

Este artículo puede ser usado únicamente para uso personal o académico. Cualquier otro uso requiere permiso del autor o editor.

El siguiente artículo fue publicado en *Información Tecnológica*, 14(5): 43-49 (2003); y lo puede consultar en <http://www.citrevistas.cl/a1.htm>

CONTROL DE TEMPERATURA EN UN REACTOR CATALÍTICO PARA LA ALQUILACIÓN DE HIDROCARBUROS A PESAR DE CINÉTICA INCIERTA

Gudelia Carrizales-Martínez^{1,3}, Ricardo Femat^{2,*} y Victor González-Álvarez³

¹ CUCEI-UDG ², MAT. APLIC. Y SIST. COMPUT, IPICyT ³, Inst. Tecnológico de Cd. Madero,

*A quien la correspondencia debe ser enviada.

Apdo. Postal 3-90, 78231 San Luis Potosí, S. L. P., México.

Tel:(+52-4) 826-2440, Fax: (+52-4) 826-2372, rfemat@uaslp.mx

RESUMEN

Se lleva a cabo la estabilización de un reactor catalítico para la alquilación de hidrocarburos a pesar de cinética incierta mediante la robustificación de un controlador obtenido a partir de técnicas de control geométrico. Se trata con el control robusto de una planta no lineal de primer orden con errores de modelo y perturbaciones. El controlador utilizado consiste en una ley de control tipo linealizante y un compensador dinámico de incertidumbres. Se presentan dos versiones para el compensador dinámico: (1) un esquema discreto en el tiempo; y (2) un esquema continuo en el tiempo. El control propuesto estabiliza al reactor continuo tipo tanque agitado (RCTA) cerca de una referencia (estabilidad práctica) a pesar de variaciones paramétricas e incertidumbre en modelo interno. Al hacer la comparación entre las dos versiones presentadas para el compensador dinámico, se puede observar que el desempeño del controlador es prácticamente el mismo.

PALABRAS CLAVES: Reactores químicos de flujo continuo; control no lineal; alquilación de hidrocarburos; estabilización robusta; estimación de incertidumbres.

ABSTRACT:

Stabilization of a catalytic reactor for hydrocarbon alkylation despite of unknown kinetics is carried out. This is made by means of controller robustification which is obtained departing from geometric control techniques. We deal with the robust control of a first order nonlinear plant with model errors and disturbances. The controller used consist of a linearizing-like feedback and a dynamic uncertainty estimator. Two versions are presented for the uncertainty estimator: (1) discrete - time scheme; and (2) continuous - time scheme. The controller proposed is able to stabilize the continuous-stirred tank reactor (CSTR) close to the set-point (practical stabilizability) despite of parametric variations and internal model uncertainties. A comparison between the two versions is presented, which shows that the controller performance is similar.

KEYWORDS: Continuous flow chemical reactors; nonlinear control; hydrocarbon alkylation; robust stabilization; uncertainty estimation.

INTRODUCCIÓN

Como una consecuencia del Acta del Aire Limpio (CAA, por sus siglas en inglés) (Corma y Martínez, 1993), en México, como en todas las refinerías del mundo, se ha visto la necesidad de establecer estrategias con motivo de cumplir con las nuevas especificaciones en la composición de las gasolinas. En este sentido se busca que se incremente la fracción de alquilación en la gasolina reformulada. La gasolina de alquilación tiene un número alto de octano de motor, con una sensibilidad baja de octano, porque está formado mayormente por parafinas ramificadas de baja reactividad.

