



**Universidad de Valladolid**



**ESCUELA DE INGENIERÍAS  
INDUSTRIALES**

**UNIVERSIDAD DE VALLADOLID**

**ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES**

**Máster en Investigación en Ingeniería de Procesos y  
Sistemas Industriales**

**IMPLEMENTACIÓN DE UNA PLANTA  
PILOTO HÍBRIDA, DESARROLLO DE SU  
SISTEMA DE CONTROL Y ESTUDIO DE SU  
OPERACIÓN ÓPTIMA**

**Autor:**

**Marcos Núñez, María P.**

**Tutores:**

**De Prada, César**

**Pitarch, José Luis**

**Dpto. de Ingeniería de Sistemas y  
Automática**

**Valladolid, julio 2017.**



## Resumen

---

*Este trabajo describe la implementación de una planta piloto híbrida, que se caracteriza por simular una reacción exotérmica, el desarrollo de su sistema de control y el estudio de su operación óptima. Esta aproximación permite ahorrar costes y evitar posibles problemas de seguridad y tratamiento de residuos durante la experimentación de la planta. Para ello, primero se ha modelado y simulado el proceso mediante EcosimPro. Seguidamente, se han implementado los componentes híbridos de la planta piloto y se ha diseñado y desarrollado tanto el sistema de control como el sistema SCADA con el que se controlará la planta. El SCADA proporciona una interfaz gráfica con la que supervisar el proceso y conecta la tarjeta de adquisición de datos de la planta con el sistema de control vía OPC. Finalmente se ha estudiado la operación óptima del reactor desde un punto de vista económico, desarrollando un RTO que calcula la trayectoria de operación óptima online. El RTO se ha implementado con Pyomo y se ha utilizado IPOPT como método de resolución del concerniente problema dinámico.*

## Abstract

---

*This project describes the implementation of a hybrid pilot plant where an exothermic reaction is being simulated, the development of its control system and the study of its optimal operation. This approach allows to reduce costs and avoid possible safety and waste treatment problems while the plant is operating. In a first step, the process has been modelled and simulated on EcosimPro. After that, the hybrid components of the pilot plant has been implemented and it has been designed and developed its control system and the SCADA system which will control the plant. The SCADA provides a graphical interface of supervision of the process and connects the acquisition data card with the control system using OPC. Finally, the optimal economic operation of the reactor has been studied, developing an RTO to compute on-line the optimal operating trajectory. The RTO has been implemented in the Pyomo environment and the corresponding dynamic optimization problem has been solve using IPOPT.*



# ÍNDICE

CAPÍTULO 1	Introducción .....	1
1.1	Motivación.....	3
1.2	Objeto.....	4
1.3	Descripción de la planta .....	5
1.4	Alcance: ámbito de aplicación.....	7
1.5	Antecedentes bibliográficos .....	8
1.6	Notación general y acrónimos.....	9
CAPÍTULO 2	Modelado simulación e implementación.....	11
2.1	Planteamiento de ecuaciones.....	13
2.2	Simulación del modelo obtenido.....	17
2.3	Montaje experimental .....	20
2.3.1	Equipos .....	20
2.3.2	Instrumentación .....	22
2.3.3	Tarjeta DAQ.....	22
2.3.4	Módulo externo: Bloque de cálculo.....	23
CAPÍTULO 3	Sistema de control .....	25
3.1	Estrategia de control .....	27
3.2	Sintonía de los controladores.....	31
3.3	Implementación.....	35
3.3.1	Módulos externos: PIDs .....	36
3.3.2	HMI Intouch .....	38
3.4	Ensayos experimentales .....	44
3.4.1	Lazos en cascada 1 .....	45
3.4.2	Lazo en cascada 2 .....	46
CAPÍTULO 4	Optimización .....	51

4.1 Modelo a optimizar .....	54
4.2 Introducción a Pyomo .....	55
4.3 Formulación en Pyomo .....	56
4.4 Módulo externo: Optimizador .....	59
CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO .....	61
REFERENCIAS .....	65
ANEXOS .....	69
ANEXO I. Código del componente de la simulación del proceso .....	71
ANEXO II. Código del experimento de la simulación del proceso.....	73
ANEXO III. Código del componente de la simulación con control .....	75
ANEXO IV. Código del experimento de la simulación con control .....	78
ANEXO V. Código principal del HMI Intouch.....	80
ANEXO VI. Variables definidas en el HMI Intouch.....	82
ANEXO VII. Código de la optimización realizada con Pyomo .....	83
ANEXO VIII. Código del archivo de datos para la optimización .....	86

# CAPÍTULO 1

## Introducción



## 1.1 MOTIVACIÓN

En los últimos años se han desarrollado novedosas técnicas de control y optimización basadas en modelos con el fin de mejorar la industria de procesos. Sin embargo, la validez de dichas técnicas debe ser corroborada experimentalmente en una planta real.

Por otra parte, si el objetivo es conocer y experimentar con el proceso, trabajar con el proceso a escala industrial conlleva diversos inconvenientes (disponibilidad, rango de operación, etc.) además de un elevado coste, por lo que una planta piloto permite realizar una gran variedad de experimentos de forma empírica evitando los inconvenientes de tratar con una planta de tamaño industrial. Una planta piloto consiste en una instalación industrial a tamaño reducido que sirve para poder experimentar con el sistema antes de llevarlo a escala industrial con el fin de obtener información sobre el mismo. De esta forma se reducen los riesgos asociados a la experimentación con un proceso a gran escala, evitando accidentes y pérdidas de inversión, además de permitir la formación de empleados en nuevas estrategias y herramientas (control, visualización, optimización, etc.).

No obstante, la experimentación, incluso a pequeña escala, es una técnica cara que, además puede suponer complicaciones añadidas con respecto a la seguridad y al impacto ambiental, por ello se ha decidido llevar a cabo una opción intermedia, construyendo una planta piloto híbrida, es decir, una planta que mantiene su estructura e instrumentación y opera a tiempo real pero donde parte del proceso está siendo simulado. En concreto en este proyecto se ha considerado una planta piloto donde el proceso que se lleva a cabo es la obtención de un producto B a partir de un reactivo A mediante una reacción química exotérmica llevada a cabo en un reactor continuo encamisado.

Esta opción es una interesante alternativa a, por ejemplo, los laboratorios virtuales [1] [2] [3], los cuales están íntegramente basados en simulaciones. Aunque la simulación es una técnica muy avanzada actualmente, la realidad de los procesos siempre presenta inconvenientes adicionales a los que enfrentarse. Esto se debe a que los modelos empleados en simulación son una

aproximación más o menos precisa de la realidad, pero no incorporan elementos como el trabajo en tiempo real, la imprecisión de la instrumentación, etc. y, por tanto, los resultados derivados de las simulaciones pueden diferir bastante de la realidad experimental.

El interés de proponer una planta piloto híbrida es que se pueda experimentar con ella sin incurrir en los costosos gastos que supone operar con compuestos químicos; adquisición de materias primas; tratamiento de residuos, etc. Es decir, se obtiene una solución más favorable económica y ecológicamente. Aunque esta forma de operar tampoco reproduce totalmente el comportamiento real del sistema, sí que puede aproximar de una manera muy fiel la realidad además de permitir la experimentación en un rango de operación más amplio.

## 1.2 OBJETO

Este trabajo tiene como objeto desarrollar las interfaces entre el sistema real y los componentes de reacción simulada, así como diseñar, instalar y configurar el sistema de control y supervisión de una planta piloto química con el fin de que se pueda experimentar con ella, actuar sobre el control de las diferentes variables del proceso y observar su dinámica. Igualmente se desea estudiar la optimización de la operación del proceso.

Para alcanzar el objetivo final se han establecido 3 etapas principales a ser:

- Modelado, simulación e implementación del proceso híbrido: Para poder diseñar la planta se ha de conocer el comportamiento del sistema en distintas condiciones, en este caso de flujo y temperatura. Para ello se utilizará la herramienta de modelado y simulación *EcosimPro* [4]. Conociendo la dinámica del sistema puede procederse a implementar el proceso híbrido experimentalmente.
- Diseño del sistema de control: Una vez Implementado el sistema se han de establecer las estrategias de control a utilizar, así como desarrollar el sistema de control y una interfaz gráfica amigable desde la que se

pueda visualizar y controlar todo el proceso tanto de forma manual como automática. El sistema de control estará basado en diferentes módulos externos creados nuevamente con el entorno de simulación *EcosimPro* mientras que el HMI que comunique el sistema de control con la planta y que actúe como interfaz gráfica con la que supervisar la planta se creará mediante el software *Intouch* de la empresa *Wonderware FactorySuite 2014* [5].

- Optimización: Por último, se desea implementar una capa superior de optimización con la que comandar el sistema de control, es decir, una capa que establezca los puntos de consigna de las variables controladas según una función objetivo determinada. Para crear esta capa de optimización se utilizará *Pyomo* [6], un entorno de optimización numérica accesible en lenguaje *Python*.

### 1.3 DESCRIPCIÓN DE LA PLANTA

El elemento principal de la planta piloto es un reactor continuo de tanque agitado (RCTA), etiquetado como R-101 en la Figura 1, con una camisa refrigerante, en el que se quiere llevar a cabo una determinada reacción exotérmica. La reacción base que se usará para el diseño es la que se produce al introducir un mol de reactivo A para obtener un mol de producto B.

Sin embargo, puesto que una reacción química conlleva altos costes de materia prima, tratamiento de productos, problemas de seguridad e impacto ambiental, etc., se ha decidido que la parte experimental de la reacción sea sustituida por un cálculo en simulación cuyos resultados puedan visualizarse en forma de concentración y aplicar el calor de reacción que se estaría produciendo mediante una resistencia eléctrica variable, cuya potencia corresponda a la cantidad de calor de reacción calculado. Sin embargo, puesto que esta resistencia es demasiado grande para poder introducirla en el reactor, para simular el calor de reacción se lleva parte del fluido del interior del reactor a un

tanque (T-102) en el que hay una resistencia calefactora que aumenta la temperatura del fluido, y se devuelve nuevamente al reactor.

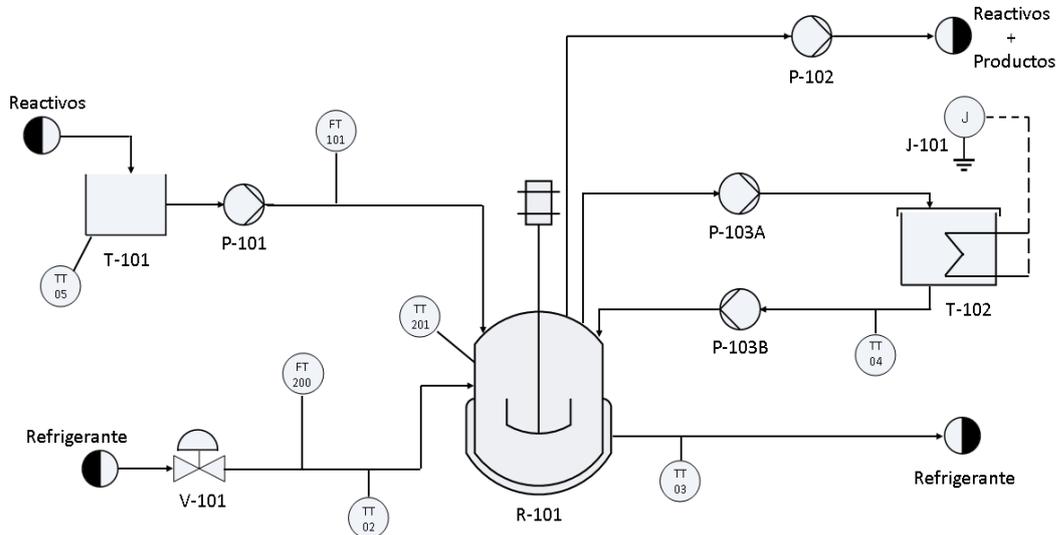


Figura 1 Diagrama de la planta piloto híbrida

Además del reactor y del tanque calefactor, la planta cuenta con diversos equipos auxiliares; tanque de almacenamiento de reactivos (T-101), bomba peristáltica de impulsión de reactivos al reactor (P-101), bomba de diafragma a la salida del reactor (P-102), bomba peristáltica de cabezal doble para extraer (P-103A) e introducir (P-103B) el líquido que se lleva al tanque calefactor, válvula de diafragma que controla el fluido refrigerante (V-101), y unidad de potencia trifásica a tiristores que proporciona la potencia a la resistencia calefactora (J-101).

Como instrumentación para poder implementar el sistema de control se cuenta con: dos caudalímetros electromagnéticos para medir los caudales de alimento al reactor (FT101) y a la camisa refrigerante (FT200) y 5 termorresistencias con su correspondiente transmisor para medir la temperatura en: el tanque de alimentación (TT05); dentro del reactor (TT201); a la entrada (TT02) y salida (TT03) de la camisa y; en el tanque calefactor (TT04), todo ello conectado a una tarjeta de adquisición de datos (DAQ) para poder controlar el sistema mediante el ordenador.

#### 1.4 ALCANCE: ÁMBITO DE APLICACIÓN

La finalidad de la planta piloto es que tanto los alumnos como los investigadores de la Universidad de Valladolid puedan experimentar con ella modificando el sistema de control y la dificultad de las reacciones a simular, y observar la dinámica del proceso.

Como se trata de una planta piloto híbrida donde parte del proceso está siendo simulado, para poder simplificar el comportamiento real del sistema se tienen que tener en cuenta un par de consideraciones:

1. En primer lugar, para que la hidrodinámica del proceso quede bien representada, las propiedades físicas de los diferentes fluidos del proceso real (densidad, viscosidad, capacidad calorífica, etc. de cada corriente) han de ser prácticamente invariantes con las propiedades que si varían a lo largo del proceso (temperatura y concentración) y así poder sustituir los reactivos y productos por un fluido más manejable, en este caso el agua.
2. En segundo lugar, puesto que parte del proceso se está simulando, es necesario disponer de modelos matemáticos que permitan calcular de forma precisa las variables que no se pueden medir (debido a que la reacción se está simulando) según las condiciones de operación establecidas.

Consecuentemente, si se dispone de un modelo y la planta piloto puede ser operada utilizando estos fluidos alternativos, se puede desarrollar un sistema híbrido con el que poder experimentar parcialmente. El comportamiento real queda simplificado, pero las características hidrodinámicas y térmicas se mantienen fieles a la realidad. Además, empleando un modelo adecuado las variables de concentración finales del proceso pueden ser calculadas razonablemente (no medidas) en un amplio rango de operación.

## 1.5 ANTECEDENTES BIBLIOGRÁFICOS

Aunque muchos aspectos relacionados con la disciplina de control, en especial aquellos relacionados con aspectos matemáticos, pueden ser estudiados de forma teórica, para poder entender algunos detalles de la dinámica de los sistemas es conveniente poder experimentar en plantas [7].

La elevada disponibilidad actual de herramientas de desarrollo virtual y el progreso en el hardware y software de los ordenadores, ha motivado a universidades y grupos de investigación a diseñar nuevos entornos de enseñanza-aprendizaje interactivos [1] [2] [3]. Estos nuevos instrumentos virtuales y laboratorios interactivos son una mezcla entre laboratorios normales y aprendizaje teórico que permiten explicar los conceptos básicos de los sistemas además de proporcionar nuevas perspectivas a los problemas e ilustrar los tópicos del diseño y análisis de los procesos. Por ello, en los últimos años se han desarrollado multitud de instrumentos virtuales creados mediante diferentes plataformas (LabVIEW, Java, Matlab, Simulink, etc.) para diferentes aplicaciones como laboratorios para el estudio de brazos robóticos y sistemas mecatrónicos [8], procesamiento de señales mediante simulaciones interactivas [9], simulaciones para el estudio del control y la dinámica de sistemas [10], laboratorios de control ACT [11], etc.

Por otra parte, un referente a la aplicación de plantas pilotos híbridas es el caso de la universidad de Santamaría de Valparaíso, Chile en el campo de las columnas de flotación [12]. En la minería, las columnas de flotación son uno de los equipos más utilizados para obtención de minerales valiosos procedentes de la ganga, pero realizar experimentos con estos equipos es costoso debido a sus condiciones de operación. La implementación del sistema híbrido viene dada por la sustitución de la alimentación por agua y la consiguiente simulación de concentraciones de los componentes tanto a la entrada como a la salida.

## 1.6 NOTACIÓN GENERAL Y ACRÓNIMOS

- $A$ : área de intercambio entre el reactor y la camisa refrigerante, en  $m^2$ .
- $C_A$ : es la concentración del reactivo A en el reactor, en  $mol \cdot L^{-1}$ .
- $C_{A0}$ : es la concentración del reactivo A a la entrada del reactor, en  $L^{-1}$ .
- $C_p$ : capacidad calorífica de los reactivos/productos, en  $kJ \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ .
- $C_{pj}$ : capacidad calorífica del fluido refrigerante, en  $kJ \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ .
- $d$ : es el retardo del sistema, es decir, el tiempo que tarda en empezar a cambiar la salida del sistema desde que se produce el cambio en la entrada, en  $min$ .
- $e(t)$ : es el error entre el valor de la variable que se quiere controlar y el valor de consigna que se desea de dicha variable, en %
- $E_a$ : es la energía de activación, en  $J/mol$ .
- $K$ : es la constante cinética, en  $min^{-1}$ .
- $K_0$ : es el factor preexponencial o factor de frecuencia, en  $min^{-1}$ .
- $K_{ij}$ : es la ganancia estacionaria de la salida  $i$  respecto de la entrada  $j$ .
- $K_p$ : es la ganancia del sistema correspondiente al término proporcional del controlador, en % / %.
- $OP$ : es la variable de salida de un controlador (Output to Process)
- $OPHI$ : es el límite superior de la variable de salida de un controlador
- $OPLO$ : es el límite inferior de la variable de salida de un controlador
- $PV$ : es la variable de entrada a un controlador (Process Variable)
- $PVEUHI$ : es el límite superior de la variable del proceso de un controlador
- $PVEULO$ : es el límite inferior de la variable del proceso de un controlador
- $Q_{int}$ : calor intercambiado entre el reactor y la camisa, en  $kJ \cdot min^{-1}$ .
- $Q_{reac}$ : calor que desprende la reacción, en  $kJ \cdot min^{-1}$ .
- $Q_v$ : es el caudal volumétrico que entra (y sale) del reactor, en  $L \cdot min^{-1}$ .
- $Q_{vj}$ : caudal volumétrico del fluido refrigerante, en  $L \cdot min^{-1}$ .
- $R$ : es la constante universal de los gases ideales, en  $J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$ .
- $r_A$ : es la velocidad de reacción del compuesto A, en  $mol \cdot L^{-1} \cdot min^{-1}$ .
- $SP$ : es el punto de consigna de un controlador (Set Point)

- $T$ : temperatura a la salida del reactor, en  $^{\circ}\text{C}$ .
- $T_0$ : temperatura a la entrada del reactor, en  $^{\circ}\text{C}$ .
- $T_d$ : es el tiempo de retado correspondiente al término derivativo del regulador, en  $\text{min}$ .
- $T_i$ : es el tiempo integral correspondiente al término integral del regulador, en  $\text{min}$ .
- $T_j$ : temperatura a la salida de la camisa refrigerante, en  $^{\circ}\text{C}$ .
- $T_{j0}$ : temperatura a la entrada de la camisa refrigerante, en  $^{\circ}\text{C}$ .
- $U$ : coeficiente global de transmisión de calor, en  $\text{kJ}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{min}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ .
- $u$ : son las entradas al sistema, caudal de alimentación y de refrigerante.
- $V$ : volumen del reactor, en  $L$ .
- $V_j$ : volumen de la camisa refrigerante, en  $L$ .
- $y$ : son las salidas del sistema, conversión y temperatura del reactor.
- $\Delta H$ : variación de entalpía molar de la reacción, en  $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ .
- $\theta$ : es una constante cuyo valor está relacionado con la robustez de un controlador es el tiempo de respuesta del sistema, es decir, el tiempo que tarda en estabilizarse la salida desde que se produce el cambio en la entrada, en  $\text{min}$ .
- $\lambda_{ij}$ : es la ganancia relativa de la salida  $i$  respecto de la entrada  $j$ .
- $\rho$ : densidad media de los fluidos en el interior del reactor, en  $\text{kg}\cdot\text{L}^{-1}$ .
- $\rho_j$ : densidad del fluido refrigerante, en  $\text{kg}\cdot\text{L}^{-1}$ .
- $\Delta u$ : es el incremento en la señal de entrada, en  $\%$ .
- $\Delta y$ : es el incremento en la señal de salida, en  $\%$ .

