

## Modelación, simulación y control de un reactor exotérmico por lotes utilizando Matlab-Simulink

Aída Pérez R. (1), Eliana Peña T. (2), Pascual Aljibes D. (1)

(1) Unidad de Investigación en Automatización Industrial, Escuela de Ingeniería Eléctrica, Universidad de Carabobo, Venezuela, E-mail: aperezr@mipunto.com, pad@net\_uno.net
(2) Departamento de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de Carabobo,
E-mail: elianapenat@mipunto.com

#### Resumen

Este trabajo tiene como finalidad el estudio de un reactor por lotes exotérmico a partir de su modelo matemático. Se definen las ecuaciones que describen el comportamiento dinámico del reactor estudiado y se seleccionan los parámetros que lo representan. Se realiza al análisis en lazo abierto del sistema modelado y se diseña su esquema de control, en base al algoritmo tradicional proporcional - integral - derivativo (PID).

**Palabras clave:** Reactor químico, simulación en Matlab–Simulink, modelo no lineal, fases de operación, algoritmo PID.

# Modeling, simulation and control of an exothermic batch reactor using Matlab–Simulink

#### **Abstract**

This work has as a purpose the study of an exothermic batch reactor based on the mathematical model. The equations describing the dynamic behavior of the studied reactor are defined and the parameters that represent the reactor are selected. The open loop analysis for the modeled system is performed and its control scheme is designed, based on the proportional -integral - derivative traditional algorithm (PID).

**Keywords:** Chemical reactor, Matlab–Simulink simulation, non linear model, operation phases, PID algorithm.

#### 1. INTRODUCCIÓN

Un reactor químico se puede definir como un equipo en el cual se forma una sustancia o producto a partir de otra (s) llamada (s) reactante (s), por medio de una serie de transformaciones químicas [1].

El procesamiento por lotes constituye un sector importante de la industria de procesos químicos. Este tipo de procesos es empleado en la producción de químicos de uso altamente especializado, productos farmacéuticos, polímeros y otros relacionados con el campo de la biotecnología [1].

Los procesos por lotes requieren una estrategia de control diferente a la de los procesos continuos dado que ellos no operan en estado estacionario. El objetivo de control es lograr que la salida del sistema siga una trayectoria deseada.

Los reactores por lotes constituyen una operación intermitente bastante compleja, dado que requieren procedimientos tales como llenado, mezclado, calentamiento, control del punto final, adición de alimentación, remoción de productos de enfriamiento y vaciado. Si además se tiene una reacción exotérmica, la misma muchas veces es inestable en estado estacionario [2].

Debido a la importancia de estas unidades de proceso y a lo costoso que implicaría su estudio a partir de plantas piloto a nivel de pregrado, el presente artículo se enfoca en el diseño de un esquema de control para un reactor por lotes exotérmico, teniendo el modelo matemático y la simulación por computadora como puntos de apoyo para todo el desarrollo de dicho diseño; y utilizando el software academico-científico Matlab y su herramienta Simulink como elementos para la programación.

#### 2. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

El modelo del reactor por lotes estudiado está limitado a las etapas de calentamiento, llenado de la chaqueta y enfriamiento, durante las cuales ocurre la reacción exotérmica en el tanque y se forma el producto deseado a partir de un reactante.

El reactante ha sido previamente cargado y mezclado en el reactor, por lo que el volumen en el mismo permanece constante.

Para iniciar la reacción de la mezcla se inyecta vapor al interior de la chaqueta. Esto eleva la temperatura de la mezcla hasta un cierto valor límite. Una vez alcanzado dicho valor, se cierra la válvula de inyección de vapor. Luego que la reacción se inicia, la misma comienza a liberar calor, el cual será retirado mediante la apertura de la válvula de agua fría, con la finalidad de mantener la temperatura del reactor dentro del rango de operación que fije el proceso.

El objetivo de control original es lograr una conversión adecuada del producto formado, minimizando la presencia del subproducto. Esto se consigue mediante el control de la temperatura dentro del reactor, por ser la variable que proporciona más información sobre la dinámica de la reacción.

Las variables manipuladas son los flujos de vapor y agua que entran al reactor, formando así el sistema de calentamiento-enfriamiento del reactor. Dicho sistema operará con coeficientes de transferencia de calor máximo, a fin de suministrar ó retirar (según la fase de operación del modelo) la mayor cantidad de calor posible. El mecanismo de circulación es de un solo pase, es decir, los flujos de vapor y agua atraviesan la chaqueta una sola vez [3].

La perturbación aplicada al proceso es la temperatura del agua fría, para las fases de llenado y enfriamiento solamente.

