

Estructura de control variable en cascada para reactores tubulares

Sergio Reséndiz Camacho^a, Galo Rafael Urrea García^{a*}, Guadalupe Luna Solano^a, Eusebio Bolaños Reynoso^a

División de Estudios de Posgrado e Investigación, Instituto Tecnológico de Orizaba
Av. Instituto Tecnológico No.852, Col. Emiliano Zapata, Orizaba, Veracruz, C.P. 94320, México
itorizaba@hotmail.com

Teléfono: (01 272) 72 57056 ext.104

Resumen— El reactor tubular es el más importante para la síntesis de químicos a gran escala, comúnmente empacados con catalizador para reacciones en fase gaseosa, son difíciles de controlar debido al comportamiento no lineal ocasionado por los fenómenos de transferencia de masa y calor entre fases sólida y gas, y a la cinética de las reacciones que ocurren en su interior. En este trabajo se presentan los resultados de una estructura de control variable en cascada para controlar la composición de salida del reactor y lograr una seguridad operacional. Como caso de estudio se considera la reacción de oxidación parcial de benceno produciendo anhídrido maléico. Se propone una estructura de varios controladores en cascada, que constan de un lazo primario para regular la composición a la salida del reactor y uno secundario que regula la temperatura en un punto a lo largo del reactor. La señal de entrada del controlador propuesto resulta de una combinación de cada entrada de control convencional multiplicada por un factor de ponderación, ajustándose dinámicamente con la desviación de temperatura en cada punto de control. La estructura propuesta es comparada con las estructuras convencionales frente a secuencias de perturbaciones en las condiciones de alimentación.

la literatura de control de reactores tubulares [1,2]. Tomando en cuenta que un reactor tubular es un sistema de parámetros distribuidos, la medición de temperatura (que varía en función de la longitud z) proporciona información acerca de la reacción, de la transferencia de calor y de momento en cada punto del reactor. La escasez de modelos y parámetros confiables generalmente dificulta el diseño de esquemas de control robusto para estos reactores.

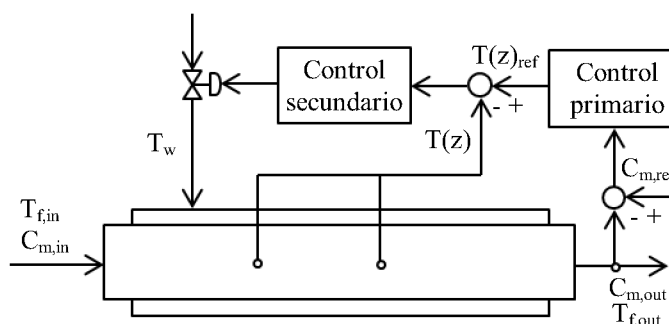


Figura 1. Esquema de control del reactor tubular.

Palabras clave: Control en cascada, reactor tubular, hot spot.

I. INTRODUCCIÓN

La estructura de control en cascada convencional para el reactor tubular está compuesta de un lazo de control de composición (controlador primario) que proporciona un valor de referencia (set point) para la temperatura en un punto a lo largo del reactor $T(z)$. Este valor de referencia es ajustado en base a la desviación de la composición de salida ($c_{m,out}$) con la composición de referencia ($c_{m,ref}$), ocasionado por alguna perturbación en las condiciones de alimentación, siendo estas la concentración ($c_{m,in}$) o en la temperatura ($T_{f,in}$). El lazo (interno) de control de temperatura debe regular la temperatura en un punto del reactor $T(z)$ en base al valor de referencia $T(z)_{ref}$ proporcionado por el controlador primario. Esto es realizado comúnmente manipulando el flujo o la temperatura del medio de enfriamiento o calentamiento (T_w) como se muestra en la Figura 1.

La localización de los puntos de medición (y control) de temperatura es uno de los aspectos más importantes en el diseño de los controladores y ha sido ampliamente tratado en

Se han propuesto estructuras de control en cascada con múltiples mediciones de temperatura [3,4] con el propósito de mejorar el desempeño del control frente a perturbaciones en las condiciones de alimentación (flujo molar y temperatura). Esto es equivalente a la aplicación de varios controladores en cascada donde cada uno realiza la regulación de la temperatura en diferentes puntos a lo largo del reactor. Cada medición de temperatura proporciona información sobre desviaciones en las condiciones de operación del reactor (causada por perturbaciones o dinámicas no modeladas) dentro del lazo de retroalimentación y permite tomar acciones correctivas con cierta anticipación.