# CAPÍTULO 2

## Modelado simulación e implementación



El modelado consiste en la creación de un modelo matemático que represente un sistema real o teórico mediante una serie de leyes físicas y/o experimentales, expresadas como relaciones lógicas y/o cuantitativas entre sus variables de estado y entradas. Aunque la mejor forma de estudiar un sistema es mediante la experimentación, en ocasiones puede ser imposible de realizar por motivos físicos y/o económicos, por lo que el modelado permite obtener un modelo que refleje con la fidelidad adecuada las características más importantes del sistema a estudiar y así permitir realizar experimentos como si del sistema original se tratara. La complejidad del modelo depende del propósito para el cual haya sido creado, debiéndose buscar siempre un equilibrio entre complejidad y precisión al representar la realidad. [13]

El problema de los modelos matemáticos es que en muchas ocasiones son lo suficientemente complejos como para no poderse resolver de manera exacta mediante procedimientos analíticos, por lo que debe recurrirse a métodos numéricos de simulación para obtener una respuesta aproximada a partir del conocimiento del valor de una serie de variables (condiciones de partida). Gracias a la simulación se puede evaluar el rendimiento de un sistema bajo diferentes configuraciones y largos periodos de tiempo como si del sistema real se tratase. [13]

En este proyecto, se quiere modelar y simular el proceso del reactor para diferentes condiciones de caudal y temperatura. Existen diferentes tipos de modelado matemático: de conocimiento, obtenidos mediante razonamientos y/o leyes físicas, químicas, etc., o de identificación, obtenidos mediante experimentación directa sobre el sistema a estudiar y el análisis posterior de datos. En este caso se va a realizar un modelo de conocimiento a partir de los principios de conservación de masa y energía y otras leyes particulares del dominio de aplicación.

## **2.1 PLANTEAMIENTO DE ECUACIONES**

El sistema que el modelo matemático va a reproducir consiste en la reacción básica de producir un mol de producto B a partir de un mol de reactivo A, es

decir,  $A \rightarrow B$ . Esta reacción se lleva a cabo de forma continua en un RCTA encamisado según se aprecia en la Figura 2.

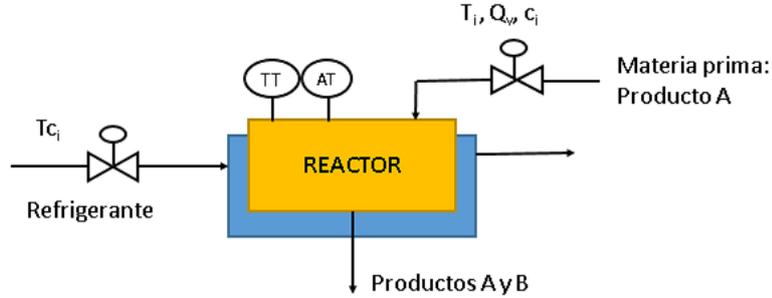


Figura 2. Diagrama de la reacción

Para el modelado del reactor se ha considerado que en el interior hay un comportamiento de mezcla perfecta, es decir se ha descartado que haya caminos de flujo preferentes o zonas muertas. Además, se ha considerado que el caudal de entrada es el mismo que el de salida, tanto en el caso del reactor como en la camisa refrigerante.

Así pues, realizando un balance de materia al reactor se obtiene:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{Q_v}{V} (C_{A0} - C_A) - r_A \quad (1)$$

Donde:

- $C_A$ : es la concentración del reactivo A en el reactor, en  $mol \cdot L^{-1}$ .
- $C_{A0}$ : es la concentración del reactivo A a la entrada del reactor, en  $L^{-1}$ .
- $Q_v$ : es el caudal volumétrico que entra (y sale) del reactor, en  $L \cdot min^{-1}$ .
- $r_A$ : es la velocidad de reacción del compuesto A, en  $mol \cdot L^{-1} \cdot min^{-1}$ .
- $V$ : es el volumen del reactor, en  $L$ .

Puesto que se trata de una reacción simple de primer orden, la velocidad de reacción del compuesto A, es decir, la cantidad de compuesto que se transforma, por unidad de volumen y tiempo será:

$$r_A = K \cdot C_A \quad (2)$$

Donde  $K$  es la constante cinética que depende de la temperatura según la ecuación de Arrhenius de acuerdo con la expresión:

$$K = K_0 \cdot e^{\left(\frac{-Ea}{RT}\right)} \quad (3)$$

Siendo:

- $Ea$ : es la energía de activación, en  $J/mol$ .
- $K_0$ : es el factor preexponencial o factor de frecuencia, en  $min^{-1}$ .
- $R$ : es la constante universal de los gases ideales, en  $J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$ .
- $T$ : es la temperatura del reactor, en  $K$ .

Por otra parte, si se realiza un balance de energía tanto al reactor como a la camisa refrigerante, las ecuaciones resultantes respectivamente son:

$$V\rho C_p \frac{dT}{dt} = Q_v \rho C_p (T_0 - T) - Q_{int} + Q_{reac} \quad (4)$$

$$V_j \rho_j C_{pj} \frac{dT_j}{dt} = Q_{vj} \rho_j C_{pj} (T_{j0} - T_j) + Q_{int} \quad (5)$$

Donde:

- $C_p$ : capacidad calorífica de los reactivos/productos, en  $kJ \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ .
- $C_{pj}$ : capacidad calorífica del fluido refrigerante, en  $kJ \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ .
- $Q_{int}$ : calor intercambiado entre el reactor y la camisa, en  $kJ \cdot min^{-1}$ .
- $Q_{reac}$ : calor que desprende la reacción, en  $kJ \cdot min^{-1}$ .
- $Q_{vj}$ : caudal volumétrico del fluido refrigerante, en  $L \cdot min^{-1}$ .
- $T$ : temperatura a la salida del reactor, en  $^{\circ}C$ .
- $T_0$ : temperatura a la entrada del reactor, en  $^{\circ}C$ .
- $T_j$ : temperatura a la salida de la camisa refrigerante, en  $^{\circ}C$ .
- $T_{j0}$ : temperatura a la entrada de la camisa refrigerante, en  $^{\circ}C$ .
- $V$ : volumen del reactor, en  $L$ .
- $V_j$ : volumen de la camisa refrigerante, en  $L$ .
- $\rho$ : densidad media de los fluidos en el interior del reactor, en  $kg \cdot L^{-1}$ .
- $\rho_j$ : densidad del fluido refrigerante, en  $kg \cdot L^{-1}$ .

Para calcular tanto el calor intercambiado como el calor de reacción se pueden utilizar las siguientes formulas:

$$Q_{int} = U \cdot A \cdot (T - T_j) \quad (6)$$

$$Q_{reac} = \Delta H \cdot V \cdot r_A \quad (7)$$

Siendo:

- $U$ : coeficiente global de transmisión de calor, en  $kJ \cdot m^{-2} \cdot min^{-1} \cdot K^{-1}$ .
- $A$ : área de intercambio entre el reactor y la camisa refrigerante, en  $m^2$ .
- $\Delta H$ : variación de entalpía molar de la reacción, en  $kJ \cdot mol^{-1}$ .

Cabe destacar que, puesto que se trata de una planta híbrida y por tanto se va a trabajar con agua, el calor de reacción va a ser simulado mediante una unidad de potencia conectada a una resistencia calefactora, y por tanto, el calor de reacción será equivalente a la potencia que se le suministre a la resistencia calefactora. Esta potencia se puede manipular proporcionalmente mediante la señal de mando (4-20mA) que se le envíe. (Véase apartado 2.3.4)

De las diferentes variables que describen el sistema, algunas son constantes asociadas o al montaje experimental (como el volumen del reactor, de la camisa refrigerante y el área de intercambio entre ambos) o que dependen de la reacción que se quiera simular (variación de la entalpía de reacción, densidad y capacidad específica de reactivos, productos y fluido refrigerante, energía de activación, etc.), y por último, hay variables con son estados del proceso, es decir que varían con el tiempo.

Con este modelo se pueden realizar diferentes experimentos variando las condiciones del proceso (temperatura inicial, temperatura del refrigerante, caudal, etc.) tanto para una reacción en concreto como para diferentes reacciones modificando los parámetros propios de la reacción. Sin embargo, puesto que las diferentes simulaciones se van a querer comprobar empíricamente se han de ajustar los parámetros propios de la planta a los del montaje experimental. Los valores de estos parámetros son:

$$V = 4.67 L$$

$$V_j = 1 L$$

$$A = 0.149 m^2$$

Sin embargo, además de estos valores, falta el valor del coeficiente de transmisión de calor global, que a pesar de que es inherente al reactor, no se conoce su valor.

## 2.2 SIMULACIÓN DEL MODELO OBTENIDO

Una vez modelado el proceso, se ha simulado en diferentes condiciones para comprobar su coherencia. Esta simulación se ha realizado mediante el entorno EcosimPro, herramienta matemática de modelado y simulación de sistemas multidisciplinares basada en ecuaciones algebraico-diferenciales y eventos discretos, que permite el análisis de procesos en estado estacionario, junto con estudios de sensibilidad y optimización.

Por otra parte, en EcosimPro el modelado de sistema puede realizarse mediante un lenguaje de modelado o gráficamente creando o reusando librerías de componentes ya desarrollados. En este caso se ha utilizado el lenguaje de modelado, basado en el modelo que se había obtenido previamente (*véase apartado 2.1*) para crear tanto el componente como el experimento que permitirán simular el proceso. Puede verse el código desarrollado en el ANEXO I y en ANEXO II.

Una vez creado el modelo, EcosimPro se encarga de extraer las variables de contorno necesarias para resolver el modelo, ordenar las ecuaciones del conjunto, y resolverlas numéricamente.

El modelo obtenido está compuesto por 7 ecuaciones en las que aparecen 12 variables y 12 parámetros del proceso diferentes: constantes propias del montaje experimental, de la reacción o propiedades físicas de los fluidos utilizados (Tabla 2). Teniendo esto en cuenta, se tienen 5 grados de libertad y puesto que se quieren dejar el caudal de alimentación y el de refrigerante como variables manipuladas se han de establecer 3 variables de contorno, a ser las condiciones de entrada: concentración del alimento, temperatura y temperatura del refrigerante (Tabla 1).

Tabla 1. Valores de las variables de contorno utilizadas para la simulación del sistema

$C_{A0}$ ( $\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ )	5,00
$T_0$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	15,0
$T_{j0}$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	10,0

Tabla 2. Valores de los parámetros constantes del sistema

$\Delta H$ ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ )	20,0
$\rho$ ( $\text{kg}\cdot\text{L}^{-1}$ )	1,00
$\rho_j$ ( $\text{kg}\cdot\text{L}^{-1}$ )	1,00
$C_p$ ( $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ )	4,18
$C_{p_j}$ ( $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ )	4,18
$k_0$ ( $\text{min}^{-1}$ )	1,38
$E_a$ ( $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ )	2420
$R$ ( $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ )	8,31
$V$ (L)	4,67
$A$ ( $\text{m}^2$ )	0,149
$V_j$ (L)	1,00
$U$ ( $\text{kJ}\cdot\text{min}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ )	333

Los valores de las especificaciones que se muestran en la Tabla 2 corresponden con los datos del montaje experimental, las densidades y capacidades caloríficas del agua [14] asumiendo que no varían con la temperatura. Las temperaturas de entrada mostradas en la Tabla 1 corresponden a las de la toma de agua de red en Valladolid en marzo. Cabe destacar que, como se ha comentado anteriormente, del montaje experimental no se conoce el valor del coeficiente global de transferencia calorífica. Este se ha estimado a partir del coeficiente de conductividad térmica del vidrio [14] (material con que está hecho el reactor) suponiendo que el espesor de la pared que separa el reactor de la camisa refrigerante es de 3 cm.

A partir de estas especificaciones y mediante el código que se incluye en el ANEXO I y en el ANEXO II, se ha realizado una simulación variando los caudales de alimentación y de refrigerante, cuyos resultados se muestran en la Figura 3.

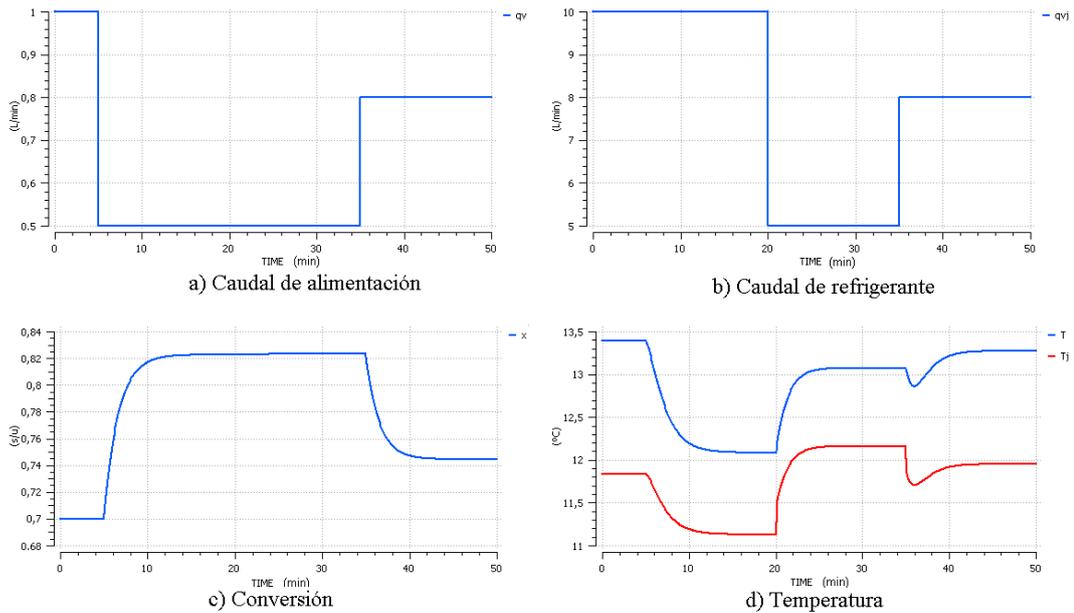


Figura 3. Simulación del proceso

Partiendo del estado estacionario, se han introducido saltos en el caudal de alimentación a los 5 y 35 minutos (Figura 3.a) y en el caudal de refrigerante a los 20 y 35 minutos (Figura 3.b). Si se analiza la evolución del sistema hasta el equilibrio para las variables más importantes del sistema, conversión (Figura 3.c) y temperatura (Figura 3.d) se observa que la conversión únicamente se ve afectada positivamente ante una disminución del caudal de alimentación mientras que la temperatura tanto del reactor como de la camisa depende de ambos caudales, pero con dinámicas opuestas: una disminución del caudal de alimentación disminuye las temperaturas (ganancia positiva) mientras que una disminución del caudal de refrigerante las aumenta (ganancia negativa). Cabe destacar que la ganancia de la temperatura respecto al caudal de alimentación es mayor que la ganancia respecto al caudal de refrigerantes puesto que, como se aprecia en la Figura 3.d, ante un cambio de ambos caudales, las temperaturas se ven más afectadas por el cambio del caudal de alimentación, pese a ser un cambio en una escala 10 veces menor.

Estos resultados son coherentes con la dinámica del proceso puesto que, si se disminuye el caudal de alimentación, aumenta el tiempo de residencia del fluido en el reactor y por tanto se aumenta la cantidad de producto B que se produce (mayor conversión). Puesto que la reacción es exotérmica, que

aumente el tiempo de residencia del fluido en el reactor también implica que la velocidad de reacción disminuya, se produzca menos calor de reacción y por tanto la temperatura del reactor disminuya. Por otra parte, al aumentar el caudal de refrigerante, se aumenta el calor intercambiado entre la camisa y el reactor y por tanto es lógico que la temperatura del interior del reactor disminuya. Se ha de señalar que la conversión debería depender del caudal de refrigerante, dado que depende de la temperatura y esta sí depende del caudal de refrigerante. Sin embargo, en la simulación no se observa este comportamiento. Esto puede deberse a que los coeficientes de reacción escogidos que hacen poco sensible la velocidad de reacción a cambios muy pequeños en la temperatura.

## 2.3 MONTAJE EXPERIMENTAL

Una vez modelado y simulado el proceso, se puede proceder a implementarlo experimentalmente, siguiendo el esquema del apartado 1.3. Además de los diferentes equipos e instrumentos, para completar la implementación de la planta híbrida se necesita un elemento que, de forma automática, calcule el calor de reacción que se estaría produciendo y le envíe la señal correspondiente a la unidad de potencia J-101 para suministrarlo, es decir, un bloque de cálculo capaz de resolver unas ecuaciones con las que obtener el calor de reacción según las entradas que se le suministre. Este bloque de cálculo puede enviar la señal de mando adecuada a la unidad de potencia a través de la tarjeta DAQ, conectando ambos vía OPC.