#### 3. MODELACIÓN DEL REACTOR POR LOTES

El modelo dinámico no lineal del reactor por lotes se obtuvo a partir de las ecuaciones diferenciales que describen su funcionamiento [3]. Debe tenerse presente que se trata de un proceso intermitente y no autoregulatorio. Se realizaron las siguientes consideraciones:

- La reacción es exotérmica, irreversible y de primer orden, del tipo A => B => C, donde A es el reactante, B el producto principal y C el producto secundario no deseado.
- No se modela el tiempo muerto.
- Reactante, producto y subproducto se encuentran en fase líquida.
- La densidad y capacidad calórica de la mezcla permanecen constantes, así como otras propiedades termodinámicas de reactante y producto.
- Sólo se modelan los efectos energéticos que ocurren en la pared del tanque y se consideran despreciables los efectos de las paredes de la chaqueta.
- El volumen de la mezcla es constante.
- El volumen de la chaqueta es constante durante las fases de calentamiento y enfriamiento.

En la Figura 1 se muestra un dibujo ilustrativo del proceso, acompañado del sistema de calentamiento – enfriamiento tipo chaqueta:

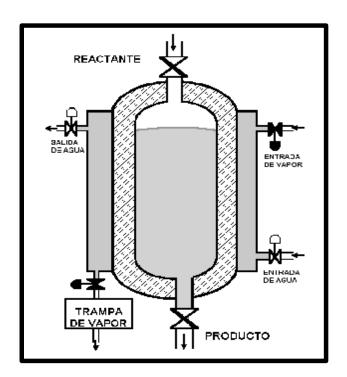


Figura 1. Reactor por Lotes.

A continuación se muestran las ecuaciones que describen el funcionamiento del reactor por lotes bajo estudio:

**§** Balance de componente sobre el reactante:

$$\frac{dC_A(t)}{dt} = -K_1(T)C_A(t) \tag{1}$$

donde:

 $C_A(t)$ : concentración final del reactante,  $lb_{mol}/pie^3$ .  $K_{1(T)}$ : velocidad de reacción específica de la reacción principal, min. (depende de la temperatura de la mezcla).

**§** Balance de componente sobre el producto:

$$\frac{dC_B(t)}{dt} = K_1(T)C_A(t) - K_2(T)C_B(t)$$
 (2)

donde:

 $C_B(t)$ : concentración final del producto,  $lb_{mol}/pie^3$ .  $K_2(T)$ : velocidad de reacción específica de la reacción secundaria, min.  $^{-1}$ .

§ Ecuaciones para las velocidades de reacción específicas:

$$K_1(T) = K_{o1} e^{-(E_1/R(T(t)+460))}$$
 (3)

$$K_2(T) = K_{o2} e^{-(E_2/R(T(t)+460))}$$
 (4)

donde:

Ko<sub>1</sub>, Ko<sub>2</sub>: factores pre-exponenciales o de frecuencia de Arrhenius para las reacciones principal y secundaria respectivamente, min<sup>-1</sup>.

 $E_1$ ,  $E_2$ : energías de activación de las respectivas reacciones principal y secundaria,  $Btu/lb_{mol}$ .

R: constante universal de los gases, Btu/lb<sub>mol</sub>.ºR.

T(t): temperatura dentro del reactor, °F.

**§** Balance de energía en el reactor:

$$r C_{p} V \frac{dT_{(t)}}{dt} = -m_{i} A_{i} \left( T_{(t)} - T_{M_{(t)}} \right)$$

$$- I_{1} V K_{1(T)} C_{A^{(t)}}$$

$$- (-I_{2} V K_{2(T)} C_{B}^{(t)})$$
(5)

donde:

p: densidad de la mezcla reaccionante, lb<sub>m</sub>/pie<sup>3</sup>.

 $C_P$ : capacidad calórica promedio de la mezcla,  $Btu/lb_m$ . $^o$ F.

V: volumen de la mezcla reaccionante, pie<sup>3</sup>.

 $\mu_i$ : coeficiente pelicular de transferencia de calor interno, Btu/°F.pie<sup>2</sup>.s.

A<sub>i</sub>: área interna de transferencia de calor, pie<sup>2</sup>.

T<sub>M</sub>(t): temperatura de las paredes del tanque, °F.

 $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ : calores exotérmicos de las reacciones principal y secundaria respectivamente, Btu/lb<sub>mol</sub>.

• Balance de energía en las paredes del tanque:

Se definen dos coeficientes externos de transferencia de calor: uno para la fase de calentamiento (vapor de agua) y otro para las fases de llenado y enfriamiento (agua fría).

