SIMULACIÓN DE UN REACTOR PARA GENERAR HIDRÓGENO Y DESARROLLO DE UN SISTEMA DE CONTROL AVANZADO

ALIRIO ACUÑA GÓMEZ

ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER BUCARAMANGA 2004

SIMULACIÓN DE UN REACTOR PARA GENERAR HIDRÓGENO Y DESARROLLO DE UN SISTEMA DE CONTROL AVANZADO

ALIRIO ACUÑA GÓMEZ

ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER BUCARAMANGA 2004

SIMULACIÓN DE UN REACTOR PARA GENERAR HIDRÓGENO Y

DESARROLLO DE UN SISTEMA DE CONTROL AVANZADO

ALIRIO ACUÑA GÓMEZ

Tesis para optar al título de Ph. D. en Ingeniería Química

DIRECTOR CARMELO FUENTES LOZANO Ph. D. Ingeniería Química

ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

BUCARAMANGA 2004

A toda mi familia

AGRADECIMIENTOS

El autor expresa sus agradecimientos a:

Carlos A. Smith, Ph. D. en Ingeniería Química por ser mi tutor durante la pasantía en la University of South Florida y por su apoyo en el desarrollo del trabajo.

Carmelo Fuentes Lozano, Ph. D. en Ingeniería Química por su aporte en el desarrollo del trabajo.

Marco Sanjuan, Ph. D. en Ingeniería Química por su aporte y colaboración durante el desarrollo del trabajo.

Cesar A. Vergel Ph. D. en Ingeniería Química por su apoyo durante el desarrollo del trabajo.

Empresa Colombiana de Petróleos ECOPETROL por su apoyo financiero y fuente de los datos para la validación del modelo.

University of South Florida, lugar en donde realicé la pasantía y desarrollé gran parte de este trabajo.

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	1
1. MODELO DE UN REACTOR DE REFORMADO DE METANO	
CON VAPOR	10
1.1 INTRODUCCIÓN	10
1.2 OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR DE HIDROCARBUROS	12
1.2.1 Reformado con vapor (Steam Reforming)	13
1.3 ESTADO DEL ARTE EN EL DESARROLLO DE MODELOS	14
1.3.1 Modelos basados en CFD	19
1.3.1.1 Reactores de Lecho Fijo	22
1.4 PLANTEAMIENTO DEL MODELO	24
1.4.1 Reacciones	26
1.4.1.1 Metano equivalente	26

1.4.1.2 Hidrógeno equivalente	27
1.4.2 Balance dinámico de masa	27
1.4.2.1 Balance molar para el CH ₄	28
1.4.2.2 Balance molar para el CO ₂	29
1.4.2.3 Modelo Cinético	30
1.4.3 Balances dinámicos de energía	36
1.4.3.1 Balance de energía para el volumen de control	36
1.4.3.2 Balance de energía en la pared metálica del volumen de control	45
1.4.3.3 Balance de energía en el horno	46
1.5 RESUMEN	51
2. VALIDACION E IDENTIFICACION DEL MODELO	53
2.1 INTRODUCCIÓN	53
2.2 VERIFICACIÓN EN ESTADO ESTABLE DEL MODELO	56
2.3 COMPARACIÓN CON OTROS MODELOS	60
2.4 IDENTIFICACIÓN Y VERIFICACIÓN DINÁMICA DEL MODELO	61
2.5 SIMULACION EN LINEA	65
2.6 RESUMEN	69

3. ESTRATEGIA CONVENCIONAL DE CONTROL PARA EL

ix

REACTOR DE REFORMADO DE METANO CON VAPOR	71
3.1 INTRODUCCIÓN	71
3.2 COMPONENTES BÁSICOS DEL SISTEMA DE CONTROL	73
3.2.1 Válvulas de control	73
3.2.2 Sensor – Transmisor	74
3.2.3 Controlador	74
3.2.4 Algoritmo PID	75
3.3 ESTUDIO DE LA LINEALIDAD DEL PROCESO	76
3.4 ESTRATEGIA DE CONTROL DE LA TEMPERATURA DE SALIDA	
DEL PRODUCTO GASEOSO	78
3.5 RESUMEN	89
4. ESTRATEGIA DE CONTROL MULTIVARIABLE PARA EL REACTOR	
DE REFORMADO DE METANO CON VAPOR	91
4.1 INTRODUCCIÓN	91
4.2 INTERACCIÓN ENTRE LAZOS DE CONTROL	92
4.3 ACOPLAMIENTO DE VARIABLES MANIPULADAS Y CONTROLADAS	
95	
4.4 ESTABILIDAD	101

4.4.1 Estabilidad en lazo abierto	101
4.4.2 Estabilidad en lazo cerrado	102
4.5 ESTRATEGIA DE CONTROL DEL HORNO CON CONTROLADORES	
DE TEMPERATURA Y LA FRACCIÓN DE HIDRÓGENO DEL GAS	
PRODUCTO	106
4.5.1 Sintonización utilizando el método de Medina	107
4.5.2 Sintonización utilizando desacopladores	108
4.5.3 Comparación entre el desempeño de las estrategias de co	ntrol
utilizando el método de Medina y el uso de desacopladores	112
4.6 RESUMEN	117
5. ESTRATEGIA DE CONTROL MULTIVARIABLE PREDICTIVO PARA	
EL REACTOR DE REFORMADO DE METANO CON VAPOR	119
5.1 INTRODUCCIÓN	119
5.2 ESTRATEGÍA DE CONTROL DEL HORNO CON UN CONTROLADOR	
MULTIVARIABLE PREDICTIVO MDC (MATRIZ DINÁMICA DE CONTR	lol)
PARA LA TEMPERATURA Y LA FRACCIÓN DE HIDRÓGENO DEL	
PRODUCTO GASEOSO	121
5.2.1 Algoritmo de la Matriz Dinámica de Control	123

xi

5.2.1.1 Modificación		
5.2.2 Análisis de Estabilidad para el Algoritmo de la Matriz Dinámica		
de Control.	133	
5.2.3 Sintonización del MDC (Algoritmo de Cutler).	136	
5.2.4 Algoritmo Modificado	142	
5.2.5 Comparación entre el desempeño de las dos estrategias de		
control basadas en la matriz dinámica de control	144	
5.3 RESUMEN	149	
6. ANALISIS DE DESEMPEÑO DE LAS ESTRATEGIAS DE CONTROL	151	
6.1 INTRODUCCIÓN 15 ⁷		
6.2 INDICES	152	
6.3 RESUMEN	163	
7. CONCLUSIONES	165	
BIBLIOGRAFÍA 1		
APENDICE A: Método de MEDINA		
APENDICE B: Nomenclatura 177		

LISTA DE TABLAS

Tabla 1.	Condiciones de operación de una unidad de reformado de	
	gas natural.	57
Tabla 2.	Comparación entre los resultados en estado estable del	
	modelo y la planta.	58
Tabla 3.	Comparación entre los resultados del modelo con otros	
	estudios.	61
Tabla 4.	Indices de desempeño de las diferentes estrategias de	
	control.	154
Tabla 5.	Errores promedio en la temperatura y la fracción de Hidrógeno	
	del producto gaseoso.	156
Tabla 6.	Costo asociado a los movimientos de las variables	
	Manipuladas.	158

Pág.

Tabla 7. Costo asociado al desempeño de las estrategias cuando

se presentan perturbaciones y variaciones en los valores

de referencia.

LISTA DE FIGURAS

Pág.

Figura 1.	Esquema del reactor de reformado de gas natural con vapor
25	
Figura 2.	Análisis del elemento diferencial para uno de los tubos
27	
Figura 3.	Diagrama de proceso de un reactor de reformado
49	
Figura 4.	Secciones del tubo y su intercambio de calor con el horno 49
Figura 5.	Balances de masa y energía en cada sección del tubo
50	
Figura 6.	Detalle del bloque de salida de cada sección
50	
Figura 7.	Variación de la composición molar a lo largo del tubo
20	
Figura 8.	Variación de la temperatura y la presión a lo largo del reactor
33	

xv

Figura 9. Variación de la temperatura de radiación con el flujo de carga. 60

Figura 10.	Comparación entre los datos de la planta y los del modelo	63
Figura 11. 66	Variación de las ganancias con el flujo de gas combustible	
Figura 12.	Variación de las ganancias con el flujo de vapor	67
Figura 13.	Esquema de control convencional	68
Figura 14.	Variación de las ganancias con el flujo de gas combustible	77
Figura 15. 77	Variación de las ganancias con el flujo de vapor	
Figura 16.	Esquema de control convencional	79
Figura 17.	Desempeño de los controladores de flujo de vapor	
	y gas combustible	
82		
Figura 18.	Curva de respuesta de la variable controlada temperatura	
	a un cambio escalón en la variable manipulada flujo de	
	gas combustible	

Figura 19. Comparación entre datos de planta y simulados 84

Figura 20. Desempeño del controlador de gas combustible a

cambios en el valor de referencia de temperatura

86

Figura 21. Desempeño del controlador de gas combustible a

variaciones en el gas de carga

Figura 22.	Interacción entre las variables controladas y manipuladas	94
Figura 23.	Esquema general de un sistema 2 X 2	96
Figura 24.	Estabilidad en lazo cerrado para un sistema 2 X 2	105
Figura 25.	Esquema con lazos de control de temperatura y fracción	
	de Hidrógeno independientes	107
Figura 26.	Diagrama de bloques del horno de reformado	110
Figura 27.	Diagrama de bloques del horno de reformado con	
	desacopladores	111
Figura 28.	Desempeño de los controladores de la fracción de Hidrógeno	
	y de la temperatura a cambios en los valores de referencia	114
Figura 29.	Desempeño de los controladores de la fracción de Hidrógeno	

	y de la temperatura a perturbaciones en el flujo de carga de	
	gas natural	116
Figura 30.	Esquema de control multivariable para la temperatura	
	y conversión	123
Figura 31.	Curvas de respuesta escalón	124
Figura 32.	Principio de superposición	125
Figura 33.	Diagrama en bloques del controlador basado en la Matriz	
	Dinámica	131
Figura 34.	Efecto del factor de aceleración	132
Figura 35.	Efecto del factor de supresión	138
Figura 36.	Efecto del horizonte de control en el tamaño del primer	
	movimiento en las variables manipuladas	139
Figura 37.	Efecto del horizonte de control en la temperatura de salida	
	del producto gaseoso	140
Figura 38.	Efecto del horizonte de control en la fracción de Hidrógeno	
	a la salida del producto gaseoso	141
Figura 39.	Efecto del factor de aceleración sobre la temperatura y la	
	fracción de Hidrógeno del producto gaseoso	143

Figura 40.	Desempeño de los dos controladores multivariables	
	predictivos a cambios en los valores de referencia	146
Figura 41.	Desempeño de los dos controladores multivariables	
	predictivos a variaciones en el flujo de carga	148

TITULO: SIMULACIÓN DE UN REACTOR PARA GENERAR HIDRÓGENO Y DESARROLLO DE UN SISTEMA DE CONTROL AVANZADO *

Alirio Acuña Gómez **

Palabras claves: Reformado, gas natural, modelos, PID, control predictivo.

El reformado de gas natural con vapor de agua es un proceso muy importante en las refinerías y por esta razón es necesario evaluar el desempeño adecuado de la estrategia de control de estas unidades industriales. Actualmente se utilizan modelos para simular el comportamiento de las plantas de proceso. En este trabajo se desarrolla un modelo dinámico de un reactor de reformado, que considera las reacciones, los procesos de transferencia de masa y energía. El modelo se utiliza para evaluar las estrategias de control basadas en algoritmos PID (Proporcional, Integral y Derivativos) y se proponen nuevas estrategias basadas en algoritmos predictivos como el MDC (Matriz Dinamica de Control).

Se propone una novedosa modificación al algoritmo MDC que consiste en adicionar un parametro denominado Factor de Aceleración (Ω), que regula el número de veces que se realizan los calculos del valor predicho de la variable controlada y los incrementos en la variable manipulada antes de actualizar la salida del controlador, mejorando su desempeño.

El parámetro Ω es ajustable en tiempo real y compensa la demora en la integración del algoritmo, lo cual lo hace más adaptable a las condiciones del proceso. Para procesos altamente no lineales se utilizan valores pequeños de Ω (2 ò 3). En procesos lentos se utilizan valores de Ω superiores a 3. En este trabajo, se encontró que al incrementar Ω , el tiempo de estabilización del proceso no cambia significativamente, debido a que el controlador responde mas conservadoramente. ** Facultad de Fisicoquimicas, Doctorado en Ingeniería Química, Dir. Alvaro Ramirez

TITLE : HYDROGEN REACTOR SIMULATION AND DEVELOPMENT OF AN ADVANCE PROCESS CONTROL SYSTEM *

Alirio Acuña Gómez **

Key words : Reformado, gas natural, modelos, PID, control predictivo.

Steam reforming of natural gas is a very important industrial process in refinery then it is necessary to evaluate the proper performance of the control strategy in industrial units. Models are used today to simulate units behavior. In this work a steam reformer dynamic model is developed, taken into account mass an energy transfer processes. The model is useful to evaluate control strategies based on PID algorithms (Proportional, Integral and Derivative) and to propose strategies based on predictive algorithms as DMC (Dynamic Matrix Control).

A novel modification to the DMC algorithm is proposed, it consists in adding a new parameter named Acceleration Factor (Ω). This parameter adjusts the predicted value of the controlled variable is performed and it also calculates the increment of the manipulate variable before to update the controller output, improving in this way its performance.

The Ω parameter is adjustable on line and compensates the integration delay of the algorithm, as a result it is more adaptable to the process conditions. For strongly non linear process, small Ω values (2 or 3) are used. For slow processes, Ω values higher than 3 are used. In this work, it is founded that if Ω is increased the settling time does not changed significantly, due to the controller response is more sluggish.

* Doctoral Dissertation

** Facultad de Fisicoquimicas, Doctorado en Ingeniería Química, Dir. Alvaro Ramirez

INTRODUCCIÓN

Los cambios en la legislación para combustibles fósiles, han afectado el balance de Hidrógeno en la industria de refinación. La demanda de Hidrógeno ha aumentado significativamente debido al alto grado de hidrotratamiento de las cargas exigido para cumplir con las regulaciones ambientales.

El reformado del gas natural (esencialmente Metano) con vapor es el proceso más económico y más ampliamente utilizado industrialmente para la generación de Hidrógeno. Las plantas que producen Hidrógeno por reformado con vapor de agua procesan desde gas natural hasta destilados medios (gasóleos) y residuos. El gas de proceso contiene trazas de azufre que se eliminan en desulfurizadores de óxido de zinc. Posteriormente, el gas se mezcla con vapor y se alimenta al horno (reformador) en donde se produce Hidrógeno, monóxido y bióxido de carbono utilizando un catalizador, a base de níquel, a temperaturas entre 980 K y 1050 K, y presiones entre 2066 Kpa y 4132 Kpa con relaciones molares vapor – carbono entre 2 y 9.

En la mayoría de estas plantas el horno reactor es sensible a fluctuaciones que afectan las condiciones de las corrientes de entrada, la producción y calidad del Hidrógeno. El proceso de reformado con vapor es multivariable por naturaleza y las interacciones pueden llegar a ser significativas. Para que los cambios en las condiciones de operación no alteren el desempeño de la unidad, se debe disponer de un sistema de control apropiado que compense todas las interacciones posibles, asegurando la estabilidad en la operación y optimizando la rentabilidad de la unidad.

En la mayoría de estas plantas se ha modernizado la instrumentación y la adquisición de datos, lo cual hace de estos reactores, dada su complejidad, una gran oportunidad para desarrollar un proyecto de simulación y control avanzado.

A escala industrial, se dificulta llevar a cabo pruebas que permitan analizar el efecto de perturbaciones, cambios en las variables manipuladas y/o controladas, debido a que son limitadas, indeseables y pueden conducir a severas alteraciones del desempeño de la unidad; por lo tanto, se hace esencial el uso de modelos dinámicos rigurosos.

En este proyecto se desarrolla un modelo matemático que representa los fenómenos físicos y químicos que tienen lugar en el proceso. A partir del flujo, la temperatura, la presión y la composición del gas de proceso a la entrada del

reactor, se determinan la temperatura, la presión y la composición de la mezcla gaseosa a medida que recorre la longitud del tubo. Los catalizadores comerciales para este proceso mantienen su actividad por varios años, por lo cual en este modelo, no se tienen en cuenta los efectos de coquización o pérdida de la actividad catalítica.

El calor requerido por la reacción se obtiene al quemar gas combustible. El calor se transfiere por radiación y convección del gas combustible al reactor multitubular y de los tubos al gas de proceso. Las temperaturas del gas, de la pared del tubo y de radiación se determinan utilizando balances de energía en el horno reactor. En el modelo desarrollado en este proyecto, para el balance de energía en la pared metálica se considera que el área del horno es mucho mayor que la de los tubos y éstos están completamente dentro del horno (Smith y Corripio, 1985). Esta consideración es una contribución al estado del arte en el desarrollo de modelos de reformado, dado que esta alternativa reemplaza el uso de técnicas como: factores de vista y expresiones empíricas para determinar la temperatura de la pared del tubo.

La solución del modelo se realiza por medio de la técnica de los balances diferenciales de masa y energía. Por medio de expresiones cinéticas encontradas en la literatura, se plantean los balances diferenciales de masa de una forma más exacta. Al comparar los resultados del modelo con la dinámica y los datos de una

unidad comercial, se obtiene una buena concordancia. La conversión y la temperatura están dentro del rango de precisión que permite la instrumentación industrial. Por el buen desempeño del modelo para representar una planta real, puede ser utilizado para estudiar y analizar estrategias de control y seleccionar la que pueda ofrecer más ventajas para hacer más eficiente este proceso.

El modelo también puede utilizarse como una herramienta de análisis operacional para evaluar el comportamiento del reactor, cuando se efectúen cambios en las condiciones del proceso o en la estrategia de control.

En las estrategias de control se adicionan al modelo las expresiones que describen los componentes básicos del sistema de control como: sensores – transmisores de flujo, temperatura y fracción de Hidrógeno; las válvulas de control y los controladores. En este proceso, las variables manipuladas son la relación vapor - carga y el flujo de gas combustible y las variables controladas son la conversión y la temperatura del gas efluente del reactor. Como variable de perturbación se toma el flujo de gas de la carga. Se estudia la linealidad del proceso a partir de la información obtenida mediante pruebas tipo escalón en el flujo de gas combustible y en el vapor de reacción aplicadas al modelo. Utilizando el método de las ganancias relativas, se determina que la mejor estrategia es controlar la temperatura de salida del gas producto con el flujo de gas combustible y la fracción molar del Hidrógeno en el gas producto con la relación vapor – carga.

En una estrategia de control convencional se controla la temperatura del producto gaseoso manipulando el flujo de gas combustible. La relación molar entre el gas de carga y el vapor de agua se suministra manualmente, como valores de referencia a los controladores de flujo. Con la información sobre las pruebas escalón, se hallaron funciones de transferencia de primer orden más tiempo muerto, para relacionar las variables controlador y manipulada. Utilizando las reglas de sintonía de síntesis del controlador (Smith y Corripio, 1997) se determinaron los parámetros para un controlador Proporcional Integral Derivativo "PID".

Por la naturaleza del proceso, se estudia una estrategia de control multivariable para controlar simultáneamente la fracción de Hidrógeno y la temperatura de salida del producto gaseoso. Para eliminar la interacción entre lazos de control se utilizaron dos métodos: las reglas de sintonización propuestas por Maximino Medina (1991) y el uso de desacopladores.

También se analiza una estrategia de control multivariable predictivo que utiliza el algoritmo de la Matriz Dinámica de Control "MDC", para controlar simultáneamente la temperatura y la conversión de la mezcla gaseosa reaccionante, manipulando el flujo de gas combustible y la relación vapor – carga. En esta estrategia también se estudia el desempeño de un algoritmo MDC, modificado por la adición de un factor de aceleración, que actúa de manera similar

a la acción integral en un controlador PID, reduciendo la desviación de la variable controlada de su valor de referencia y el error acumulado en el tiempo. El factor de aceleración es una contribución muy importante para mejorar el desempeño de procesos en donde el vector de datos recopilados presenta gran parte de los valores en estado estable como en el caso de la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso.

Para analizar las estrategias de control se utilizaron índices que permiten evaluar cuantitativamente el desempeño de una estrategia de control, cuando se presentan perturbaciones o cambios en los valores de referencia de las variables controladas. Se utilizaron los índices IAE y CENT que son proporcionales al error acumulado y al tiempo que tarda el proceso en estabilizarse luego de sufrir una perturbación y el índice AMP para medir la desviación mayor de la variable controlada de su valor de referencia. Además se definió como *Error promedio* el IAE divido en el CENT para medir la desviación promedio de la variable controlada de su valor de referencia, durante el tiempo que tarda en estabilizarse el proceso.

Los valores de los índices muestran que en la estrategia convencional se dan los menores valores de IAE, CENT y AMP; debido a que el error acumulado entre la temperatura y su valor de referencia es mínimo y a que el proceso se estabiliza rápidamente sin sobresaltos apreciables en la variable controlada. Sin embargo, en esta estrategia no se controla la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso.