### 2.3.1 EQUIPOS

Las características de los equipos con los que se ha realizado el montaje experimental son:

- R-101: Reactor encamisado de tanque agitado de cuyo volumen es de 4.67 L y con una camisa de volumen de 1 L. El área de contacto entre el reactor y la camisa es de 0.15 m<sup>2</sup>. (Figura 4.d)
- P-101: Bomba peristáltica de la marca MASTERFLEX modelo L/S 6-600 capaz de proporcionar un caudal máximo de 2.3 L/min según la

configuración del controlador. El controlador asociado permite controlar la velocidad de la bomba de 0 a 600 rpm, proporcionando un caudal máximo de 1.5 L/min. (Figura 4.a)

- P-102: Bomba de dosificación de membrana tipo electromecánico de la marca JESCO modelo MEMBOS LB 150. Está configurada para mantener el nivel del reactor mediante ajuste del caudal de salida al de entrada, puesto que la salida del reactor no se obtiene por gravedad. (Figura 4.e)
- P-103: Bomba peristáltica de cabezal doble también de la marca MASTERFLEX pero modelo I/P 115/223. El controlador a esta bomba permite manipular la velocidad de giro entre 0 y 650 rpm permitiendo que circule un caudal máximo de 8 L/min en cada cabezal. (Figura 4.c)
- V-101: Válvula de asiento de la marca FISHER modelo NPS 1 GX capaz de proporcionar un caudal máximo de 20 L/min. Esta válvula tiene conectado un controlador modelo FIELDVE DVC200 que permite controlar la apertura de la válvula. (Figura 4.b)
- J-101: Unidad de potencia trifásica a tiristores de la marca Desin Instruments modelo UPTF 380. Está unidad permite controlar la corriente hasta 380A y requiere una señal de disparo de 0 a 5V, por lo que puede llegar a generar una potencia de 1.9 kW. (Figura 4.f)
- T-102: Tanque cerrado de metacrilato con una resistencia cuya potencia está regulada mediante J-101. (Figura 4.g)

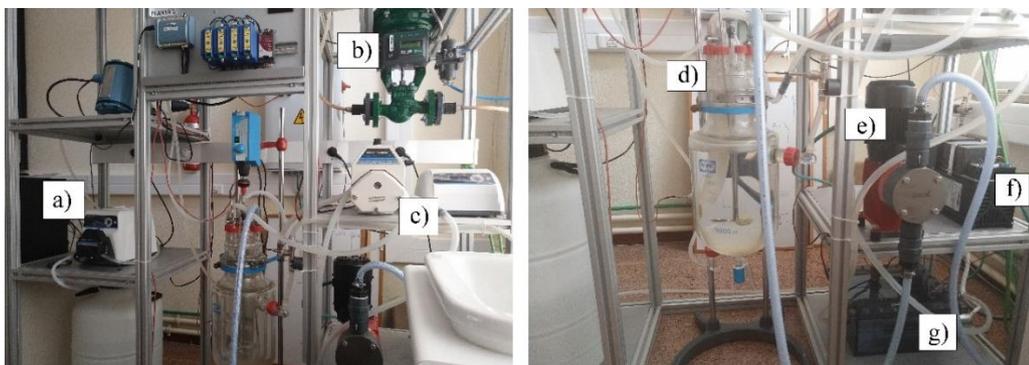


Figura 4. Montaje experimental de la planta piloto.

### 2.3.2 INSTRUMENTACIÓN

Por otra parte, además de los diferentes equipos se han instalado diversos medidores de temperatura y de caudal para comprobar el buen funcionamiento de la planta. Estos instrumentos son:

- 5 termorresistencias Pt-100 colocadas en el tanque de alimento T-101, en el interior del reactor E-101, a la entrada y la salida de la camisa refrigerante, y a la salida del tanque calefactado T-102. El rango de medición de cada una de las termorresistencias es de 0 a 65°C.
- 2 caudalímetros electromagnéticos de la empresa Emerson, modelo Rosemount 8732 capaces de medir un rango de velocidades de 0.3 a 9.14 m/s. Puesto que cada uno tiene un diámetro diferente, 3.81 mm y 7.62 mm, el rango de caudal volumétrico que permiten detectar es de 0.21 a 6.25 L/min y de 0.83 a 25.02 L/min respectivamente. Por ello el primero se utilizará para medir el caudal de alimentación y el segundo para medir el caudal de refrigerante.

### 2.3.3 TARJETA DAQ

Además de los diferentes equipos y la instrumentación, para poder experimentar con la planta se necesita una tarjeta DAQ con la que obtener los valores de las diferentes variables medidas y poder enviar señales de los diversos actuadores.

Mediante la tarjeta DAQ se obtienen los valores medidos de las temperaturas tanto del reactor, a la entrada y la salida de la camisa refrigerante, y del tanque de almacenamiento de reactivos, como de los caudales de alimentación y de refrigerante.

Por otra parte, envía las señales de control a la bomba de alimentación y a la válvula de refrigerante (actuadores del sistema de control, véase *apartado 3.3*), y la señal proporcional adecuada a la unidad de potencia para que suministre al sistema el calor de reacción calculado.

### 2.3.4 MÓDULO EXTERNO: BLOQUE DE CÁLCULO

Por último, el aspecto más importante en la implementación de la planta híbrida es el módulo externo que calcula el calor de reacción. Este bloque de cálculo se ha desarrollado en el lenguaje de simulación EcosimPro, aprovechando su facilidad para generar dll (“dynamic-link library”, biblioteca de enlace dinámico) y servidores OPC, ya que se conectará vía OPC a la planta.

El módulo que se ha desarrollado permite calcular la conversión del reactor y el calor que estaría produciendo la reacción (y que ha de proporcionar la unidad de potencia J-101) resolviendo una combinación de las ecuaciones (1)-(3) y (7), así como la de la definición de la conversión (10).

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{Q_v}{V}(C_{A0} - C_A) - K_0 \cdot e^{\left(\frac{-Ea}{RT}\right)} \cdot C_A \quad (8)$$

$$Q_r = \Delta H \cdot V \cdot K_0 \cdot e^{\left(\frac{-Ea}{RT}\right)} \cdot C_A \quad (9)$$

$$x = 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} \quad (10)$$

Según las expresiones anteriores, puede verse que la conversión depende de la concentración de reactivo que se ha consumido y esta, a su vez, del caudal de alimento al reactor y de la temperatura del mismo. Por otra parte, el calor de reacción también depende de la concentración y de la temperatura del reactor. Por ello, el módulo externo se ha desarrollado de tal forma que, en tiempo real, reciba el valor del caudal de alimento que se está midiendo y de la temperatura del reactor, resuelva las ecuaciones (8), (9) y (10), y devuelva cómo salida la conversión y el calor de reacción.

En la Figura 5 se muestra cómo se implementa en el montaje de la planta, donde el bloque de cálculo se ha identificado con el símbolo de ordenador y etiquetado como UX - 100.

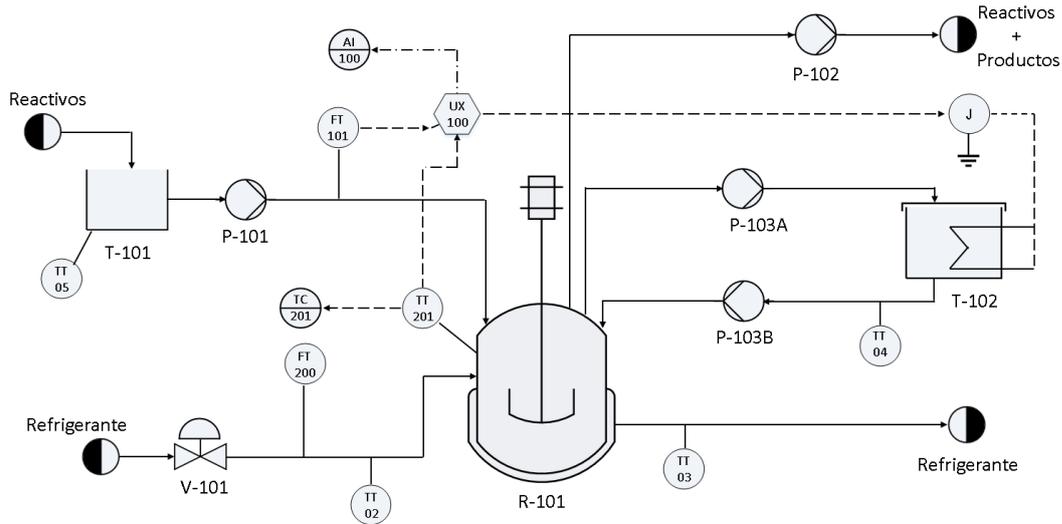


Figura 5. Diagrama del montaje experimental de la planta

La concentración de reactivo se ha calculado y se envía como salida para facilitar posteriormente el sistema de control (Véase *CAPÍTULO 3*)

Cabe destacar que tanto la concentración como el calor de reacción dependen de la reacción que se quiera simular. Por ello se ha establecido que el módulo externo también tenga como entradas los parámetros propios de la reacción ( $\Delta H$ ,  $K_0$ ,  $C_{A0}$  y  $E_a$ ). Los valores de estas constantes se pueden modificar desde el HMI permitiendo así la simulación de diferentes reacciones según los valores que ahí se establezcan. (Véase apartado 3.3.2)

Por último, se ha de señalar que la expresión de la velocidad de reacción (2) que se ha utilizado para obtener las ecuaciones (8) y (9) es la correspondiente a una reacción de primer orden, por lo que el módulo que se ha desarrollado permite simular diferentes reacciones pero todas de primer orden. Sin embargo, puesto que esta limitación solo aparece a la hora de calcular el calor de reacción mediante el bloque de cálculo, el montaje experimental podría simular reacciones de diferente complejidad simplemente cambiando el módulo de cálculo.

# CAPÍTULO 3

## Sistema de control



En la mayoría de procesos industriales, ya sean continuos o discontinuos, se pretende mantener las variables del sistema en un valor deseado fijo, en un valor variable con el tiempo de acuerdo con una relación predeterminada, o bien guardando una relación determinada con otra variable. [15]

Así pues, un sistema de control es aquel que permite este mantenimiento de las variables en las referencias deseadas, comparando el valor de la variable o condición a controlar con dicho valor referencia, tomando una acción de corrección de acuerdo con la desviación existente. Por tanto, el sistema de control exige que se incluya un sistema de medida, una unidad de procesamiento, un sistema de actuadores y el propio proceso. Este conjunto de sistemas forma un bucle denominado lazo de control. El lazo puede ser abierto, si la acción de corrección la toma el usuario, o bien cerrado, si dicha acción se produce de manera automática. [15]

### **3.1 ESTRATEGIA DE CONTROL**

Existen diferentes estructuras de control según el proceso a controlar y el objetivo de control. El lazo convencional de control SISO (una entrada una salida) es aquel en el que se mide el error existente entre la variable que se quiere controlar y el punto de consigna, un controlador calcula la señal que se ha de aplicar para corregir el error y un actuador aplica dicha acción correctora.

Sin embargo, existen modificaciones en la estructura del lazo simple con el fin de mejorar el sistema de control. Las estructuras de control más utilizadas, además del lazo convencional, son los lazos en cascada, los compensadores por realimentación, el control el selectivo, de override, por rango partido y el inferencial.

El control en cascada se basa en añadir un segundo medidor (y su correspondiente controlador) en una variable intermedia (secundaria) de manera que rechace las perturbaciones antes de que afecten a la variable controlada primaria. Así se reduce el efecto de las perturbaciones que afectan al proceso puesto que se aumenta la velocidad de respuesta. Los compensadores por realimentación utilizan las mediciones disponibles de

perturbaciones a la entrada y las relaciones entre dichas entradas y las salidas para predecir el efecto que una perturbación hará sobre la salida y compensarlo antes de que se produzca. Por otra parte, cuando se tienen más salidas que variables manipuladas, un control selectivo designa de forma automática cual es la variable a controlar según las condiciones del sistema. Cuando se tienen varios controladores y una sola variable manipulada el control override escoge cuál de ellos debe operar en cada momento. Del mismo modo, el control de rango partido reparte la acción de control de un controlador entre varios actuadores. Por último, si lo que se desea es controlar una variable del proceso que no se está midiendo, es necesario un inferencial, donde el valor de dicha variable se estime a partir de medidas del proceso, leyes físicas, químicas, etc. [14]

Para el caso de este proyecto se van a controlar las dos variables más importantes en un reactor químico, la temperatura del reactor y la conversión de la reacción, es decir, la cantidad de producto que se está produciendo en relación a la cantidad de reactivo que entra. Para controlar dichas variables se tienen dos grados de libertad, el caudal de alimentación y el caudal de refrigerante, por lo que el sistema de control consistirá en dos lazos convencionales.

Cabe destacar que cuando se lleve a cabo la implementación del sistema de control al montaje experimental estos lazos simples serán sustituidos respectivamente por dos lazos en cascada con los respectivos caudales.

Una vez que se han determinado las variables controladas se ha de establecer cuales deben de ser las variables manipuladas en cada lazo. A partir del modelo obtenido se han hecho diferentes simulaciones (véase *apartado 2.2*) manipulando las entradas del sistema (los diferentes caudales) y observando la evolución de las salidas (temperatura del reactor y conversión). En la Figura 3 se puede observar el resultado de estas simulaciones.

A partir de los incrementos de las salidas respecto a los saltos introducidos en las entradas se puede calcular una aproximación las ganancias estacionarias de cada par y por tanto la matriz de ganancias estacionarias:

$$k_{ij} = \frac{\partial y_i}{\partial u_j} \approx \frac{\Delta y_i}{\Delta u_j} \quad (11)$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} \\ k_{21} & k_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} \quad (12)$$

Donde:

- $k_{ij}$ : es la ganancia estacionaria de la salida  $i$  respecto de la entrada  $j$ .
- $\Delta u$ : es el incremento en la señal de entrada, en %
- $\Delta y$ : es el incremento en la señal de salida, en %

Aplicando las ecuaciones (11) y (12) a los resultados obtenidos en la simulación se obtiene la siguiente matriz de ganancias estacionarias.

$$\begin{bmatrix} T \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.0842 & 0.0651 \\ -1.81 \cdot 10^{-3} & -0.246 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{vj} \\ Q_v \end{bmatrix} \quad (13)$$

Sin embargo, esta matriz no refleja la interacción entre los lazos, para ello ha de calcularse la matriz de ganancias relativas (RGA) [16]:

$$RGA: \begin{matrix} & \begin{matrix} y_1 & y_2 \end{matrix} \\ \begin{matrix} u_1 \\ u_2 \end{matrix} & \begin{bmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} \end{bmatrix} \end{matrix} = \begin{matrix} & \begin{matrix} y_1 & y_2 \end{matrix} \\ \begin{matrix} u_1 \\ u_2 \end{matrix} & \begin{bmatrix} \lambda_{11} & 1 - \lambda_{11} \\ 1 - \lambda_{11} & \lambda_{11} \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (14)$$

Para obtener dicha matriz se han de calcular las diferentes ganancias relativas ( $\lambda_{ij}$ ) del sistema. La ganancia relativa de cada par entrada ( $u_j$ ) - salida ( $y_i$ ) se calcula a partir de las ganancias estacionarias en los casos extremos de cada lazo:

- El resto de lazos del sistema están abiertos:  $u_k = 0, \forall k \neq j$

$$k_{ij} = \left( \frac{\partial y_i}{\partial u_j} \right)_{u_k=0, k \neq j} \quad (15)$$

- El resto de lazos del sistema están con control perfecto:  $y_k = 0, \forall k \neq i$

$$\hat{k}_{ij} = \left( \frac{\partial y_i}{\partial u_j} \right)_{y_k=0, k \neq i} \quad (16)$$

Siendo  $k_{ij}$  la ganancia estacionaria de la salida  $i$  respecto de la entrada  $j$  cuando el resto de lazos están abiertos, y  $\hat{k}_{ij}$  la ganancia estacionaria de la salida  $i$  respecto a la entrada  $j$  pero cuando el resto de lazos del sistema están cerrados y con un control perfecto. A partir de lo expuesto anteriormente, la ganancia relativa  $\lambda_{ij}$  se calcula como la relación entre ambas ganancias según:

$$\lambda_{ij} = \frac{k_{ij}}{\hat{k}_{ij}} = \frac{\left(\frac{\partial y_i}{\partial u_j}\right)_{u_k=0, k \neq j}}{\left(\frac{\partial y_i}{\partial u_j}\right)_{u_k=0, k \neq j}} \quad (17)$$

Por otra parte, puede demostrarse [17] que, para un sistema de dos entradas con dos salidas, la ganancia estacionaria cuando el resto de lazos del sistema están controlados depende del resto de ganancias cuando el resto de lazos están abiertos según la siguiente expresión:

$$\hat{k}_{11} = k_{11} - \frac{k_{21}}{k_{22}} k_{12} \quad (18)$$

Teniendo en cuenta esto, la ganancia relativa de cada par entrada-salida puede calcularse según:

$$\lambda_{11} = \frac{k_{11}}{k_{11} - \frac{k_{21}}{k_{22}} k_{12}} = \frac{k_{11} \cdot k_{22}}{k_{11} \cdot k_{22} - k_{12} \cdot k_{21}} \quad (19)$$

Y por tanto la matriz de ganancias relativas será:

$$RGA: \begin{matrix} & \begin{matrix} y_1 & y_2 \end{matrix} \\ \begin{matrix} u_1 \\ u_2 \end{matrix} & \begin{bmatrix} \frac{k_{11} \cdot k_{22}}{k_{11} \cdot k_{22} - k_{12} \cdot k_{21}} & \frac{-k_{12} \cdot k_{21}}{k_{11} \cdot k_{22} - k_{12} \cdot k_{21}} \\ \frac{-k_{12} \cdot k_{21}}{k_{11} \cdot k_{22} - k_{12} \cdot k_{21}} & \frac{k_{11} \cdot k_{22}}{k_{11} \cdot k_{22} - k_{12} \cdot k_{21}} \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (20)$$

Con los resultados de la matriz de ganancias estacionarias (13) y aplicando estas expresiones, la matriz RGA queda tal que:

$$RGA: \begin{matrix} & x & T \\ Q_v & \begin{bmatrix} 0.994 & 5.67 \cdot 10^{-3} \\ 5.67 \cdot 10^{-3} & 0.994 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (21)$$

A la vista de los resultados obtenidos, se establecen dos lazos de control con el siguiente emparejamiento: el lazo 1 que controlará la conversión a partir del caudal de alimentación y el lazo 2 que controlará la temperatura del reactor a partir del caudal de refrigerante. Además, puesto que los valores de la diagonal son aproximadamente 1 se puede deducir que la interacción entre ambos lazos de control será prácticamente nula.

### 3.2 SINTONÍA DE LOS CONTROLADORES

De entre todos los controladores industriales, uno de los más utilizados es el controlador de tipo PID, cuyas siglas significan proporcional, integral y derivativo. La parte proporcional del controlador mueve su salida de forma *proporcional* a la desviación de la variable controlada respecto de su consigna. Sin embargo, en la práctica esto puede provocar un error en estado estacionario considerable en procesos no-integrativos. Por ello a los controladores proporcionales se les suele añadir una acción integral que elimina dicho error estacionario moviendo la salida del controlador de forma proporcional a la integral de la desviación del punto de consigna (i.e., error acumulado). Por último, la acción derivativa mueve la salida del controlador de forma proporcional a la velocidad de cambio del error y contribuye a estabilizar el proceso y a suprimir posibles sobrepicos en la respuesta. [18]

Por tanto, los reguladores P están indicados para procesos con integradores o donde no sea importante un error estacionario, y los reguladores PID para procesos con variables intensivas y sin ruidos. Para el caso que nos ocupa, la respuesta del proceso es bastante rápida, y no hay retardo apreciable en las salidas tras un cambio en las entradas (véase *Figura 3*), por lo que, por simplicidad, los reguladores de ambos lazos serán controladores PI.

La ecuación característica de señal de salida en forma estándar de este tipo de controlador es:

$$u(t) = K_p \cdot e(t) + \frac{K_p}{T_i} \int e(t) dt \quad (22)$$

Donde:

- $e(t)$ : es el error entre el valor de la variable que se quiere controlar y el valor de consigna que se desea de dicha variable, en %
- $K_p$ : es la ganancia del sistema correspondiente al término proporcional del controlador, en % / %.
- $T_i$ : es el tiempo integral correspondiente al término integral del regulador, en *min*.

