

# Jornadas de Automática

## Desarrollo y calibración de un modelo matemático para control predictivo del proceso de esterilización térmica de alimentos sólidos

Novoa, M.<sup>a</sup>, Pitarch, J.L.<sup>b</sup>, Antelo, L.T.<sup>a</sup>, Vilas, C.<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup>Grupo de Biosistemas e Ingeniería de Bioprocesos, IIM-CSIC, C/ Eduardo Cabello, 6, 36208, Vigo, España

<sup>b</sup>Control de Sistemas Complejos, Instituto de Automática e Informática Industrial (ai2), Universitat Politècnica de València, Valencia 46022, Spain

**To cite this article:** Novoa, M., Pitarch, J.L., Antelo, L.T., Vilas, C. 2024. Development and calibration of a mathematical model for the predictive control of the solid food sterilization process. *Jornadas de Automática*, 45. <https://doi.org/10.17979/ja-cea.2024.45.10915>

### Resumen

La esterilización de alimentos envasados es uno de los procesos más utilizados para incrementar la vida útil de productos de la industria alimentaria. Sin embargo, es un proceso que consume energía y tiempo y que, si no se lleva a cabo de forma adecuada, puede resultar en productos inseguros o de baja calidad. El modelado matemático y la optimización de procesos son herramientas útiles para evitar estos problemas. En este trabajo proponemos un nuevo modelo matemático para la descripción del proceso de esterilización de alimentos envasados en autoclaves de vapor. Respecto a los modelos existentes en la literatura nuestra alternativa presenta dos claras ventajas. Por una parte, es capaz de describir los siguientes fenómenos físicos: (i) cambios de estado discretos derivados de condiciones de no equilibrio entre agua y vapor mediante la ecuación de Fischer-Burmeister; (ii) entrada de aire por la purga; y (iii) salida de gases (vapor y aire) por el drenaje. Por otra parte, la simulación del modelo es eficiente lo que permite que pueda ser usado en un esquema de control predictivo no lineal basado en modelos, lo que requiere resolver problemas de optimización dinámica en línea, con periodos inferiores a 5 segundos. Además, estimamos los parámetros desconocidos del modelo a partir de datos experimentales.

**Palabras clave:** Modelado matemático, Estimación de parámetros, Fischer-Burmeister, Equilibrio líquido-vapor, Autoclave de vapor

### Development and calibration of a mathematical model for the predictive control of the solid food sterilization process

#### Abstract

Sterilization of packaged foods is one of the most widely used processes to increase the shelf life of products in the food industry. However, it is an energy- and time-consuming process that, if not carried out properly, can result in unsafe or low-quality products. Mathematical modeling and process optimization are useful tools to avoid these problems. In this work, we propose a new mathematical model for the description of the sterilization process in steam retorts. Regarding the existing models in the literature, our alternative has two clear advantages. On the one hand, it is capable of describing the following physical phenomena: (i) discrete changes in the states derived from steam-water non-equilibrium conditions using the Fischer-Burmeister equation; (ii) air entry through the purge; and (iii) gas exit through the drain. On the other hand, the simulation of the model is efficient so that it can be used in the framework of model-based nonlinear predictive control, which requires solving on-line dynamic optimization problems with periods of less than 5 seconds. In addition, we estimate the model unknown parameters from experimental data.

**Keywords:** Mathematical modelling, Parameter estimation, Fischer-Burmeister, Liquid-vapor equilibrium, Steam retort

## 1. Introducción

El objetivo principal del proceso de esterilización de alimentos envasados es la eliminación de las bacterias que suponen un riesgo para la salud de los consumidores. Para ello, se utilizan unidades de operación (autoclaves) en los que se somete al alimento a temperaturas de entre 100 y 130 °C durante un periodo de tiempo suficiente para garantizar la seguridad del mismo. Dicho periodo varía en función de aspectos como la temperatura del proceso, el tamaño del envase, la calidad final deseada, o el tipo de bacterias presentes, entre otros (Casp and Abril, 2003).

La utilización de modelos matemáticos que describen la evolución de las variables relevantes (temperatura, presión, calidad y seguridad del producto, consumo de recursos como agua y energía, entre otros) permite la mejora del proceso. En este sentido, dichos modelos pueden utilizarse para mejorar el diseño de los autoclaves donde se lleva a cabo la esterilización, u optimizar las políticas de operación del proceso (Pitarch et al., 2021).

