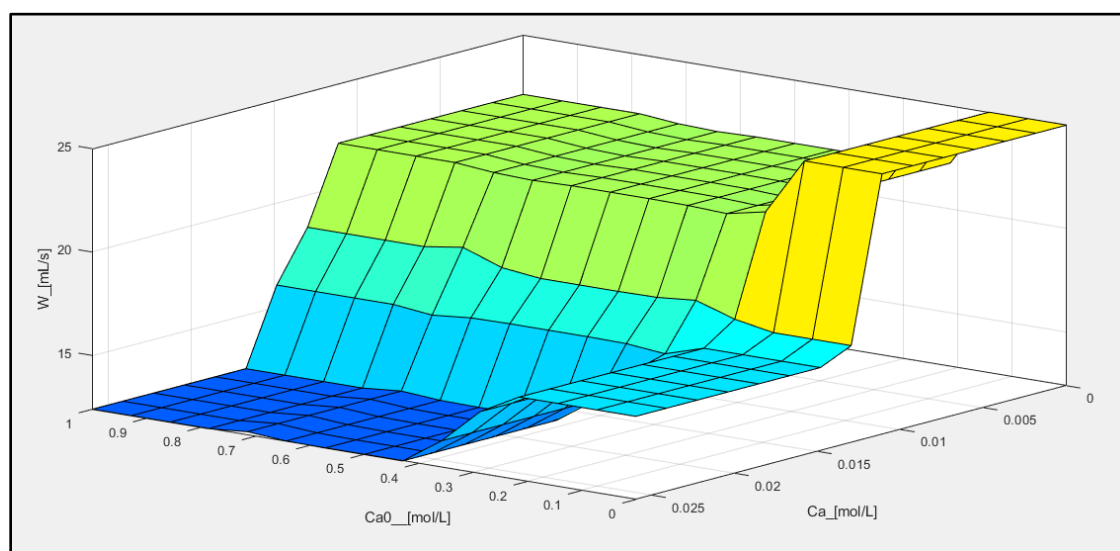


Figura 3.11 Superficie de respuesta W vs C_A y Ca_0 .

3.3. EVALUACIÓN DEL CONTROLADOR EXPERTO-DIFUSO

Para evaluar el funcionamiento del controlador experto-difuso se inducen condiciones aleatorias del proceso y se busca llegar al valor de conversión objetivo en base a los cambios que dicta el sistema experto, se espera un número reducido de iteraciones, en el mejor de los casos una sola. En caso de que el sistema experto no sea preciso y/o se demore en converger, se debe considerar aplicar cambios al sistema, ya sea agregando variables, niveles, cambiando las funciones de membresías, modificando y agregando reglas, etc.

Las tablas 3.1, 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5 muestran los resultados de 5 pruebas independientes realizadas al proceso con el fin validar el controlador experto-difuso, dichas pruebas fueron hechas el mismo día y con una temperatura ambiente aproximada de 21 [°C] la cual fue disminuyendo levemente a medida que transcurría el día, sin embargo, puede considerarse constante a fines prácticos. También se registra la temperatura del tanque de alimentación y de entrada de refrigerante son iguales a 20.9 y 20.7 [°C] respectivamente.

Tabla 3.1 Caso 1 del sistema experto.

Iteración	0	1	2
C _A	0,0183	0,0164	0,0148
C _{A0}	0,75	0,75	0,75
W	22	17	12.4
F	8,5	8,5	8,5

Tabla 3.2 Caso 2 del sistema experto.

Iteración	0	1	2	3
C _{A0}	0,87	0,87	0,87	0,87
C _A	0,0212	0,0181	0,0163	0,014
W	20	15,8	12,3	10
F	10	10	10	10

Tabla 3.3 Caso 3 del sistema experto.

Iteración	0	1	2
C _{A0}	0,62	0,62	0,62
C _A	0,0169	0,0151	0,0142
W	25	17	15,6
F	6,7	6,7	6,7

Tabla 3.4 Caso 4 del sistema experto.

Iteración	0	1	2
C_{A0}	0,55	0,55	0,55
C_A	0.0124	0.0124	0,0133
W	13	13,1	14
F	7	7	7

Tabla 3.5 Caso 5 del sistema experto.

Iteración	0	1	2	3
C_{A0}	0,65	0,65	0,65	0,65
C_A	0,0258	0,204	0,0197	0,0178
W	25	13,9	12.7	10
F	14	14	14	14

Se observa que el sistema logra llevar al rango deseado en torno a 2 iteraciones en la mayoría de los casos, cumpliendo el objetivo salvo en el caso 5, en donde el sistema satura el recurso no cumpliéndose el objetivo para este último caso, sin embargo, esto es más un error en la delimitación de los rangos operacionales que un error del sistema experto como tal, puesto que el sistema avanza en la dirección correcta. Sin embargo, el flujo F es muy grande, por lo tanto, el tiempo de residencia es muy pequeño lo cual no permite al reactivo A reaccionar para cumplir con el objetivo de concentración de salida.

Dados las pocas iteraciones requeridas por el sistema experto-difuso no es necesario aplicar algún cambio al sistema.

Es importante destacar que la solución en todos los casos converge de forma asintóticamente esto debido a que los cambios son conservadores dado a los tipos de funciones de membresía seleccionados, en caso de querer converger a la solución más rápido se pueden modificar los tipos de las funciones de membresía a unos del tipo triangular. Además, dado que la variable de concentración de salida es la que más afecta la salida W, las funciones de membresía de C_A son las que al cambiarlas aceleraran más los cambios, siendo especialmente importante la función de membresía “Medio”. La Figura 3.12 se muestra un ejemplo de una función de membresía triangular con vértices en los puntos (0,0.5,1).

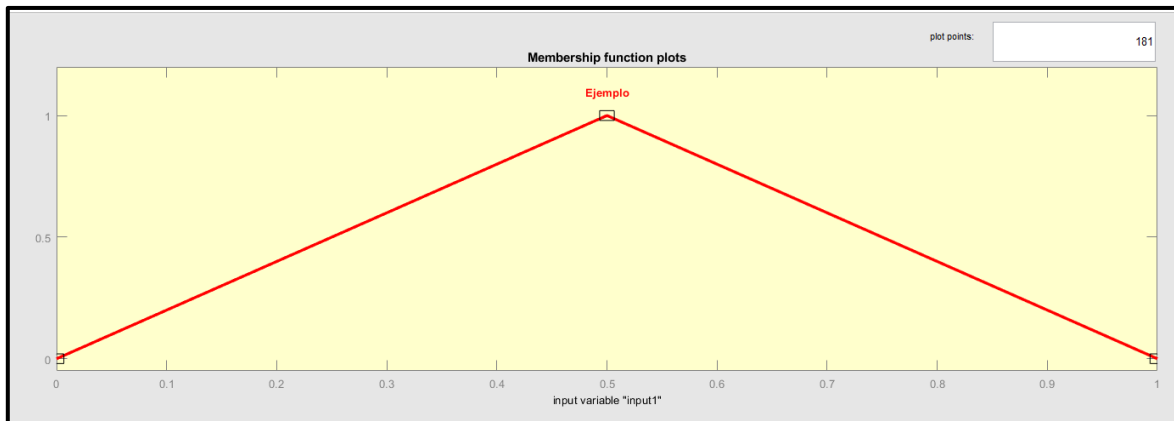


Figura 3.12 Ejemplo de función de membresía triangular.

Otra forma de reducir el número de iteraciones es mediante el uso de un modelo que evalúe en línea los cambios que el controlador experto-difuso desea implementar al sistema. Esta solución es más novedosa e interesante que cambiar las funciones de membresía y es abordada en el siguiente capítulo del trabajo.

4. IMPLEMENTACION CONTROL EXPERTO-DIFUSO APOYADO POR GEMELO DIGITAL

Un *digital twin*, o gemelo digital, se refiere a una réplica virtual en tiempo real de un objeto, sistema o proceso físico. Un *digital twin* permite la simulación, monitorización y análisis del rendimiento y comportamiento de su contraparte física, lo que permite a los usuarios tomar decisiones más informadas y realizar mejoras en tiempo real (Tao *et al.*, 2019).

