



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO

Doctorado en Ciencias en Ingeniería Mecánica

“Modelado, análisis y control de sistemas termodinámicos mediante Bond Graphs en columnas de destilación con integración de energía”

Tesis que para obtener el grado de:

Doctor en Ciencias en Ingeniería Mecánica

Presenta:

Juancarlos Méndez Barriga

Asesores de tesis:

Dr. Gilberto González Ávalos

Dr. Carlos Rubio Maya

Morelia, Michoacán, febrero de 2023.



Resumen

Modelado, análisis y control de sistemas termodinámicos mediante Bond Graphs en columnas de destilación con integración de energía

Tesis que presenta

Juancarlos Méndez Barriga

como parte de los requisitos para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA MECÁNICA

Facultad de Ingeniería Mecánica, U.M.S.N.H.

Morelia, Michoacán.

Bond Graph (BG) es una metodología de modelado para el análisis de sistemas que contienen múltiples dominios físicos conectados, reemplazando las variables específicas de esos dominios por elementos y variables generalizados. Su enfoque centrado en el flujo de potencia lo convierte en un entorno natural para el análisis de sistemas de manipulación de energía. En esta tesis se le propone como una herramienta para el modelado de procesos que involucran subsistemas termodinámicos con flujo, en particular esquemas y estructuras desarrolladas para el modelado de los sistemas termodinámicos característicos de las Columnas de Destilación con Integración de Energía (CDIE).

Aunque el modelado, simulación y control mediante BG es de uso común en campos afines, ha sido poco empleada para sistemas termodinámicos. En esta tesis se demuestra su aplicabilidad, desarrollando modelos para una columna binaria de cinco etapas, ofreciendo aproximaciones alternativas y presentando una estructura de unión para obtener el modelo matemático directamente de su Bond Graph. La estructura de unión propuesta es una herramienta que relaciona el modelo en BG con su Representación en Espacio de Estados, de forma que las propiedades estructurales de los sistemas no lineales que caracterizan a las columnas de destilación pueden analizarse directamente del Bond Graph y validarse matemáticamente a través de la estructura de unión.

Esta representación da soporte a la descripción de un modelo linealizado equivalente en Bond Graph y su extensión a lazos de control mediante retroalimentación total de estados.

Con esta técnica se desarrolló el bond graph de una columna binaria de cinco etapas, de la que se tenía un análisis completo de comportamiento en lazo abierto, derivado de un trabajo previo. Las simulaciones en BG replicaron exitosamente las obtenidas del modelo matemático original. Aunque se presentan casos de estudio para columnas de cinco etapas, por su forma modular el modelo puede ampliarse fácilmente a casos con etapas múltiples en las secciones de rectificación y agotamiento.

Palabras clave: Bond Graphs, destilación, integración de energía.

Abstract

Bond Graph (BG) is a modeling methodology conceived to analyze systems containing diverse interconnected physical domains by replacing domain-specific variables with generalized elements and variables. Its energy-flow point of view offers a natural environment for model development of energy manipulation systems. In this thesis BG is proposed as a modeling tool for process systems featuring thermodynamic subsystems involving flow, in particular the kind of schemes and structures seen in the thermodynamic systems found on Energy Integrated Distillation Columns (EIDC).

Although modeling, simulation and control with BG is of common use in related fields of knowledge, it has been used very sparsely to model thermodynamic systems. In this thesis it's applicability is demonstrated by developing models for a five stage binary distillation column, offering several alternatives to generate its BG model, also a junction structure is presented that permits to obtain the mathematical model of the same system directly from its Bond Graph. The proposed junction structure is a link between the BG model of the system and its State Space Representation so that the analysis of the structural properties of the non-linear systems that characterize distillation columns can be carried directly from its BG and be mathematically validated through its junction structure.

This representation supports the description of the same system by means of it's equivalent linearized model. Further, the control design for a distillation column in the physical domain can be extended and presented by a total state feedback method. With this technique the bond graph representation of a binary, five stage distillation column was developed. This column had been thoroughly studied from an open loop control point of view in a previous study. BG simulations successfully replicated those of the original mathematical model. Although case studies were carried for the five stage column, due to the modular construction of the Bond Graph representation, the number of trays can be easily increased for columns with multiple trays in its rectification and stripping sections.

Keywords: Bond Graphs, distillation, energy integration.

A la memoria de mi papá, Sabino Méndez López, quien cada vez que me veía me abrazaba, preguntaba por la familia y por el avance de la tesis, en ese orden. Siempre un padre amoroso, sobre todo cuando no entendía a sus hijos.

A la muy activa presencia de mi mamá, Margarita Barriga Ruiz, que no deja de mostrarme lo que significan en la práctica valor, carácter, perseverancia y la dedicación, y que la brillantez sin ellos no es suficiente. Me quiso desde antes de conocerme y me sigue queriendo a pesar de haberme tratado tanto tiempo.

A mis adorados polluelos: Juancarlos, Fabiola Yunuén y Wendy María; que nunca han necesitado hacer nada para que los quiera, pues son mis hijos y quererlos estaba en el contrato, pero siendo congruentes con sus respectivos valores y personalidades hacen que los quiera más. Me llena de orgullo saber que todos los días se gradúan con honores en la vida.

A Araceli, en la que todos los grados académicos no empiezan a describir al ser humano. Tal vez sí eran necesarias cuatro décadas de pausa.

El Posgrado de la Facultad de Ingeniería Mecánica me mostró que la calidad humana bien puede ser el más valioso de los recursos de una planta docente de excelencia. No dejo de sorprenderme al ver que, además de su indiscutible calidad profesional, se distingue por su generosidad para compartir sus conocimientos y evidente compromiso en convertir sus clases en una fuente renovable de energía.

No puedo dejar de mencionar a los doctores Pacheco, Rubio Maya y Víctor López Garza que me ayudaron a entender que ingenieros químicos y mecánicos no vemos la termodinámica de la misma forma y se esforzaron en cerrar la brecha conceptual; a la Dra. Laura Ibarra y el Dr. Pablo Martínez que dieron una profundidad inesperada a sus materias, profundidad que resultó imprescindible para poder realizar este trabajo o el invaluable apoyo de Vero con sus recomendaciones, advertencias y oportunos jalones de oreja para cumplir con trámites y requisitos en tiempo y forma.

Mis asesores externos: doctores Noé Barrera Gallegos y Gerardo Ayala Jaimés, que hicieron comprensibles algunas de mis exposiciones de seminario y posible la publicación de varios artículos.

Mis asesores: doctores Gilberto González Ávalos y Carlos Rubio Maya por haber dedicado tantas horas a clases personalizadas y al seguimiento del trabajo necesario, incluso estando a medio mundo de distancia o de vacaciones, siempre con amabilidad, agudeza y paciencia para mis excursiones intelectuales por callejones sin salida, y con el tacto necesario sacarme de ellos sin lastimar demasiado mi amor propio. Sin ellos no hubiera podido salir del laberinto.

A mis geniales compañeros de generación: Christian, Ángel, Javier y Alma Rosa. No podría haber tenido un mejor equipo.

Cada uno de los miembros de mi mesa tutorial han tenido gran influencia en el desarrollo de este trabajo y en mi evolución como persona, no solo como investigador.

Gracias a todos.

Índice general

Índice de figuras	VI
Índice de tablas	IX
1. Introducción	1
1.1. Objetivos	2
1.1.1. Objetivo general	2
1.1.2. Objetivos específicos	3
1.2. Estado del Arte	3
1.3. Elementos básicos de destilación	4
1.4. Principios de modelado en Bond Graph	7
1.4.1. Elementos del Bond Graph	10
1.5. Construcción de representaciones mediante Bond Graphs en diferentes domi- nios físicos	15
1.5.1. Circuitos eléctricos	15
1.5.2. Sistemas mecánicos	16
1.5.3. Sistemas de transferencia de calor (pseudo bondgraphs).	16
1.6. Contribución	16
1.7. Estructura de la tesis	17
2. Modelado de sistemas termodinámicos en Bond Graph	18
2.1. Termodinámica Clásica	18
2.2. Variables de estado en diferentes entornos	20
2.3. Equilibrio de fases	26
2.4. Relación de variables termodinámicas con las variables generalizadas en BG.	33
2.4.1. Campos de almacenamiento, multipuertos $-C$	37
2.4.2. Campos disipativos, multipuertos $-R$	40
3. Descripción general y modelado de las columnas de destilación	41
3.1. Volatilidad y equilibrio termodinámico	42
3.2. Destilación simple	44
3.3. Integración de procesos	45
3.4. Modelado y control	47
3.4.1. Variables de diseño y operación	47
3.4.2. Modelado de la columna, modelo matemático y mediante Bond Graphs	49
3.4.3. Descripción del modelo	51

3.4.4.	Modelo matemático general para la columna en estado transitorio . .	52
3.4.5.	Modelo dinámico simplificado	60
3.5.	Elementos del modelo de la CDIE en Bond Graph	62
3.5.1.	Modelado de la etapa de equilibrio (charola o plato de destilación) . .	63
3.5.2.	Modelado hidráulico en Bond Graph	65
3.5.3.	Elementos de BG para sistemas hidráulicos	66
3.6.	Modelado de transferencia de calor en equipos de proceso	75
3.6.1.	Modelado de transferencia de calor mediante Pseudo Bond Graphs(PBG)	79
3.6.2.	Modelado de transferencia de calor mediante Bond Graphs verdaderos	82
4.	Modelo en Bond Graph para Columnas de destilación	84
4.1.	Espacio de Estados	85
4.2.	Estructura de Unión	87
4.3.	Modelo de la columna partiendo de su REE mediante campos $-R$	91
4.3.1.	Procedimiento de generación de un Bond Graph partiendo de la re-	
	presentación en espacio de estados del sistema	94
4.3.2.	Representación en espacio de estados para la columna de cinco etapas	95
4.4.	Modelo para la columna de cinco etapas en Bond Graph verdadero	104
4.4.1.	Estructura de unión para una clase de modelos en Bond Graph para	
	una clase de sistemas no-lineales	104
4.4.2.	Modelo para la CDIE	107
5.	Simulación y consideraciones de control para la columna	112
5.1.	Linealización del modelo dinámico con n etapas	112
5.1.1.	Matriz de linealización de las variables de estado	114
5.1.2.	Matriz de linealización de las variables de entrada	117
5.1.3.	Linealización de la ecuación para las variables de salida	120
5.1.4.	Expresión para la solución analítica	121
5.1.5.	Linealización del modelo en Bond Graph	121
5.2.	Controlabilidad	122
5.2.1.	Análisis de controlabilidad para el caso de estudio.	125
5.2.2.	Controlabilidad estructural en BG.	126
5.3.	Observabilidad	126
5.3.1.	Análisis de observabilidad para el caso de estudio.	127
5.3.2.	Observabilidad estructural en BG.	128
5.4.	Control mediante retroalimentación de estados y ubicación de polos.	128
5.5.	Solución del modelo en estado transitorio para un caso de la literatura	130
5.6.	Simulación del modelo no lineal en estado transitorio.	133
5.7.	Simulación del modelo de la columna de destilación en el dominio físico me-	
	diante Bond Graph	134
5.7.1.	Primer caso de estudio	135
5.7.2.	Segundo caso de estudio	138
5.8.	Significado físico y valores de las variables y agrupaciones de variables en el	
	modelo para la columna de cinco etapas	140
5.8.1.	Modelo expresado en fracciones molares para la columna de cinco etapas	144
5.8.2.	Ecuaciones de balance para las corrientes	145
5.8.3.	Casos de estudio adicionales para el modelo expresado en fracciones .	151
5.8.4.	Modelo expresado en flujos para la columna de cinco etapas	158

6. Conclusiones, recomendaciones y posibles líneas de trabajo a desarrollar	160
6.1. Interpretación de los gráficos de la simulación de la CDIE de cinco etapas para los casos A y B	160
6.1.1. Análisis del caso original	160
6.1.2. Análisis del Caso B	164
6.2. Conclusiones	167
6.3. Recomendaciones	170
6.4. Posibles líneas de investigación y trabajo futuro.	171
A. Notación	172
A.1. Cantidad de materia y variables normalizadas	172
A.2. Superíndices, subíndices y acentos	172
A.3. Propiedades termodinámicas y cantidades relacionadas	172
A.4. Variables y parámetros del modelo dinámico para la columna de destilación .	173
B. Conceptos de termodinámica clásica	174
B.1. Áreas de relevancia especial para el modelado en BG	174
B.1.1. Variables termodinámicas de estado	175
C. Análisis de un caso realista de pistón con calentamiento.	179
C.1. Aportación de trabajo de frontera móvil, efecto hidráulico en el campo -C . .	179
C.2. Aportación del calentamiento sobre el pistón, efecto térmico en el campo -C	188
D. Artículos publicados	190
D.1. Fichas de publicación	190
E. Bibliografía	280

Índice de figuras

1.1. Bond con trazo causal e información que contiene	9
1.2. Conceptualización de un sistema batería-bomba hidráulica para modelado en bond graps	9
1.3. Elementos -C e -I en causalidad integral	10
1.4. Elemento -C causalidad derivativa	12
1.5. Elemento -I causalidad derivativa	12
1.6. Elementos R causalidad indistinta	13
1.7. Fuentes de esfuerzo y flujo	13
1.8. Transformadores	14
1.9. Giradores	14
1.10. Uniones -0 y -1	15
2.1. Elemento -C en causalidad integral	21
2.2. Arreglo de pistón y cilindro con calentamiento	34
2.3. Arreglo de pistón y cilindro sin calentamiento	34
2.4. Elemento -C en causalidad integral	35
2.5. Puerto-C con la potencia como salida	35
2.6. Pistón con calentamiento	36
2.7. Elemento -C almacenando energía térmica en un Bond Graph verdadero	37
2.8. Elemento -C almacenando energía térmica en un pseudo Bond Graph	38
2.9. Almacenamiento de energía térmica e hidráulica como energía interna en un Campo -C	38
2.10. Entalpía como campo -C	38
2.11. Energía libre de Gibbs como campo -C	39
2.12. Energía libre de Helmholtz como campo -C	39
2.13. Puertos -R	40
3.1. Columna estándar con n etapas de equilibrio	45
3.2. Primera etapa: Condensador	53
3.3. Etapa típica	54
3.4. Plato de alimentación	54
3.5. Etapa n - Rehervidor	55
3.6. Columna con integración de energía	56
3.7. Diagrama de bloques etapa de alimentación	59
3.8. Condensador	59
3.9. Rehervidor	60
3.10. Balance de materiales en la etapa de alimentación	65
3.11. Balance de entalpía para la etapa de alimentación	66
3.12. Charola con tapas de borboteo	67
3.13. Patrón de flujos en los platos de una columna estándar	68

3.14. Elemento resistivo con variables generalizadas	69
3.15. Representación de un elemento resistivo con variables para un sistema hidráulico	69
3.16. Tubo de gran longitud relativa a su diámetro	69
3.17. Resistencia por presencia de un tapón poroso	70
3.18. Resistencia por válvula parcialmente cerrada	70
3.19. Resistencia por placa de orificio	70
3.20. Representación desarrollada de un elemento resistivo para un sistema hidráulico	71
3.21. Ejemplo de capacitor hidráulico (a)	71
3.22. Ejemplo de capacitor hidráulico (b)	71
3.23. Representación desarrollada de un elemento capacitivo en un sistema hidráulico	73
3.24. Inercia de un fluido en un segmenteo de tubería	73
3.25. Representación desarrollada de un elemento de inercia en un sistema hidráulico	73
3.26. Segmento largo de tubería modelado incluyendo elementos varios	74
3.27. Representación desarrollada de un elemento con elemento varios en un sistema hidráulico	75
3.28. Transporte de calor a través de una pared vertical	76
3.29. Transferencia de calor a través de una pared compuesta	77
3.30. Transporte de calor por convección forzada a través de una pared vertical	78
3.31. Transferencia de calor como análogo de circuito eléctrico	79
3.32. Flujo de calor a través de una resistencia.	80
3.33. Representación en BG del flujo de calor a través de una resistencia	81
3.34. Representación en BG de un cuerpo en calentamiento con pseudo Bond Graphs	81
3.35. Representación en BG de disipación térmica con Bond Graphs	83
4.1. Diagrama de Bloques de la Estructura de Unión	89
4.2. Estructura del campo -R propuesta	99
4.3. Representación de la rama del Bond Graph correspondiente a la ecuación (4.58)	102
4.4. Representación de la rama del Bond Graph correspondiente a la ecuación (4.59)	102
4.5. Representación de la rama del Bond Graph correspondiente a la ecuación (4.60)	103
4.6. Representación de la rama del Bond Graph correspondiente a la ecuación (4.61)	103
4.7. Representación de la rama del correspondiente a la ecuación (4.62)	103
4.8. Bond Graph de la primera etapa para el modelo con campos -R	104
4.9. Estructura de Unión para sistemas no lineales modelados mediante Bond Graphs	105
4.10. Modelo en Bond Graphs verdaderos para la columna de cinco etapas	108
5.1. Bond Graph linealizado de la columna de cinco etapas	123
5.2. Bond Graph del sistema de control para la columna de cinco etapas mediante retroalimentación total de estados.	131
5.3. Comportamiento de la concentración de componente ligero en el destilado q_1	137
5.4. Concentración de ligero en los fondos q_5	137
5.5. Potencial químico en las etapas 3,4 y 5	138
5.6. Respuesta del comportamiento del componente ligero en el destilado	140
5.7. Respuesta de la composición de ligeros en la corriente de fondos	141
5.8. Comportamiento del potencial químico en las etapas 3, 4 y 5	141
6.1. Fracción mol del ligero en la salida de destilado	162
6.2. Fracción mol de componente ligero en la corriente de fondos.	163
6.3. Comportamiento del potencial químico en cada una de las etapas	164
6.4. Esquema de Bond Graph para una columna de más de cinco etapas.	168
B.1. Arreglo de cilindro y pistón con calentamiento	177
C.1. Pistón con calentamiento	180

C.2. Forma general de las ecuaciones de velocidad y desplazamiento	182
C.3. Funciones de movimiento para el pistón	185
C.4. Relación física de las variables de esfuerzo en el pistón	186
C.5. Comportamiento de las funciones de potencia y energía	187
C.6. Potencia y-trabajo hidráulico en el pistón para $v= 0.5 \text{ m/s}$	188
C.7. Velocidad de acumulación de energía interna	189

Índice de tablas

1.1. Técnicas de modelado tradicionales	7
2.1. Variables usadas en Bond Graph en diferentes dominios	23
2.2. Variables propuestas para transferencia de energía y equilibrio de fases diferentes dominios	23
2.3. Cantidades útiles en termodinámica del equilibrio de fases	31
5.1. Condiciones del sistema para el primer caso de estudio	135
5.2. Valores de las variables en el estado estacionario	135
5.3. Condiciones del sistema para el segundo caso de estudio	139
5.4. Valores de las variables en el estado estacionario	139
5.5. Valores de x_1 en los puntos de incremento de los reflujo de destilado y fondos	150
5.6. Comparación de datos para las condiciones de operación de los diferentes casos estudiados	152
6.1. Comparación de datos para las condiciones de operación de los casos A y B .	164
6.2. Comparación del efecto global de los cambios en los parámetros entre los casos A y B	166
C.1. Dimensiones del pistón	180

Capítulo 1

Introducción

Casi cualquier planta de proceso se puede visualizar como una sucesión de etapas de reacción, separación y reciclado, soportadas por redes de intercambio de calor, equipos auxiliares y servicios. El modelado de una planta, o partes de ella, debe incluir consideraciones para fenómenos químicos, térmicos, hidráulicos, de equilibrio de fases, eléctricos y mecánicos, entre otros. Dependiendo del tipo de equipo y nivel de detalle, algunos no serán relevantes, pero siempre es conveniente considerar si lo son.

Bond Graph proporciona un marco teórico y conceptual para el desarrollo de modelos que contienen elementos de diferentes dominios energéticos en forma estructurada, con simbología y notación unificada.

Al modelar un sistema físico se debe buscar la máxima aproximación para el objetivo de estudio con un mínimo de variables a definir y se hace necesario decidir, desde las etapas iniciales de desarrollo, cuáles son los aspectos que deben incluirse en él. El proceso de discriminación debe estar guiado por un marco estructural que considere el impacto relativo de las diferentes variables y permita incluir de forma consistente los puntos de mayor relevancia. Este es el procedimiento estándar en aplicaciones de ingeniería, pero los resultados que entrega el modelo están en buena medida acotados por la elección inicial de variables, que a su vez dependen del marco estructural elegido [1].

Cada disciplina tiene una base conceptual propia que sirve para ordenar el conocimiento y distribuirlo entre quienes la practican, con un vocabulario, convenciones y reglas que pueden diferir bastante de los usados en ciencias afines y derivadas, como puede verse en el caso de matemática pura e ingeniería. Estas bases son parte integral de la forma en que el investigador aborda los problemas y las incluye en forma automática a los modelos generados. En tanto se trate de un esfuerzo dentro de una disciplina aislada, cumple con su propósito de facilitar el intercambio de información, sin embargo, por la complejidad de los sistemas encontrados en el medio físico, es cada vez más frecuente la integración de equipos multidisciplinarios para su análisis, y es ahí donde la existencia de marcos independientes se vuelve limitante. El problema es muy marcado en control de procesos, en particular en procesos termodinámicos, donde este enfoque es la norma y hay diferencias dialectales de cierta importancia entre sus

ramas (aplicaciones a ingeniería mecánica y química, por ejemplo). La metodología de Bond Graph (BG) es una herramienta de modelado gráfico diseñada explícitamente para capturar la estructura energética de un sistema, que proporciona un marco teórico y conceptual para el desarrollo de modelos que contienen elementos de diferentes dominios energéticos en forma estructurada. Con simbología y notación unificada, permite hacer una descripción concisa de sistemas complejos, incluyendo causalidad dentro de los subsistemas y facilita el análisis de sus características de control (controlabilidad, observabilidad o diagnóstico de falla).

Con esta metodología el sistema físico se representa mediante un gráfico de ligaduras, nodos y simbología estandarizada para elementos de almacenamiento, transporte y disipación de potencia, conectados en una red de conservación de la energía. Las variables de estado se definen en términos de energía, de forma que los sistemas se describen en un entorno de variables generalizadas a través de interacciones de potencia [2].

Considerando los sistemas como elementos de manipulación de energía, el comportamiento dinámico de estos se puede ver como la manifestación externa de las interacciones de potencia dentro de él, permitiendo manejar modelos que involucran diferentes disciplinas dentro de un mismo marco de referencia, con capacidad para incorporar múltiples dominios en una misma representación, con la energía como elemento central [3].

La destilación es el proceso de separación dominante en las industrias de procesos químicos y refinación, en ella se purifican con relativa facilidad mezclas líquidas multicomponente, separándolas en dos o más corrientes de diferente composición. A pesar de su ubicuidad, el principal inconveniente de la destilación es su demanda intensiva de energía, con sus problemas asociados de consumo de combustible e impacto ambiental. Para reducirlos, en las últimas décadas se ha generado multitud de herramientas de análisis y diseño enfocadas al ahorro de energía [4]. A ese conjunto de técnicas y herramientas se les engloba en el concepto de Integración de Procesos (IP) [5].

Hay varias escuelas de análisis y aplicación de la integración, pero en esencia buscan usar las corrientes calientes de salida para calentar los materiales que entran al proceso o para generar vapor y energía eléctrica en equipos de cogeneración para reducir simultáneamente la demanda total de servicios de calentamiento y enfriamiento para el sistema [6],[7]. El precio de la integración es que al cruzar corrientes de proceso de esa manera, se introducen interacciones entre subsistemas que hacen difícil mantener estables los parámetros de operación, aparte de que posibles fallas en una pequeña sección pueden afectar a todo el sistema.

1.1. Objetivos

1.1.1. Objetivo general

Modelar y analizar en Bond Graph los elementos de una columna de destilación con integración de energía y mostrarla como una opción viable para generar arreglos de control que permitan su operación.

1.1.2. Objetivos específicos

Modelar en Bond Graph los elementos de una columna de destilación con integración de energía (CDIE).

Modelar la columna en Bond Graph.

Estudiar las herramientas de análisis de estabilidad, controlabilidad y observabilidad de ese tipo de columnas mediante Bond Graph.

Plantear un posible esquema de control mediante Bond Graph.

Analizar los modelos y evaluar comportamiento del control no lineal desarrollado.

1.2. Estado del Arte

El modelado en Bond Graph se basa en las interacciones de potencia dentro de un sistema y en ese contexto a esta se le considera el producto de variables generalizadas de esfuerzo y flujo. El intercambio se da a través de ligaduras en el diagrama, que tienen el nombre estandarizado de bonds. Aunque el diagrama presenta cierta semejanza con los diagramas de bloque en ingeniería de procesos o los diagramas de flujo de información en ingeniería de sistemas, contiene información explícita adicional sobre la dirección del flujo de energía, la causalidad del mismo; define también elementos generalizados de almacenamiento, disipación y es posible determinar las ecuaciones del sistema directamente de él. La primera publicación sobre Bond Graph corresponde a su creador, el Dr. Henry M. Paynter en 1961, como una herramienta de modelado en un entorno unificado, con sus primeras aplicaciones en controladores de velocidad para centrales de potencia [8], con publicaciones cada vez más frecuentes en aplicaciones a sistemas eléctricos, hidráulicos, electrónicos y mecatrónica, entre otros, pero prácticamente sin publicaciones a sistemas térmicos o de ingeniería química [9].

Parecería que las características de las columnas o trenes de destilación como manipuladores de energía para lograr una separación, y la premisa de energía y potencia como elementos centrales de BG lo convierte en una herramienta natural para su modelado, sin embargo, su desarrollo para aplicaciones en ingeniería de procesos quedó rezagada durante mucho tiempo.

Al parecer esto se debe a que en los campos donde se extendió primero el uso de BG es práctica frecuente usar modelos isotérmicos o en los casos donde hay transferencia de calor y cambio de temperatura, la aproximación más frecuente es estudiar el fenómeno como un cambio entre estados de equilibrio, sin considerar a detalle la ruta del cambio entre estados, característica elemental en análisis termodinámico. Conforme se extendió su uso en ciertas áreas, por la misma naturaleza del proceso de publicación, en vez de considerarse como una herramienta de modelado con énfasis energético, se percibe como una herramienta de modelado, análisis y control para campos específicos y se emplea casi exclusivamente en estos. Esta tendencia comenzó a cambiar con el trabajo pionero de Brooks en modelado de columnas de destilación con Bond Graph [10] seguido de otra laguna en el tema hasta que alrededor del año 2000 se da un cambio relevante con publicaciones en reactores, redes de reactores, intercambiadores, ubicación óptima de sensores, habilidad de monitoreo de columnas de destilación [11-13] y desde el 2010 se encuentran frecuentes publicaciones de

este tipo, incluyendo columnas de destilación [14-16]. El volumen de publicaciones recientes de aplicaciones de Bond Graph a ingeniería de procesos indica claramente que al difundirse su aplicación en ese campo, cada vez se aprecian más las características propias de esta metodología, pero al ser una herramienta “nueva” hay cierto grado de resistencia y áreas que están muy atrás en la curva de aprendizaje, particularmente la de integración de energía, que ha sido desatendida incluso desde el enfoque de técnicas de modelado clásico y es un área de oportunidad que se debe aprovechar [17-19].

Ante este paisaje de fondo, la revisión de la bibliografía revela bastante interés reciente en este campo, pero orientado a equipos no integrados, entre los más socorridos para representación en Bond Graph están columnas de destilación multicomponente [15], torres de absorción [11], reactores químicos, calentadores de agua y reactores agitados tipo tanque [21]. El proceso de definición de variables a seguir en equipos de proceso depende completamente de si se trata de diseño o de operación y control. Para diseñar un equipo, el número de variables a especificar se determina con un análisis de grados de libertad del sistema, que en esencia es un conteo donde se restan las incógnitas presentes del total de ecuaciones que lo describen, incluyendo relaciones entre fases [22]. El procedimiento de evaluación para torres multietapas es directo pero muy engorroso. Lo importante para el caso es que para dos componentes en la alimentación se dispone de cuatro variables de diseño.

En cambio, para poder operar la planta se debe saber las variables que hay que manipular para obtener los resultados planteados en el diseño [23] y suelen ser muy diferentes: mientras que en el primer caso se puede especificar el diámetro de la torre, en el segundo resultaría absurdo. La columna vertebral de este trabajo está basada en textos clásicos de Bond Graph [13],[24-26] control y destilación [27-30], control [31-33] e integración de energía[6],[34],[35]. Como es de suponerse, los artículos consultados son demasiado numerosos para citarlos, por lo que se mencionan solo algunas publicaciones de especial relevancia. El conjunto de publicaciones de control para columnas de destilación es muy extenso, pero generalmente enfocado a control clásico y lazos individuales, con pocas publicaciones referentes a aplicaciones de Bond Graph para plantas o equipos de proceso [12],[14],[15],[20],[36],[37].

1.3. Elementos básicos de destilación

La función de las columnas de destilación es separar los componentes de una mezcla líquida aplicando calor para generar dos corrientes de composición diferente a la original, con los componentes más volátiles recuperándose por la parte superior (ligeros) y los más pesados concentrándose en la parte baja (pesados o fondos).

Para lograr la separación es necesario aportar suficiente energía al sistema para lograr el cambio de fase, normalmente esto se da por intercambio de calor en un tren de precalentamiento, que se refleja en la corriente de alimentación como una elevación de la temperatura sin cambio de fase (calor sensible) y calentamiento adicional en el rehervidor que aporta la energía necesaria para el cambio de fase (calor latente), aunque no es raro que el rehervidor tenga que aportar parte del calor sensible necesario para llevar la mezcla a su punto de

burbuja, que es el equivalente en mezclas multicomponente de la temperatura de ebullición.

Los vapores de material ligero que llegan al domo de la columna se deben condensar para obtener el material en fase líquida requerido en el punto de salida del sistema. El condensador realiza esa función intercambiando calor entre los vapores de producto destilado y un fluido de enfriamiento, que en equipos con integración de energía puede ser la alimentación a la misma columna o bien una corriente de otro proceso que requiere calentamiento, como pudiera ser agua de alimentación a calderas.

La composición de los productos o el grado de separación buscado para los componentes de la mezcla original puede estar definido por condiciones de mercado o de optimización global de la planta. Un objetivo probable del sistema de control sería mantener la composición estable y tan cerca del valor de diseño como sea posible [30]. Un objetivo frecuente es obtener la máxima recuperación de alguno de los componentes más ligeros en el destilado, o en forma análoga, minimizar la cantidad de ligeros que sale en la corriente de fondos, dentro de las restricciones fijadas por el equipo físicamente disponible; si parte del destilado condensado se retorna a la columna, la concentración global de ligeros en el sistema se incrementa y la composición del destilado será aún más rica en estos. Si se retorna parte de los fondos, la concentración de pesados aumenta, reduciendo proporcionalmente la cantidad de ligeros que salen en la corriente de fondos.

Para evitar repeticiones, algunos términos se sustituyen por equivalentes aceptables, como sería rehervidor por reboiler y en el caso de la corriente de salida de fondos también se usan los términos residuo o fondos.

El problema de operar y controlar equipos de destilación no es nuevo, los elementos básicos de la teoría de la destilación se conocen desde el primer tercio del siglo pasado, pero es la herramienta disponible la que cambia constantemente, así como la forma en que se usan métodos que dejaron de aplicarse al ser reemplazada su plataforma tecnológica, o que no se aplicaron al momento de ser descubiertos por estar conceptualmente adelante de esas plataformas[38].

Varios de los investigadores de mayor prestigio en el campo de control de torres de destilación han dicho que cada 15 a 20 años se tiene que volver a descubrir cómo implementar algunos sistemas básicos de control, al ser lo más adecuado para manejar la nueva "encarnación" del mismo problema y con una periodicidad similar se ha visto a la investigación en el control de columnas de destilación alternativamente como un campo maduro en el que casi todo se ha descubierto o un área prometedora en expansión [38],[39]. La revisión de la bibliografía revela un patrón histórico razonablemente consistente en la investigación y aunque en cualquier momento hay publicaciones que no caen en él, parece haber un orden típico:

- Descubrimiento de un nuevo campo de aplicación para la destilación o avance tecnológico que da nueva vida a una aplicación madura
- Diseño y control de columnas para ese campo. Normalmente estas publicaciones están mucho más enfocadas al diseño y las consideraciones de control son muy superficiales.
- Técnicas de control para las columnas basadas en soluciones tradicionales.

- Modelado y control de esos sistemas.
- Optimización de la operación y control.

Para las columnas de destilación integradas, el proceso ha sido más prolongado debido a la interacción de la investigación en equipo de intercambio de calor, determinación de objetivos energéticos, técnicas para lograr los objetivos fijados y diseño de equipo de intercambio.

Los primeros trabajos sistemáticos para la integración energética datan de principios de los sesentas [41-43] y su sistematización, bajo diferentes filosofías, se fue consolidando en los ochentas y noventas.

De hecho el problema específico de controlar una planta integrada energéticamente (aunque llamándolas columnas con recuperación de calor” se resolvía en los ochentas mediante complicadas reglas heurísticas [43],[44]; que en cierto modo son predecesoras de los sistemas expertos.

Un aspecto frustrante encontrado en la literatura es que buena cantidad de las propuestas típicas como variables de control carecen de sentido en la práctica. Por ejemplo: casi nunca se puede especificar la composición de alimentación, al estar dada por la operación de otro equipo o varía con cambios en la materia prima; otro caso es la carga térmica al rehvador: si ya se hizo la inversión en área de intercambio, es deseable obtener la máxima producción posible de esta y no parece buena opción reducirla en tanto se pueda recurrir a otra variable.

Cuando se habla de destilación, para la mayoría de las personas la imagen que primero viene a la mente son las columnas de una refinería, dado que es una referencia típica en los medios de comunicación por su volumen de producción y múltiples usos de las fracciones destiladas (gasolinas, queroseno, etc.), que le dan una importancia especial, sin embargo la separación del petróleo crudo en fracciones es una operación relativamente directa, ya que la materia prima se puede alimentar con poco pre-procesamiento y las fracciones separadas salen del equipo en puntos predefinidos, pero realmente abundan los procesos que requieren esquemas de separación de mucha mayor complejidad. No es raro encontrar en una misma línea de producción tres o cuatro tipos diferentes de destilador: tanques flash, columnas con reacción, columna fraccionadora, destiladores batch, etc., cada uno con una función específica que no pueden realizar las otras unidades y que debe hacerse en ese punto del proceso y no en otro. Hay plantas en las que virtualmente se podría colocar un equipo de destilación después de cada etapa de reacción. Para algunos campos se ha vuelto práctica normal la venta de equipo de destilación a la medida ya que, dependiendo de la materia prima empleada y su calidad, puede haber residuos resinosos, depositación de sólidos o formación de jabón en los equipos. Cada tipo de materia prima e impurezas puede requerir una combinación particular de equipos de pretratamiento, reacción y separación. La mezcla óptima de equipos para una planta puede ser una pésima elección para otra, aún con cambios aparentemente pequeños en la materia prima y el mismo producto final.

Aunque los principios básicos no cambian, la tecnología, materia prima, especificaciones y condiciones del mercado lo hacen continuamente, así la predominancia de la destilación como proceso de separación se basa sobre todo en su versatilidad, permitiendo realizar ciertas

Dominio físico	Técnica de modelado (matemática o gráfica)
Mecánico	Diagrama de cuerpo libre Leyes de Newton
Eléctrico	Diagrama de circuito eléctrico Leyes de Kirchhoff
Hidráulico	Diagramas de flujo Ecuación de Bernoulli Ecuaciones de Navier Stokes

Tabla 1.1: Técnicas de modelado tradicionales

separaciones que no se pueden hacer por otro medio o porque presenta ventajas económicas, al permitir hacer la misma operación a menor costo. Un ejemplo de esto es el caso del biodiésel: entre 2004 y 2013 la especificación ASTM D67514 para él cambió en 14 ocasiones. Cada cambio de especificaciones de producto representa un nuevo conjunto de parámetros de cumplimiento obligatorio que requieren cambios en los procesos y condiciones de operación, partiendo de materias primas diversas, que ha podido lograrse mediante destilación [45].

Se puede afirmar sin temor a exagerar, que la industria actual, en la que se basa gran parte de nuestro estilo de vida, no podría sostenerse sin columnas de destilación, aún con los serios inconvenientes asociados a su operación, como su alta demanda de energía e impacto ambiental.

1.4. Principios de modelado en Bond Graph

En el modelado, análisis y simulación de procesos casi siempre se trata con una representación matemática simplificada de una parte discreta del universo, esta permite encontrar soluciones de mayor o menor semejanza con el sistema original, dependiendo de la elección de variables y la complejidad del modelo.

En modelado para ingeniería es muy común el uso de formas gráficas de representación, como diagramas de cuerpo libre, diagramas de flujo de proceso o de circuitos eléctricos. Estas representaciones gráficas se usan como herramientas asociadas que se adhieren a reglas formales con simbología estandarizada y facilitan la comunicación entre los usuarios.

Las diversas técnicas de modelado en ingeniería tienen una característica en común: todas dan resultados probados en la aplicación para la que fueron desarrolladas o en las que se volvieron herramienta de uso común, casi todas son aplicables a un dominio específico, como puede verse en la tabla (1.1).

Evidentemente las leyes de Newton siguen siendo aplicables sin importar el entorno, pero el resto de las técnicas mencionadas son usadas en un solo campo.

En 1959 el Dr. Henry Paynter presentó una herramienta gráfica para expresar la estructura energética de sistemas, independientemente del dominio físico en el que se enmarquen, como

un subproducto de su trabajo en modelado de plantas hidroeléctricas, donde se entrelazan subsistemas hidráulicos, mecánicos y eléctricos, cada uno con características específicas y difíciles de empatar en un modelo general; en ese proceso se percató de que, al plantear los modelos en términos de flujo de energía, las diferencias atribuibles al dominio físico de cada subsistema se hacían cada vez más difusas, con marcadas analogías entre ellos y que al reemplazar las variables propias de cada dominio por variables generalizadas se les podía expresar sobre una base común sin importar su origen [8],[46].

Las semejanzas en el comportamiento de los sistemas dinámicos no son solo en la estructura matemática, están determinadas por equivalencias fundamentales en los fenómenos físicos de almacenamiento, transferencia y disipación irreversible de la energía. Por ejemplo: el desplazamiento mecánico de un objeto, el de un volumen fluyendo o el de una carga eléctrica pueden considerarse análogos y asociarse a una función de almacenamiento que requiere una condición de equilibrio para estar definida, donde el desplazamiento viene a ser el argumento, esta puede verse como una función de energía potencial; este es el caso en la descripción matemática de resortes, capacitores eléctricos o tanques de almacenamiento [47].

Un Bond Graph es una representación abstracta de un conjunto de elementos que interactúan a través del intercambio de energía, colocados en un sistema que la transfiere entre diferentes dominios físicos. El tema en común es la interpretación de subsistemas como elementos de manipulación de energía, donde el comportamiento dinámico que se percibe en un sistema físico viene a ser la manifestación externa de los procesos de intercambio de energía en su interior [3],[26].

Bond Graph describe las interacciones energéticas básicamente en esos términos de transferencia, almacenamiento, transformación y disipación de energía y a los puntos donde se realizan estas operaciones se les visualiza como elementos con uno o más puertos de transporte de energía. Como el interés particular radica en el modelado de sistemas dinámicos, la variable común es la potencia y se le considera como el producto de variables de esfuerzo y flujo; a su elemento básico se le da el nombre de bond, que se podría traducir como enlace o ligadura, pero ese es su nombre estandarizado en BG sus características pueden verse en la figura 1.1. Esfuerzo y flujo constituyen un entorno de variables acopladas de potencia y en conjunto les conoce como variables de potencia, variables acopladas o variables de enlace [13],[24].

En la figura 1.1 se representa un bond, la línea sencilla horizontal indica la transferencia de potencia entre los puertos A y B, con la semiflecha indicando la dirección del flujo de esta. Cada bond implícitamente contiene las variables de esfuerzo y flujo, el trazo causal señala la dirección de la variable de esfuerzo y flujo en dirección opuesta. Debe entenderse que para cualquier elemento de BG, la variable que entra en él es la variable independiente y la que sale es la variable dependiente, con la ley constitutiva del elemento proporcionando la función que las liga. Bond Graph define cuatro variables generalizadas, las ya mencionadas variables de potencia esfuerzo (e) y flujo (f), que son las variables de energía momento (p) y desplazamiento (q), asociadas a las variables de estado en Bond Graph, y que se definen como:

Bond Graph

- e variable generalizada de esfuerzo
- f variable generalizada de flujo

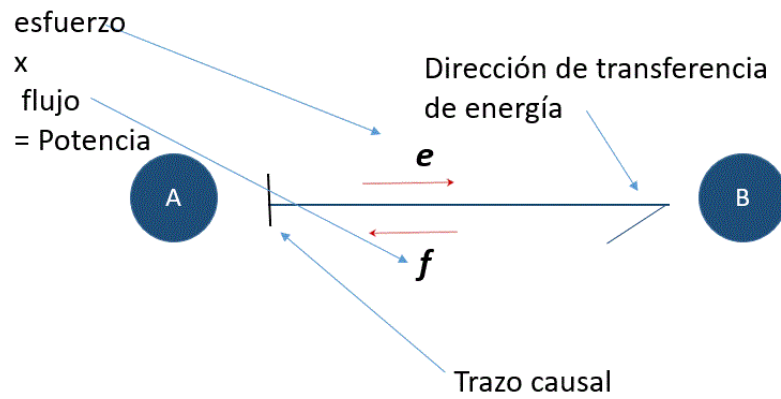


Figura 1.1: Bond con trazo causal e información que contiene

$$p = \int_0^{\tau} e(t) dt \quad (1.1)$$

$$q = \int_0^{\tau} f(t) dt \quad (1.2)$$

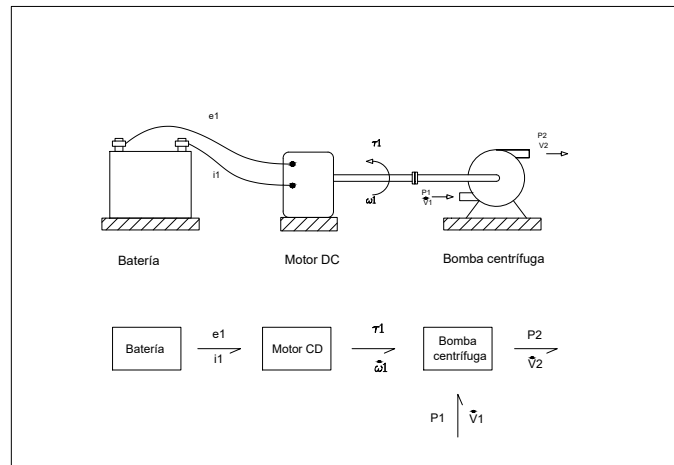


Figura 1.2: Conceptualización de un sistema batería-bomba hidráulica para modelado en bond graphs

En el sistema mostrado en la figura 1.2, donde se conecta un motor eléctrico a una bomba mediante una flecha rígida, lo que se está haciendo es transformar energía eléctrica a hidráulica mediante una serie de pasos de transporte de energía mecánica rotacional. La transferencia de energía se da en las conexiones entre subsistemas o elementos, como la unión entre motor y flecha, flecha a la bomba o entre motor y bomba si se considera a la flecha como parte del motor o de la bomba.

En el arreglo de motor y bomba la potencia transferida es igual al producto de par y velocidad angular, y en los puntos mencionados los valores de velocidad angular y par de fuerza en ambos lados de la conexión forzosamente serán iguales.

En general, los puntos donde se tiene conexión entre subsistemas (no necesariamente física) es donde puede haber flujo de potencia y donde las variables acopladas se ven forzadas a tener el mismo valor a ambos lados de la conexión, o visto de otra forma, se fijan a un mismo valor en ambos subsistemas. Estos puntos son puertos de transferencia de energía. Junto con el bond, la estructura dinámica de un sistema de transferencia de energía puede describirse en términos generales a través de cinco tipos de elementos: almacenamiento, disipación, fuentes, transformadores y giradores.

1.4.1. Elementos del Bond Graph

Almacenamiento.

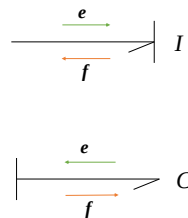


Figura 1.3: Elementos $-C$ e $-I$ en causalidad integral

Elementos $-C$ e $-I$ en causalidad integral El puerto $-C$, mostrado en la figura 1.3 es una idealización de componentes como capacitores eléctricos, resortes, tanques de almacenamiento o acumuladores hidráulicos que almacena y entrega energía sin pérdidas en el proceso. La causalidad integral es la elección natural para casos de simulación en control, mientras que la causalidad derivativa lo es para detección de fallas.

Como puede verse en esa figura, el flujo entra a la capacitancia y en consecuencia será la variable independiente y el flujo al salir de ella es la variable dependiente a través de la ley constitutiva que los rige. La expresión general para elementos $-C$ en causalidad integral es:

$$e(t) = \phi_C^{-1} \left[\int f(t) dt \right] \quad (1.3)$$

Que en términos de q viene a ser

$$e(t) = \phi_C^{-1} [q(t) dt] \quad (1.4)$$

La expresión para el caso lineal es:

$$e(t) = \frac{1}{C} \int f(t) dt \quad (1.5)$$

Un segundo tipo de elemento, mostrado también en la figura 1.3, es el conocido como puerto -I que se emplea para modelar componentes inductivos en sistemas eléctricos y efectos másicos o inerciales en sistemas mecánicos o hidráulicos, su relación constitutiva es

$$f(t) = \phi_I^{-1} \left[\int e(t) dt \right] \quad (1.6)$$

Y para el caso lineal

$$f(t) = \frac{1}{L} \int e(t) dt \quad (1.7)$$

Debido a sus relaciones constitutivas los puertos -C e -I presentan características ligeramente distintas, en ambos la potencia está dada por la ecuación

$$\dot{E} = e(t)f(t) \quad (1.8)$$

Para el elemento -C en causalidad integral la ecuación de potencia es

$$\dot{E} = \phi_C^{-1} \left[\int f(t) dt \right] f(t) \quad (1.9)$$

La sustitución equivalente para el puerto -I

$$\dot{E} = e(t)(\phi_I^{-1} \left[\int e(t) dt \right]) \quad (1.10)$$

Elemento -C en causalidad derivativa

Este se muestra en la figura 1.4 Su ley constitutiva está dada por:

$$f(t) = \frac{d\phi_C[e(t)]}{dt} \quad (1.11)$$

La expresión para el caso lineal es:

$$f(t) = C \frac{d[e(t)]}{dt} \quad (1.12)$$

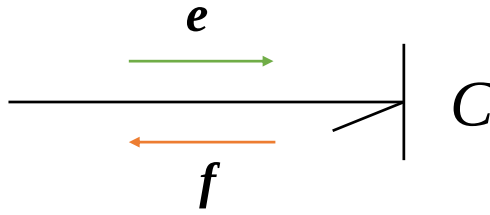


Figura 1.4: Elemento -C causalidad derivativa

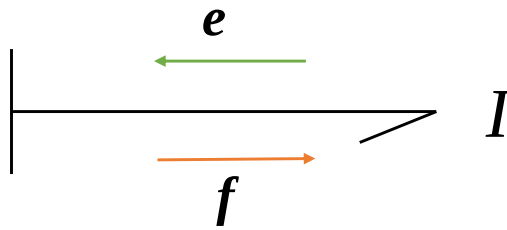


Figura 1.5: Elemento -I causalidad derivativa

Elemento $-I$ en causalidad derivativa Este se muestra en la figura 1.5, con relación constitutiva:

$$e(t) = \frac{d\phi_I[f(t)]}{dt} \quad (1.13)$$

Para el caso lineal

$$e(t) = L \frac{d[f(t)]}{dt} \quad (1.14)$$

Resistivos

. Se trata de elementos estáticos y que modelan componentes y fenómenos de disipación de energía en los sistemas, tales como fricción o resistencia eléctrica, representados por los puertos -R como los mostrados en la figura 1.6.

Sus relaciones constitutivas están determinadas por el trazo causal, donde el flujo es variable dependiente o independiente según el esfuerzo salga o entre a R

$$f(t) = \Phi_R^{-1}[e(t)] \quad (1.15)$$

$$e(t) = \Phi_R[f(t)] \quad (1.16)$$

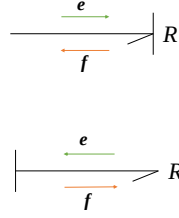


Figura 1.6: Elementos R causalidad indistinta

Fuentes

Los puertos correspondientes a la alimentación de potencia al sistema son las fuentes de esfuerzo y flujo, que son idealizaciones de voltaje, presión o fuerza para el esfuerzo y corriente, flujo y velocidad para el flujo. Se representan como se muestra en la figura 1.7

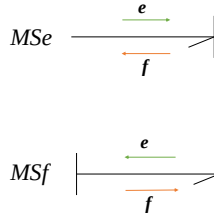


Figura 1.7: Fuentes de esfuerzo y flujo

Transformación

Estos tienen la función de representar cambios en la magnitud de una variable de potencia, como es el caso en un transformador eléctrico o su tipo. Los dos tipos son Transformadores, mostrados en la figura 1.8 y Giradores, mostrados en la figura 1.9.

Para los transformadores las relaciones entre las variables de entrada y salida están dadas por las expresiones

$$\begin{bmatrix} e_1(t) \\ f_1(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_2(t) \\ f_2(t) \end{bmatrix} \quad (1.17)$$

$$\begin{bmatrix} e_2(t) \\ f_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1(t) \\ f_1(t) \end{bmatrix} \quad (1.18)$$

Las expresiones corresponden al orden de las causalidades mostradas en la figura 1.8



Figura 1.8: Transformadores

Por su parte los Giradores ests sujetos a las relaciones

$$\begin{bmatrix} e_1(t) \\ f_1(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & r_1 \\ \frac{1}{r_1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_2(t) \\ f_2(t) \end{bmatrix} \quad (1.19)$$

$$\begin{bmatrix} e_2(t) \\ f_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & r_2 \\ \frac{1}{r_2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1(t) \\ f_1(t) \end{bmatrix} \quad (1.20)$$

que igualmente hacen referencia al orden mostrado en las causalidades indicadas en la figura 1.9. Como puede verse en las expresiones para transformadores y giradores, hay cambios en las variables de enlace, pero sin almacenamiento de energa en ellos.



Figura 1.9: Giradores

Conexin

Se trata de multipuertos de conexin del sistema. Constituyen los nodos de enlace de la estructura y son puntos de definicin del flujo de potencia en el sistema, representados mediante uniones -0 y -1 mostrados en la figura 1.10, modelan la distribucin de flujo de lo que en un circuito elctrico seran las conexiones en serie y paralelo, respectivamente. La unin -0 se caracteriza en que todas las variables de esfuerzo entrando y saliendo de la unin

tienen un mismo valor. Para que esto se cumpla solo una de ellas debe llevar la información del esfuerzo a la unión. En consecuencia solo uno de los trazos causales debe estar junto a la unión ya que si más de uno de ellos estuviera en esa posición indicaría dos entradas de esfuerzo y se correría el riesgo de tener un conflicto si sus valores fueran diferentes, en tanto que al entrar una sola señal de esfuerzo se toma esta como causa y las demás como efecto. La unión -1 por su parte es la unión de flujo común donde los valores de este entrando y saliendo de la unión son iguales y en forma correspondiente a la de la unión -0 todos los trazos causales, menos uno, deben estar junto a la unión, siendo este el que lleva la información del flujo. Las expresiones válidas para la unión -0 son las dadas en (1.21)

$$f_1(t) - f_2(t) - f_3(t) = 0; \quad e_1(t) = e_2(t) = e_3(t) \quad (1.21)$$

$$f_1(t) = f_2(t) = f_3(t); \quad e_1(t) - e_2(t) - e_3(t) = 0 \quad (1.22)$$

y en (1.22) para la unión 1,

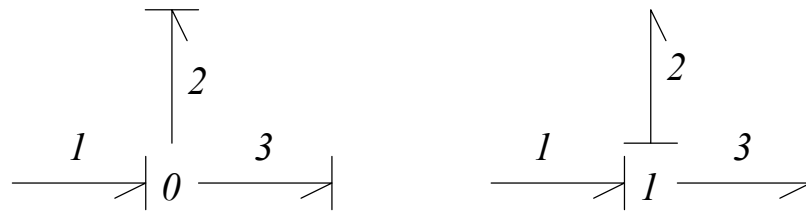


Figura 1.10: Uniones -0 y -1

1.5. Construcción de representaciones mediante Bond Graphs en diferentes dominios físicos

1.5.1. Circuitos eléctricos

Se comienza definiendo la dirección de flujo de referencia para la corriente y enseguida:

- Para cada nodo del circuito se inserta una unión-0, generalmente se trata de puntos sin cambio de potencial.
- Se inserta una unión-1 (unión de flujo común) entre dos uniones cero y se unen todos los elementos sujetos a esa diferencia de potencial (-C,-R,-I,Se y Sf) a la unión-1 correspondiente.
- Se asigna dirección de potencia a los bonds.

- Se elimina la unión-0 de la tierra, sus bonds adyacentes y se simplifica eliminando las uniones irrelevantes o redundantes.

1.5.2. Sistemas mecánicos

- Insertar una unión-1 para cada velocidad distinta. La velocidad es la variable de flujo y este tipo de unión implica que las velocidades entrando y saliendo de ella son iguales.
- Se asigna a cada elemento de generación de fuerza una unión-0. Fuerza es la variable de esfuerzo.
- Se colocan uniones-0 entre las uniones-1 apropiadas y se da el mismo tratamiento a las inercias.
- El nodo de referencia, equivalente a la tierra en un circuito eléctrico, es cualquier punto de velocidad cero.

1.5.3. Sistemas de transferencia de calor (pseudo bondgraphs).

- Definir un eje de referencia para la dirección de flujo de calor [48], generalmente de alta a baja temperatura.
- Se ubican las fuentes de esfuerzo (temperatura) y flujo de calor ($\dot{Q}$) respecto al eje de referencia.
- Se coloca una unión-0 y se conecta a cada temperatura distinta. Corresponde a los nodos de diferente potencial. Si asociado a alguna temperatura hay un elemento de almacenamiento de energía, en ese nodo se conecta un elemento -C.
- Colocar una unión-1 entre cada dos uniones-0 y entre una unión-0 y una fuente de esfuerzo térmico.
- Tanto disipación como transferencia de calor se modelan como resistencias (elementos -R) y se conectan a uniones-1.

1.6. Contribución

Aunque la metodología de modelado, simulación y control mediante Bond Graphs es ampliamente utilizada en campos como mecatrónica y robótica, ha sido poco empleada en ingeniería de procesos y en el modelado de sistemas termodinámicos, aquí se muestra su aplicabilidad al modelado del sistema no lineal de una columna de destilación, su equivalente linealizado y su aplicación al control mediante retroalimentación total de estados.

Se desarrolló un modelo en Bond Graph de estructura modular para una columna binaria de cinco etapas, y se presenta una estructura de unión para obtener el modelo matemático

directamente del modelo en Bond Graph. La estructura de unión es una herramienta que relaciona el modelo en Bond Graph con su Representación en Espacio de Estados de forma que las propiedades estructurales de los sistemas no lineales que caracterizan a las columnas de destilación pueden analizarse directamente del Bond Graph y validarse matemáticamente a través de la estructura de unión.

Esta representación da soporte a la descripción de un modelo linealizado equivalente en Bond Graph y su extensión a lazos de control.

La metodología se empleó en el modelado de una columna de cinco etapas obteniendo su Bond Graph, estructura de unión y el correspondiente modelo matemático, pero la forma modular en que está estructurado permite ampliarlo fácilmente a casos con etapas múltiples en las secciones de rectificación o agotamiento.

1.7. Estructura de la tesis

El presente trabajo se divide en seis capítulos, que se describen a continuación:

Capítulo 1. Introducción, que incluye objetivos, estado del arte, aportaciones del trabajo y la estructura.

Capítulo 2. Modelado de sistemas termodinámicos y de intercambio de calor en Bond Graph.

Capítulo 3. Descripción general y modelado de las columnas de destilación.

Capítulo 4. Modelo en Bond Graph para columnas de destilación.

Capítulo 5. Simulación y consideraciones de control para la columna.

Capítulo 6. Conclusiones y recomendaciones pertinentes así como posibles líneas de trabajo a desarrollar.

Capítulo 2

Modelado de sistemas termodinámicos en Bond Graph

2.1. Termodinámica Clásica

Cuando se usa ese término en forma aislada, lo más probable es que se esté hablando de una subdivisión de la fisicoquímica que estudia las transformaciones matemáticas de la energía y entropía en fluidos sujetas a diversas restricciones debida a la naturaleza de las funciones de estado [49],[50].

El estudio formal y sistemático de la termodinámica surge como un subproducto de la necesidad de describir los principios de operación de las máquinas de vapor y la relación entre calor suministrado con el trabajo obtenido, de ahí que el nombre asocie directamente calor y movimiento y en cierto modo se definiera como el estudio de la potencia obtenida del calor [50-52]. Este enfoque se fue ampliando progresivamente hasta abarcar, entre otras cosas la determinación de requerimientos energéticos en procesos físicos, químicos y biológicos; condiciones de equilibrio y objetivos de conversión en reacciones químicas; la distribución de componentes entre fases en equilibrio y trabajo máximo obtenible [49],[53],[54].

La termodinámica ha tenido desde un principio una muy marcada dicotomía entre su faceta como rama de la física y la de aplicación específica de ingeniería. En el aspecto científico el enfoque se centra en la obtención de un mayor conocimiento de las relaciones fundamentales que rigen el comportamiento físico y químico de cantidades determinadas de materia y usa las leyes de la termodinámica para relacionar las propiedades de la materia. En su faceta ingenieril el foco de interés es el estudio de sistemas y cómo se relacionan con su entorno, incluyendo entrada y salida de materiales. La interacción de estos puntos de vista independientes, pero complementarios, han impulsado alternadamente el desarrollo de esta disciplina.

La mayoría de los procesos en ingeniería pueden representarse como el paso de un conjunto de condiciones a otro. Para pasar de un estado a otro es necesario aprender a desarrollar las

rutas para hacerlo, en tanto lleven del punto inicial al final no importa la ruta elegida, solo que sea posible determinar los cambios en las propiedades en cada etapa y sumar los cambios en el total de etapas. Además, al aplicar las enseñanzas de la termodinámica clásica, se puede generalizar el conocimiento obtenido para cualquier fluido o condiciones.

El diseño, operación y control de equipos de proceso y separación están íntimamente relacionados con el cálculo balances de materia y energía mientras que la búsqueda de eficiencia energética y optimización requiere además balances de exergía y herramientas relacionadas con la cantidad de trabajo disponible y reducción de pérdidas innecesarias de energía aprovechable. Para realizarlos es necesario disponer, o poder estimar, las propiedades termodinámicas de las sustancias involucradas, tales como volumen molar, capacidad calorífica, fugacidad o actividad, principalmente en función de temperatura, presión y composición. En forma concurrente, casi cualquier aplicación de la termodinámica en sistemas reales a ingeniería de procesos implica el modelado de sistemas con flujo, e interacciones energéticas (intercambio de calor, refrigeración, etc.) y por tanto raras veces será aplicable considerar sistemas cerrados o isotérmicos.

La primera ley de la termodinámica enuncia que la energía se conserva, pero no la define, y en diferentes disciplinas se reconoce en múltiples manifestaciones con distintas definiciones matemáticas, que la expresan como función de variables medibles en cada entorno físico, por ejemplo: la energía potencial gravitacional es función de la elevación y la cinética de la velocidad, etc. La conservación indica que, ya que no se crea ni se destruye, la energía que desaparece en una manifestación debe aparecer en otra. Durante siglos se ha usado la fuerza del viento para bombear agua, accionar telares o moler grano y actualmente la conversión directa de energía cinética del viento en energía eléctrica.

La segunda ley establece que en una máquina térmica no se puede transformar todo el calor disponible en trabajo. En cada evento de transferencia de calor con diferencia finita de temperatura aumenta la entropía y se reduce el trabajo aprovechable. Es la que ley que trata sobre viabilidad y eficiencia.

Estas dos leyes, con definiciones apropiadas de variables y la aplicación de deducción matemática, han generado un conjunto de ecuaciones entrelazadas que permiten calcular los requisitos energéticos o condiciones de equilibrio en múltiples procesos, pero su aplicación práctica está íntimamente relacionada con la medición, tabulación, correlación y predicción de propiedades de la materia. Por ejemplo, para hacer un análisis de desempeño de un proceso y su eficiencia, como en un refrigerador comercial, es necesario el entramado matemático que proporcionan las leyes de la termodinámica, las formulaciones derivadas de estas, las relaciones Presión-Volumen-Temperatura (PVT) de las sustancias involucradas y las que determinan las condiciones de cambio de fase del refrigerante, además de la conversión de energía eléctrica a mecánica en el compresor, la disipación de calor en el condensador.

Claramente se aprecia que un modelo dinámico que describa todo el proceso efectivamente ha de incluir consideraciones para efectos eléctricos, mecánicos, térmicos, hidráulicos (o neumáticos), del equilibrio de fases involucrados y en forma muy relevante el estudio de las resistencias que deben vencerse para efectuar los cambios.

La velocidad con que proceden los cambios depende tanto de la fuerza impulsora como

de la resistencia, por ejemplo, el flujo de calor transferido por conducción está dado en la ley de Fourier como:

$$\dot{Q} = kA \frac{\delta T}{\delta x} \quad (2.1)$$

donde k es el inverso de la resistencia. Estrictamente hablando las resistencias no caen dentro del campo de estudio de la termodinámica, pero en buena medida definen la magnitud de la fuerza impulsora necesaria para realizar un cambio en un tiempo aceptable. Por su misma naturaleza son una expresión de la no idealidad fundamental de los sistemas. Aunque ciertamente la presencia de estas irreversibilidades, como efectos de mezclado, diferencia de temperatura finita en intercambio de calor o expansión libre en un pistón implican pérdidas de trabajo aprovechable, no hay que perder de vista que si $\Delta T \rightarrow 0 \Rightarrow t \rightarrow 0$ y, en consecuencia, muchas veces las pérdidas de exergía deben verse como el precio a pagar para poder efectuar un cambio dentro de parámetros de operación físicamente realizables.

2.2. Variables de estado en diferentes entornos

Aunque el modelado en Bond Graph se usó con éxito en sistemas con elementos mecánicos, eléctricos e hidráulicos desde su origen, su aplicación a sistemas termodinámicos ha tenido un desarrollo irregular y su aplicación a casos industriales en ingeniería de procesos es prácticamente nula.

Uno de los aspectos que saltan a la vista al revisar la literatura de Bond Graph, termodinámica y transferencia de calor son algunas diferencias de matiz en la definición de conceptos, que puede haber influido en la escasez de aplicaciones de BG a ingeniería de procesos.

Los puntos de divergencia van desde la misma interpretación de lo que se entiende por variable de estado. Podría pensarse que es un concepto suficientemente general para ser un factor común y generalizado. En cierto modo lo es, pero el nivel de definición no es el mismo para cada disciplina. En aplicaciones de control, y en matemáticas en general, se considera válida la siguiente definición [33],[55].

Variable de estado: es el conjunto más pequeño de variables de sistema linealmente independientes que determina completamente el estado de un sistema dinámico. Si se necesitan al menos n variables para describir completamente su comportamiento, una vez especificadas las condiciones iniciales al tiempo $t = t_0$ para esas n variables, y dadas las entradas para $t \geq t_0$, cualquier estado futuro está completamente determinado, es decir se tiene la información necesaria para poder predecir su comportamiento. Este conjunto son las variables de estado.

En Bond Graph, la definición contempla la condición adicional de que las variables de estado deben ser variables de energía entrando a los elementos de almacenamiento en causalidad integral [26], que son p para los elementos $-I$ y q para los puertos $-C$. En Bond Graphs termodinámicos no hay elemento de inercia, así que en los subsistemas termodinámicos de un modelo, esos elementos corresponden a puertos $-C$ en causalidad integral, donde entra flujo (variable independiente) y sale esfuerzo (variable dependiente), como se muestra en la

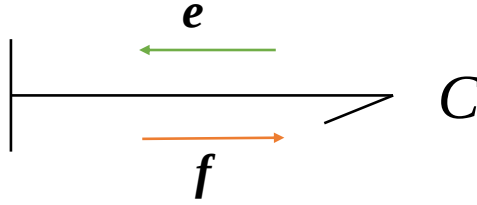


Figura 2.1: Elemento -C en causalidad integral

figura 2.1, donde

$$e = \frac{q}{C} \quad (2.2)$$

$$q = \int_0^\tau f(t)dt \quad (2.3)$$

$$e = \frac{dp}{dt} \quad (2.4)$$

Las variables de estado forzosamente son variables de desplazamiento, como volumen o moles totales en el equipo o en la etapa. El esfuerzo es también la derivada del momento respecto al tiempo y en sistemas de proceso corresponde al término de acumulación en los balances de materia y energía. La condición de un sistema termodinámico, en un punto particular en el tiempo, se describe mediante un conjunto de cantidades llamadas propiedades termodinámicas. La condición descrita por esas propiedades se define como estado y una variable de estado puede ser cualquiera de las variables intensivas de un sistema en equilibrio: temperatura, presión, índice de refracción y variables extensivas expresadas por unidad de masa o molar como volumen, energía interna, entalpía, entropía, energía de Gibbs o Helmholtz, aunque en cálculos en el contexto de ingeniería de procesos, normalmente aparecen combinaciones de las variables dentro del conjunto: $\{P, V, T, S, U, H, A \text{ y } G\}$ [53],[56],[57].

Propiedades termodinámicas son solo aquellas cantidades cuyos valores numéricos no dependen de la historia del sistema conforme este evoluciona entre dos estados de equilibrio, cantidades tales como presión y temperatura son propiedades porque sus valores dependen estrictamente de las condiciones instantáneas del sistema.

Comparando esta con las definiciones en matemáticas, control y Bond Graph, todas coinciden en que las variables de estado deben describir el estado de un sistema, pero difieren en la forma en que se considera satisfecho ese requisito, dado que en BG se exige que sea una variable de energía entrando a un elemento capacitivo y en termodinámica que sea capaz de describir un sistema termodinámico en equilibrio (de preferencia como variable intensiva), así se infiere que una variable de estado válida para un Bond Graph termodinámico debe cumplir simultáneamente con todos los requisitos, y esto significa que la variable de potencia entrando al elemento de almacenamiento debe ser una propiedad termodinámica que pueda describirse como variable de flujo.

Otros puntos a tomar en cuenta para la elección de variables de estado dentro de las usadas regularmente en termodinámica:

- $\{U, H, G, A\}$ tienen dimensiones de energía.
- S tiene dimensiones de energía sobre temperatura absoluta.
- P es una variable de esfuerzo.
- En procesos de separación con fases en equilibrio, como la destilación, el volumen molar no es una variable linealmente independiente de la presión o temperatura
- Las variables empleadas tradicionalmente para modelar y simular equipo de transferencia de calor también tienen dimensiones de energía.

Como se ha mencionado, una característica crítica en la elección de las variables que se generalizan como esfuerzo e y flujo f en esta metodología es que su producto debe dar como resultado la potencia transferida.

Para diferentes dominios estos pares están perfectamente definidos por variables estandarizadas (P y en hidráulica o voltaje y corriente en electricidad) estas se pueden apreciar en la tabla 2.1, y es de notarse que en ninguno de los dominios donde es común la aplicación de esta metodología se utilizan variables de momento o desplazamiento que tengan inherentemente dimensiones de energía, ni esfuerzo y flujo de potencia. Esto sí se ve al tratar con pseudo Bond Graphs, pero en estos el producto de esfuerzo y flujo no da como resultado la potencia.

En la mayor parte de las aplicaciones termodinámicas se ha dejado de lado el uso de Bond Graphs verdaderos y se prefiere los pseudo Bond Graphs en parte porque permiten el uso de variables de flujo con unidades de potencia sin requerir que el producto con su covariable sea la potencia, pero en realidad en muchos de esos casos es posible utilizar una aproximación válida mediante una elección cuidadosa de las variables a acoplar.

Dominio energético	Esfuerzo e	Momento p	Flujo f	Desplazamiento q
Mecánica rotacional	Par	Momento angular	Velocidad angular	ángulo
Mecánica translacional	Fuerza	Momento	Velocidad	Desplazamiento
Hidráulico	Presión	Momento de presión PT	Flujo volumétrico	Volumen
Eléctrico	Voltaje	Enlace de flujo	Corriente	Carga
Termodinámico	Temperatura	-	Flujo de entropía	Entropía

Tabla 2.1: Variables usadas en Bond Graph en diferentes dominios

Dominio energético	Esfuerzo e	Momento p	Flujo f	Desplazamiento q
Sistemas termodinámicos	Potencial químico	-	Flujo molar	Moles acumuladas
Equilibrio de fases	Rel de concentración	-	Flujo de entalpía	Entalpía
Hidráulico	Presión	Momento de presión PT	Flujo volumétrico	Volumen
Transporte de energía	ΔT	-	$\dot{m}Cp$	mCp
Transporte de energía	ΔT	-	$\dot{V}\rho Cp$	$V\rho Cp$
Termodinámico	Temperatura	-	Flujo de entropía	Entropía

Tabla 2.2: Variables propuestas para transferencia de energía y equilibrio de fases diferentes dominios

La opción propuesta es aparear variables de uso común en termodinámica en formas que aseguren ese resultado. Se ha buscado probar la aplicabilidad de expresiones adimensionales como variables generalizadas de esfuerzo acopladas con variables de flujo con dimensiones nativas de potencia, como el flujo de entalpía o el potencial químico. Donde es posible, el uso de la combinación de una variable adimensional con una de potencia permite, en principio, recuperar todas las propiedades del Bond Graph verdadero y aún así seguir usando variables muy arraigadas en campos como termodinámica, intercambio de calor o termofluidos.

Además de esto, la elección de variables de potencia adecuadas para procesos de transferencia de calor presenta algunas peculiaridades que vale la pena analizar: en el modelado de circuitos eléctricos la variable de flujo es la corriente y la de esfuerzo es el voltaje, que es la fuerza motriz que hace que fluya la corriente. De forma similar, para que se transfiera calor debe haber una diferencia de temperatura e intuitivamente se le considera como la fuerza motriz para que se dé la transferencia. Si se sigue la analogía respecto a un circuito eléctrico, la diferencia de temperatura sería la variable de esfuerzo y la velocidad de transferencia de calor sería la correspondiente variable de flujo. Aunque esta convención resulta satisfactoria en muchas aplicaciones, presenta el inconveniente de que la velocidad de transferencia tiene dimensiones de potencia y su producto con la variable de esfuerzo (T o ΔT) no puede dar como resultado de su producto la potencia transferida. En sistemas cerrados las variables que se deben elegir, para que su producto resulte en potencia, son la temperatura como variable de esfuerzo y el flujo de entropía como variable generalizada de flujo. Cuando se usan estas variables en la definición del Bond Graph de un sistema se dice que se trata de un Bond Graph verdadero, en cambio para cualquier caso en que las variables elegidas no dan como resultado de su producto la potencia transferida se dice que se trata de un pseudo Bond Graph. Pseudo Bond Graphs y Bond Graphs verdaderos tienen cada uno ventajas para aplicaciones específicas que los hacen más atractivos para ese caso particular, pero antes de verlas es necesario hacer un estudio de las variables en sistemas térmicos y termodinámicos en el contexto de la Termodinámica Clásica. En varios trabajos sobre Bond Graphs termodinámicos [24],[25] se considera que la manipulación mediante transformadas de Legendre, que son una herramienta típica en termodinámica clásica, da invariablemente como resultado dominios con una variable de estado extensiva q conservativa, una velocidad de flujo que define el equilibrio, una variable de flujo conservativa y una variable intensiva de esfuerzo.

Este planteamiento es indudablemente cierto, pero solo ateniéndose a la premisa de que la variable de estado debe ser extensiva. Al considerar otras opciones surgen preguntas como:

- ¿Se puede usar en estos sistemas variables apareadas que den como resultado la potencia empleando esquemas con variables adimensionales y flujos de energía?
- ¿Es factible usar agrupamientos de variables para generar las de esfuerzo y flujo en vez de usarlas en su papel tradicional?
- ¿Hay alguna transformación que permita obtener los mismos resultados partiendo de variables en unidades molares, específicas o adimensionales?

Se demostrará más adelante la respuesta es positiva, bajo ciertas restricciones.

Como se ha visto, pareciera que parte de las complicaciones de aplicación de la metodología al modelado de plantas de proceso radica en que, dependiendo del proceso estudiado,

la caracterización de los sistemas no se hace con un conjunto estándar de variables, aún en procesos similares, como puede ser la absorción o evaporación, la elección de variables difiere bastante. Aunque esto debería hacer el enfoque de variables generalizadas más atractivo, implica el reemplazar la comodidad de la multitud de variables familiares por su uso en un entorno unificado pero desconocido.

Al modelar en BG dentro de las disciplinas donde se usa tradicionalmente, es frecuente despreciar efectos térmicos y de transferencia de calor y la potencia se puede seguir a través de sus transformaciones de un subsistema a otro, como es el caso de un motor eléctrico donde la energía eléctrica se transforma en energía mecánica. Prácticamente en cada caso se trata de energía transferida por unidad de tiempo donde no se requiere considerar potencia o energía por unidad de masa o sobre base molar, y en casos como el mencionado de un motor de corriente directa simplemente no tiene sentido.

Pero incluso en casos como el de una turbina hidráulica, donde se tiene una relación directa entre la cantidad de masa que pasa por ella y la energía eléctrica transferida, se prefiere el planteamiento del modelo en términos de variables extensivas y potencia total. Por contraste, en ingeniería de procesos (química, petroquímica, etc.) rutinariamente se hace el modelado y análisis en términos de variables intensivas, particularmente en sistemas termodinámicos, en buena medida porque así se evitan problemas de escala. Para poder usar verdaderos Bond Graphs con variables intensivas es necesario incluir entre las ramas donde se empleen esos conceptos y el cuerpo central del modelo, elementos de transformación adecuados para enlazar variables extensivas a este último. Por ejemplo, para el caso de un balance de materiales por componente en un equipo o en una sección de un proceso se puede expresar como variables extensivas en la forma

$$n_h \frac{dx_{h,j}}{dt} = L_{h-1}x_{h-1,j} + V_{h+1}y_{h+1,j} + Fz_{F,j} - L_h x_{h,j} - V_h y_{h,j} \quad (2.5)$$

o su equivalente en base molar con fracciones molares en la forma:

$$\frac{dx_{h,j}}{dt} = \frac{L_{h-1}}{n_h}x_{h-1,j} + \frac{V_{h+1}}{n_h}y_{h+1,j} + \frac{F}{n_h}z_{F,j} - \frac{L_h}{n_h}x_{h,j} - \frac{V_h}{n_h}y_{h,j} \quad (2.6)$$

ambas igualmente válidas y aplicables al modelado en BG.

Al modelar sistemas termodinámicos es necesario mantener la mente abierta para asociar variables no usuales como generalizadas, en tanto cumplan con los requisitos para considerarlas como esfuerzo y flujo. Principalmente, la variable de esfuerzo debe tener una influencia marcada, de preferencia relación causal evidente y directa sobre el flujo, ser la fuerza impulsora para que se dé un cambio y que su producto dé como resultado una forma de potencia.

En la tabla 2.2 aparecen algunos de los acoplamientos propuestos, donde hay que hacer notar que grupos como mCp o $V\rho Cp$ son usados comúnmente en integración de procesos [6],[58], aunque no aparecen en la tabla, también se consideran válidos acoplamientos de variables de esfuerzo adimensionales como coeficientes de fugacidad o actividad, relación de presiones parciales o fracciones mol acopladas con variables de flujo con dimensiones de potencia, como el flujo de entalpía. Las variables de esfuerzo citadas frecuentemente se usan en lugar del potencial químico en aplicaciones de equilibrio de fases o difusión, como la

derivada parcial de la fracción mol de fracción mol en fase vapor respecto a la fracción mol de líquido del mismo componente en la misma etapa, y se les considera transformaciones de la energía de Gibbs, el potencial químico o propiedades molares parciales, como se verá en la siguiente sección.

2.3. Equilibrio de fases

En destilación el grado de separación generalmente se ve como la relación entre las fracciones molares en las fases vapor y líquida, (y_i y x_i , respectivamente) para el componente de interés i , en el equilibrio bajo condiciones específicas de presión y temperatura [59]. La forma en que se distribuyen los componentes está relacionada con la energía libre de Gibbs de cada fase en un sistema multicomponente. En este trabajo se usará el término "energía libre de Gibbs" indistintamente con las expresiones recomendadas por la IUPAC "energía de Gibbs." "función de Gibbs".

Las variables naturales para la energía libre de Gibbs en un sistema de composición variable son presión, temperatura y el número de moles presentes de cada especie y se puede expresar en la forma

$$G^t = G(T, P, n_1, n_2, \dots, n_{nc}) \quad (2.7)$$

La energía de Gibbs frecuentemente se usa como punto de partida para el desarrollo de expresiones que describan el equilibrio entre fases, dado que, de termodinámica clásica se tiene que su diferencial total para una mezcla de nc componentes es

$$d(G^t) = d(nG) = -(nS)dT + (nV)dP + \sum_{i=1}^{nc} \left[\frac{\partial(nG)}{\partial n_i} \right]_{T,P,n_{j \neq i}} dn_i; n = \sum_{i=1}^{nc} n_i \quad (2.8)$$

El potencial químico para la especie química i se define

$$\mu_i = \left[\frac{\partial(nG)}{\partial n_i} \right]_{T,P,n_{j \neq i}} \quad (2.9)$$

Si se sustituye en (2.8)

$$d(G^t) = d(nG) = -(nS)dT + (nV)dP + \sum_{i=1}^{nc} \mu_i dn_i \quad (2.10)$$

En el apéndice de Notación se da una lista completa de ellas pero vale la pena mencionar que en lo que se refiere a expresiones termodinámicas se toma la convención para expresar propiedades en base molar con mayúsculas, ya sea con acento circunflejo ($\widehat{M}$) o sin él (M) mientras las propiedades extensivas se denotan con el superíndice t como referencia a propiedad total o en forma nM para indicar el producto entre la propiedad intensiva y el número de moles.

Las condiciones indispensables para que dos fases α y β estén en equilibrio son igualdad de temperatura, presión y potencial químico de cada componente, comúnmente denotado

$$T^\alpha = T^\beta \quad (2.11)$$

$$P^\alpha = P^\beta \quad (2.12)$$

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta; \forall i | 1 \leq i \leq nc \quad (2.13)$$

El potencial químico no tiene una cantidad análoga en nuestra experiencia sensorial del mundo físico y resulta difícil asociarlo con algo en nuestra experiencia además de presentar algunos pequeños inconvenientes en su uso. Para obviarlos se consideró conveniente usar una función auxiliar más fácil de relacionar con la percepción de realidad. Esa función es la fugacidad.

Para una sustancia pura que sigue la ley de gas ideal

$$\left[\frac{\partial \mu_i}{\partial P} \right]_T = V_i \quad (2.14)$$

$$V_i = \frac{RT}{P} \quad (2.15)$$

Sustituyendo V_i e integrando a T constante entre una presión de referencia P_0 y P se tiene

$$\mu_i - \mu_o = RT \ln \left(\frac{P}{P_0} \right) \quad (2.16)$$

Esta ecuación, aunque solo es válida para gases ideales puros, da la relación entre una abstracción matemática y una propiedad intensiva con presencia física. Para generalizarla se reemplazó la presión por fugacidad, que está definida para el mismo cambio isotérmico, pero aplica a cualquier componente en cualquier sistema, ya sea en estado sólido, líquido o gaseoso; puro o en mezclas multicomponente, en la forma:

$$\mu_i - \mu_o = RT \ln \left(\frac{f_i}{f_0} \right) \quad (2.17)$$

Aquí tanto μ_o como f_0 son variables arbitrarias, pero al estar ligadas en la ecuación anterior no son independientes, al especificar una la otra queda definida.

Para un gas ideal puro la fugacidad es igual a la presión, y para el componente i en una mezcla de gases ideales es igual a su presión parcial $y_i P$ donde y_i es la fracción mol del componente i en la fase gaseosa. Como todos los sistemas a muy baja presión se aproximan al comportamiento de gas ideal

$$\lim_{P \rightarrow 0} \frac{f_i}{y_i P} = 1 \quad (2.18)$$

Esta relación entre potencial químico y fugacidad ayuda a ver a esta como una transformación para convertir una variable difícil de visualizar a una que puede percibirse como una "presión ajustada" o "presión corregida" para no idealidades causadas por fuerzas intermoleculares.

Para una sustancia en una mezcla de gases ideales la fugacidad es igual a la presión parcial de la misma. Otra aplicación de esa transformación está en los criterios de equilibrio, para las fases α y β :

$$\mu_i^\alpha - \mu_o^\alpha = RT \ln \left(\frac{f_i^\alpha}{f_o^\alpha} \right) \quad (2.19)$$

$$\mu_i^\beta - \mu_o^\beta = RT \ln \left(\frac{f_i^\beta}{f_o^\beta} \right) \quad (2.20)$$

Sustituyendo en

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta \quad (2.21)$$

se obtiene

$$\mu_o^\alpha + RT \ln \left(\frac{f_i^\alpha}{f_o^\alpha} \right) = \mu_o^\beta + RT \ln \left(\frac{f_i^\beta}{f_o^\beta} \right) \quad (2.22)$$

Si el estado de referencia es el mismo (para más detalle ver Prausnitz et al, 1999 Sección 2.7)

$$f_i^\alpha = f_i^\beta \quad (2.23)$$

y esta igualdad se utiliza para reemplazar al potencial químico como condición de equilibrio termodinámico.

Si se utiliza notación de propiedades molares parciales [52].

La definición del potencial químico como

$$\mu_i = \left[\frac{\partial(nG)}{\partial n_i} \right]_{T,P,n_{j \neq i}} \quad (2.24)$$

como la derivada parcial de una propiedad extensiva, respecto al número de moles de uno de los componentes de la mezcla, implica la existencia de más variables del mismo tipo

Si se define una propiedad molar parcial $\overline{M}_i$ en una solución como

$$\overline{M}_i = \left[\frac{\partial(nM)}{\partial n_i} \right]_{T,P,n_{j \neq i}} \quad (2.25)$$

$\overline{M}_i$ es una medida de la respuesta de la propiedad total nM a la adición de una cantidad infinitesimal de del componente i a una cantidad finita de solución a temperatura y presión constantes.

Los símbolos genéricos M y $\overline{M}_i$ pueden usarse para expresar propiedades de soluciones en base molar o base masa, la forma de la expresión no cambia, si se quiere dejar la opción abierta de usar base masa se puede hablar simplemente de propiedades parciales. Las propiedades molares de soluciones se representan con la letra M , las propiedades molares con una barra y subíndice para indicar el componente específico ($\overline{M}_i$) y las propiedades del mismo componente en estado puro a las mismas condiciones de presión y temperatura de la solución se identifican con la misma letra y subíndice, pero sin la barra (M_i).

	Notación	Ejemplos
Propiedades de soluciones	M	V, U, G, H
Propiedades parciales	$\overline{M}_i$	$\overline{S}_i, \overline{V}_i, \overline{U}_i$
Propiedades de componente puro	M_i	V_i, U_i, G_i, H

En esta notación también se puede representar al potencial químico como

$$\mu_i = \overline{G}_i \quad (2.26)$$

Una definición alternativa de la fugacidad parcial es

$$\overline{f}_i = C e^{\left(\frac{\mu_i}{RT}\right)} \quad (2.27)$$

Donde C es un parámetro dependiente de la temperatura.

Para una sustancia pura la fugacidad parcial $\overline{f}_i$ se convierte en la fugacidad del componente puro f_i .

Para un gas ideal puro la fugacidad es igual a la presión total y para un componente en una mezcla de gases ideales la fugacidad parcial es igual a la presión parcial

$$\overline{f}_i = P_i = y_i P \quad (2.28)$$

El coeficiente de fugacidad para una sustancia pura se define como

$$\phi_i \equiv \frac{f_i}{P} \quad (2.29)$$

Para un gas ideal $\phi_i = 1$.

En mezclas los coeficientes de fugacidad parcial están definidos en el vapor y líquido por

$$\overline{\phi}_{iV} \equiv \frac{\overline{f}_{iV}}{y_i P} \quad (2.30)$$

$$\overline{\phi}_{iL} \equiv \frac{\overline{f}_{iL}}{x_i P} \quad (2.31)$$

Cuando el comportamiento es lo suficientemente cercano al de gas ideal se puede considerar que

$$\overline{\phi}_{iV} = 1.0 \quad (2.32)$$

$$\overline{\phi}_{iL} = \frac{P_i^{sat}}{P} \quad (2.33)$$

Otro término relacionado es la actividad. A una temperatura dada, a la relación de la fugacidad parcial de un componente respecto a la de su fugacidad en un estado estándar se le llama actividad. Cuando el estado estándar es la especie pura para la misma presión y estado de la mezcla

$$a_i \equiv \frac{\overline{f}_i}{f_i^o} \quad (2.34)$$

Como en el equilibrio entre fases el valor de f_i^o es el mismo para cada fase, la ecuación anterior implica una condición alternativa adicional de equilibrio

$$a_i^\alpha = a_i^\beta \quad (2.35)$$

Para una solución ideal

$$a_{iV} = y_i \quad (2.36)$$

$$a_{iL} = x_i \quad (2.37)$$

Para representar la desviación de las actividades respecto a las fracciones molares cuando la solución no es ideal se definen los coeficientes de actividad

$$\gamma_{iV} \equiv \frac{a_{iV}}{y_i} \quad (2.38)$$

$$\gamma_{iL} \equiv \frac{a_{iL}}{x_i} \quad (2.39)$$

Para soluciones ideales $\gamma_{iV} = 1.0$ y $\gamma_{iL} = 1.0$

Cantidad	Definida por	Significado fisico	Valor limite para gas y solución ideal
Potencial químico	$\mu_i = \left(\frac{\partial(nG)}{\partial n_i} \right)_{P,T,n,j}$	Energía de Gibbs molar parcial	$\mu_i = \tilde{G}_i$
Fugacidad parcial	$\bar{f}_i \equiv C \exp \left(\frac{\mu_i}{RT} \right)$	Presión termodinámica	$\bar{f}_{iV} = y_i P; \bar{f}_{iV} = x_i P_i^s$
Coeficiente de fugacidad para una sustancia pura	$\phi_i \equiv \frac{f_i}{P}$	Desviación de la fugacidad debida a la presión	$\phi_{iV} = 1.0; \phi_{iL} = \frac{P_i^s}{P}$
Coef. fugacidad parcial para componente en una mezcla	$\bar{\phi}_{iV} \equiv \frac{\bar{f}_{iV}}{y_i P}$ $\bar{\phi}_{iL} \equiv \frac{\bar{f}_{iL}}{x_i P}$	Desviación de la fugacidad debida a presión y composición	$\bar{\phi}_{iV} = 1.0$ $\bar{\phi}_{iL} = \frac{P_i^s}{P}$
Actividad	$a_i \equiv \frac{\bar{f}_i}{f_i^o}$	Presión termodinámica relativa	$a_{iV} = y_i; a_{iL} = x_i$
Coeficiente de actividad	$\gamma_{iV} \equiv \frac{a_{iV}}{y_i}$ $\gamma_{iL} \equiv \frac{a_{iL}}{x_i}$	Desviación de la fugacidad debida a composición	$\gamma_{iV} = 1.0$ $\gamma_{iL} = 1.0$

Tabla 2.3: Cantidades útiles en termodinámica del equilibrio de fases

Relación de equilibrio de fases.- Se llama así a la razón entre las fracciones molares de un componente entre dos fases en equilibrio. En destilación se le conoce como valor k o relación de equilibrio vapor-líquido.

$$k_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (2.40)$$

Para cálculos de separación en etapas, el factor de separación entre dos componentes de la mezcla está dado por la volatilidad relativa

$$\alpha_{ij} = \frac{k_i}{k_j} = \frac{y_i/x_i}{y_j/x_j} \quad (2.41)$$

Para el equilibrio vapor líquido la tercera condición de equilibrio para cada componente i se denota

$$\bar{f}_{iV} = \bar{f}_{iL} \quad (2.42)$$

Para expresar la relación de equilibrio k_i en una forma que contenga estas expresiones, las fugacidades parciales se deben reordenar de modo que contengan fracciones molares como

$$\bar{f}_{iL} = \gamma_{iL} x_i f_{iL}^o \quad (2.43)$$

$$\bar{f}_{iL} = \bar{\phi}_{iL} x_i P \quad (2.44)$$

$$\bar{f}_{iV} = \bar{\phi}_{iV} y_i P \quad (2.45)$$

Las dos formas de la fugacidad parcial en el líquido se pueden emplear junto con la expresión de la fugacidad parcial en el vapor para generar dos variantes equivalentes de k_i , cada una con un enfoque ligeramente distinto

$$k_i = \frac{\bar{\phi}_{iL}}{\bar{\phi}_{iV}} \quad (2.46)$$

En esta forma de la relación de equilibrio de fases los coeficientes de fugacidad se pueden calcular usando ecuaciones de estado para relaciones PVT y se conoce como la forma de k_i para ecuaciones de estado

$$k_i = \frac{\gamma_{iL} f_{iL}^o}{\bar{\phi}_{iV} P} = \frac{\gamma_{iL} \phi_{iL}}{\bar{\phi}_{iV}} \quad (2.47)$$

Esta forma de la relación de equilibrio de fases se conoce como la forma de k_i para coeficientes de actividad.

Si en esta se puede considerar a la fase vapor como gas ideal y la fase líquida como solución ideal, dado que $\gamma_{iL} = 1.0$, $\phi_{iL} = \frac{P_i^s}{P}$ y $\bar{\phi}_{iV} = 1.0$ se obtiene la expresión

$$k_i = \frac{P_i^s}{P} \quad (2.48)$$

A la ecuación (2.48) se le conoce como la expresión de k_i de acuerdo con la ley de Raoult

Si se puede hacer la misma consideración para todos los gases en la mezcla

$$\alpha_{ij} = \frac{P_i^s}{P_j^s} \quad (2.49)$$

La elección de la forma de k_i depende de la información, correlaciones y parámetros de las ecuaciones disponibles para los materiales involucrados y es un compromiso entre precisión y complejidad de la expresión, pero todas ellas van a ser parte importante de la no linealidad inherente a la destilación y, de cara a Bond Graph, parte del reto de modelado.

2.4. Relación de variables termodinámicas con las variables generalizadas en BG.

El desarrollo de las ecuaciones termodinámicas y sus relaciones se puede ver en el Apéndice B, en esta sección solo se hará uso de las relaciones y funciones detalladas en él.

Casi cualquier aplicación de la termodinámica al modelado de sistemas reales de ingeniería de procesos implica flujo, propiedades termofísicas de los materiales, interacciones energéticas (intercambio de calor, refrigeración, etc.) de cierta complejidad pero es conveniente comenzar con modelos menos complejos y se consideró oportuno limitar el estudio, en principio, a sistemas cerrados simples. En este contexto, se entiende por sistema simple a aquel que no presenta en su interior divisiones por paredes rígidas, impermeables o adiabáticas, no está sujeto a la influencia de campos externos y en su interior no presenta gradientes de temperatura, presión, velocidad, concentración o densidad [53]. Si además el sistema únicamente puede intercambiar trabajo por expansión o compresión (trabajo de frontera móvil), se tiene un sistema simple compresible.

Un ejemplo clásico sería un sistema de pistón y cilindro (en adelante se mencionará como pistón) que se ha llenado previamente con un gas ideal. El pistón puede deslizarse sin fricción y la base del cilindro está acondicionada para recibir calentamiento desde una fuente externa completamente controlable, pero cuya naturaleza carece de importancia de momento. El resto del cilindro está perfectamente aislado, por lo que ese es el único puerto para el intercambio de calor. Las variables de intercambio de energía relacionadas son fuerza y desplazamiento; presión y volumen del lado del pistón y flujo de calor y temperatura por la base del cilindro, como se muestra en la figura (2.2).

Se parte de la ecuación (2.50), su significado físico respecto al pistón-cilindro de la figura y su equivalencia conceptual en Bond Graph

$$dU = TdS - PdV \quad (2.50)$$

Si de momento se considera el sistema sin aplicar calentamiento y se comprime el gas entre los volúmenes V_1 y V_2 , donde $V_1 > V_2$, como se ve en la figura 2.3.

La ecuación (2.50) se reduce a $\int_{U_1}^{U_2} dU = - \int_{V_1}^{V_2} PdV$. Al integrar entre los límites apropiados se obtiene el incremento en la energía interna del sistema debido al trabajo de compresión realizado sobre él.

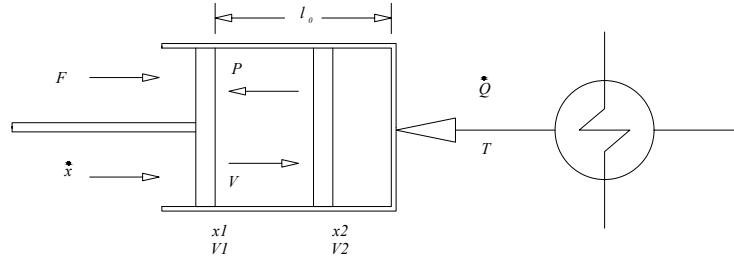


Figura 2.2: Arreglo de pistón y cilindro con calentamiento

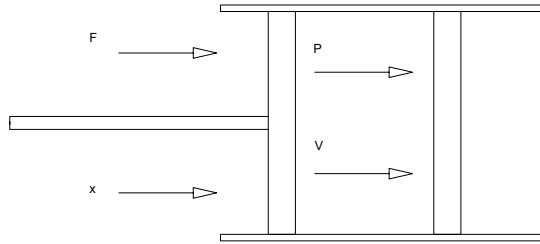


Figura 2.3: Arreglo de pistón y cilindro sin calentamiento

Como $V_1 > V_2$ el cambio de energía interna

$$\Delta U = U_2 - U_1 > 0 \quad (2.51)$$

lo que concuerda con la convención de signos elegida: se aplicó trabajo al sistema y este se transforma en energía interna del gas. El trabajo es energía en tránsito, nunca se almacena como tal y este caso sirve para considerar el concepto de que el trabajo alimentado se almacena al transformarse en energía interna del gas. Uno de los dominios físicos donde la equivalencia como variables generalizadas está firmemente definida y estandarizada es el hidráulico, en él la variable de esfuerzo e es la presión y el flujo volumétrico la correspondiente variable de flujo f . Para el pistón no hay flujo volumétrico y la derivada del volumen respecto al tiempo se refiere al cambio de volumen dentro del cilindro, sigue refiriéndose a un cambio en el volumen. En BG por definición el flujo es la derivada de la variable de desplazamiento q respecto al tiempo:

$$f = \frac{dq}{dt} \quad (2.52)$$

y como

$$\dot{V} = \frac{dV}{dt} \quad (2.53)$$

se aprecia claramente que V a su vez constituye la variable generalizada de desplazamiento. Ambos miembros de la ecuación $dU = -PdV$ tienen dimensiones de energía. Si se considera

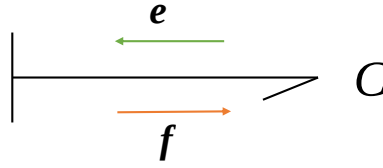


Figura 2.4: Elemento -C en causalidad integral

que el miembro de la izquierda se toma como elemento de almacenamiento, el de la derecha es el producto de una variable de esfuerzo y una de desplazamiento. En Bond Graph los elementos de almacenamiento son los puertos $-I$ y $-C$. Pero cada uno relaciona diferentes variables, concretamente el que relaciona esfuerzo y desplazamiento es el puerto $-C$ y su representación es la de la figura 2.4

Como en cualquier dominio físico que se modela con Bond Graphs, el bond representa un punto de transferencia de potencia, la semiflecha indica la dirección en que fluye la potencia y el trazo causal indica la dirección de la variable de esfuerzo. Como P y $\dot{V}$ son las variables de potencia en hidráulica, en adelante a los fenómenos de transferencia de energía que involucren P como producto con V o $\dot{V}$, se les llamará fenómenos hidráulicos, potencia hidráulica, etc., aún en casos como el del pistón donde, estrictamente hablando, se trata de efectos neumáticos con trabajo de frontera móvil. Como la semiflecha señala la dirección del flujo de potencia, y con la potencia hidráulica definida por:

$$\dot{W} = -P \frac{dV}{dt} = -P\dot{V} \quad (2.54)$$

la convención de signos obliga a cambiar la dirección de la semiflecha para que la potencia hidráulica salga del elemento $-C$ en vez de entrar en él, de forma que la representación sería la mostrada en la figura(2.5)

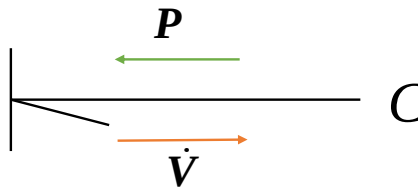


Figura 2.5: Puerto-C con la potencia como salida

para reflejar el flujo de potencia correspondiente al signo negativo.