La mayoría de trabajos enfocados al desarrollo de modelos para el proceso de esterilización se centran en la parte del producto (Erdogdu and Balaban, 2003; Simpson and Abakarov, 2011) obviando las dinámicas que ocurren en el autoclave, y asumiendo que el control de la temperatura en el mismo es perfecto. Sin embargo, el modelado matemático de las dinámicas del autoclave es de vital importancia para entender problemas que puedan surgir durante el proceso, para diseñar esquemas avanzados de control, para minimizar consumos de recursos, o para reaccionar ante comportamientos no esperados, entre otros. En el campo del modelado de las dinámicas del autoclave, el grupo de Alonso y col. ha sido el más activo (Alonso et al., 1997; Vilas et al., 2008; Alonso et al., 2013) desarrollando un modelo capaz de reproducir el comportamiento del proceso satisfactoriamente. No obstante, las ecuaciones diferenciales algebraicas (DAE, por sus siglas en inglés) seleccionadas para describir este sistema conducen a que aparezca índice superior, lo que dificulta su uso en esquemas de control predictivo debido a la gran carga computacional que supone su resolución. Además, este modelo no considera ciertas situaciones, observadas en distintos experimentos realizados en una planta piloto, como: (i) que el sistema pueda estar fuera del equilibrio líquido-vapor durante un cierto tiempo; (ii) la salida de gases por el drenaje cuando la cantidad de agua en el autoclave es prácticamente nula; (iii) la entrada de aire por la válvula de purga cuando hay una caída de presión en el autoclave que hace que sea menor que la presión atmosférica.

En este trabajo proponemos un nuevo modelo matemático para la descripción de las variables relevantes del proceso de esterilización de alimentos sólidos envasados que resuelve los principales problemas encontrados en las alternativas desarrolladas en la literatura. En este sentido, nuestro modelo:

1. Ya que las ecuaciones consideradas no resultan en un problema de índice superior, puede ser utilizado eficientemente en esquemas de optimización dinámica en tiempo real, por ejemplo para control predictivo basado en modelos. Para ello, en lugar de considerar directamente los procesos de condensación y evaporación que ocurren en el interior del autoclave, planteamos un balance de masa total, en lugar de las masas de agua, aire y vapor por separado.

2. Permite simular situaciones donde el sistema no esté en equilibrio líquido-vapor (p.ej. si se drena toda el agua que condensa). Para ello, introducimos variables de holgura en el cálculo de la presión de vapor, y dichas variables se restringen a las condiciones de cambio de estado mediante la ecuación de Fischer-Burmeister (Stechlinski et al., 2018). En particular, utilizamos una versión aproximada de la misma para suavizar discontinuidades convenientemente.
3. Considera la posible salida de gases por el drenaje cuando no hay agua en el autoclave. Para ello, también es necesario modelar la discontinuidad que se da cuando deja de haber agua en el autoclave. En este caso, proponemos usar la función sigmoide para suavizar dicha discontinuidad.

Por último, se ha llevado a cabo la estimación de los parámetros desconocidos del modelo a partir de datos experimentales.

## 2. Modelo matemático del autoclave

### 2.1. Descripción de la planta piloto y del proceso

Existen distintos tipos de autoclaves para llevar a cabo el proceso de esterilización. En este caso consideramos el autoclave de vapor alojado en las instalaciones del IIM-CSIC, cuyo esquema se muestra en la Figura 1. El incremento de temperatura se logra introduciendo vapor de agua saturado proveniente de una caldera. La operación de la planta se lleva a cabo mediante la manipulación de 3 válvulas de regulación neumática (entrada de vapor, aire comprimido, y purga de gases) y dos válvulas de apertura motorizada (drenaje de agua y entrada de agua de enfriamiento).

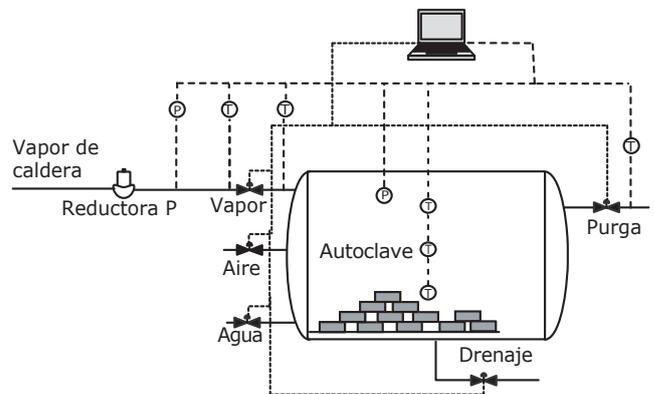


Figura 1: Esquema general de la planta piloto de esterilización de alimentos del IIM-CSIC.

En lo que se refiere al proceso de esterilización, típicamente consta de tres etapas:

- **Venteo.** Esta etapa tiene dos objetivos: eliminar el aire que hay en el autoclave (incrementando la transferencia de calor con el producto) y elevar la temperatura hasta la consigna. Para ello, se abre completamente la válvula de entrada de vapor mientras. Las válvulas de purga (que permite la salida de gases del autoclave) y drenaje (que permite la salida de agua condensada) se mantienen abiertas, aunque no del

todo para asegurar que la temperatura se incrementa rápidamente. Esta etapa finaliza cuando se termina de expulsar todo el aire del interior del autoclave.