Una forma de simplificar el diseño de la estructura de control con múltiples mediciones de temperatura es considerar que la respuesta del elemento de control secundario es una combinación de la respuesta de varios controladores que regulan la temperatura en diferentes puntos a lo largo de la longitud del reactor. De esta manera, la entrada de control resulta de una sumatoria de N entradas de cada controlador multiplicada por un factor de ponderación

α_j ($u = \sum_{j=1}^N \alpha_j u_j$), donde los parámetros $\alpha_j \in [0, 1]$, son

tratados como parámetros a ser ajustados y que deben

cumplir la restricción $\sum_{j=1}^N \alpha_j = 1$.

Se ha mostrado que la localización de las mediciones de temperatura antes del punto caliente del reactor y cercanas a la salida del reactor proporcionan una mejor regulación de la composición de salida en comparación con las mediciones en un solo punto del reactor [3].

La mejora en el desempeño de esta estructura de control se debe a que el controlador tiene la capacidad de: 1) detectar y atenuar rápidamente el efecto de las perturbaciones en la alimentación por las mediciones de temperatura cercanas a la entrada del reactor; 2) estabilizar la zona de alta variación de temperatura mediante las mediciones cercana al punto caliente (hot spot) del reactor y, 3) mejorar el desempeño en la regulación de la composición mediante las mediciones de temperatura cercanas a la salida del reactor.

Los coeficientes de ponderación α son un parámetro del que depende en gran medida la mejora en el desempeño de los controladores, sin embargo, hasta el momento no se ha propuesto ningún método sistemático para su ajuste. Incluso no hay un ajuste que proporcione el mejor desempeño para toda las posibles perturbaciones en las condiciones de alimentación del reactor.

En un trabajo previo [6] se propuso una estructura de control que incorpora un ajuste variable para el factor de ponderación basado en el error de la temperatura en cada punto de control a lo largo del reactor de tal manera que el factor de peso de cada señal de control sea proporcional a la desviación de la temperatura de acuerdo con la ecuación (1).

$$\alpha_j = \frac{|\varepsilon_j|}{\sum_{j=1}^N |\varepsilon_j|} \quad (1)$$

donde $|\varepsilon_j| = |T_{ref,j} - T_j|$ es el valor absoluto del error de regulación de la temperatura en el punto j .

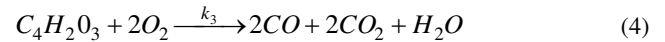
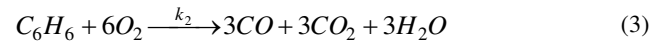
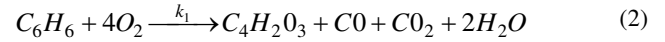
Con esta relación se obtiene una estructura de control que minimiza la suma del error de temperatura y por lo mismo ofrece un mejor desempeño ante una amplia variedad de perturbaciones en la alimentación.

En este trabajo se presentan los resultados de la aplicación de la estructura de control propuesta para la regulación de la composición de salida en un reactor tipo tubular de lecho fijo para la producción de anhídrido maléico [2,4] donde se realizan tres reacciones exotérmicas irreversibles en fase gas. Se considera un modelo pseudohomogéneo con dispersión axial. El problema de control consiste en regular la composición de salida del reactor al tiempo que se logra una operación segura al mantener la estabilidad de la temperatura del punto caliente (hot spot) del reactor.

II. DESARROLLO

A continuación se presenta el modelo pseudohomogéneo de un reactor tubular de lecho fijo, el cual describe la producción de anhídrido maléico mediante la oxidación parcial de benceno [2, 4].

D.R. © AMCA Octubre de 2012



La reacción deseada es la reacción (2), mientras que las reacciones (3) y (4) son las reacciones no deseadas ya que es la oxidación tanto del reactivo como del producto. La alimentación al reactor es benceno con oxígeno en exceso, por lo que las reacciones son asumidas como pseudo primer orden. La ecuación de Arrhenius es considerada para describir las velocidades de reacción en las ecuaciones (2)-(4).

$$k_i(t, z) = A_i \cdot \exp(-E_i / RT_s(t, z)) \quad (5)$$

Los factores de frecuencia, energías de activación y entalpías de reacción son mostrados en la Tabla 1.