• Balance de energía en las paredes del tanque durante la fase de calentamiento

$$\Gamma_{M} C_{M} V_{M} \frac{dT_{M}(t)}{dt} = \mathbf{m}_{i} A_{i} \left( T(t) - T_{M}(t) \right) + \mathbf{m}_{\alpha s} A_{\alpha} \left( T_{I}(t) - T_{M}(t) \right)$$
(6)

donde:

 $\rho_M$ : densidad de las paredes de metal del tanque,  $lb_m/pie^3$ .

C<sub>M</sub>: capacidad calórica de las paredes del tanque, Btu/lb<sub>m</sub>.°F.

V<sub>M</sub>: volumen de las paredes del tanque, pie<sup>3</sup>.

 $\mu_{os}$ : coeficiente pelicular de transferencia de calor externo del vapor,  $Btu/^{o}F.pie^{2}.s.$ 

A<sub>o</sub>: área externa de transferencia de calor, pie<sup>2</sup>.

 $T_J(t)$ : temperatura dentro de la chaqueta, °F.

• Balance de energía en las paredes del tanque durante las fases de llenado y enfriamiento:

$$r_{M} C_{M} V_{M} \frac{dT_{M}(t)}{dt} = m_{i} A_{i} \left(T(t) - T_{M}(t)\right)$$

$$- m_{ow} A_{o} \left(T_{M}(t) - T_{J}(t)\right)$$

$$(7)$$

donde:

 $\mu_{ow}$ : coeficiente pelicular de transferencia de calor externo del agua fría, Btu/°F.pie<sup>2</sup>.s.

§ Balance de masa en la chaqueta para la etapa de calentamiento:

$$V_{J} \frac{d}{dt} (r_{s}(T)) = F_{s}(t) r_{si} - W_{c}(t) \quad (8)$$

donde:

V<sub>J</sub>: volumen constante de la chaqueta, pie<sup>3</sup>.

 $\rho_s$ : densidad de vapor dentro y a la salida de la chaqueta,  $lb_m/pie^3$ .

F<sub>s</sub>(t): flujo volumétrico de vapor de agua, pie<sup>3</sup>/min.

 $\rho_{si}$ : densidad de vapor que entra a la chaqueta,  $lb_m/pie^3$ .

W<sub>C</sub>(t): rata de condensación del flujo másico de vapor de agua, lb<sub>m</sub>/min.

§ Ecuación de estado del vapor de agua:

$$W_c(t) = \frac{m_{os} A_o \left( T_J(t) - T_M(t) \right)}{H_S - h_C} \tag{9}$$

donde:

 $(H_S - h_C)$ : diferencia entre la entalpía de entrada y la entalpía de salida del vapor.

§ Ecuación para la presión del vapor:

$$P_{J}(\mathbf{T}) = e^{\left(\frac{A_{W}}{(T_{J}(t)+460)}+B_{W}\right)}$$
 (10)

donde:

A<sub>w</sub>: constante de presión de vapor de agua, R.

 $B_{\mathrm{w}}$ : constante de presión de vapor de agua, adimensional.

§ Ecuación para el cálculo de la densidad del vapor en función de la presión y la temperatura:

$$r_{S(T)} = \frac{M}{R.(T_J(t) + 460)} P_J(T)$$
 (11)

donde:

M: peso molecular del vapor,  $M = 18 lb_m/mol$ .

§ Balance de masa en la chaqueta para la etapa de llenado:

$$\frac{dV_{J}(t)}{dt} = F_{wo}(t) \tag{12}$$

donde:

V<sub>J</sub>(t): volumen variable de la chaqueta, pie<sup>3</sup>.

 $F_{wo}(t)$ : flujo volumétrico de la alimentación de agua fría, pie<sup>3</sup>/min.

**§** Balance de energía en la chaqueta para la etapa de llenado:

$$\rho_{J}C_{J}\frac{d}{dt}(V_{J}.T_{J}(t)) = \rho_{J}C_{J}F_{wo}(t).T_{Jo}(t) + \mu_{ow}A_{o}(t)(T_{M}(t) - T_{J}(t))$$
(13)

donde:

 $\rho_J$ : densidad del agua que sale de la chaqueta,  $lb_m/pie^3$ .  $C_J$ : capacidad calórica del agua dentro de la chaqueta,  $Btu/lb_m$ .°F.

 $T_{Jo}(t)$ : temperatura del flujo de alimentación de la chaqueta, °F.

 $\mu_{\rm ow}$ : coeficiente pelicular de transferencia de calor externo, Btu/°F.pie<sup>2</sup>·s.

 $A_o(t)$ : àrea externa de transferencia de calor, pie<sup>2</sup>.

