



ESTRUCTURA DE CONTROL JERARQUICO APLICADA A UN REACTOR DE AMONIACO, TIPO TUBULAR, CON ENFRIAMIENTO INTERMEDIO

A HIERARCHIC CONTROL STRUCTURE APPLIED TO AN AMMONIA TUBULAR REACTOR WITH COLD SHOT COOLING

J. García¹, G. Fernández-Anaya^{2*}, F.D. Vargas-Villamil¹ y E. Orduña¹

¹*Matemáticas Aplicadas y Computación, Instituto Mexicano del Petróleo
Eje Central Lázaro Cárdenas 152, México, D.F. 07330*

²*Depto. de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana,
Prolongación Paseo de la Reforma 880, Col. Lomas de Santa Fe, México, D. F. 01210*

Recibido 31 de Mayo 2010; Aceptado 18 de Agosto 2010

Resumen

Las estructuras de control jerárquicas son útiles en procesos altamente integrados puesto que descomponen un sistema complejo en varios subsistemas que pueden tener diferentes objetivos (e.g. estabilización, desempeño, optimización) o escalas de tiempo. En este trabajo se propone una estructura jerárquica para el control de un reactor de amoniaco con enfriamiento intermedio que es altamente no lineal y está fuertemente acoplado. El sistema de control jerárquico tiene tres niveles. El primer nivel está compuesto de controladores tipo PI y su principal objetivo es la estabilización. El segundo nivel está compuesto de un controlador interpolante que provee la temperatura de referencia para el control de la primera cama del reactor. Su objetivo es ampliar el rango de operación del controlador y por lo tanto mejorar el desempeño. El tercer nivel esta compuesto de un optimizador cuyo objetivo es maximizar la producción de amoniaco. Los resultados muestran que la estructura jerárquica permite tener un control robusto y estable en un amplio rango de operación, manteniendo las salidas de control en su valor de referencia y rechazando las perturbaciones.

Palabras clave: estructura jerárquica, control interpolante, control en cascada, camas de catalizador.

Abstract

Hierarchical control structures are useful in highly integrated processes, since they decompose a complex system in various subsystems, which may have different objectives (e.g. stabilization, performance, optimization) or scales of time. In this work, a hierarchical structure for the control of an ammonia reactor with cold-shot cooling, which is highly nonlinear and strongly coupled, is proposed. This hierarchical control system has three levels. The first level is composed of PI type controllers, and its main objective is stabilization. The second level is composed of an interpolated controller that provides the reference temperature for the control of the first bed of the reactor. Its objective is to extend the operating range of the controller and therefore, to improve the performance. The Third level is composed of an optimizer whose objective is to maximize the ammonia production. The results show that the hierarchical structure results in a robust and stable controller in a large operating range, keeping the control outputs on its reference while rejecting the disturbances.

Keywords: structure, interpolate controller, cascade controller, catalyst beds.

* Autor para la correspondencia. E-mail: guillermo.fernandez@uia.mx

1 Introducción

La importancia de un sistema de control confiable para la operación estable, segura y económica de los procesos químicos, ha sido una de las principales preocupaciones de los ingenieros y de los investigadores. En las plantas actuales, la función de los sistemas de control va más allá de los procesos básicos de monitoreo y regulación. Actualmente, los sistemas de control son vistos por la industria como dispositivos para mantener el proceso dentro del rango de operación, mantener la calidad, y optimizar la producción. Además, debido a que muchos procesos son no lineales y están altamente integrados los sistemas de control juegan un papel crucial en su operación. Por esto, el diseño e implementación de nuevas estructuras de control y controladores se convierte en un proceso complejo que requiere de métodos cada vez más avanzados.

Existen diferentes métodos para diseñar controladores que utilizan técnicas de linealización o modelos simplificados, tal es el caso del control predictivo basado en modelos (MPC por sus siglas en inglés), del control adaptable o el control de ganancia programada (Gain Scheduling). En general, estos métodos definen el sistema de control en puntos de operación característicos. Sin embargo, su rango de operación puede ser ampliado utilizando métodos de interpolación. Esto permite obtener sistemas de control que son robustos en un mayor rango de operación. Además, dividiendo el sistema en jerarquías, se pueden optimizar los costos o maximizar la producción. La estructura jerárquica puede extender los métodos de control hacia múltiples objetivos con diferentes prioridades. Para esto, la planta se descompone formando grupos con diferentes niveles de prioridad y escalas de tiempo.

En este trabajo se propone una estructura de control jerárquico aplicada al modelo de un reactor de amoníaco formado por un reactor tubular con tres camas de catalizador. Además de la estabilización, el propósito de este control es mejorar el desempeño del reactor aumentando el rango de operación de los controladores, y maximizar la producción de amoníaco. Este control jerárquico está estructurado en tres niveles. El principal objetivo del primer nivel, que está formado por controladores PI, es la estabilización. Este utiliza los flujos de enfriamiento, para regular la temperatura de

enfriamiento a la entrada del reactor y las temperaturas de la segunda y tercera cama de catalizador. El objetivo del segundo nivel es obtener un buen desempeño en un amplio rango de operación, para esto, se utiliza un control interpolante. Este permite extender el punto de operación del proceso no lineal más allá del rango de estabilidad, el cual, está limitado por la consideración de linealidad durante el diseño del controlador. Este control regula la temperatura a la salida de la primera cama de catalizador y provee la referencia para el controlador PI del primer nivel. Finalmente, el objetivo del tercer nivel es optimizar la producción de amoníaco. Para esto, se maximiza la conversión de amoníaco con respecto a la temperatura de la cama de catalizador, esta temperatura se utiliza como referencia en el control interpolante. Los resultados muestran que la estructura jerárquica permite tener un control robusto y estable en un amplio rango de operación, manteniendo las variables del proceso en su valor de referencia y eliminando perturbaciones, comparado con los resultados obtenidos por Stephens y Richards (1973), Silverstein y Shinnar (1982) y Morud y Skogestad (1998).

2 Reactor de amoníaco

En este trabajo se utilizó el modelo desarrollado por Morud y Skogestad (1998). Este modelo fue desarrollado para estudiar las oscilaciones sostenidas, en la temperatura de salida del reactor, que surgieron en un reactor de Amoníaco de una planta en Alemania. Este ciclo límite, con un rango de 250 a 500 °C, resultaba ante perturbaciones en la presión o temperatura de alimentación. Además de los problemas asociados con la operación, estas variaciones pueden dañar el catalizador y la estructura del reactor. El objetivo de este modelo (Morud y Skogestad, 1998) fue el análisis de la dinámica del proceso y su estabilización. Ellos analizaron el modelo linealizado utilizando el diagrama de Nyquist y estabilizaron el proceso utilizando un control proporcional en el flujo de alimentación.