Tabla 1. Valores de los parámetros para las velocidades de reacción.

Reacción	A_i (s ⁻¹)	E_i (J mol ⁻¹)	ΔH_i (J mol ⁻¹)
1	86760	71711.7	-1490000
2	37260	71711.7	-2322000
3	149.4	36026.3	-832000

Se consideran dos balances de masa en el modelo, que describen el comportamiento del flujo molar del benceno (c_b) y del anhídrido maléico (c_m), las ecuaciones diferenciales parciales se presentan en las siguientes ecuaciones (6)-(7).

$$\frac{\partial c_b}{\partial t} = D_{eff} \frac{\partial^2 c_b}{\partial z^2} - v \frac{\partial c_b}{\partial z} - k_1 c_b - k_2 c_b \quad (6)$$

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = D_{eff} \frac{\partial^2 c_m}{\partial z^2} - v \frac{\partial c_m}{\partial z} + k_1 c_b - k_3 c_m \quad (7)$$

Dos balances de calor, describiendo el comportamiento de la temperatura de la fase del fluido (T_f) y del catalizador en fase sólida (T_s), se muestran en las siguientes ecuaciones (8)-(9).

$$\frac{\partial T_f}{\partial t} = K_{eff} \frac{\partial^2 T_f}{\partial z^2} - v \frac{\partial T_f}{\partial z} - U_{fv}(T_f - T_j) - U_{sf}(T_s - T_f) \quad (8)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = -U_{sf}(T_s - T_f) + c_s (\Delta H_1 k_1 c_b + \Delta H_2 k_2 c_b + \Delta H_3 k_3 c_m) \quad (9)$$

Las condiciones frontera utilizada para los cálculos son:

$$\begin{aligned} D_{eff} \frac{\partial^2 c_b}{\partial z^2} &= 0 & z = 0, t \geq 0 \\ D_{eff} \frac{\partial^2 c_m}{\partial z^2} &= 0 & z = 0, t \geq 0 \\ K_{eff} \frac{\partial^2 T_f}{\partial z^2} &= 0 & z = 0, t \geq 0 \end{aligned} \quad (10)$$

$$D_{eff} \frac{\partial^2 c_b}{\partial z^2} = 0 \quad z = 1, t \geq 0$$

$$D_{eff} \frac{\partial^2 c_m}{\partial z^2} = 0 \quad z = 1, t \geq 0 \quad (11)$$

$$K_{eff} \frac{\partial^2 T_f}{\partial z^2} = 0 \quad z = 1, t \geq 0$$

Las condiciones iniciales en el reactor son:

$$c_b = 0.009 \text{ mol} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$c_m = 0 \text{ mol} \cdot \text{s}^{-1} \quad (12)$$

$$T_f = 733 \text{ K}$$

$$T_s = 660 \text{ K}$$

Los parámetros de las ecuaciones (6)-(9) se encuentran en la Tabla 2.

Tabla 2. Parámetros para oxidación parcial de benceno

Parámetros	Valor (unidades)
Velocidad del gas, v	2.48 m s^{-1}
Coefficiente efectivo de difusión de masa, D_{eff}	$0.00317 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Coefficiente efectivo de difusión de calor, K_{eff}	$0.0317 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Coefficiente efectivo de transferencia de calor de la fase del fluido-temperatura de la pared, U_{fw}	26 s^{-1}
Temperatura de la pared, T_w	733 K
Coefficiente efectivo de transferencia de calor del sólido-fase del fluido, U_{sf}	30 s^{-1}
Constante del balance de calor sólido-fase, c_s	0.729 s K J^{-1}

Solución del modelo y simulación. Se realizó la solución de un modelo dinámico pseudohomogéneo del reactor tubular con dispersión axial, por medio de la aproximación en diferencias finitas de las ecuaciones diferenciales parciales de los balances de materia y energía de las ecuaciones (6)-(9), obteniendo un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias, solucionadas mediante el método de Runge-Kutta 4/5 orden. De esta manera se lograron obtener los perfiles de concentración del reactivo y del producto, y de temperatura para el fluido y el catalizador, logrando observar el comportamiento de estas variables a lo largo del reactor en las Figuras 2-5. Se observa la localización de un punto caliente cercano a 0.8 m de longitud del reactor en la Figura 2.

