

COMPORTAMIENTO CAÓTICO DE UN REACTOR TIPO TANQUE EN RÉGIMEN DE AUTORREGULACIÓN

Manuel Pérez Polo

Departamento de Física Ingeniería de Sistemas y Teoría de la Señal. Universidad de Alicante. Escuela Politécnica Superior. Apartado 99. E-03080 Alicante. E-mail: manolo@disc.ua.es

Resumen

Este trabajo presenta el comportamiento de un reactor continuo tipo tanque refrigerado por camisa en el que se da una reacción exotérmica de primer orden. Puesto que estos reactores tienen varios puntos de equilibrio, no se considera ningún sistema de control externo, de forma que el reactor opera en régimen de autorregulación. Se comprueba que es posible la aparición de comportamiento caótico a través de dos mecanismos distintos de perturbación del estado estacionario. El comportamiento caótico y la aparición de atractores extraños se investiga a través de la determinación de los exponentes de Lyapunov, la densidad espectral de potencia y el análisis de la dependencia sensible.

Palabras clave: Reactor, autorregulación, regular, auto-oscilación, caótico, atractor.

1 INTRODUCCIÓN

Se ha demostrado [3] que el régimen auto-oscilante de reactores químicos y bioreactores, en los que la composición y temperatura del reactor varían periódicamente, puede ser económicamente ventajoso cuando se utiliza un esquema apropiado de mezclado junto con unas determinadas condiciones de alimentación al reactor. En estas condiciones es posible alcanzar altas velocidades de reacción, mejorando las condiciones de controlabilidad, así como de selectividad a determinados productos de reacción. Además, en el caso de reacciones exotérmicas, es posible utilizar el calor de reacción para precalentar la alimentación, con lo cual se mejora el rendimiento global de la operación.

El estudio de reactores continuos perfectamente mezclados y refrigerados por camisa, en los que se da una reacción exotérmica se ha estudiado en [3],[5],[6]. El control de estos reactores se realiza a través de los múltiples estados estacionarios que pueden aparecer en función del caudal, composición y temperatura de la alimentación. En el caso de que ningún sistema

de control externo se aplica al reactor, se ha comprobado que al variar la temperatura del agua de refrigeración utilizando una señal senoidal o cuadrada, puede aparecer un comportamiento oscilatorio irregular, que tras una serie de doblados de periodo genera un comportamiento caótico. En todos estos casos, los modelos del reactor no consideran la dinámica de la camisa de refrigeración, resultando modelos caracterizados por dos variables de estado: la composición y la temperatura del reactor, siendo la tercera variable la temperatura periódica del agua de refrigeración.

En este trabajo se estudia un reactor continuo refrigerado por camisa en el que se da una reacción exotérmica e irreversible de primer orden, tomando como variables de estado la composición, temperatura del reactor y la temperatura del agua de refrigeración en la camisa. Se comprueba que el comportamiento caótico aparece tras una serie de doblados de periodo por dos vías distintas.

a) Modificando el estado de equilibrio a través de variaciones periódicas en el caudal de alimentación y en la temperatura de la corriente de entrada.

b) Perturbando un estado básico auto-oscilatorio con una variación periódica senoidal del caudal de fluido refrigerante.

En ambos casos se obtienen familias de nuevos atractores extraños, verificando la presencia de un conjunto de Cantor y una fuerte dependencia sensible respecto de las condiciones iniciales. El cálculo de los exponentes de Lyapunov, la densidad espectral de potencia y la dependencia sensible a las condiciones iniciales corroboran la presencia de dichos atractores extraños.

2 REACTOR AUTORREGULADO

El análisis del reactor auto regulado se realiza a través del modelo matemático de proceso, el cual está basado en las ecuaciones del balance de materia y energía. En la figura 1 aparece un esquema del reactor.

- Balance de masa para el producto A en la reacción $A \rightarrow B$.

$$\frac{dC_a}{dt} = \frac{F_o}{V} \cdot (C_{ao} - C_a) - \alpha \cdot \exp(-E/RT) \quad (1)$$

siendo C_a , C_{ao} las composiciones de A en el reactor y en la alimentación respectivamente, F_o el caudal de la corriente de alimentación, V el volumen del reactor en ft^3 , α el coeficiente preexponencial de la ley de Arrhenius, E la energía de activación, R la constante de los gases y T la temperatura.

-Balance de energía en el reactor.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_o}{V} \cdot (T_o - T) + \frac{H\alpha}{\rho c_p} \cdot C_a \cdot \exp(-E/RT) - \frac{UA}{\rho c_p V} \cdot (T - T_j) \quad (2)$$

siendo H el calor de reacción, ρ , c_p la densidad de la mezcla y el calor específico de la mezcla en el reactor respectivamente.

- Balance de energía en la camisa

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{F_{jo}}{V_j} \cdot (T_{jo} - T_j) + \frac{UA}{\rho_j c_{pj} V_j} \cdot (T - T_j) \quad (3)$$

en donde el subíndice "j" se refiere al fluido refrigerante y V_j es el volumen de la camisa.