El proceso de alquilación es complejo. De hecho, el mecanismo de reacción en la alquilación no está comprendido del todo. Existen diversas alternativas propuestas (ver Langley y Pike, 1972, y referencias ahí citadas). Por ejemplo en una unidad de alquilación se producen muchas reacciones laterales no deseadas debido a 1) las impurezas presentes y 2) a las condiciones de operación (Ryskamp y Badabas, 1986). En relación al primer punto, la mayoría de los productos, tales como los aceites solubles ácidos (polímeros) y el alquilado pesado, disminuyen la calidad del producto. También la polimerización olefina - olefina es perjudicial porque produce brea que gasta al catalizador y reduce el rendimiento de los productos valiosos. En relación a las condiciones de operación, se sabe que una variación en la temperatura de reacción tiene un efecto casi lineal en el número de octano del alquilado. Cuando se aumenta la temperatura, el octanaje del alquilado disminuye y la producción de polímeros se incrementa (Corma y Martínez, 1993). *El mejorar el control de la temperatura en el reactor provee beneficios tales como mejora en la calidad y rendimiento del alquilado y reducción en el consumo del catalizador* (Ryskamp y Badabas, 1986).

Otra variable de operación importante es la relación Isobutano/Olefina (I/O). Cuando se alimentan altas relaciones I/O, las olefinas tienen mayor probabilidad de reaccionar con una molécula de isobutano para formar el producto deseado que de formar la polimerización olefina - olefina, y así minimizar las reacciones indeseables. Frecuentemente, los efectos de la concentración de la olefina están correlacionados al factor velocidad espacial o tiempo de residencia, baja velocidad espacial en el reactor incrementa el octanaje y disminuye los requerimientos de ácido, mientras que altas velocidades espaciales incrementan la formación de sulfatos ácidos; los cuales causan problemas de corrosión en la sección de fraccionación siguiente

(Corma y Martínez, 1993). Una disminución en la relación I/O origina error en el modelo puesto que las reacciones consideradas no contemplan la polimerización, pueden presentarse perturbaciones al variar la relación I/O a la entrada de la unidad y puede haber variaciones paramétricas en el tiempo de residencia.

El carácter no lineal de los procesos químicos representa un factor de complejidad importante cuando se plantea el problema de control. Los procesos químicos se han controlado tradicionalmente usando análisis y herramientas de diseño de sistemas lineales (Bequette, 1991). La teoría de sistemas lineales ha sido muy aceptada porque se tiene una solución analítica, de aquí que existen generalmente pruebas más rigurosas de estabilidad y desempeño. También, las demandas computacionales para la simulación e implementación de procesos lineales es menor comparada a la simulación no lineal. Por supuesto, el uso de sistemas lineales está limitado si el proceso es altamente no lineal. Se han realizado progresos en la teoría de control no lineal, que combinada con avances en la *hardware* de las computadoras. Estos permiten en la actualidad que las estrategias de control no lineales se puedan implementar satisfactoriamente en los procesos. Es sabido que el carácter no lineal lo aporta el término de la tasa de reacción.

En el presente trabajo se propone un controlador de temperatura basado en modelo interno. Se reconoce que para realizar control no lineal sobre el reactor catalítico de alquilación existen incertidumbres intrínsecas a cinética debido a errores en el mecanismo de reacción, la cinética y la obtención experimental de parámetros cinéticos. El objetivo es diseñar una ley de control que establezca prácticamente la temperatura en un reactor catalítico para la alquilación de hidrocarburos con tasas de reacción inciertas. El desempeño del controlador se probó ante variaciones paramétricas y perturbaciones en el inverso del tiempo de residencia, **2**, por la importancia, ya mencionada, en el proceso de alquilación.

METODOLOGÍA

El reactor donde procede la reacción $A + B \rightarrow$ Productos está representado por una planta no lineal de primer orden con errores de modelo. El modelo se obtuvo bajo las condiciones siguientes: mezclado perfecto, caudal F constante, proceso no isotérmico, propiedades constantes y parámetros conocidos. Se propone un controlador que consiste en una ley de control tipo linealizante y un compensador dinámico de incertidumbres. Para la solución del problema se

usarán las herramientas de control geométrico (Isidori, 1989).