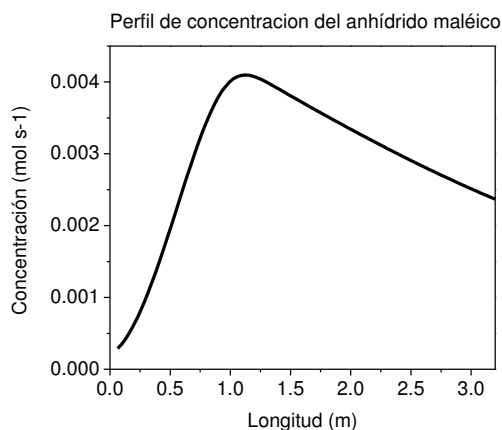


Figura 2. Perfil de concentración del anhídrido maléico.

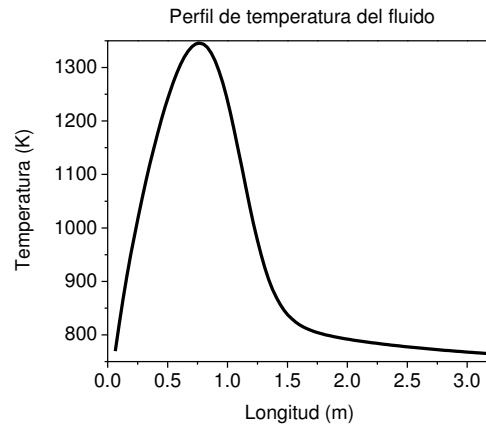


Figura 3. Perfil de temperatura del fluido.

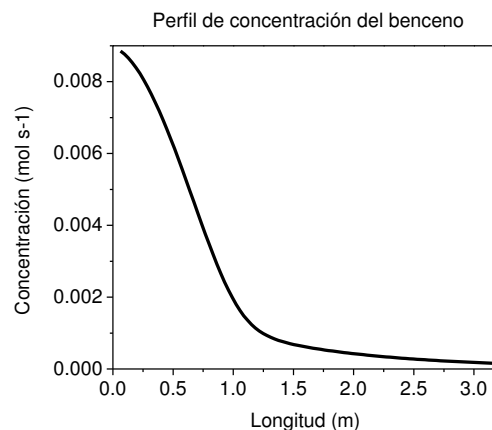


Figura 4. Perfil de concentración del benceno.

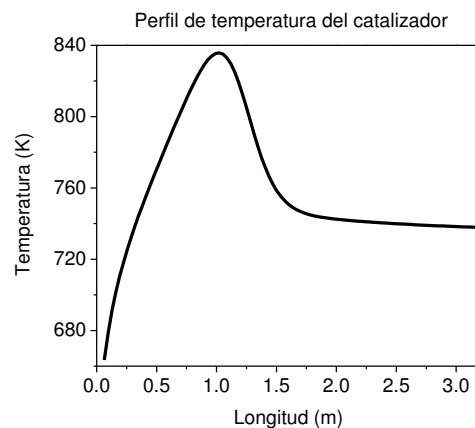


Figura 5. Perfil de temperatura del catalizador.

Caracterización del proceso. Se seleccionaron 4 puntos de medición de temperatura a lo largo del reactor. Estos puntos se eligieron con base en los siguientes criterios: 1) que estuvieran cercanos a los extremos del reactor (entrada y salida); 2) que uno de las mediciones estuviera antes del punto de temperatura máxima (hot spot) y, 3) que una de las mediciones estuviera posterior al hot spot. Con estos criterios se busca que la caracterización del proceso en estos puntos proporcione información importante acerca del desarrollo de la reacción en diferentes zonas del reactor. De esta forma se seleccionaron los siguientes puntos de longitud adimensional: $z_1=0.05$ indicando el punto cerca a la entrada del reactor, $z_2=0.20$ antes del punto caliente, $z_3=0.40$ después del punto

caliente y $z_4=0.95$ cercano a la salida del reactor. Se caracterizó la respuesta de las variables controladas ante un cambio en escalón en la temperatura de la camisa del reactor (+10%). Las respuestas a este cambio se presentan en las siguientes Figuras 6-10.