Pasando a hacer el estudio para el mismo sistema, pero sujeto a calentamiento y sin que se realice ningún trabajo, el sistema sigue siendo cerrado, simple y lleno de gas ideal.

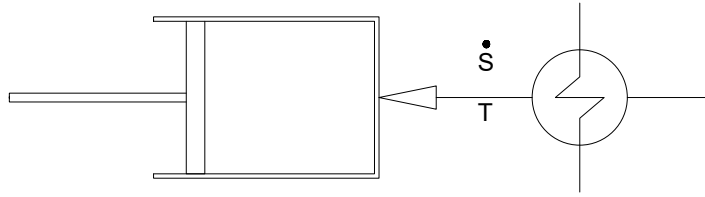


Figura 2.6: Pistón con calentamiento

Se considera que el calentamiento es completamente regulable y suficientemente lento para considerarlo reversible (2.6).

Al no haber trabajo, la ecuación (2.50) se reduce a

$$dU = TdS \quad (2.55)$$

con

$$dS = \frac{dQ_{rev}}{T_{sistema}} \quad (2.56)$$

Parte de la rápida codificación de sus variables generalizadas en el ámbito de mecánica, hidráulica y análisis de circuitos eléctricos viene de las analogías electromecánicas de Maxwell para modelos con parámetros agrupados. El desarrollo de este tipo de analogías se basaba en encontrar relaciones entre variables con la misma forma matemática en mecánica y electricidad, involucrando pares de variables conjugadas de potencia análogas de fuerza y velocidad. Al modelar circuitos eléctricos la variable equiparable con la fuerza es el voltaje, ambas vistas como variables de esfuerzo, y la corriente como análoga de la velocidad y ambas agrupadas como variables de flujo. Otro de los aspectos tomados del trabajo de Maxwell es considerar que en un circuito eléctrico se cuenta con tres elementos pasivos (resistencia, inductancia y capacitancia) y dos activos (generadores de voltaje y corriente), todo esto evidencía a los Bond Graphs como su descendiente conceptual [60].

De forma similar, la fuerza motriz en los procesos de transferencia de calor es la diferencia de temperatura y se pudiera suponer que su variable de flujo es el calor transferido por unidad de tiempo. Este concepto está cerca de los usados normalmente en balances de energía y diseño de intercambiadores de calor, y por esa familiaridad se percibe como intuitivamente “correcta” y de hecho resulta satisfactoria en muchos sistemas de ingeniería, pero tiene el inconveniente de que la velocidad de transferencia de calor, al ser en sí misma una forma de potencia, al multiplicarse por la variable de esfuerzo no puede dar por resultado la potencia.

En mecánica, un pequeño incremento de energía puede entenderse como el producto de una fuerza por un pequeño desplazamiento, en forma semejante, en sistemas termodinámicos se puede ver un pequeño incremento en su energía interna como el producto de un esfuerzo generalizado por un pequeño desplazamiento, como en termodinámica la energía interna de un sistema se expresa en función de los pares de variables conjugadas de energía como

temperatura y entropía o presión y volumen encontrados en las Relaciones de Gibbs (B). En su forma como variables extensivas las relaciones de Gibbs pueden verse como el producto de una variable intensiva (presión, temperatura) como esfuerzo y una variable extensiva de desplazamiento (volumen, entropía).

En el caso del pistón, las variables conjugadas a elegir deben ser la temperatura para el esfuerzo y el flujo de entropía para el flujo. Cuando se usan esas variables en el desarrollo de un modelo en BG se dice que se trata de un Bond Graph verdadero y cuando el par de variables elegido no da como producto la potencia se trata de un pseudo Bond Graph.

Ambas categorías tienen sus áreas de aplicación y casos para los que una de ellas resulta más conveniente, pero hay muchos casos en que el modelado del sistema requiere el uso de ambas en paralelo. Dado que las expresiones conteniendo flujo de calor y de entropía se relacionan a través de las ecuaciones (2.55) y (2.56) ambas son igualmente válidas.

De acuerdo con estas consideraciones, al aplicar calentamiento al cilindro sin interacciones de trabajo se puede visualizar como el calentamiento aplicado almacenándose como energía interna, en la misma forma que se vio con el trabajo. Visto así, la energía que se almacena en el cilindro está dada por $dU = TdS$ y la potencia por:

$$\frac{dU}{dt} = T \frac{dS}{dt} \quad (2.57)$$

La representación de este efecto en BG se hace mediante un puerto-C en la forma mostrada en la figura 2.7 para un Bond Graph verdadero o en la figura 2.8 para un pseudo Bond Graph.

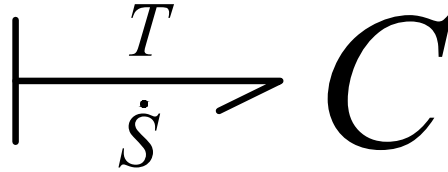


Figura 2.7: Elemento -C almacenando energía térmica en un Bond Graph verdadero

2.4.1. Campos de almacenamiento, multipuertos $-C$

Hasta aquí el análisis ha permitido mostrar que en el pistón el cambio en la energía interna se debe a una aportación hidráulica y una aportación térmica que pueden verse como dos componentes de la energía almacenada en el pistón y de ahí la forma de representarlas en BG. Ahora bien, si en el pistón se dan simultáneamente efectos térmicos e hidráulicos la representación mediante un puerto-C resulta insuficiente y se hace necesario usar un par de capacitores acoplados, o más apropiadamente un campo -C, también llamado multipuerto $-C$. La representación de la relación fundamental de propiedades mediante este concepto se muestra en la figura(2.9)

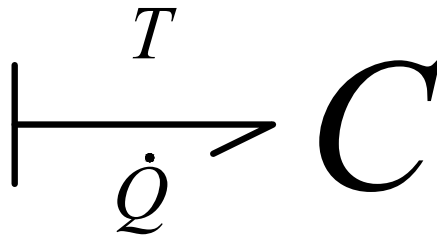


Figura 2.8: Elemento -C almacenando energía térmica en un pseudo Bond Graph

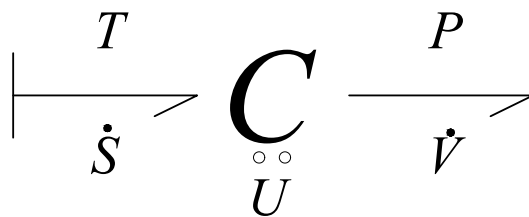


Figura 2.9: Almacenamiento de energía térmica e hidráulica como energía interna en un Campo -C

Donde se aprecia que el cambio de energía interna es el elemento de almacenamiento, y a ambos lados están las conexiones del campo con sus aportaciones térmica e hidráulica. Mientras que los fenómenos de almacenamiento de energía por un mecanismo individual (sea térmico o hidráulico) se representan mediante un elemento $-C$ simple, el almacenamiento mediante distintos mecanismos simultáneamente requiere su representación mediante un campo $-C$, con tantos puertos como mecanismos intervengan. Para la energía interna se trata de un campo con dos puertos, y cada una de las relaciones de Gibbs puede representarse mediante un campo semejante, aunque el ordenamiento variables y signos genera un modelo distinto. Las representaciones en Bond Graph para la entalpía, energía de Helmholtz y energía de Gibbs se dan en las figuras 2.10, 2.11 y 2.12.

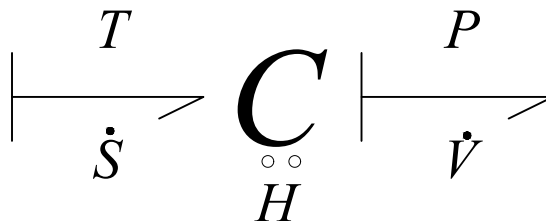


Figura 2.10: Entalpía como campo -C

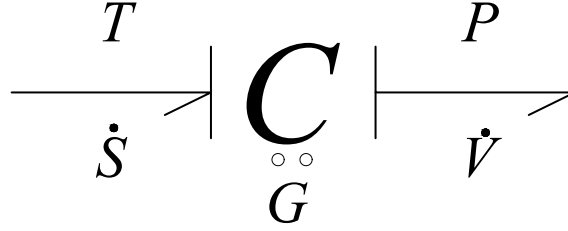


Figura 2.11: Energía libre de Gibbs como campo -C

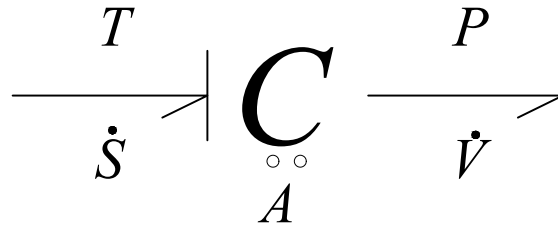


Figura 2.12: Energía libre de Helmholtz como campo -C

Al tratar con puertos $-C$ (puerto -1) su ley constitutiva relaciona esfuerzo e y desplazamiento q . Para el caso general en causalidad integral

$$e(t) = \phi_C^{-1} [q(t) dt] \quad (2.58)$$

y causalidad derivativa

$$f(t) = \frac{d\phi_C [e(t)]}{dt} \quad (2.59)$$

o su equivalente

$$q(t) = \phi_C [e(t)] \quad (2.60)$$

Cuando se trata con campos $-C$ (multipuerto), al tener entradas/salidas múltiples estos pueden tener causalidad integral y otros en causalidad derivativa que se rigen por relaciones generales del tipo

$$e_i(t) = \phi_C^{-1} [q_1, q_2, \dots, q_j, e_{j+1}, e_{j+2}, \dots, e_n]; i = 1, 2, \dots, j \quad (2.61)$$

$$(2.62)$$

$$q_k(t) = \phi_C [q_1, q_2, \dots, q_j, e_{j+1}, e_{j+2}, \dots, e_n]; k = j+1, j+2, \dots, n \quad (2.63)$$

En estas expresiones cada uno de los esfuerzos depende de cada uno de los desplazamientos (causalidad integral) y esfuerzos (causalidad derivativa) entrando y saliendo del campo. Lo mismo aplica para los campos $-I$ pero con flujo f y momento p en vez de esfuerzo y

desplazamiento, pero estos no son relevantes para el presente trabajo al no haber elementos de inercia en los Bond Graphs termodinámicos.

2.4.2. Campos disipativos, multipuertos $-R$

Los campos $-C$ e $-I$ son idealizaciones de subsistemas conservativos que regresan la misma cantidad de energía que se les alimentó.

Karnopp y colaboradores [26] definen los campos $-R$ como un multipuerto n donde las leyes constitutivas relacionan los esfuerzos y flujos de los n -puertos mediante funciones estáticas, esto es ecuaciones algebraicas sin elementos diferenciales. Esta definición podría incluir elementos conservativos como uniones -0 y -1 , pero en general se consideran solamente elementos disipativos.

Al tener relaciones constitutivas algebraicas, en vez de contener diferenciales o integrales, es posible emplear los campos $-R$ como un punto central de acumulación de aportaciones de flujo o esfuerzo según sea la causalidad de cada puerto individual. Los campos $-R$ aceptan causalidad resistiva como el la figura 2.13 La relación constitutiva para los campos $-R$ en

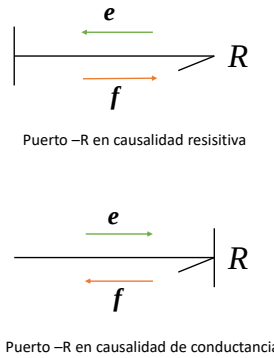


Figura 2.13: Puertos $-R$

causalidad resistiva es

$$e(t) = \Phi_R[f(t)]; i = 1, 2, \dots, n \quad (2.64)$$

Para los mismos en causalidad de conductancia

$$f(t) = \Phi_R^{-1}[e(t)]e(t); i = 1, 2, \dots, n \quad (2.65)$$

Muchos sistemas contienen combinaciones de ambas. Una de las características de estos campos es que son esencialmente neutros desde el punto de vista de asignación de variables dependientes e independientes.

Capítulo 3

Descripción general y modelado de las columnas de destilación

La destilación es el proceso de separación dominante en las industrias de refinación, procesos químicos y bioquímica, en parte porque permite purificar con relativa facilidad mezclas fluidas de dos o más componentes, los principios en los que se basa son bien conocidos y sobre todo, porque su costo es menor que el de otras técnicas capaces de lograr un resultado equivalente.

Más de la mitad de la energía empleada mundialmente en la destilación va a la refinación de hidrocarburos; en la industria química se usa ampliamente para la separación de compuestos orgánicos con cadenas de 2 a 20 átomos de carbono y en la bioquímica para separar o purificar pequeñas moléculas como alcoholes, ácidos grasos, cetonas y la purificación de bio-combustibles. Casi nunca se usa para separar metabolitos, polímeros ni otros compuestos de alto peso molecular por el riesgo de degradación térmica antes de alcanzar su punto de ebullición [61].

Las columnas de destilación (CD) son una parte importante de cualquier industria de procesos, su función típica es separar una mezcla líquida aplicando calentamiento para generar dos corrientes de composición diferente a la original, con el componente más volátil concentrándose en la parte superior (ligeros) y el menos volátil por la parte baja (pesados, residuo o fondos).

El estudio sistemático de los principios básicos en que se basa comenzó a dar resultados prácticos hacia 1889 [62] y sigue sin interrupción hasta hoy. Debido a la multitud de usos que se le han dado, hay casi tantas técnicas de destilación como aplicaciones [61]. Tan solo en la destilación fraccionada por etapas, estas pueden estar formadas por platos físicos con rebosadero, cachucha, válvula, tapa de borboteo o por empaque - estructurado y no estructurado - con multitud de fabricantes, cada uno con varias líneas de empaque según el servicio [28].

3.1. Volatilidad y equilibrio termodinámico

Todas las variantes de destilación aprovechan la diferencia de volatilidad entre los componentes de la mezcla (casi siempre líquida) para lograr su separación diferenciada en líquido y vapor; aplicando el concepto de etapa de equilibrio para estimar las composiciones de las dos fases generadas.

La diferencia en las volatilidades de los compuestos de la mezcla determina el grado de dificultad de la separación y en buena medida la complejidad del equipo a utilizar, cuando las diferencias son grandes puede bastar con una etapa de equilibrio, conocida como destilación flash. Si el grado de separación no es satisfactorio se colocan etapas en serie hasta lograr el resultado deseado, si su número se hace muy grande -cien, por ejemplo- se acostumbra introducir una sustancia miscible de baja volatilidad para promover una mayor separación de los componentes y se conoce como destilación extractiva. Dependiendo de las características propias de cada separación se hacen los cambios necesarios para que su operación sea viable; generando multitud de variantes del mismo principio básico.

El concepto de etapa de equilibrio es una idealización que permite estimar las composiciones del líquido y el vapor que se encuentran en contacto en un segmento dado de la columna. Si se conocen o pueden estimar esas composiciones, junto con la presión y temperatura dentro de la torre, solo sería necesario aplicar los balances de materia y energía pertinentes para diseñar el equipo y su sistema de control, sin necesidad de conocer de antemano los patrones de flujo o velocidades de transferencia de calor dentro de él. El estado de equilibrio termodinámico es una condición estática donde las propiedades macroscópicas de un sistema aislado de sus alrededores no cambian con el tiempo y debe cumplir con las siguientes características:

- Dentro de él no hay gradientes de temperatura, presión, velocidad ni concentración o está formado por subsistemas que cumplen con estas condiciones. En términos del proceso de separación significa que para un sistema líquido-vapor las dos fases están a la misma presión y temperatura, ya que el sistema está inmóvil y que la composición dentro de cada fase es uniforme. Aunque la composición de las fases sea diferente, dentro de ellas no hay gradientes de concentración.
- No existen flujos de masa, calor y trabajo entre el sistema y sus alrededores.
- La velocidad neta de cualquier reacción dentro del sistema es cero. Este requisito unido al primero exigen que las concentraciones de los componentes en cada fase se mantengan sin cambios.

Aunque las restricciones formales al estado de equilibrio lo hacen parecer como algo muy difícil de encontrar, en realidad la mayoría de los sistemas se desplazan hacia él espontáneamente y siempre será el estado final en sistemas aislados. Incluso si una vez alcanzado el estado final se alteran las condiciones, con el tiempo se alcanzará un nuevo punto de equilibrio [50].

Para un sistema cerrado con una mezcla líquido-vapor en equilibrio, las fuerzas impulsoras en las dos fases están perfectamente balanceadas y no hay tendencia al cambio entre ellas.

La temperatura y presión se han igualado y las composiciones de cada fase se mantienen fijas. Aún así a nivel molecular las condiciones nunca son estáticas. Las moléculas dentro del líquido en un momento dado no necesariamente son las mismas que un instante después. Muchas moléculas cruzan la interfase y se integran a la otra pero la velocidad de transferencia en las dos direcciones será la misma y el transporte total entre fases es nulo.

Esa condición de flujo continuo a nivel molecular, sin cambio apreciable a nivel macroscópico, permite proponer que los sistemas abiertos (con flujo de materia o energía) también pueden presentar condiciones de equilibrio, pero supeditado a que su interacción con los alrededores sea tal que se pueda considerar que el sistema no tiene cambio neto. Si no hay flujo de materia y el medio ambiente tiene diferente temperatura, presión o volumen, la evolución hacia el equilibrio es prácticamente automática.

En el caso de la temperatura, cuando el sistema no está aislado, habrá una diferencia de temperatura en la frontera y transferencia de calor hasta que las temperaturas se igualen alcanzando un equilibrio estable. Cuando la interacción es por flujo de masa y energía entrando y saliendo del sistema, como en una barra calentándose en un extremo o el bombeo de un fluido a un tanque, el sistema solo se podrá considerar en equilibrio si esos flujos no cambian en función al tiempo, que es la definición de operación en estado estable. Incluso en algunos casos de estado estable donde el sistema no es uniforme, por haber gradientes de concentración, presión o temperatura en su interior, se puede estimar su comportamiento usando el equilibrio como condición límite.

En el caso de la destilación, se considera una sección donde se tiene contacto entre líquido y vapor, a la misma presión y temperatura, con intercambio libre de materia entre las fases, como puede ser en la charola de un plato de destilación, donde el vapor circula a través del líquido con máximo contacto entre ellas. En esas condiciones el componente menos volátil se desplaza hacia el líquido, mientras el compuesto más volátil se desprende de él, cruzan la interfase y se concentra en el vapor.

En la práctica un plato de destilación no cumple varios de los requisitos de equilibrio, pero si el flujo de vapor a través del líquido es lo bastante lento para que se tenga una mezcla perfecta de las fases, la suposición es aceptable y con ella la hipótesis de que la cantidad de material que se evapora de cada componente es igual a la que condensa, de modo que sus composiciones no cambian con el tiempo.

Las masas de líquido y vapor con sus composiciones a las condiciones locales de presión y temperatura en el segmento considerado constituyen una etapa de equilibrio. La suposición de equilibrio para cálculos de ingeniería solo se justifica cuando los resultados que arroja son tan cercanos a la realidad física que el error generado no es significativo o puede ajustarse con un factor de eficiencia conocido de casos similares. Considerar un plato de una columna como una etapa de equilibrio es una simplificación que se justifica por los resultados obtenidos.

En la descripción previa, se menciona con frecuencia la composición y por contexto se entiende que se trata de una medición de la aportación de cada elemento a una mezcla, como es imprescindible tener una idea clara de su significado físico para el modelado, es necesaria una definición concreta. Las formas más comunes de expresarla son la fracción masa, fracción mol y concentración molar. La fracción masa y fracción mol se definen respectivamente como

la relación entre la masa y número de moles de un componente en una mezcla o solución sobre la masa, o moles, totales en una mezcla o solución.

Si el subíndice i denota a un cierto componente de la mezcla, sus fracciones masa y mol son:

$$w_i = \frac{m_i}{m} \quad (3.1)$$

y

$$x_i = \frac{n_i}{n} \quad (3.2)$$

Donde el número de moles de una sustancia se obtiene dividiendo su masa entre su peso molecular, ambos expresados en gramos

$$n_i = \frac{m_i}{PM_i}. \quad (3.3)$$

La suma de las fracciones de todos los componentes de la mezcla, tanto masa como mol es igual a la unidad

$$\sum_i w_i = 1 \quad (3.4)$$

$$\sum_i x_i = 1 \quad (3.5)$$

La concentración molar se define como la relación de la fracción mol de una especie química dentro de una mezcla o solución sobre el volumen molar de la mezcla

$$C_i = \frac{x_i}{\hat{V}} \quad (3.6)$$

.

Las fracciones masa y mol tienen unidades de

$$\frac{masa_i}{masa_{total}} \quad (3.7)$$

y

$$\frac{moles_i}{moles_{totales}} \quad (3.8)$$

pero en general se manejan como adimensionales, la concentración tiene unidades de mol/volumen unitario.

3.2. Destilación simple

Como ya se ha mencionado, hay variedad de arreglos y modificaciones que hacen versátil a la destilación, pero para entender sus aspectos fundamentales basta con analizar la destilación simple por etapas, como la mostrada en la figura 3.1 es la variante más sencilla que ya incluye accesorios usados en columnas realmente complejas.

El material a separar se alimenta como líquido, o mezcla líquido-vapor, en algún punto cerca del centro de la columna, que por lo mismo se conoce como etapa o “plato de alimentación” y entra en contacto con el líquido y vapor ya se encuentra en el plato. A a la parte

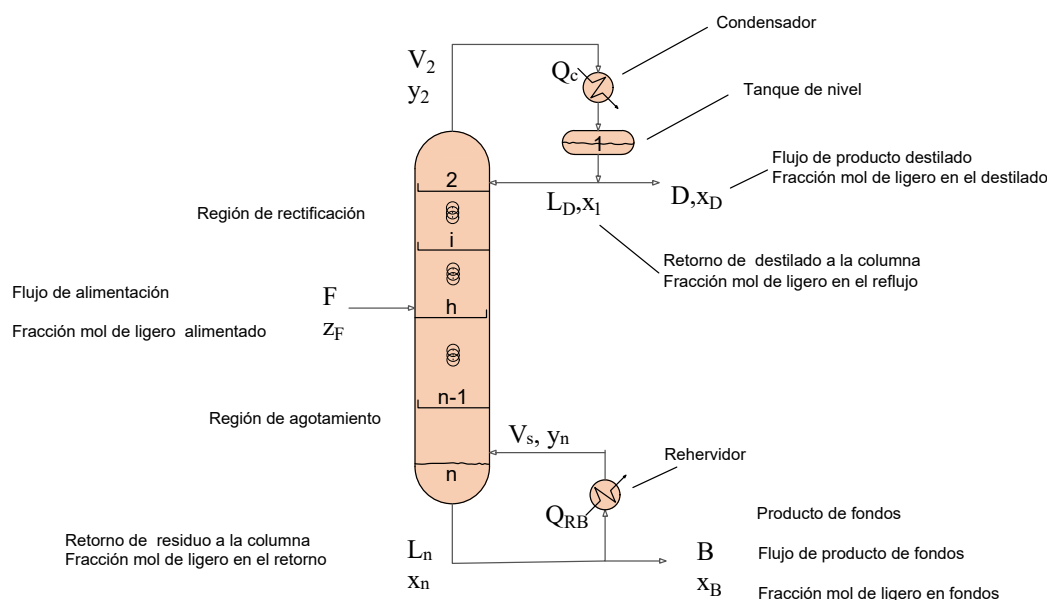


Figura 3.1: Columna estándar con n etapas de equilibrio

de equipo que físicamente contiene el líquido se le llamará indistintamente plato o charola, si se trata un plato físico, o al volumen equivalente si es un plato teórico. La fracción no vaporizada de la alimentación baja con el resto del líquido en el plato hacia las etapas siguientes, ganando pequeñas fracciones de componentes pesados y cediendo ligeros en cada una.

En el fondo de la columna se encuentra el rehervidor, también llamado reboiler, que es donde se suministra la energía necesaria para lograr la separación.

El vapor generado fluye hacia arriba y en cada etapa va ganando un poco más de los componentes ligeros. El vapor abandona la columna por la parte superior y se condensa parcial o totalmente, dependiendo de las características del material y separación en particular. El líquido obtenido se separa en producto destilado (de aquí en adelante se le mencionará solo como destilado) y reflujo a la torre.

El líquido que sale por el fondo se divide en dos corrientes: una parte se retorna hacia el rehervidor y la otra es el producto pesado que se extrae del sistema.

3.3. Integración de procesos

El principal inconveniente de la destilación es su demanda intensiva de energía, alta inversión en equipo de intercambio de calor, consumo de combustibles e impacto ambiental asociado. Para reducirlo, en las últimas décadas se ha generado multitud de diseños para ahorrar energía [4],[6] en el contexto conocido como Integración de Procesos (IP); [5].

Hay varias escuelas de análisis y aplicación de la integración, pero en esencia todas buscan

la mejor forma de usar las corrientes calientes de salida (que se desea enfriar) para calentar los materiales fríos que entran al proceso o para generar vapor y energía eléctrica en equipos de cogeneración para así reducir el consumo de energía y servicios de enfriamiento en el total de la planta. Es obvio que la aplicación de la IP representa beneficios en varios niveles: ahorro de combustibles y servicios de calentamiento innecesarios, costo de bombeo y tratamiento de agua de enfriamiento; reducción de emisiones contaminantes y del impacto ambiental general al bajar la contaminación térmica descargada a la atmósfera en las torres de enfriamiento, entre otras cosas. En una de sus primeras aplicaciones -en Imperial Chemical Industries, 1980- se lograron ahorros de energía del 30 % respecto al diseño tradicional, con resultados similares en varios proyectos que le siguieron; con lo que se validó de inmediato la aplicación práctica del concepto teórico [6],[7].

Como era de esperarse, también hay inconvenientes en la integración y uno de ellos es el riesgo de inestabilidad implícito en el cruce corrientes de distintas áreas de operación, como es el caso cuando un problema menor en un punto normalmente aislado, por la interacción entre corrientes puede extenderse por todo el sistema hasta detener la operación. Aún en los casos menos serios pueden presentarse lazos de control más complejos que hacen difícil mantener estable la operación.

Además de la interacción entre corrientes calientes y frías, la mayor parte del equipo de intercambio tiene comportamiento no lineal [63] igual que los modelos de predicción de propiedades termodinámicas y los de estimación del equilibrio de fases[64]. Cada uno de estos aspectos por sí solo garantiza la no linealidad de una operación que, irónicamente, por su misma complejidad requiere en mayor grado la aplicación de modelado y predicción del comportamiento de las variables de control que permitan operarla.

En cierto modo la integración es una faceta adicional de un problema que se ha venido resolviendo de una forma u otra desde finales del siglo XIX, y por ello como una extensión manejable del mismo.

Las tres técnicas de integración de energía más usadas en columnas de destilación son:

- Uso de la corriente de alimentación como líquido de enfriamiento en un condensador interno.
- Precalentamiento de la corriente de alimentación en un tren de intercambio de calor que puede incluir el condensador y precalentadores donde el producto destilado es el fluido de calentamiento.
- Enfriamiento externo del condensador con algún fluido que requiere calentamiento en otro proceso o sistema de recuperación, como es la alimentación de agua para calderas o corrientes de alimentación a reactores.

Las primeras dos son muy similares y la elección de calentamiento interno o externo se hace en base de las diferencias de temperatura que se busca obtener, las características de alimentación y destilado y el área de intercambio económicamente viable. La tercera es en la práctica un sistema de intercambio tradicional desde el punto de vista de operación y

control de la columna, pero las complicaciones asociadas son mayores al involucrar sistemas independientes en un gran lazo operativo. Cualquiera de estos métodos implica la posibilidad de contaminación de corrientes, por lo que la elección de corrientes a cruzar debe estar regida por estrictos criterios de minimización de riesgo. La variedad de esquemas de recuperación impide hacer generalizaciones, pero muchos de ellos, incluyendo columnas con condensador interno pueden modelarse usando como base el de la figura 3.6.

3.4. Modelado y control

3.4.1. Variables de diseño y operación

Al estudiar un sistema con fines de diseño o control para una torre de destilación, lo más frecuente es que se desee obtener una recuperación especificada o fracción de uno de los componentes en una de las corrientes - el destilado, por ejemplo- y el sistema de control debería ser capaz de mantenerla a pesar de las perturbaciones externas. Para lograr esos objetivos se deben plantear y resolver las siguientes cuestiones:

- ¿Qué variables se desea medir? ¿puede hacerse? ¿hay valores específicos entre los que deben mantenerse? ¿que condiciones de operación o variables de proceso es posible especificar? ¿se puede especificar alguna o se deberá aceptar lo que entregue el equipo?
- ¿Como se pretende monitorear el desempeño del proceso? ¿Qué variables reflejan ese desempeño?
- El proceso, tal como es ¿resulta estable? ¿necesita control retroalimentado para serlo? ¿cuántos lazos de control se necesitan?
- ¿Puede mejorarse el proceso con una elección diferente de variables o cambiando las condiciones de operación?
- ¿Cuáles son los parámetros del sistema?
- ¿Hay fuentes evidentes de comportamiento no lineal?

Esta es solo una muestra, pero basta para dar una idea de que en el diseño y operación de una columna de destilación se debe tener en cuenta un gran número de variables. Muchas de ellas se definen durante la etapa de diseño y se convierten en parámetros del equipo, otras vienen a ser los objetivos de operación o control, otras más son las variables que se deben manipular para lograr esos objetivos y aún otras serán perturbaciones externas sobre las que no se tiene ningún control, pero cuyos efectos han de considerarse.

Dentro de estas, algunas de las más importantes son:

- 1. Alimentación: flujo, composición, fase, temperatura, presión.

2. Separación deseada, sea como concentración de uno de los componentes en una de las corrientes o como recuperación del mismo en una de las corrientes.
3. Presión de operación del equipo.
4. Caída de presión en la columna.
5. Reflujo de destilado (mínimo y de operación).
6. Retorno de pesados al fondo de la torre o flujo de fondos extraído.
7. Carga térmica al rehervidor y condensador (calor suministrado al rehervidor y calor retirado del condensador).
8. Número de etapas para la separación (mínimo y de diseño).
9. Tipo de condensador.
10. Estado del condensado (saturado, grado de subenfriamiento).
11. Tipo y área del rehervidor.
12. Tipo de etapa (Platos, empaque, etc.).
13. Altura y diámetro de la columna.
14. Etapa de alimentación.
15. Internos y materiales de construcción de la columna.

De la lista anterior, las primeras siete variables se espera que vayan cambiando en función de las condiciones generales del proceso y se conocen como variables de operación. Se deben definir o estimar para poder diseñar el equipo, pero sabiendo de antemano que algunas, como el flujo y composición de la alimentación, dependen del comportamiento de los procesos previos. El valor asignado en el diseño sirve para establecer la capacidad de producción máxima o mínima esperada.

Otras como el retorno de destilado a la columna deberán modificarse para lograr la separación deseada y aún otras, como la composición del destilado, dependen de influencias externas y de las condiciones de operación vigentes. El resto de las variables mencionadas, como el área de transferencia del rehervidor, se definen o se calculan durante la fase de diseño, acotando así lo que será posible obtener del equipo como entidad física. Una vez que se construye el equipo, para fines de control, estas dejan de ser variables y se convierten en parámetros del sistema.

Para diseñar un equipo, el número de variables intensivas (aquellas que no dependen del tamaño del sistema) que deben especificarse está determinado por el análisis de grados de libertad, que en esencia es un conteo donde se restan las incógnitas presentes del total de ecuaciones que lo describen, incluyendo relaciones entre fases [22].

El procedimiento para determinación de grados de libertad en columnas multietapa es directo, pero engorroso y no vale la pena analizarlo a detalle; lo importante del caso es que algo tan complejo como una columna de destilación pueda diseñarse, y su comportamiento predecirse, debido a que la mayoría de las propiedades y variables del sistema se relacionan unas con otras en forma conocida, o se puede estimar con bastante seguridad.

Ya se ha explicado que la forma en que se dividen los componentes de una mezcla al aplicarle calentamiento depende tanto de la naturaleza de estos, como de la presión y temperatura a que se encuentre el sistema. Los flujos de alimentación, destilado y fondos están relacionados entre sí, dependiendo también de esas relaciones de separación y de la energía total suministrada al rehervidor. Como el cumplimiento con las relaciones de separación en equilibrio y con las ecuaciones de balance de materia y energía se da en todo el sistema, deben formar parte de cualquier intento de describirlo.

Como ya se ha visto, para poder operar la planta se debe identificar las variables que se van a manipular para obtener los resultados planteados en el diseño [23], [29]. Esto presupone la existencia de reglas de asociación que se puedan aplicar consistentemente para dirigir el equipo hacia los objetivos de diseño y operación. A primera vista parece un asunto trivial, sabiendo que todas las variables se relacionan, y si solo se requiriera eso, sería trivial, pero se ocupa más que relación funcional. Lo que se necesita es identificar casos de fuerte dependencia donde una o más de las variables cumplan con los objetivos expresados mientras que la variable de la que dependen puede modificarse con facilidad.

Buena cantidad de las propuestas para variables de control encontradas en la literatura carecen de sentido en la práctica. Por ejemplo, casi nunca se puede especificar la composición de la alimentación, al estar dada por la operación de otro equipo o varía con cada lote de materia prima. Otro caso es la carga térmica (flujo de calor suministrado) al rehervidor: al contar con un área de intercambio definida, se desea es obtener la máxima producción que se pueda obtener de ella y no es rentable reducir el flujo del medio de calentamiento en tanto se pueda recurrir a otra variable para obtener el mismo resultado.

Para entender como funciona una columna de destilación, describir y estimar su comportamiento se necesita una estructura que haga uso de las variables, funciones y reglas de asociación descritas, y entregue resultados análogos a los del sistema analizado. Esa estructura es el modelo matemático del sistema.

3.4.2. Modelado de la columna, modelo matemático y mediante Bond Graphs

Se debe mantener siempre a la vista que el modelo de proceso es una abstracción matemática que pretende describir una entidad física. Las ecuaciones que lo forman son tan solo una aproximación de la realidad y nunca incluirán todas sus características.

En aplicaciones de ingeniería los modelos matemáticos se expresan como una o más ecuaciones diferenciales con las condiciones iniciales y de frontera suficientes y necesarias para su solución. Es deseable que estas ecuaciones se obtengan de leyes y principios básicos de la naturaleza aplicados a un sistema o volumen de control [65], pero la mayoría de las veces es necesario usar ecuaciones de correlación, ya sea para aportar mayor precisión, por falta de formas aplicables de leyes fundamentales o carencia de datos experimentales confiables en el rango de interés.

Para una columna de destilación tradicional, el modelo matemático suele incluir ecuacio-

nes de balance de materia y energía, ecuaciones de equilibrio entre fases, relación de retorno de pesados en el fondo y reflujo de destilado, entre otras. En un modelo orientado a diseño, lo normal es plantearlo para el estado estacionario, o estado estable, con base en velocidades de flujo promedio sobre un tiempo prolongado y donde no hay términos de acumulación. También aplica en casos donde las variaciones de la masa total del sistema son pequeñas o donde la acumulación de energía debida a sus interacciones de calentamiento y enfriamiento, no es relevante [66].

En cambio para simulación y control, deben aplicarse las ecuaciones de balance en función del tiempo, considerando términos de acumulación de materia y energía. A estos se les conoce como balances dinámicos del sistema y al modelo resultante como modelo dinámico.

En su forma más sencilla el modelo se expresa como un sistema de ecuaciones diferenciales lineales ordinarias de primer orden, del tipo:

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= f_1(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m, p_1, \dots, p_r) \\ \frac{dx_2}{dt} &= f_2(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m, p_1, \dots, p_r) \\ &\vdots \\ \frac{dx_n}{dt} &= f_n(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m, p_1, \dots, p_r)\end{aligned}\tag{3.9}$$

El conjunto de las ecuaciones 3.9 representan la configuración del sistema al tiempo t , donde x_i puede ser cualquiera característica del sistema que depende del tiempo, como el nivel el tanque separador de destilado o la temperatura en el fluido de calefacción para el reboiler en un momento en particular (t). El mismo conjunto de ecuaciones puede expresarse en forma vectorial compacta como:

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

donde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ es el vector de variables de estado, $\dot{\mathbf{x}}$ su derivada, $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_m)$ es el vector de variables de entrada y $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_r)$ es el vector de parámetros del sistema.

Las dificultades comienzan cuando se debe considerar aspectos relacionados con la no linealidad de los sistemas, tales como la fricción, turbulencia o la interacción térmica de corrientes. Todos los sistemas reales son no lineales y es raro que se pueda expresar el modelo con ecuaciones diferenciales lineales, en la mayor parte de los casos se opta por una linealización del modelo. Cuando esto no da una descripción adecuada, se debe resolver los modelos no lineales [27].

La composición de los productos o el grado de separación de los componentes de la mezcla original puede estar definido por condiciones de mercado o de operación global de la planta, pero un objetivo probable del sistema de control sería mantener la composición estable y tan cerca del valor de diseño como sea posible [30].

3.4.3. Descripción del modelo

En una columna típica, como la mostrada en la figura 3.1, la alimentación se da en un punto cerca a la mitad del cuerpo de la torre en lo que se llama etapa de alimentación (h). El vapor fluye de etapa a etapa hacia la parte alta de la columna y el líquido hace lo propio derramándose de una etapa a la siguiente. El vapor que sale del domo de la columna se hace pasar por un condensador total, donde se convierte en líquido saturado. Una parte se recircula a la columna y el líquido restante es el producto destilado, que debe contener una proporción elevada de los componentes más ligeros. En el fondo de la torre el líquido también se divide: una parte se retira como producto de fondos, con una concentración sustancialmente mayor del componente pesado y el resto se vaporiza en el rehervidor y retorna a la columna.

Para fines de exposición se supone que las etapas están formadas por charolas con rebosadero donde la configuración del plato promueve que el vapor que sube de la etapa inmediata inferior se mezcle perfectamente con el líquido y así considerar que las concentraciones de los componentes en el líquido y vapor en cada etapa no presentan gradientes de composición y se puede hablar de una sola concentración para cada componente y un solo flujo para cada fase en cada etapa.

Por ejemplo: si se cumplen las condiciones de mezcla perfecta en una etapa cualquiera, denotada como "etapa p ", se puede decir que el flujo de vapor saliendo de ella es Vp , su fracción mol del componente i es y_i ; el flujo de líquido que sale es Lp , y la fracción mol de i en él es x_i , descartando posibles cambios de la concentración de los componentes a diferentes profundidades de líquido en la charola.

Para el caso especial de destilación de una mezcla binaria, como la suma de las fracciones mol y masa en una mezcla es igual a uno, siempre se puede expresar la fracción del componente pesado (componente 2) en términos del componente ligero (componente 1) como $x_2 = 1 - x_1$.

En el caso considerado se muestra una columna que consta de n platos de equilibrio, incluyendo el rehervidor y condensador total. Para la numeración de las etapas se puede empezar desde el condensador o desde el rehervidor, pero es un poco más frecuente que se tome el condensador y tanque de destilado como etapa 1 y el rehervidor como etapa n y es la que se usa para el desarrollo de los modelos.

Suponiendo que la alimentación ingresa a la columna en el plato de alimentación (h) con dos componentes, al ingresar a la charola entra en contacto con el vapor y líquido que se encuentran ahí. Si el mezclado es adecuado se puede seguir con la hipótesis de que el líquido que cae y el vapor que sale de esa etapa está en equilibrio, pero considerando la aportación de la corriente alimentada a la composición de la mezcla en el plato.

Si todo el calor aportado al sistema entra en el rehervidor, el vapor producido ahí fluye en la forma ya descrita hacia el domo y conforme sube se enriquece progresivamente en el componente ligero mientras que en cada etapa cede una parte del componente pesado al líquido con el que se cruza.

El vapor abandona la columna por la parte de arriba, donde se condensa y se divide en el producto destilado (D) y el reflujo, que regresa a la columna como líquido. Este líquido fluye hacia la parte baja, aumentando su contenido de componentes pesados y deshaciéndose

de su fracción de ligeros. Ese líquido deja la torre por la parte baja para evaporarse en el rehervidor, parte del líquido se retira como producto de fondos y el resto se recircula a la torre. La pérdida y ganancia mencionadas se dan en cada etapa, donde líquido y vapor se ponen en contacto para alcanzar el equilibrio de fases.

Durante la operación, la columna debe cumplir con los objetivos de proceso en presencia de perturbaciones externas. Esos objetivos suelen ser la fracción de recuperación de un componente clave -destilado o de fondos- o cierta composición mínima de un componente en esas mismas corrientes. Para entender como interactúan las variables de proceso, describir su comportamiento en conjunto y tal vez estimarlo, se necesita una estructura que haga uso de las variables, funciones y reglas de asociación descritas y entregue resultados análogos a los del sistema analizado, que en este caso es su modelo termodinámico.

Para una columna tradicional el modelo matemático suele incluir las ecuaciones de balance de materia y energía (generales y por etapa), las ecuaciones de equilibrio entre fases, la relación de retorno de pesados en el fondo y el reflujo de destilado, entre otras. En el caso de simulación y control, deben aplicarse las ecuaciones de balance en función del tiempo, considerando términos de acumulación de materia y energía.

3.4.4. Modelo matemático general para la columna en estado transitorio

Para fines de exposición se supone que las etapas están formadas por charolas de platos perforados con rebosadero para la salida de líquido y que permiten el paso del vapor atravesando la fase líquida, aunque el modelo es igualmente válido para columnas empacadas donde se usa el concepto de etapa teórica. La columna consta de n etapas numeradas del condensador (etapa 1) al rehervidor (etapa n). La de alimentación es la etapa h .

El modelo es un sistema de ecuaciones diferenciales y algebraicas formado por las ecuaciones de balance de materia, energía y equilibrio de fases para cada etapa y las correspondientes al sistema global.

Puede incluir también las ecuaciones que describen el comportamiento hidráulico de las corrientes en el interior de la columna, pero estas normalmente no se requieren para el diseño termodinámico de la misma.

A continuación se expresan las ecuaciones de balance necesarias para modelar una columna de n etapas con nc componentes en la alimentación.

Primera etapa - Condensador

La representación de la primera etapa se da en la figura 3.8 y las ecuaciones que la describen son:

Balance global de materiales para la etapa.

$$\frac{dn_1}{dt} = V_2 - (L_1 + D) \quad (3.10)$$

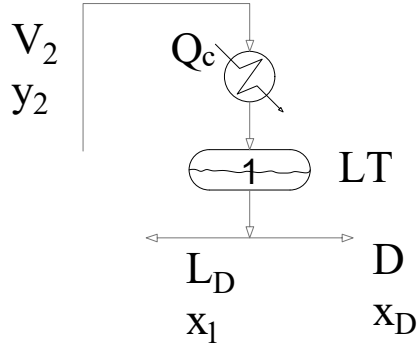


Figura 3.2: Primera etapa: Condensador

Balance para cada componente j entre $j = 1$ y nc :

$$\frac{dn_1 x_{1,j}}{dt} = V_2 y_{2,j} - (L_1 + D) x_{D,j} \quad (3.11)$$

El balance de energía para la etapa:

$$\frac{d(n_1 H_1)}{dt} = V_2 H_{2,v} - (L_1 + D) H_{1,L} - \dot{Q}_C \quad (3.12)$$

y ahí

$$\dot{Q}_C = V_2 \Delta H_V = (L_1 + D) \Delta H_{V,C} \quad (3.13)$$

Así que

$$\frac{d(n_1 H_1)}{dt} = V_2 H_{2,v} - (L_1 + D) H_{1,L} - (L_1 + D) \Delta H_{V,C} \quad (3.14)$$

En estas ecuaciones V_1 es el flujo molar de vapor saliendo de la etapa i y L_i es el flujo molar de líquido saliendo de ella. n_1 son los moles retenidos en el conjunto de condensador y tanque de nivel y j es el índice para los componentes.

Etapas normales

Para cualquier plato en las secciones de rectificación y agotamiento, como el mostrado en la figura 3.3:

Balance global

$$\frac{dn_i}{dt} = L_{i-1} + V_{i+1} - L_i + V_i \quad (3.15)$$

$$\forall i | 1 < i < n$$

Balance por componente

$$\frac{dn_i x_{i,j}}{dt} = L_{i-1} x_{i-1,j} + V_{i+1} y_{i+1,j} - L_i x_{i,j} - V_i y_{i,j} \quad (3.16)$$

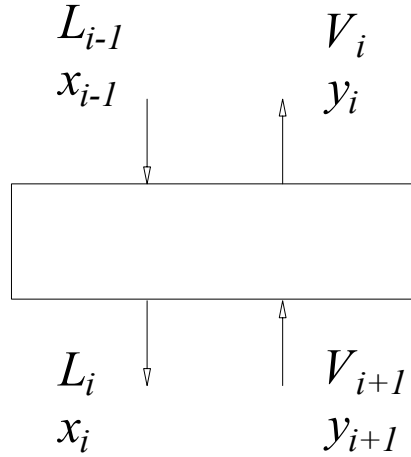


Figura 3.3: Etapa típica

$$\forall j | 1 \leq j \leq nc$$

Balance de energía

$$\frac{d(n_i H_i)}{dt} = L_{i-1} H_{i-1,L} + V_{i+1} H_{i+1,V} - L_i H_{i,L} - + V_i H_{i,V} \quad (3.17)$$

Alimentación

La etapa de alimentación se muestra en la figura 3.4

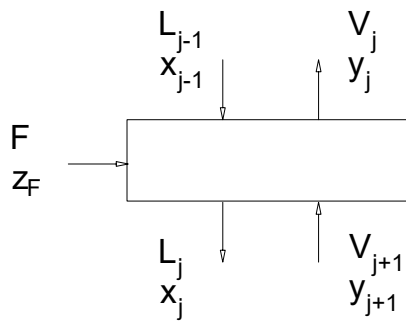


Figura 3.4: Plato de alimentación

Balance global

$$\frac{dn_h}{dt} = L_{h-1} + V_{h+1} + F - L_h + V_h \quad (3.18)$$

Balance por componente

$$\frac{dn_h x_{h,j}}{dt} = L_{h-1} x_{h-1,j} + V_{h+1} y_{h+1,j} + F z_j - L_h x_{h,j} + V_h y_{h,j} \quad (3.19)$$

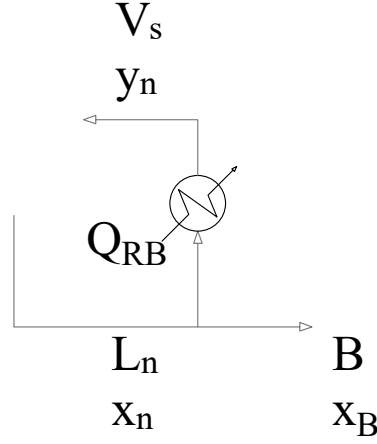


Figura 3.5: Etapa n - Rehervidor

Balance de energía

$$\frac{d(n_h H_h)}{dt} = L_{h-1} H_{h-1,L} + V_{h+1} H_{h+1,V} + F H_{h,L} - L_h H_{h,L} - V_h H_{h,V} \quad (3.20)$$

donde n_h son los moles retenidos en la etapa.

Rehervidor

Su diagrama se muestra en la figura 3.5

Balance global

$$\frac{dn_n}{dt} = L_{n-1} - L_n + V_n \quad (3.21)$$

Balance por componente

$$\frac{dn_n x_{n,j}}{dt} = L_{n-1} x_{n-1,j} - L_n x_{n,j} - V_n y_{n,j} \quad (3.22)$$

$$\forall j | 1 \leq j \leq nc$$

Balance de energía

$$\frac{d(n_n H_n)}{dt} = L_{n-1} H_{n-1,L} + V_{i+1} H_{i+1,V} - L_n H_{n,L} - V_n H_{n,V} + \dot{Q}_{RB} \quad (3.23)$$

El flujo molar de vapor y líquido se denotan con V y L . Los subíndices $h-1$, h y $h+1$ se refieren a la etapa de donde sale la corriente; $x_{i,j}$ es la fracción mol de componente j en el líquido saliendo de la etapa i .

Para cualquier corriente k de líquido saturado

$$H_{k,L} = \dot{n} C_{p,k} (T_k - T_{ref}) \quad (3.24)$$

Para cualquier corriente l de vapor saturado

$$H_{l,V} = \dot{n} C_{p,l} (T_l - T_{ref}) + \Delta H_V |^{T_l} \quad (3.25)$$

Ecuaciones de los cruces de corriente

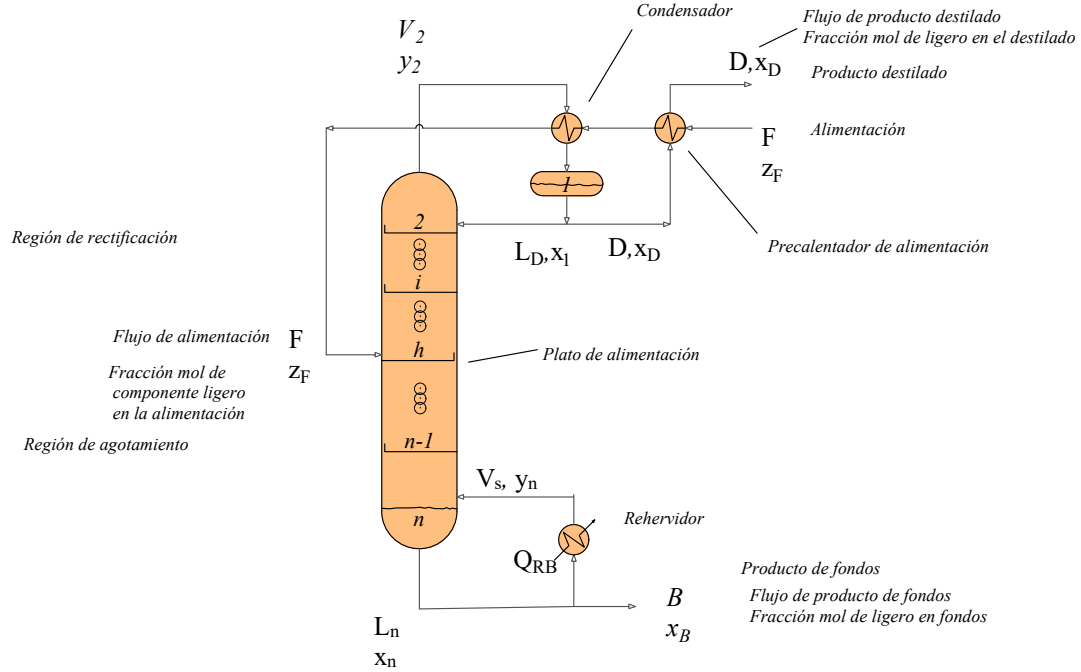


Figura 3.6: Columna con integración de energía

Hay gran cantidad de arreglos posibles involucrando corrientes externas que, para efectos de control del sistema, se comportan como corrientes con enfriamiento/calentamiento tradicional. Los esquemas de recuperación que impactan la dinámica de operación en la columna son aquellos donde se cruzan corrientes de proceso que entran y salen del sistema. Los esquemas más comunes son:

- La corriente de alimentación se usa para enfriar el producto destilado lo más cerca posible de la temperatura de almacenamiento en tanque al tiempo que la alimentación se lleva lo más cerca posible de su temperatura de burbuja.
- La corriente de alimentación se usa directamente como líquido de enfriamiento en el condensador .

En ambos casos la recuperación de energía está condicionada por la diferencia mínima de temperatura requerida entre las corrientes caliente y fría del equipo de intercambio de calor.

En la opción de integración energética mostrada en la figura 3.6 el balance para el equipo de precalentamiento está dado por:

$$\frac{d(n_{prec}H_{prec})}{dt} = FH_{F,e} + DH_{D,e} - FH_{F,s} + DH_{D,s} \quad (3.26)$$

$$\frac{d(n_{prec}H_{prec})}{dt} = FCp_F(T_{F,e} - T_{F,s}) + DCp_D(T_{D,e} - T_{D,s}) \quad (3.27)$$

Para el intercambio directo en el condensador

$$\frac{d(n_1H_1)}{dt} = V_2H_2 - (L_1 + D)H_1 - \dot{Q}_C \quad (3.28)$$

se convierte en

$$\frac{d(n_1H_1)}{dt} = V_2H_2 - (L_1 + D)H_1 - F\Delta H_{V,F} - \dot{Q}_C \quad (3.29)$$

La mayor parte de las CDIE, independientemente de su estructura, en tanto su red de recuperación de energía esté formada exclusivamente por corrientes de entrada /salida del sistema pueden modelar esa recuperación mediante

$$\frac{d(n_1H_1)}{dt} = V_2H_2 - (L_1 + D)H_1 - \dot{Q}_{Cprimario} - \dot{Q}_{Csecundario} \quad (3.30)$$

$$\frac{d(n_1H_1)}{dt} = V_2H_2 - (L_1 + D)H_1 - F\Delta H_{V,F} - \dot{Q}_{C,secundario} \quad (3.31)$$

considerando la necesidad de proveer enfriamiento adicional para completar la condensación del destilado si no basta con el que provee la alimentación.

Consideraciones para simplificación del modelo

Si se tratara de plantear el modelo para una mezcla a destilar conteniendo cincuenta hidrocarburos se tendría, solo en la alimentación, cincuenta y una ecuaciones de balance y cincuenta relaciones de equilibrio entre las composiciones en el líquido y vapor. Para hacer manejable el análisis se hace necesario introducir algunas consideraciones y simplificaciones:

- La alimentación tiene dos componentes y por tanto destilación binaria. Como la suma de fracciones mol es igual a uno, los balance se expresarán en términos del componente ligero y la fracción del componente pesado (componente 2) se obtiene por diferencia.
- Suponiendo que la alimentación entra a la columna en el plato de alimentación (h), en su charola entra en contacto con el vapor y líquido que se llegan a ella de las etapas adyacentes. Si el mezclado es adecuado se puede seguir contemplando el líquido que cae y el vapor que sale de esa etapa como fases en equilibrio, pero tomando en cuenta la aportación de la alimentación a la composición de la mezcla en ese plato.
- Si el calor latente de vaporización de los dos componentes es similar se puede considerar que el componente pesado que condensa en cada etapa produce la evaporación de una cantidad igual del componente ligero.
- No hay retención de vapor en ninguna etapa.
- El volumen molar de líquido en cada etapa es constante.

- Si la columna está bien aislada, se alimenta energía al sistema solo en el rehornidor y se retira solo en el condensador, se pueden obviar los balances de energía por etapa.
- El calor retirado en el condensador lleva al destilado a la condición de líquido saturado, sin subenfriar.
- Como se están definiendo las ecuaciones de balance en el condensador y rehornidor en términos de material condensado y vaporizado, el sistema es directamente aplicable a columnas con integración de energía. En cada caso se hace necesario encontrar la relación funcional $F = f(V_S, L_D)$, que es la forma en que la alimentación depende del reflujo de destilado y del retorno de fondos en el rehornidor.
- El volumen de líquido en el tanque de destilado es constante.
- No hay acumulación de líquido en el rehornidor.
- El estado de fase de la alimentación se define con la variable q_F , fracción de líquido en la alimentación. Esta varía entre 1 para el líquido saturado y 0 para el vapor saturado. La calidad de una mezcla saturada líquido-vapor es la fracción de vapor en la mezcla, así que q_F es la cantidad complementaria de la calidad del vapor: $Calidad = 1 - q_F$, aclarando que aquí se trata de fracciones molares.

La etapa de alimentación h divide la destilación en dos secciones bien diferenciadas: encima de la alimentación está la zona de rectificación o enriquecimiento, por debajo de ella está la zona de agotamiento.

Debido a las condiciones de no retención de vapor en ninguna etapa y al no haber acumulación de líquido en ellas, el flujo de vapor y líquido en las secciones de rectificación y agotamiento es constante de una etapa a otra, y la diferencia en los flujos entre rectificación y agotamiento debido a la condición de saturación de la corriente alimentada. Para cualquier etapa i :

$$V_i = V_{i+1} = V_{i-1} \quad (3.32)$$

$$L_i = L_{i+1} = L_{i-1} \quad (3.33)$$

Expresando los balances para cada sección:

El balance global está dado por:

$$F = D + B \quad (3.34)$$

Balance en la etapa de Alimentación

En la etapa de alimentación, mostrada en la figura 3.7, el flujo molar de vapor que sale de ella es:

$$V_F = V_{F+1} + F(1 - q_F) \quad (3.35)$$

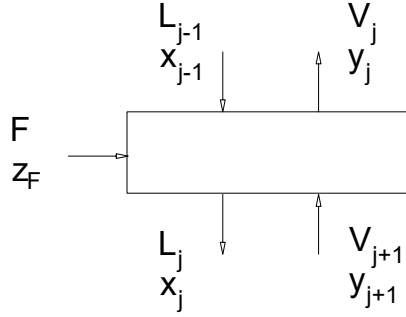


Figura 3.7: Diagrama de bloques etapa de alimentación

y el flujo de líquido saliendo:

$$L_F = L_{F-1} + Fq_F \quad (3.36)$$

Balance en el Condensador

De acuerdo con la figura 3.8 el balance se expresa como:

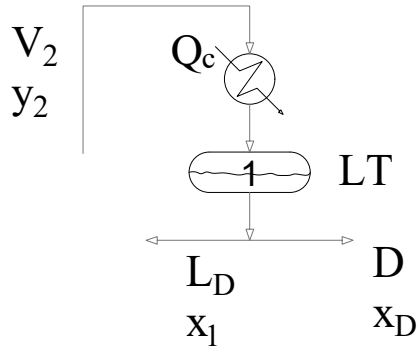


Figura 3.8: Condensador

$$L_D + D = L_2 \quad (3.37)$$

Rehervidor

De acuerdo con la figura 3.9 el balance se expresa como:

Rehervidor

$$B = L_{n-1} - V_s \quad (3.38)$$

Zona de rectificación

El balance para la zona de rectificación está dado por:

$$L_i = L_R = L_D \quad (3.39)$$

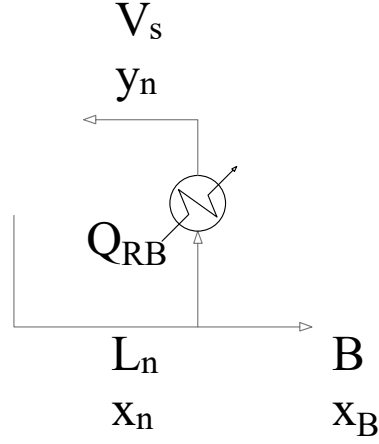


Figura 3.9: Rehervidor

$$V_R = V_S + F(1 - q_F) \quad (3.40)$$

Zona de agotamiento

El balance para la zona de agotamiento está dado por:

$$L_i = L_S = L_R + Fq_F \quad (3.41)$$

$$V_S = V_{RB} \quad (3.42)$$

Los subíndices S , R y RB se refieren a flujos molares en la zona de enriquecimiento, agotamiento y en el rehervidor, respectivamente.

3.4.5. Modelo dinámico simplificado

Las ecuaciones de balance del componente ligero en cada sección se expresan según el desarrollo mostrado a continuación:

Condensador-Tanque de destilado (etapa 1):

$$n_1 \frac{dx_1}{dt} = V_R(y_2 - x_1) \quad (3.43)$$

Poniendo la derivada en forma explícita:

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{V_R}{n_1}(y_2 - x_1) \quad (3.44)$$

Zona de rectificación (etapas $i = 2$ a $h - 1$):

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{L_R}{n_i}(x_{i-1} - x_i) + \frac{V_R}{n_i}(y_{i+1} - y_i) \quad (3.45)$$

Alimentación (etapa $i = h$):

$$\frac{dx_h}{dt} = \frac{L_R}{n_h}x_{h-1} - \frac{L_S}{n_h}x_h + \frac{V_S}{n_h}y_{h+1} - \frac{V_R}{n_h}y_h + \frac{F}{n_h}z_F \quad (3.46)$$

Agotamiento (etapas $i = h + 1$ a $n - 1$):

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{L_S}{n_i}(x_{i-1} - x_i) + \frac{V_S}{n_i}(y_{i+1} - y_i) \quad (3.47)$$

Rehervidor:

$$\frac{dx_n}{dt} = \frac{L_S}{n_{RB}}x_{n-1} - \frac{B}{n_{RB}}x_n - \frac{V_S}{n_{RB}}y_n \quad (3.48)$$

De (3.38)

$$B = L_s - V_s \quad (3.49)$$

que sustituyendo y reordenando queda

$$\frac{dx_n}{dt} = \frac{L_S}{n_{RB}}(x_{n-1} - x_n) + \frac{V_s}{n_{RB}}(x_n - y_n) \quad (3.50)$$

La relación entre la fracción mol en el vapor y la del líquido para una etapa en equilibrio está dada por:

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (3.51)$$

donde α es la volatilidad relativa entre los dos componentes. Esta consideración es muy delicada ya que la relación solo es constante para soluciones ideales donde ambos componentes tienen el mismo calor latente de vaporización. Cuando los calores latentes difieren en forma significativa esta simplificación deja de ser válida y hay que recurrir a otras expresiones, que no se consideran de momento.

El modelo es un sistema de ecuaciones diferenciales, que para resolverse requiere un conjunto consistente de condiciones iniciales.

Cuando el comportamiento del sistema no varía con el tiempo los términos de acumulación (derivadas respecto al tiempo) se hacen cero y las ecuaciones de balance de componente ligero en cada sección son:

Condensador-Tanque de destilado (etapa 1):

$$V_R(y_2 - x_1) = 0 \quad (3.52)$$

Zona de rectificación (etapas $i = 2$ a $h - 1$):

$$L_R(x_{i-1} - x_i) + V_R(y_{i+1} - y_i) = 0 \quad (3.53)$$

Alimentación:

$$L_Rx_{h-1} - L_Sx_h + V_Sy_{h+1} - V_Ry_h + Fz_F = 0 \quad (3.54)$$

Agotamiento (etapas $i = h + 1$ a $n - 1$):

$$L_S(x_{i-1} - x_i) + V_S(y_{i+1} - y_i) = 0 \quad (3.55)$$

Rehervidor:

$$L_S x_{n-1} - B x_n - V_S y_n \quad (3.56)$$

La relación entre la fracción mol en el vapor y la del líquido para una etapa en equilibrio sigue siendo:

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (3.57)$$

Este no es un sistema de ecuaciones lineales, dado que y es no lineal respecto a la variable de estado y aparece en todas las ecuaciones, haciendo el sistema no lineal incluso con α es constante.

3.5. Elementos del modelo de la CDIE en Bond Graph

En la sección 1.4 se describen los elementos fundamentales del modelado en Bond Graph, ahora corresponde hacer la correlación entre esos elementos y el modelado matemático de las CDIE.

De acuerdo con los trabajos de Brooks, Couenne y Latreche [10],[11],[14],[36], entre otros, los puertos básicos presentan limitaciones al modelar ciertos equipos en ingeniería de procesos, por lo que se han desarrollado herramientas adicionales para lograrlo, sobre todo en áreas de transferencia de calor, manejo de sistemas irreversibles y modelado del comportamiento hidráulico de las torres.

Aunque los aspectos termodinámicos del equilibrio de fases, como igualdad de presión y temperatura entre las fases y potencial químico de cada componente en ellas son quienes gobiernan la separación, para tener esas condiciones es necesario que el equipo tenga espacios donde se promueva el contacto íntimo entre líquido y vapor, que al mismo tiempo permita que una vez alcanzado el equilibrio las fases puedan separarse. A cada uno de estos espacios colocados en serie se les conoce como etapas de separación.

Hay muchas formas de generar físicamente esas zonas de interacción entre las fases, como charolas (platos de equilibrio) o empaque en la columna y cada sistema da lugar a una familia de columnas, con múltiples variantes cada una, muchas veces diseñadas para aplicaciones específicas.

En las columnas de platos cada uno forma una etapa física, mientras que en una columna empacada se tiene espacios entre el material de empaque por donde circulan a contracorriente líquido y vapor de forma que cierta longitud de columna da el comportamiento equivalente a un plato, a ese segmento se conoce como etapa teórica. Sin importar el tipo de columna, por la forma en que están estructuradas, cada etapa proporciona el espacio donde se ponen en contacto el líquido descendente y el vapor que sube por su interior en forma tal que realmente se den las condiciones suficientes y necesarias para lograr el equilibrio termodinámico. Así se tiene que los requerimientos termodinámicos que rigen la separación a su vez se ven gobernados, al menos en parte, por consideraciones hidráulicas que en Bond Graph han de representarse con elementos específicos al caso.

Las ecuaciones de equilibrio termodinámico son las mismas si la columna es de platos o empacada, pero los patrones de flujo no, con la complicación adicional de que en las columnas empacadas cada tipo de empaque estructurado tiene un patrón propio, cuyos parámetros de modelado son propiedad del fabricante y rara vez aparecen en la literatura, haciendo necesario recopilar directamente información de campo para cada caso.

Para las necesidades de este trabajo es conveniente modelar equipos con características físicas que faciliten la aplicación directa de los elementos correspondientes en Bond Graph, como platos con rebosadero como la mostrada en la figura 3.12 [67] en vez de columna empacada, condensador total en vez de parcial, etc. Enseguida se expone parte del análisis correspondiente al comportamiento hidráulico de un plato perforado, con énfasis en la representación de sus elementos en Bond Graph.

3.5.1. Modelado de la etapa de equilibrio (charola o plato de destilación)

En una columna tradicional, como la mostrada en la figura 3.1, la alimentación se da en un punto cerca de la mitad del cuerpo de la torre y encima del plato de alimentación. El vapor fluye de etapa a etapa hacia la parte alta de la columna y el líquido hace lo propio derramándose de una etapa a la siguiente. El vapor que sale del domo de la columna se condensa. Una parte de ese condensado se recircula hacia el cuerpo de la columna y el líquido restante es el producto destilado, con una proporción mayor de los componentes más ligeros que la alimentación. En el fondo de la torre el líquido también se divide: una parte se retira como producto de fondos, con una concentración sustancialmente mayor del componente pesado y el resto se vaporiza en el rehervidor y retorna a la columna.

Aunque el mínimo absoluto de etapas para una destilación es de una (flash o destilación batch) [61] el número de etapas mínimo para una columna que contenga los elementos básicos de alimentación, rectificación, agotamiento, condensador y rehervidor es de cinco; una para cada sección básica, y es el que se usó para el modelo matemático.

Para la representación en BG del sistema es necesario obtener las ecuaciones de modelado que tienen sus representaciones equivalentes en Bond Graph. Por ejemplo, para las ecuaciones de la etapa de alimentación h y usando los subíndices adicionales L y V para denotar líquido y vapor:

Balance global

$$\frac{dn_h}{dt} = L_{h-1} + V_{h+1} + F - L_h + V_h \quad (3.58)$$

Balance por componente

$$\frac{dn_h x_{h,j}}{dt} = L_{h-1} x_{h-1,j} + V_{h+1} y_{h+1,j} + F z_j - L_h x_{h,j} + V_h y_{h,j} \quad (3.59)$$

$$\forall j | 1 \leq j \leq nc$$

Balance de energía

$$\frac{d(n_h H_h)}{dt} = L_{h-1} H_{h-1,L} + V_{h+1} H_{h+1,V} + F H_{h,L} - L_h H_{h,L} - V_h H_{h,V} \quad (3.60)$$

donde n_h son los moles dentro de la etapa y $\frac{dn_h x_{h,j}}{dt}$ el término de acumulación para la misma.

En realidad el balance por componentes usando fracciones molares, expresado en la ecuación (3.59) es equivalente al balance de flujos molares de cada componente

$$\frac{dn_{h,j}}{dt} = L_{h-1,j} + V_{h+1,j} + F_j - L_{h,j} - V_{h,j} \quad (3.61)$$

$$\forall j | 1 \leq j \leq nc$$

La representación en BG está determinada por las condiciones de equilibrio termodinámico,

$$T_{h,L} = T_{h,V} \quad (3.62)$$

$$P_{h,L} = P_{h,V} \quad (3.63)$$

$$\mu_{i,h,L} = \mu_{i,h,V}; \forall i | 1 \leq i \leq nc \quad (3.64)$$

Particularmente, las condiciones de igualdad de potencial y sus transformaciones, el detalle de estas transformaciones se encuentra en el apéndice B.

Si se toma un par de variables conjugadas de potencia formado por el potencial químico por componente como esfuerzo y el flujo molar del mismo componente como flujo, con el requisito de igualdad del potencial químico la representación del balance de materiales para la etapa se muestra en la figura 3.10 y el correspondiente balance de entalpía en la figura 3.11

Para los equipos con charolas, como el de las figuras 3.12 y 3.13 la operación de cada etapa se basa en la acumulación de cierto volumen de líquido saturado que baja de la etapa anterior, el plato tiene perforaciones que permiten el paso de vapor y un rebosadero para la salida de líquido. El líquido acumulado debe ser suficiente para asegurar un adecuado contacto con el vapor ascendente y los orificios en el plato deben permitir el paso del vapor, cuyo flujo debe impedir que por ahí escurra el líquido, aunque en muchos diseños se emplean válvulas para evitar este fenómeno. La configuración del plato promueve que el vapor que sube de la etapa inmediata inferior se mezcle perfectamente con el líquido y se considera que las concentraciones de los componentes en el líquido y vapor en cada etapa no presentan gradientes de composición y se puede hablar de una sola concentración para cada componente y un solo flujo para cada fase en cada etapa.

Desde el punto de vista del modelado en Bond Graph de la charola, se trata de un caso muy similar al del problema de calcular el vaciado de un tanque cilíndrico a través de una tubería. Ya se ha comentado que los sistemas hidráulicos constituyen uno de los campos de mayor aplicación de esta metodología, aquí las variables de esfuerzo (e), flujo (f), desplazamiento (q) y momento (p) se corresponden con presión, flujo volumétrico, volumen acumulado y

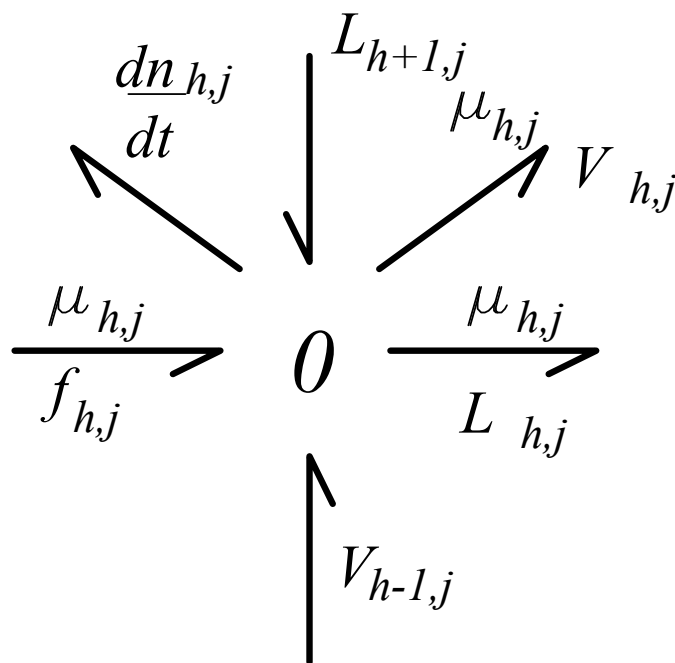


Figura 3.10: Balance de materiales en la etapa de alimentación

momento de presión. En el nivel de detalle requerido para simulación y control de procesos, como las columnas, es suficiente el uso de parámetros agrupados y ecuaciones algebraicas, ya que la consideración de volumen acumulado constante para las etapas y la condición de flujo constante en las secciones de agotamiento y rectificación descartan el término de acumulación en las ecuaciones de balance para las etapas.

3.5.2. Modelado hidráulico en Bond Graph

Las elecciones y simplificaciones enunciadas en la sección 3.4.4 afectan principalmente al planteamiento de los balances de materia y energía y equilibrio de fases, pero algunas influyen también al modelado hidráulico de la torre, como:

- Cada etapa está formada por un plato físico perforado estándar con rebosadero y la cámara de vapor formada entre la superficie del líquido y el fondo de la siguiente etapa.
- No hay retención de vapor en ninguna etapa.
- El volumen de líquido en cada etapa es el mismo.
- El volumen de líquido retenido en condensador y rehervidor es el mismo y constante.

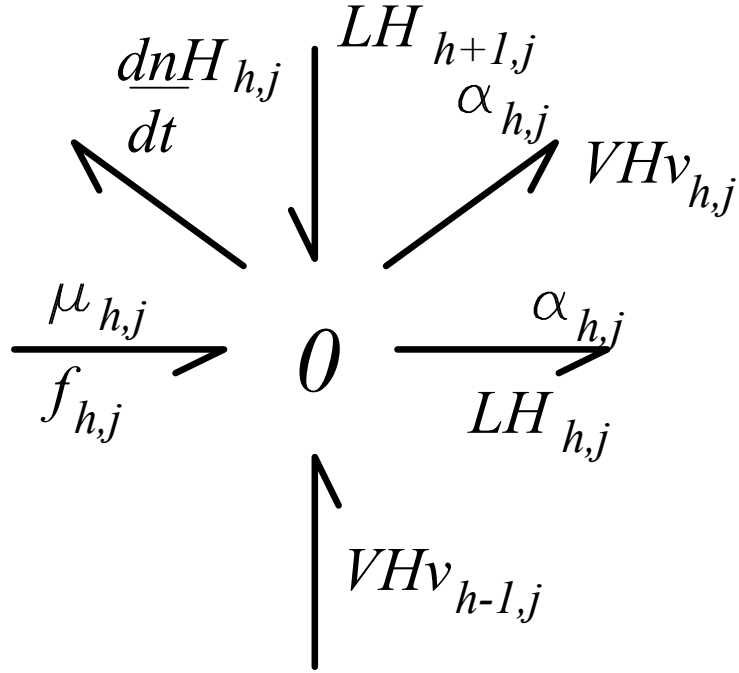


Figura 3.11: Balance de entalpía para la etapa de alimentación

- Debido a las condiciones de no retención de vapor en ninguna etapa y al no haber acumulación de líquido en ellas, el flujo de vapor y líquido en las secciones de rectificación y agotamiento es constante de una etapa a otra, y la diferencia en los flujos entre rectificación y agotamiento debido a la condición de saturación - o calidad- de la corriente alimentada.

3.5.3. Elementos de BG para sistemas hidráulicos

Resistencias

Cabe aclarar que en esta sección se usa frecuentemente la simbología de variables específicas para sistemas hidráulicos o termodinámicos con el fin de enfatizar el significado físico de las variables pero, en la mayoría de los casos, al modelar en BG es preferible expresarse en términos de nomenclatura generalizada.

Anteriormente se mostró la representación de un elemento resistivo como se muestra en la figura 3.14 [26] que para un elemento con las variables correspondientes a un BG hidráulico se muestra en la figura 3.15.

Aún siendo perfectamente válida, esta representación no es suficiente para reflejar con claridad la relación entre variables que se presenta en elementos que experimentan resistencia

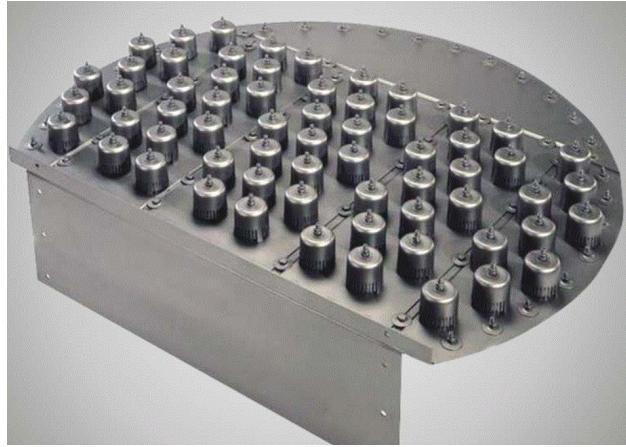


Figura 3.12: Charola con tapas de borboteo

al flujo como un tubo de gran longitud relativa a su diámetro los mostrado en la figura 3.16, tapón poroso (fig 3.17), válvula parcialmente cerrada (fig.3.18) o una placa de orificio (fig. 3.19).

En todos esos elementos se disipa potencia, que puede pasar desapercibida en sistemas ya en operación, dado que el equipo de bombeo o la altura de los depósitos de líquido la aportan sin efecto aparente; pero tratándose de diseño esta potencia disipada se debe incluir forzosamente en el cálculo de los equipos de bombeo. En los elementos mostrados la potencia disipada es igual al producto del flujo volumétrico por la caída de presión, y en la representación de la figura 3.15 no se aprecia que la variable de esfuerzo es la diferencia de presiones entre entrada y salida. Más aún, aunque estrictamente hablando la presión a la entrada del elemento es la que fuerza al fluido a pasar por la restricción de flujo, la caída de presión es una función del flujo volumétrico que normalmente es no lineal y puede expresarse mediante una relación constitutiva del tipo

$$\Delta P = \Phi_R(V) \quad (3.65)$$

Una forma más adecuada para representar estos elementos se muestra en la figura 3.20

En esta se usa una unión 1 para representar la caída de presión (P_3) como la diferencia entre las presiones de entrada (P_1) y salida (P_2) al mismo tiempo que los flujos volumétricos se mantienen inalterados, ya que en una unión-1 $f_1 = f_2 = f_3$, que en este caso corresponde a $\dot{V}_1 = \dot{V}_2 = \dot{V}_3$ y se cumple la función del arreglo de la figura 3.20 de relacionar un esfuerzo con el flujo en forma más conveniente.

Capacitancia en flujo de fluidos (Capacitores)

En sistemas con flujo, los elementos capacitivos son aquellos donde se presenta acumulación del fluido con una ley constitutiva que relaciona esfuerzo y la integral del flujo (variable de desplazamiento) que en el caso de fluidos serán la presión y el volumen acumulado. Un capacitor es, en esencia un elemento de almacenamiento unido directamente a la línea, como

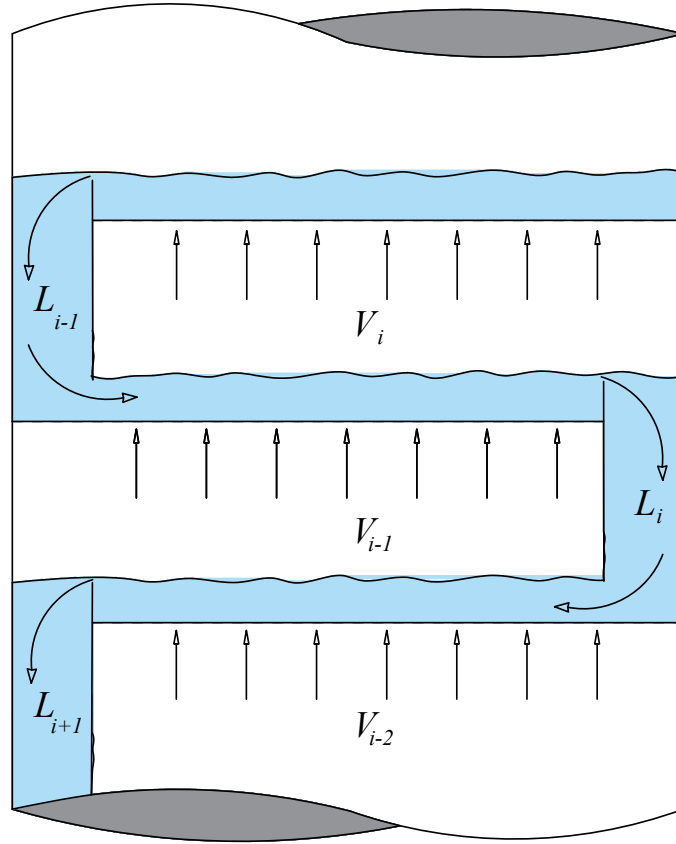


Figura 3.13: Patrón de flujos en los platos de una columna estándar

un tanque vertical, secciones de tubería con aumento de diámetro o receptores flexibles (vejigas) entre otros. La relación constitutiva general es del tipo $P = \phi C - 1(V)$; $V = \int_0^t \dot{V} dt$. Si la relación constitutiva puede considerarse lineal:

$$P = \frac{V}{C} \quad (3.66)$$

Algunos de los elementos que hacen esa función para los fluidos se muestran en las figuras 3.21 y 3.22.

Con estos se presenta un caso similar al de las resistencias, en donde el elemento estándar no da exactamente la funcionalidad del elemento físico, pero mientras que en las resistencias el flujo es constante, en los capacitores hidráulicos se mantiene constante el esfuerzo (presión), con flujo (flujo volumétrico) conservativo.

Así que en forma similar al elemento resistivo, se usa una unión para lograrlo, solo que en vez de unión -1 se trata de una unión-0 como se muestra en la figura 3.23 y las relaciones constitutivas serían:

$$P_3 = \phi_C^{-1}(V_3) \quad (3.67)$$

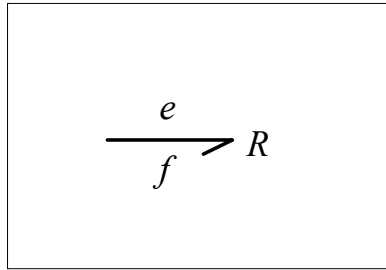


Figura 3.14: Elemento resistivo con variables generalizadas

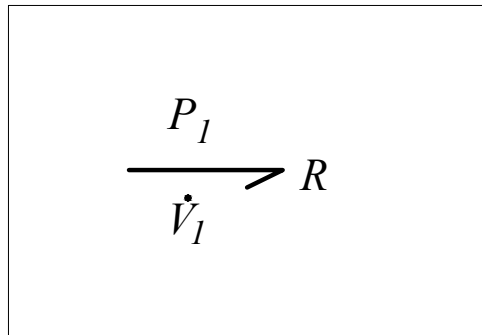


Figura 3.15: Representación de un elemento resistivo con variables para un sistema hidráulico

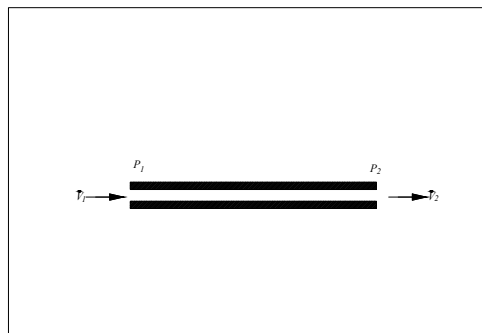


Figura 3.16: Tubo de gran longitud relativa a su diámetro

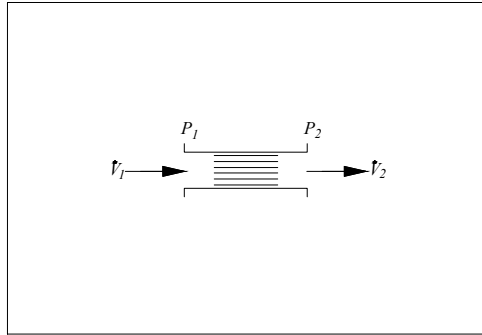


Figura 3.17: Resistencia por presencia de un tapón poroso

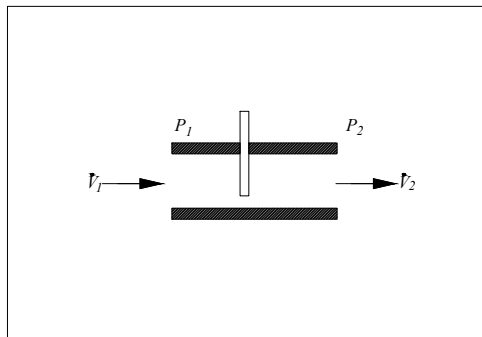


Figura 3.18: Resistencia por válvula parcialmente cerrada

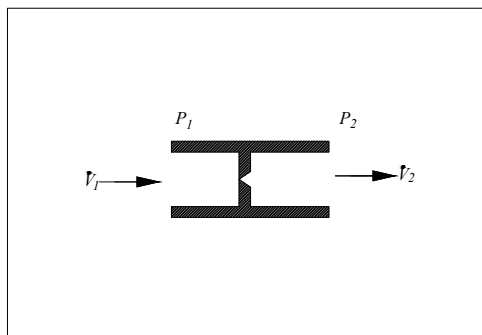


Figura 3.19: Resistencia por placa de orificio

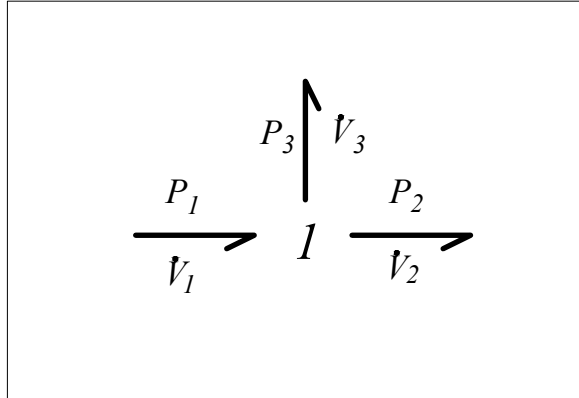


Figura 3.20: Representación desarrollada de un elemento resistivo para un sistema hidráulico

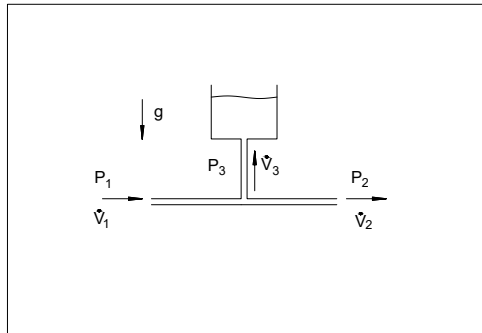


Figura 3.21: Ejemplo de capacitor hidráulico (a)

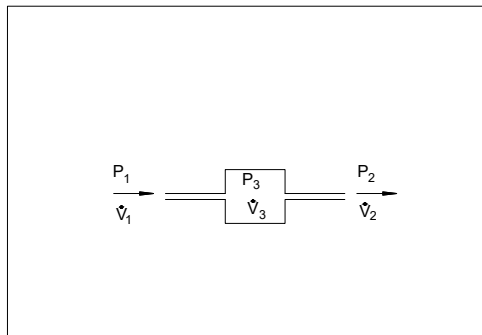


Figura 3.22: Ejemplo de capacitor hidráulico (b)

o

$$P_3 = \frac{V_3}{C_3} \quad (3.68)$$

para el caso lineal donde

$$V_3 = \int_0^t \dot{V}_3 dt \quad (3.69)$$

La unión -1 permite que el elemento representado de las relaciones correctas de esfuerzo y flujo

$$P_1 = P_2 - P_3 \quad (3.70)$$

y

$$\dot{V}_3 = \dot{V}_1 - \dot{V}_2 \quad (3.71)$$

en la unión-0 y V_3 es el fluido total acumulado en el tiempo t debido a la diferencia de flujos entre el punto 1 y el 2. Para un nivel h en el tanque y un área de la superficie cilíndrica A_3 el volumen acumulado en un campo gravitacional estándar la presión en el fondo del tanque es:

$$P_3 = \frac{\rho g V_3}{A_3} \quad (3.72)$$

y

$$C_3 = \frac{A_3}{\rho g} \quad (3.73)$$

Inercia

Este elemento describe la inercia asociada con el fluido contenido en un segmento de tubería, este mismo elemento en circuitos eléctricos describe la inductancia. La inercia relaciona flujo y momento (variables generalizadas) que en variables para movimiento de fluidos serían flujo volumétrico y momento de presión p_P donde

$$p_P = \int P(t) dt \quad (3.74)$$

Para un segmento de tubería de longitud l , área de sección transversal A y densidad del fluido ρ , como el mostrado en la figura 3.24.

En estos elementos se cumplen las ecuaciones

$$P_3 = P_1 - P_2 \quad (3.75)$$

$$p_{P_3} = \int_0^t P_3(t) dt = \int_0^t (P_1 - P_2) dt \quad (3.76)$$

y para cualquier fluido incompresible

$$\dot{V}_1 = \dot{V}_2 = \dot{V}_3 \quad (3.77)$$

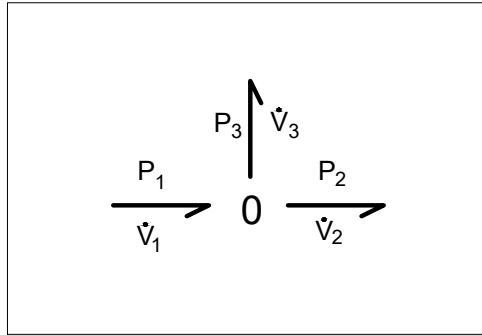


Figura 3.23: Representación desarrollada de un elemento capacitivo en un sistema hidráulico

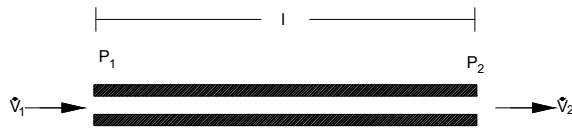


Figura 3.24: Inercia de un fluido en un segmenteo de tubería

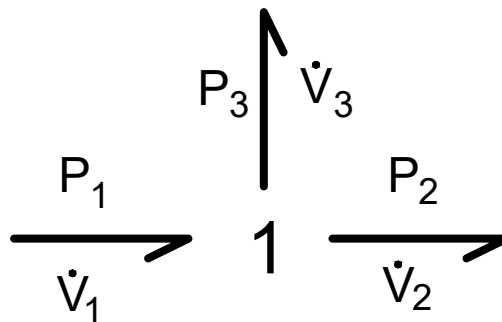


Figura 3.25: Representación desarrollada de un elemento de inercia en un sistema hidráulico

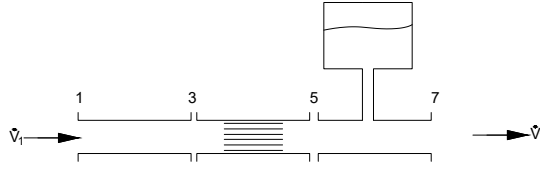


Figura 3.26: Segmento largo de tubería modelado incluyendo elementos varios

estas ecuaciones hacen evidente que para su representación nuevamente se debe hacer uso de la unión-1 para complementar la representación de las relaciones entre esfuerzo y flujo en el elemento modelado como se muestra en la figura 3.25.

El coeficiente de inercia lineal está definido por la relación entre el flujo volumétrico y el momento de presión

$$I_3 = \frac{pP_3}{I_3} \quad (3.78)$$

o

$$I_3 V_3 = pP_3 \quad (3.79)$$

Suponiendo que el fluido se mueve en flujo tapón, su velocidad está dada por

$$v = \frac{\dot{V}_3}{A} \quad (3.80)$$

su aceleración

$$a = \frac{d\dot{V}_3}{dt} \quad (3.81)$$

con la masa

$$m = \rho Al \quad (3.82)$$

La fuerza neta empujando el tapón involucra el producto ρA en los dos extremos de la tubería

$$\frac{\rho Al}{A} \frac{d\dot{V}_3}{dt} = (P_1 - P_2)A \quad (3.83)$$

y de ahí que

$$I_3 = \frac{\rho l}{A} \quad (3.84)$$

Modelado de un segmento de tubería combinado

Si se tiene un segmento de tubería relativamente largo, puede ser modelado considerando que contiene elementos combinados de inercia, resistencia y acumulación, como se muestra en la figura 3.26; aunque físicamente no existan tales elementos sería necesario agregarlos para simular el comportamiento de una línea lo suficientemente prolongada con irregularidades en su trayecto.

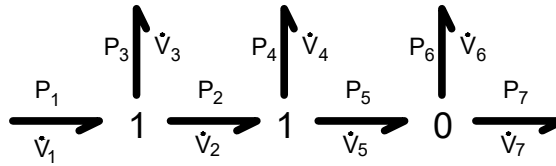


Figura 3.27: Representación desarrollada de un elemento con elemento varios en un sistema hidráulico

Esta representación es claramente unidimensional, donde la presión y el flujo volumétrico pasando por cualquier sección de área transversal deben contemplarse como promedios dentro de un campo de flujo (campos de velocidades y de flujo) que en un análisis más detallado cambian dentro de esa sección. Si la representación se hace en ese orden, su Bond Graph sería el que puede apreciarse en la figura 3.27 y sus relaciones constitutivas para esfuerzo y flujo son las ya definidas en esta sección.

3.6. Modelado de transferencia de calor en equipos de proceso

. En la sección 3.5.1 se analizó el modelado de una etapa de destilación mediante Bond Graphs verdaderos usando las variables extensivas tradicionales y la propuesta con variables en base molar y adimensionales para balances de materia y energía, aquí se considera en forma específica el modelado del transporte de calor.

En la literatura de BG es frecuente encontrar el término “térmico” aplicado para referirse a procesos de transferencia de calor o bien a procesos termodinámicos indistintamente, de hecho “térmico” en general se refiere a fenómenos debidos o asociados a la temperatura, pero carece de definición concreta en un entorno de ingeniería, por ejemplo, en el diccionario de la Real Academia [68] de la lengua:

"Térmico: (1) Perteneciente o relativo a la temperatura (2) Que conserva la temperatura".

O en inglés, en el diccionario de Merriam-Webster [69]: “Thermal: Relating to or caused by heat, dependent, being or involving a state of matter depending in temperature”.

La misma vaguedad del término lo hace fácil de usar, pero exige del lector mayor cuidado al contexto para entender a que se refiere en cada caso. Por otro lado, tanto la Termodinámica como los Fenómenos de Transporte (Transferencia de calor en particular) tienen definiciones y entornos de aplicación bien delimitados y complementarios, pero no estrictamente intercambiables. La termodinámica, entre otras cosas, estudia las transformaciones o transiciones energéticas de un sistema, principalmente entre estados de equilibrio, y la velocidad con que se den los cambios no se tiene en cuenta o el sistema se especifica de tal forma que necesariamente implica que el proceso se de muy lentamente. Por contraste, al estudiar el mismo

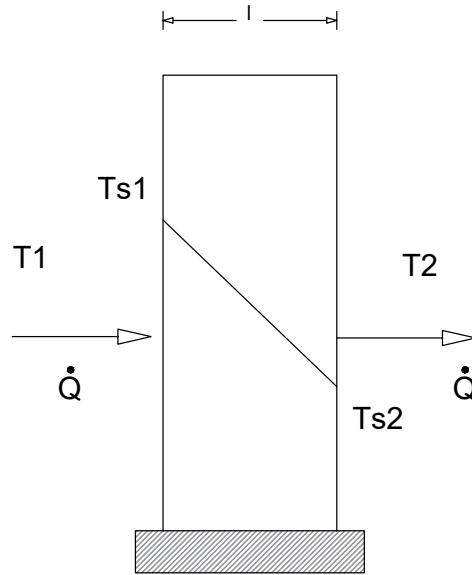


Figura 3.28: Transporte de calor a través de una pared vertical

fenómeno desde el punto de vista de transferencia de calor las propiedades dentro del sistema no suelen ser uniformes, su valor suele depender de la posición y el tiempo requerido es un aspecto crítico en el análisis. La transferencia de calor se da por cualquiera de los tres mecanismos de conducción, convección y radiación, o una combinación de estos. En las aplicaciones estudiadas en este trabajo se presentan los tres, con la convección dominando en los procesos de flujo y la conducción en el transporte a través de paredes metálicas; la radiación tiene un impacto muy pequeño y no se tomará en cuenta. Al estudiar el transporte de calor por conducción a través de una pared plana vertical, expuesta por un lado a un fluido caliente de temperatura T_1 y por el otro a un fluido frío de temperatura T_2 con temperaturas en la superficie de la placa T_{s1} y T_{s2} suele ser una buena aproximación considerar que la temperatura en el interior de la placa varía linealmente con la distancia respecto a la pared en contacto con el fluido caliente, como se muestra en la figura 3.28.