- **Calentamiento.** En esta etapa se busca la desactivación de la bacterias que puedan resultar dañinas. Para ello, el alimento se somete a un cierto perfil tiempo-temperatura mediante la manipulación de la válvula de vapor. Para mejorar la eficiencia, la válvula de purga suele estar cerrada, mientras que el drenaje se mantiene parcialmente abierto, evitando así que se acumule agua condensada en el autoclave.
- **Enfriamiento.** El objetivo es bajar rápidamente la temperatura para evitar que la calidad del producto se degrade excesivamente por un exceso de tratamiento. Esto se consigue introduciendo agua a temperatura ambiente. Para evitar caídas de presión fuertes (debidas a la condensación de vapor) que dañen los envases, se introduce aire.

Antes de la válvula de entrada de vapor se instaló una válvula reductora que permite estabilizar la variación de presión de la caldera (entre 5 y 8 bar) a unos 3.5 bar. La planta cuenta, además con una serie de sensores que permiten registrar datos de distintas variables con una frecuencia determinada, en este caso 5 segundos. En este sentido, para mediciones de temperatura la planta cuenta con 6 sensores PT100: tres de ellos dentro del autoclave, otros dos, respectivamente, antes y después de la válvula de vapor, y otro después de la válvula de purga. Además, hay un sensor de presión en la válvula reductora y otro en el interior del autoclave. Estas medidas se guardan automáticamente en una base de datos. La descripción completa de la planta se puede consultar en Alonso et al. (2013).

### 2.2. Modelo matemático

La Tabla 1 muestra el valor de los parámetros utilizados en el modelo.

El modelo desarrollado en este trabajo para el proceso de esterilización en autoclave de vapor consta de:

- 3 ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) que describen la evolución de temperatura, masa total y masa de aire
- 3 ecuaciones que provocan la existencia de lazos algebraicos. Una de ellas permite calcular la masa de agua condensada o la de vapor. Las otras dos permiten implementar el autómata híbrido que posibilita el cambio entre las 3 fases discretas: (i) equilibrio líquido-vapor, (ii) solamente vapor, (iii) solamente agua.
- Varias ecuaciones algebraicas explícitas que describen principalmente los flujos a través de las válvulas.

Cabe destacar que en este trabajo el foco se ha puesto en la descripción del autoclave, sin considerar el producto a esterilizar.

Empezaremos la descripción del modelo por los balances de masa de aire  $m_a$  y masa total ( $M = m_a + m_w + m_s$ ), donde  $m_w$  y  $m_s$  representan las masas de agua y vapor, respectivamente. En la Figura 1 se puede ver que dichos balances llevan a las siguientes ecuaciones:

$$\frac{dm_a}{dt} = F_a^i + F_b^i - x_a F_b^o - x_a F_{sad}^o \quad (1)$$

Tabla 1: Descripción de los parámetros del modelo del autoclave.

Par.	Valor	Unidades	Descripción
<i>Parámetros del autoclave</i>			
$V_T$	0.30	$m^3$	Volumen del autoclave
$m_r c_{p,r}$	a estimar	$JK^{-1}$	Masa del autoclave por calor específico carcasa
$r$	0.33	$m$	Radio del autoclave
$L$	1.10	$m$	Longitud del autoclave
$A_r$	3.10	$m^2$	Área del autoclave
$\theta$	$5.67 \times 10^{-8}$	$Wm^{-2}K^{-4}$	Cte de Stefan-Boltzman
$\eta$	0.99	-	Emisividad térmica
$h_r$	a estimar	$Wm^{-2}K^{-1}$	Coef. de transferencia de calor
<i>Parámetros de válvula</i>			
$C_f$	0.92	-	Factor de flujo crítico
$G_f$	1.00	-	Gravedad específica del gas
$c_{v,s}$	a estimar	-	Característica v. vapor
$c_{v,b}$	a estimar	-	Característica v. purga
$c_{v,a}$	5.00	-	Característica v. aire
$c_{v,sad}$	a estimar	-	Característica v. drenaje
$A_w$	$3.93 \times 10^{-5}$	$m^2$	Sección válvula agua
$A_d$	a estimar	$m^2$	Sección válvula drenaje
<i>Parámetros termodinámicos</i>			
$R_s$	461.89	$JK^{-1}kg^{-1}$	Cte. gases ideales por unidad de masa molecular de agua
$R_a$	287.68	$JK^{-1}kg^{-1}$	Cte. gases ideales por unidad de masa molecular de aire
$A$	23.48	-	Parámetro ley Antoine
$B$	-3984.80	-	Parámetro ley Antoine
$C$	39.72	-	Parámetro ley Antoine
$P_{atm}$	101325.00	Pa	Presión atmosférica
$\rho_w$	1000.00	$kgm^{-3}$	Densidad del agua
$c_{p,w}$	4183.00	$JK^{-1}kg^{-1}$	Calor específico agua
$c_{p,a}$	1010.00	$JK^{-1}kg^{-1}$	Calor específico aire
$c_{p,s}$	2200.00	$JK^{-1}kg^{-1}$	Calor específico vapor