El reactor para la producción de amoníaco está formado por un reactor tubular con tres camas de catalizador (Fig. 1). El flujo de alimentación (F) se precalienta con los efluentes del reactor en un intercambiador de calor colocado a la salida del

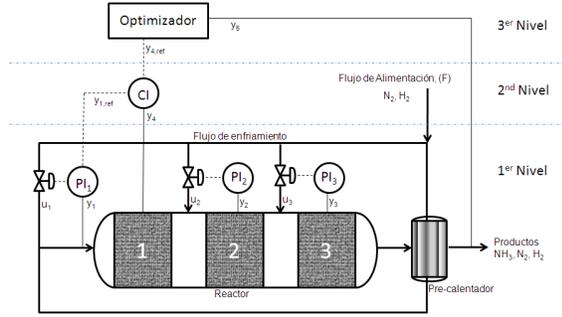


Fig. 1: Reactor de amoníaco y estructura de control jerárquico. PI_i control tipo PI; CI control interpolante; y_i salidas de control; u_i entradas de control; $y_{i,ref}$ referencia del controlador i .

reactor. Mediante un *by-pass*, parte del flujo de alimentación se utiliza para regular las camas de catalizador y estabilizar el proceso. Este flujo de enfriamiento intermedio es inyectado a la entrada de la segunda (u_2) y tercera cama (u_3) de catalizador. En la primera cama, este flujo de enfriamiento (u_1), se mezcla primero con el flujo de alimentación restante (Fig. 1).

2.1 Modelo del reactor

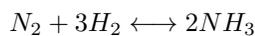
El modelo del reactor de amoníaco se obtiene haciendo un balance de materia y energía en cada cama de catalizador. Las ecuaciones diferenciales que representan el modelo son:

$$u_w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{Cp_g}{Cp_c} r(T, c) \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_w \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\Delta H_r}{Cp_c} r(T, c) + \Gamma \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2)$$

donde $u_w [s^{-1}]$ es la velocidad de difusión de onda térmica, $Cp_g [J/kgK]$ es la capacidad calorífica del gas, $Cp_c [J/kgcatK]$, es la capacidad calorífica del catalizador, $T [K]$ es la temperatura, $c [kgNH_3/kgGas(NH_3 + N_2 + H_2)]$ es la concentración del amoníaco, $\Gamma [s^{-1}]$ es el coeficiente de dispersión, $r [kgNH_3/kgCat.s]$ es la velocidad de reacción y $\Delta H_r [J/kgNH_3]$ es el calor de reacción.

El amoníaco se obtiene de la reacción reversible entre el nitrógeno y el hidrógeno,



La velocidad de reacción $r_{N_2} \left[\frac{kmolN_2}{(kgCat)hr} \right]$ está dada por la ecuación de Temkin-Pishev (Froment

y Bischoff, 1990):

$$r_{N_2} = \frac{1}{\rho_c} \left[K_1 P_{N_2} \frac{P_{N_2}^{1.5}}{P_{NH_3}} - K_2 \frac{P_{NH_3}}{P_{H_2}^{1.5}} \right] \quad (3)$$

$$K_1 = (1.79 \times 10^4) e^{-\frac{87090}{RT}} \quad (4)$$

$$K_2 = (2.57 \times 10^{16}) e^{-\frac{198464}{RT}} \quad (5)$$

donde P_{N_2} , P_{H_2} y P_{NH_3} [bar] son las presiones parciales del nitrógeno, el hidrógeno, y el amoníaco, K_1 y K_2 son los coeficientes de reacción, $R = 8.314 [J/molK]$ es la constante universal de los gases, $\rho_c [kg/m^3]$ es la densidad del catalizador y $T [K]$ es la temperatura. Para poder reproducir los datos del reactor industrial, Morud y Skogestad (1998) multiplican la velocidad de reacción por un factor de 4.75. Este factor toma en cuenta la mayor actividad de los catalizadores actuales, puesto que esta cinética fue obtenida por Temkin y Pishev en 1940.

2.2 Intercambiador de calor

El intercambiador de calor es del tipo de tubos y coraza, con flujo a contracorriente y el algoritmo para modelarlo es del tipo (e^{-NTU}) (Kreith and Bohn, 1993),

$$e = \frac{1 - e^{-NTU(1-RF)}}{1 - (RF)e^{-NTU(1-RF)}} \quad (6)$$

$$Q = (e) (F_t Cp_g) (TE_c - TE_t) \quad (7)$$

donde NTU es el número de unidades de transferencia (relación de transferencia de calor entre los tubos y el fluido), Q es el calor total transferido, RF es la relación de flujos entre los tubos y la coraza (flujo frío y flujo caliente), TE_t es la temperatura de entrada en los tubos (temperatura del flujo frío) y TE_c es la temperatura de entrada en la coraza (temperatura del flujo caliente).

$$TS_c = TE_c - \frac{Q}{F_c Cp_g} \quad (8)$$

$$TS_t = TE_t + \frac{Q}{F_t Cp_g} \quad (9)$$

donde TS_t es la temperatura de salida de los tubos (temperatura del flujo que se calienta) y TS_c es la temperatura de salida de la coraza (temperatura del flujo que se enfría). Todas las temperaturas están en K, $F_c [kg/s]$ es el flujo másico de gas de la coraza, $F_t [kg/s]$ es el flujo másico de gas de los tubos.

3 Comportamiento del modelo

Este modelo reproduce adecuadamente la formación de ciclos límite y el apagado del reactor. Esto es el resultado de los términos no lineales de la tasa de reacción propuesta por Temkin-Pishev (Froment y Bischoff, 1990).

- *Ciclo límite* (oscilaciones sostenidas). La reproducción de este fenómeno y su análisis fue el objetivo principal de este modelo. Este se puede obtener de dos maneras: En ambos casos se parte del estado estacionario a una presión de 200 psi y a una temperatura en el flujo de alimentación de 250 °C. En el primer caso, se perturba la temperatura del flujo de enfriamiento hasta los 230 °C, manteniendo la presión constante. En el segundo caso, se perturba la presión reduciéndola hasta los 150 psi manteniéndola temperatura de alimentación constante. En ambos casos la temperatura del reactor comienza a oscilar alcanzando diferencias de temperatura de hasta de 250 °C.
- *Apagado del reactor (inhibición de la reacción)*. Cuando la temperatura del flujo de alimentación es inferior a los 200 °C la reacción se apaga puesto que la tasa de reacción es muy baja. Esto se debe a que se requiere de una temperatura mínima para que se pueda iniciar la reacción. Por esto, se utiliza un pre-calentador para incrementar la temperatura de los reactivos.