Tratándose de una pared plana isotrópica, el transporte unidireccional por conducción en estado estable a través de ella está dado por la ecuación de Fourier

$$\dot{Q} = kA \frac{dT}{dx} \quad (3.85)$$

o en su forma integrada

$$\dot{Q} = \frac{kA}{\Delta x} \Delta T \quad (3.86)$$

Donde A es el área perpendicular al flujo, k es la conductancia térmica del material y Δx es la posición en x donde se evalúa la temperatura. En forma similar a lo que sucede en un

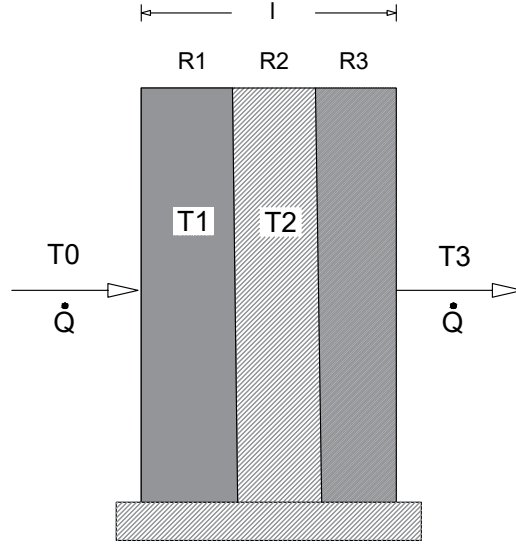


Figura 3.29: Transferencia de calor a través de una pared compuesta

circuito eléctrico, si se define la conductancia como

$$Conductancia = \frac{kA}{\Delta x} \quad (3.87)$$

La resistencia es el inverso de la conductancia, es decir:

$$R = \frac{\Delta x}{kA} \quad (3.88)$$

y así

$$\dot{Q} = \frac{\Delta T}{R} \quad (3.89)$$

Para una pared compuesta como la que se muestra en la figura 3.29

$$\dot{Q}_1 = \dot{Q}_2 = \dot{Q}_3 = \dot{Q} \quad (3.90)$$

la figura 3.29 $T_0 > T_3$ y las resistencias individuales son:

$$R_1 = \frac{\Delta x_1}{k_1 A} \quad (3.91)$$

$$R_2 = \frac{\Delta x_2}{k_2 A} \quad (3.92)$$

$$R_3 = \frac{\Delta x_3}{k_3 A} \quad (3.93)$$

Con la resistencia combinada de la pared:

$$R = \sum_{i=1}^3 R_i \quad (3.94)$$

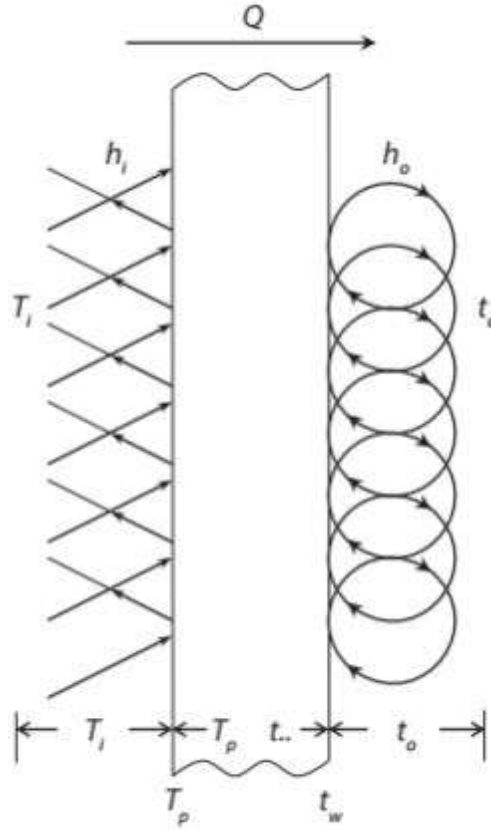


Figura 3.30: Transporte de calor por convección forzada a través de una pared vertical

El área considerada es la misma para todas las resistencias dado que se trata del área perpendicular al flujo de calor y es constante. Sustituyendo y reorganizando se obtiene:

$$\dot{Q} = \frac{T_0 - T_3}{R_1 + R_2 + R_3} \quad (3.95)$$

Considerando ahora el mecanismo de convección para la placa en contacto con dos fluidos a diferente temperatura por ambos lados, la convección requiere desplazamiento de materia para acarrear las propiedades transportadas. En el diagrama de la figura 3.30 [70] se tiene convección forzada de diferente magnitud en ambos lados de la placa. Se transfiere calor desde un fluido caliente en movimiento del lado izquierdo de la placa hacia el fluido frío del lado derecho, que también se encuentra en movimiento. En realidad el transporte en esas condiciones es una combinación de conducción y convección, pero esta última representa la resistencia más importante y en consecuencia el mecanismo controlante. Aquí el inverso de la resistencia a la transferencia se conoce como coeficiente de película, denotado por la letra h , con el transporte de calor dado por:

$$dQ = hAdT \quad (3.96)$$

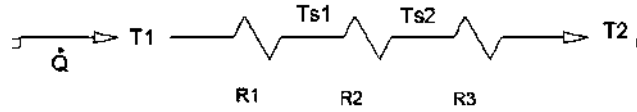


Figura 3.31: Transferencia de calor como análogo de circuito eléctrico

o integrada

$$\dot{Q} = hA\Delta T \quad (3.97)$$

En el caso de transporte de la figura 3.28 cuando se tiene convección forzada en ambos lados de la placa y conducción pura en ella, tomando la pared como isotrópica y si no hay generación ni consumo de energía dentro de la pared, se puede considerar la analogía de transporte de calor como un circuito eléctrico mostrada en la figura 3.31

Donde

$$R_1 = \frac{1}{h_0 A} \quad (3.98)$$

$$R_2 = \frac{l}{kA} \quad (3.99)$$

$$R_3 = \frac{1}{h_2 A} \quad (3.100)$$

$$\dot{Q}_1 = \dot{Q}_{1-2} = \dot{Q}_2 = \dot{Q} \quad (3.101)$$

$$\dot{Q} = \frac{T_1 - T_{s1}}{\frac{1}{h_1 A}} = \frac{T_{s1} - T_{s2}}{\frac{1}{kA}} = \frac{T_{s2} - T_2}{\frac{1}{h_2 A}} \quad (3.102)$$

$$R = \frac{1}{h_1 A} + \frac{l}{kA} + \frac{1}{h_2 A} \quad (3.103)$$

Si se denota con U al coeficiente global de transferencia, la resistencia total es entonces:

$$\dot{Q} = \frac{T_1 - T_2}{\left[\frac{1}{h_1 A} + \frac{l}{kA} + \frac{1}{h_2 A} \right]} = UA(T_1 - T_2) \quad (3.104)$$

3.6.1. Modelado de transferencia de calor mediante Pseudo Bond Graphs(PBG)

El análisis de las paredes y película de fluido como resistencias y conductores de calor y su analogía con un circuito eléctrico lleva directamente a su representación como elementos resistivos en Bond Graph.

Como se comentaba anteriormente, en el modelado de transferencia de calor con pseudo Bond Graphs es común elegir la temperatura como variable de esfuerzo y el flujo de calor

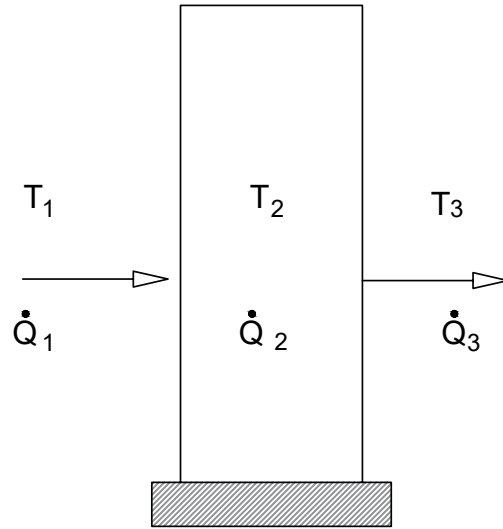


Figura 3.32: Flujo de calor a través de una resistencia.

como flujo, dada la similitud con las variables usadas en su modelado matemático o en los textos de transferencia de calor, las hace intuitivamente satisfactorias [13],[26].

Para el transporte a través de una pared uniforme con gradientes de temperatura como los mostrados en las figuras 3.28 y 3.32, el flujo de calor se da solo en dirección $+x$.

Si se toma a la pared como una resistencia donde no hay almacenamiento de energía, ya sea porque se ha alcanzado el estado estacionario o porque su capacidad calorífica es muy baja, el flujo de calor que pasa por la pared es igual al que entra desde el fluido caliente e igual al que se transfiere hacia el fluido frío, es decir $\dot{Q}_1 = \dot{Q}_2 = \dot{Q}_3 = \dot{Q}$ tal como se vio en la sección anterior.

Aunque esta ecuación no es consistente con un elemento resistivo simple, tomando el flujo de calor como variable de flujo se adapta perfectamente a la representación mediante una unión-1 con un elemento resistivo en uno de los bonds, como se puede ver en la figura 3.33.

Siguiendo las reglas para las uniones de flujo común

$$T_2 = T_1 - T_3 \quad (3.105)$$

que viene a ser en el desarrollo para la transferencia de calor a través de la pared vertical. Con la ley constitutiva en la resistencia

$$\dot{Q}_2 = \frac{T_2}{R} = \frac{T_1 - T_3}{R} \quad (3.106)$$

donde $R = \frac{1}{kA}$. Cuando se está modelando como un cuerpo frío en calentamiento, la temperatura de la pared cambia en función de la energía térmica neta almacenada y se deduce que

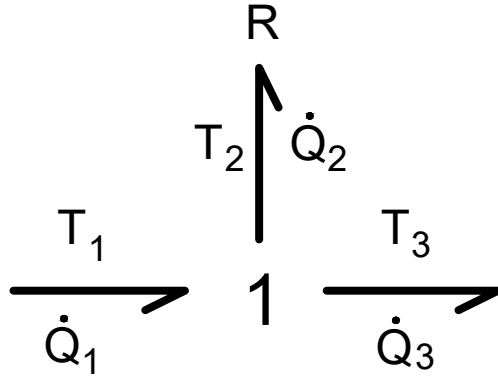


Figura 3.33: Representación en BG del flujo de calor a través de una resistencia

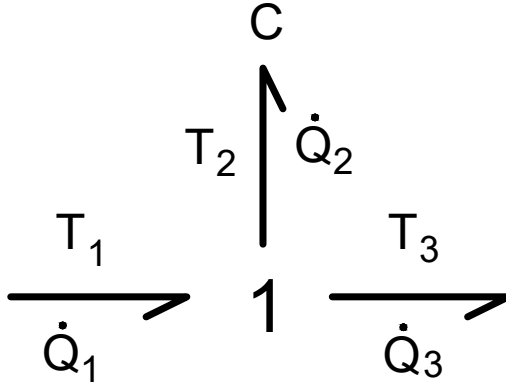


Figura 3.34: Representación en BG de un cuerpo en calentamiento con pseudo Bond Graphs

$$Q_2 = \int_0^\tau \dot{Q}_2 dt \quad (3.107)$$

y a su vez $\dot{Q}_2 = \dot{Q}_1 - \dot{Q}_3$, de donde

$$Q_2 = \int_0^\tau [\dot{Q}_1 - \dot{Q}_3] dt \quad (3.108)$$

Desde el enfoque de Bond Graph, al usar $\dot{Q}$ como variable de flujo necesariamente Q viene a ser una variable de desplazamiento y

$$Q_2 = \int_0^\tau \dot{Q}_2 dt = q_2 \quad (3.109)$$

donde la pared claramente se debe tomar como un elemento capacitivo representado como se muestra en la figura 3.34, en ella $T_1 = T_2 = T_3$.

Si la capacidad calorífica de la pared es constante y se puede considerar un comportamiento lineal, la integración de la ecuación (3.109) conduce a:

$$T_2 = T_{2,t=0} + \frac{1}{C} \int_0^\tau \dot{Q}_2 dt \quad (3.110)$$

En este caso C es el calor específico y recordando que para sólidos uniformes $C = Cp = Cv$.

3.6.2. Modelado de transferencia de calor mediante Bond Graphs verdaderos

El transporte de calor tiene como fuerza motriz una diferencia finita de temperatura y es un proceso inherentemente irreversible, la magnitud de la irreversibilidad se asocia con la entropía generada o el cambio total de entropía en el proceso, que viene a ser la suma de los cambios de entropía en los depósitos de energía (fluido caliente y fluido frío) y el elemento conductor, o resistencia según sea el enfoque requerido. En el caso de la pared, los dos fluidos forman en conjunto un sistema adiabático, pero al no estar estrictamente en contacto directo, la transferencia entre cada depósito y el conductor se hace a la temperatura de su punto de contacto.

Con la consideración ya mencionada de que el conductor encuentra en estado estacionario y las temperaturas en la superficie de la pared se mantienen constantes, al no haber cambios en el estado del conductor tampoco habrá cambios de entropía en él y el cambio total de entropía del sistema viene a ser la suma de los cambios en ambos depósitos [54], que aquí corresponde al cambio de entropía en cada lado de la pared.

$$\begin{aligned} \dot{Q}_1 &= T_1 \dot{S}_1 \\ \dot{Q}_2 &= T_2 \dot{S}_2 \\ T_1 \dot{S}_1 &= \dot{Q} = T_2 \dot{S}_2 \end{aligned} \quad (3.111)$$

El cambio de entropía es entonces

$$\dot{S}_2 - \dot{S}_1 = \dot{Q} \left[\frac{T_1 - T_2}{T_1 T_2} \right] \quad (3.112)$$

Como $T_1 > T_2$ entonces $\dot{S}_2 > \dot{S}_1$ y la entropía saliendo de la pared es mayor. Al ser un sistema disipativo se representa en BG mediante un resistor de la forma mostrada en la figura 3.35

Si h es el coeficiente de transferencia

$$\dot{Q} = h(T_1 - T_2) \quad (3.113)$$

$$\dot{S}_1 = \frac{h(T_1 - T_2)}{T_1} \quad (3.114)$$

$$\dot{S}_2 = \frac{h(T_2 - T_1)}{T_2} \quad (3.115)$$

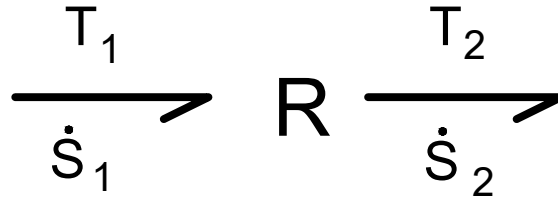


Figura 3.35: Representación en BG de disipación térmica con Bond Graphs

$$\dot{S}_2 - \dot{S}_1 = \frac{h(T_1 - T_2)^2}{T_1 T_2} > 0 \quad (3.116)$$

El uso de Bond Graph verdaderos para representar transporte de calor conduce a estructuras marcadamente más complicadas y una forma de combinar las ventajas de ambas representaciones es el uso de elementos mixtos de conexión. como acumuladores y restrictores que hacen las veces de capacitancias y resistencias pero actúan con entradas en BG o PBG según se requiera, pero su salida es con Bond Graph verdaderos, en este trabajo los elementos de conversión entre Bond Graphs con variables intensivas o sobre base molar y el modelado en variables extensivas se hace a través de multipuertos $-TF-$ y $-GY-$ como se describe en el capítulo 4: "Modelo en Bond Graph para Columnas de destilación".

Capítulo 4

Modelo en Bond Graph para Columnas de destilación

Como se ha comentado previamente, el desarrollo de un modelo que considere todas las posibles interacciones entre variables, aún en caso de ser posible, sería poco práctico desde el punto de vista de esfuerzo de cálculo, por ello deben introducirse simplificaciones y elecciones de modelado que lo acerquen a un equilibrio aceptable entre nivel de detalle, esfuerzo computacional y tiempo de ejecución viables. Para dar claridad a las opciones de modelado en BG y poder contrastarlas contra el sistema de ecuaciones diferenciales y algebraicas del modelo matemático se toma el caso particular de una columna de cinco etapas, correspondientes a cada una de las secciones mayores de una columna. Además de las consideraciones delineadas en la sección 3.4.5:

- Se considera una etapa por cada una de las secciones de alimentación, rectificación, agotamiento, condensador y rehervidor.
- El equipo es una columna de destilación de cinco etapas con condensador total y rehervidor externo.
- La columna está bien aislada y puede considerarse adiabática y sin interacciones energéticas dentro de las etapas ni hacia el exterior; toda la transferencia de calor se da en el rehervidor y condensador.
- El calor retirado en el condensador se utiliza para precalentar la alimentación y llevarla a su temperatura de burbuja.
- La etapa de alimentación divide la operación en dos secciones bien diferenciadas: encima de ella está la zona de rectificación o enriquecimiento y por debajo la zona de agotamiento.

- La fase vapor se toma como una mezcla de gases ideales y la líquida como una solución ideal.
- C_p , C_v , densidad y volatilidad relativa se mantienen constantes a lo largo de toda la columna.
- En cada etapa se tiene mezclado perfecto, en cada una se tiene concentración uniforme.

En esta columna de destilación, la corriente de alimentación se lleva de la temperatura en el tanque de almacenamiento hasta la de burbuja en el punto de entrada, usando como fuente de calefacción el calor latente de la corriente de vapor que llega al condensador.

El flujo de calor latente disponible es notablemente superior a la capacidad de enfriamiento de la corriente de alimentación y hace necesario hacer la condensación en dos etapas, en la primera se elimina tanta energía como es posible sin sobrecalentar la alimentación y posteriormente el vapor húmedo que sale de ella se hace pasar por un condensador secundario que lleva la corriente de destilado a la fase líquida, en principio sin subenfriar.

En columnas con condensador interno se puede obtener una mayor recuperación y se reduce la demanda de energía que debe entregar el rehervidor, pero esta representación del esquema de recuperación permite modelar casi cualquier secuencia de integración con condensador externo. Otro aspecto que puede hacer poco atractivo un esquema con condensador interno el operativo, como evaporación súbita en las válvulas de control de alimentación, cavitación en las bombas, pitting en líneas de proceso, intercambiadores de calor y principalmente en el condensador, y el consiguiente riesgo de contaminación del producto destilado con filtraciones desde la alimentación.

Como la alimentación entra a la columna como líquido saturado, la energía adicional para el cambio de fase se suministra en el rehervidor por medio de un fluido térmico de alta temperatura (tal como Dowtherm A o Therminol 66) proveniente de una caldera de uso exclusivo.

El modelado gráfico en BG con sus leyes constitutivas, relaciones causales y ecuaciones diferenciales (almacenamiento) o algebraicas (resistivo) asociadas a cada bond y elemento, implícitamente está ligado a su representación matemática, y en particular su representación en espacio de estados, como se verá en las secciones siguientes.

4.1. Espacio de Estados

En aplicaciones de control, se pretende modificar el comportamiento de un sistema dinámico mediante la manipulación de ciertas variables (entradas o variables de control) de modo que las salidas del sistema (variables controladas) sigan ciertos valores de referencia, que pueden ser fijos o no.

Los métodos de control en ingeniería de procesos suelen partir del modelado de un sistema físico cuyo comportamiento depende del tiempo, de los valores que tomen las variables de entrada y las condiciones del sistema en un momento determinado, con cambios en su estado

respecto al tiempo y para describirlo casi siempre se requiere del uso de ecuaciones diferenciales. Las características de estas definen en buena medida la forma en que debe resolverse el modelo matemático [31]. Como se ha visto, se puede expresar como:

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= f_1(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m, p_1, \dots, p_r) \\ \frac{dx_2}{dt} &= f_2(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m, p_1, \dots, p_r) \\ &\vdots \\ \frac{dx_n}{dt} &= f_n(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m, p_1, \dots, p_r)\end{aligned}$$

Los sistemas de ecuaciones diferenciales generados suelen incluir múltiples entradas, parámetros propios del equipo, variables controladas e interacciones de gran complejidad tales que, para su análisis, se hace necesario el uso de herramientas matemáticas que faciliten su visualización global y permitan identificar tendencias o características especiales en su comportamiento, es decir, hay que reducir la complejidad de la formulación.

Si se define como:

- Variables de sistema.- Cualquier variable que responde, o es en si misma, una de sus entradas o condiciones iniciales
- Variables de estado.- Subconjunto mínimo de variables de sistema tal que, conociendo sus valores y los de sus funciones de forzamiento en un momento dado, determinan el valor de las demás variables del sistema en cualquier punto en el tiempo. Las variables de este subconjunto mínimo deben ir asociadas con características que varían con el tiempo y ser linealmente independientes.

En Bond Graph el número mínimo de variables de estado es igual al de elementos independientes de almacenamiento de energía. Bajo estas condiciones, el número de variables de estado es fijo y debe ser igual al orden del sistema [55]. Aunque el número de variables de estado para un sistema sea fijo, el conjunto de variables de estado no es único.

La Representación en Espacio de Estados (REE) surgió como un procedimiento matemático para poder expresar las ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) de orden superior en un modelo como un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden [71], pero es igualmente aplicable a casos en que se parte de un modelo expresado como sistema de EDO de primer orden. En ella, las variables de estado se consideran como elementos de un vector (vector de estados), y lo mismo se hace con sus derivadas de primer orden respecto al tiempo, las variables de control (entradas) y controladas (salidas).

Muchos modelos en ingeniería de procesos, y en particular el modelo dinámico para la destilación, están especialmente bien condicionados para el uso de esta representación, dado que las variables que describen el comportamiento dinámico de la propiedades conservativas (p. ej. los términos de acumulación en los balances de materia y energía) son la elección lógica para tomarlas como variables de estado [72].

Al aplicar la REE a sistemas lineales donde los coeficientes de derivadas y variables no dependen del tiempo, estos se pueden agrupar en matrices, que junto con los vectores de estados, entradas y salidas permiten compactar las ecuaciones del modelo en una ecuación diferencial matricial de primer orden:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x}(\mathbf{t}) + \mathbf{B}\mathbf{u}(\mathbf{t}) \quad (4.1)$$

complementada por la relación

$$\mathbf{y}(\mathbf{t}) = \mathbf{C}\mathbf{x}(\mathbf{t}) + \mathbf{D}\mathbf{u}(\mathbf{t}) \quad (4.2)$$

donde

- $\mathbf{x}(\mathbf{t})$, es el vector de variables de estado.
- $\mathbf{u}(\mathbf{t})$ vector de entradas.
- $\mathbf{y}(\mathbf{t})$ vector de salidas
- $\dot{\mathbf{x}}$ vector de la derivada respecto al tiempo de las variables de estado.
- $\mathbf{A}$ es la matriz del sistema, que contiene los coeficientes de las variables de estado.
- $\mathbf{B}$ es la matriz correspondiente para las variables de entrada.
- $\mathbf{C}$ identifica los estados que realmente afectan a las salidas.
- $\mathbf{D}$ cumple la misma función para las entradas.

La ecuación (4.2) es necesaria porque muchas de las variables de estado no resultan de interés para el control del sistema. En sistemas físicos suele suceder que las entradas no tienen influencia directa sobre las variables controladas y, de haberla, su efecto se manifiesta a través de las variables de estado, así en la mayoría de los sistemas de proceso $\mathbf{D}$ es nula.

La gran ventaja al usar la REE es que se mantiene la formulación compacta sin importar el número de variables de estado, entradas, etc. La ecuación general es la misma -lo que cambia son las matrices- ya sea que se trate de una columna de destilación de tres o de cien etapas, facilitando el análisis conceptual del sistema [32],[73].

Aunque la representación en espacio de estados es usada en control no lineal, la forma matricial de representar los modelos normalmente solo se aplica en sistemas lineales.

4.2. Estructura de Unión

Del trabajo de Kubiak et al. [74] se sabe que partiendo del modelo en Bond Graph de un sistema físico, mediante el cálculo de las ganancias de las trayectorias y lazos causales es posible determinar la ecuación de estado asociada a él no solamente para el caso de sistemas

con elementos de almacenamiento de puerto-1, sino que aplica también a multipuertos como campos $-C$ y $-R$.

Un Bond Graph se compone de elementos básicos idealizados mediante puertos $-I$ y $-C$ (almacenamiento) $-R$ (disipativos) MS_e y MS_f (fuentes) y la estructura que une esos elementos dinámicos, o estructura de unión, está constituida por las uniones 0 y 1, elementos $-TF-$ (transformadores) y $-GY-$ (giradores) y es por ella por donde se transfiere energía entre los diferentes subsistemas, en un entorno conservativo.

Considerando los mismos vectores empleados en la REE para variables de estado, entradas y salidas; pero en el contexto del modelado en Bond Graph, es necesario tomar en cuenta también las interacciones entre variables acopladas de potencia y energía en los elementos de almacenamiento, disipación y transformación.

Las ecuaciones

$$D_{out} = LD_{in}; \quad (4.3)$$

$$z = Fx \quad (4.4)$$

$$x = \int \dot{x} dt \quad (4.5)$$

$$z = F \int \dot{x} dt \quad (4.6)$$

definen, a nivel estructura de unión, como se relacionan las variables de potencia entrando y saliendo de cada subsistema como vectores clave, pero la misma forma es extensiva a elementos individuales, siendo vectores de un elemento. La ecuación (4.3) describe esas relaciones para elementos disipativos y (4.4) para los de almacenamiento. El diagrama de bloques de la estructura de unión que puede verse en la figura 4.1 muestra la forma en que se relacionan los elementos dinámicos en un Bond Graph para un sistema lineal invariante en el tiempo (LTI), aunque los elementos considerados son comunes a cualquier sistema de control.

En el centro de la figura están los elementos 0 y 1, que son las uniones, o puntos de intercambio de potencia entre los demás elementos, así como los elementos TF y GY (transformadores y giradores), que cumplen funciones de modificación de la magnitud o naturaleza de variables de potencia entre subsistemas. Las uniones y elementos de transformación proporcionan la parte central a la que se conectarán los elementos de almacenamiento (L y C), disipativos (R), fuentes (MS_e y MS_f) y detectores (D).

Las flechas que conectan las diferentes clases de elementos indican el flujo de variables de potencia entre ellas y la causalidad en cada elemento. A las variables indicadas se les conoce como vectores clave del sistema, como el caso de el vector $\dot{x}$, que representa la transferencia de flujo o esfuerzo entre la estructura central y los elementos de almacenamiento en causalidad integral mientras que z representa a su covariable de potencia. Por ejemplo: si a un elemento I entra esfuerzo, la covariable de potencia que simultáneamente estará saliendo del mismo es el flujo.

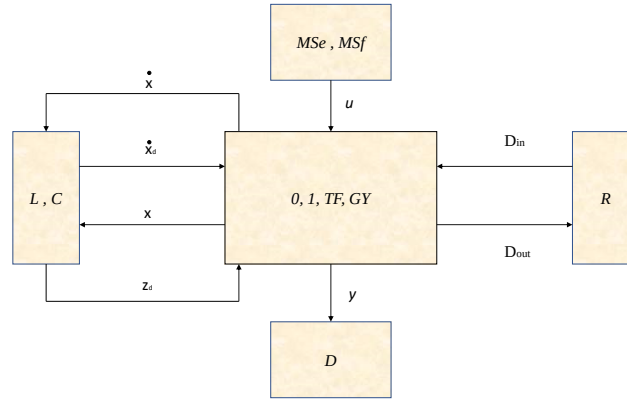


Figura 4.1: Diagrama de Bloques de la Estructura de Unión

Lo mismo aplica para los elementos resistivos con las variables D_{in} entrando al elemento y D_{out} saliendo de él; u es el vector de variables de control alimentadas al modelo desde las fuentes e y son las variables de salida del sistema de control hacia los detectores.

Esta estructura lleva asociadas las relaciones matemáticas entre los vectores clave y se pueden representar en forma de ecuación matricial.

En el caso general, partiendo del Bond Graph de sistema con elementos en causalidad integral y derivativa, se puede definir la ecuación matricial para la estructura de unión mediante:

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ D_{in} \\ y \\ z_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z \\ D_{out} \\ u \\ \dot{x}_d \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

En esta ecuación, a la matriz $\mathbf{S}$

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

se le conoce como Matriz de la Estructura de Unión (MEU) aunque con frecuencia se usa ese nombre y abreviatura para referirse al conjunto de la ecuación matricial. En la ecuación 4.7

- $\mathbf{x}$ es el vector de variables de estado en causalidad integral.
- $\mathbf{x}_d$, es el vector de variables de estado en causalidad derivativa.
- $\mathbf{z}$ es el vector de covariables de potencia saliendo del elemento dinámico en causalidad integral.

- $\mathbf{z}_d$, es el vector de covariables de potencia saliendo del elemento dinámico en causalidad derivativa.
- $\dot{\mathbf{x}}$ vector de la derivada respecto al tiempo de las variables de estado en causalidad integral.

Para u , y , D_{in} y D_{out} no hay cambio en significado ni simbología.

La ecuación (4.7) define estructuralmente las relaciones matemáticas entre los vectores clave. Como el Bond Graph se construye con base en el sistema físico, las variables que forman los vectores son conocidas y es necesario determinar las submatrices S_{ij} necesarias para que se cumpla a igualdad directamente del gráfico. Por ejemplo: la submatriz S_{11} contiene la información que relaciona el vector de covariables $z(t)$ con $\dot{x}(t)$ y si estos son vectores de n renglones, forzosamente la matriz deberá ser cuadrada de dimensión $n \times n$. La submatriz S_{12} contiene la relación entre el vector $D_{out}(t)$ que representa la salida de los elementos disipativos, con las variables dinámicas $\dot{x}$, si $D_{out}(t)$ tiene n renglones y $D_{out}(t)$ m renglones S_{12} deberá ser una matriz de dimensiones $n \times m$.

La forma general para las ecuaciones de estado considerando causalidad integral y derivativa está definida por:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}_1 \mathbf{x}(t) + \mathbf{A}_2 \mathbf{x}_d(t) + \mathbf{B}_1 \mathbf{u}(t) \quad (4.9)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_d = \mathbf{A}_3 \mathbf{x}(t) + \mathbf{A}_4 \mathbf{x}_d(t) + \mathbf{B}_2 \mathbf{u}(t) \quad (4.10)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C} \mathbf{x}(t) + \mathbf{D} \mathbf{u}(t) \quad (4.11)$$

Las diferentes matrices que aparecen en las ecuaciones (4.9), (4.10) y (4.11) se pueden obtener de las expresiones mostradas a continuación. Para las matrices A_i :

$$\begin{aligned} A_1 &= (S_{11} + S_{12}(I_d - LS_{33})^{-1}LS_{31})F \\ A_2 &= (S_{12} + S_{13}(I_d - LS_{33})^{-1}LS_{32}) \\ A_3 &= (F_d)^{-1}(S_{21} + S_{23}(I_d - LS_{33})^{-1}LS_{31})F \\ A_4 &= (F_d)^{-1}(S_{22} + S_{23}(I_d - LS_{33})^{-1}LS_{32}) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Para las B_i :

$$\begin{aligned} B_1 &= S_{14} + S_{13}(I_d - LS_{33})^{-1}LS_{34} \\ B_2 &= (F_d)^{-1}(S_{24} + S_{23}(I_d - LS_{33})^{-1}LS_{34}) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Con L , F_d y F_i definidas por las ecuaciones (4.3) y (4.4), usando los vectores z_d y x_d para F_d y z y x para F

En la ecuación de salidas:

$$\begin{aligned} C &= (S_{41} + S_{43}(I - LS_{33})^{-1}LS_{31})F \\ D &= S_{44} + S_{43}(I_d - LS_{33})^{-1}LS_{34} \end{aligned} \quad (4.14)$$

En el caso de la columna de destilación planteada, de no haber causalidad derivativa

$$A_2 = A_3 = A_4 = B_2 = 0 \quad (4.15)$$

y la expresión para la ecuación de estados se reduce a:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}_1 \mathbf{x}(\mathbf{t}) + \mathbf{B}_1 \mathbf{u}(\mathbf{t}) \quad (4.16)$$

o simplemente

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A} \mathbf{x}(\mathbf{t}) + \mathbf{B} \mathbf{u}(\mathbf{t}) \quad (4.17)$$

con

$$\begin{aligned} S_{13} &= B \\ S_{31} &= CF^{-1} \\ S_{33} &= D \\ L &= -AF^{-1} \end{aligned} \quad (4.18)$$

y la ecuación matricial queda:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ D_{in}(t) \\ y(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & 0 \\ S_{31} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z(t) \\ D_{out}(t) \\ u(t) \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

4.3. Modelo de la columna partiendo de su REE mediante campos $-R$

El procedimiento normal de modelado y simulación dinámica en Bond Graph parte del sistema físico, se genera su modelo secuencial en BG y, usando este como plataforma, se obtienen sus ecuaciones como Representación en Espacio de Estados (REE) y se le aplican las diversas técnicas de análisis mencionadas previamente (como estabilidad, observabilidad y controlabilidad, entre otras).

Por contraste, al aplicar técnicas de Control Clásico o control en el dominio del tiempo (Control Moderno) del modelo físico se pasa a generar su representación matemática y, de ser necesario, se linealiza y reordena para expresarlo en REE. Es sobre el modelo matemático explícito que hace el análisis de control. Siendo la teoría de Control Clásico mucho más antigua que la de BG, hay multitud de publicaciones que describen el sistema mediante sus ecuaciones en representación en espacio de estados con las condiciones iniciales y de frontera necesarias, sin describir a detalle el sistema físico. Eso representa un problema serio desde el enfoque de modelado en Bond Graph: ¿Como desarrollar el diagrama sin tener un sistema físico en el cual basarse?

González y Galindo [75] desarrollaron una técnica para la eliminación de lazos algebraicos en Bond Graphs, en ella se parte de la Representación en Espacio de Estados (A, B, C, D) de un sistema físico lineal invariante en el tiempo (LTI) de entrada múltiple y salida múltiple (MIMO) donde todos los elementos de almacenamiento permanecen en asignación de causalidad integral cuando se realiza una causalidad integral predefinida, para ese caso proponen la siguiente ecuación para la estructura de unión:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ D_{in,R}(t) \\ y(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I_n & B \\ -I_n & 0 & 0 \\ CF^{-1} & 0 & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z(t) \\ D_{out,R}(t) \\ u(t) \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

Donde las relaciones para los elementos de almacenamiento y disipativos son:

$$\begin{aligned} z(t) &= Fx(t) \\ D_{out,R}(t) &= LD_{in,R}(t) \\ L &= -AF^{-1} \end{aligned} \quad (4.21)$$

I_n es una matriz identidad de dimensiones $n \times n$ donde n es el orden del sistema.

Desarrollando la ecuación (4.54) para $\dot{x}(t)$ y $D_{in,R}(t)$ se tiene que:

$$\dot{x}(t) = D_{out,R}(t) + Bu = L_n D_{in,R} + Bu \quad (4.22)$$

$$D_{in,R}(t) = -z(t) \quad (4.23)$$

F es una matriz diagonal que a través de las las operaciones de los elementos de F^{-1} se cancelan los elementos capacitivos y de inercia en $L = -AF^{-1}$ dejando solo los elementos resistivos. Dado que las variables del campo disipativo $D_{in}(t)$ son funciones solamente de las variables de coenergía $z(t)$ y los elementos del campo disipativo no estará acoplados y el Bond Graph asociado habría sido alterado para no tener lazos algebraicos.

En esta técnica se debe conocer las matrices del sistema inicial con asignación en causalidad integral, sus vectores clave, relaciones constitutivas en los campos y su estructura de unión; su efecto es generar un Bond Graph equivalente que comparte las mismas ecuaciones de estado en REE pero sin la presencia de lazos algebraicos. Aunque el objetivo inicial era diferente, la metodología propuesta reunía características deseables para generar un Bond Graph sin disponer del medio físico. Sobre ese trabajo los mismos autores proponen que la existencia de una REE del sistema implica que debería ser posible encontrar un BG equivalente, o lo que es lo mismo, un BG que generaría ese mismo sistema de ecuaciones diferenciales si se siguiera el método tradicional.

Es bien sabido que un sistema físico se puede representar con más de un diagrama válido y es teóricamente posible obtener múltiples Bond Graphs que tengan una misma REE, sin que ninguno de ellos corresponda exactamente al sistema físico original y se considera que estos son modelos equivalentes que derivan en una misma representación matemática. Cabe hacer énfasis en que el conjunto de variables de estado no es único, como tampoco lo es el sistema de ecuaciones diferenciales y algebraicas del modelo, sin embargo, una vez establecido un sistema de ecuaciones válido

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= F_1(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \frac{dx_2}{dt} &= F_2(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \\ &\vdots \\ \frac{dx_n}{dt} &= F_n(t, x_1, x_2, \dots, x_n) \end{aligned} \quad (4.24)$$

Si cada una de las funciones $f_1, f_2, \dots, f_n$ es una función lineal de las variables de pendientes $x_1, x_2, \dots, x_n$ se dice que el sistema de ecuaciones diferenciales es lineal.

Si las funciones $p_{11}, p_{12}, \dots, p_{nn}, g_1, g_2, \dots, g_n$ son continuas en un intervalo abierto $I : \alpha < t < \beta$ entonces habrá una solución única

$$x_1 = \phi_1(t), x_2 = \phi_2(t), \dots, x_n = \phi_n(t)$$

del sistema

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= p_{11}(t)x_1 + \dots + p_{1n}(t)x_n + g_1(t) \\ \frac{dx_2}{dt} &= p_{21}(t)x_1 + \dots + p_{2n}(t)x_n + g_2(t) \\ &\vdots \\ \frac{dx_n}{dt} &= p_{n1}(t)x_1 + \dots + p_{nn}(t)x_n + g_n(t) \end{aligned} \quad (4.25)$$

Que además cumple con las condiciones iniciales $x_1(t_0) = x_1^0, x_2(t_0) = x_2^0, \dots, x_n(t_0) = x_n^0$ Donde t_0 es cualquier punto y en I y $x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0$ cualquier número prescrito. Además la solución existe a todo lo largo del intervalo I [76].

Sobre estas bases González y Galindo [77] desarrollaron una metodología para generar un modelo equivalente en BG usando como herramienta principal las propiedades de los elementos de campo resistivo para enlazar las ecuaciones del sistema en el entorno gráfico.

El procedimiento se basa en el uso de las propiedades de los campos disipativos y propone una estructura de unión que limita las interacciones permisibles entre variables de estado, variables asociadas al campo disipativo, elementos de almacenamiento, fuentes y salidas de forma que la estructura solo acepta interacciones entre variables de estado, campo disipativo y entradas; campo disipativo y covariables de energía y las salidas solo son funciones de las entradas y covariables de energía. La información requerida para aplicarlo es la representación en variables de estado del sistema y las características de los elementos de almacenamiento [77],[78].

La falta de información del sistema físico original prácticamente garantiza que el BG obtenido no será igual al que se obtendría directamente de él, pero al disponer de la información que proporcionan las matrices de la REE y mediante el procedimiento algebraico para obtener las ecuaciones de estados y de salidas 4.2, en ausencia de lazos algebraicos las dependencias entre de las matrices de las ecuaciones de estados respecto a las matrices F y L que relacionan las variables de potencia entrando y saliendo de los elementos disipativos y de almacenamiento son:

$$\begin{aligned} A &= A(F, L) \\ B &= B(L) \\ C &= C(F, L) \\ D &= D(L) \end{aligned} \quad (4.26)$$

A su vez $F = F$ (elementos de almacenamiento en causalidad integral) y $L = L$ (elementos disipativos). Si se dispone de F y esta es invertible, junto con la REE podría obtenerse L de cualquiera de las matrices anteriores mediante algún procedimiento de inversión de funciones y generar un Bond Graph capaz de simular su comportamiento.

Esta técnica se ha aplicado multitud de veces en sistemas de diversa índole, pero no se tiene referencia de su aplicación a sistemas que incluyen la interacción integrada de entornos químico, hidráulico y térmico, como se da en una columna de destilación.

4.3.1. Procedimiento de generación de un Bond Graph partiendo de la representación en espacio de estados del sistema

Cada variable de estado del sistema está asociado a un elemento de almacenamiento en causalidad integral y los vectores clave dan la información del número y relación causal en los puertos de almacenamiento y disipativos, el rango de la matriz $\mathbf{B}$ da el número de entradas, el rango de la matriz $\mathbf{C}$ el de las salidas. La ecuación (4.7) da la estructura de unión del sistema y las submatrices S_{13} , S_{31} y S_{33} se obtienen de

$$\begin{aligned} S_{13} &= B \\ S_{31} &= CF^{-1} \\ S_{33} &= D \end{aligned} \tag{4.27}$$

La caracterización de los elementos de almacenamiento (si se trata de un puerto $-C$ o $-I$) se hace por inspección o por conocimiento del sistema, y de ahí las relaciones constitutivas del campo de almacenamiento y el vector F .

1. Dibujar cada elemento de almacenamiento y la unión asociada para el vector clave $x(t)$. Si se trata de un elemento $-C$ se conecta a una unión -0 y -1 para elementos $-I$.
2. En cada unión del paso (1) se conectan las fuentes de acuerdo con la submatriz S_{13} . En caso de que el elemento de esa submatriz sea una ganancia dada por R o $1/R$ habrá que conectar un girador entre la fuente y la unión donde la ganancia es el módulo del girador. En caso de que la ganancia sea R_1/R_2 se conecta un transformador entre la fuente y la unión, ahí R_1/R_2 es el módulo del transformador
3. Conectar cada unión -0 en el paso (1) a una unión -1 con un bond, la dirección del flujo de potencia es la misma del elemento $-C$. Conectar cada unión -1 en el paso (1) a una unión -0 con un bond, la dirección del flujo de potencia es la misma del elemento $-I$. Estas uniones adicionales corresponden a la submatriz $S_{12} = I_n$
4. Las uniones -0 y -1 agregadas en el paso (3) se conectan al campo $-R$ del paso (2) - Como la submatriz $S_{21} = -I_n$ la dirección de esos bonds es la opuesta respecto a los elementos $-C$ e $-I$ obteniendo la representación de la submatriz $S_{21} = -I_n$
5. Cada salida del sistema se obtiene usando bonds activos.

6. Aplicar causalidad integral al campo de almacenamiento y extender las implicaciones causales al resto de los elementos hasta completar el Bond Graph.

4.3.2. Representación en espacio de estados para la columna de cinco etapas

Dejando pendiente de momento el desarrollo matemático, obtenido en un trabajo anterior, se propone que, para el mismo modelo de una columna de destilación de cinco etapas en estado inestable expuesto en la sección 3.4.5, la representación en espacio de estados del modelo linealizado está dada por las ecuaciones:

$$\dot{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} -\frac{V_R}{n_1} & \frac{V_R \zeta_2}{L_R + V_R \zeta_2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L_R}{n_2} & -\frac{V_R \zeta_3}{L_R + V_R \zeta_3} & \frac{V_R \zeta_4}{L_S + V_S \zeta_4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L_R}{n_3} & -\frac{V_R \zeta_5}{L_S + V_S \zeta_5} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L_S}{n_4} & -\frac{V_S \zeta_5}{L_S + V_S \zeta_5} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L_S}{n_5} & -\frac{V_S \zeta_5}{L_S + V_S \zeta_5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

$$+ \begin{bmatrix} 0 & \frac{(y_2 - x_1)}{n_1} & \frac{(y_2 - x_1)(1 - q_F)}{n_1} & 0 \\ \frac{(x_1 - x_2)}{n_2} & \frac{(y_3 - y_2)}{n_2} & \frac{(y_3 - y_2)(1 - q_F)}{n_2} & 0 \\ \frac{(x_2 - x_3)}{n_3} & \frac{(y_4 - y_3)}{n_3} & \frac{z_F - x_3 q_F - y_3(1 - q_F)}{n_3} & \frac{F}{n_3} \\ \frac{(x_3 - x_4)}{n_4} & \frac{(y_5 - y_4)}{n_4} & \frac{(x_3 - x_4) q_F}{n_4} & 0 \\ \frac{(x_4 - x_5)}{n_5} & \frac{(y_5 - y_4)}{n_5} & \frac{(x_4 - x_5) q_F}{n_5} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ z_F \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{y}_\delta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} \quad (4.29)$$

$$\zeta_i = \frac{\alpha}{[1 + (\alpha - 1)x_i]^2}$$

En el esquema de control propuesto para la columna se tiene como variables de entrada el reflujo de destilado líquido a la columna L_R , reflujo molar de vapor en el rehervidor V_S , flujo de alimentación F y fracción molar de componente ligero en la alimentación. El subíndice R se refiere a la variable en la zona de rectificación (arriba del plato de alimentación) y el S a la variable en la zona de agotamiento (abajo del plato de alimentación).

Otro parámetro relevante es q_F , la condición de saturación, indica la cantidad de líquido saturado en la alimentación.

Las variables de estado en este caso son x_i , o fracción mol del componente ligero en el líquido de la etapa i , mientras y_i es su fracción en el vapor de la misma etapa.

α_i es la volatilidad relativa entre los dos componentes.

La variable ζ_i es la derivada parcial de la fracción mol del componente ligero en el vapor respecto a la fracción en el líquido para la etapa i .

n_i son los moles de material retenido en el líquido en la etapa i .

Así

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ z_F \end{bmatrix} \quad (4.31)$$

Con las composiciones correspondientes de la fase vapor en el vector $\mathbf{y}$

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

Las matrices $\mathbf{A}_L$ y $\mathbf{B}_L$ de la ecuación de estados son:

$$\mathbf{A}_L = \begin{bmatrix} -\frac{V_R}{n_1} & \frac{V_R \zeta_2}{L_R + V_R \zeta_2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L_R}{n_2} & -\frac{n_2}{L_R + V_R \zeta_2} & \frac{V_R \zeta_3}{L_S + V_R \zeta_3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L_R}{n_3} & -\frac{n_3}{L_S + V_R \zeta_3} & \frac{V_R \zeta_4}{L_S + V_S \zeta_4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L_S}{n_4} & -\frac{n_4}{L_S + V_S \zeta_4} & \frac{V_S \zeta_5}{L_S + V_S(1 - \zeta_5)} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L_S}{n_5} & -\frac{n_5}{L_S + V_S(1 - \zeta_5)} \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

$$\mathbf{B}_L = \begin{bmatrix} 0 & \frac{(y_2 - x_1)}{n_1} & \frac{(y_2 - x_1)}{n_1}(1 - q_F) & 0 \\ \frac{(x_1 - x_2)}{n_2} & \frac{(y_3 - y_2)}{n_2} & \frac{(y_3 - y_2)}{n_2}(1 - q_F) & 0 \\ \frac{(x_2 - x_3)}{n_3} & \frac{(y_4 - y_3)}{n_3} & \frac{z_F - x_3 q_F - y_3(1 - q_F)}{n_3} & \frac{F}{n_3} \\ \frac{(x_3 - x_4)}{n_4} & \frac{(y_5 - y_4)}{n_4} & \frac{(x_3 - x_4)}{n_4} q_F & 0 \\ \frac{(x_4 - x_5)}{n_5} & \frac{(x_5 - y_5)}{n_5} & \frac{(x_4 - x_5)}{n_5} q_F & 0 \end{bmatrix} \quad (4.34)$$

Los valores de cada elemento de $\mathbf{A}_L$ y $\mathbf{B}_L$ se determinan con los valores de sus variables en el estado estacionario.

Asignando sus correspondientes variables de esfuerzo, flujo, momento y desplazamiento a los vectores de estados, entradas y el término de acumulación de la REE

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_5 \\ p_7 \\ p_9 \\ p_{11} \\ p_{13} \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

$$\dot{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} e_5 \\ e_7 \\ e_9 \\ e_{11} \\ e_{13} \end{bmatrix} \quad (4.36)$$

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} f_5 \\ f_7 \\ f_9 \\ f_{11} \\ f_{13} \end{bmatrix} \quad (4.37)$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ z_F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ e_4 \end{bmatrix} \quad (4.38)$$

$$\mathbf{F} = \text{diag} \left\{ \frac{1}{n_1}, \frac{1}{n_2}, \frac{1}{n_3}, \frac{1}{n_4}, \frac{1}{n_5} \right\} \quad (4.39)$$

$$\mathbf{F}^{-1} = \text{diag} \{n_1, n_2, n_3, n_4, n_5\} \quad (4.40)$$

Dado que de la ecuación (4.23) $z(t) = -D_{in,R}$ necesariamente la forma de $z(t)$ y para el campo disipativo se propone:

$$D_{in,R} = \begin{bmatrix} f_{21} \\ f_{22} \\ f_{23} \\ f_{24} \\ f_{25} \end{bmatrix} \quad (4.41)$$

$$D_{out,R} = \begin{bmatrix} e_{21} \\ e_{22} \\ e_{23} \\ e_{24} \\ e_{25} \end{bmatrix} \quad (4.42)$$

De la ecuación (4.21) se tiene que $L = -AF^{-1}$ y para una matriz $\dim(\mathbf{A}) = 5 \times 5$ y $\mathbf{F}^{-1} = \text{diag} \{n_1, n_2, n_3, n_4, n_5\}$:

$$\mathbf{L} = - \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & n_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & n_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & n_5 \end{bmatrix} \quad (4.43)$$

$$\mathbf{L} = - \begin{bmatrix} a_{11}n_1 & a_{12}n_2 & a_{13}n_3 & a_{14}n_4 & a_{15}n_5 \\ a_{21}n_1 & a_{22}n_2 & a_{23}n_3 & a_{24}n_4 & a_{25}n_5 \\ a_{31}n_1 & a_{32}n_2 & a_{33}n_3 & a_{34}n_4 & a_{35}n_5 \\ a_{41}n_1 & a_{42}n_2 & a_{43}n_3 & a_{44}n_4 & a_{45}n_5 \\ a_{51}n_1 & a_{52}n_2 & a_{53}n_3 & a_{54}n_4 & a_{55}n_5 \end{bmatrix} \quad (4.44)$$

Si se denotan los elementos de L como l_{ij}

$$l_{ij} = -a_{ij}n_j \quad (4.45)$$

Y con las ecuaciones (4.41) y (Dout) se tiene que:

$$\begin{bmatrix} e_{21} \\ e_{22} \\ e_{23} \\ e_{24} \\ e_{25} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} & l_{14} & l_{15} \\ l_{21} & l_{22} & l_{23} & l_{24} & l_{25} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & l_{34} & l_{35} \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} & l_{45} \\ l_{51} & l_{52} & l_{53} & l_{54} & l_{55} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{21} \\ f_{22} \\ f_{23} \\ f_{24} \\ f_{25} \end{bmatrix} \quad (4.46)$$

Esta última es la expresión matricial del sistema de ecuaciones que relaciona las covariables de potencia, esfuerzo y flujo, que salen y entran respectivamente del campo disipativo. Estas ecuaciones desarrolladas tienen la forma general:

$$e_{2i} = l_{i1}f_{21} + l_{i2}f_{22} + l_{i3}f_{23} + l_{i4}f_{24} + l_{i5}f_{25} \quad (4.47)$$

Para las ecuaciones particulares de la columna de cinco etapas:

$$\begin{bmatrix} e_{21} \\ e_{22} \\ e_{23} \\ e_{24} \\ e_{25} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{V_R}{n_1} & -\frac{V_R\zeta_2}{n_1} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{L_R n_1}{n_2} & L_R + V_R\zeta_2 & -\frac{V_R\zeta_3 n_3}{n_2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{L_R n_2}{n_3} & L_S + V_R\zeta_3 & -\frac{V_S\zeta_4 n_4}{n_3} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{L_S n_3}{n_4} & L_S + V_S\zeta_4 & -\frac{V_S\zeta_5 n_5}{n_4} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{L_S n_4}{n_5} & -(L_S + V_S(\zeta_5 - 1)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{21} \\ f_{22} \\ f_{23} \\ f_{24} \\ f_{25} \end{bmatrix} \quad (4.48)$$

Que al expandir da las ecuaciones:

$$e_{21} = V_R f_{21} - \frac{V_R \zeta_2 n_2}{n_1} f_{21} \quad (4.49)$$

$$e_{22} = -\frac{L_R n_1}{n_2} f_{21} + (L_R + V_R \zeta_2) f_{22} - \frac{V_R \zeta_3 n_3}{n_2} f_{23} \quad (4.50)$$

$$e_{23} = -\frac{L_R n_2}{n_3} f_{22} + (L_R + V_R \zeta_3) f_{23} - \frac{V_R \zeta_4 n_4}{n_3} f_{24} \quad (4.51)$$

$$e_{24} = -\frac{L_S n_3}{n_4} f_{23} + (L_S + V_S \zeta_4) f_{24} - \frac{V_S \zeta_5 n_5}{n_4} f_{25} \quad (4.52)$$

$$e_{25} = -\frac{L_S n_4}{n_5} f_{24} + [L_S + V_S(\zeta_5 - 1)] f_{25} \quad (4.53)$$

La forma de L , que no es una matriz diagonal, está asociada a un campo resistivo de cinco ramas y los elementos de $D_{in,R}$ determinan su forma. La estructura del campo -R con $D_{in,R}$ propuesta y las causalidades correspondientes es la mostrada en la figura 4.2

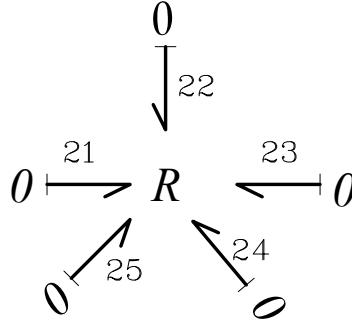


Figura 4.2: Estructura del campo -R propuesta

De acuerdo con el método desarrollado por González y Galindo [77] la matriz de la estructura de unión requerida para desacoplar los lazos algebraicos debe tener la forma

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ D_{in,R}(t) \\ y(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I_n & B \\ -I_n & 0 & 0 \\ CF^{-1} & 0 & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z(t) \\ D_{out,R}(t) \\ u(t) \end{bmatrix} \quad (4.54)$$

En el modelo linealizado para la columna de destilación de cinco etapas la ecuación de salidas se reduce a:

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C}\mathbf{x}(t) \quad (4.55)$$

Donde:

$$\mathbf{y}(t) = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_5 \end{bmatrix} \quad (4.56)$$

y

$$\mathbf{C}_L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.57)$$

Con el fin de mantener el análisis sin complicaciones y dada la simplicidad de la matriz $\mathbf{C}$ para este segmento del análisis se considera solo la ecuación de estados.

Las ecuaciones derivadas de la Matriz de la Estructura de Unión son:

$$e_5 = e_{21} + \frac{y_2 - y_1}{n_1} f_2 + \frac{y_2 - y_1}{n_1} f_2 + \frac{(y_2 - x_1)(1 - q_F)}{n_1} f_3; \quad f_{21} = -f_5 \quad (4.58)$$

$$e_7 = e_{22} + \frac{x_1 - x_2}{n_2} f_1 + \frac{(y_3 - y_2)}{n_2} f_2 + \frac{(y_3 - y_2)(1 - q_F)}{n_2} f_3; \quad f_{22} = -f_7 \quad (4.59)$$

$$e_9 = e_{23} + \frac{x_2 - x_3}{n_3} f_1 + \frac{(y_4 - y_3)}{n_3} f_2 + \frac{z_F - x_3 q_F - y_3(1 - q_F)}{n_3} f_3 + \frac{F}{n_3}; \quad f_{23} = -f_9 \quad (4.60)$$

$$e_{11} = e_{24} + \frac{x_3 - x_4}{n_4} f_1 + \frac{(y_5 - y_4)}{n_4} f_2 + \frac{(x_3 - x_4)q_F}{n_4} f_3; \quad f_{24} = -f_1 1 \quad (4.61)$$

$$e_{13} = e_{25} + \frac{x_4 - x_5}{n_5} f_1 + \frac{(x_5 - y_5)}{n_5} f_2 + \frac{(x_4 - x_5)q_F}{n_2} f_3; \quad f_{25} = -f_1 3 \quad (4.62)$$

En las ecuaciones (4.58) a (4.62), los subíndices que aparecen en las expresiones apareadas indican la presencia bonds y exigen que estos estén en una misma rama del campo $-R$ y separados de las demás. Los agrupamientos para cada rama serían:

$$\begin{aligned} &\{2,3,5,21\} \\ &\{1,2,3,7,22\} \\ &\{1,2,3,4,9,23\} \\ &\{1,2,3,11,24\} \\ &\{1,2,3,13,25\} \end{aligned}$$

La matriz de la estructura de unión expandida para todo el sistema es:

$$\begin{bmatrix} e_5 \\ e_7 \\ e_9 \\ e_{11} \\ e_{13} \\ f_{21} \\ f_{22} \\ f_{23} \\ f_{24} \\ f_{25} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{y_2 - y_1}{m_1} & \frac{y_2 - x_1}{m_1}(1 - q_F) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{x_1 - x_2}{m_2} & \frac{y_3 - y_2}{m_2} & \frac{y_3 - y_2}{m_2}(1 - q_F) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \frac{x_2 - x_3}{m_3} & \frac{y_4 - y_3}{m_3} & \frac{z_F - x_3 q_F - y_3(1 - q_F)}{m_3} & \frac{F}{m_3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{x_3 - x_4}{m_4} & \frac{y_5 - y_4}{m_4} & \frac{x_3 - x_4}{m_4} q_F & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \frac{x_4 - x_5}{m_5} & \frac{x_5 - y_5}{m_5} & \frac{x_4 - x_5}{m_5} q_F & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_5 \\ e_7 \\ e_9 \\ e_{11} \\ e_{13} \\ f_{21} \\ f_{22} \\ f_{23} \\ f_{24} \\ f_{25} \end{bmatrix} \quad (4.63)$$

Cuando se obtiene la representación en espacio de estados del sistema físico a partir de su Bond Graph, aplican las siguientes reglas:

1. Los elementos de la diagonal de $\mathbf{A}$ representan la ganancia de de un lazo causal entre un elemento de almacenamiento y uno disipativo.
2. los elementos fuera de la diagonal corresponden a la ganancia de la trayectoria entre dos elementos dinámicos asociados a las variables de estado x_i y x_j para $a_{i,j}|j \neq i$.
3. Los elementos de la matriz $\mathbf{B}$ representan las ganancias de las trayectorias causales que unen directamente un elemento de entrada y uno de almacenamiento, dicha trayectoria puede pasar por elementos disipativos y aún considerarse directa.

$$F = diag \left\{ \frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2}, \frac{1}{m_3}, \frac{1}{m_4}, \frac{1}{m_5} \right\} \quad (4.64)$$

$$\mathbf{u} = \{L_R, V_S, F, z_F\}^T \quad (4.65)$$

Las relaciones constitutivas para el campo $-R$ quedaron definidas por $D_{out,R} = LD_{in,R}$. Tanto estas como las ecuaciones (4.58) a (4.62) contienen esfuerzos en términos de flujo, por lo que deben incluirse elementos GY en la representación del sistema. los elementos de alimentación que afectan a varias ramas deben manejarse aparte, indicando solo los puntos de conexión.

Construcción del modelo Se muestra a detalle la construcción de la primera rama del modelo, correspondiente a la ecuación (4.58).

$$e_5 = e_{21} + \frac{y_2 - y_1}{n_1} f_2 + \frac{y_2 - y_1}{n_1} f_2 + \frac{(y_2 - x_1)(1 - q_F)}{n_1} f_3; \quad f_{21} = -f_5 \quad (4.66)$$

En esta ecuación

$$\begin{aligned} \dot{x} &= e_5 \\ D_{out,R,1} &= e_{21} \\ b_2 &= \frac{y_2 - y_1}{n_1} + \frac{y_2 - y_1}{n_1} \\ b_3 &= \frac{(y_2 - x_1)(1 - q_F)}{n_1} \\ u_2 &= f_2 \\ u_3 &= f_3 \\ f_{21} &= -f_5 \end{aligned} \quad (4.67)$$

La rama del Bond Graph correspondiente a la ecuación (4.58) queda representada en la figura 4.3.2

En la figura 4.3.2 el seguimiento de las trayectorias causales se cumple a través de las ecuaciones:

$$\begin{aligned} f_5 &= f_{31} \\ f_{31} &= -f_{21} \\ f_{21} &= -f_5 \end{aligned} \quad (4.68)$$

$$\begin{aligned} f_2 &= f_{42} \\ e_{42\alpha} &= b_{12} f_{42} \\ e_{42\alpha} &= b_{12} f_2 \end{aligned} \quad (4.69)$$

$$\begin{aligned} f_3 &= f_{43} \\ e_{43\alpha} &= b_{13} f_{43} \\ e_{43\alpha} &= b_{13} f_3 \end{aligned} \quad (4.70)$$

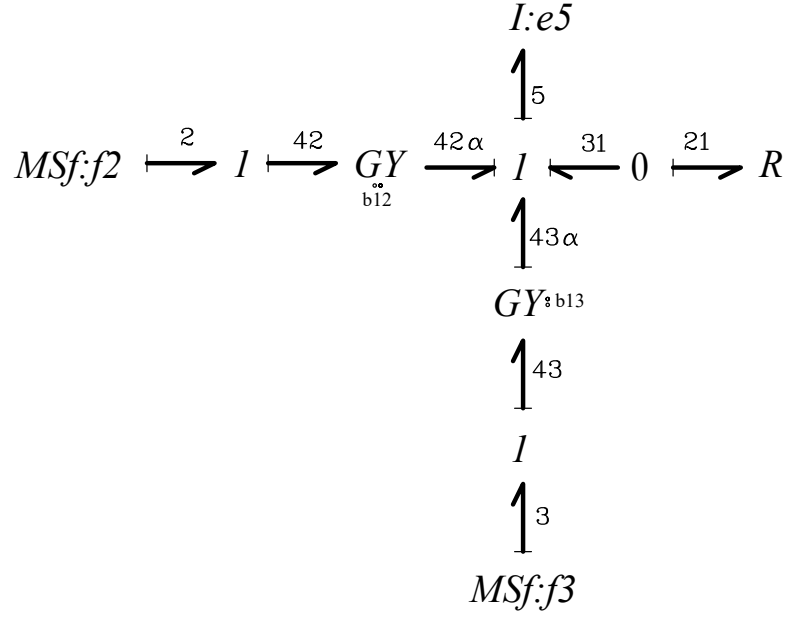


Figura 4.3: Representación de la rama del Bond Graph correspondiente a la ecuación (4.58)

$$\begin{aligned}
 e_5 &= e_{42\alpha} + e_3 1 \\
 e_5 &= b_{12} f_2 + b_{13} f_3 + e_{21}
 \end{aligned}
 \tag{4.71}$$

Las representaciones de las ramas correspondientes a las ecuaciones ((4.59) a (4.62) se muestran en las figuras 4.4 a 4.7. El modelo equivalente para la columna de cinco etapas se muestra en la figura 4.8

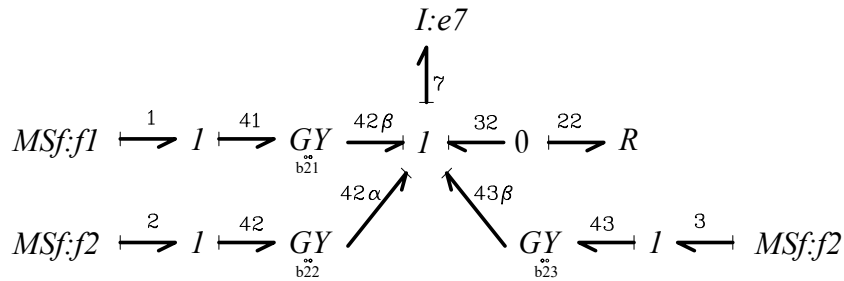


Figura 4.4: Representación de la rama del Bond Graph correspondiente a la ecuación (4.59)

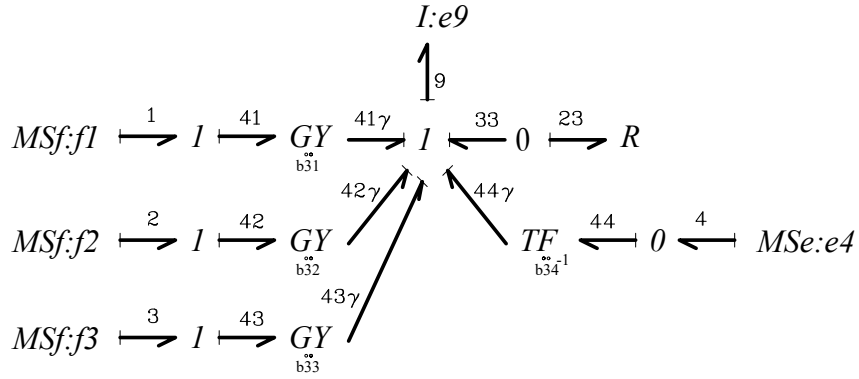


Figura 4.5: Representación de la rama del Bond Graph correspondiente a la ecuación (4.60)

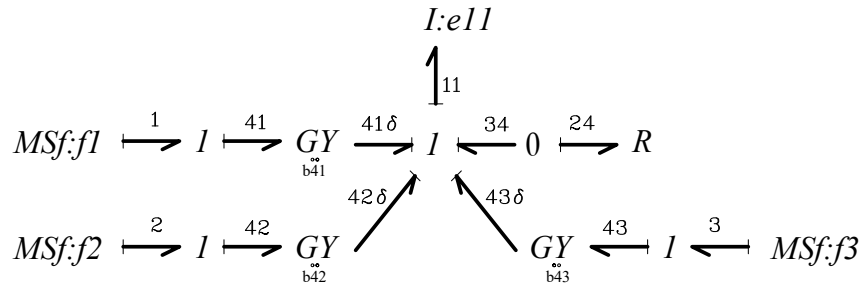


Figura 4.6: Representación de la rama del Bond Graph correspondiente a la ecuación (4.61)

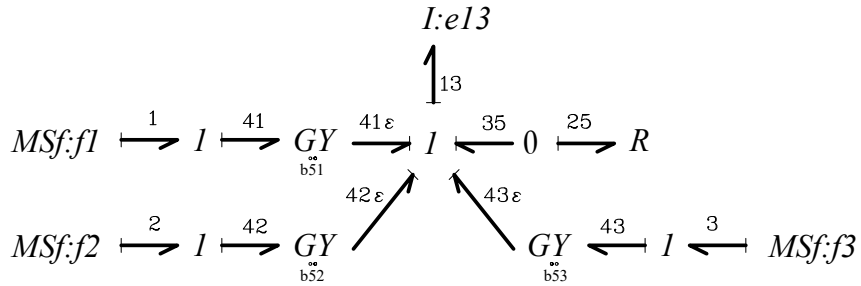


Figura 4.7: Representación de la rama del correspondiente a la ecuación (4.62) y el modelo

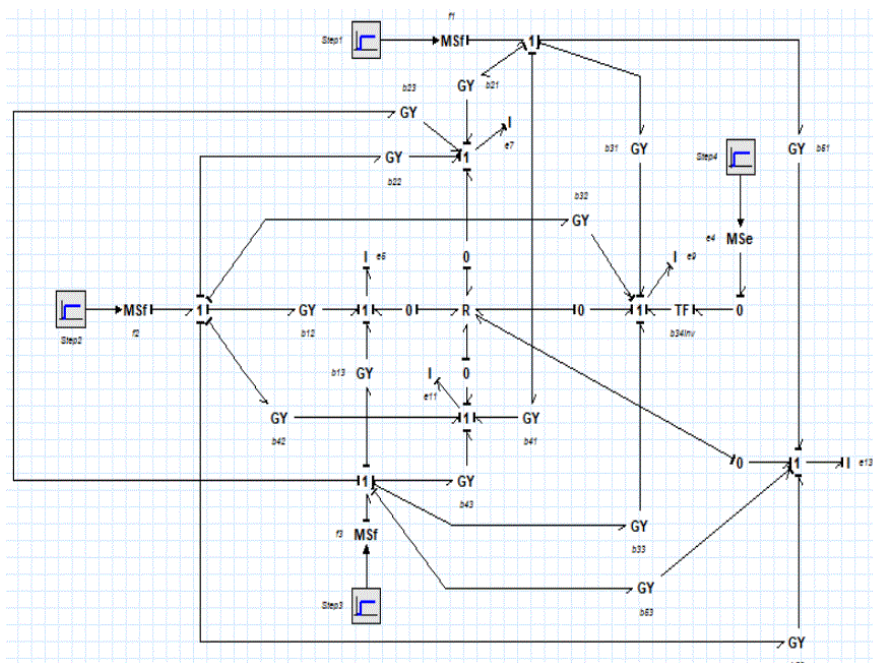


Figura 4.8: Bond Graph de la primera etapa para el modelo con campos -R

4.4. Modelo para la columna de cinco etapas en Bond Graph verdadero

4.4.1. Estructura de unión para una clase de modelos en Bond Graph para una clase de sistemas no-lineales

El modelo matemático desarrollado para la CDIE es claramente no lineal y sabemos que la expresión de α empleada es una de las variantes más sencillas de expresar el modelo termodinámico del equilibrio de fases y se entiende que al emplear otras variantes se debe esperar que la no linealidad sea aún mayor.

El modelado de sistemas en Bond Graph se caracteriza por facilitar la determinación de sus propiedades estructurales [79]. La asignación de causalidad a sus diferentes elementos permite encontrar muchas de sus propiedades estructurales relevantes para aplicaciones de control, tales como observabilidad, controlabilidad, respuesta en estado estacionario y linealización del modelo [25]. Una de las claves para hacer la demostración formal de estos análisis radica en obtener la estructura de unión del Bond Graph.

En la estructura de unión se clasifican los diferentes elementos en campos y en esta sección se propone una estructura de unión que permite el modelado en Bond Graph de una columna de destilación. Como ya se ha visto, la estructura de unión se basa en la separación de los elementos en campos para fuentes y detectores, asociados a entradas y salidas respectivamente; campo de almacenamiento, con elementos en causalidad integral o derivativa asociados a variables de estado linealmente independientes (causalidad integral) y

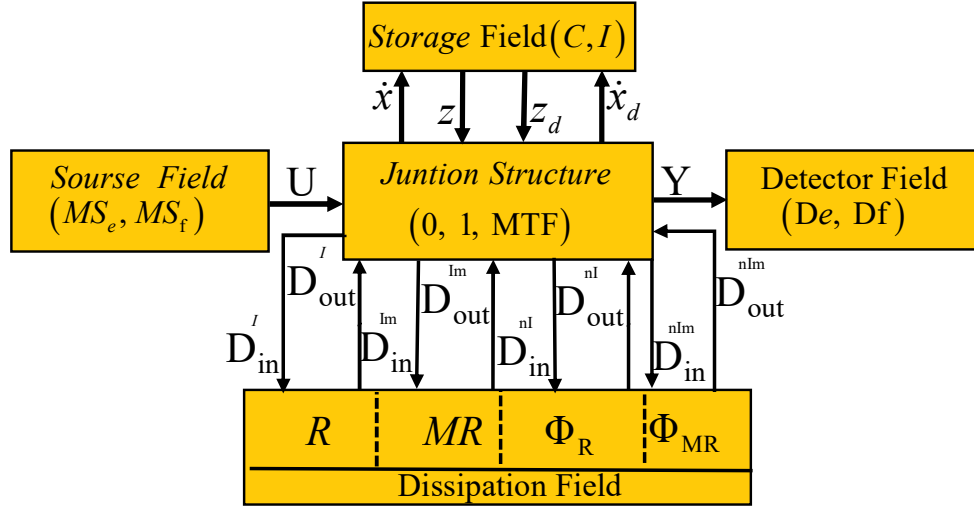


Figura 4.9: Estructura de Unión para sistemas no lineales modelados mediante Bond Graphs

dependientes (derivativa) y un campo de elementos disipativos, que para este caso contiene elementos lineales y no lineales que además pueden ser modulados.

La estructura de unión se muestra en la figura 4.9 con los siguientes elementos:

- Entradas al sistema $u(t) \in \mathbb{R}^p$ a través de las fuentes de esfuerzo y flujo denotadas MS_e y MS_f , respectivamente.
- Salidas del sistema $y(t) \in \mathbb{R}^q$ a través de detectores de esfuerzo y flujo denotados D_e y D_f , respectivamente.
- Las variables de estado linealmente independientes $x(t) \in \mathbb{R}^n$ son variables de almacenamiento en causalidad integral C or I con variables de potencia $\dot{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ y $z(t) \in \mathbb{R}^n$.
- Las variables de estado linealmente dependientes $x_d(t) \in \mathbb{R}^m$ son variables de almacenamiento en causalidad derivativa C or I con variables de potencia $\dot{x}_d(t) \in \mathbb{R}^m$ y $z_d(t) \in \mathbb{R}^m$.
- Relaciones algebraicas, lineales y no lineales, a través de un campo disipativo que se divide en:
 - Elementos disipativos lineales denotados R con vectores clave $D_{in}^l \in \mathbb{R}^{r_l}$ y $D_{out}^l \in \mathbb{R}^{r_l}$.
 - Elementos disipativos lineales modulados denotados MR con vectores clave $D_{in}^{lm} \in \mathbb{R}^{r_{lm}}$ y $D_{out}^{lm} \in \mathbb{R}^{r_{lm}}$.
 - Elementos disipativos no lineales denotados ϕ_R con vectores clave $D_{in}^{nl} \in \mathbb{R}^{r_{nl}}$ y $D_{out}^{nl} \in \mathbb{R}^{r_{nl}}$.

- Elementos disipativos no lineales modulados denotados ϕ_{MR} con vectores clave $D_{in}^{nlm} \in \mathfrak{R}^{r_{nlm}}$ y $D_{out}^{nlm} \in \mathfrak{R}^{r_{nlm}}$.
- La estructura de unión formada por
 - Uniones -1 y -0 que determinan la conexión entre los elementos.
 - Transformadores y giradores denotados MTF y MGY , respectivamente.

Las relaciones entre entradas y salidas de la estructura de unión de la figura 4.9 determinan la forma matemática del modelo en Bond Graph. Debido al hecho de que esta estructura permite la inclusión de elementos modulados en general, el modelo representa una clase de sistemas no lineales, y las relaciones formales entre la estructura de unión propuesta y su representación en el Espacio de Estados, se establecen mediante el siguiente lemma.

Lemma 1 *Considérese un sistema modelado mediante Bond Graph al que se le ha asignado una causalidad integral predefinida cuyos diagramas de bloques, vectores clave e interconexiones se pueden ver en la figura 4.9 . La estructura de unión está definida por:*

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ D_{in}^l(t) \\ D_{in}^{lm}(t) \\ D_{in}^{nl}(t) \\ D_{in}^{nlm}(t) \\ y(t) \\ z_d(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11}(x) & S_{12}^{11}(x) & S_{12}^{12}(x) & S_{12}^{13}(x) & S_{12}^{14}(x) & S_{13}(x) & S_{14}(x) \\ S_{21}^{11}(x) & S_{22}^{11}(x) & S_{22}^{12}(x) & 0 & 0 & S_{23}^{11}(x) & 0 \\ S_{21}^{21}(x) & S_{22}^{21}(x) & S_{22}^{22}(x) & 0 & 0 & S_{23}^{21}(x) & 0 \\ S_{21}^{31}(x) & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{23}^{31}(x) & 0 \\ S_{21}^{41}(x) & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{23}^{41}(x) & 0 \\ S_{31}(x) & S_{32}^{11}(x) & S_{32}^{12}(x) & S_{32}^{13}(x) & S_{32}^{14}(x) & S_{33}(x) & 0 \\ S_{41}(x) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z(t) \\ D_{out}^l(t) \\ D_{out}^{lm}(t) \\ D_{out}^{nl}(t) \\ D_{out}^{nlm}(t) \\ u(t) \\ \dot{x}_d(t) \end{bmatrix} \quad (4.72)$$

con entradas $S(x)$ dentro del conjunto $\{0, \pm 1, \pm f_T(x), \pm f_G(x)\}$, donde $f_T(x)$ y $f_G(x)$ son funciones de estado que modulan a MTF y MGY , respectivamente; y las relaciones constitutivas de los campos dadas por

$$z(t) = Fx(t) \quad (4.73)$$

$$z_d(t) = F_d x_d(t) \quad (4.74)$$

$$D_{out}^l(t) = LD_{in}^l(t) \quad (4.75)$$

$$D_{out}^{lm}(t) = L_m D_{in}^{lm}(t) \quad (4.76)$$

$$D_{out}^{nl}(t) = \phi(D_{in}^{nl}(t)) \quad (4.77)$$

$$D_{out}^{nlm}(t) = \phi_m(D_{in}^{nlm}(t)) \quad (4.78)$$

entonces una representación de variables de estado para esta clase de sistemas se describe mediante:

$$\dot{x}(t) = A(x)x(t) + B(x)u(t) + H(x, u) \quad (4.79)$$

donde

$$A(x) = E^{-1}(x) [S_{11}^{11}(x) + S_{12}^{11}(x) Q(x) S_A(x) + S_{12}^{12}(x) Q_m(x) S_{Am}(x) + S_{14}(x) F_d^{-1} \dot{S}_{14}(x)] F \quad (4.80)$$

$$B(x) = E^{-1}(x) [S_{13}(x) + S_{12}^{11}(x) Q(x) S_B(x)] \quad (4.81)$$

$$H(x, u) = E^{-1}(x) [S_{21}^{13}(x) D_{out}^{nl}(t) + S_{12}^{14}(x) D_{out}^{nlm}(t)] \quad (4.82)$$

$$E(x) = I - S_{14}(x) F_d^{-1} S_{41}(x) F \quad (4.83)$$

con

$$S_A(x) = S_{21}^{11}(x) + S_{22}^{12}(x) M_m(x) S_{21}^{21}(x) \quad (4.84)$$

$$S_{Am}(x) = S_{21}^{21}(x) + S_{22}^{21}(x) M(x) S_{21}^{11}(x) \quad (4.85)$$

$$S_B(x) = S_{23}^{11}(x) + S_{22}^{12}(x) M_m(x) S_{23}^{21}(x) \quad (4.86)$$

$$S_{Bm}(x) = S_{23}^{21}(x) + S_{22}^{21}(x) M(x) S_{23}^{11}(x) \quad (4.87)$$

y

$$Q(x) = L [I - S_{22}^{11}(x) L - S_{22}^{12}(x) M_m(x) S_{22}^{21}(x) L]^{-1} \quad (4.88)$$

$$Q_m(x) = L_m [I - S_{22}^{22}(x) L_m - S_{22}^{21}(x) M(x) S_{22}^{12}(x) L_m]^{-1} \quad (4.89)$$

$$M(x) = L [I - S_{22}^{11}(x) L]^{-1} \quad (4.90)$$

$$M_m(x) = L_m [I - S_{22}^{22}(x) L_m]^{-1} \quad (4.91)$$

A continuación se aplica la metodología propuesta para generar el modelo de la columna de destilación mediante Bond Graphs.

4.4.2. Modelo para la CDIE

Para los fines de este caso, en la aproximación mediante Bond Graphs la columna representa un sistema con equilibrio de fases y flujo de materiales, donde las variables de potencia son el potencial químico como esfuerzo y el flujo molar como variable de flujo. La columna cuenta con cinco etapas que determinan cinco potenciales químicos diferentes, y con ello la columna debe contar con cinco uniones 0-. Los elementos de almacenamiento C están conectados a cada una de estas uniones 0-, para incluir la acumulación de material en cada etapa. En cada etapa hay un flujo molar de material en fase vapor saliendo de ella $V_R y_i = V_{i,1}$. Estos términos se modelan mediante elementos disipativos R , y el flujo molar del componente líquido que sale de la etapa i señala la conexión con otro elemento R . De esta forma, las conexiones con cada unión 0- expresa la ecuación de balance para cada plato en la columna. Sobre esta base, un modelo en BG para la columna de cinco etapas se puede ver en la figura 4.10.

Los elementos básicos de la columna son:

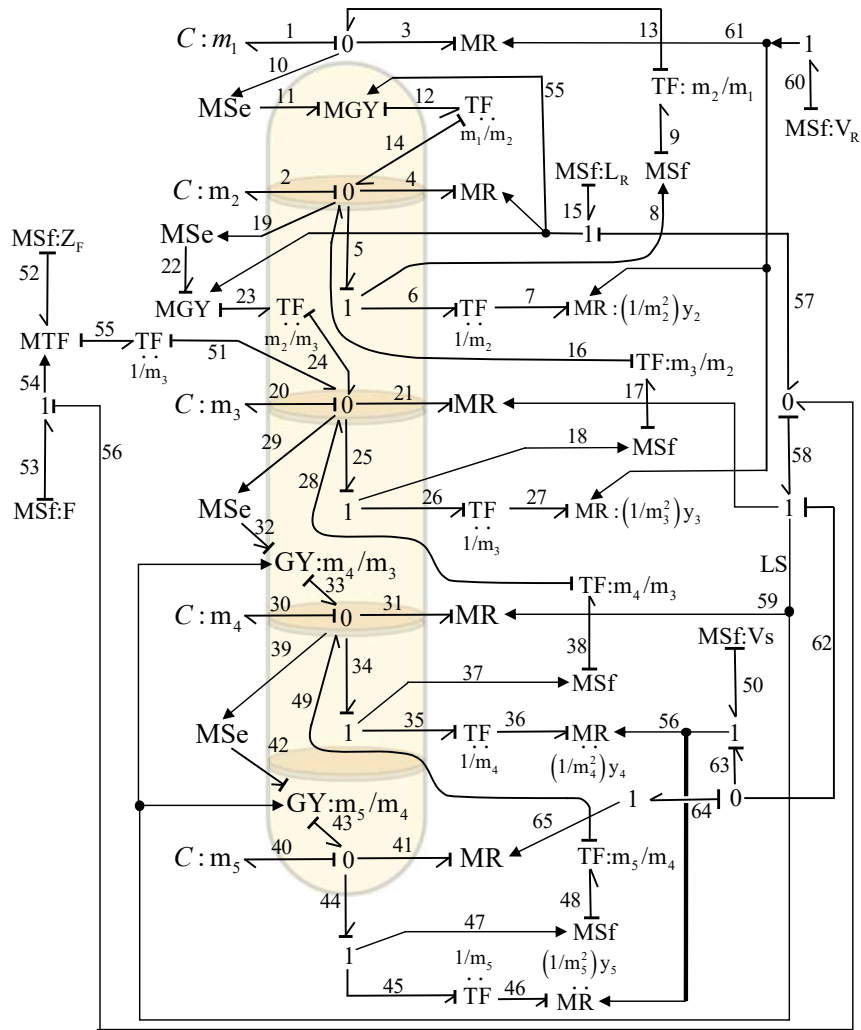


Figura 4.10: Modelo en Bond Graphs verdaderos para la columna de cinco etapas

- Cinco uniones -0 principales, una para cada potencial químico en el sistema, correspondientes a cada etapa de la columna.
- Cinco elemento de almacenamiento C representando un acumulador de flujo por cada charola con rebosadero.
- Los elementos MR , que son modulados a través de los flujos molares y consideraciones para la volatilidad relativa.
- Se usan transformadores $-TF-$ y giradores MGY para acoplar las entradas y salidas de cada etapa con las de los platos adyacentes.

Para poder generar el modelo matemático desde el modelo en Bond Graph deben obtenerse las variables correspondientes a los diferentes campos mostrados en la figura 4.9, así los vectores clave para los elementos de almacenamiento se expresan mediante:

$$x(t) = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_{20} \\ q_{30} \\ q_{40} \end{bmatrix}; \dot{x}(t) = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_{20} \\ f_{30} \\ f_{40} \end{bmatrix}; z(t) = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_{20} \\ e_{30} \\ e_{40} \end{bmatrix} \quad (4.92)$$

y la descripción de los campos disipativos y sus vectores claves es: by

$$D_{in}^{lm}(t) = \begin{bmatrix} e_4 \\ e_3 \\ e_{21} \\ e_{31} \\ e_{41} \end{bmatrix}; D_{out}^{lm}(t) = \begin{bmatrix} f_4 \\ f_3 \\ f_{21} \\ f_{31} \\ f_{41} \end{bmatrix}; D_{in}^{nlm}(t) = \begin{bmatrix} e_7 \\ e_{27} \\ e_{36} \\ e_{46} \end{bmatrix}; D_{out}^{nlm}(t) = \begin{bmatrix} f_7 \\ f_{27} \\ f_{36} \\ f_{46} \end{bmatrix} \quad (4.93)$$

con las entradas

$$u(t) = f_{53} \quad (4.94)$$

Dadas las relaciones constitutivas lineales

$$F = \text{diag} \left\{ \frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2}, \frac{1}{m_3}, \frac{1}{m_4}, \frac{1}{m_5} \right\} \quad (4.95)$$

$$L_m = \text{diag} \{L_R, V_R, L_S, L_S, B\} \quad (4.96)$$

y las no lineales como:

$$\begin{bmatrix} f_7 \\ f_{27} \\ f_{36} \\ f_{46} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{V_R}{m_2^2} y(e_7) \\ \frac{V_R}{m_2^2} y(e_{27}) \\ \frac{V_S}{m_2^2} y(e_{36}) \\ \frac{V_S}{m_5^2} y(e_{46}) \end{bmatrix} \quad (4.97)$$

donde

$$y(e_7) = \frac{\alpha e_7}{1 + (\alpha - 1) e_7} \quad (4.98)$$

$$y(e_{27}) = \frac{\alpha e_{27}}{1 + (\alpha - 1) e_{27}} \quad (4.99)$$

$$y(e_{36}) = \frac{\alpha e_{36}}{1 + (\alpha - 1) e_{36}} \quad (4.100)$$

$$y(e_{46}) = \frac{\alpha e_{46}}{1 + (\alpha - 1) e_{46}} \quad (4.101)$$

La estructura de unión para el Bond Graph queda definida como:

$$\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_{20} \\ f_{30} \\ f_{40} \\ e_4 \\ e_3 \\ e_{21} \\ e_{31} \\ e_{41} \\ e_7 \\ e_{27} \\ e_{36} \\ e_{46} \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{ccccc|ccccc|ccccc|ccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{m_2^2}{m_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{m_1}{m_2} L_R & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -m_2 & \frac{m_3^2}{m_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{m_2}{m_3} L_R & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -m_3 & \frac{m_4^2}{m_3} & 0 & \frac{f_{52}}{m_3} \\ 0 & 0 & \frac{m_3}{m_4} L_S & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -m_4 & \frac{m_5^2}{m_4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{m_4}{m_5} L_S & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -m_5 & 0 \end{array} \right] \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_{20} \\ e_{30} \\ e_{40} \\ f_4 \\ f_3 \\ f_{21} \\ f_{31} \\ f_{41} \\ f_7 \\ f_{27} \\ f_{36} \\ f_{46} \\ f_{53} \end{bmatrix} \quad (4.102)$$

Puede verse que no hay elementos de almacenamiento en causalidad derivativa y, por lo tanto, no habrá variables de estado linealmente dependientes en el modelo mediante Bond Graph, y la matriz $E(x) = I$. Para este caso, puesto que $S_{22}^{11}(x) = 0$, $S_{22}^{22}(x) = 0$, se desprende que $M(x) = L$, $M_m(x) = L_m T$, $Q(x) = L$ y $Q_m(x) = L_m$. De (4.80), (4.84), (4.85) con (4.95), (4.96) y (4.102),

$$A(x) = \begin{bmatrix} \frac{-V_R}{m_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L_R}{m_2} & \frac{-L_R}{m_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L_R}{m_3} & \frac{-L_S}{m_3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L_S}{m_4} & \frac{-L_S}{m_4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L_S}{m_5} & \frac{-B}{m_5} \end{bmatrix} \quad (4.103)$$

De (4.81), (4.86), (4.87) con (4.102),

$$B(x) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{f_{52}}{m_3} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.104)$$

De (4.82) con (4.97) y (4.102),

$$H(x, u) = \begin{bmatrix} \frac{V_R}{m_1} y(e_7) \\ \frac{-V_R}{m_2} y(e_7) + \frac{V_R}{m_2} y(e_{27}) \\ \frac{-V_R}{m_3} y(e_{27}) + \frac{V_R}{m_1} y(e_{36}) \\ \frac{-V_S}{m_4} y(e_{36}) + \frac{V_S}{m_4} y(e_{46}) \\ \frac{-V_S}{m_5} y(e_{46}) \end{bmatrix} \quad (4.105)$$

La representación en espacio de estados para la columna de destilación de (4.103), (4.104) y (4.105) está definida por

$$\dot{x}(t) = \begin{bmatrix} \frac{-V_R}{m_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L_R}{m_2} & \frac{-L_R}{m_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L_R}{m_3} & \frac{-L_S}{m_3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L_S}{m_4} & \frac{-L_S}{m_4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L_S}{m_5} & \frac{-B}{m_5} \end{bmatrix} x(t) + \begin{bmatrix} \frac{V_R}{m_1} y(e_7) \\ \frac{-V_R}{m_2} y(e_7) + \frac{V_R}{m_2} y(e_{27}) \\ \frac{-V_R}{m_3} y(e_{27}) + \frac{V_R}{m_1} y(e_{36}) \\ \frac{-V_S}{m_4} y(e_{36}) + \frac{V_S}{m_4} y(e_{46}) \\ \frac{-V_S}{m_5} y(e_{46}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{f_{52}}{m_3} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} u(t) \quad (4.106)$$

en forma desarrollada con (4.93), la columna de destilación tiene la forma

$$m_1 \frac{dq_1}{dt} = -V_R q_1 + V_R y(q_2) \quad (4.107)$$

$$m_2 \frac{dq_2}{dt} = L_R q_1 - L_R q_2 - V_R y(q_2) + V_R y(q_3) \quad (4.108)$$

$$m_3 \frac{dq_3}{dt} = L_R q_2 - L_S q_3 - V_R y(q_3) + V_S y(q_4) + f_{52} \cdot u \quad (4.109)$$

$$m_4 \frac{dq_4}{dt} = L_S q_3 - L_S q_4 - V_S y(q_4) + V_S y(q_5) \quad (4.110)$$

$$m_5 \frac{dq_5}{dt} = L_S q_4 - B q_5 - V_S y(q_5) \quad (4.111)$$

Comparando las ecuaciones (3.61) con (4.107) a (4.111), se concluye que el modelo generado en el Bond Graph de la columna de destilación efectivamente representa el mismo modelo matemático para este sistema.

Capítulo 5

Simulación y consideraciones de control para la columna

5.1. Linealización del modelo dinámico con n etapas

Cuando se trata con modelos lineales, es relativamente fácil llegar a una solución analítica que proporcione directamente información general sobre el comportamiento del sistema en diferentes condiciones, aplicando teoría de control lineal, que es ampliamente conocida y aplicada.

Si se considera que para describir casi cualquier fenómeno físico se debe usar ecuaciones diferenciales no lineales - ordinarias o parciales- a veces de orden superior, la ausencia de técnicas analíticas de solución de aplicación general, impide emplear técnicas equivalentes a las del control lineal. Aunque hoy día se tiene la opción de usar programas para obtener soluciones numéricas en puntos específicos, para entender adecuadamente un fenómeno es necesario correr muchas simulaciones, usando variación secuenciada de diversos parámetros y entradas, muchas veces sin obtener la comprensión deseada de la interacción de variables más que para estrechos rangos de observación.

Cuando el área de estudio es una región cercana a un punto estable y se buscan en ella soluciones del sistema, puede resultar preferible el uso de herramientas de linealización para hacerlo. Para el caso específico de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias lineales (EDOL) con coeficientes invariantes en el tiempo, se puede hacer uso de herramientas matemáticas de aplicación general, como las transformadas integrales de Laplace, Fourier o Z; diagrama de Bode y diversos criterios de estabilidad. Estas técnicas constituyen la columna vertebral del Control Clásico, pero en general solo son aplicables a sistemas lineales, por lo que es conveniente usar la aproximación lineal donde es válida.

Para un modelo dinámico del tipo:

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

o

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= f_1(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m) \\ \dot{x}_2 &= f_2(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m) \\ &\vdots \\ \dot{x}_n &= f_n(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m)\end{aligned}$$

es posible considerar el sistema en términos de variables de desviación respecto a un estado de referencia [31],[66],[73] que para el control de una columna de destilación sería el estado estable. Una forma de expresarlo es:

$$\omega_\delta = \omega - \omega_s \quad (5.1)$$

donde ω es una variable de interés cualquiera, ω_s es su valor en el estado estable y ω_δ la desviación de la variable respecto al mismo.

La representación en Espacio de Estados, para los casos en que **A**, **B**, **C** y **D** son invariantes con el tiempo y donde las variables de estado, entrada y salida se expresan como variables de desviación es:

$$\dot{\mathbf{x}}_\delta = \mathbf{A}\mathbf{x}_\delta(\mathbf{t}) + \mathbf{B}\mathbf{u}_\delta(\mathbf{t}) \quad (5.2)$$

$$\mathbf{y}_\delta = \mathbf{C}\mathbf{x}_\delta(\mathbf{t}) + \mathbf{D}\mathbf{u}_\delta(\mathbf{t}) \quad (5.3)$$

que a su vez se puede linealizar haciendo

$$\dot{\mathbf{x}}_\delta(t) = \mathbf{A}_L\mathbf{x}_\delta(\mathbf{t}) + \mathbf{B}_L\mathbf{u}_\delta(\mathbf{t}) \quad (5.4)$$

$$\mathbf{A}_L = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \dots & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

$$\mathbf{B}_L = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_1} & \frac{\partial f_1}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial u_m} \\ \frac{\partial f_2}{\partial u_1} & \frac{\partial f_2}{\partial u_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial u_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial u_1} & \dots & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial u_m} \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

Donde las matrices **A** y **A_L** siempre deben tener el mismo número de renglones y columnas, mientras que **B** y **B_L** pueden ser cuadradas, pero no es un requisito.

Debe hacerse notar que como $\frac{d\mathbf{x}_s}{dt} = 0$, $\dot{\mathbf{x}}_\delta = \dot{\mathbf{x}}$ pero las ecuaciones de linealización se expresan en términos de $\dot{\mathbf{x}}_\delta$ con fines de uniformidad en la nomenclatura y de modo que la solución del sistema sea directamente en términos de variable de desviación.

5.1.1. Matriz de linealización de las variables de estado

Para el modelo de la columna de destilación generado, la variable de estado es la composición de la fase líquida en cada etapa y se tomaron como variables de entrada el flujo y composición de la alimentación y los reflujo hacia la columna en el condensador y rehervidor. Es importante hacer notar que en realidad el retorno de fondos no es una variable independiente, pero se puede considerar como tal con base en el siguiente tren de razonamiento: en varias aplicaciones con especificaciones o carga variable, suele suceder que, al aumentar la demanda, se trate de elevar la producción incrementando el flujo de calor al rehervidor, o aumentar el calentamiento directo al equipo que suministra el fluido de calefacción al rehervidor. Hacer esto casi siempre es mala idea, porque cada columna se diseña para condiciones concretas de flujo interno y siempre habrá una condición de flujo máximo alcanzable en el interior y este a su vez define la carga térmica máxima que se puede entregar al rehervidor.

Si se excede esta carga máxima, el flujo de vapores ascendiendo arrastrará gotas de pesados hacia el destilado, que es precisamente el material que se desea separar del destilado. Estas consideraciones en cierto modo facilitan la simulación, pues en vez de usar la carga térmica como variable de entrada, se usa la carga máxima para definir el flujo máximo de retorno que es capaz de evaporar el rehervidor. Cualquier flujo por debajo de él es físicamente posible, y permite obtener la carga al rehervidor mediante un balance de energía en ese equipo. Es por eso que la variable elegida es el flujo de retorno y los balances de energía se consideran como dependientes de los flujos dados.