El *digital twin* generado para el proceso corresponde a un modelo PLS en línea del reactor híbrido, el cual se construye a través de un diseño experimental el cual se detalla más adelante.

4.1. METODOLOGÍA PLS

Los métodos de proyección son algoritmos utilizados en cálculos multivariantes que permiten manejar la información de un sistema de manera más eficiente. Estos métodos se basan en medir la correlación entre las variables de una muestra específica y generar una estructura de menor dimensión que represente los datos originales. Uno de los métodos más conocidos es el Análisis de Componentes Principales (*Principal Components Analysis*, PCA), el cual busca comprender el comportamiento global de un grupo de variables a través de un número reducido de componentes principales. El análisis PCA calcula la estructura de estos nuevos componentes principales mediante la interacción de las variables originales, lo que permite comprimir la información global en un menor número de variables. Una vez explicado el análisis PCA, se puede entender de mejor forma la metodología PLS, la cual es una técnica estadística multivariante que se basa en una combinación de regresión y análisis de componentes principales (PCA). La Figura 4.1 presenta un ejemplo de un problema de 3 variables reducido a 2 PC usando el método PCA (Gomez, 2008).

En el contexto del PLS se busca comprender el sistema al relacionar las variables de entrada con las variables de salida mediante una reducción de la dimensionalidad de ambas. Luego, se procura establecer una relación lineal entre los componentes principales de las variables de entrada y salida.

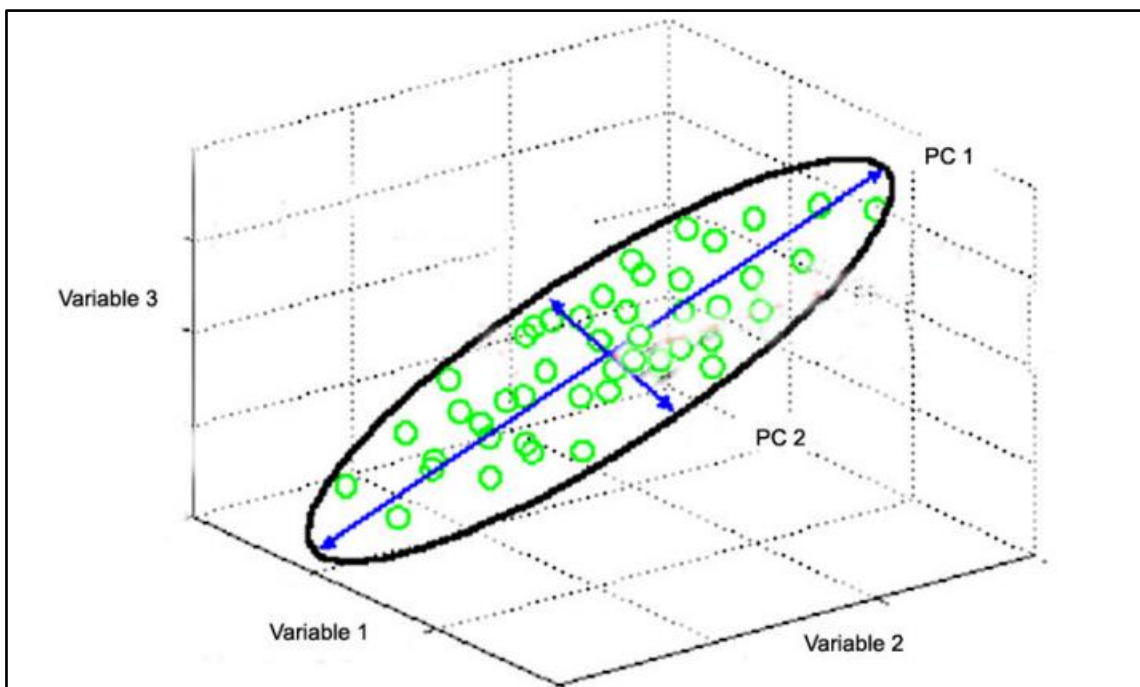


Figura 4.1 Representación de un problema de 3 variables usando métodos de proyección (Gomez, 2008).

4.1.1. Algoritmo regresión PLS

Si bien la regresión PLS es obtenida mediante el uso de un software comercial, es importante entender o mínimamente conocer el proceso de obtención de dicho modelo. En la literatura es posible encontrar detalladamente el proceso de obtención de una regresión PLS tanto con enfoques matemáticos como geométricos, a continuación, se presenta la explicación dada por Cruz (2014) dado que se considera la más fácil de entender sin dejar de lado los aspectos matemáticos del método.

Para iniciar el algoritmo se requiere de únicamente de dos matrices: X e Y siendo X una matriz centrada de $N \times P_1$ y por su parte Y una matriz centrada de $N \times P_2$. Donde N corresponde al número de filas y P_1 , P_2 al número de columnas de cada matriz.

Una vez dicho lo anterior se da inicio al algoritmo (Cruz, 2014):

- 1) Se selecciona un vector inicial cualquiera para el primer componente de Y ($t_{(2)i}$).
- 2) $w_1 = \frac{X^T t_{(2)i}}{t_{(2)i}^T t_{(2)i}}$
- 3) $W = \frac{w_1}{\|w_1\|}$
- 4) $t_{(1)i} = XW$
- 5) $c_1 = \frac{Y^T t_{(1)i}}{t_{(1)i}^T t_{(1)i}}$

$$6) C = \frac{c_1}{\|c_1\|}$$

$$7) t_{(2)i} = \frac{Y^T C}{C^T \cdot C}$$

8) Se debe iterar los pasos 2 al 7 hasta lograr la convergencia de C , lo que implica que $t_{(2)i}$ también debe converger.

$$9) p = \frac{X^T t_{(1)i}}{t_{(1)i}^T \cdot t_{(1)i}}$$

$$10) q = \frac{Y^T t_{(2)i}}{t_{(2)i}^T \cdot t_{(2)i}}$$

$$11) b = \frac{t_{(2)i} \cdot t_{(1)i}}{t_{(1)i}^T \cdot t_{(1)i}}$$

$$12) X = X - t_{(1)i} p^T, Y = Y - b t_{(1)i} c^T$$

Para calcular las convergencias o los valores propios se emplea típicamente el método de potencia, el cual corresponde a un método numérico capaz de converger de forma rápida típicamente en menos de 10 iteraciones, sin embargo, explicar dicho método o sus variantes escapa del límite de batería de este trabajo además de que tampoco es de gran aporte al entendimiento del método.

4.1.2. Diagnóstico de datos

Dado que el modelo se obtiene de una regresión PLS es importante obtener la mayor cantidad posible de información de los datos, por lo tanto, se requiere especial cuidado con los *outliers* o fallos.

Un fallo se define como un alejamiento de la operación normal o una diferencia en la correlación entre las variables en comparación con la operación considerada como normal (Acosta, 2007).

Al tratarse de problemas con alta dimensionalidad la detección de datos anómalos no es tan simple, por ejemplo: considere una persona que mide 1.85 [m] y pesa 40 [kg]. De manera individual ambos valores pueden ser catalogados como normales, pero al combinarlos se trataría de un caso evidentemente atípico.

En el caso de la metodología PLS (y PCA), existen dos estadígrafos que comúnmente se utilizan para la detección de datos anómalos: el estadígrafo de *Hotelling* T^2 y el estadígrafo Q .

El estadígrafo de *Hotelling* T^2 , en el contexto del método PLS, es un indicador que evalúa la distancia multivariada entre las observaciones actuales y el estado normal del sistema. Este estadígrafo se basa en los componentes latentes generados por el PLS y mide la magnitud de la desviación de un nuevo conjunto de observaciones con respecto a las condiciones operativas normales. En esencia, cuantifica cuán lejos se encuentra el sistema de su estado de referencia.