Un aspecto clave a la hora de realizar un sistema de control es la sintonía del regulador, es decir, en el caso de PI, establecer el valor de la ganancia del sistema y el tiempo integral. Esta sintonización debe ser realizada por el usuario para ajustar el controlador al proceso que se desea controlar, evitando acciones bruscas para proteger al actuador final. Existen numerosos métodos de sintonización de un PI, desde los basados en métodos heurísticos (p. ej. [19]), métodos analíticos (p. ej. [20]), métodos basados en respuestas en frecuencia (p. ej. [21]), hasta basados en métodos de optimización (p. ej. [22] [23]). [18]

En este trabajo la sintonía de los controladores se ha realizado mediante el método S-IMC [24] en lazo abierto donde las constantes del controlador vienen determinadas por las siguientes expresiones:

$$K_p = \frac{\tau}{k(\theta + d)} \quad (23)$$

$$T_i = \min(\tau, 4(\theta + d)) \quad (24)$$

Donde:

- $d$ : es el retardo del sistema, es decir, el tiempo que tarda en empezar a cambiar la salida del sistema desde que se produce el cambio en la entrada, en *min*.
- $k$ : es la ganancia de la salida respecto a la entrada, véase (11).

- $\theta$ : es una constante cuyo valor está relacionado con la robustez del controlador, a menor valor de  $\theta$  mayor robustez, pero esto implica un control menos agresivo y por tanto más lento. Generalmente se le asigna el mismo valor que el retardo.
- $\tau$ : es el tiempo de respuesta del sistema, es decir, el tiempo que tarda la salida en alcanzar el 98% del valor final de estabilidad desde que se produce el cambio en la entrada, en *min*.

A partir de los resultados de la Figura 3 se han calculado modelos de primer orden con retardo para los pares de variables seleccionados, obteniéndose los siguientes resultados:

Tabla 3. Sintonía de los controladores

	$K$ (%/%)	$\tau$ (min)	$d$ (min)	$K_p$ (%/%)	$T_i$ (min)
$T - Q_{vj}$	-0,0842	5	0	-29,68	5
$x - Q_v$	-0,246	10	0	-20,35	8

Cabe destacar que  $\theta$  suele tener un valor entre 0.1 y 0.5 veces el tiempo de respuesta dependiendo de si se quiere obtener control más agresivo (0.1) o más conservador (0.5) [24]. Por ello, teniendo en cuenta el tiempo de respuesta de ambas salidas (véase Figura 3), a la hora de realizar la sintonía de ambos reguladores se ha escogido  $\theta$  igual a 2 y así obtener un buen compromiso entre robustez y velocidad de respuesta.

Para comprobar el buen funcionamiento del sistema de control y la correcta sintonía de los reguladores, se ha realizado una simulación en EcosimPro donde los valores de las entradas vienen establecidos por la ecuación (21) aplicando los resultados de la Tabla 3. Los resultados del control de la conversión del reactor mediante el caudal de alimentación (lazo 1) y del control de la temperatura mediante el caudal de refrigerante (lazo 2) se muestran en la Figura 6.

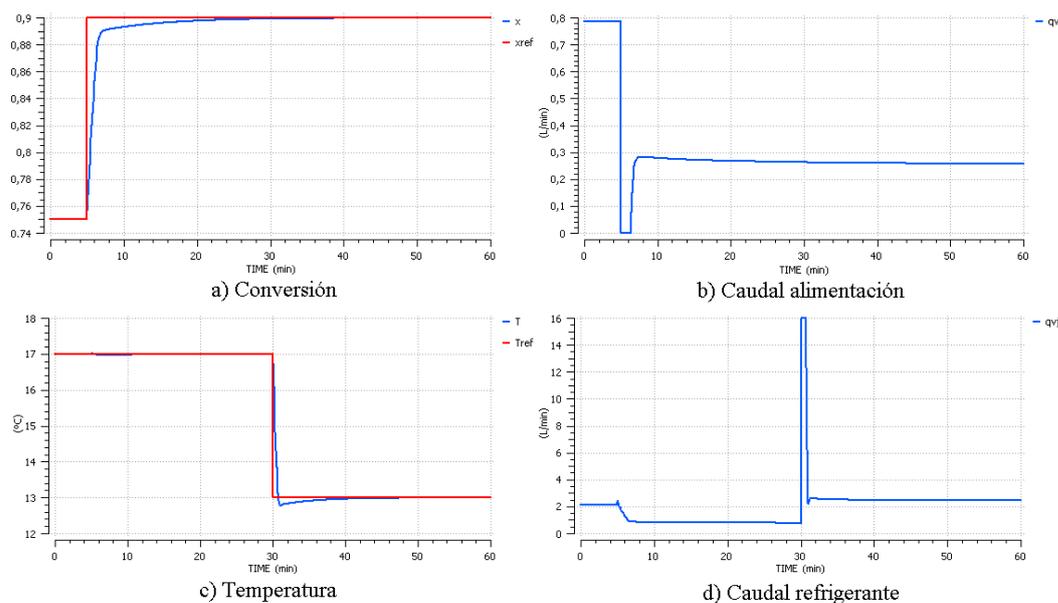


Figura 6. Simulación del sistema de control

A partir de la Figura 6 se puede apreciar que, al modificar los puntos de consigna, el sistema responde rápidamente para llegar al nuevo estado de referencia. Por otra parte, se observa que hay acciones excesivamente bruscas de control, por lo que conviene poner una sintonía más suave, pero puesto que se ha de comprobar empíricamente, cuando se realice el montaje experimental se volverá a hacer la sintonía de los diferentes parámetros. También cabe destacar que hay poco acoplamiento entre lazos pues la temperatura apenas varía ante un cambio de caudal de alimentación y la conversión no varía ante cambios en el caudal de refrigerante.

Se ha de tener en cuenta que, cuando se proceda a implementarlo, el caudal de alimentación se controlará con la velocidad proporcionada a la bomba de alimentación P-101 y el caudal de refrigerante se regulará mediante la válvula V-101. Como no se manipulan directamente los caudales, pero sí son medidos, el sistema de control será parecido al obtenido teóricamente, pero añadiendo en ambos casos un lazo interno con el que controlar los correspondientes actuadores, es decir, la bomba P-101 y la válvula V-101. Así pues, se establecerán dos lazos en cascada, en el primero el lazo externo controlará la conversión a partir del caudal de alimentación de referencia y el lazo interno comparará dicho caudal de referencia con el caudal real y modificará la

velocidad de la bomba. Por otra parte, el segundo lazo en cascada hará lo mismo con la temperatura, el caudal de refrigerante y la válvula respectivamente. (Véase Figura 7)

También se ha de señalar que, en el caso del control de la conversión, no se obtiene una medida directa de esta variable pero su valor se está calculando continuamente mediante el módulo externo que actúa como bloque calculador por lo tanto se puede actuar sobre ella como si se tratara de una variable medida normal.

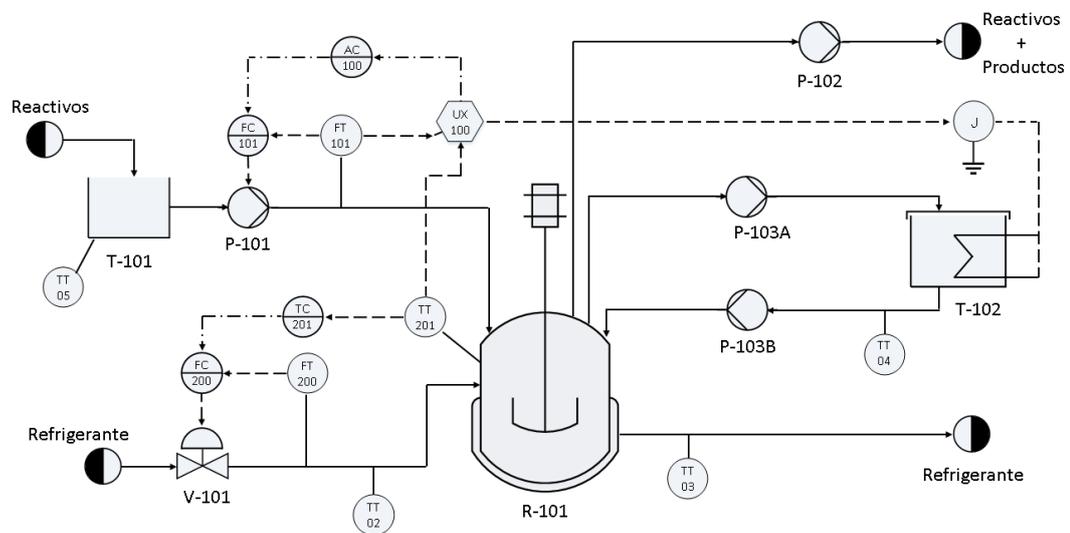


Figura 7. Diagrama P&I del proceso

### 3.3 IMPLEMENTACIÓN

Una vez diseñado el sistema de control de la planta, se procede a implementarlo en el montaje experimental. Para ello se ha desarrollado un sistema SCADA ("Supervisory Control And Data Acquisition", supervisión, control y adquisición de datos) el cual es capaz de adquirir, registrar y manipular información de la planta, de avisar al operario acerca de funcionamientos incorrectos de la misma y de anomalías en la planta y que permite adaptar el comportamiento del sistema a unas condiciones deseadas de funcionamiento. También se han desarrollado diferentes módulos externos que de forma conjunta actúan como sistema de control

Así pues, el SCADA/HMI que se ha configurado denominado Intouch de la empresa Wonderware, se comunica con el sistema de control, con el módulo externo que actúa como un bloque de cálculo y con la tarjeta de adquisición de datos (DAQ). Este sistema de control estará basado en 4 módulos externos donde cada uno actuará como un controlador PID.

La integración de los diferentes subsistemas con el SCADA puede apreciarse en la Figura 8.

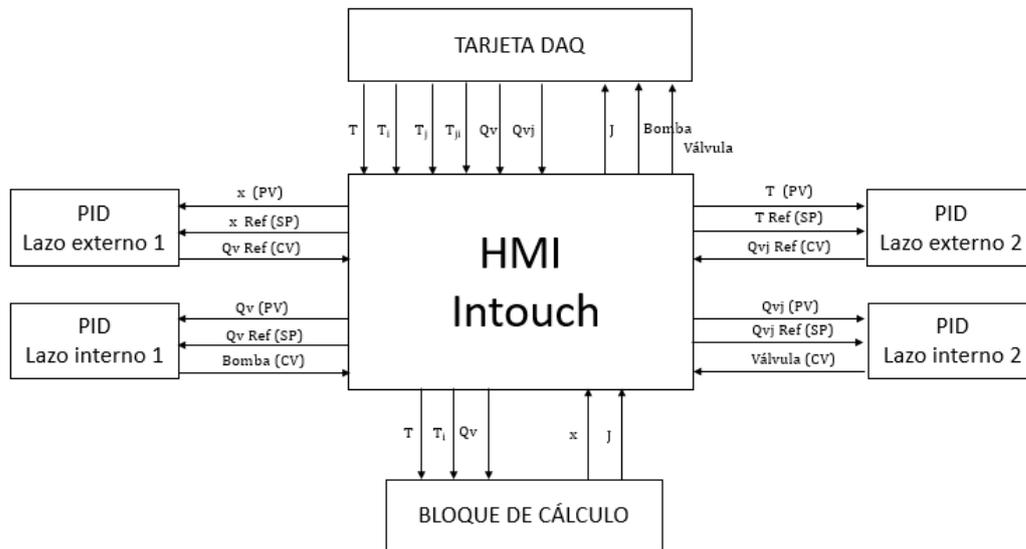


Figura 8. Integración de los diferentes subsistemas.

Cabe destacar que en todos los casos la transferencia de datos se realiza a través de protocolos de comunicación OPC ("OLE for Process Control"), que permitirá tanto captar datos de la planta como enviar datos desde el HMI. Además, los diferentes módulos externos serán accesibles como servidores OPC para poder comunicarlos con el HMI Intouch.

### 3.3.1 MÓDULOS EXTERNOS: PIDS

Como se ha comentado, el sistema SCADA no proporciona un sistema de control, por lo que este se ha tenido que desarrollar aparte. El sistema de control que se ha diseñado está compuesto por cuatro módulos externos que actúan como controladores PID. Estos módulos con soporte OPC, desarrollados por el grupo de investigación en Control y Supervisión de Procesos de la

Universidad de Valladolid [25], son capaces de calcular la variable manipulada ( $OP$ ) de un lazo de control tras suministrarle el valor actual de la variable del proceso a controlar ( $PV$ ), el punto de consigna ( $SP$ ) y los parámetros del regulador ( $Kp$ ,  $Ti$ ,  $Td$ ). Además, según están desarrollados permiten diferentes configuraciones:

- Dos modos de operación: ideal ( $modo = 1$ ) o real ( $modo = 0$ )
- Cuatro tipos de estructuras PID normalizadas: PID ( $tipo = 1$ ), PI-D ( $tipo = 2$ ), I-PD ( $tipo = 3$ ) e I ( $tipo = 4$ ).
- Dos modos de control: manual, en el que la señal de control la proporciona el usuario ( $autom = 0$ ) o automático si el usuario especifica únicamente el valor de consigna ( $autom = 1$ ).
- Dos modos de ejecución: autónomo (el algoritmo se ejecuta de forma temporizada en tiempo real) o supervisado (el usuario decide en qué momento se ha de recalculer la variable de salida).
- Evitar los cambios bruscos debido a la conmutación entre automático y manual activando el SP Tracking ( $SPTracking = 1$ ) para que el valor de la señal de referencia sea el valor de la señal del proceso cuando se está en modo manual.

Asimismo, puesto que la salida que proporciona el controlador está normalizada, se han de indicar los límites superiores e inferiores de las señales de campo tanto de la variable del proceso ( $PVEUHI$  y  $PVEULO$ ) como de la variable controlada ( $OPHI$  y  $OPLO$ ).

Para el caso de este proyecto se necesitan dos módulos externos para cada lazo de control en cascada correspondientes con los lazos internos y externos:

En el lazo externo del lazo 1 se calcula el caudal de alimentación ( $OP = Q_{vref}$ ) necesario para que la conversión ( $PV = x$ ) alcance el punto de consigna establecido ( $SP = x_{Ref}$ ). En el lazo interno del lazo 1, este caudal de alimentación de referencia ( $SP = Q_{vRef}$ ) se compara con el medido experimentalmente ( $PV = Q_v$ ) y se calcula que velocidad ha de proporcionar la bomba P-101 para suministrar dicho caudal ( $OP = Bomba$ ).

Por otra parte, en el lazo externo del lazo en cascada 2, se compara la temperatura ( $PV = T$ ) del reactor con el valor de consigna ( $SP = T_{Ref}$ ) y se calcula el caudal de refrigerante que debería circular ( $OP = Q_{vjRef}$ ). Y en el lazo interno se calcula la apertura de la válvula V-101 ( $OP = Valvula$ ) para que el caudal de refrigerante medido ( $PV = Q_{vj}$ ) sea el mismo que el que debería circular para que haya esa temperatura de consigna ( $SP = Q_{vjRef}$ ).

El resto de variables que establecen la forma de funcionamiento de cada controlador se pueden configurar desde el HMI Intouch desarrollado, donde se ha establecido una configuración por defecto que el usuario puede modificar. (Véase apartado 3.3.2)

### 3.3.2 HMI INTOUCH

Intouch es un programa del paquete FactorySuite 2014 de la empresa Wonderware que facilita un entorno gráfico para la información y control de una planta. Este software permite conectarse a diversos servidores OPC para acceder a diferentes fuentes de datos, permitiendo así ser un medio de comunicación entre el sistema de control con la planta y proporcionar una interfaz con la que visualizar e interactuar con el proceso mediante representaciones gráficas de los mismos.

Lo primero que hay que tener en cuenta a la hora de desarrollar el HMI Intouch es que este software distingue 3 tipos de variable:

- De memoria: variables internas de Intouch,
- I/O (Input/Output): variables que son entradas o salidas de servidores OPC respectivamente.
- Especial: variables que se usan para conseguir funciones más complejas.

Además, cada tipo de variable puede ser real, discreta, entera o texto, si se va a utilizar como una cadena de caracteres.

Para añadir una variable I/O primero se ha iniciado la aplicación System Management Console, y configurar la comunicación OPC entre los diferentes

servidores OPC (los módulos externos desarrollados con EcosimPro y la tarjeta DAQ) y el HMI Intouch.

Destacar que, si una variable se ha definido como I/O de un determinado servidor OPC, no se puede utilizar como entrada o salida a otro servidor, sino que se ha de crear una nueva variable con otro nombre, que se indique que es I/O del segundo servidor al que se quiere acceder, y en el código principal del HMI indicar que ambas variables deben ser iguales. Un ejemplo de esto es la temperatura del reactor, que se ha definido en 3 ocasiones diferentes, Temp\_reactor como variable que se obtiene de la tarjeta DAQ, T\_Estimador como variable que se envía al módulo externos usado como bloque de cálculo, y PV21 como variable que se envía al módulo externo que actúa como controlador del lazo externo 2. (Véase ANEXO V y ANEXO VI)

Teniendo esto en cuenta, se han definido las 73 variables I/O, 6 variables de memoria para poder controlar adecuadamente el sistema y se ha establecido en el código principal de la aplicación una serie de condiciones que se han de cumplir en todo momento. Además de estas variables, se han definido otras para facilitar la supervisión del proceso.

Como se ha comentado anteriormente, además de medio de comunicación entre los módulos externos y la tarjeta DAQ, el HMI Intouch permite crear una interfaz gráfica al gusto del usuario mediante diferentes ventanas y objetos a los que se les pueden añadir animaciones. Así pues, se ha creado una interfaz con la que visualizar las diferentes variables del proceso y modificar el sistema de control de forma sencilla.

Primeramente, se ha creado una pantalla principal (véase *Figura 9*) en la que se visualiza un esquema del proceso y del sistema de control según la disposición experimental, y en el que además se visualizan las diferentes variables medidas del proceso (entradas de la tarjeta DAQ), la conversión calculada con el simulador y las salidas del sistema (salidas de la tarjeta DAQ). Además, se ha establecido que las tuberías (generalmente grises) cambien su color cuando un fluido circula por ellas, verde si es reactivo, azul si es refrigerante, y rojo si es el agua que entra o sale de la unidad de potencia.