Se considera un RCTA, donde procede $A + B \div$ Productos, no isotérmico cuyo modelo está dado por:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \mathbf{q}(x_{1e} - x_1) - ER(x) \\ \dot{x}_2 &= \mathbf{q}(x_{2e} - x_2) + \mathbf{b}(x)R(x) - \mathbf{g}x_2 + \mathbf{g}u \end{aligned} \quad (1)$$

donde $2 = F/V$ es el inverso del tiempo de residencia (F es el caudal de alimentación y V el volumen del reactor), \mathbf{C} es un coeficiente conocido, y E es el coeficiente estequiométrico. \mathcal{H} es la entalpía asociada a la rapidez de conversión $R(x)$ y $x_e = (x_{1e}, x_{2e})$ es un vector que representa la alimentación al reactor. $x_1 \mathbf{0} \mathbf{U}_+^2$ es el vector de concentración y $x_2 \mathbf{0} \mathbf{U}_+$ es la temperatura del reactor, u es la temperatura de enfriamiento, la cual se toma como la entrada de control. Hay un subconjunto natural $M \mathbf{d} \mathbf{U}_+^{n+1}$ donde está definido el sistema dinámico (1). En efecto, $M = [0, x_1^{\max}] \times \mathbf{U}_+$, donde $x_1^{\max} \mathbf{0} \mathbf{U}_+^n$ es la máxima concentración posible bajo las condiciones de alimentación y reacción dadas (debe notarse que $\mathbf{1}_{x_1^{\max}} \mathbf{1} < 4$). En este trabajo asumimos que el reactor isotérmico $\mathbf{0}_1 = 2(x_{1e} - x_1) - ER(x_1; x_2^*)$, donde x_2^* es una constante, es asintóticamente estable en $x_1^* \mathbf{0} M$ (Gavalas, 1968).

Para el diseño de los dos controladores se hacen las siguientes suposiciones: (A.1) La temperatura del reactor x_2 está disponible para medición. (A.2) El tiempo de residencia $1/2$ y el coeficiente de transferencia de calor \mathbf{C} son parámetros conocidos. (A.3) La tasa de reacción $R(x)$ y la entalpía de reacción $\mathcal{H}(x) \mathbf{0} \mathbf{U}^n$ se desconocen. (A.4) El reactor isotérmico $\mathbf{0} = 2(x_{1e} - T) - ER(T; x_2^*)$ posee un punto de equilibrio único $T^*(x_2^*)$, para cualquier temperatura $x_2^* \mathbf{0} \mathbf{U}_+$. Adicionalmente a las suposiciones (A.1) - (A.4), se considera que se mantienen las siguientes propiedades: (P.1) $R(x_1, 0) = 0$ para $0 \# x_1 \# x_1^{\max}$. (P.2) $R(x_1, x_2) \# R^*(x_1)$, para toda $x_2 \mathbf{0} \mathbf{U}_+$ para alguna función acotada $R^*(x_1)$. $\mathbf{1} \mathcal{H}(x) \mathbf{1} \# \mathcal{H}_1 < 4$, para toda $x \mathbf{0} M$. Todas las reacciones químicas en la industria de procesos satisfacen (P.1) y (P.2). (P.1) establece que no hay reacción química a cero temperatura, y (P.2) establece que las tasas de reacción están acotadas.

Compensador dinámico discreto

Se propone un controlador el cual consiste en una ley de control tipo linealizante y un compensador dinámico de incertidumbres. Se parte de las

suposiciones (A.1) - (A.4) y de las propiedades (P.1) y (P.2) para llegar a un algoritmo de control robusto basado en estimación de los términos inciertos. El compensador dinámico consiste en un esquema discreto en el tiempo que provee un valor estimado tiempo a tiempo de la incertidumbre. Al disponer de valores estimados de la incertidumbre cercanos al actual, éstos se pueden usar a través de control retroalimentado para contrarrestar e inducir una dinámica deseada.