Para calcular el estadígrafo de *Hotelling* T^2 , se realiza una medición del error cuadrado de los *scores* normalizados en relación con su media. Esto implica calcular la discrepancia en la dirección de los componentes latentes entre las observaciones actuales y el estado normal. El valor global del estadígrafo se obtiene sumando el error cuadrado entregado por cada variable en un punto dado. Si el valor de T^2 es significativamente alto en comparación con un umbral establecido, se interpreta como una señal de que el sistema ha experimentado una desviación de sus condiciones operativas normales, lo que puede indicar una falla o un cambio en el proceso.

$$T^2 = \sum_{j=1}^k \frac{t_j^2}{\lambda_j} \quad (37)$$

Para calcular la contribución de cada variable de la muestra al estadígrafo T^2 , se requiere definir un parámetro que evalúe la importancia de cada variable en el error global. Este parámetro se basa en las variables que muestran errores significativos en comparación con la desviación estándar (σ) de sus valores. La contribución de una variable se determina como sigue:

$$C_{ij} = p_{ji} \cdot x_i \quad (38)$$

Para terminar, se determina la contribución de cada variable al error global mediante la siguiente expresión:

$$T_j^2 = \frac{t_j}{\lambda_j} \cdot C_{ij} \quad (39)$$

En donde, T_j^2 se define como el aporte del score j-esimo al error de T^2 . Por su parte λ_j corresponde al valor propio del j-esimo score, p_{ij} es un parámetro que se utiliza para determinar qué variables tienen un error significativo en relación con su media y finalmente, C_{ij} es la contribución de la variable i al j-esimo score.

El otro indicador fundamental utilizado en el monitoreo de sistemas multivariados a través del método PLS es el estadígrafo Q. Este estadígrafo se enfoca en la varianza residual de los errores de predicción generados por el modelo PLS. Un aumento significativo en el valor de Q puede indicar que el modelo PLS no se ajusta adecuadamente a las nuevas observaciones o que ha ocurrido un cambio en el sistema que no ha sido capturado por el modelo. En términos más precisos, el estadígrafo Q mide la desviación de un punto de datos con respecto

al subespacio formado por los componentes principales generados por el PLS. Esta desviación representa la variabilidad que no puede ser explicada o capturada por el modelo PLS. En consecuencia, el estadígrafo Q se puede definir como:

El estadígrafo Q se calcula a partir de la diferencia entre el punto de datos real y la proyección de ese punto en el subespacio de los componentes principales generados por el modelo PLS. Esta diferencia se evalúa en términos de la varianza residual, lo que proporciona una medida de cuánta información no está siendo representada por el modelo en las nuevas observaciones. Si el valor de Q es sustancialmente alto, indica que el modelo no es capaz de explicar ciertos aspectos del sistema, lo que puede sugerir una desviación o un cambio en el proceso.

El uso de estadígrafos en el proceso de diagnóstico es crucial para interpretar el estado del sistema, y las configuraciones y diagnósticos se pueden realizar según los siguientes criterios:

1. $-T > T_{limite}$ y $Q < Q_{limite}$: Si el valor del estadígrafo T es mayor que su límite predefinido y el estadígrafo Q es menor que su límite, esto indica que el proceso se encuentra en un punto de operación anormal dentro del subespacio formado por los componentes principales, pero fuera del rango de operación. En otras palabras, el sistema está experimentando una desviación significativa de las condiciones normales de operación, pero esta desviación no se refleja en la varianza de los errores de predicción. Esto podría deberse a una operación fuera de las especificaciones normales.
2. $-T < T_{limite}$ y $Q > Q_{limite}$: Si el valor de T es menor que su límite y el valor de Q supera su límite, esto sugiere que existe una falla en uno o más sensores del proceso. Esto se debe a que el punto de observación forma parte de la matriz de error que está fuera del subespacio de los componentes principales. En este caso, los valores medidos por esos sensores no coinciden con los valores calculados por el modelo PLS en función de las otras variables, lo que indica una anomalía en los sensores.
3. $-T < T_{limite}$ y $Q < Q_{limite}$: Cuando tanto T como Q están por debajo de sus respectivos límites, esto señala que el sistema se encuentra en un punto de operación normal. Los valores de las variables se correlacionan de manera adecuada, lo que indica que no se aprecian fallas significativas en los sensores del proceso. El sistema opera dentro de sus condiciones normales.
4. $-T > T_{limite}$ y $Q > Q_{limite}$: Cuando tanto T como Q superan sus límites, no se puede realizar un diagnóstico claro. Solo se puede concluir que el punto observado es anormal. (Gomez, 2008)

Estos criterios ayudan a filtrar los datos recolectados a fin de generar una regresión PLS con mejores datos, lo cual se traduce en un mejor modelo.

4.2. DISEÑO DEL GEMELO DIGITAL

El *digital twin* del CSTR se basa en la fenomenología del mismo, entiéndase, los balances de energía y materia del CSTR ya mostrados anteriormente, existen diversas maneras de obtener las variables virtuales, todas de ellas buscan cumplir con los balances lógicamente. Una de ellas, es darse un valor de concentración inicial de A y en base a ello simular el calor de reacción y así obtener la concentración del reactor una vez se estaciona el sistema, sin embargo, esta metodología (y en general todas las variantes que simulan el calor de reacción) como ya fue mencionado antes, tiene la desventaja de que se requieren múltiples iteraciones de la simulación, lo que se traduce en un mayor gasto de tiempo para la recolección de datos, por ello se decide optar por un enfoque en donde el calor suministrado es una variable controlada, por lo que no es necesario iterar, y en conjunto a las demás variables reales, se obtiene un único set de datos de las variables virtuales. La Figura 4.2 detalla las variables del proceso y su clasificación respectiva.

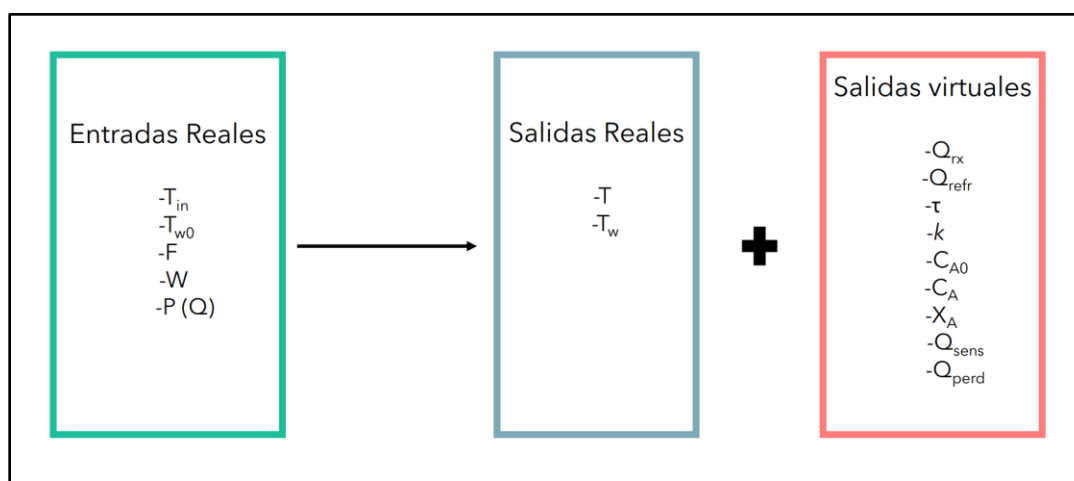


Figura 4.2 Variables de la simulación.

Por otra parte, la Figura 4.3 muestra el diagrama de bloques de la simulación, en donde se observa que dados ciertos valores de las condiciones de entrada al sistema: flujo de alimentación F , flujo de refrigerante W , temperatura entrada del reactor T_{in} , temperatura entrada del refrigerante T_{w0} y potencia calefactora P se obtiene un valor único de temperatura de salida del reactor T y temperatura de salida del refrigerante T_w , luego se puede calcular en primera instancia las variables de Constante cinética k , tiempo de residencia τ y el calor refrigerado Q_{refr} . Finalmente, las variables que resultan calculadas a partir de las anteriores, en lo que podría llamarse un segundo y tercer bloque de variables, a las que corresponden: Calor de reacción, Concentración de salida, Concentración de entrada y la Conversión.