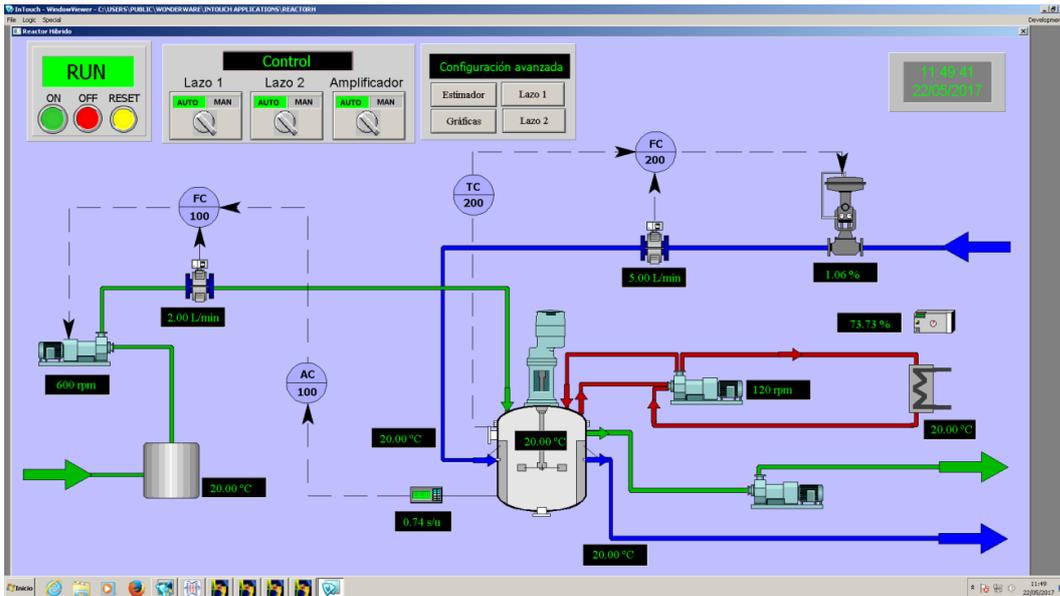


Figura 9. Ventana de la pantalla principal del HMI Intouch

Además de estas características, a esta pantalla se le han añadido algunos botones agrupados en 3 paneles:

El panel más importante es una serie de 3 botones y una pequeña pantalla con mensaje, en el que se establece si la planta está en marcha (botón verde) y la pantalla muestra el mensaje “RUN” o está parada (botón rojo), la pantalla muestra “STOP” y se obliga a todas las bombas, la unidad de potencia y la apertura de la válvula a ponerse a 0. El tercer botón sirve para resetear los parámetros de los controladores.

El segundo panel se basa en 2 interruptores que establecen el modo manual o automático de los dos lazos en cascada, es decir, no se permite poner el lazo externo en manual y el interno en automático, sino que solo se han configurado dos opciones, que esté el lazo externo en automático y por tanto el lazo interno también, o que el lazo interno esté en manual y por consiguiente el lazo externo también. Como medida de precaución se ha añadido un tercer interruptor que indique si la señal que se le suministra a la unidad de potencia viene determinada por el usuario (modo manual) o por el módulo de cálculo (modo automático). Cabe destacar que cuando dichos interruptores están en manual, el valor de las diferentes salidas puede ajustarse en los correspondientes recuadros de visualización.

Por último, se ha añadido un panel con 4 botones que muestran pantallas donde ver y/o manipular la configuración del sistema. A partir de la pantalla principal se puede visualizar el comportamiento del proceso en tiempo real y establecer un control manual o automático. Sin embargo, para modificar la configuración de alguno de los lazos, de los parámetros de la reacción que se está simulando, o ver gráficas históricas de las diferentes variables del proceso se han creado otras pantallas.

A partir del botón “Lazo 1” se abre la ventana con la configuración del lazo 1 (véase *Figura 10*). En esta se pueden observar 3 gráficas en tiempo real. En la primera gráfica se muestra la variable de proceso y su valor de consigna del lazo externo, en este caso la conversión y el valor de la referencia. En la segunda se observa la variable controlada del lazo interno, el caudal de alimentación, y su consigna, que coincide con la salida del lazo externo. Por último, en la tercera gráfica se observa el valor del actuador final, en este caso la velocidad de la bomba P-101.

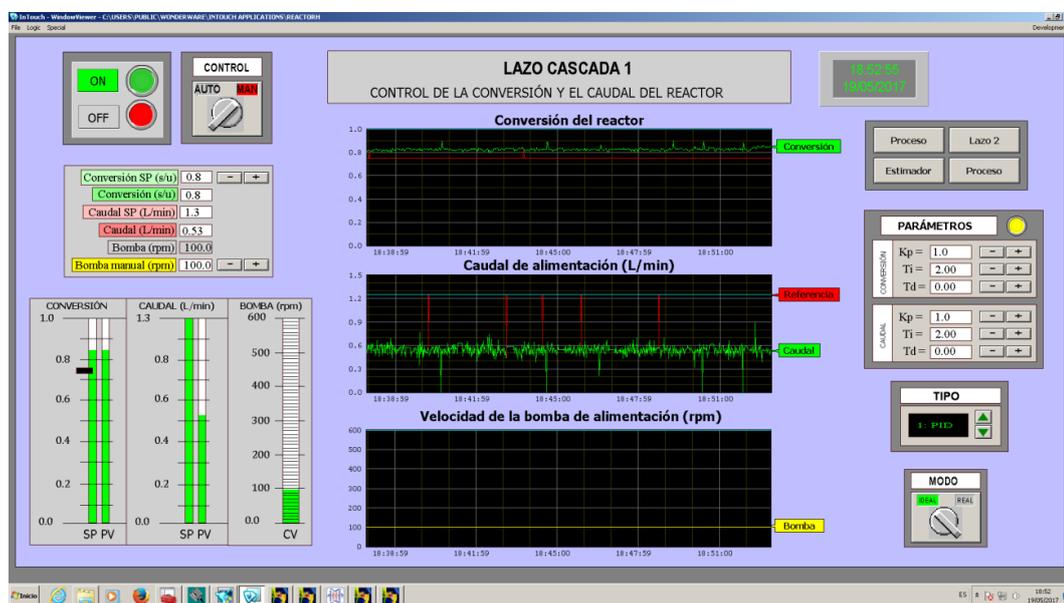


Figura 10. Ventana de la configuración del lazo en cascada 1

Además de las diferentes gráficas, se ha añadido un panel donde visualizar numéricamente el valor de las diferentes variables involucradas en el lazo de control y donde poder manipular el valor de consigna del lazo externo. También

se ha añadido una visualización de dichas variables en forma de barras, donde la conversión de referencia es un deslizador manipulable.

Con respecto a la configuración del controlador se han creado diferentes paneles. El primer panel sirve para poner en marcha el controlador y el segundo para determinar su modo de actuación, automático o manual. Por otra parte, se ha elaborado un panel donde se visualizan los parámetros de los dos controladores (lazo interno y lazo externo) y que pueden ser modificados por el usuario. A este panel se le ha añadido un botón “reset” (en amarillo) en el que los parámetros del controlador vuelven a su valor por defecto. Por último, se han añadido dos paneles más, mediante el primero se elige el modo de operación del controlador (ideal o real) y mediante el segundo se escoge el tipo la ecuación de señal de control. (Véase apartado 3.3.1)

Al igual que esta ventana para la configuración del lazo 1, se ha creado una igual pero correspondiente al lazo 2, denominada “Lazo 2”.

Otra de las ventanas que se ha creado accesible a partir del botón “Estimador”, es la que se muestra en la Figura 11. Esta ventana permite manipular los parámetros de la reacción que se esté simulando, que se utilizan para calcular la concentración y el calor de reacción mediante el módulo externo desarrollado para tal.

PARÁMETROS PROPIOS DE LA REACCIÓN A SIMULAR		16:52:30 19/05/2017
Energía de activación - $E_a$ (kJ/mol)	2024	PROCESO
Entalpía molar de reacción - $DH$ (kJ/mol)	100.0	LAZO 1
Concentración en la entrada - $C_{A0}$ (mol/L)	5.00	LAZO 2
Constante preexponencial - $K_0$ (L/mol·min)	1.38	

Figura 11. Ventana de configuración de la reacción

Por último, se ha incorporado una nueva ventana en la que el usuario puede elegir ver las gráficas históricas de diferentes variables. (Véase Figura 12)

Cuando se elige una variable de las que muestra la ventana de elección de gráficas, se abre una nueva ventana en la que se ve el valor de la variable

seleccionada en el intervalo de tiempo que el usuario escoja a partir de los botones que se muestran bajo la gráfica de la variable en la Figura 13.

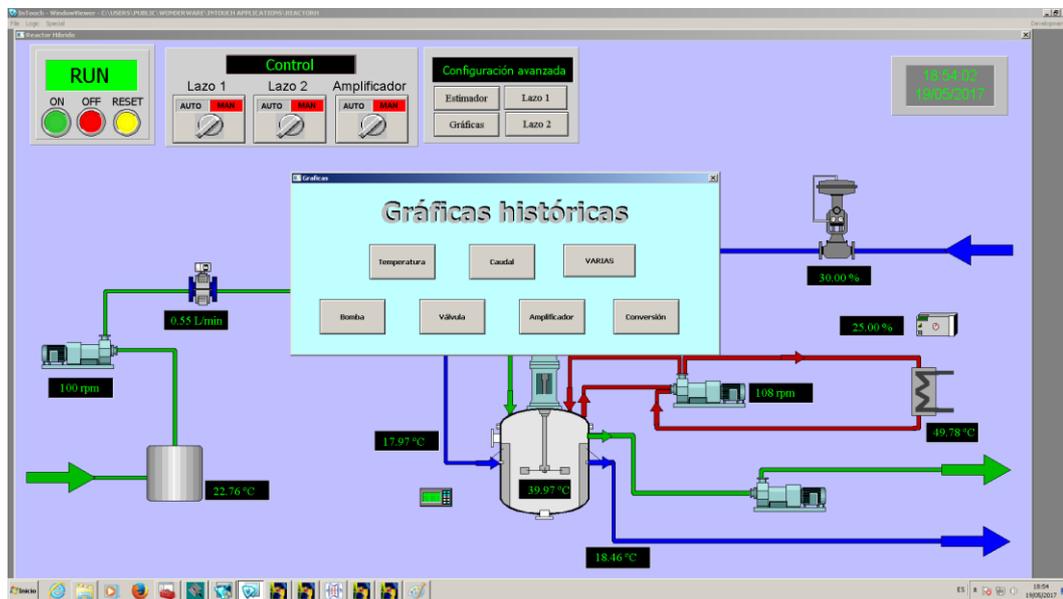


Figura 12. Ventana de elección de gráficas históricas



Figura 13. Ventanas de ejemplo de gráficas históricas

Un caso particular es cuando se selecciona la opción “VARIAS” en la ventana de selección de gráficas históricas pues abre una ventana en la que se ven simultáneamente 4 gráficas, temperatura del reactor y del tanque calefactado, temperaturas de alimento y de entrada y salida de la camisa refrigerante,

caudal de alimentación y caudal de refrigerante (Véase *Figura 14*). Además, a diferencia del resto de ventanas de gráficas históricas, esta ventana tiene la posibilidad de elegir si se quiere visualizar la evolución de las diferentes variables en un intervalo concreto, o si se quiere visualizar en tiempo real (mediante el botón "Tiempo Real"). Esta ventana se creó expresamente para ver la evolución de las diferentes temperaturas ante cambios de los dos caudales.

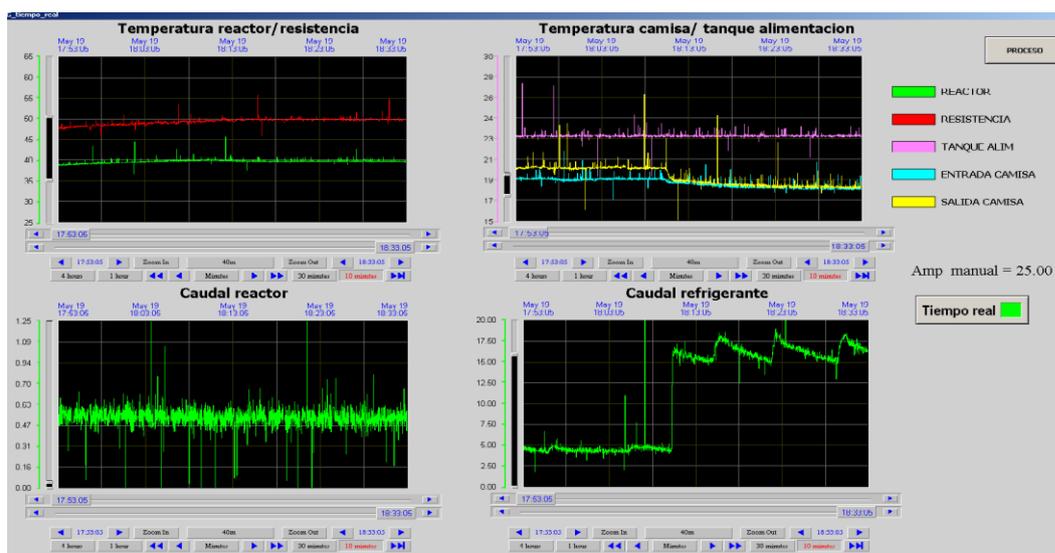


Figura 14. Ventana de "VARIAS" gráficas

### 3.4 ENSAYOS EXPERIMENTALES

Puesto que solo se han diseñado y sintonizado los controladores, correspondientes a los lazos externos de los dos lazos en cascada, una vez desarrollado el HMI Intouch se tiene que comprobar la sintonía de dichos controladores y sintonizar los controladores correspondientes a los lazos internos. Es decir, se ha de realizar la sintonía de los lazos internos, y una vez realizada dicha sintonía se ha de comprobar la realizada en simulación para los lazos externos.

Para ello se ha hecho el mismo experimento que se hizo en simulación para la sintonía de los lazos externos, se ha dado un salto a las variables de control, que en este caso son la velocidad de la bomba P-101 y la apertura de la válvula V-101, y se ha analizado la respuesta de las variables manipuladas. Una vez se

sintonicen los parámetros de los diferentes controladores, se comprobará el funcionamiento de la planta con todos los lazos cerrados.

### 3.4.1 LAZOS EN CASCADA 1

En lo referente al lazo 1 (véase *Figura 15*), puede apreciarse que, ante un incremento en el caudal de alimentación, la conversión disminuye proporcionalmente, de forma similar a la esperada a partir de los datos de simulación, y la respuesta del caudal respecto a la señal que se le envía a la bomba es prácticamente instantánea.

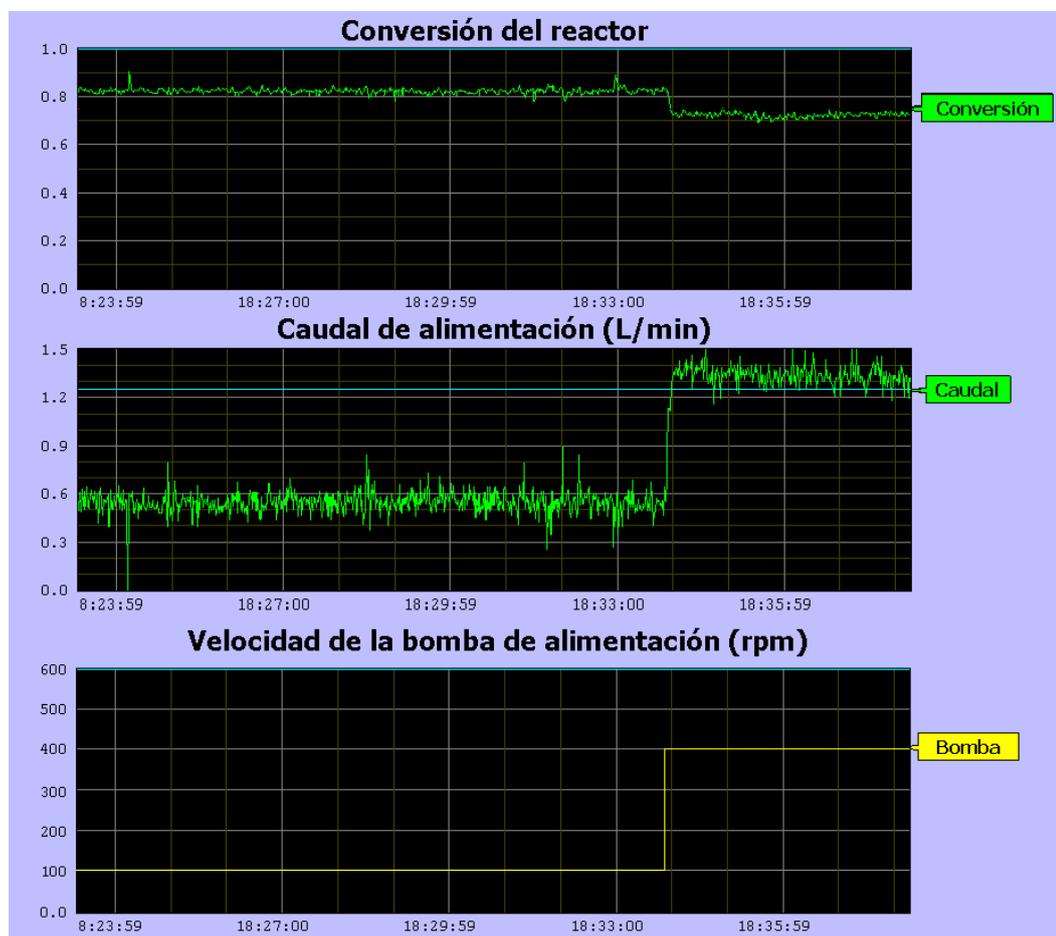


Figura 15. Respuesta de la conversión ante un cambio de caudal

A partir de los datos de este experimento se puede realizar la sintonía de ambos lazos utilizando nuevamente el método de S-IMC [24] en lazo abierto. Los valores obtenidos de los parámetros para cada controlador se pueden observar en la Tabla 4.

Tabla 4. Sintonía de los reguladores del lazo 1

	$K$ (%/%)	$\tau$ (min)	$d$ (min)	$K_p$ (%/%)	$T_i$ (min)
$x - Q_v$	-0,214	0,3	0	0,700	0,300
$Q_v - Bomba$	1,027	0,2	0	0,097	0,200

### 3.4.2 LAZO EN CASCADA 2

En lo que respecta al lazo 2, en la Figura 16 se observa que ante un cambio de apertura de la válvula V-101, aumenta el caudal de refrigerante, pero no se produce ningún cambio significativo en la temperatura del reactor.