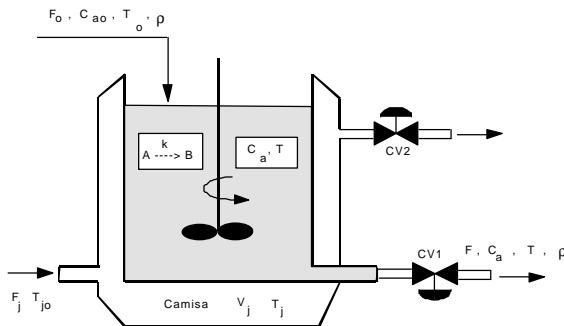


Figura 1. Reactor refrigerado por camisa

En la tabla 1 se indican los valores de los parámetros utilizados en la simulación. Si el volumen de la camisa es mucho menor que el del reactor es posible despreciar su dinámica frente a la del reactor con lo cual será posible despreciar la variación de la temperatura T_j

respecto al tiempo. Esta posibilidad se analiza a continuación.

Tabla 1
Valores de los parámetros para el reactor

| Variable | Descripción | Valor |
|----------|--|-----------------------|
| F_o | Caudal entrada (ft^3/h) | 40 |
| V_m | Volumen medio reactor (ft^3) | 48 |
| C_{ao} | Concentración media caudal entrada ($\text{mol A}/\text{ft}^3$) | 0.50 |
| C_{am} | Concentración media en el reactor ($\text{mol A}/\text{ft}^3$) | 0.245 |
| T_{mj} | Temperatura media en el reactor ($^{\circ}\text{R}$) | 600 |
| T_{mj} | Temperatura media del refrigerante ($^{\circ}\text{R}$) | 594 |
| T_{mo} | Temperatura media caudal de entrada ($^{\circ}\text{R}$) | 530 |
| V_j | Volumen camisa (ft^3) | 3 |
| α | Constante de reacción ecuación Arrhenius (h^{-1}) | 7.08×10^{10} |
| E | Energía de activación (BTU/mol) | 30000 |
| U | Coefficiente transmisión de calor ($\text{BTU}/(\text{h} \cdot \text{ft}^2 \cdot ^{\circ}\text{R})$) | 150 |
| A | Área transmisión calor (ft^2) | 250 |
| T_{jo} | Temperatura entrada fluido refrigerante ($^{\circ}\text{R}$) | 530 |
| H | Calor de reacción (BTU/mol) | 30000 (-) |
| c_p | Calor específico mezcla en el reactor ($\text{BTU}/\text{lb} \cdot ^{\circ}\text{R}$) | 0.75 |
| c_{pj} | Calor específico fluido refrigerante ($\text{BTU}/\text{lb} \cdot ^{\circ}\text{R}$) | 1 |
| ρ | Densidad mezcla (lb/ft^3) | 50 |
| ρ_j | Densidad fluido refrigerante (lb/ft^3) | 62.3 |
| F_j | Caudal fluido refrigerante (ft^3/h) | 49.9 |

Considerando la parte lineal de las ecuaciones (2) y (3), las constantes de tiempo asociadas a la dinámica del reactor y la camisa son respectivamente:

$$\tau_r = \frac{V}{F_o + \frac{UA}{\rho c_p}} = 0.057 \text{h}^{-1} \quad (4)$$

$$\tau_{Tj} = \frac{V_j}{F_o + \frac{UA}{\rho_j c_{pj}}} = 0.0056 \text{h}^{-1} \quad (5)$$

con lo cual, a efectos de estudiar las auto-oscilaciones es posible considerar el modelo

simplicado formado por las ecuaciones (1) y la ecuación resultante de eliminar T_j de la ecuación (3) igualada a cero y la ecuación (2), es decir:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_o}{V} \cdot (T_o - T) + \frac{H\alpha}{\rho c_p} \cdot C_a \cdot \exp(-E/RT) - \frac{UA}{\rho c_p V} \cdot \left(\frac{F_j \rho_j c_{pj}}{F_j \rho_j c_{pj} + UA} \right) (T - T_{je}) \quad (6)$$

De las ecuaciones (1), (2) y (3) se obtiene las condiciones de estado estacionario igualando a cero las derivadas, con lo cual se pueden escribir las siguientes ecuaciones de equilibrio:

$$C_{ae} = \frac{C_{ao}}{1 + \frac{\alpha V}{F_o} \cdot \exp(-E/RT)} \quad (7)$$

$$\frac{F_o}{V} \cdot (T_o - T_e) + \frac{H\alpha}{\rho c_p} \cdot C_{ae} \cdot \exp(-E/RT) - \frac{UA}{\rho c_p V} \cdot (T_e - T_{je}) = 0 \quad (8)$$

$$T_{je} = \frac{\rho_j c_{pj} F_j T_{jo} + UA T_e}{\rho_j c_{pj} F_j T_{jo} + UA} \quad (9)$$

Eliminando C_{ae} entre las ecuaciones (7) y (8) se puede obtener la expresión para el calor generado por la reacción QG y el calor eliminado en la camisa QE, o sea:

$$QG = \frac{VH\alpha C_{ao} \cdot \exp(-E/RT)}{1 + \frac{\alpha V}{F_o} \cdot \exp(-E/RT)} \quad (10)$$

$$QE = \rho c_p F_o \cdot (T_e - T_o) + UA \cdot (T_e - T_{je}) \quad (11)$$

Si se representan gráficamente el calor generado y eliminado en función de la temperatura de equilibrio se obtiene una sigmoide y una línea recta que se pueden cortar en uno dos o tres puntos dependiendo de los valores de los parámetros del reactor y de los valores del caudal, composición y temperatura de la corriente de entrada.