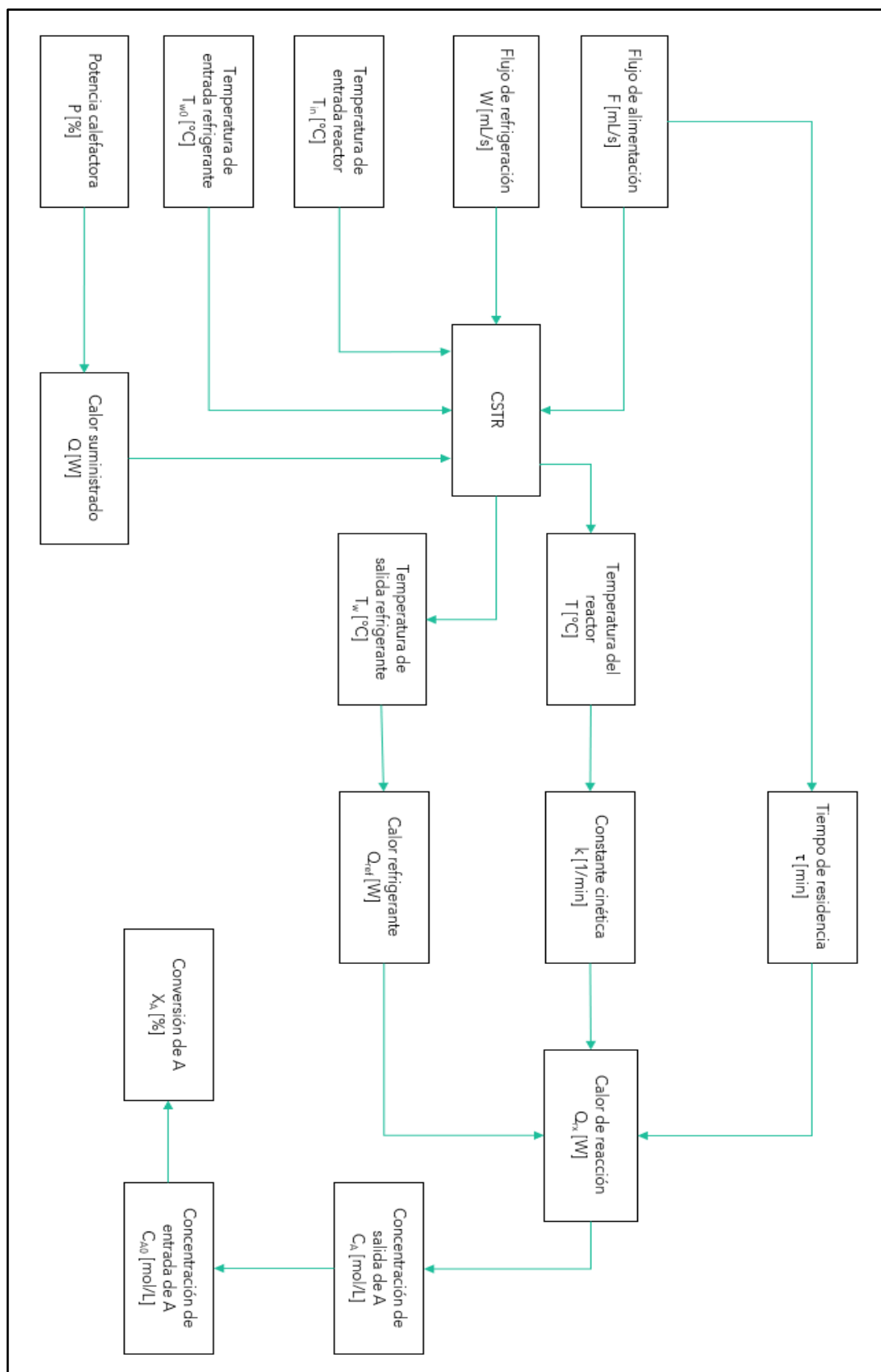


Figura 4.3 Diagrama de bloques de la simulación DT.

Para la construcción del *digital twin* es necesario obtener antes un set de datos, el cual se busca que posea la mayor información posible en el menor número de experimentos, para ello se realiza un diseño factorial de 3 niveles para cada variable real de entrada, salvo las de temperatura pues estas variables no se pueden controlar. Por lo tanto, se diseñan 3 estados: bajo (-), medio (0) y alto (+) para el flujo de alimentación F , la potencia calefactora P y el flujo de refrigeración W , obteniendo un total de 27 experimentos. La Tabla 4.1 muestra los valores de las variables en cada nivel del diseño experimental, mientras que la Tabla 4.2 presenta los rangos de operación de las variables reales.

Tabla 4.1 Diseño experimental del gemelo digital

Nivel	F [mL/s]	W [mL/s]	P [%]
+	15.0	25,00	90.0
0	10.0	16.67	60.0
-	5.0	8.33	30.0

Tabla 4.2 Rangos de operación de las variables reales.

Variable	Símbolo	Rango	Unidad
Temperatura entrada	T_{in}	18-25	°C
Flujo de alimentación	F	5-15	mL/s
Flujo de refrigeración	W	8.33-25	mL/s
Temperatura refrigerante entrada	T_{w0}	18-25	°C
Temperatura refrigerante salida	T_w	19-39	°C
Potencia plato calefactor	P	30-90	%
Temperatura reactor	T	19-40	°C

Adicionalmente, se implementan replicados en los puntos extremos, por lo que se suman 6 experimentos más, lo que en total da un set de 33 experimentos.

Una vez obtenido el set de datos con los valores reales, se procede a obtener los valores de las variables virtuales, para ello primeramente se obtiene el tiempo de residencia τ y la constante cinética k mediante las ecuaciones ya mencionadas anteriormente, también se calcula el calor de refrigeración que viene dado por la siguiente ecuación:

$$Q_{refr} = W \cdot C_p \cdot (T_{w0} - T_w) \quad (40)$$

Dado que T_w es siempre igual o mayor a T_{w0} , el calor de refrigeración será negativo, es decir, se entregará calor al agua de refrigeración y por tanto disminuirá la temperatura del CSTR, el cual es el objetivo de usar un serpentín refrigerante.

Una vez obtenido el valor de Q_{refr} se puede proceder al cálculo del calor de reacción Q_{sen} mediante la siguiente ecuación:

$$Q_{sen} = F \cdot C_p \cdot (T_{in} - T) \quad (41)$$

Mientras que el calor de reacción se obtiene mediante la ecuación 36 anteriormente vista.

Luego las pérdidas se obtienen como:

$$Q_p = Q_{rx} - Q_{sen} - Q_{refr} \quad (42)$$

Para calcular la concentración de A en la salida e interior del CSTR, se usa la ecuación que relaciona el calor de reacción con la concentración de A:

$$Q_{RX} = -\Delta H_{rx} \cdot V \cdot k \cdot C_A \quad (43)$$

Despejando se obtiene lo siguiente:

$$C_A = \frac{Q_{RX}}{-\Delta H_{rx} \cdot V \cdot k} \quad (44)$$

Luego, se obtiene la concentración de entrada de A despejando esta variable de la ecuación de diseño del CSTR (2.4.6).

$$C_{A0} = C_A \cdot (1 + \tau \cdot k) \quad (45)$$

4.3. CONSTRUCCIÓN DEL MODELO PLS

Una vez obtenidas las variables reales y virtuales para todo el set de datos, se procede con la construcción del modelo PLS, para ello se utiliza el software comercial *SOLO* de *Eigenvector studio*. Esta herramienta permite obtener los *principal components* (PC) y ajustar el modelo de acuerdo con el número de PC que el usuario estime conveniente. Para la construcción del modelo PLS se usa el criterio de las varianzas acumuladas, esto es que se selecciona el número de PC que capturen una varianza igual o mayor al 80% tanto para x como para y. Otro aspecto importante del programa es que entrega los valores y las gráficas de los estadígrafos Q^2 y el T^2 , entre otros.

Otro gráfico importante que nos entrega el programa es el de *VIP's scores* (*Variable Importance in Projection scores*), los cuales son una medida utilizada para evaluar la importancia relativa de las variables predictoras en un modelo de regresión multivariante, es decir, entregan información de cuáles son las variables más importantes dentro del sistema.

Finalmente, el software nos entrega el modelo de forma gráfica, comparándola con una línea de 45°, mientras más parecida a dicha línea sea el modelo mejor ajustará a los datos.