Este modelo también reproduce otros fenómenos como la reversibilidad de las reacciones a temperaturas superiores a los 520 °C lo cual, reduce la conversión. Por otro lado los flujos de enfriamiento intermedio (Fig. 1) permiten controlar la temperatura generada por la reacción y evitar la formación de ciclos límites, reacciones reversibles, y la degradación del catalizador. Aunque la degradación del catalizador no está representada en el modelo, es ampliamente conocido que los catalizadores deben operar en un rango de temperatura y que a temperaturas muy altas se degradan.

4 Diseño del sistema de control

Durante la identificación del sistema, la implementación y la sintonización del control se detectaron problemas y fenómenos que se resolvieron en forma individual. Sin embargo, la estructura jerárquica de control permite precisamente el manejo individual de diferentes problemas o diferentes objetivos, incluso con diferente escala de tiempo, para finalmente integrarse mediante funciones y algoritmos que den los parámetros de ajuste o los valores de referencia que puedan controlar el proceso de acuerdo a los requerimientos.

Entre los problemas que se detectaron durante la sintonización de los controladores, sobresale el siguiente: Al controlar el flujo de enfriamiento en la primera cama del catalizador utilizando la temperatura de salida como referencia, las oscilaciones disminuyen pero no se eliminan completamente, esto se debe al retraso de tiempo en la respuesta del sistema a causa de la dinámica lenta del cambio de temperatura en el interior del reactor. Si controlamos el flujo de enfriamiento tomando como referencia la temperatura de entrada, las oscilaciones se eliminan y el sistema se estabiliza, sin embargo, el sistema se comporta como un control abierto donde se controla la entrada pero no la salida y el control es estable pero no eficiente. Para resolver este problema, se utiliza un control en cascada donde la temperatura a la salida se utiliza para ajustar el valor de referencia de la temperatura a la entrada, a la vez, la temperatura a la entrada se utiliza para ajustar el flujo de enfriamiento. De esta manera la temperatura a la salida se ajusta al valor de referencia en forma eficiente.

Otro importante problema de control detectado, es la desestabilización de los controladores ante perturbaciones o ante cambios en las condiciones de operación. Esto se debe a que los parámetros del controlador se calculan suponiendo un sistema lineal y dado que la linealidad se mantiene en un reducido rango de operación, solo en ese rango el controlador será estable.

Para resolver el problema se implementó un control interpolante donde se obtienen diferentes valores de los parámetros del controlador, calculados a diferentes condiciones de operación.

Posteriormente dichos valores se interpolan utilizando funciones de interpolación que se ajustarán de acuerdo a las diferentes condiciones de operación que se presenten. De esta manera, tendremos un controlador robusto y estable que resistirá las perturbaciones y los cambios en las condiciones de operación.

Finalmente, es conveniente definir el punto óptimo de operación donde se obtenga la máxima eficiencia, la máxima productividad y los mínimos costos de operación o de energía.

En nuestro caso, la única referencia es la concentración del amoníaco, por lo tanto, la función objetivo para optimizar el punto de operación será la que se obtiene al graficar la concentración en función de la temperatura a la salida de la cama del catalizador, determinando el valor máximo de concentración con la mínima temperatura a la salida de la cama del catalizador para asegurar una máxima eficiencia en la reacción.

4.1 Implementación de la estructura jerárquica de control

La estructura de control jerárquico se deriva de una simplificación del sistema de control. Cuando el control esta basado en modelos, se auxilia por una serie de modelos del proceso que pueden ir desde una abstracción muy general hasta una descripción detallada.

Los niveles más altos del control corresponden a largas escalas de tiempo y controlan eventos de baja frecuencia, mientras que los niveles mas bajos corresponden a escalas de tiempo cortas y controlan eventos de alta frecuencia.

El sistema de control se implementa con una estructura jerárquica de control en tres niveles. Cada nivel se enfoca a resolver diferentes problemas de control con diferentes objetivos e incluso diferente escala de tiempo. La interacción de cada nivel se muestra en la Fig. 1.

Primer nivel

En el primer nivel los requerimientos del proceso para la estructura de control son:

- Mantener una temperatura en el interior del reactor suficientemente baja para evitar la degradación del catalizador. Observando el comportamiento del modelo, arriba de

los 500 °C la concentración del amoníaco a la salida de la cama del catalizador disminuye, debido a reacciones reversibles. Arriba de los 530 °C la concentración del amoníaco disminuye considerablemente. Esto se observa claramente en la Fig. 2.

- Mantener una temperatura adecuada en el interior del reactor para evitar reacciones reversibles del producto, que disminuyan la eficiencia del reactor.
- Evitar temperaturas demasiado bajas a la entrada del reactor que provoquen el apagado de la reacción. Observando el comportamiento del modelo, con temperaturas en el flujo de alimentación menores de 200 °C se tienen temperaturas a la salida de la cama del catalizador menores a 480 °C, iniciándose la inhibición de la reacción y el apagado del reactor. Como se puede observar en la Fig. 2.
- Evitar la formación del ciclo límite (oscilación) en la temperatura del reactor.

Para controlar la temperatura y evitar que cualquiera de las situaciones mencionadas se presente, se implementan controladores tipo PI a la entrada de cada cama de catalizador. Existen tres controladores, el primero controla la temperatura de alimentación de la primera cama de catalizador mientras que, el segundo y el tercero controlan la temperatura de la segunda y tercera cama de catalizador. Todos manipulan

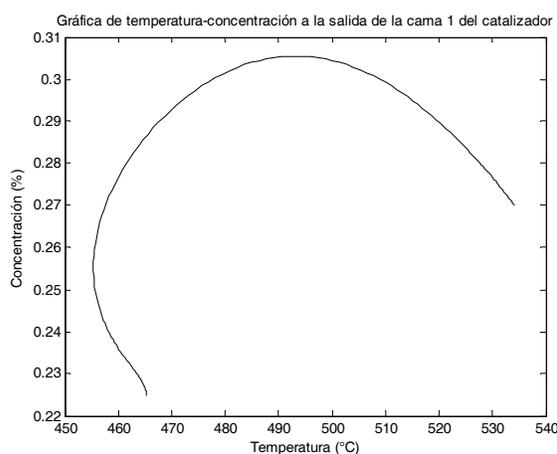


Fig. 2: Concentración de amoníaco a diferentes valores de temperatura a la salida de la primera cama del catalizador.

el flujo de enfriamiento a la entrada del reactor (Fig. 1). En la primera cama del catalizador se modifica el flujo de enfriamiento tomando como referencia la temperatura a la entrada de la cama del catalizador. En la segunda y tercera camas de catalizador se modifica el flujo de enfriamiento tomando como referencia la temperatura a la salida de cada cama de catalizador.