§ Ecuación para la variación del área de transferencia de calor externa:

$$A_{o}(t) = \left(\frac{A_{o}}{V_{J}}\right) V_{J}(t) \tag{14}$$

**§** Expresión para el cálculo de la temperatura en la chaqueta:

$$T_{J}(t) = \left(\frac{\left[V_{J}(t)T_{J}(t)\right]}{V_{J}(t)}\right) \tag{15}$$

**§** Balance de energía en la chaqueta para la etapa de enfriamiento:

$$r_{J}C_{J}V_{J}\frac{dT_{J}(t)}{dt} = r_{J}C_{J}C_{vw}\sqrt{P_{CP}}X_{w}(t)\left(T_{Jo}(t) - T_{J}(t)\right) + \mathbf{m}_{ow}A_{o}\left(T_{M}(t) - T_{J}(t)\right)$$
(16)

#### 4. PARÁMETROS CARACTERÍSTICOS Y CONDICIONES INICIALES

#### Condición de operación:

$$T_{set} = 200 \text{ }^{o}F$$

Tabla 1. Valores de los parámetros [3].

Parámetro	Valor
$K_{o1}$	729.55 min <sup>-1</sup>
K <sub>o2</sub>	6567.6 min <sup>-1</sup>
$E_1$	15000 Btu/lb <sub>mol</sub>
$E_2$	20000 Btu/lb <sub>mol</sub>
$\lambda_1$	- 40000 Btu/lb <sub>mol</sub>
$\lambda_2$	50000 Btu/lb <sub>mol</sub>
$\mu_{ m os}$	1000 Btu/hr.°F.pie <sup>2</sup>
$\mu_{\mathrm{ow}}$	400 Btu/hr.°F.pie <sup>2</sup>
$\mu_{\rm i}$	160 Btu/hr.°F.pie <sup>2</sup>
$T_{Jo}$	80 ° F
$A_{i}$	56.5 pie <sup>2</sup>
$A_{o}$	56.5 pie <sup>2</sup>
$(H_s - h_c)$	939 Btu/lb <sub>m</sub>
V	42.5 pie <sup>3</sup>
ρ	50 lb <sub>m</sub> /pie <sup>3</sup>
$\rho_{\scriptscriptstyle J}$	62.3 lb <sub>m</sub> /pie <sup>3</sup>
$C_p$	1 Btu/lb <sub>m</sub> .°F
$C_{J}$	1 Btu/lb <sub>m</sub> .°F
$V_{\rm J}$	18.83 pie <sup>3</sup>
$V_{\mathrm{M}}$	9.42 pie <sup>3</sup>
$ ho_{ m M}$	512 lb <sub>m</sub> /pie <sup>3</sup>
$C_{\mathrm{M}}$	0.12 Btu/lb <sub>m</sub> .°F
P <sub>ss</sub>	35 Psia
$P_{CP}$	20 Psi
$C_{vs}$	112 lb <sub>m</sub> /min.Psi <sup>0.5</sup>
$C_{vw}$	100 gpm/Psi <sup>0.5</sup>

Tabla 2. Constantes usadas [3].

Constante	Valor	
$A_{\rm w}$	- 8744.4 °R	
$B_{\rm w}$	15.70	
M	18 lb <sub>m</sub> /mol	
R	1.987 Btu/lb <sub>mol</sub> .°R	

Tabla 3. Condiciones iniciales [3].

Variable	Valor
$C_A(o)$	0.8 lb <sub>mol</sub> /pie <sup>3</sup>
$C_B(o)$	0 lb <sub>mol</sub> /pie <sup>3</sup>
T(o)	80 °F
$T_{M}(o)$	80 °F
$T_{J}(o)$	259 °F
P <sub>J</sub> (o)	34.40178 Psia

## 5. DESCRIPCIÓN DEL ESQUEMA DE INSTRUMENTACIÓN Y CONTROL

A continuación se presentan los aspectos relacionados con la instrumentación y el esquema de control para el reactor por lotes exotérmico bajo estudio.

#### 5.1. Transmisor

Existe una sola variable a medir: la temperatura del reactor. Para su medición se utilizará un transmisor electrónico con salida estándar de 4 a 20 mA. El rango del mismo se seleccionó de acuerdo a los máximos valores alcanzados por la temperatura en lazo cerrado.

La ecuación que representará al transmisor es de orden cero, es decir, consta sólo de una ganancia para convertir de temperatura a mA y su retardo se considera despreciable comparado con las constantes de tiempo del proceso [4].

La ecuación de la señal de salida del transmisor se muestra a continuación:

$$TT(t) = \left(\frac{T_{i}(t) - T_{min}}{T_{max} - T_{min}}\right) (I_{max} - I_{min}) + I_{min} (17-A)$$

donde:

TT(t); señal de salida del transmisor, mA.

 $T_i(t)$ : Señal de temperatura de entrada al transmisor,  ${}^{\circ}F$ .