Para la construcción del modelo PLS se utiliza la base de datos obtenida mediante el diseño experimental anteriormente expuesta (ver Anexo G). Cabe mencionar que para el modelo PLS se tienen 3 salidas Y, la temperatura del reactor, la temperatura de salida del refrigerante y la concentración de salida de A.

Un aspecto importante para considerar en construcción del modelo PLS es que se divide el conjunto experimental en datos de calibración y testeo en una proporción de 70/30 respectivamente, esto con el fin de prevenir el sobreajuste y evaluar el modelo construido. Es importante que las variables latentes del modelo recojan la mayor información posible para ello se utiliza como criterio que al menos se capture el 80% de la varianza acumulada capturada de X e Y. Otro criterio para tener en cuenta es que la razón de los errores asociados a la validación cruzada y calibración sean cercanos a la unidad y menores a 1,2 (RMSE CV/C). La Figura 4.4 muestra el comportamiento de RMSECV y RMSEC versus el número de variables latentes mientras que la Figura 4.5. presenta como cambia la varianza acumulada al variar el número de variables latentes. Se opta por emplear 4 variables latentes. Siendo el único criterio que no se cumple el de varianza acumulada de Y, donde el máximo alcanzado es de 60% aproximadamente.

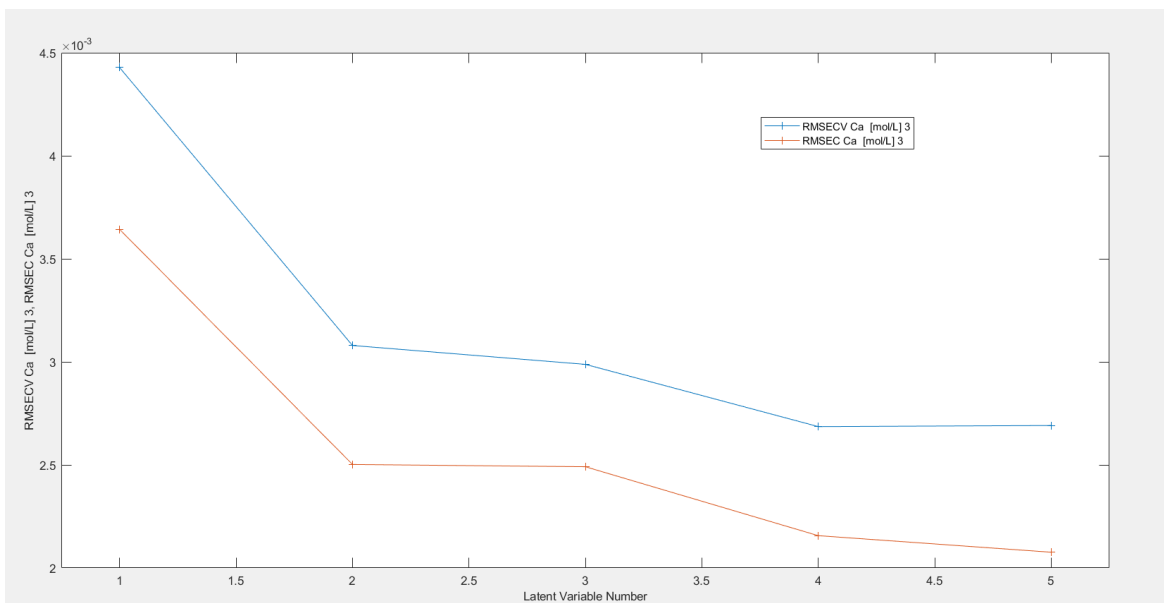


Figura 4.4 RMSECV y RMSEC.

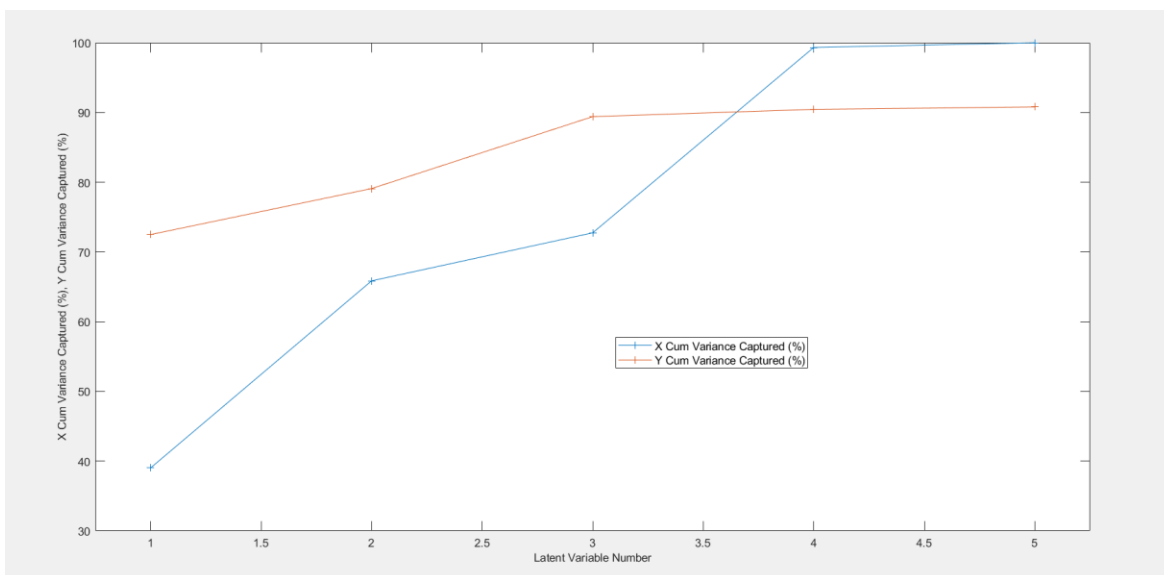


Figura 4.5 Varianza acumulada de X e Y.

Una vez seleccionada la cantidad de variables latentes a utilizar, el programa arroja los estadígrafos T^2 y Q del set de datos, en la Figura 4.6 se observa que todos los datos a excepción de uno se encuentran en la zona de normalidad. Dado que el dato anormal pertenece al conjunto de testeo no se excluye el dato, pues el modelo no se ha construido con dicho dato.

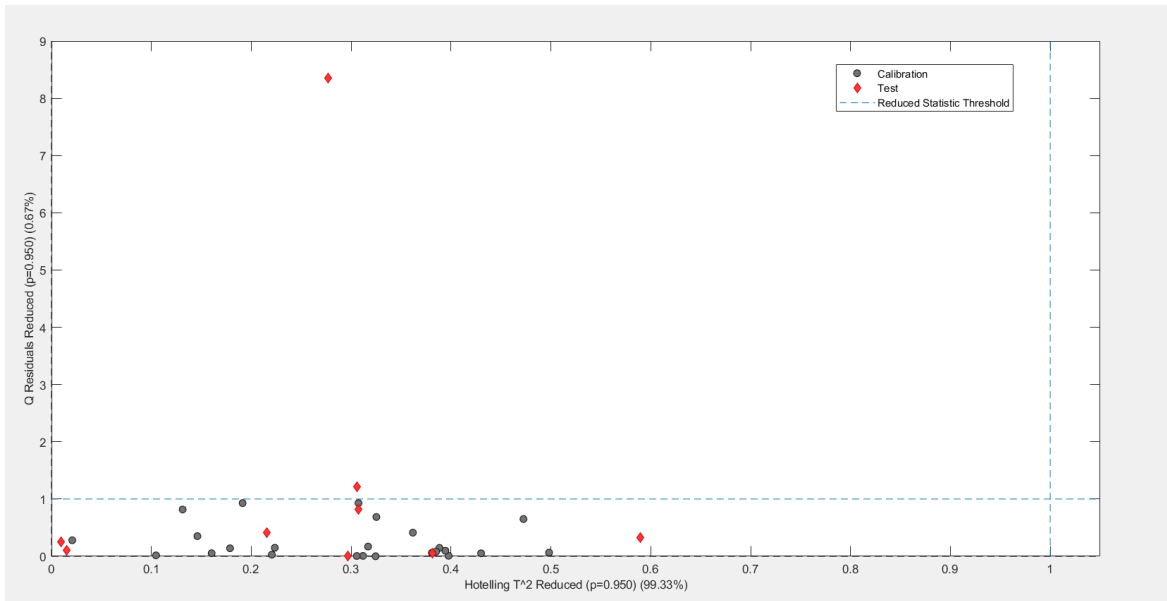


Figura 4.6 Estadígrafo T2 y Q del set de datos.