En las estrategias de control multivariable que usan desacopladores obtienen los menores valores para los índices IAE, CENT y AMP para la temperatura, cuando el proceso es sometido a cambios en los valores de referencia o a perturbaciones causadas por variaciones en el flujo del gas natural (carga al proceso).

Las estrategias de control multivariable predictivo basadas en el algoritmo MDC presentan un desempeño similar; sin embargo, la estrategia que utiliza el algoritmo de Cutler (1983) produce menores valores de IAE, CENT y AMP para el controlador de temperatura del producto gaseoso. La estrategia con el algoritmo modificado produce menores valores de IAE, CENT y AMP para el controlador de la fracción de Hidrógeno, lo cual puede explicarse porque las funciones de transferencia que relacionan la fracción de Hidrógeno con el flujo de gas combustible y con la relación vapor carga son rápidas (no hay tiempo muerto y las constantes de tiempo son pequeñas). En este caso, el factor de aceleración reduce los sobresaltos y el error acumulado en el tiempo. Adicionalmente, se observa que el error acumulado y el tiempo de estabilización son pequeños y no se presentan sobresaltos apreciables.

En las estrategias de control multivariable puede evaluarse adicionalmente el desempeño utilizando el error promedio, definido como la integral del error acumulado entre la variable controlada y su valor de referencia, dividida entre el tiempo requerido para que el proceso se estabilice. Por error promedio la la

estrategia que utiliza desacopladores ratifica su mejor desempeño reflejado en los menores valores de errores promedio y en el impacto en la rentabilidad del proceso; sin embargo, este método sólo se puede utilizar para controladores PID cuando hay dos lazos interactuantes. Los desacopladores pueden mejorar el desempeño del sistema de control, sin embargo su configuración en el sistema de control distribuido es una actividad compleja que sobrecarga la base de datos, debido a que requieren N x (N-1) desacopladores para un sistema de dimensión N x N. El desempeño de las estrategias de control multivariables basadas en el algoritmo MDC es ligeramente inferior, sin embargo son adecuadas en sistemas con dimensiones mayores.

El desarrollo de este trabajo contribuye a la metodología de cómo utilizar los modelos matemáticos rigurosos en el diseño y análisis de desempeño de estrategias de control basadas en modelos del proceso. El trabajo inicia con la reseña del estado del arte en los modelos del proceso, se proponen modificaciones que mejoran su acercamiento a la realidad y se verifica a nivel industrial. Posteriormente se analiza la estrategia de control convencional y se estudia la posibilidad de un esquema multivariable. Para evaluar el comportamiento de cada estrategia se utilizan índices que permiten cuantificar el desempeño y elegir la mejor teniendo en cuenta la seguridad, calidad de productos y rentabilidad del proceso.

Las contribuciones al modelo, al algoritmo de control y a la metodología se realizaron en gran parte durante la pasantía en la que pertenecí al grupo de investigación en control automático de procesos orientado por el Doctor Carlos A. Smith en la Universidad del Sur de la Florida.

1. MODELO DE UN REACTOR DE REFORMADO DE METANO CON VAPOR

1.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se presenta el estado del arte para el proceso de reformado con vapor de agua para producir Hidrógeno, las cargas, el catalizador y los reactores en los que se llevan a cabo estos procesos. Se hace una reseña del desarrollo de modelos para este proceso y se plantea un modelo dinámico de un reactor multitubular vertical, en el cual tiene lugar el reformado de gas natural principalmente Metano, con vapor de agua sobre un catalizador a base de Níquel, soportado en alúmina. Utilizando expresiones cinéticas encontradas en la literatura, se plantean balances diferenciales de masa de una forma más exacta. Este proceso es endotérmico y el calor requerido se transfiere por radiación y convección del gas de combustión al reactor multitubular y de los tubos al gas de proceso. Para evaluar la temperatura del gas de proceso se establecen tres balances de energía: dentro del volumen de control, en la pared metálica del tubo

y en el horno. Para el balance de energía en la pared metálica, en este proyecto, se supone que el área del horno es mucho mayor que la de los tubos y que estos están completamente dentro del horno, (Smith y Corripio, 1985). Utilizar esta consideración, mejora los modelos de reformado porque evita realizar excesivas pruebas para correlacionar la temperatura de pared con variables como potencia calorífica del gas combustible y temperatura de reacción, o el uso de métodos aleatorios como factores de vista acompañados de técnicas Montecarlo utilizadas en trabajos previos (Plehiers, 1989). Los tubos se simulan, por medio de un modelo heterogéneo unidimensional. Para resolver el modelo se utilizó un algoritmo en MATLAB (ODE23S), para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias tipo Stiff basado en una modificación del método de Rosenbrock (Shampine y Gordon, 1975).

También se presenta un resumen del enfoque del diseño de reactores utilizando las técnicas de la fluido dinámica computacional (CFD por sus siglas en Inglés), en donde se debe concebir el equipo reactor adecuado y el procedimiento de operación para alcanzar en la práctica las condiciones fluido dinámicas deseadas.

El objetivo de este modelo riguroso es determinar las condiciones del producto gaseoso del horno para unas condiciones iniciales a la entrada del reactor. El modelo permite estudiar el desempeño de estrategias de control, el diseño del reactor y la evaluación del comportamiento del mismo.

1.2 OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR DE HIDROCARBUROS

En la producción de Hidrógeno se emplean diferentes cargas: gas natural (Metano, Etano, Propano...), fracciones de petróleo (gas licuado de petróleo "LPG", nafta, aceite, residuos de vacío, asfaltos...), carbón y biomasa (residuos lignocelulosos, madera,...). Dependiendo del caso específico (catalítico u otros procesos) se eliminan previamente las impurezas (compuestos de azufre, mercurio y otros metales). Además, los efluentes de Composición variable, son tratados para mejorar los rendimientos de la operación (Chauvel y Lefebvre, 1989).

Los procesos industriales para la producción de Hidrógeno más ampliamente difundidos, son: oxidación parcial y reformado con vapor. En las plantas industriales se realizan etapas previas al reformado como: desulfurización (en reformado con vapor) y destilación atmosférica (en oxidación parcial con Oxigeno), y etapas posteriores como: conversión de Monóxido de Carbono (CO) con vapor (shift reaction) para mejorar la producción de Hidrógeno, extracción de gases ácidos (H_2S , $CO_2...$) y purificación final para eliminar las trazas de CO.

1.2.1 Reformado con vapor (Steam Reforming). En el reformado de Metano con vapor se utiliza un catalizador compuesto de níquel sobre alúmina. La formación de carbono se reduce usando un promotor de potasio que facilita la acción del vapor sobre el CO. La relación vapor – hidrocarburo a la entrada del reactor oscila entre dos o tres veces la cantidad teórica requerida. La temperatura de operación es entre 1123 K y 1213°K a la salida de la zona de reacción, con presiones de 4000 Kpa absolutas en las plantas modernas. La velocidad espacial en volumen por hora (VHSV) oscila entre 1600 y 5000 h⁻¹. Económicamente se recomiendan altas presiones de operación para reducir los costos de purificación y compresión. (Chauvel y Lefebvre, 1989).

Los reactores empleados son hornos tubulares (Johansen, 1992 y Tindall, 1994) y pueden dividirse en cuatro tipos: hornos verticales con quemadores en el piso para consumir el gas residual de la instalación, hornos de celdas paralelas con calentamiento lateral por medio de quemadores de gas colocados en filas, hornos verticales con quemadores en el techo de llama corta y tiro forzado, permiten la combustión de líquidos y hornos con quemadores de tiro natural o combinación de estos para permitir la combustión de una amplia variedad de gases y líquidos.

En todos estos tipos de hornos, la cámara de combustión opera a presión negativa por medio de un soplador de aire. Se pueden distinguir dos secciones principales: la zona de convección, en donde se recupera calor del gas de combustión por

medio de bancos de tubos colocados horizontalmente y la zona de radiación de los gases de combustión y el refractario. Poseen bancos de tubos con catalizador (500 tubos en plantas grandes), con diámetros entre 8.3 cm y 12.6 cm, longitud máxima de 10 m a 15 m., y espesor entre 18 mm y 20 mm.

1.3 ESTADO DEL ARTE EN EL DESARROLLO DE MODELOS

Muchos autores han desarrollado modelos dinámicos para reactores químicos de lecho fijo. En 1967, Oblad presentó un modelo de un reformador de Metano con vapor, que considera la transferencia de calor y el análisis de la cinética de las reacciones. La formación de carbón es generalmente muy pequeña y puede considerarse despreciable a las condiciones de operación para la simulación. En este modelo se supone flujo unidimensional (pistón) para los gases en los tubos del reformador y una expresión cinética de primer orden, para la presión parcial del Metano, en la velocidad de reacción. La ecuación para la velocidad de reacción inversa también se tiene en cuenta en el equilibrio de las reacciones. Los resultados se ajustan bien a los datos obtenidos en planta piloto.

En 1968, Hyman desarrolló un modelo similar; sin embargo, se establecen algunas diferencias con el modelo anterior. Para evaluar la velocidad de la reacción de conversión del Metano se utiliza una expresión derivada de la ley de acción de masas, en lugar de una ecuación de primer orden. También se supone flujo pistón para los gases y un perfil de la temperatura exterior de la pared del tubo, en lugar de la velocidad de flujo de los gases. El modelo puede utilizarse para analizar el reformado de hidrocarburos pesados. Los resultados del modelo concuerdan con los datos de planta.

En 1978, Harth y sus colaboradores, introdujeron una aplicación novedosa a la tecnología del reformado, la combinación de un reformador de Metano con un reactor nuclear a alta temperatura, enfriado con vapor. En el catalizador se invierten las reacciones de reformado liberando energía. Un punto interesante de este estudio, es el uso del diseño de doble flujo tubular en contracorriente. Los cálculos se basan en balances globales y datos del catalizador.

En 1979, Olesen y Sederquist consideraron un doble flujo tubular en contracorriente. Este diseño, también es descrito por Smith y Santangelo en 1980. En éste, se considera la formación de carbón y reduce la cantidad de calor requerido. El modelo tiene en cuenta los efectos de mezclado axial y radial. Los resultados se ajustan bien a los datos de planta. Sin embargo, dada la
complejidad del modelo, la precisión de sus resultados no es comparable a la obtenida con modelos de flujo pistón.

Chandra y Deoki, en 1979, desarrollaron un método para calcular la transferencia de calor del horno de reformado. Se considera la transferencia simultanea de calor de las llamas y los gases de combustión con la de los gases de reacción, dentro de una sección diferencial del tubo reactor. Los resultados obtenidos al simular el reactor de reformado utilizando este método se ajustan muy bien a los datos de planta.

En 1982, Murray y Snyder desarrollaron un modelo cinético de un reformador de Metano con vapor como una herramienta de diseño y análisis para acondicionar sistemas de celdas combustibles. Este modelo posee opciones para considerar los efectos de tipo de reacción, geometría, arreglo de flujo y transferencia de calor. Los resultados del modelo se ajustan bien a los datos experimentales.

En 1983, Demicheli y otros desarrollaron un modelo unidimensional con el objeto de estudiar el efecto de la transferencia de calor sobre el desempeño del reactor de reformado, para obtener el espesor optimo del tubo de acuerdo al flujo másico y la presión.

En 1989, Plehiers y Froment, publicaron el desarrollo de un modelo heterogéneo unidimensional para un reactor de reformado con vapor. El modelo considera la presencia de gradientes de presión parcial intrapartícula y simultáneamente la distribución de temperatura en el horno y en el reactor. Para la transferencia de calor en el horno, se utiliza un programa de simulación de un horno estándar, basado en el método de la zona. Para determinar los factores de vista, aplica técnicas de simulación MonteCarlo; se considera la localización de los quemadores y la absorción y emisión de radiación. Las distribuciones de temperatura del horno y la composición obtenidas por el modelo se ajustan excelentemente a los datos industriales.

En 1989, Alatiqui, Meziou y Gasmelseed, publicaron el desarrollo de un modelo heterogéneo unidimensional para un reactor de reformado con vapor. El modelo establece la transferencia de calor por radiación y convección. El modelo supone que la temperatura es uniforme en la partícula de catalizador y es la misma del gas de proceso. Igualmente, supone que no hay formación de coque en el reformador. Las predicciones de temperatura y la composición del modelo se ajustan satisfactoriamente a los datos industriales.

En 1989, Laborde y otros desarrollaron un modelo bidimensional seudohomogeneo con el objeto de reproducir los datos de salida de un reactor de reformado industrial, analizando además algunas variables que afectan la vida útil

del tubo, la conversión y la formación de coque. Los valores obtenidos por el modelo se ajustan satisfactoriamente a los datos a la salida del reactor industrial.

La revisión bibliográfica se extendió hasta la actualidad, pero no se encontraron más publicaciones relevantes para este trabajo.

Para analizar el comportamiento dinámico del reactor de reformado, se desarrolló un modelo matemático heterogéneo y unidimensional que representa los fenómenos físicos y químicos que tienen lugar en el proceso. Las velocidades de reacción se determinan a partir de las expresiones cinéticas propuestas en la literatura (Moe, 1965; Haldor, 1965; Xu, 1989). La temperatura del gas de proceso se calcula estableciendo tres balances de energía: dentro del volumen de control, en la pared metálica del tubo y en el horno. Para el balance de energía en la pared metálica, se considera que el área del horno es mucho mayor que la de los tubos y estos, están completamente dentro del horno (Smith y Corripio, 1985). Utilizar esta consideración, contribuye al desarrollo de modelos de reformado porque evita realizar excesivas pruebas para correlacionar la temperatura de pared con variables como: potencia calorífica del gas combustible y temperatura de reacción, o el uso de métodos aleatorios como factores de vista acompañados de técnicas Montecarlo utilizadas en trabajos previos.

El modelo que se desarrolló es esencial para analizar el desempeño de estrategias de control automático en unidades industriales, como se verá en los capítulos posteriores. En unidades comerciales, las pruebas experimentales para estudiar el efecto de perturbaciones o cambios en las variables manipuladas o controladas son muy limitadas, a menudo indeseables y pueden conducir a severas alteraciones del desempeño de la unidad.

1.3.1 Modelos basados en CFD. La ingeniería de los reactores químicos involucra todas las actividades para desarrollar el mejor equipo posible y el procedimiento de operación de los reactores para satisfacer las demandas del proceso sin comprometer la seguridad, el ambiente y la economía. Para asegurar esto el ingeniero de reactores debe establecer las relaciones entre el equipo, las condiciones del procedimiento de operación y los objetivos de desempeño. El ingeniero de reactores debe interactuar con químicos para entender la química básica y las peculiaridades de los catalizadores. Basado en este conocimiento y de acuerdo a los objetivos de desempeño propuestos, debe abstraer la información relevante para identificar las características fluido dinámicas deseables en el reactor. El ingeniero de reactores debe concebir el equipo reactor adecuado y el procedimiento de operación para alcanzar en la práctica las condiciones fluido dinámicas deseadas. La fluido dinámica juega un papel principal para establecer las relaciones entre el equipo reactor y su desempeño.

Para establecer las relaciones entre el equipo reactor y su desempeño se debe utilizar una variedad de diferentes herramientas y modelos. La aplicación con creatividad de la mejor herramienta posible es requerida para desarrollar la mejor configuración posible del equipo y el procedimiento de operación para el reactor en consideración. Actualmente se dispone en la práctica de una variedad de herramientas altamente desarrolladas para modelar las reacciones y su cinética química. Esta actividad constituye la parte principal de la ingeniería de reacciones químicas. La mayoría de los modelos que se incluyen en esta categoría hacen simplificaciones muy drásticas a cerca de la fluido dinámica del reactor. En realidad se dispone de modelos sofisticados y teorías para predecir la interacción entre la química y los procesos de transporte como mezclado y transferencia de Sin embargo, estos modelos raramente intentan relacionar masa y calor. rigurosamente las propiedades de transporte con el equipo y el procedimiento de operación. Para un caso especifico de reacciones químicas y catalizador, el desempeño del reactor es una compleja función de los procesos de transporte que ocurren (Dixon y otros, 1999). Estos procesos de transporte son a su vez gobernados por la fluido dinámica y además por una variedad de parámetros de operación y diseño del equipo de proceso. En la ingeniería de reacciones convencional, se utilizan métodos experimentales y semi - teóricos (como simulaciones en frió y estudios de trazabilidad) para relacionar la fluido dinámica y el mezclado con el equipo de reacción y las condiciones de operación. La información que se obtiene por estos métodos es usualmente descrita en una forma paramétrica global. Esta practica oculta información detallada local a cerca de la turbulencia y el mezclado, lo cual puede finalmente determinar el

desempeño del reactor. Estas aproximaciones se basan en métodos de ensayo y error para desarrollar el equipo reactor adecuado. Estas herramientas además pueden ser bastante costosas y requieren mucho tiempo para desarrollar la mejor tecnología para reactores. Es necesario adaptar o desarrollar mejores técnicas y herramientas para relacionar el equipo reactor con la fluido dinámica y los procesos de transporte resultantes.

A través de los años, los ingenieros aeroespaciales, quienes tienen que ver más con la tarea de establecer las relaciones entre los equipos y la fluido dinámica resultante, han desarrollado y utilizado rutinariamente la fluido dinámica computacional (CFD). La fluido dinámica computacional es un cúmulo de conocimientos y técnicas utilizadas para resolver modelos fluido dinámicos matemáticos en computadores digitales. En los años recientes, los ingenieros químicos han notado que aunque establecer una relación entre el equipo reactor y la fluido dinámica no es la parte principal de su trabajo, esto no es menos importante. Con el desarrollo de los computadores de alto desempeño y los avances en técnicas numéricas y algoritmos, la ingeniería química ha comenzado a explorar la potencia de las herramientas de la fluido dinámica computacional. Considerando el rol central de los reactores en las industrias de procesos químicos, hay un potencial bastante grande para la aplicación de estas herramientas para mejorara la ingeniería de reactores. Aplicado correctamente el modelamiento de la fluido dinámica puede reducir el tiempo de desarrollo, reducir el tiempo para la comercialización, acortar el tiempo de pago de la inversión y

mejorara el flujo de caja. Es, sin embargo, necesario adaptar las técnicas de fluido dinámica computacional y desarrollar aproximaciones de modelos fluido dinámicos para aplicarlos en la ingeniería de reactores químicos.

1.3.1.1 Reactores de Lecho Fijo. En los reactores de lecho fijo, las reacciones en fase gaseosa generalmente se llevan a cabo utilizando un lecho estacionario de catalizador sólido. En un reactor típico, se dispone de mallas que soportan las partículas de catalizador, a través del cual fluye la fase gaseosa. Los reactivos gaseosos se absorben sobre la superficie del catalizador, las reacciones ocurren sobre la superficie y los reactivo son desorbidos hacia la fase gaseosa. Los tipos de reactores de lecho fijo mas usados son : el convencional de flujo axial y el de flujo radial. La elección del tipo de reactor depende de muchos factores como la velocidad de reacción intrínseca, el calor de reacción, el efecto de las resistencias externas al transporte sobre la selectividad, el cambio en el número de moles durante la reacción,.... Muchos procesos comercialmente importantes como el reformado de metano o nafta con vapor, obtención de metanol a partir de gas de síntesis, síntesis de amonio, alquilación de benceno,... se realizan utilizando este tipo de reactores. Los modelos para la ingeniería de reacción son muy bien desarrollados. Generalmente los reactores de lecho fijo son modelados como flujo pistón o flujo pistón con dispersión axial. Todos los efectos como el by pass o el acanalamiento del gas mientras fluye a través del lecho catalítico son tratados utilizando una aproximación de parámetros agrupados. Los modelos de fluido dinámica computacional pueden realizar grandes contribuciones para nuestro

entendimiento del complejo comportamiento del flujo dentro del lecho catalítico (Ranade, 1997). Si la velocidad intrínseca de reacción es rápida, las características de la interfase para transferencia de masa y calor se convierten en parámetros de diseño importantes. La predicción exacta de los coeficientes de transporte en la interfase requiere información sobre la fluido dinámica local alrededor de las partículas de catalizador. Es muy difícil obtener esta información a las condiciones de operación. Los modelos de fluido dinámica computacional pueden utilizarse para predecir el comportamiento fluido dinámico local a partir de la cual se pueden estimar los coeficientes de transporte en la interfase, con gran precisión (Logtemberg y otros, 1998 y 1999). Estos modelos también pueden ser utilizados para evaluar el efecto de los internos del reactor (soportes del lecho, serpentines de intercambio de calor, distribuidores de gas,...) sobre la distribución de flujo dentro del lecho (Ranade, 1994). Los modelos basados en fluido dinámica computacional contribuyen substancialmente a ligar la configuración real del equipo con el desempeño del reactor.

1.4 PLANTEAMIENTO DEL MODELO

En el reactor tubular se lleva a cabo la reacción del gas natural, principalmente Metano, con vapor de agua sobre un catalizador a base de Níquel soportado en Alúmina y el calor requerido se suministra por medio de quemadores de gas, ver Figura 1. El calor se transfiere por radiación y convección de la reacción de combustión y las llamas en el horno, al reactor multitubular y de los tubos al gas de proceso. Los tubos y el horno se simulan por medio de un modelo dinámico heterogéneo unidimensional.