En la figura 2 se muestran los resultados obtenidos para los valores de la tabla 1, en un margen de temperaturas comprendidas entre 470 y 700 °R. De acuerdo con la ecuación (11), la posición de la recta del calor eliminado depende del término UA y de la temperatura de equilibrio del fluido refrigerante, dada por la ecuación (9), con lo cual siempre es posible tener un único estado de equilibrio.

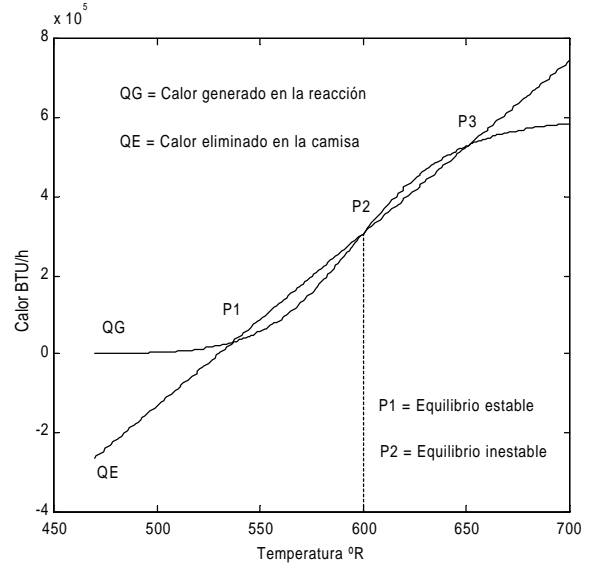


Figura 2. Puntos de equilibrio del reactor

El punto P1 es siempre estable, el punto P2 es siempre inestable y el punto P3 puede ser estable o inestable. Aunque en la bibliografía aparecen razonamientos intuitivos respecto a la estabilidad o inestabilidad de los puntos P1, P2, P3, [5],[6], la forma más precisa de argumentar en relación a la estabilidad, es linealizar las ecuaciones (1), (2), (3) del reactor en dichos puntos y determinar los autovalores del jacobiano resultante de la linealización. La presencia de un autovalor con parte real positiva indica que el punto es inestable. Si todos los autovalores tienen parte real negativa el punto de equilibrio será estable. Esto contradice la afirmación de que siempre el punto P3 es estable, lo cual no necesariamente tiene que cumplirse siempre.

En la figura 2, el punto P2 corresponde a una temperatura de equilibrio de 600°R, la cual es imposible de alcanzar sin ningún sistema de control externo. Para los valores indicados en la tabla 1, si las condiciones de la alimentación son compatibles con valores de la temperatura de alimentación por debajo de 600 °R, el reactor evoluciona hacia el punto P1 de baja temperatura y alto valor de la concentración en el reactor C_a . Por el contrario, valores superiores a 600 °R en la alimentación hacen que el reactor evolucione hacia el punto de equilibrio P3 de alta temperatura y bajos valores de la concentración C_a .

El hecho de que el reactor puede tener más de un estado de equilibrio es de gran importancia a la hora de investigar posibles comportamientos caóticos y sus causas.

3 COMPORTAMIENTO CAÓTICO CON DOBLE PERTURBACIÓN PERIÓDICA

De los resultados obtenidos en el apartado anterior se deduce que el reactor tiene dos estados de equilibrio en los puntos P1 y P3 de la figura 2. Estos estados de equilibrio vienen definidos por las ecuaciones (7), (8) y (9). Obsérvese que una vez alcanzada la temperatura de equilibrio T_e , a partir de la ecuación (7) se determina la correspondiente concentración C_{ae} , y a partir de la ecuación (9) se determina la temperatura de estado estacionario en la camisa para un caudal dado de fluido refrigerante F_j . De la ecuación (9) también se deduce que la temperatura de equilibrio T_e debe ser mayor que T_{je} , a fin de que el caudal F_j sea positivo. Esta situación corresponde a una operación normal del reactor en la que hay una transmisión de calor del reactor al fluido refrigerante en estado estacionario. Con objeto de hacer más manejable el problema, se introducen las siguientes variables adimensionales.

$$\tau = \frac{F_o t}{V} ; x = \frac{C_a}{C_{aor}} ; x_o = \frac{C_{ao}}{C_{aor}} \quad (12)$$

$$\frac{1}{y} = \frac{E}{RT} ; \frac{1}{y_o} = \frac{E}{RT} ; \frac{1}{z_{jo}} = \frac{E}{RT_{jo}} \quad (13)$$

siendo C_{aor} la concentración inicial que hay en el reactor de la especie A. Las ecuaciones (1), (2) y (3) se transforman en:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= -c_o x \cdot \exp(-1/y) + x_o - x \\ \frac{dy}{d\tau} &= y_o - y + c_1 x \cdot \exp(-1/y) - c_2 \cdot (y - z) \\ \frac{dz}{d\tau} &= c_3 \cdot (z_{jo} - z) + c_4 \cdot (y - z) \end{aligned} \quad (14)$$

siendo:

$$\begin{aligned} c_o &= \frac{V\alpha}{F_o} ; c_1 = \frac{VRH\alpha}{F_o E \rho c_p} \cdot C_{aor} \\ c_2 &= \frac{UA}{\rho c_p F_o} ; c_3 = \frac{VF_j}{V_j F_o} ; c_4 = \frac{VUA}{V_j \rho_j c_{pj} F_o} \end{aligned} \quad (15)$$

constantes adimensionales

Las ecuaciones (14) se pueden simplificar si se considera despreciable la dinámica de la camisa, para lo cual se elimina la variable z

entre las ecuaciones (14), con lo cual se obtiene el modelo simplificado:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= -c_o x \cdot \exp(-1/y) + x_o - x \\ \frac{dy}{d\tau} &= c_1 x \cdot \exp(-1/y) - \beta \cdot (y_{or} - z) \end{aligned} \quad (16)$$

siendo:

$$y_{or} = \frac{y_o + c_o z_{jo}}{\beta} ; \beta = 1 + \frac{c_2 c_3}{c_3 + c_4} \quad (17)$$

Las ecuaciones (16) son muy útiles para estudiar el comportamiento auto-oscilatorio como se verá en el próximo apartado.