Defínase lo siguiente $\mathbf{O}(t) := \mathcal{H}(x(t)) R(x(t))$, y $L(x_2) := 2(x_{2e} - x_2) - \mathbf{C}x_2$, la ecuación de temperatura se puede escribir como

$$\dot{x}_2 = L(x_2) + \mathbf{h}(t) + \mathbf{g}u(t) \quad (2)$$

donde $L(x_2)$ representa los términos conocidos que son esencialmente lineales, $\mathbf{O}(t)$ representa una función no lineal incierta. En principio una manera de estimar $\mathbf{O}(x_2)$ es resolviendo la ecuación dinámica de temperatura x_2 para obtener:

$$\mathbf{h}(t) = \dot{x}_2 - L(x_2) - \mathbf{g}u(t) \quad (3)$$

Para ello se requiere conocer los términos del lado derecho, situación poco realista. Empero, la dinámica de la temperatura $\mathbf{0}_2$ puede aproximarse utilizando diferencias finitas centradas en la k -ésima medida de la temperatura, es decir, $\mathbf{0}_2(t_k) = (x_2(t_k) - x_2(t_{k-1}))/J$, donde $J > 0$ es la tasa de muestreo. De esta manera, se puede considerar la dinámica en el intervalo $t \mathbf{0} (t_k, t_{k-1}]$ para algún $J = t_k - t_{k-1}$, y siguiendo las ideas reportadas por Álvarez-Ramírez y col., (1996), obtener lo siguiente:

$$u(x_{2,k}) = \frac{1}{\mathbf{g}} - L(x_{2,k}) - \hat{\mathbf{h}}_k - K(x_{2,k} - x_2^*) \quad (4)$$

$$\hat{\mathbf{h}}_k = \frac{x_{2,k} - x_{2,k-1}}{t} - L(x_{2,k}) - \mathbf{g}u_{k-1} \quad (5)$$

donde $x_{2,k} = x_2(t_k)$. Así, el controlador propuesto consiste en la ley de control de tipo linealizante (4) y el compensador dinámico de incertidumbre (5).

Compensador dinámico continuo

Se propone un controlador el cual consiste en una ley de control tipo linealizante para obtener un controlador robusto ante errores en modelo y variaciones paramétricas. El algoritmo propuesto comprende dos partes: a) una ley de tipo linealizante y b) un compensador dinámico de incertidumbres. Se aglutinan

las incertidumbres en una función no lineal la cual se interpreta como una nueva variable de estado en un sistema de dimensión 2 (sistema extendido). Luego se construye un observador de estados para el sistema extendido. De esta manera, una aproximación a la ley de control linealizante se provee de un estimado de las incertidumbres y éstas se pueden contrarrestar. Entonces el algoritmo resulta en un control asintótico robusto (CAR).

Retomando la ecuación de temperatura (2), consideremos la ley de control

$$u = \frac{1}{g} [-L(x_2) - h - K(x_2 - x_2^*)] \quad (6)$$

donde $K > 0$. No obstante, la ley de control linealizante no puede ser implementada porque el estado \mathbf{O} es desconocido. Adicionalmente no se dispone de él por mediciones. Empero, es posible explorar la propiedad de observabilidad para proponer un controlador por retroalimentación de salida.

Así, siguiendo las ideas reportadas por Álvarez-Ramírez y col., (1997), se propone

$$u(x_1, x_2) = \frac{1}{g} [-L(x_2) - \hat{h}(x_1, x_2) - K(x_2 - x_2^*)] \quad (7)$$

donde \mathbf{O} es un estimado del estado \mathbf{O} . Debe puntualizarse que $\mathbf{O}(x_1, x_2)$ es una nueva variable de estado que permite extender el sistema definido en $\mathbf{M}^d \mathbf{U}^{n+1}$ a un sistema en una variedad $(n+1)$ -dimensional inmersa en un espacio \mathbf{U}^{n+2} .