Así los vectores que definen las variables de estado y entrada, respectivamente son:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ Z_F \end{bmatrix} \quad (5.7)$$

Para las matrices de linealización del modelo de la columna (5.5) y (5.6), cada renglón corresponde a una etapa. Para las variables de estado y entrada ya definidas

$$\mathbf{A}_L = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \cdot & A_{1,n} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \cdot & A_{2,n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ A_{n,1} & \cdot & \cdot & A_{n,n} \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

donde evidentemente

$$A_{i,j} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \quad (5.9)$$

El primer renglón de $\mathbf{A}_L$ corresponde al condensador y el renglón n al rehervidor. Calculando las derivadas parciales correspondientes para cada sección:

Condensador

$$f_1 = \frac{V_R}{m_1}(y_2 - x_1) \quad (5.10)$$

$$A_{1,1} = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \quad (5.11)$$

$$A_{1,1} = -\frac{V_R}{m_1} \quad (5.12)$$

$$A_{1,2} = \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \quad (5.13)$$

$$A_{1,2} = \frac{V_R}{m_1} \frac{\partial y_2}{\partial x_2} \quad (5.14)$$

recordando que

$$\begin{aligned} \zeta_i &= \frac{\partial y_i}{\partial x_i} \\ A_{1,2} &= \zeta_2 \frac{V_R}{m_1} \end{aligned} \quad (5.15)$$

dado que

$$\begin{aligned} f_1 &= f(x_1, x_2) \\ A_{1,j} &= 0 \quad | \quad j > 2 \end{aligned} \quad (5.16)$$

Para la zona de rectificación (etapas 2 hasta h - 1)

$$f_i = \frac{L_R}{m_i}(x_{i-1} - x_i) + \frac{V_R}{m_i}(y_{i+1} - y_i), \quad 2 \leq i \leq h - 1 \quad (5.17)$$

$$A_{i,j} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \quad (5.18)$$

En la función (5.17) para cada etapa de esta zona, los índices de la variable de estado son los de la propia etapa y los de las dos etapas adyacentes, o sea $j = (i - 1, i, i + 1)$, en consecuencia son las derivadas respecto a x_{i-1} , x_i y x_{i+1} las que pueden generar coeficientes diferentes de cero, y el mismo caso se presenta a todo lo largo de la columna y

$$A_{i,j} = 0 \quad | \quad i - 2 \geq j \geq i + 2. \quad (5.19)$$

Para los coeficientes que pueden ser diferentes de cero:

$$A_{i,i-1} = \frac{\partial f_i}{\partial x_{i-1}} \quad (5.20)$$

$$A_{i,i-1} = \frac{L_R}{m_i} \quad (5.21)$$

$$A_{i,i} = -\frac{L_R + V_R \zeta_i}{m_i} \quad (5.22)$$

$$A_{i,i+1} = \frac{V_R}{m_i} \zeta_{i+1} \quad (5.23)$$

En la etapa de Alimentación (etapa h)

$$f_i = \frac{L_R}{m_i} x_{i-1} - \frac{L_S}{m_i} x_i + \frac{V_S}{m_i} y_{i+1} - \frac{V_R}{m_i} y_i + \frac{F z_F}{m_i}, \quad i = h \quad (5.24)$$

$$A_{i,i-1} = \frac{\partial f_i}{\partial x_{i-1}} \quad (5.25)$$

$$A_{i,i-1} = \frac{L_R}{m_i} \quad (5.26)$$

$$A_{i,i} = -\frac{L_S + V_R \zeta_i}{m_i} \quad (5.27)$$

$$A_{h,h+1} = \frac{V_S \zeta_{h+1}}{m_h} \quad (5.28)$$

Para la zona de Agotamiento (etapas $h + 1$ hasta $n - 1$)

$$f_i = \frac{L_S}{m_i} (x_{i-1} - x_i) + \frac{V_S}{m_i} (y_{i+1} - y_i); \quad h + 1 \leq i \leq n - 1 \quad (5.29)$$

$$A_{i,i-1} = \frac{L_S}{m_i} \quad (5.30)$$

$$A_{i,i} = -\frac{L_S + V_S \zeta_i}{m_i} \quad (5.31)$$

$$A_{i,i+1} = \frac{V_S}{m_i} \zeta_{i+1} \quad (5.32)$$

Rehervidor (etapa n)

$$f_i = \frac{L_S}{m_{RB}} x_{i-1} - \frac{B}{m_{RB}} x_i - \frac{V_S}{m_{RB}} y_i, \quad i = n \quad (5.33)$$

como

$$B = L_S - V_S \quad (5.34)$$

$$f_n = \frac{L_S}{m_{RB}} x_{n-1} - \frac{L_S - V_S}{m_{RB}} x_n - \frac{V_S}{m_{RB}} y_n \quad (5.35)$$

reordenando términos

$$f_n = \frac{L_S}{m_{RB}} (x_{n-1} - x_n) + \frac{V_S}{m_{RB}} (x_n - y_n) \quad (5.36)$$

de ahí que

$$A_{n,n-1} = \frac{L_S}{m_{RB}} \quad (5.37)$$

$$A_{n,n} = -\frac{L_S + V_S (\zeta_n - 1)}{m_{RB}} \quad (5.38)$$

o expresado con la corriente de fondos (B) explícita

$$A_{n,n} = -\frac{B + V_S \zeta_n}{m_{RB}} \quad (5.39)$$

5.1.2. Matriz de linealización de las variables de entrada

De forma análoga a la matriz de estados, se obtiene la linealización para las variables de entrada mediante la matriz

$$\mathbf{B}_L = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_1} & \frac{\partial f_1}{\partial u_2} & \frac{\partial f_1}{\partial u_3} & \frac{\partial f_1}{\partial u_4} \\ \frac{\partial f_2}{\partial u_1} & \frac{\partial f_2}{\partial u_2} & \frac{\partial f_2}{\partial u_3} & \frac{\partial f_2}{\partial u_4} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial u_1} & \frac{\partial f_n}{\partial u_2} & \frac{\partial f_n}{\partial u_3} & \frac{\partial f_n}{\partial u_4} \end{bmatrix} \text{ donde } \mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ z_F \end{bmatrix} \quad (5.40)$$

Como ya se mencionó, el primer renglón de $\mathbf{B}_L$ corresponde al condensador y el n al rehervidor. Calculando las derivadas parciales correspondientes para cada sección:

Condensador

$$f_1 = \frac{V_R}{m_1}(y_2 - x_1) \quad (5.41)$$

$$B_{1,1} = \frac{\partial f_1}{\partial L_R} \quad (5.42)$$

$$B_{1,1} = 0 \quad (5.43)$$

$$B_{1,2} = \frac{\partial f_1}{\partial V_S} \quad (5.44)$$

$$B_{1,2} = \frac{(y_2 - x_1)}{m_1} \frac{\partial V_R}{\partial V_S} \quad (5.45)$$

de acuerdo con (3.40)

$$\begin{aligned} V_R &= V_S + F(1 - q_F) \\ \therefore \frac{\partial V_R}{\partial V_S} &= 1 \end{aligned} \quad (5.46)$$

y

$$B_{1,2} = \frac{(y_2 - x_1)}{m_1} \quad (5.47)$$

$$B_{1,3} = \frac{\partial f_1}{\partial F} \quad (5.48)$$

$$B_{1,3} = \frac{(y_2 - x_1)}{m_1} \frac{\partial V_R}{\partial F} \quad (5.49)$$

e igualmente por (3.40)

$$\frac{\partial V_R}{\partial F} = (1 - q_F) \quad (5.50)$$

$$B_{1,3} = \frac{(y_2 - x_1)}{m_1} (1 - q_F) \quad (5.51)$$

$$B_{1,4} = \frac{\partial f_1}{\partial z_F}, \quad B_{1,4} = \frac{(y_2 - x_1)}{m_1} \frac{\partial V_R}{\partial z_F} \quad (5.52)$$

$$\frac{\partial V_R}{\partial z_F} = 0 \quad (5.53)$$

$$B_{1,4} = 0 \quad (5.54)$$

Para la zona de rectificación (etapas 2 hasta $h - 1$)

$$f_i = \frac{L_R}{m_i}(x_{i-1} - x_i) + \frac{V_R}{m_i}(y_{i+1} - y_i), \quad 2 \leq i \leq h - 1 \quad (5.55)$$

$$B_{i,1} = \frac{\partial f_i}{\partial L_R} \quad (5.56)$$

$$B_{i,1} = \frac{(x_{i-1} - x_i)}{m_i} \quad (5.57)$$

$$B_{i,2} = \frac{(y_{i+1} - y_i)}{m_i} \quad (5.58)$$

$$B_{i,3} = \frac{(y_{i+1} - y_i)}{m_i}(1 - q_F) \quad (5.59)$$

$$B_{i,4} = 0 \quad (5.60)$$

En la etapa de Alimentación (etapa h)

$$f_i = \frac{L_R}{m_i}x_{i-1} - \frac{L_S}{m_i}x_i + \frac{V_S}{m_i}y_{i+1} - \frac{V_R}{m_i}y_i + \frac{Fz_F}{m_i}, i = h \quad (5.61)$$

$$B_{i,1} = \frac{(x_{i-1} - x_i)}{m_i} \quad (5.62)$$

$$B_{i,2} = \frac{(y_{i+1} - y_i)}{m_i} \quad (5.63)$$

$$B_{i,3} = \frac{x_{i-1}}{m_i} \frac{\partial L_R}{\partial F} - \frac{x_i}{m_i} \frac{\partial L_S}{\partial F} + \frac{y_{i+1}}{m_i} \frac{\partial V_S}{\partial F} - \frac{y_i}{m_i} \frac{\partial V_R}{\partial F} + \frac{z_F}{m_i} \frac{\partial F}{\partial F} \quad (5.64)$$

de acuerdo con (3.40) y (3.41)

$$L_S = L_R + Fq_F$$

$$V_R = V_S + F(1 - q_F)$$

de ahí que

$$\frac{\partial L_R}{\partial F} = 0 \quad (5.65)$$

$$\frac{\partial L_S}{\partial F} = q_F \quad (5.66)$$

$$\frac{\partial V_S}{\partial F} = 0 \quad (5.67)$$

$$\frac{\partial V_R}{\partial F} = 1 - q_F \quad (5.68)$$

$$B_{i,3} = -\frac{x_i}{m_i}q_F - \frac{y_i}{m_i}(1 - q_F) + \frac{z_F}{m_i} \quad (5.69)$$

o

$$B_{i,3} = \frac{z_F - x_i q_F - y_i(1 - q_F)}{m_i} \quad (5.70)$$

$$B_{i,4} = \frac{F}{m_i} \quad (5.71)$$

Zona de agotamiento (etapas $h + 1$ hasta $n - 1$)

$$f_i = \frac{L_S}{m_i}(x_{i-1} - x_i) + \frac{V_S}{m_i}(y_{i+1} - y_i); h + 1 \leq i \leq n - 1 \quad (5.72)$$

$$B_{i,1} = \frac{(x_{i-1} - x_i)}{m_i} \quad (5.73)$$

$$B_{i,2} = \frac{(y_{i+1} - y_i)}{m_i} \quad (5.74)$$

$$B_{i,3} = \frac{(x_{i-1} - x_i)}{m_i}q_F \quad (5.75)$$

$$B_{i,4} = 0 \quad (5.76)$$

Rehervidor (etapa n)

$$f_i = \frac{L_S}{m_{RB}}x_{i-1} - \frac{B}{m_{RB}}x_i - \frac{V_S}{m_{RB}}y_i, i = n \quad (5.77)$$

como

$$B = L_S - V_S \quad (5.78)$$

$$f_n = \frac{L_S}{m_{RB}}(x_{n-1} - x_n) + \frac{V_S}{m_{RB}}(x_n - y_n) \quad (5.79)$$

$$B_{n,1} = \frac{x_{n-1} - x_n}{m_{RB}} \quad (5.80)$$

$$B_{n,2} = \frac{x_n - y_n}{m_{RB}} \quad (5.81)$$

$$B_{n,3} = \frac{(x_{n-1} - x_n)}{m_{RB}}q_F \quad (5.82)$$

$$B_{n,4} = 0 \quad (5.83)$$

5.1.3. Linealización de la ecuación para las variables de salida

Para el control de la columna, las variables de interés son las composiciones en el destilado y corriente de fondos, que para el caso simplificado viene a ser la fracción mol del componente ligero en ellas: x_D y x_B (o lo que es lo mismo x_1 y x_n).

La ecuación general para las salidas es:

$$\mathbf{y}_\delta = \mathbf{C}_L \mathbf{x}_\delta(\mathbf{t}) + \mathbf{D}_L \mathbf{u}_\delta(\mathbf{t}) \quad (5.84)$$

$$\mathbf{y}_\delta = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_n \end{bmatrix}_\delta \quad (5.85)$$

donde

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_n \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} x_1 - x_{1,s} \\ x_n - x_{n,s} \end{bmatrix} \quad (5.86)$$

$$g_1(x) = x_1 - x_{1,s} \quad (5.87)$$

$$g_2(x) = x_n - x_{n,s} \quad (5.88)$$

en consecuencia $\mathbf{C}_L$ y $\mathbf{D}_L$ se definen por

$$\mathbf{C}_L = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_2}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (5.89)$$

$$\mathbf{D}_L = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial u_1} & \frac{\partial g_1}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial u_n} \\ \frac{\partial g_2}{\partial u_1} & \frac{\partial g_2}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial g_2}{\partial u_n} \end{bmatrix} \quad (5.90)$$

que para este caso viene a ser:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_n \end{bmatrix}_\delta = \mathbf{C}_L \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix}_\delta + \mathbf{D}_L \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ z_F \end{bmatrix}_\delta \quad (5.91)$$

A pesar de que las variables de salida son funciones de $\mathbf{u}$, esta relación se manifiesta implícitamente en (5.2), por lo que debe omitirse el término de entradas en (5.91) y al anularse la matriz $\mathbf{D}_L$ la ecuación se convierte en

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_n \end{bmatrix}_\delta = \mathbf{C}_L \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix}_\delta \quad (5.92)$$

donde

$$\mathbf{C}_L = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_2}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (5.93)$$

que de acuerdo a (5.87) y (5.88) implica que:

$$C_{1,1} = 1, C_{1,j} = 0 \mid j \neq 1 \quad (5.94)$$

$$C_{2,n} = 1, C_{2,j} = 0 \mid j \neq n \quad (5.95)$$

5.1.4. Expresión para la solución analítica

En principio, una vez linealizado el modelo es posible obtener una solución analítica de la forma.

$$\mathbf{x}_\delta(\mathbf{t}) = e^{\mathbf{A}_L(\mathbf{t}-\boldsymbol{\tau})} \mathbf{x}_\delta(\boldsymbol{\tau}) + \int_{\boldsymbol{\tau}}^{\mathbf{t}} e^{\mathbf{A}_L(\mathbf{t}-\boldsymbol{\lambda})} \mathbf{B}_L \mathbf{u}_\delta(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} \quad (5.96)$$

$$\mathbf{y}_\delta(\mathbf{t}) = \mathbf{C}_L e^{\mathbf{A}_L(\mathbf{t}-\boldsymbol{\tau})} \mathbf{x}_\delta(\boldsymbol{\tau}) + \int_{\boldsymbol{\tau}}^{\mathbf{t}} \mathbf{C}_L e^{\mathbf{A}_L(\mathbf{t}-\boldsymbol{\lambda})} \mathbf{B}_L \mathbf{u}_\delta(\boldsymbol{\lambda}) d\boldsymbol{\lambda} \quad (5.97)$$

para un sistema donde se conocen las condiciones en el tiempo inicial $\boldsymbol{\tau}$ y $\boldsymbol{\lambda}$ es una variable de interacción que representa al tiempo.

La expresión equivalente en el dominio de Laplace con condiciones iniciales en $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}$ es:

$$\mathbf{X}(s) = [(s * \mathbf{I} - \mathbf{A}_L)^{-1} \mathbf{B}_L] \mathbf{U}(s) \quad (5.98)$$

$$\mathbf{Y}(s) = [(s * \mathbf{I} - \mathbf{A}_L)^{-1} \mathbf{B}_L] \mathbf{U}(s) \quad (5.99)$$

Sin embargo, casi nunca se usa la solución analítica por la complejidad de las expresiones y se prefiere emplear otras técnicas de solución.

5.1.5. Linealización del modelo en Bond Graph

Una propiedad importante en teoría de Bond Graph es la trayectoria causal, esencial para la determinación de algunas propiedades de control como son observabilidad, controlabilidad, la relación entre variables de estado y la representación en espacio de estados de las ecuaciones del sistema [79], esta última característica también puede emplearse para linealizar un sistema que puede representarse en Bond Graph.

González y Galindo propusieron un método para obtener la linealización de un Bond Graph [80] adaptando la técnica mostrada en la sección 5.1, la técnica incluye una estructura de unión para el Bond Graph linealizado y la correspondiente representación en espacio de estados puede obtenerse de la estructura de unión o del análisis de trayectorias causales.

Procedimiento para obtener el Bond Graph linealizado Bond Graph representa gráficamente una estructura física y los intercambios de potencia en ese sistema físico, codificando en esos diagramas su forma matemática y se desprende que se puede obtener una estructura que muestre las relaciones causales entre las señales del sistema. La información gráfica de BG puede usarse para identificar secciones no lineales del sistema físico mediante los siguientes pasos:

1. Considérese el Bond Graph no lineal de un sistema físico, donde se deben identificar las secciones no lineales.
2. Siguiendo las trayectorias causales se comienza del elemento I_1 o C_1 , pasando por transformadores MTF o Giradores MGY con el módulo de la variable de estado hasta llegar a otro elemento $I : 2$ o C_2
3. La linealización es alrededor de la trayectoria nominal y los módulos de MTF o MGY del paso anterior estarán en la trayectoria nominal para la trayectoria de la variable de estado.
4. Incluir los bonds hacia adentro de acuerdo con las trayectorias causales del segundo paso. Cada elemento I_1 se cambia por una fuente nominal de flujo, y si el elemento es C_1 , por una fuente nominal de esfuerzo; entonces se agregan bonds para tomar en cuenta la trayectoria causal llegando a los elementos I_2 o C_2 . El valor de estas fuentes son la trayectoria nominal de las covariables de estado de energía. El módulo MTF o MGY de la trayectoria causal adicional es el original de paso 1.
5. Si hay una variable de estado con dos o más trayectorias causales en el paso 1, el inicio de esas trayectorias debe unirse a la fuente del paso 5. Se tratará de una unión -1 para una fuente de esfuerzo y -0 para cualquier otro caso.

El Bond Graph de la CDIE de 5 etapas se muestra en la figura 5.1

5.2. Controlabilidad

La definición de Controlabilidad varía dependiendo de la disciplina donde se aplique y, siendo específicas a un campo, introducen limitaciones en el concepto. Por ejemplo, para plantas de proceso en operación continua capaces de operar en el estado estable, el sistema es controlable si las variables de salida se pueden mantener en el set point (que se entiende coincide con el estado estable) a pesar de las perturbaciones al proceso [31]. Esta definición resulta un tanto restrictiva porque, entre otras cosas, genera la impresión de que el set point de un proceso es una característica intrínseca del mismo y no una variable sujeta a consideraciones económicas y operativas, reforzando la conveniencia de usar una definición más general.

El problema para elegir una definición general no radica en la carencia de estas, sino en que el problema combinado de *Observabilidad* y *Controlabilidad*, presenta gran complejidad

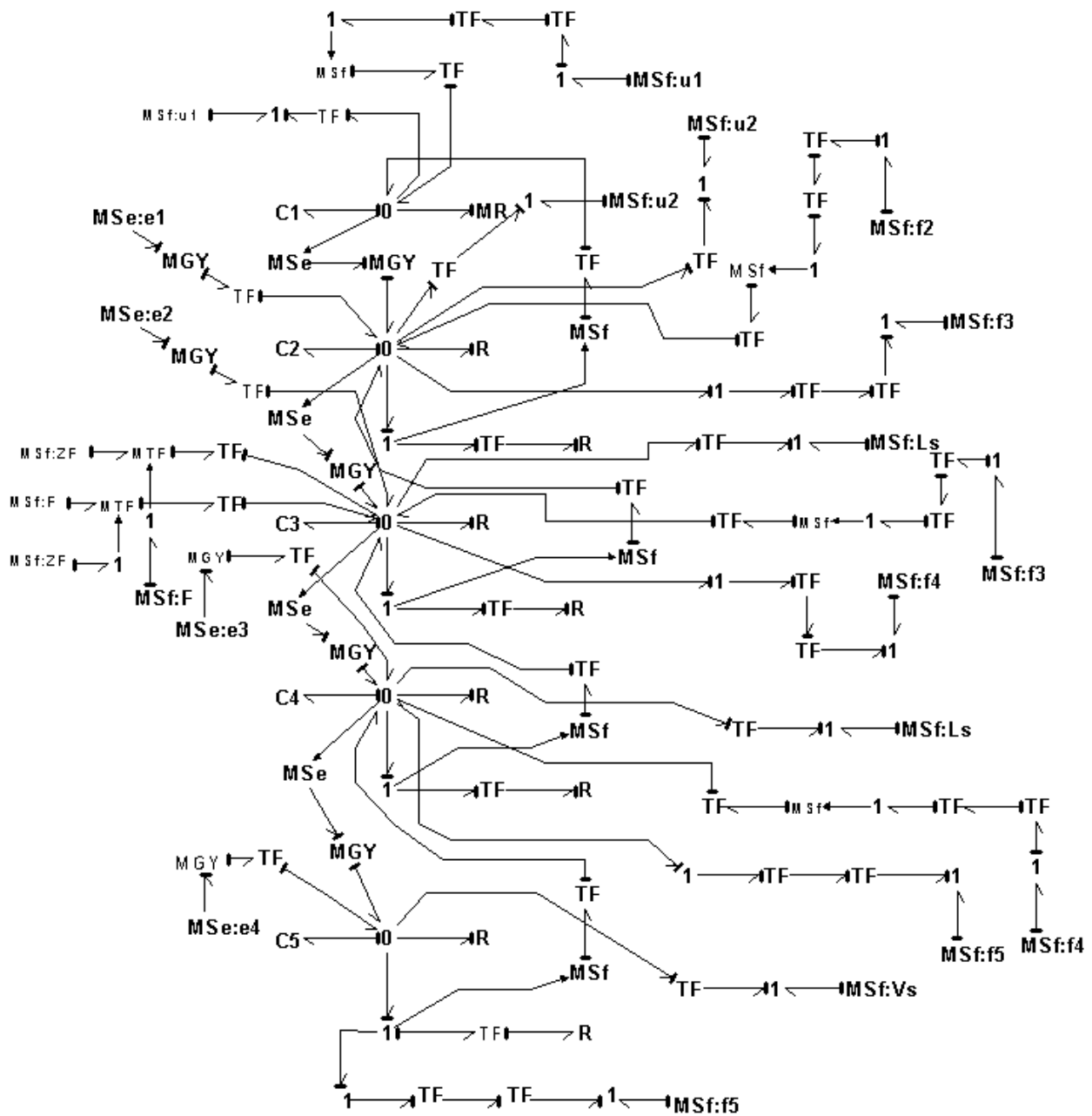


Figura 5.1: Bond Graph linealizado de la columna de cinco etapas

y ha sido investigado a profundidad pero mucho del trabajo realizado es tan complicado que deja de ser aplicable a casos prácticos [81] y se debe tomar un camino intermedio balanceando rigor con aplicabilidad.

Con el modelo dinámico desarrollado, si se dispone de los valores de todas las variables de estado y sus funciones de forzamiento para un tiempo específico -que pueden ser los del estado estable o las condiciones al comenzar el seguimiento- debería ser posible conocer el estado del sistema en cualquier momento posterior y seguir la trayectoria de las variables de estado en función de perturbaciones externas o manipulación de las variables de control. Considerando los cambios de estado como puntos de esa línea, la Controlabilidad, puede decirse que es la capacidad de desplazar el sistema de un estado $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$ a otro $\mathbf{x}(t_1) = \mathbf{x}_1$ en un tiempo finito $t_1 - t_0$ manipulando el vector de entradas, o bien que para un sistema controlable, se puede encontrar un vector de entradas que lo lleve de $\mathbf{x}_0$ a $\mathbf{x}_1$. Otro aspecto a considerar es que se habla de alcanzar el estado x_1 , pero sin garantía de que se logre estabilizar ahí el sistema para procesos capaces de operar en estado estable. La condición de poder llevar el sistema de un estado de desviación al de referencia es un caso particular de la definición general de Controlabilidad.

La expresión analítica formal para un sistema lineal (o linealizado en este caso) con coeficientes invariantes en el tiempo del tipo

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}\mathbf{u}(t) \quad (5.100)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C}\mathbf{x}(t) + \mathbf{D}\mathbf{u}(t) \quad (5.101)$$

establece que un sistema es controlable si el Wronskiano

$$\mathbf{W}_1(t) = \int_0^t e^{\mathbf{A}\tau} \mathbf{B} \mathbf{B}^T e^{\mathbf{A}^T \tau} d\tau \quad (5.102)$$

es no singular para cualquier tiempo $t > 0$. Es decir $\det(\mathbf{W}_1(t)) \neq 0$ [32],[72]. Esta expresión analítica es muy difícil de aplicar en la práctica porque requiere obtener las integrales de los productos matriciales y al ser $\mathbf{W}_1(t)$ una matriz del mismo tamaño de $\mathbf{A}$, el desarrollo del determinante cualquier $\mathbf{A}$ con $n > 3$ puede ser una tarea realmente complicada.

Como alternativa se tiene el análisis de rango, que es una condición basada en la definición formal, pero de aplicación práctica directa y se hace mediante la evaluación del rango de la matriz de controlabilidad.

El rango de una matriz es la dimensión del espacio vectorial comprendida por sus columnas e igual a la de sus renglones, en su forma más simple viene a ser el menor entre el número columnas y renglones linealmente independientes. Una matriz cuadrada es de rango completo si todos sus renglones y columnas son linealmente independientes; para otras matrices el rango completo se define si su rango es igual al número menor entre renglones y columnas o si el rango es igual al número de variables de estado.

Para que el sistema en REE, sea controlable es necesario generar la matriz

$$\mathbf{C}_n = [\mathbf{B} \quad \mathbf{A}\mathbf{B} \quad \mathbf{A}^2\mathbf{B} \quad \dots \quad \mathbf{A}^{n-1}\mathbf{B}] \quad (5.103)$$

y determinar su rango. Si $\mathbf{C}_n$ es de rango completo, el sistema descrito es controlable, y de acuerdo con las reglas de multiplicación de matrices, debe tener rango n que es el de la matriz de estados $\mathbf{A}$. Esta forma de determinar la controlabilidad del sistema es perfectamente consistente con la analítica y su fundamentación viene descrita en varios textos clásicos de control, como [32] o [55], entre otros; con la diferencia respecto a la forma analítica de que es relativamente fácil obtener el rango de la matriz de controlabilidad. Un aspecto relevante de esto es que solo depende de las matrices de la ecuación de estados $\mathbf{A}$ y $\mathbf{B}$, sin involucrar a la de entradas/salidas.

5.2.1. Análisis de controlabilidad para el caso de estudio.

Tomando la ecuación de estados de la REE linealizada en términos de variable de desviación

$$\dot{\mathbf{x}}_\delta = \mathbf{A}_L \mathbf{x}_\delta(\mathbf{t}) + \mathbf{B}_L \mathbf{u}_\delta(\mathbf{t}) \quad (5.104)$$

para la columna de cinco etapas y el modelo desarrollado:

$$\dot{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} -\frac{V_R}{m_1} & \frac{V_R \zeta_2}{m_1} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L_R}{m_2} & -\frac{L_R + V_R \zeta_2}{m_2} & \frac{V_R \zeta_3}{m_2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L_R}{m_3} & -\frac{L_S + V_R \zeta_3}{m_3} & \frac{V_R \zeta_4}{m_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L_S}{m_4} & -\frac{L_S + V_S \zeta_4}{m_4} & \frac{V_S \zeta_5}{m_4} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L_S}{m_5} & -\frac{L_S + V_S(1-\zeta_5)}{m_5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix}_\delta \quad (5.105)$$

$$+ \begin{bmatrix} 0 & \frac{(y_2-x_1)}{m_1} & \frac{(y_2-x_1)(1-q_F)}{m_1} & 0 \\ \frac{(x_1-x_2)}{m_2} & \frac{(y_3-y_2)}{m_2} & \frac{(y_3-y_2)(1-q_F)}{m_2} & 0 \\ \frac{(x_2-x_3)}{m_3} & \frac{(y_4-y_3)}{m_3} & \frac{z_F - x_3 q_F - y_3(1-q_F)}{m_3} & \frac{F}{m_3} \\ \frac{(x_3-x_4)}{m_4} & \frac{(y_5-y_4)}{m_4} & \frac{(x_3-x_4)q_F}{m_4} & 0 \\ \frac{(x_4-x_5)}{m_5} & \frac{(x_5-y_5)}{m_5} & \frac{(x_4-x_5)q_F}{m_5} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ z_F \end{bmatrix}_\delta$$

La matriz de controlabilidad a desarrollar es:

$$\mathbf{C}_n = [\mathbf{B}_L \quad \mathbf{A}_L \mathbf{B}_L \quad \mathbf{A}_L^2 \mathbf{B}_L \quad \mathbf{A}_L^3 \mathbf{B}_L \quad \mathbf{A}_L^4 \mathbf{B}_L] \quad (5.106)$$

Haciendo un breve análisis por inspección para la estructura de la matriz de controlabilidad en función de la estructura de la matriz de estados:

$$\mathbf{A}_L = \begin{bmatrix} -\frac{V_R}{m_1} & \frac{V_R \zeta_2}{m_1} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L_R}{m_2} & -\frac{L_R + V_R \zeta_2}{m_2} & \frac{V_R \zeta_3}{m_2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L_R}{m_3} & -\frac{L_S + V_R \zeta_3}{m_3} & \frac{V_R \zeta_4}{m_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L_S}{m_4} & -\frac{L_S + V_S \zeta_4}{m_4} & \frac{V_S \zeta_5}{m_4} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L_S}{m_5} & -\frac{L_S + V_S(1-\zeta_5)}{m_5} \end{bmatrix} \quad (5.107)$$

Se aprecia que $\mathbf{A}_L$ es una matriz tridiagonal y al elevarla al cuadrado $\mathbf{A}_L^2$ presenta dos diagonales adicionales llenas. Al elevar al cubo se tienen ceros solo en $A(5,1)$ y $A(1,5)$ mientras que en $\mathbf{A}_L^4$ no hay elementos nulos. Esta estructura prácticamente garantiza que

no habrá renglones ni columnas linealmente dependientes en $\mathbf{C}_n$ y es de esperarse que tenga rango completo.

Al hacer la determinación de rango mediante las funciones correspondientes en MATLAB se obtiene que el rango de $\mathbf{C}_n$ es 5, con lo que se demuestra que tiene rango completo y que el sistema es controlable.

5.2.2. Controlabilidad estructural en BG.

La representación en bond Bond Graph del mismo sistema permite determinar su controlabilidad si se cumple que:

- Existen trayectorias causales de las fuentes a los elementos de almacenamiento.
- Se puede generar un Bond Graph válido en causalidad derivativa predeterminada para el sistema.

Ventajas de la determinación de la controlabilidad mediante BG:

- No es necesario de terminar a priori las ecuaciones del sistema para establecer si es controlable.
- No se requiere determinar la matriz de controlabilidad ni su rango.
- Permite identificar la posición óptima de medidores y sensores para un sistema.
- Utilizando la no controlabilidad de un sistema permite desviar de puntos críticos las posibles entradas de perturbación.

5.3. Observabilidad

Para utilizar la retroalimentación total de estado en control de lazo cerrado, es necesario que el controlador tenga acceso permanente a los valores de las variables de estado, pero puede suceder que algunas de ellas no sean directamente medibles - ya sea por falta de sensores adecuados o por estar en un lugar inaccesible para la medición - y sea necesario calcularlas o estimarlas con base a la información disponible para ese punto particular. Por la misma naturaleza de las especificaciones de operación, lo que siempre debe estar sujeto a medición son las variables de salida.

La observabilidad en principio viene a ser la capacidad de reconstruir el estado inicial del sistema conociendo el modelo y sus salidas, aunque la definición formal enuncia que un sistema es observable si es posible reconstruir las variables de estado para $t_0 = 0$ conociendo los vectores de entrada y salida para una sucesión de estados en un tiempo finito, o hacerlo para un tiempo t cualquiera partiendo del estado inicial x_0 y los vectores de entrada y salida para la sucesión de estados mencionada.

Un sistema con representación en espacio de estados es completamente observable si la matriz de observabilidad

$$O_n = \begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ \mathbf{CA} \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathbf{CA}^{n-1} \end{bmatrix} \quad (5.108)$$

es de rango completo e igual al número de variables de estado.

Como se puede apreciar en la expresión anterior, del mismo modo que la controlabilidad está dada por las matrices de la ecuación de estados $\mathbf{A}$ y $\mathbf{B}$, la observabilidad queda definida por las matrices de estados $\mathbf{A}$ y $\mathbf{C}$, sin considerar las matrices correspondientes a las entradas.

5.3.1. Análisis de observabilidad para el caso de estudio.

El desarrollo es muy parecido al de la controlabilidad y para la REE de la columna de cinco etapas en términos de variable de desviación con matriz $\mathbf{D}$ nula

$$\dot{\mathbf{x}}_\delta = \mathbf{A}_L \mathbf{x}_\delta(\mathbf{t}) + \mathbf{B}_L \mathbf{u}_\delta(\mathbf{t}) \quad (5.109)$$

$$\mathbf{y}_\delta = \mathbf{C}_L \mathbf{x}_\delta(\mathbf{t}) \quad (5.110)$$

$$\dot{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} -\frac{V_R}{m_1} & \frac{V_R \zeta_2}{m_1} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L_R}{m_2} & -\frac{L_R + V_R \zeta_2}{m_2} & \frac{V_R \zeta_3}{m_2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L_R}{m_3} & -\frac{L_S + V_R \zeta_3}{m_3} & \frac{V_R \zeta_4}{m_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L_S}{m_4} & -\frac{L_S + V_S \zeta_4}{m_4} & \frac{V_S \zeta_5}{m_4} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L_S}{m_5} & -\frac{L_S + V_S(1 - \zeta_5)}{m_5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix}_\delta \quad (5.111)$$

$$+ \begin{bmatrix} 0 & \frac{(y_2 - x_1)}{m_1} & \frac{(y_2 - x_1)(1 - q_F)}{m_1} & 0 \\ \frac{(x_1 - x_2)}{m_2} & \frac{(y_3 - y_2)}{m_2} & \frac{(y_3 - y_2)(1 - q_F)}{m_2} & 0 \\ \frac{(x_2 - x_3)}{m_3} & \frac{(y_4 - y_3)}{m_3} & \frac{z_F - x_3 q_F - y_3(1 - q_F)}{m_3} & \frac{F}{m_3} \\ \frac{(x_3 - x_4)}{m_4} & \frac{(y_5 - y_4)}{m_4} & \frac{(x_3 - x_4) q_F}{m_4} & 0 \\ \frac{(x_4 - x_5)}{m_5} & \frac{(x_5 - y_5)}{m_5} & \frac{(x_4 - x_5) q_F}{m_5} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ z_F \end{bmatrix}_\delta$$

$$\mathbf{y}_\delta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix}_\delta \quad (5.112)$$

La matriz de observabilidad a desarrollar es:

$$O_n = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_L \\ \mathbf{C}_L \mathbf{A}_L \\ \mathbf{C}_L \mathbf{A}_L^2 \\ \mathbf{C}_L \mathbf{A}_L^3 \\ \mathbf{C}_L \mathbf{A}_L^4 \end{bmatrix} \quad (5.113)$$

Por la estructura de las matrices involucradas, principalmente la tridiagonalidad de la matriz $\mathbf{A}_L$ era de esperarse no hubiera dependencia lineal en renglones ni columnas de O_n , y esto quedó demostrado al determinar el rango con las funciones adecuadas de MATLAB, obteniéndose rango igual a 5, que es el rango completo para O_n .

En conclusión, el modelo desarrollado es controlable y observable para las condiciones del caso de estudio y en lo general presenta una estructura que es muy favorable a estas propiedades del sistema en tanto se elijan flujos dentro de los límites físicos del equipo.

5.3.2. Observabilidad estructural en BG.

En Bond Graph un sistema es observable sí:

- Existe al menos una trayectoria causal de los elementos de almacenamiento en causalidad integral a las salidas o detectores.
- Se puede generar un Bond Graph válido en causalidad derivativa predeterminada para el sistema.

5.4. Control mediante retroalimentación de estados y ubicación de polos.

El control por retroalimentación se basa en la determinación de la diferencia entre el valor de una variables y un valor de referencia, esta diferencia se usa para generar un cambios en una variable de entrada definida con anterioridad de modo que se anule la diferencia medida.

Para el caso de la retroalimentación de estados la medición se da sobre el total de variables que definen un estado y las diferencias entre ellas y sus puntos de referencia se emplean para alterar el vector de entradas. La forma más simple de control por retroalimentación de estados es una forma análoga al control proporcional, donde el vector de entradas se obtiene de multiplicar la desviación de las variables de estado por una matriz de ganancia del proceso que funge como constante de proporcionalidad.

Desde el punto de vista de teoría de control, la retroalimentación total de estados es un método para aumentar la estabilidad del lazo cerrado mediante la reubicación de sus polos a lugares predefinidos, en su forma original expresado como predefinidos en el plano s para sistemas en que su lazo de control está dado en términos de su función de transferencia y estos fijan la ganancia.

En el dominio del tiempo no se usa la transformada de Laplace para obtener una función de transferencia, pero la definición de la matriz de ganancia tampoco es arbitraria, está definida a partir de los eigenvalores de la matriz de estados. Como los polos describen el comportamiento de los sistemas dinámicos lineales, varias de las características deseables en un lazo de control, como estabilidad, velocidad de respuesta, oscilación y sobretiro limitados, etc. están íntimamente relacionados con los valores de los polos del sistema, en lo sucesivo denotados como p . Si son reales negativos el sistema es monotónicamente estable; si uno o más de ellos son reales positivos, el sistema es monotónicamente inestable; si se tienen polos complejos conjugados con la parte real negativa, el sistema tendrá un comportamiento estable, pero oscilatorio, en tanto que si la parte real es positiva seguirá siendo oscilatorio, pero inestable. Así se podría seguir enumerando características dependientes del valor de los polos, pero lo importante es que la relación existe y que cuando cambian sus valores implica que las condiciones del sistema también lo han hecho.

Para aprovechar esta propiedad se ha desarrollado la técnica de ubicación de polos, que esencialmente usa el camino opuesto: Una vez calculados los eigenvalores de la matriz de estados del sistema (o su Jacobiano de linealización) se determinan los valores deseados en los polos y se cambian las condiciones del sistema mediante retroalimentación de estado.

La forma de hacerlo es decidir donde deben estar los polos y forzar las condiciones del sistema para obtenerlos ajustando la ganancia del control retroalimentado -a esto también se le llama forzar los polos- (Okada, 2010).

Para el modelo linealizado en espacio de estados

$$\dot{\mathbf{x}}_\delta = \mathbf{A}_L \mathbf{x}_\delta(t) + \mathbf{B}_L \mathbf{u}_\delta(t) \quad (5.114)$$

$$\mathbf{y}_\delta = \mathbf{C}_L \mathbf{x}_\delta(t) + \mathbf{D}_L \mathbf{u}_\delta(t) \quad (5.115)$$

con los polos definidos por los eigenvalores de $\mathbf{A}_L$. Si se elige el control mediante retroalimentación total de estados de modo que:

$$\mathbf{u}_\delta = \mathbf{v}_\delta + \mathbf{K} \mathbf{x}_\delta \quad (5.116)$$

donde $\mathbf{v}_\delta$ se refiere al vector de entradas de la ecuación de estados original.

$$\dot{\mathbf{x}}_\delta = \mathbf{A}_L \mathbf{x}_\delta(t) + \mathbf{B}_L (\mathbf{v}_\delta + \mathbf{K} \mathbf{x}_\delta) \quad (5.117)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_\delta = \mathbf{A}_L \mathbf{x}_\delta(t) + \mathbf{B}_L \mathbf{v}_\delta + \mathbf{B}_L \mathbf{K} \mathbf{x}_\delta \quad (5.118)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_\delta = (\mathbf{A}_L + \mathbf{B}_L \mathbf{K}) \mathbf{x}_\delta(t) + \mathbf{B}_L \mathbf{v}_\delta \quad (5.119)$$

Si se hace

$$\mathbf{A}_K = \mathbf{A}_L + \mathbf{B}_L \mathbf{K} \quad (5.120)$$

$$\dot{\mathbf{x}}_\delta = \mathbf{A}_K \mathbf{x}_\delta(t) + \mathbf{B}_L \mathbf{v}_\delta \quad (5.121)$$

Como se ha definido la posición de los polos deseados $p_{d,i}$ y estos deben ser iguales a los valores principales de $\mathbf{A}_K$

$$\det((s * \mathbf{I}) - \mathbf{A}_K) = (s - p_{d,1})(s - p_{d,2}) \cdots (s - p_{d,n}) \quad (5.122)$$

O lo que es igual

$$\det((s * \mathbf{I}) - (\mathbf{A}_L + \mathbf{B}_L \mathbf{K})) = (s - p_{d,1})(s - p_{d,2}) \cdots (s - p_{d,n}) \quad (5.123)$$

En esta expresión se conoce $\mathbf{A}_L$, $\mathbf{B}_L$ y se ha definido los valores de $p_{d,i}$, por lo que al desarrollar las expresiones para los dos lados de la igualdad se pueden obtener los elementos de la matriz $\mathbf{K}$. Se trata de un sistema de ecuaciones simultáneas lineales, cuya solución no debería dar muchos problemas, incluso en procesos con muchas etapas, pero como $\det((s * \mathbf{I}) - (\mathbf{A}_L + \mathbf{B}_L \mathbf{K}))$ genera expresiones que dependen de los coeficientes del Jacobiano de linealización y de la matriz de entradas, su forma suele ser muy complicada y solo es viable resolverlas mediante métodos numéricos, preferentemente con rutinas específicas para control.

El estudio de la aplicación específica de la RTE en Bond Graphs a columnas de destilación para configuraciones múltiples queda pendiente para trabajo posterior. De cualquier forma, se desarrolló el Bond Graph con control de este tipo para la columna de cinco etapas y se muestra en la figura 5.2.

5.5. Solución del modelo en estado transitorio para un caso de la literatura

El modelo dinámico general desarrollado es un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias y para resolverlo es necesario conocer los valores de todos los parámetros y variables de la columna y las condiciones iniciales del sistema. El caso de estudio es una columna de destilación binaria ideal de cinco etapas con la alimentación definida por completo (flujo, composición y condición de saturación), también se tiene como datos la volatilidad, el flujo de retorno y producto destilado. Con estos datos se deben evaluar todos los flujos de líquido y vapor internos de la columna, definir por completo la corriente de fondos y las composiciones de cada una de ellas. Para el modelo dinámico también se debe saber la cantidad de material almacenado en cada etapa y las condiciones iniciales del sistema.

El modelo simplificado para la columna de cinco etapas en forma explícita es:

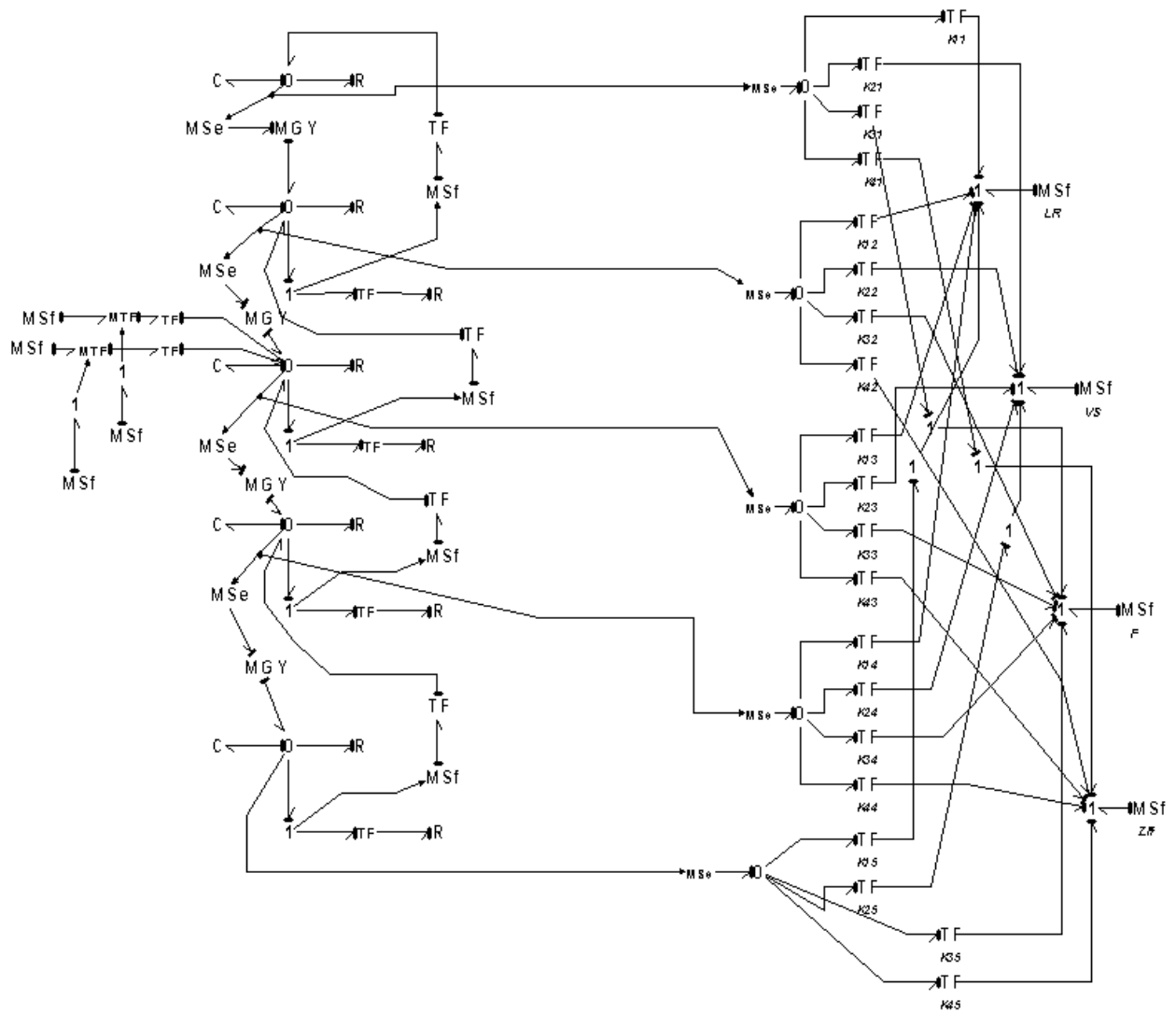


Figura 5.2: Bond Graph del sistema de control para la columna de cinco etapas mediante retroalimentación total de estados.

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{V_R}{m_1}(-x_1 + y_2) \quad (5.124)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \frac{L_R}{m_2}x_1 - \frac{L_R}{m_2}x_2 - \frac{V_R}{m_2}y_2 + \frac{V_R}{m_2}y_3 \quad (5.125)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = \frac{L_R}{m_3}x_2 - \frac{L_S}{m_3}x_3 - \frac{V_R}{m_3}y_3 + \frac{V_S}{m_3}y_4 + \frac{F}{m_3}z_F \quad (5.126)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = \frac{L_S}{m_4}x_3 - \frac{L_S}{m_4}x_4 - \frac{V_S}{m_4}y_4 + \frac{V_S}{m_4}y_5 \quad (5.127)$$

$$\frac{dx_5}{dt} = \frac{L_S}{m_5}x_4 - \frac{B}{m_5}x_5 - \frac{V_S}{m_5}y_5 \quad (5.128)$$

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (5.129)$$

Tomando los datos del caso publicado por Skogestad y Morari [30]: alimentación $F = 1$ mol/min, fracción de componente ligero en la alimentación $z_F = 0.5$, volatilidad $\alpha = 1.5$, reflujo inicial de destilado a la torre $L_D = 2.706$ mol/min, flujo producto destilado $D = 0.5$ mol/min y fracción de líquido saturado en la alimentación $q_F = 1.0$.

Por otro lado, de condiciones de diseño se sabe que se tiene una retención de 5.0 mol entre el condensador total y el tanque acumulador, 5.0 mol entre el fondo de la columna y el rehervidor y cada etapa tiene un plato con rebosadero con capacidad para 0.5 mol. Las condiciones iniciales son las fracciones molares de componente ligero en el líquido de cada etapa obtenidas para el estado estable.

Sustituyendo $F = 1$ mol/min, $z_F = 0.5$, $\alpha = 1.5$, $L_D = 2.706$ mol/min, $D = 0.5$ mol/min y $q_F = 1.0$; $m_1 = 5$ mol, $m_2 = m_3 = m_4 = 0.5$ mol y $m_5 = 5$ mol y resolviendo los balances correspondientes, se tiene del balance global (5.149):

$$B = F - D = 1 - 0.5 = 0.5 \text{ mol/ min} \quad (5.130)$$

Para la zona de rectificación de (3.39)

$$L_R = L_D = 2.706 \text{ mol/ min} \quad (5.131)$$

Para la zona de agotamiento de (3.41)

$$L_S = L_R + Fq_F = 3.706 \text{ mol/ min} \quad (5.132)$$

El flujo de vapor en la sección de agotamiento (3.42)

$$V_R = V_{RB} = L_S - B = 3.206 \text{ mol/ min} \quad (5.133)$$

y para la sección de rectificación (3.40)

$$V_s = V_R + F(1 - q_F) = 3.206 \text{ mol/ min} \quad (5.134)$$

El sistema se transforma entonces en:

$$\frac{dx_1}{dt} = 0.6412(-x_1 + y_2) \quad (5.135)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = 5.412x_1 - 5.412x_2 - 6.412y_2 + 6.412y_3 \quad (5.136)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = 5.412x_2 - 7.412x_3 - 6.412y_3 + 6.412y_4 + 0.5 \quad (5.137)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = 7.412x_3 - 7.412x_4 - 6.412y_4 + 6.412y_5 \quad (5.138)$$

$$\frac{dx_5}{dt} = 0.7412x_4 - 0.1x_5 - 0.6412y_5 \quad (5.139)$$

$$y_2 = \frac{1.5x_2}{1 + 0.5x_2} \quad (5.140)$$

$$y_3 = \frac{1.5x_3}{1 + 0.5x_3} \quad (5.141)$$

$$y_4 = \frac{1.5x_4}{1 + 0.5x_4} \quad (5.142)$$

$$y_5 = \frac{1.5x_5}{1 + 0.5x_5} \quad (5.143)$$

En tanto no haya una perturbación, la solución es $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0)$ pero lo que se pretende es precisamente evaluar su comportamiento ante cambios diversos y el procedimiento habitual es resolver el sistema de EDO. Las perturbaciones se generan mediante cambios en escalón para cada variable de interés a tiempos predefinidos -manteniendo el resto de las entradas en sus valores del estado estable- para después pasar a cambios simultáneos de dos o más variables. Si este procedimiento se aplica para el análisis del sistema con fines de control, se requiere una enorme cantidad de simulaciones para determinar las zonas de inestabilidad, saturación, interacciones de las entradas y otras limitaciones del modelo, simplemente porque al tratarse de análogos de puntos de inflexión o discontinuidades en la solución numérica de un modelo multivariable, ubicarlas requiere resolver el modelo con pequeños incrementos en cada variable de control hasta alcanzar las posibles discontinuidades y una vez ubicados los límites para cada entrada, repetir el procedimiento con todos los posibles pares de variables de control para determinar discontinuidades por interacción entre ellas.

En la teoría clásica de control se ha usado la linealización de las ecuaciones diferenciales y solución mediante transformadas de Laplace, pero en este trabajo se aplica linealización mediante Jacobianos para mantener el modelo en el dominio del tiempo.

5.6. Simulación del modelo no lineal en estado transitorio.

En un trabajo previo se analizó la respuesta del sistema ante los cambios en las entradas con escalones de diferente magnitud y no se repetirán sus resultados, únicamente se estudia

el caso donde se hacen variar todas las entradas en secuencia con incremento de un 10 % en cada una.

El vector de entradas en el estado estable es:

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ z_F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.706 \\ 3.206 \\ 1 \\ 0.5 \end{bmatrix} \quad (5.144)$$

Las desviaciones introducidas en las variables de entrada:

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ z_F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.2706 \\ 0.3206 \\ 0.1 \\ 0.05 \end{bmatrix} \quad (5.145)$$

y los tiempos (en minutos) a que se presentan los cambios en cada entrada son

$$\begin{bmatrix} t_{L_R,\delta} \\ t_{V_S,\delta} \\ t_{F,\delta} \\ t_{z_F,\delta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 30 \\ 40 \\ 20 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (5.146)$$

La secuencia de perturbaciones en las variables de entrada es primero alterando el flujo de alimentación, después la composición de alimentación, seguida del reflujo de destilado y finalmente el retorno de fondos al rehervidor. Aunque se podrían introducir en cualquier momento la secuencia se maneja así porque es más frecuente que las dos primeras sean perturbaciones externas y las dos últimas se alteren para compensar su efecto.

El objetivo de esta simulación es tener un marco de referencia del impacto relativo de cada entrada en el comportamiento del sistema. Todos los cambios son de signo positivo su secuencia es la misma que en las simulaciones individuales: composición de la alimentación, flujo de alimentación, reflujo de destilado y retorno de fondos.

La composición de la alimentación es casi siempre una perturbación y está definida por procesos aguas arriba de la destilación, pero los flujos de alimentación y reflujo se regulan mediante válvulas de control.

5.7. Simulación del modelo de la columna de destilación en el dominio físico mediante Bond Graph

Se simularon varios casos con el modelo en Bond Graph de la columna, pero aquí se tratan dos de ellos, uno es el caso estudiado previamente y un segundo sistema tomado de la literatura; ambos sistemas son casos clásicos, adaptados y escalados para columnas de cinco etapas. Para la simulación en el entorno de Bond Graph se usó el programa 20sim.

Condiciones de operación para la columna de destilación.

Número de etapas, n	5
Alimentación, F	1 $kmol$ /mín
m_1	5 $kmol$
m_2	0.5 $kmol$
m_3	0.5 $kmol$
m_4	0.5 $kmol$
m_5	5 $kmol$
z_F	0.5
L_R	2.706 $kmol$ /mín
V_S	3.206 $kmol$ /mín
B	0.5 $kmol$ /mín
V_R	3.206 $kmol$ /mín
α	1.5

Tabla 5.1: Condiciones del sistema para el primer caso de estudio

Variable de estado.

$q_1 = 0.669271$
$q_2 = 0.574302$
$q_3 = 0.488711$
$q_4 = 0.412885$
$q_5 = 0.330728$

Tabla 5.2: Valores de las variables en el estado estacionario

5.7.1. Primer caso de estudio

La columna de destilación simulada trata con una mezcla binaria de baja volatilidad relativa. Las condiciones de operación al inicio del proceso están dadas en la tabla 5.1. Este caso fue tomado de publicaciones de Bequette [66] y Skogestad [30].

Las variables de entrada al sistema están definidas por L_R (reflujo de destilado), V_S (reflujo de fondos al rehervidor), z_F (fracción mol del componente ligero en la alimentación) y F (flujo molar de la corriente de alimentación), las condiciones iniciales están dadas en la tabla 5.2.

Los resultados de la simulación se obtienen dando incrementos de un 10 % respecto a su valor inicial, y el vector de entradas perturbadas está dado por:

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.1 * L_R \\ 0.1 * V_S \\ 0.1 * z_F \\ 0.1 * F \end{bmatrix} \quad (5.147)$$

y los tiempos de activación de esos cambios se describen en el vector:

$$\begin{bmatrix} t_{L_R} \\ t_{V_S} \\ t_{z_F} \\ t_F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 90 \\ 140 \\ 50 \\ 10 \end{bmatrix} \text{ minutos} \quad (5.148)$$

Estos periodos de tiempo se definieron con base en el tiempo requerido para la estabilización de la composición del componente ligero en el destilado y los tiempos de activación de las diferentes entradas. La secuencia de los cambios en las entradas se eligió para introducir primero los cambios que pueden ser causados por variaciones externas (Flujo de alimentación y composición de la misma) y a continuación los de aquellas entradas que pueden usarse con mejores resultados para controlar las salidas.

Las variables críticas en el proceso son las concentraciones del componente ligero tanto en el destilado como en la corriente de fondos, dado que son las que determinan el grado de separación obtenido.

El comportamiento dinámico del componente ligero q_1 puede verse en la figura 5.3. Después de diez minutos de operación en estado estable el flujo de alimentación se incrementa en un diez por ciento, con el correspondiente incremento en la concentración del componente ligero en el destilado. De acuerdo con el gráfico la concentración del ligero en el destilado se incrementa de $q_1 = 0.6693$ a $t = 0$ hasta $q_1 = 0.7154$ en $t = 50$ min, que viene a ser un incremento del 6.9% con un 10% contra el de 10% de la entrada. El siguiente cambio es el de la composición de la alimentación, que también provoca un incremento en la concentración de ligero, ahora de $q_1 = 0.7274$ en $t = 90$ min, y representa un incremento del 1.7% para el correspondiente 10% de la entrada.

El incremento de reflujo de destilado a la columna en $t = 90$ min genera un incremento de la fracción mol de ligero en el destilado de $q_1 = 0.7850$ a $t = 140$ min, el cuál representa un incremento de 7.9% debido al 10% de aumento en esa entrada. Finalmente el incremento del reflujo de fondos al rehervidor produce un decremento de la concentración de ligeros a todo lo largo de las etapas de separación, y lógicamente en el destilado, de forma que el cambio del 10% en el reflujo de fondos se refleja en un cambio de $q_1 = 0.7172$, es decir un 8.6%, y representa un efecto inverso respecto al de las otras variables de control.

Usando los cambios en las entradas al sistema dadas en (5.147) y sujetos a la distribución de los tiempos de activación especificados en (5.148), el comportamiento dinámico de la concentración de ligero en los fondos q_5 se muestra en la figura 5.4.

De acuerdo con la figura 5.4, las concentraciones son menores, pero se aprecia claramente que la evolución de los cambios es similar a los de q_1 . Un aspecto a notar en la simulación del modelo de la columna en Bond Graph, es que puede obtenerse el potencial químico, así la evolución del potencial químico en las etapas 3,4 y 5 puede verse en la figura 5.5.

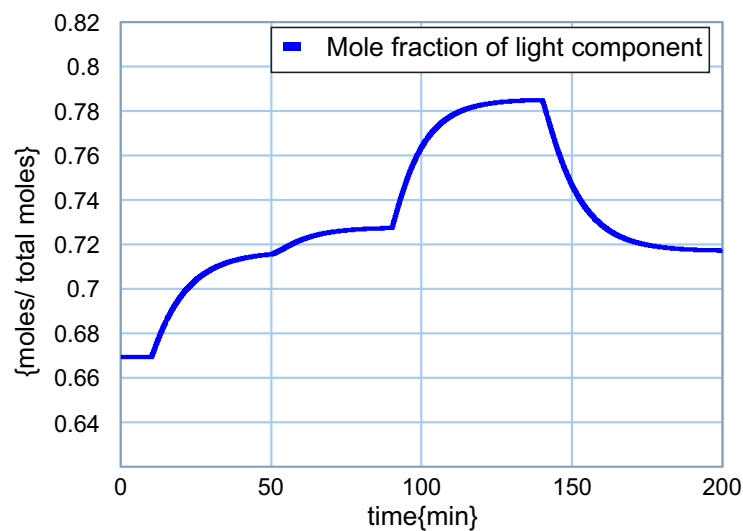


Figura 5.3: Comportamiento de la concentración de componente ligero en el destilado q_1

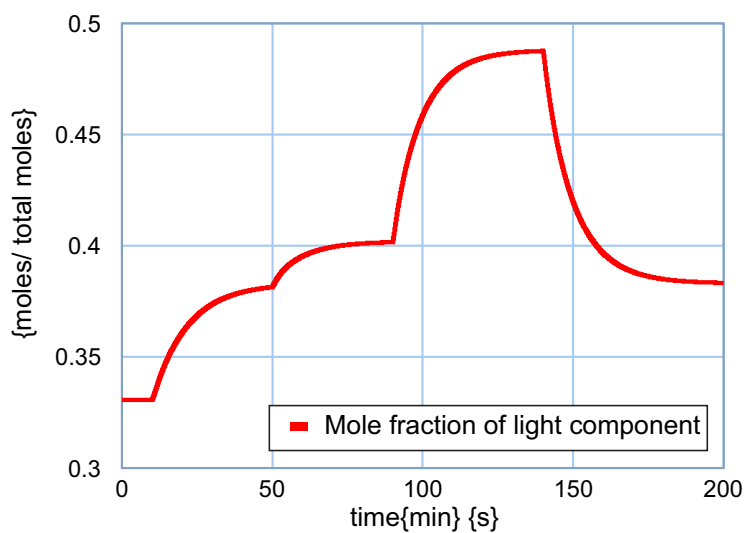


Figura 5.4: Concentración de ligero en los fondos q_5

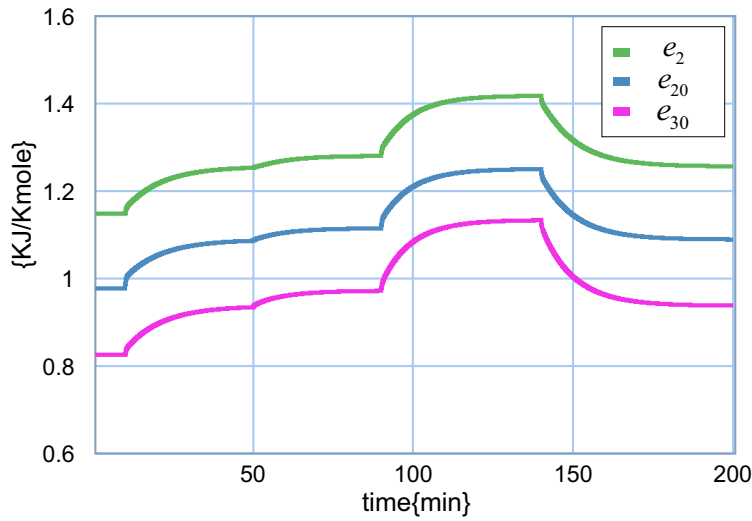


Figura 5.5: Potencial químico en las etapas 3,4 y 5

5.7.2. Segundo caso de estudio

A la columna de considerada en este caso se le alimenta una mezcla binaria de alta volatilidad relativa que permite una fácil separación de la mezcla sin que sea necesario un mayor número de etapas. Las condiciones nominales de los datos para este equipo están dados en la tabla 5.3 [61].

Los valores para el sistema en el estado estable se describen en la tabla 5.4.

Los cambios relativos en las entradas al sistema son los mismos que en el primer caso, con incrementos del 10 % respecto a sus valores nominales definidos por:

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.9776 \\ 1.5886 \\ 0.6 \\ 1 \end{bmatrix}$$

los tiempos de activación para cada entrada se definen por (5.148).

El desempeño de la concentración del componente ligero en el destilado q_1 se ilustra en la figura 5.6.

De acuerdo con la figura 5.6, en el rango de tiempo de 10 a 50 min, la alimentación es más rica en componente ligero e introduce una mayor concentración de este a la columna, y en consecuencia en el destilado, subiendo de $q_1 = 0.8472$ a $q_2 = 0.8903$ en $t = 50$ min con un 5.1 % de incremento debido al 10 % en el cambio de la entrada. Enseguida se da el aumento en la composición de la alimentación y la fracción mol de ligero en el destilado tiene el correspondiente aumento a $q_1 = 0.9043$ en $t = 90$ min, con un incremento del 1.6 % para el 10 % de la entrada. Con el 10 % de aumento en el reflujo de destilado la fracción mol del ligero en el destilado se eleva hasta $q_1 = 0.9240$ en $t = 140$ min, que viene a ser un incremento porcentual de 2.2 %. Por último un 10 % de aumento en el retorno de fondos al rehervidor

Condiciones de operación.	
Número de etapas, n	5
Alimentación, F	1 $kmol/mín$
m_1	5 $kmol$
m_2	0.5 $kmol$
m_3	0.5 $kmol$
m_4	0.5 $kmol$
m_5	5 $kmol$
z_F	0.6
L_R	0.9776 $kmol/mín$
V_S	1.5886 $kmol/mín$
B	0.389 $kmol/mín$
V_R	1.5886 $mol/mín$
α	2.6

Tabla 5.3: Condiciones del sistema para el segundo caso de estudio

Variable de estado.
$q_1 = 0.8472$
$q_2 = 0.6807$
$q_3 = 0.5288$
$q_4 = 0.3170$
$q_5 = 0.2118$

Tabla 5.4: Valores de las variables en el estado estacionario

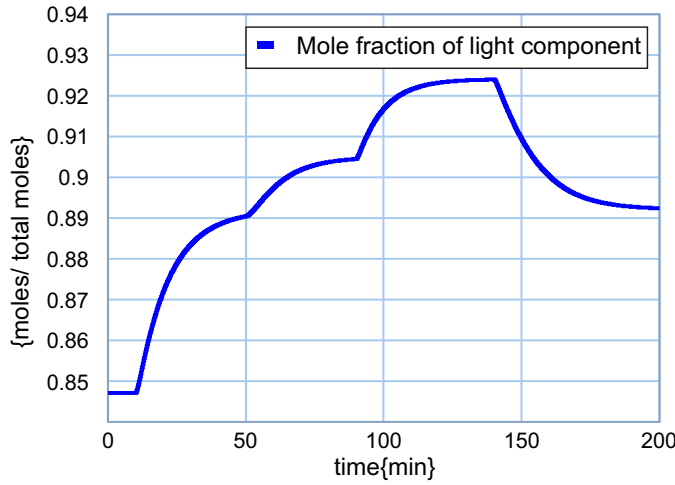


Figura 5.6: Respuesta del comportamiento del componente ligero en el destilado

produce un descenso en la concentración de ligero encada una de las etapas, así como en el destilado a 0.8924 en $t = 200$ min, que representa un porcentaje del 3.4 %.

El comportamiento de la composición en la corriente de fondos se muestra en la figura 5.7 y se puede ver que tiene un desempeño similar al de la composición en el destilado, pero con concentraciones marcadamente menores, tal como era de esperarse.

El comportamiento del potencial químico en las etapas 3, 4 y 5 pueden verse en la figura 5.8.

La respuesta del potencial químico nuevamente presenta un perfil semejante al de las concentraciones de componente ligero dado que depende de su concentración. Desde el punto de vista de Bond Graph la obtención de los valores de los potenciales químicos representa la detección de los esfuerzos en las uniones 0 conectadas a $C_1 : m_1$, $C_2 : m_2$ y $C_3 : m_3$. Así, el uso del modelo en Bond Graph de la columna de destilación permite obtener variables adicionales, incluyendo la potencia en el equilibrio de fases. Más aún, la influencia sobre ciertos elementos en la medición de algunas variables en el Bond Graph puede obtenerse en forma clara, simple y directa mediante la observación de las trayectorias causales del modelo [82].

5.8. Significado físico y valores de las variables y agrupaciones de variables en el modelo para la columna de cinco etapas

Para una columna con nc componentes, en la etapa de alimentación el balance de masa global está dado por:

$$\frac{dn_F}{dt} = L_{F-1} + V_{F+1} + F - L_F + V_F \quad (5.149)$$

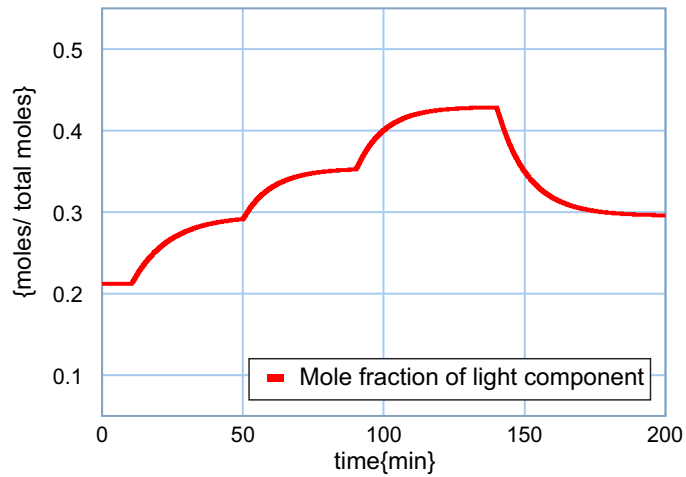


Figura 5.7: Respuesta de la composición de ligeros en la corriente de fondos

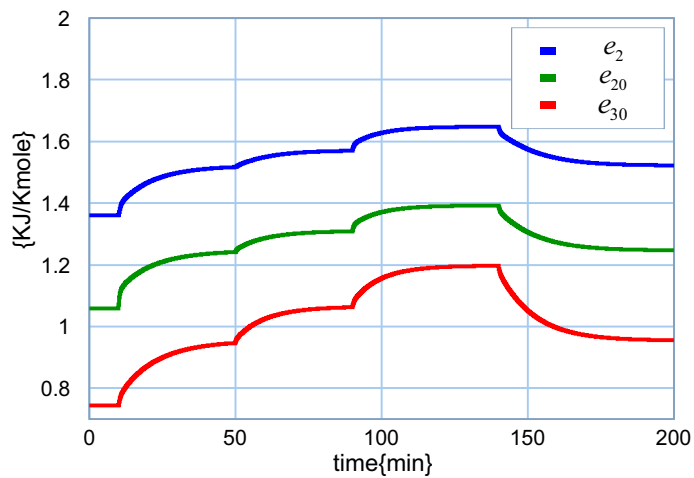


Figura 5.8: Comportamiento del potencial químico en las etapas 3, 4 y 5

Reiterando que

- n_F son los moles totales en la etapa de alimentación (F), es decir la cantidad total de materia en la etapa, expresada en moles.
- F es el flujo molar de la corriente de alimentación
- V y L son los flujos molares de vapor y líquido entre etapas.

La numeración de las etapas de equilibrio comienza en la parte superior de la columna, donde el condensador y su tanque acumulador son la número 1. En la ecuación anterior los subíndices $h - 1$, h y $h + 1$ indican la etapa de donde proviene la corriente, así el líquido y vapor saliendo de la etapa de alimentación tienen el mismo subíndice h mientras que el de la corriente de vapor entrando viene de la etapa justo debajo de ella y debe ser $h + 1$.

El balance para cada componente j se expresa como:

$$\frac{dn_{F,j}}{dt} = L_{F-1}x_{F-1,j} + V_{F+1}y_{F+1,j} + Fz_{F,j} - L_Fx_{F,j} - V_Fy_{F,j} \quad (5.150)$$

$$\frac{dx_{F,j}n_F}{dt} = L_{F-1}x_{F-1,j} + V_{F+1}y_{F+1,j} + Fz_{F,j} - L_Fx_{F,j} - V_Fy_{F,j} \quad (5.151)$$

En estas expresiones

- n_F son los moles retenidos en la etapa, y su derivada respecto al tiempo $\frac{dn_F}{dt}$ es el término de acumulación.
- $n_{F,j}$ son los moles correspondiente al componente j y $\frac{dx_{F,j}n_F}{dt}$ su acumulación en la etapa
- $x_{i,j}$ es la fracción mol de componente j en el líquido saliendo de la etapa i .
- $y_{i,j}$ es la fracción mol de componente j en el vapor saliendo de la etapa i .
- $z_{F,j}$ es la fracción mol del componente j en la corriente de alimentación.

Se tomó como ejemplo el balance de la etapa de alimentación porque en él aparecen casi todas las variables relevantes del sistema, pero la estructura es la misma para todas las etapas, solo cambiando la alimentación por salidas en el condensador y reboiler.

Entre las consideraciones de modelado se definió que:

- q_F determina el estado de fase de la alimentación, tomando valores entre 0 para el vapor saturado y 1 para el líquido saturado.
- Los flujos y fracciones son en base molar.
- No hay retención de vapor en ninguna etapa, así que la acumulación solo podría darse en fase líquida.

- Cada etapa está formada por un plato con derrame por rebosadero, por lo tanto el volumen y número de moles en el líquido son constantes.
- Moles totales de líquido en el condensador y rehervidor constantes.

Como la retención de líquido en cada etapa es constante, n_i se puede sacar de la derivada y se obtiene

$$n_h \frac{dx_{h,j}}{dt} = L_{h-1}x_{h-1,j} + V_{h+1}y_{h+1,j} + Fz_{F,j} - L_hx_{h,j} - V_hy_{h,j} \quad (5.152)$$

Esta forma se asocia directamente con las variables de flujo generalizado en BG, aunque para un Bond Graph verdadero también debe usarse una forma adecuada para la variable de esfuerzo (potencial químico).

Como el material retenido en cada etapa es constante n_h se puede pasar dividiendo al lado derecho de la ecuación para dejar la misma ecuación expresada por mol en la etapa, o base molar

$$\frac{dx_{h,j}}{dt} = \frac{L_{h-1}}{n_h}x_{h-1,j} + \frac{V_{h+1}}{n_h}y_{h+1,j} + \frac{F}{n_h}z_{F,j} - \frac{L_h}{n_h}x_{h,j} - \frac{V_h}{n_h}y_{h,j} \quad (5.153)$$

Podemos llamar a esta forma del sistema "Modelo en base a fracciones molares." "modelo en fracciones" a la forma de la ecuación (5.152) como "Modelo basado en flujos molares." "Modelo en flujos".

En ambos casos aplica la condición de no retención de vapor y número de moles de líquido constante en cada etapa, así el flujo de vapor y líquido entre etapas en las secciones de rectificación y agotamiento es constante, y la diferencia en los flujos entre rectificación y agotamiento debido a la condición de saturación ($q_F = 1 - \text{calidad}$) de la corriente alimentada. Para cualquier etapa i diferente de la de alimentación:

$$V_i = V_{i+1} = V_{i-1} \quad (5.154)$$

$$L_i = L_{i+1} = L_{i-1} \quad (5.155)$$

Estas son consideraciones generales aplicables a cualquier columna, en el modelo desarrollado se trata específicamente de una columna de cinco etapas con dos componentes (destilación binaria).

5.8.1. Modelo expresado en fracciones molares para la columna de cinco etapas

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{V_R}{m_1}(-x_1 + y_2) \quad (5.156)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \frac{L_R}{m_2}x_1 - \frac{L_R}{m_2}x_2 - \frac{V_R}{m_2}y_2 + \frac{V_R}{m_2}y_3 \quad (5.157)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = \frac{L_R}{m_3}x_2 - \frac{L_S}{m_3}x_3 - \frac{V_R}{m_3}y_3 + \frac{V_S}{m_3}y_4 + \frac{F}{m_3}z_F \quad (5.158)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = \frac{L_S}{m_4}x_3 - \frac{L_S}{m_4}x_4 - \frac{V_S}{m_4}y_4 + \frac{V_S}{m_4}y_5 \quad (5.159)$$

$$\frac{dx_5}{dt} = \frac{L_S}{m_5}x_4 - \frac{B}{m_5}x_5 - \frac{V_S}{m_5}y_5 \quad (5.160)$$

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (5.161)$$

En este sistema de ecuaciones

- m_1 es la cantidad de moles de líquido en el condensador.
- m_2 a m_4 moles de líquido en los platos intermedios y por diseño iguales entre si.
- m_5 moles de líquido en el rehervidor.
- x_1 a x_5 fracciones molares de componente ligero en el líquido de las etapas 1 a 5.
- y_1 a y_5 fracciones molares de componente ligero en el vapor saliendo de etapas 1 a 5.
- F es el flujo molar de alimentación a la columna.
- L_S y L_R son los flujos molares de líquido bajando entre las etapas de la sección de agotamiento y rectificación, respectivamente.
- V_S y V_R son los flujos molares de vapor subiendo por las secciones de agotamiento y rectificación, respectivamente.
- B es el flujo molar de producto de fondos saliendo de la columna.
- α es la volatilidad relativa.

L_R y V_S son iguales a los reflujo de destilado y de fondos a la columna, respectivamente.

Las ecuaciones del sistema anterior están asociadas a las ecuaciones de balance para las corrientes de líquido y vapor moviéndose entre las etapas, así como los balances totales para el equipo, el condensador y el rehervidor

5.8.2. Ecuaciones de balance para las corrientes

El balance global para la columna es

$$F = D + B \quad (5.162)$$

En el estado estacionario y teniendo como datos los flujos de alimentación (F), destilado (D) y retorno de destilado a la columna (L_D), la corriente de fondos se obtiene por diferencia.

$$B = F - D \quad (5.163)$$

El flujo de vapor subiendo por la sección de rectificación (V_R) puede obtener del balance en el condensador

$$V_R = L_D + D \quad (5.164a)$$

o del balance de vapor en la etapa de alimentación, pues el vapor que sube por la sección de rectificación es el mismo que sale de esa etapa

$$V_R = V_S + F(1 - q_F) \quad (5.165)$$

En la zona de agotamiento, el flujo de líquido bajando por ella es igual al que sale de la etapa de alimentación

$$L_S = L_R + Fq_F \quad (5.166)$$

El vapor en esa sección es el mismo que se genera en el rehervidor

$$V_S = V_{RB} \quad (5.167)$$

Y el flujo de líquido bajando se puede obtener también del balance de materiales en el rehervidor

$$L_S = B + V_{RB} \quad (5.168)$$

O lo que es igual

$$L_S = B + V_S \quad (5.169)$$

Estas ecuaciones permiten calcular los balances en el estado estacionario teniendo como datos conocidos los flujos de alimentación (F), destilado (D) y retorno de destilado a la columna (L_D).

Pero al evaluar el sistema en estado transitorio, si se combinan las ecuaciones 5.162, 5.164a, 5.169 y 5.165 se obtiene

$$D = V_S - L_R \quad (5.170)$$

y

$$B = L_R + Fq_F - V_S \quad (5.171)$$

En consecuencia ambas son variables de pendientes durante la evaluación del sistema dinámico

Calculo del modelo en fracciones molares del caso de estudio

Tomando los mismos valores usados para la simulación para el estado estable:

- Alimentación $F = 1$ kmol/min
- Fracción de componente ligero en la alimentación $z_F = 0.5$
- Volatilidad relativa $\alpha = 1.5$
- Reflujo inicial de destilado a la torre $L_D = 2.706$ kmol/min
- Flujo producto destilado $D = 0.5$ kmol/min
- Fracción de líquido saturado en la alimentación $q_F = 1.0$.

Por condiciones de diseño se sabe que hay una retención de 5.0 kmol entre el condensador total y el tanque acumulador (en conjunto forman la primera etapa), 5.0 kmol entre el fondo de la columna y el rehervidor (juntos forman la última etapa, quinta en este sistema) y cada etapa de equilibrio tiene un plato con rebosadero con capacidad para 0.5 kmol. Las condiciones iniciales son las fracciones molares de componente ligero en el líquido de cada etapa obtenidas para el estado estacionario.

Si se sustituye $F = 1$ kmol/min, $z_F = 0.5$, $\alpha = 1.5$, $L_D = 2.706$ kmol/min, $D = 0.5$ kmol/min y $q_F = 1.0$; $m_1 = 5$ kmol, $m_2 = m_3 = m_4 = 0.5$ kmol y $m_5 = 5$ kmol en los balances global, por sección y etapa.

Balance global:

$$F = D + B \quad (5.172)$$

$$B = F - D \quad (5.173)$$

$$B = 1 - 0.5 \text{ kmol/mín} = 0.5 \text{ kmol/mín}$$

Zona de rectificación

$$L_R = L_D \quad (5.174)$$

$$L_R = 2.706 \text{ kmol/mín}$$

Zona de agotamiento

$$L_S = L_R + Fq_F \quad (5.175)$$

$$L_S = 3.706 \text{ kmol/ mín} \quad (5.176)$$

Vapor en la sección de agotamiento

En el rehervidor

$$L_S = B + V_{RB} \quad (5.177)$$

$$V_S = V_{RB} = L_S - B \quad (5.178)$$

$$V_S = 3.206 \text{ kmol/ mín}$$

Vapor en la sección de rectificación

$$V_R = V_S + F(1 - q_F) \quad (5.179)$$

$$V_S = 3.206 \text{ kmol/ mín}$$

Las condiciones iniciales para las variables de estado, que en esta representación son los valores de las fracciones molares del componente ligero en el líquido de cada etapa para el estado estacionario son

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0.6693 \\ 0.5743 \\ 0.4887 \\ 0.4129 \\ 0.3307 \end{bmatrix} \quad (5.180)$$

con sus composiciones correspondientes de la fase vapor

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0.7522 \\ 0.6693 \\ 0.5891 \\ 0.5133 \\ 0.4225 \end{bmatrix} \quad (5.181)$$

Este último vector no contiene estados, sino las soluciones de las fracciones correspondientes a la ecuación complementaria

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (5.182)$$

El vector de moles almacenados en cada etapa es

$$\mathbf{m} = \begin{bmatrix} 5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 5 \end{bmatrix} \quad (5.183)$$

recordando que m_1 y m_5 son los moles en el condensador y rehervidor respectivamente.

Las variables de entrada al sistema son L_R , V_S , z_F y F , la condición inicial de cada una es su valor en el estado estacionario, así el vector de condiciones iniciales es:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.706 \\ 3.206 \\ 0.5 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.184)$$

Con estos valores, en tanto no haya una perturbación, la solución es $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0)$.

Cálculo de algunos puntos del sistema en estado inestable para el caso de estudio.

Las variables de entrada al sistema son L_R , V_S , z_F y F , la condición inicial de cada una es su valor en el estado estacionario, así el vector de condiciones iniciales es:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix} \quad (5.185)$$

Para simular el modelo en estado transitorio las perturbaciones introducidas son incrementos en escalón del 10 % de su valor en el estado estable, con un evento para cada entrada

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.1 * L_R \\ 0.1 * V_S \\ 0.1 * z_F \\ 0.1 * F \end{bmatrix} \quad (5.186)$$

con separaciones que van de 40 a 50 minutos entre una y otra perturbación y se capturan en el siguiente vector de tiempos, estos están dados en minutos

$$\begin{bmatrix} t_{L_R} \\ t_{V_S} \\ t_z \\ t_F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 90 \\ 140 \\ 50 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (5.187)$$

Estos tiempos se determinan de acuerdo con el tiempo necesario para la estabilización de la concentración del componente ligero en el mismo después de cada cambio en las entradas para el caso de estudio inicial. La secuencia de perturbaciones en las entradas se eligió para

introducir primero los cambios que pueden ser causados por variaciones externas (flujo y composición de la alimentación) y después las que pueden ser usadas con mayor efecto en el control de las salidas, por ello se perturba en primer lugar el flujo de alimentación, en la composición de alimentación seguida del reflujo de destilado y finalmente el retorno de fondos al rehervidor.

Las variables críticas de proceso son las concentraciones del componente ligero en el líquido en las corrientes de destilado y fondos, pues son las que determinan el grado de separación logrado.

La magnitud de los incrementos se eligió buscando que, siendo valores realistas, su magnitud relativa mostrara el nivel de impacto de cada variable de entrada respecto a las demás.

Para simular el modelo en estado inestable las perturbaciones introducidas son incrementos en escalón del 10 % de su valor en el estado estable, con un evento para cada entrada

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.2706 \\ 0.3206 \\ 0.05 \\ 0.1 \end{bmatrix} \quad (5.188)$$

con separaciones de diez minutos entre ellos. El momento en que se da cada incrementos está dado en el vector de tiempos, dados en minutos

$$\begin{bmatrix} t_{L_R} \\ t_{V_S} \\ t_z \\ t_F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 90 \\ 140 \\ 50 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (5.189)$$

En esta secuencia de modificación en las entradas primero cambia el flujo de alimentación, después la composición de alimentación seguida del reflujo de destilado y finalmente el retorno de fondos al rehervidor.

Cuando $t \geq 140$ mín todas las entradas variables de entrada han cambiado y

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_{t \geq 140} = \begin{bmatrix} 2.9766 \\ 3.5266 \\ 0.55 \\ 1.1 \end{bmatrix} \quad (5.190)$$

Los valores de x_1 en los puntos de incremento de los reflujo de destilado y fondos a $t = 90$ mín, $t = 140$ mín y $t = 200$ mín

Para el cálculo de las condiciones en estado estacionario se tomaron los flujos de alimentación, destilado y reflujo de destilado como datos para calcular los flujos restantes, pero para la determinación de flujos molares en el estado transitorio no se cuenta con valores de flujo de destilado, que han sido reemplazados por el retorno de fondos al rehervidor, por lo que los flujos de salida de destilado y fondos son variables de pendientes.

Las ecuaciones relevantes son 5.170 y 5.171

t mín	x_1
90	0.7273
140	0.7850
200	0.7172

Tabla 5.5: Valores de x_1 en los puntos de incremento de los reflujo de destilado y fondos

En $t < 90$, justo antes del incremento al reflujo de destilado

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_{t < 90} = \begin{bmatrix} 2.706 \\ 3.206 \\ 0.55 \\ 1.1 \end{bmatrix} \quad (5.191)$$

$$D = V_S - L_R \quad (5.192)$$

$$D = 3.206 - 2.706 = 0.5 \quad (5.193)$$

$$B = L_R + Fq_F - V_S \quad (5.194)$$

$$B = 2.706 + 1.1 - 3.206 = 0.6 \quad (5.195)$$

Al darse este cambio durante la operación de la columna el incremento en el flujo de alimentación sin modificarse los flujos de retorno y dado que F entra como líquido saturado el flujo de vapor a condensar es el mismo y el incremento de alimentación provoca un aumento instantáneo en el flujo de fondos de salida.

En $t = 90$, se da el incremento en el reflujo de destilado

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_{t=90} = \begin{bmatrix} 2.9766 \\ 3.206 \\ 0.55 \\ 1.1 \end{bmatrix} \quad (5.196)$$

Al aumentar el reflujo de destilado, automáticamente se reduce el de destilado de salida, pues ambos provienen del flujo de líquido obtenido en el condensador.

$$D = V_S - L_R \quad (5.197)$$

$$D = 3.206 - 2.9766 = 0.2294 \quad (5.198)$$

Nuevamente, al estarse retornando líquido al equipo aumenta el flujo de la corriente de fondos de salida.

$$B = L_R + Fq_F - V_S \quad (5.199)$$

$$B = 2.706 + 1.1 - 3.206 = 0.8706 \quad (5.200)$$

Se puede decir que, para alcanzar $x_1 = 0.7850$ es necesario incrementar el flujo de salida de fondos hasta casi un 80 % del flujo de entrada.

Finalmente, con el incremento en el reflujo de fondos al rehervidor en $t = 140$

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_{t=140} = \begin{bmatrix} 2.9766 \\ 3.5266 \\ 0.55 \\ 1.1 \end{bmatrix} \quad (5.201)$$

$$D = V_S - L_R \quad (5.202)$$

$$D = 3.5266 - 2.9766 = 0.55 \quad (5.203)$$

$$B = L_R + Fq_F - V_S \quad (5.204)$$

$$B = 2.706 + 1.1 - 3.5266 = 0.2794 \quad (5.205)$$

El aumento del flujo de retorno al rehervidor representa la correspondiente disminución en la corriente de fondos saliendo de la columna, con lo que al acercarse a $t = 200$ mín la concentración de ligero en el destilado baja a $x_1 = 0.7172$ por efecto del aumento en la cantidad del componente pesado dentro del equipo.

Comparando las concentraciones del componente ligero al comienzo y final de la simulación:

$$\mathbf{x}_{t=0} = \begin{bmatrix} 0.6693 \\ 0.5743 \\ 0.4887 \\ 0.4129 \\ 0.3307 \end{bmatrix}; \mathbf{x}_{t=200} = \begin{bmatrix} 0.7172 \\ 0.6284 \\ 0.5446 \\ 0.4692 \\ 0.3833 \end{bmatrix} \quad (5.206)$$

5.8.3. Casos de estudio adicionales para el modelo expresado en fracciones

Los ejemplos mostrados son adaptaciones de casos de la literatura normalizados a un flujo de alimentación como líquido saturado ($q_F = 1$) de 1 kmol/min. Los ejemplos B y C están tomados de Seader, J.D. ; Henley, E.J.; Roper, D. K., Separation Process Principles with Applications third Edition (2010). D y E de Skogestad, S. y Morari, M., Understanding the dynamic Behavior of Distillation Columns. Ind. Chem. Eng. Res. Vol. 27 No. 10, 1988.

	F	z_F	α	D/F	L_R/F
B	1	0.6	2.6	0.611	0.9776
C	1	0.46	2.52	0.6	1.329
D	1	0.2	5	0.158	0.226
E	1	0.65	1.12	0.614	11.862

Tabla 5.6: Comparación de datos para las condiciones de operación de los diferentes casos estudiados

Caso B

Si se sustituye $F = 1$ kmol/min, $z_F = 0.6$, $\alpha = 2.6$, $L_D = 0.9776$ kmol/min, $D = 0.611$ kmol/min y $q_F = 1.0$; $m_1 = 5$ kmol, $m_2 = m_3 = m_4 = 0.5$ kmol y $m_5 = 5$ kmol en los balances global, por sección y etapa

$$B = F - D \quad (5.207)$$

$$B = 1 - 0.611 \text{ kmol/mín} = 0.389 \text{ kmol/mín}$$

$$L_R = 0.9776 \text{ kmol/mín}$$

$$L_S = L_R + Fq_F \quad (5.208)$$

$$L_S = 1 + 0.9776 = 1.9776 \text{ kmol/mín}$$

$$V_S = L_S - B \quad (5.209)$$

$$V_S = 1.9776 - 0.389 \text{ kmol/mín} = 1.5886$$

O bien

$$V_s = V_R + F(1 - q_F) \quad (5.210)$$

$$V_S = 1.5886 \text{ kmol/mín}$$

Las condiciones iniciales para las fracciones molares del componente ligero en el líquido de cada etapa (variables de estado)

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0.8472 \\ 0.6807 \\ 0.5288 \\ 0.3720 \\ 0.2118 \end{bmatrix} \quad (5.211)$$

composiciones correspondientes de la fase vapor

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0.9351 \\ 0.8472 \\ 0.7447 \\ 0.6064 \\ 0.4113 \end{bmatrix} \quad (5.212)$$

El vector de moles almacenados en cada etapa es el mismo del caso inicial

$$\mathbf{m} = \begin{bmatrix} 5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \\ 5 \end{bmatrix} \quad (5.213)$$

Las variables de entrada al sistema son L_R , V_S , z_F y F , la condición inicial de cada una es su valor en el estado estacionario, así el vector de condiciones iniciales es:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.9776 \\ 1.5886 \\ 0.6 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.214)$$

Para simular el modelo en estado transitorio las perturbaciones introducidas son incrementos en escalón del 10 % de su valor en el estado estable, con un evento para cada entrada

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_{\delta} = \begin{bmatrix} 0.0978 \\ 0.1589 \\ 0.06 \\ 0.1 \end{bmatrix} \quad (5.215)$$

con separaciones de diez minutos entre ellos. El momento en que se da cada incrementos está dado en el vector de tiempos, dados en minutos

$$\begin{bmatrix} t_{L_R} \\ t_{V_S} \\ t_z \\ t_F \end{bmatrix}_{\delta} = \begin{bmatrix} 90 \\ 140 \\ 50 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (5.216)$$

La secuencia de modificación en las entradas es la misma: primero cambia el flujo de alimentación, después la composición de alimentación seguida del reflujo de destilado y finalmente el retorno de fondos al rehervidor.

El comportamiento general es el mismo, pero los valores de concentración en el destilado son significativamente mayores en el caso B, consistente con la mayor volatilidad relativa. El efecto de los cambios en reflujo es sustancialmente menor debido a que en el estado estable los valores de reflujo respecto al de la alimentación son menores en un orden de magnitud.

Caso C

Si se sustituye $F = 1$ kmol/min, $z_F = 0.46$, $\alpha = 2.52$, $L_D = 1.329$ kmol/min, $D = 0.6$ kmol/min y $q_F = 1.0$; $m_1 = 5$ kmol, $m_2 = m_3 = m_4 = 0.5$ kmol y $m_5 = 5$ kmol en los balances global, por sección y etapa

$$B = F - D \quad (5.217)$$

$$B = 1 - 0.6 \text{ kmol/min} = 0.4 \text{ kmol/min}$$

$$L_R = 1.329 \text{ kmol/min}$$

$$L_S = L_R + Fq_F \quad (5.218)$$

$$L_S = 1 + 1.329 = 2.329 \text{ kmol/min}$$

$$V_S = L_S - B \quad (5.219)$$

$$V_S = 2.329 - 0.4 \text{ kmol/min} = 1.929 \text{ kmol/min}$$

Las condiciones iniciales para las fracciones molares del componente ligero en el líquido de cada etapa (variables de estado)

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0.7021 \\ 0.4833 \\ 0.3278 \\ 0.1928 \\ 0.0968 \end{bmatrix} \quad (5.220)$$

composiciones correspondientes de la fase vapor

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0.8559 \\ 0.7021 \\ 0.5514 \\ 0.3757 \\ 0.2127 \end{bmatrix} \quad (5.221)$$

El vector de moles almacenados en cada etapa es el mismo del caso inicial

Las variables de entrada al sistema son L_R , V_S , z_F y F , la condición inicial de cada una es su valor en el estado estacionario, así el vector de condiciones iniciales es:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.329 \\ 1.929 \\ 0.46 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.222)$$

Para simular el modelo en estado transitorio las perturbaciones introducidas son incrementos en escalón del 10 % de su valor en el estado estable, con un evento para cada entrada

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.1329 \\ 0.1929 \\ 0.046 \\ 0.1 \end{bmatrix} \quad (5.223)$$

con separaciones de diez minutos entre ellos. El momento en que se da cada incrementos está dado en el vector de tiempos, dados en minutos

$$\begin{bmatrix} t_{L_R} \\ t_{V_S} \\ t_z \\ t_F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 90 \\ 140 \\ 50 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (5.224)$$

La secuencia de modificación en las entradas es la misma: primero cambia el flujo de alimentación, después la composición de alimentación seguida del reflujo de destilado y finalmente el retorno de fondos al rehervidor.

Aquí se observa una menor recuperación en el destilado a pesar del marcado incremento del retorno de destilado, esto se debe a que simultáneamente la concentración de ligero en la alimentación bajó de 0.6 a 0.46, afectando la cantidad de ligero que se puede obtener.

Caso D

Si se sustituye $F = 1$ kmol/min, $z_F = 0.2$, $\alpha = 5$, $L_D = 0.226$ kmol/min, $D = 0.158$ kmol/min y $q_F = 1.0$; $m_1 = 5$ kmol, $m_2 = m_3 = m_4 = 0.5$ kmol y $m_5 = 5$ kmol en los balances global, por sección y etapa

$$B = F - D \quad (5.225)$$

$$B = 1 - 0.158 \text{ kmol/min} = 0.842 \text{ kmol/min}$$

$$L_R = 0.226 \text{ kmol/min}$$

$$L_S = L_R + Fq_F \quad (5.226)$$

$$L_S = 1 + 0.226 = 1.226 \text{ kmol/min}$$

$$V_S = L_S - B \quad (5.227)$$

$$V_S = 1.226 - 0.842 \text{ kmol/min} = 0.384 \text{ kmol/min}$$

Las condiciones iniciales para las fracciones molares del componente ligero en el líquido de cada etapa (variables de estado)

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0.7915 \\ 0.4316 \\ 0.2162 \\ 0.1639 \\ 0.0980 \end{bmatrix} \quad (5.228)$$

composiciones correspondientes de la fase vapor

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0.9499 \\ 0.7915 \\ 0.5797 \\ 0.4950 \\ 0.3282 \end{bmatrix} \quad (5.229)$$

El vector de moles almacenados en cada etapa es el mismo del caso inicial

Las variables de entrada al sistema son L_R , V_S , z_F y F , la condición inicial de cada una es su valor en el estado estacionario, así el vector de condiciones iniciales es:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.226 \\ 0.384 \\ 0.2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.230)$$

Para simular el modelo en estado transitorio las perturbaciones introducidas son incrementos en escalón del 10 % de su valor en el estado estable, con un evento para cada entrada

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.0226 \\ 0.038 \\ 0.02 \\ 0.1 \end{bmatrix} \quad (5.231)$$

con separaciones de diez minutos entre ellos. El momento en que se da cada incrementos está dado en el vector de tiempos, dados en minutos

$$\begin{bmatrix} t_{L_R} \\ t_{V_S} \\ t_z \\ t_F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 90 \\ 140 \\ 50 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (5.232)$$

Caso E

Si se sustituye $F = 1$ kmol/min, $z_F = 0.65$, $\alpha = 1.12$, $L_D = 11.862$ kmol/min, $D = 0.614$ kmol/min y $q_F = 1.0$; $m_1 = 5$ kmol, $m_2 = m_3 = m_4 = 0.5$ kmol y $m_5 = 5$ kmol en los balances global, por sección y etapa

$$B = F - D \quad (5.233)$$

$$B = 1 - 0.614 \text{ kmol/ mín} = 0.386 \text{ kmol/ mín}$$

$$L_R = 11.862 \text{ kmol/ mín}$$

$$L_S = L_R + Fq_F \quad (5.234)$$

$$L_S = 1 + 0.12.862 = 12.862 \text{ kmol/ mín}$$

$$V_S = L_S - B \quad (5.235)$$

$$V_S = 12.862 - 0.386 \text{ kmol/ mín} = 12.476 \text{ kmol/ mín}$$

Las condiciones iniciales para las fracciones molares del componente ligero en el líquido de cada etapa (variables de estado)

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0.6888 \\ 0.6640 \\ 0.6395 \\ 0.6146 \\ 0.5883 \end{bmatrix} \quad (5.236)$$

composiciones correspondientes de la fase vapor

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0.7125 \\ 0.6888 \\ 0.6652 \\ 0.6411 \\ 0.6154 \end{bmatrix} \quad (5.237)$$

El vector de moles almacenados en cada etapa es el mismo del caso inicial

Las variables de entrada al sistema son L_R , V_S , z_F y F , la condición inicial de cada una es su valor en el estado estacionario, así el vector de condiciones iniciales es:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11.862 \\ 12.476 \\ 0.65 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.238)$$

Para simular el modelo en estado transitorio las perturbaciones introducidas son incrementos en escalón del 10 % de su valor en el estado estable, con un evento para cada entrada

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 1.1862 \\ 1.2476 \\ 0.065 \\ 0.1 \end{bmatrix} \quad (5.239)$$

con separaciones de diez minutos entre ellos. El momento en que se da cada incrementos está dado en el vector de tiempos, dados en minutos

$$\begin{bmatrix} t_{L_R} \\ t_{V_S} \\ t_z \\ t_F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 90 \\ 140 \\ 50 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (5.240)$$

5.8.4. Modelo expresado en flujos para la columna de cinco etapas

$$m_1 \frac{dx_1}{dt} = -V_R x_1 + V_R y_2 \quad (5.241)$$

$$m_2 \frac{dx_2}{dt} = L_R x_1 - L_R x_2 - V_R y_2 + V_R y_3 \quad (5.242)$$

$$m_3 \frac{dx_3}{dt} = L_R x_2 - L_S x_3 - V_R y_3 + V_S y_4 + F z_F \quad (5.243)$$

$$m_4 \frac{dx_4}{dt} = L_S x_3 - L_S x_4 - V_S y_4 + V_S y_5 \quad (5.244)$$

$$m_5 \frac{dx_5}{dt} = L_S x_4 - B x_5 - V_S y_5 \quad (5.245)$$

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (5.246)$$

En esta representación del modelo $m_i \frac{dx_i}{dt} = \frac{d(x_i m_i)}{dt}$ es la acumulación del componente ligero en la etapa i , $L_{i,1} = L_R x_i$ es el flujo molar del componente ligero en fase líquida saliendo de la etapa i , $V_{i,1} = V_R y_i$ es el correspondiente flujo molar del componente saliendo de esa etapa en fase vapor y $B x_5$ es el flujo molar de ligero saliendo con la corriente de fondos. Así que en esta representación la asociación entre término de acumulación y variables de estado es indirecta pues esta forma la relación aparente es entre la acumulación de componente ligero y los flujos entrando y saliendo de ella, pero en realidad el sistema se sigue resolviendo para fracciones molares de componente ligero, dado que los flujos molares de vapor y líquido entre etapas dentro de una misma sección son constantes.