 $T_{min}$ : valor mínimo del rango del transmisor, 50 °F.  $T_{max}$ : valor máximo del rango del transmisor, 250°F.  $I_{max}$ : máxima señal de salida del transmisor, 20 mA.  $I_{min}$ : mínima señal de salida del transmisor, 4 mA.

La ecuación (17-A) indica que la relación entre la señal de entrada y la salida del transmisor es una línea recta, cuya pendiente representa la ganancia del transmisor:

$$K_t = \frac{I_{\text{max}} - I_{\text{min}}}{T_{\text{max}} - T_{\text{min}}}$$
 (17-B)

#### 5.2. Controlador

La señal de salida del controlador de temperatura va a dos válvulas que operan en rango partido, una de vapor y otra de agua fría. Las señales de entrada y salida del controlador son eléctricas, en el rango estándar de 4 a 20 mA. El controlador es de acción inversa. Esta acción se selecciona de acuerdo a la posición que deben tener las válvulas para una falla segura. La estrategia empleada será la de tipo proporcional, integral y derivativo (PID).

#### 5.3. Convertidor I/P

Se utilizarán dos convertidores de corriente a presión (I/P) para convertir la señal eléctrica del controlador a señales neumáticas para la entrada de las válvulas que regulan los respectivos flujos de vapor y agua fría. La ecuación de la señal de salida del convertidor es la siguiente:

$$Y(t) = \frac{(TC(t) - I_{\min})}{(I_{\max} - I_{\min})} (P_{\max} - P_{\min}) + P_{\min} (18-A)$$

donde:

Y(t): señal de salida del convertidor, Psig.

TC(t): señal de salida del controlador, mA.

 $P_{max}$ : máxima señal de salida del convertidor, 15 psig.  $P_{min}$ : mínima señal de salida del convertidor, 3 psig.

La ecuación (18-A) representa una línea recta, de pendiente  $K_{\nu}$ :

$$K_{y} = \frac{P_{\text{max}} - P_{\text{min}}}{I_{\text{max}} - I_{\text{min}}}$$
 (18-B)

#### 5.4. Válvulas

#### 5.4.1. Tipo de acción

La acción de las válvulas se seleccionó de acuerdo a las características del proceso para una acción de falla segura [5]: la válvula de vapor es de falla cerrada ó aire para abrir, pues en caso de una falla en el suministro de aire, ésta permanece cerrada, evitando con eso la entrada no regulada de la energía entregada por el vapor.

La válvula de agua fría es de falla abierta ó aire para cerrar, con el fin de mantenerla abierta en caso de falla y así poder retirar la máxima cantidad de calor exotérmico de reacción posible, y garantizar igualmente la seguridad del sistema.

#### 5.4.2. Característica de flujo de las válvulas

Se seleccionaron dos válvulas de tipo lineal para manejar los flujos de vapor y agua fría respectivamente.

Para la válvula de vapor, el flujo másico  $W_s$  que entra a la chaqueta es [4]:

$$W_s = F_s(t) r_{si} = C_{vs} X_s(t) \sqrt{P_{ss} - P_I(T)}$$
 (19)

donde:

C<sub>vs</sub>: coeficiente de dimensionamiento de la válvula de vapor, lb<sub>m</sub>/min.Psi<sup>0.5</sup>.

X<sub>s</sub>(t): cracción de apertura de la válvula de vapor.

P<sub>ss</sub>: presión de la alimentación del vapor, Psia.

P<sub>J</sub>(T): presión del vapor dentro de la chaqueta, Psia.

Para la válvula de agua fría el flujo volumétrico  $F_{wo}$  que entra a la chaqueta es [4]:

$$F_{wo}(t) = C_{vw} X_{w}(t) \sqrt{P_{CP}}$$
 (20)

donde:

C<sub>vw</sub>: coeficiente de dimensionamiento de la válvula de agua, lb<sub>m</sub>/min.Psi<sup>0.5</sup>.

 $X_w(t)$ : fracción de apertura de la válvula de agua fría.  $P_{CP}$ : cabezal de presión del agua fría, Psig.

Esta característica de flujo elegida para las válvulas no toma en cuenta aspectos relacionados con tuberías de instalación de las mismas, dado que el estudio está limitado a la simulación del proceso a través de sus ecuaciones matemáticas, en forma aislada, sin incluir el efecto de otros procesos con los cuales estaría interactuando un reactor en una operación real.

#### 5.4.3. Rango de operación y ecuaciones

Las válvulas quedarán ajustadas de manera tal que la válvula de vapor esté completamente abierta cuando la señal de salida del controlador esté en su máximo valor (20 mA), y esté cerrada cuando su salida se encuentre en la mitad del rango total (12 mA).