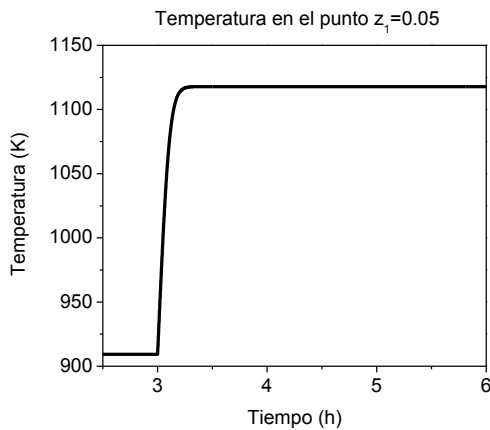


Figura 6. Temperatura en el punto $z_1=0.05$.

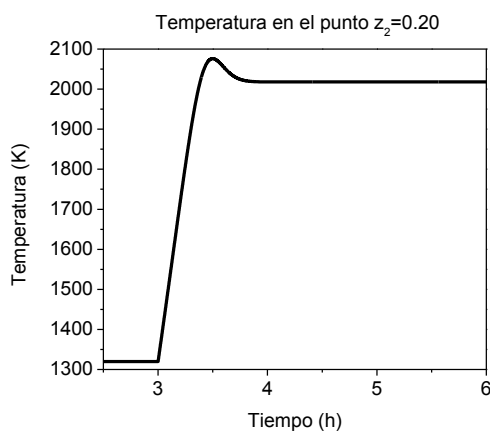


Figura 7. Temperatura en el punto $z_2=0.20$.

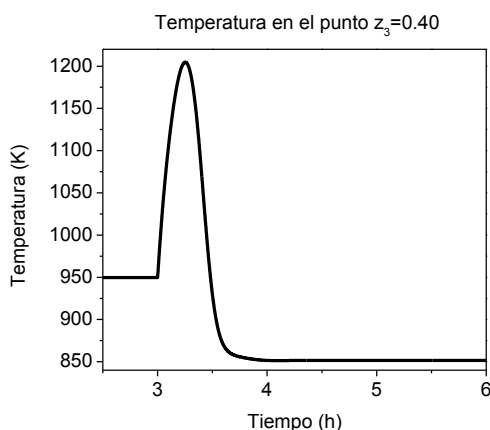


Figura 8. Temperatura en el punto $z_3=0.40$.

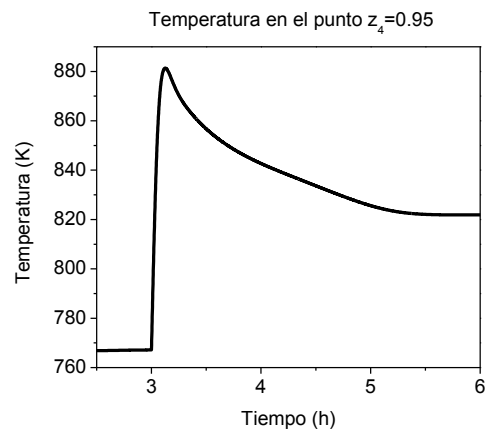


Figura 9. Temperatura en el punto $z_4=0.95$.

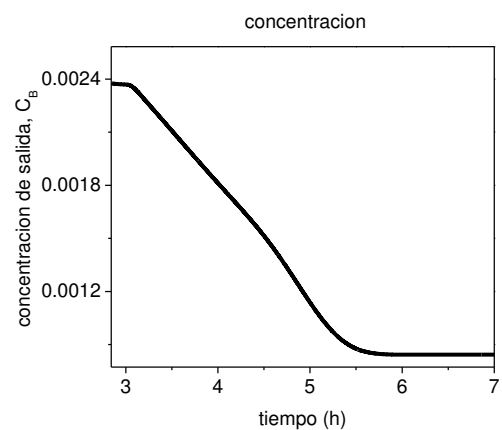


Figura 10. Concentración de benceno a la salida del reactor.

Se obtuvieron los modelos entrada y salida de primer orden para la concentración de salida y la temperatura en los puntos seleccionados.

$$g(s) = \frac{k}{\tau s + 1} e^{-\theta s} \quad (13)$$

Diseño del controlador. Se diseñaron 5 controladores en cascada basados en los puntos $z_1=0.05$, $z_2=0.20$, $z_3=0.40$ y $z_4=0.95$ de medición y control de temperatura. Los controladores primarios son del tipo proporcional-integral (PI) y los controladores secundarios son del tipo proporcional (P). Los ajustes de los parámetros se obtuvieron mediante las guías Internal Model Control (IMC) [5] con base en los modelos de primer orden obtenidos en el punto anterior.