En el estado estable, los valores de los flujos molares de componente ligero son:

$$\begin{aligned}
V_R x_1 &= 2.1458 \\
V_R y_2 &= 2.1458 \\
L_R x_1 &= 1.8111 \\
L_R x_2 &= 1.5541 \\
V_R y_3 &= 1.8887 \\
V_S y_4 &= 1.6456 \\
L_S x_3 &= 1.8111 \\
F z_F &= 0.5 \\
L_S x_4 &= 1.5302 \\
V_S y_5 &= 1.3545 \\
B x_5 &= 0.16535
\end{aligned}$$

La solución del modelo en flujos presenta cierta diferencia conceptual respecto al de fracciones molares, con este las ecuaciones tienen la forma

$$\begin{aligned}
\frac{dx_1}{dt} &= f_1(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m, p_1, \dots, p_r) \\
\frac{dx_2}{dt} &= f_2(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m, p_1, \dots, p_r) \\
&\vdots \\
\frac{dx_n}{dt} &= f_n(x_1, x_2, \dots, x_n, u_1, \dots, u_m, p_1, \dots, p_r)
\end{aligned}$$

Mientras que el modelo en flujos tiene ecuaciones del tipo

$$\frac{dn_h}{dt} = L_{h-1} + V_{h+1} + F - L_h + V_h \quad (5.247)$$

Donde el término del lado izquierdo es de acumulación de moles de componente ligero en la etapa, aunque no haya dificultad en resolver el sistema de ecuaciones no se tiene una estructura del tipo

$$\frac{dn_i}{dt} = a_1 n_1 + a_2 n_2 + \dots + a_m n_m \quad (5.248)$$

o

$$\frac{d(\text{estado})_j}{dt} = \sum_1^m a_i \text{estado}_i \quad (5.249)$$

Como es el caso en el modelo en fracciones molares

Capítulo 6

Conclusiones, recomendaciones y posibles líneas de trabajo a desarrollar

6.1. Interpretación de los gráficos de la simulación de la CDIE de cinco etapas para los casos A y B

Se aprecia que el impacto de la variación en el flujo de alimentación es bastante menor al de las otras entradas, que son de orden similar. Las alteraciones en los reflujo de destilado y fondos provocan cambios mayores que el de la fracción de ligero en la alimentación. El mayor impacto de todos, como era previsible, lo tiene el cambio en el retorno de fondos, que es quien regula el nivel total de agotamiento en el sistema.

Los cambios inducidos por las perturbaciones en el retorno de fondos son en sentido opuesto a los que provocan las perturbaciones en el flujo de alimentación, reflujo de destilado y composición de la alimentación del mismo signo, por lo que se hace evidente la forma en que se deben usar los cambios en las entradas para compensar el efecto de los cambios en la salida.

6.1.1. Análisis del caso original

Las variables de entrada al sistema son L_R , V_S , z_F y F , la condición inicial de cada una es su valor en el estado estacionario, así el vector de condiciones iniciales es:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix} \quad (6.1)$$

Para simular el modelo para cada caso en estado transitorio las perturbaciones introducidas son incrementos en escalón del 10 % de su valor en el estado estable, con un evento para cada entrada

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.1 * L_R \\ 0.1 * V_S \\ 0.1 * z_F \\ 0.1 * F \end{bmatrix} \quad (6.2)$$

con separaciones que van de 40 a 50 minutos entre una y otra perturbación y se capturan en el siguiente vector de tiempos, estos están dados en minutos

$$\begin{bmatrix} t_{L_R} \\ t_{V_S} \\ t_z \\ t_F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 90 \\ 140 \\ 50 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (6.3)$$

Estos tiempos se eligieron de acuerdo con el tiempo necesario para la estabilización de la concentración del componente ligero en el mismo después de cada cambio en las entradas para el caso original. La secuencia de perturbaciones en las entradas se eligió para introducir primero los cambios que pueden ser causados por variaciones externas (flujo y composición de la alimentación) y después las que pueden ser usadas con mayor efecto en el control de las salidas, por ello se perturba en primer lugar el flujo de alimentación, en la composición de alimentación seguida del reflujo de destilado y finalmente el retorno de fondos al rehervidor.

Las variables críticas de proceso son las concentraciones del componente ligero en el líquido en las corrientes de destilado y fondos, pues son las que determinan el grado de separación logrado.

se eligió buscando que, siendo valores realistas, su magnitud relativa mostrara el nivel de impacto de cada variable de entrada respecto a las demás.

La variable de salida más importante es la fracción mol (concentración del componente ligero) en la salida de destilado, que es igual a la fracción mol de ligero en el líquido de la etapa 1 y su comportamiento puede apreciarse en la figura 6.1

Se introduce la primera perturbación, que es la del flujo de alimentación, a los diez minutos de operar en estado estable, con un incremento del 10 % respecto al flujo inicial. Se puede esperar un efecto directo positivo sobre su fracción mol en el destilado siempre que se hace subir la concentración del componente más volátil dentro del sistema. Ese es el efecto obtenido, aunque para este caso no era de esperarse una respuesta muy marcada, dado que, por la composición de la alimentación ($z_F = 0.5$), se aumenta la concentración del componente pesado en la misma proporción. En la simulación, el incremento en el flujo de alimentación hace que la concentración de componente ligero en el destilado aumente de $x_{1,0} = 0.6693$ a $x_{1,50} = 0.7154$ que es una respuesta relativa de aproximadamente un 6.9 % ante una perturbación de un 10 % en esa entrada.

La siguiente perturbación es en la composición de alimentación donde también se debe esperar un efecto directo positivo semejante sobre la composición del destilado, porque al

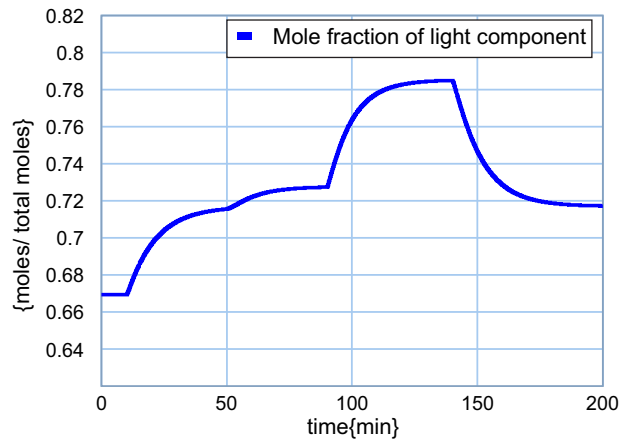


Figura 6.1: Fracción mol deligero en la salida de destilado

incrementarse la fracción mol directamente se está haciendo subir la concentración de ligero en el sistema. En la práctica, la alteración a $t = 50$ min de la fracción mol del componente ligero produce un incremento en la fracción mol de ligero en el destilado de $x_{1,50} = 0.7154$ a $x_{1,90} = 0.7274$ que es una respuesta relativa de aproximadamente un 1.7 % ante una perturbación de un 10 % en esa entrada.

El retorno de destilado a la columna, al retornar al equipo parte de la corriente más rica en el componente más volátil, hace que aumente su concentración en el sistema, desplazando el equilibrio de fases de modo que la concentración de estos sea aún mayor en el destilado. Con el incremento en el reflujo se debería esperar un aumento significativo en la concentración de ligero en el destilado. En la simulación el aumento en el retorno de destilado a la columna a $t = 90$ min produce un incremento en la fracción mol de ligero en el destilado de $x_{1,90} = 0.7274$ a $x_{1,140} = 0.7850$ que es un aumento de aproximadamente un 7.9 % ante una perturbación de un 10 % en esa entrada.

En cada uno de estos eventos se elevó la concentración de ligero en el destilado, porque todos estos mecanismos hacen que aumente su concentración en el interior del equipo, las concentraciones por etapa y los flujos totales del componente más volátil desplazándose entre las etapas.

La corriente de fondos es la más pobre en dicho componente y es la que contiene la mayor concentración del componente más pesado. Al aumentar el retorno de fondos al equipo se maximiza la recuperación del componente ligero porque se reduce la cantidad de este que sale con la corriente de fondos. En el caso límite donde el flujo de la corriente de fondos tiende a cero, todo el ligero que entra al equipo sale en el destilado, pero lo mismo hace el componente pesado y no hay separación por destilación.

En este contexto, es de esperar que el aumento en el reflujo de fondos produzca una disminución de la concentración del componente ligero a lo largo de las etapas de separación y en consecuencia también en el destilado. Este efecto es precisamente el que se obtiene: un aumento del 10 % en el retorno al rehervidor produce un cambio de $x_{1,140} = 0.7850$ a

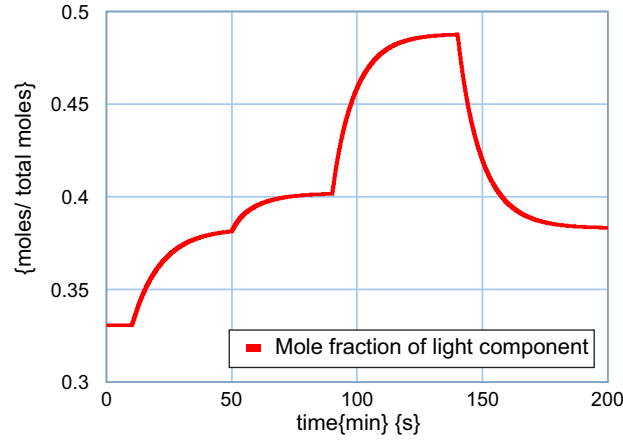


Figura 6.2: Fracción mol de componente ligero en la corriente de fondos.

$x_{1,200} = 0.7172$, una disminución en la concentración de un 8.6 %, que representa el efecto más marcado de las variables de proceso, pero con efecto inverso.

Todas las respuestas son no lineales, pero su efecto directo o inverso es evidente en cada caso.

Exactamente los mismos efectos se pueden apreciar para la concentración de ligero en los fondos en la figura 6.2, donde la concentración de ligero corresponde a la variable x_5 .

Las concentraciones son menores, pero claramente se aprecia que x_5 pasando de aproximadamente $x_{5,0} = 0.335$ a $x_{5,200} = 0.385$ en un patrón muy semejante al anterior.

El esfuerzo, que en este caso corresponde al potencial químico, definido por

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j \neq i} \quad (6.4)$$

En esta definición $G = \sum_1^{nc} n_i G_i$ y en consecuencia el potencial químico μ_i es función de la concentración del componente i en el equipo y por tanto es lógico que la forma de la gráfica sea consistente con las anteriores.

La gráfica de esfuerzos en las etapas intermedias presenta el mismo patrón que las de fracciones molares en las etapas porque el potencial químico para cada componente depende directamente de su concentración en la fase y al aumentar la fracción mol de componente ligero en el interior del equipo debe aumentar el potencial químico de este para cada fase en cualquiera de las etapas como se muestra en la figura 6.3.

La base teórica para el uso combinado de variables de flujo adimensionales con esfuerzos en términos de potencia, que sería el caso aplicable todavía está incompleta, por lo que no puedo dar una explicación más detallada del comportamiento en este momento.

Observación de las gráficas: el comportamiento de la etapa 1 no es relevante para este caso porque se está usando un condensador total y la composición del líquido y vapor del condensador es igual, por eso se toman como variable de salida la fracción mol de ligero en

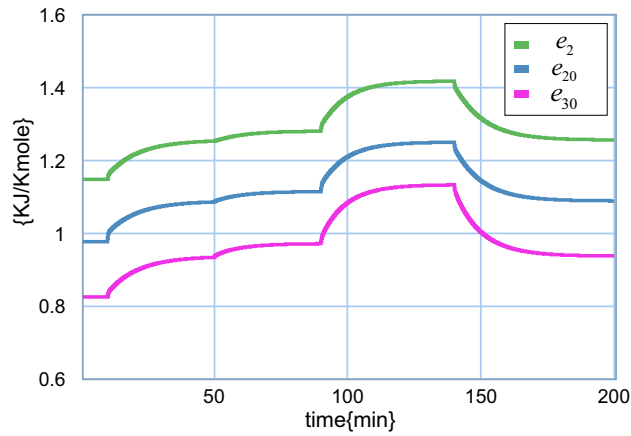


Figura 6.3: Comportamiento del potencial químico en cada una de las etapas

	F	z_F	α	D	L_R	Fuente
A	1	0.5	1.5	0.5	2.706	S&M
B	1	0.6	2.6	0.611	0.9776	SHR 7.1

Tabla 6.1: Comparación de datos para las condiciones de operación de los casos A y B

el líquido que sale del condensador. Esa concentración, para esta configuración, es igual a la del vapor que sale de la etapa 2.

Aquí y_1 no es relevante, como tampoco el esfuerzo para esta etapa. El concepto y resultado de simulación son válidos, solo que al usar un condensador total se tiene una solución trivial.

Nótese que los tiempos de simulación, comparados con los encontrados en otros dominios físicos son bastante grandes, tal vez dos o tres órdenes de magnitud mayores. Este es un fenómeno común en control de plantas de proceso donde los tiempos de control están relacionados con tiempos de residencia o calentamiento relativamente grandes

6.1.2. Análisis del Caso B

Para el segundo caso se consideran las mismas características de equipo: destilación binaria en una columna de cinco etapas, condensador total y alimentación de líquido saturado, a las condiciones del plato, en la tercera etapa. La mezcla de alimentación y los parámetros de operación presentan cambios importantes, como puede verse en la tabla siguiente:

Como se puede apreciar, la mezcla a separar es notablemente más volátil, con una volatilidad relativa $\alpha = 2.6$ contra el $\alpha = 1.5$ del caso original y también un cambio significativo en el flujo de retorno de destilado a la columna.

Para la simulación del segundo caso se utilizan las mismas variables para el vector de entradas, con la misma magnitud relativa de un 10% en el incremento en escalón de las perturbaciones introducidas y la misma secuencia de tiempos empleados anteriormente.

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.9776 \\ 1.5886 \\ 0.6 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

Las perturbaciones introducidas son los incrementos definidos del 10 % del valor de cada entrada en el estado estable, con un evento para cada entrada

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.0978 \\ 0.1589 \\ 0.06 \\ 0.1 \end{bmatrix} \quad (6.6)$$

con separaciones que van de 40 a 50 minutos entre una y otra. El momento en que se da cada incrementos está dado en el vector de tiempos, dados en minutos

$$\begin{bmatrix} t_{L_R} \\ t_{V_S} \\ t_z \\ t_F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 90 \\ 140 \\ 50 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (6.7)$$

Cuando se alcanza $t \geq 140$ el vector de entradas se habrá transformado a:

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_{t \geq 140} = \begin{bmatrix} 0.10758 \\ 0.17479 \\ 0.066 \\ 0.11 \end{bmatrix} \quad (6.8)$$

A pesar de los cambios en las entradas, el comportamiento general del sistema es muy similar, con las concentraciones del componente ligero en destilado y fondos reaccionando en la misma dirección en ambos casos. Ese tipo de respuesta a las perturbaciones de las variables de entrada es el que cabe esperar ya que los principios bajo los que opera el sistema son los mismos. Sin importar el mecanismo individual, si al aumentar la concentración de componente ligero en el interior del equipo, la fracción mol de ligero en el destilado se incrementa y si baja (aumentando la concentración del componente pesado) la fracción mol de ligero en el destilado debe bajar.

Las corrientes más ricas en los componentes ligero y pesado son, respectivamente el destilado y los fondos y la recirculación de parte de estas corrientes hacia el interior de la columna tiene un efecto muy marcado, pero siempre afectando la curva en la misma forma general.

Comparando las concentraciones del componente ligero en cada etapa en el estado estable para ambos casos:

	F	z_F	α	D	L_R	Fuente
A	1	0.5	1.5	0.5	2.706	S&M
B	1	0.6	2.6	0.611	0.9776	SHR 7.1

Tabla 6.2: Comparación del efecto global de los cambios en los parámetros entre los casos A y B

$$\mathbf{x}_A = \begin{bmatrix} 0.6693 \\ 0.5743 \\ 0.4887 \\ 0.4129 \\ 0.3307 \end{bmatrix}; \mathbf{x}_B = \begin{bmatrix} 0.8472 \\ 0.6807 \\ 0.5288 \\ 0.3720 \\ 0.2118 \end{bmatrix} \quad (6.9)$$

La comparación entre los casos en el estado estable es interesante porque las modificaciones a los valores de α (mayor volatilidad relativa), z_F (mayor concentración de ligero en la alimentación) y V_S (menor reflujo de fondos) son tales que propician una mayor concentración de ligero en el destilado, mientras que con un menor reflujo de destilado hacia la columna la concentración de ligero en el producto se reduce. Como se puede observar en siguiente tabla, el efecto global de los cambios en los parámetros es que las concentraciones de ligero en las corrientes de destilado y fondos son marcadamente más altas desde antes de perturbar sus variables de entrada.

En $t = 10$ mín se introduce el incremento del 10 % en el flujo de alimentación. En este caso, como la corriente de alimentación es más rica en ligero y como se ha comentado se podía esperar un efecto directo positivo dado que introduce una mayor cantidad de componente ligero al sistema y, efectivamente, ese es el resultado obtenido en la simulación. El aumento en el flujo de alimentación hace que la concentración de componente ligero en el destilado suba de $x_{1,0} = 0.8472$ a $x_{1,50} = 0.8903$ que es una respuesta relativa de aproximadamente un 5.1 % ante una perturbación de un 10 % en esa entrada.

La siguiente perturbación, que es en la composición de alimentación para $t = 50$ min, produce un incremento en la fracción mol de ligero en el destilado de $x_{1,50} = 0.8903$ a $x_{1,90} = 0.9043$ que es una respuesta relativa de aproximadamente un 1.6 % ante una perturbación de un 10 % en esa entrada.

El incremento en el retorno de destilado en $t = 90$ min debería reflejarse en un aumento significativo de la concentración de ligero en el destilado, pero en la simulación, el incremento en la fracción mol en el destilado solo pasa de $x_{1,90} = 0.9043$ a $x_{1,140} = 0.9240$, una respuesta relativa de aproximadamente un 2.2 %.

Como se esperaba, en cada caso hubo un aumento en la concentración de ligero en el destilado, porque todos estos mecanismos hacen que aumente su concentración en el interior del equipo, en las concentraciones por etapa y los flujos totales del componente más volátil entre las etapas.

En el caso B, la corriente de fondos también es la más pobre en dicho componente y como

ya se mencionó, al aumentar el retorno de fondos al equipo se maximiza la recuperación del componente ligero porque se reduce la cantidad de este que sale con la corriente de fondos.

En este contexto, es de esperar que el aumento en el reflujo de fondos produzca una disminución de la concentración del componente ligero a lo largo de las etapas de separación y en consecuencia también en el destilado. Este efecto es precisamente el que se obtiene: un aumento del 10% en el retorno al rehervidor produce un cambio de $x_{1,140} = 0.0.924$ a $x_{1,200} = 0.8924$, una disminución en la concentración de un 3.4%.

Se puede observar que, en general, los porcentajes de respuesta son menores que en el caso A. Esto es debido a que con $x_{1,0} = 0.8472$ entre las condiciones iniciales y con la notación en fracciones mol acotada entre 0 y 1, los incrementos en la concentración en el destilado por efecto de los cambios en las entradas no pueden ser muy grandes. En general cuando la volatilidad relativa es elevada la separación es más nítida, pero el efecto de los cambios en los valores en las variables de control es menos notorio porque la volatilidad es la propiedad dominante en esta técnica de separación.

En la composición de la corriente de fondos se aprecia exactamente la misma dinámica y las mismas respuestas, pero con concentraciones de ligero mucho menores

Tanto concentraciones de corriente de fondos como potencial químico, al ser funciones de los moles de componente en el sistema, etapa y fase tienen un comportamiento análogo.

6.2. Conclusiones

El objetivo principal de mostrar a la metodología de Bond Graph como una opción viable para el modelado, análisis y generar arreglos de control que permitan la operación de sistemas termodinámicos como columnas de destilación con integración de energía quedó probado ampliamente.

Uno de los objetivos de proponer una estructura de unión para la clase de sistemas no lineales que la columna de destilación analizada representa era verificar que este modelo gráfico efectivamente determina las ecuaciones diferenciales del sistema, que se demuestra en las ecuaciones (4.107)–(4.111).

El modelo en BG tiene el mismo comportamiento que el modelo matemático demostrando así que:

- Cualquier acción que cause un incremento en la concentración del componente más volátil dentro del sistema, automáticamente provoca el correspondiente incremento en su concentración en cada una de las etapas. En el modelo en BG las concentraciones mencionadas vienen a ser las variables de estado (q_1, q_2, q_3, q_4, q_5). El efecto es más relevante para las variables de salida q_1 y q_5 , que representan la fracción mol del componente ligero en el destilado y los fondos, respectivamente.
- Cualquier incremento en el flujo de alimentación, fracción mol de ligero en la alimentación, y reflujo de destilado provoca un incremento en los valores de las variables de

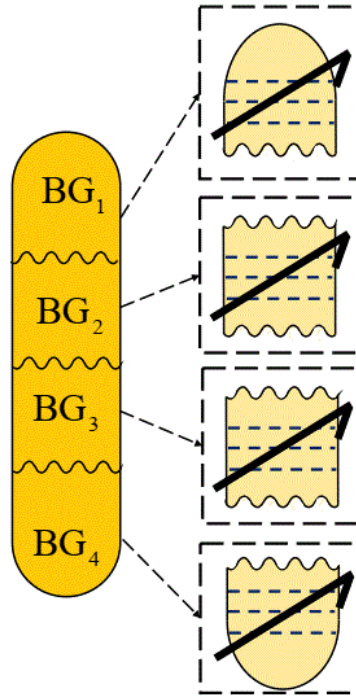


Figura 6.4: Esquema de Bond Graph para una columna de más de cinco etapas.

estado $(q_1, q_2, q_3, q_4, q_5)$ de magnitud proporcional al efecto relativo de cada perturbación

- De forma análoga, cualquier perturbación que cause una reducción en la concentración del componente ligero en el sistema hará bajar su concentración en cada etapa. La corriente de fondos es la más pobre en dicho componente y, por lo tanto, el retorno de fondos hacia el rehervidor deberá causar una reducción en los valores de las variables de estado $(q_1, q_2, q_3, q_4, q_5)$.

Finalmente el Bond Graph propuesto para la columna de cinco etapas, por su construcción modular, puede extenderse para un mayor número de etapas, como se muestra en la figura 6.4 donde se tiene una columna de veinte etapas que se obtiene de conectar cuatro Bond Graphs, cada uno representando una sección con cinco etapas.

Los procesos industriales generalmente representan sistemas no lineales, mientras que los métodos tradicionales suelen determinar su comportamiento a través de la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales no lineales, con su inherente complejidad. En este trabajo se ha presentado a Bond Graph como alternativa gráfica que, por su naturaleza gráfica esta técnica describe las interacciones de potencia en el sistema considerando la transformación y almacenamiento de energía. Como se ha demostrado en las secciones previas, una de las grandes ventajas del modelado en BG de las columnas de destilación es que al construirse en forma modular permite agregar secciones enteras al modelo sin necesidad de generar un modelo matemático desde cero cada vez que se hace necesario modificarlo.

Se propuso una estructura de unión para determinar el modelo de la columna desde su Bond Graph. Esta estructura indica y clasifica las variables y elementos del sistema. Mediante esta estructura de unión se establece un enlace natural entre el Bond Graph y su representación matemática. Así, las características estructurales del sistema pueden derivarse gráfica y matemáticamente.

Otras ventajas de este enfoque son:

- Si se tuviera que reconfigurar la columna, el nuevo Bond Graph se construye dentro del esquema ya desarrollado.
- La relación entre las variables y los elementos de la columna se aprecia en forma clara y directa mediante el seguimiento de las trayectorias causales, mientras que con la aproximación tradicional puede resultar bastante confusa.
- La inclusión de nuevos elementos o la incorporación de diferentes relaciones matemáticas, tales como diferentes formas de representar la volatilidad relativa es bastante directa, en tanto que con métodos tradicionales puede representar una reconstrucción total del modelo.
- El análisis del sistema en BG es simbólico, mientras que en la aproximación tradicional la solución numérica es el estándar.
- La evaluación de las covariables de potencia se hace en forma directa, como es el caso del potencial químico.
- El modelo puede linealizarse directamente desde su Bond Graph no lineal
- Las entradas y salidas para el diseño de los sistemas de control es directo en Bond Graph.

El modelo desarrollado es controlable y observable para las condiciones del caso de estudio y en lo general presenta una estructura que es muy favorable para mantener simultáneamente estabilidad, observabilidad y controlabilidad en sistemas con diferentes parámetros, en tanto se aseguren valores de flujos y condiciones de operación dentro de los límites físicos de cada equipo.

La forma en que se modelaron las etapas hace que el sistema se comporte como un proceso autorregulado de primer orden, independientemente del número de etapas y de las condiciones del estado estacionario. Estas propiedades hacen que en lazo abierto el sistema alcance estados de equilibrio relativamente cerca del punto de referencia, aún sin aplicar acciones de control, aunque el nuevo estado de equilibrio alcanzado nunca será igual al estado estable original. Esto es consistente con la práctica tradicional de control en lazos PID individuales para los posibles apareamientos variable de control/variable controlada, que resultan aplicables también para columnas de destilación con integración de energía.

Por otra parte debe recordarse que se aplicaron consideraciones y simplificaciones importantes en el desarrollo del modelo matemático para hacerlo manejable como primera aproximación y estas tienen penalizaciones que limitan su aplicabilidad. Entre las más delicadas está la relación de equilibrio de fases usada, que al ser extremadamente simple solo es aplicable a sustancias no polares y estructuralmente semejantes.

La aplicación del modelo debe estar limitada a sistemas donde se cumplen las condiciones de similitud entre los componentes de la mezcla a separar.

6.3. Recomendaciones

Las recomendaciones directas, aunque son las que dicta el sentido común, deben enfatizarse porque el modelo está ligado a las hipótesis introducidas, en consecuencia: no se debe usar el modelo para estimar el comportamiento de sistemas alejados de las condiciones para las que fue desarrollado.

Solo es capaz de manejar mezclas binarias o aquellas que permitan considerarse como tales, de baja polaridad y con propiedades termofísicas muy semejantes.

Muchas de las observaciones más interesantes de la aplicación de estas técnicas no se incluyeron en el cuerpo de este trabajo, por no caer estrictamente dentro del alcance considerado, pero son pertinentes para poder hacer recomendaciones sobre el uso y desempeño de los modelos generados.

Debido a que la técnica de linealización es una variante de la expansión en serie de Taylor multivariable, con truncamiento en el segundo término, es de esperarse que el desempeño se degrade al alejarse del punto de referencia, que en este caso es el estado estable, y efectivamente se aprecia este efecto cuando las entradas se alejan del estado estable. El efecto también se puede apreciar en el modelo no lineal, pues los cálculos de etapa a etapa vienen a ser interpolaciones entre la información conocida de los extremos de la columna.

El tipo de información disponible implica que, sin importar la complejidad del método de estimación, el cálculo de las condiciones en las zonas de agotamiento y rectificación siempre es un proceso de interpolación entre las condiciones de la etapa de alimentación, del rehervidor y condensador. Aún sin tener un estudio detallado del fenómeno, es perfectamente entendible el comportamiento al aumentar el número de etapas o al alejarse la etapa de alimentación de las etapas extremas. Si además se considera que se está aplicando una linealización del modelo simplificado, en términos reales se está empleando extrapolación desde las condiciones de las corrientes de alimentación y producto para las etapas intermedias y en consecuencia el modelo opera fuera de la vecindad donde es válido.

La variable de entrada de mayor impacto en el flujo de retorno de fondos al rehervidor, que se ha manejado como variable independiente del sistema, pero en la práctica no lo es.

6.4. Posibles líneas de investigación y trabajo futuro.

La principal línea de investigación abierta es la aplicación de BG a sistemas de proceso con subsistemas termodinámicos con flujo continuo, sistemas de intercambio de calor e integración de energía.

Además de esto, queda por hacer la simulación detallada a diversos casos de control con retroalimentación total de estado basados en el sistema de control desarrollado.

Apéndice A

Notación

A.1. Cantidad de materia y variables normalizadas

m masa

m_i masa del componente i

$\dot{m}$ flujo másico

$w_i = \frac{m_i}{m}$ fracción masa del componente i

n número de moles

n_i moles del componente i

$x_i = \frac{n_i}{n}$ fracción mol del componente i

A.2. Superíndices, subíndices y acentos

$\bar{X}$ Propiedad X referida por unidad de masa, propiedad específica

X o $\hat{X}$ Propiedad X por mol, propiedad molar

$\bar{X}_i$ Propiedad específica X para el componente i

X_i o $\hat{X}_i$ Propiedad molar X para el componente i

$X^t, n\hat{X}$ o $m\bar{X}$ Propiedad total, propiedad extensiva

$\dot{X}$ Derivada de la propiedad X respecto al tiempo o flujo de la propiedad por unidad de tiempo ($\dot{m}, \dot{V}$ o $\dot{n}$ por ejemplo)

A.3. Propiedades termodinámicas y cantidades relacionadas

U Energía interna

H Entalpía

S Entropía

A Energía de Helmholtz
 G Energía de Gibbs
 E Energía
 $\dot{E}$ Potencia
 P Presión absoluta
 R Constante universal de los gases
 T Temperatura absoluta
 Q Calor
 W Trabajo
 V Volumen
 e Variable generalizada de esfuerzo en Bond Graph
 f Variable generalizada de flujo en Bond Graph
 p Variable generalizada de momento
 q Variable generalizada de desplazamiento

A.4. Variables y parámetros del modelo dinámico para la columna de destilación

F Flujo molar de alimentación entrando a la columna.
 $z_{F,j}$ Fracción mol del componente j entrando a la columna con la corriente de alimentación.
 q_F Condición de saturación de la corriente de alimentación.
 V y L son los flujos molares de vapor y líquido entre etapas.
 V_i Flujo molar de vapor saliendo de la etapa i .
 V_R Flujo molar de vapor subiendo por la zona de rectificación.
 V_S Flujo molar de vapor subiendo por la zona de agotamiento.
 $y_{i,j}$ Fracción mol del componente j en el vapor saliendo de la etapa i
 L_i Flujo molar de líquido saliendo de la etapa i .
 L_R Flujo molar de líquido bajando por la sección de rectificación.
 L_S Flujo molar de líquido bajando por la sección de agotamiento.
 $x_{i,j}$ Fracción mol del componente j en el líquido saliendo de la etapa i
 n_i Moles retenidos en la etapa i
 $n_{i,j}$ Moles del componente j en la etapa i .
 ΔH_{vdest} Calor latente de vaporización del producto destilado.
 $\Delta H_{vfondos}$ Calor latente de vaporización del material de fondos.
 f, R y S como subíndices indican alimentación, rectificación y agotamiento, respectivamente

Apéndice B

Conceptos de termodinámica clásica

B.1. Áreas de relevancia especial para el modelado en BG

En el estudio de las transformaciones matemáticas de la energía y entropía en fluidos, sujetas a restricciones debida a la naturaleza de las funciones de estado [49],[50] hay áreas específicas de interés para el modelado en BG, como:

- a) Relación fundamental de propiedad $dU = TdS - PdV$.
- b) Desarrollo de fórmulas generales de dependencia para propiedades no medibles en términos de variables medibles, como sería la dependencia de la energía interna respecto a presión y temperatura o entalpía respecto a P, V y T.
- c) Equilibrio de fase, que corresponde a los cálculos de división de material entre las fases y la composición de estas.

La relación fundamental de propiedad proporciona una conexión general entre los balances de energía y entropía asociados a la primera y segunda ley, respectivamente y asocia matemáticamente funciones de estado de forma que no se requiere una medición física cuando se considera como cambian la energía y entropía, esto es: nos dice como cambia una variable en términos de variables de las que se pudiera conocer el comportamiento.

El interés aquí radica en comprender como transformar de un conjunto de variables a otro, previo el desarrollo de fórmulas generales de dependencia de propiedades respecto a variables medibles. Aplicando las enseñanzas de la termodinámica clásica se puede generalizar el conocimiento obtenido para cualquier fluido o condiciones. La mayoría de los procesos en ingeniería pueden representarse como el paso de un conjunto de condiciones a otro. Para pasar de un estado a otro es necesario aprender a desarrollar las rutas para hacerlo, ya que en tanto lleven del punto inicial al final no importa la trayectoria elegida, solo que sea posible determinar los cambios en las propiedades en cada etapa y sumar esos cambios.

B.1.1. Variables termodinámicas de estado

En cálculos termodinámicos frecuentemente aparecen combinaciones de ocho variables de estado dentro del conjunto: $\{P, V, T, S, U, H, A \text{ y } G\}$. Con fines de modelado ofrece ciertas ventajas el uso de variables intensivas fácilmente medibles por lo que, cuando es posible, se prefiere elegir P , T y dependiendo de la aplicación, cualquiera otra dentro de ese conjunto, pero en forma molar o específica, así que a menos que se indique explícitamente otra convención, en esta exposición se trabaja con variables molares. Si X^t es una propiedad extensiva cualquiera su notación en forma molar es $\hat{X}$ y en forma específica (por unidad de masa) es $\bar{X}$.

Otra convención que es importante definir es la de signos para el calor y el trabajo, que aquí se toma como positivo si entra al sistema y negativo si sale de él. Esta convención se aplica porque facilita llegar a algunas de las expresiones típicas de varias de las relaciones estudiadas.

Regla de las Fases de Gibbs

Para un sistema cerrado donde puede ignorarse el efecto de campos electromagnéticos y tensión superficial la Regla de las Fases de Gibbs establece que el número de grados de libertad del sistema está dado por:

$$F = 2 - \pi + n \quad (\text{B.1})$$

donde F son los grados de libertad, π es el número de fases en equilibrio y n es el número de especies químicas presentes, entendiendo por fase una porción de materia homogénea con la misma composición y estructura física. Para una sustancia pura en un sistema cerrado simple con una sola fase

$$F = 2 - 1 + 1 = 2$$

Se dispone de dos grados de libertad, es decir, se debe especificar dos de sus propiedades termodinámicas intensivas para fijar las demás y con ello el estado intensivo del sistema. Considerándolo desde otro punto de vista, los grados de libertad es el número de variables independientes del sistema con todas las demás como variables dependientes, con la particularidad de que la regla no indica cuales se debe elegir como independientes, por lo que para fines prácticos se puede elegir el par que resulte más conveniente para el análisis del sistema considerado.

Propiedades matemáticas

El hecho de que al fijar dos variables las otras seis queden determinadas significa que se puede elegir arbitrariamente como independientes cualquier par de variables intensivas y las demás se constituyen en variables dependientes por defecto. Si se elige a T y V (volumen molar) como independientes

$$U = U(T, V); S = S(T, V); H = H(T, V);$$

$$P = P(T, V); A = A(T, V); G = G(T, V)$$

El cambio en, por ejemplo, la energía interna debido a cambios en T y V se representa por medio de su diferencial total

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T \quad (\text{B.2})$$

Los subíndices son una convención propia de la termodinámica clásica y muestran la variable que se mantiene constante en la derivación, que en este caso es el volumen en la derivada parcial respecto a la temperatura y T en la derivada parcial respecto al volumen. Como en cualquier derivada parcial, se indica la variación de la variable dependiente respecto a la variable independiente indicada y por definición todas las demás se mantienen constantes dentro de esa derivada, y por tanto los subíndices son redundantes desde el punto de vista matemático, sin embargo resultan muy útiles para mostrar las restricciones involucradas en el desarrollo específico y especialmente en definiciones como $C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P$ o $C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$

En el desarrollo de las relaciones deseadas entre propiedades y variables medibles se hace uso de diversas herramientas del cálculo multivariable, sobre todo aplicaciones y variantes de la regla de la cadena, regla de expansión y la regla del producto triple.

Desarrollo de las Relaciones de Gibbs para el sistema simple

. Muchas de las aplicaciones más relevantes de la termodinámica en ingeniería de procesos están en el modelado de sistemas con flujo, propiedades termofísicas de los materiales, interacciones energéticas (intercambio de calor, refrigeración, etc.) pero para fines de este apéndice se consideró oportuno limitar el estudio, en principio, a sistemas cerrados simples.

En este contexto, se entiende por sistema simple a aquel que no presenta en su interior divisiones por paredes rígidas, impermeables o adiabáticas, no está sujeto a la influencia de campos externos y en su interior no presenta gradientes de temperatura, presión, velocidad, concentración o densidad [53].

Si además el sistema únicamente puede intercambiar trabajo por expansión o compresión (trabajo de frontera móvil), se tiene un sistema simple compresible. Un ejemplo clásico sería un sistema de pistón y cilindro (en adelante se mencionará como pistón) que se ha llenado previamente con un gas ideal. El pistón puede deslizarse sin fricción y la base del cilindro está acondicionada para recibir calentamiento desde una fuente externa completamente controlable, pero cuya naturaleza carece de importancia de momento. El resto del cilindro está perfectamente aislado, por lo que el único puerto para el intercambio de calor es ese. Las variables de intercambio de energía relacionadas son fuerza y desplazamiento; presión y volumen del lado del pistón y calor y temperatura por la base del cilindro. Como se muestra en la figura B.1

Planteando el balance de energía para el sistema descrito:

$$d[U + E_k + E_p] = \delta Q + \delta W_s + \delta W_{EC} \quad (\text{B.3})$$

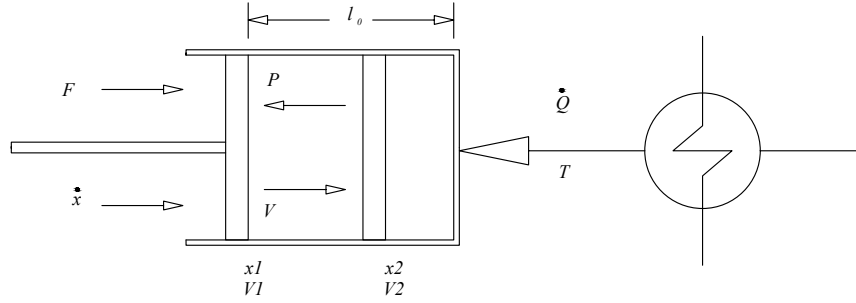


Figura B.1: Arreglo de cilindro y pistón con calentamiento

eliminando todas las variables que no son relevantes al caso y sustituyendo el trabajo de expansión-compresión por su equivalencia $-PdV$ se obtiene

$$dU = \delta Q - PdV \quad (\text{B.4})$$

Por definición

$$dS = \frac{dQ_{rev}}{T_{sistema}} \quad (\text{B.5})$$

Para que el sistema sea reversible no debe haber en el sistema gradientes de temperatura, con lo que todo él debe estar a la misma temperatura. Así se llega a la Relación Fundamental de Propiedad

$$dU = TdS - PdV \quad (\text{B.6})$$

Esta ecuación, dependiendo de la fuente, se identifica con otros nombres, pero independientemente del nombre que se le de, todas las fuentes coinciden en su relevancia [52-54].

Esta ecuación es significativa porque relaciona los cambios en una variable de estado con los cambios en otras dos variables de estado (dU , dS y dV respectivamente) y el problema físico de relacionar el flujo de calor y cambios de volumen con cambios en la energía interna se ha transformado en un problema puramente matemático de cálculo multivariable. Esta transformación nos libera de la necesidad de pensar en los medios físicos para obtener cierta conversión de energía y en su lugar aplicar reglas de cálculo para cambios en entropía y volumen. Aunque la energía interna se puede expresar como función de otras variables, la expresión más simple es cuando se expresa en términos de entropía y volumen, por lo que se dice que U es función natural de S y V . Se ha definido la entalpía como

$$H \equiv U + PV \quad (\text{B.7})$$

Diferenciando

$$dH = dU + PdV + VdP \quad (\text{B.8})$$

$$dH = TdS - PdV + PdV + VdP \quad (\text{B.9})$$

$$dH = TdS + VdP \quad (\text{B.10})$$

Esta manipulación se conoce como Transformación de Legendre y también hay transformaciones equivalentes para la energía libre de Helmholtz y la energía libre de Gibbs. Se observa que la entalpía es función natural de S y V y que tanto en la expresión para dU como para dH aparecen en el mismo término {T,S} y {P,V}. Estos pares de variables siempre aparecen juntos en todas las transformaciones y por ello se conocen como pares conjugados. Las ecuaciones resultantes de las transformaciones para A y G son:

$$dA = -PdV - SdT \quad (\text{B.11})$$

$$dG = -SdT + VdP \quad (\text{B.12})$$

En general a las ecuaciones (B.6), (B.10), (B.11) y (B.12) se les conoce como Relaciones de Gibbs.

Se ha mencionado la necesidad de desarrollar fórmulas generales de dependencia de propiedades termodinámicas en términos de variables medibles, sin haber aclarado cuales son. Las variables físicamente medibles de las que se habla son P, V, T y derivadas parciales que contengan solo a P, V y T; Cp y Cv, que normalmente son funciones conocidas de T a bajas presiones. La entropía es aceptable en tanto no aparezca como restricción de una derivada parcial ya que normalmente se puede calcular una vez que se ha especificado el estado del sistema. Como se mencionaba anteriormente, para el sistema simple estudiado, lleno con un gas ideal puro, cualquier variable intensiva es función de otras dos cualesquiera, pero lo más conveniente sería que se tratara de variables medibles. Aprovechando que las relaciones de Gibbs son diferenciales exactas, si se calculan las derivadas de U, H, A y G, sus derivadas cruzadas de segundo orden, aplicando analogías con las relaciones de Gibbs y las reglas de cálculo multivariable ya mencionadas, se llega a una serie de ecuaciones que permiten determinar el valor de esas propiedades a partir de propiedades medibles. Las relaciones obtenidas se conocen como Relaciones de Maxwell. Las más relevantes para el sistema considerado son:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V \quad (\text{B.13})$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P \quad (\text{B.14})$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \quad (\text{B.15})$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = -\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T \quad (\text{B.16})$$

Apéndice C

Análisis de un caso realista de pistón con calentamiento.

Se presenta un caso de modelado y simulación de un sistema termodinámico simple en Bond Graph, concretamente de un sistema de pistón y cilindro con calentamiento que correspondiera dimensionalmente con un pistón real operando en condiciones tales que resultaran válidas las consideraciones para un sistema termodinámico simple cerrado con un único punto donde puede entregar o recibir calor, con el resto del equipo perfectamente aislado. Todos los parámetros se especificaron buscando alcanzar al mismo tiempo los criterios de realismo y cuasi equilibrio.

C.1. Aportación de trabajo de frontera móvil, efecto hidráulico en el campo -C

El sistema elegido consta de un pistón con las dimensiones tomadas de un motor de combustión interna real [83] lleno de nitrógeno. Para que el nitrógeno se pueda considerar como gas ideal, la temperatura debe estar entre 180 y 1000 K con presión entre 0 y 0.5 MPa (factor de compresibilidad entre 0.99 y 1.01), así que se eligió arbitrariamente $T=320$ K y $P=0.1$ MPa, ambas dentro del rango prescrito, con lo que se llenaron los grados de libertad disponibles en cuanto a variables intensivas. Para fijar el tamaño del sistema se tomaron las dimensiones del cilindro citado para el volumen total, dejando la masa como variable dependiente. Las dimensiones se pueden ver en la tabla C.1) y un diagrama del mismo en la figura C.1, en esta el subíndice (1) corresponde a las condiciones iniciales de desplazamiento (x_1), volumen (V_1) y tiempo ($t_1 = 0$) y el (2) al punto final al completarse el movimiento durante la compresión.

Para mayor claridad, en este estudio solamente se considera la etapa de compresión, ya que de considerar la expansión el desplazamiento total y el cambio de volumen son nulos, e

incluir esa etapa complica innecesariamente el modelo sin aportaciones relevantes.

Carrera del pistón (l)	93 mm
Diámetro (d)	83 mm
Frecuencia del motor (frpm)	2000 rpm
Presión de operación (P)	1.73 MPa

Tabla C.1: Dimensiones del pistón

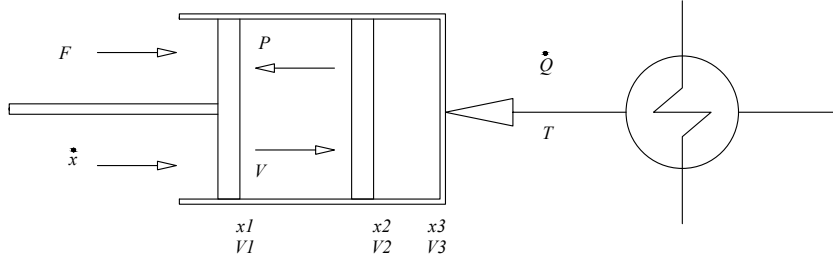


Figura C.1: Pistón con calentamiento

Cuando se completa la carrera, la cara del émbolo no toca el fondo del cilindro, queda un espacio libre que contiene el nitrógeno comprimido. Con l denotando la carrera del pistón y llamando espacio libre al volumen entre su cara interna y el fondo del cilindro:

$$l = x_1 - x_2 = 9.3 \times 10^{-2} m \quad (C.1)$$

donde x_1 y x_2 son los puntos extremos del desplazamiento de la cara del pistón. Si d es el diámetro del pistón y A_p el área de la cara del pistón:

$$\begin{aligned} d &= 8.2 \times 10^{-2} m \\ A &= 5.4103 \times 10^{-3} m^2 \end{aligned} \quad (C.2)$$

El cambio de volumen interno debido al desplazamiento del émbolo es

$$V = l(A) = 5.032 \times 10^{-4} m^3 \quad (C.3)$$

Si la carrera del pistón representa un 80 % de la longitud total del cilindro

$$\begin{aligned} V_{total\ del\ cilindro} &= 6.2828 \times 10^{-4} m^3 \\ V_{libre} &= (6.2828 - 5.032) \times 10^{-4} m^3 \\ V_{libre} &= 1.258 \times 10^{-4} m^3 \end{aligned}$$

De ahí que

$$V_1 = 6.2828 \times 10^{-4} m^3 \quad (C.4)$$

y

$$V_2 = 1.258 \times 10^{-4} m^3 \quad (C.5)$$

La presión normal de operación del pistón de un motor de combustión interna como el descrito (1.73 MPa) está por encima de la presión máxima a la que se puede considerar al nitrógeno como gas ideal, pero la presión elegida es un orden de magnitud por debajo de esta y se deja un margen de seguridad que se espera sea adecuado para su incremento durante la compresión.

Con las condiciones especificadas para el inicio del proceso y las dimensiones del pistón : $P_1 = 1 \text{ bar}$; $t_1 = 320 \text{ K}$; $V_1 = 6.2828 \times 10^{-4} m^3$; $R = 8.314 \times 10^{-2} \text{ bar} \cdot m^3 / \text{kmol} \cdot K$.

$$n = \frac{PV}{RT} \quad (C.6)$$

$$n = 2.364 \times 10^{-5} \text{ kmol}$$

Con esto quedan completamente definidas las condiciones del sistema para $t = 0$.

Si se desea modelar la energía y potencia transmitidas por el brazo y pistón al gas y las condiciones al terminar la compresión, es necesario conocer el comportamiento de la presión, desplazamiento y velocidad del émbolo en esa etapa. Tomando el desplazamiento de la cara del émbolo como variable de estado y denotándola con x , en $t = 0$ el pistón está en reposo, por lo tanto $x = 0$; condición que se repite al terminar la etapa de compresión con desplazamiento igual a la carrera del pistón $x = l$ y por la naturaleza de la operación se sabe que el desplazamiento y la velocidad tienen comportamiento cíclico, y dado que $x = 0$ para $t = 0$ parece razonable proponer que la velocidad de la cara del pistón se comporta de acuerdo con una ecuación de la forma general

$$\dot{x}(t) = \alpha \sin(\beta t + \varphi) \quad (C.7)$$

Para esta forma de la ecuación de velocidad, su integral corresponde a la ecuación de desplazamiento, que tendría la forma

$$x(t) = \frac{-\alpha}{\beta} \cos(\beta t + \varphi) + \gamma \quad (C.8)$$

y su comportamiento gráfico debe ser del tipo mostrado en la figura C.2)

Para determinar las constantes de amplitud (α), longitud de onda (β) y desfase (γ) es necesaria la duración de la compresión y la velocidad con que se mueve el pistón. La velocidad se define en base al mismo artículo donde se reportan las dimensiones del arreglo [83], pero ajustado a condiciones que limiten la formación de gradientes de presión, densidad y velocidad.

Para un motor de combustión interna con carrera l y frecuencia f rpm la velocidad promedio del pistón está dada por

$$v_{prom} = \frac{2lf \text{ rpm}}{60} \quad (C.9)$$

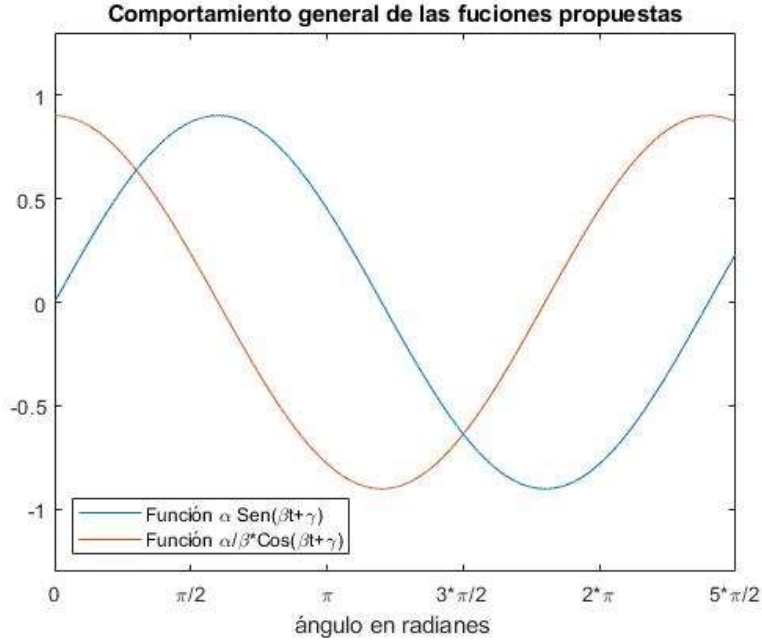


Figura C.2: Forma general de las ecuaciones de velocidad y desplazamiento

Para el motor referido

$$v_{prom} = \frac{2(9.3 * 10^{-4})(2000)}{60} = 6.2m/s \quad (C.10)$$

Esta velocidad a todas luces no es compatible con un sistema en cuasi-equilibrio, pero acota los límites físicos para el sistema. En motores de combustión interna la velocidad máxima del pistón suele estimarse con la ecuación

$$v_{pico} = \sqrt{2}v_{prom} \quad (C.11)$$

pero en este caso no aplica porque en esos equipos, por la particular geometría del cigüeñal, la velocidad máxima se alcanza cuando el giro alcanza 74° en vez de los 90° que corresponden al punto medio de la etapa de compresión. Como no se trata propiamente de ese arreglo y no interesa estudiar el desplazamiento excéntrico de la biela, se considera una curva no deformada donde la velocidad máxima se da a la mitad de su recorrido, dado que el émbolo debe estar en reposo en $t = 0$ y $x = l$. La velocidad promedio del motor es demasiado alta para las restricciones del sistema, por lo que se propuso una velocidad promedio de 0.5 m/s (menos de un décimo de la velocidad nominal), pero corresponde a una frecuencia de 161 rpm, que aún parece alta, por lo que se decidió fijarla en 0.005 m/s (tres órdenes de magnitud por debajo de la velocidad nominal) con una frpm=1.61, que por contraste parece glacial, pero más viable. En estas condiciones la duración del recorrido es

$$t_2 = \frac{l}{v_{prom}} = \frac{93 * 10^{-3}m}{0.005m/s} \quad (C.12)$$

$$t_2 = 18.6s$$

Por las razones arriba expuestas no se puede estimar directamente la velocidad máxima, pero al tratarse de una curva no deformada se dará a la mitad de la compresión

$$t_{1/2} = \frac{t_2}{2} \quad (C.13)$$

$$t_{1/2} = 9.3s$$

Si la velocidad durante la compresión se describe mediante la ecuación C.7 se desprende que su integración dará la ecuación para el desplazamiento

$$x(t) = \alpha \int \text{sen}(\beta t + \varphi) dt \quad (C.14)$$

$$x(t) = -\frac{\alpha}{\beta} \cos(\beta t + \varphi) + \gamma \quad (C.15)$$

Para la función $\alpha \text{sen}(\beta t + \varphi)$ aislada la amplitud no guarda relación alguna con la frecuencia, longitud de onda, etc. pero como las ecuaciones (C.7) y (C.15) forman un sistema de ecuaciones y las condiciones iniciales y de frontera necesarias para determinar los valores de las constantes y las mismas constantes aparecen en ambas ecuaciones, de forma que los parámetros de la curva mencionados, como la amplitud y la longitud de onda, son interdependientes. Las condiciones iniciales y de frontera de las que se dispone para resolver el sistema son:

$$\text{C.I. } t_1 = 0; x = x_1 = 0; \dot{x} = \dot{x}_1 = 0$$

$$\text{C.F.1 } t_2 = 18.6s; x = \frac{l}{2} = 0.0465m; \dot{x} = v_{pico}$$

Se tiene una condición de frontera adicional, que es el punto medio del desplazamiento:

$$\text{C.F.2 } t = t_{1/2} = 9.3s; x = \frac{l}{2} = 0.0465m; \dot{x} = v_{pico}$$

Aplicando C.I a la ecuación (C.7) se tiene:

$$\text{sen}(\varphi) = 0$$

Para el sistema solo tiene significado físico la mitad del periodo de la función de velocidad, así que las únicas raíces relevantes de ϕ son 0 y π , y como $\phi = \pi$ representa el final de la compresión, no puede considerarse como desfase, por lo tanto: $\phi = 0$ Sustituyendo ϕ y las condiciones iniciales en la ecuación (C.15)

$$\gamma = \frac{\alpha}{\beta} \quad (C.16)$$

Sustituyendo en las ecuaciones (C.7) y (C.15) se tiene

$$\dot{x}(t) = \alpha \text{sen}(\beta t) \quad (C.17)$$

$$x(t) = -\frac{\alpha}{\beta} \cos(\beta t) + \frac{\alpha}{\beta} \quad (\text{C.18})$$

Aplicando la C.F.1 a la ecuación (C.18) se obtiene

$$l = \frac{\alpha}{\beta} (1 - \cos(\beta t_2)) \quad (\text{C.19})$$

Haciendo lo mismo con la ecuación (C.17)

$$\text{sen}(\beta t_2) = 0 \quad (\text{C.20})$$

$$\beta = \frac{\pi}{t_2}$$

Si se sustituye C.F.2 en la ecuación (C.17) se obtiene

$$\alpha = v_{pico} \quad (\text{C.21})$$

Si en (31) se sustituyen α y β y se obtiene:

$$v_{pico} = \frac{(\pi)(l)}{2t_2} \quad (\text{C.22})$$

Sustituyendo valores numéricos en (C.22)

$$v_{pico} = 0.007854 m/s$$

La forma analítica de las ecuaciones (C.17) y (C.18) viene a ser

$$\dot{x}(t) = v_{pico} \text{sen}\left(\frac{\pi}{t_2} t\right) \quad (\text{C.23})$$

$$x(t) = \frac{t_2 v_{pico}}{\pi} (1 - \cos(\frac{\pi}{t_2} t)) \quad (\text{C.24})$$

y ya con valores numéricos:

$$\dot{x}(t) = 0.007854 \text{sen}(0.1689t) \quad (\text{C.25})$$

$$x(t) = 0.0465(1 - \cos(0.1689t)) \quad (\text{C.26})$$

El comportamiento gráfico de las funciones se aprecia en la figura C.3

Dado que las curvas cumplen con el comportamiento físico y se apegan a los puntos dados, se consideran adecuadas para emplearse en el modelo termodinámico para calcular el trabajo de frontera móvil del sistema. Si se toma la primera relación de Gibbs y se expresa como derivada respecto al tiempo

$$\frac{du}{dt} = T \frac{dS}{dt} - P \frac{dV}{dT} \quad (\text{C.27})$$

Como

$$\frac{dS}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{Q}{T}$$

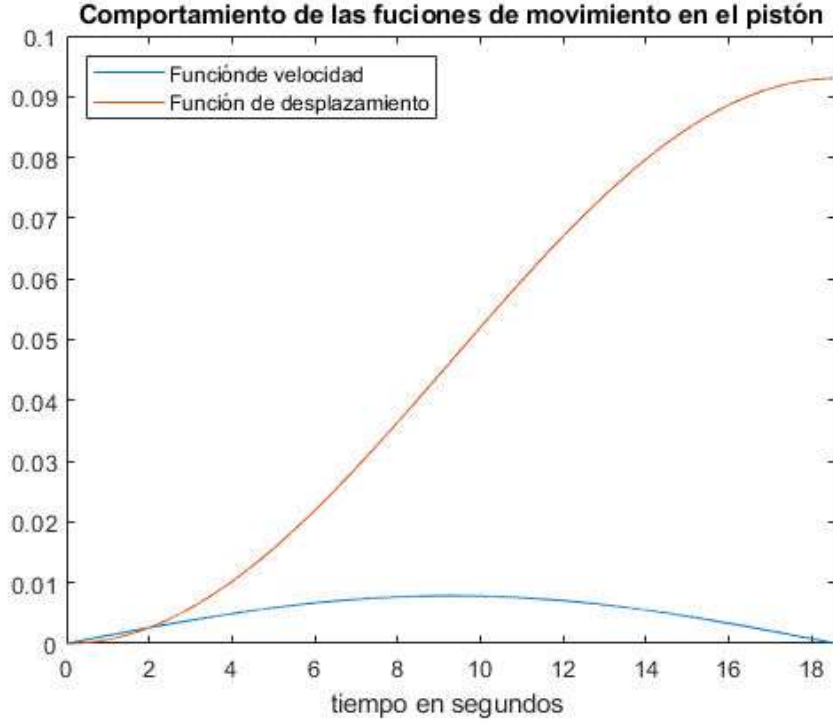


Figura C.3: Funciones de movimiento para el pistón

Si la temperatura no es función del tiempo

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{T} \dot{Q} \quad (C.28)$$

Como el campo -C empleado para la expresión de la primera relación de Gibbs contempla a la energía interna como un elemento de almacenamiento, para de observar el comportamiento del modelo es deseable que los flujos de potencia térmica e hidráulica sean semejantes. Para lograr esto se analiza primero la aportación hidráulica en ausencia de transferencia de calor. donde la ecuación (C.28) se anula y la (C.27) se reduce a

$$\frac{du}{dt} = -P \frac{dV}{dT} \quad (C.29)$$

Para el sistema cerrado simple la fuerza aplicada por el brazo debe mantenerse en equilibrio con la fuerza ejercida por la presión del gas sobre la cara interna del pistón como se muestra en la figura C.4.

El volumen en el interior se reduce al deslizarse el émbolo hacia el fondo del cilindro de acuerdo con la expresión

$$V(t) = [l_0 - x(t)]A_p \quad (C.30)$$

Donde $V(t)$ es el volumen libre en el interior del cilindro a cualquier tiempo t tal que $0 \leq t \leq 18.6s$ l_0 es la longitud total del cilindro y 80 % de ella es la carrera del pistón l y $l = x_1 - x_2$, $l_o = \frac{0.093m}{0.8} = 0.11625m$ $x(t)$ es la distancia recorrida por el émbolo desde x_1 ,

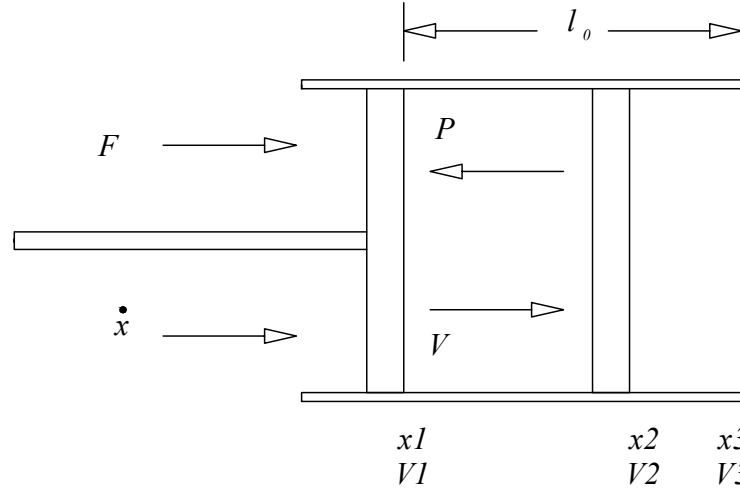


Figura C.4: Relación física de las variables de esfuerzo en el pistón

dado por la función de desplazamiento definida por la ecuación (C.24). A_P es el área de la cara del pistón.

Derivando respecto al tiempo se obtiene la velocidad de cambio de volumen interno

$$\frac{dV}{dt} = -A_P \frac{dx}{dt} = -A_P \dot{x} \quad (C.31)$$

Donde $\dot{x}$ está definido por la ecuación (C.23). El nitrógeno dentro del arreglo cumple con la ecuación de gas ideal

$$PV = nRT \quad (C.32)$$

Pero sustituyendo la ecuación (C.30) y reordenando

$$P = \frac{nRT}{[l_0 - x(t)]A_P} \quad (C.33)$$

De (C.31) y (C.33)

$$PdV = -\frac{nRT}{[l_0 - x(t)]\dot{x}} \quad (C.34)$$

Que sustituyendo en (C.29)

$$\frac{dU}{dT} = \frac{nRT}{[l_0 - x(t)]\dot{x}} \quad (C.35)$$

Esta ecuación es válida para la energía interna del sistema cerrado simple, pero poniéndola en términos de las ecuaciones de velocidad y desplazamiento se obtiene

$$-P \frac{dV}{dt} = \frac{nRT v_{pico} \text{Sen}(\frac{\pi t}{t_2})}{\frac{t_2 v_{pico}}{\pi} \text{Cos}(\frac{\pi t}{t_2}) + l_0 - \frac{t_2 v_{pico}}{\pi}} \quad (C.36)$$

La ecuación anterior es la función de potencia para la transferencia de trabajo de frontera móvil (hidráulico) al gas en ausencia de calentamiento. Para determinar la energía transferida se integra la ec. (C.36) con las mismas condiciones límites ya consideradas, obteniendo

$$\Delta U = -nRT \ln \left[\frac{l_o - \frac{t_2 v_{pico}}{\pi} (1 - \cos(\frac{\pi t}{t_2}))}{l_o} \right] \quad (C.37)$$

Esta es la en función de acumulación de energía interna del nitrógeno por aportación hidráulica para cualquier tiempo t tal que $0 \leq t \leq 18.6s$ Sustituyendo valores las ecuaciones de potencia y energía acumulada quedan

$$\frac{dU}{dT} = -P \frac{dV}{dt} = \frac{4.94175 * 10^{-4} \text{Sen}(0.168903t)}{0.0465 \cos(0.1689t) + 0.06975} \quad (C.38)$$

$$\Delta U = -P \Delta V = -0.06289 \ln \left[\frac{0.11625 - 0.0465(1 - \cos(0.1689t))}{0.11625} \right] \quad (C.39)$$

El comportamiento de las funciones de potencia y energía se aprecia en figura C.5

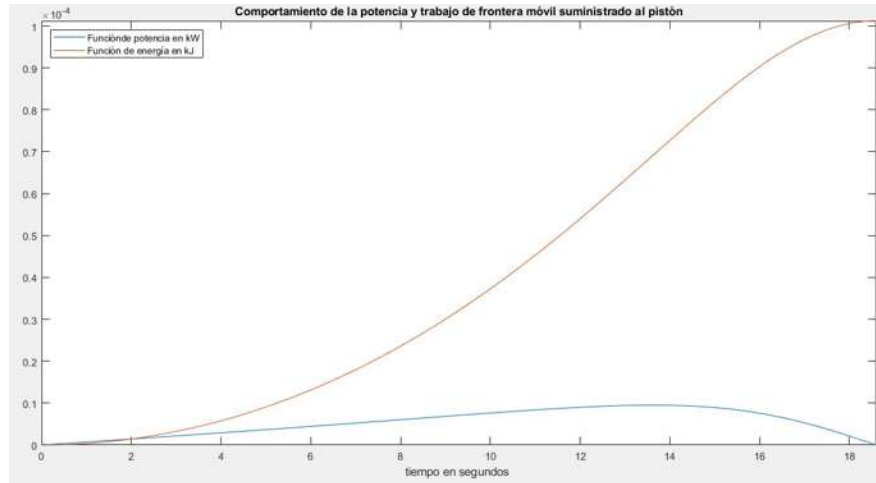


Figura C.5: Comportamiento de las funciones de potencia y energía

Las ecuaciones del modelo para la aportación por trabajo de frontera móvil son muy sensibles a la elección de velocidad promedio. Era lógico esperar que la magnitud del cambio en la energía interna cambiase en forma proporcional a la velocidad seleccionada, lo que fue sorpresivo fue el efecto sobre la forma de las curvas, que se esperaba sufriera menos alteración que la presentada en la curva mostrada en la figura C.6, esta se dio con $v_{prom} = 0.5m/s$. La velocidad está completamente fuera de rango, pero es un recordatorio sobre la importancia de vigilar la posible influencia de nuestras ideas preconcebidas sobre el análisis de resultados en investigación.

Este efecto probablemente se debe a que, a pesar de que los parámetros afectados por la velocidad de desplazamiento aparecen en todas las ecuaciones, en la función de potencia vienen tanto en el numerador y denominador de las ecuaciones en forma que se cancela la deformación, pero no el efecto sobre la amplitud, en tanto que en las demás ecuaciones aparecen en términos diferentes sin efectos de estabilización.

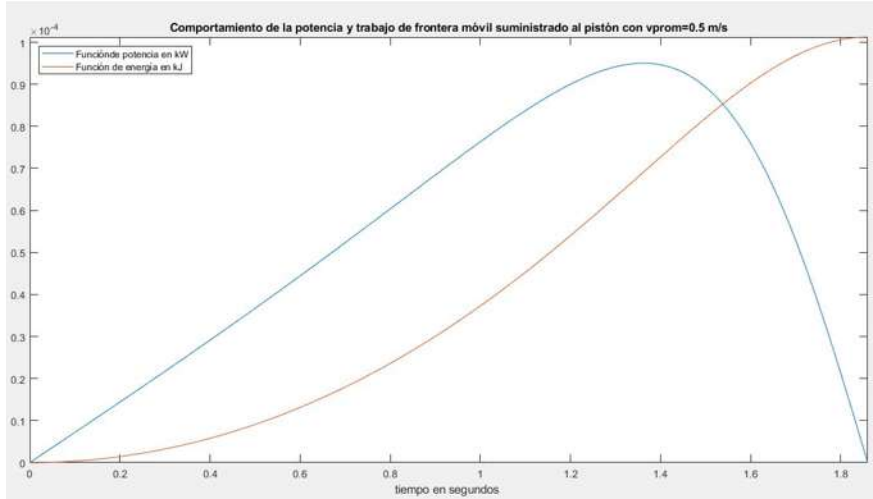


Figura C.6: Potencia y-trabajo hidráulico en el pistón para $v = 0.5 \text{ m/s}$

C.2. Aportación del calentamiento sobre el pistón, efecto térmico en el campo -C

Para efectos de simulación es conveniente que el suministro de potencia térmica al campo sea semejante a la hidráulica, con cierta dominancia de una de ellas para poder notar los efectos de cada rama en el cambio en la energía interna sea apreciable y no correr el riesgo de que se pierdan como ruido en caso de haber gran diferencia entre ellas. Así en

$$\frac{du}{dt} = T \frac{dS}{dt} - P \frac{dV}{dT}$$

los dos términos del miembro de la derecha deben de ser del mismo orden de magnitud, o muy cercano.

Entre las bases de diseño se tiene que se debe disponer de calentamiento plenamente controlable para el pistón. Aunque se desea que y tengan el mismo orden de magnitud no es conveniente repetir el patrón cíclico, optando por una rampa de calentamiento apoyada en $t_1 = 0$ y $t_2 = 13.6 \text{ s}$, que es el punto donde la potencia hidráulica alcanza un máximo con $\dot{W}_2 = 9.502 \times 10^{-6} \text{ kW}$.

Para las condiciones elegidas aplica la ecuación

$$\dot{Q} = T \frac{dS}{dT} \quad (\text{C.40})$$

Dado que involucra valores puntuales, de momento se usará en vez de en el desarrollo de la expresión de potencia térmica. Para mantener el mismo orden de magnitud en todo el rango de definición, se define mediante una recta apoyada en los puntos

$$P1(t_1, \dot{Q}_1; t_1 = 0 \dot{Q}_1 = 0$$

$$P2(t_2, \dot{Q}_2; t_2 = 13.6 \text{ s } \dot{Q}_2 = 4.751 \times 10^{-6} \text{ kW}$$

Donde la potencia térmica del segundo punto es la mitad de la potencia hidráulica. Obteniendo la ecuación de la recta apoyada en esos puntos se tiene que la ecuación para la

potencia térmica es

$$\dot{Q} = 3.4934 * 10^{-7}t \quad (C.41)$$

Poniéndola en términos de $T \frac{dS}{dt}$

$$T \frac{dS}{dt} = 3.4934 * 10^{-7}t \quad (C.42)$$

Sustituyendo los términos de la ecuación se obtiene la ecuación general para la velocidad de acumulación de energía interna, representativa del campo -C estudiado es

$$\frac{dU}{dT} = 3.4934 * 10^{-7}t + \frac{4.94175 * 10^{-4} Sen(0.168903t)}{0.0465 Cos(0.1689t) + 0.06975} \quad (C.43)$$

Al revisar el lado derecho de la igualdad se ve que el primer término representa la aportación térmica al campo, debida al calentamiento externo y el segundo término es la aportación hidráulica debida a la compresión mecánica del gas, ambos de signo positivo. Al tratarse de un cilindro con calentamiento y compresión simultáneos, las dos ramas representan entrada de potencia al sistema, por lo que la velocidad de acumulación de energía interna es una suma directa de potencia térmica e hidráulica, cosa que evidentemente no se cumpliría si se hubiese considerado enfriamiento o expansión en el cilindro. El comportamiento simultáneo de la velocidad de almacenamiento en el gas, junto con sus aportaciones se aprecia en la figura C.7

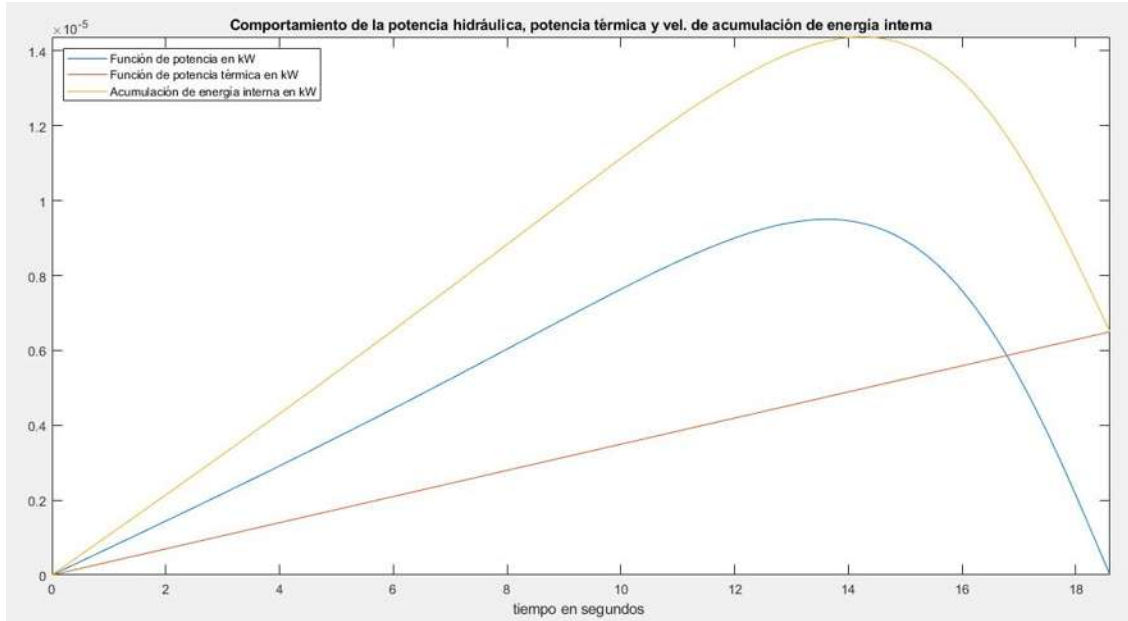


Figura C.7: Velocidad de acumulación de energía interna

Apéndice D

Artículos publicados

D.1. Fichas de publicación

Mendez-Barriga, J., Gonzalez-Avalos, G., Barrera-Gallegos, N., Rubio-Maya, C., & Ayala-Jaimes, G. (2022). Modelling and Simulation of an Energy Integrated Distillation Column in a Bond Graph Approach. *Entropy* 2022, 24(9), 1191; <https://doi.org/10.3390/e24091191>

Ayala-Jaimes, G., Gonzalez-Avalos, G., Gallegos, N. B., Garcia, A. P., & Mendez-B, J. (2022). Direct Determination of Reduced Models of a Class of Singularly Perturbed Nonlinear Systems on Three Time Scales in a Bond Graph Approach. *Symmetry*, 14(1). <https://doi.org/10.3390/sym14010104>

Garcia, A. P., Gonzalez-Avalos, G., Ayala-Jaimes, G., Gallegos, N. B., Mendez-B, J., & Alvarado-Zamora, D. (2022). Tracking Control of Physical Systems with Application to a System with a DC Motor: A Bond Graph Approach. *Symmetry*, 14(4), 1–40. <https://doi.org/10.3390/sym14040755>

Méndez Barriga, J., González Ávalos, G., & Rubio Maya, C. (2021). Modeling Energy Integrated Distillation Columns with Bond Graph. In M. E. Kalgi & A. Klich (Eds.), 4th International European Conference On Interdisciplinary Scientific Research, August 8-9, 2021 Warsaw, Poland: Vol. I (pp. 294–303). ISPEC Publishing House.

Article

Modeling and Simulation of an Energy Integrated Distillation Column in a Bond Graph Approach

Juancarlos Mendez-B ^{1,*} , Gilberto Gonzalez-Avalos ¹ , Noe Barrera Gallegos ²  and Gerardo Ayala-Jaimes ³ 
and Carlos Rubio-Maya ¹

¹ Graduate Studies Division of the Faculty of Mechanical Engineering, University of Michoacán, Morelia 58000, Mexico

² Faculty of Mechanical Engineering, University of Michoacán, Morelia 58000, Mexico

³ Faculty of Sciences of Engineering and Technology, Autonomous University of Baja California, Tijuana 21500, Mexico

* Correspondence: juancarlos.mendez@umich.mx

Abstract: The bond graph methodology for modelling an integrated energy distillation column is applied in this paper. The distillation column is built by five trays for a binary mixture. However, due to its modular construction in a bond graph, the number of trays can be increased. In order to link the analysis tools of systems modeled in the bond graph to the mathematical model given to a distillation column, a junction structure of the proposed bond graph is presented. Hence, this junction structure is a way to obtain the state space representation of the modeled column in bond graphs. Likewise, it is well known that distillation columns determine a class of nonlinear systems, so throughout this paper, these systems in a bond graph approach can be analyzed. In order to learn the behavior of the distillation column in the physical domain, simulation results using 20-Sim software are shown. In addition, with the simulation of two case studies consisting of two mixtures with different relative volatilities, the versatility of the column model in a bond graph is presented. In both cases, the increase in the feed flow, the mole fraction of the light component in the feed or the distillate reflux that enriches the concentration of light in the column determine an increase in the mole fraction of light in the distillate and in the bottom reflow. Further, the control design for a distillation column in the physical domain can be extended.

Keywords: bond graph; distillation column; integrated energy; junction structure; nonlinear systems



Citation: Mendez-B, J.; Gonzalez-Avalos, G.; Barrera Gallegos, N.; Ayala-Jaimes, G.; Rubio-Maya, C. Modeling and Simulation of an Energy Integrated Distillation Column in a Bond Graph Approach. *Entropy* **2022**, *24*, 1191. <https://doi.org/10.3390/e24091191>

Academic Editor: Ciro Aprea

Received: 10 July 2022

Accepted: 23 August 2022

Published: 25 August 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

The most important separation operation in process engineering is distillation. The distillation process allows for the separation of mixtures due to the differences in their volatilities, which is achieved by the application or removal of heat. However, these heating or cooling operations require the consumption of a huge amount of energy. Distillation columns have been used in a wide number of applications, for example, from alcoholic beverages to oleo chemicals of pharmaceutical plants.

There are a large number of references on modeling, analysis and processes in distillation columns that we can cite. In [1], the modeling and simulation of a distillation column via Matlab are described. In [2], the use of Aspen and Matlab in the modeling and simulation of a batch distillation column is proposed. The modeling and control of a distillation column in a petroleum process are presented in [3]. The simulation of a segmented distillation column in flexible operation considering dynamic modeling is developed in [4]. The modeling and simulation of a batch reactive distillation column with optimization effects are proposed in [5]. Steady-state modeling of reactive distillation columns is introduced in [6]. In [7], the separation of a methanol/water mixture is developed in the ASPEN PLUS software for the modeling and simulation of the distillation column.

In order to reduce their significant energy consumption, there have been several successful developments from the use of process and energy integration techniques applied to distillation columns. The aim of these energy-integrated schemes is to reduce costs as a result of less energy consumption [8]. A new distillation column configuration constructed by the Toyo Engineering Corporation with a reduction in energy consumption is presented in [9]. The optimal design of distillation columns using an exergy graphical method is proposed in [10]. A control structure of a heat-integrated distillation column using a benzene and toluene mixture for an optimal operation is proposed in [11]. The fluid separation by distillation using a modular model framework is introduced in [12]. The limitations of distillation columns in the separation of multicomponent mixtures with different structures are considered in [13].

The modeling of a distillation column using Dymola and Simulink is found in [14]. The modeling and simulation of the connection of two distillation columns of the ethanol–water mixture in the EMSO platform is developed in [15]. The use of ASPEN PLUS in the modeling and simulation of a distillation column of the methanol/water mixture is described in [16].

There are also numerous references on the control of distillation columns that can be cited. The implications of control for integrated distillation networks are explained in [17]. Multivariable control applied to distillation columns is proposed in [18]. The control of an energy-integrated distillation column and the selection of its structure is introduced by [19]. Different control configurations applied to distillation columns with respect to conceptual design are presented in [20].

In the modeling and simulation of distillation columns, various methods have been proposed, and some software has been used. Hence, in this paper, the bond graph methodology in the modeling of a distillation column is applied.

Bond graph theory offers the ability to model systems in a structural and generalized way [21–23]. These systems can be linear, nonlinear, time-varying with concentrated or distributed parameters. From a bond graph model, the mathematical model of the system in a transfer function or in state space can be obtained. Various important system analysis tools such as stability, controllability, observability, linearization and steady state in bond graph models can be determined directly [24]. Furthermore, the use of the bond graph in the controller design has been extended. One of the great advantages of bond graphs is the ability to model systems composed of electrical, mechanical, hydraulic, thermal and chemical sections [25].

Therefore, modeling an integrated energy distillation column in a bond graph approach is proposed in this paper. A junction structure for the determination of the mathematical model in state space from the bond graph model of the distillation column is presented.

A bond graph model of a distillation column is proposed in [26], in which the balance equations are obtained in parts, and the validation of the mathematical model requires great effort. Some advantages of the proposed paper with respect to [26] are that the construction of the full column bond graph is clearly displayed, each stage indicates the incoming and outgoing flows, and the determination and validation of the mathematical model are performed in a structured manner.

In this paper, the modeled distillation column has five plates, but due to the modular characteristic in the construction of bond graph models, columns with a high number of plates, such as in industrial cases, can be modeled in the physical domain.

The proposed junction structure allows obtaining the state space representation of the distillation column showing the nonlinear characteristic. This structure accepts the possible derivative causality of the storage elements, that is, that it can have linearly dependent elements.

Furthermore, the relationships between the different system variables can be determined in the bond graph model, and the analysis of structural properties such as observability, controllability, linearization and steady-state can be applied.

The versatility of the bond graph is expressed with the application of the proposed methodology to the simulation of two case studies of a distillation column with different relative volatility. The graphic results of the concentrations of the light component in the distillate and bottom flow through simulations using 20 Sim software are shown. In order to demonstrate the advantages of a bond graph model for this type of process, the behavior of chemical potentials along the column is illustrated.

However, other variables can be analyzed, such as the chemical power and the relationships of the variables in the different stages of the column, which can be achieved through causal paths in bond graph models.

The novelty of this paper is the description of a bond graph model of a distillation column and the direct connection with its well-established mathematical model in various published references [27–29]. This allows us to state the following advantages:

- The increase in the number of stages is immediate with a greater number of elements in the bond graph.
- Other auxiliary elements of a column, such as a condenser, reboiler and preheater, can be modeled in the bond graph and included in the column model in order to know the behavior of these elements in the column variables.
- The configuration of two columns for complete extractive distillation processes is possible by connecting the bond graph models of the conventional column with the extractive column.
- Structural properties such as structural observability and controllability, linearization, steady-state and singular perturbations of bond graph modeled systems can be applied.
- Control design to a column in the bond graph approach can be achieved.

Section 2 summarizes the traditional model of a distillation column describing the elements and variables that are part of the system. The essential elements in bond graph modeling are described in Section 3. A junction structure for linking bond graph models to mathematical models for this class of nonlinear systems is proposed in Section 4. The model of a distillation column with five stages in the physical domain is presented in Section 5. Two case studies in order to obtain the simulation results of the bond graph of the distillation column are analyzed in Section 6. Finally, Section 8 presents our conclusions.

2. Modeling of a Distillation Column

Distillation is the basic operation in petrochemical and pharmaceutical processes [26]. Distillation is carried out in a vertical column whose chemical process consists of separating mixtures. This column contains plates used to enhance the component separations, a reboiler to provide heat for the necessary vaporization from the bottom of the column, a condenser to cool and condense the vapor from the top of the column and a reflux drum to hold the condensed vapor so that liquid reflux can be recycled back from the top of the column. A scheme of a distillation column is shown in Figure 1.

The liquid mixture that needs to be processed is known as the feed, which is entered near the middle of the column to a stage known as the feed tray. Considering the feed tray, the column is divided into the enriching or rectification section located at the top and the stripping section at the bottom. A reboiler located at the bottom collects the feed flow coming down from the column. Likewise, vapor is generated in the reboiler due to the supply of heat. The vapor raised in the reboiler is returned to the column at the bottom. The resulting liquid from the reboiler is called the bottom product. A condenser located at the top of the column is used to cool the vapor moving up the column and, in some integration schemes, as depicted in Figure 1, may be used to preheat the mixture to be fed to the column at the same time. The part of the recovered liquid in the condenser is stored in a holding vessel called a reflux drum. A quantity of the liquid is recycled back to the top of the column, and it is called reflux. Finally, the distillation is the condensed liquid removed from the system.

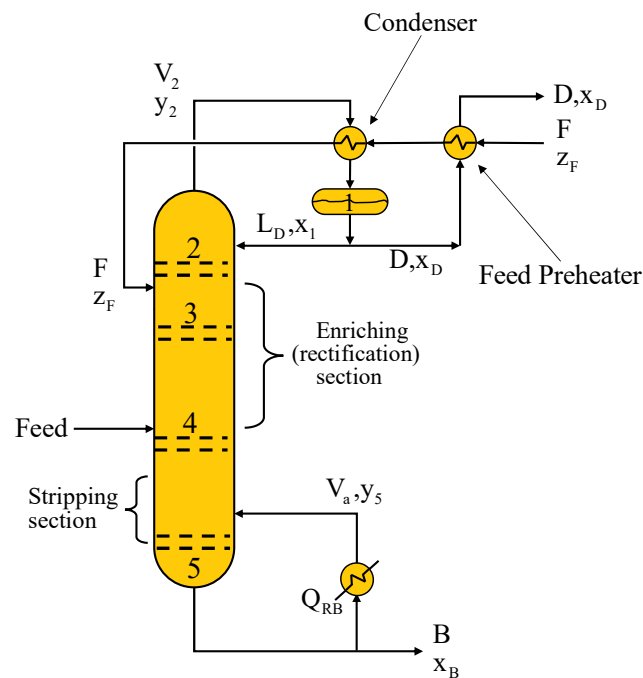


Figure 1. A distillation column.

Figure 2 shows the direction of vapor and liquid flow across a tray and across a column.

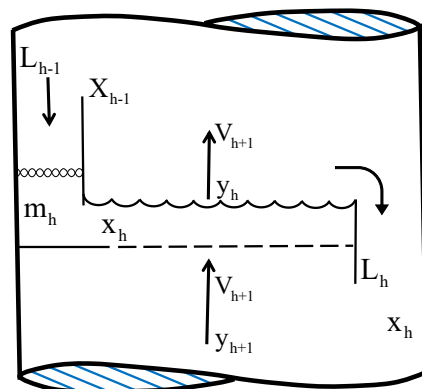


Figure 2. Section of a distillation column for a plate.

Two conduits are installed at the ends of each tray called downcomers through which the liquid falls by gravity. Because the vapor is lighter, it flows up the column and contacts the liquid through openings in each tray. The area through which the vapor circulates in each tray is called the active tray area.

In order to find a mathematical model of the distillation column, the following assumptions are applied.

- Each stage is a perfectly mixed stage.
- The liquid and vapor leaving any stage are in physical equilibrium.
- The energy balance is based on the conservation of enthalpy instead of internal energy.
- There is no vapor retention at any stage.
- Flows and fractions are on a molar basis.
- The volume and number of moles in the liquid remain constant at each stage.
- Total moles of liquid in the condenser and reboiler is constant.

Consider a distillation column with nc components; in the feed stage, the overall mass balance is given by

$$\frac{dn_h}{dt} = L_{h-1} + V_{h+1} + F - L_h - V_h \quad (1)$$

where n_h are the total mole mass in the feed stage (h), i.e., the total amount of matter in the stage expressed in moles, F is the molar flow rate for the supply and V and L are molar flows of vapor and liquid between stages, respectively.

The balance for each component j is expressed as

$$\frac{dn_{h,j}}{dt} = L_{h-1}x_{h-1,j} + V_{h+1}y_{h+1,j} + Fz_{F,j} - L_hx_{h,j} - V_hy_{h,j} \quad (2)$$

$$\frac{dx_{h,j}m_f}{dt} = L_{h-1}x_{h-1,j} + V_{h+1}y_{h+1,j} + Fz_{F,j} - L_hx_{h,j} - V_hy_{h,j} \quad (3)$$

where n_h are the moles retained in the stage, $\frac{dn_{h,j}}{dt}$ is the term of accumulation, $n_{h,j}$ are the moles corresponding to component j , $\frac{dx_{h,j}m_f}{dt}$ accumulation in the stage, $x_{k,j}$ is the mole fraction of component j in the liquid leaving stage k , $y_{k,j}$ is the mole fraction of component j in the vapor leaving stage k and $z_{F,j}$ is the mole fraction of component j in the feed.

As the liquid retention in each state is constant,

$$n_h \frac{dx_{h,j}}{dt} = L_{h-1}x_{h-1,j} + V_{h+1}y_{h+1,j} + Fz_{F,j} - L_hx_{h,j} - V_hy_{h,j} \quad (4)$$

also the flow of vapor and liquid between stages in the rectification and stripping sections is constant, for any stage i different from the feed stage,

$$V_i = V_{i+1} = V_{i-1} \quad (5)$$

$$L_i = L_{i+1} = L_{i-1} \quad (6)$$

The model expressed in mole fractions for a binary mixture, in terms of the most volatile component for a five-stage distillation column, is described by

$$\frac{dx_1}{dt} = -\frac{V_R}{m_1}x_1 + \frac{V_R}{m_1}y_2 \quad (7)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \frac{L_R}{m_2}x_1 - \frac{L_R}{m_2}x_2 - \frac{V_R}{m_2}y_2 + \frac{V_R}{m_2}y_3 \quad (8)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = \frac{L_R}{m_3}x_2 - \frac{L_S}{m_3}x_3 - \frac{V_R}{m_3}y_3 + \frac{V_S}{m_3}y_4 + \frac{F}{m_3}z_F \quad (9)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = \frac{L_S}{m_4}x_3 - \frac{L_S}{m_4}x_4 - \frac{V_S}{m_4}y_4 + \frac{V_S}{m_4}y_5 \quad (10)$$

$$\frac{dx_5}{dt} = \frac{L_S}{m_5}x_4 - \frac{B}{m_5}x_5 - \frac{V_S}{m_5}y_5 \quad (11)$$

where mole fraction (or composition) of the light component as a function on the composition of the same component in the liquid using the relative volatility formula α is expressed by

$$y_i = \frac{\alpha x_i}{1 + (\alpha - 1)x_i} \quad (12)$$

The system described from (7) to (11) indicates

- m_1 is the number of moles of liquid in the condenser.
- m_2 to m_4 are the moles of liquid in the intermediate plates and, by design, equal to each other.
- m_5 are the moles in the reboiler.
- x_1 to x_5 are the mole fractions of the light component in the liquid from stages 1 to 5.
- y_1 to y_5 are the mole fractions of the light component in the vapor leaving stages 1 to 5.
- F is the molar feed flow to the column.

- L_S and L_R are the molar flows of liquid in the stripping and rectification section stages, respectively.
- V_S and V_R are the molar flows of vapor going up the stripping and rectification, respectively.
- B is the molar flow of bottom product leaving the column.

The basic elements of bond graph modeling of systems are described in the next section.

3. Bond Graph Models

Power transfer is an essential property in bond graph modeling of systems. Using generalized variables, power is defined as the product of effort $e(t)$ and flow $f(t)$. Power transmission from one port to another port is drawn by a simple line with direction, which is called the power bond and is shown in Figure 3 [21].

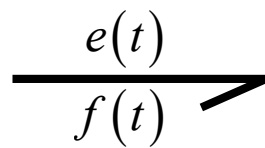


Figure 3. Power bond.

Generalized power variables in different energy domains are indicated in Table 1.

Table 1. Power variables.

Energy Domain	Effort ($e(t)$)	Flow ($f(t)$)
Electric	Voltage	Current
Mechanics of rotation	Torque	Velocity
Mechanics of translation	Force	Velocity
Hydraulics	Pressure	Volume flow
Thermal	Temperature	Heat flow
Thermodynamics	Temperature	Entropy flow
Chemistry	Chemical tension	Molar flow

Additionally, two energy variables are used in this graphical modeling called moment $p(t)$ and displacement $q(t)$ and are related to the power variables by $p(t) = \int e(t)dt$ and $q(t) = \int f(t)dt$. The relationships of the variables in a bond graph are determined by causality, which is applied to each bond by a vertical stroke, as illustrated in Figure 4 [21].

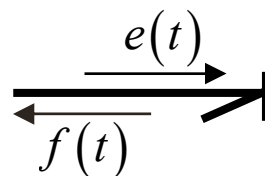


Figure 4. Causal power bond.

The elements that are part of a model in the bond graph are the following:

- Passive elements store or dissipate energy. Resistors are characterized by being dissipative elements, as shown in Figure 5.



Figure 5. Resistor.

The causal relationship defines

$$e(t) = \Phi_R[f(t)] \quad (13)$$

$$f(t) = \Phi_R^{-1}[e(t)] \quad (14)$$

The elements that store energy are inertia or capacitance. Figure 6 illustrates a capacitance in integral causality assigned, and the relationship of its variables is expressed by

$$e(t) = \phi_C^{-1} \left[\int f(t) dt \right] \quad (15)$$

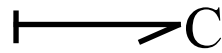


Figure 6. Capacitance in integral causality.

when this element is in derivative causality it is defined by

$$f(t) = \frac{d\phi_C[e(t)]}{dt} \quad (16)$$

and is shown in Figure 7.



Figure 7. Capacitance in derivative causality.

Inertia is the other energy storage element, and its representation in integral causality is illustrated in Figure 8.



Figure 8. Inertia in integral causality.

whose causal relationship is given by

$$f(t) = \phi_I^{-1} \left[\int e(t) dt \right] \quad (17)$$

this element in derivative causality is defined by

$$e(t) = \frac{d\phi_I[f(t)]}{dt} \quad (18)$$

and is shown in Figure 9.



Figure 9. Inertia in derivative causality.

- Active elements are representative elements of sources that supply power to the system due to the two variables. There are two sources that are shown in Figure 10.



Figure 10. Active elements: sources of effort and flow.

- Transformation elements change the magnitude or type of signal to another. One of these elements is transformers, as shown in Figure 11.



Figure 11. Transformers.

Causal relationships are described by

$$\begin{bmatrix} e_1(t) \\ f_1(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_2(t) \\ f_2(t) \end{bmatrix} \quad (19)$$

$$\begin{bmatrix} e_2(t) \\ f_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1(t) \\ f_1(t) \end{bmatrix} \quad (20)$$

depending on the causality.

Figure 12 shows the element that changes the type of the signal



Figure 12. Gyroscopes.

and according to the applied causality, the expressions are given by

$$\begin{bmatrix} e_1(t) \\ f_1(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & r_1 \\ \frac{1}{r_1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_2(t) \\ f_2(t) \end{bmatrix} \quad (21)$$

$$\begin{bmatrix} e_2(t) \\ f_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & r_2 \\ \frac{1}{r_2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1(t) \\ f_1(t) \end{bmatrix} \quad (22)$$

- Connection elements are defined by the series junction (1) and the parallel junction (0), and through these junctions, the connection of the bonds is made. Figure 13 illustrates these junctions.

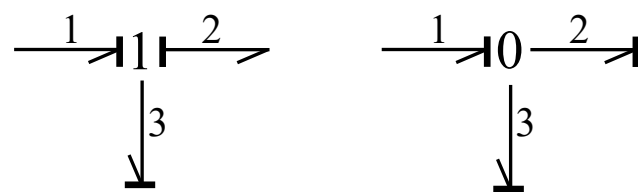


Figure 13. Junctions.

According to Figure 10, junction 1 determines the following expressions for efforts and flows,

$$f_1(t) = f_2(t) = f_3(t); e_1(t) - e_2(t) - e_3(t) = 0 \quad (23)$$

and for junction 0, they are

$$f_1(t) - f_2(t) - f_3(t) = 0; e_1(t) = e_2(t) = e_3(t) \quad (24)$$

- Active bonds are used as information bonds and are drawn by full arrows indicating the signal transmitted by a sensor, a summation element or, in general, one of the generalized power variables, as shown in Figure 14.



Figure 14. Active bond.

4. Junction Structure of Bond Graph Models for a Class of Nonlinear Systems

Bond graph modeling of systems has been characterized by determining structural properties [30]. The assignment of causality to the different elements of a bond graph allows to directly find structural controllability and structural observability, steady-state response and linearization [23]. One of the keys to carry out the formal mathematical proof of these analyses is to obtain the junction structure of the bond graph.

The junction structure classifies the different elements of the model into fields. Hence, in this paper, a junction structure that allows the modeling of a distillation column in a bond graph is proposed. This structure is based on the fields of sources and detectors that determine inputs and outputs, respectively, the storage field that has elements in integral and derivative causality assigning linearly independent and dependent state variables, respectively, and the field of dissipative elements has been divided into linear and nonlinear elements and can also be modulated.

The proposed junction structure is shown in Figure 15 with the following elements:

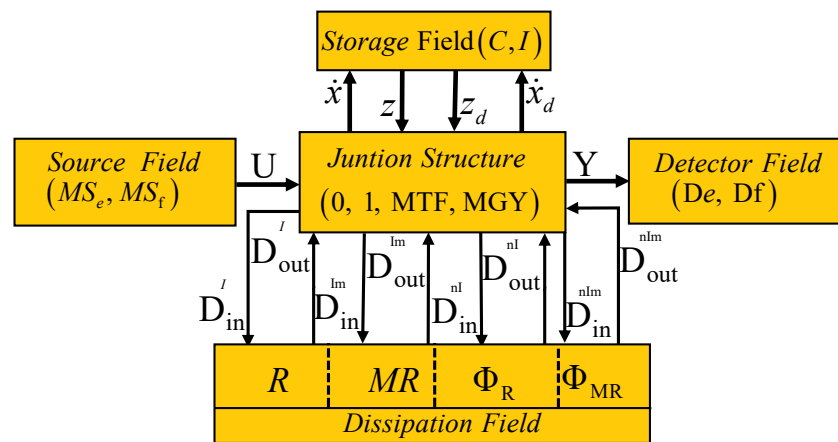


Figure 15. Junction structure for nonlinear systems modeled by bond graphs.