La producción de Hidrógeno está ligeramente influenciada por la presión y la temperatura del gas de carga, pero depende fuertemente del perfil de temperatura de la pared exterior del tubo y de la relación vapor – carga.

Consideraciones:

- El horno reactor multitubular es vertical y el calor se transfiere por radiación y convección de los gases de combustión.
- Las condiciones de operación en todos los tubos son similares.

- Flujo pistón del gas de proceso en los tubos (L/di>100).
- La dispersión axial es insignificante para todas las velocidades de flujo a lo largo del reactor.
- Los hidrocarburos pesados se convierten en Metano a la entrada de los tubos.
- El gradiente radial de temperatura es insignificante.
- La temperatura de las partículas de catalizador es uniforme e igual a la del gas de proceso (d_i/d_p=10).
- No se deposita coque en el catalizador (vida útil 6 8 años).



Figura 1. Esquema del reactor de reformado de gas natural con vapor

1.4.1 Reacciones. En las condiciones de operación de las unidades comerciales, usualmente, se consideran las siguientes reacciones:

• Producción de Monóxido de Carbono "CO" a partir de Metano.

$$CH_4 + H_2O \longleftrightarrow CO + 3H_2$$

• Producción de Dióxido de Carbono "CO₂", (Water Gas Shift Reaction).

$$CO + H_2O \longleftrightarrow CO_2 + H_2$$

• Conversión de Parafinas a Metano "CH₄".

$$C_k H_{2k+2} + (k-1) H_2 \longleftrightarrow k C H_4$$

1.4.1.1 Metano equivalente. Si la carga se compone de n_k moles de $C_k H_{2k+2}$ por hora, se producen Kn_k moles de CH₄, por la expresión:

$$N_{CH_4, Equiv.} = \sum kn_k$$
 (1)

1 ec., 1 inc.
$$\left[N_{CH_4,Equiv.}\right]$$

Las ecuaciones e incógnitas son contabilizadas a medida que se plantean, con el objeto de igualar sus números al final del planteamiento del modelo y obtener la secuencia de solución de este sistema de ecuaciones acopladas.

1.4.1.2 Hidrógeno equivalente. En la conversión a Metano de los hidrocarburos más pesados se consume Hidrógeno. Las moles de Hidrógeno, después del hidrotratamiento, se obtienen por:

$$N_{H_2,Equiv.} = N_{H_2,Inicial} - \sum (k-1)n_k$$
 (2)

2 ec., 2 inc.
$$N_{H_{2,Equiv.}}$$

1.4.2 Balance dinámico de masa. Debido a que la temperatura y la concentración del gas varían continuamente con la distancia desde la entrada del reactor, se puede considerar como volumen de control una sección del tubo de una longitud Δz dentro del cual las propiedades pueden considerase constantes, como se muestra en la Figura 2. La definición de la nomenclatura utilizada se presenta en el apéndice B.



Figura 2. Análisis del elemento diferencial para uno de los tubos

El balance molar de los componentes puede establecerse debido a que del gas de proceso (gas natural y vapor) se conoce el flujo y su composición, la cantidad de inertes (principalmente Nitrógeno) se considera insignificante.

1.4.2.1 Balance molar para el CH₄. La ecuación diferencial para el balance molar del CH₄, en el volumen de longitud ΔZ , a una distancia de la entrada, es :

$$\frac{1}{V} \frac{\partial N_{CH_4}(t)}{\partial t} = \frac{1}{A_T} \frac{\partial \dot{N}_{CH_4}(t)}{\partial Z} + \rho_c (1-\upsilon) R_{CH_4}(t)$$
$$\frac{\partial \dot{N}_{CH_4}(t)}{\partial Z} = \lim_{\Delta z \to 0} \frac{\dot{N}_{CH_4}(t)|_{z+\Delta z} - \dot{N}_{CH_4}(t)|_z}{\Delta Z}$$
(3)
$$\frac{dN_{CH_4}(t)}{dt} = \dot{N}_{CH_4}(t)|_z - \dot{N}_{CH_4}(t)|_{z+\Delta z} + \rho_c V(1-\upsilon) R_{CH_4}(t)$$

3 ec., 5 inc.
$$\left[N_{CH_4}(t), \dot{N}_{CH_4}(t)|_{z+\Delta z}, R_{CH_4}(t)\right]$$

 $\dot{N}_{CH_4}(t)|_z$ es el flujo molar de Metano que entra al elemento diferencial y es dado por el elemento anterior, al igual que los demás componentes. $\dot{N}_{CH_4}(t)|_{z+\Delta z}$ es el flujo molar de Metano que sale del elemento diferencial y se obtiene así:

$$\dot{N}_{CH_4}(t)|_{z+\Delta z} = y_{CH_4}(t)\dot{N}_{tot}(t)|_{z+\Delta z}$$
 (4)

4 ec., 7 inc. $\left[y_{CH 4}(t), \dot{N}_{tot}(t)|_{z+\Delta z}\right]$

De manera similar se obtienen los flujos molares de los demás componentes.

Si se supone que el producto gaseoso tiene un comportamiento ideal, dadas las condiciones de temperatura y presión que se tienen en estos procesos, la fracción molar del Metano, se calcula así:

$$y_{CH_4}(t) = \frac{N_{CH_4}(t)}{N_{tot}(t)|_{\Delta z}}$$
(5)

5 ec., 8 inc.
$$[N_{tot}(t)|_{\Delta z}]$$

Para calcular las propiedades fisicoquímicas se utilizaron las expresiones propuestas por Reid (1985).

Por la ecuación de gases ideales:

$$N_{tot}(t)|_{\Delta z} = \frac{P(t)|_{z+\Delta z} V}{RT(t)|_{z+\Delta z}}$$
(6)

6 ec. , 10 inc. $\left[P(t)\left|_{z+\Delta z},T(t)\right|_{z+\Delta z}\right]$

1.4.2.2 Balance molar para el CO₂. El balance molar para el CO₂ dentro del elemento diferencial de control se plantea como:

$$\frac{dN_{CO_2}(t)}{dt} = \dot{N}_{CO_2}(t) |_z - \dot{N}_{CO_2}(t) |_{z+\Delta z} + \rho_c V(1-\upsilon) R_{CO_2}(t)$$
(7)

7 ec., 13 inc. $\left[N_{CO_2}(t), \dot{N}_{CO_2}(t)|_{z+\Delta z}, R_{CO_2}(t)\right]$

1.4.2.3 Modelo Cinético. Se han propuesto varios modelos cinéticos para las reacciones que ocurren en el reformado de gas natural con vapor de agua. Algunos de los estudios cinéticos para la reacción de producción de Monóxido de Carbono son: Moe y Gerhard (1965), Haldor (1965), Allen y otros (1975), y Xu y Froment (1989). Estos modelos tienen en común que la velocidad de desaparición del Metano es de primer orden con respecto a su concentración y que la constante de velocidad en el sentido directo es independiente de la presión. Una de las diferencias entre las diversas velocidades de reacción para la desaparición del Metano es la insignificante resistencia difusional entre los poros, debido a las altas velocidades másicas que se dan en los reactores de reformado. Para la reacción de producción de Dióxido de Carbono, se han propuesto ecuaciones para la velocidad de reacción como las de Moe (1962), Haldor (1965), Ruthven (1967), y Xu y Froment (1989).

En este trabajo, para la velocidad de reacción del Metano y del Monóxido de Carbono se utilizan las expresiones propuestas por Haldor (1965), porque son de licenciadores de tecnología para la construcción de este tipo de reactores industriales y por la buena concordancia entre los datos de planta y los obtenidos por el modelo generado Chandra y Deoki en 1979. Las ecuaciones son:

$$R_{CH_4}(t) = k_1(t) \left(P_{CH_4}(t) - \frac{P_{H_2}^3(t) P_{CO}(t)}{K_1(t) P_{H_2O}(t)} \right)$$
(8)

8 ec., 19 inc.
$$\left[P_{CH_4}(t), P_{H_2O}(t), P_{CO}(t), P_{H_2}(t), K_1(t), k_1(t)\right]$$

$$R_{CO_2}(t) = k_2(t) \left(P_{CO}(t) - \frac{P_{H_2}(t)P_{CO_2}(t)}{K_2(t)P_{H_2O}(t)} \right)$$
(9)

9 ec., 22 inc.
$$[P_{CO2}(t), K_2(t), k_2(t)]$$

La presión parcial de cada componente se obtiene así:

• Para el Metano:

$$P_{CH_4}(t) = y_{CH_4}(t) P(t)|_{z+\Delta z}$$
(10)

10 ec., 22 inc.

• Para el vapor de agua:

$$P_{H_20}(t) = y_{H_20}(t) P(t)|_{z+\Delta z}$$
(11)

11 ec., 23 inc.
$$[y_{H_2O}(t)]$$

La fracción molar de cada componente en el gas que sale del volumen de control y en el que se acumula en este, es igual, por lo cual:

$$y_{H_{2}O}(t) = \frac{\dot{N}_{H_{2}O}(t)|_{z+\Delta z}}{\dot{N}_{tot}(t)|_{z+\Delta z}}$$
(12)

12 ec. , 24 inc.
$$\left[\dot{N}_{H_2O}(t) \mid_{z+\Delta z}\right]$$

Si definimos a X(t), como las moles de Metano equivalente convertidos:

$$X(t) = \dot{N}_{CH_4}(t) |_{z} - \dot{N}_{CH_4}(t) |_{z+\Delta z}$$
(13)

13 ec., 25 inc.
$$[X(t)]$$

Por la estequiometría, suponiendo que las moles de cada componente que se acumulan en el volumen de control son insignificantes, las moles de vapor de agua a la salida del volumen de control se calculan así:

$$\dot{N}_{H_{2}O}(t)|_{z+\Delta z} = \dot{N}_{H_{2}O}(t)|_{z} - X(t) - \dot{N}_{CO_{2}}(t)|_{z+\Delta z}$$
(14)

14 ec., 25 inc.

• Para el Hidrógeno:

$$P_{H_2}(t) = y_{H_2}(t)P(t)|_{z+\Delta z}$$
(15)

15 ec., 26 inc. $[y_{H_2}(t)]$

La fracción molar del Hidrógeno, se obtiene por:

$$y_{H_2}(t) = \frac{\dot{N}_{H_2}(t)|_{z+\Delta z}}{\dot{N}_{tot}(t)|_{z+\Delta z}}$$
(16)

16 ec. , 27 inc.
$$\left[\dot{N}_{H_2}(t)|_{z+\Delta z}\right]$$

Las moles de Hidrógeno a la salida del volumen de control, se calculan así:

$$\dot{N}_{H_2}(t)|_{z+\Delta z} = \dot{N}_{H_2}(t)|_z + 3X(t) + \dot{N}_{CO_2}(t)|_{z+\Delta z}$$
(17)

17 ec., 27 inc.

• Para el Monóxido de Carbono:

$$P_{CO}(t) = y_{CO}(t) P(t)|_{z+\Delta z}$$
(18)

18 ec., 28 inc.
$$[y_{CO}(t)]$$

La fracción molar del Monóxido de Carbono, se obtiene por:

$$y_{CO}(t) = \frac{\dot{N}_{CO}(t)|_{z+\Delta z}}{\dot{N}_{tot}(t)|_{z+\Delta z}}$$
(19)

19 ec. , 29 inc. $\left[\dot{N}_{CO}\left(t\right)|_{z+\Delta z}\right]$

Las moles de Monóxido de Carbono a la salida del volumen de control, se calculan así:

$$\dot{N}_{CO}(t)|_{z+\Delta z} = \dot{N}_{CO}(t)|_{z} + X(t) - \dot{N}_{CO_{2}}(t)|_{z+\Delta z}$$
 (20)

20 ec., 29 inc.

La constante de velocidad específica para R_{CH4} (*t*), se obtiene por :

$$k_1(t) = k_{01} \exp\left[-\frac{E_{a1}}{RT(t)}\right]$$
 (21)

21 ec., 29 inc.

La constante de equilibrio para la producción de CO(t), se determina por :

$$K_1(t) = \exp\left[\frac{-50753.7}{0.55T(t) + 424} + 31.526\right]$$
 (22)

22 ec., 29 inc.

La presión parcial del Dióxido de Carbono, se obtiene así:

$$P_{CO_2}(t) = y_{CO_2}(t) P(t)|_{z+\Delta z}$$
(23)

23 ec. , 30 inc.
$$[y_{CO_2}(t)]$$

La fracción molar del Dióxido de Carbono, se calcula así:

$$y_{CO_2}(t) = \frac{N_{CO_2}(t)}{N_{tot}(t)|_{\Delta z}}$$
(24)

24 ec. , 30 inc.

La constante de velocidad especifica para $R_{CO_2}(t)$, se obtiene por :

$$k_{2}(t) = k_{02} \exp\left[-\frac{E_{a2}}{RT(t)}\right]$$
 (25)

25 ec., 30 inc.

Para la producción de Dióxido de Carbono, la constante de equilibrio es:

$$K_{2}(t) = \exp\left[\frac{8349.2}{0.55T(t) + 428} - 4.38\right] \rightarrow T < 866K$$

$$K_{2}(t) = \exp\left[\frac{7448.64}{0.55T(t) + 428} - 3.81\right] \rightarrow T \ge 866K$$
(26)

26 ec., 30 inc.

 $\dot{N}_{CO_2}(t)|_{z+\Delta z}$ es el flujo molar de Dióxido de Carbono que sale del elemento diferencial y está dado por:

$$\dot{N}_{CO_2}(t)|_{z+\Delta z} = y_{CO_2}(t)\dot{N}_{tot}(t)|_{z+\Delta z}$$
 (27)

27 ec., 30 inc.

Las moles totales que salen del volumen de control, se obtienen así:

$$\dot{N}_{tot}|_{z+\Delta z} = \dot{N}_{CH_4}|_z + \dot{N}_{H_2O}|_z + \dot{N}_{H_2}|_z + \dot{N}_{CO}|_z + \dot{N}_{CO_2}|_z + 2X + \dot{N}_{N_2}$$
(28)

28 ec., 30 inc.

 $\dot{N}_{N_2}(t)$ es el flujo molar de Nitrógeno que entra al elemento diferencial, éste componente no reacciona y su contenido en el gas de proceso es muy pequeño (menor del 0.5 % vol.), se puede despreciar para efectos de cálculo.

1.4.3 Balances dinámicos de energía. Para evaluar la temperatura del gas de proceso es necesario plantear balances de energía dentro del volumen de control, en la pared metálica del tubo y en el horno.

1.4.3.1 Balance de energía para el volumen de control. Se toma como estado de referencia, para la entalpía y energía interna, los elementos que constituyen los reactivos y los productos a 25°C y los elementos que no reaccionan a una temperatura conveniente y la presión del sistema. Con esta referencia el balance de energía en el elemento diferencial se plantea así:

$$\frac{dU(t)|_{\Delta z}}{dt} = H(t)|_{z} - H(t)|_{z+\Delta z} + h_{i}\pi d_{i}\Delta z [T_{w}(t) - T(t)|_{z+\Delta z}]$$
(29)
29 ec., 35 inc. $[U(t)|_{\Delta z}, H(t)|_{z}, H(t)|_{z+\Delta z}, h_{i}(t), T_{w}(t)]$

La energía interna del gas de proceso acumulada en el volumen diferencial, se calcula por:

$$U|_{\Delta z}(t) = N_{CH_4}(t)|_{\Delta z} \,\hat{u}_{CH_4}(t) + N_{H_2O}(t)|_{\Delta z} \,\hat{u}_{H_2O}(t) + N_{H_2}(t)|_{\Delta z} \,\hat{u}_{H_2}(t)$$

$$+ N_{CO}(t)|_{\Delta z} \, \hat{u}_{CO}(t) + N_{CO_{2}}(t)|_{\Delta z} \, \hat{u}_{CO_{2}}(t)$$
(30)

30 ec. , 40 inc.
$$\left[\hat{u}_{CH_4}(t), \hat{u}_{H_2O}(t), \hat{u}_{H_2}(t), \hat{u}_{CO}(t), \hat{u}_{CO_2}(t)\right]$$

• La energía interna para el Metano se obtiene por la siguiente expresión:

$$\widehat{u}_{CH_4}(t) = \widehat{u}_{f_{CH_4}}^0 + R \int_{T_0}^{T(t)|_{z+\Delta z}} \left(\frac{C_{p_{CH_4}}(t)}{R} - 1 \right) dT$$
(31)

31 ec. , 41 inc.
$$\left[C_{p_{CH_4}}(t)\right]$$

• Para el vapor de agua:

$$\widehat{u}_{H_{2}O}(t) = \widehat{u}_{f_{H_{2}O}}^{0} + R \int_{T_{0}}^{T(t)|_{z+\Delta z}} \left(\frac{C_{p}}{R} - 1 \right) dT$$
(32)

32 ec. , 42 inc.
$$\left[C_{p_{H_2O}}(t)\right]$$

• Para el Hidrógeno:

$$\widehat{u}_{H_2}(t) = \widehat{u}_{f_{H_2}}^0 + R \int_{T_0}^{T(t)|_{z+\Delta z}} \left(\frac{C_{p_{H_2}}(t)}{R} - 1 \right) dT$$
(33)

33 ec. , 43 inc. $\left[\, C_{p_{\, H_2}}(t) \, \right]$

• Para el Monóxido de Carbono:

$$\hat{u}_{CO}(t) = \hat{u}_{f_{CO}}^{0} + R \int_{T_0}^{T(t)|_{z+\Delta z}} \left(\frac{C_{p_{CO}}(t)}{R} - 1 \right) dT$$
(34)

34 ec. , 44 inc.
$$\left[C_{p_{CO}}(t)\right]$$

• Para el Dióxido de Carbono:

$$\widehat{u}_{CO_2}(t) = \widehat{u}_{f_{CO_2}}^0 + R \int_{T_0}^{T(t)|_{z+\Delta z}} \left(\frac{C_{p_{CO_2}}(t)}{R} - 1 \right) dT$$
(35)

35 ec. , 45 inc.
$$\left[C_{P_{CO_2}}(t)\right]$$

La capacidad calorífica para el Metano, viene dada por:

$$C_{P_{CH_4}}(t) = A_{CH_4} + B_{CH_4}T(t) + C_{CH_4}T^2(t) + D_{CH_4}T^{-2}(t)$$
(36)

36 ec., 45 inc.

En esta expresión se ha reemplazado $T(t)|_{z+\Delta z}$ por T(t), para efectos de simplificar las ecuaciones.

La capacidad calorífica del vapor de agua, está dada por:

$$C_{P_{H_2O}}(t) = A_{H_2O} + B_{H_2O}T(t) + C_{H_2O}T^2(t) + D_{H_2O}T^{-2}(t)$$
(37)

37 ec., 45 inc.

La capacidad calorífica del Hidrógeno, está dada por:

$$C_{P_{H_2}}(t) = A_{H_2} + B_{H_2}T(t) + C_{H_2}T^2(t) + D_{H_2}T^{-2}(t)$$
(38)

38 ec., 45 inc.

La capacidad calorífica del Monóxido de Carbono, está dada por:

$$C_{P_{CO}}(t) = A_{CO} + B_{CO}T(t) + C_{CO}T^{2}(t) + D_{CO}T^{-2}(t)$$
(39)

39 ec., 45 inc.

La capacidad calorífica del Dióxido de Carbono, está dada por:

$$C_{P_{CO_2}}(t) = A_{CO_2} + B_{CO_2}T(t) + C_{CO_2}T^2(t) + D_{CO_2}T^{-2}(t)$$
(40)

40 ec., 45 inc.

La entalpía del gas de proceso, a la entrada del elemento diferencial, se obtiene por:

$$H(t)|_{z} = N_{CH_{4}}(t)|_{z} \hat{h}_{CH_{4}}(t)|_{z} + N_{H_{2}O}(t)|_{z} \hat{h}_{H_{2}O}(t)|_{z} + N_{H_{2}}(t)|_{z} \hat{h}_{H_{2}}(t)|_{z}$$
$$+ N_{CO}(t)|_{z} \hat{h}_{CO}(t)|_{z} + N_{CO_{2}}(t)|_{z} \hat{h}_{CO_{2}}(t)|_{z}$$
(41)

41 eq., 50 inc.
$$\left[\hat{h}_{CH_4}(t)|_z, \hat{h}_{H_2O}(t)|_z, \hat{h}_{H_2}(t)|_z, \hat{h}_{CO}(t)|_z, \hat{h}_{CO|_2}(t)|_z\right]$$

La entalpía para el Metano, se halla por:

$$\widehat{h}_{CH_4}(t)|_{z} = \widehat{h}_{f_{CH_4}}^{0} + R \int_{T_0}^{T(t)|_{z}} \left(\frac{C_{p_{CH_4}}(t)}{R}\right) dT$$
(42)

42 ec., 50 inc.

Para el vapor de agua, por:

$$\widehat{h}_{H_{2}O}(t)|_{z} = \widehat{h}_{f_{H_{2}O}}^{0} + R \int_{T_{0}}^{T(t)|_{z}} \left(\frac{C_{p_{H_{2}O}}(t)}{R}\right) dT$$
(43)

43 ec., 50 inc.