La válvula de agua fría estará cerrada cuando la salida del controlador sea 12 mA y completamente abierta para una señal de salida del controlador de 4 mA (valor mínimo del rango).

La acción de las válvulas puede representarse como sigue:

Válvula para vapor:

$$X_{s}(t) = \frac{Y(t) - P_{med}}{P_{max} - P_{med}}$$
 (21)

Válvula para agua fría:

$$X_{w}(t) = \frac{P_{med} - Y(t)}{P_{med} - P_{\min}}$$
 (22)

donde:

Y(t): salida del convertidor I/P, Psig.

P<sub>med</sub>: valor de la mitad del rango del convertidor, 9

Psig.

 $P_{max}$ : máxima señal de salida del convertidor, 15 Psig.  $P_{min}$ : Mínima señal de salida del convertidor, 3 Psig.

#### 5.4.4. Coeficientes de dimensionamiento

Coeficiente de dimensionamiento para la válvula de vapor:

$$C_{vs} = 112 \text{ lbm/(min Psi}^{0.5})$$

Coeficiente de dimensionamiento para la válvula de agua fría:

$$C_{vw} = 100 \text{ gpm/Psi}^{0.5}$$

La justificación de la selección de estos valores no aparece detallada en este artículo, pero aparece en el trabajo realizado por Pérez y Peña [6].

#### 5.5. Esquema de Control

#### 5.5.1. Pruebas en lazo abierto

El reactor por lotes modelado no puede operar en lazo abierto, por requerir un sistema que regule la cantidad de calor agregado inicialmente y posteriormente retire aquel que se produzca por efecto de la reacción química.

Para demostrar la veracidad de la afirmación anterior, se realizaron simulaciones dejando en lazo abierto al reactor, manteniendo fijas las aperturas de las válvulas que regulan los respectivos flujos de vapor y agua fría.

Las simulaciones se realizaron a partir del modelo construido en Matlab–Simulink. Algunos de los resultados obtenidos se presentan en las Figuras 2 y 3, donde se observa la respuesta de la temperatura del reactor y de la concentración del producto cuando se deja la válvula de vapor completamente abierta y se cierra la válvula de agua fría.

La Figura 2 muestra cómo la temperatura aumenta sin ninguna restricción, alcanzando un valor pico que viene a ser más del doble de su punto de ajuste, lo cual deberá evitarse con el esquema de control.

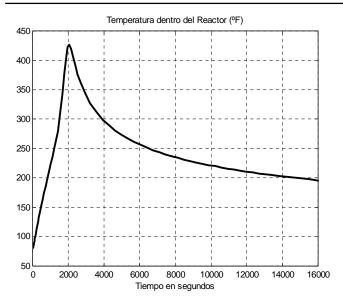


Figura 2. Simulación con la válvula para vapor abierta.

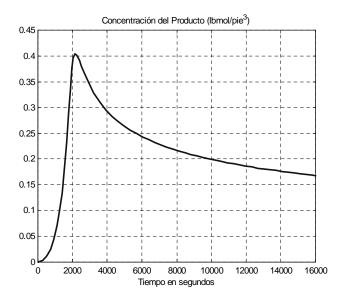


Figura 3. Simulación con la válvula para vapor abierta al 100% y la válvula para agua completamente cerrada.

Concentración del producto.

Tanto la temperatura como la concentración presentan una respuesta inversa, debida al mismo aumento desproporcionado de la temperatura, lo cual favorece la reacción secundaria y hace perder parte de la conversión lograda inicialmente [1].

### 5.5.2. Criterios para la selección del modo de control más adecuado

Para el control del reactor por lotes se realizaron varias simulaciones con distintos modos o acciones que permitieron al final llegar a una respuesta adecuada dentro de las limitaciones del tipo de controlador ya seleccionado (tradicional), teniendo en cuenta varios aspectos:

- Producir una conversión adecuada de reactante a producto, cercana al 50%.
- Disminuir el sobrepico en la temperatura.
- Lograr un buen rechazo ante pequeñas perturbaciones de ± 10% y de ± 20% en la temperatura de entrada del agua fría.
- Evitar la continua saturación y oscilación del controlador y de las válvulas dentro de las limitaciones impuestas por la dinámica del proceso.

#### 5.5.3. Ley de Control

Se empleó una ley de control clásica por realimentación, empleando un esquema de control basado en un PID [5,7]. La fórmula más simple para el controlador PID se escribe de la siguiente manera:

$$m_{C}(t) = K_{C} e(t) + \frac{K_{C}}{T_{i}} \int e(t) dt + K_{C} T_{d} \frac{de(t)}{dt} + m_{o}$$

$$(23)$$

donde:

K<sub>C</sub>: ganancia del controlador.