- System inputs $u(t) \in \mathbb{R}^p$ through the effort and flow sources denoted by MS_e and MS_f , respectively.
- System outputs $y(t) \in \mathbb{R}^q$ through effort and flow detectors denoted by D_e and D_f , respectively.
- Linearly independent state variables $x(t) \in \mathbb{R}^n$ are storage elements in integral causality C or I with power variables $\dot{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ and $z(t) \in \mathbb{R}^n$.
- Linearly dependent state variables $x_d(t) \in \mathbb{R}^m$ are storage elements in derivative causality C or I with power variables $\dot{x}_d(t) \in \mathbb{R}^m$ and $z_d(t) \in \mathbb{R}^m$.
- Linear and nonlinear algebraic relationships through the dissipative field are divided into:
 - Linear dissipation elements denoted by R with key vectors $D_{in}^l \in \mathbb{R}^{r_l}$ and $D_{out}^l \in \mathbb{R}^{r_l}$.
 - Modulated linear dissipation elements denoted by MR with key vectors $D_{in}^{lm} \in \mathbb{R}^{r_{lm}}$ and $D_{out}^{lm} \in \mathbb{R}^{r_{lm}}$.
 - Nonlinear dissipation elements denoted by ϕ_R with key vectors $D_{in}^{nl} \in \mathbb{R}^{r_{nl}}$ and $D_{out}^{nl} \in \mathbb{R}^{r_{nl}}$.
 - Modulated nonlinear dissipation elements denoted by ϕ_{MR} with key vectors $D_{in}^{nlm} \in \mathbb{R}^{r_{nlm}}$ and $D_{out}^{nlm} \in \mathbb{R}^{r_{nlm}}$.

- The junction structure formed by
 - Junctions 1 and 0 that determine the connection between the elements.
 - Transformers and gyrators denoted by *MTF* and *MGY*, respectively.

The relationships between inputs and outputs of the junction structure of Figure 15 determine the mathematical model of the bond graph model. Due to the fact that this structure allows modulated elements in general, the model represents a class of nonlinear systems, and through the following lemma, the formal relationships of the proposed junction structure and its representation in state space are established.

Lemma 1. Consider a physical system modeled by a bond graph model in a predefined integral causality assignment whose block diagrams, key vectors and interconnections are illustrated in Figure 15. The junction structure is defined by

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ D_{in}^l(t) \\ D_{in}^{lm}(t) \\ D_{in}^{nl}(t) \\ D_{in}^{nlm}(t) \\ y(t) \\ z_d(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11}(x) & S_{11}^{11}(x) & S_{12}^{12}(x) & S_{12}^{13}(x) & S_{12}^{14}(x) & S_{13}(x) & S_{14}(x) \\ S_{21}^{11}(x) & S_{22}^{11}(x) & S_{22}^{12}(x) & 0 & 0 & S_{23}^{11}(x) & 0 \\ S_{21}^{21}(x) & S_{22}^{21}(x) & S_{22}^{22}(x) & 0 & 0 & S_{23}^{21}(x) & 0 \\ S_{31}^{31}(x) & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{33}^{31}(x) & 0 \\ S_{41}^{41}(x) & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{43}^{41}(x) & 0 \\ S_{31}(x) & S_{32}^{11}(x) & S_{32}^{12}(x) & S_{32}^{13}(x) & S_{32}^{14}(x) & S_{33}(x) & 0 \\ S_{41}(x) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z(t) \\ D_{out}^l(t) \\ D_{out}^{lm}(t) \\ D_{out}^{nl}(t) \\ D_{out}^{nlm}(t) \\ u(t) \\ \dot{x}_d(t) \end{bmatrix} \quad (25)$$

with entries of $S(x)$ inside the set $\{0, \pm 1, \pm f_T(x), \pm f_G(x)\}$, where $f_T(x)$ and $f_G(x)$ are state functions that modulate *MTF* and *MGY*, respectively; and the constitutive relations of the fields are given by

$$z(t) = Fx(t) \quad (26)$$

$$z_d(t) = F_d x_d(t) \quad (27)$$

$$D_{out}^l(t) = L D_{in}^l(t) \quad (28)$$

$$D_{out}^{lm}(t) = L_m D_{in}^{lm}(t) \quad (29)$$

$$D_{out}^{nl}(t) = \phi(D_{in}^{nl}(t)) \quad (30)$$

$$D_{out}^{nlm}(t) = \phi_m(D_{in}^{nlm}(t)) \quad (31)$$

then a state variable representation for this class of nonlinear systems is described by

$$\dot{x}(t) = A(x)x(t) + B(x)u(t) + H(x, u) \quad (32)$$

where

$$A(x) = E^{-1}(x) \left[S_{11}^{11}(x) + S_{12}^{11}(x)Q(x)S_A(x) + S_{12}^{12}(x)Q_m(x)S_{Am}(x) + S_{14}(x)F_d^{-1}\dot{S}_{14}(x) \right] F \quad (33)$$

$$B(x) = E^{-1}(x) \left[S_{13}(x) + S_{12}^{11}(x)Q(x)S_B(x) \right] \quad (34)$$

$$H(x, u) = E^{-1}(x) \left[S_{21}^{13}(x)D_{out}^{nl}(t) + S_{12}^{14}(x)D_{out}^{nlm}(t) \right] \quad (35)$$

$$E(x) = I - S_{14}(x)F_d^{-1}S_{41}(x)F \quad (36)$$

with

$$S_A(x) = S_{21}^{11}(x) + S_{22}^{12}(x)M_m(x)S_{21}^{21}(x) \quad (37)$$

$$S_{Am}(x) = S_{21}^{21}(x) + S_{22}^{21}(x)M(x)S_{21}^{11}(x) \quad (38)$$

$$S_B(x) = S_{23}^{11}(x) + S_{22}^{12}(x)M_m(x)S_{23}^{21}(x) \quad (39)$$

$$S_{Bm}(x) = S_{23}^{21}(x) + S_{22}^{21}(x)M(x)S_{23}^{11}(x) \quad (40)$$

and

$$Q(x) = L \left[I - S_{22}^{11}(x)L - S_{22}^{12}(x)M_m(x)S_{22}^{21}(x)L \right]^{-1} \quad (41)$$

$$Q_m(x) = L_m \left[I - S_{22}^{22}(x)L_m - S_{22}^{21}(x)M(x)S_{22}^{12}(x)L_m \right]^{-1} \quad (42)$$

$$M(x) = L \left[I - S_{22}^{11}(x)L \right]^{-1} \quad (43)$$

$$M_m(x) = L_m \left[I - S_{22}^{22}(x)L_m \right]^{-1} \quad (44)$$

The proof of Lemma 1 is given in Appendix A.

The proposed methodology to obtain a distillation column model in a bond graph approach is applied in the next section.

5. Bond Graph Model of a Distillation Column

A distillation column is a multidomain energy system. However, for the purposes of this paper, the variables of interest for the column are described in Section 2.

In the bond graph approach, this column represents a chemical system whose power variables are: chemical potential and molar flow as effort and flow, respectively. The column has five stages that determine five different chemical tensions, and the bond graph will have five 0-junctions. Storage elements C are connected to each of these 0-junctions, resulting in the accumulation of components. From each stage, there is a molar flow of the component leaving that stage in the vapor phase $V_R y_i = V_{i,1}$. These terms are modeled as dissipative elements R , and the molar flow of the light component in the liquid phase leaving stage i indicates the connection of another element R . In this way, the elements are connected, and each 0-junction expresses the equation of each plate of the column. Therefore, a bond graph model of a distillation column of five plates is illustrated in Figure 16.

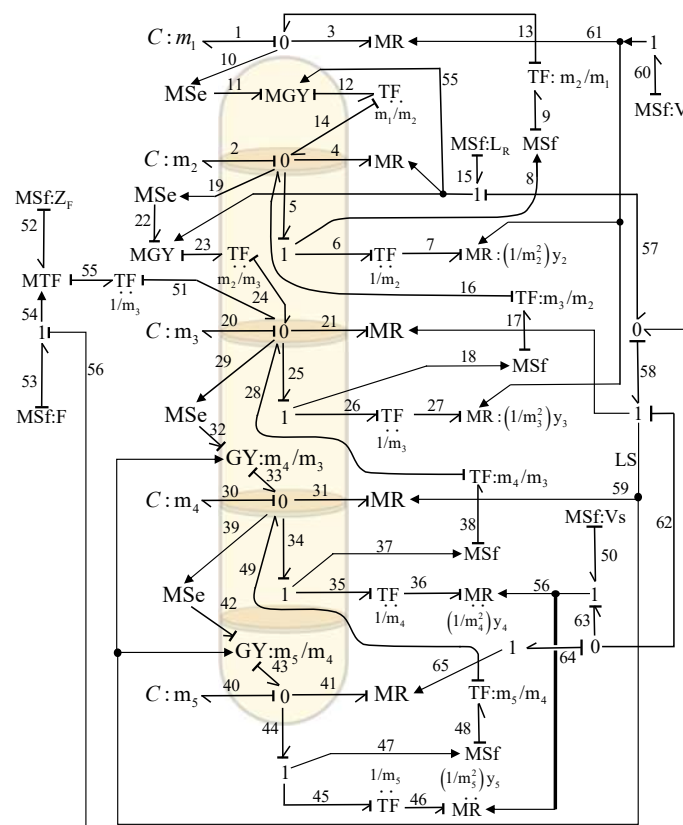


Figure 16. Bond Graph for a Distillation Column.

The basic elements of the distillation column bond graph are:

- Five major 0-junctions of each chemical tension corresponding to each plate of the column.
- Five storage elements C of each flow accumulator for each tray.
- MR elements are modulated by molar flows and considering the relative volatility.
- Transformers TF and gyrators MGY are used to couple the different input and output flows to each tray.

In order to obtain the mathematical model of a bond graph model, the variables of the different fields, according to Figure 15, are obtained. Hence, the key vectors for the storage elements are expressed by

$$x(t) = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_{20} \\ q_{30} \\ q_{40} \end{bmatrix}; \dot{x}(t) = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_{20} \\ f_{30} \\ f_{40} \end{bmatrix}; z(t) = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_{20} \\ e_{30} \\ e_{40} \end{bmatrix} \quad (45)$$

the decomposition of the dissipation field and its key vectors are described by

$$D_{in}^{lm}(t) = \begin{bmatrix} e_4 \\ e_3 \\ e_{21} \\ e_{31} \\ e_{41} \end{bmatrix}; D_{out}^{lm}(t) = \begin{bmatrix} f_4 \\ f_3 \\ f_{21} \\ f_{31} \\ f_{41} \end{bmatrix}; D_{in}^{nlm}(t) = \begin{bmatrix} e_7 \\ e_{27} \\ e_{36} \\ e_{46} \end{bmatrix}; D_{out}^{nlm}(t) = \begin{bmatrix} f_7 \\ f_{27} \\ f_{36} \\ f_{46} \end{bmatrix} \quad (46)$$

with the input

$$u(t) = f_{53} \quad (47)$$

The linear constitutive relationships are given by

$$F = \text{diag} \left\{ \frac{1}{m_1}, \frac{1}{m_2}, \frac{1}{m_3}, \frac{1}{m_4}, \frac{1}{m_5} \right\} \quad (48)$$

$$L_m = \text{diag} \{ L_R, V_R, L_S, L_S, B \} \quad (49)$$

and nonlinear as

$$\begin{bmatrix} f_7 \\ f_{27} \\ f_{36} \\ f_{46} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{V_R}{m_2^2} y(e_7) \\ \frac{V_R}{m_3^2} y(e_{27}) \\ \frac{V_S}{m_4^2} y(e_{36}) \\ \frac{V_S}{m_5^2} y(e_{46}) \end{bmatrix} \quad (50)$$

where

$$y(e_7) = \frac{\alpha e_7}{1 + (\alpha - 1)e_7} \quad (51)$$

$$y(e_{27}) = \frac{\alpha e_{27}}{1 + (\alpha - 1)e_{27}} \quad (52)$$

$$y(e_{36}) = \frac{\alpha e_{36}}{1 + (\alpha - 1)e_{36}} \quad (53)$$

$$y(e_{46}) = \frac{\alpha e_{46}}{1 + (\alpha - 1)e_{46}} \quad (54)$$

The junction structure of the bond graph is defined by

$$\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_{20} \\ f_{30} \\ f_{40} \\ e_4 \\ e_3 \\ e_{21} \\ e_{31} \\ e_{41} \\ e_7 \\ e_{27} \\ e_{36} \\ e_{46} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ m_1/m_2 L_R & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_2/m_3 L_R & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_3/m_4 L_S & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_4/m_5 L_S & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1^2/m_2^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -m_2 & m_3^2/m_2^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -m_3 & m_4^2/m_3^2 & 0 & f_{52}/m_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -m_4 & m_5^2/m_4^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -m_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_{20} \\ e_{30} \\ e_{40} \\ f_4 \\ f_3 \\ f_{21} \\ f_{31} \\ f_{41} \\ f_7 \\ f_{27} \\ f_{36} \\ f_{46} \\ f_{53} \end{bmatrix} \quad (55)$$

There are no storage elements in derivative causality assignment in the bond graph model, so there are no linearly dependent variables, and the matrix $E(x) = I$. For this case, since $S_{22}^{11}(x) = 0$, $S_{22}^{22}(x) = 0$, then $M(x) = L$, $M_m(x) = L_m T$, $Q(x) = L$ and $Q_m(x) = L_m$. From (33), (37), (38) with (48), (49) and (55),

$$A(x) = \begin{bmatrix} \frac{-V_R}{m_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L_R}{m_2} & \frac{-L_R}{m_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L_R}{m_3} & \frac{-L_S}{m_3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L_S}{m_4} & \frac{-L_S}{m_4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L_S}{m_5} & \frac{-B}{m_5} \end{bmatrix} \quad (56)$$

From (34), (39), (40) with (55),

$$B(x) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ f_{52}/m_3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (57)$$

From (35) with (50) and (55),

$$H(x, u) = \begin{bmatrix} \frac{V_R}{m_1} y(e_7) \\ \frac{-V_R}{m_2} y(e_7) + \frac{V_R}{m_2} y(e_{27}) \\ \frac{-V_R}{m_3} y(e_{27}) + \frac{V_R}{m_1} y(e_{36}) \\ \frac{-V_S}{m_4} y(e_{36}) + \frac{V_S}{m_4} y(e_{46}) \\ \frac{-V_S}{m_5} y(e_{46}) \end{bmatrix} \quad (58)$$

The state space of the distillation column from (56), (57) and (58) is defined by

$$\dot{x}(t) = \begin{bmatrix} \frac{-V_R}{m_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L_R}{m_2} & \frac{-L_R}{m_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L_R}{m_3} & \frac{-L_S}{m_3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L_S}{m_4} & \frac{-L_S}{m_4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L_S}{m_5} & \frac{-B}{m_5} \end{bmatrix} x(t) + \begin{bmatrix} \frac{V_R}{m_1} y(e_7) \\ \frac{-V_R}{m_2} y(e_7) + \frac{V_R}{m_2} y(e_{27}) \\ \frac{-V_R}{m_3} y(e_{27}) + \frac{V_R}{m_1} y(e_{36}) \\ \frac{-V_S}{m_4} y(e_{36}) + \frac{V_S}{m_4} y(e_{46}) \\ \frac{-V_S}{m_5} y(e_{46}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ f_{52}/m_3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} u(t) \quad (59)$$

in a developed form with (46), the distillation column has the form

$$m_1 \frac{dq_1}{dt} = -V_R q_1 + V_R y(q_2) \quad (60)$$

$$m_2 \frac{dq_2}{dt} = L_R q_1 - L_R q_2 - V_R y(q_2) + V_R y(q_3) \quad (61)$$

$$m_3 \frac{dq_3}{dt} = L_R q_2 - L_S q_3 - V_R y(q_3) + V_S y(q_4) + f_{52} \cdot u \quad (62)$$

$$m_4 \frac{dq_4}{dt} = L_S q_3 - L_S q_4 - V_S y(q_4) + V_S y(q_5) \quad (63)$$

$$m_5 \frac{dq_5}{dt} = L_S q_4 - B q_5 - V_S y(q_5) \quad (64)$$

Comparing the equations from (7) to (11) with respect to (60) to (64), it is concluded that the model built in the bond graph of the distillation column effectively represents the mathematical model of this system.

6. Distillation Columns Simulation in the Physical Domain

A generic design distillation column adapted to the conditions of the case studies is used. The architecture of the system is of a column designed for crude oil with bubble plates and a total condenser modified for distillation of fatty acids under vacuum.

The difference in the volatilities of the components of a mixture determines the degree of difficulty of the separation and, to a large extent, the complexity of the equipment to be used. This difference is evaluated by means of the relative volatility α , which is the ratio of the volatility of the most volatile component (light) over that of the least volatile (heavy). The greater its value, the easier the separation and the lower the number of steps required for a given separation, and decreasing α increases the number of stages in the column.

Two case studies with different relative volatility based on a distillation column bond graph were simulated. The 20 Sim software was used to perform the simulations in a bond graph environment.

6.1. First Case Study

The distillation column that is proposed to be simulated has a binary mixture with a low relative volatility. The nominal operating conditions of the column are described in Table 2. These conditions are based on classic cases from the literature [27–29], adapted and scaled into five stages.

Table 2. Operational conditions of the distillation column.

Number of Stages, n	5
Feed, F	1 kmol/min
m_1	5 kmol
m_2	0.5 kmol
m_3	0.5 kmol
m_4	0.5 kmol
m_5	5 kmol
z_F	0.5
L_R	2.706 kmol/min
V_S	3.206 kmol/min
B	0.5 kmol/min
V_R	3.206 kmol/min
α	1.5

The input variables to the system are defined by L_R (distillate reflux to column dome), V_S (bottom reflux to the reboiler), z_F (mole fraction of light component in the feed) and F (molar feed flow) being the initial conditions given in Table 3.

Table 3. Steady-state values.

$q_1 = 0.669271$
$q_2 = 0.574302$
$q_3 = 0.488711$
$q_4 = 0.412885$
$q_5 = 0.330728$

The simulation results are obtained from increments of 10% of its supplied value, so the input vector with these variations is expressed by

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.1 * L_R \\ 0.1 * V_S \\ 0.1 * z_F \\ 0.1 * F \end{bmatrix} \quad (65)$$

and the activation times for the given changes are described by

$$\begin{bmatrix} t_{L_R} \\ t_{V_S} \\ t_{z_F} \\ t_F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 90 \\ 140 \\ 50 \\ 10 \end{bmatrix} \text{minutes} \quad (66)$$

These time periods are calculated by the time required for the stabilization of the light component and the activation sequence of the different inputs. The sequence of input changes was selected to first introduce the changes that can be caused by external variations (feed flow and composition) and then those that can be used with the greatest effect in controlling the outputs.

The critical variables in the process are the concentrations of the light component in both the distillate and bottom flows since they are the ones that determine the degree of separation achieved.

The dynamic behavior of the light component q_1 is illustrated in Figure 17. After 10 min of steady-state operation, the feed flow is increased by 10%, so the magnitude of the light component also increases. According to the graph, the concentration of the light component in the distillate increases from $q_1 = 0.6693$ at $t = 0$ to $q_1 = 0.7154$ at $t = 50$ min, which is an increase of 6.9% with a 10% change in input. The next change is the feed composition, which also increases the light component to $q_1 = 0.7274$ at $t = 90$ min, representing an increase of 1.7% at a 10% input change.

The increase in the return of the distillate to the column at $t = 90$ min produces an increase in the mole fraction of light in the distillate to $q_1 = 0.7850$ at $t = 140$ min, which determines a 7.9% increase due to a 10% increase in this input. Finally, the increase in bottom reflow produces a decrease in the concentration of the light component throughout the separation stages and consequently also in the distillate. In this way, a 10% increase in the return to the reboiler produces a change to $q_1 = 0.7172$, which determines a decrease of 8.6%, representing the inverse effect with respect to the previous changes.

Using the changes in the system inputs given by (65) and subject to the distribution of time intervals defined by (66), the dynamic behavior in the concentration of light in the bottom q_5 is shown in Figure 18.

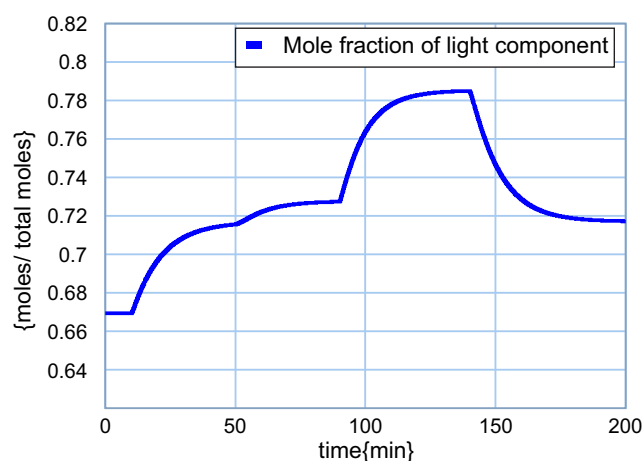


Figure 17. Behavior of the light component q_1 .

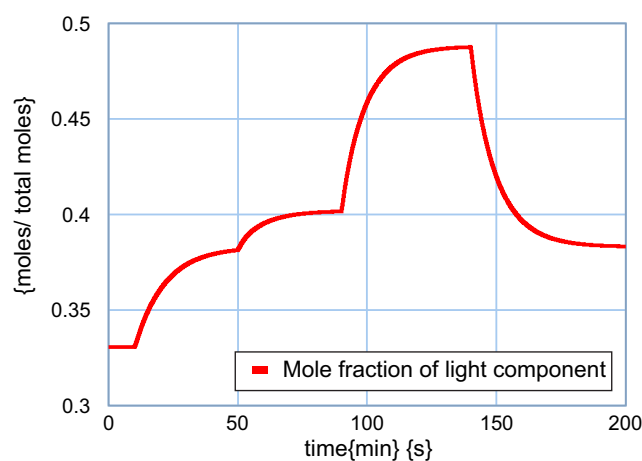


Figure 18. Concentration light in the bottom q_5 .

According to Figure 18, the concentrations are lower; however, it is clearly seen that the evolution of the changes is similar to q_1 .

An interesting aspect of the bond graph model of the distillation column is that the chemical potential can be obtained. Therefore, the behavior of the chemical potential of stages 3, 4 and 5 are shown in Figure 19.

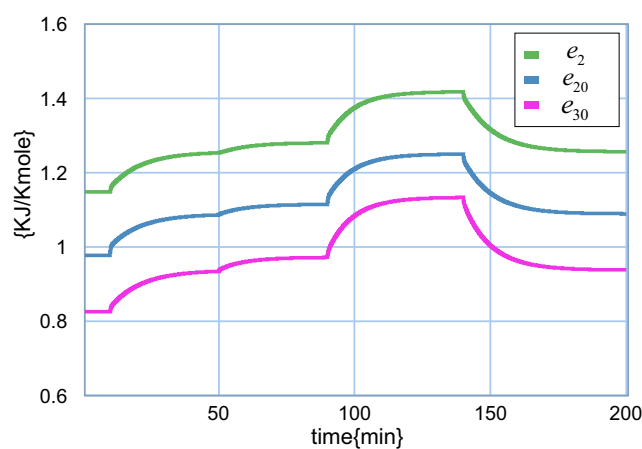


Figure 19. Chemical potential of stages 3, 4 and 5.

6.2. Second Case Study

The distillation column considered in this case has a binary mixture with a high relative volatility that allows easy separation of the mixture without requiring many column stages. In this case, the nominal data of the column are indicated in Table 4 [27–29].

Table 4. Operational conditions of the distillation column.

Number of Stages, n	5
Feed, F	1 kmol/min
m_1	5 kmol
m_2	0.5 kmol
m_3	0.5 kmol
m_4	0.5 kmol
m_5	5 kmol
z_F	0.6
L_R	0.9776 kmol/min
V_S	1.5886 kmol/min
B	0.389 kmol/min
V_R	1.5886 mol/min
α	2.6

The steady-state values of the system are described by Table 5.

Table 5. Steady-state values.

$q_1 = 0.8472$
$q_2 = 0.6807$
$q_3 = 0.5288$
$q_4 = 0.3170$
$q_5 = 0.2118$

The inputs to the system are the same as in the previous case, with a variation of increments of 10% of their nominal values defined by

$$\begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ z_F \\ F \end{bmatrix}_\delta = \begin{bmatrix} 0.9776 \\ 1.5886 \\ 0.6 \\ 1 \end{bmatrix}$$

the activation times for each of the inputs are defined by (66).

The performance of the light component in the distillate q_1 is illustrated in Figure 20.

According to Figure 20, in the range of variation from 10 to 50 min, the feed is richer in the light component and introduces a greater amount of light component in the distillate, increasing from $q_1 = 0.8472$ to $q_2 = 0.8903$ at $t = 50$ min with a 5.1% increase due to a 10% change in that input. The feed composition is then increased, and the mole fraction of light in the distillate increases to $q_1 = 0.9043$ at $t = 90$ min, representing an increase of 1.6% with a 10% increase in this input. With the 10% increase in distillate return, the mole fraction of the lighter in the distillate also increases to $q_1 = 0.9240$ at $t = 140$ min, indicating a percentage increase of 2.2%. Finally, a 10% increase in the bottom reflow produces a decrease in the concentration of the light component throughout the separation stages and,

consequently, also in the distillate to 0.8924 at $t = 200$ min, which determines a reduction in percentage to 3.4%.

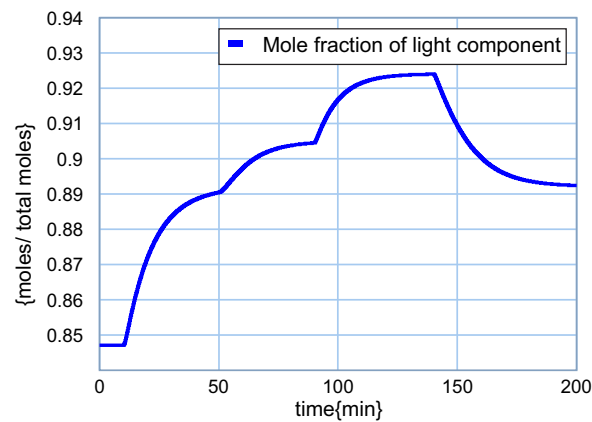


Figure 20. Response of the light component in the distillate.

The behavior in the composition of the flow of bottom shown in Figure 21 has a similar performance to the composition of the light component; however, the concentrations of light have much lower magnitudes as expected.

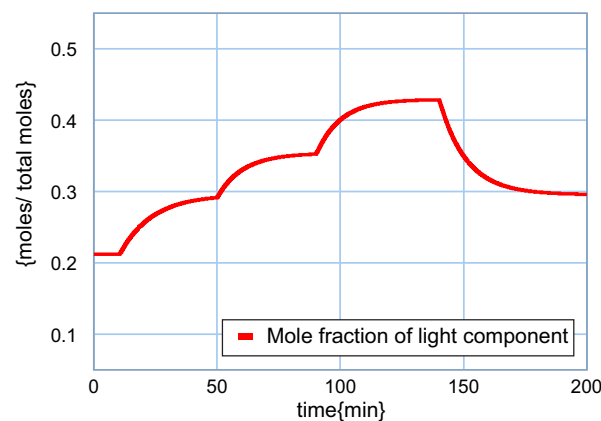


Figure 21. Response of the light component in the bottom.

The performance of chemical potentials of stages 3, 4 and 5 are illustrated in Figure 22.

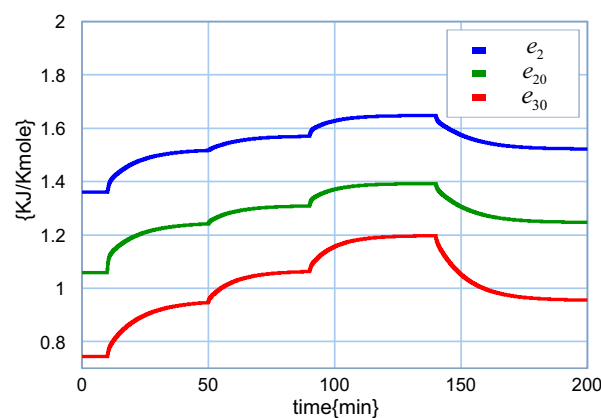


Figure 22. Chemical tension of stages 3, 4 and 5.

The response of the chemical tensions have forms similar to the concentration of the light component because it depends directly on this concentration. From the bond graph point of view, the measurement of these chemical tensions is the detection of efforts in

the 0-junctions connected to $C_1 : m_1$, $C_2 : m_2$ and $C_3 : m_3$. Therefore, the use of the bond graph model of the distillation column allows for the detection of other variables, including chemical power.

Furthermore, the influence of some elements in the measurement of some variable in the bond graph can be obtained in a clear, simple and direct way with the use of causal paths [31].

7. Discussions

One of the objectives of proposing a junction structure for the class of nonlinear systems that the given distillation column represents is to verify that this graphical model effectively determines the differential equations of the system, which is demonstrated from Equations (60)–(64).

The behavior of the responses of the column model has been verified according to [27–29]. Likewise, the following observations are given:

- Any action that causes an increase in the concentration of the most volatile component within the system automatically causes a corresponding increase in its concentration in each of the stages, which in the model corresponds to the state variables $(q_1, q_2, q_3, q_4, q_5)$, particularly in the variables output q_1 and q_5 , which represent the mole fraction of light in the distillate and in the bottom stream.
- Any increase in feed flow, mole fraction of light component in the feed, and distillate reflux cause an increase in the state variables $(q_1, q_2, q_3, q_4, q_5)$ of magnitude proportional to the relative effect of each disturbance.
- Similarly, any disturbance that causes a reduction in the concentration of light, the system will decrease its concentration at each stage. The bottom current is the poorest in that component, and therefore, in the bottom reflux towards the reboiler, it should cause a decrease in the values of the state variables $(q_1, q_2, q_3, q_4, q_5)$.

Finally, the proposed bond graph for a five-stage column can be increased to a larger number, as illustrated in Figure 23.

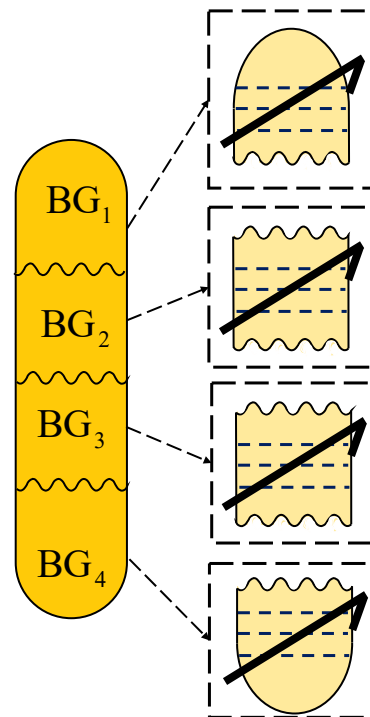


Figure 23. Bond graph scheme for a column of more than 5 plates.

According to Figure 22, there is a column of 20 plates, which is achieved by connecting four bond graphs and each of them with five plates.

8. Conclusions

Industrial processes generally represent nonlinear systems, whereas classical methods normally determine their behavior through nonlinear differential equations, which are complex. In this way, a graphical alternative such as the bond graph modeling of a distillation column has been presented. Due to its graphical nature, this model describes the exchange of power in the system considering energy transformation and storage.

One of the advantages of the bond graph approach in modeling the distillation columns in this paper is that it has been built in a modular way. Thus, a column formed by a large number of stages can be obtained. In order to determine the mathematical model of the column from its bond graph, a junction structure that indicates and classifies the variables and elements of the system has been proposed. Through this junction structure, a natural link of the bond graph and its mathematical representation is presented. Therefore, the structural characteristics of the system can be derived graphically and mathematically.

Other advantages of this approach are:

- If there is a reconfiguration of the column, the new bond graph is instructed to be built.
- The relationship of the variables and elements that the column contains is clear and simple with the use of causal trajectories [31], in the classical approach, it is difficult and confusing.
- The inclusion of new elements or non-modeled dynamics or the incorporation of different mathematical relationships such as a different relative volatility function is straightforward and, in the classical approach, can lead to the total reconstruction of the system.
- The analysis of the system in the bond graph is symbolic, and in the classical approach, numerical analysis is common.
- The measurement of any variable in the bond graph is straightforward, as is the chemical potential.
- The linearization of the bond graph for approximate studies can be obtained directly with [32].
- The inputs and outputs for the possible design of controllers and observers are direct in the bond graph.

Finally, the methodology exposed to two case studies has been applied. In both cases, there are binary mixtures with different relative volatilities, and the behavior of the concentration of the light component in the distillate and bottom, as well as the chemical tensions of the column, have been shown.

Author Contributions: Conceptualization, J.M.-B. and G.G.-A.; methodology, G.G.-A.; validation, N.B.G.; formal analysis, G.A.-J., N.B.G. and C.R.-M.; writing—original draft preparation, J.M.-B., C.R.-M. and G.G.-A.; writing—review and editing, G.G.-A., G.A.-J. and N.B.G. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research received no external funding.

Institutional Review Board Statement: Not applicable.

Informed Consent Statement: Not applicable.

Data Availability Statement: Not applicable.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

Appendix A

Proof. From the seventh line of (25) with (26) and (27), the relationship between storage elements in integral and derivative causality assignment are given by

$$x_d(t) = F_d^{-1} S_{41}(x) F x(t) \quad (\text{A1})$$

obtaining the derivative with respect to time,

$$\dot{x}_d(t) = F_d^{-1} \dot{S}_{41}(x) Fx(t) + F_d^{-1} S_{41}(x) F \dot{x}(t) \quad (\text{A2})$$

From the second line of (25) with (28) and (29),

$$D_{in}^l(t) = \left[I - S_{22}^{11}(x)L \right]^{-1} \left[S_{21}^{11}(x)z(t) + S_{22}^{12}(x)L_m D_{in}^{lm}(t) + S_{23}^{11}(x)u(t) \right] \quad (\text{A3})$$

from the third line of (25) with (28) and (29),

$$D_{in}^{lm}(t) = \left[I - S_{22}^{11}(x)L_m \right]^{-1} \left[S_{21}^{21}(x)z(t) + S_{22}^{21}(x)L D_{in}^l(t) + S_{23}^{21}(x)u(t) \right] \quad (\text{A4})$$

substituting (A4) into (A3),

$$D_{in}^l(t) = \left[I - S_{22}^{11}(x)L \right]^{-1} \left\{ S_{21}^{11}(x)z(t) + S_{23}^{11}(x)u(t) + S_{22}^{12}(x)L_m \left[I - S_{22}^{11}(x)L_m \right]^{-1} \left[S_{21}^{21}(x)z(t) + S_{22}^{21}(x)L D_{in}^l(t) + S_{23}^{21}(x)u(t) \right] \right\} \quad (\text{A5})$$

with (44), (A5) is reduced by

$$D_{in}^l(t) = \left[I - S_{22}^{11}(x)L - S_{22}^{12}(x)L_m S_{22}^{21}(x)L \right]^{-1} \left\{ S_{21}^{11}(x)z(t) + S_{23}^{11}(x)u(t) + S_{22}^{12}(x)L_m \left[S_{21}^{21}(x)z(t) + S_{22}^{21}(x)L_m S_{23}^{21}(x)u(t) \right] \right\} \quad (\text{A6})$$

In a similar way, substituting (A3) into (A4),

$$D_{in}^{lm}(t) = \left[I - S_{22}^{22}(x)L_m \right]^{-1} \left\{ S_{21}^{21}(x)z(t) + S_{23}^{21}(x)u(t) + S_{22}^{21}(x)L \left[I - S_{22}^{11}(x)L \right]^{-1} \left[S_{21}^{11}(x)z(t) + S_{22}^{12}(x)L_m D_{in}^{lm}(t) + S_{23}^{11}(x)u(t) \right] \right\} \quad (\text{A7})$$

Equation (A7) with (43) is reduced to

$$D_{in}^{lm}(t) = \left[I - S_{22}^{22}(x)L_m - S_{22}^{21}(x)L S_{22}^{12}(x)L_m \right]^{-1} \left\{ S_{21}^{21}(x)z(t) + S_{23}^{21}(x)u(t) + S_{22}^{21}(x)L M(x) \left[S_{21}^{11}(x)z(t) + S_{23}^{11}(x)u(t) \right] \right\} \quad (\text{A8})$$

From the first line of (25) with (28), (29), (A6) and (A8),

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) = & S_{11}(x)z + S_{12}^{11}(x)L \left[I - S_{22}^{11}(x)L - S_{22}^{12}(x)L_m S_{22}^{21}(x)L \right]^{-1} \left[S_{21}^{11}(x)z(t) + \right. \\ & \left. S_{22}^{12}(x)L_m S_{21}^{21}(x)z(t) + S_{22}^{12}(x)L_m S_{23}^{21}(x)u(t) + S_{23}^{11}(x)u(t) \right] \\ & + S_{12}^{12}(x)L_m \left[I - S_{22}^{22}(x)L_m - S_{22}^{21}(x)L S_{22}^{12}(x)L_m \right]^{-1} \left[S_{21}^{21}(x)z(t) \right. \\ & \left. + S_{22}^{21}(x)L M(x) S_{21}^{11}(x)z(t) + S_{22}^{21}(x)L M(x) S_{23}^{11}(x)u(t) + S_{23}^{21}(x)u(t) \right] \\ & + S_{12}^{13}(x)D_{out}^{nl}(t) + S_{12}^{14}(x)D_{out}^{nlm}(t) + S_{13}(x)u(t) + S_{14}(x)\dot{x}_d(t) \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

with (41) and (42), (A9) is expressed by

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) = & \left\{ S_{11}(x) + S_{12}^{11}(x)Q(x) \left[S_{21}^{11}(x) + S_{22}^{12}(x)M_m(x)S_{21}^{21}(x) \right] \right. \\ & + S_{12}^{12}(x)Q_m(x) \left[S_{21}^{21}(x) + S_{22}^{21}(x)M(x)S_{21}^{11}(x) \right] \Big\} z + \\ & \left\{ S_{13}(x) + S_{12}^{11}(x)Q(x) \left[S_{23}^{11}(x) + S_{22}^{12}(x)M_m(x)S_{23}^{21}(x) \right] \right. \\ & + S_{12}^{12}(x)Q_m(x) \left[S_{23}^{21}(x) + S_{22}^{21}(x)M(x)S_{23}^{11}(x) \right] \Big\} u(t) + \\ & + S_{12}^{13}(x)D_{out}^{nl}(t) + S_{12}^{14}(x)D_{out}^{nlm}(t) + S_{14}(x)\dot{x}_d(t) \end{aligned} \quad (A10)$$

from (30), (31), and the fourth and fifth lines of (25), the expressions for the nonlinear dissipation fields are given by

$$D_{out}^{nl}(t) = \phi \left(S_{21}^{31}(x)z(t) + S_{23}^{31}(x)u(t) \right) \quad (A11)$$

$$D_{out}^{nlm}(t) = \phi \left(S_{21}^{41}(x)z(t) + S_{23}^{41}(x)u(t) \right) \quad (A12)$$

substituting (A2) into (A10) with (33), (34), (35), the state equation for this class of nonlinear systems modeled by bond graphs is proved. $\square$

References

- Shukla, G. Study the Dynamic Behaviour of Distillation Column with Fundamental Modeling and Simulation by MATLAB. *Int. J. Eng. Res. Technol.* **2017**, *6*, 800–807.
- Zapata, R.B.; Villa, A.L.; de Correa, C.M. Modeling and Simulation of a Batch Distillation Column for Recovering Limonene Epoxide. *Rev. EIA* **2012**, *18*, 131–141.
- Minh, V.T.; Rani, A.M.A. Modeling and Control of Distillation Column in a Petroleum Process. *Math. Probl. Eng.* **2009**, *2009*, 404702. [\[CrossRef\]](#)
- Bruns, B.; Fasel, H.; Grunewald, M.; Riese, J. Development of a Dynamic Modeling Approach to Simulate a Segmented Distillation Column for Flexible Operation. *ChemEngineering* **2021**, *5*, 66. [\[CrossRef\]](#)
- Lopez-Saucedo, E.S.; Grossmann, I.E.; Segovia-Hernandez, J.G.; Hernandez, S. Rigorous modeling, simulation and optimization of a conventional and nonconventional batch reactive distillation column: A comparative study of dynamic optimization approaches. *Chem. Eng. Res. Des.* **2016**, *111*, 83–99. [\[CrossRef\]](#)
- Steffen, V.; da Silva, E.A. Steady-state modeling of reactive distillation columns. *Acta Sci. Technol.* **2012**, *34*, 61–69. [\[CrossRef\]](#)
- Lone, S.R.; Ahmad, S.A. Modeling and Simulation of a Distillation Column Using MATLAB. *Int. J. Eng. Res. Sci. Technol.* **2013**, *2*, 1–4.
- Annakou, O.; Mizsey, P. Rigorous Comparative Study of Energy-Integrated Distillation Schemes. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1996**, *35*, 1877–1885. [\[CrossRef\]](#)
- Rodriguez, M.; Arranz, I.P.F. Dynamics and Control of a Fully Heat-Integrated Complex Distillation Column. In Proceedings of the 29th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Eindhoven, The Netherlands, 16–19 June 2019.
- Khoa, T.D.; Shuhaimi, M.; Hashim, H.; Panjeshahi, M.H. Optimal design of distillation column using three dimensional exergy analysis curves. *Energy* **2010**, *35*, 5309–5319. [\[CrossRef\]](#)
- Bisgaard, T.; Skogestad, S.; Huusom, J.K.; Abildskov, J. Optimal Operation and Stabilizing Control of the Concentric Heat-Integrated Distillation Column. *IFAC-Pap.* **2016**, *49*, 747–752.
- T. Bisgaard, J. Kjobsted Huuson, J. Abildskov, A Modeling Framework for Conventional and Heat Integrated Distillation Columns. In Proceedings of the 10th IFAC International Symposium on Dynamics and Control of Process Systems, Mumbai, India, 18–20 December 2013.
- Balunov, A.; Sukin, i.; Tsirlin, A. Entropic Balance Conditions and Optimization of Distillation Column System. *Entropy* **2021**, *23*, 1468. [\[CrossRef\]](#) [\[PubMed\]](#)
- Duro, N. A Modelling Methodology for Distillation Columns Using Dymola and Simulink. *Energy* **2003**, *1000*, 2.
- Rojas, J.V.; Stinguel, L.; Wolf-Maciell, M.R.; Guirardello, R. Modeling and Simulating Complete Extractive Distillation Process of Ethanol-Water Mixture Using Equilibrium-Stage Distillation Model and Efficiency Correlations (Barros & Wolf) on EMSO Platform. *Chem. Eng. Trans.* **2016**, *50*, 331–336.
- Lone, S.R.; Rather, M.A. Modeling and Simulation of a Distillation Column using ASPEN PLUS for separating Methanol/water mixture. *Int. J. Sci. Eng. Res.* **2015**, *6*, 619–627.
- Jogwar, S.S.; Daoutidis, P. Energy Flow Patterns and Control Implications for Integrated Distillation Networks. *Int. Eng. Res.* **2010**, *49*, 8048–8061. [\[CrossRef\]](#)

18. Benavides, J.L.; Valarezo, J.M.; Peralta, D.T. Multivariable Control of a Binary Distillation Column. *Int. Eng. Appl. Sci.* **2015**, *2*, 257777. [CrossRef]
19. Hansen, J.E.; Jorgensen, S.B.; Heath, J.; Perkins, J.D. Control structure selection for energy integrated distillation column. *J. Proc. Cont.* **1998**, *8*, 185–195. [CrossRef]
20. Stichlmair, J. Conceptual design of the control configurations of distillation columns. *Chem. Eng. Process.* **1995**, *34*, 61–69. [CrossRef]
21. Karnopp, D.C.; Rosenberg, R.C. *Systems Dynamics: A Unified Approach*; Wiley John & Sons: Hoboken, NJ, USA, 2000.
22. Gawthrop, P.; Smith, L. *Metamodelling*; Prentice-Hall: Hoboken, NJ, USA, 1996.
23. Brown, F.T. *Engineering system Dynamics*; Dekker: New York, NY, USA, 1989.
24. Dauphin-Tanguy, G. *Les Bond Graphs*; Hermes Science Europe: London, UK, 2000.
25. Thoma, J.; Bouamama, B.O. *Modelling and Simulation in Thermal and Chemical Engineering a Bond Graph Approach*; Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 2000.
26. Latreche, S.; Khemliche, M. Modeling and Simulation of the Distillation Column Plates. *Adv. Eng. Int. J.* **2018**, *2*. Available online: <https://www.academia.edu/download/58129579/2218adeij02.pdf> (accessed on 2 May 2022).
27. Bequette, B.W. *Process Dynamics. Modeling, Analysis and Simulation*; Prentice Hall: Hoboken, NJ, USA, 1998.
28. Roper, K.D.; Seader, J.D.; Henley, E.J. *Separation Process Principle*; John Wiley & Sons: Hoboken, NJ, USA, 2010.
29. Skogestad, S.; Morari, M. Control configuration selection of distillation columns. *AIChE J.* **1987**, *33*, 1620–1635. [CrossRef]
30. Dauphin-Tanguy, G.; Rahmani, A.; Sueur, C. Bond graph aided design of controlled systems. *Simul. Pract. Theory* **1999**, *7*, 493–513. [CrossRef]
31. Van Dijk, J.; Breedveld, P.C. Simulation of systems models containing zero-order causal paths-I. Classification of zero-order causal paths. *J. Frankl. Inst.* **2006**, *328*, 959–979. [CrossRef]
32. Sueur, C.; Dauphin-Tanguy, G. Bond graph approach for structural analysis of MIMO linear systems. *J. Franklin Inst.* **1991**, *1*, 55–70. [CrossRef]

Article

Tracking Control of Physical Systems with Application to a System with a DC Motor: A Bond Graph Approach

Aaron Padilla Garcia ^{1,*} , Gilberto Gonzalez-Avalos ², Gerardo Ayala-Jaimes ³ , Noe Barrera Gallegos ⁴, Juancarlos Mendez-B. ² and David Alvarado-Zamora ²

¹ Faculty of Electrical Engineering, University of Michoacán, Morelia 58000, Mexico

² Graduate Studies Division, Faculty of Mechanical Engineering University of Michoacán, Morelia 58000, Mexico; gilberto.gonzalez@umich.mx (G.G.-A.); juancarlos.mendez@umich.mx (J.M.-B.); 0213483k@umich.mx (D.A.-Z.)

³ Faculty of Sciences of Engineering and Technology, Autonomous University of Baja California, Tijuana 22260, Mexico; ayala.gerardo@uabc.edu.mx

⁴ Faculty of Mechanical Engineering, University of Michoacán, Morelia 58000, Mexico; noe.barrera@umich.mx

* Correspondence: aaron.padilla@umich.mx

Abstract: In this paper, the bond graph modeling for the control of tracking systems has been applied. The closed loop system is built by the bond graph model of the system to be controlled, an additional bond graph according to the tracking input signal, and feedback gains in the physical domain. Hence, a procedure to obtain the closed loop tracking system is proposed. The proposal of modeling and tracking control systems in this paper determines symmetries in the bond graph approach with respect to the traditional algebraic approach. The great advantage of this graphical approach is that the mathematical determination of the system model is not necessary. Moreover, the coefficients of the characteristic polynomial using unidirectional causal loops of the closed loop system modeled in bond graphs are obtained. A case of study of a DC motor connected to an electrical supply network and a mechanical load is considered. Tracking control for the step, ramp, and acceleration type input signals in a bond graph approach are applied. In order to show the effectiveness of the proposed procedure, the simulation results are shown.

Keywords: bond graph; closed loop tracking system; controllability; causal paths; loops



Citation: Padilla Garcia, A.; Gonzalez-Avalos, G.; Ayala-Jaimes, G.; Barrera Gallegos, N.; Mendez-B., J.; Alvarado-Zamora, D. Tracking Control of Physical Systems with Application to a System with a DC Motor: A Bond Graph Approach. *Symmetry* **2022**, *14*, 755. <https://doi.org/10.3390/sym14040755>

Academic Editor: Christos Volos

Received: 5 March 2022

Accepted: 1 April 2022

Published: 6 April 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

Many linear system control procedures have been applied to regulator design while system tracking controllers design has not received much attention. On the other hand, basic developments of tracking controllers have been published in [1–4]. Some references using different alternatives in tracking control systems and various applications can be found in [5–12].

Bond graph theory provides formal and unified procedures in the modeling of dynamic physical systems. Bond graphs determine state equations and transfer functions related to simulation results. The representation and exchange of the power of the elements that form a system is the main characteristic of bond graph modeling [13]. In addition, bond graphs allow modeling systems formed by different types of energy (electrical, mechanical, hydraulic, thermal), and their junction structure gives the structural properties of the systems [14].

The research question that can be mentioned is whether the bond graph methodology can be used in controller design, which is answered in this paper.

For a given input, the system inversion to get the input can be used. Hence, system inversion is an interesting methodology for control theory [15]. The construction of an inverse system for an LTI discrete system is considered in [16].

The mathematical models used in the classical inversion methods generally determine structural characteristics and physical interpretation that are difficult to interpret. In this way, bond graph models using the concept of bicausality give a correct direction to obtain inverse systems [17]. In [18], this concept is used to model the virtual earth, which allows simplifying the modeling electronic circuits with operational amplifiers. The control design in the development of complex supervision applying bond graphs with bicausality is proposed in [19].

In this paper, the design of tracking controllers applied to systems modeled in a bond graph is presented. The proposed procedure consists of the model of the system in the physical domain and an additional bond graph that determines the tracking controller. Likewise, this control is built by additional state variables for tracking the input signals and the feedback gains.

Currently, the research in bond graphs has been directed to the modeling of different physical systems with their applications, so this paper is a development in the design of tracking control systems in the physical domain. Likewise, due to the characteristics of bond graphs, this methodology can be applied to electrical, mechanical, hydraulic, and thermal systems. Furthermore, the system modeling, the controller design, and the determination of the feedback gains are obtained in the graphical approach only. These are the main motivations of this paper.

The tracking error of the proposal in this paper is zero. However, the control law to achieve this error requires that the system parameters be known and constant. Refs. [11,12] have solved this problem considering uncertain nonlinearities. Hence, future works correspond to consider models with unknown parameters and dynamics not modeled.

In order to obtain the closed-loop system, the conditions of controllability and observability have to be satisfied, which are determined in the physical domain.

Some of the main advantages of this paper with respect to previously published works follow. (1) The classical approach of tracking control [1,2,4–6,8,11,12,20] is based on an analysis of differential equations or state equations; if the system changes, it is not easy to adapt these modifications, while in bond graphs, the adaptation process is simple. (2) The papers mentioned are dedicated to specific models and the bond graph has a multi-domain energy characteristic. (3) Changing the command of the inputs implies simple changes in the closed-loop bond graph. (4) It is not necessary to determine the mathematical model of the system to find the closed-loop system. (5) The coefficients of the characteristic polynomial are obtained directly in symbolic form with causal loops in the physical domain. A basic proposal in the control of tracking systems in bond graph is described in [21]. However, in this paper, the control of systems modeled in bond graph with linearly-dependent state variables is given, and the ordered evolution of the controllers due to the type of tracking input is described in the DC motor case study.

An interesting approach in the characterization of the electromagnetic compatibility of DC motors considering the electromagnetic interferences that appear in the brushes and commutator is proposed in [22]. It may be interesting to apply a bond graph to electromagnetic compatibility in order to obtain some graphical characteristics.

In [23], the author proposed an intelligent planning model applied to unmanned aerial vehicles (UAVs) using mobile internet of things (MIoT), which can be thought of as a form of tracking control. In addition, a prediction method for traffic flow using neural networks is proposed in [24], which can be interpreted as a way to implement a tracking control. An adaptive tracking control with fractional-order PID applied to a DC motor is proposed in [25]. A robust switched control for the trajectory tracking of DC motors that is part of a mobil robot is introduced in [26].

Therefore, the main contribution of this paper is to present bond graph tools applied to system tracking control without requiring its mathematical model.

The modeling of systems in bond graphs represents a symmetry to the modeling in the state space of these systems. Likewise, in this paper, other symmetries are established:

the tracking control in the physical domain and the direct determination of the coefficients of the characteristic polynomial using causal loops in bond graphs.

The proposed methodology is applied to an electromechanical system as a case study. Based on the bond graph model of this system, the controllability and observability conditions to be satisfied are verified. Additional state variables to achieve tracking and feedback gains are connected to the model. In 20 Sim software (v1.4, Controllab Products, Netherlands), this complete system is simulated showing the effectiveness of the proposed methodology.

Section 2 summarizes the problem statement by describing the traditional tracking systems approach. The basic methodology of bond graphs is given in Section 3. The procedure for the design of the tracking control in systems modeled by bond graphs is presented in Section 4. The direct determination of the characteristic polynomial in a bond graph approach is described in Section 5. A case study applying the proposed procedure is developed in Section 6. Finally, Section 6 presents the conclusions.

2. Problem Statement

Consider a linear time-invariant system (LTI) described by

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ y(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(t) \\ u(t) \end{bmatrix} \quad (1)$$

where $x(t) \in \mathbb{R}^n$, $u(t) \in \mathbb{R}^p$, and $y(t) \in \mathbb{R}^q$ and for a polynomial input of the form [1,20]

$$r(t) = r_0 + r_1 t + r_2 t^2 + \dots + r_{\delta-1} t^{\delta-1} \quad (2)$$

then, the output vector $y(t)$ becomes equal to the input $r(t)$ under the steady-state conditions of

$$\lim_{t \rightarrow \infty} [r(t) - y(t)] = 0 \quad (3)$$

where $r(t) \in \mathbb{R}^q$ and the polynomial input has the property

$$\frac{d^\delta r(t)}{dt^\delta} = 0 \quad (4)$$

In summary, the system outputs track the system inputs according to (3) with the characteristic of the inputs given by (4). In the controller design, auxiliary state variables are required to consider the property (4), which is defined by

$$\begin{bmatrix} \dot{\lambda}_1(t) \\ \dot{\lambda}_2(t) \\ \vdots \\ \dot{\lambda}_\delta(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1(t) \\ \lambda_2(t) \\ \vdots \\ \lambda_{\delta-1}(t) \\ \lambda_\delta(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r(t) - y(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

where $\lambda_1(t) \in \mathbb{R}^q$, $\lambda_2(t) \in \mathbb{R}^q$, $\dots$, $\lambda_{\delta-1}(t) \in \mathbb{R}^q$ are the additional state variables due to integrators.

The open loop tracking system is built by the original model (1) and the additional state variables model (5), which is defined by

$$\dot{x}_\lambda(t) = A_{OL} x_\lambda(t) + B_{OL} u(t) + Q_{OL} v(t) \quad (6)$$

where

$$A_{OL} = \begin{bmatrix} A & 0_{n \times \delta(q)} & 0_{n \times q} \\ -C & 0_{q \times \delta(q)} & 0_{q \times q} \\ 0_{\delta(q) \times n} & I_{\delta(q) \times \delta(q)} & 0_{\delta(q) \times q} \end{bmatrix}; B_{OL} = \begin{bmatrix} B \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; Q_{OL} = \begin{bmatrix} 0 \\ I_{q \times q} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

The next step is to determine if the open loop tracking system is controllable. The controllability condition is established in the following theorem.

Theorem 1 ([1,20]). *The open loop tracking system given by (6) is controllable if and only if the following conditions are satisfied.*

The controllability matrix $C_o = [B \ AB \ A^2B \ \dots \ A^{n+\delta q}B]$ is the full rank $n + \delta q$. From (6) and (7), this matrix is described by

$$C_o = \begin{bmatrix} B & AB & A^2B & \dots & A^{n+\delta q-1}B \\ 0 & -CB & -CAB & \dots & -CA^{n+\delta q-2}B \\ 0 & 0 & -CB & \dots & -CA^{n+\delta q-3}B \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -CA^{n+\delta q-\delta-1}B \end{bmatrix} \quad (8)$$

then

$$\text{rank } C_o = n + \delta q - 1 \quad (9)$$

Once the system has been verified to be controllable, the feedback of the system-state variables and additional state variables is applied. The complete feedback is defined by

$$u(t) = [K_x \ K_{\lambda 1} \ K_{\lambda 2} \ \dots \ K_{\lambda \delta}] \begin{bmatrix} x(t) \\ \lambda_1(t) \\ \lambda_2(t) \\ \vdots \\ \lambda_\delta(t) \end{bmatrix} \quad (10)$$

where K_x is an $p \times n$ matrix and K_i ($i = 1, 2, \dots, \delta$) are $p \times q$ matrices.

Applying the feedback (10) to the open loop system (7), we obtain

$$\dot{x}_\lambda(t) = A_{CL}x_\lambda(t) + B_{CL}v(t) \quad (11)$$

where

$$A_{OL} = \begin{bmatrix} A + BK_x & BK_\lambda & BK_{\lambda \delta} \\ -C & 0_{q \times \delta(q)} & 0_{q \times q} \\ 0_{\delta(q) \times n} & I_{\delta(q) \times \delta(q)} & 0_{\delta(q) \times q} \end{bmatrix}; \quad B_{CL} = \begin{bmatrix} 0 \\ I_{q \times q} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (12)$$

with

$$K_\lambda = [K_{\lambda 1} \ K_{\lambda 2} \ \dots \ K_{\lambda(\delta-1)}] \quad (13)$$

The essential elements in bond graph modeling are described in the next section.

3. Modeling in Bond Graph

The main characteristic in bond graph modeling is the power transfer in the system, which is obtained by the product of generalized variables of effort $e(t)$ and flow $f(t)$. This transfer is carried out in bonds drawn by a simple line with direction and causality. In addition, the energy stored and dissipated can be determined. Therefore, bond graph models derive equations directly, and structural analysis can be obtained [27].

The representation of a bond is shown in Figure 1.

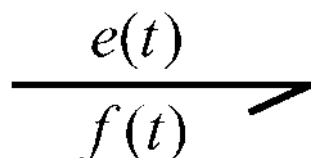


Figure 1. Power bond.

The power variables for some physical systems are indicated in Table 1.

Table 1. Power variables.

System	Effort ($e(t)$)	Flow ($f(t)$)
Mechanical	Force (F)	Velocity (v)
	Torque (τ)	Ang. velocity (ω)
Electrical	Voltage (v)	Current (i)
Hydraulic	Pressure (P)	Volume flow rate (Q)

In addition, in this type of system modeling, it is necessary to know the energy variables denoted by momentum $p(t)$ and displacement $q(t)$ where $p(t) = \int e(t)dt$ and $q(t) = \int f(t)dt$. At each port, both an effort and a flow exist; if one of the effort or flow variables is an input, the other will be the output; this relationship is called causality. Hence, effort and flow are in opposite directions. A causal stroke represented by a short line perpendicular to the beginning or end of a bond allows causality to be assigned. In the direction of the causal stroke goes the direction of the effort $e(t)$, and in the opposite direction, the flow $f(t)$ will always be in a bond. A bond with the causal stroke is illustrated in Figure 2 [13,28].

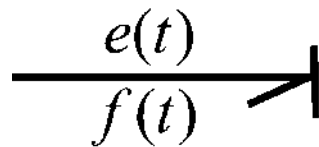


Figure 2. Causal bond.

Moreover, the sources, dissipation, and storage elements can be modeled in a bond graph, and Table 2 gives these elements with their causal relations.

Table 2. Causal forms for 1-ports.

Element	Causal Form	Causal Relation
Effort Source	$\mathbf{MS} \xrightarrow{\quad} \mathbf{I}$	$e(t) = E(t)$
Flow Source	$\mathbf{MS} \xleftarrow{\quad} \mathbf{I}$	$f(t) = F(t)$
Resistance	$\mathbf{R} \xleftarrow{\quad} \mathbf{I}$	$e(t) = \Phi_R(f(t))$
	$\mathbf{R} \xrightarrow{\quad} \mathbf{I}$	$f(t) = \Phi_R^{-1}(e(t))$
Capacitance	$\mathbf{C} \xleftarrow{\quad} \mathbf{I}$	$e(t) = \Phi_C(\int f(t)dt)$
	$\mathbf{C} \xrightarrow{\quad} \mathbf{I}$	$f(t) = \Phi_C^{-1}(\frac{de(t)}{dt})$
Inertia	$\mathbf{C} \xleftarrow{\quad} \mathbf{I}$	$e(t) = \Phi_I(\int e(t)dt)$
	$\mathbf{C} \xrightarrow{\quad} \mathbf{I}$	$f(t) = \Phi_I^{-1}(\frac{df(t)}{dt})$

The block diagram of a Bond Graph in an Integral causality assignment (BGI) of an LTI system is shown in Figure 3 [14,28].

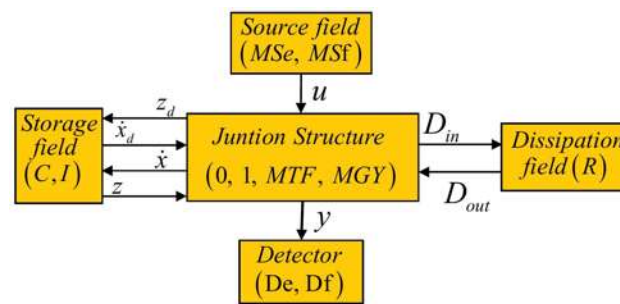


Figure 3. Key vectors of the BGI.

The elements of Figure 3 are as follows:

- (MS_e, MS_f) represent the effort and flow modulated sources.
- (C, I) denote the storage elements defined by capacitance and inertia, respectively.
- R represents the dissipation elements that constitute the resistors.
- $(0, 1, TF, GY)$ represent the junction structure with 0 and 1 junctions and the transformers and gyrators denoted by TF and GY , respectively.
- (D_e, D_f) determine the detectors for the effort and flow, respectively.

The energy variables are $p(t)$ and $q(t)$ related to elements I and C , respectively. The key vectors in Figure 3 are described by

- $x(t) \in \mathbb{R}^n$ and $x_d(t) \in \mathbb{R}^m$ represent the state variables for storage elements in integral and derivative causality assignments, respectively.
- $z(t) \in \mathbb{R}^n$ and $z_d(t) \in \mathbb{R}^m$ are the co-energy vectors for storage elements in integral and derivative causality assignments, respectively.
- $D_{in}(t) \in \mathbb{R}$ and $D_{out}(t) \in \mathbb{R}$ represent the relationships between the junction structure and dissipation elements.
- $u(t) \in \mathbb{R}^p$ and $y(t) \in \mathbb{R}^q$ determine the inputs and outputs of the system, respectively.

The relationships of the storage and dissipation fields are expressed by

$$z(t) = Fx(t) \quad (14)$$

$$z_d(t) = F_d x_d(t) \quad (15)$$

$$D_{out}(t) = LD_{in}(t) \quad (16)$$

The relationships of the junction structure are given by

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ D_{in}(t) \\ y(t) \\ z_d(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & 0 \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & 0 \\ S_{41} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z(t) \\ D_{out}(t) \\ u(t) \\ \dot{x}_d(t) \end{bmatrix} \quad (17)$$

The values of the matrix S are in the set of $\{0, \pm 1, \pm k_t, \pm k_g\}$ where k_t and k_g are transformer and gyrator modules. There are two important properties related to this matrix S :

- S_{11} and S_{22} are square skew-symmetric matrices.
- S_{12} and S_{21} are matrices in which each other negatively transpose.

The state-space equations of the bond graph model are defined by [14,28]

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + Bu(t) \quad (18)$$

$$y(t) = Cx(t) + Du(t) \quad (19)$$

where

$$A = E^{-1}(S_{11} + S_{12}MS_{21})F \quad (20)$$

$$B = E^{-1}(S_{13} + S_{12}MS_{23}) \quad (21)$$

$$C = (S_{31} + S_{32}MS_{21})F \quad (22)$$

$$D = S_{33} + S_{32}MS_{23} \quad (23)$$

with

$$E = I - S_{14}F_d^{-1}S_{41}F \quad (24)$$

being

$$M = (I - LS_{22})^{-1}L \quad (25)$$

Graphical procedures to determine the structural controllability and observability are defined in the following properties.

Property 1 ([29]). A bond graph model is structurally controllable if the following two conditions are satisfied:

1. The storage elements (I, C) in the integral causality assignment are causally connected with some control source (MS_e, MS_f) in the bond graph with preferred integral causality.
2. All storage elements (I, C) in integral causality in the bond graph with preferred integral causality can change to a derivative causality assignment. If it is not satisfied directly, a dualization of some MS_e or MS_f sources has to be applied in order to change the remaining integral causalities.

Property 2 ([29]). A bond graph model is structurally observable if the following two conditions are satisfied:

1. The storage elements (I, C) in the integral causality assignment are causally connected with some sensor (D_e, D_f) in the bond graph with preferred integral causality.
2. All storage elements (I, C) in integral causality in the bond graph with preferred integral causality can change to a derivative causality assignment. If it is not satisfied directly, a dualization of some D_e or D_f sources has to be applied in order to change the remaining integral causalities.

The causal paths are defined in Appendix A.

A procedure to build the tracking control applied to a bond graph model is presented in the next section.

4. Design of a Tracking Controller in a Bond Graph Approach

The general scheme of the tracking control is illustrated in Figure 4 in which it is desired to control the plant described in state space (1). The controller is defined by a number δ of additional state variables to achieve the tracking of plant outputs $y(t)$ to inputs $r(t)$ given by (2). In order to achieve system stabilization, control law (10) through feedback gains is determined. This feedback is a function of the gains applied to the plant states $x(t)$ and to the additional states $\lambda(t)$ to supply to the plant input $u(t)$.

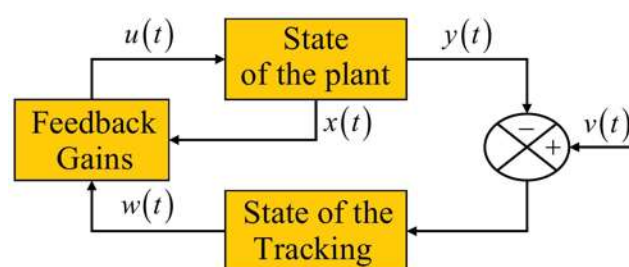


Figure 4. Scheme of the system with a tracking controller.

A first step in tracking control is the design of the open loop tracking system in the physical domain, which is shown in Figure 5. The scheme of the model in the bond graph of the plant is formed by the fields of sources, dissipation, and storage with the junction structure that determines the interconnection between its elements. The detector block allows to obtain the outputs for the plant. The desired tracking inputs r are connected through a new source field with a junction structure in order to connect the new storage field for additional state variables.

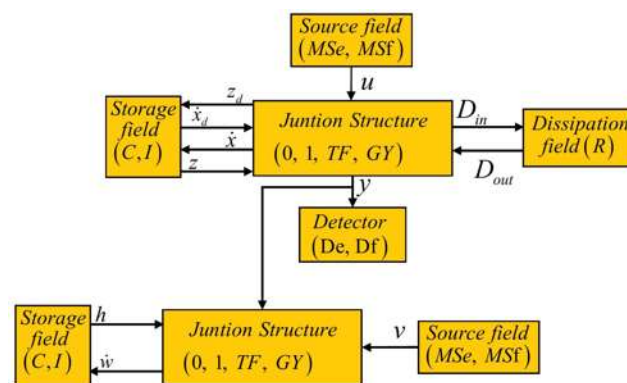


Figure 5. Open loop system using junction structure in bond graph models.

According to (6) with (7), the open loop tracking system requires r additional state variables, as illustrated in Figure 3. The additional states are defined by $\lambda(t)$, the energy vector is $\dot{\lambda}(t)$, the co-energy vector is $\sigma(t)$, and the desired inputs are $r(t)$.

From the block diagram of Figure 5, the junction structure for the open loop tracking system in a bond graph approach is presented by

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ D_{in}(t) \\ y(t) \\ z_d(t) \\ \dot{\lambda}_1(t) \\ \dot{\lambda}_2(t) \\ \vdots \\ \dot{\lambda}_{\delta-1}(t) \\ \dot{\lambda}_{\delta}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ S_{31} & S_{32} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ S_{41} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -S_{31} & -S_{32} & 0 & 0 & I & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & I & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z(t) \\ D_{out}(t) \\ u(t) \\ \dot{x}_d(t) \\ r(t) \\ \sigma_1(t) \\ \sigma_2(t) \\ \vdots \\ \sigma_{\delta-1}(t) \\ \sigma_{\delta}(t) \end{bmatrix} \quad (26)$$

the constitutive relationships for the new state variables are expressed by

$$\sigma_i(t) = F_i \lambda_i(t) \quad \forall i = 1, \dots, \delta \quad (27)$$

where F_i are constant and diagonal matrices and can be the identity matrices I .

It is interesting to note that the proposed junction structure is simple and only requires additional state variables of the order of the command input.

The last step to get the tracking control system in a bond graph approach is to introduce the control law given by (10) with Figure 2; then, a block diagram of the closed loop system is shown in Figure 6.

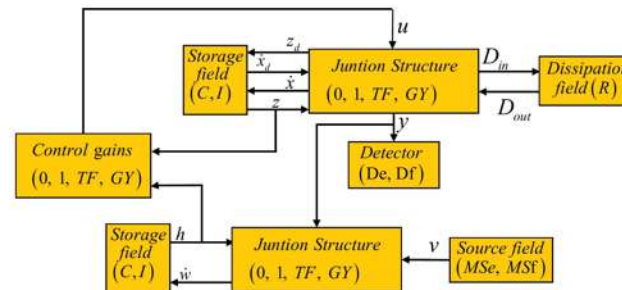


Figure 6. Closed loop system using junction structures.

A state feedback given by (10) is applied being the junction structure of this system defined by

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ D_{in}(t) \\ y(t) \\ z_d(t) \\ \dot{\lambda}_1(t) \\ \dot{\lambda}_2(t) \\ \vdots \\ \dot{\lambda}_{\delta-1}(t) \\ \dot{\lambda}_{\delta}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} + S_{13}K_g & S_{12} & S_{14} & 0 & K_{g1} & K_{g2} & \cdots & K_{g(r-1)} & K_{gr} \\ S_{21} + S_{23}K_g & S_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ S_{31} & S_{32} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ S_{41} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -S_{31} & -S_{32} & 0 & I & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & I & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z(t) \\ D_{out}(t) \\ \dot{x}_d(t) \\ v(t) \\ \sigma_1(t) \\ \sigma_2(t) \\ \vdots \\ \sigma_{\delta-1}(t) \\ \sigma_{\delta}(t) \end{bmatrix} \quad (28)$$

It can be shown that this approach for tracking systems consists of additional state variables and feedback gains of the complete state variables vector.

With the controller gains determined, the closed loop system is obtained. In a bond graph, these gains are implemented with TF and GY elements.

In order to obtain (28) with Figure 6, a graphical procedure for tracking systems in the physical domain is presented. The proposed procedure is the following:

Procedure 1.

1. Obtain a bond graph model in an integral causality assignment (BGI) of the system.
2. Verify the structural controllability and observability properties for the BGI.
3. Determine the index of (2) for command input.
4. Connect for each output the corresponding bond graph shown in Figure 7 for the additional state variables in order to get the open loop tracking system.

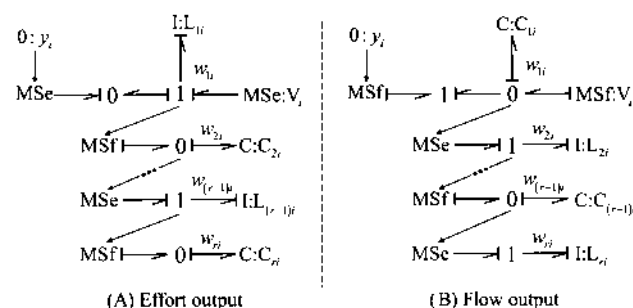


Figure 7. Bond graphs for the additional states.

only exist in the direction of the active bonds that are required in the design of controllers in the bond graph approach.

Therefore, the model of the plant to be controlled, the tracking control, and the characteristic polynomial of the closed loop system are obtained in the physical domain.

The proposed methodology to obtain the closed loop tracking system in a bond graph approach is applied in the next section.

6. Case Study

The theory presented in previous sections can be conveniently illustrated by designing a controller that will cause the output of the controllable third-order linear plant whose Figure 9 shows a scheme of a DC motor connected to an RC network. However, in the mechanical load of the motor, a linearly dependent state variable is considered.

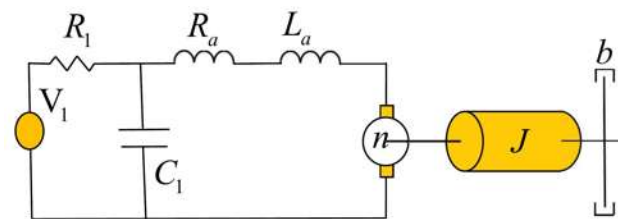


Figure 9. Scheme of a DC motor connected by an RC network.

Figure 9 describes the following elements: the supply voltage is V_1 , the resistance and the inductance of the armature winding are R_a and L_a , respectively; the inertia moment is J , the damping coefficient is b ; the electromechanical constant is n , and it is an R_1C_1 network. A mechanical connection with module a to consider a load moment of inertia J_e is applied.

The bond graph of this electromechanical system is shown in Figure 10.

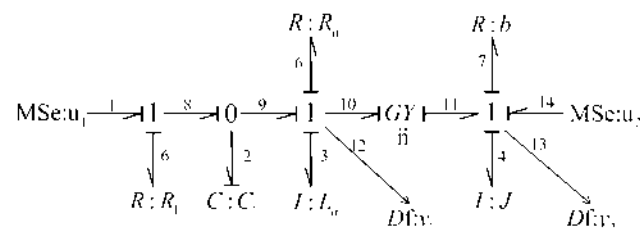


Figure 10. BGI of the system.

In this bond graph, the storage elements that are in an integral causality assignment are $(C : C_1, I : L_a, I : J)$ whose key vectors are expressed by

$$x = \begin{bmatrix} q_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{bmatrix}; \dot{x} = \begin{bmatrix} f_2 \\ e_3 \\ e_4 \end{bmatrix}; z = \begin{bmatrix} e_2 \\ f_3 \\ f_4 \end{bmatrix}$$

with a constitutive relationship given by

$$F = \text{diag} \left\{ \frac{1}{C_1}, \frac{1}{L_a}, \frac{1}{J} \right\} \quad (31)$$

The storage element in a derivative causality assignment is $(I : J_e)$, which determines the linearly dependent state variable; the key vectors are

$$x_d = p_{17}; \dot{x}_d = e_{17}; z_d = f_{17}$$

and the constitutive relation

$$F_d = \frac{1}{J_e} \quad (32)$$

The key vectors for the dissipation elements are

$$D_{in} = \begin{bmatrix} e_5 \\ f_6 \\ f_7 \end{bmatrix}; D_{out} = \begin{bmatrix} f_5 \\ e_6 \\ e_7 \end{bmatrix}$$

where the constitutive relationship is

$$L = \text{diag} \left\{ \frac{1}{R_1}, R_a, b \right\} \quad (33)$$

This system has two inputs: the supply voltage ($MS_e : u_1$) and a load torque ($MS_e : u_2$), and two system outputs: ($D_f : y_1$) and ($D_f : y_2$), whose key vectors are

$$u = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_{14} \end{bmatrix}; y = \begin{bmatrix} f_3 \\ f_4 \end{bmatrix}$$

The junction structure of the BGI is given by

$$\begin{bmatrix} f_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ \hline e_5 \\ f_6 \\ f_7 \\ \hline f_3 \\ f_4 \\ \hline f_{17} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -n & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & a & -a \\ \hline -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ \hline f_5 \\ e_6 \\ e_7 \\ \hline e_1 \\ e_{14} \\ \hline e_{17} \end{bmatrix} \quad (34)$$

Before building a system controller, it is necessary to verify the controllability and observability conditions. The causal paths for the two-control input u_1 are described by

- $MS_e : u_1 \mapsto C : C_1$ the causal path is (1 – 5 – 5 – 8 – 2).
- $MS_e : u_1 \mapsto I : L_a$ the causal path is (1 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3).
- $MS_e : u_1 \mapsto I : J$ the causal path is (1 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3 – 3 – 10 – 11 – 4).

and these causal paths are shown in Figure 11.

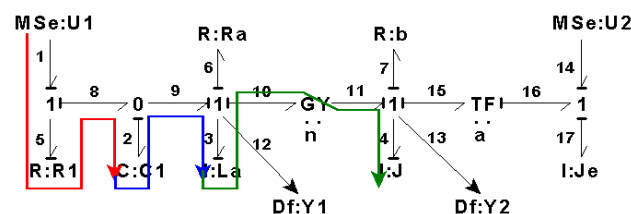


Figure 11. Causal paths from source $MS_e : u_1$ to storage elements.

Figure 12 shows the causal paths for the control input u_2 given by

- $MS_e : u_2 \mapsto I : J$ the causal path is (14 – 16 – 15 – 4).
- $MS_e : u_2 \mapsto I : L_a$ the causal path is (14 – 16 – 15 – 4 – 4 – 11 – 10 – 3).
- $MS_e : u_2 \mapsto C : C_1$ the causal path is (14 – 16 – 15 – 4 – 4 – 11 – 10 – 3 – 3 – 9 – 2).

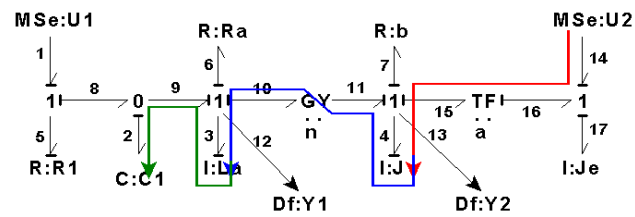


Figure 12. Causal paths from source $MSe : u_2$ to storage elements.

The causal paths from the storage elements (state variables) to the detectors (outputs) for y_1 are defined by

- $I : L_a \mapsto D_f : y_1$ the causal path is (3 – 12).
- $C : C_1 \mapsto D_f : y_1$ the causal path is (2 – 9 – 3 – 3 – 12).
- $I : J \mapsto D_f : y_1$ the causal path is (4 – 11 – 10 – 3 – 3 – 12).

and these causal paths are shown in Figure 13.

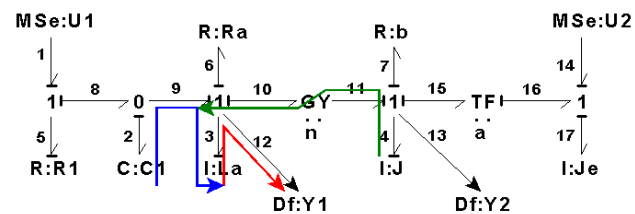


Figure 13. Causal paths from storage elements to detector $D_f : y_1$.

Figure 14 shows the causal paths for the output y_2 given by

- $I : J \mapsto D_f : y_2$ the causal path is (4 – 13).
- $I : L_a \mapsto D_f : y_2$ the causal path is (3 – 10 – 11 – 4 – 4 – 13).
- $C : C_1 \mapsto D_f : y_2$ the causal path is (2 – 9 – 3 – 3 – 10 – 11 – 4 – 4 – 13).

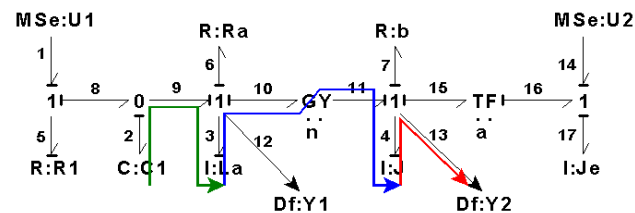


Figure 14. Causal paths from storage elements to detector $D_f : y_2$.

The corresponding bond graph in a derivative causality assignment (BGD) is shown in Figure 15.

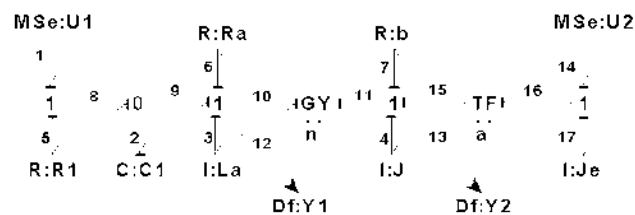


Figure 15. BGD of the system.

According to Properties 1 and 2, the system is structurally controllable and observable, and a tracking controller can be designed.

It is important to determine the coefficients of the characteristic polynomial for the design of the controller gains. The stabilization of the system and the convergence of the

outputs to the desired inputs is achieved by calculating the gains of the controller, which are obtained using the coefficients of the characteristic polynomial in closed loop. In a bond graph sense, these coefficients are obtained with the causal loops. Therefore, the characteristic polynomial for the bond graph model of Figure 10 is described by

$$S^3 + a_1 S^2 + a_2 S + a_3 = 0$$

- For a_1 , causal loops to a storage element are required.
 - $C : C_1 \leftrightarrow R : R_1$ the causal path is (2 – 8 – 5 – 5 – 8 – 2) denoted by

$$C_1 R_1(T) = \frac{1}{R_1 C_1} \quad (35)$$

- $I : L_a \leftrightarrow R : R_a$ the causal path is (3 – 6 – 6 – 3) with

$$L_a R_a(T) = \frac{R_a}{L_a} \quad (36)$$

- $I : J \leftrightarrow R : b$ the causal path is (4 – 7 – 7 – 4) with

$$J b(T) = \frac{b}{J} \quad (37)$$

and (4 – 15 – 16 – 17 – 17 – 16 – 15 – 14) with

$$J b_e(T) = \frac{J}{\Lambda} \quad (38)$$

where $\Lambda = J + a^2 J_e$ then

$$J b J_e(T) = J b(T) \cdot J b_e(T) = \frac{b}{J} \cdot \frac{J}{\Lambda} = \frac{b}{\Lambda} \quad (39)$$

this coefficient is defined by

$$a_1 = C_1 R_1(T) + L_a R_a(T) + J b J_e(T) = \frac{1}{R_1 C_1} + \frac{R_a}{L_a} + \frac{b}{\Lambda} \quad (40)$$

The causal loops are illustrated in Figure 16 where the red causal loop is (35), the blue causal loop is (36), and (39) is the green causal loop.

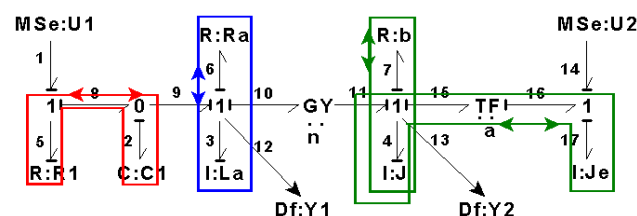


Figure 16. Causal loops for a_1 .

- For a_2 , causal loops containing two storage elements are required.
 - $C : C_1 \leftrightarrow I : L_a$ the causal path is (2 – 9 – 3 – 3 – 9 – 2) with

$$C_1 L_a(T) = \frac{1}{C_1 L_a} \quad (41)$$

- $(I : L_a \leftrightarrow I : J)$ the causal path is $(3 - 10 - 11 - 4 - 4 - 11 - 10 - 3)$

$$L_a J b J_e(T) = \frac{n^2}{L_a \Lambda} \quad (42)$$

- $(C : C_1 \leftrightarrow R : R_1)$ and $(I : L_a \leftrightarrow R : R_a)$ given by (35) and (36), respectively,

$$C_1 R_1(T) = C_1 R_1(T) \cdot L_a R_a(T) = \frac{1}{R_1 C_1} \cdot \frac{R_a}{L_a} = \frac{R_a}{R_1 C_1 L_a} \quad (43)$$

Figure 17 shows the causal loops for some terms of the coefficient a_2 where the red causal loop is (41), the blue causal loop is (42), and the green causal loop is (43).

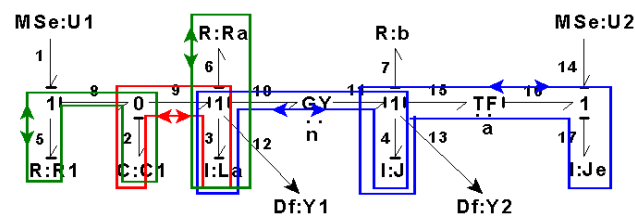


Figure 17. Causal loops for (44) and (45) of a_2 .

- – $(C : C_1 \leftrightarrow R : R_1)$ and $(I : J \leftrightarrow R : b)$ given by (35) and (39), respectively,

$$C_1 R_1(T) = C_1 R_1(T) \cdot J b J_e(T) = \frac{1}{R_1 C_1} \cdot \frac{b}{\Lambda} = \frac{b}{R_1 C_1 \Lambda} \quad (44)$$

- $(I : L_a \leftrightarrow R : R_a)$ and $(I : J \leftrightarrow R : b)$ given by (36) and (39), respectively,

$$L_a R_a(T) = L_a R_a(T) \cdot J b J_e(T) = \frac{R_a}{L_a} \cdot \frac{b}{\Lambda} = \frac{b R_a}{L_a \Lambda} \quad (45)$$

The rest of the terms for a_2 are illustrated in Figure 18 where the red causal loops is (44) and the blue causal loops is (45).

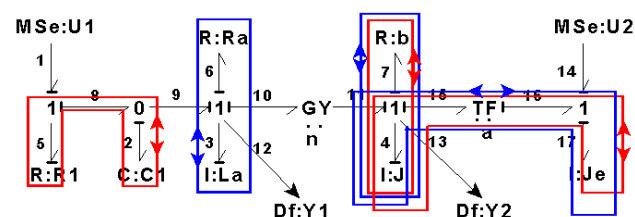


Figure 18. Causal loops for (44) and (45) of a_2 .

- This coefficient is described by

$$\begin{aligned} a_2 &= C_1 L_a(T) + L_a J b J_e(T) + \frac{C_1 R_1}{L_a R_a}(T) + \frac{C_1 R_1}{J b J_e}(T) + \frac{L_a R_a}{J b J_e}(T) \\ a_2 &= \frac{1}{C_1 L_a} + \frac{n^2}{L_a \Lambda} + \frac{R_a}{R_1 C_1 L_a} + \frac{b}{R_1 C_1 \Lambda} + \frac{b R_a}{L_a \Lambda} \end{aligned} \quad (46)$$

- For a_3 , causal loops are formed by three storage elements.

- $(C : C_1 \leftrightarrow I : L_a)$ and $(I : J \leftrightarrow R : b)$ given by (43), and (39), respectively,

$$C_1 L_a(T) = C_1 L_a(T) \cdot J b J_e(T) = \frac{1}{C_1 L_a} \cdot \frac{b}{\Lambda} = \frac{b}{C_1 L_a \Lambda} \quad (47)$$

- $(C : C_1 \leftrightarrow R : R_1)$, $(I : L_a \leftrightarrow R : R_a)$ and $(I : J \leftrightarrow R : b)$ given by (35), (36) and (39), respectively,

$$C_1 R_1 (T) \overset{JbJe}{L_a R_a} = C_1 R_1 (T) \cdot L_a R_a (T) \cdot JbJe (T) = \frac{1}{R_1 C_1} \cdot \frac{R_a}{L_a} \cdot \frac{b}{\Lambda} = \frac{b R_a}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (48)$$

- $(C : C_1 \leftrightarrow R : R_1)$, $(I : L_a \leftrightarrow R : R_a)$ and $(I : J \leftrightarrow R : b)$ given by (35) and (42), respectively,

$$\overset{C_1 R_1}{L_a JbJe} (T) = \frac{1}{R_1 C_1} \cdot \frac{n^2}{L_a \Lambda} = \frac{n^2}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (49)$$

The causal loops for a_3 are shown in Figure 19 where (47) are the red causal loops, (48) are the blue causal loops, and (49) are the green causal loops.

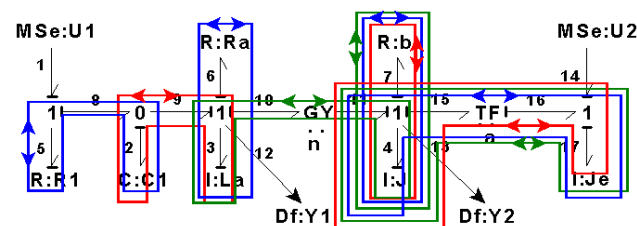


Figure 19. Causal loops for a_3 .

- This coefficient is

$$\begin{aligned} a_3 &= \overset{C_1 L_a}{JbJe} (T) + \overset{C_1 R_1}{L_a R_a} (T) \overset{JbJe}{L_a R_a} + \overset{C_1 R_1}{L_a JbJe} (T) \\ a_3 &= \frac{b}{C_1 L_a \Lambda} + \frac{b R_a}{R_1 C_1 L_a \Lambda} + \frac{n^2}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \end{aligned} \quad (50)$$

These coefficients will be used to determine the controller gains that are described below.

6.1. Step Tracking Control

The first tracking control to design is with an input command vector for constant steps defined by

$$\begin{bmatrix} r_1(t) \\ r_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{01} \\ r_{02} \end{bmatrix} \quad (51)$$

In this case, it can be seen that the command input is of the form (2) and (51) with $\delta = 1$ and applying Procedure 1; Figure 20 shows the open loop tracking system in the physical domain.

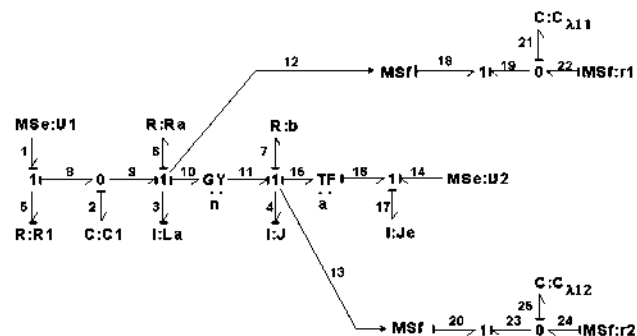


Figure 20. Open loop tracking system for steps.

The key vectors of the additional states for the bond graph of the open loop tracking system are defined by

$$\lambda_1 = \begin{bmatrix} q_{21} \\ q_{25} \end{bmatrix}; \dot{\lambda}_1 = \begin{bmatrix} f_{21} \\ f_{25} \end{bmatrix}; \sigma_1 = \begin{bmatrix} e_{21} \\ e_{25} \end{bmatrix}; r = \begin{bmatrix} f_{22} \\ f_{27} \end{bmatrix} \quad (52)$$

The junction structure of the open loop system is given by

$$\begin{bmatrix} f_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ \hline e_5 \\ f_6 \\ f_7 \\ \hline f_3 \\ f_4 \\ \hline f_{17} \\ f_{21} \\ f_{25} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -n & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & a & -a & 0 & 0 & 0 \\ \hline -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ \hline f_5 \\ e_6 \\ e_7 \\ \hline e_1 \\ e_{14} \\ e_{17} \\ \hline f_{22} \\ f_{24} \\ \hline e_{21} \\ e_{25} \end{bmatrix} \quad (53)$$

Since the controllability condition is satisfied in this case, therefore, it is possible to synthesize a control law of the form (10) applied to these inputs in the following way

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (k_x)_{11} & (k_x)_{12} & (k_x)_{13} & (k_{\lambda 1})_{11} & (k_{\lambda 1})_{12} \\ 0 & 0 & 0 & (k_{\lambda 1})_{21} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_2 \\ p_3 \\ p_4 \\ q_{21} \\ q_{26} \end{bmatrix} \quad (54)$$

Applying the controller gains from step 5 of Procedure 1, the bond graph of the closed loop tracking system is illustrated in Figure 21.

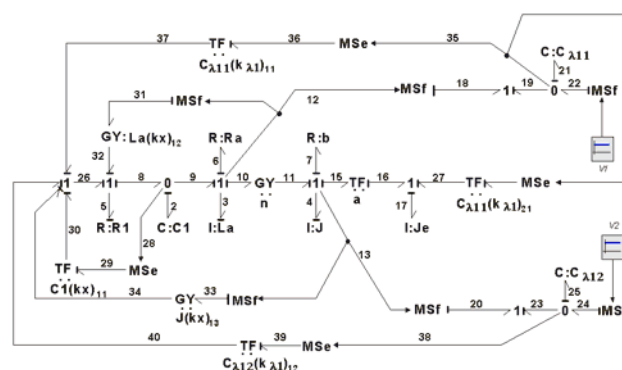


Figure 21. Closed loop tracking system for steps.

In order to obtain the gains for the controller, the characteristic polynomial of the closed loop system has to be determined. The order of the complete system is five, and the characteristic polynomial is given by

$$s^5 + b_1s^4 + b_2s^3 + b_3s^2 + b_4s + b_5 = 0 \quad (55)$$

The coefficients of this polynomial using causal paths are defined

- For b_1 : $(R : R_1 \longleftrightarrow C : C_1)$, $(R : R_a \longleftrightarrow I : L_a)$, $(R : b \longleftrightarrow I : J)$ given by (35), (36), and (39), respectively, and
 - $R : R_1 \longleftrightarrow C : C_1$ the causal path is $(2 - 28 - 29 - 30 - 26 - 5 - 5 - 8 - 2)$ shown in Figure 22 with

$$C_1(k_x)_{11}R_1(T) = \frac{-(k_x)_{11}}{R_1} \quad (56)$$

this causal loop is unidirectional due to the presence of feedback for the controller gain.

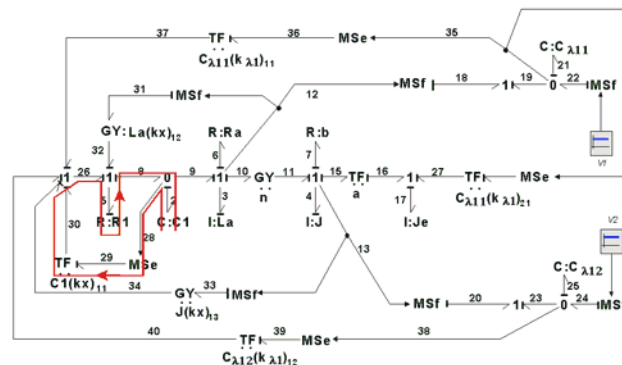


Figure 22. Unidirectional causal loop for (56).

Then

$$\begin{aligned} b_1 &= a_1 + C_1(k_x)_{11}R_1(T) \\ b_1 &= \frac{1}{R_1C_1} + \frac{R_a}{L_a} + \frac{b}{\Lambda} - \frac{(k_x)_{11}}{R_1} \end{aligned} \quad (57)$$

- For b_2 : $(C : C_1 \leftrightarrow I : L_a)$, $[(I : L_a \leftrightarrow R : R_a) \text{ and } (I : J \leftrightarrow R : b)]$, $[(C : C_1 \leftrightarrow R : R_1) \text{ and } (I : L_a \leftrightarrow R : R_a)]$, $[(C : C_1 \leftrightarrow R : R_1) \text{ and } (I : J \leftrightarrow R : b)]$, $[(I : L_a \leftrightarrow R : R_a) \text{ and } (I : J \leftrightarrow R : b)]$ defined by (41), (45), (44), (44) and (42), respectively, and
 - $(R : R_1 \longleftrightarrow C : C_1)$ and $(I : L_a \leftrightarrow R : R_a)$ given by (56) and (36), respectively

$$\frac{C_1(k_x)_{11}R_1(T)}{L_aR_a} = \frac{C_1(k_x)_{11}R_1(T)}{L_a} \cdot (T) = \frac{-(k_x)_{11}}{R_1} \cdot \frac{R_a}{L_a} \quad (58)$$

- $(R : R_1 \longleftrightarrow C : C_1)$ and $(I : J \leftrightarrow R : b)$ given by (56) and (39), respectively

$$\frac{C_1(k_x)_{11}R_1(T)}{JbJ_e} = \frac{C_1(k_x)_{11}R_1(T)}{JbJ_e} \cdot (T) = \frac{-(k_x)_{11}}{R_1} \cdot \frac{b}{\Lambda} \quad (59)$$

- $(I : L_a \leftrightarrow C : C_1)$ the causal path is $(3 - 12 - 31 - 32 - 5 - 5 - 8 - 2 - 2 - 9)$ with

$$L_a(k_x)_{12}C_1(T) = \frac{-(k_x)_{12}}{R_1C_1} \quad (60)$$

then

$$\begin{aligned} b_2 &= a_2 + \frac{C_1(k_x)_{11}R_1(T)}{L_aR_a} + \frac{C_1(k_x)_{11}R_1(T)}{JbJ_e} + L_a(k_x)_{12}C_1(T) \\ b_2 &= \frac{1}{C_1L_a} + \frac{n^2}{L_a\Lambda} + \frac{R_a}{R_1C_1L_a} + \frac{b}{R_1C_1\Lambda} + \frac{bR_a}{L_a\Lambda} \\ &\quad - \frac{(k_x)_{12}}{C_1R_1} - \frac{(k_x)_{11}R_a}{R_1L_a} - \frac{(k_x)_{11}b}{R_1\Lambda} \end{aligned} \quad (61)$$

Causal loops due to feedback gains are illustrated in Figure 23 where the red causal loop is (58), the blue causal loop is (59), and (60) is the green causal loop.

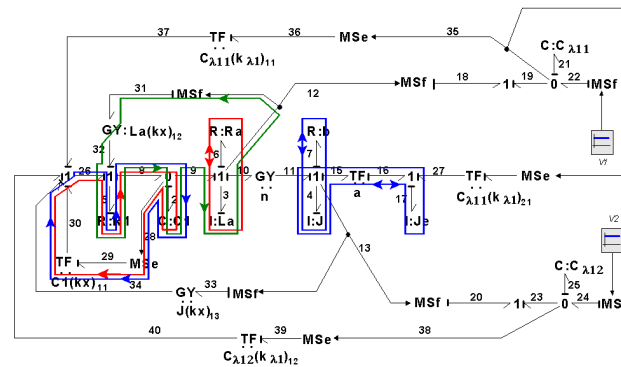


Figure 23. Unidirectional causal loop for (58), (59), and (60).