Ahora se procede a la obtención del modelo, para ello SOLO entrega una representación gráfica del ajuste del modelo PLS con los valores de Y medidos. En la Figura 4.7 se puede notar que el modelo se ajusta bien a los datos dado que se acopla a la línea de 1:1, esta línea corresponde a la intersección entre los datos medidos y los predichos. Se puede notar también que el mayor error del modelo se presenta a los extremos, vale decir, los valores más pequeños y grandes de C_A esto no es un gran problema puesto que la región operacional de C_A para el sistema experto corresponde a 0 y 0.03 [mol/L], siendo el valor 0 alcanzado únicamente cuando no está corriendo la simulación. Además, la Tabla 4.3 presenta los valores de la regresión para cada una de las 5 variables involucradas, esto permite la externalización del modelo hacia otros softwares, como, por ejemplo; EXCEL o bien MATLAB.

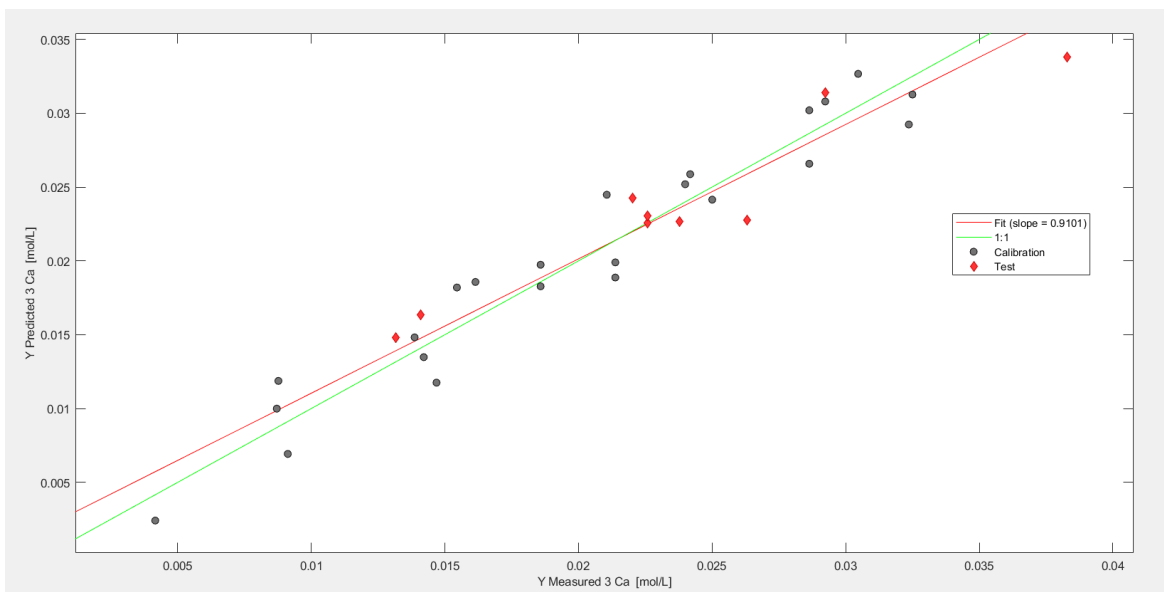


Figura 4.7 Modelo PLS para la concentración de salida de A.

Tabla 4.3 Regresión PLS para C_A .

Variable	Vector de regresión de C_A [mol/L]
F [mL/s]	0,147
W [mL/s]	0,572
T_{in} [°C]	-0,161
T_{w0} [°C]	-0,116
C_{A0} [mol/L]	-0,533

También en la Figura 4.8 se presentan los residuos del modelo, observando que no hay evidencia de sesgo que invalide la regresión generada.

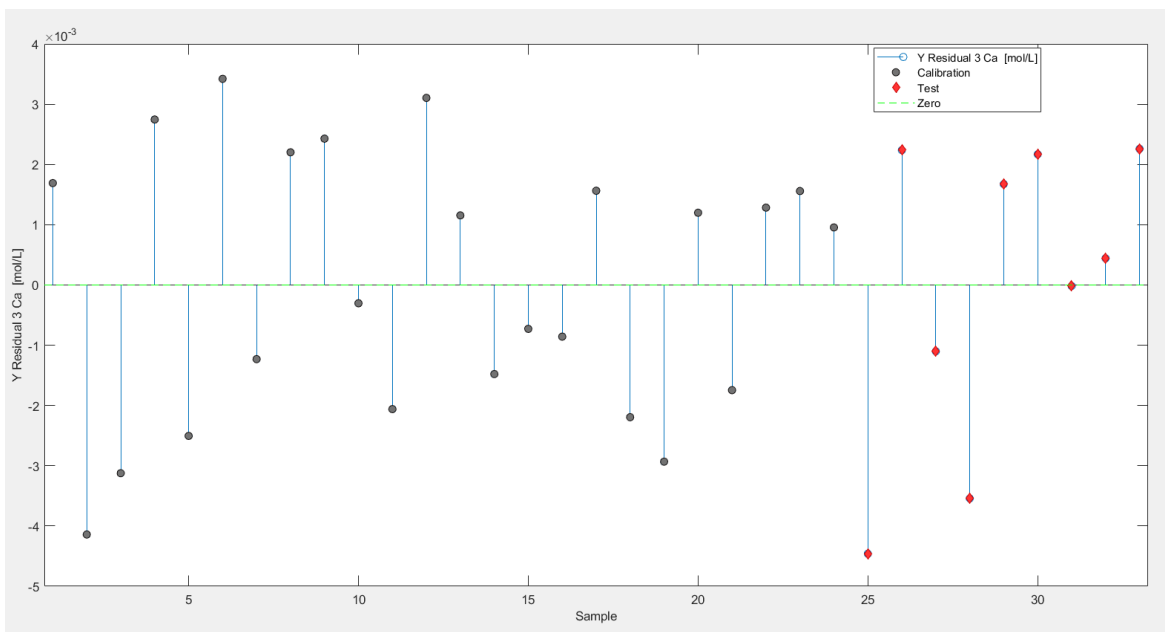


Figura 4.8 Residuos del modelo.

Finalmente, se realiza un análisis de VIP's la Figura 4.9 muestra el aporte individual de cada variable, se observar que las variables que aportan información relevante para la concentración de salida de A del reactor CSTR son la concentración de entrada de A y el flujo de refrigerante W. Idealmente debiese ser únicamente W esto con el fin de tener una mayor controlabilidad en el proceso utilizando este recurso.

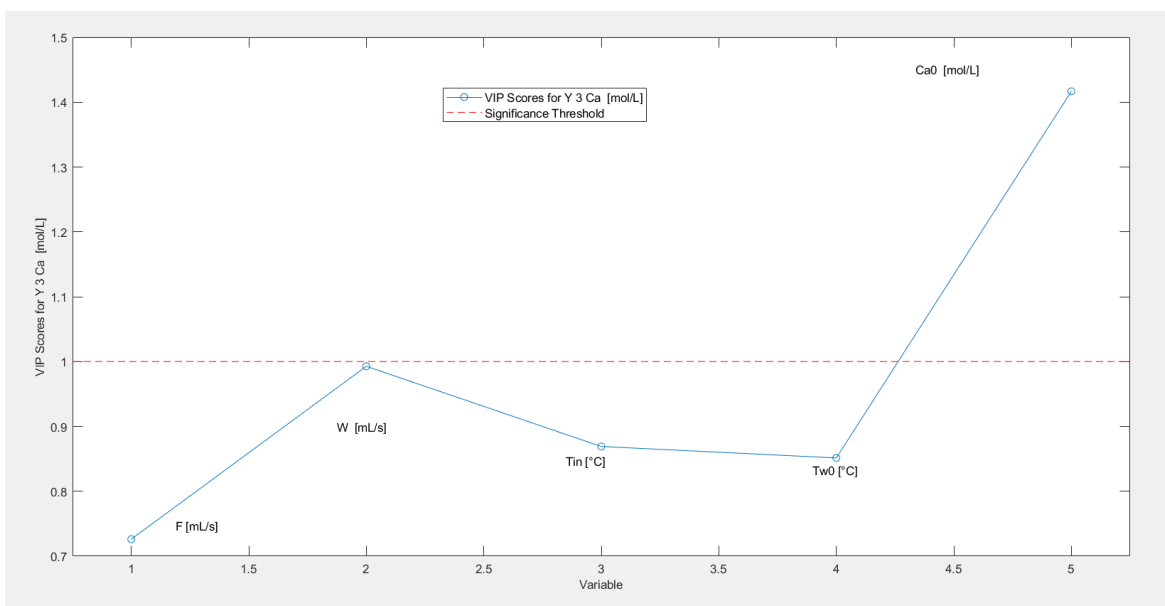


Figura 4.9 VIP's score de C_A .