Para el Hidrógeno, por:

$$\widehat{h}_{H_2}(t)|_z = \widehat{h}_{f_{H_2}}^0 + R \int_{T_0}^{T(t)|_z} \left(\frac{C_{p_{H_2}}(t)}{R}\right) dT$$
(44)

44 ec., 50 inc.

Para el Monóxido de Carbono, por:

$$\hat{h}_{CO}(t)|_{z} = \hat{h}_{f_{CO}}^{0} + R \int_{T_{0}}^{T(t)|_{z}} \left(\frac{C_{p_{CO}}(t)}{R}\right) dT$$
(45)

45 ec., 50 inc.

La entalpía para el Dióxido de Carbono, por:

$$\hat{h}_{CO_2}(t)|_z = \hat{h}_{f_{CO_2}}^0 + R \int_{T_0}^{T(t)|_z} \left(\frac{C_{p_{CO_2}}(t)}{R} \right) dT$$
(46)

46 ec., 50 inc.

El cálculo de la entalpía del gas de proceso, a la salida del elemento diferencial, se puede realizar utilizando una expresión comprimida:

$$H(t)|_{z+\Delta z} = \sum N_i(t)\hat{h}_i(t)|_{z+\Delta z}$$
(47)

47 ec. , 51 inc.
$$\left[\widehat{h}_i(t) \left|_{z+\Delta z}\right]$$

La entalpía de cada componente se puede hallar así:

$$\hat{h}_{i}(t)|_{z+\Delta z} = \hat{h}_{f_{i}}^{0} + R \int_{T_{0}}^{T(t)|_{\Delta z+\Delta z}} \left(\frac{C_{p_{i}}(t)}{R}\right) dT$$
(48)

48 ec., 51 inc.

• Cálculo del Coeficiente de Película para la transferencia de calor. El modelo utiliza un coeficiente de película para la transferencia de calor " $h_i(t)$ ", calculado a partir de la correlación de Beek (1962). Esta expresión ha sido utilizada por Hyman (1965) y Alatiqui (1983) con buenos resultados en la verificación de sus modelos con datos industriales. Para facilitar la escritura se utilizan expresiones comprimidas para el cálculo de las propiedades del producto gaseoso y sus componentes.

El coeficiente de película para la transferencia de calor, se calcula a partir de la siguiente expresión:

$$h_{i}(t) = \frac{k_{f}}{d_{p}} \left[2.58 \left(\frac{d_{p}G}{\mu(t)} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu(t)C_{p}(t)}{k_{f}(t)} \right)^{1/3} + 0.094 \left(\frac{d_{p}G}{\mu(t)} \right)^{0.8} \left(\frac{\mu(t)C_{p}(t)}{k_{f}(t)} \right)^{0.4} \right]$$
(49)

49 ec., 55 inc.
$$[G, \mu(t), C_p(t), k_f(t)]$$

La velocidad másica superficial, se define como:

$$G = 4 \frac{N_{tot_0} \overline{M}_0}{\pi d_i^2}$$
(50)

50 ec., 55 inc.

• Cálculo de la Viscosidad. Se utiliza el método de Wilkes (Reid, 1987) para evaluar la viscosidad del producto gaseoso:

$$\mu(t) = \sum \frac{y_i \mu_i(t)}{\sum y_i \Phi_{ij}(t)}$$
(51)

51 ec. , 57 inc.
$$\left[\mu_i(t), \Phi_{ij}(t)\right]$$

$$\Phi_{ij}(t) = \frac{\left[1 + \left(\frac{\mu_i(t)}{\mu_j(t)}\right)^{0.5} \left(\frac{\overline{M}_j}{\overline{M}_i}\right)^{0.25}\right]^2}{\left[8\left(1 + \frac{\overline{M}_i}{\overline{M}_j}\right)\right]^{0.5}}$$
(52)

52 ec., 57 inc.

$$\Phi_{ji}(t) = \frac{\mu_j(t)}{\mu_i(t)} \frac{\overline{M}_i}{\overline{M}_j} \Phi_{ij}(t)$$
(53)

53 ec. , 58 inc. $\left[\Phi_{_{ji}}(t)\right]$

La viscosidad de cada uno de los componentes del producto gaseoso, se determina por el método propuesto por Lucas (Reid, 1987):

$$\mu_i(t)\xi_i = \left[0.0807T_{ri}^{0.618} - 0.357e^{-0.449T_{ri}} + 0.340e^{-4.058T_{ri}} + 0.018\right]F_{\mathcal{Q}_i}^0$$
(54)

54 ec., 60 inc.
$$\left[\xi_{i}, F_{Q_{i}}^{0}\right]$$

$$\xi_{i} = \left[\frac{T_{Ci}}{\overline{M}_{i}^{3} P_{Ci}}\right]^{1/6}$$
(55)

Para el Hidrógeno:

$$F_{Q_i}^{0} = 1.1708 \left[1 + 0.00385 \left(T_r - 12 \right) \right]$$
(56)

56 ec., 59 inc.

Para los demás componentes $F_{Q_i}^{0} = 1$

• Cálculo de la Conductividad Térmica. Para evaluar la conductividad térmica del producto gaseoso, se utiliza la ecuación propuesta por Mason y Saxena (Reid, 1987):

$$k_{f}(t) = \sum \frac{y_{i}k_{f_{i}}(t)}{\sum y_{i}\Phi_{ij}(t)}$$
(57)

57 ec. , 61 inc.
$$[k_{f_i}(t)]$$

La conductividad térmica de cada uno de los componentes del gas producto, se evalúa por el método propuesto por Stiel y Thodos (Reid, 1987):

$$k_{f_i}(t) = \frac{\mu_i(t) \left(C_{p_i}(t) - R \right)}{\overline{M}_i} \left[1.15 + \frac{2.03R}{C_{p_i}(t) - R} \right]$$
(58)

58 ec., 61 inc.

Finalmente,

$$C_{p}(t) = \sum y_{i} C_{p_{i}}(t)$$
 (59)

1.4.3.2 Balance de energía en la pared metálica del volumen de control. Si se supone que el área del horno es mucho mayor que la de los tubos y que estos están completamente dentro del horno, el balance de energía, para la pared

metálica del volumen de control, puede plantearse utilizando la siguiente expresión:

$$\rho_{M} \frac{\pi}{4} \left(d_{e}^{2} - d_{i}^{2} \right) \Delta z C_{P_{M}} \frac{dT_{w}(t)|_{z}}{dt} = \varepsilon \sigma \pi d_{e} \Delta z \left(T_{R}^{4}(t) - T_{w}^{4}(t)|_{z} \right) - h_{i}(t) \pi d_{i} \Delta z \left(T_{w}(t) - T(t)|_{z+\Delta z} \right)$$
(60)

60 ec., 62 inc.
$$[T_R(t)]$$

1.4.3.3 Balance de energía en el horno. Para el balance de calor se supone que cada uno de los volúmenes diferenciales, en que se divide el reactor, recibe calor por radiación y convección de los gases de combustión, como se plantea en la siguiente expresión:

$$M_{B}C_{P_{B}}\frac{dT_{R}(t)}{dt} = F_{H}H_{F}\eta_{F} - \sum_{0}^{L}\varepsilon\sigma\pi d_{e}(T_{R}^{4}(t) - T_{w}^{4}(t))dz$$
(61)

61 ec., 62 inc.

 Caída de Presión a través del lecho de catalizador. Utilizando la ecuación de Ergun (1952):

$$\frac{dP}{dz} = -\left[\frac{150(1-\upsilon)}{\left(\frac{d_pG}{\mu(t)}\right)} + 1.75\right] \left(\frac{G^2}{\rho(t)}\right) \frac{1}{d_p} \left(\frac{1-\upsilon}{\upsilon^3}\right) \frac{1}{8.834e^{11}}$$
(62)

62 ec. , 63 inc. $\left[\rho(t)\right]$

La densidad del producto gaseoso, se calcula por:

$$\rho(t) = \frac{\overline{M}(t)P(t)}{RT(t)}$$
(63)

63 eq., 64 inc.
$$\left[\overline{M}(t)\right]$$

Finalmente, el peso molecular del gas de proceso, se obtiene por:

$$\overline{M}(t) = \sum y_i(t) \overline{M}_i$$
(64)

64 ec., 64 inc.

La simulación dinámica del horno reactor de reformado de gas natural con vapor de agua, se realizó utilizando el paquete MATLAB (versión 6.0) y el *toolbox* SIMULINK (Versión 3.0). El reactor tubular se dividió en ocho secciones de igual longitud. Al contar y citar las variables que aparecen en cada ecuación se obtiene la secuencia de solución de las ecuaciones. Para resolver las ecuaciones se utilizó un algoritmo en MATLAB (ODE23S), para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias tipo Stiff basado en una modificación del método de Rosenbrock (Shampine y Gordon, 1975).

El esquema gráfico de solución programado en Simulink se presenta en las Figuras 3 a 6. En la Figura 3 se representa un diagrama de proceso del reactor de reformado, con las corrientes que entran y salen del proceso y las válvulas, sensores y controladores; que constituyen los lazos de control de flujos y temperatura, en una planta convencional. La Figura 4 muestra las ocho secciones en las cuales se ha dividido el tubo reactor y como cada una de éstas interactúa con el horno para intercambiar calor, también se muestran los bloques que permiten dar al programa los parámetros de diseño y las condiciones iniciales del reactor de reformado que se quiere simular.

La Figura 5 representa los balances diferenciales de masa para cada componente y los balances diferenciales de energía en cada sección del reactor y en la pared metálica del tubo, también se muestran los bloques de las condiciones de entrada y salida de cada sección.

En la Figura 6 se presenta en detalle el bloque de condiciones de salida de cada sección. Como cada una de estas se considera un reactor de mezcla perfecta, la corriente que sale tiene las mismas propiedades que la sección de la cual procede.



Figura 3. Diagrama de proceso de un reactor de reformado



Figura 4. Secciones del tubo y su intercambio de calor con el horno



Figura 5. Balances de masa y energía en cada sección del tubo



Figura 6. Detalle del bloque de salida de cada sección

1.5 RESUMEN

En este capítulo se presentó una reseña general del proceso de reformado con vapor de agua para producir Hidrógeno, las cargas, el catalizador y los reactores en los que se llevan a cabo estos procesos.

Se hizo una reseña del estado del arte en el desarrolló de modelos para este proceso y se desarrolló un modelo dinámico de un reactor, multitubular vertical, en el cual tiene lugar el reformado de gas natural, principalmente Metano, con vapor de agua sobre un catalizador a base de Níquel, soportado en alúmina.

Se resume el enfoque del diseño de reactores utilizando las técnicas de la fluido dinámica computacional (CFD), en donde se debe concebir el equipo reactor adecuado y el procedimiento de operación para alcanzar en la práctica las condiciones fluido dinámicas deseadas.

Utilizando expresiones cinéticas encontradas en la literatura, se plantean los balances diferenciales de masa de una forma más exacta. Conociendo el flujo de carga (vapor y gas), la temperatura, la presión y la composición del gas de proceso a la entrada del reactor, se hallan la temperatura, la presión, y
composición de la mezcla gaseosa a medida que recorre la longitud del tubo. Para evaluar la temperatura del gas de proceso, se establecieron tres balances de energía: dentro del volumen de control, en la pared metálica del tubo, y en el horno. En este modelo, para el balance de energía en la pared metálica se supone que el área del horno es mucho mayor que la de los tubos y que estos están completamente dentro del horno (Smith y Corripio, 1985).

El uso de un modelo basado en principios fundamentales, permite evaluar la distribución de compuestos y temperatura a través de un reactor con gran precisión. Los balances de calor en el horno, en la pared del tubo y en el reactor, hacen posible considerar los efectos de radiación y convección, para determinar exactamente la posición de los quemadores y su distribución. La valiosa información generada en el desarrollo del modelo contribuye a un mejor conocimiento del proceso.

2. VALIDACIÓN E IDENTIFICACIÓN DEL MODELO

2.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se presenta la validación de los resultados del modelo con datos de una planta industrial. Para evaluar las condiciones de operación y rendimientos predichos por el modelo se recopiló información de dos pruebas en planta: una para un cambio de catalizadores en 1994 y otra realizada en el 2000 para verificar la dinámica del proceso. El tipo de señal que más se utiliza para excitar el proceso en plantas industriales es el escalón, debido a que no hace oscilar el proceso y por tal razón es la más aceptada por los operadores (según mi experiencia en los proyectos de sintonización y aplicación de control avanzado). En la planta es muy limitada la magnitud de los cambios tipo escalón, porque se compromete la seguridad del personal, de los equipos de proceso, de la calidad de los productos y la rentabilidad de la operación. Además, por la no linealidad de los procesos un cambio escalón grande puede llevar la operación а una situación de riesgo. Se definen como variables manipuladas, los flujos de gas combustible y vapor de reacción y como variables controladas la temperatura y la fracción de Hidrógeno del gas a la salida del reactor. Las variables manipuladas y controladas se relacionan mediante funciones de transferencia calculadas utilizando dos métodos basados en la curva de respuesta para evaluar los parámetros ganancia, tiempo muerto y constante de tiempo. El método Fit3 (Smith y Corripio, 1997) ubica tres puntos en la curva y ARX (Ljung, 1999) es un método estadístico autoregresivo de ajuste de curvas. De la comparación de los resultados del modelo con los datos de una planta comercial, se observa que la conversión y la temperatura están dentro del rango de precisión que permite la instrumentación industrial. Además, se comparan los porcentajes de error en la predicción de la temperatura y la fracción de Hidrógeno a la salida del reactor, calculados por el modelo desarrollado en este trabajo, con los datos presentados para otros modelos realizados por otros autores. Los resultados de este modelo están dentro de los rangos de precisión publicados. La precisión en los resultados del modelo de Alatiqui (1989) es ligeramente superior. Alatiqui determina la temperatura de la pared del tubo utilizando una expresión empírica, cuyos coeficientes deben ser evaluados a partir de pruebas en planta, a diferencia del modelo aquí desarrollado en el cual se realiza un balance de energía en el seno del horno.

Igualmente se compara el comportamiento dinámico del modelo con el desempeño de una prueba escalón en el flujo de gas combustible a nivel industrial. El modelo dinámico y riguroso aquí desarrollado, describe excelentemente la dinámica de la unidad industrial. Las diferencias entre los parámetros: ganancia, tiempo muerto y constante de tiempo, calculados a partir del modelo y los datos de planta, están dentro de un porcentaje permisible si se tiene en cuenta la complejidad para reproducir la dinámica de una unidad comercial, la cual está sujeta a las fluctuaciones en los flujos que entran y salen de ella, por su interacción con las demás plantas.

Para conectar en línea el modelo con la planta industrial se utiliza EXCEL como integrador de la información de la base de datos en tiempo real del proceso y las aplicaciones en MATLAB - SIMULINK y HYSYS.

Los datos de la planta como flujos de gas natural, vapor y gas combustible; composición, temperatura y presión son utilizadas por el modelo para realizar la simulación y generar los datos que concuerdan bien con los del proceso.

Los datos de propiedades de transporte (viscosidad y conductividad térmica) calculados a partir de las expresiones del modelo y los obtenidos por un simulador como el HYSYS son esencialmente iguales.

2.2 VERIFICACIÓN EN ESTADO ESTABLE DEL MODELO

Para verificar los resultados del modelo se utilizó como caso base, las condiciones de entrada de una planta industrial, presentadas en la Tabla 1. El gas combustible tiene la misma composición del gas de carga. El factor de compresiblidad se ha calculado utilizando la ecuación de Peng Robinson (Reid, 1987) para verificar la suposición de comportamiento ideal de la mezcla gas natural y vapor de agua a las condiciones establecidas en cada caso, por su valor cercano a la unidad la mezcla gaseosa se comporta idealmente.

La Tabla 2 muestra la comparación entre los datos del modelo y la planta industrial. La temperatura y la composición del producto gaseoso seco, obtenidas por el modelo, se ajustan excelentemente a las condiciones de la planta industrial. El factor de compresibilidad calculado es igual a 1, verificando el comportamiento ideal del producto gaseoso a la salida del reactor.

Las Figuras 7 a 9 presentan los resultados obtenidos por simulación. La Figura 7 muestra la distribución de la composición molar a lo largo del tubo. Las fracciones molares del Metano y vapor de agua disminuyen continuamente a través del

reactor. Las cantidades de Hidrógeno, Monóxido y Dióxido de Carbono aumentan con la longitud del reactor.

Tabla 1. Condiciones de operación de una unidad de reformado de gas natural

Condiciones de Operación	Octubre 8, 1994	Junio 20, 2000
Carga, m³est/h	3228.12	3599.2
Vapor, kg/h	13517.19	15286.06
Relación Vapor – Carga, mol/mol	4.31	5.28
Temperatura a la entrada, K	672	688.7
Presión a la entrada, Kpa	1861.6	1772
Composición de la Carga, % Vol.		
Hidrógeno	21.86	0.00
Metano	77.39	98.27
Etano	0.66	0.27
Propano	0.01	0.05
Monóxido de Carbono	0.01	0.00
Dióxido de Carbono	0.01	0.03
Nitrógeno	0.06	1.38
Factor de Compresibilidad	0.98	0.98

Condiciones de Operación	08-10-94	Modelo	20-06-00	Modelo
Temperatura de pared, K	1216.3	1212.5	1172.0	1168.7
Temperatura de salida, K	1066.3	1070.0	1047.7	1049.0
Presión de salida, Kpa	1612.6	1635.4	1771.1	1750.4
Comp. Gas de salida, %v				
Metano	2.25	2.30	2.74	2.20
Hidrógeno	76.55	77.56	75.93	76.41
Monóxido de Carbono	9.51	9.48	9.46	9.06
Dióxido de Carbono	11.65	10.77	11.85	12.34
Nitrógeno	0.04	0.016	0.00	0.00
Factor de Compresibilidad	1.00	1.00	1.00	1.00

Tabla 2. Comparación entre los resultados en estado estable del modelo y laplanta.



Figura 7. Variación de la composición molar a lo largo del tubo



Figura 8. Variación de la temperatura y la presión a lo largo del reactor

En la Figura 8 se muestra la variación de las temperaturas de la pared del tubo y en el reactor, y de la presión a través del tubo. La temperatura externa del tubo aumenta continuamente con la longitud del tubo. Un comportamiento similar se observa en la temperatura de reacción. La presión disminuye con la longitud del tubo. Los perfiles de estas variables obtenidos por simulación conducen a valores de salida del reactor que se ajustan a los valores de operación observados en el reactor industrial. La Figura 9 muestra el efecto de un aumento en el flujo de carga sobre la temperatura de radiación en el seno del horno. La temperatura de radiación disminuye cuando aumenta el flujo de gas natural si se mantiene el flujo de gas combustible constante, lo cual se explica porque se tiene una mayor cantidad de masa dentro del reactor y se dispone de la misma cantidad de calor suministrado por la quema del gas combustible.



Figura 9. Variación de la temperatura de radiación con el flujo de carga.

2.3 COMPARACIÓN CON OTROS MODELOS

La verificación de los resultados del modelo y los datos industriales, permite calcular los porcentajes de error en la predicción de la temperatura y composición a la salida del reactor. En la Tabla 3 se comparan los porcentajes de error

calculados para este modelo y los reportados por otros autores que han desarrollado modelos con diferentes fines para este proceso. Los resultados de este modelo están dentro de los rangos de precisión publicados. La precisión en los datos del modelo de Alatiqui es ligeramente superior; sin embargo, él utiliza una expresión empírica, a partir de pruebas en planta.

Tabla 3. Comparación entre los resultados del modelo con otros estudios.

Modelo	Conversión (% error)	Temperatura (% error)
I. M. Alatiqui y A. M. Meziou	0.31 – 1.24	0.09 – 0.33
M. H. Hyman	1.3 – 3.5	0.5 – 2.7
C. P. P. Singh y D. N. Saraf	0.2 – 2	0.04 – 1.3
A. P. Murray y T. S. Snyder	12 – 36	6.5 - 9.6
P. M. Plehiers y G. F. Froment	0.9 – 2.32	0.76 – 3.3
Este Estudio	0.63 – 1.32	0.16 – 0.41

2.4 IDENTIFICACIÓN Y VERIFICACIÓN DINÁMICA DEL MODELO

Para verificar los resultados del modelo dinámico se utilizó como caso base las condiciones de entrada de una planta industrial, presentadas en la Tabla 1.

Las variables manipuladas y controladas se relacionan por medio de funciones de transferencia calculadas, utilizando los métodos: Fit 3 y ARX.

El método Fit3 halla funciones de transferencia de primer orden más tiempo muerto en el dominio de Laplace, así:

$$G(s) = \frac{Ke^{-t_o s}}{\tau s + 1}$$
(65)

Donde :

- G(s) = función de transferencia del proceso.
- *K* = ganancia de estado estacionario, variación en la salida del transmisor de la variable controlada dividido entre la variación en la salida de la variable manipulada (salida del controlador), % ST / %SC.
- T_o = tiempo muerto del proceso, min.
- τ = constante de tiempo del proceso, min.

El ARX es un método paramétrico que se basa en estimar los coeficientes por mínimos cuadrados para determinar las funciones de transferencia de diverso orden. El método requiere datos de entrada, salida y valores estimados de los ordenes del numerador, del denominador y del tiempo muerto del sistema. El método evalúa una función de transferencia estimada que incluye la aproximación de Pade (Smith y Corripio, 1997) del tiempo muerto.