T<sub>i</sub>: tiempo integral.

T<sub>d</sub>: tiempo derivativo.

mo: reset manual.

La ecuación (23) corresponde a un controlador PID "paralelo" o ideal, porque los tres modos están en paralelo. Cuando se usan los tres modos, usualmente se hace una aproximación mediante la utilización de un adelanto - retardo, resultando la siguiente función de transferencia:

$$\frac{M_C(s)}{E(s)} = K_C \left( 1 + \frac{1}{T_i s} \right) \left( \frac{1 + T_d s}{1 + a T_d s} \right) \tag{24}$$

Los valores típicos de  $\alpha$  están entre 0.05 y 0.1; una vez seleccionado, no se varía [6].

Otra alternativa consiste en aplicar el término derivativo sobre la variable controlada y no sobre la señal de error:

$$m_{C}(t) = K_{C} e(t) + \frac{K_{C}}{T_{i}} \int e(t) dt$$

$$- K_{C} T_{d} \frac{dV_{C}(t)}{dt}$$
(25)

# 5.5.4. Resultados de las simulaciones con los parámetros de control calculados a partir del método de las oscilaciones continuas

Se calcularon los parámetros del controlador de acuerdo a las fórmulas para ajustes óptimos según el método de las oscilaciones continuas de Ziegler y Nichols para cadena cerrada [5, 7].

Se aplicaron los modos proporcional puro, proporcional más derivativo con derivada en la variable controlada, proporcional más integral, y proporcional más integral más derivativo, a fin de observar los resultados aportados con los parámetros de control dados en la Tabla 4.

Tabla 4. Entonación de parámetros

MODO	PARÁMETROS	VALORES
P	Kc	2,75
PI	Kc	2,45
	Ti	17,8
PD	Kc	3,3
	Td	2,67
PID	Kc	3,3
	Ti	10,68
	Td	2,67

Unidades de  $K_c$ : mA/mA. Unidades de  $T_i$  y  $T_d$ : minutos.

La simulación del esquema PID paralelo con los parámetros de la Tabla 4 no pudo ser completada ya que ocasionó dificultades en el cálculo de la derivada, por tanto se obvian los resultados del experimento.

Del análisis de las simulaciones realizadas (no mostradas en este estudio), se desprende lo siguiente [6]:

- La acción proporcional sola deja un error de estado estacionario bastante considerable.
- Para el caso proporcional, existe mucha oscilación en la válvula de vapor una vez finalizada su etapa de operación. En una planta real esto implicaría una transición continua entre inyección de vapor y agua.
- El término derivativo implementado de forma ideal, bien sea sobre la variable controlada o sobre el error, causa problemas al programa simulador en los cálculos de las derivadas por su característica de adelanto ó "predicción" del comportamiento de la variable controlada, además de saturar al controlador y con ello a los elementos finales de control.
- La acción integral causa un elevado sobrepico en la fase de calentamiento del reactor, pero es necesaria para la fase de enfriamiento.

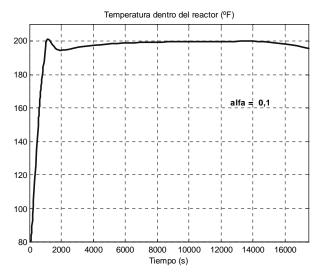
## **5.5.5.** Resultados de las simulaciones con los esquemas de control mejorados

Para mejorar los esquemas, se reajustaron los parámetros anteriores y se aplicaron los siguientes cambios:

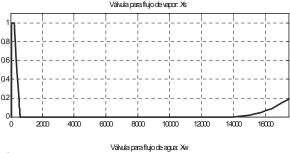
- Uso de un control proporcional durante las fases de calentamiento y llenado, y cambio a un esquema proporcional más integral en la etapa de enfriamiento.
- Introducción de una unidad de adelanto retardo a fin de mejorar la implementación de la acción derivativa en el programa simulador.
- Empleo de un control proporcional más derivativo para las fases de calentamiento y llenado, y un esquema proporcional más integral para la etapa final de operación.
- Variación del coeficiente de dimensionamiento de la válvula de agua fría (C<sub>vw</sub>), con el fin de observar su efecto sobre las oscilaciones de la válvula de vapor.

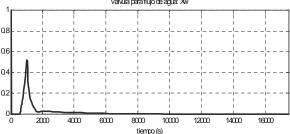
Algunos de los resultados se ilustran en las Figuras 4 y 5. Las mismas muestran que la acción integral disminuye en cada caso el error de la etapa de enfriamiento.