4.4. CONTROLADOR EXPERTO-DIFUSO APOYADO GEMELO DIGITAL

El gemelo digital construido se implementa sobre el controlador experto-difuso desarrollado anteriormente en el capítulo 3. En la Figura 4.10 se observa un diagrama resumen del funcionamiento del nuevo controlador. Donde el término u_{sp} se refiere a los valores de entrada registrados por el operador del reactor híbrido, d hace alusión a las perturbaciones presentes en el sistema, y son las salidas del sistema, u' es la cuantificación de los cambios sobre u_{sp} que el sistema experto-difuso estima convenientes para cumplir el objetivo establecido, u son los valores resultantes de las entradas u_{sp} al efectuarse los cambios u' , y' son los cambios generados en y por la actuación del controlador, finalmente y_{sp} son los valores objetivos que desea obtener en el sistema experto.

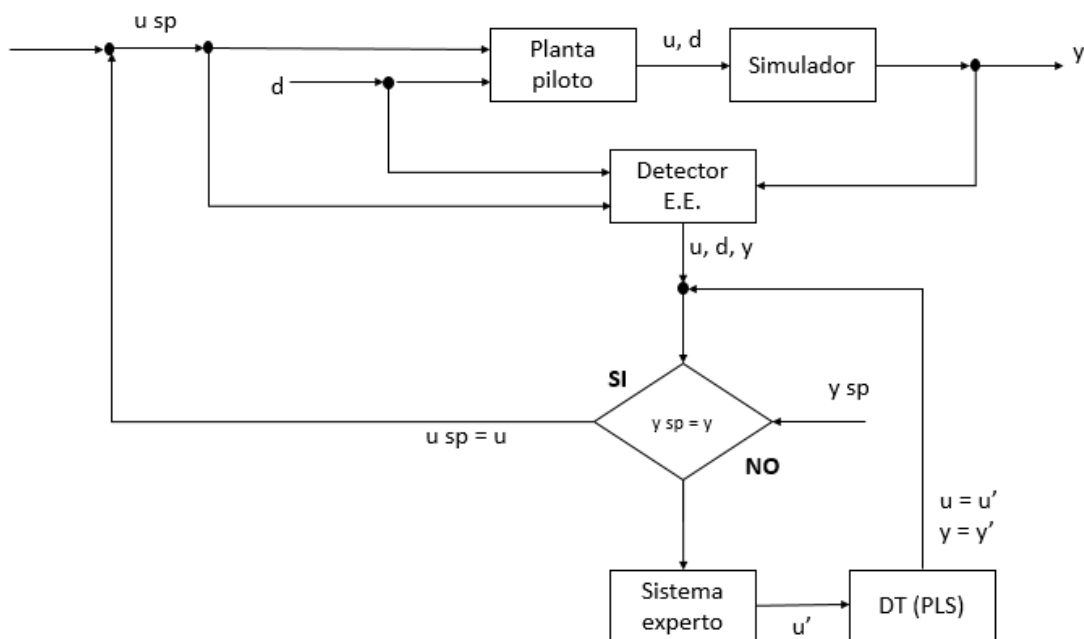


Figura 4.10 Diagrama del controlador experto-difuso apoyado por gemelo digital.

4.5. EVALUACIÓN DEL CONTROLADOR EXPERTO-DIFUSO APOYADO POR GEMELO DIGITAL (PLS)

Una vez construido el DT se implementa junto al sistema experto, y se evalúa su rendimiento en comparación al control obtenido únicamente con el sistema experto.

Para poder implementar el Gemelo Digital se debe tener en cuenta que el modelo entregado por SOLO está normalizado, por lo que es necesario desnormalizar la predicción de C_A antes de ingresarla en el Sistema experto y a su vez también hay que normalizar los valores de F ,

W , T_{in} y T_{W0} para obtener la predicción de C_A . Para normalizar los valores se usa la siguiente ecuación:

$$Z = \frac{X - u}{\sigma} \quad (46)$$

Donde X es el valor en unidades de ingeniería, u la media de la muestra de X y σ su desviación estándar.

Luego para desnormalizar C_A se despeja la ecuación anterior.

$$X = Z \cdot \sigma + u \quad (47)$$

Las medias y desviaciones típicas de las diferentes variables se encuentran en el Anexo H.

Una vez aclarado lo anterior, se procede a implementar el gemelo en el sistema experto, para ello se utiliza el *script* enviado en la memoria de cálculo del trabajo, llamado “SistExp-DT”. A continuación, se muestra el funcionamiento del nuevo controlador tomando como ejemplo el primer experimento, únicamente para facilitar el entendimiento del algoritmo.

1.- Se entrega la matriz de valores iniciales (iteración 0) al sistema experto:

$$[F; W; C_{A0}; C_A] = [8.5; 22; 0.75; 0.0183]$$

2.-El sistema experto entrega un nuevo valor de refrigerante:

$$W' = 17 \left[\frac{mL}{s} \right]$$

3.- Se normaliza los valores de F , W , C_{A0} , T_{in} y T_{out} y se ingresan al gemelo digital

$$[F; W; T_{in}; T_{out}; C_{A0}] = [-0.4; 0.1; 1.7; 1.7; -0.4]$$

4.- El gemelo digital entrega una predicción normalizada, la cual se convierte a unidades de ingeniería, obteniendo un valor de:

$$C_A = 0.0185$$

5.-Dado que este valor no está dentro de la banda objetivo se vuela al paso 1, cambiando la matriz de entrada.

$$[F; W; C_{A0}; C_A] = [8.5; 17; 0.75; 0.0185]$$

6.-El sistema experto entrega un nuevo valor de refrigerante:

$$W' = 12.4 \left[\frac{mL}{s} \right]$$

7.- Se normaliza los valores de F , W , C_{A0} , T_{in} y T_{out} y se ingresan al gemelo digital

$$[F; W; T_{in}; T_{out}; C_{A0}] = [-0.4; -0.8; 1.7; 1.7; -0.4]$$

8.- El gemelo digital entrega una predicción normalizada, la cual se convierte a unidades de ingeniería, obteniendo un valor de:

$$C_A = 0.0148$$

9.- Como el valor predicho está dentro del banda objetivo se detiene la iteración y se implementa el último flujo de W en la simulación. Obteniendo un valor de concentración de salida A igual a 0.0148 en la simulación, nótese que el PLS y la simulación entregan el mismo valor obtenido para este caso en particular aun cuando la primera predicción se aleja de la realidad pues al disminuir el flujo la concentración de salida aumenta.

Se observa que el resultado final del flujo W es el mismo que al implementar el únicamente el sistema experto con la ventaja de reducir en 1 el número de iteraciones. A continuación, en la Tabla 4.4 y 4.5 se muestra una comparativa todos los casos con y sin Gemelo Digital respectivamente.

Tabla 4. 4 Control experto-difuso sin Gemelo Digital.

Casos	Flujo final de W [mL/s]	Iteraciones	Ca [mol/L] final
1	12.4	2	0.0148
2	10	3	0.014
3	15.6	2	0.0142
4	14	2	0.0133
5	10	3	0.0178

Tabla 4.5 Control experto-difuso con Gemelo Digital.