Así mismo, para estimar $\mathbf{O}(t)$ se propone el siguiente observador:

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}}_2 &= L(\hat{x}_2) + \hat{h} + g(x_2, \hat{h})u + k_1 L(x_2 - \hat{x}_2) \\ \dot{\hat{h}} &= k_2 L^2(x_2 - \hat{x}_2) \end{aligned} \quad (8)$$

con condiciones iniciales $\hat{x}_2(0) = x_{2,0}$ y $\mathbf{O}(0) = \mathbf{O}^*$ donde \mathbf{O}^* es un número arbitrario. \hat{x}_2 y \mathbf{O} son valores estimados de x_2 y \mathbf{O} , respectivamente. L y L^* es un parámetro de ajuste y las constantes k_1 y k_2 son elegidas de tal manera que el polinomio $P_2(s) = s^2 + k_1s + k_2 = 0$ tenga todas sus raíces localizadas en el hemiplano complejo izquierdo, o sea, $P_2(s)$ es Hurwitz. El sistema (8) se denominará como un reconstuctor de incertidumbres. Se nota que este

estimador es un observador de alta ganancia, su uso está motivado por la idea de recuperar la dinámica de las incertidumbres aglutinadas en \mathbf{O} lo más rápido posible con el fin de compensarlas. \mathbf{O} Se inicializa arbitrariamente. Las ecuaciones (7) y (8) definen un controlador de retroalimentación dinámica.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Como un caso de estudio se considera un reactor químico continuo tipo tanque agitado no isotérmico en el cual se lleva a cabo la reacción exotérmica irreversible de segundo orden $A + B \rightarrow \text{Productos}$ (Aris, 1973), cuya cinética está dada por $R(x) = x_{1,1} x_{1,2} k_0 \exp(-Ea/Rx_2)$, donde Ea es la energía de activación, R es la constante de los gases y k_0 es el factor de frecuencia o factor preexponencial. Se eligió esta reacción por la similitud que tiene con la reacción Isobutano + Propileno $\rightarrow iC_j$ para $j = 5, 6, 7, 8, 9, 10$; y a que el rango de los valores de temperatura que es la variable a controlar, así como algunos otros parámetros tales como relación de reactivos, calor de reacción, se encuentran en el rango de los valores de la reacción de alquilación. Los valores utilizados son: $\tau = 0.1 \text{ min}^{-1}$, $x_{1e} = 20 \text{ mol-g/l}$, $x_{2e} = 3 \text{ mol-g/l}$, $T = 10071.5 \text{ }^\circ\text{K}$, $x_{3e} = 290 \text{ }^\circ\text{K}$, $\tau = 0.0385 \text{ min}^{-1}$, $u = 360 \text{ }^\circ\text{K}$, $\Delta H = 30.769 \text{ }^\circ\text{K} \cdot \text{l/mol-g}$, $k_0 = 33 \times 10^9 \text{ min}^{-1}$.

Para todas las simulaciones la regulación de temperatura se realizó en el punto de equilibrio inestable que corresponde a $x_2^* = 340.3 \text{ }^\circ\text{K}$. Se impone saturación a $500 \text{ }^\circ\text{K}$. Para el compensador dinámico discreto los parámetros de control son $K = 1.0$ y $J = 0.1$; y para el continuo $K = 1.0$ y $L = 15$, para las condiciones iniciales $(x_{1,0}, x_{2,0}, x_{3,0}, \hat{x}_{3,0}, \mathbf{O}_0) = (20, 3, 290, 290, 20)$.