Figura 10. Comparación entre los datos de la planta y los del modelo

En la planta es muy limitado el rango de flexibilidad para realizar cambios tipo escalón de gran magnitud, porque se compromete la seguridad del personal y los equipos de proceso y la rentabilidad de la operación. Por esta razón, para Identificar el proceso, sólo se pudo efectuar un cambio tipo escalón en el flujo de combustible de 3118 m³est/h a 3160 m³est/h, con el fin de determinar su efecto en la temperatura del producto gaseoso del reactor. Con la información de la curva

de respuesta (ver Figura 10) se utilizaron los métodos Fit 3 y ARX para realizar la identificación del sistema y se obtuvo la siguiente función de transferencia:

Para la planta:

$$T(s) = \left(\frac{2.48e^{-6.48s}}{15.9s+1}\right) F_g(s)$$
(66)

Para el modelo:

$$T(s) = \left(\frac{2.21e^{-6.5s}}{15.6s+1}\right) F_g(s)$$
(67)

Las dos funciones de transferencia son similares en sus magnitudes. Las ganancias calculadas de los datos del modelo y de la planta difieren en 11 %. El tiempo muerto hallado es prácticamente igual para la planta y el modelo. En las dos constantes de tiempo calculadas para la planta y el modelo hay una diferencia de 2%. Las variaciones en los flujos de la carga y el vapor afectan el cálculo de la función de transferencia de la planta, especialmente la ganancia del proceso, lo cual explica su diferencia con el valor hallado con el modelo. Los parámetros dinámicos, tiempo muerto y constante de tiempo, no son afectados por estas variaciones. Los resultados de la composición del producto gaseoso se comparan

con los análisis de laboratorio de una muestra de este gas. De los resultados se aprecia que el modelo reproduce bien el comportamiento dinámico de la planta; por esta razón puede ser utilizado para analizar estrategias de control convencionales, proponiendo nuevas que permitan reducir la interacción entre los lazos de control, beneficiando la seguridad, la calidad de los productos y la rentabilidad del proceso.

2.5 SIMULACIÓN EN LINEA

Para conectar en línea el modelo con la planta industrial se utilizo la estructura mostrada en la Figura 11. Utilizando EXCEL se envía la información de la base de datos en tiempo real del proceso a MATLAB - SIMULINK y también a HYSYS.



Figura 11. Estructura para poner en línea la simulación y el proceso real.

Los datos de la planta como flujos de gas natural, vapor y gas combustible; composición, temperatura y presión son utilizadas por el modelo para realizar la simulación y generar los datos que se comparan con los del proceso. En la Figura 12, se muestra la comparación entre los datos de planta y los generados por el modelo para la composición del gas a la salida del reformador. Se puede ver que los resultados concuerdan muy bien.

En la Figura 13, se observa que los datos de propiedades de transporte (viscosidad, conductividad térmica y coeficiente global de transferencia de calor) calculados a partir de las expresiones del modelo y los obtenidos por un simulador como el HYSYS son esencialmente iguales, lo cual permite verificar más la exactitud del modelo.



Figura 12. Comparación de rendimientos entre el modelo y la planta







Figura 13. Comparación entre propiedades calculadas por el modelo y el HYSYS.

2.6 RESUMEN

En este capítulo se presentó la verificación entre los resultados del modelo dinámico riguroso del reactor de reformado de gas natural con vapor de agua desarrollado en este trabajo, con información de una planta industrial. Para evaluar la precisión de las condiciones de operación calculadas por el modelo, se recopiló información de dos pruebas en planta. En plantas industriales el cambio escalón es el tipo de señal que más se utiliza para excitar los procesos, debido a que no hacen oscilar los procesos y por tal razón son las más aceptadas por los operadores. En la planta magnitud de los cambios tipo escalón es limitada porque se compromete la seguridad del personal, de los equipos de proceso, de la calidad de los productos y la rentabilidad de la operación. Como variables manipuladas, se definieron los flujos de gas combustible y el vapor de reacción y como variables controladas, se escogieron la temperatura y la fracción de Hidrógeno del gas a la salida del reactor. La relación entre variables manipuladas y controladas se determinó utilizando funciones de transferencia calculadas por medio de dos métodos: Fit3 y ARX.

Los resultados del modelo con datos a nivel industrial se ajustan bien y están dentro del rango de precisión, que permite la instrumentación industrial. Además, se comparó el porcentaje de error en la predicción de la temperatura y la fracción

de Hidrógeno a la salida del reactor del modelo desarrollado en este trabajo, con los datos reportados para otros modelos realizados por otros autores. Los resultados de este modelo, están dentro de los rangos de precisión publicados. Los resultados del modelo de Alatiqui se ajustan mejor, pero para el uso de la expresión que permite evaluar la temperatura de pared es necesario realizar pruebas en planta para evaluar los parámetros de esta expresión ligeramente mejor. Alatiqui determina la temperatura de la pared del tubo utilizando una expresión empírica, cuyos coeficientes deben ser evaluados a partir de pruebas en planta, a diferencia del modelo aquí desarrollado en el cual se realiza un balance de calor en el seno del horno.

El modelo utiliza EXCEL como integrador de la información de la base de datos en tiempo real del proceso y las aplicaciones en MATLAB - SIMULINK y HYSYS.

La información de flujos de gas natural, vapor y gas combustible; composición, temperatura y presión de la planta real son utilizadas por el modelo para generar los datos que se comparan con la información de la base de datos en tiempo real, la concordancia es buena. Las propiedades de transporte (viscosidad y conductividad térmica) calculadas a partir de las expresiones del modelo y las obtenidas por un simulador como el HYSYS son esencialmente iguales.

3. ESTRATEGIA CONVENCIONAL DE CONTROL PARA EL REACTOR DE REFORMADO DE METANO CON VAPOR

3.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se presentan los componentes básicos del sistema de control del horno – reactor de reformado de gas natural con vapor de agua, cuyo modelo fue desarrollado en el capítulo anterior. Estos componentes básicos son: los sensores – transmisores de flujo, temperatura y fracción de Hidrógeno; las válvulas de control y los controladores. Se muestran las ecuaciones que describen la dinámica de estos elementos de control.

Para estudiar la linealidad del proceso se efectuaron variaciones tipo escalón en los flujos de gas combustible y vapor de reacción para determinar sus efectos en la temperatura y la fracción de Hidrógeno del gas efluente del reactor.

Luego, se estudia la estrategia de control existente en un reactor multitubular vertical, en el cual tiene lugar el reformado de gas natural. Esta estrategia es convencional y consiste en controlar la temperatura del gas efluente del reactor, manipulando el flujo de gas combustible. En esta planta se miden y controlan los flujos del gas de proceso y del vapor de reacción. La relación molar se calcula fijando el valor deseado de flujo de vapor.

Con la información sobre la linealidad del proceso, se encuentra un modelo de una función de transferencia de primer orden más tiempo muerto, que relaciona las variables controlada y manipulada. Con el modelo obtenido y utilizando las reglas de sintonía de síntesis del controlador (Smith y Corripio, 1997), se determinan los parámetros de un controlador PID.

Finalmente, se realizan pruebas escalón en el valor de referencia de la temperatura del gas producto y en el flujo del gas de carga y se analiza el desempeño de la estrategia para estabilizar el proceso.

3.2 COMPONENTES BÁSICOS DEL SISTEMA DE CONTROL

Los tres elementos básicos para el sistema de control son: la válvula de control, el conjunto sensor – transmisor y el controlador.

3.2.1 Válvulas de control. Si se considera constante la caída de presión a través de la válvula, su dinámica se puede describir así:

$$\tau_{v} \frac{df_{i}(t)}{dt} = K_{v}m(t) - f_{i}(t)$$
 (68)

Donde:

- $f_i(t)$ = señal de flujo en Kg/h para vapor y M³estd/h para gases.
- M(t) = señal de salida del controlador, % SC.
- τ_v = constante de tiempo de la válvula, min.
- *K_v* = ganancia de la válvula, [(Kg/h) / % SC, para vapor o (M³est/h) / % SC para gases].

3.2.2 Sensor – Transmisor. La dinámica del conjunto sensor – transmisor puede representarse por:

$$\tau_T \frac{dc(t)}{dt} = K_T \big[f_i(t) - LIR \big] - c(t)$$
(69)

Donde :

- c(t) = señal de la salida del transmisor, % ST.
- τ_{T} = constante de tiempo del transmisor, min.
- K_T = ganancia del transmisor, [% ST / K para temperatura, % ST / % mol Hidrógeno en el producto gaseoso].
- LIR = límite inferior del rango.

3.2.3 Controlador. La dinámica del controlador se puede expresar como:

$$m(t) = CTRL \{ C^*, e(t) \}$$
 (70)

Para controladores en cascada, el secundario, el valor de referencia es dado por:

valor de referencia
$$(t) = CTRL \{ C^*, e(t) \}$$
 (71)

Donde :

e(t) = error, % ST.

 C^* = señal de referencia, % ST.

3.2.4 Algoritmo PID. Los parámetros de un controlador Proporcional, Integral y Derivativo se relacionan por la siguiente expresión:

$$m(t) = \overline{m} + K_c e(t) + \frac{K_c}{\tau_I} \int e(t) dt + K_c \tau_D \frac{de(t)}{dt}$$
 (72)

Donde :

- K_c = ganancia del controlador, % SC / % ST
- τ_l = tiempo integral, min.
- τ_D = tiempo derivativo, min.

Se utilizo una aproximación a los controladores industriales modificando la ecuación del PID para incluir la realimentación de la integral y derivar la variable de control para evitar los grandes sobresaltos que se presentan cuando se utiliza la derivada del error.

Para la sintonización de los parámetros se utilizó el método de síntesis del controlador (Smith y Corripio, 1997).

3.3 ESTUDIO DE LA LINEALIDAD DEL PROCESO

Para determinar la linealidad del proceso en la región de operación normal, se evaluaron las ganancias entre la temperatura y la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso del reactor (variables controladas) y los flujos de combustible y vapor de reacción (variables manipuladas). Se manipula el flujo de vapor par poder variar la relación molar entre el vapor y la carga (gas natural), como se verá mas adelante cuando se estudia la estrategia de control convencional para este proceso. La relación molar " $R_{\nu c}$ " debe mantenerse dentro de ciertos límites para poder garantizar la estequiometría de la reacción de reformado.

En las Figuras 14 y 15 se presentan las variaciones de las ganancias del proceso con los flujos de vapor y de gas combustible. Estas figuras muestran que las ganancias del proceso se pueden considerar lineales en los rangos de variación de los flujos de gas combustible y de vapor para la operación del proceso. Las ganancias del proceso con respecto al flujo de gas combustible son positivas, debido a que el aumento en el flujo de gas combustible aumenta la cantidad de calor al sistema catalizador y mezcla reaccionante, aumentando la temperatura y la conversión en el gas producto. En el caso del flujo de vapor – carga sobre la temperatura y la conversión. Con el flujo de gas combustible constante, Al aumentar el vapor, se tiene la misma cantidad de calor para una masa mayor de catalizador y mezcla reaccionante, lo cual reduce la temperatura y la conversión.



Figura 14. Variación de las ganancias con el flujo de gas combustible



Figura 15. Variación de las ganancias con el flujo de vapor

3.4 ESTRATEGIA DE CONTROL DE LA TEMPERATURA DE SALIDA DEL PRODUCTO GASEOSO

En esta estrategia utilizada en unidades convencionales (Haldor, 1965 y Alatiqui, 1989) se controla la temperatura de salida de los gases de reacción, por un arreglo en cascada de dos controladores: uno de temperatura (primario), que envía el valor de referencia a otro de flujo (secundario), que regula la cantidad de gas combustible que entra al horno. La temperatura del gas producto es una medida indirecta de la conversión, bajo la restricción de que los flujos de vapor y de gas natural se mantengan en su valor deseado por medio de controladores de flujo. El gas natural (gas de carga) generalmente proviene de otra planta por lo que su flujo no es controlado en esta unidad y es una perturbación para el proceso, por esta razón la medición de la temperatura del producto gaseoso a la salida del reactor no es una indicación precisa de la conversión. Para mantener el flujo de vapor, en la proporción exacta requerida por la reacción de reformado, se utiliza un relacionador que recibe como entradas la señal del transmisor de flujo de gas natural, y la relación molar entre el vapor y la carga "R*", fijada por la estequiometría. El relacionador calcula el flujo molar de vapor y entrega como salida flujo másico de vapor necesario (valor de referencia al controlador de flujo de vapor), para mantener la conversión deseada en el proceso, ver Figura 16.

VAPOR, kg/h



GAS COMBUSTIBLE, m³est/h

Figura 16. Esquema de control convencional

Para evaluar el desempeño de la estrategia de control, en primer lugar, se sintonizaron los controladores de flujo realizando variaciones de 5 % SC en la salida de cada controlador y registrando los cambios en los correspondientes flujos. Las funciones de transferencia y los parámetros calculados son:

Para el flujo de carga:

$$Fc(s) = \left(\frac{1.13}{3.0s+1}\right) Xc(s)$$
 (73)

 $K_c = 0.880 \% \text{ SC} / \% \text{ST}, \qquad \tau_I = 3.0 \text{ min.}, \quad \tau_D = 0.0 \text{ min.}$

Para el flujo de vapor:

$$Fv(s) = \left(\frac{0.85}{3.6s+1}\right) Xv(s)$$
 (74)

 K_c = 1.17 % SC / %ST, τ_l = 3.6 min., τ_D = 0.0 min.

Para el flujo de gas combustible:

$$Fg(s) = \left(\frac{0.94}{3.0s+1}\right) Xg(s)$$
 (75)

 $K_c = 1.07 \% \text{ SC} / \% \text{ST}, \tau_l = 3.0 \text{ min.}, \tau_D = 0.0 \text{ min.}$

Los parámetros de los controladores se hallaron a partir de las funciones de transferencia, utilizando las reglas de sintonización propuestas por el método de síntesis del controlador (Smith y Corripio, 1997). Se realizaron pruebas de desempeño en lazo cerrado (automático) como se muestra en la Figura 17.

En esta estrategia y en las que se proponen en los siguientes capítulos, cada variable controlada y su respectivo valor de referencia, se convierten de unidades de ingeniería a porcentaje de salida del transmisor "% ST" y son retroalimentadas al controlador, el cual las compara y genera un error base para ejecutar su algoritmo de corrección y producir una señal de salida en porcentaje "% SC". Las

señales de salida de los controladores son las que operan las válvulas por lo tanto se puede relacionar directamente "% ST" con "% de apertura" de las válvulas.

El desempeño de cada uno de los lazos de control del flujo de vapor de reacción (ver Figuras 17a y 17c) y gas combustible (ver Figuras 17b y 17d) con los parámetros de sintonización hallados, es aceptable. Cuando se modifican los valores de referencia, el controlador en cada lazo responde de manera rápida y sin sobrepasarse para llevar el proceso al nuevo valor deseado y alcanzar el estado estable en corto tiempo, como se observa en la Figura 17.

En segundo lugar, para sintonizar el controlador de la temperatura del gas producto de la reacción (primario), se puso en automático el controlador de flujo de gas combustible (secundario) y en manual el controlador primario y se efectuaron cambios escalón en su salida. La curva de respuesta obtenida se presenta en la Figura 18.

La Figura 18 muestra que al aumentar la salida del controlador (valor de referencia al controlador de flujo de gas combustible, % SC) aumenta la señal del transmisor de temperatura del gas producto (% ST). Esta era la tendencia esperada, a mayor flujo de gas combustible, mayor temperatura. Con la información de la curva de respuesta se utilizaron los métodos Fit 3 y ARX para realizar la identificación del sistema.



Figura 17. Desempeño de los controladores de flujo de vapor y gas combustible

La ganancia que relaciona la temperatura con el flujo de gas combustible es positiva y establece que el controlador de temperatura es de acción directa. Por medio de los métodos Fit3 y ARX se obtiene la función de transferencia siguiente:

$$T(s) = \left(\frac{2.58e^{-4.36s}}{14s+1}\right) F_g(s)$$
(76)



Figura 18. Curva de respuesta de la variable controlada temperatura a un cambio escalón en la variable manipulada flujo de gas combustible

La ganancia que relaciona la temperatura con el flujo de gas combustible es positiva y establece que el controlador de temperatura es de acción directa. Por medio de los métodos Fit3 y ARX se obtiene la función de transferencia siguiente:

$$T(s) = \left(\frac{2.58e^{-4.36s}}{14s+1}\right) F_g(s)$$
(76)

En la Figura 19 se presenta la comparación entre los datos del proceso y los calculados para las funciones de transferencia por los dos métodos. En esta gráfica se observa que la función de transferencia hallada reproduce aceptablemente los datos de proceso.



Figura 19. Comparación entre datos de planta y simulados

Con la función de transferencia así obtenida y partiendo de las reglas de sintonización propuestas por el método de síntesis del controlador (Smith y Corripio, 1997), se obtuvieron los siguientes parámetros para el controlador de temperatura de salida de los gases de reacción:

$$K_c$$
 = 1.0 % SC / %ST, τ_l = 14.0 min., τ_D = 0.0 min.

Para evaluar el desempeño del lazo de control con los parámetros de sintonización hallados, se puso en automático el controlador de temperatura de los

gases a la salida del reactor y se realizaron cambios en el valor de referencia de la temperatura (ver Figura 20) y en el flujo de gas natural (ver Figura 21).

En la Figura 20 se presenta la temperatura del gas producto, su valor deseado, la salida del controlador y su efecto en la fracción de Hidrógeno del gas producto. Se observa que el controlador responde rápidamente para llevar la variable controlada de su valor inicial de 71.42 % ST (1049 K) a su nuevo valor deseado de 75.60 % ST (1063 K), ver Figura 20a. El controlador aumenta el flujo de gas combustible, incrementando su salida de 47.12 % SC a 48.58 % SC (3131.55 m³est/h a 3228.58 m³est/h, ver Figura 20c). La fracción de Hidrógeno aumenta de 39.78 % ST a 40.25 % ST (39.78 % mol a 40.25 % mol, ver Figura 20b). El aumento de 0.47 en la fracción molar de Hidrógeno en el producto gaseoso, se debe a que la conversión aumenta con la temperatura. En esta estrategia no existe un controlador de la fracción de Hidrógeno que conserva la cantidad del Hidrógeno en un valor deseado. Las variaciones en el flujo del gas combustible no son tan grandes para saturar ó llevar a operar el proceso a los límites de la salida del controlador (ver Figura 20c). El flujo de vapor de reacción se mantuvo constante en 72.91 % SC (15268.37 kg/h, ver Figura 20d).



Figura 20. Desempeño del controlador de gas combustible a cambios en el valor de referencia de temperatura

En este proceso las fluctuaciones en el gas de carga son las perturbaciones al proceso. Para evaluar el efecto de esta perturbación sobre el proceso, se realizó un cambio escalón en el flujo de gas de carga de 69.84 % SC a 74.34 % SC (3599.2 m³est/h a 3831.11 m³est/h) y se evaluó el desempeño de cada estrategia de control para eliminar esta perturbación sobre el proceso, ver Figura 21.

La variación en el flujo de gas de carga causa un descenso en la temperatura de la mezcla reaccionante de 71.42 % ST a 69.6 % ST (1049 K a 1042.9 K), ver Figura 21a. Para poder mantener la temperatura en el valor deseado de 1049 K el controlador aumenta el flujo de gas combustible, incrementando su salida de 47.12 % SC a 49.73 % SC (3131.55 m³est/h a 3305,0 m³est/h ver Figura 21c). En la Figura 21b se observa que el sensor de contenido de hidrogeno no registra un descenso en la fracción molar del gas que sale del reactor, pero luego de aumentar el flujo de gas combustible para alcanzar el valor de temperatura deseado, la fracción de Hidrógeno aumenta ligeramente de 39.78 % a 40% (39.78 % mol a 40% mol), indicando que el control de temperatura no es suficiente para mantener la conversión en un valor deseado. En la Figura 21d se presenta una variación en el flujo de vapor de 15268.37 kg/h a 16036.91 kg/h (72.91 % SC a 76.58 % SC) debido a que el relacionador establece una relación molar fija entre el gas de proceso y el vapor. La estrategia tiene un desempeño aceptable para rechazar las perturbaciones sobre el proceso de una forma lenta para evitar sobre pasos en la temperatura de salida del reformador.

Para evaluar cuantitativamente el desempeño de una estrategia de control, se utilizan índices que miden por ejemplo el tiempo que demora un proceso en estabilizarse, la máxima desviación de la variable controlada de su valor deseado y el error acumulado en el tiempo. Estos se definen en el Capitulo 6.


Figura 21. Desempeño del controlador de gas combustible a variaciones en

el gas de carga

3.5 RESUMEN

En este capítulo se presentaron las expresiones matemáticas que describen el comportamiento dinámico de los sensores – transmisores de flujo, temperatura y fracción de Hidrógeno; las válvulas de control y los controladores que son los componentes básicos del sistema de control del horno – reactor de reformado de gas natural con vapor de agua. Se efectuaron variaciones tipo escalón en los flujos de gas combustible y vapor de reacción, con el objeto de estudiar la linealidad del proceso.