Es conocido que un sistema con no-linealidades si se somete a perturbaciones externas de tipo oscilatorio puede dar lugar a comportamiento caótico. Ejemplos son los osciladores de Duffing, Van der Pool, o el péndulo viscoso con par exterior forzado de tipo senoidal [2],[7]. Con objeto de investigar el comportamiento caótico el estado estacionario correspondiente al punto P3 se perturba introduciendo en las ecuaciones (14) o (16) perturbaciones senoidales en la temperatura adimensional de entrada y_o y en el caudal de refrigeración F_j de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} y_o &\rightarrow y_o + \frac{RA_t}{E} \cdot \text{sen } \omega\tau \\ F_j &\rightarrow F_j + A_f \cdot \text{sen } \omega\tau \end{aligned} \quad (18)$$

Siendo A_t y A_f las amplitudes de las perturbaciones en la temperatura de la corriente de entrada y en el caudal respectivamente, y ω la pulsación angular adimensional. Teniendo en cuenta los razonamientos similares a los que se exponen en [2], es posible argumentar que para ciertos valores de las magnitudes anteriores aparece un conjunto que es isomorfo a un conjunto herradura de tipo Smale, que da lugar a atractores extraños.

Con objeto de caracterizar estos atractores se simula el comportamiento de los sistemas (14) o (16) para determinar los exponentes de Lyapunov utilizando el algoritmo de Benettin [1]. Puesto que el sistema es disipativo, se determina la divergencia media del vector campo y se comprueba que coincide muy aproximadamente con la suma de los exponentes de Lyapunov cambiados de signo:

$$\text{div}(\vec{f}) = -\sum_i \lambda_i \quad (19)$$

La demostración de (19) se puede encontrar en [2].

Los resultados obtenidos para el sistema definido por las ecuaciones (1), (2), (3) y (18) se indican a continuación. Los valores de las perturbaciones son: $A_i = 200$ °R, $A_f = 30$ ft³/h, $\omega = 5$ rad/(unidad adimensional tiempo).

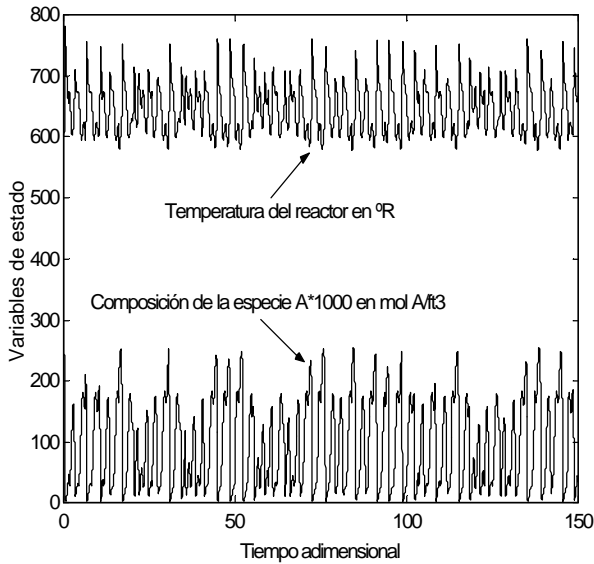


Figura 3. Oscilaciones caóticas

En la figura 3 se observa que el comportamiento caótico se obtiene para temperaturas próximas a las del punto P3 de la figura 1, o sea para altas temperaturas y baja concentración del componente A.

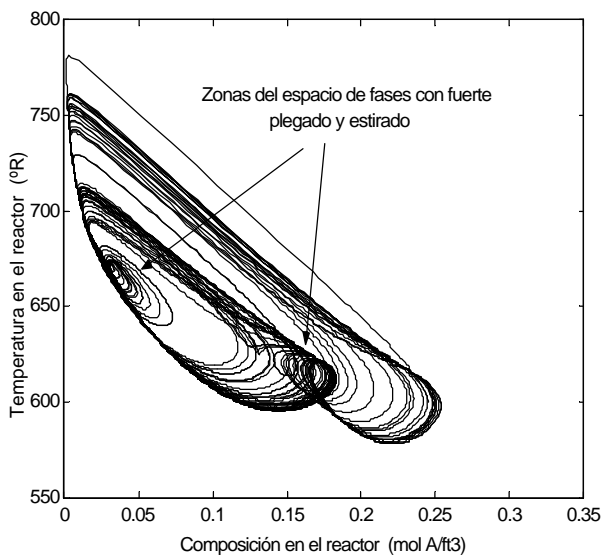


Figura 4. Atractor extraño en el plano x-y

En la figura 4 se muestra el atractor extraño en el plano composición del reactor de la especie A y la temperatura del mismo. Se marcan las zonas de fuerte plegado del espacio de fases. La ampliación de estas zonas revela la presencia de un conjunto de Cantor con la propiedad característica de auto-similaridad.