$$\frac{dM}{dt} = F_w^i + F_s^i + F_a^i - F_b^o + F_b^i - F_d^o - F_{sad}^o \quad (2)$$

donde los caudales  $F_w^i$ ,  $F_s^i$ ,  $F_a^i$  y  $F_b^i$  representan los flujos de entrada a través de las válvulas de agua, de vapor, de aire y purga, respectivamente.  $F_d^o$  y  $F_{sad}^o$  son los flujos de salida de agua condensada y gases (vapor y aire) a través de la válvula de drenaje, y  $F_b^o$  es el flujo saliente de gases a través de la purga.  $x_a$  y  $x_s$  son la fracción de aire y vapor presentes en el autoclave, respectivamente, cumpliendo  $x_a + x_s = 1$ . Como se puede ver en las ecuaciones anteriores, este modelo permite la entrada de aire a través de la purga y salida de gases a través del drenaje. Ambos fenómenos han sido observados en la instalación experimental.

Los flujos aire y vapor a través de las válvulas vienen descritos por ecuaciones de la forma (Smith and Corripio, 2005):

$$F_x^k = 3.4 \times 10^{-8} c_{v,x} u_x C_f P_i \sqrt{G_f} (\omega_x - 0.148 \omega_x^3) \quad (3)$$

$$\omega_x = \frac{1.63}{C_f} \sqrt{\frac{P_{in} - P_{out}}{P_{in}}}$$

Donde el superíndice  $k$  indica dirección de flujo ( $i$  para entrada en el autoclave, y  $o$  para salida) y  $x$  indica la válvula asociada al flujo ( $s$  para vapor,  $a$  para aire, y  $b$  para purga).  $P_{in}$  y  $P_{out}$  son las presiones en la entrada y salida de la válvula en cuestión. El grado de apertura de las válvulas se representa por  $u_x \in [0, 1]$ .

Nótese que para describir la salida de gas a través del drenaje hay que modelar una discontinuidad ya que, al estar éste instalado en el fondo del autoclave, solamente puede salir gas si no hay agua. Se ha seleccionado la función sigmoide con punto de inflexión  $\kappa \rightarrow 0^+$  y elevada pendiente definida por  $\sigma$  para suavizar esta discontinuidad y posibilitar la resolución del modelo en tiempo real:

$$\begin{aligned} F_{sad}^{max} &= 3.4 \times 10^{-8} c_{v,sad} u_d C_f P_T \sqrt{G_f} (\omega_{sad} - 0.148 \omega_{sad}^3) \\ F_{sad}^o &= (1 - \text{sigmoide}(m_w, \kappa, \sigma)) F_{sad}^{max} \end{aligned} \quad (4)$$

Los flujos de entrada y salida de agua se describen usando la siguiente ecuación:

$$F_y = A_y u_y \rho_w \sqrt{\frac{2(P_{in} - P_{out})}{\rho_w}} \quad (5)$$

Donde  $y$  denota la válvula,  $d$  para drenaje y  $w$  para agua fría. Además, considerando la presión en la válvula de drenaje como la del gas en el autoclave más el peso del agua condensada que pueda existir, se tiene que:

$$\begin{aligned} F_d^{max} &= A_d u_d \rho_w \sqrt{\frac{2(P_T - P_{atm})}{\rho_w} + 2 \cdot 9.8 l_w} \\ F_d^o &= \text{sigmoide}(m_w, \kappa, \sigma) F_d^{max} \end{aligned} \quad (6)$$

Siendo  $l_w$  la altura de la columna de agua en metros, la cual se calcula por trigonometría a partir de  $m_w$ ,  $V_T$ , y las dimensiones de la sección del autoclave cilíndrico. Fórmulas omitidas por brevedad. La presión total ( $P_T$ ) se calcula como la suma de las presiones de aire ( $P_a$ ) y vapor ( $P_s$ ). Se asume que tanto el aire como el vapor se comportan como gases ideales:

$$P_x V_l = m_x R_x T_r; \quad V_l = V_T - \frac{m_w}{\rho_w} \quad (7)$$

Considerando el autoclave como volumen de control y asumiendo uniformidad (equilibrio térmico) en la temperatura ( $T_r$ ), el balance de energía global resulta en la siguiente EDO:

$$\begin{aligned} (\Psi_s + \Psi_a + \Psi_w + \Psi_r) \frac{dT_r}{dt} &= -(Q_{con} + Q_{rad}) + F_s^i h_s + \\ F_a^i h_a + F_w^i (h_w - c_{p,w}(T_r - T_w)) - F_b^o (x_s h_s + x_a h_a) + \\ F_b^i h_a - F_d^o h_w - F_{sad}^o (x_s h_s + x_a h_a) \end{aligned} \quad (8)$$