Las Figuras 1 y 2 muestran el desempeño de los controladores ((4) y (5)) y ((7) y (8)), respectivamente, ante variación del parámetro asociado con el inverso del tiempo de residencia, τ , de $\pm 20 \%$. Puede observarse en la Figura 1.a que la temperatura de referencia se alcanza primero para el caso cuando el inverso del tiempo de residencia se disminuye (aproximadamente a los 8.5 min.), y que la dinámica de la temperatura del reactor es más lenta cuando el inverso del tiempo de residencia se incrementa. En la Figura 1.b se puede observar que se requiere una acción de control mayor en estado estacionario para el caso cuando el inverso del tiempo de residencia se incrementa. Este comportamiento se

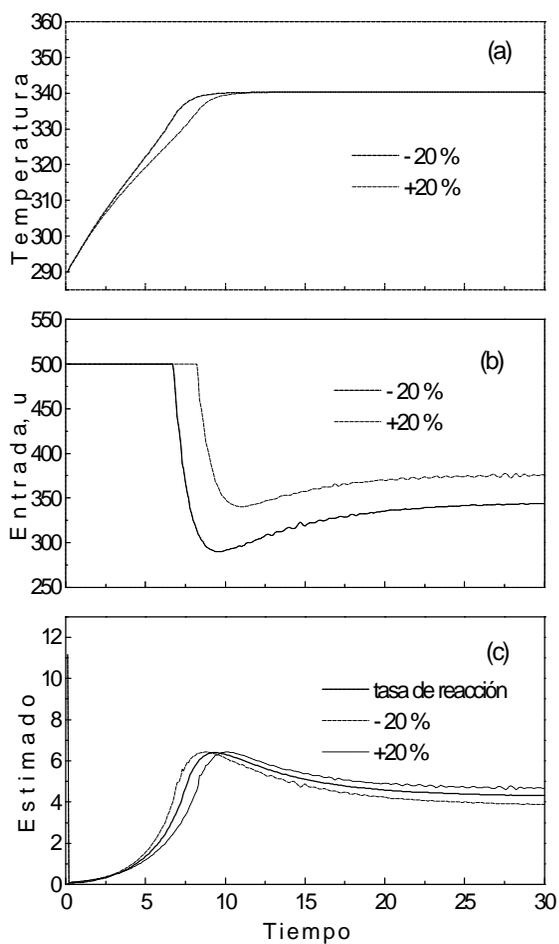


Figura 1 Desempeño del controlador con compensador dinámico discreto ante variación paramétrica.

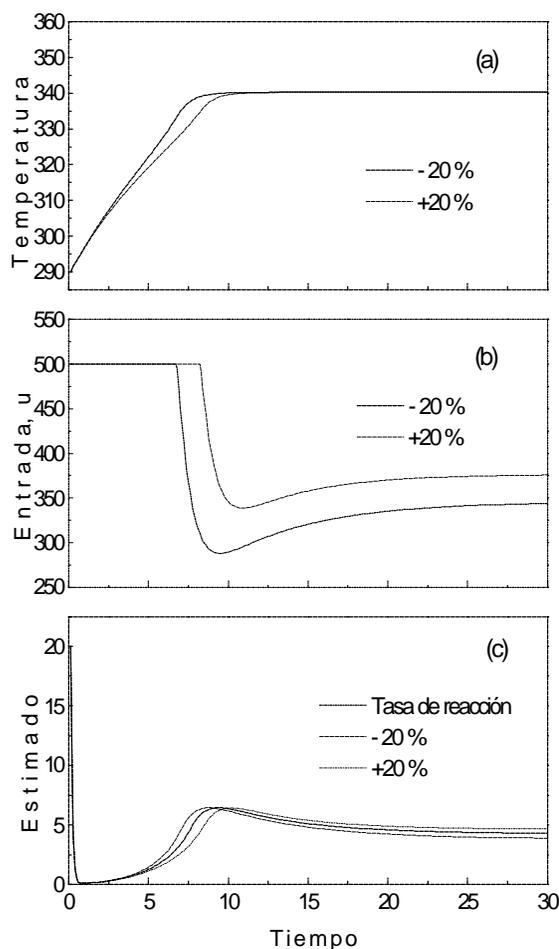


Figura 2 Desempeño del controlador con compensador dinámico continuo ante variación paramétrica.

tendrá que tomar en consideración en la reacción de alquilación, ya que en ésta el tiempo de residencia es un parámetro importante. La Figura 1.c muestra que no hay una diferencia significativa en el comportamiento del estimado de la incertidumbre en ambos casos. En la Figura 2 se muestra que el desempeño del controlador con compensador continuo es prácticamente el mismo que el observado con el controlador con compensador dinámico discreto.