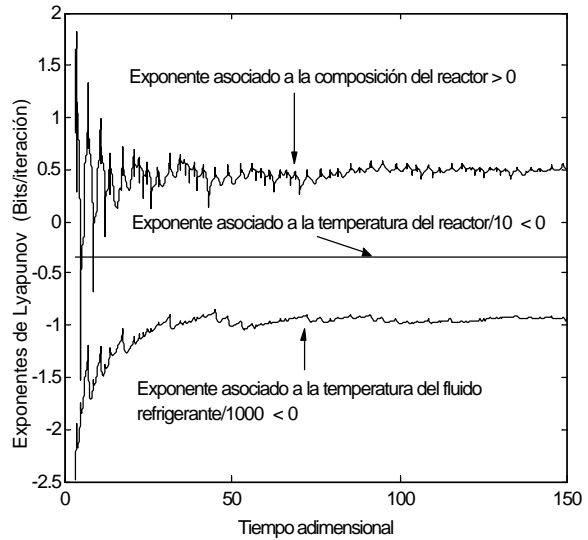


Figura 5. Exponentes de Lyapunov

En la figura 5 se muestra el resultado obtenido del cálculo de los exponentes de Lyapunov utilizando el algoritmo de Benettin et al. [1]. Se observa que el exponente de Lyapunov asociado a la composición es positivo con un valor próximo a 0.5 en estado estacionario, mientras que los otros exponentes son negativos. El cuarto exponente asociado a la variable periódica es siempre cero y no se ha representado en la figura. El espectro de los exponentes de Lyapunov es de la forma $(-, +, +, -)$, lo cual sugiere la presencia de un atractor extraño. No obstante conviene tener en cuenta que no está demostrado que el hecho de que aparezca un exponente de Lyapunov positivo implique necesariamente la presencia de un atractor extraño.

Con objeto de asegurar que los cálculos son correctos, se ha aplicado la ecuación (19) cuando se alcanza el estado estacionario, obteniéndose los siguientes valores:

$$\text{div}(\vec{f}) = -232.45 ; \sum_i \lambda_i = -237.73$$

que se diferencian en un 2.2%. Hay que tener en cuenta que es necesario utilizar un método de integración muy preciso, ya que los exponentes de Lyapunov de mayor valor se calculan con menor precisión. El método de integración

utilizado ha sido el de Runge-Kutta-Fehlberg con paso de integración $T = 0.0025$ y error global de $O(T^5)$.

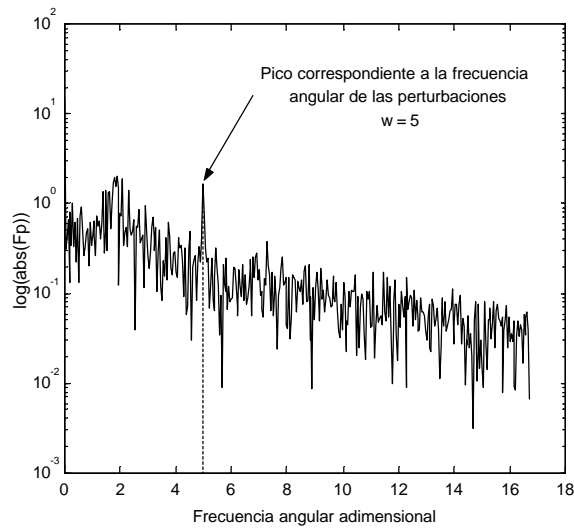


Figura 6. Densidad espectral de potencia

En la figura 6 se muestra la densidad espectral para la composición del reactor. Se comprueba que la forma es la correspondiente a un sistema caótico. En la gráfica se muestra el pico asociado a la frecuencia de las señales perturbadoras definidas en (18).

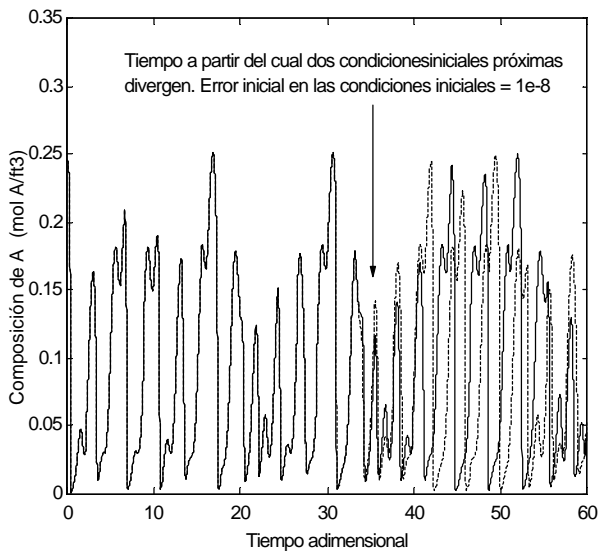


Figura 7. Dependencia sensible

En la figura 7 se ha calculado la respuesta del sistema con dos condiciones iniciales que en el instante inicial se diferencian en 10^{-8} . Se observa que a partir de 50 unidades de tiempo adimensional los valores de la composición del componente A en mol A/ft³ son completamente diferentes. Se comprueba que el reactor, con las perturbaciones definidas en (18) tiene una fuerte dependencia sensible. Todos los resultados anteriores considerados en conjunto llevan a la conclusión de que el sistema es caótico con una familia de atractores extraños. Los diagramas de bifurcación se pueden investigar en función de los parámetros A_t , A_f y ω .