Se analizó la estrategia de control convencional que consiste en controlar la temperatura del gas efluente del reactor, manipulando el flujo de gas combustible. En esta planta se miden y controlan los flujos de gas de proceso y el vapor de reacción. De la estequiometría de las reacciones se establece la relación molar entre el vapor y la carga (gas de proceso) y con la lectura del transmisor del flujo del gas natural se calcula valor deseado de flujo de vapor.

Basados en la información sobre la linealidad en la región de operación del proceso, se halló un modelo de una función de transferencia de primer orden más tiempo muerto, que relaciona las variables controlada y manipulada. Con el modelo obtenido y utilizando las reglas de sintonía de síntesis del controlador

(Smith y Corripio, 1997), se determinaron los parámetros de un controlador Proporcional Integral Derivativo (PID). Finalmente, se realizaron pruebas escalón en el valor de referencia de la temperatura del producto gaseoso y en el flujo del gas de carga, para analizar el desempeño de la estrategia de control del proceso.

4. ESTRATEGIA MULTIVARIABLE DE CONTROL PARA EL REACTOR DE REFORMADO DE METANO CON VAPOR

4.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se estudia inicialmente la interacción entre los lazos de control, utilizando el método de las ganancias relativas para definir la forma en que deben acoplarse las variables controladas y manipuladas. Luego, se estudia la estabilidad del proceso en lazo abierto y en lazo cerrado. Un sistema multivariable es estable en lazo abierto, si todos los polos de la matriz función de transferencia están en el semiplano izquierdo del eje real; de otro modo es inestable. En lazo cerrado se analiza la estabilidad estudiando la función de transferencia del sistema, el controlador posee acción integral lo cual significa que puede ser PI, PID O cualquier controlador multivariable con retroalimentación que incluya acción integral (Grossdidier, 1985). Si todas las raíces se encuentran ubicadas en el sistema semiplano izquierdo del eje real, el es estable en lazo cerrado (Ogunnaike, 1994). Adicionalmente, el criterio de estabilidad de Nyquist para un proceso multivariable en lazo cerrado establece que si la curva del determinante de la ecuación característica del sistema (ecuación 46) circunscribe el punto (-1,0), el sistema en lazo cerrado es inestable (Luyben, 1997).

Luego, se propone una estrategia de control multivariable para la fracción de Hidrógeno y la temperatura de salida del gas producto. Después, se realiza la sintonización de los controladores: el propuesto por Maximino Medina (1991) y el que utiliza desacopladores. El método de Medina, consiste en utilizar como controlador secundario el más rápido y sintonizarlo de la forma estándar y, para el controlador primario, se utilizan las reglas de sintonía desarrolladas por Medina. El uso de los desacopladores se basa en eliminar la interacción entre lazos de control, utilizando bloques que anulan el efecto que tiene un lazo sobre los demás.

4.2 INTERACCIÓN ENTRE LAZOS DE CONTROL

Para estudiar la interacción entre las variables controladas y manipuladas en el modelo, se realizó una prueba en tres etapas: en la primera etapa se puso el

controlador de temperatura en manual, se fijó su salida y se dejó que el proceso se estabilizara. La segunda etapa, se realizó dos horas después de la estabilización y consistió en un cambio en el flujo de vapor de reacción. En la tercera etapa, se puso en automático el controlador de temperatura tres horas después del paso anterior, como se muestra en la Figura 22.

En la prueba se realizan cambios en el flujo de vapor, fijando la salida del respectivo controlador en 73.02 % SC y en 78.02 % SC (15264.64 kg/h y 16309.9 kg/h). En la planta industrial cambios de esta magnitud solo se pueden realizar si los límites dentro de los cuales se controla la temperatura de reacción lo permiten, normalmente estos limites están dentro del rango del valor de referencia ± 2 K.

En esta Figura se muestra que cuando se abre la válvula de vapor de 73.02 % SC a 78.02 % SC (ver Figura 22a), la fracción del Hidrógeno en el producto gaseoso se reduce de 39.76 % ST a 38.37 % ST (39.76 % mol a 38.37 % mol, ver Figura 22b). Al aumentar el flujo de vapor, con el flujo de gas combustible constante (controlador de temperatura en manual, ver Figura 22c), parte del calor generado en el horno se utiliza para calentar la masa adicional de vapor, reduciendo la cantidad de calor disponible para la conversión del gas natural; lo cual se refleja en la disminución de la temperatura de 71.4 % ST a 67.48 % ST (1048.9 K a 1035.1 K), ver Figura 22d. Al ponerse en automático el controlador de temperatura, éste lleva la temperatura del gas producto a su valor deseado de

71.4 % ST (1048.9 K), aumentando la conversión del gas natural, lo cual se verifica en el incremento de la fracción del Hidrógeno en el producto gaseoso de 38.37 % ST a 38.82 % ST (38.37 % mol a 38.82, ver Figura 22b).



Figura 22. Interacción entre las variables controladas y manipuladas

La interacción presentada es de competencia, lo cual significa que si se cierra el lazo de control de temperatura, se produce un cambio en la fracción molar del Hidrógeno en sentido opuesto al causado por el cambio en el flujo de vapor inicial; efecto conocido como interacción negativa.

4.3 ACOPLAMIENTO DE VARIABLES MANIPULADAS Y CONTROLADAS

El proceso del reformado de gas natural con vapor, puede ser representado por un sistema de dimensión 2 X 2 (ver Figura 23), dos variables controladas (temperatura y fracción de Hidrógeno) y dos variables manipuladas (flujo de gas combustible y flujo de vapor). Se deben agrupar en pares la variable controlada y la variable manipulada que tiene mayor efecto sobre ella. Para medir la influencia entre las variables manipuladas y controladas, se utiliza el método de las ganancias relativas.

Se utilizó el método de Bristol (1966) para evaluar la interacción entre las variables manipuladas. Este método utiliza las ganancias relativas definidas como la relación entre las ganancias en lazo abierto y lazo cerrado. La ganancia en lazo abierto es la relación de cambio entre una variable controlada y una variable manipulada, manteniendo las demás variables manipuladas constantes. La ganancia en lazo cerrado es una relación similar a la anterior, pero en este caso, las demás variables controladas son las que se mantienen constantes.



Figura 23. Esquema general de un sistema 2 X 2

En un sistema de 2 X 2 las ganancias en lazo abierto se expresan así:

$$K_{11} = \frac{\Delta c_1}{\Delta m_1} \left[m_2 \quad K_{12} = \frac{\Delta c_1}{\Delta m_2} \right] m_1$$

$$K_{21} = \frac{\Delta c_2}{\Delta m_1} \left[m_2 \quad K_{22} = \frac{\Delta c_2}{\Delta m_2} \right] m_1$$
(77)

Y las ganancias en lazo cerrado, por:

$$K'_{11} = \frac{\Delta c_1}{\Delta m_1} c_2 \qquad K'_{12} = \frac{\Delta c_1}{\Delta m_2} c_2$$

$$K'_{21} = \frac{\Delta c_2}{\Delta m_1} c_1 \qquad K'_{22} = \frac{\Delta c_2}{\Delta m_2} c_1$$
(78)

Y finalmente, las ganancias relativas se expresan por:

$$\omega_{11} = \frac{K_{11}}{K'_{11}} \qquad \omega_{12} = \frac{K_{12}}{K'_{12}}$$

$$\omega_{21} = \frac{K_{21}}{K'_{21}} \qquad \omega_{22} = \frac{K_{22}}{K'_{22}}$$
(79)

La regla para hacer pares entre variables manipuladas y controladas (Bristol, 1966) es:

...Para minimizar el efecto de interacción en sistemas de control multivariables, se hacen parejas entre las variables controladas y manipuladas teniendo en cuenta que las ganancias relativas para cada par estén cercanas a la unidad...

Las ganancias en lazo abierto y cerrado y, relativas; se evaluaron con los datos obtenidos de las pruebas escalón en las variables manipuladas, moviendo una a la vez y manteniendo la otra constante. Se registró la información de los efectos en las variables controladas: temperatura y fracción molar del Hidrógeno a la salida del reactor.

El sistema se identificó utilizando los métodos Fit 3 y ARX (del método Fit 3 se calcula el tiempo muerto y se utiliza como índice en el modelo ARX), obteniéndose la siguiente matriz de funciones de transferencia:

$$\binom{T(s)}{X(s)} = \begin{pmatrix} \frac{-5.62s + 2.58}{30.52s^2 + 16.18s + 1} & \frac{0.27s - 0.83}{5.57s^2 + 15.24s + 1} \\ \frac{-1.22s + 0.47}{40.71s^2 + 18.13s + 1} & \frac{-0.32}{8.74s + 1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_g(s) \\ R_{vc}(s) \end{pmatrix}$$
(80)

Las ganancias en lazo abierto son:

$$K_{TF_g} = 2.58$$
 $K_{TR_{vc}} = -0.83$
 $K_{XF_g} = 0.47$ $K_{XR_{vc}} = -0.32$

Las ganancias en lazo cerrado son:

$$K'_{TF_g} = 1.36$$
 $K'_{TR_{vc}} = 0.93$
 $K'_{XF_g} = -0.52$ $K'_{XR_{vc}} = -0.17$

Finalmente, las ganancias relativas son:

$$\omega_{TF_g} = 1.89 \qquad \omega_{TR_{vc}} = -0.89$$
$$\omega_{XF_g} = -0.89 \qquad \omega_{XR_{vc}} = 1.89$$

En forma de matriz, las ganancias relativas se expresan así:

$$\omega = \begin{pmatrix} 1.89 & -0.89 \\ & & \\ -0.89 & 1.89 \end{pmatrix}$$

Las ganancias relativas no son cercanas a la unidad, la diagonal principal es positiva, pero la diagonal inversa es negativa, indicando interacción negativa. Para evitar la interacción negativa se hacen pares de variables así:

...La temperatura de salida del gas producto, con el flujo de gas combustible y la fracción en volumen de Hidrógeno en el gas producto, con la relación vapor – carga...

Si el controlador de temperatura varía el flujo de gas combustible en 1% SC, con el lazo de control de la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso en manual, el cambio en la temperatura de este gas, utilizando la ganancia en lazo abierto es:

$$\Delta T = K_{TF_g} \Delta F_g = 2.58 \% ST \ (1.43 K)$$

y la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso cambiará por:

$$\Delta X = K_{XF_g} \Delta F_g = 0.47 \% ST \ (0.47 \% mol)$$

Si el controlador de la fracción de Hidrógeno se coloca en automático, tratará de retornar la fracción molar del Hidrógeno a su valor deseado. El cambio necesario en la relación vapor – carga es:

$$\Delta R_{vc} = \frac{-\Delta X}{K_{XR_{vc}}} = 1.47 \text{ mol} / \text{mol}$$

El cambio total en la temperatura del gas de reacción es:

$$\Delta T = K_{TF_g} \Delta F_g + K_{TR_{vc}} \Delta R_{vc} = 2.58 - 1.52$$
$$\Delta T = 1.36 \% ST \ (0.76 K)$$

Se observa que el cambio producido por la interacción entre los dos controladores es de -1.52 % ST (0.85 K) y actúa en sentido contrario al efecto del flujo de gas combustible sobre la temperatura del gas producto 2.58 % ST (1.43 K). La ganancia de cada controlador se reduce por un factor de 1.89 (la ganancia relativa).

Para estudiar la estabilidad del sistema se utilizan dos métodos en lazo abierto, para analizar si el sistema por sí solo es estable y en lazo cerrado para determinar el efecto del conjunto proceso más controlador.

4.4.1 Estabilidad en lazo abierto. Un sistema multivariable es estable si todos los polos de la matriz función de transferencia están en el semiplano izquierdo del eje real; de otro modo es inestable. El determinante de la matriz de las funciones de transferencia de la ecuación 80 es:

$$\begin{vmatrix} -5.62s + 2.58 & 0.27s - 0.83 \\ \hline 30.52s^2 + 16.18s + 1 & 5.57s^2 + 15.24s + 1 \\ \hline -1.22s + 0.47 & -0.32 \\ \hline 40.71s^2 + 18.13s + 1 & 8.74s + 1 \end{vmatrix} = 0$$
 (81)

Resolviendo el determinante se obtiene la siguiente ecuación:

$$\left(\frac{-5.62s + 2.58}{30.52s^2 + 16.18s + 1}\right)\left(\frac{-0.32}{8.74s + 1}\right) - \left(\frac{-1.22s + 0.47}{40.71s^2 + 18.13s + 1}\right)\left(\frac{0.27s - 0.83}{5.57s^2 + 15.24s + 1}\right) = 0$$

Los polos de esta ecuación son:

$$s = -2.670, s = -0.460, s = -0.381, s = -0.114, s = -0.071, s = -0.067, s = -0.064$$

Ningún polo se encuentra en el semiplano derecho del eje real, lo cual significa que el proceso es estable en el lazo abierto.

4.4.2 Estabilidad en lazo cerrado. Los polos de la matriz función de transferencia en lazo cerrado son las raíces del polinomio resultante de la evaluación del determinante:

$$\left|\left(I+GG_{c}\right)\right|=0$$
 (83)

Donde la matriz función de transferencia del proceso es:

$$G(s) = \begin{pmatrix} \frac{-5.62s + 2.58}{30.52s^2 + 16.18s + 1} & \frac{0.27s - 0.83}{5.57s^2 + 15.24s + 1} \\ \frac{-1.22s + 0.47}{40.71s^2 + 18.13s + 1} & \frac{-0.32}{8.74s + 1} \end{pmatrix}$$
(84)

Para la matriz función de transferencia del controlador, se utiliza un controlador con acción integral lo cual significa que puede ser un controlador PI, PID o cualquier controlador multivariable con retroalimentación que incluya acción integral (Grossdidier,1985). A partir de las funciones de transferencia para los pares a temperatura de salida del gas producto, con el flujo de gas combustible y la fracción en volumen de Hidrógeno en el gas producto, con la relación vapor – carga y utilizando las reglas de sintonización propuestas por el método de síntesis del controlador (Smith y Corripio, 1997), se obtuvieron los siguientes parámetros para los controladores de temperatura y de la fracción de Hidrógeno a la salida de los gases de reacción:

Para el controlador de la temperatura de salida de los gases de reacción:

$$K_c$$
 = 1.0 % SC / % ST, τ_l = 14.0 min., τ_D = 0.0 min

• Para el controlador de la fracción de Hidrógeno a la salida de los gases de reacción:

$$K_c$$
 = -3.13 % SC / % ST, τ_l = 8.75 min., τ_D = 0.0 min

Reemplazando estos valores en la matriz de funciones de transferencia para los controladores, se tiene:

$$G_{c}(s) = \begin{pmatrix} 1.0\left(1 + \frac{1}{14s}\right) & 0\\ 0 & -3.13\left(1 + \frac{1}{8.75s}\right) \end{pmatrix}$$
(85)

Reemplazando las ecuaciones 84 y 85 en la ecuación 83:

$$\begin{vmatrix} 1 + \left(\frac{-5.62s + 2.58}{30.52s^2 + 16.18s + 1}\right) \left(\frac{14s + 1}{14s}\right) & \left(\frac{0.27s - 0.83}{5.57s^2 + 15.24s + 1}\right) \left(\frac{-27.39s - 3.13}{8.75s}\right) \\ & \left(\frac{-1.22s + 0.47}{40.71s^2 + 18.13s + 1}\right) \left(\frac{14s + 1}{14s}\right) & 1 + \left(\frac{-0.32}{8.74s + 1}\right) \left(\frac{-27.39s - 3.13}{8.75s}\right) \end{vmatrix} = 0$$

(86)

Las raíces que se obtienen al resolver el determinante son:

$$s = -2.76, s = -0.40, s = -0.07 + 0.26i, s = -0.07 - 0.026i,$$

 $s = -0.25, s = -0.11, s = -0.07, s = -0.07, s = -0.05$

Como todas las raíces se encuentran ubicadas en el semiplano izquierdo del eje real el sistema es estable en lazo cerrado (Ogunnaike, 1994).

Adicionalmente, el criterio de estabilidad de Nyquist para un proceso multivariable en lazo cerrado establece que si la curva del determinante de la ecuación característica del sistema (ecuación 46) circunscribe el punto (-1,0), el sistema en lazo cerrado es inestable (Luyben, 1997). En la Figura 24 se presenta la gráfica de la ecuación 46 en el dominio de la frecuencia. Se observa que la curva no encierra el punto (-1,0) por lo cual el sistema es estable en lazo cerrado.



Figura 24. Estabilidad en lazo cerrado para un sistema 2 X 2

4.5 ESTRATEGIA DE CONTROL DEL HORNO CON CONTROLADORES DE LA TEMPERATURA Y LA FRACCIÓN DE HIDRÓGENO DEL PRODUCTO GASEOSO

En esta estrategia es una modificación de la estrategia convencional. La modificación consiste en adicionar un medidor de la fracción de Hidrógeno y un controlador de cantidad Hidrógeno en el producto gaseoso en el valor deseado. El controlador de la fracción de Hidrógeno trabaja en cascada con el controlador del flujo de vapor, a través del relacionador. El controlador de la fracción de Hidrógeno (primario) mantiene la fracción de Hidrogeno en el producto gaseoso enviando como salida la relación molar entre el vapor y la carga (valor deseado R*) al relacionador, en donde conociendo el flujo del gas natural, se determina el flujo de vapor y se envía como valor de referencia al controlador del flujo de vapor (secundario). El lazo de control temperatura posee la misma configuración que en la estrategia convencional, ver Figura 25.

Para evaluar los parámetros de sintonización de los controladores, se utilizaron los resultados de las pruebas escalón, realizadas para determinar las parejas entre variables manipuladas y controladas en la sección anterior.

VAPOR, kg/h



GAS COMBUSTIBLE, $m^3 est/h$



4.5.1 Sintonización utilizando el método de Medina. Se utilizó el método propuesto por Maximino Medina en 1991 (ver Apéndice A) para sintonizar los controladores interactuantes. En primer lugar, partiendo de los pares entre variables, se determina cuál de los lazos es más rápido; es decir, el que posee la menor constante de tiempo. El lazo más rápido (control de la fracción de Hidrógeno) se sintonizó, primero, utilizando las reglas de síntesis del controlador, con el otro lazo en manual. Luego, se sintoniza el lazo más lento (control de la

temperatura) con las reglas definidas por Medina, colocando en automático el lazo más rápido. En este método se considera que el lazo más lento tiene un menor efecto sobre el desempeño del más rápido, debido a que este último, reacciona con rapidez a las acciones del más lento. La sintonización obtenida de esta forma, contempla totalmente la interacción entre los dos lazos.

Los parámetros calculados son:

• Para el controlador de la temperatura de salida de los gases de reacción:

$$K_c$$
 = 0.42 % SC/% ST, τ_l = 14.0 min., τ_D = 0.0 min.

 Para el controlador de la fracción de Hidrógeno a la salida de los gases de reacción:

$$K_c$$
 = -12.01 % SC / % ST, τ_l = 7.2 min., τ_D = 0.0 min.

El desempeño de los controladores sintonizados con este método se estudia posteriormente, junto con el uso de los desacopladores.

4.5.2 Sintonización utilizando desacopladores. La interacción entre los dos lazos de control también puede eliminarse o reducirse utilizando desacopladores.

La matriz de funciones de transferencia nos da una indicación de cuándo los desacopladores pueden beneficiar el desempeño. La matriz de funciones de transferencia es:

$$\begin{pmatrix} T(s) \\ X(s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{TFg}(S) & G_{TR_{vc}}(S) \\ G_{XFg}(S) & G_{XR_{vc}}(S) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_g(s) \\ R_{vc}(s) \end{pmatrix}$$
(86)

Si las parejas entre las variables manipuladas y controladas poseen ganancias relativas que están muy lejos de la unidad, entonces los desacopladores pueden ayudar. La característica básica, es que en sistemas interactuantes los desacopladores afectan a cada lazo, como lo harían los demás lazos. La diferencia está en que el desempeño de cada lazo se hace independiente de la sintonización.

En la Figura 26 se presenta el diagrama de bloques para el horno de reformado. Los bloques $G_{XFg}(s)$ y $G_{RvcT}(s)$ representan la interacción entre los lazos de control de temperatura y de la fracción de Hidrógeno.

Para eliminar la interacción se instalaron dos desacopladores: los bloques $D_{X Fg}(s)$ y $D_{TRvc}(s)$, como se muestra en la Figura 27. El objetivo de los bloques desacopladores es eliminar el efecto que sobre la temperatura tiene el bloque $G_{XFg}(s)$ y sobre la fracción de Hidrógeno el bloque $G_{TRvc}(s)$. Es decir, el bloque D_X $_{Fg}(s)$ cancela el efecto que sobre la temperatura tiene el flujo de vapor (relación vapor – carga) y el bloque $D_{TRvc}(s)$ cancela el efecto del gas combustible sobre la fracción de Hidrógeno.