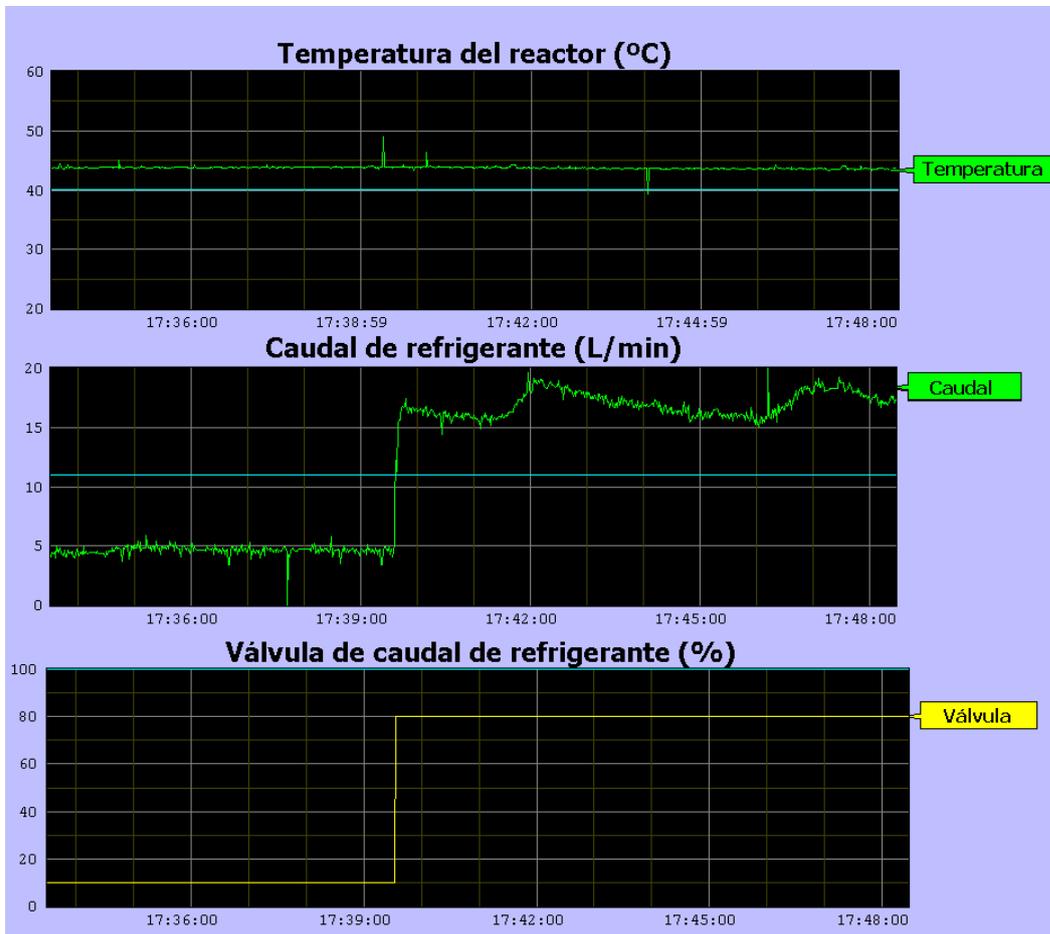


Figura 16. Ensayo para sintonizar el lazo 2

Se ha intentado realizar la sintonía de los dos controladores, sin embargo, como era de esperar, al no producirse un cambio de temperatura ante un aumento de caudal, la ganancia del controlador de temperatura es infinita. Los

valores obtenidos de los parámetros para cada controlador se pueden observar en la Tabla 5.

Tabla 5. Sintonía de los reguladores del lazo 2.

	$K$ (%/%)	$\tau$ (min)	$d$ (min)	$K_p$ (%/%)	$T_i$ (min)
$T - Q_{vj}$	0	0	0	Inf.	0
$Q_{vj} - \text{Válvula}$	0,914	0,2	0	0.109	0,200

Los resultados de la Tabla 5 indican que la temperatura se ve mínimamente afectada por el caudal de refrigerante, es decir, que el calor intercambiado entre el reactor y la camisa refrigerante es despreciable. Puesto que el calor depende del coeficiente de transmisión de calor, y este se había supuesto (véase apartado 2.2), se ha realizado el cálculo inverso para determinar el verdadero valor de dicho coeficiente.

Tabla 6. Datos para calcular el calor intercambiado y el coeficiente de transmisión de calor real.

$T(^{\circ}\text{C})$	43,37
$T_i(^{\circ}\text{C})$	27,5
$T_j(^{\circ}\text{C})$	26,2
$T_{ji} (^{\circ}\text{C})$	25,5
$Q_v$ (L/min)	0,6
$Q_{vj}$ (L/min)	4,89
$Q_{reac}$ (kJ/min)	48,5
$\rho$ (kg·L <sup>-1</sup> )	1
$\rho_j$ (kg·L <sup>-1</sup> )	1
$C_p$ (kJ·kg <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> )	4,18
$C_{pj}$ (kJ·kg <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> )	4,18
$A$ (m <sup>2</sup> )	0,1485

A partir de los datos empíricos obtenidos al realizar el experimento (parte izquierda de la Figura 15) mostrados en la Tabla 6, se puede calcular el calor intercambiado entre el reactor y la camisa. Puesto que el sistema se encuentra en estado estacionario, este calor intercambiado se puede calcular según:

$$Q_{int} = Q_v \rho C_p (T_0 - T) + Q_{reac} \quad (25)$$

Conociendo el valor real del calor intercambiado y aplicando la ecuación (6), se ha obtenido que el valor del coeficiente de transmisión de calor es:

$$U = 3.2 \frac{kJ}{min \cdot m^2 \cdot K}$$

Es decir, el coeficiente de transmisión de calor es 100 veces menor del supuesto. Esto implica que la camisa refrigerante no va a poder controlar la temperatura del reactor.

Este problema podría solucionarse cambiando el reactor por uno con las mismas características de volumen y área de intercambio, pero de otro material con mayor conductividad térmica, o disminuyendo el grosor de la pared que separa la camisa refrigerante del reactor. Ambas soluciones incrementan el valor del coeficiente global de transmisión de calor.

Por otra parte, puesto que el calor intercambiado también depende del área de intercambio entre la camisa y el reactor, este podría incrementarse sustituyendo el reactor por uno cuya área de intercambio sea mayor.

Por último, el tercer factor que afecta al calor intercambiado es la diferencia de temperatura entre el interior de reactor y la camisa, por tanto, para aumentar el calor intercambiado se ha de aumentar dicha diferencia de temperatura. Puesto que lo que se desea controlar es la temperatura del interior del reactor, para incrementar la diferencia de temperatura se propone disminuir la temperatura del refrigerante. Sin embargo, puesto que el agua de refrigeración proviene de la toma de red, la única forma de disminuir esta temperatura sería poniendo un sistema de refrigeración antes de que el fluido refrigerante se introdujera en la camisa.

De las diferentes opciones propuestas, se ha decidido cambiar el reactor. Sin embargo, para no tener que comprar un nuevo reactor, se ha decidido cambiar el RCTA por un intercambiador de calor, por donde el fluido refrigerante circule por el interior del serpentín del intercambiador, y los “reactivos” vayan por la carcasa, simulando el comportamiento de un reactor tubular. Al igual que en el caso desarrollado para este proyecto, parte del fluido de la carcasa del

intercambiador se llevará a al tanque con la resistencia calefactora donde se simulará el calor de reacción desprendido. Sin embargo, puesto que la temperatura del reactor no será homogénea, sino que habrá un gradiente de temperatura a lo largo del intercambiador. Es decir, el modelo matemático del proceso se ha de cambiar para tener en cuenta la dependencia de la temperatura con la longitud además de con el tiempo. Un esquema de la nueva planta puede apreciarse en la Figura 17.

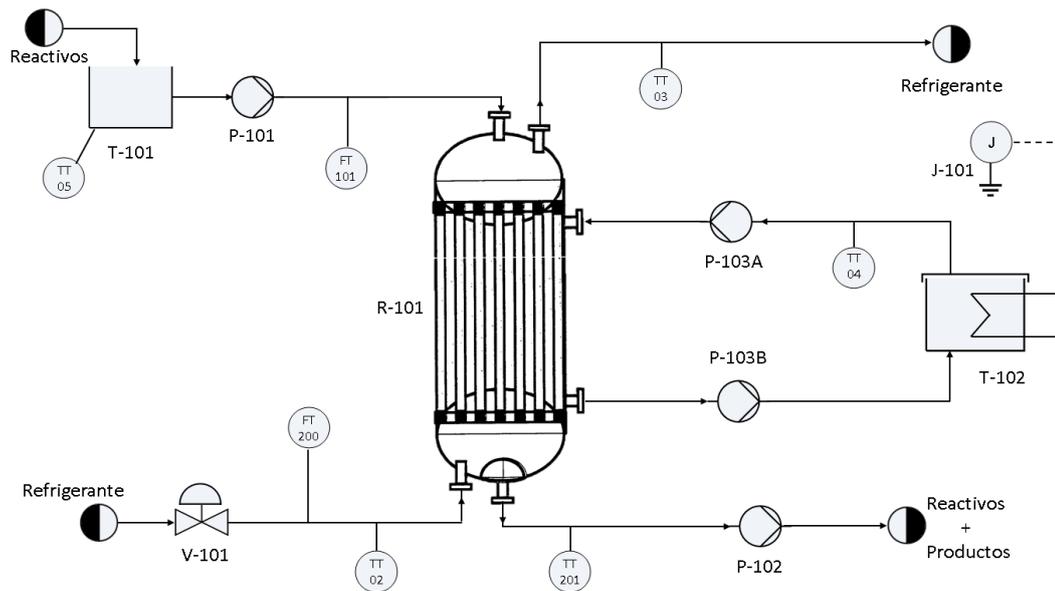


Figura 17. Esquema de la nueva planta piloto.



# CAPÍTULO 4

## Optimización



Antiguamente el control se podía contemplar como una disciplina puramente de ingeniería, sin embargo, hoy en día se busca cada vez más la interrelación entre los departamentos y unidades de negocio dentro de una empresa. Esto ha hecho que el enfoque del control de procesos se aplique a una gran variedad de problemas, combinando así ingeniería, economía y planificación estratégica.

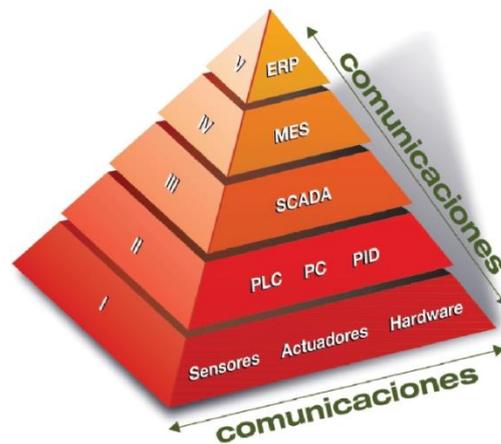


Figura 18. Pirámide de la automatización

La pirámide de la Figura 18 presenta la estructura corporativa dividida en cinco niveles según las funciones principales que se desarrollan en cada uno de ellos. Los primeros tres niveles corresponden al está comprendido por toda la parte de automatización y control de procesos englobando tanto el nivel de control como el nivel de campo. El cuarto nivel, denominado MES (“Manufacturing Execution System”, gestión de la producción) corresponde al nivel de supervisión de la pirámide y comprende la gestión de calidad, documentación, gestión de producción, mantenimiento y optimización. Por último, el nivel superior, ERP (“Enterprise Resource Planning”, planificación de recursos empresariales) engloba todo el nivel de gestión, compras, ventas, logísticas. Sin embargo, cabe señalar que estos niveles no tienen límites claramente definidos.

Teniendo esto en cuenta, se ha decidido implementar una capa superior de optimización con la que comandar el sistema de control para lograr una operación óptima de la planta incorporando al sistema SCADA un módulo externo, también accesible como servidor OPC, que realice una optimización del sistema en tiempo real para ajustar las consignas de temperatura y

conversión a las condiciones de cada instante, según una función objetivo determinada. Esta optimización se realizará mediante Pyomo, un entorno de optimización numérica accesible en lenguaje Python.

#### 4.1 MODELO A OPTIMIZAR

Antes de realizar la optimización en Pyomo se ha de establecer cuál es el modelo del sistema y la función objetivo que se quiere minimizar. En este caso el modelo es el mismo que se utilizó para la simulación del sistema, expresiones (1)-(7), pero incluyendo las definiciones de la conversión (10) y la concentración de producto a la salida del reactor (29). A este modelo hay que añadirle la función objetivo que se quiere optimizar, en este el objetivo es maximizar la producción de producto B, es decir, el problema resultante a optimizar es:

$$\min \int -C_B \cdot Q_v dt \quad (26)$$

s.a.

$$\frac{dC_A}{dt} - \frac{Q_v}{V}(C_{A0} - C_A) + K_0 e^{\left(\frac{-Ea}{RT}\right)} C_A = 0 \quad (8)$$

$$V\rho C_p \frac{dT}{dt} - Q_v \rho C_p (T_0 - T) + UA(T - T_j) - \Delta HV K_0 e^{\left(\frac{-Ea}{RT}\right)} C_A = 0 \quad (27)$$

$$V_j \rho_j C_{pj} \frac{dT_j}{dt} - Q_{vj} \rho_j C_{pj} (T_{j0} - T_j) - UA(T - T_j) = 0 \quad (28)$$

$$x - 1 + \frac{C_A}{C_{A0}} = 0 \quad (10)$$

$$C_B - x \cdot C_{A0} = 0 \quad (29)$$

Puede apreciarse que el modelo es dinámico puesto que contiene diferentes ecuaciones diferenciales. Las restricciones a las variables de decisión serán que tanto la temperatura del reactor como la de la camisa no alcance la máxima temperatura que soporta el tanque calefactado de metacrilato, es decir, 50°, y que los caudales de alimento y de refrigerante estén limitados por

los caudales mínimos y máximos que se pueden obtener experimentalmente, es decir, para el caudal de alimento que esté entre 0 y 1.5L/min, y el caudal de refrigerante entre 0 y 20L/min.

Se ha de señalar que la función objetivo es bastante sencilla, puesto que inicialmente se ha querido realizar una sencilla optimización del proceso. Esta función objetivo puede cambiarse en el modelo por otras de mayor complejidad que tengan en cuenta otros intereses, como minimizar el uso de refrigerante o la cantidad de materia prima que se utiliza.

## 4.2 INTRODUCCIÓN A PYOMO

Una de las bibliotecas de Python es Pyomo, la cual permite al usuario formular problemas de optimización de manera similar a la notación usual en optimización matemática. Pyomo admite un estilo orientado a objetos para formular modelos de optimización, los cuales son definidos a través de gran variedad de componentes de modelación: conjuntos, parámetros tanto escalares como multidimensionales, variables de decisión, objetivos, restricciones, ecuaciones y más.

Una de las características más importantes de Pyomo es que permite crear dos tipos de modelos, concretos o abstractos. En los primeros, cuando se crea el modelo se especifican los datos para su resolución, mientras que en los modelos abstractos son definidos sin datos y es a posteriori cuando se especifica que datos se han de utilizar para realizar la optimización. Estos modelos pueden ser inicializados con datos de Python, o mediante fuentes externas como hojas de cálculo, bases de datos y variados formatos de archivos de texto. Así pues, los modelos abstractos permiten resolver un modelo matemático para diferentes conjuntos de datos, según se indique. Sin embargo, tanto en los modelos concretos como en los modelos abstractos, Pyomo permite la separación del modelo y los datos.

Por otra parte, Pyomo admite comunicación con docenas de algoritmos de resolución, algunos comerciales y otros de código abierto, incluyendo muchos de los admitidos por AMPL, PICO, CBC, CPLEX, IPOPT, Gurobi y GLPK. El

algoritmo de resolución puede ser llamado directamente, o asincrónicamente con un administrador de algoritmos de resolución, permitiendo de esta última forma la ejecución remota y paralela de códigos de Pyomo.

Por último, las dos ventajas más importantes que presenta Pyomo respecto a otros entornos de optimización es que, por una parte, permite plantear modelos con ecuaciones diferenciales y discretizarlas para su posterior resolución, y por otra abordar problemas con incertidumbres de una manera amigable, es decir, aquellos en donde no se conoce el valor exacto de uno o varios de los parámetros o variables externas del sistema. En este caso no se ha supuesto ninguna incertidumbre, sin embargo, el modelo del proceso tiene 3 ecuaciones diferenciales que se han de discretizar para la optimización del sistema, y Pyomo permite realizar esta discretización de manera automática pudiendo elegir el método de discretización entre diferencias finitas o mediante colocación ortogonal [26]. [6]

### 4.3 FORMULACIÓN EN PYOMO

Para optimizar un modelo con Pyomo primero hay que crearlo y definir el tipo de modelo que se desea crear, concreto o abstracto. En este caso se ha elegido un modelo abstracto puesto que los datos para resolver el modelo se van a ir modificando (*el código desarrollado puede verse en el ANEXO VII*).

Una vez definido el tipo de modelo se han de definir los parámetros que se han de tener en cuenta, las variables del problema, la función objetivo que se quiere minimizar (o maximizar) y las diferentes restricciones que se han de cumplir.

Primero se declaran los parámetros constantes del problema, que al tratarse de un modelo abstracto simplemente se indica que cuando se vaya a crear el correspondiente modelo concreto para resolver la optimización se compruebe que el dominio sea el adecuado.

Puesto que en este caso el modelo contiene ecuaciones diferenciales respecto del tiempo, se ha de crear un set continuo, indicando los límites de este, es decir, entre que instantes de tiempo se va a realizar la optimización.

Seguidamente se definen las distintas variables del proceso, especificando si dependen del set tiempo en aquellas que su valor varíe con el tiempo, además de los límites superiores e inferiores de cada una, así como el valor inicial con el que empezar la optimización con el objetivo de facilitar la optimización. Puesto que es un modelo dinámico, las derivadas de las variables también se han de definir como variables, indicando de que variable es la derivada y respecto de que conjunto de variables, en este caso el tiempo.

Por otra parte, las restricciones del problema serán las ecuaciones del modelo matemático obtenido anteriormente. Estas ecuaciones se han definido previamente como funciones.

Por último, faltaría definir la función objetivo, sin embargo, puesto que en este caso se trata de un problema continuo y lo que se quiere minimizar es el coste en cada instante, es decir, se ha de minimizar la suma del coste en todos los puntos en los que se va a discretizar el modelo. Por ello, hasta que no se cree el modelo continuo concreto y se discretice, no se puede añadir la función objetivo del problema.

Una vez creado el modelo abstracto se procede a resolverlo, pero para ello primero se ha de crear una instancia concreta con los datos que se quieran utilizar para la optimización. (ANEXO VIII)

Seguidamente, las ecuaciones diferenciales del modelo se han de discretizar, especificando el modelo concreto que se quiere discretizar, el número de elementos finitos en los que dividir el problema, respecto de que conjunto de variables y el método (diferencias finitas o colocación ortogonal [26]).

Una vez discretizado, se indican las condiciones iniciales de las variables algebraicas (por defecto su valor es nulo) y ahora sí, se especifica la función objetivo. Teniendo en cuenta que el objetivo de este problema es obtener el mayor beneficio posible, la función objetivo será aquella que maximice la producción de producto.

Finalmente se resuelve el problema concreto especificando el algoritmo de optimización a utilizar, en este caso IPOPT [27], puesto que permite resolver problemas no lineales de una forma muy eficiente computacionalmente.

A partir del código que se muestra en el ANEXO VII se ha llevado a cabo la optimización del proceso para obtener el máximo beneficio con los datos obtenidos en simulación (los datos se muestran en el ANEXO VIII).

En la Figura 20 se muestra la evolución de las diferentes variables de decisión desde un punto determinado del reactor hasta que alcanza el punto de trabajo óptimo. Este punto óptimo se obtiene cuando el caudal de alimentación es el máximo permisible y el caudal de refrigerante se ajusta para que la temperatura del reactor no supere los 50°C (máxima temperatura que soporta el tanque calefactado de metacrilato). De esta forma se observa que se disminuye la conversión y por tanto la concentración de producto, pero se compensa al aumentar el caudal produciendo la máxima cantidad de producto.

Por otra parte, si se analiza la evolución del valor de la función objetivo, Figura 19, se aprecia que su crecimiento es lineal, puesto que la acción correctora que maximiza el beneficio, el aumento de caudal de alimento se produce en el primer instante, y la disminución de la concentración de producto apenas es apreciable. Por tanto, el coste en cada instante es el mismo, y el coste total, es decir, la suma en cada instante aumenta de forma lineal.