4 COMPORTAMIENTO CAÓTICO A PARTIR DEL REGIMEN AUTO-OSCILANTE

El análisis realizado en el apartado anterior sugiere que si en vez de introducir una doble perturbación periódica, se consigue llevar al reactor a un régimen auto-oscilante, se podría obtener comportamiento caótico con solo una perturbación periódica. Por consiguiente se va a estudiar si es posible el régimen auto-oscilante y bajo qué condiciones puede obtenerse. Las ecuaciones que se van a utilizar son las (16), que aunque son aproximadas, pueden acotar un intervalo de valores para los que se pueda investigar el régimen auto-oscilante. Igualando a cero las derivadas de las ecuaciones (16) se obtienen las siguientes condiciones de equilibrio

$$x^* = \frac{x_o}{1 + c_o \cdot \exp(-1/y^*)} \quad (20)$$

$$y_{or} = y^* - \frac{c_1 x_o}{\beta \cdot (c_o + \exp(-1/y^*))} \quad (21)$$

Siendo x^* , y^* las coordenadas de equilibrio. Si se fijan los valores de los parámetros β , c_o y c_1 la ecuación (21) define una curva de bifurcación. Se puede comprobar que dicha curva puede tener un máximo y un mínimo, cuando se representa y_{or} en función de y^* y del valor de x_o , tal como se muestra en la figura 8. Para un valor de y_{or} , el número de estados de equilibrio depende del número de puntos de corte de la recta $y_{or} = \text{Cte}$ con la curva $y_{or} = f(y^*)$ dada por la ecuación (21). Se puede demostrar que el punto P2 es inestable, mientras que los puntos P1 y P3 son estables.

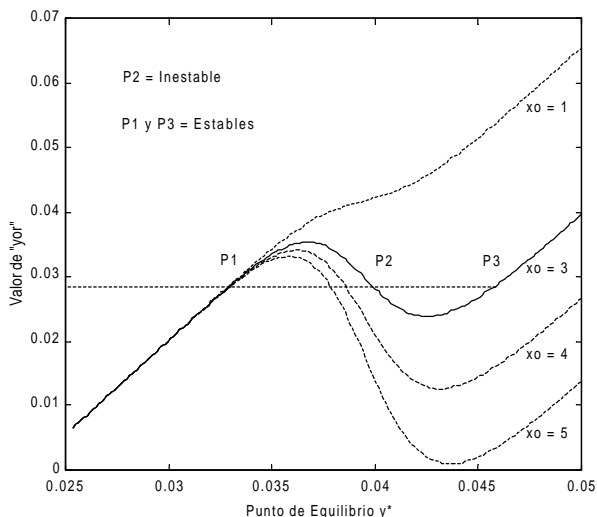


Figura 8. Curvas de bifurcación

Se observa que para un valor dado de x_0 tal que aparezca un máximo y un mínimo, será posible en función de x_0 determinar el máximo de dicha curva a partir de la ecuación (21) sin más que igualar la derivada dy_{or}/dy^* a cero, con lo cual se obtiene:

$$x_0 = \frac{\beta}{c_1} \cdot (y^*)^2 \cdot \exp(-1/y^*) \cdot (c_0 + \exp(1/y^*))^2 \quad (22)$$

Las ecuaciones (21) y (22) representan las curvas de bifurcación en coordenadas paramétricas, en las que el parámetro es y^* . Dando valores a y^* se obtienen los valores de x_0 y y_0 que se pueden representar en el plano x_0 - y_0 , siendo x_0 la composición adimensional y y_0 la temperatura adimensional en la corriente de entrada al reactor.

Por otro lado la naturaleza del punto de equilibrio se puede determinar a partir de los autovalores del jacobiano del sistema (16) linealizado en el punto de equilibrio (x^*, y^*) , que se puede escribir de la forma:

$$J = \begin{bmatrix} -1 - c_0 \cdot e^{-1/y^*} & -c_0 \cdot \frac{x^*}{(y^*)^2} \cdot e^{-1/y^*} \\ e^{-1/y^*} & \frac{x^*}{(y^*)^2} \cdot e^{-1/y^*} - \beta \end{bmatrix} \quad (23)$$

La condición de que los autovalores de J sean reales y distintos da lugar a las ecuaciones deducidas anteriormente (21) y (22). De igual forma imponiendo la condición de que los

autovalores sen complejos conjugados, se obtiene otra ecuación para x_0 dada por:

$$x_0 = \frac{c_0 (y^*)^2}{c_1} \left[2 + \beta + \left(\frac{1 + \beta}{c_0} \right) \cdot e^{1/y^*} + c_0 \cdot e^{-1/y^*} \right] \quad (24)$$

La ecuación (24) junto con la (21) definen en el plano x_0 - y_0 otra curva que representa los valores límites de la composición y de la temperatura de entrada para las cuales el reactor alcanza el régimen auto-oscilatorio. En la figura 9 se muestran las dos curvas obtenidas anteriormente a partir de las ecuaciones paramétricas (21)-(22) y (21)-24 con parámetro y^* y una concentración inicial en el reactor de 0.5 mol A/ft³.

Se comprueba que en la zona interior del lóbulo representa los valores de la temperatura y de la composición de la corriente de entrada para los cuales el reactor auto-oscila.