Las Figuras 3 y 4 muestran el desempeño de los controladores ((4) y (5)) y ((7) y (8)), respectivamente, ante una perturbación asociada con el inverso del tiempo de residencia, 2, de + 20 % a un tiempo de 20 min. Puede observarse en la Figura 3.a que a pesar de que la ley de control no contempla el rechazo de perturbaciones, el lazo cerrado tiene una buena respuesta de regulación, ya que el efecto de la perturbación es imperceptible en la temperatura del reactor. Como ya se había mencionado, en la figura 3.b se puede observar que se requiere una acción de control mayor en estado estacionario al presentarse la perturbación de incremento del inverso del tiempo de

residencia, y que el controlador es sensible a altas frecuencias. En la Figura 3.c se puede observar que el controlador muestra sensibilidad ante la perturbación pero el estimado de la incertidumbre continúa en su valor real. En la Figura 4 se muestra que el desempeño del controlador ((7) y (8)) es mejor que el observado con el controlador ((4) y (5)).

Una diferencia notable es que el controlador ((4) y (5)) es sensible a altas frecuencias, mientras que el ((7) y (8)) no lo es. También que el primero es de fácil implementación porque no se tiene que integrar un sistema de ecuaciones diferenciales, mientras que en el segundo sí.

Las leyes de control diseñadas estabilizan sin diferencias significativas la temperatura del reactor continuo tipo tanque agitado con tasa de reacción desconocida. La estabilización es cerca de una referencia (estabilidad práctica) con todas las señales internas acotadas; a pesar de variaciones paramétricas, perturbaciones actuando sobre el sistema y errores de modelo. La estabilización es con acciones de control suaves y de bajo esfuerzo.

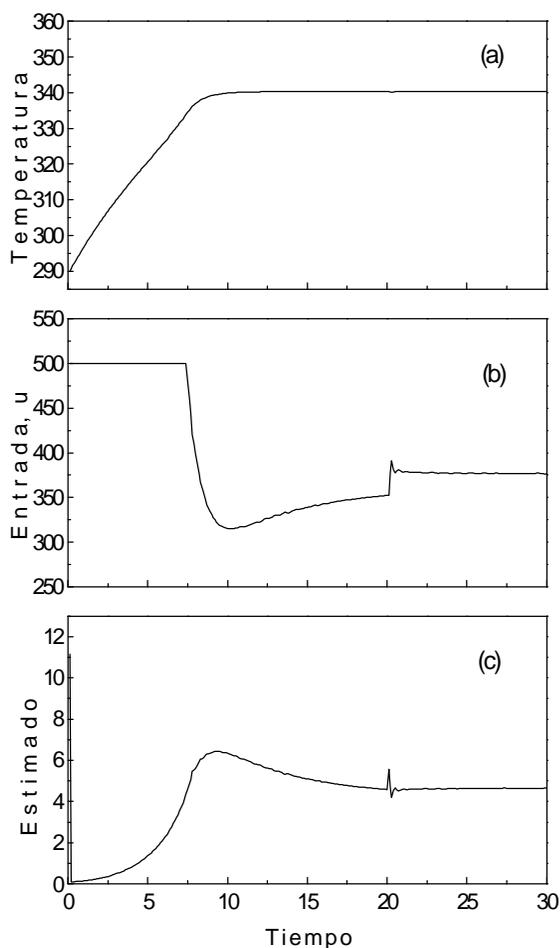


Figura 3 Desempeño del controlador con compensador dinámico discreto ante perturbaciones.