Estructura de control propuesta. La estructura de control propuesta esta basada en la combinación de los lazos de control de temperatura en los puntos z_2 y z_4 mediante la relación

$$C_{z_2, z_4} = \alpha C_{z_2} + (1 - \alpha) C_{z_4} \quad (14)$$

Evaluación de los controladores. Se aplicaron varias secuencias de perturbaciones en las condiciones de alimentación al reactor (Tabla 3). Estas perturbaciones incluyen cambios escalón en la composición y temperatura de alimentación.

Tabla 3. Secuencia de perturbaciones

	Tiempo (h)		
	50	100	150
Secuencia 1	+20% C_{in}	-20% C_{in}	-20% C_{in}
Secuencia 2	+20% T_{in}	-20% T_{in}	-20% T_{in}
Secuencia 3	+20% C_{in}	-20% C_{in}	-20% C_{in}
	+20% T_{in}	-20% T_{in}	-20% T_{in}
Secuencia 4	-20% C_{in}	+20% C_{in}	+20% C_{in}
	+20% T_{in}	-20% T_{in}	-20% T_{in}

III. RESULTADOS

En las siguientes Figuras (Figura 11-14) se muestran los resultados obtenidos con la estructura de control en cascada propuesta ($C_{z2,z3}$) en comparación con los controles en cascada convencionales con un punto de control y medición de temperatura ($C_{z1}=0.05$, $C_{z2}=0.20$, $C_{z3}=0.40$ y $C_{z4}=0.95$).

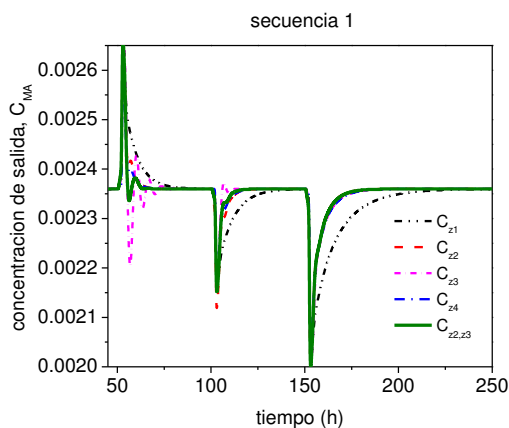


Figura 11. Desempeño de los controladores convencionales y el propuesto frente a las perturbaciones de la secuencia 1.

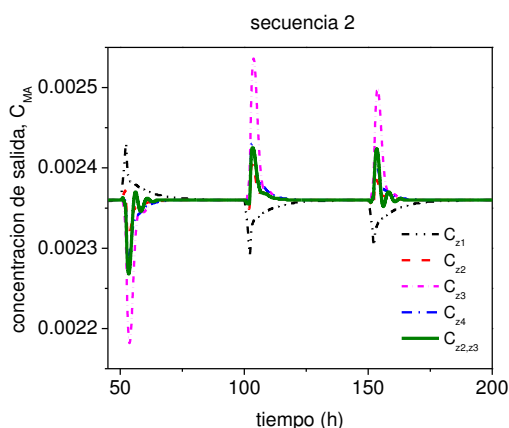


Figura 12. Desempeño de los controladores convencionales y el propuesto frente a las perturbaciones de la secuencia 2.

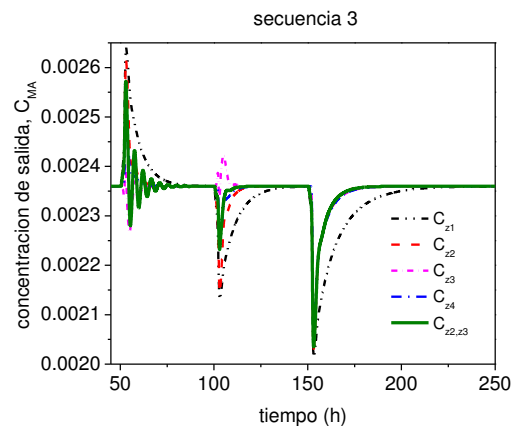


Figura 13. Desempeño de los controladores convencionales y el propuesto frente a las perturbaciones de la secuencia 3.