Segundo nivel

En el segundo nivel, los requerimientos del proceso son:

- Mantener la temperatura del flujo a la salida en el punto de referencia
- Mantener el sistema estable ante fuertes perturbaciones
- Conservar la estabilidad ante cambios en los valores de referencia
- Mantener la estabilidad en un amplio margen de operación

Para cumplir con estos requerimientos, se implementa primeramente un control en cascada, donde el valor de referencia de la temperatura a la salida se utiliza para ajustar el valor de referencia de la temperatura de entrada y este a su vez, ajusta el flujo de enfriamiento a la entrada de la primera cama de catalizador. En este segundo nivel se implementa, además, un control interpolante que nos permite ampliar el rango de operación del controlador. Para esto, se obtienen los parámetros del controlador en diferentes puntos de operación, posteriormente, dichos valores se interpolan mediante una función de interpolación que se ajusta de acuerdo a las condiciones de operación.

Tercer nivel

Finalmente, en este nivel los objetivos principales son:

- Mantener un mayor rendimiento del proceso
- Maximizar la eficiencia de la reacción para incrementar la conversión.

La optimización se enfocó a obtener la máxima concentración del producto a la temperatura de salida, lo cual indica que se tiene una máxima

eficiencia en la reacción y una mayor calidad del producto.

En la Fig. 1 se muestra la implementación de la estructura de control en el reactor de amoniaco. En el controlador CT1, la entrada u_1 corresponde al flujo de enfriamiento a la entrada de la cama No. 1 del catalizador y la salida y_1 corresponde a la temperatura de entrada al reactor. El controlador CT2 corresponde al controlador en cascada, donde la entrada u_2 es el valor de referencia del controlador CT1 y la salida y_2 corresponde a la temperatura a la salida de la cama No. 1 del catalizador. En los controladores CT3 y CT4, las variables de entrada u_3 y u_4 son los flujos de enfriamiento a la entrada y las salidas y_3 y y_4 corresponden a las temperaturas de salida en las camas No. 2 y No. 3 del catalizador, respectivamente.

5 Cálculo de los parámetros del controlador

Existen varios métodos para sintonizar un controlador tipo PID. En este trabajo utilizamos las reglas de sintonizado propuestas por Skogestad (2003). Estas están basadas en el control de modelo interno (IMC por sus siglas en inglés; Rivera *y col.*, 1986) y han tenido buena aceptación en la academia y la industria. A continuación se describe brevemente el procedimiento que se hizo en este trabajo. Un control PID en su forma paralela, está definido por (Aström y Hägglund, 2004):

$$U(t) = K_P \varepsilon(t) + K_I \int_0^t \varepsilon(t) dt + K_d \frac{d\varepsilon(t)}{dt} \quad (10)$$

$$\varepsilon(t) = Y_{ref}(t) - Y_f(t) \quad (11)$$

donde $U(t)$ es la variable de control, K_P es la constante proporcional, K_I es la constante integral, K_d es la constante derivativa, Y_{ref} es el valor de referencia, Y_f la señal de proceso filtrada y definida en el dominio de la frecuencia como:

$$Y_f(s) = G(s)Y(s) \quad (12)$$

donde $Y(s)$ es la variable de salida del proceso, $G(s)$ es la función de transferencia que se puede considerar como un filtro de primero o segundo orden, y s es la variable de Laplace en el dominio de la frecuencia.

El controlador PID en el dominio de la frecuencia (en la variable s) tiene la siguiente función de transferencia la cual relaciona $U(t)$, con el error $\varepsilon(t)$:

$$C(s) = \frac{K_P}{s} \left(\frac{1}{t_I} + s + t_D s^2 \right) \quad (13)$$

donde $K_d = K_P t_D$ y $K_I = K_P / t_I$. Este control (Eq. 13) se sintonizó utilizando las reglas propuestas por Skogestad (2003). A continuación se describe el procedimiento para sintonizar los controladores PI utilizados en este trabajo:

Paso 1.- Obtener un modelo de primer o segundo orden mas un retardo que aproxime el comportamiento de la planta.

Paso 2.- Diseñar un controlador con base en el modelo obtenido.

Se recomienda utilizar un controlador PI si la respuesta es de primer orden, y un controlador PID si la respuesta es de segundo orden. Como se indicó, en el primer nivel de control se implementaron controladores PID, sin embargo al sintonizarlos e implementarlos se observó que la parte diferencial del controlador mantiene el comportamiento oscilatorio del proceso ante una perturbación, además, en el procedimiento de sintonización Skogestad (2003) recomienda que cuando la respuesta de un proceso ante una perturbación tiene un comportamiento equivalente a un modelo de primer orden, se utilice un controlador PI.

Para obtener el modelo simplificado de primer orden que represente el comportamiento de la planta, se aplica una perturbación (Δu) y se grafica la respuesta del incremento en la variable de salida (Δy). De esta gráfica se obtiene la función de transferencia:

$$G(s) = \frac{k e^{-\theta s}}{(\tau s + 1)} \quad (14)$$

$$k = \frac{\Delta y}{\Delta u}; \quad \tau = 1.5(t_2 - t_1); \quad \theta = t_2 - \tau$$

donde k es la ganancia, τ es el tiempo característico y θ es el tiempo muerto o tiempo de retraso. Este último puede aproximarse utilizando la ecuación de Padé en una aproximación de primer orden.

$$e^{-\theta s} = \frac{2 - \theta s}{2 + \theta s} \quad (15)$$

En seguida, utilizando la respuesta a lazo cerrado, obtenemos la constante proporcional τ_C y la constante integral τ_I del controlador PI.

$$K_P = \frac{1}{k} \frac{\tau_I}{(\tau_C + \theta)} \quad (16)$$

$$K_I = \frac{K_P}{\tau_I} \quad (17)$$

donde τ_C es una variable que permite ajustar los parámetros del control, Skogestad (2003) recomienda que $\tau_C = \theta$ para obtener un control robusto. Entonces, la constante proporcional es:

$$K_P = \frac{1}{k} \frac{\tau}{2\theta} \quad (18)$$

Cálculo de los parámetros del controlador en la primera cama del catalizador.