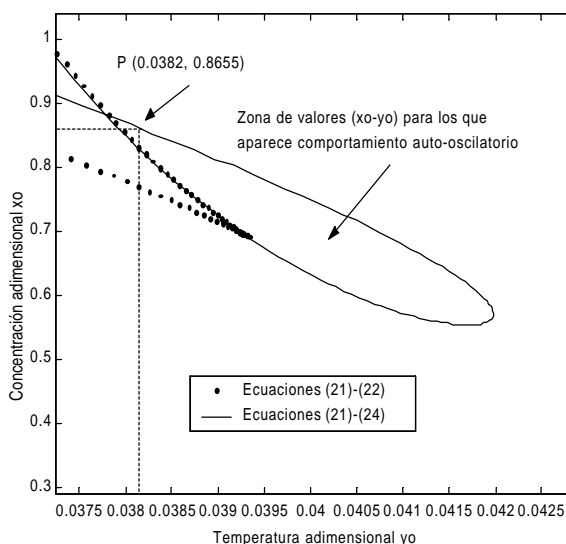


Figura 9. Curvas frontera ($C_{aor} = 0.5 \text{ mol A/ft}^3$)

Con relación a la figura 9 es necesario tener en cuenta que es posible que con valores fuera del lóbulo, se obtenga un punto de equilibrio inestable que haga que el sistema evolucione hacia un ciclo límite. En tal caso, también se obtendría un comportamiento auto-oscilante. Sin embargo, se puede estar seguro de que para valores de x_0 , y_0 dentro del lóbulo se obtienen las auto-oscilaciones.

Una vez que el reactor está en régimen auto-oscilante se puede investigar bajo qué tipo de perturbaciones externas es posible obtener comportamiento caótico, y caracterizar el

posible atractor extraño de la misma forma que se hizo en el apartado anterior.

Si se utilizan las ecuaciones (16) para las que se ha obtenido la figura (9), cualquier valor dentro del lóbulo es adecuado. Pero si se emplean las ecuaciones del reactor (14) sin despreciar la dinámica de la camisa hay que asegurarse de que con los valores de x_0 - y_0 seleccionados se alcanza el régimen auto-oscilante.

Se ha encontrado que variando senoidalmente el caudal de fluido refrigerante de la forma indicada en la ecuación (18) es posible encontrar comportamiento caótico. El razonamiento cualitativo por el que se puede argumentar la presencia de horseshoes es similar al realizado en [2], [4], [7]. Para los valores indicados en el punto P del contorno de la figura 9, con un caudal de perturbación $A_f = 20 \text{ ft}^3/\text{h}$ y una frecuencia angular adimensional $\omega = 6.5$ se obtiene para el modelo definido por las ecuaciones (14) la siguiente respuesta temporal.

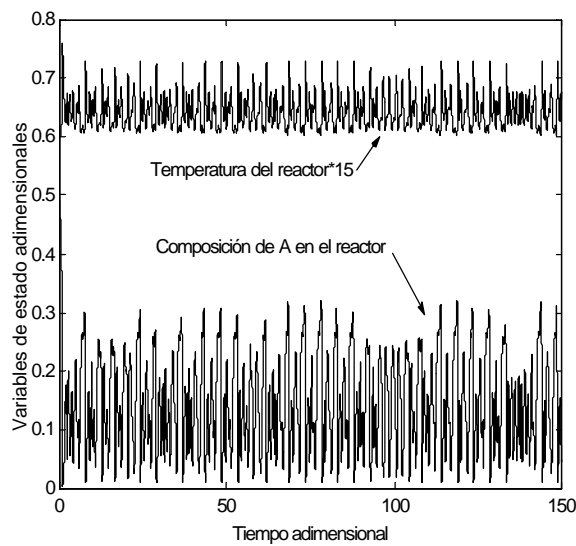


Figura 10. Respuesta temporal caótica

En la figura 11 se muestra al atractor extraño obtenido para el modelo de reactor dado por las ecuaciones (16). Similares atractores se obtienen para el modelo definido por las ecuaciones (14) que considera la dinámica de la camisa no despreciable. En la figura se indican el fuerte plegado del espacio de fases. La ampliación de las zonas indicadas vuelve a mostrar la propiedad de auto-similaridad, haciéndose evidente la presencia de horseshoes.

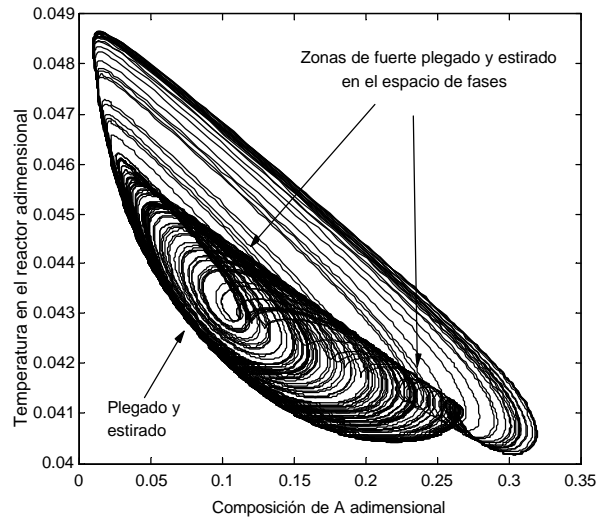


Figura 11 Atractor extraño modelo (16)

Para valores de x_0 y y_0 dentro del lóbulo de la figura 9, también se han encontrado familias de atractores extraños para otros valores de la amplitud de perturbación del caudal de refrigerante y de la frecuencia angular.

En la figura 12 se muestran los exponentes de Lyapunov, apareciendo un espectro típico de un sistema caótico (-,+,0).