los términos a la izquierda de la igualdad representan las energías acumuladas por el vapor, el agua, y el aire, y el calor absorbido por la carcasa metálica. Siendo:

$$\Psi_x = m_x (c_{p,x} - R_x); \quad \Psi_y = m_y c_{p,y} \quad (9)$$

$x$  representa vapor ( $s$ ) o aire ( $a$ ) e  $y$  se refiere al agua ( $w$ ) o a la carcasa metálica ( $r$ ). Las pérdidas de calor al exterior por convección y radiación y tienen las siguientes expresiones:

$$Q_{con} = h_r A_r (T_r - T_{ext}); \quad Q_{rad} = \theta \eta A_r (T_r^4 - T_{ext}^4) \quad (10)$$

Nótese que los flujos de energía en (8) se calculan usando las entalpías específicas del agua  $h_w$ , aire húmedo  $h_a$  y vapor saturado  $h_s$ . Además, para el flujo de agua fría, se ha restado el calor necesario para calentarla a la temperatura del autoclave,

ya que se asume equilibrio térmico en el interior. Las temperaturas del aire y agua entrantes ( $T_a$ ,  $T_w$ ) se asumen iguales a la temperatura ambiente  $T_{ext}$ . La masa total ( $M$ ) en el autoclave debe de ser igual a la suma de las masas de agua, vapor, y aire. Esto se impone mediante la siguiente ecuación algebraica:

$$M - m_w - m_s - m_a = 0 \quad (11)$$

En la fase de equilibrio agua-vapor, la presión de vapor sigue la conocida fórmula de Antoine:

$$P_{eq} = \exp\left(A + \frac{B}{T_r - C}\right) \quad (12)$$

Sin embargo, cuando el autoclave se queda sin agua, el sistema ya no está en equilibrio siendo  $P_s < P_{eq}$ . Análogamente, en una situación de ausencia de vapor bien por total condensación/purga o bien por inundación con agua de enfriamiento, el sistema tampoco está en equilibrio, siendo  $P_s > P_{eq}$ . Nótese que, fuera de la fase de equilibrio, el modelo matemático ya está completamente determinado sin incluir (12).

Un modelado dinámico clásico por eventos discretos mediante un autómata híbrido presenta serios problemas en este caso, ya que en un instante de tiempo infinitesimal pueden producirse *infinitos* saltos entre las fases de equilibrio y no equilibrio (Stechlinski et al., 2018). Si bien este problema es bien conocido y existen soluciones eficaces para simulación fuera de línea, la mayoría no es aplicable para realizar optimización dinámica en tiempo real. Esto es debido a que todas las formulaciones que logran tiempos de cómputo aceptables para obtener soluciones en tiempo real pasan por utilizar paquetes de diferenciación automática y algoritmos de optimización basados en gradiente (Biegler, 2010). Dichos algoritmos no manejan bien discontinuidades en los modelos, por lo que tratar la aparición de eventos discretos es un reto.

Normalmente, las estrategias existentes para paliar este inconveniente se basan en suavizar las regiones alrededor de las discontinuidades (p.ej. reemplazando condiciones *if-else* por sigmoides, como en (4) y en (6)) logrando así evitar puntos con derivadas infinitas. No obstante, el lector podrá notar que nuestro problema va más allá, ya que aquí se debe “conectar-desconectar” la ecuación (12) del modelo cuando ocurra un cambio de fase, y hacerlo de forma suficientemente suave sin alejarse en exceso de la física real del proceso. La solución que proponemos es introducir unas variables de holgura  $\Delta P$  en el cálculo de la presión de vapor respecto a la de Antoine:

$$P_s = P_{eq} - \Delta P_1 + \Delta P_2 \quad (13)$$

Mediante la asignación (13), si:

- $\Delta P_1 = \Delta P_2 = 0$ , estamos en la fase de equilibrio;
- $\Delta P_1 > 0$  y  $\Delta P_2 = 0$ , estamos en la fase de sólo vapor;
- $\Delta P_1 = 0$  y  $\Delta P_2 > 0$ , estamos en la fase de sólo líquido.