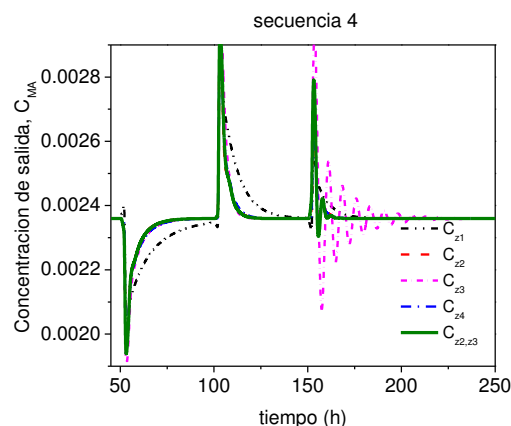


Figura 14. Desempeño de los controladores convencionales y el propuesto frente a las perturbaciones de la secuencia 4.

El control en cascada propuesto combina los lazos de temperatura de los controladores ubicados en los puntos $z_2=0.20$ y $z_3=0.40$, el peso de cada señal de controlador (α_j), es modificado de acuerdo con la ecuación 1. Se observa en la Figura 11-14 que el desempeño de los controladores en cascada convencionales varía según la secuencia de perturbaciones aplicadas al proceso, de esta manera, no existe una estructura de control convencional basada en un punto de medición que tenga el mejor desempeño frente al conjunto de perturbaciones. Sin embargo, se puede observar que la estructura de control en cascada propuesta ajusta el peso de cada controlador secundario, obteniendo de esta manera un ajuste o una adecuación dinámica de acuerdo a las perturbaciones que afectan el proceso. En la Figura 15 se puede observar claramente como varía el peso del factor de ponderación en base a la secuencia de perturbaciones de la Tabla 1. Se puede observar la ventaja del ajuste dinámico del factor de ponderación de acuerdo a la perturbación a la que es sometida el proceso incrementándole peso a la zona con mayor sensibilidad a la perturbación, y disminuyéndole peso al punto con menor sensibilidad, logrando mejorar el desempeño del controlador.

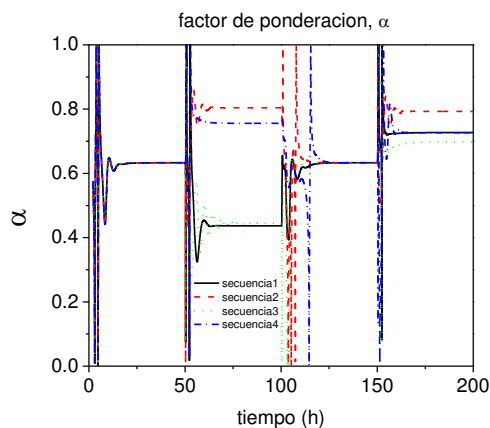


Figura 15. Ajuste del peso α con respecto al tiempo.

IV. CONCLUSIONES

Se estudió el desempeño de la estructura de control en cascada con una combinación de mediciones a lo largo del reactor mediante un factor de ponderación. En la estructura propuesta, el factor de peso (α_j) se ajusta mediante la desviación de la temperatura de referencia con la temperatura medida en cierto punto, dicho factor será proporcional a la desviación temperatura. Se desarrollaron 4 controladores convencionales para regular la concentración de salida del reactor, cada uno con diferentes puntos de medición de temperatura a lo largo del reactor. Se observó que ningún control convencional presentó el mejor desempeño para todas las secuencias de perturbaciones aplicadas (Tabla 3), en cambio, la estructura de control propuesta mostró aproximarse siempre al mejor desempeño presentado en todas las secuencias de perturbaciones en la alimentación del reactor.

REFERENCIAS

1. Karafyllis I., Daoutidis P., *Comp Chem Eng* 26 (2002).
2. Van den Berg F. W. J., Hoefsloot H. C. J., Boelens H. F. M., Smilde A. K., *Chem Eng Sci.*, 55 (2000).
3. Urrea R., Álvarez J., Álvarez-Ramírez J., *Chem Eng Com*, 195:7,803 (2008).
4. Hernandez-Martinez E., Puebla H., Alvarez-Ramirez J., *International journal of chemical reactor engineering*, vol. 8 (2010).
5. Skogestad S., *journal of process control* 13 (2003).
6. Reséndiz C., S., Urrea G., G. R., Luna S., G., Bolaños R., E. "Memorias del XXXIII Encuentro Nacional y II Congreso Internacional de la AMIDIQ" (2012). ISBN: 978-607-507-121-3.