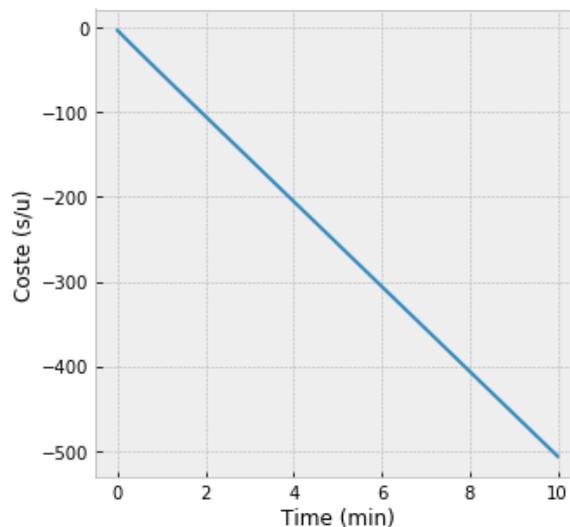


Figura 19. Evolución del valor de la función objetivo

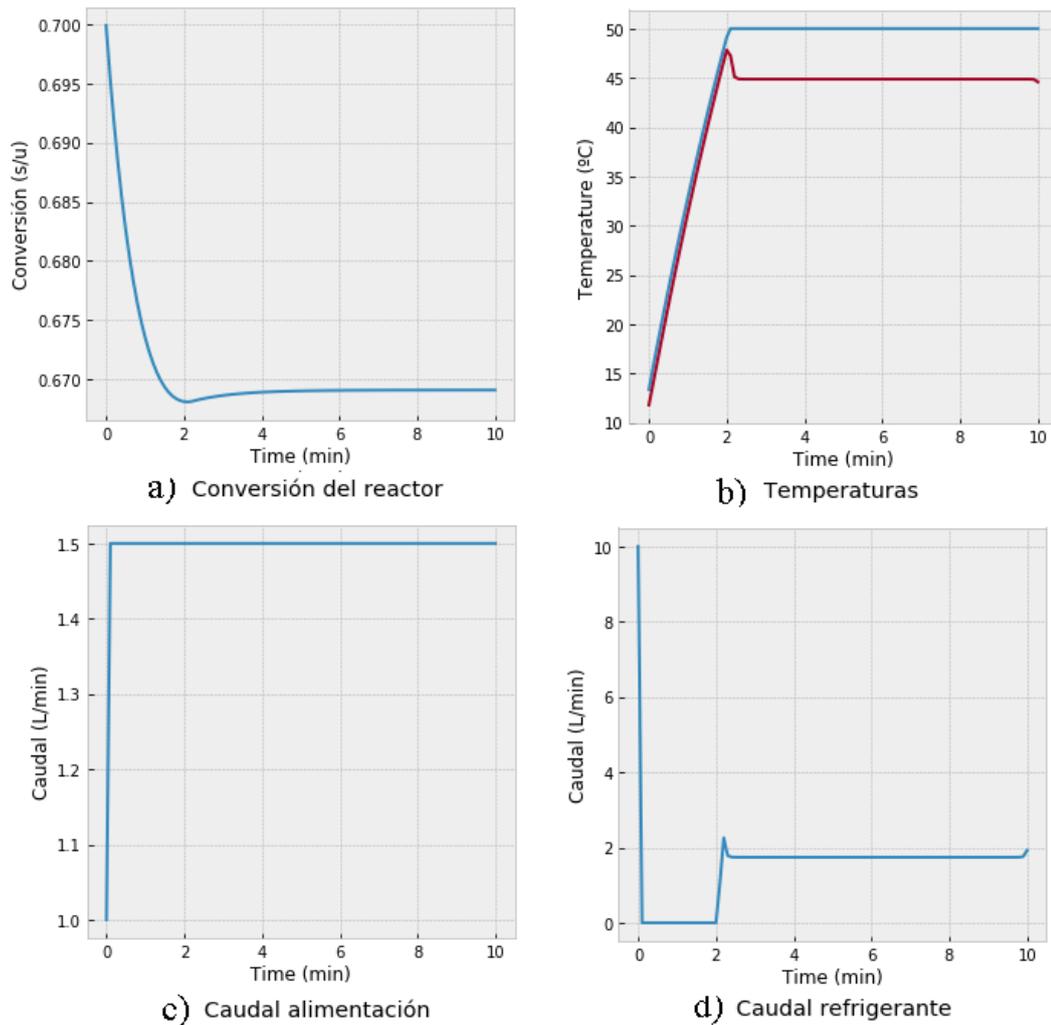


Figura 20. Resultados de la optimización con Pyomo

#### 4.4 MÓDULO EXTERNO: OPTIMIZADOR

Como se ha comentado en la introducción del capítulo, se desea añadir un nivel de optimización con el que dirigir el sistema de control para operar la planta de forma óptima. Esta capa de optimización consiste en conectar un nuevo módulo externo accesible como servidor OPC al sistema HMI Intouch.

Este nuevo módulo debe tener como entradas las temperaturas de entrada tanto del reactor como de la camisa refrigerante y las salidas serán la temperatura de referencia y la conversión de referencia que se envían a los controladores de los respectivos lazos externos. Sin embargo, puesto que el modelo sirve para optimizar diferentes reacciones dependiendo de los parámetros de reacción que se escojan, estos también se han de establecer

como entradas al sistema para poder utilizar dicho modulo en diferentes reacciones. No obstante, tal y como pasaba con el bloque de cálculo, aunque se modifiquen el valor de los diferentes parámetros de reacción, solo sirve para reacciones de primer orden.

Cabe destacar que este nuevo módulo de optimización no se ha integrado puesto que, como se ha visto en el apartado 3.4.2, el control de la temperatura del reactor no es posible según el montaje actual y por tanto el nivel de optimización avanzado no puede ser incorporado.

# CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO



El trabajo realizado hasta ahora se basa en un modelo matemático teórico que simula de forma coherente el comportamiento del tipo de la planta piloto que se quiere controlar. A partir de este, se ha implementado una planta híbrida que permite trabajar con distintas reacciones en tiempo real, pero evitando los problemas de manipulación de reactivos, y se ha diseñado un sistema de control que permite controlar las variables más importantes del proceso, a ser la conversión de la reacción y la temperatura del interior del reactor, teniendo poca interacción entre ambos lazos. También se ha desarrollado un sistema SCADA/HMI que conecta el sistema de control con la planta y se ha diseñado una interfaz gráfica con la que poder visualizar, supervisar y controlar la planta. Por último, también se ha realizado una optimización del proceso

Como trabajo futuro se desea integrar esa capa de optimización con el sistema de control de la planta piloto, implementando una capa superior de optimización con la que comandar el sistema de control para lograr una operación óptima de la planta. Sin embargo, para poder abordar problemas de un nivel superior, los niveles inferiores han de funcionar correctamente, en concreto, la optimización económica exige que el nivel de control funcione adecuadamente. Sin embargo, a la hora de experimentar con la planta real se ha observado que el comportamiento no era el predicho en simulación puesto que el coeficiente de transmisión de calor ha resultado ser mucho menor del esperado, limitando la operabilidad de la planta. Esto provoca que el control de la temperatura del reactor no sea posible según el montaje actual y por tanto el nivel de optimización avanzado no puede ser incorporado.

Para solucionar este problema se han propuesto diversas soluciones: modificar el reactor por uno de otro material con mayor conductividad térmica o menor espesor de pared entre reactor y camisa, aumentar el área de intercambio y aumentar la diferencia de temperatura entre reactor y camisa disminuyendo la temperatura de entrada de refrigerante. Según los equipos que se disponen en la Universidad de Valladolid, se ha decidido cambiar el reactor por un intercambiador de calor que funcione como un reactor tubular. Esto implica que además de con el tiempo, las variables de estado del sistema dependerán de la distancia a la que se encuentren de la longitud del reactor/intercambiador.



# REFERENCIAS

- [1] J. M. Andújar y T. J. Mateo, «Diseño de Laboratorios Virtuales y/o Remotos. Un caso Práctico,» *Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial RIAI*, vol. 7, nº 1, pp. 64-72, 2010.
- [2] R. Pastor, J. Sánchez y S. Dormido, «Web-based virtual lab and remote experimentation using easy java simulations,» *IFAC Proceedings Volumes*, vol. 38, nº 1, pp. 103-108, 2005.
- [3] S. Dormido, C. Martín, R. Pastor, J. Sánchez y F. Esquembre, «Magnetic Levitation System: A Virtual Lab in “Easy Java Simulation”,» de *Amercian Control Conference*, Boston, 2004.
- [4] EcosimPro, «EcosimPro,» 2016. [En línea]. Available: <http://www.ecosimpro.com/>.
- [5] Wonderware, «Wonderware Spain,» 2016. [En línea]. Available: <http://www.wonderware.es/>.
- [6] Pyomo, «Pyomo,» [En línea]. Available: <http://www.pyomo.org/>. [Último acceso: 2017 06 13].
- [7] K. Aström y B. Wittenmark, *Computer-controlled systems: Theory and desing*, Prentice Hall, 1997.
- [8] M. Pipan, T. Arh y B. J. Blazic, «Advanced eVocational Education of Mechatronic Professions,» *International Journal of Education and Information Technologies*, vol. 3, nº 1, pp. 12-19, 2009.
- [9] E. Luther, «Developing Interactive Simulations with the,» Openstax, [En línea]. Available: <http://cnx.org/contents/OQVW7F5k@1/Developing-Interactive-Simulat.> [Último acceso: 28 06 2017].

- [10] J. Henry y R. Zollars, «Assessment of Remote Experiments and Local Simulations: Student Experiences, Satisfaction and Suggestions,» de *ASEE Annual Meeting*, 2003.
- [11] M. Casini, D. Prattichizzo y A. Vicino, «The automatic control telelab,» *IEEE Control System*, vol. 24, n° 3, pp. 36-44, 2004.
- [12] L. G. Bergh, «A Hybrid Approach to Empirically Test Process Monitoring, Diagnosis and Control Strategies,» *Thaung K. (eds) Advanced Information Technology in Education. Advances in Intelligent and Soft Computing*, vol. 126., 2012.
- [13] A. M. Law, *Simulation Modeling and Analysis*, 5ª ed., New York: McGraw-Hill, 2015.
- [14] R. H. Perry y D. W. Green, *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, 7 ed., McGraw-Hill, 1997.
- [15] A. Creus, *Instrumentación Industrial*, 8 ed., Marcombo, 1997.
- [16] E. H. Bristol, «On a New Measure of Interaction for Multivariable Process Control,» *IEEE Transactions on Automatic Control*, vol. 11, n° 1, pp. 133-134, 1966.
- [17] S. Skogestad y I. Postlethwaite, «3.4 Relative Gain Array (RGA),» de *Multivariable Feedback Control*, 2ª ed., New York, John Wiley & Sons, 2005, pp. 82-91.
- [18] K. J. Aström y T. Hägglund, *PID Controllers: Theory, Design, and Tuning*, Research Triangle Park, NC: Instrument Society of America, 1995.
- [19] J. G. Ziegler y N. B. Nichols, «Optimum settings for automatic controllers,» *Transactions of the A.S.M.E.*, vol. 64, n° 11, pp. 759-765, 1942.

- [20] D. E. Rivera, M. Morari y S. Skogestad, «Internal Model Control: PID Controller Design,» *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, vol. 265, n° 25, p. 252, 1986.
- [21] G. H. Cohen y G. A. Coon, «Theoretical Consideration of Related Control,» *Transactions of the A.S.M.E.*, vol. 75, pp. 827-834, 1953.
- [22] C. Kessler, «Über die Vorausberechnung optimal abgestimmter Regelkreise Teil III. Die optimale Einstellung des Reglers nach dem Betragsoptimum,» *Regelungstechnik, Jahrg*, vol. 3, n° 2, pp. 40-49, 1955.
- [23] G. Reynoso, X. Blasco, J. Sanchis y H. M. Herrero, *Controller Tuning with Evolutionary Multiobjective Optimization*, Springer, 2016.
- [24] S. Skogestad, «Simple analytic rules for model reduction and PID,» *Journal of Process Control*, vol. 13, pp. 291-309, 2003.
- [25] J. M. Zamarreño, M. J. de la Fuente y L. F. Acebes, «Desarrollo de un control PID accesible como servidor OPC,» de *Jornadas de Automática*, Bilbao, 2015.
- [26] C. Lanczos, «Trigonometric interpolation of empirical and analytical functions,» *Studies in Applied Mathematics*, vol. 17, n° 1-4, pp. 123-199, 1938.
- [27] A. Wächter y L. T. Biegler, «On the Implementation of a Primal-Dual Interior Point Filter Line Search Algorithm for Large-Scale Nonlinear Programming,» *Mathematical Programming*, vol. 106, n° 1, pp. 25-57, 2006.



# ANEXOS



## ANEXO I. CÓDIGO DEL COMPONENTE DE LA SIMULACIÓN DEL PROCESO

```

/*-----
LIBRARY: RHIRBIDO
FILE: Reactor_hibrido
CREATION DATE: 27/02/2017
-----*/

USE MATH

COMPONENT Reactor_hibrido

DATA

REAL ca0 = 5          "concentracion inicial de A en (mol/L)"
REAL DH = 20         "entalpia de la reaccion en (kJ/mol)"
REAL Ti = 15         "temperatura de entrada del reactor en (°C)"
REAL Tij = 10       "temperatura de entrada del refrigerante en (°C)"
REAL ro = 1          "densidad del fluido en (kg/L)"
REAL roj = 1         "densidad del refrigerante en (Kg/L)"
REAL cp = 4.18       "calor especifico en (kJ/kg·K)"
REAL cpj = 4.18     "calor especifico del refrigerante en (kJ/kg·K)"
REAL k0 = 1.38       "constate inicial de ec. cinetica en (min-1)"
REAL ER = 2420/8.31 "energia de activacion entre cte de gases
ideales (K)"
REAL V = 4.67        "volumen (L)"
REAL A = 0.1485     "area del reactor en contacto con la camisa (m2)"
REAL Vj = 1         "volumen de la camisa de refrigerante (L)"
REAL U = 333        "coeficiente global de transmision de calor
(KJ/m2·K·s)"

DECLS

REAL qv             "Caudal volumetrico en (L/min)"
REAL qvj           "Caudal de refrigerante (L/min)"
REAL T              "temperatura del reactor (°C)"
REAL Tj            "temperatura del refrigerante (°C)"
REAL ca            "concentracion de A (mol/L)"
REAL cc            "concentracion de C (mol/L)"
REAL k             "constante de la reaccion (L/mol·min)"
REAL x             "conversion (s/u)"
REAL Q             "calor que desprende la reaccion (kJ/s)"
REAL Qr            "calor de reaccion que ha de producir la resistencia
(W)"

INIT

T = Ti
Tj = Tij

```

$$ca = ca0$$

## CONTINUOUS

-- Calculo de la conversion --

$$x = cc/ca0$$

-- Calculo de cc --

$$cc = ca0 - ca$$

-- Calculo de la constante cinetica --

$$k = k0 * \exp(-ER/(T+273.15))$$

-- Calculo del calor

$$Q = U * A * (T - Tj)$$

/\* ECUACIONES DINAMICAS DEL SISTEMA \*/

-- Balance de materia del compuesto A --

$$V * ca' = qv * (ca0 - ca) - V * k * ca$$

-- Balance de energia del reactor --

$$V * ro * cp * T' = qv * ro * cp * (Ti - T) + Qr - Q$$

-- Balance de energia de la camisa --

$$Vj * roj * cpj * Tj' = qvj * roj * cpj * (Tij - Tj) + Q$$

/\* ECUACIONES DEL EQUIPO \*/

-- Potencia equivalente al calor de reaccion

$$Qr = DH * V * k * ca$$

END COMPONENT

## ANEXO II. CÓDIGO DEL EXPERIMENTO DE LA SIMULACIÓN DEL PROCESO

```

/*-----
LIBRARY: RHIRBIDO
COMPONENT: Reactor_hibrido
PARTITION: partition2
EXPERIMENT: exp1
TEMPLATE: TRANSIENT
CREATION DATE: 16/03/2017
-----*/

EXPERIMENT exp1 ON Reactor_hibrido.partition2
  DECLS
  OBJECTS
  INIT
  BOUNDS
    qv = 1
    qvj = 10

  BODY
    RESTORE_STATE("Estado_estacionario")
    SET_INIT_ACTIVE(FALSE)

    -- set the debug level (valid range [0,4])
    DEBUG_LEVEL= 1
    -- select default integration solver.
    IMETHOD= IDAS -- default is DASSL, recommended is either IDAS or
IDAS_SPARSE
    -- Settings for different actions. Valid actions are: SEV_DISABLE,
SEV_NONE, SEV_WARNING, SEV_ERROR, SEV_KILLPOINT,
SEV_FATAL
    eSetErrorAction(ERR_BAD_OPER,SEV_KILLPOINT) -- Detect bad
numerical operations (eg division by zero), default is SEV_NONE, recommended
is SEV_KILLPOINT
    eSetErrorAction(ERR_NAN_INF, SEV_KILLPOINT) -- Detect NaN or Inf
values, default is SEV_NONE, recommended is SEV_KILLPOINT
    eSetConfig(CFG_FORCE_STOP_CINT,TRUE) -- Force or not to stop the
solver each CINT. Sometimes you can speed up the simulation if you select
FALSE
    -- set tolerances and other important inputs
    REL_ERROR = 1e-06 -- transient solver relative tolerance
    ABS_ERROR = 1e-06 -- transient solver absolute tolerance
    TOLERANCE = 1e-06 -- steady solver relative tolerance
    INIT_INTEG_STEP = -1 -- initial integration step size (-1 means use the
solver estimation)
    MAX_INTEG_STEP = -1 -- maximum integration step size (-1 means use
the solver estimation)

```

**NSTEPS** = 1 -- Only for explicit solvers use CINT/NSTEPS as integration step size  
**REPORT\_MODE** = IS\_EVENT -- by default it reports results at every CINT and event detection. Other valid options are IS\_STEP, IS\_CINT and IS\_MANUAL\_REFRESH

-- simulate a transient in range[TIME,TSTOP] reporting every CINT  
**TIME** = 0  
**TSTOP** = 5  
**CINT** = 0.1  
**INTEG()**