Para hacer cumplir estas condiciones siempre que aparezcan las condiciones para ello, en el modelo incorporamos la restricción suavizada de Fischer-Burmeister (Stechlinski et al.,

2018) como ecuaciones algebraicas:

$$m_w + \frac{\Delta P_1}{P_{atm}} - \sqrt{m_w^2 + \left(\frac{\Delta P_1}{P_{atm}}\right)^2} + \epsilon = 0 \quad (14)$$

$$m_s + \frac{\Delta P_2}{P_{atm}} - \sqrt{m_s^2 + \left(\frac{\Delta P_2}{P_{atm}}\right)^2} + \epsilon = 0 \quad (15)$$

Así, para una tolerancia de suavizado deseada  $\epsilon \rightarrow 0$ , se obliga  $\Delta P_1 = \Delta P_2 \rightarrow 0$  mientras  $m_w$  o  $m_s$  sean distintas de cero. Únicamente cuando  $m_w \rightarrow 0$  o  $m_s \rightarrow 0$ , quedan libres  $dP_1$  o  $dP_2$ , respectivamente, para modificar  $P_s$ . Esto permite calcular la presión adecuada a cada fase sin sacar (12) del modelo. Además, (14)-(15) imponen de facto las restricciones necesarias  $m_w \geq 0$ ,  $m_s \geq 0$ ,  $\Delta P_1 \geq 0$ , y  $\Delta P_2 \geq 0$ .

*Observación.* Este modelo, aunque no calcula flujos de condensación- evaporación, como sí lo hace el modelo descrito en Alonso et al. (1997), no es un sistema DAE de alto índice. Por lo tanto, puede simularse directamente por integradores numéricos con sensibilidades, e.g. IDAS (Hindmarsh et al., 2005), lo que reduce drásticamente el tiempo de cómputo.

### 2.3. Estimación de parámetros del modelo

Los valores de los parámetros de la Tabla 1 han sido extraídos de la literatura o de las especificaciones de la planta. Sin embargo, hay seis parámetros cuyo valor es desconocido y que, por lo tanto, tiene que ser estimado a partir de datos experimentales:  $\theta = \{m_r c_{p,r}, c_{v,s}, c_{v,b}, c_{v,sad}, h_r, A_d\}$ . El problema de estimación de parámetros consiste en encontrar el valor de los mismos que minimice la distancia entre los datos experimentales y las predicciones del modelo. En este caso, se utiliza la raíz del error cuadrático medio (RMSE, por sus siglas en inglés) para medir dicha distancia. Matemáticamente, el problema se expresa como:

$$\min_{\theta} J_{RMSE} := \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (T_i(\theta) - T_i^{exp})^2}{n}} \quad (16)$$

sujeto a las ecuaciones del modelo (1)-(15).  $T_i(\theta)$  y  $T_i^{exp}$  representan, respectivamente, el valor de la temperatura simulada y medida a tiempo  $t_i$ , mientras que  $n$  indica el número de puntos de muestreo de la temperatura del autoclave.

Es habitual que la función objetivo (16) sea multimodal. Por lo tanto, para encontrar el mínimo global, se recurre a un optimizador metaheurístico *Differential evolution* (Storn and Price, 1997), con un refinamiento final mediante un algoritmo local *fminscn* de Matlab. Para resolver el modelo DAE utilizamos el algoritmo *IDAS* (Hindmarsh et al., 2005).

## 3. Resultados

### 3.1. Resultados de simulación

En esta sección ilustramos el comportamiento del modelo mediante una simulación que representa situaciones típicas durante el proceso de esterilización. Los valores de los parámetros se indican en la Tabla 1. Además, se consideró  $c_{v,s} = 3.6$ ,  $c_{v,b} = 10.0$ ,  $c_{v,sad} = 6.0$ ,  $m_r c_{p,r} = 1.0 \times 10^5$  y  $A_d = 3.9 \times 10^{-5}$ . La simulación empieza con una etapa de venteo típica (válvula de vapor totalmente abierta y válvulas

de drenaje y purga parcialmente abiertas). Al finalizar esta etapa, se cierran completamente las válvulas de vapor y purga - ver recuadro negro en Figura 2(a)- con el objetivo de provocar una condensación brusca del vapor que hace que el sistema salga momentáneamente del equilibrio líquido-vapor. Como se puede observar en la Figura 2(b), el modelo es capaz de capturar este comportamiento permitiendo una presión en el autoclave (línea magenta) inferior a la de equilibrio (línea naranja). También se observa un pequeño descenso de la temperatura del autoclave debido al cierre de la entrada de vapor (Figura 2(c)). Durante la fase de calentamiento del autoclave, se introducen una serie de escalones en la válvula de vapor. En esta etapa se ve que la presión del sistema coincide con la presión de equilibrio. Al finalizar el calentamiento, se abre casi por completo la válvula de entrada de agua de enfriamiento (recuadro verde en Figura 2). En esta situación, el autoclave se inunda por completo como se puede ver en la Figura 2(c) provocando una salida del equilibrio líquido-vapor. En la simulación se observa como el modelo responde adecuadamente y la presión total es superior a la de equilibrio -recuadro verde en la Figura 2(b)-.