En la primera cama de catalizador se utilizó la temperatura a la entrada como variable de control (y_1) y el flujo de enfriamiento como variable controlable (u_1), con el fin de evitar inestabilidad por el retraso de tiempo. El procedimiento para calcular los parámetros del controlador es el siguiente:

Primeramente, partiendo de un estado estable y perturbando el proceso al incrementar y disminuir el flujo de enfriamiento un 20%. Con la gráfica de la respuesta del proceso (que en este caso es la temperatura a la entrada del reactor) obtenemos la ecuación de primer orden sin retraso de tiempo que aproxima el comportamiento del proceso ante la perturbación. La función de transferencia y los valores de los parámetros del controlador se muestran en la Tabla 1.

Cálculo de los parámetros del controlador en la segunda y tercera cama del catalizador

En la segunda y tercera camas de catalizador, se utilizó la temperatura a la salida de cada cama de catalizador como variable de control (y_3, y_4) y el flujo de enfriamiento como variable controlable (u_3, u_4).

Para ajustar los controladores que regulan la temperatura en la segunda y tercera camas del catalizador del reactor de amoniaco, se realiza un procedimiento similar al descrito anteriormente para la primera cama de catalizador. A partir de un estado estable, se incrementan y disminuyen los flujos de enfriamiento a la entrada de las camas del

Tabla 1. Parámetros del controlador en las tres camas del catalizador

Control	Δu (lt/s)	Δy (°C)	k	θ (s)	τ (s)	Función de transferencia	K_P	K_I
C1	3	-22	-7.3	0	20	$G_1 = \frac{-7.3}{20S+1}$	-2.74	-0.1369
	-3	26	-8.6	0	30	$G_1 = \frac{-8.6}{30S+1}$	-3.48	-0.116
C2	4.2	-13.5	-2.02	110	130	$G_2 = \frac{-2.02e^{110S}}{130S+1}$	-0.29	-0.0022
	-4.7	7	-1.49	70	35	$G_2 = \frac{-1.5e^{70S}}{35S+1}$	-0.166	-0.0047
C3	-4.1	5	-1.22	90	80	$G_3 = \frac{-1.22e^{90S}}{80S+1}$	-0.3642	-0.0045
	4.0	-6.1	-1.52	134	100	$G_3 = \frac{-1.52e^{134S}}{100S+1}$	-0.2554	-0.0025

catalizador en un 50%. En estos casos, se grafica la temperatura a la salida de cada cama del catalizador para obtener la ecuación de primer orden y retraso de tiempo, que aproximan el comportamiento del proceso ante una perturbación. Con estas ecuaciones se obtienen los parámetros del controlador de acuerdo al procedimiento recomendado por Skogestad (2003). Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 1.

5.1 Sintonización del control en cascada

La variable de control del controlador en cascada corresponde a la temperatura a la salida de la cama del catalizador (y_2) y la variable controlable corresponde al valor de referencia de la temperatura de entrada (u_2).

Para sintonizar el control en cascada se parte de un estado estable con una temperatura del flujo de alimentación de 250 °C y una temperatura a la entrada del reactor de 377 °C. En seguida se perturba el proceso incrementando la temperatura de entrada hasta un valor de 390 °C. A continuación se grafica la temperatura a la salida de la primera cama del catalizador como respuesta a la perturbación. Con la gráfica obtenida se determina la función de transferencia y los parámetros del controlador. Como esta esquematizado en la Fig. 1.

5.2 Sintonización del control interpolante

La respuesta del proceso ante una perturbación tiene un comportamiento no lineal, esto es, que a diferentes rangos de temperatura la respuesta es diferente, obteniéndose funciones de transferencia diferentes, y por tanto, parámetros diferentes para el controlador. Esto significa que los diferentes parámetros del controlador solo darán resultados

válidos en rangos de temperatura reducidos. Para ampliar el rango de operación, el método adecuado es la interpolación de los parámetros del controlador obtenidos a diferentes rangos de temperatura.

Los parámetros del controlador en cascada obtenidos mediante el procedimiento descrito anteriormente con una temperatura de alimentación de 250 °C, corresponden al punto de operación intermedio.

Para obtener los parámetros del controlador en un punto de temperatura superior para realizar la interpolación, se parte de un estado estable donde la temperatura de alimentación es de 270 °C y la temperatura a la entrada del reactor es de 387 °C. Se perturba el proceso incrementando la temperatura a la entrada del reactor hasta un valor de 400 °C. Graficando la respuesta a la perturbación, tenemos la función de transferencia que representa el modelo de la respuesta a la perturbación. Con la función de transferencia obtenemos los parámetros del controlador de acuerdo al procedimiento sugerido por Skogestad (2003).

Para ampliar el rango de operación del controlador hasta un punto de temperatura inferior, partiendo de un estado estable con la temperatura de alimentación en 230 °C y con la temperatura a la entrada del reactor en 358 °C, se perturba el proceso disminuyendo dicha temperatura hasta un valor de 346 °C. Graficando la temperatura a la salida de la cama del catalizador como respuesta a la perturbación, obtenemos la función de transferencia que modela en forma simplificada el comportamiento del proceso ante la perturbación. A partir de la ecuación de transferencia se obtienen los parámetros proporcional e integral de la ecuación de control, de acuerdo a lo indicado por Skogestad (2003).

Tabla 2. Parámetros del control interpolante

Control	Δu (lt/s)	Δy (°C)	k	θ (s)	τ (s)	Función de transferencia	K_P	K_I
CC3	13	3.6	0.27	500	150	$G_3 = \frac{0.276e^{-500S}}{150S+1}$	0.543	0.0036
CC2	-11	-38	3.45	180	150	$G_2 = \frac{3.45e^{-180S}}{150S+1}$	0.1207	0.0008
CC1	-12	-75	6.25	175	50	$G_1 = \frac{6.25e^{-175S}}{50S+1}$	0.022	0.00045

Tabla 3. Parámetros del control en tres puntos de operación para la interpolación

Punto de operación	Temperatura (°C)	Constante proporcional (K_P)	Constante integral (K_I)
1	490	0.022	0.00045
2	500	0.1207	0.0008
3	510	0.543	0.0036

En la Tabla 2 se resumen los resultados obtenidos del procedimiento descrito para la sintonización de los parámetros del control a diferentes condiciones de funcionamiento, para posteriormente realizar la interpolación y alargar el rango de operación del control del proceso.