- For $b_3 : [(C : C_1 \leftrightarrow I : L_a) \text{ and } (I : J \leftrightarrow R : b)]$, $[(C : C_1 \leftrightarrow R : R_1)$, $(I : L_a \leftrightarrow R : R_a) \text{ and } (I : J \leftrightarrow R : b)]$, $[(C : C_1 \leftrightarrow R : R_1)$, $(I : L_a \leftrightarrow R : R_a) \text{ and } (I : J \leftrightarrow R : b)]$ defined by (47), (48), and (49), respectively, and
 - $(R : R_1 \longleftrightarrow C : C_1) \text{ and } [(I : L_a \leftrightarrow R : R_a) \text{ and } (I : J \leftrightarrow I : J_e)]$ given by (56) and (42), respectively,

$$\frac{C_1(k_x)_{11}R_1}{L_a J}(T) = C_1(k_x)_{11}R_1(T) \cdot L_a J(T) = \frac{-(k_x)_{11}}{R_1} \cdot \frac{n^2}{L_a \Lambda} \quad (62)$$

- $(R : R_1 \longleftrightarrow C : C_1)$, $[(I : L_a \leftrightarrow R : R_a) \text{ and } (I : J \leftrightarrow R : b)]$ given by (56), (36), and (39), respectively,

$$\frac{C_1(k_x)_{11}R_1}{L_a R_a}(T) J b J_e = C_1(k_x)_{11}R_1(T) \cdot L_a R_a(T) \cdot J b J_e(T) = \frac{-(k_x)_{11}}{R_1} \cdot \frac{R_a}{L_a} \cdot \frac{b}{\Lambda} \quad (63)$$

- $(I : L_a \longleftrightarrow C : C_1) \text{ and } (I : J \leftrightarrow R : b)$ given by (60) and (39), respectively,

$$\frac{L_a(k_x)_{12}C_1}{J b J_e}(T) = L_a(k_x)_{12}C_1(T) \cdot J b J_e(T) = \frac{-(k_x)_{12}}{R_1 C_1} \cdot \frac{b}{\Lambda} \quad (64)$$

- $(I : J \longleftrightarrow I : J)$ the causal path is $(4 - 13 - 33 - 34 - 26 - 5 - 5 - 8 - 2 - 2 - 9 - 3 - 3 - 10 - 11)$ with

$$J(K_x)_{13}J(T) = \frac{-n(k_x)_{13}}{R_1 C_1 L_a} \cdot \frac{J}{\Lambda} \quad (65)$$

- $(C : C_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : L_a)$ the causal path is $(21 - 35 - 36 - 37 - 26 - 5 - 5 - 8 - 2 - 2 - 9 - 3)$ with

$$C_{\lambda 11}(k_{\lambda})_{11}L_a(T) = \frac{-(k_{\lambda})_{11}}{R_1 C_1 L_a} \quad (66)$$

- $(C : C_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : L_a)$ the causal path is $(21 - 35 - 41 - 27 - 16 - 15 - 4 - 4 - 11 - 10 - 3)$ with

$$C_{\lambda 11}(k_{\lambda})_{21}L_a(T) = \frac{-an(k_{\lambda})_{21}}{J L_a} \cdot \frac{J}{\Lambda} = \frac{-an(k_{\lambda})_{21}}{L_a \Lambda} \quad (67)$$

then

$$\begin{aligned}
 b_3 &= a_3 + \frac{C_1(k_x)_{11}R_1}{L_aJ}(T) + \frac{C_1(k_x)_{11}R_1}{L_aR_a}(T)JbJ_e + \frac{L_a(k_x)_{12}C_1}{JbJ_e}(T) + J(k_{\lambda 1})_{13}J(T) \\
 &\quad + C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{11}L_a(T) + C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{21}L_a(T) \\
 b_3 &= \frac{b}{C_1L_a\Lambda} + \frac{bR_a}{R_1C_1L_a\Lambda} + \frac{n^2}{R_1C_1L_a\Lambda} - \frac{(k_x)_{11}n^2}{R_1L_a\Lambda} - \frac{(k_x)_{11}R_ab}{R_1L_a\Lambda} - \frac{(k_x)_{12}b}{R_1C_1\Lambda} \\
 &\quad - \frac{n(k_x)_{13}J}{R_1C_1L_a\Lambda} + \frac{(k_{\lambda 1})_{11}}{R_1C_1L_a} - \frac{an(k_{\lambda 1})_{21}}{L_a\Lambda}
 \end{aligned} \quad (68)$$

Figure 24 shows the causal loops for the term (62) being the red causal loops and (63) being the blue causal loops.

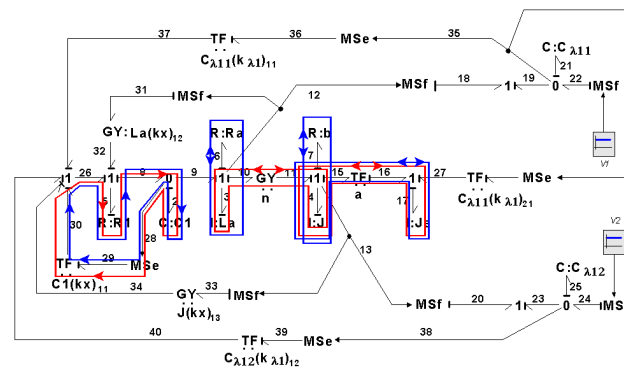


Figure 24. Causal loops for (62) and (63).

Figure 25 shows the red causal loops for (64) and (65) is the blue causal loop.

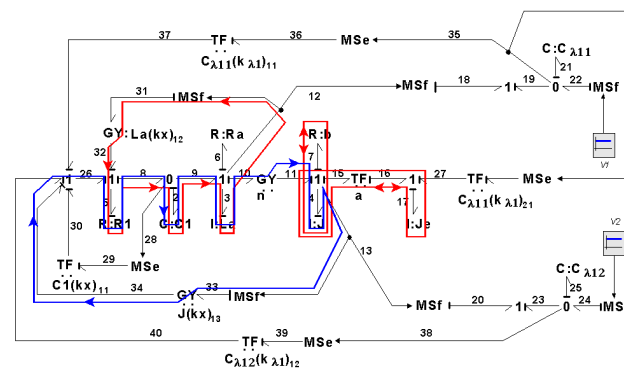


Figure 25. Causal loops for (64) and (65).

Figure 26 shows the red causal loops for (66) and (67) is the blue causal loop.

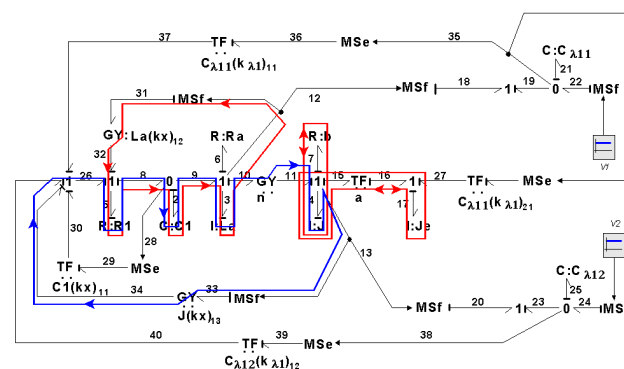


Figure 26. Causal loops for (66) and (67).

- For b_4
 - $(C : C_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : L_a)$ and $(I : J \longleftrightarrow R : b)$ given by (66) and (39), respectively,

$$\frac{C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{11} L_a}{J b J_e}(T) = C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{11} L_a(T) \cdot J b J_e(T) = \frac{(k_{\lambda 1})_{11}}{R_1 C_1 L_a} \cdot \frac{b}{\Lambda} \quad (69)$$

and Figure 27 shows this causal loop.

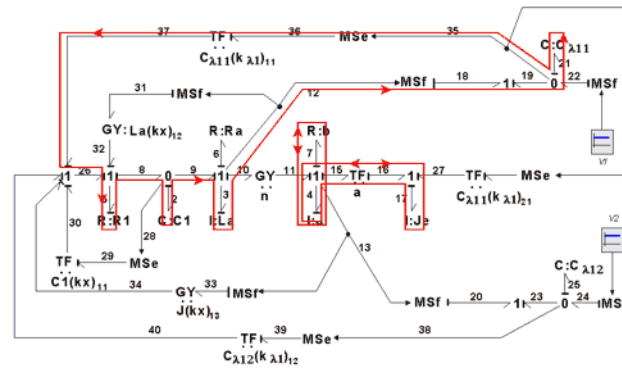


Figure 27. Causal loops for (69).

- – $(C : C_{\lambda 12} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 12})$ the causal path is (25 – 38 – 39 – 40 – 26 – 5 – 5 – 8 – 9 – 3 – 3 – 10 – 11 – 4 – 4 – 13 – 20 – 23) with

$$\frac{C_{\lambda 12}(k_{\lambda 1})_{12} J}{J J_e}(T) = C_{\lambda 12}(k_{\lambda 1})_{12} J(T) \cdot J J_e(T) = \frac{n(k_{\lambda 1})_{12}}{R_1 C_1 L_a J} \cdot \frac{J}{\Lambda} \quad (70)$$

this term is shown in Figure 28.

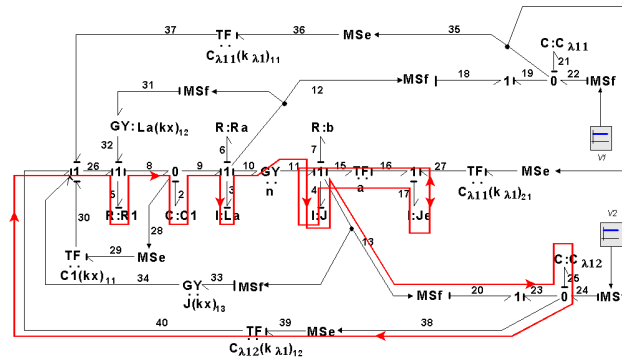


Figure 28. Causal loops for (70).

- – $(C : C_{\lambda 11} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 11})$ and $(C : C_1 \longleftrightarrow R : R_1)$ given by (67) and (35), respectively,

$$\frac{C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{21} L_a}{C_1 R_1}(T) = C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{21} L_a(T) \cdot C_1 R_1(T) = \frac{-a n(k_{\lambda 1})_{21}}{L_a \Lambda} \cdot \frac{1}{R_1 C_1} \quad (71)$$

this term is shown in Figure 29.

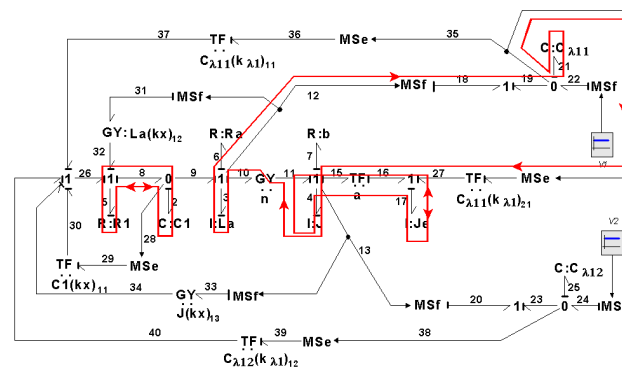


Figure 29. Causal loops for (71).

- $(C : C_{\lambda 11} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 11})$ and $(C : C_1 \longleftrightarrow R : R_1)$ given by (67) and (56), respectively,

$$\frac{C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{21} L_a}{C_1 k_1 R_1}(T) = \frac{C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{21} L_a}{C_1 k_1 R_1}(T) \cdot C_1(k_{\lambda 1})_{11} R_1(T) = \frac{-an(k_{\lambda 1})_{21}}{L_a \Lambda} \cdot \frac{(k_x)_{11}}{R_1} \quad (72)$$

which is shown in Figure 30.

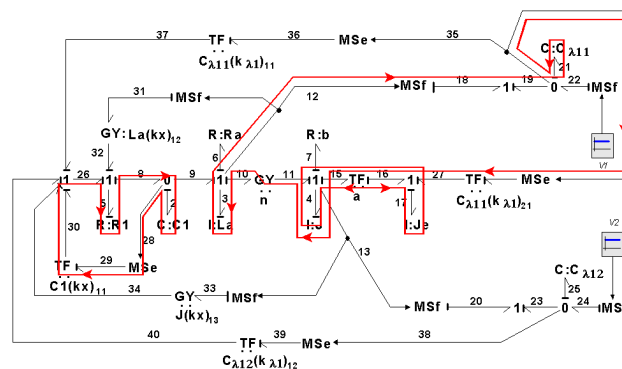


Figure 30. Causal loops for (72).

- $(C : C_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : J)$ the causal path is (21 – 35 – 41 – 27 – 16 – 15 – 4 – 4 – 13 – 33 – 34 – 26 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3) with

$$\frac{C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{21} L_a}{R_1 C_1 L_a \Lambda}(T) = \frac{J a(k_x)_{13}(k_{\lambda 1})_{21}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (73)$$

shown in Figure 31.

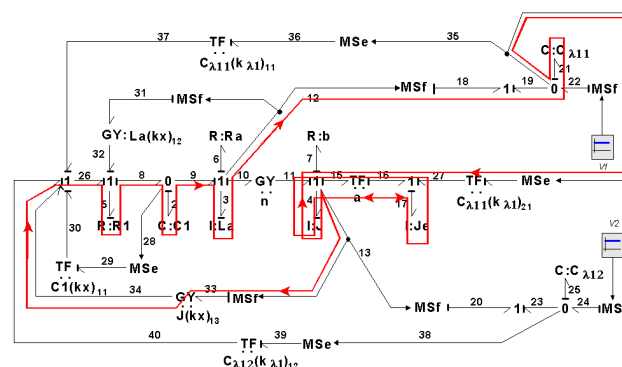


Figure 31. Causal loops for (73).

- – Then

$$\begin{aligned}
 b_4 &= a_4 + \frac{C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{11} L_a}{J b J_e}(T) + \frac{C_{\lambda 2}(k_{\lambda 1})_{12} J}{J J_e}(T) + \frac{C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{21} L_a}{C_1 R_1}(T) + \frac{C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{21} L_a}{C_1 (k_{\lambda 1})_{11} R_1}(T) \\
 &\quad + C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{21} L_a(T) \\
 b_4 &= \frac{n(k_{\lambda 1})_{12}}{R_1 C_1 L_a J} \cdot \frac{J}{\Lambda} + \frac{(k_{\lambda 1})_{11}}{R_1 C_1 L_a} \cdot \frac{b}{\Lambda} - \frac{a n(k_{\lambda 1})_{21}}{L_a \Lambda} \cdot \frac{1}{R_1 C_1} - \frac{a n(k_{\lambda 1})_{21}}{L_a \Lambda} \cdot \frac{(k_x)_1}{R_1 C_1} \\
 &\quad + \frac{J a (k_x)_3 (k_{\lambda 1})_{21}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (74)
 \end{aligned}$$

- For b_5 , the only causal loop required is $(C : C_{\lambda 2} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 2})$ with $(25 - 38 - 39 - 40 - 26 - 5 - 5 - 8 - 2 - 2 - 9 - 3 - 3 - 12 - 18 - 19 - 21 - 21 - 35 - 41 - 27 - 16 - 15 - 13 - 20 - 23)$ where

$$b_5 = \frac{-a(k_{\lambda 1})_{12}(k_{\lambda 1})_{21}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (75)$$

and Figure 32 shows this term.

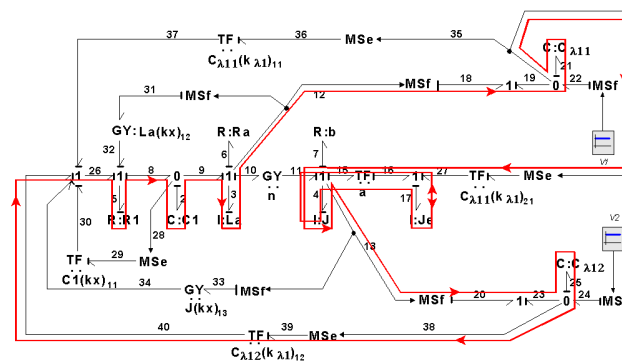


Figure 32. Causal loop for b_5 .

The numerical parameters used to carry out the simulation of the system are given in Table 3.

Table 3. Numerical parameters of the system.

$R_1 = 2 \Omega$	$L_a = 0.01 \text{ H}$	$b = 1.2 \text{ N-s/m}$	$n = 0.1$	$J_e = 0.625 \text{ N-m-s}^2$
$C_1 = 0.02 \text{ F}$	$R_a = 0.1 \Omega$	$J = 0.4 \text{ N-m-s}^2$	$a = 0.4$	

Then, the calculated controller gains so that the eigenvalues are all assigned the value -1 are shown in Table 4.

Table 4. Gains for the step tracking controller with eigenvalues at -1 .

$(k_x)_{11} = 64.8$	$(k_x)_{12} = 196.97$	$(k_x)_{13} = -0.05188$
$(k_{\lambda 1})_{11} = 0.00413$	$(k_{\lambda 1})_{12} = -0.04$	$(k_{\lambda 1})_{21} = 0.01$

The behavior of the system outputs are shown in Figure 33. The inputs at $t = 0$ are $V_1 = 5.2 \text{ A}$ and $V_2 = 1.25 \text{ rad/s}$; then, at $t = 30 \text{ s}$, there is an increment $\Delta V_1 = 0.8 \text{ A}$, and at $t = 60 \text{ s}$, the other input is increased by $\Delta V_2 = 0.8 \text{ rad/s}$. It is clear that the control performs its function effectively.

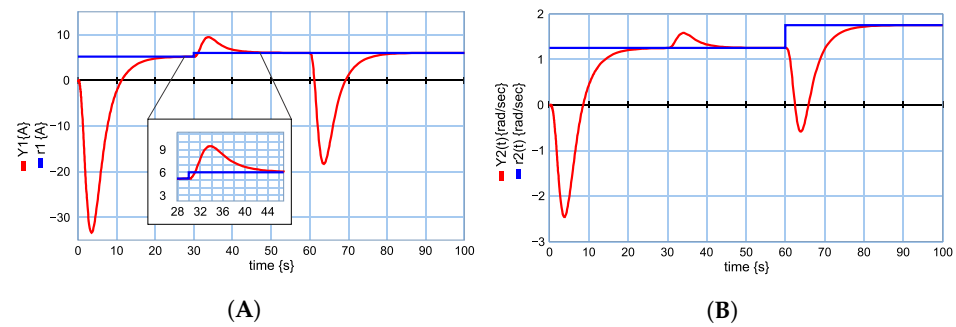


Figure 33. System outputs with a step tracking control with all eigenvalues at -1 : (A) Input r_1 and output y_1 ; (B) Input r_2 and output y_2 .

In order to stabilize the outputs of the system with smaller transients, all the eigenvalues are assigned in -10 , and the new gains are given in Table 5.

Table 5. Gains for the step tracking controller with eigenvalues at -10 .

$(k_x)_{11} = -25.2$	$(k_x)_{12} = 179.69$	$(k_x)_{13} = 3.5106$
$(k_{\lambda 1})_{11} = 3.4424$	$(k_{\lambda 1})_{12} = -4$	$(k_{\lambda 1})_{21} = 10$

The conditions of the inputs are the same as those described above, and Figure 34 illustrates the dynamic behavior of the outputs.

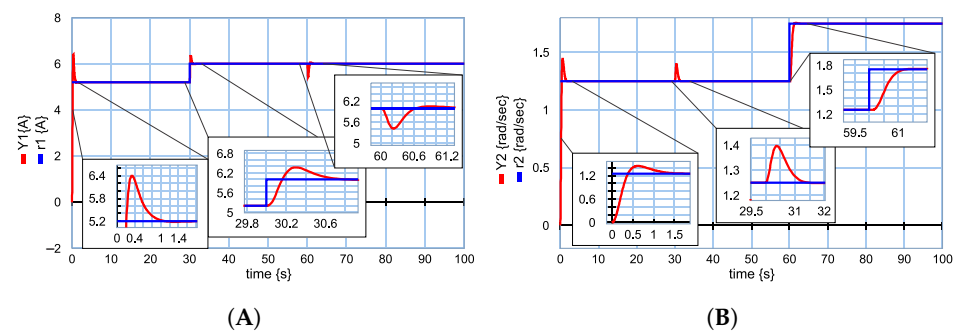


Figure 34. System outputs with a step tracking control with all eigenvalues at -10 : (A) Input r_1 and output y_1 ; (B) Input r_2 and output y_2 .

6.2. Ramp Tracking Control

The second tracking control to design is with an input command vector for constant ramps defined by

$$\begin{bmatrix} r_1(t) \\ r_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{01} + r_{11} * t \\ r_{02} + r_{12} * t \end{bmatrix} \quad (76)$$

For this command input comparing (2) and (76), $\delta = 2$, then Procedure 1 is applied, and Figure 35 shows the open loop tracking system in a bond graph approach.

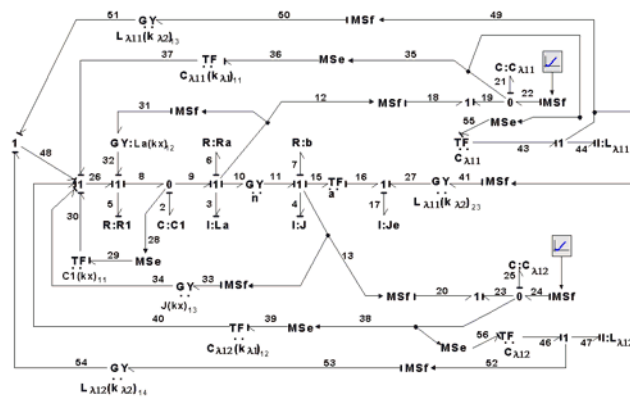


Figure 36. Closed loop tracking system for ramps.

The characteristic polynomial of the system has to be determined for the design of the control gains expressed by

$$s^7 + c_1 s^6 + c_2 s^5 + c_3 s^4 + c_4 s^3 + c_5 s^2 + c_6 s + c_7 = 0 \quad (79)$$

The coefficients of this polynomial using causal paths are defined by

- For c_1

$$c_1 = b_1 \quad (80)$$

- For c_2

$$c_2 = b_2 \quad (81)$$

- For c_3

- $(R : R_1 \longleftrightarrow C : C_1)$ and $[(I : L_a \longleftrightarrow R : R_a) \text{ and } (I : J \longleftrightarrow I : J_e)]$ given by (62)
- $(R : R_1 \longleftrightarrow C : C_1)$, $[(I : L_a \longleftrightarrow R : R_a) \text{ and } (I : J \longleftrightarrow R : b)]$ given by (63)
- $(I : L_a \longleftrightarrow C : C_1)$ and $(I : J \longleftrightarrow R : b)$ given by (64)
- $(I : J \longleftrightarrow I : J)$ given by (65)
- $(C : C_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : L_a)$ given by (66)

$$\begin{aligned} c_3 &= a_3 - \frac{(k_x)_{11} n^2}{R_1 L_a \Lambda} - \frac{(k_x)_{11} R_a b}{R_1 L_a \Lambda} - \frac{(k_x)_{12} b}{R_1 C_1 \Lambda} - \frac{(k_{\lambda 1})_{11}}{R_1 C_1 L_a} - \frac{J n (k_x)_{13}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} - \frac{a n (k_{\lambda 1})_{21}}{L_a \Lambda} \\ &= b_3 + \frac{a n (k_{\lambda 1})_{21}}{L_a \Lambda} \end{aligned} \quad (82)$$

- For c_4

- $(C : C_{\lambda 11} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 11})$ and $(I : J \longleftrightarrow R : b)$ given by (69) with

$$\frac{C_{\lambda 11} (k_{\lambda 1})_{11} L_a}{J b J_e} (T) = \frac{(k_{\lambda 1})_{11}}{R_1 C_1 L_a} \cdot \frac{b}{\Lambda} \quad (83)$$

- $(I : L_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : L_{\lambda 11})$ the causal loop is $(44 - 49 - 50 - 51 - 48 - 26 - 5 - 5 - 8 - 2 - 2 - 9 - 3 - 3 - 12 - 18 - 19 - 21 - 21 - 35 - 55 - 43 - 44)$ with

$$L_{\lambda 11} (k_{\lambda 2})_{13} L_a (T) = \frac{(k_{\lambda 2})_{13}}{R_1 C_1 L_a} \quad (84)$$

The causal loops of terms (83) and (84) are shown in Figure 37.

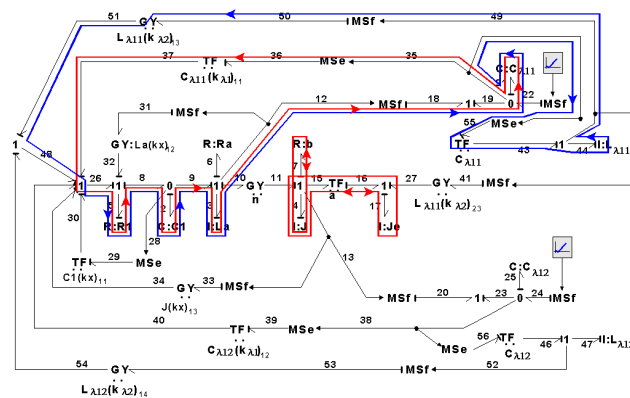


Figure 37. Causal loops for (83) and (84).

- $(C : C_{\lambda 12} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 12})$ the causal loop is $(25 - 38 - 39 - 40 - 26 - 55 - 8 - 2 - 2 - 9 - 3 - 3 - 10 - 11 - 4 - 4 - 13 - 20.23 - 25)$ with

$$C_{\lambda 12}(k_{\lambda 1})_{12} L_a(T) = - \frac{n(k_{\lambda 1})_{12}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (85)$$

- $(I : L_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : L_{\lambda 11})$ the causal loop is $(44 - 41 - 27 - 16 - 15 - 4 - 4 - 11 - 10 - 3 - 3 - 12 - 18 - 19 - 21 - 21 - 35 - 55 - 43 - 44)$ with

$$L_{\lambda 11}(k_{\lambda 2})_{23} L_a(T) = - \frac{an(k_{\lambda 2})_{23}}{L_a \Lambda} \quad (86)$$

The causal loops of terms (85) and (86) are illustrated in Figure 38.

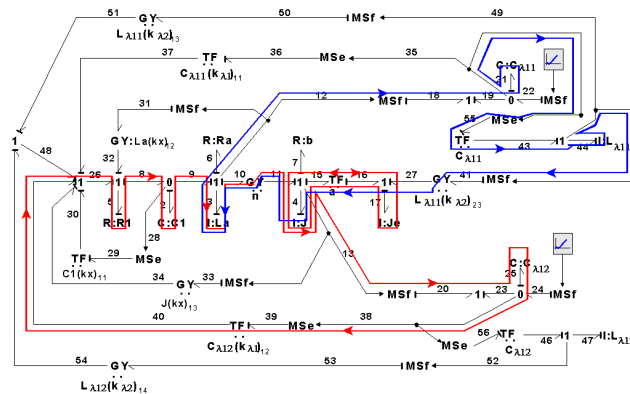


Figure 38. Causal loops for (85) and (86).

- then

$$c_4 = \frac{C_{\lambda 11}(k_{\lambda 1})_{11} L_a(T) + C_{\lambda 12}(k_{\lambda 1})_{12} L_a(T) + L_{\lambda 11}(k_{\lambda 2})_{13} L_a(T) + L_{\lambda 11}(k_{\lambda 2})_{23} L_a(T)}{JbJ_e} \quad (87)$$

$$c_4 = \frac{b(k_{\lambda 1})_{11}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} - \frac{n(k_{\lambda 1})_{12}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} + \frac{(k_{\lambda 2})_{13}}{R_1 C_1 L_a} - \frac{an(k_{\lambda 2})_{23}}{L_a \Lambda}$$

- For c_5

- $(I : L_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : L_{\lambda 11})$ and $(I : J \longleftrightarrow R : b)$ given by (84) and (39), respectively

$$L_{\lambda 11}(k_{\lambda 2})_{13} L_a(T) = \frac{(k_{\lambda 2})_{13}}{R_1 C_1 L_a} \cdot \frac{b}{\Lambda} \quad (88)$$

- $(I : L_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : L_{\lambda 11})$ and $(C : C_1 \longleftrightarrow R : R_1)$ given by (86) and (35), respectively

$$\frac{L_{\lambda 11}(k_{\lambda 2})_{23} L_a}{J b I_e}(T)^{R_1 C_1} = -\frac{a n(k_{\lambda 2})_{23}}{L_a \Lambda} \cdot \frac{1}{R_1 C_1} \quad (89)$$

The causal loops of terms (88) and (89) are shown in Figure 39.

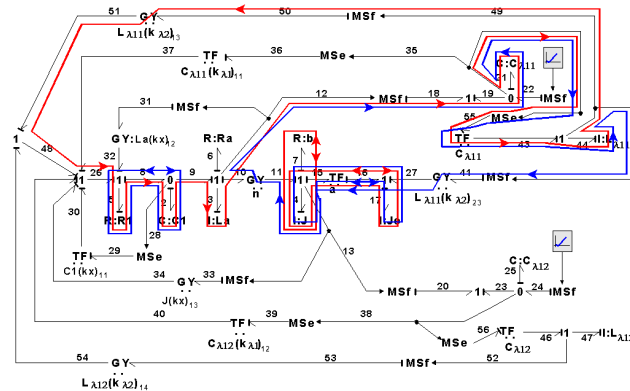


Figure 39. Causal loops for (88) and (89).

- – $(C : C_{\lambda 12} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 12})$ the causal path is (25 – 38 – 56 – 46 – 47 – 47 – 52 – 53 – 54 – 48 – 26 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3 – 3 – 10 – 11 – 4 – 4 – 13 – 20 – 23 – 25)

$$C_{\lambda 12}(k_{\lambda 2})_{14} I(T) = \frac{(k_{\lambda 2})_{14}}{R_1 C_1 L_a} \cdot \frac{n}{\Lambda} \quad (90)$$

- $(I : L_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : L_{\lambda 11})$ the causal path is (44 – 49 – 41 – 27 – 16 – 15 – 4 – 4 – 11 – 10 – 3 – 3 – 9 – 2 – 2 – 28 – 29 – 30 – 26 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3 – 3 – 12 – 18 – 19 – 21 – 21 – 35 – 55 – 43 – 44) with

$$L_{\lambda 11}(k_{\lambda 2})_{23} L_a(k_{\lambda 2})_{11}(T) = \frac{a n(k_{\lambda 2})_{11}(k_{\lambda 2})_{23}}{R_1 L_a \Lambda} \quad (91)$$

The causal loops of terms (90) and (91) are illustrated in Figure 40.

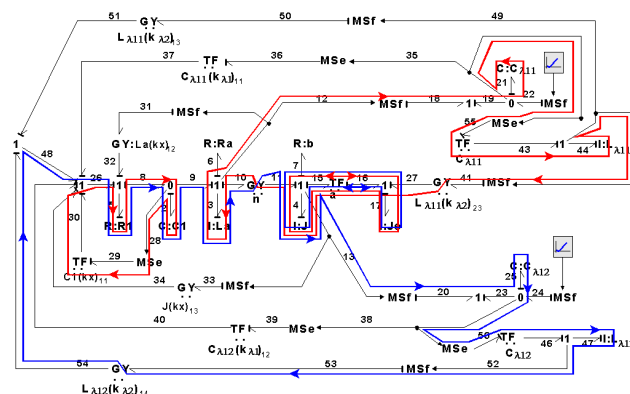


Figure 40. Causal loops for (90) and (91).

- – $(I : L_{\lambda 11} \longleftrightarrow I : L_{\lambda 11})$ the causal path is (44 – 49 – 41 – 27 – 17 – 17 – 16 – 15 – 14 – 4 – 13 – 33 – 34 – 26 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3 – 3 – 12 – 18 – 19 – 21 – 21 – 35 – 55 – 43 – 44) with

$$\frac{L_{\lambda 11}(k_{\lambda 2})_{23} L_a}{J b I_e}(T) = \frac{a(k_{\lambda 2})_{13}(k_{\lambda 2})_{23} I}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (92)$$

The causal loops of term (92) can be seen in Figure 41.

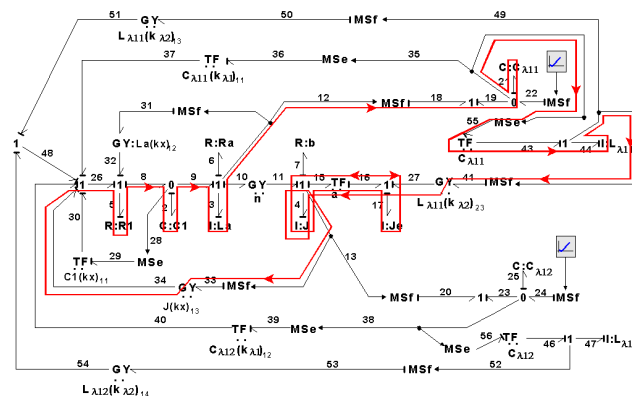


Figure 41. Causal loops for (92).

- – Then

$$c_5 = \frac{a(k_x)_{13}(k_{\lambda 2})_{23}I}{R_1 C_1 L_a \Lambda} + \frac{an(k_x)_{11}(k_{\lambda 2})_{23}}{R_1 L_a \Lambda} + \frac{b(k_{\lambda 2})_{13}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} + \frac{n(k_{\lambda 2})_{14}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} - \frac{an(k_{\lambda 2})_{23}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (93)$$

- For c_6 , the only term of this factor has the causal path (25 – 38 – 39 – 40 – 26 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3 – 3 – 12 – 18 – 19 – 21 – 21 – 35 – 55 – 43 – 44 – 41 – 27 – 17 – 17 – 16 – 15 – 4 – 4 – 13 – 20 – 23 – 25) with

$$c_6 = \frac{-a(k_{\lambda 1})_{12}(k_{\lambda 2})_{23}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (94)$$

which is shown in Figure 42.

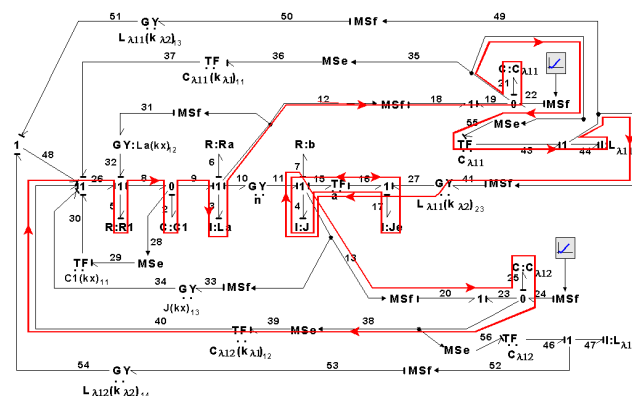


Figure 42. Causal loops for c_6 .

- For c_7 , the only term of this factor has the causal path (25 – 38 – 56 – 46 – 47 – 47 – 52 – 53 – 54 – 48 – 26 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3 – 3 – 12 – 18 – 19 – 21 – 21 – 35 – 55 – 43 – 44 – 44 – 41 – 27 – 17 – 17 – 16 – 15 – 4 – 4 – 13 – 20 – 23 – 25) with

$$c_7 = \frac{-a(k_{\lambda 2})_{14}(k_{\lambda 2})_{23}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (95)$$

and it is shown in Figure 43.

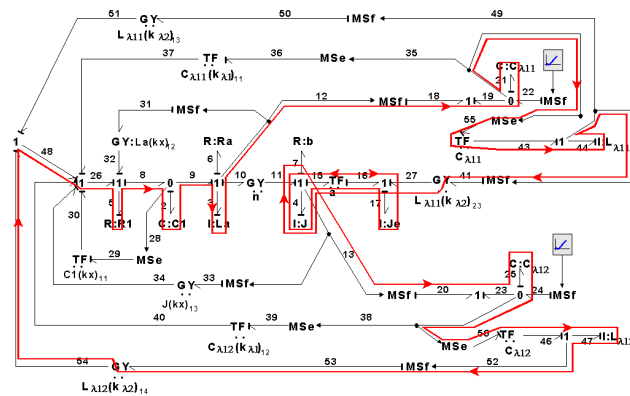


Figure 43. Causal loops for c_7 .

The gains for this tracking control considering that all the eigenvalues are at -1 are given in Table 6.

Table 6. Gains for the ramp tracking controller with eigenvalues at -1 .

$(k_x)_{11} = 60.8$	$(k_x)_{12} = 197.52$	$(k_x)_{13} = 0.1984$	$(k_{\lambda 1})_{11} = 0.026512$
$(k_{\lambda 1})_{12} = -0.28$	$(k_{\lambda 2})_{13} = 0.0064128$	$(k_{\lambda 2})_{14} = -0.04$	$(k_{\lambda 2})_{23} = 0.01$

Figure 44 shows the performance of the tracking control in the physical domain. The tracking input for the current signal in this simulation case is of the form $r_1(t) = 0.5 * t$ ($0 \leq t \leq 30$ s). From 30 to 60 s, there is a negative slope of 0.5 resulting in a constant step signal of 15 A; for $t > 60$ s the current signal to track is with a slope of 1.5, i.e., $r_1(t) = 1.5 * t$. The tracking input for the torque signal is $r_2(t) = 0.2 * t$ ($0 \leq t \leq 85$ s) and $r_2(t) = -0.5 * t$ ($85 < t < \infty$).

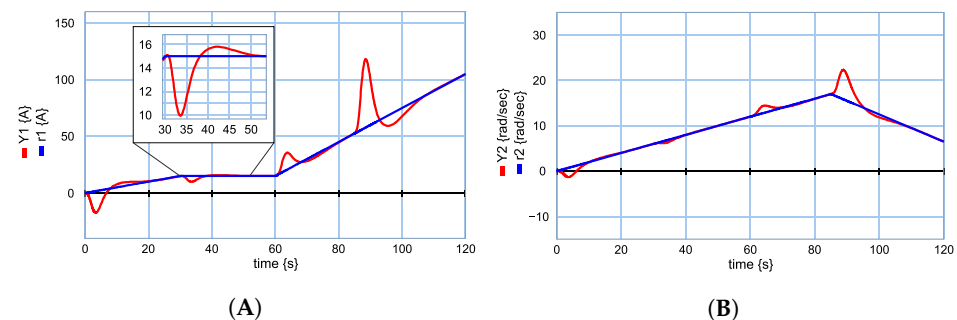


Figure 44. System outputs with a ramp tracking control with all eigenvalues at -1 : (A) Input r_1 and output y_2 ; (B) Input r_2 and output y_2 .

Now, considering all eigenvalues at -10 , the controller gains are indicated in Table 7.

Table 7. Gains for the ramp tracking controller with eigenvalues at -10 .

$(k_x)_{11} = -65.2$	$(k_x)_{12} = 145.61$	$(k_x)_{13} = 14.931$	$(k_{\lambda 1})_{11} = 13.29$
$(k_{\lambda 1})_{12} = -28$	$(k_{\lambda 2})_{13} = 114.1$	$(k_{\lambda 2})_{14} = -40$	$(k_{\lambda 2})_{23} = 100$

Figure 45 illustrates the effectiveness of the controller with the given conditions.

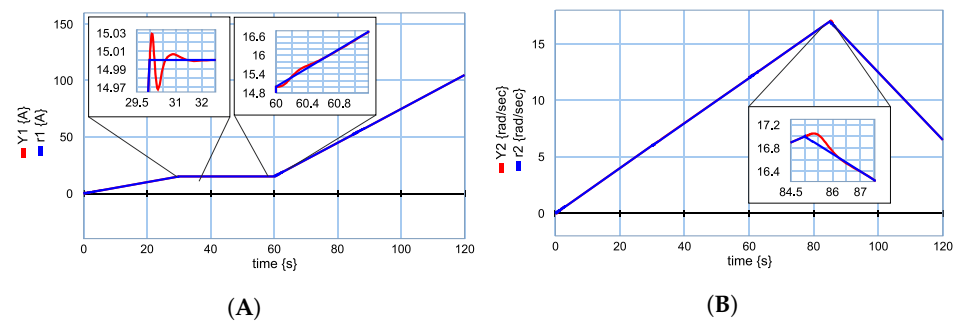


Figure 45. System outputs with a ramp tracking control with all eigenvalues at -10 : (A) Input r_1 and output y_1 ; (B) Input r_2 and output y_2 .

Figures 44 and 45 show that the DC motor outputs can effectively track the desired ramp inputs. In order to stabilize the output responses at shorter times, the eigenvalues of -1 in Figure 44 are changed to -10 in Figure 45. In addition, the desired ramp inputs can have steps.

6.3. Acceleration Tracking Control

The last tracking control is of the acceleration shape defined by

$$\begin{bmatrix} r_1(t) \\ r_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{01} + r_{11} * t + r_{21} * t^2 \\ r_{02} + r_{12} * t + r_{22} * t^2 \end{bmatrix} \quad (96)$$

for this signal; according to (2) and (96), it results $\delta = 3$. The open loop system is built by adding storage elements ($C : C_{\lambda 21}$ and $C : C_{\lambda 22}$) whose bonds are (59 and 62), respectively, according to step 4 of Procedure 1, which is shown in Figure 46.

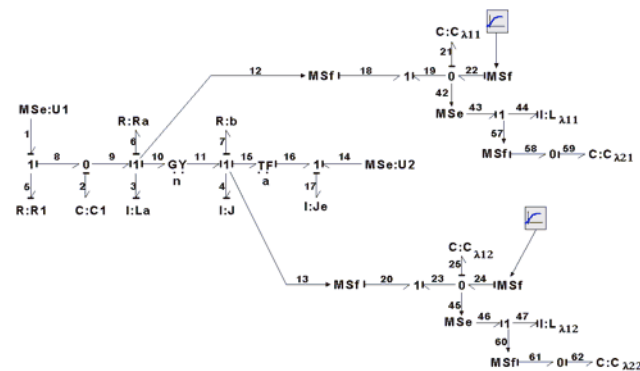


Figure 46. Open loop tracking system for accelerations.

The key vectors for the additional states of the bond graph are defined by

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \begin{bmatrix} q_{21} \\ q_{25} \end{bmatrix}; \dot{\lambda}_1 = \begin{bmatrix} f_{21} \\ f_{25} \end{bmatrix}; \sigma_1 = \begin{bmatrix} e_{21} \\ e_{25} \end{bmatrix} \\ \lambda_2 &= \begin{bmatrix} p_{44} \\ p_{47} \end{bmatrix}; \dot{\lambda}_2 = \begin{bmatrix} e_{44} \\ e_{47} \end{bmatrix}; \sigma_2 = \begin{bmatrix} f_{44} \\ f_{47} \end{bmatrix} \\ \lambda_3 &= \begin{bmatrix} q_{59} \\ q_{62} \end{bmatrix}; \dot{\lambda}_3 = \begin{bmatrix} f_{59} \\ f_{62} \end{bmatrix}; \sigma_3 = \begin{bmatrix} e_{59} \\ e_{62} \end{bmatrix}; r = \begin{bmatrix} f_{22} \\ f_{24} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

The junction structure of the open loop system is given by

$$\begin{bmatrix} f_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ f_6 \\ f_7 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_{17} \\ f_{21} \\ f_{25} \\ e_{44} \\ e_{47} \\ f_{59} \\ f_{62} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -n & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & a & -a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{C_{\lambda 11}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{C_{\lambda 12}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{L_{\lambda 11}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{L_{\lambda 12}} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \\ e_6 \\ e_7 \\ e_1 \\ e_{14} \\ e_{17} \\ f_{22} \\ f_{24} \\ e_{21} \\ e_{25} \\ f_{44} \\ f_{47} \\ e_{59} \\ e_{62} \end{bmatrix} \quad (97)$$

Feedback gains to achieve signal tracking are of the form

$$\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (k_x)_{11} & (k_x)_{12} & (k_x)_{13} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (k_{\lambda 1})_{11} & (k_{\lambda 1})_{12} & (k_{\lambda 2})_{13} & (k_{\lambda 2})_{14} & (k_{\lambda 3})_{15} & (k_{\lambda 3})_{16} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (k_{\lambda 3})_{25} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_{21} \\ q_{25} \\ p_{44} \\ p_{47} \\ q_{59} \\ q_{62} \end{bmatrix} \quad (98)$$

Adding the feedback gains (98) according to step 5 of Procedure 1, the bond graph of the closed loop system is illustrated in Figure 47.

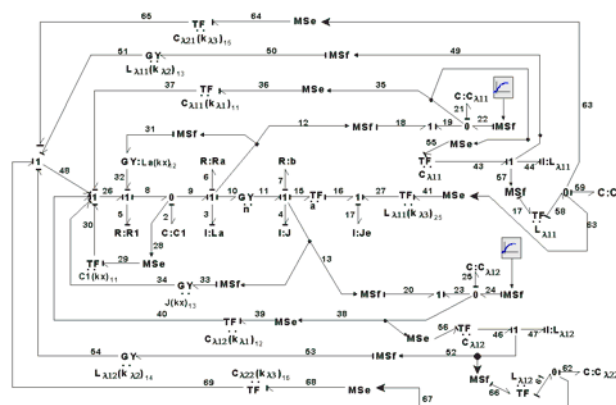


Figure 47. Closed loop tracking system for accelerations.

The polynomial characteristic of this system is expressed by

$$s^9 + d_1 s^8 + d_2 s^7 + d_3 s^6 + d_4 s^5 + d_5 s^4 + d_6 s^3 + d_7 s^2 + d_8 s + d_9 = 0 \quad (99)$$

The coefficients of (99) are calculated by

$$d_1 = b_1 \quad (100)$$

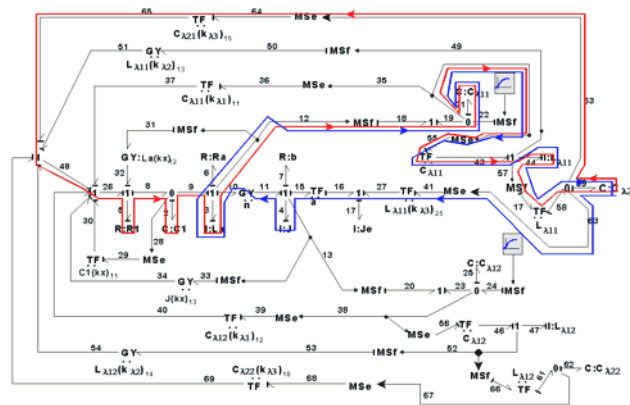


Figure 49. Causal loops for $(k_{\lambda 3})_{15}$ and (105).

- – Then

$$d_5 = \frac{b(k_{\lambda 2})_{13}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} + \frac{n(k_{\lambda 2})_{14}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} + \frac{(k_{\lambda 3})_{15}}{R_1 C_1 L_a} - \frac{an(k_{\lambda 3})_{25}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (106)$$

- For d_6

- $(C : C_{\lambda 21} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 21})$ the causal path is (59 – 63 – 64 – 65 – 48 – 26 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3 – 3 – 12 – 18 – 19 – 21 – 21 – 35 – 55 – 43 – 44 – 44 – 57 – 17 – 58 – 59) with

$$C_{\lambda 21}(k_{\lambda 3})_{15} L_a(T) = \frac{b(k_{\lambda 3})_{15}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (107)$$

- $(C : C_{\lambda 22} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 22})$ the causal path is (62 – 67 – 68 – 69 – 48 – 26 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3 – 3 – 10 – 11 – 4 – 4 – 13 – 20 – 23 – 25 – 25 – 38 – 56 – 46 – 47 – 47 – 52 – 66 – 61 – 62) with

$$C_{\lambda 22}(k_{\lambda 3})_{16} I(T) = \frac{n(k_{\lambda 3})_{16}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (108)$$

- $(C : C_{\lambda 21} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 21})$ the causal path is (59 – 63 – 41 – 27 – 16 – 15 – 4 – 4 – 13 – 33 – 34 – 26 – 5 – 5 – 8 – 2 – 2 – 9 – 3 – 3 – 12 – 18 – 19 – 21 – 21 – 35 – 55 – 43 – 44 – 57 – 17 – 58 – 59) with

$$C_{\lambda 21}(k_{\lambda 3})_{25}(k_x)_{13}(T) = \frac{a(k_x)_{13}(k_{\lambda 3})_{25} I}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (109)$$

The causal loops of terms (107), (108), and (109) can be seen in Figure 50.

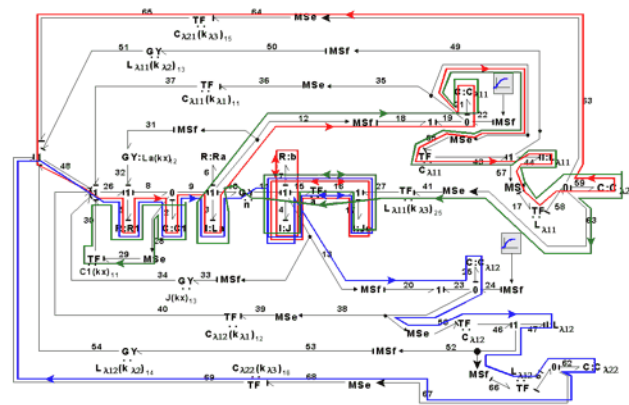


Figure 50. Causal loops for (107), (108), and (109).

- $(C : C_1 \longleftrightarrow R : R_1)$ given by (35) and $(C : C_{\lambda 21} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 21})$; the causal path is $(59 - 63 - 41 - 27 - 16 - 15 - 4 - 4 - 11 - 10 - 3 - 3 - 12 - 18 - 19 - 21 - 21 - 35 - 55 - 43 - 44 - 44 - 57 - 17 - 58 - 59)$ with

$$\frac{C_{\lambda 21}(k_{\lambda 3})_{15} L_a(T)}{R_1 C_1} = \frac{-an(k_{\lambda 3})_{25}}{L_a \Lambda} \cdot \frac{1}{R_1 C_1} \quad (110)$$

- $(C : C_{\lambda 21} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 21})$ the causal path is $(59 - 63 - 41 - 27 - 16 - 15 - 4 - 4 - 11 - 10 - 3 - 3 - 9 - 2 - 2 - 28 - 29 - 30 - 26 - 5 - 5 - 8 - 2 - 2 - 9 - 3 - 3 - 12 - 18 - 19 - 21 - 21 - 35 - 55 - 43 - 44 - 44 - 57 - 17 - 58 - 59)$ with

$$C_{\lambda 21}(k_{\lambda 3})_{25}(k_x)_{11}(T) = \frac{an(k_x)_{11}(k_{\lambda 3})_{25}}{R_1 L_a \Lambda} \quad (111)$$

Figure 51 shows the unidirectional causal loops of terms (110) and (111).

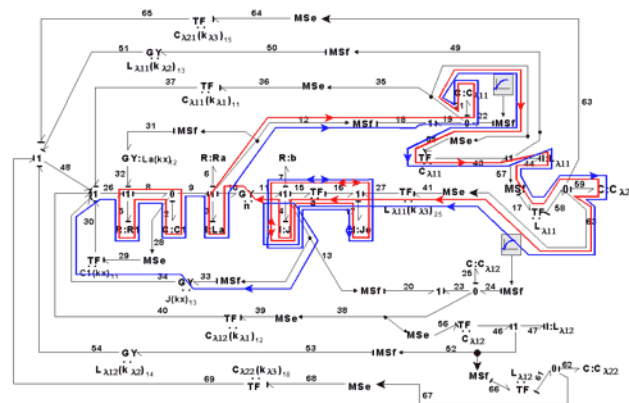


Figure 51. Causal loops for (110) and (111).

- Then

$$d_6 = \frac{b(k_{\lambda 3})_{15}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} + \frac{n(k_{\lambda 3})_{16}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} - \frac{an(k_{\lambda 3})_{25}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} + \frac{a(k_x)_{13}(k_{\lambda 3})_{25} I}{R_1 C_1 L_a \Lambda} + \frac{an(k_x)_{11}(k_{\lambda 3})_{25}}{R_1 L_a \Lambda} \quad (112)$$

- For d_7 , the only term of this factor $(C : C_{\lambda 21} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 21})$ has the causal path $(59 - 63 - 41 - 27 - 16 - 15 - 4 - 4 - 13 - 20 - 23 - 25 - 25 - 38 - 39 - 40 - 26 - 5 - 5 - 8 - 2 - 2 - 9 - 3 - 3 - 12 - 18 - 19 - 21 - 21 - 35 - 55 - 43)$

$-44 - 44 - 57 - 17 - 58 - 59)$ with

$$d_7 = \frac{-a(k_{\lambda 1})_{12}(k_{\lambda 3})_{25}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (113)$$

This term is shown in Figure 52.

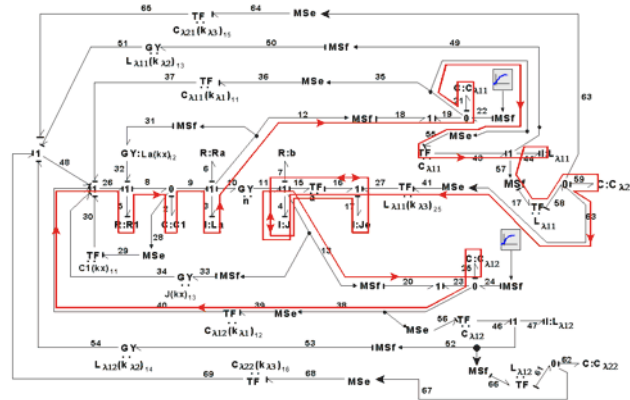


Figure 52. Causal loops for d_7 .

- For d_8 , the only term of this factor ($C : C_{\lambda 21} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 21}$) has the causal path $(59 - 63 - 41 - 27 - 16 - 15 - 4 - 4 - 13 - 20 - 23 - 25 - 25 - 38 - 56 - 46 - 47 - 47 - 52 - 53 - 54 - 48 - 26 - 5 - 5 - 8 - 2 - 2 - 9 - 3 - 3 - 12 - 18 - 19 - 21 - 21 - 35 - 55 - 43 - 44 - 57 - 17 - 58 - 59)$ with

$$d_8 = \frac{-a(k_{\lambda 2})_{14}(k_{\lambda 3})_{25}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (114)$$

and it is illustrated in Figure 53.

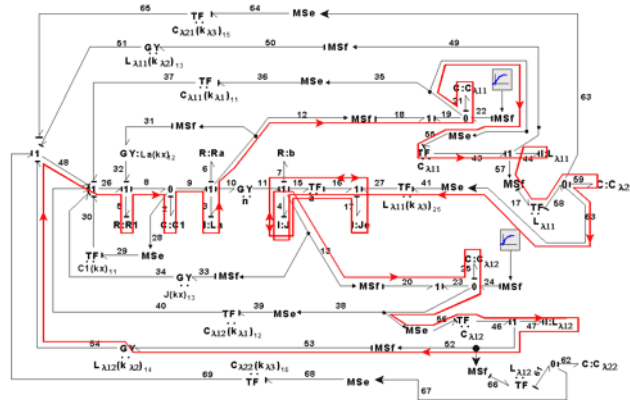


Figure 53. Causal loops for d_8 .

- For d_9 , the only term of this factor ($C : C_{\lambda 21} \longleftrightarrow C : C_{\lambda 21}$) has the causal path $(59 - 63 - 41 - 27 - 16 - 15 - 4 - 4 - 13 - 20 - 23 - 25 - 25 - 38 - 56 - 46 - 47 - 47 - 52 - 66 - 61 - 62 - 67 - 68 - 69 - 48 - 26 - 5 - 5 - 8 - 2 - 2 - 9 - 3 - 3 - 12 - 18 - 19 - 21 - 21 - 35 - 55 - 43 - 44 - 57 - 17 - 58 - 59)$ with

$$d_9 = \frac{-a(k_{\lambda 3})_{16}(k_{\lambda 3})_{25}}{R_1 C_1 L_a \Lambda} \quad (115)$$

which is shown in Figure 54.

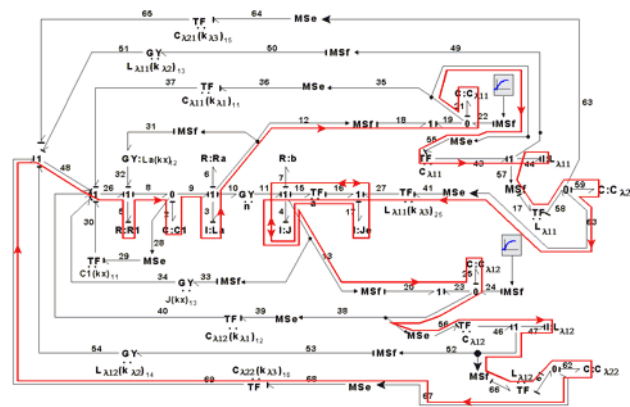


Figure 54. Causal loops for d_9 .

The determination of the gains for the location of the eigenvalues at -1 is given in Table 8.

Table 8. Gains for the acceleration tracking controller with eigenvalues at -1 .

$(k_x)_{11} = 56.8$	$(k_x)_{12} = 197.91$	$(k_x)_{13} = 13.454$	$(k_{\lambda 1})_{11} = 1.0951$	$(k_{\lambda 1})_{12} = -14.4$
$(k_{\lambda 2})_{13} = 0.30222$	$(k_{\lambda 2})_{14} = -3.6$	$(k_{\lambda 3})_{15} = 0.045087$	$(k_{\lambda 3})_{16} = -0.4$	$(k_{\lambda 3})_{25} = 0.001$

The acceleration signals for current and torque in this tracking control are

$$r_1(t) = 0.002 + 0.15 * t + 0.05 * t^2$$

$$r_2(t) = 0.5 + 0.12 * t + 0.2 * t^2$$

The dynamic behavior of the system outputs is shown in Figure 55. In this case, the convergence to the reference signals is relatively slow.

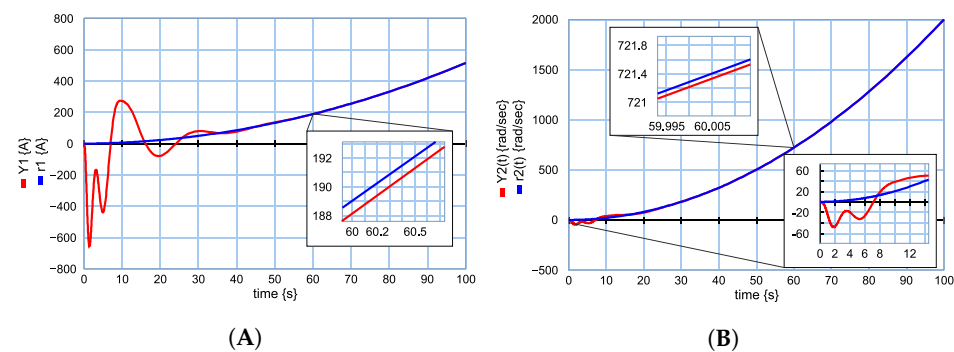


Figure 55. System outputs with an acceleration tracking control with all eigenvalues at -1 : (A) Input r_1 and output y_1 ; (B) Input r_2 and output y_2 .

For a faster response of the control, the location of the eigenvalues at -10 is proposed where Table 9 gives the values of the feedback gains and Figure 56 gives the performance of the outputs.

Table 9. Gains for the acceleration tracking controller with eigenvalues at -1 .

$(k_x)_{11} = -105.2$	$(k_x)_{12} = 95.530$	$(k_x)_{13} = 60.737$	$(k_{\lambda 1})_{11} = 35.145$	$(k_{\lambda 1})_{12} = -144$
$(k_{\lambda 2})_{13} = 448.46$	$(k_{\lambda 2})_{14} = -360$	$(k_{\lambda 3})_{15} = 4039.8$	$(k_{\lambda 3})_{16} = -400$	$(k_{\lambda 3})_{25} = 1000$

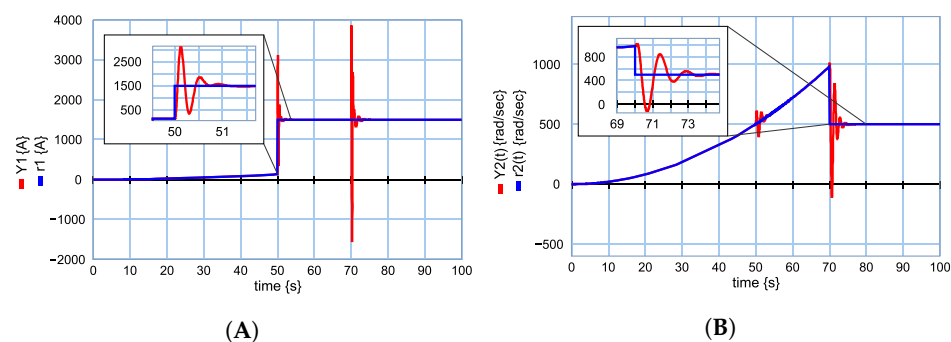


Figure 56. System outputs with an acceleration tracking control with all eigenvalues at -10 : (A) Input r_1 and output y_1 ; (B) Input r_2 and output y_2 .

Regarding control with acceleration tracking inputs for current and angular velocity whose responses are shown in Figures 55 and 56, it can be seen that the successful design of a bond graph of the closed loop system has been achieved. Due to the fact that general tracking inputs must be polynomial, different inputs can be proposed to know different performances of the system outputs. In addition, the controller designs in the bond graph for the step, ramp, and acceleration inputs differ in the increase of the storage elements that determine the additional state variables and the corresponding feedback gains.

Note that the proposed procedure is an interesting tool when an LTI system is modeled by a bond graph; then, the closed loop tracking system in a bond graph approach can be obtained in a direct way. This paper gives the possibility of having a closed loop tracking system of a real system and building the tracking system and the feedback gains with external elements to the system, and we can validate the method and models of this paper.

7. Conclusions

The extension of modeling of physical systems to their tracking control in a bond graph has been presented. An additional bond graph containing additional state variables and the feedback gains determine the proposed controller. The advantages of this approach are that it does not require the mathematical model of the system and it can control systems with different energy domains. In addition, linearly independent and dependent state variables are considered. Therefore, modeling and control symmetries between the bond graph and state space approaches have been established. A DC motor fed with an electrical network and with a mechanical load represents the case study in this paper. First, a tracking control with step signals is designed. From this controller, additional elements are introduced to track ramp type signals. Finally, this controller for acceleration signals is extended. In order to verify the effectiveness of the controllers simulation, results have been shown.

Author Contributions: Conceptualization, A.P.G. and G.G.-A.; methodology, A.P.G.; validation, N.B.G.; formal analysis, J.M.-B. and N.B.G.; writing—original draft preparation, A.P.G. and G.G.-A.; writing—review and editing, G.G.-A., G.A.-J., D.A.-Z. and A.P.G. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research received no external funding.

Institutional Review Board Statement: Not applicable.

Informed Consent Statement: Not applicable.

Data Availability Statement: No other was used for this article.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

Appendix A. Causal Paths

In this section, the definition and classification of the zero-causal paths [32] are described.

The classification of zero-order causal paths follows from the research work carried out by Van Dijk and Breedveld [32].

Definitions

Causal path is a sequence of causal bonds between two vertices of the bond graph. The causal strokes must be attached to each bond at the “same relative position”.

Causal cycle is a closed causal path.

Topological loop is a signal (flow or effort) loop associated with a causal cycle.

Causal mesh is a closed causal path, which usually ends in a port of an element, and it has to contain an odd number of gyrators.

A causal cycle is an *essential causal cycle* if:

1. There is a closed path along a simple junction structure. If more conservation principles than just power conservation are applicable, then the bond graph must represent them explicitly.
2. There is a closed causal path along a weighted junction structure, and the loop gain associated with this causal cycle is not equal to 1.

In all other cases, the causal cycle is not essential.

Zero-order causal path is a causal path with topological loops whose variables are related to themselves by means of algebraic assignments [32].

The following classification of zero-order causal can be described [32],

Class 1 zero-order causal path: causal path is between a storage element (or port) with a derivative and a storage element (port) with integral causality (Figure A1a).

Class 2 zero-order causal path: causal path is between elements (ports) whose constitutive relations are algebraic (algebraic loop) (Figure A1b).

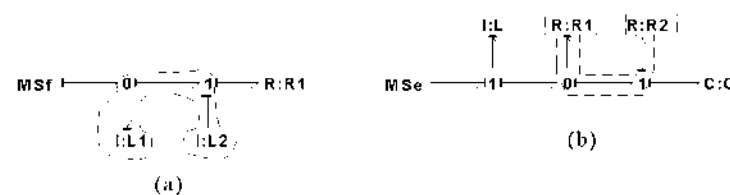


Figure A1. Bond graphs with (a) class 1 and (b) class 2 zero-order causal paths.

Class 3 zero-order causal path: the closed causal path is an essential causal cycle (Figure A2a).

Class 4 zero-order causal path: causal cycle is not essential. The loop gain of the topological loops is always +1 (Figure A2b).

Class 5 zero-order causal path: the closed causal path is a causal mesh (Figure A2c).

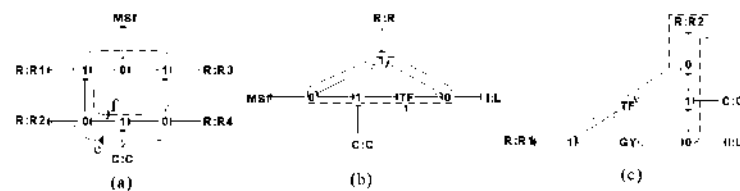


Figure A2. Bond graphs with (a) class 3, (b) class 4, and (c) class 5 zero-order causal paths.

References

1. Porter, B.; Bradshaw, A. Design of linear multivariable continuous-time tracking systems. *Int. Syst. Sci.* **1974**, *5*, 1156–1164. [\[CrossRef\]](#)
2. Young, P.C.; Willems, J.C. An approach to the linear multivariable servomechanism problem. *Int. Control* **1972**, *15*, 961–979. [\[CrossRef\]](#)
3. Osman, J.H.S.; Roberts, P.D. A class of Decentralized Tracking Controller for Robot Manipulators. *Proc. Inst. Mech. Eng. Part I J. Syst. Control Eng.* **1991**, *205*, 141–150. [\[CrossRef\]](#)
4. Ha, W.; Back, J. A Robust Tracking Controller for Robot Manipulators: Embedding Internal Model of Disturbances. In Proceedings of the IEEE International Conference on Robotics and Automation (ICRA), Montreal, QC, Canada, 20–24 May 2019. [\[CrossRef\]](#)

5. Hwang, C.L.; Lan, C.H.; Jieng, W.J. The trajectory tracking of an electrohydraulic servo-mechanism via a sliding mode controller. *Proc. Inst. Mech. Eng. Part I J. Systems Control Eng.* **1993**, *207*, 135–142. [\[CrossRef\]](#)
6. Ghazali, R.; Ngaden, R.; Sam, Y.M.; Rahmat, M.F.; Zulfatman; Hamzah, N. Chaotic trajectory tracking of an electron-hydraulic actuator system using discrete sliding mode control. In Proceedings of the IEEE International Conference on Control System, Computing and Engineering, Penang, Malaysia, 25–27 November 2011. [\[CrossRef\]](#)
7. Zhao, Z.M.; Yuan, X.Y.; Guo, Y.; Xu, F.; Li, Z.G. Modelling and simulation of a two-axis tracking system. *Proc. Inst. Mech. Eng. Part I J. Syst. Control Eng.* **2010**, *224*, 125–137 [\[CrossRef\]](#)
8. Cho, H.S.; Lee, C.W.; Cho, Y.J. Optimal control-system design for solar-tracking concentrators. *Trans. Inst. Meas. Control* **1980**, *2*, 207–213. [\[CrossRef\]](#)
9. Abadi, I.; Musyafa, A.; Soeprinanto, A. Design and Implementation of Active Two Axes Solar Tracking System Using Particle Swarm Optimizatgion Based Fuzzy Logic Controller. *Int. Model. Simul. (IREMOS)* **2015**, *8*, 640–652. [\[CrossRef\]](#)
10. Marcu, A.; Alexandru, C.; Barbu, I. Modeling and Simulation of a dual-axis solar tracker for PV modules. In Proceedings of the Product Design, Robotics, Advanced Mechanical and Mechatronic Systems and Innovation Conference (PRASIC), Brasov, Romania, 8–9 November 2018; IOP Conference Series: Materials Science and Engineering; Volume 514. [\[CrossRef\]](#)
11. Wu, J.; Wu, Z.-G.; Li, J.; Wang, G.; Zhao, H.; Chen, W. Practical Adaptive Fuzzy Control of Nonlinear Pure-feedback Systems with Quantized Nonlinearity Input. *IEEE Trans. Syst. Man Cybern. Syst.* **2019**, *49*, 638–648. [\[CrossRef\]](#)
12. Wu, J.; Chen, X.; Zhao, Q.; Li, J.; Wu, Z.-G. Adaptive Neural Dynamic Surface Control with Prespecified Tracking Accuracy of Uncertain Stochastic Nonstrict-Feedback Systems. *IEEE Trans. Cybern.* **2020**, 1–14. [\[CrossRef\]](#)
13. Karnopp, D.C.; Rosenberg, R.C. *Systems Dynamics: A Unified Approach*; Wiley John & Sons: Hoboken, NJ, USA, 1975.
14. Wellstead, P.E. *Physical System Modelling*; Academic Press: London, UK, 1979.
15. Silverman, L.M. Inversion of multivariable linear systems. *IEEE Trans. Autom. Control* **1969**, *AC-14*, 270–276. [\[CrossRef\]](#)
16. Pushkov, S.G. Inversion of Linear Systems on the Basis of State Space Realization. *J. Comput. Syst. Sci. Int.* **2018**, *57*, 7–17. [\[CrossRef\]](#)
17. Gawthrop, P.J. Bicausal bond graphs. In Proceedings of the 1995 International Conference on Bond Graph Modelling and Simulation: ICBGM'95, Las Vegas, NV, USA, 15–18 January 1995; pp. 83–88.
18. Gawthrop, P.J.; Palmer, D. A bicausal bond graph representation of operational amplifiers. *Proc. Inst. Mech. Eng. Part I J. Syst. Control* **2003**, *217*, 49–58. [\[CrossRef\]](#)
19. Samantaray, A.K.; Ghoshal, S.K. Bicausal bond graphs for supervision: From fault detection and isolation to fault accommodation. *J. Frankl. Inst.* **2008**, *345*, 1–28. [\[CrossRef\]](#)
20. Porter, B.; Bradshaw, A. Design of linear multivariable continuous-time tracking systems incorporating error-actuated controllers. *Int. J. Syst. Sci.* **1976**, *7*, 943–948. [\[CrossRef\]](#)
21. Gonzalez-A, G. Design of LTI tracking systems modelled by bond graphs. In Proceedings of the 2013 18th International Conference on Methods & Models in Automation & Robotics (MMAR), Miedzyzdroje, Poland, 26–29 August 2013.
22. Kahoul, R.; Azzouz, Y.; Ravelo, B.; Mazari, B. New Behavioral Modeling of EMI for DC Motors Applied to EMC Characterization. *IEEE Trans. Ind. Electron. (TIE)* **2013**, *60*, 5482–5496. [\[CrossRef\]](#)
23. Meng, D.; Xiao, Y.; Guo, Z.; Jolfaei, A.; Qin, L.; Lu, X.; Xiang, Q. A data-driven intelligent panning model for UAVs routing networks in mobile Internet of Things. *Comput. Commun.* **2021**, *179*, 231–241. [\[CrossRef\]](#)
24. Zhang, Q.; Yu, K.; Guo, Z.; Garg, S.; Rodrigues, J.J.P.C.; Hassan, M.M.; Guizani, M. Graph Neural Network-Driven Traffic Forecasting for the Connected Internet of Vehicles. *IEEE Trans. Netw. Sci. Eng.* **2021**. [\[CrossRef\]](#)
25. Olejnik, P.; Adamski, P.; Batory, D.; Awrejcewicz, J. Adaptive Tracking PID and FOPID Speed Control of an Elastically Attached Load Driven by a DC Motor at Almost Step Disturbance of Loading Torque and Parametric Excitation. *Appl. Sci.* **2021**, *11*, 679. [\[CrossRef\]](#)
26. Garcia-Sanchez, J.R.; Tavera-Mosqueda, S.; Silva-Ortigoza, R.; Guzman, V.M.H.; Sandoval-Gutierrez, J.; Marcelino-Aranda, M.; Marciano-Melchor, H.T.M. Robust Switched Tracking Control for Wheeled Mobile Robots Considering the Actuators and Drivers. *Sensors* **2018**, *18*, 4316. [\[CrossRef\]](#)
27. Gawthrop, P.; Smith, L. *Metamodeling*; Prentice-Hall: London, UK, 1996.
28. Sueur, C.; Dauphin-Tanguy, G. Bond graph approach for structural analysis of MIMO linear systems. *J. Frankl. Inst.* **1991**, *1*, 55–70. [\[CrossRef\]](#)
29. Dauphin-Tanguy, G.; Rahmani, A.; Sueur, C. Bond graph aided design of controlled systems. *Simul. Pract. Theory* **1999**, *7*, 493–513. [\[CrossRef\]](#)
30. Dauphin-Tanguy, G. *Les Bond Graphs*; Hermes: Paris, France, 2000.
31. Brown, F.T. *Engineering System Dynamics*; Dekker: New York, NY, USA, 1989.
32. Van Dijk, J.; Breedveld, P.C. Simulation of systems models containing zero-order causal paths—I. Classification of zero-order causal paths. *J. Frankl. Inst.* **1991**, *328*, 959–979. [\[CrossRef\]](#)

Article

Direct Determination of Reduced Models of a Class of Singularly Perturbed Nonlinear Systems on Three Time Scales in a Bond Graph Approach

Gerardo Ayala-Jaimes ^{1,*} , Gilberto Gonzalez-Avalos ², Noe Barrera Gallegos ³, Aaron Padilla Garcia ⁴ and Juancarlos Méndez-Barriga ²

¹ Faculty of Sciences of Engineering and Technology, Autonomous University of Baja California, Tijuana 22260, Mexico

² Graduate Studies Division of the Faculty of Mechanical Engineering, University of Michoacán, Morelia 58000, Mexico; gilberto.gonzalez@umich.mx (G.G.-A.); juancarlos.mendez@umich.mx (J.M.-B.)

³ Faculty of Mechanical Engineering, University of Michoacán, Morelia 58000, Mexico; noe.barrera@umich.mx

⁴ Faculty of Electrical Engineering, University of Michoacán, Morelia 58000, Mexico; aaron.padilla@umich.mx

* Correspondence: ayala.gerardo@uabc.edu.mx

Abstract: One of the most important features in the analysis of the singular perturbation methods is the reduction of models. Likewise, the bond graph methodology in dynamic system modeling has been widely used. In this paper, the bond graph modeling of nonlinear systems with singular perturbations is presented. The class of nonlinear systems is the product of state variables on three time scales (fast, medium, and slow). Through this paper, the symmetry of mathematical modeling and graphical modeling can be established. A main characteristic of the bond graph is the application of causality to its elements. When an integral causality is assigned to the storage elements that determine the state variables, the dynamic model is obtained. If the storage elements of the fast dynamics have a derivative causality and the storage elements of the medium and slow dynamics an integral causality is assigned, a reduced model is obtained, which consists of a dynamic model for the medium and slow time scales and a stationary model of the fast time scale. By applying derivative causality to the storage elements of the fast and medium dynamics and an integral causality to the storage elements of the slow dynamics, the quasi-steady-state model for the slow dynamics is obtained and stationary models for the fast and medium dynamics are defined. The exact and reduced models of singularly perturbed systems can be interpreted as another symmetry in the development of this paper. Finally, the proposed methodology was applied to a system with three time scales in a bond graph approach, and simulation results are shown in order to indicate the effectiveness of the proposed methodology.

Keywords: bond graph; singular perturbations; three time scales; reduced systems



Citation: Ayala-Jaimes, G.; Gonzalez-Avalos, G.; Barrera Gallegos, N.; Padilla Garcia, A.; Méndez-Barriga, J. Direct Determination of Reduced Models of a Class of Singularly Perturbed Nonlinear Systems on Three Time Scales in a Bond Graph Approach. *Symmetry* **2022**, *14*, 104. <https://doi.org/10.3390/sym14010104>

Academic Editor: Jan Awrejcewicz

Received: 9 December 2021

Accepted: 6 January 2022

Published: 8 January 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

The modeling, analysis, and control of high-order systems are an interesting challenge to give adequate results. Furthermore, some of these systems may present different time scales, which are called singularly perturbed systems. Systems of two time scales are the most common determining slow and fast variables. These systems are characterized by having parasitic parameters.

Essential references of systems with singular perturbations are found in [1,2]. Modeling and its properties of nonlinear systems with multiple time scales are proposed in [3]. The correct application of some of the singular perturbation methods derived in the reduction of systems given the exact decomposition of the slow and fast modes was proposed in [4]. Systems with singular perturbations indicate the presence of the parasitic parameter, and the control of this parameter was described in [5]. Exponential stability applied to

nonlinear singularly perturbed systems was analyzed in [6]. The asymptotic stability of time-varying systems with singular perturbations was introduced in [7]. Observers of singularly perturbed systems were applied in [8,9]. The robust stability of systems with singular perturbations was described in [10].

More recent references and three time scales are cited below. The control of a helicopter system that determines a system with three time scales was presented in [11]. Furthermore, sliding mode control for systems with three time scales and disturbances was proposed in [12]. An adaptive fault-tolerant control for LTI systems with two or three time scale was presented in [13]. The control theory with applications in the period 1984–2001 for systems with singular perturbations was described in [14].

The bond graph methodology allows modeling, analyzing, and controlling systems in different energy domains (electrical, mechanical, hydraulic, thermal, magnetic) [15,16]. Some papers have been published on systems with singular perturbations with bond graphs within which the following can be cited. The models and their simplification to singular perturbation methods were described in [17]. Reciprocal systems to obtain fast dynamics were introduced in [18]. Reduced models of LTI systems with singular perturbations on two time scales with different causalities were proposed in [19]. The determination of approximate models of LTI systems with mixed causalities to the storage elements in the bond graph was presented in [20].

The determination of bond graph models and their realization in the state space indicate the graphical and mathematical symmetry of these systems.

The different dynamics of a system through causal loops were identified in [18,21]. State feedback using an observer for LTI systems in the physical domain was proposed in [22]. Furthermore, the modeling of a class of nonlinear systems with two time scales was presented in [23]. LTI systems with three time scales, their modeling, and their reduction with mixed causalities in bond graphs were introduced in [24].

Currently, there are some software programs available for modeling and system analysis in a bond graph approach, for example the 20-sim software developed at the university of Twente, BONDLAB introduced by Bond Lab Technologies, SYMBOLS 2000 presented by Mukherjee and Samantaray, and CAMPG developed by Cadsim Engineering.

Control systems modeled in bond graphs require the design of the control law existing in different procedures, for example bond-graph-based control by Gawthrop [25,26] and bond graphs in control by Karnopp [27]. A slow state estimated feedback applied to a bond graph model of a singularly perturbed system was proposed in [22]. Furthermore, a composite feedback control of a system with singular perturbations in the physical domain was presented in [28].

In this paper, bond graph models of a class of nonlinear systems with singular perturbations on three time scales (fast, medium, slow) are proposed. These systems can have linearly independent and dependent state variables on each time scale. Due to the properties of singularly perturbed systems, reduced models can be obtained. The deduction and comparison of reduced models from the exact models can be manifested as a symmetry of the systems with singular perturbations.

The first reduced model is when the fast dynamics have converged, which is applied to the storage elements that represent these dynamics as a derivative causality. The next reduced model is obtained by assigning derivative causality to the elements of the medium dynamics, indicating that these dynamics have converged. Therefore, the traditional quasi-steady-state model with slow dynamics in a bond graph approach is determined. This paper is based on [19,23]. However, the extension to three time scales to a class of nonlinear systems and the different dynamics can be linearly independent and dependent, offering the originality of this paper.

Bond graph modeling has been used extensively in robotic systems and is applied to internal combustion and electric vehicles today [29]. Furthermore, thermal and chemical systems have been modeled with bond graphs [15]. These systems generally determine nonlinear models on various time scales, so this paper can be useful to analyze the behavior

of reduced models. Complex dynamic systems are an interesting challenge to model in bond graphs

This paper is organized as follows: Section 2 gives the analysis of systems with singular perturbations in the algebraic approach. The modeling and reduction in the bond graph of systems with three time scales is presented in Section 3. A case of study of an electromechanical system by obtaining the reduced models in the physical domain is described in Section 4. Finally, in Section 5, the conclusions are given.

2. Singular Perturbation Method

A singularly perturbed nonlinear system is expressed by:

$$\dot{x}_1 = f(x_1, x_2, u, \varepsilon, t), \quad x_1(t=0) = x_1(0) \quad x_1 \in \mathbb{R}^n \quad (1)$$

$$\varepsilon \dot{x}_2 = g(x_1, x_2, u, \varepsilon, t), \quad x_2(t=0) = x_2(0) \quad x_2 \in \mathbb{R}^m \quad (2)$$

It is assumed that in the domain of interest, f and g are continuous differentiable functions of their arguments x_1 , x_2 , u , ε , and t . Due to the characteristics of systems with singular perturbations whose complete order is $(n + m)$ containing small time constants, it is possible to neglect them by setting $\varepsilon = 0$ in (2):

$$0 = g(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{u}, 0, t) \quad (3)$$

and substituting (3) into (1):

$$\dot{\bar{x}}_1 = f(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{u}, 0, t) \quad (4)$$

determines a reduced differential equation of order n and an algebraic equation of order m .

It is assumed that one of the several solutions of (3) is defined by:

$$\bar{x}_2 = \phi(\bar{x}_1, \bar{u}, t) \quad (5)$$

and substituting (5) into (4), the quasi-steady-state model is obtained by:

$$\begin{aligned} \dot{\bar{x}}_1 &= f(\bar{x}_1, \phi(\bar{x}_1, \bar{u}, t), \bar{u}, t) \\ &= \bar{f}(\bar{x}_1, \bar{u}, t) \end{aligned} \quad (6)$$

The validity of the given reduction of a system with singular perturbations is due to the Tikhonov theorem, which requires the following assumptions.

Assumption 1 ([1,2]). The functions f and g are continuous with the variables x , y , and t .

Assumption 2 ([1,2]). The differential equation of fast dynamics on the fast time scale:

$$\frac{dx_2(\tau)}{d\tau} = g[\bar{x}_1, x_2(\tau), \bar{u}, 0, t] \quad (7)$$

where $\bar{x}_1$ and t are fixed parameters, is called the boundary layer equation of the system (1) and (2).

Assumption 3 ([1,2]). The root $\bar{x}_2 = \phi(\bar{x}_1, \bar{u}, t)$ of the equation $g(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{u}, 0, t) = 0$ is called an isolated root in a domain D of the set of variables x_1 , u , and t , if there exists an $\varepsilon > 0$ such that the equation $g(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{u}, 0, t) = 0$ has no solution other than $\phi(\bar{x}_1, \bar{u}, t)$ for $|\bar{x}_2 - \phi(\bar{x}_1, \bar{u}, t)| < \varepsilon$.

Assumption 4 ([1,2]). The isolated root $\bar{x}_2 = \phi(\bar{x}_1, \bar{u}, t)$ is called stable in D if, for all points $(x_1, u, t) \in D$, the points $\bar{x}_2 = \phi(\bar{x}_1, \bar{u}, t)$ are asymptotically stable equilibrium points according to Lyapunov with Equation (7) as $\tau \rightarrow \infty$. This means that the Jacobian matrix g_{x_2} has all eigenvalues with negative real parts,

$$\operatorname{Re} \lambda \left\{ \frac{\partial g}{\partial x_2} \right\} \leq -c < 0 \quad (8)$$

Assumption 5 ([1,2]). The region of influence R of an isolated stable root $\bar{x}_2 = \phi(\bar{x}_1, \bar{u}, t)$ is the set of points $[x_1(0), x_2(0), u(0), t_0]$ such that the solution of (7) satisfying the initial condition $x_2(\tau = 0) = x_2(0)$ tends to the value $\phi(\bar{x}_1(0), \bar{u}(0), t_0)$, as $\tau \rightarrow \infty$.

With the established assumptions, the Tikhonov theorem is enunciated.

Theorem 1 ([1,2]). Let Assumptions 1 to 5 be satisfied. Then, the solutions $x_1(t, \varepsilon)$ and $x_2(t, \varepsilon)$ of the full system (1) and (2) are related to the solutions $\bar{x}_1$ and $\bar{x}_2$ of the degenerate model (3) and (4) as:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [x_1(t, \varepsilon)] = \bar{x}_1(t), \quad 0 \leq t \leq T \quad (9)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [x_2(t, \varepsilon)] = \bar{x}_2(t), \quad 0 < t \leq T \quad (10)$$

where T is any value such that $\bar{x}_2 = \phi(\bar{x}_1, \bar{u}, t)$ is an isolated stable root of $g(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{u}, 0, t) = 0$ for $0 \leq t \leq T$. Thus, the convergence is uniform in $0 \leq t \leq T$ for $x_1(t, \varepsilon)$ and in any interval $0 < t_1 \leq t \leq T$ for $x_2(t, \varepsilon)$.

A singular perturbed system with three time scales is defined by:

$$\dot{x}_1 = f(x_1, x_2, x_3, u, \varepsilon_1, \varepsilon_2, t), \quad x_1(t=0) = x_1(0) \quad x_1 \in \mathbb{R}^n \quad (11)$$

$$\dot{x}_2 = g(x_1, x_2, x_3, u, \varepsilon_1, \varepsilon_2, t), \quad x_2(t=0) = x_2(0) \quad x_2 \in \mathbb{R}^m \quad (12)$$

$$\dot{x}_3 = h(x_1, x_2, x_3, u, \varepsilon_1, \varepsilon_2, t), \quad x_3(t=0) = x_3(0) \quad x_3 \in \mathbb{R}^l \quad (13)$$

where f , g , and h are assumed to be sufficiently many times continuously differentiable functions for their arguments x_1 , x_2 , x_3 , ε_1 , and ε_2 .

In this paper, the product of state variables is the specific class of nonlinear systems modeled and analyzed. These systems are described by:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \varepsilon_1 \dot{x}_2(t) \\ \varepsilon_2 \dot{x}_3(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}(x) & A_{12}(x) & A_{13}(x) \\ A_{21}(x) & A_{22}(x) & A_{23}(x) \\ A_{31}(x) & A_{32}(x) & A_{33}(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B_1(x) \\ B_2(x) \\ B_3(x) \end{bmatrix} u(t) \quad (14)$$

where the slow, medium, and fast dynamics are $x_1(t) \in \mathbb{R}^n$, $x_2(t) \in \mathbb{R}^m$, and $x_3(t) \in \mathbb{R}^l$, respectively, and the inputs are $u(t) \in \mathbb{R}^p$.

The first reduction of this system is obtained by neglecting the fast dynamics ($\varepsilon_2 = 0$) deriving the following expressions:

$$\begin{bmatrix} \dot{\bar{x}}_1(t) \\ \varepsilon_1 \dot{\bar{x}}_2(t) \\ \bar{x}_3(t) \end{bmatrix} = \bar{A}(x) \begin{bmatrix} \bar{x}_1(t) \\ \bar{x}_2(t) \end{bmatrix} + \bar{B}(x) u(t) \quad (15)$$

where:

$$\begin{aligned} \bar{A}(x) &= \begin{bmatrix} \bar{A}_{11}(x) & \bar{A}_{12}(x) \\ \bar{A}_{21}(x) & \bar{A}_{22}(x) \\ \bar{A}_{31}(x) & \bar{A}_{32}(x) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} A_{11}(x) - A_{13}(x)A_{33}^{-1}(x)A_{31}(x) & A_{11}(x) - A_{13}(x)A_{33}^{-1}(x)A_{32}(x) \\ A_{21}(x) - A_{23}(x)A_{33}^{-1}(x)A_{31}(x) & A_{22}(x) - A_{23}(x)A_{33}^{-1}(x)A_{32}(x) \\ -A_{33}^{-1}(x)A_{31}(x) & -A_{33}^{-1}(x)A_{32}(x) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (16)$$

and:

$$\bar{B}(x) = \begin{bmatrix} \bar{B}_1(x) \\ \bar{B}_2(x) \\ \bar{B}_3(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1(x) - A_{13}(x)A_{33}^{-1}(x)B_3(x) \\ B_2(x) - A_{23}(x)A_{33}^{-1}(x)B_3(x) \\ -A_{33}^{-1}(x)B_3(x) \end{bmatrix} \quad (17)$$

The last reduction is achieved by removing the medium dynamics with $\varepsilon_1 = 0$, and the system is described by:

$$\begin{bmatrix} \dot{\tilde{x}}_1(t) \\ \tilde{x}_2(t) \end{bmatrix} = \tilde{A}(x)\tilde{x}_1(t) + \tilde{B}(x)u(t) \quad (18)$$

where:

$$\tilde{A}(x) = \begin{bmatrix} \widetilde{A_{11}} \\ \widetilde{A_{21}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overline{A_{11}}(x) - \overline{A_{12}}(x)[\overline{A_{22}}(x)]^{-1}\overline{A_{21}}(x) \\ -[\overline{A_{22}}(x)]^{-1}\overline{A_{21}}(x) \end{bmatrix} \quad (19)$$

and:

$$\tilde{B}(x) = \begin{bmatrix} \widetilde{B_1} \\ \widetilde{B_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overline{B_1}(x) - \overline{A_{12}}(x)[\overline{A_{22}}(x)]^{-1}\overline{B_2}(x) \\ -[\overline{A_{22}}(x)]^{-1}\overline{B_2}(x) \end{bmatrix} \quad (20)$$

Bond graph models of singularly perturbed systems are described in the next section.

3. Singularly Perturbed Systems in a Bond Graph Approach

The bond graph methodology provides a modeling platform based on the exchange of power of the elements that form a system. Power is obtained as the product of two generalized power variables: effort $e(t)$ and flow $f(t)$, as shown in Figure 1.

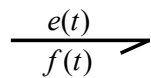


Figure 1. Representation of a bond.

In bond graph modeling, two generalized energy variables called momentum $p(t) = \int_0^t e(\tau)d\tau$ and displacement $q(t) = \int_0^t f(\tau)d\tau$ are used.

In order to obtain the sets of equations of a system, the constitutive relations of the elements are required. These relations can be dynamic or algebraic depending on the element and by the cause–effect assignment. In a bond graph, a bond with a causal stroke determines the causality assignment, and the assignments of the half arrow and the causal stroke are independent, as is shown in Figure 2.



Figure 2. Representation of causal bonds.

The different physical systems that can be used to build a dynamic system are described below:

- One-port passive elements are defined by:
 - Resistance taking whatever causality shown in Figure 3. This element represents damper, resistor, or fluid resistance, and the constitutive relationship is given by:

$$e = Rf \quad (21)$$



Figure 3. Representation of a resistive bond.

- Capacitance in integral causality assignment where the flow variable is integrated to produce the effort variable, as illustrated in Figure 4. Accumulator, linear, and torsional springs represent capacitances whose constitutive relationship is described by:

$$e = \frac{1}{C} \int f dt \quad (22)$$

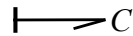


Figure 4. Representation of a capacitive bond in integral causality.

This element in a derivative causality assignment is shown in Figure 5 and the corresponding constitutive relationship given by:

$$f = C \frac{de}{dt} \quad (23)$$

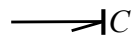


Figure 5. Representation of a capacitive bond in derivative causality.

- Inertance in integral causality assignment where the effort variable is integrated to produce the flow variable, which is shown in Figure 6. This element is representative of a mass, inductor, or flywheel, and its constitutive relationship is:

$$f = \frac{1}{C} \int e dt \quad (24)$$

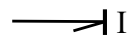


Figure 6. Representation of an inductive bond in integral causality.

When a derivative causality is assigned to this element, the constitutive relationship is described by:

$$e = I \frac{df}{dt} \quad (25)$$

and Figure 7 shows this element with the causality applied.

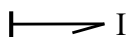


Figure 7. Representation of an inductive bond in derivative causality.

- One-port active elements denoted by (MS_e, MS_f) represent the power sources. These sources have only one causality, and this is shown in Figure 8;



Figure 8. Representation of power sources: MS_e is an effort source; MS_f is a flow source.

- Two-port elements represent distribution elements denoted by (TF, GY) , which are transformers and gyrators, and Figure 9 shows these elements;

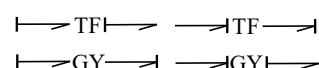


Figure 9. Representation of transformers, TF , and gyrators, GY .

The constitutive relationships for the transformers are given by:

$$e_1 = ae_2 \quad (26)$$

$$f_1 = \frac{1}{a}f_2 \quad (27)$$

and for gyrators are:

$$e_1 = bf_2 \quad (28)$$

$$f_1 = \frac{1}{b}e_2 \quad (29)$$

- Three-port elements represent junctions and are denoted by $(1,0)$, which determine the different connections of the elements, and these junctions are shown in Figure 10;

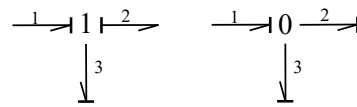


Figure 10. Connection representation: series junctions, 1, and parallel junctions, 0.

A one-junction is defined by:

$$e_{in1} + e_{in2} + \dots + e_{inm} = e_{out1} + e_{out2} + \dots + e_{outn} \quad (30)$$

$$f_{in1} = f_{in2} = \dots = f_{inm} = f_{out1} = f_{out2} = \dots = f_{outn} \quad (31)$$

and for a zero-junction:

$$e_{in1} = e_{in2} = \dots = e_{inm} = e_{out1} = e_{out2} = \dots = e_{outn} \quad (32)$$

$$f_{in1} + f_{in2} + \dots + f_{inm} = f_{out1} + f_{out2} + \dots + f_{outn} \quad (33)$$

where m and n are the entry and exit bonds to the one-junction.

The different elements of a bond graph can be grouped into fields, and the use of junction structures allows relatively complex systems to be modeled and analyzed in this approach. A bond graph model with a preferred integral causality assignment (BGI) of a system with singular perturbations is shown in Figure 11. The junction structure of a bond graph model with three time scales is based on the junction structure of a basic bond graph model introduced in [30].

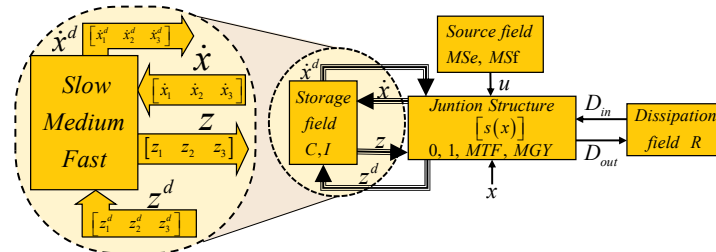


Figure 11. Diagram of a junction structure with all storage elements in a predefined integral causality: energy state variables x ; inputs, u ; dissipation field variables, (D_{in}, D_{out}) ; derived from states in integral and derivative causality, $(\dot{x}, \dot{x}^d)$; co-energy variables in integral and derivative, causality (z, z^d) .

The block diagram of Figure 11 is described by:

- The source field denoted by (MS_e, MS_f) that determines the plant input $u(t) \in \mathbb{R}^p$;

- The junction structure denoted by $(0, 1, MTF, MGY)$ with zero and one junctions, transformers MTF , and gyrators MGY , which can be modulated by state variables $x(t)$;
- The energy storage field denoted by (C, I) that defines energy variables $q(t)$ and $p(t)$ associated with C and I storage elements in an integral causality assignment describing linearly independent state variables of energy $x(t)$ and co-energy $z(t)$ and storage elements with a derivative causality assigned describing linearly dependent state variables of energy $x^d(t)$ and co-energy $z^d(t)$.

This storage field is defined by elements that represent the slow, medium, and fast dynamics that are indicated in Figure 11. The storage elements for each dynamic can

have an integral causality whose state vector is $x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{bmatrix}$ and a derivative

causality with state vector $x^d(t) = \begin{bmatrix} x_1^d(t) \\ x_2^d(t) \\ x_3^d(t) \end{bmatrix}$.

Therefore, the smallest circle in Figure 11 defines all the storage elements, and the largest circle indicates that this field is formed by the dynamics of three time scales. These dynamics are:

- Slow dynamics $x_1(t) \in \mathbb{R}^n$ and $x_1^d(t) \in \mathbb{R}^{n_d}$ with constitutive relationships:

$$z_1(t) = F_1 x_1(t) \quad (34)$$

$$z_1^d(t) = F_1^d x_1^d(t) \quad (35)$$

- Medium dynamics $x_2(t) \in \mathbb{R}^m$ and $x_2^d(t) \in \mathbb{R}^{m_d}$ with constitutive relationships:

$$z_2(t) = F_2 x_2(t) \quad (36)$$

$$z_2^d(t) = F_2^d x_2^d(t) \quad (37)$$

- Fast dynamics $x_3(t) \in \mathbb{R}^l$ and $x_3^d(t) \in \mathbb{R}^{l_d}$ with constitutive relationships:

$$z_3(t) = F_3 x_3(t) \quad (38)$$

$$z_3^d(t) = F_3^d x_3^d(t); \quad (39)$$

- The energy dissipation field denoted by (R) that defines $D_{in}(t) \in \mathbb{R}^r$ and $D_{out}(t) \in \mathbb{R}^r$ as a mixture of power variables $e(t)$ and $f(t)$ indicating the energy exchanges between the dissipation field and the junction structure.

The mathematical model of the diagram in Figure 11 is obtained from the following lemma.