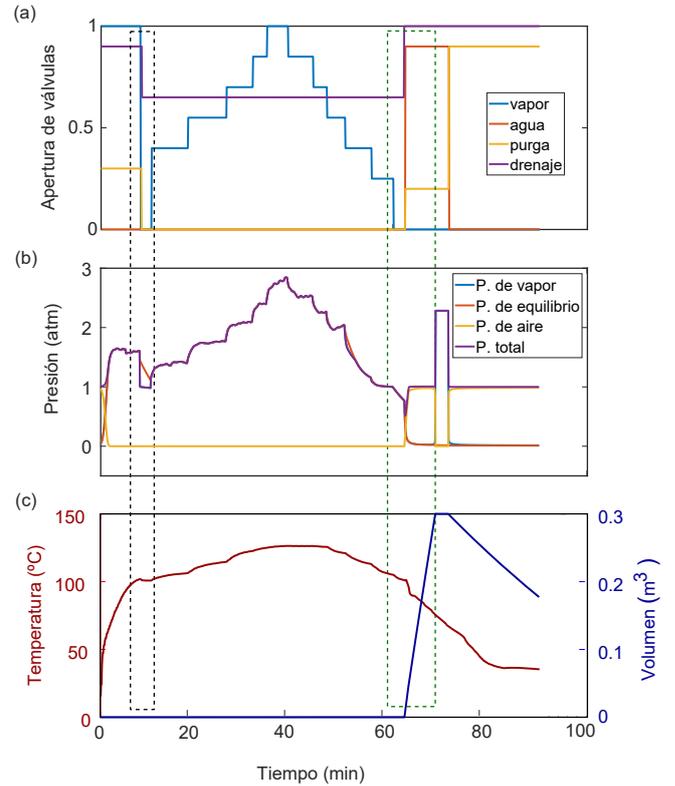


Figura 2: (a) Perfil de las aperturas de las válvulas seleccionado para ilustrar el comportamiento del modelo. Evolución, según el modelo, (b) de las distintas presiones y (c) la temperatura y del volumen de agua.

### 3.2. Resultados de estimación de parámetros

Los datos experimentales necesarios para calcular los valores de los parámetros desconocidos, siguiendo el procedimiento descrito en la sección 2.3, se han obtenido a partir de un experimento en el que se introdujeron varios escalones en la válvula de vapor -ver Figura 3(a)-. La duración de cada escalón fue seleccionada de forma que permitiese al sistema acercarse al estado estacionario. De esta forma, se tienen

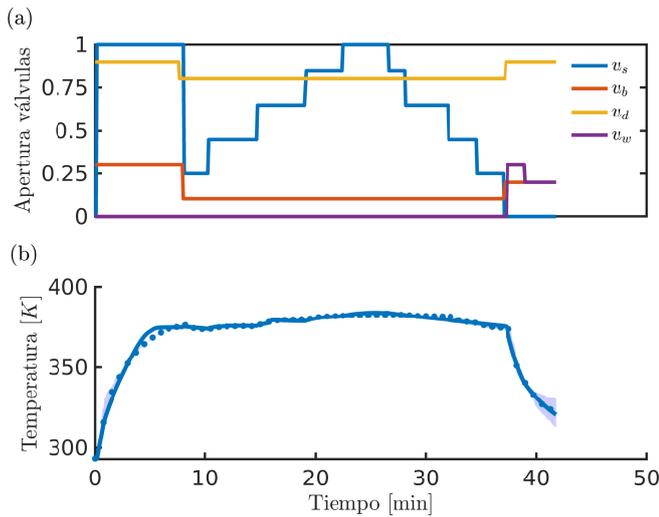


Figura 3: (a) Perfil de apertura de la válvula de vapor. (b) Comparación entre la temperatura medida (puntos) y simulada (líneas continuas).

los datos de la dinámica del proceso sin que haya información repetida (estado estacionario). La etapa de venteo en este experimento se extendió 8 min. Durante el calentamiento, la válvula de purga se mantuvo abierta al 0.1 con el objetivo de estimar el parámetro  $c_{v,b}$ . Los datos de temperatura medidos se corresponden con la media de los tres sensores PT100. La Tabla 2 muestra el resultado del problema de optimización (16) y las cotas para cada parámetro consideradas en dicho problema. Con estos parámetros se obtiene un RMSE (función de coste) de 1.76. La Figura 3(b) muestra que el modelo (línea continua) ajusta satisfactoriamente los datos experimentales (puntos). Las banda azul muestra la desviación estándar entre las tres medidas proporcionadas por las PT100 en cada instante de tiempo. La principales diferencias se concentran en la etapa de venteo, siendo el modelo capaz de representar con precisión la etapa de calentamiento. Debido a que la temperatura en la etapa de venteo es menor que en la de calentamiento, la primera tiene una influencia menor en la calidad y seguridad del producto. Por lo tanto, errores en ella son menos relevantes que en el calentamiento.

Tabla 2: Valores estimados de los parámetros desconocidos del autoclave.