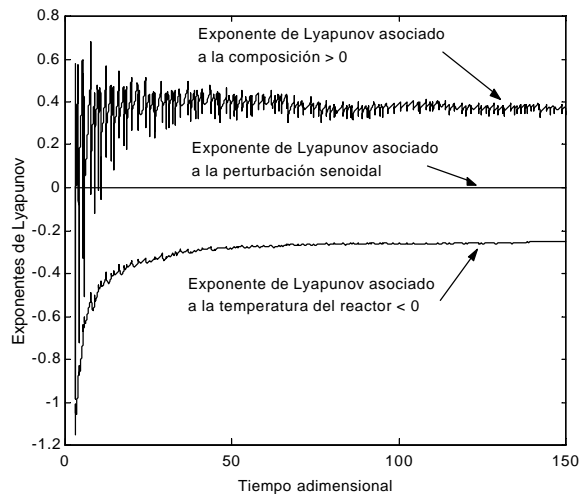


Figura 12. Exponentes de Lyapunov

El exponente asociado a la temperatura se ha escalado dividiéndolo por 20 a fin de comparar con el exponente positivo.

En la figura 13 se muestra una fuerte dependencia sensible, lo cual demuestra que se ha identificado un nuevo atractor extraño. El cálculo de la densidad espectral de potencia confirma los resultados anteriores.

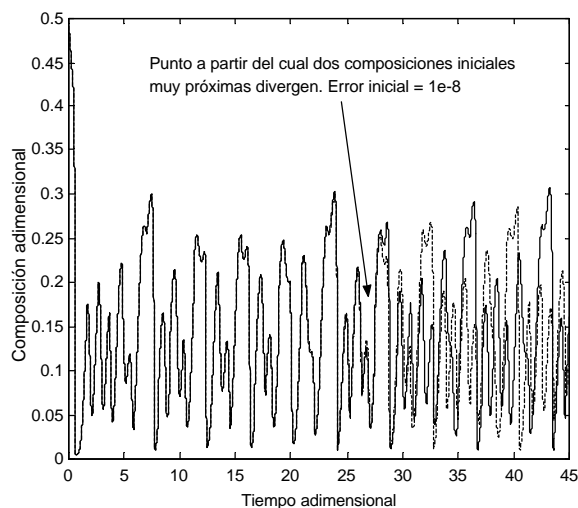


Figura 13. Dependencia sensible

Con un error mayor en las condiciones iniciales se ha comprobado que la divergencia puede aparecer a las dos horas de iniciarse la operación de carga del reactor, lo cual supone un tiempo del orden del que el reactor necesita para alcanzar el estado estacionario.

5 CONCLUSIONES

En este trabajo se ha presentado el estudio de un reactor continuo agitado tipo tanque en régimen de autorregulación en el que se da una reacción exotérmica de primer orden. Se han analizado las condiciones bajo las cuales el reactor puede funcionar normalmente, en régimen auto-oscilatorio y en régimen caótico. Se han aclarado los mecanismos que dan lugar al comportamiento caótico a partir de las ecuaciones del sistema y de las ecuaciones del modelo simplificado en el que se desprecia la dinámica de la camisa. Se comprueba que por lo menos hay dos mecanismos que dan lugar al caos. La aparición de atractores extraños se ha estudiado a partir del comportamiento cualitativo de las ecuaciones del sistema, de la determinación de los exponentes de Lyapunov y de la dependencia sensible respecto a dos condiciones iniciales muy próximas.

La ampliación del estudio anterior para reacciones de cualquier orden, e incluso a reacciones paralelas o consecutivas puede dar lugar a la aparición de nuevos fenómenos caóticos, sobre todo si se consideran efectos de heterogeneidad debido a un mezclado imperfecto.

Otro aspecto es el hecho de que el reactor con un sistema de control externo para controlar el volumen y la temperatura, formado por reguladores PI, da lugar a un sistema multivariable no lineal en el que aparecen auto-oscilaciones caóticas. Este problema ha sido investigado por el autor, demostrando que el caos aparece como consecuencia de la aparición de órbitas tipo Silnikov.

Aún más interesante puede ser la situación en que con técnicas de control no lineal, siempre que el sistema tenga dinámica interna asociada, y las dimensiones de esta dinámica sean las adecuadas, es posible conjeturar que bajo ciertas condiciones el sistema controlado tendrá ciertas variables de estado que presenten oscilaciones caóticas.

REFERENCIAS

- [1] Benettin, G, Galgani, L., Strelcyn, J-M, (1980) "Lyapunov characteristic exponents for smooth dynamical systems and for Hamiltonian systems: a method for computing all of them". *Meccanica*, Vol. 15, pp 9.
- [2] Guckenheimer, J., Holmes, P., (1983). *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*. Springer-Verlag, New York.
- [3] Kevrekidis, I.G., Aris, R., Schmidt, L.D., (1986). "The Stirred Tank Forced". *Chem. Eng. Sci.*, Vol 41, pp 1549.
- [4] Lorenz, E.N., (1995). *The Essence of Chaos*, University Washington Press.
- [5] Luyben, W.L. (1990). *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*, McGraw-Hill, New York.
- [6] Ray, W.H. (1981). *Advanced Process Control*. McGraw-Hill, New York.
- [7] Seydel, L.P., (1994). *Practical Bifurcation and Stability Analysis From Equilibrium to Chaos*, Springer-Verlag, New York.