Con los valores de la Tabla 2, obtenemos los parámetros de los controladores interpolados para tres diferentes puntos de operación como se muestra en la Tabla 3. El primer control interpolado se obtiene de los tres controladores PI de la Tabla 2 en el primer punto de operación, el segundo control interpolado se obtiene de los tres controladores PI de la Tabla 2 en el segundo punto de operación, y similarmente para el tercer control interpolado. En el procedimiento anterior se utilizan funciones de interpolación que dependen de la temperatura y en consecuencia del punto de operación.

Para realizar la interpolación de los parámetros de los controladores utilizamos las funciones de interpolación α_i , sugerida por Fernández-Anaya y Flores-Tlacuahuac (2006)

$$\begin{aligned}
 Si \dots T \leq 490 &\rightarrow \begin{cases} \alpha_1 = 1 \\ \alpha_2 = 0 \\ \alpha_3 = 0 \end{cases} \\
 Si \dots 490 \leq T \leq 500 &\rightarrow \begin{cases} \alpha_1 = e^{\frac{(T-490)^2}{4^2}} \\ \alpha_2 = 1 - \alpha_1 - \alpha_3 \\ \alpha_3 = 0 \end{cases} \\
 Si \dots 500 \leq T \leq 510 &\rightarrow \begin{cases} \alpha_1 = 0 \\ \alpha_2 = 1 - \alpha_1 - \alpha_3 \\ \alpha_3 = e^{\frac{(T-590)^2}{4^2}} \end{cases} \\
 Si \dots T \geq 510 &\rightarrow \begin{cases} \alpha_1 = 0 \\ \alpha_2 = 0 \\ \alpha_3 = 1 \end{cases}
 \end{aligned}
 \tag{19}$$

donde $\sum_{i=1}^3 \alpha_i = 1$. Los valores de las constantes proporcional e integral del controlador interpoladas en cada punto de operación serán:

$$K_P = (K_{P1})(\alpha_1) + (K_{P2})(\alpha_2) + (K_{P3})(\alpha_3) \tag{20}$$

$$K_I = (K_{I1})(\alpha_1) + (K_{I2})(\alpha_2) + (K_{I3})(\alpha_3) \tag{21}$$

donde K_{Pi} y K_{Ii} son las constantes proporcional e integral del controlador CCi de la Tabla 2 en cada punto de operación $i = 1, 2, 3$, y las α_i dependen del punto de operación o temperatura que se considere, específicamente 490 °C, 500 °C, y 510 °C para los puntos de operación 1, 2 y 3, respectivamente.

Estos controladores interpolados estabilizan simultáneamente a las plantas $G_1(s)$, $G_2(s)$, y $G_3(s)$ en la Tabla 2. Para probar la estabilidad de lazo cerrado del control interpolado propuesto para las funciones de transferencia $G_1(s)$, $G_2(s)$, y $G_3(s)$, que representan el comportamiento del reactor en condiciones de operación diferentes, se uso un procedimiento que prueba analíticamente la estabilidad, siguiendo el criterio de estabilidad propuesto por Doyle y col. (1990), en los Teoremas 1 y 2 del capítulo 3 de esa referencia. El procedimiento se muestra con detalle en los artículos publicados por García y col. (2009), donde se demuestra que las funciones de transferencia que representan el comportamiento del reactor en los puntos de operación diferentes, se estabilizan simultáneamente con el controlador interpolado.

5.3 Referencia del control en cascada

La implementación del control en cascada está basado en un desarrollo de Morud (1995), que a su vez se basa en varios artículos entre los que se destacan el de Maarleveld y Rijnsdorp (1970) donde se optimiza la operación de una columna de destilación, y el de Morari (1980a, b) donde se indica cómo clasificar los objetivos del control dentro del control regulatorio y como analizar la estructura del control óptimo.

En este caso, el control se enfoca en la optimización de la conversión del producto, tratando de ajustar la temperatura de operación con la máxima conversión para obtener el valor de concentración más alto del producto a la salida del reactor.

El valor de referencia del controlador está dado por la optimización de la siguiente función objetivo:

$$\max_{T_1} J = c_{NH_3}(T_1, c) \quad (22)$$

donde c_{NH_3} es la concentración de amoníaco a la salida de la primera cama de catalizador en kg mol por unidad de masa total y T_1 (K) es la temperatura de referencia del control interpolante.

Si perturbamos el proceso incrementando la temperatura del flujo de alimentación de 250 °C hasta 300 °C y graficamos la temperatura a la salida de la primera cama del catalizador en un rango de 450 a 540 °C, la función de la concentración c_{NH_3} tendrá un comportamiento como el que se muestra en la Fig. 2.

En esta gráfica se puede observar que el valor de máxima concentración se encuentra entre 490 °C y 500 °C. Por tanto, al colocar el valor de referencia entre esos valores se asegura una alta conversión del producto obtenido.

Utilizando la función FMINBND de MATLAB aplicada a los valores de la función, podemos obtener el valor mínimo de temperatura en el cual la concentración es máxima. Este valor de temperatura será nuestro valor de referencia para el controlador en cascada del tercer nivel (ver la Fig. 1).

6 Resultados

6.1 Rechazo de perturbaciones

Uno de los objetivos del sistema de control es rechazar perturbaciones como la que se presenta

cuando se modifica la presión o la temperatura del flujo de alimentación, manteniendo las variables del proceso (temperatura y concentración) dentro de su valor de referencia. Otro objetivo importante del sistema de control es evitar el fenómeno de ciclo límite que puede ocasionar daños al reactor por fatiga térmica.

En la Fig. 3 se observa la gráfica que reproduce el fenómeno de ciclo límite que consiste en oscilaciones sostenidas y fuertes en la temperatura de las camas del reactor durante un periodo de tiempo. Reproducir este fenómeno para analizar su origen y la forma de resolverlo, fue el principal objetivo en el trabajo desarrollado por Morud y Skogestad (1998) como se mencionó anteriormente.

Con la siguiente prueba se verifica que el sistema de control evita la formación del ciclo límite en el reactor (oscilación de la temperatura) al reproducir la perturbación en la cual el fenómeno se presenta cuando no se tiene implementado el sistema de control.

La prueba consiste en cambiar la temperatura del flujo de alimentación de 250 a 230 °C, a partir de un estado estable. En las figs. 4 y 5 se puede observar como la temperatura se estabiliza en su valor de referencia y la concentración del amoníaco alcanza su valor máximo en la última cama del catalizador a la salida del reactor.