Lemma 1. Consider a class of nonlinear systems of the type of product of state variables composed of three time scales modeled by bond graphs in a preferred integral causality assignment whose junction structure is defined by:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ D_{in}(t) \\ z^d(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11}(x) & S_{12}(x) & S_{13}(x) & S_{14}(x) \\ S_{21}(x) & S_{22}(x) & S_{23}(x) & 0 \\ S_{31}(x) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z(t) \\ D_{out}(t) \\ u(t) \\ \dot{x}^d(t) \end{bmatrix} \quad (40)$$

where the state variables are:

$$x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{bmatrix} \quad (41)$$

$x_1(t)$, $x_2(t)$, and $x_3(t)$ being the slow, medium, and fast dynamics, respectively, with linear constitutive relationships:

$$z(t) = Fx(t) \quad (42)$$

$$z^d(t) = F^d x^d(t) \quad (43)$$

$$D_{out}(t) = LD_{in}(t) \quad (44)$$

then a mathematical model of this system is given by:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \varepsilon_1 \dot{x}_2(t) \\ \varepsilon_2 \dot{x}_3(t) \end{bmatrix} = A(x)x(t) + B(x)u(t) \quad (45)$$

where:

$$A(x) = \varepsilon E^{-1}(x) \left[S_{11}(x) + S_{12}(x)M(x)S_{21}(x) + S_{14}(x)(F^d)^{-1} \dot{S}_{31}(x) \right] F \quad (46)$$

$$B(x) = \varepsilon E^{-1}(x) [S_{13}(x) + S_{12}(x)M(x)S_{23}(x)] \quad (47)$$

with:

$$E(x) = I - S_{14}(x)(F^d)^{-1} S_{31}(x)F \quad (48)$$

$$M(x) = L[I - S_{22}(x)L]^{-1} \quad (49)$$

and:

$$\varepsilon = \text{diag}\{I, F_2^{-1}, F_3^{-1}\} \quad (50)$$

The proof is presented in Appendix A. The symmetry between graphical modeling in a bond graph and mathematical modeling in the state space through Lemma 1 is established.

In order to obtain the mathematical model with the conditions of this paper from a bond graph model of a class of nonlinear systems with singular perturbations, the following assumptions have to be considered.

Assumption 6. The constitutive relationships of the storage elements and dissipation elements are linear.

Assumption 7. The product of the state variables defines the class of nonlinear systems.

Assumption 8. The relationships between storage elements in integral and derivative causality defined by $E(x)$ are structurally invertible.

Assumption 9. The algebraic loops between dissipation elements defined by $M(x)$ are structurally invertible.

The bond graph methodology allows deriving different models depending on the causality applied to its elements. Furthermore, when a system has the properties of having different time scales, reduced models can be obtained. Therefore, the direct determination of reduced models for a class of nonlinear systems with three time scales in a bond graph approach is presented.

In the analysis of singularly perturbed systems, the fast dynamics reach the steady state when the medium and slow dynamics are developing their transitory period. These reduced models can be obtained by assigning a derivative causality to the storage elements of the fast dynamics and maintaining integral causality to the storage elements of the medium and slow dynamics. This formulation is proposed in Figure 12.

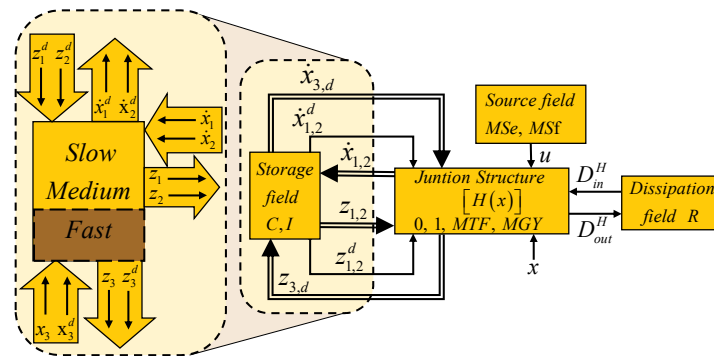


Figure 12. Diagram of a junction structure with storage elements in integral causality for slow and medium dynamics $x_{1,2}$ and in derivative causality for fast dynamics $x_{3,d}$; energy state variables x ; inputs, u ; dissipation field variables (D_{in}^H, D_{out}^H) .

The junction structure of Figure 12 indicates that for the elements of the storage field of the slow and medium dynamics, an integral causality is assigned, which is denoted by $x_{1,2}$, and all the elements of the fast dynamics have a derivative causality, that is the elements that are in Figure 11 in integral causality x_3 and derivative x_3^d will all have derivative causality and are denoted by $x_{3,d}$. Therefore, these key vectors are a compact representation of the storage field:

- $x_{1,2}$ state variables of slow and medium dynamics in integral causality;
- $x_{3,d}$ state variables linearly independent and dependent on fast dynamics in derivative causality.

The representation of the left part of Figure 12 shows individually the causality for each of the slow, medium, and fast dynamics. The causality of the dissipative field has to be adjusted with its key vectors (D_{in}^H, D_{out}^H) so that the entire bond graph is causally corrected.

Based on the diagram in Figure 12, the junction structure that allows deriving the reduced models is introduced in the following lemma.

Lemma 2. Consider a class of nonlinear systems with singular perturbations modeled by bond graphs where the storage elements that represent slow and medium dynamics have an integral causality assignment, and for the storage elements for the fast dynamics, a derivative causality is assigned, whose junction structure is defined by:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_{1,2}(t) \\ z_{3,d}(t) \\ D_{in}^H(t) \\ z_{1,2}^d(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H_{11}^{(1,2)(1,2)}(x) & H_{11}^{(1,2)(3,d)}(x) & H_{12}^{(1,2)}(x) & H_{13}^{(1,2)}(x) & H_{14}^{(1,2)}(x) \\ H_{11}^{(3,d)(1,2)}(x) & H_{11}^{(3,d)(3,d)}(x) & H_{12}^{(3,d)}(x) & H_{13}^{(3,d)}(x) & 0 \\ H_{21}^{(1,2)}(x) & H_{21}^{(3,d)}(x) & H_{22}(x) & H_{23}(x) & 0 \\ H_{31}^{(1,2)}(x) & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_{1,2}(t) \\ \dot{x}_{3,d}(t) \\ D_{out}^H(t) \\ u(t) \\ \dot{x}_{1,2}^d(t) \end{bmatrix} \quad (51)$$

where the state variables are expressed by:

$$x_{1,2}(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} \quad (52)$$

and:

$$x_{3,d} = \begin{bmatrix} x_3(t) \\ x_3^d(t) \end{bmatrix} \quad (53)$$

with

$$D_{out}^H(t) = L_H D_{in}^H(t) \quad (54)$$

then the quasi-steady-state models are given by:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_{1,2}(t) \\ x_{3,d}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^{(1,2)}(x) \\ A^{(3,d)(1,2)}(x) \end{bmatrix} x_{1,2}(t) + \begin{bmatrix} B^{(1,2)}(x) \\ B^{(3,d)}(x) \end{bmatrix} u(t) \quad (55)$$

where:

$$\begin{aligned} A^{(1,2)}(x) &= \varepsilon_H [E^{(1,2)}(x)]^{-1} \left[H_{11}^{(1,2)(1,2)}(x) + H_{12}^{(1,2)} N_H(x) H_{21}^{(1,2)}(x) \right. \\ &\quad \left. + H_{14}^{(1,2)}(x) (F_{1,2}^d)^{-1} \dot{H}_{31}^{(1,2)}(x) \right] F_{1,2} \end{aligned} \quad (56)$$

$$B^{(1,2)}(x) = \varepsilon_H [E^{(1,2)}(x)]^{-1} \left[H_{13}^{(1,2)}(x) + H_{12}^{(1,2)} N_H(x) H_{23}^{(1,2)}(x) \right] \quad (57)$$

$$A^{(3,d)(1,2)}(x) = (F_{3,d})^{-1} \left[H_{11}^{(3,d)(1,2)}(x) + H_{12}^{(3,d)} N_H(x) H_{21}^{(1,2)}(x) \right] \quad (58)$$

$$B^{(3,d)}(x) = (F_{3,d})^{-1} \left[H_{13}^{(3,d)}(x) + H_{12}^{(3,d)} N_H(x) H_{23}(x) \right] \quad (59)$$

with:

$$N_H(x) = L_H [I - H_{22}(x) L_H]^{-1} \quad (60)$$

$$E^{(1,2)}(x) = I - H_{14}^{(1,2)}(x) (F_{1,2}^d)^{-1} H_{31}^{(1,2)}(x) F_{1,2} \quad (61)$$

and:

$$F_{1,2} = \text{diag}\{F_1, F_2\} \quad (62)$$

$$F_{1,2}^d = \text{diag}\{F_1^d, F_2^d\} \quad (63)$$

$$F_{3,d} = \text{diag}\{F_3, F_3^d\} \quad (64)$$

$$\varepsilon_H = \text{diag}\{I, F_2^{-1}\} \quad (65)$$

The proof is presented in Appendix B.

The model described by Lemma 2 represents a system in which the fast dynamics has converged. However, in an analysis at a time greater than the convergence of the medium dynamics, reduced models can be obtained.

The application of Lemma 2 requires that the following assumptions be satisfied.

Assumption 10. The equation:

$$A_{31}(x) \bar{x}_1(t) + A_{32}(x) \bar{x}_2(t) + A_{33}(x) \bar{x}_3(t) + B_3(x) u(t) = 0 \quad (66)$$

can be solved in terms of:

$$\bar{x}_3(t) = \bar{\phi}_i(\bar{x}_1, \bar{x}_2, u), \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (67)$$

where k are distinct roots.

Assumption 11. The $A_{33}(x)$ matrix is nonsingular.

Assumption 12. The algebraic loops matrix $N_H(x)$ is nonsingular.

This new model reduced in a bond graph approach is obtained by assigning derivative causality to the storage elements of the medium and fast dynamics and to the storage elements of the slow dynamics, and an integral causality is assigned. This last reduction is illustrated in Figure 13.

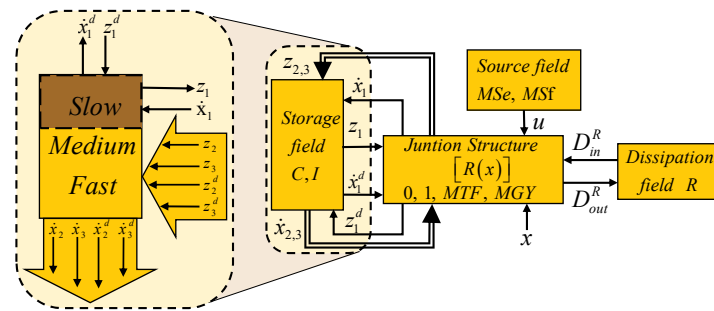


Figure 13. Diagram of a junction structure with storage elements in integral causality for slow dynamics, x_1 , and in derivative causality for fast and medium dynamics, $x_{2,3}$; energy state variables x ; inputs, u ; dissipation field variables (D_{in}^R, D_{out}^R) .

The junction structure of Figure 13 indicates that all the storage elements of the medium and fast dynamics have derivative causality in compact form denoted by $x_{2,3}$, and for the linearly independent elements of the slow dynamics defined by x_1 , an integral causality is assigned. The left part of Figure 13 shows the causality assignment for each dynamics of the system. Due to the change of causalities in the elements described, the causality in the dissipation elements will have to be adjusted through the key vectors (D_{in}^R, D_{out}^R) so that the bond graph is causally correct.

The mathematical model according to Figure 13 is obtained by applying the following lemma.

Lemma 3. Consider a class of nonlinear singularly perturbed systems modeled by bond graphs where for the storage elements that determine the slow dynamics, an integral causality is assigned, and the storage elements for the medium and fast dynamics have a derivative causality assignment with a junction structure defined by:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1(t) \\ z_{2,3}(t) \\ D_{in}^R(t) \\ z_1^d(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11}^{11}(x) & R_{11}^{1(2,3)}(x) & R_{12}^{11}(x) & R_{13}^{11}(x) & R_{14}^{11}(x) \\ R_{11}^{(2,3)1}(x) & R_{11}^{(2,3)(2,3)}(x) & R_{12}^{(2,3)}(x) & R_{13}^{(2,3)}(x) & 0 \\ R_{21}^{11}(x) & R_{11}^{(2,3)}(x) & R_{22}(x) & R_{23}(x) & 0 \\ R_{31}^{11}(x) & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1(t) \\ \dot{x}_{2,3}(t) \\ D_{out}^R(t) \\ u(t) \\ \dot{x}_1^d(t) \end{bmatrix} \quad (68)$$

where the state variables for the medium and fast dynamics are described by:

$$x_{2,3}(t) = \begin{bmatrix} x_2(t) \\ x_2^d(t) \\ x_3(t) \\ x_3^d(t) \end{bmatrix} \quad (69)$$

with

$$D_{out}^R(t) = L_R D_{in}^R(t) \quad (70)$$

then the quasi-steady-state models are given by:

$$\dot{\tilde{x}}_1(t) = \widetilde{A}_{11}(x) \tilde{x}_1(t) + \widetilde{B}_1(x) u(t) \quad (71)$$

$$\widetilde{x}_{2,3}(t) = \widetilde{A}_{23}(x) \tilde{x}_1(t) + \widetilde{B}_{2,3}(x) u(t) \quad (72)$$

where:

$$\widetilde{A}_{11}(x) = \widetilde{E}_1^{-1}(x) \left[R_{11}^{11}(x) + R_{12}^{11}(x) N_R(x) R_{21}^{11}(x) + R_{14}^{11}(x) (F_1^d)^{-1} \bullet^{11} R_{31}(x) \right] F_1 \quad (73)$$

$$\widetilde{A}_{23} = F_{2,3}^{-1} \left[R_{11}^{(2,3)1}(x) + R_{12}^{(2,3)} N_R(x) R_{21}^{11}(x) \right] F_1 \quad (74)$$

$$\widetilde{B}_1(x) = \widetilde{E}_1^{-1}(x) \left[R_{13}^{11}(x) + R_{12}^{11}(x) N_R(x) R_{23}(x) \right] \quad (75)$$

$$\widetilde{B}_{2,3}(x) = F_{2,3}^{-1} \left[R_{13}^{(2,3)}(x) + R_{12}^{(2,3)} N_R(x) R_{23}(x) \right] F_1 \quad (76)$$

with:

$$N_R(x) = L_R [I - R_{22}(x) L_R]^{-1} \quad (77)$$

$$F_{2,3} = \text{diag}\{F_2, F_3\} \quad (78)$$

The proof is presented in Appendix C.

The application of Lemma 3 requires that the following assumptions be satisfied.

Assumption 13. The equation:

$$A_{21}(x) \bar{x}_1(t) + A_{22}(x) \bar{x}_2(t) + A_{23}(x) \bar{x}_3(t) + B_2(x) u(t) = 0 \quad (79)$$

can be solved in terms of:

$$\bar{x}_2(t) = \bar{\phi}_i(\bar{x}_1, u), \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (80)$$

where k are distinct roots.

Assumption 14. The $A_{22}(x)$ matrix is nonsingular.

Assumption 15. The algebraic loops matrix $N_R(x)$ is nonsingular.

The reduced models of a system with singular perturbations can be obtained by applying Lemmas 2 and 3, determining a symmetry with the exact models for each of the dynamics.

The most important limitation of this paper is if the fast and medium dynamics' storage elements cannot accept derivative causality due to the configuration of the model. A possible solution to this problem is to include dissipative elements with small or large numerical values in order to be able to assign derivative causality to the storage elements for fast and medium dynamics. Other limitations are that the given assumptions cannot be applied.

The proposed methodology was applied to the following case study.

4. Case Study as an Illustrative Example

DC motors represent electromechanical systems that are widely used as actuating elements in industrial applications, whose advantages are easy speed and position control and a wide adjustability range. In the modeling of a DC motor, it is common to neglect nonlinearities in order to find a simple model. However, the assumption that the nonlinear elements on the system are negligible may give to big modeling errors. Likewise, it is common for the supply of energy to the DC motor to be obtained through the activation of elements of fast reaction electronics.

Therefore, the complete system will have three times scales and qualify as a singularly perturbed nonlinear system shown in Figure 14.

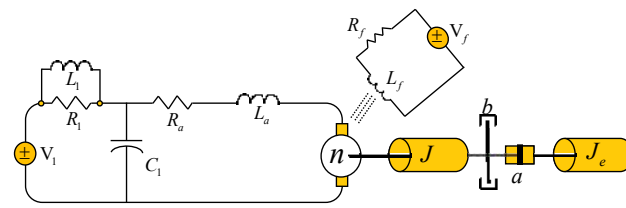


Figure 14. Diagram of a physical system with three time scales.

In Figure 14, R_1 , L_1 , and C_1 represent the resistance, inductance, and capacitance, respectively, from the electronic input stage through which the supply voltage V_1 is introduced to the system. The armature winding is defined by the resistance R_a and the inductance L_a ; R_f and L_f are the resistance and inductance of the field winding with the voltage V_f applied to this circuit. The mechanical load to the motor is the connection of two inertias J and J_e by using a transformer a and a damping b .

The bond graph in an integral causality assignment of the system is shown in Figure 15.

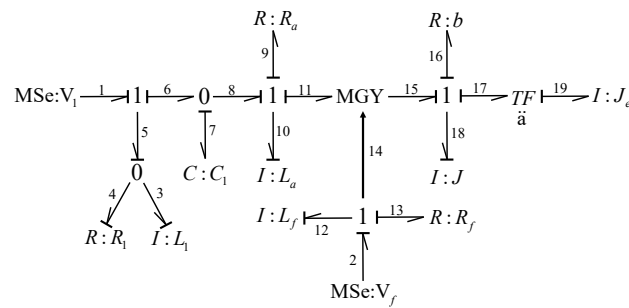


Figure 15. Bond graph with three time scales in an integral causality predefined.

The bond graph in integral causality assignment allows obtaining the mathematical model of the complete system using Lemma 1, the first step being the description of the dynamics that form the system. The variables of the mechanical subsystem describe the slow dynamics expressed by the key vectors and constitutive relationship:

$$x_1(t) = p_{18}; \dot{x}_1(t) = e_{18}; z_1(t) = f_{18} \quad (81)$$

$$F_1 = \frac{1}{J} \quad (82)$$

and the key vectors for $I : J_e$ with a derivative causality assignment that determines a linearly dependent state variable are the following:

$$x_1^d(t) = p_{20}; \dot{x}_1^d(t) = e_{20}; z_1^d(t) = f_{20} \quad (83)$$

$$F_1^d = \frac{1}{J_e} \quad (84)$$

The medium dynamics are represented by the storage elements of the electrical subsystem of the DC motor, whose key vectors and constitutive relationship are:

$$x_2(t) = \begin{bmatrix} p_{10} \\ p_{12} \end{bmatrix}; \dot{x}_2(t) = \begin{bmatrix} e_{10} \\ e_{12} \end{bmatrix}; z_2(t) = \begin{bmatrix} f_{10} \\ f_{12} \end{bmatrix} \quad (85)$$

$$F_2 = \text{diag} \left\{ \frac{1}{L_a}, \frac{1}{L_f} \right\} \quad (86)$$

The electronic subsystem for supplying power to the motor represents the fast dynamics defined by:

$$x_3(t) = \begin{bmatrix} p_3 \\ q_7 \end{bmatrix}; \dot{x}_2(t) = \begin{bmatrix} e_3 \\ f_7 \end{bmatrix}; z_2(t) = \begin{bmatrix} f_3 \\ e_7 \end{bmatrix} \quad (87)$$

$$F_3 = \text{diag}\left\{\frac{1}{L_1}, \frac{1}{C_1}\right\} \quad (88)$$

according to Figure 11 for the dissipation elements:

$$D_{in}(t) = \begin{bmatrix} f_{16} \\ f_9 \\ f_{13} \\ e_4 \end{bmatrix}; D_{out}(t) = \begin{bmatrix} e_{16} \\ e_9 \\ e_{13} \\ f_4 \end{bmatrix} \quad (89)$$

$$L = \text{diag}\left\{b, R_a, R_f, \frac{1}{R_1}\right\} \quad (90)$$

and the inputs:

$$u(t) = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \end{bmatrix} \quad (91)$$

The system order is given by $n = 1$, $n_d = 1$, $m = 2$, and $l = 2$; thus, $n + m + l = 5$ and $F = \text{diag}\{F_1, F_2, F_3\}$. The junction structure $S(x)$ is described by:

$$\begin{bmatrix} e_{18} \\ e_{10} \\ e_{12} \\ e_3 \\ f_7 \\ f_{16} \\ f_9 \\ f_{13} \\ e_4 \\ f_{20} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & f_{12} & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -a \\ -f_{12} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{18} \\ f_{10} \\ f_{12} \\ f_3 \\ e_7 \\ e_{16} \\ e_9 \\ e_{13} \\ f_4 \\ e_1 \\ e_2 \\ e_{20} \end{bmatrix} \quad (92)$$

From (40), (48), (82), (84), and (92), the relationship of the linearly dependent state variable to the linearly independent variable is described by:

$$E(x) = \text{diag}\left\{1 + a^2 \frac{J_e}{J}, I_4\right\} \quad (93)$$

From (45)–(47), and (49) with (82), (86), (88), and (93), the mathematical model of the complete system is given by:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \varepsilon_1 \dot{x}_2(t) \\ \varepsilon_2 \dot{x}_3(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{-b}{J+a^2 J_e} & \frac{J}{J+a^2 J_e} \cdot \frac{p_{12}}{L_f L_a} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-L_a p_{12}}{J L_f} & -R_a & 0 & 0 & \frac{L_a}{C_1} \\ 0 & 0 & -R_f & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-L_1}{C_1} \\ 0 & \frac{-C_1}{L_a} & 0 & \frac{C_1}{L_1} & \frac{-1}{R_1} \end{bmatrix} x(t) + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & L_f \\ \frac{L_1}{C_1} & 0 \\ \frac{C_1}{R_1} & 0 \end{bmatrix} u(t) \quad (94)$$

Assigning a derivative causality to all the storage elements ($I : L_1; C : C_1$) that represent the fast dynamics (x_3) and maintaining integral causality to the elements of the medium and slow state variables ($I : L_a; I : L_f$) and ($I : J$), respectively, the reduced

model (15) applying Lemma 2 is obtained. Figure 16 shows the bond graph to obtain the reduced model when the fast dynamics have converged.

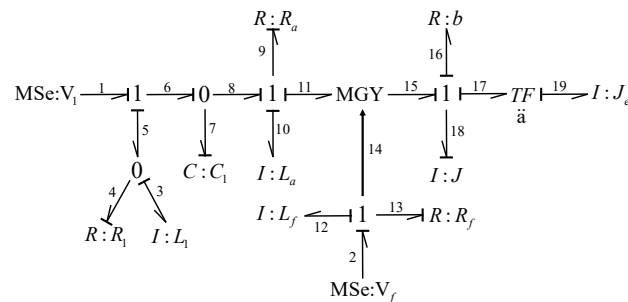


Figure 16. Bond graph with $I : L_1$ and $C : C_1$ in derivative causality.

In this case, the dissipation elements retain the same causality with respect to the bond graph of Figure 13, then the key vectors and their constitutive relationship are defined by:

$$D_{in}^H(t) = D_{in}(t); D_{out}^H(t) = D_{out}(t); L_H = L \quad (95)$$

Applying Lemma 2, the junction structure of the bond graph of Figure 14 is given by:

$$\begin{bmatrix} e_{18} \\ e_{10} \\ e_{12} \\ \hline f_3 \\ e_7 \\ f_{16} \\ f_9 \\ f_{13} \\ e_4 \\ f_{20} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & f_{12} & 0 & | & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & -a \\ -f_{12} & 0 & 0 & | & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & | & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & | & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & | & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ \hline a & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{18} \\ f_{10} \\ f_{12} \\ \hline e_3 \\ f_7 \\ \hline e_{16} \\ e_9 \\ e_{13} \\ f_4 \\ \hline e_1 \\ e_2 \\ e_{20} \end{bmatrix} \quad (96)$$

From (56), (57), (60), and (61) with (96), the quasi-steady-state model for x_1 and x_2 is defined by:

$$\dot{x}_{1,2}(t) = \begin{bmatrix} \frac{-b}{J+a^2J_e} & \frac{p_{12}}{L_a L_f (J+a^2J_e)} & 0 \\ \frac{-p_{12}}{J L_f} L_a & -R_a & 0 \\ 0 & 0 & -R_f \end{bmatrix} x_{1,2}(t) + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} u(t) \quad (97)$$

From (58)–(60) with (96), the expression of the fast dynamics when they have converged is described by:

$$x_{3,d}(t) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{L_1}{L_a} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} x_{1,2}(t) + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ C_1 & 0 \end{bmatrix} u(t) \quad (98)$$

The smallest model is obtained by assigning derivative causality to the storage elements ($I : L_a; I : L_f$) of the medium dynamics (x_2), which is shown in Figure 17.

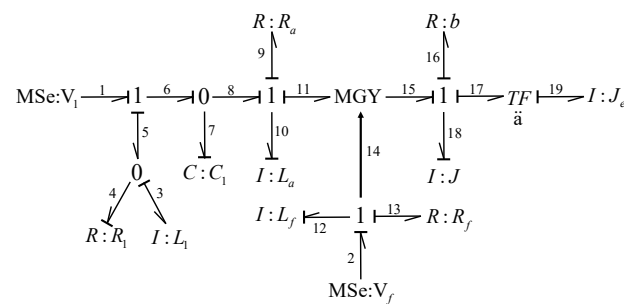


Figure 17. Bond graph with a derivative causality to the fast ($I : L_1$ and $C : C_1$) and medium dynamics ($I : L_a$ and $I : L_f$).

In order to have a correct bond graph, the key vectors and the constitutive relation for the dissipation elements are defined by:

$$D_{in}^R(t) = \begin{bmatrix} f_{16} \\ e_9 \\ e_{13} \\ e_4 \end{bmatrix}; D_{out}^R(t) = \begin{bmatrix} e_{16} \\ f_9 \\ f_{13} \\ f_4 \end{bmatrix}; L_R = \text{diag} \left\{ b, \frac{1}{R_a}, \frac{1}{R_f}, \frac{1}{R_1} \right\} \quad (99)$$

and the junction structure is obtained by:

$$\begin{bmatrix} e_{18} \\ f_{10} \\ f_{12} \\ f_3 \\ e_7 \\ f_{16} \\ e_9 \\ e_{13} \\ e_4 \\ f_{20} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & f_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -a \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -f_{12} & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{f_{18}}{e_{10}} \\ e_{12} \\ e_3 \\ f_7 \\ e_{16} \\ f_9 \\ f_{13} \\ f_4 \\ e_1 \\ e_2 \\ e_{20} \end{bmatrix} \quad (100)$$

The quasi-steady-state model applying Lemma 3 is obtained from (73), (75), and (77) with (100) given by:

$$\dot{\tilde{x}}_1(t) = \left(\frac{1}{J + a^2 J_e} \right) \left(\frac{-b}{J} - \frac{p_{12}^2}{J L_f^2 R_a} \right) \tilde{x}_1(t) + \left(\frac{J}{J + a^2 J_e} \right) \begin{bmatrix} \frac{p_{12}}{L_f R_a} & 0 \end{bmatrix} u(t) \quad (101)$$

The convergence of the medium and fast dynamics is determined from (74), (76), and (77) with (100) expressed as:

$$\widetilde{\tilde{x}}_{2,3}(x) = \begin{bmatrix} \frac{-p_{12} L_a}{J L_f L_a} \\ 0 \\ \frac{-p_{12} L_1}{J L_f L_a} \\ 0 \end{bmatrix} \tilde{x}_1(t) + \begin{bmatrix} \frac{L_a}{R_a} & 0 \\ 0 & \frac{L_f}{R_f} \\ \frac{L_1}{R_a} & \frac{-L_1}{R_1} \\ C_1 & 0 \end{bmatrix} u(t) \quad (102)$$

In order to show the effectiveness of the proposed methodology, Table 1 gives the numerical parameters of the bond graph illustrated in Figure 15.

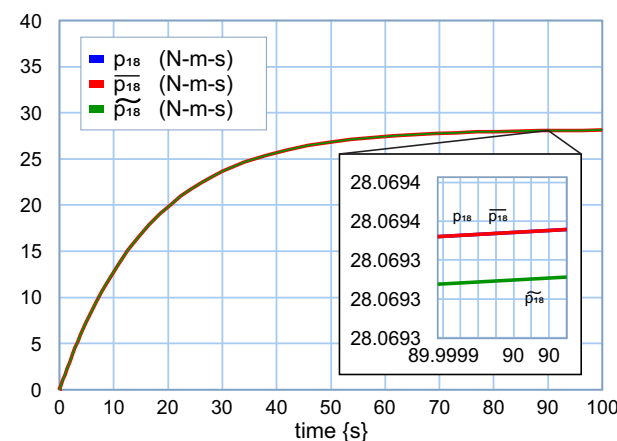
Table 1. Parameters of the case study.

$R_1 = 100 \, \Omega$	$L_f = 0.02 \, \text{F}$	$a = 2$
$R_f = 10 \, \Omega$	$b = 1.2 \, \text{N-m-s}$	$V_a = 120 \, \text{V}$
$R_a = 25 \, \Omega$	$J = 3.5 \, \text{N-m-s}^2$	$V_f = 24 \, \text{V}$
$L_1 = 10 \, \mu\text{H}$	$J_e = 5 \, \text{N-m-s}^2$	
$L_e = 0.1 \, \text{H}$	$C_1 = 1 \, \mu\text{F}$	

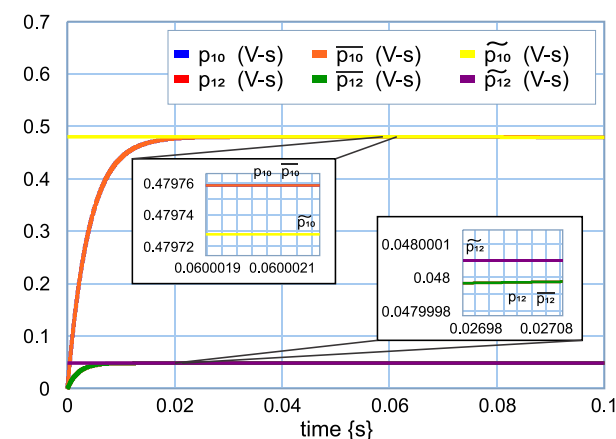
In order to verify numerically the reduced models with respect to the exact model, the graphs are illustrated in the following figures. The simulation of this case study was obtained by using the 20-sim software.

It is important to note that the simulation results for the exact model shown in Figure 15 were obtained directly from the bond graph library of the 20-sim software. However, the simulation of the reduced model was carried out through Equations (97) and (98) for the convergence of the fast dynamics. The simulation of the reduced model for the convergence of the medium and fast dynamics was used in Equations (101) and (102).

Figure 18 shows the behavior of the fast state variables, based on the exact model (p_3, q_7) and the reduced model ($\bar{p}_3, \bar{q}_7$) given by (98).

**Figure 18.** Behavior of the fast state variables: exact model (p_3, p_7); reduced model ($\bar{p}_3, \bar{p}_7$).

Now, the performance of the state variables of the medium dynamics is shown in Figure 19. The great closeness of the models reduced to the exact model can be seen.

**Figure 19.** Behavior of the fast state variables: exact model (p_{10}, p_{12}); reduced model removing fast dynamics ($\bar{p}_{10}, \bar{p}_{12}$); from (102), reduced model ($\tilde{p}_{10}, \tilde{p}_{12}$).

Finally, the behavior of the state variable of the slow dynamics is illustrated in Figure 20.

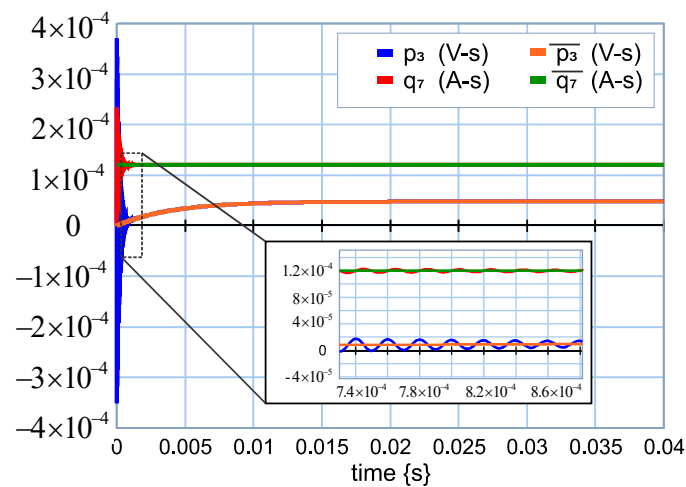


Figure 20. Behavior of the slow state variable: exact model (p_{18}); reduced model removing fast dynamics ($\bar{p}_{18}$); reduced model removing medium dynamics ($\widehat{p}_{18}$).

It is clear from Figures 18–20 that the system contains three time scales: the simulation time for the convergence of the fast dynamics is from 0–0.015 s, of the medium dynamics from 0–0.03 s, and of the slow dynamics from 0–100 s.

This paper can be applied to multidisciplinary systems, for example mechatronics, electric vehicles [29], and chemical processes [15], where they are characterized by having several time scales in their dynamic behavior.

Some complex dynamical systems have been modeled in bond graphs, for example [31–33], and the possible application of this paper requires that the system contains several time scales and the class of nonlinear systems be according to the product of the state variables.

5. Conclusions

The analysis of a class of nonlinear systems with singular perturbations in a bond graph approach was presented. The type of systems, although they are specific, can be found in many electrical machines, as well as in aeronautical systems. One of the main objectives of singularly perturbed systems is to obtain simplified models. Therefore, reduced models in the physical domain have been proposed. The key for the direct determination of these models is to assign derivative causality to the storage elements that converge to their steady-state value, and for the remaining dynamics, an integral causality is assigned. In this way, the three time scales (fast, medium, slow) are reduced to two time scales (medium, slow) and finally to one (slow). The proposed methodology was applied to an electromechanical system, obtaining the reduced models, and the simulation results were shown, verifying the effectiveness of the presented lemmas.

Through this paper, the direct simulation of the bond graphs for reduced models is a challenge to achieve using the bond graph library of the 20-sim software, but it is required as future work to have these objectives.

Finally, the symmetry of graphical and mathematical models was established for systems modeled in a bond graph. Furthermore, reduced models from exact models for systems on three time scales by determining symmetries were presented.

Author Contributions: Conceptualization, G.A.-J. and G.G.-A.; methodology, A.P.G.; validation, N.B.G.; formal analysis, J.M.-B. and N.B.G.; writing—original draft preparation, G.A.-J. and G.G.-A.; writing—review and editing, G.G.-A., G.A.-J. and A.P.G. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research received no external funding.

Institutional Review Board Statement: Not applicable.

Informed Consent Statement: Not applicable.

Data Availability Statement: No others were used for this article.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

Appendix A. Proof of Lemma 1

Form the third line of (40) with (42) and (43):

$$x^d(t) = \left(F^d\right)^{-1} S_{31}(x) F x(t) \quad (\text{A1})$$

deriving with respect to time:

$$\dot{x}^d(t) = \left(F^d\right)^{-1} \dot{S}_{31}(x) F x(t) + \left(F^d\right)^{-1} S_{31}(x) F \dot{x}(t) \quad (\text{A2})$$

Now, from the second line of (40) with (44),

$$D_{in}(t) = [I - S_{22}(x)L]^{-1} [S_{21}(x)z(t) + S_{23}(x)u(t)] \quad (\text{A3})$$

Substituting (A2) and (A3) into the first line of (40) with (44):

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) = & S_{11}(x)z(t) + S_{12}(x)L[I - S_{22}(x)L]^{-1} [S_{21}(x)z(t) + S_{23}(x)u(t)] \\ & + S_{13}(x)u(t) + S_{14}(x) \left[\left(F^d\right)^{-1} \dot{S}_{31}(x) F x(t) + \left(F^d\right)^{-1} S_{31}(x) F \dot{x}(t) \right] \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

With the assumptions that (48) and (49) can be obtained with (46) and (47), the model (45) is proven.

Appendix B. Proof of Lemma 2

From the fourth line of (51) with (62) and (63),

$$x_{1,2}^d(t) = \left(F_{1,2}^d\right)^{-1} H_{31}^{(1,2)}(x) F_{1,2} x_{1,2}(t) \quad (\text{A5})$$

Deriving (A5) with respect to time:

$$\dot{x}_{1,2}^d(t) = \left(F_{1,2}^d\right)^{-1} \left[\dot{H}_{31}^{(1,2)}(x) F_{1,2} x_{1,2}(t) + H_{31}^{(1,2)}(x) F_{1,2} \dot{x}_{1,2}(t) \right] \quad (\text{A6})$$

From the third line of (51) with (54):

$$D_{in}^H(t) = [I - H_{22}(x)L_H]^{-1} \left[H_{21}^{(1,2)}(x) z_{1,2}(t) + H_{21}^{(3,d)}(x) \dot{x}_{3,d}(t) + H_{23}(x)u(t) \right] \quad (\text{A7})$$

Substituting (A6) and (A7) into the first line of (51) with (54):

$$\begin{aligned} \dot{x}_{1,2}(t) = & H_{11}^{(1,2)(1,2)}(x)z_{1,2}(t) + H_{11}^{(1,2)(3,d)}(x)\dot{x}_{3,d}^d(t) + H_{13}^{(1,2)}(x)u(t) + \\ & H_{12}^{(1,2)}(x)L_H[I - H_{22}(x)L_H]^{-1}\left[H_{21}^{(1,2)}(x)z_{1,2}(t) + H_{21}^{(3,d)}(x)\dot{x}_{3,d}^d(t) \right. \\ & \left. + H_{23}(x)u(t)\right] + H_{14}^{(1,2)}(x)\left(F_{1,2}^d\right)^{-1}\left[\dot{H}_{31}^{(1,2)}(x)F_{1,2}x_{1,2}(t) \right. \\ & \left. + H_{31}^{(1,2)}(x)F_{1,2}\dot{x}_{1,2}(t)\right] \end{aligned} \quad (A8)$$

With (60) and (61), Expression (A8) can be rewritten by:

$$\begin{aligned} E^{(1,2)}(x)\dot{x}_{1,2}(t) = & \left[H_{11}^{(1,2)(1,2)}(x) + H_{12}^{(1,2)}(x)N_H(x)H_{21}^{(1,2)}(x) + \right. \\ & \left.H_{14}^{(1,2)}(x)\left(F_{1,2}^d\right)^{-1}\dot{H}_{31}^{(1,2)}(x)\right](x)F_{1,2}x_{1,2}(t) + H_{11}^{(1,2)(3,d)}(x)\dot{x}_{3,d}^d(t) \\ & + \left[H_{13}^{(1,2)}(x) + H_{12}^{(1,2)}(x)N_H(x)H_{23}(x)\right]u(t) \end{aligned} \quad (A9)$$

Removing the term $\dot{x}_{3,d}^d(t)$ and substituting (56) and (57) into (A9), the first line of (55) is proven.

From the second line of (51) and (A7) with (A7):

$$\begin{aligned} z_{3,d}(t) = & H_{11}^{(3,d)(1,2)}(x)z_{1,2}(t) + H_{11}^{(3,d)(3,d)}(x)\dot{x}_{3,d}^d(t) + H_{13}^{(3,d)}(x)u(t) \\ & H_{12}^{(3,d)}(x)L_H[I - H_{22}(x)L_H]^{-1}\left[H_{21}^{(1,2)}(x)z_{1,2}(t) + \right. \\ & \left. H_{21}^{(3,d)}(x)\dot{x}_{3,d}^d(t) + H_{23}(x)u(t)\right] \end{aligned} \quad (A10)$$

with (60), (62), and (64), (A10) can be rewritten as:

$$\begin{aligned} z_{3,d}(t) = & \left[H_{11}^{(3,d)(1,2)}(x) + H_{12}^{(3,d)}(x)N_H(x)H_{21}^{(1,2)}(x)\right]z_{1,2}(t) + \\ & \left[H_{13}^{(3,d)}(x) + H_{12}^{(3,d)}(x)N_H(x)H_{23}(x)\right]u(t) \\ & + A^{(3,d)(3,d)}(x)\dot{x}_{3,d}^d(t) \end{aligned} \quad (A11)$$

where:

$$A^{(3,d)(3,d)}(x) = \left[H_{11}^{(3,d)(3,d)}(x) + H_{12}^{(3,d)}(x)N_H(x)H_{21}^{(3,d)}(x)\right] \quad (A12)$$

Substituting (58) and (59) into (A11) and removing $\dot{x}_{3,d}^d(t)$, the second line of (55) is proven.

Equation (A11) with (A11) can be expressed by:

$$\begin{aligned} \dot{x}_{3,d}(t) = & -\left[A^{(3,d)(3,d)}(x)\right]^{-1}A^{(3,d)(1,2)}(x)x_{1,2}(t) + \left[A^{(3,d)(3,d)}(x)\right]^{-1}x_{3,d}(t) \\ & -\left[A^{(3,d)(3,d)}(x)\right]^{-1}B^{(3,d)}(x)u(t) \end{aligned} \quad (A13)$$

The fast state variables in integral and derivative causality are not related, so considering the linearly independent state variable:

$$\begin{aligned} \dot{x}_3(t) = & -\left[A_{11}^{(3,d)(3,d)}(x)\right]^{-1}A_{11}^{(3,d)(1,2)}(x)x_1(t) - \left[A_{11}^{(3,d)(3,d)}(x)\right]^{-1}A_{12}^{(3,d)(1,2)}(x)x_2(t) \\ & + \left[A_{11}^{(3,d)(3,d)}(x)\right]^{-1}x_3(t) - \left[A_{11}^{(3,d)(3,d)}(x)\right]^{-1}B_1^{(3,d)}(x)u(t) \end{aligned} \quad (A14)$$

comparing (A14) with respect to the third line of (45) and (16):

$$A_{11}^{(3,d)(3,d)}(x) = A_{33}^{-1} \varepsilon_2 \quad (\text{A15})$$

$$A_{11}^{(3,d)(1,2)}(x) = -A_{33}^{-1} A_{31} = \overline{A_{31}}(x) \quad (\text{A16})$$

$$A_{12}^{(3,d)(1,2)}(x) = -A_{33}^{-1} A_{32} = \overline{A_{32}}(x) \quad (\text{A17})$$

$$B_1^{(3,d)}(x) = -A_{33}^{-1} B_3 = \overline{B_3}(x) \quad (\text{A18})$$

Equation (A9) with (56) and (57) can be given by:

$$\dot{x}_{1,2}(t) = A^{(1,2)}(x)x_{1,2}(t) + B^{(1,2)}(x)u(t) + A^{(1,2)(3,d)}(x)\dot{x}_{3,d}(t) \quad (\text{A19})$$

Substituting (A13) into (A19) and removing $x_3(t)$,

$$\begin{aligned} \dot{x}_{1,2}(t) = & \left\{ A^{(1,2)}(x) - A^{(1,2)(3,d)}(x) \left[A^{(3,d)(3,d)}(x) \right]^{-1} A^{(3,d)(1,2)}(x) \right\} x_{1,2}(t) \\ & + \left\{ B^{(1,2)}(x) - A^{(1,2)(3,d)}(x) \left[A^{(3,d)(3,d)}(x) \right]^{-1} B^{(3,d)}(x) \right\} u(t) \end{aligned} \quad (\text{A20})$$

expression (A20) is a compact representation of (16) and (17); therefore, the first reduction is verified.

Appendix C. Proof of Lemma 3

From the third line of (68) with (70),

$$D_{in}^R(t) = [I - R_{22}(x)L_R]^{-1} \left[R_{21}^{11}(x)z_1 + R_{21}^{(2,3)}(x)\dot{x}_{2,3}(t) + R_{23}(x)u(t) \right] \quad (\text{A21})$$

and substituting (A21) into the second line of (68) with (70),

$$\begin{aligned} z_{2,3}(t) = & R_{11}^{(2,3)1}z_1(t) + R_{12}^{(2,3)}L_R[I - R_{22}(x)L_R]^{-1} \left[R_{21}^{11}(x)z_1(t) + R_{21}^{(2,3)}(x)\dot{x}_{2,3}(t) \right. \\ & \left. + R_{23}(x)u(t) \right] + R_{13}^{(2,3)}(x)u(t) + R_{11}^{(2,3)(2,3)}(x)\dot{x}_{2,3}(t) \end{aligned} \quad (\text{A22})$$

with (77), Equation (A22) can be rewritten in the following form:

$$\begin{aligned} z_{2,3}(t) = & \left[R_{11}^{(2,3)1} + R_{12}^{(2,3)}N_R(x)R_{21}^{11}(x) \right] z_1(t) \\ & + \left[R_{13}^{(2,3)}(x) + R_{12}^{(2,3)}N_R(x)R_{23}(x) \right] u(t) + \\ & \left[R_{11}^{(2,3)(2,3)}(x) + R_{12}^{(2,3)}N_R(x)R_{21}^{(2,3)}(x) \right] \dot{x}_{2,3}(t) \end{aligned} \quad (\text{A23})$$

Removing $\dot{x}_{2,3}(t)$ and substituting (73) and (75) into (A23) with (78), Equation (72) is proven.

From the fourth line of (68) with (34) and (35),

$$x_1^d(t) = \left(F_1^d \right)^{-1} R_{31}^{11}(x)x_1(t) \quad (\text{A24})$$

deriving this expression with respect to time:

$$\dot{x}_1^d(t) = \left(F_1^d \right)^{-1} \dot{R}_{31}^{11}(x)F_1x_1(t) + \left(F_1^d \right)^{-1} R_{31}^{11}(x)F_1\dot{x}_1(t) \quad (\text{A25})$$

and substituting (A21) and (A25) with (70),

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(t) = & R_{11}^{11}(x)z_1 + R_{12}^{11}(x)L_R[I - R_{22}(x)L_R]^{-1} \left[R_{21}^{11}(x)z_1(t) + R_{21}^{(2,3)}(x)\dot{x}_{2,3}(t) \right. \\ & \left. + R_{23}(x)u(t) \right] + R_{11}^{1(2,3)}(x)\dot{x}_{2,3}(t) + R_{13}^{11}(x)u(t) \\ & + R_{14}^{11}(x)\left(F_1^d \right)^{-1} \dot{R}_{31}^{11}(x)F_1x_1(t) + R_{14}^{11}(x)\left(F_1^d \right)^{-1} R_{31}^{11}(x)F_1\dot{x}_1(t) \end{aligned} \quad (\text{A26})$$

from (77), Equation (A26) can be written as:

$$\begin{aligned} \left[I - R_{14}^{11}(x) \left(F_1^d \right)^{-1} R_{31}^{11}(x) F_1 \right] \dot{x}_1(t) = & \left[R_{11}^{11}(x) + R_{12}^{11}(x) N_R(x) R_{21}^{11}(x) + \right. \\ & \left. R_{14}^{11}(x) \left(F_1^d \right)^{-1} \dot{R}_{31}^{11}(x) \right] z_1 + \left[R_{11}^{1(2,3)}(x) \right. \\ & \left. + R_{12}^{11}(x) N_R(x) R_{21}^{(2,3)}(x) \right] \dot{x}_{2,3}(t) + \left[R_{13}^{11}(x) \right. \\ & \left. + R_{12}^{11}(x) N_R(x) R_{23}(x) \right] u(t) \end{aligned} \quad (\text{A27})$$

Removing $\dot{x}_{2,3}(t)$ with (73) and (75) representing the quasi-steady-state model, (71) is proven. Now, (A23) can be written as:

$$\dot{\bar{x}}_{2,3}(t) = \left[\widetilde{A}_{2,3}^{(2,3)}(x) \right]^{-1} \left[-\widetilde{A}_{2,3}^{(1)}(x) \bar{x}_1(t) + \bar{x}_{2,3}(t) - \bar{B}_{2,3}(x) u(t) \right] \quad (\text{A28})$$

Compared to:

$$\varepsilon_1 \dot{\bar{x}}_2(t) = \bar{A}_{21}(x) \bar{x}_1(t) + \bar{A}_{22}(x) \bar{x}_2(t) + \bar{B}_2(x) u(t)$$

the following expressions are obtained:

$$\widetilde{A}_{2,311}^{(2,3)}(x) = [\bar{A}_{22}(x)]^{-1} \varepsilon_1 \quad (\text{A29})$$

$$\widetilde{A}_{2,311}^{(1)}(x) = -[\bar{A}_{22}(x)]^{-1} \bar{A}_{21}(x) \quad (\text{A30})$$

$$\bar{B}_{2,31}(x) = -[\bar{A}_{22}(x)]^{-1} \bar{B}_2(x) \quad (\text{A31})$$

Equation (A27) can be expressed by:

$$\dot{\bar{x}}_1(t) = \bar{A}_{11}(x) \bar{x}_1(t) + \bar{A}_{23}(x) \dot{\bar{x}}_{2,3}(t) + \bar{B}_1(x) u(t) \quad (\text{A32})$$

Substituting (A29)–(A31) into (A32):

$$\begin{aligned} \dot{\bar{x}}_1(t) = & \left\{ \bar{A}_{11}(x) - \bar{A}_{2311}(x) \left[\widetilde{A}_{2,311}^{(2,3)}(x) \right]^{-1} \widetilde{A}_{2,311}^{(1)}(x) \right\} \bar{x}_1(t) \\ & + \left\{ \bar{B}_1(x) - \bar{A}_{2311}(x) \left[\widetilde{A}_{2,311}^{(2,3)}(x) \right]^{-1} \bar{B}_{2,31}(x) \right\} u(t) \end{aligned} \quad (\text{A33})$$

and comparing (A33) with respect the first line of (19) and (20), (18) is proven.

References

1. Kokotovic, P.V.; Khalil, H.K.; O'Reilly, J. *Singular Perturbation Methods in Control: Analysis and Design*; Academic Press: London, UK, 1986.
2. Naidu, D.S. *Singular Perturbation Methodology in Control Systems*; IET: London, UK, 1988.
3. Silva-Madriz, R.; Sastry, S.S. Multiple Time Scales for Nonlinear Systems. *Circuits Syst. Signal Process* **1986**, *5*, 153–169. [\[CrossRef\]](#)
4. Su, W.C.; Gajic, Z.; Shen, X.M. The Exact Slow-Fast Decomposition of the Algebraic Riccati Equation of Singularly Perturbed Systems. *IEEE Trans. Autom. Control* **1992**, *37*, 1456–1459. [\[CrossRef\]](#)
5. Fayaz, A.M. An interpolation method for the control of ε -varying Singularly Perturbed Systems. In Proceedings of the 40th IEEE Conference on Decision and Control, Orlando, FL, USA, 4–7 December 2001.
6. Hajer Bouzaouache, N.; Brajek, B. On guaranteed global exponential stability of polynomial singularly perturbed control systems. In Proceedings of the IMACS Multiconference on Computational Engineering in Systems Applications, Beijing, China, 4–6 October 2006.
7. Javid, S.H. Uniform Asymptotic Stability of Linear Time-Varying Singularly Perturbed Systems. *J. Frankl. Inst.* **1978**, *305*, 27–37. [\[CrossRef\]](#)
8. Javid, S.H. Stabilization of Time-Varying Singularly Perturbed Systems by Observer-Based Slow-State Feedback. *IEEE Trans. Autom. Control* **1982**, *27*, 702–704. [\[CrossRef\]](#)
9. Javid, S.H. Observing the Slow States of a Singularly Perturbed System. *IEEE Trans. Autom. Control* **1980**, *25*, 277–280. [\[CrossRef\]](#)
10. Sandell, N.R., Jr. Robust Stability of Systems with Application to Singular Perturbations. *Automatica* **1979**, *15*, 467–470. [\[CrossRef\]](#)

11. Esteban, S.; Aracil, J.; Gordillo, F. Three-Time Scale Singular Perturbation Control for a Radio-Control Helicopter on a Platform. In Proceedings of the AIAA Atmospheric Flight Mechanics Conference and Exhibit, San Francisco, CA, USA, 15–18 August 2005; pp. 1–19.
12. Munje, R.K.; Musmade, B.B.; Parkhe, J.G.; Patre, B.M. Sliding Mode Control for Three Time Scale System with Matched Disturbances. In Proceedings of the 2012 Annual IEEE India Conference, Kochi, India, 7–9 December 2012.
13. Tellili, A.; Abdelkrim, N.; Challouf, A.; Abdelkrim, M.N. Adaptive Fault Tolerant Control of Multi-time-scale Singularly Perturbed Systems. *Int. J. Autom. Comput.* **2018**, *15*, 736–746. [\[CrossRef\]](#)
14. Subbaram Naidu, D. Singular Perturbations and Time Scales in Control Theory and Applications: An overview. *Dyn. Contin. Discret. Impuls. Syst. Ser. B* **2002**, *9*, 233–278.
15. Thoma, J.; Bouamama, B.O. *Modelling and Simulation in Thermal and Chemical Engineering, A Bond Graph Approach*; Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 2000.
16. Wang, H.; Linkens, D. *Intelligent Supervisory Control, a Qualitative Bond Graph Reasoning Approach*; World Scientific Publishing: Singapore, 1996.
17. Sueur, C.; Dauphin-Tanguy, G. Bond graph approach to multi-time systems analysis. *J. Frankl. Inst.* **1991**, *328*, 1005–1026. [\[CrossRef\]](#)
18. Dauphin-Tanguy, G.; Borne, P.; Lebrun, M. Order reduction of multi-time scale systems using bond graphs, the reciprocal system and the singular perturbation method. *J. Frankl. Inst.* **1985**, *319*, 157–171. [\[CrossRef\]](#)
19. Gonzalez, G.; Barrera, N. Quasi-steady state model determination for systems with singular perturbations modeled by bond graphs. *Math. Comput. Model. Dyn. Syst.* **2013**, *19*, 483–503. [\[CrossRef\]](#)
20. Gonzalez, G.; Padilla, A. Approximate bond graph models for linear singularly perturbed systems. *Math. Comput. Dyn. Syst.* **2016**, *22*, 412–443. [\[CrossRef\]](#)
21. Orbak, A.Y.; Turkay, O.S.; Eskimat, E.; Youcef-Toumi, K. Model reduction in the physical domain. *Proc. Inst. Mech. Eng. Part I J. Syst. Control Eng.* **2003**, *217*, 481–496. [\[CrossRef\]](#)
22. Gonzalez, G. A bond graph model of a singularly perturbed LTI MIMO system with a slow state estimated feedback. *Proc. Inst. Mech. Eng. Part I J. Syst. Control Eng.* **2016**, *230*, 799–819. [\[CrossRef\]](#)
23. Gonzalez, G.; Padilla, A. Quasi-steady state model of a class of nonlinear singularly perturbed system in a bond graph approach. *Electr. Eng. J.* **2018**, *100*, 293–302. [\[CrossRef\]](#)
24. González, G.A.; Barrera, N.G.; Ayala, G.; Padilla, J.A.; Alvarado, D.Z. Quasi-Steady-State Models of Three Timescale Systems: A Bond Graph Approach. *Math. Probl. Eng.* **2019**, *2019*, 9783740. [\[CrossRef\]](#)
25. Gawthrop, P.J. Bond graph based control. In Proceedings of the Systems Man and Cybernetics 1995 Intelligent System for the 21st Century IEEE International Conference, Vancouver, BC, Canada, 22–25 October 1995; Volume 4, pp. 3011–3016.
26. Gawthrop, P.J. Physical Model- Based Control: A Bond Graph Approach. *J. Frankl. Inst.* **1995**, *332B*, 285–305. [\[CrossRef\]](#)
27. Karnopp, D.C. Bond graphs in control: Physical state variables and observers. *J. Frankl. Inst.* **1979**, *308*, 221–234. [\[CrossRef\]](#)
28. Gonzalez, G.; Barrera, N.; Padilla, A.; Ayala, G. Composite feedback control of linear singularly perturbed systems: A bond graph approach. *Int. J. Dyn. Control* **2020**, *9*, 689–710. [\[CrossRef\]](#)
29. Karnopp, D.C.; Margolis, D.L.; Rosenberg, R.C. *System Dynamics Modeling and Simulation of Mechatronic Systems*; Wiley Interscience: Hoboken, NJ, USA, 2000.
30. Sueur, C.; Dauphin-Tanguy, G. Bond graph approach for structural analysis of MIMO linear systems. *J. Frankl. Inst.* **1991**, *328*, 55–70. [\[CrossRef\]](#)
31. Wun, J.; Yu, G.; Gao, Y.; Wang, L. Mechatronics modeling and vibration analysis of a 2-DOF parallel manipulator in a 5-DOF hybrid machine tool. *Mech. Mach. Theory* **2018**, *121*, 430–445.
32. Gawthrop, P.J.; Siekmann, I.; Kameneva, T.; Saha, S.; Ibbotson, M.R.; Crampin, E.J. Bond graph modeling of chemoelectrical energy transduction. *IET Syst. Biol.* **2017**, *11*, 127–138. [\[CrossRef\]](#)
33. Gawthrop, P.J.; Crampin, E.J. Modular Bond-graph Modelling and Analysis of Biomolecular Systems. *IET Syst. Biol.* **2016**, *10*, 187–201. [\[CrossRef\]](#) [\[PubMed\]](#)

MODELING ENERGY INTEGRATED DISTILLATION COLUMNS WITH BOND GRAPHS

Juancarlos Méndez Barriga

Universidad Michoacana, Faculty of Mechanical Engineering, Graduate Studies Division of the Faculty of Mechanical Engineering, Morelia, México

Gilberto González Ávalos

Universidad Michoacana, Faculty of Electrical Engineering, Graduate Studies Division of the Faculty of Mechanical Engineering

Carlos Rubio Maya

Universidad Michoacana, Faculty of Mechanical Engineering, Graduate Studies Division of the Faculty of Mechanical Engineering, Morelia, México

ABSTRACT

Distillation is the leading separation technique in petrochemical, chemical and alcoholic beverages industries, among others; the widespread adoption of distillation has come to be because complex separations of fluid mixtures can be achieved with relative ease. Its main drawback is the energy intensive nature of the required equipment. To a certain degree, Energy Integration was developed to address this problem and has helped to reduce the overall heating and cooling demands within process plant environments, reaching great economical success, but with increased complexity in modeling, simulation, operation and control.

Bond Graph (BG) modeling provides a general methodology to analyze complex systems containing diverse physical domains by replacing domain-specific variables with generalized elements and variables. Its energy-flow point of view offers a natural environment for model development on energy manipulation systems, allowing for the separation in subsystems with different domains without altering the model's inner nature. In this paper several developments in bond graph modeling of the thermodynamic systems typical of integrated distillation columns are shown, beginning with the analysis of the bond graph model of an existing multi-stage distillation column using R- fields, based on a previously developed space state representation of the system, followed and compared with elements of the corresponding bond graph model developed directly from the column structure..

Keywords: Bond Graph, Distillation, Energy Integration, R-Fields.

INTRODUCTION

Distillation is the most important separation operation in process engineering, it can be found in applications ranging from alcoholic beverages to oleo chemicals or pharmaceutical plants.

It relies on the difference in boiling points between the components of a liquid mixture. When the mixture is heated the lighter components vaporize more readily and tend to concentrate in the vapor phase while the heavier components mostly remain liquid, in most cases the degree of separation obtained is below the desired goal, but can be achieved by repeated application of the same steps, stacking them one on top of the other until the equipment is capable of delivering the separation objectives. The vapor with the most volatile components concentrate at the top of the column and can be collected there after condensation, the heavier components fall to the bottom where part of it is reheated, vaporized and returned to the equipment while the remaining material is cooled and sent to storage (Schack et al., 2020) (King, 1980). Distillation has been in use for a long time and it looks like it will be in use for the foreseeable future because, by industrial standards, it is cheap, achieves separations that other methods cannot and its theoretical basis are well understood (Kiss & Smith, 2020; Stichlmair et al., 2021), but even the basic outline presented above hints at the main drawback of distillation: The mixture to be separated has to be heated while the streams leaving the system must be cooled. To use both heating and cooling in the same process, although common practice, is highly inefficient, increasing the heat inlet and low grade waste heat released to the atmosphere in an already energy intensive process, with the related problems of high fossil fuel consumption and environmental pollution.

Energy Integration, also called Process Integration, was developed to solve this kind of problems. There are several design philosophies and criteria to define and identify the best possible heat exchange network arrangement, and how to handle process and safety restrictions, but all of them try to recover as much energy as possible exchanging heat between cold streams entering the system and hot streams leaving it, using them to preheat streams in other subsystems, such as boiler feedwater for auxiliary services or in cogeneration schemes. Each of these design philosophies, when used appropriately, leads to significant energy savings but also to more complicated operation and control architecture. Take for example the distillation column in figure 1

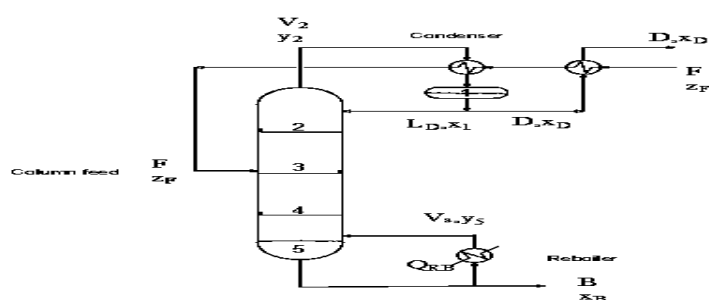


Figure 1 Distillation column with basic energy integration

In this case the feed stream and the distillate vapor exchange energy in the condenser, the feed is heated by the distillate vapor to its saturated liquid temperature at the feed tray conditions while, at the same time the distillate goes thorough partial condensation. Any disturbance in

the flowrate or temperature in the feed stream is bound to cause disturbances in the behavior of the distillate and bottoms streams and is very important to have a control structure capable of handling disturbances in the mass or energy behavior of the column, and Bond Graph is a methodology specifically designed to deal with energy transfer systems in multi-domain environments

To foster diffusion of knowledge among their practitioners, every scientific discipline has developed its own structural framework with vocabulary, conventions and rules that can be very different from those used in similar disciplines, or even different applications in the same field, as is the case of mechanical and chemical engineering applications of thermodynamics, where vocabulary and sign conventions are not quite the same. This structural framework molds the way in which researchers approach problem and influences their collective modeling style, and has yielded remarkable success promoting information flow inside the same field, but in today's problem solving landscape, where interdisciplinary teams are commonplace, ease of use of tools that span knowledge and physical domains are equally important. Process control is a classic example of an application where interdisciplinary teams have been used for decades and tools developed to face the implicit challenges.

MODELING IN BOND GRAPH

Bond Graphs is a graphical modeling methodology devised to represent systems containing multiple interlocking parts, each belonging to different physical domains, converting and replacing domain-specific variables like voltage, current, force and velocity with generalized effort and flow variables in such way that the product of effort and flow in each domain equals a manifestation of power. Analyzing electric circuits, the product of voltage (effort) times current (flow) equals power in an electrical resistance, the same way pressure ((effort) times volumetric flow (flow) equals power in hydraulics. When generalized variables and power interactions are used to model energy transfer systems, domain boundaries disappear and the system can be modeled as a whole using only a handful of elements representing power transfer, storage and dissipative effects; transformations or interactions and power sources in an energy conservative frame of reference. (Karnopp et al., 2012)]

In BG physical systems are modeled using graphical networks where power transfer is represented by bonds between nodes which can be junctions, analog to serial and parallel connections in electric circuits, or ideal energy ports that stand for subsystems of variable complexity; the power transferred in each bond is the product of generalized effort and flow.

Flow and effort variables in each bond act on opposite directions and are bound by causality , where one causes the other, mirroring those of the corresponding variables in the physical model and is indicated in the graphical model by the "causality stroke", as shown in figure 2 (adapted from Janevska, 2017).

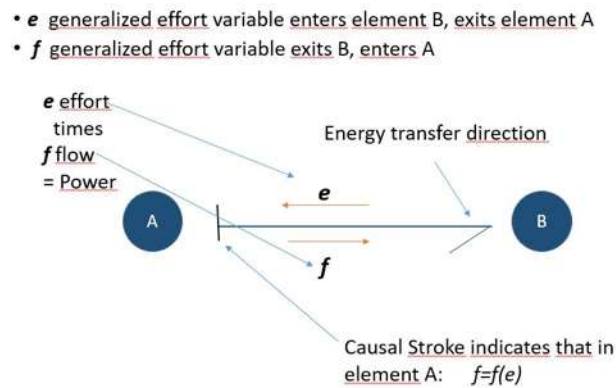


Figure 2 Relevant elements of a bond

Considering physical systems as energy manipulation elements, their dynamic behavior is a manifestation of the energy interactions inside them (Wellstead, 2000) and causality in the bond is the graphical representation of a physical reality. Causality and the laws governing energy manipulation ports (I- inertia or inductor, C- compliance or capacitor, and R- resistor) (Samantaray, 2001) are closely related to the mathematical model of the system.

The generalized variables used in BG are effort (e), flow (f), momentum (p) and displacement (q) and the corresponding variables in several physical domains are shown in table 1.

Table 1. BG generalized variables in several physical environments

Energy domain	effort (e)	flow (f)	momentum (p)	displacement(q)
Electrical	Voltage	Current	Flux linkage	Charge
Translational mechanics	Force	Velocity	Momentum	Displacement
Hydraulics/pneumatics	Pressure	Volumetric flow	Pressure momentum	Volume
Phase equilibria	Chemical potential	Molar flow	-	Number of moles
Heat transfer	Temperature	Entropy flow	-	Entropy

Momentum and displacement are defined in terms of effort and flow, respectively by

$$p = \int_0^{\tau} e(t)dt \quad \text{(Equation 1)}$$

$$q = \int_0^{\tau} f(t)dt \quad \text{(Equation 2)}$$

Many physical systems can be represent by sets of differential equations and auxiliary algebraic equations. In traditional control notation, multiple input multiple output (MIMO) systems that can be considered linear and with time invariant parameters (LTI), the sets of differential equations is frequently rearranged into the State Space Representation (SSR)

$$\dot{x} = Ax + Bu \quad \text{(Equation 3)}$$

$$y = Cx + Du \quad \text{(Equation 4)}$$

Here x is the state variables vector, $\dot{x}$ the time derivatives vector of the state variables, u the input variables vector, y the output, A the state or system matrix and B the input matrix, C the output matrix and D the feedforward matrix.(Nise, 2020)

The symbolic representation for the same MIMO LTI system in Bond Graphs, with storage elements in integral causality, can be seen in figure 3 (Gonzalez-A & Galindo, 2009a). There MS_e and MS_f are effort and flow source fields; L, C inductive and capacitive storage fields, respectively; R dissipative fields and D the necessary detectors; $(0, 1, TF, TY)$ corresponds with the junction structure augmented with transformers (-TF-) and gyrators (-GY-); a detailed description of these elements can be found on (Borutzky, 2010; Karnopp et al., 2012) or (Gawthrop & Bevan, 2007) □ □

In BG, state variables are the energy variables momentum p and displacement q associated with storage elements $-I$ and $-C$; and although not depicted in this figure, their time derivatives $\dot{x}$ are, and this vector of time derivatives is formed by the effort and flow variables entering the storage fields in integral causality. The remaining vectors are:

u denotes input and y output vectors to the system, z is the coenergy vector of flow and effort variables exiting the storage fields, while D_{in} and D_{out} are effort and flow variables representing energy exchange between dissipative fields and the junction structure (Gonzalez & Galindo, 2008).

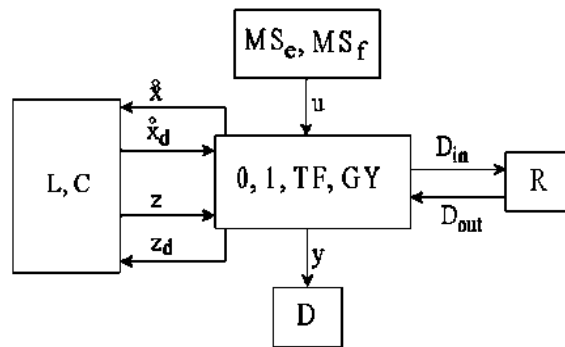


Figure 3 Symbolic representation of a Bond Graph and Key Vectors

The functional relations between storage and dissipative fields are given by the equations

$$z(t) = Fx(t) \quad (\text{Equation 5})$$

$$z_d(t) = F_d x_d(t) \quad (\text{Equation 6})$$

$$\text{and } D_{in} = LD_{out} \quad (\text{Equation 7})$$

The relations between storage and dissipative fields are condensed in the expression

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ D_{in} \\ y \\ z_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & 0 \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & 0 \\ S_{41} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z \\ D_{out} \\ u \\ \dot{x}_d \end{bmatrix} \quad (\text{Equation 8})$$

The coefficients of submatrices S_{ij} take values from the set $\{0, 1, k_{TF}, k_{GY}\}$ with k_{TG} and k_{GY} being the modules of transformers and gyrators, respectively furthermore submatrices S_{11} and S_{22} are square skew-symmetric, while S_{12} and S_{21} are each other negative transpose. It has been established (Sueur & Dauphin-Tanguy, 1991) and (Wellstead, 2000) □ how these

relationships and equations can be used to generate the state space representation of the differential algebraic system of equations of the model.

OBTAINING THE BOND GRAPH MODEL FROM THE SSR OF A PHYSICAL SYSTEM

Mathematical models in State Space of control systems are widely used and the literature frequently describes a system only by its SSR and steady state conditions, without adding detail about the physical layout, in such cases BG wasn't able to produce a graphical model through the normal procedure, but González and Galindo (Gonzalez-A & Galindo, 2009b; Gonzalez & Galindo, 2008) demonstrated that a realizable bond graph with physical meaning could be generated on that basis using a particular junction structure and a set of matrixial equations (shown in equations 8 to 14) to generate a bond graph model with all its storage elements in integral causality linking the different elements by means of R- fields to attach model different branches of the model.

In this context an R- field is an energy exchange multiport whose constitutive laws relate flows and efforts of the n-ports in the field using algebraic functions, inside the field there can be 0-, 1- junctions, and other elements, but are basically formed by interconnected resistors

This technique states that if there is a junction structure of the form

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ D_{in} \\ y \\ z_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I_n & S_{13} \\ -I_n & 0 & 0 \\ S_{31} & 0 & S_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z \\ D_{out} \\ u \\ \dot{x}_d \end{bmatrix} \quad (\text{Equation 9})$$

where equations (5) and (7) are supposed valid for the relevant MIMO system, and F invertible, the bond graph realization must correspond to

$$S_{13} = B_P \quad (\text{Equation 10})$$

$$S_{31} = C_P F^{-1} \quad (\text{Equation 11})$$

$$S_{33} = D_P \quad (\text{Equation 12})$$

$$L = -A_P F^{-1} \quad (\text{Equation 13})$$

In equations (10) to (13) subindex P has been affixed to the matrices corresponding to the SSR of the process being modeled, to distinguish it from BG general notation.

MODELING ENERGY INTEGRATED DISTILLATION COLUMNS WITH BOND GRAPHS

It would seem that Bond Graph with its characteristic energy manipulation focus design is a natural modeling environment for the energy manipulation systems in distillation, but for decades BG was regarded as a versatile tool to be used in disciplines like hydraulics, robotics, mechatronics or electronics and seldomly used in process engineering applications, with some work focused on standard distillation columns (Brooks, 1993; Latreche et al., 2014; Latreche & Khemliche, 2019). Based in previous work by the authors, an space state representation for the material balances of a distillation column was used to develop the

corresponding model in BG with the methodology of Gonzalez and Galindo. The mathematical model for the distillation column in SSR is:

$$\dot{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} -\frac{V_R}{m_1} & \frac{V_R \zeta_2}{m_1} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L_R}{m_2} & -\frac{L_R + V_R \zeta_2}{m_2} & \frac{V_R \zeta_3}{m_2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L_R}{m_3} & -\frac{L_S + V_R \zeta_3}{m_3} & \frac{V_R \zeta_4}{m_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L_S}{m_4} & -\frac{L_S + V_S \zeta_4}{m_4} & \frac{V_S \zeta_5}{m_4} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L_S}{m_5} & -\frac{L_S + V_S (1 - \zeta_5)}{m_5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \frac{(y_2 - x_1)}{m_1} & \frac{(y_2 - x_1)(1 - q_F)}{m_1} & 0 \\ \frac{(x_1 - x_2)}{m_2} & \frac{(y_3 - y_2)}{m_2} & \frac{(y_3 - y_2)(1 - q_F)}{m_2} & 0 \\ \frac{(x_2 - x_3)}{m_3} & \frac{(y_4 - y_3)}{m_3} & \frac{z_F - x_3 q_F - y_3 (1 - q_F)}{m_3} & \frac{F}{m_3} \\ \frac{(x_3 - x_4)}{m_4} & \frac{(y_5 - y_4)}{m_4} & \frac{(x_3 - x_4) q_F}{m_4} & 0 \\ \frac{(x_4 - x_5)}{m_5} & \frac{(x_5 - y_5)}{m_5} & \frac{(x_4 - x_5) q_F}{m_5} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_R \\ V_S \\ F \\ z_F \end{bmatrix} \quad (\text{Equation 14})$$

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} \quad (\text{Equation 15})$$

where zeta is defined by

$$\zeta_i = \frac{\partial y_i}{\partial x_i} \quad (\text{Equation 16})$$

and the model obtained:

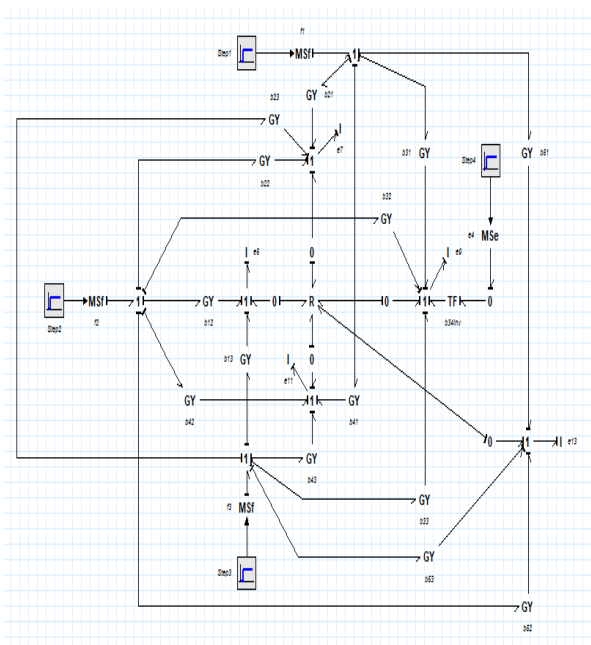


Figure 4 BG model with R- fields for the five stage distillation column

RESULTS

This variant of Bond Graph model generation method has been applied to numerous systems of diverse nature but, to the authors best knowledge, have never been used to model systems including interactions of chemical, hydraulic and thermal environments such as EIDCs; to determine its applicability and performance.

It was decided use it to develop the BG model for a five stage distillation column with stripping, feed and rectification sections which have been studied previously, its whole state space equations determined, and their behavior known. Simulations of the BG model developed were run and compared with those based on the mathematical model for the dynamic system, assigning step changes in sequence to each variable of the input variables vector, the resulting plot for each simulation is, for all practical purposes, the same for both models.

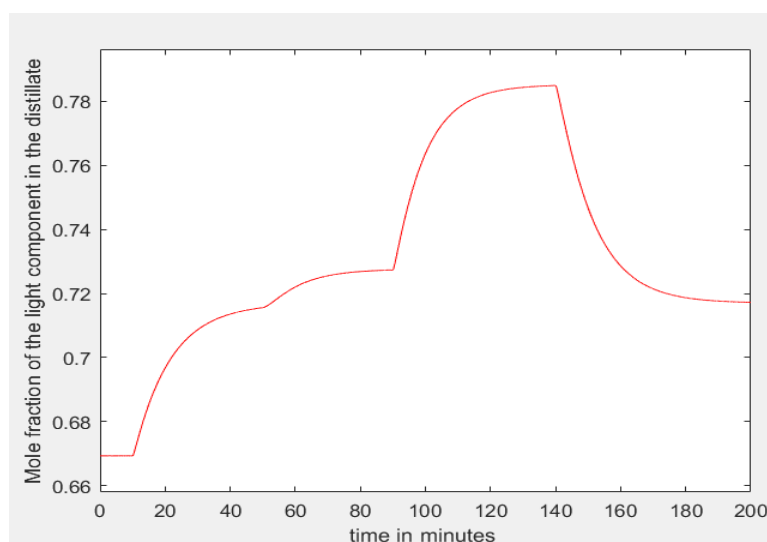


Figure 5 Light component concentration in the distillate with sequenced step changes in the input variables

CONCLUSION

It was reassuring to find that both simulations gave essentially the same results, since they are based in the same system of differential and algebraic equations with the same set of steady state conditions, but the point in case is that the applied methodology was capable of delivering those results inside a graphical modeling environment, up until now foreign to this particular field, opening a path for further research in process engineering applications with thermodynamic, fluid flow, heat exchange and mass transfer interacting subsystems.

Detailed analysis of variable groupings in the product of matrix B_P and vector u underscore that results for the distillation column with the state space equations based on dimensionless

variables are dimensionless themselves, instead manifestations of power, and as such the resulting model must be deemed as a valid pseudo bond graph.

The model offers insight on the way that dimensionless groupings can be used as proxies for effort variables coupled with equally dimensionless flow variables, by contrast, in this instance straight classification of flow and effort variables is not as appealing because it would be necessary to insert chemical potential or equivalent variable in the equations, when it is not really needed.

There are significant challenges in the implementation of BG in process systems like EIDCs, namely to identify the most relevant process variables to tag as effort or flow, but they seem to be surmountable.

REFERENCE

- Borutzky, W. (2010). *Bond Graph Methodology* (W. Borutzky (ed.); Issue July). Springer.
- Brooks, B. A. (1993). *MODELING OF A DISTILLATION COLUMN USING BOND GRAPHS* by. University of Arizona, Tucson, AZ.
- Gawthrop, P. J., & Bevan, G. P. (2007). Bond-Graph Modeling: A Tutorial for Control Engineers. *IEEE Control Systems Magazine*, April, 24–45. <http://www.ele.ita.br/~takashi/Leitura01.pdf>
- Gonzalez, G., & Galindo, R. (2008). Removing the algebraic loops of a bond graph model. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers. Part I: Journal of Systems and Control Engineering*, 222(6), 543–556. <https://doi.org/10.1243/09596518JSCE559>
- Gonzalez-A, G., & Galindo, R. (2009a). A bond graph model from a state space description of a LTI MIMO system. *IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline)*.
- Gonzalez-A, G., & Galindo, R. (2009b). A bond graph model from a state space description of a LTI MIMO system. *IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline)*, 14(PART 1), 402–407. <https://doi.org/10.3182/20090819-3-PL-3002.00070>
- Janevska, G. (2017). *Bond Graphs Approach to Modeling Thermal Processes*. 8(May), 736–740.
- Karnopp, D. C., Margolis, D. L., & Rosenberg, R. C. (2012). *System Dynamics: Modeling, Simulation, and Control of Mechatronic Systems* (Fifth). John Wiley & Sons, Inc.
- King, C. J. (1980). *Separation Processes* (Second). McGraw-Hill College.
- Latreche, S., & Khemliche, M. (2019). Modeling and Simulation of the Distillation Column Plates. *Advances in Engineering: An International Journal (ADEIJ)*, 2(2), 1–12.
- Latreche, S., Mostefai, M., Badoud, A. E., & Khemliche, M. (2014). *Modeling and Monitoring of a Distillation Column*. 03(06), 1504–1513.
- Nise, N. S. (2020). *Control System Engineering-* (8th edition). Wiley.
- Samantaray, K. A. (2001). About Bond Graphs. *The System Modeling World*.

- Schack, D., Jastram, A., Liesche, G., & Sundmacher, K. (2020). Energy-Efficient Distillation Processes by Additional Heat Transfer Derived From the FluxMax Approach. *Frontiers in Energy Research*, 8(July), 1–15. <https://doi.org/10.3389/fenrg.2020.00134>
- Sueur, C., & Dauphin-Tanguy, G. (1991). Bond-graph approach for structural analysis of MIMO linear systems. *Journal of the Franklin Institute*, 328(1), 55–70. [https://doi.org/10.1016/0016-0032\(91\)90006-O](https://doi.org/10.1016/0016-0032(91)90006-O)
- Wellstead, P. (2000). *Introduction to Physical System Modelling* (1st ed.). Academic Press Ltd. <http://www.control-systems-principles.co.uk>

Apéndice E

Bibliografía

[1] D. Basmadjian y R. Farnood, The art of modeling in science and engineering, 2.^a ed. Chapman and Hall/CRC, 2007, p. 509.

[2] W. Borutzky, Bond graph methodology. Springer, 2010, p. 662.

[3] P. E. Wellstead, Introduction to physical system modelling, Academic Press Ltd., 2000, p. 256. [En línea]. Disponible en: <http://www.control-systems-principles.co.uk>

[4] M. F. Mustafa, N. A. F. A. Samad, K. A. Ibrahim, y M. K. A. Hamid, «Methodology development for designing energy efficient distillation column systems», en Energy procedia, 2014, pp. 66-69. doi: 10.1016/j.egypro.2014.12.043.

[5] F. Staine y D. Favrat, «Energy integration of industrial processes based on the pinch analysis method extended to include exergy factors», vol. 16, n.^o 6, pp. 497-507, 1996.

[6] I. C. Kemp y B. Linnhoff, «Pinch analysis and process integration», en Pinch analysis and process integration, 2.^a ed., Butterworth-Heinemann, 2007, p. 415.

[7] M. Sorin y J. Paris, Combined exergy and pinch approach to process analysis, Computers and Chemical Engineering, vol. 21, n.^o 97, pp. S23-S28, 1997, doi: 10.1016/S0098-1354(97)87473-X.

[8] H. M. Paynter, «The gestation and birth of bond graphs», pp. 1-7, 2000.

[9] F. Cellier, «Bond graph bibliography», 1998, [En línea], Disponible en: <https://www.inf.ethz.ch/per/papers.html>

[10] B. A. Brooks, «MODELING OF A DISTILLATION COLUMN USING BOND GRAPHS By», M.Sc., University of Arizona, Tucson, AZ., 1993.

- [11] F. Couenne, D. Eberard, L. Lefèvre, C. Jallut, y B. Maschke, «Multi-scale distributed parameter model of an adsorption column using a bond graph approach», *European Symposium on Computer Aided Process Engineering*, vol. 20, pp. 625-630, 2005, doi: 10.1016/S1570-7946(05)80226-3.
- [12] F. Couenne, C. Jallut, B. Maschke, M. Tayakout-fayolle, y P. Breedveld, «Bond graph for dynamic modelling in chemical engineering», en *Chemical engineering and processing: Process intensification*, vol. 47, 2008, pp. 1994-2003. doi: 10.1016/j.cep.2007.09.006.
- [13] B. Thoma, J.; Ould Bouamama, *Modelling and simulation in thermal and chemical engineering*, vol. 144. Berlin, Heidelberg: Springer, 2000. [En línea]. Disponible en: <http://link.springer.com/>
- [14] S. Latreche y M. Khemliche, «Modeling and simulation of the distillation column plates», *Advances in Engineering: an International Journal (ADEIJ)*, vol. 2, n.º 2, pp. 1-12, 2019.
- [15] S. Latreche, M. Mostefai, A. E. Badoud, y M. Khemliche, «Modeling and monitoring of a distillation column», vol. 03, n.º 06, pp. 1504-1513, 2014.
- [16] J. Wu, F. Couenne, B. Hamroun, E. Gagnère, y C. Jallut, «A HYBRID MODEL FOR DYNAMIC SIMULATION OF AN AIR-COOLED HEAT PUMP SYSTEM COUPLED WITH A PCM STORAGE TANK», en *ESCAPE17*, 2007. doi: 9781510812062.
- [17] Y. H. Kim, «Design and control of energy-efficient distillation columns», *Korean Journal of Chemical Engineering*, vol. 33, n.º 9, pp. 2513-2521, sep. 2016, doi: 10.1007/s11814-016-0124-4.
- [18] N. Shankar, V. Aneesh, y V. Sivasubramanian, «Aspen hysys based simulation and analysis of crude distillation unit», *International Journal of Current Engineering and Technology*, vol. 5, n.º 4, pp. 283-2837, 2015.
- [19] J. A. Vázquez-Castillo, J. G. Segovia-Hernández, y J. M. Ponce-Ortega, «Multiobjective optimization approach for integrating design and control in multicomponent distillation sequences», *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 54, n.º 49, pp. 12320-12330, 2015, doi: 10.1021/acs.iecr.5b01611.
- [20] S. Latreche, M. Mostefai, y M. Khemliche, «Optimal sensors placement for monitoring a steam condenser of the distillation column using bond graph approach», n.º 25, pp. 97-110, 2014.
- [21] T. Bentaleb, M. Tu Pham, D. Eberard, y W. Marquis-Favre, *Bond graph model of A water heat exchanger*. 2016, pp. 333-339. doi: 10.7148/2016-0333.

- [22] Q. T. Pham, «Degrees of freedom of equipment and processes», Chemical Engineering Science, vol. 49, n.º 15, pp. 2507-2512, ago. 1994, doi: 10.1016/0009-2509(94)E0056-V.
- [23] W. L. Luyben, «Design and control degrees of freedom», Industrial and Engineering Chemistry Research, vol. 35, n.º 7, pp. 2204-2214, 1996, doi: 10.1021/ie960038d.
- [24] W. Borutzky, «Bond graph modelling of engineering systems», en Bond graph modelling of engineering systems, W. Borutzky y P. C. Breedveld, Eds. New York: Springer-Verlag, 2011, p. 453. doi: 10.1007/978-1-4419-9368-7.
- [25] F. T. Brown, Engineering system dynamics: A unified graph-centered approach, second edition, 2.ª ed., vol. 15. CRC Press, 2007, p. 1074.
- [26] D. Karnopp, D. L. Margolis, y R. Rosenberg, System dynamics: Modeling, simulation, and control of mechatronic systems, 5.ª ed. Hoboken, NJ, USA: John Wiley and Sons, Inc., 2012, p. 645.
- [27] B. W. Bequette, Process control: Modeling, design, and simulation. Prentice Hall PTR Prentice-Hall, 2002.
- [28] A. Gorak y Z. Olujic, Distillation: Equipment and processes, Academic Press, 2014, p. 361.
- [29] W. L. Luyben, «Distillation control», en Distillation, Elsevier, 2014, pp. 1-35. [En línea]. Disponible en: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780123868763000016>.
- [30] S. Skogestad y M. Morari, «Control configuration selection for distillation columns», AIChE Journal, vol. 33, n.º 10, pp. 1620-1635, oct. 1987, doi: 10.1002/aic.690331006.
- [31] T. E. Marlin, Process control, 2.ª ed. McGraw-Hill, 2000, p. 1056.
- [32] K. Ogata, Modern control engineering, 5.ª ed. Prentice Hall, 2010, p. 905.
- [33] Katsuhiko. Ogata, System dynamics / katsuhiko ogata., 4.ª ed. Pearson Education Limited, 2014, p. 781.
- [34] T. Kotas, The exergy method of thermal plant analysis, 2.ª ed. Malabar, Florida, USA.: Krieger Publishing Company, 1995.
- [35] B. Linnhoff, «Introduction to pinch technology», New Design, p. 63, 1998.
- [36] F. Couenne, C. Jallut, L. Lefevre, Y. Le Gorrec, y B. Maschke, «Basis for bond-graph modeling in chemical engineering», Computer Aided Chemical Engineering, vol. 24, pp. 69-74, 2007, doi: 10.1016/S1570-7946(07)80035-6.

- [37] F. Couenne, C. Jallut, B. Maschke, P. Breedveld, y M. Tayakout, «Bond graph modeling for chemical reactors», *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems*, vol. 12, n.º 2-3, pp. 159-174, 2006, doi: 10.1080/13873950500068823.
- [38] S. Skogestad, «Dynamics and control of distillation columns - A critical survey», *Modeling, Identification and Control: A Norwegian Research Bulletin*, vol. 18, n.º 3, pp. 177-217, 1997, doi: 10.4173/mic.1997.3.1.
- [39] S. Skogestad, «Dynamics and control of distillation columns», vol. 75. pp. 539-562, 1997. doi: 10.1205/026387697524092.
- [40] B. Linnhoff y J. R. Flower, «Synthesis of heat exchanger networks: II. Evolutionary generation of networks with various criteria of optimality», *AIChE Journal*, vol. 24, n.º 4, pp. 642-654, jul. 1978, doi: 10.1002/aic.690240412.
- [41] R. N. S. Rathore, K. A. Van Wormer, y G. J. Powers, «Synthesis strategies for multicomponent separation systems with energy integration», *AIChE Journal*, vol. 20, n.º 3, pp. 491-502, 1974, doi: 10.1002/aic.690200309.
- [42] A. Valero et al., «CGAM problem: Definition and conventional solution», *Energy*, vol. 19, n.º 3, pp. 279-286, mar. 1994, doi: 10.1016/0360-5442(94)90112-0.
- [43] C. R. Branan, *Branan's rules of thumb for chemical engineers*. Butterworth-Heinemann, 2005, p. 426. doi: 10.1016/B978-075067856-8/50015-3.
- [44] J. Couper, R. Penney, J. Fair, y S. Walas, *Chemical Process Equipment Selection and Design*, 3.ª ed. Butterworth-Heinemann, 2012.
- [45] R. Kotrba, «The many faces of distillation», *Biodiesel Magazine*, 2013, [En línea]. Disponible en: <https://biodieselmagazine.com/articles/8997/the-many-faces-of-distillation>
- [46] K. A. Samantaray, «About bond graphs», *The System Modeling World*, 2001.
- [47] B. Bird, W. Stewart, E. Lightfoot, y D. Klingenberg, *Introductory Transport Phenomena*, 1.ª ed. Wiley, 2014.
- [48] G. Janevska, «Bond graphs approach to modeling thermal processes», *International Journal of Scientific and Engineering Research*, vol. 8, n.º 5, pp. 736-740, 2017.
- [49] J. R. Elliott y C. T. Lira, *Introductory chemical engineering thermodynamics*, 2.ª ed. Prentice Hall, 2012, p. 1340.
- [50] S. I. Sandler, «Chemical biochemical and engineering thermodynamics», en John Wiley and sons, inc., 4.ª ed., John Wiley and Sons, Inc., 2006, p. 960.

- [51] M. J. Moran, H. N. Shapiro, D. D. Boettner, y M. B. Bailey, Fundamentals of engineering thermodynamics, 9.^a ed. Hoboken, NJ, USA: John Wiley and Sons, Inc., 2018.
- [52] J. Smith, H. Van Ness, M. Abbott, y M. Swihart, Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 9.^a ed. McGraw-Hill, 2021.
- [53] A. Bejan, Advanced engineering thermodynamics, 4^a ed. Hoboken, NJ, USA: John Wiley and Sons, Inc., 2016, p. 782.
- [54] Y. A. Cengel, M. A. Boles, y M. Kanoglu, Thermodynamics, an engineering approach, 9.^a ed. New York, N.Y., U.S.A.: McGraw Hill Higher Education, 2019, p. 1094. [En línea]. Disponible en: McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering.
- [55] N. S. Nise, Control systems engineering, 8.^a ed. John Wiley and Sons, Inc., 2020, p. 966.
- [56] R. K. Rajput y M. Tabatabaian, Advanced thermodynamics: Fundamentals, mathematics, applications. Mercury Learning and Information, 2018.
- [57] S. R. Turns y L. L. Pauley, Thermodynamics: Concepts and applications, 2.^a ed. Cambridge University Press, 2020, p. 909.
- [58] B. Linnhoff, «Introduction to pinch technology», New Design, p. 63, 1998.
- [59] D. K. Seader, J.D., Henley, Ernest J., Roper, Separation process principles with applications using process simulators, 4.^a ed. John Wiley and Sons, Inc., 2015, p. 554.
- [60] J. Maxwell, «The Scientific Papers of James Clerk Maxwell», Cambridge University Press, 2011.
- [61] E. J. Roper, Keith D.; Seader, J.D.; Henley, Separation process principles. John Wiley and Sons, Inc., 2010, p. 848.
- [62] J. W. Gentry, «The 19th century legacy to distillation from Kidd to Young», Chemical Engineering Education, pp. 250-255, 1995.
- [63] C. Rubio-Maya, J. J. Pacheco-Ibarra, H. C. Gutiérrez Sanchez, C. Mendoza-Covarrubias, J. Martínez Patiño, y M. Picón Nuñez, «Aproximaciones de la diferencia media logarítmica de temperatura (DMLT) en problemas de optimización matemática, aplicación al problema CGAM. 1», Memorias del XV congreso internacional anual de la SOMIM, pp. 1024-1030, 2009.
- [64] T. Gundersen, «Numerical aspects of the implementation of cubic equations of state in flash calculation routines», Computers and Chemical Engineering, vol. 6, n.º 3, pp. 245-255, 1982, doi: 10.1016/0098-1354(82)80015-X.

[65] S. Moaveni, Finite element analysis. Theory and applications with ansys. Prentice Hall PTR Prentice-Hall, 1999, p. 538.

[66] B. W. Bequette, Process dynamics. Modeling, analysis and simulation. Prentice Hall PTR Prentice-Hall, 1998, p. 800.

[67]“column-tray-1944481.jpg (JPEG Imagen, 800×552 píxeles).” <https://img3.exportersindia.com/p/full/dir119/3567759/column-tray-1944481.jpg> (accessed Feb. 22, 2023).

[68] ASALE, “Térmico, Térmica | Diccionario de La Lengua Española.” «Diccionario de la lengua española» - Edición del Tricentenario. Accessed: Oct. 18, 2022. [Online]. Available: <https://dle.rae.es/t>

[69] Merriam Webster Online, «Definition of THERMAL», Dictionary Definition Thermal, 18 de febrero de 2023. <https://www.merriam-webster.com/dictionary/thermal> (accedido 22 de febrero de 2023). (accessed Oct. 18, 2022).

[70] A. M. Flynn, T. Akashige, y L. Theodore, «Kern’s process heat transfer», en Kern’s process heat transfer, 2.^a ed., John Wiley and Sons, Inc., 2019, p. 707. doi: 10.1002/9781119364825.

[71] E. D.- Sontag, Mathematical control theory deterministic finite dimensional systems 2nd ed, 2.^a ed. Springer, 1998, p. 548.

[72] K. M. Hangos, J. Bokor, and G. Szederkényi, Analysis and Control of Nonlinear Process Systems. Springer. [Online]. Available: <https://books.google.com.mx/books?id=Jgtwi3o-mmUC>

[73] D. Seborg, T. Edgar, D. Mellicamp, and F. Doyle III, Process Dynamics and Control, Third. John Wiley and Sons, Inc., 2011. doi: 10.1007/s13398-014-0173-7.2.

[74]P. Kubiak, A. Azmani, and G. Dauphin-Tanguy, Proceedings of the 1999 International Conference on Bond Graph Modeling and Simulation (ICBGM ’99): 1999 Western MultiConference.

[75] G. González A. and R. Galindo, “Removing the algebraic loops of a bond graph model,” Proc. Inst. Mech. Eng. Part I J. Syst. Control Eng., vol. 222, no. 6, pp. 543–556, 2008, doi: 10.1243/09596518JSCE559.

[76] W. E. Boyce, R. C. DiPrima, y D. B. Meade, Elementary differential equations and boundary value problems., 11 th. Hoboken, NJ, USA: John Wiley and Sons, Inc., 2017, p. 625.

[77] G. González A. y R. Galindo, «A bond graph model from a state space description of a LTI MIMO system», IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline), vol. 14, n.^o PART 1, pp. 402-407, 2009, doi: 10.3182/20090819-3-PL-3002.00070.

[78] G. González A. y A. Padilla-G, «Steady state for a class of nonlinear systems: A bond graph approach», en IFAC proceedings volumes (IFAC-PapersOnline), vol. 14, IFAC, 2009, pp. 483-488. doi: 10.3182/20090819-3-PL-3002.00084.

[79] C. Sueur y G. Dauphin-Tanguy, «Bond-graph approach for structural analysis of MIMO linear systems», Journal of the Franklin Institute, vol. 328, n.º 1, pp. 55-70, 1991, doi: 10.1016/0016-0032(91)90006-O.

[80] G. Gonzalez-A y R. Galindo, «A bond graph model from a state space description of a LTI MIMO system», en IFAC proceedings volumes (IFAC-PapersOnline), 2009.

[81] S. A. Aisagaliev y I. V. Sevryugin, «CONTROLLABILITY OF PROCESS DESCRIBED BY LINEAR SYSTEM OF ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS», TWMS J. Pure Appl. Math., vol. V.8, N.2, n.º February 2017, pp. 170-185, 2017.

[82] J. Van Dijk y P. C. Breedveld, «Simulation of system models containing zero-order causal paths—I. Classification of zero-order causal paths», Journal of the Franklin Institute, vol. 328, n.º 5, pp. 959-979, 1991, doi: [https://doi.org/10.1016/0016-0032\(91\)90064-A](https://doi.org/10.1016/0016-0032(91)90064-A).

[83] P. S. Kuo, “Cylinder Pressure in a Spark-Ignition Engine : A Computational Model,” vol. 3, no. Fall, pp. 141–145.