El control PID con unidad de adelanto-retardo mostrado en la Figura 4 logra una respuesta con pocas oscilaciones en la temperatura alrededor del punto de operación. El control PD – PI (Figura 5) no es tan ideal como el anterior pero también produce una trayectoria de temperatura aceptable, con oscilaciones por debajo del punto de ajuste.



4-a. Temperatura del reactor





4-b. Apertura de las válvulas

Figura 4. Simulación con un controlador PID y unidad adelanto – retardo en la variable controlada.  $K_C = 2.3$ .  $T_d = 4.2$ .  $T_i = 33.3$ .

De la variación de  $K_C$  y  $C_{\rm vw}$  realizada en otras simulaciones, se dedujo que la misma no produjo mucho efecto sobre la conversión de producto lograda, pero sí afectó el sobrepico de temperatura y las oscilaciones de la válvula de vapor.

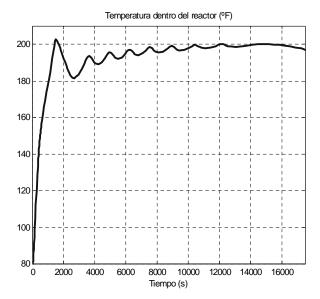


Figura 5. Simulación con un controlador PD-PI  $K_C = 2$ .  $T_d = 16,7$ .  $T_i = 58,3$ .

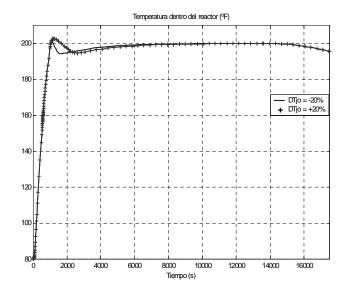


Figura 6. Respuesta del controlador PID con unidad de adelanto-retardo ante perturbaciones en la temperatura de entrada del agua fría.

#### **5.5.6.** Comportamiento ante perturbaciones

La Figura 6 indica el comportamiento del modo PID con unidad de adelanto-retardo ante perturbaciones de +20% y -20% en la temperatura de entrada del agua fría que circula por la chaqueta, cuyo valor de operación es de 80 °F.

La unidad de adelanto – retardo mejora el rechazo del controlador a las perturbaciones, lo cual se refleja en el sobrepico, cuyo aumento (para perturbaciones positivas) es mucho menor al de los esquemas sin acción derivativa, como es el caso del control P-PI. Este último requiere más tiempo para recuperarse de las perturbaciones aplicadas.

#### 6. CONCLUSIONES

La utilización de Simulink como herramienta de programación en bloques de subsistemas sirvió para construir el modelo no lineal del reactor por lotes y dividirlo según sus fases de operación bien diferenciadas: calentamiento, llenado y enfriamiento. La programación en Matlab se empleó para coordinar la simulación de esas etapas.

Se logró una conversión de reactante a producto cercana al 50%, minimizando así la presencia de subproducto a través del control de temperatura.

La aplicación de diferentes combinaciones del algoritmo PID permitió observar el efecto de cada una de esas variantes sobre la dinámica de un mismo reactor químico, haciendo su estudio a nivel de control más completo.

La selección de la ganancia del controlador y del coeficiente de dimensionamiento de la válvula para agua fría ( $C_{vw}$ ), implica un compromiso entre ambos parámetros, ya que una mayor ganancia ( $K_C$ ) y un coeficiente  $C_{vw}$  menor al de diseño producen un sobrepico inicial de temperatura más alto, mientras que las oscilaciones de la válvula se reducen cuando se decrementan los valores de  $C_{vw}$  o de  $K_C$ .

#### 7. REFERENCIAS

- [1] Smith, J. M. (1997). "Ingeniería de la Cinética Ouímica". Editorial CECSA. México.
- [2] Shinskey, F. G. (1988). "Process Control Systems (Application, Design and Tuning)". Mc Graw Hill. Third Edition. U.S.A.

- [3] Luyben, William (1990). "Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers". Mc Graw Hill. Second Edition. U.S.A.
- [4] Álvarez, Alex y col. "Control e Instrumentación de un reactor exotérmico". Universidad de los Andes. Facultad de Ingeniería. Mérida Venezuela.
- [5] Smith, C. y Corripio A. (1999). Control Automático de Procesos (Teoría y Práctica). Editorial Limusa. México.
- [6] Pérez, Aída y Peña, Eliana (2001), "Simulación para el Control de Reactores Químicos Tipo Tanque Continuamente Agitados y por Lotes", Trabajo Especial de Grado, Facultad de Ingeniería, Universidad de Carabobo, Valencia, Venezuela.
- [7] Corripio, Armando (1990). "Tuning of Industrial Control Systems". Instrument Society of America. North Carolina, U.S.A