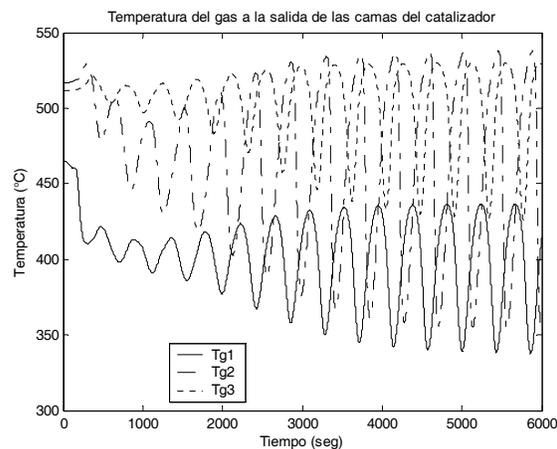


Fig. 3: Ciclo límite. Temperatura a la salida las camas de catalizador (y_1 , y_2 , y_3) cuando la temperatura del flujo de alimentación a la entrada del intercambiador de calor disminuye a 230 °C.

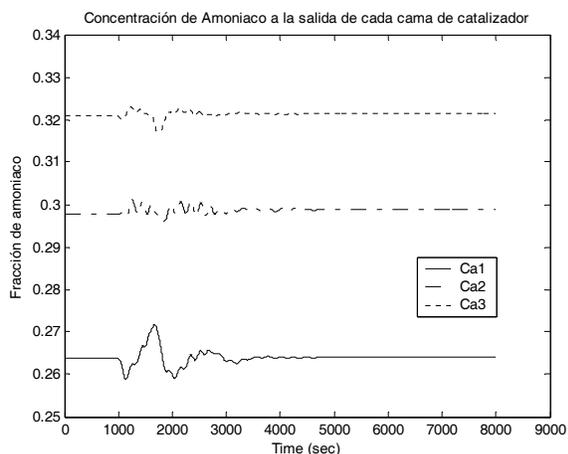


Fig. 4: Concentración de amoniaco a la salida de las camas de catalizador. La temperatura del flujo de alimentación se incremento a los 1000 s de 250 °C a 280 °C.

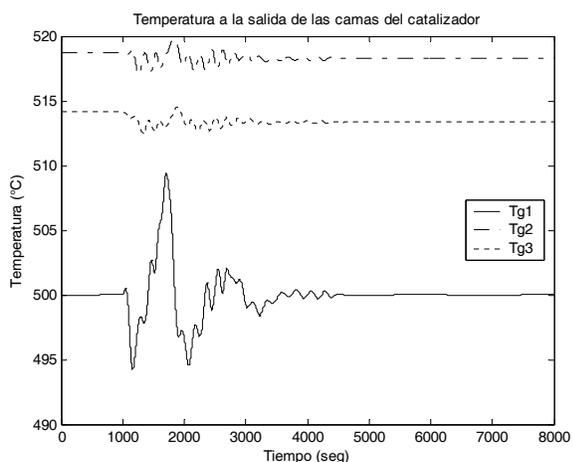


Fig. 5: Temperatura a la salida de cada las camas del catalizador (y_4 , y_2 , y_3). La temperatura del flujo de alimentación (T_F) se incremento a los 1000 s de 250 °C a 280 °C.

6.2 Cambio en el valor de referencia (set point)

El objetivo más importante del sistema de control es mantener la estabilidad del controlador en un amplio margen de operación, lo cual ocurre cuando se cambia el valor de referencia (set point) del controlador y las condiciones del proceso rebasan los límites de linealidad de un controlador PI normal. La siguiente prueba se enfoca a comprobar que el controlador estabiliza el proceso a pesar del cambio en el valor de referencia.

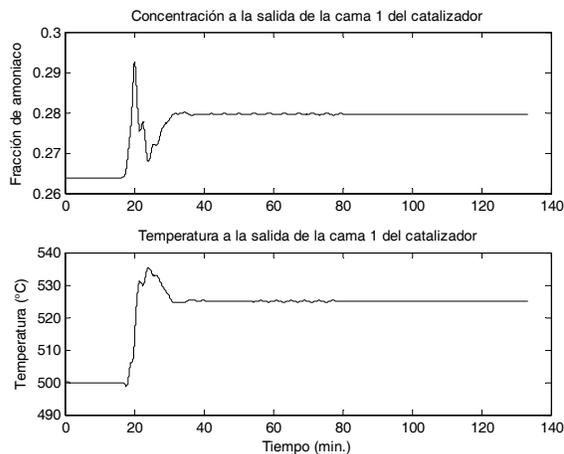


Fig. 6: Concentración de amoniaco y temperatura a la salida de la cama 1 ante un cambio en el valor de referencia ($y_{1,ref}$) de la temperatura a la salida de la primera cama del catalizador de 500 °C a 510 °C.

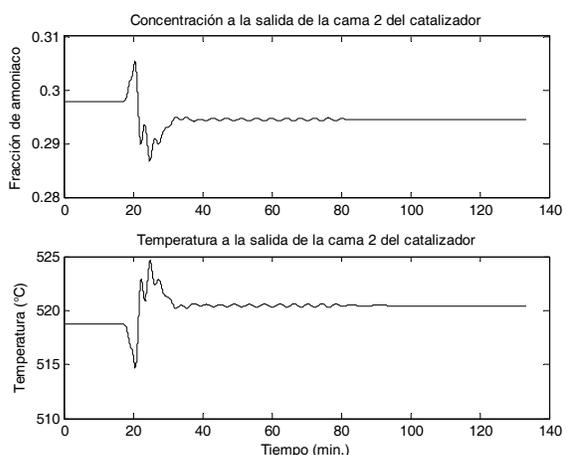


Fig. 7: Concentración de amoniaco y temperatura a la salida de la cama 2 del ante un cambio en el valor de referencia ($y_{2,ref}$) de la temperatura a la salida de la segunda cama de 519 °C a 522 °C.

La prueba consiste en modificar la temperatura de referencia a la salida de la primera cama del catalizador de 500 °C a 525 °C, partiendo de un estado estable con la temperatura del flujo de alimentación en 250 °C.

En las figs. 6-8 se observa el comportamiento de la temperatura y la concentración del amoniaco ante el cambio en esta condición de operación. Se puede observar que la concentración de amoniaco a la salida del reactor aumento (ver Fig. 8), y el sistema permanece estable.