Figura 26. Diagrama de bloques del horno de reformado

Por álgebra de bloques los efectos anteriores son:

$$\frac{T(s)}{R_{vc}(s)} = D_{TR_{vc}}(s)G_{TFg}(s) + G_{TR_{vc}}(s) = 0$$

$$\frac{X(s)}{Fg(s)} = D_{XFg}(s)G_{XR_{vc}}(s) + G_{XFg}(s) = 0$$
(87)

Despejando se obtienen las funciones de transferencia de los dos desacopladores:

$$D_{TR_{vc}}(s) = -\frac{G_{TR_{vc}}(s)}{G_{TFg}(s)}$$

$$(88)$$

$$D_{X,Fg}(s) = -\frac{G_{XFg}(s)}{G_{TFg}(s)}$$

$$D_{X Fg}(s) = -\frac{G_{XFg}(s)}{G_{XR_{vc}}(s)}$$



Figura 27. Diagrama de bloques del horno de reformado con desacopladores

La sintonización de cada uno de los lazos de control de temperatura y de la fracción de Hidrógeno del gas producto, se realizó de forma independiente utilizando el método de síntesis del controlador.

Los parámetros calculados son:

• Para el controlador de la temperatura de salida de los gases de reacción:

$$K_c = 1.0 \% \text{ SC} / \% \text{ ST}, \tau_I = 14.0 \text{ min.}, \tau_D = 0.0 \text{ min}$$

• Para el controlador de la fracción de Hidrógeno a la salida de los gases de reacción:

$$K_c = -3.13 \% \text{ SC} / \% \text{ ST}, \qquad \tau_l = 8.75 \text{ min.}, \quad \tau_D = 0.0 \text{ min.}$$

4.5.3 Comparación entre el desempeño de las estrategias de control **utilizando el método de Medina y el uso de desacopladores**. Para evaluar el desempeño de la estrategia de control con los parámetros de sintonización hallados por el método de Medina y con el uso de desacopladores, se realizaron cambios en el flujo de gas de carga y en los valores de referencia de la fracción de Hidrógeno y de la temperatura.

En la Figura 28 se grafican las variables controladas, sus valores deseados y las salidas de los controladores. Se observa que cuando el tiempo es igual a una hora se realiza un cambio en el valor deseado de la temperatura de 71.42 % ST a 75.60 % ST (1049 K a 1063 K), en las estrategias de control de Medina y desacopladores, el controlador de temperatura responde rápidamente para restablecer la estabilidad en el proceso. La estrategia que utiliza desacopladores presenta un sobrepaso mayor que la estrategia de Medina, pero se estabiliza mas

rápidamente en el nuevo valor deseado de temperatura (ver, Figura 28a). El proceso se estabilizó en las dos estrategias aumentando el flujo de gas combustible de 47.11 % SC a 49.17 % SC (3131.55 m³est/h a 3268.48 m³est/h, ver Figura 28c). El cambio en el flujo de gas combustible es una perturbación en la fracción de Hidrógeno del producto gaseoso (aumenta con la temperatura). Aunque se da un mayor sobrepaso en la temperatura en la estrategia con desacopladores, sin embargo la desviación de la fracción de Hidrógeno se presenta durante un tiempo más corto (ver Figura 28b). El controlador de la fracción de Hidrógeno en las dos estrategias, responde rápidamente aumentando el flujo de vapor de 72.91 % SC a 75.1 % SC (15268.37 kg/h a 15727.0 kg/h, ver Figura 28d), para mantener la fracción del Hidrógeno en el valor deseado. Cuando el tiempo es igual a tres horas se realiza un cambio en el valor deseado de la fracción de Hidrógeno de 39. 78 % ST a 44.79 % ST (39.78 % mol a 44.79 % mol, ver Figura 28b), en las dos estrategias, el controlador de la fracción de Hidrógeno reacciona rápidamente llevando la fracción de Hidrógeno a su nuevo valor deseado y restableciendo la estabilidad en el proceso, reduciendo el flujo de vapor de 75.1 % SC a 51.18 % SC (15727.0 kg/h a 10717.81 kg/h, ver Figura 28d). La estrategia que utiliza desacopladores presenta un sobrepaso menor que la estrategia de Medina (ver, Figura 28b). La disminución en el flujo de vapor actúa como una perturbación que trata de aumentar la temperatura del producto gaseoso, porque disminuye la cantidad de la mezcla gas de proceso más vapor de reacción en el reactor, pero el controlador de temperatura actúa rápidamente reduciendo la cantidad de gas combustible de 49.17 % SC a 41.57 %SC (3268.48 m³est/h a 2763.28 m³est/h, ver Figura 28c).



Figura 28. Desempeño de los controladores de la fracción de Hidrógeno y de la temperatura a cambios en los valores de referencia

En este proceso las fluctuaciones en el gas de carga son las perturbaciones más importantes del proceso. Para evaluar el efecto de esta perturbación sobre el proceso, se realizó un cambio escalón en el flujo de gas de carga de 69.84 % SC a 74.34 % SC (3599.2 m³est/h a 3831.11 m³est/h) y se evaluó el desempeño de cada estrategia de control para eliminar esta perturbación sobre el proceso, ver Figura 29.

La variación en el flujo de gas de carga causó un descenso en la temperatura de la mezcla reaccionante de 71.42 % ST a 69.21 % ST (1049 a 1041.6 K) utilizando desacopladores y de 71.42 % ST a 68.72 % ST (1049 a 1040 K) con el método de Medina, ver Figura 29a. La fracción molar del Hidrógeno se reduce de 39.78 % ST a 39.42 % ST (39.78 % mol a 39.42 % mol, ver Figura 29b) utilizando desacopladores y para la estrategia de Medina se presenta una oscilación de 0.07 % ST (0.07 % mol) alrededor del valor de referencia. Para poder mantener la temperatura y la fracción del Hidrógeno a la salida del reactor en los valores deseados de 1049 K y 39.78 % mol respectivamente, el controlador de temperatura aumenta el flujo de gas combustible, incrementando su salida de 47.11% SC a 49.73 % SC (3131.55 m³est/h a 3305.7 m³est/h, ver Figura 29c) y el de la fracción de Hidrógeno aumenta su salida de 72.91 a 77.76 % SC (15268.37 kg/h a 16284.03 kg/h, ver Figura 29d).

Las perturbaciones y cambios en los valores de referencia, no hacen que las aperturas de las válvulas que regulan los flujos de vapor de reacción o gas combustible, estén cerca de los límites de saturación.

El desempeño de las dos estrategias de control: Método de Medina y utilizando desacopladores; es similar. Sin embargo, se puede observar que cuando se realizan cambios en los valores de referencia, las variables controladas se

estabilizan más rápido cuando se utilizan desacopladores que actúan eliminando la interacción entre los lazos. Para poder cuantificar el desempeño de estas dos estrategias, se utilizarán los índices de desempeño que se definen en el capítulo 6.



Figura 29. Desempeño de los controladores de la fracción de Hidrógeno y de la temperatura a perturbaciones en el flujo de carga de gas natural

4.6 RESUMEN

En este capítulo se estudio la interacción entre los lazos de control. Se utilizó el método de las ganancias relativas para definir las parejas entre las variables controladas y manipuladas. Luego, se estudia la estabilidad del proceso analizando los polos y las raíces de las correspondientes funciones de transferencia en lazo abierto y en lazo cerrado. En lazo cerrado se utiliza un controlador con acción integral, lo cual significa que puede ser PI, PID O cualquier controlador multivariable con retroalimentación que incluya acción integral (Grossdidier,1985). Adicionalmente, se utiliza el criterio de estabilidad de Nyquist para un proceso multivariable en lazo cerrado (Luyben, 1997).

Luego, se propuso una estrategia de control multivariable para poder controlar simultáneamente la fracción de Hidrógeno y la temperatura de salida del producto gaseoso. La sintonización de los controladores se realizó utilizando dos métodos: el propuesto por Maximino Medina (1991) y el uso de desacopladores, con el fin de eliminar la interacción entre los lazos de control. El método de Medina consiste en utilizar como controlador secundario el más rápido (el de la fracción de Hidrógeno) y sintonizarlo de la forma estándar; para el controlador primario (el de la temperatura) se utilizan las reglas de sintonía desarrolladas por Medina. Posteriormente, se configuraron dos desacopladores en la estrategia de control diseñados a partir de las funciones de transferencia del proceso. Finalmente, serealizaron pruebas para evaluar el desempeño de las estrategias cuando se

presentan perturbaciones o cambios en los valores de referencia de las variables controladas.

5. ESTRATEGIA DE CONTROL MULTIVARIABLE PREDICTIVO PARA EL REACTOR DE REFORMADO DE METANO CON VAPOR

5.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se propone una estrategia de control multivariable predictivo que modifica el esquema de control en el reactor, tomando como base los resultados del estudio de la interacción entre los lazos de control realizado en el capítulo anterior.

En esta estrategia se utiliza el algoritmo de Matriz Dinámica de Control MDC para controlar simultáneamente la temperatura y la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso, manipulando el flujo de gas combustible y la relación vapor – carga. Luego, se utiliza una modificación al algoritmo MDC que le permite mejorar su desempeño. La modificación al MDC propuesta en este trabajo consiste en adicionar a este algoritmo un nuevo parámetro denominado factor de aceleración

" Ω " que establece las veces que se debe ejecutar el algoritmo durante el tiempo que transcurre antes de enviar un nuevo valor en la señal de salida del controlador.

Posteriormente se estudia la estabilidad teniendo en cuenta que los algoritmos de control predictivo fueron desarrollados originalmente por grupos de trabajo de la industria, cuyo objetivo primario fue obtener un buen desempeño del sistema. Los análisis teóricos de estas técnicas han aparecido muy lentamente. Marchetti (1981), derivó una función de transferencia para un controlador predictivo que permite visualizar la dificultad para analizar la estabilidad de un sistema de una variable manipulada y una controlada y determinar el efecto de los parámetros del controlador sobre su estabilidad. En el caso de sistemas con mayor número de variables éste análisis es prácticamente imposible y se debe recurrir a la simulación para estudiar la estabilidad del sistema en lazo cerrado.

Para determinar los parámetros de sintonización de los controladores basados en la matriz dinámica de control se utilizan las reglas de sintonización propuestas por Cutler (1983) y en el caso del factor de aceleración propuesto en este trabajo se propone realizar una gráfica de la integral del error absoluto en la variable controlada contra el factor de aceleración. Se selecciona como factor de aceleración el valor para el cual la integral es mínima.

Finalmente, se analiza el desempeño de cada estrategia de control para eliminar perturbaciones o variaciones en los valores de referencia de la temperatura y de la fracción de Hidrógeno del producto gaseoso. El desempeño de cada estrategia de control se cuantifica utilizando los índices de desempeño, que nos permiten seleccionar la estrategia adecuada.

5.2 ESTRATEGÍA DE CONTROL DEL HORNO CON UN CONTROLADOR MULTIVARIABLE PREDICTIVO MDC (MATRIZ DINÁMICA DE CONTROL) PARA LA TEMPERATURA Y LA FRACCIÓN DE HIDRÓGENO DEL PRODUCTO GASEOSO

En esta estrategia es muy similar a la estrategia de control multivariable presentada en el capítulo anterior, pero para controlar la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso y la temperatura se sustituyen los dos controladores (PID) por un controlador multivariable predictivo basado en la Matriz Dinámica de Control " MDC". El controlador MDC esta en cascada con un controlador de flujo de gas combustible y con un controlador de flujo del vapor de reacción a través de un relacionador para los flujos de vapor y gas natural. En la salida el controlador

MDC envía los valores calculados como referencia de relación molar entre el vapor y la carga (valor deseado R*) y del flujo de gas combustible. Esta estrategia controla de manera independiente la temperatura y la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso de la reacción de reformado como se aprecia en la Figura 30.

Se utilizó el algoritmo de Matriz Dinámica de Control propuesto por Cutler (1983) y una modificación propuesta en esta tesis. Para diseñar el controlador se tomaron los resultados de las pruebas escalón realizadas para evaluar las ganancias relativas.

VAPOR, kg/h



GAS COMBUSTIBLE, *m³est/h*



5.2.1 Algoritmo de la Matriz Dinámica de Control. El algoritmo de la Matriz Dinámica de Control "MDC" se basa en un modelo de convolución discreto. Para procesos lineales y autoregulables, el modelo dinámico puede representarse por una sucesión finita de muestras de la curva escalón de respuesta, el grado de precisión depende del número de datos, *N*. En la Figura 31 se presenta una curva de respuesta escalón típica.


Figura 31. Curvas de respuesta escalón

A continuación se presenta la descripción matemática del algoritmo MDC para el caso de un sistema 1 X 1 variables (una variable controlada y ambios de la variable manipulada, así:

$$\Delta C = f(\Delta M_1, \Delta M_2, \dots \Delta M_n)$$
 (89)

El MDC utiliza el vector respuesta para predecir el valor futuro de la variable controlada. En cualquier instante de tiempo se supone que los valores futuros de la variable controlada, corresponden a los incrementos actuales y futuros en la variable manipulada, siguiendo el principio de superposición. Esto es, si un proceso puede ser representado razonablemente por un modelo dinámico lineal, el efecto de varios movimientos puede ser aditivo y se puede predecir el comportamiento global. En la Figura 32 se presenta gráficamente la respuesta global de la variable controlada como la suma de las repuestas causadas por cambios escalones realizados en la variable manipulada.



Figura 32. Principio de superposición

El principio de superposición puede expresarse como:

$$C_{1} = C_{1}^{0} + a_{1} \Delta M_{0}$$
 (90)
$$C_{2} = C_{2}^{0} + a_{2} \Delta M_{0} + a_{1} \Delta M_{1}$$
 (91)

$$C_{k} = C_{k}^{0} + a_{k} \Delta M_{0} + a_{k-1} \Delta M_{1} + a_{k-n+1} \Delta M_{n-1}$$
(92)

.

Donde C_k es la salida del modelo en el k- esimo período de muestreo, $M_{k\cdot i}$ es la entrada al modelo en el instante k-i. a_i son los coeficientes de la curva de respuesta, N es el número de términos muestreados en la secuencia de la curva de respuesta escalón. C^o , sería el valor de la variable controlada, si sobre la variable manipulada no se realiza ningún movimiento ahora o en el futuro y si no existe ninguna perturbación. Esto significa que la variable controlada sigue respondiendo a los cambios en la variable manipulada, hechos con anterioridad. Si se considera que se realizan k movimientos futuros en la variable manipulada, k es el horizonte de salida del controlador. Las ecuaciones 90 a 92 se expresan en notación matricial, así:

$$C = C^0 + A\Delta M_0$$
 (93)

donde A es la matriz dinámica y se expresa por:

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_2 & a_1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & a_1 \\ a_{k-N+1} & \vdots & \vdots & \vdots & a_{k-N+1} \end{bmatrix}$$
(94)

El algoritmo, basado en la matriz dinámica de control, minimiza el error predicho en un número finito N de instantes de muestreo. El vector error, contiene las diferencias entre los valores de referencia (r) y los valores predichos de la variable de control en los siguientes N instantes de muestreo.

El vector error se obtiene, así:

$$e = r - c = r - C^{0} - A\Delta M = e^{0} - A\Delta M$$
(95)

Donde, e^{o} es el vector de errores en los siguientes *N* instantes de muestreo, causados por los cambios en el pasado sobre las entradas al proceso, si sobre la variable manipulada no se realiza ningún movimiento ahora o en el futuro. *N e*s el vector de referencias para los siguientes *N* instantes de muestreo. El algoritmo MDC se diseña para minimizar la suma de los cuadrados del error, y además utiliza un término de penalización, para prevenir incrementos excesivos en la variable manipulada.

En notación vectorial el problema de minimización cuadrática se define como:

$$\min_{\Delta M} \left(e^{T} e^{+} \Delta M^{T} \Lambda \Delta M \right) = \min_{\Delta M} \left[\left(e^{0} - A \Delta M \right)^{T} \left(e^{0} - A \Delta M \right) + \Delta M^{T} \Lambda \Delta M \right]$$
(96)

Donde, Λ es la matriz diagonal que contiene el parámetro ajustable λ (parámetro de restricción o supresión del movimiento):

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda \end{bmatrix}$$
(97)

La solución de la Ecuación 96 es:

$$\Delta M = (A^{T}A + \Lambda)^{-1}A^{T}e^{0} = K_{c}e^{0}$$
(98)

$$\Delta M_0 = K_{c11} E_1^0 + K_{c12} E_2^0 + \dots + K_{c1n} E_{1n}^0$$
(99)

Donde, K_c es la matriz ganancia del controlador, definida como:

$$K_{c} = (A^{T}A + \Lambda)^{-1}A^{T}$$
 (100)

La ecuación 99 nos permite calcular un conjunto de movimientos de control k para minimizar el error predicho en el proceso en los siguientes N instantes de muestreo. Sin embargo, si se ejecutan todos los k movimientos de control sin retroalimentación del proceso, los errores del modelo y las perturbaciones pasarían desapercibidas en este periodo de tiempo, lo cual sería imposible de aplicar a nivel industrial. El problema se resuelve ejecutando únicamente el primero de los k movimientos. Entonces para el siguiente periodo de muestreo se obtiene un nuevo vector de errores, utilizando la medición de la variable de proceso para corregir la predicción y se obtiene una nueva secuencia de k movimientos futuros.

Cuando k se incrementa, se dispone de más grados de libertad para la optimización del controlador. Esto puede resultar en un control más exacto del proceso y un mejor desempeño, a expensas de pequeños movimientos en las variables manipuladas, pero aumentando la robustez del controlador. A mayor grado de libertad, se dispone de más movimientos de control para compensar.

El incremento en el número términos del horizonte de respuesta N considerados en la optimización, tiene un efecto de estabilización en lazo cerrado, incrementando el número de ecuaciones que se deben satisfacer en la optimización del controlador por mínimos cuadrados.

El factor de supresión λ se utiliza en la función objetivo como un factor ponderador en los cambios en la variable manipulada. Un incremento en λ hace más lenta la respuesta en lazo cerrado y reduce el tamaño de los cambios en la variable manipulada generados por el controlador, contribuyendo a aumentar la robustez.

5.2.1.1 Modificación. La modificación al MDC propuesta en este trabajo consiste en adicionar a este algoritmo un nuevo parámetro denominado factor de aceleración " Ω ". El factor de aceleración establece las veces que se debe ejecutar el algoritmo durante el tiempo que transcurre antes de enviar un nuevo valor en la señal de salida del controlador. El sistema de control actualiza los valores de la referencia, la variable controlada y la salida del controlador cada cierto tiempo, usualmente cada minuto en los controladores industriales. Por esta razón los cálculos del algoritmo pueden repetirse varias veces antes de que el sistema de control actualice los nuevos valores.

En la Figura 33 se presenta en un diagrama de bloques la forma en que el controlador MDC realiza los cálculos del vector de los valores predichos de la variable controlada (C^*) y del vector de los incrementos en la variable manipulada (ΔM). Los cálculos de los vectores de errores predichos y de incrementos, y la actualización de la variable manipulada se repiten las veces que indique el factor de aceleración. Es decir, la respuesta de la variable controlada se utiliza Ω veces

en los cálculos de la corrección del modelo y de los incrementos en la variable manipulada antes de enviar un nuevo valor a salida del controlador. En el caso de que Ω es igual a uno (1) los cálculos de los vectores de errores predichos y de incrementos, y la actualización de la variable manipulada se hacen una sola vez como en el algoritmo MDC original.

En la Figura 34 se presenta el efecto que tiene el factor de aceleración en la variable controlada y en la salida del controlador, para un cambio en el valor de referencia. A medida que aumenta el número de veces que se efectúan los cálculos de la corrección del modelo y de los incrementos en la variable manipulada se reduce el error entre el modelo y la planta, reduciendo la salida del controlador y haciendo que la variable controlada no sobrepase y se acerque más conservadoramente al valor de referencia.



Figura 33. Diagrama en bloques del controlador basado en la Matriz Dinámica.



Figura 34. Efecto del factor de aceleración.

El parámetro Ω es equivalente al inverso de la constante de tiempo en lazo cerrado, utilizado en el método de sintonización de síntesis para controladores PID . Este parámetro compensa la demora en la integración del algoritmo. Se recomienda su uso en procesos que son lentos en lazo abierto.

Por su analogía con el inverso de la constante de tiempo en lazo cerrado para un controlador PID, si el proceso es altamente no lineal se debe utilizar valores pequeños para el factor de aceleración (2 ò 3). Además, si el proceso es lento se pueden utilizar valores más altos para el factor de aceleración

5.2.2 Análisis de Estabilidad para el Algoritmo de la Matriz Dinámica de **Control.** Debido a que los algoritmos de control predictivo fueron desarrollados originalmente por grupos de trabajo de la industria, su objetivo primario fue obtener un buen desempeño del sistema. Adicionalmente, los análisis teóricos de estas técnicas han aparecido muy lentamente. Marchetti (1981), derivo una función de transferencia para un controlador predictivo.

La función de transferencia en lazo cerrado y la ecuación característica para cualquier controlador predictivo de solo una variable manipulada y una variable controlada, para k igual a uno (1), puede representarse por:

$$K^{T} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} a_{i}^{2}} \begin{bmatrix} a_{1} & a_{2} & \dots & a_{N} \end{bmatrix}$$
(101)

Pueden utilizarse diferentes modelos de convolución para el proceso y el diseño del controlador, y así permitir en el análisis los efectos del error del modelo.