Casos	Flujo final de W [mL/s]	Iteraciones	Ca [mol/L] final
1	12.4	1	0.0148
2	10	1	0.014
3	14	2	0.0137
4	14	2	0.0133
5	10	2	0.0178

Se observa que existe una mejoría en los números de iteraciones necesarias para conseguir el objetivo, además de que en 4 de los 5 casos se consigue obtener el mismo resultado.

5. RESULTADOS

5.1.1. Comparativa de los controladores

Según los resultados obtenidos, los dos controladores cumplen la función de mantener la concentración de salida en un rango especificado. Sin embargo, se observa que el controlador Experto-Difuso apoyado por el Gemelo Digital del proceso es más eficiente que el primer controlador Experto-Difuso, ya que, si bien se obtienen los mismos resultados, se llega a estos en un menor tiempo, debido a que se requiere menos iteraciones. En base a esto, es posible afirmar que el Gemelo Digital del proceso es una representación fiable del proceso, esto porque de no serlo, el controlador en cuestión no sería tan eficiente. Por lo que se podría considerar entonces la opción futura de usar únicamente un modelo PLS, para obtener cuál debería ser W para que $y = y'$, sin la necesidad de utilizar un sistema experto-difuso o cualquier otro controlador.

5.1.2. Recomendaciones

Como se mencionó, el modelo PLS predice de buena forma el comportamiento del proceso en general. No obstante, en ciertos rangos de concentraciones, la calidad de las predicciones puede mejorar o empeorar considerablemente, por lo que una recomendación para trabajos posteriores que sigan esta senda es la incorporación de dos o más gemelos digitales para condiciones de operación distintas.

Otra opción para considerar es el empleo de un PLS dinámico y usar esa predicción para controlar W en forma continua (o discreta), lo que disminuiría los tiempos de respuesta y con ello la calidad del control.

Por último, cabe mencionar que, dada la existencia de casos en los que se satura el recurso de W y no se consigue llegar al objetivo, se deduce que los rangos operacionales de las variables de entrada no fueron los mejores. Esto indica que hay espacio de mejora respecto al análisis de sensibilidad de los recursos, tal como; definir de mejor manera los límites máximos y mínimos. O bien, podría modificarse el sistema experto para que, además del flujo de W , tuviese otra salida, a fin de disminuir los casos en que se saturan los recursos.

6. CONCLUSIONES

El objetivo primordial de este trabajo fue construir, implementar y evaluar un sistema de control experto difuso de la concentración de salida, ayudado en línea por un modelo PLS (gemelo digital), de un reactor piloto CSTR.

Para ello, fue necesario configurar la planta piloto del laboratorio de control de la Universidad Técnica Federico Santa María mediante calibraciones, revisión de conexiones, creación de interfaces, entre otras actividades. Esto con el fin de operar dicha planta no sin antes crear un simulador híbrido estacionario de Arrhenius con el objetivo de implementarlo en la planta piloto generando así un reactor híbrido, el cual tiene la particularidad de medir el valor de variables reales y en base a esas mediciones simular el valor de variables virtuales, siempre y cuando el sistema se encuentre en estado estacionario.

Esto permitió desarrollar e implementar un controlador experto-difuso para el proceso, pudiendo evaluar el funcionamiento del mismo y cuantificando el número de iteraciones requeridas por el controlador para cumplir un objetivo específico mediante 5 casos independientes y con condiciones iniciales aleatorias. Concluyendo que el resultado obtenido era perfectible.

A raíz de lo dicho, se diseñó y construyó un gemelo digital del proceso siguiendo la metodología PLS. Una vez construido se implementó el gemelo digital al controlador experto-difuso y se evaluó su funcionamiento mediante los mismo 5 casos con que fue evaluado el controlador anterior. Se observa una disminución en el número de iteraciones en todos los casos por lo que concluye que el controlador experto-difuso con gemelo digital es más eficaz que el control experto-difuso sin gemelo digital.

Si bien ambos controladores lograron cumplir el objetivo en la mayoría de casos (4 de 5) el hecho de que existieron casos en los que se saturó el recurso de W y no se consiguió llegar al objetivo, se concluye que existe posibilidad de mejora en la elección de los rangos operacionales de las variables de entrada. Lo cual implica que hay espacio de mejora respecto al análisis de sensibilidad de los recursos. O bien, podría modificarse el sistema experto para que, además del flujo de W , tuviese otra salida, a fin de disminuir los casos en que se saturan los recursos.

Finalmente, se recomienda que para futuras investigaciones en esta línea se considere el empleo de un PLS dinámico y usar esa predicción para controlar W en forma continua (o discreta), lo que disminuiría los tiempos de respuesta y con ello la calidad del control.

7. BIBLIOGRAFIA

- Researchandmarkets. (2022). *Digital Twins Market by Technology, Twinning Type, Cyber-to-Physical Solutions, Use Cases and Applications in Industry Verticals 2023 - 2028*. Obtenido de Digital Twins Market by Technology, Twinning Type, Cyber-to-Physical Solutions, Use Cases and Applications in Industry Verticals 2023 - 2028: https://www.researchandmarkets.com/reports/5308850/digital-twins-market-by-technology-twinning?utm_source=dynamic&utm_medium=CI&utm_code=6q68tb&utm_campaign=1366076 -The Future of the Digital Twins Industry to 2025 in Manufacturing Smart Cities
- Acedo, J. (2006). *Instrumentación y control avanzado de procesos*. . Madrid: Dias Santos.
- Acosta, S. (2007). *Monitoreo en línea de la operación de una columna de flotación a escala piloto usando métodos de proyección*. Valparaíso: UTFSM.
- Cortés, C. (2016). Operación híbrida de una planta. En *Tesis de Magíster en Ingeniería* (págs. 132-136). Valparaíso: UTFSM.
- Cruz, B. Y. (2014). *Una aplicacion de PLS no metrico para respuestas multiples*. Guanajuato, Mexico.: CIMAT.
- Gomez, D. (2008). *Monitoreo en línea de reactor agitado calefaccionado*. Valparaíso: Tesis para optar al grado de magíster en ciencias de la ingeniería química mención automatización y control de procesos.
- Kepware. (24 de Marzo de 2022). <https://www.kepserverexopc.com/>. Obtenido de <https://www.kepserverexopc.com/>: <https://www.kepserverexopc.com/kepware-kepserverex-features/>
- Lisa Thormann, Neuling, U., & Kaltschmitt, M. (2023). Opportunities and challenges of the European Green Deal for the chemical industry: An approach measuring circularity. *Cleaner and Circular Bioeconomy*, 1-2.
- Navia, D. (2020). *Fundamentos de control industrial*. Valparaíso.
- Nico, H. (2022). HMI Application Improvements and Documentation Tools.
- Papulová, Z., Gažová, A., & Šufliarský, Ľ. (2022). Implementation of Automation Technologies of Industry 4.0 in Automotive Manufacturing Companies. *Procedia Computer Science*, 1-2.
- Rhinehart, R. R., & Cao, S. (1995). An efficient method for on-line identification of steady state . *Butterworth heinemann* 1-12.

- Roggo, Y., Chalus, P., Maurer, L., Lema-Martinez, C., Edmond, A., & Jent, N. (2007). A review of near infrared spectroscopy and chemometrics in pharmaceutical technologies. *Pharmaceutical and biomedical analysis*, 3-4.
- Tao, F., Zhang, H., Liu, A., & Nee, A. Y. (2019). Digital Twin in Industry: State of the Art. *IEEE transactions on industrial informatics*, 1-3.
- Wahlgreen, M. R., Schroll-Fleischer, E., Boiroux, D., Ritschel, T. K., Wu, H., Huusom, J. K., & Jørgensen, J. B. (2020). Nonlinear Model Predictive Control an Exothermic Reaction in an Adiabatic CSTR. *IFAC-PapersOnLine*, 200-205.
- Zadeh, L. A. (2004). Fuzzy logic systems: Origin, concepts, and trends. En L. A. adeh, *Fuzzy logic systems: Origin, concepts, and trends* (págs. 16-18).