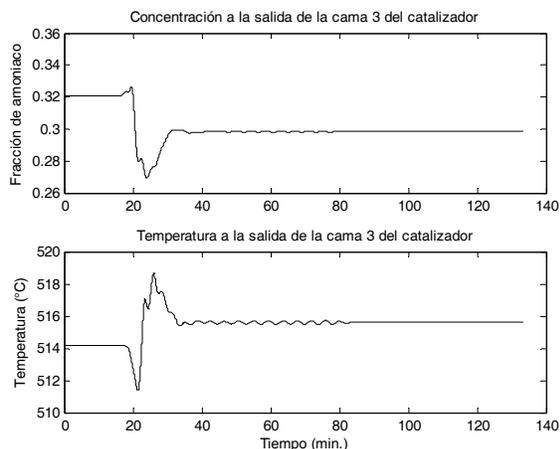


Fig. 8: Concentración del amoniaco y temperatura a la salida de la cama 3 ante un cambio en el valor de referencia ($y_{3,ref}$) de la temperatura a la salida de la tercer cama de 514 °C a 518 °C.

6.3 Comparación con trabajos anteriores

El efecto de que los reactores de síntesis de amoníaco puedan exhibir ciclos límite en su comportamiento, también fue observado por Stephens y Richards (1973), posiblemente debido al incidente en una planta de ICI. Sin embargo, su artículo no contiene ningún análisis dinámico, y no queda claro cuales fueron las causas del problema.

El artículo de Silverstein y Shinnar (1982) contiene un análisis genérico de los sistemas de intercambio de calor del reactor con alimentación de efluentes y una cámara de combustión. Su análisis se basa en la teoría básica de sistemas lineales, para explicar las condiciones de la estabilidad del reactor.

Finalmente en el trabajo de Morud y Skogestad (1998) se estabiliza el reactor utilizando herramientas de control proporcional y análisis de estabilidad basado en el diagrama de Nyquist para sistemas lineales en el dominio de la frecuencia.

En ninguno de los trabajos anteriores se consideran rechazo a perturbaciones, cambios en el valor de referencia, ni puntos de operación que permitan obtener el valor de concentración más alto del producto a la salida del reactor, como en este trabajo. Además, la estructura de control jerárquica propuesta es nueva, hasta donde sabemos de la literatura consultada, en el sentido de que ninguna propone un nivel intermedio usando control interpolante, y en consecuencia,

es un nuevo enfoque para el control de un reactor de amoniaco con enfriamiento intermedio. Por otra parte, en la literatura consultada no se ha encontrado ninguna estructura de control jerárquica, para abordar el problema antes mencionado.

Conclusiones

En este trabajo se pudo probar mediante el modelo matemático de un reactor de amoniaco, la efectividad de una estructura jerárquica de control la cual nos permite, entre otras cosas, enfocar el control hacia diferentes objetivos, resolviendo situaciones de inestabilidad, cambios en las condiciones de operación y optimización del proceso, utilizando metodologías actualizadas para el cálculo y ajuste de los parámetros de control. La estructura jerárquica de control consiste en tres niveles. El primer nivel está compuesto de controladores tipo PI y su objetivo es la estabilización. El segundo nivel está compuesto de un controlador interpolante que provee la temperatura de referencia para el control de la primera cama del reactor. Su objetivo es ampliar el rango de operación del controlador y por lo tanto mejorar el desempeño. El tercer nivel esta compuesto de un optimizador cuyo objetivo es maximizar la conversión, en éste nivel se determinan los valores de referencia del controlador en cascada de acuerdo a un valor máximo de productividad y calidad del producto.

Durante el proceso de diseño y sintonización del control jerárquico se probaron estructuras de control auxiliares, verificando por ejemplo, la efectividad del control en cascada, la robustez del control interpolante y el incremento en la concentración del producto al determinar los valores de referencia de los controladores con base en una metodología de optimización.

También se verificó la efectividad del procedimiento de sintonización sugerido por Skogestad (2003), el cual permite obtener los parámetros de los controladores de una manera rápida y fácil de implementar.

Los resultados de las pruebas aplicadas a control jerárquico, nos permite mantener el proceso en su punto óptimo de operación rechazando perturbaciones o si se requiere, poder cambiar los valores de referencia (set points) de los controladores para cambiar las condiciones

de operación y aún así mantener la estabilidad del control sin tener que hacer ajustes en los parámetros.

Los resultados obtenidos nos sugieren que esta estructura de control jerárquico se puede aplicar a procesos similares con ajustes mínimos.

Agradecimientos

Agradecemos al Instituto Mexicano del Petróleo y a CONACYT su apoyo para la realización de este trabajo.

Referencias

- Åström, K.J., Hägglund, T. (2004) Revisiting the Ziegler-Nichols step response method for PID control, Instrument Society of America, Research Triangle Park, NC.
- Doyle, J.C., Francis, B.A., Tannenbaum, A.R. (1990) *Feedback Control Theory*, Macmillan, New York.
- Fernández-Anaya, G., Flores-Tlacuahuac, A. (2006) Interpolated controllers for the robust transition control of a class of reactors. *AIChE J.* 52(1), 247-254.
- Froment, G. F., Bischoff, K. B. (1990) *Chemical Reactor Analysis and Design*, 2nd ed., Wiley, New York.
- García, J., Fernández-Anaya, G., Vargas-Villamil, F. D., Rosales-Quintero, A. (2009) Interpolated control of a fixed-bed reactor with cold-shot cooling. *Chemical Engineering Communications* 196(10), 1262-1277.
- Kreith, F., Bohn, M. S. (1993) *Principles of Heat Transfer*, 5th ed., West Publishing Co., St. Paul.
- Maarleveld, A., Rijnsdorp, J. E. (1970) Constraint control of distillation columns. *Automatica* 6, 51-58.
- Morari, M. Arkun, Y., Stephanopoulos, G. (1980a) Studies in the synthesis of control structures for chemical processes, Part I. *AIChE J.* 26 (2), 220-232.
- Morari, M., Stephanopoulos, G. (1980b) Structural aspects in the synthesis of alternative feasible control schemes, Part II. *AIChE J.* 26 (2), 232-246.
- Morud, J. (1995) *Studies of the dynamics and operation of integrated plants*. Phd thesis, Norwegian Univ. of Science and Technology, Trondheim.
- Morud, J. C. Skogestad, S. (1998) Analysis of instability in an industrial ammonia reactor, *AIChE J.*, 44 (4), pp 888-895.
- Rivera, D. E., Morari, M., Skogestad, S. (1986) Internal model control: 4 PID controller design. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 25 (1), 252-265.
- Silverstein, J. L., Shirmar R. (1982) Effect of Design on the Stability and Control of Fixed Bed Reactors with Heat Feedback. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development* 21, 241-253.
- Skogestad, S. (2003) Simple Analytic Rules for Model Reduction and PID Controller Tuning. *Journal of Process Control* 13, 291-309.
- Stephens, A. D., Richards, R. J. (1973) Steady State and Dynamic Analysis of an Ammonia Synthesis Plant. *Automatica* 9, 65-78.