Parámetro	V. Estimado	Rango	Unidades
$m_r c_{p,r}$	$2.40 \times 10^5$	$(0.10-1.00) \times 10^6$	$\text{J K}^{-1}$
$c_{v,s}$	2.01	0.00 -20.00	-
$c_{v,b}$	51.84	0.00 -80.00	-
$c_{v,sad}$	$1.00 \times 10^{-6}$	0.00 -30.00	-
$h_r$	3.71	0.00 -100.00	$\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$
$A_d$	$4.14 \times 10^{-5}$	$(0.50-6.00) \times 10^{-5}$	$\text{m}^2$

#### 4. Conclusiones y trabajo futuro

En este trabajo hemos desarrollado un modelo matemático que permite describir el proceso de esterilización de alimentos en autoclaves de vapor. Dicho modelo es capaz de representar situaciones que se pueden dar durante la operación de la planta como, por ejemplo, que el agua y el vapor no estén en equilibrio durante un periodo determinado, que el autoclave se inunde, o se quede sin agua. Las discontinuidades producidas por los cambios en las distintas situaciones se aproximan

haciendo uso de la ecuación de Fischer-Burnmeister suavizada. Además, el modelo también considera la posibilidad de que entre aire por la purga y que salgan gases por el drenaje. En este último caso usamos la función sigmoide para suavizar la discontinuidad que se da cuando deja de salir agua por el drenaje. Se han estimado los parámetros desconocidos a partir de datos experimentales y se ha comprobado que el modelo es capaz de representar el comportamiento de la planta piloto. Debido a la mejora de la eficiencia de simulación y el manejo de las discontinuidades, este modelo puede usarse en un esquema control predictivo no lineal.

Durante los próximos meses nos centraremos en calibrar de forma robusta el modelo. Para ello, consideraremos más experimentos diseñados de forma óptima para maximizar la información obtenida para estimación de parámetros. También trabajaremos en la descripción del producto y caracterización de la variabilidad e incertidumbre. Finalmente, implementaremos un esquema de control predictivo basado en modelos.

#### Agradecimientos:

Esta investigación forma parte de los proyectos LOCPU (PID2020-116585GB-I00) y a-CIDiT (PID2021-123654OB-C32) financiados por MCIN/AEI/10.13039/501100011033.

#### Referencias

Alonso, A.A., Arias-Méndez, A., Balsa-Canto, E., García, M.R., Molina, J.I., Vilas, C., Villafin, M., 2013. Real time optimization for quality control of batch thermal sterilization of prepackaged foods. *Food Control* 32, 392–403. doi:https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2013.01.002.

Alonso, A.A., Banga, J.R., Perez-Martin, R., 1997. A complete dynamic model for the thermal processing of bioproducts in batch units and its application to controller design. *Chemical engineering science* 52, 1307–1322. doi:https://doi.org/10.1016/S0009-2509(96)00484-8.

Biegler, L.T., 2010. *Nonlinear programming: concepts, algorithms, and applications to chemical processes*. SIAM.

Casp, A., Abril, J., 2003. *Procesos de conservación de Alimentos*. 2 ed., Ediciones Mundi-Prensa.

Erdogdu, F., Balaban, M.O., 2003. Complex method for nonlinear constrained multi-criteria (multi-objective function) optimization of thermal processing. *Journal of Food Process Engineering* 26, 357–375. doi:https://doi.org/10.1111/j.1745-4530.2003.tb00607.x.

Hindmarsh, A.C., Brown, P.N., Grant, K.E., Lee, S.L., Serban, R., Shumaker, D.E., Woodward, C.S., 2005. *Sundials: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers*. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* 31, 363–396. doi:https://doi.org/10.1145/1089014.1089020.

Pitarch, J.L., Vilas, C., de Prada, C., Palacén, C., Alonso, A.A., 2021. Optimal operation of thermal processing of canned tuna under product variability. *Journal of Food Engineering* 304, 110594. doi:https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2021.110594.

Simpson, R., Abakarov, A., 2011. Optimization of food thermal processing: Sterilization stage and plant production scheduling, in: Aguilera, J.M., Simpson, R., Welti-Chanes, J., Bermudez-Aguirre, D., Barbosa-Canovas, G. (Eds.), *Food Engineering Interfaces*, Springer New York. pp. 261–284.

Smith, C.A., Corripio, A.B., 2005. *Principles and practices of automatic process control*. John Wiley & sons.

Stechlinski, P., Patrascu, M., Barton, P.I., 2018. Nonsmooth differential-algebraic equations in chemical engineering. *Computers & Chemical Engineering* 114, 52–68. doi:10.1016/j.compchemeng.2017.10.031.

Storn, R., Price, K., 1997. Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of Global Optimization* 11, 341–359. doi:https://doi.org/10.1023/A:1008202821328.

Vilas, C., García, M.R., Banga, J.R., Alonso, A.A., 2008. Desarrollo de una librería de componentes en ecosimpro para la operación de plantas de procesamiento térmico de alimentos. *Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial RIAI* 5, 51–65. doi:https://doi.org/10.1016/S1697-7912(08)70123-7.