END EXPERIMENT

## ANEXO III. CÓDIGO DEL COMPONENTE DE LA SIMULACIÓN CON CONTROL

```

/*-----
LIBRARY: RHIRBIDO
FILE: Reactor_controladores_basico
CREATION DATE: 23/05/2017
-----*/

USE MATH

COMPONENT Reactor_controladores_basico

DATA

REAL ca0 = 5          "concentracion inicial de A en (mol/L)"
REAL H = 20          "entalpia de la reaccion en (kJ/mol)"
REAL Ti = 15         "temperatura de entrada del reactor en (°C)"
REAL Tij = 10        "temperatura de entrada del refrigerante en (°C)"
REAL ro = 1          "densidad del fluido en (kg/L)"
REAL roj = 1         "densidad del refrigerante en (Kg/L)"
REAL cp = 4.18       "calor especifico en (kJ/kg·K)"
REAL cpj = 4.18     "calor especifico del refrigerante en (kJ/kg·K)"
REAL k0 = 1.38      "constate inicial de ec. cinetica en
(L/mol·min)"
REAL ER = 2420/8.31 "energia de activacion entre constante de
gases ideales (K)"
REAL V = 4.67       "volumen (L)"
REAL A = 0.1485     "area del reactor en contacto con la camisa (m2)"
REAL Vj = 1         "volumen de la camisa de refrigerante (L)"
REAL U = 333       "coeficiente global de transmision de calor
(KJ/m2·K·s)"

--REGULADORES:
-- Lazo 1: Conversion - caudal de alimentacion
REAL xref = 0.75    "conversion de referencia (°C)"
REAL kp1 = -20.35  "ganancia del PI del lazo externo 1"
REAL Ti1 = 8       "tiempo integral del PI del lazo 1"
REAL qvmax = 1     "maximo valor del caudal de entrada (L/min)"
REAL autoqv = 1
REAL manqv = 0

-- Lazo 2: Temperatura - caudal de refrigerante
REAL Tref = 17     "temperatura de referencia (°C)"
REAL kp2 = -29.68  "ganancia del PI del lazo 2"
REAL Ti2 = 5       "tiempo integral del PI del lazo 2"
REAL qvjmax = 16   "maximo valor del caudal de refrigerante (L/min)"
REAL autoqvj = 1
REAL manqvj = 0

```

## DECLS

```

REAL qv          "Caudal volumetrico en (L/min)"
REAL qvj        "Caudal de refrigerante (L/min)"
REAL T           "temperatura del reactor (°C)"
REAL Tj        "temperatura del refrigerante (°C)"
REAL ca        "concentracion de A (mol/L)"
REAL cc        "concentracion de C (mol/L)"
REAL k         "constante de la reaccion (L/mol·min)"
REAL x         "conversion (s/u)"
REAL Q         "calor que desprende la reaccion (kJ/s)"
REAL Qr        "calor de reaccion que ha de producir la resistencia
(W)"

```

## --REGULADORES:

```

-- Lazo 1: Conversion - caudal de alimentacion
REAL error1     "error entre la conversion de referencia y la real"
REAL v1        "parte integral del regulador"

-- Lazo 2: Temperatura - caudal de refrigerante
REAL error2     "error entre la temperatura de referencia y la real"
REAL v2        "parte integral del regulador "

```

## INIT

```

T = Ti
Tj = Tj
ca = ca0

```

## CONTINUOUS

```

-- Calculo de la conversion --
x = cc/ca0
-- Calculo de cc --
cc = ca0 - ca
-- Calculo de la constante cinetica --
k = k0*exp(-ER/(T+273.15))
-- Calculo del calor
Q = U*A*(T-Tj)
-- Potencia equivalente al calor de reaccion
Qr = V*k*ca*H

/*ECUACIONES DINAMICAS DEL SISTEMA*/
-- Balance de materia del compuesto A --
V*ca' = qv*(ca0 - ca) - V*k*ca
-- Balance de energia del reactor --
V*ro*cp*T' = qv*ro*cp*(Ti - T) + Qr - Q
-- Balance de energia de la camisa --

```

$$V_j \cdot \rho_j \cdot c_{p,j} \cdot T_j' = q_{v,j} \cdot \rho_j \cdot c_{p,j} \cdot (T_{i,j} - T_j) + Q$$

/\* ECUACIONES DE LOS REGULADORES\*/

-- Lazo 1: conversion - caudal

$$\text{error1} = x_{\text{ref}} - x$$

$$v1' = 1/T_{i1} * \text{error1}$$

$$q_v = \max(0, \min(k_{p1} * (\text{error1} + v1), q_{v\text{max}})) * \text{auto}q_v + \text{man}q_v$$

-- Lazo 2: temperatura - caudal refrigerante

$$\text{error2} = T_{\text{ref}} - T$$

$$v2' = 1/T_{i2} * \text{error2}$$

$$q_{v,j} = \max(0, \min(k_{p2} * (\text{error2} + v2), q_{v,j\text{max}})) * \text{auto}q_{v,j} + \text{man}q_{v,j}$$

END COMPONENT

**ANEXO IV. CÓDIGO DEL EXPERIMENTO DE LA SIMULACIÓN CON CONTROL**

```

/*-----
LIBRARY: RHIRBIDO
COMPONENT: Reactor_controladores_basico
PARTITION: partition1
EXPERIMENT: exp1
TEMPLATE: EMPTY EXPERIMENT
CREATION DATE: 23/05/2017
-----*/

EXPERIMENT exp1 ON Reactor_controladores_basico.partition1
  DECLS
  OBJECTS
  INIT
  BOUNDS

  BODY
    RESTORE_STATE("Estado_estacionario")
    SET_INIT_ACTIVE(FALSE)

    -- set the debug level (valid range [0,4])
    DEBUG_LEVEL= 1
    -- select default integration solver.
    IMETHOD= IDAS -- default is DASSL, recommended is either IDAS or
    IDAS_SPARSE
    -- Settings for different actions. Valid actions are: SEV_DISABLE,
    SEV_NONE, SEV_WARNING, SEV_ERROR, SEV_KILLPOINT,
    SEV_FATAL
    eSetErrorAction(ERR_BAD_OPER,SEV_KILLPOINT) -- Detect bad
    numerical operations (eg division by zero), default is SEV_NONE, recommended
    is SEV_KILLPOINT
    eSetErrorAction(ERR_NAN_INF, SEV_KILLPOINT) -- Detect NaN or
    Inf values, default is SEV_NONE, recommended is SEV_KILLPOINT
    eSetConfig(CFG_FORCE_STOP_CINT,TRUE) -- Force or not to stop the
    solver each CINT. Sometimes you can speed up the simulation if you select
    FALSE
    -- set tolerances and other important inputs
    REL_ERROR = 1e-06 -- transient solver relative tolerance
    ABS_ERROR = 1e-06 -- transient solver absolute tolerance
    TOLERANCE = 1e-06 -- steady solver relative tolerance
    INIT_INTEG_STEP = -1 -- initial integration step size (-1 means use the
    solver estimation)
    MAX_INTEG_STEP = -1 -- maximum integration step size (-1 means use
    the solver estimation)
    NSTEPS = 1 -- Only for explicit solvers use CINT/NSTEPS as integration
    step size

```

**REPORT\_MODE = IS\_EVENT** -- by default it reports results at every CINT and event detection. Other valid options are IS\_STEP, IS\_CINT and IS\_MANUAL\_REFRESH

-- simulate a transient in range[TIME,TSTOP] reporting every CINT

**TIME = 0**

**TSTOP = 5**

**CINT = 0.1**

**INTEG()**

**END EXPERIMENT**

**ANEXO V. CÓDIGO PRINCIPAL DEL HMI INTOUCH**

```
IF Valvula > 0.1 THEN
    Color_tuberia2 = 1;
ELSE
    Color_tuberia2 = 0;
ENDIF;

IF Bomba_alim > 0.1 THEN
    Color_tuberia1 = 1;
ELSE
    Color_tuberia1 = 0;
ENDIF;

IF Amplificador > 0.1 THEN
    Color_tuberia3 = 1;
ELSE
    Color_tuberia3 = 0;
ENDIF;

T_Estimador = Temp_reactor;
Ti_Estimador = Temp_tanque_alim;
qv_Estimador = Caudal_01;
Conversion = x_Estimador;

IF autom_ampli == 0 THEN
    Amplificador = Amp_manual;
ELSE
    Amplificador = P_Estimador;
ENDIF;

autom11 = autom12;
autom21 = autom22;
modo11 = modo12;
modo21 = modo22;
tipo11 = tipo12;
tipo21 = tipo22;

PV11 = Conversion;
SP11 = Conversion_SP;
Caudal_SP = OP11;

OPHI11 = 1.25;
OPLO11 = 0;
PVEUHI11 = 1;
PVEULO11 = 0;

SP12 = Caudal_SP;
PV12 = Caudal;
```

```
Bomba_alim = OP12;

OPHI12 = 600;
OPLO12 = 0;
PVEUHI12 = 1.25;
PVEULO12 = 0;
SP21 = Temp_reactor_SP;
PV21 = Temp_reactor;
Caudal_refrig_SP = OP21;

OPHI21 = 11;
OPLO21 = 0;
PVEUHI21 = 40;
PVEULO21 = 0;

SP22 = Caudal_refrig_SP ;
PV22 = Caudal_refrig;
Valvula = OP22;

OPHI22 = 100;
OPLO22 = 0;
PVEUHI22 = 11;
PVEULO22 = 0;

IF On_Off == 0 THEN
    Valvula_01 = 0;
    Bomba_alim = 0;
    Bomba_resist = 0;
    Amplificador = 0;
ENDIF;

HTUpdateToCurrentTime( "HistTrend6" );
HistTrend6.UpdateTrend = 1;
HTUpdateToCurrentTime( "HistTrend7" );
HistTrend7.UpdateTrend = 1;
HTUpdateToCurrentTime( "HistTrend8" );
HistTrend8.UpdateTrend = 1;
HTUpdateToCurrentTime( "HistTrend9" );
HistTrend9.UpdateTrend = 1;
```

**ANEXO VI. VARIABLES DEFINIDAS EN EL HMI INTOUCH**

Nombre	Tipo de variable	Servidor OPC	Nombre	Tipo de variable	Servidor OPC
Amplificador	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	modo21	I/O Discreta	OPC_PID21
boma_alim	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	OP21	I/O Real	OPC_PID21
bomba_resist	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	OPHI21	I/O Real	OPC_PID21
Caudal	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	OPLO21	I/O Real	OPC_PID21
Caudal_refrig	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	PV21	I/O Real	OPC_PID21
Temp_camisa	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	PVEUHI21	I/O Real	OPC_PID21
Temp_ent_camisa	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	PVEULO21	I/O Real	OPC_PID21
Temp_reactor	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	SP21	I/O Real	OPC_PID21
Temp_resistencia	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	Td21	I/O Real	OPC_PID21
Temp_tanque_alim	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	Ti21	I/O Real	OPC_PID21
Valvula	I/O Real	OPC_Targeta_DAO	tipo21	I/O Entera	OPC_PID21
autom11	I/O Discreta	OPC_PID11	autom22	I/O Discreta	OPC_PID22
Kp11	I/O Real	OPC_PID11	Kp22	I/O Real	OPC_PID22
modo11	I/O Discreta	OPC_PID11	modo22	I/O Discreta	OPC_PID22
OP11	I/O Real	OPC_PID11	OP22	I/O Real	OPC_PID22
OPHI	I/O Real	OPC_PID11	OPHI22	I/O Real	OPC_PID22
OPLO	I/O Real	OPC_PID11	OPLO22	I/O Real	OPC_PID22
PV11	I/O Real	OPC_PID11	PV22	I/O Real	OPC_PID22
PVEUHI11	I/O Real	OPC_PID11	PVEUHI22	I/O Real	OPC_PID22
PVEULO11	I/O Real	OPC_PID11	PVEULO22	I/O Real	OPC_PID22
SP11	I/O Real	OPC_PID11	SP22	I/O Real	OPC_PID22
Td11	I/O Real	OPC_PID11	Td22	I/O Real	OPC_PID22
Ti11	I/O Real	OPC_PID11	Ti22	I/O Real	OPC_PID22
tipo11	I/O Entera	OPC_PID11	tipo22	I/O Entera	OPC_PID22
autom12	I/O Discreta	OPC_PID12	ca0_Estimador	I/O Real	OPC_Estimador
Kp12	I/O Real	OPC_PID12	Ea_Estimador	I/O Real	OPC_Estimador
modo12	I/O Discreta	OPC_PID12	H_Estimador	I/O Real	OPC_Estimador
OP12	I/O Real	OPC_PID12	k0_Estimador	I/O Real	OPC_Estimador
OPHI	I/O Real	OPC_PID12	P_Estimador	I/O Real	OPC_Estimador
OPLO	I/O Real	OPC_PID12	qv_Estimador	I/O Real	OPC_Estimador
PV12	I/O Real	OPC_PID12	T_Estimador	I/O Real	OPC_Estimador
PVEUHI12	I/O Real	OPC_PID12	Ti_Estimador	I/O Real	OPC_Estimador
PVEULO12	I/O Real	OPC_PID12	x_Estimador	I/O Real	OPC_Estimador
SP12	I/O Real	OPC_PID12	amp_manual	Interna Real	-
Td12	I/O Real	OPC_PID12	caudal_refrig_SP	Interna Real	-
Ti12	I/O Real	OPC_PID12	caudal_SP	Interna Real	-
tipo12	I/O Entera	OPC_PID12	conversion	Interna Real	-
autom21	I/O Discreta	OPC_PID21	conversion_SP	Interna Real	-
Kp21	I/O Real	OPC_PID21	Temp_reactor_SP	Interna Real	-

## ANEXO VII. CÓDIGO DE LA OPTIMIZACIÓN REALIZADA CON PYOMO

```

# Primero hay que importar la librería de Pyomo
from pyomo.environ import *
from pyomo.dae import *

# Creación del modelo abstracto
model = AbstractModel()

# Definición de los sets, en este caso el tiempo
model.t = ContinuousSet(bounds = (0,10))

# Definición de los diferentes parametros del modelo
model.ci = Param(within = PositiveReals, doc = 'Concentración inicial de reactivo')
model.beta = Param(within = PositiveReals, doc = 'Constante preexponencial cinetica')
model.ER = Param(within = PositiveReals, doc = 'Energia de activación/ R')
model.U = Param(within = PositiveReals, doc = 'Coeficiente global de transferencia')
model.H = Param(within = PositiveReals, doc = 'Entalpia molar de la reaccion')
model.Ti = Param(within = NonNegativeReals, doc = 'Temperatura de entrada al reactor')
model.Tij = Param(within = NonNegativeReals, doc = 'Temperatura de entrada a la camisa')
model.cp = Param(within = PositiveReals, doc = 'Capacidad calorifica reactivos/productos')
model.cpj = Param(within = PositiveReals, doc = 'Capacidad caloridica refrigerante')
model.rho = Param(within = PositiveReals, doc = 'Densidad reactivos/productos')
model.rhoj = Param(within = PositiveReals, doc = 'Densidad refrigerante')
model.V = Param(within = PositiveReals, doc = 'Volumen del reactor')
model.A = Param(within = PositiveReals, doc = 'Area de intercambio reactor y camisa')
model.Vj = Param(within = PositiveReals, doc = 'Volumen de la camisa')

# Definición de las variables
model.T = Var(model.t, bounds =(0, 60), initialize = 30, doc='Temperatura del reactor')
model.Tj = Var(model.t, bounds =(0, 60), initialize = 20, doc='Temperatura del refrigerante')
model.qv = Var(model.t, bounds =(0.0, 1), initialize = 0.5, doc='Caudal de alimentación')
model.qvj = Var(model.t, bounds =(0.0, 20), initialize = 10, doc='Caudal de refrigerante')
model.k = Var(model.t, bounds = (0, 5), initialize = 0.5, doc = 'Constante cinetica')
model.Q = Var(model.t, bounds = (0, 500), initialize = 70, doc = 'Calor que se intercambia')
model.Qr = Var(model.t, bounds = (0, 500), initialize = 70, doc = 'Calor de reaccion')
model.x = Var(model.t, bounds =(0.0, 1), initialize = 0.85, doc='Conversion')
model.ca = Var(model.t, initialize = 5, doc='Concentracion de A')
model.cb = Var(model.t, initialize = 0, doc='Concentracion de B')

# Definición de las variables derivadas

```

```

model.dcadT = DerivativeVar(model.ca, withrespectto = model.t)
model.dTdt = DerivativeVar(model.T, wrt = model.t)
model.dTjdt = DerivativeVar(model.Tj, wrt = model.t)

```

#Definicion de las restricciones del problema:

```
def definicion_k(model,t):
```

```
    return model.k[t] == model.beta*exp(-model.ER/(model.T[t]+273.15))
```

```
model.calculo_k = Constraint(model.t, rule=definicion_k)
```

```
def balance_ca(model,t):
```

```
    if t == 0 :
```

```
        return Constraint.Skip
```

```
    return model.dcadT[t] == model.qv/model.V*(model.ci-model.ca[t]) -
```

```
model.k[t]*model.ca[t]
```

```
model.bm_ca = Constraint(model.t,rule=balance_ca)
```

```
def calculo_ca(model, t):
```

```
    return model.ca[t] == model.ci*(1-model.x[t])
```

```
model.conv_ca = Constraint(model.t, rule=calculo_ca)
```

```
def calculo_cb(model, t):
```

```
    return model.cb[t] == model.ci*model.x[t]
```

```
model.conv_cb = Constraint(model.t, rule=calculo_cb)
```

```
def calculo_Q(model, t):
```

```
    return model.Q[t] == model.U*model.A*(model.T[t] - model.Tj[t])
```

```
model.be_0 = Constraint(model.t, rule=calculo_Q)
```

```
def calculo_Qr(model, t):
```

```
    return model.Qr[t] == model.k[t]*model.V*model.ca[t]*model.H
```

```
model.be_1 = Constraint(model.t, rule=calculo_Q)
```

```
def balance_reactor(model,t):
```

```
    if t == 0 :
```

```
        return Constraint.Skip
```

```
    expr = model.qv/model.V*(model.Ti-model.T[t])
```

```
    expr += model.Qr[t]/(model.V*model.rho*model.cp) -
```

```
model.Q[t]/(model.V*model.rho*model.cp)
```

```
    return model.dTdt[t] == expr
```

```
model.be_2 = Constraint(model.t, rule = balance_reactor)
```

```
def balance_camisa(model,t):
```

```
    if t == 0 :
```

```
        return Constraint.Skip
```

```
    return model.dTjdt[t] == model.qvj/model.Vj*(model.Tij-model.Tj[t]) +
```

```
model.Q[t]/(model.Vj*model.rhoj*model.cpj)
```

```

model.be_3 = Constraint(model.t, rule= balance_camisa)

# Creacion del modelo concreto a partir de los datos especificados
import os
mc = model.create_instance("Datos"+os.sep+"Datos_reactor_ODE2.dat")

# DISCRETIZACIÓN DEL MODELO
# Discretize model using Collocation method
discretizer = TransformationFactory("dae.collocation")
discretizer.apply_to(mc, nfe=10, wrt=mc.t, ncp=3, scheme="LAGRANGE-
LEGENDRE")

# Initial conditions
mc.ca[0].fix(mc.ci.value)
mc.T[0].fix(mc.Ti.value)
mc.Tj[0].fix(mc.Tij.value)

# Definicion de la función objetivo a minimizar
def obj_rule(model):
    expr = 0
    for i in mc.t:
        expr += -mc.cb[i]*mc.qv[i]
    return expr
mc.cost= Objective(rule=obj_rule)

# Resolución del modelo con el solver ipopt
opt = SolverFactory("ipopt")
results = opt.solve(mc)

```

**ANEXO VIII. CÓDIGO DEL ARCHIVO DE DATOS PARA LA OPTIMIZACIÓN**

```
param ci := 5;  
param beta := 1.38;  
param ER := 243.6;  
param U := 333;  
param H := 20;
```

```
param Ti := 15;  
param Tij := 10;
```

```
param cp := 4.18;  
param cpj := 4.18;
```

```
param rho := 1;  
param rhoj := 1;
```

```
param V := 4.67;  
param A := 0.1485;  
param Vj := 1;
```