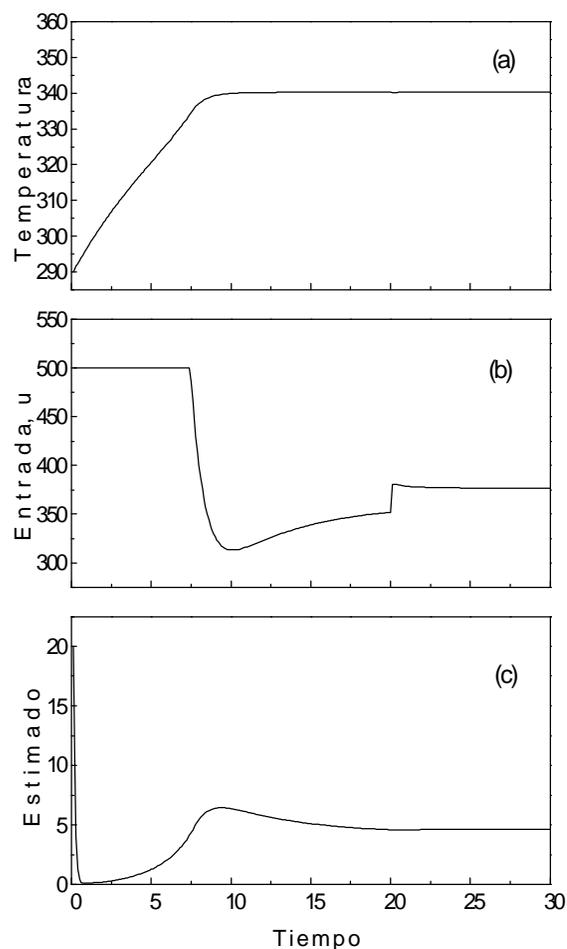


Figura 4 Desempeño del controlador con compensador dinámico continuo ante perturbaciones.

AGRADECIMIENTOS

Gudelia Carrizales Martínez desea agradecer el financiamiento otorgado por CONACYT mediante el programa de becas crédito. Al Instituto Mexicano del Petróleo por el financiamiento parcial bajo el proyecto número FIES 96-31-III. Este trabajo ha sido realizado bajo el Proyecto 31122U financiado por CONACYT.

REFERENCIAS

Álvarez-Ramírez J, R. Suárez and R. Femat. "Control of Continuous-Stirred Tank Reactors: Stabilization with Unknown Reaction Rates," *Chem. Eng. Sci.* **51**, 4183 (1996).
 Álvarez-Ramírez J., R. Suárez and R. Femat. "Robust Stabilization of Temperature in Continuous-Stirred-Tank Reactor," *Chem. Eng. Sci.* **52**, 2223 (1997).
 Aris, R. "Análisis de Reactores," *Editorial Alhambra*, Madrid (1973).
 Bequette B. W. "Nonlinear Control of Chemical Processes: A review." *Ind. Eng. Chem. Res.* **30**,

1391-1413 (1991).

Corma, A. and A. Martínez "Chemistry, Catalysts and Processes for Isoparaffin - Olefin Alkylation: Actual Situation and Future Trends," *Catal. Rev. Sci. Eng.*, **35** 483 (1993).
 Gavalas G. R., *Nonlinear Differential Equations for Chemically Reacting Systems*, Springer, N.Y., (1968).
 Isidori, A., *Nonlinear Control Systems*, Springer-Verlag, Berlin (1989).
 Langley R. and Pike R. W. "The Kinetics of Alkylation of Isobutane with Propylene." *J. AIChE Journal* **18**, 698 (1972).
 Ryskamp, C. J. and Badavas "Better alkylation control" *Hydrocarbon Processing* **65** 113 (1986).