Utilizando la estructura clásica de un controlador con retroalimentación, la función de transferencia del controlador puede escribirse como:

$$D(z) = \frac{\Delta M}{e(z)} = \frac{B}{1 + \sum_{j=1}^{M-1} z^{-j} \sum_{i=j+1}^{j+N} \sum_{n=i-j}^{N} K_n(a_i - a_{i-1})}$$
(102)

Donde, z es la transformada z y *B* está definido por:

$$B = \sum_{n=1}^{N} K_n$$
 (103)

у

$$W_i = a_i - a_{i-1}$$
 (104)

 K_{n} , es el *n-esimo* elemento del vector de ganancias en la ecuación 101, y a_i , es el *i-esimo* coeficiente de la respuesta escalón utilizado para diseñar el controlador y realizar las predicciones. La función de transferencia es:

$$HG_{p}(z) = \frac{y(z)}{\Delta M(z)} = \frac{\sum_{j=1}^{M} W_{j} z^{-j}}{1 + z^{-1}}$$
(105)

La ecuación característica del sistema es:

$$0 = 1 + D(z)HG_p(z)$$
 (106)

Reemplazando se obtiene:

$$0 = 1 + z^{-1} \left[\sum_{i=2}^{N+1} \sum_{n=i-1}^{R} K_{i} \stackrel{\wedge}{W}_{i} + B \stackrel{\wedge}{W}_{1} - 1 \right] + \sum_{j=2}^{M-1} z^{-j} \left[\sum_{i=j+1}^{j+N} K_{i-j} \stackrel{\wedge}{W}_{i} + B \left(W_{j} - \stackrel{\wedge}{W}_{j} \right) \right] + z^{-M} \left[B \left(W_{M} - \stackrel{\wedge}{W}_{M} \right) \right]$$
(107)

Esta ecuación contiene dos modelos: el del proceso y el utilizado para diseñar el controlador.

El orden de esta ecuación es *N*. El número de términos en el modelo, *N*, en la mayoría de los casos es grande (60, 90, 120, 150,180,...). Debido a que los elementos del vector ganancia del controlador son complicadas funciones de los parámetros de diseño y del modelo del proceso, no es posible calcular directamente los límites de estabilidad como funciones de los parámetros de diseño del controlador. Sin embargo este desarrollo puede utilizarse en casos sencillos especialmente cuando sólo hay una variable manipulada y una variable controlada, y el número de términos en el modelo es pequeño (menor de 20), para determinar si el sistema es estable en lazo cerrado y el grado de error en el modelo que el controlador puede tolerar. Debido a que las raíces de la ecuación 107 son muy sensibles a pequeños cambios en los coeficientes de los polinomios, la estabilidad debe verificarse con simulaciones en lazo cerrado en cada caso.

La estabilidad del algoritmo de MDC, no representa un problema si se conoce la dinámica del proceso y si el número de datos de muestras de la curva escalón de respuesta es lo suficientemente grande para que se alcance el estado estable. Si no se conoce con exactitud la dinámica del proceso, puede incrementarse el factor de supresión λ para mantener la estabilidad (Cutler, 1983). Si hay problemas de estabilidad, luego de instalar un controlador MDC, es porque existen errores en el modelo dinámico del proceso, lo ideal es contar con una técnica de identificación en línea para que recalcule automáticamente el modelo del proceso (Cutler, 1983).

Sin embargo el análisis de estabilidad aquí presentado es para diseñar y determinar el grado de robustez y su relación con el desempeño en lazo cerrado. Estas consideraciones afectan la selección de los parámetros de diseño de cada controlador predictivo.

El factor de aceleración no afecta la estabilidad del proceso debido a que si por su acción los deltas calculados de las variables manipuladas son más grandes, se puede aumentar el factor de supresión, obteniendo un menor tiempo de estabilización en comparación con el algoritmo original.

5.2.3 Sintonización del MDC de Cutler. El número de términos en el modelo para que el proceso alcance el estado estable en la variable controlada

temperatura es 100. Con el objeto de hacer mas robusto el controlador MDC tomamos la misma cantidad de términos en el horizonte de predicción (100). Para determinar los valores de horizonte de control (horizonte de salida) y factor de supresión se utilizan las reglas propuestas por Cutler (1983). Igualmente se les da el mismo nivel de importancia a las dos variables controladas.

Para seleccionar un número inicial de movimientos futuros en la variable manipulada Cutler (1938), propone tomar el tiempo que necesita la variable controlada para alcanzar un 60 % de su valor final, incluyendo el tiempo muerto, cuando se efectúa un cambio escalón en la salida del controlador. De la Figura 31 se tiene que el tiempo necesario para alcanzar el 60% de la respuesta final es de aproximadamente 18 minutos. Cutler (1983) propone que este tiempo sea dividido entre 7 y 14 para obtener el horizonte de control inicial. Para un tiempo de 18 minutos el horizonte esta entre 1 y 3, inicialmente se tomó igual a dos (2).

Con el valor de horizonte de control igual a 2 se tomaron diferentes valores de factor de supresión 0, 1, 5, 10, 15, 20 ... y se graficaron la suma del error absoluto (IAE) en la variable controlada y la suma del error absoluto de los cambios (IAE Δ M) en la variable manipulada contra el factor de supresión., como se muestra en la Figura 35.



Figura 35. Efecto del factor de supresión

Cutler (1983), propone seleccionar el factor de supresión en la zona de la gráfica en donde IAE y IAE∆M comienza a cambiar su pendiente rápidamente. De la Figura 35 se seleccionó un factor de supresión igual a 10.

Con el factor de supresión ya seleccionado (igual a 10), Cutler (1983) propone realizar cambios en el horizonte de control alrededor del punto seleccionado inicialmente y graficar el tamaño del cambio en la variable manipulada en el primer intervalo de tiempo (ΔM_0)contra el valor de horizonte de control, esta gráfica se presenta en la Figura 36.



Figura 36. Efecto del horizonte de control en el tamaño del primer movimiento en las variables manipuladas

De la Figura 36, se observa que el tamaño del primer movimiento no cambia para horizontes de control superiores a 30. Sin embargo el valor final del primer movimiento para un horizonte de control igual a 2 es muy similar al que se obtiene para un horizonte de control igual a 30. Se tomó el horizonte de control igual a 2. Para verificar el efecto del horizonte de control se graficaron la temperatura y la fracción de hidrogeno a la salida del producto gaseoso, cuando se realizan cambios en sus respectivos valores de referencia ver Figuras 37 y 38.



Figura 37. Efecto del horizonte de control en la temperatura de salida del producto gaseoso

De las Figuras 37 y 38 se observa que para valores del horizonte de control de 2, 3 ó 5, no se obtienen diferencias apreciables en las curvas de respuesta de las variables controladas. Cuando el horizonte de control es igual a 2 se obtiene el mayor valor para la integral del error absoluto en la temperatura y el menor valor para la integral del error absoluto en la fracción de Hidrógeno a la salida del producto gaseoso. Para facilidad en los cálculos se tomó el horizonte de control igual a 2.



Figura 38. Efecto del horizonte de control en la fracción de Hidrógeno a la salida del producto gaseoso

En este trabajo se consideró que las dos variables manipuladas flujo de vapor y flujo de gas combustible tienen igual importancia es decir que el controlador puede mover una u otra sin restricciones en cuanto al impacto que puede tener en la rentabilidad del proceso.

Los parámetros de sintonización son:

- Factor de supresión en los movimientos (Move Suppression Factor) = 10.
- Horizonte de salida (Horizont Output) = 2.

• Factor de Importancia = 1.0 para cada variable.

5.2.4 Sintonización del MDC Modificado. Para sintonizar los parámetros Horizonte de control y factor de supresión se siguen los pasos utilizados para MDC de Cutler. Para seleccionar el factor de aceleración inicial, en este trabajo, se propone tomar un valor de dos (2) que corresponde a utilizar doble vez la repuesta de la variable controlada en los cálculos de la corrección del modelo y de los incrementos en la variable manipulada antes de enviar un nuevo valor a salida del controlador, y se calcula el IAE. El cálculo del IAE se repite aumentando cada vez el factor de aceleración en una unidad. Posteriormente se grafica el IAE contra el factor de aceleración, de la grafica se selecciona el factor de aceleración para el cual se obtiene el mínimo IAE. Con un factor de aceleración de uno (1) se utiliza una vez la repuesta de la variable controlada en los cálculos de la corrección del modelo y de la corrección del modelo y de los incrementos en la variable controlada, como en el MDC de Cutler (1983).

En la Figura 39, se grafican los valores de la integral del error absoluto de la temperatura y la fracción de Hidrógeno del producto gaseoso contra el factor de aceleración. Se selecciona como factor de aceleración el valor para el cual se obtiene el menor valor de IAE, de la gráfica este valor corresponde a un factor de aceleración igual a 3.



Figura 39. Efecto del factor de aceleración sobre la temperatura y la fracción de Hidrógeno del producto gaseoso

La Figura 39 también muestra la relación que hay entre el factor de aceleración y el tiempo total que requiere el controlador para estabilizar el proceso, es muy importante notar que aunque un mayor factor de aceleración requiere ejecutar el algoritmo más veces, debido a que se obtiene una respuesta del controlador mas conservadora (ver Figura 34) se requiere menos tiempo para alcanzar el nuevo estado estable, luego de que se han cambiado las condiciones del proceso.

Debido a la dificultad para estudiar analíticamente la estabilidad del sistema controlador MDC y proceso, el efecto del factor de aceleración en la estabilidad en lazo cerrado, en los resultados de la simulación se verifica si el sistema se estabiliza cuando se realizan cambios en las referencias de las variables controladas y en el flujo de gas de carga que perturba el proceso, de acuerdo a las sugerencias de Cutler (1983).

Los parámetros de sintonización son:

- Factor de supresión en los movimientos = 10.
- Horizonte de salida = 2.
- Factor de importancia = 1.0 para cada variable.
- Factor de Aceleración = 3.

5.2.5 Comparación entre el desempeño de las dos estrategias de control basadas en la matriz dinámica de control. Para evaluar el desempeño de las dos estrategias de control basados en la matriz dinámica de control, se realizaron cambios en el flujo de gas de carga y en los valores de referencia de la fracción de Hidrógeno y de la temperatura.

En la Figura 40 se grafican las variables controladas, sus valores deseados y las salidas de los controladores. El comportamiento de la estrategia de control multivariable predictivo es similar a la estrategia de control multivariable estudiada en el capítulo anterior. Se observa que cuando el tiempo es igual a una hora se realiza un cambio en el valor deseado de la temperatura de 71.42 % ST a 75.60 % ST (1049 K a 1063 K), en las dos estrategias de control el controlador multivariable responde rápidamente para restablecer la estabilidad en el proceso. La estrategia que utiliza el algoritmo MDC modificado reacciona más agresivamente al inicio generándose un sobre paso ligeramente mayor, pero las dos estrategias utilizan tiempos similares para estabilizarse en el nuevo valor deseado de temperatura (ver, Figura 40a). El proceso se estabilizó en las dos estrategias aumentando el flujo de gas combustible de 47.11 % SC a 49.17 % SC (3131.55 m³est/h a 3268.48 m³est/h, ver Figura 40c). El cambio en el flujo de gas combustible es una perturbación en la fracción del Hidrógeno en el producto gaseoso (aumenta con la temperatura). La estrategia que utiliza el algoritmo MDC modificado presenta inicialmente una menor desviación de la fracción de Hidrógeno (ver Figura 40b). El controlador multivariable en las dos estrategias, responde rápidamente para mantener la fracción del Hidrógeno en el valor deseado, aumentando el flujo de vapor de 72.91 % SC a 75.1 % SC (15268.37 kg/h a 15727.0 kg/h, ver Figura 40d). Cuando el tiempo es igual a tres horas se realiza un cambio en el valor deseado de la fracción del Hidrógeno de 39. 78 % ST a 44.79 % ST (39.78 % mol a 44.79 % mol, ver Figura 40b), en las dos estrategias, el controlador multivariable reacciona rápidamente llevando la fracción del Hidrógeno a su nuevo valor deseado y restableciendo la estabilidad en el

proceso, reduciendo el flujo de vapor de 75.1 % SC a 51.18 % SC (15727.0 kg/h a 10717.81 kg/h, ver Figura 40d). En las dos estrategias se presenta un sobrepaso igual en la fracción del Hidrógeno (ver, Figura 40b). La disminución en el flujo de vapor actúa como una perturbación que trata de aumentar temperatura del producto gaseoso (mayor para el MDC modificado, ver Figura 40a), porque disminuye la cantidad de la mezcla gas de proceso más vapor de reacción en el reactor, pero el controlador multivariable actúa rápidamente reduciendo la cantidad de gas combustible de 49.17 % SC a 41.57 % SC (3268.48 m³est/h a 2763.28 m³est/h, ver Figura 40c).



Figura 40. Desempeño de los dos controladores multivariables predictivos

a cambios en los valores de referencia

En este proceso las fluctuaciones en el gas de carga son las perturbaciones al proceso más importantes. Para evaluar el efecto de esta perturbación sobre el proceso, se realizó un cambio escalón en el flujo de gas de carga de 79.1 % SC a 83.1% % SC (3599.2 m³estd/h a 3781.2 m³estd/h) y se evaluó el desempeño de cada estrategia de control para eliminar esta perturbación sobre el proceso, ver Figura 41.

La variación en el flujo de gas de carga causó un descenso en la temperatura de la mezcla reaccionante de 71.42 % ST a 68.65 % ST (1049 K a 1040 K) utilizando el algoritmo MDC modificado y de 71.42 % ST a 68.4 % ST (1049 K a 1039 K) con el algoritmo MDC, ver Figura 41a. La fracción del Hidrógeno se reduce de 39.78 % ST a 39.38 % ST (39.78 % mol a 39.38 % mol) utilizando el algoritmo MDC modificado y de 39.78 % ST a 39.27 % ST (39.78 % mol a 39.27 % mol, ver Figura 41b) con el algoritmo MDC. Para poder mantener la temperatura y la fracción del Hidrógeno a la salida del reactor en los valores deseados de 1049 K y 39.78 % mol respectivamente, el controlador multivariable aumenta el flujo de gas combustible, incrementando su salida de 47.11 % SC a 50.07 % SC (3131.55 m³est/h a 3328.31 m³est/h, ver Figura 41c) y el flujo de vapor aumentando su salida de 72.91 % SC a 77.75 % SC (15268.37 kg/h a 1681.93 kg/h, ver Figura 41d).

Las perturbaciones y cambios en los valores de referencia efectuados , no llevaron las válvulas a los límites de saturación.

El desempeño de las dos estrategias de control multivariable basados en el algoritmo de la matriz dinámica de control, es similar. Sin embargo, se puede observar que cuando se realizan variaciones en el flujo de carga, la desviación de las variables controladas de sus valores de referencia, son algo menores en el algoritmo MDC modificado. Para cuantificar el desempeño de las dos estrategias, se utilizarán los índices de desempeño que se definen en el capítulo 6.





variaciones en el flujo de carga

5.3 RESUMEN

En este capítulo se presentó una estrategia de control multivariable predictivo basado en la matriz dinámica del proceso obtenida en estudio de la interacción entre los lazos de control.

La estrategia de control multivariable utiliza el algoritmo de control matricial dinámico MDC para controlar simultáneamente, la temperatura y la conversión de la mezcla gaseosa reaccionante, manipulando la relación vapor - carga y el flujo de gas combustible.

Luego, se propone utilizar en esta estrategia un algoritmo MDC con una modificación que le permite un mejor desempeño que en el caso anterior.

Para el estudio de la estabilidad Marchetti (1981), derivó una función de transferencia para un controlador predictivo que presenta la dificultad para analizar la estabilidad de un sistema de una variable manipulada y una controlada y determinar el efecto de los parámetros del controlador sobre su estabilidad. En el caso de sistemas con mayor número de variables este análisis es prácticamente

imposible y se debe recurrir a la simulación para estudiar la estabilidad del sistema en lazo cerrado.

Para determinar los parámetros de sintonización de los controladores basados en la matriz dinámica de control se utilizan las reglas de sintonización propuestas por Cutler (1983) y en el caso del factor de aceleración utilizado en este trabajo se propone realizar una gráfica de la integral del error absoluto en la variable controlada contra el factor de aceleración. Se selecciona como factor de aceleración el valor para el cual la integral es mínima. En los resultados de la simulación se observa que el factor de aceleración no afecta la estabilidad del proceso, requiriendo un menor tiempo de estabilización en comparación con el algoritmo original.

Finalmente, se realizaron pruebas para evaluar el desempeño de los dos algoritmos, cuando se presentan perturbaciones o cambios en los valores de referencia de las variables controladas.

6. ANALISIS DE DESEMPEÑO DE LAS ESTRATEGIAS DE CONTROL

6.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se definen los índices que permiten analizar y evaluar cuantitativamente el desempeño de una estrategia de control. Se utilizan los índices IAE (integral del valor absoluto del error) y CENT (Centroide de respuesta) que son proporcionales al error acumulado y al tiempo que tarda el proceso en estabilizarse, luego de sufrir una perturbación. También se utiliza el índice AMP (altura máxima del pico) para cuantificar la máxima desviación de la variable controlada de su valor de referencia cuando hay perturbaciones.

Se estudian y comparan los esquemas de control multivariable y multivariable predictivo a la luz de los índices de desempeño, el error promedio en las variables controladas y su impacto en la rentabilidad del proceso. Estos indicadores

permiten discernir entre diferentes esquemas de control y seleccionar el más adecuado para una aplicación específica minimizando losmenores errores promedio y garantizando la seguridad, la calidad y la rentabilidad del proceso.

6.2 INDICES

Los índices utilizados para evaluar el desempeño de las estrategias de control son:

 La integral del valor absoluto del error acumulado en el tiempo "IAE", se define como:

$$IAE = \int \left| e(t) \right| dt \tag{108}$$

• La integral del valor absoluto del error acumulado ponderado en el tiempo "ITAE", se define como:

$$ITAE = \int \left| e(t) \right| dt \tag{109}$$

• Centroide de respuesta "CENT" (Sanjuan, 1999), indica que tan rápido se estabiliza la variable controlada por la estrategia de control y se define como:

$$Cent = \frac{ITAE}{IAE} = \frac{\int |e(t)| t \, dt}{\int |e(t)| \, dt}$$
(110)

 Altura máxima de pico "AMP", es en valor absoluto la mayor desviación que alcanza la variable controlada cuando el proceso es perturbado.

La Tabla 4 muestra los índices de desempeño obtenidos en la simulación del proceso, cuando se realizaron perturbaciones al proceso y cambios en los valores de referencia.

En el caso de las estrategias de control multivariable, los índices cuantifican el efecto de las perturbaciones y los cambios en los valores deseados sobre la fracción de Hidrógeno y la temperatura.

La Tabla 4 muestra que cuando el esquema de control convencional es afectado por un cambio en el valor de referencia de la temperatura, se obtienen los menores valores de IAE, CENT y AMP, debido a que el error acumulado entre la temperatura y su valor de referencia es mínimo y que el proceso se estabiliza rápidamente. Estos menores valores, también se deben a que en esta estrategia no se controla la fracción del Hidrógeno en el gas producto. Cuando la estrategia convencional sufre una perturbación en el flujo de gas de carga, los valores de CENT y AMP para la temperatura son los menores reportados. La variación en el flujo de carga afecta la temperatura y la distribución de productos.

		CAMBIOS DE REFERENCIA			PERTURBACIONES		
Estrategía	LAZO	IAE	CENT	AMP	IAE	CENT	AMP
		(% ST-h)	(h)	(% ST)	(% ST-h)	(h)	(% ST)
Convencional	Temperatura	0.688	1.157	1.075	0.58	1.3	1.84
PID (Medina)	Temperatura	4.88	3.13	5.00 ^a	1.58	1.56	2.70
	Fracción H ₂	1.12	3.22	0.17 ^b	0.08	1.861	0.08
Desacoplados	Temperatura	0.73	1.33	0.36 ^ª	1.08	1.49	2.21
	Fracción H ₂	1.15	3.15	0.37 ^b	0.27	1.71	0.37
DMC	Temperatura	1.21	1.77	0.40 ^a	1.57	1.43	3.03
	Fracción H ₂	0.94	2.9	0.75	0.29	1.51	0.52
DMC-Mod.	Temperatura	1.27	1.95	0.42 ^a	1.64	1.64	3.14
	Fracción H ₂	0.92	2.83	0.74	0.26	1.48	0.52

Tabla 4. Indices de desempeño de las diferentes estrategias de control.

^{a:} variación en la fracción de Hidrógeno, ^{b:} variación en la temperatura

Cuando las estrategias de control multivariable son afectadas por perturbaciones al proceso y por cambios en los valores de referencia de las variables controladas, los menores valores para el IAE, CENT y AMP se producen, en el caso de la temperatura, por la estrategia que utiliza desacopladores, excepto en el CENT cuando hay perturbaciones. En la fracción de Hidrógeno, los menores valores de los índices de desempeño, se obtienen por la estrategia de control MDC modificado, excepto en el AMP cuando hay perturbaciones y cambios en la referencia. El error acumulado y el tiempo de estabilización son pequeños y no se presentan sobrepasos apreciables.

El desempeño de las estrategias basadas en el algoritmo MDC (control multivariable predictivo) es similar, cuando se someten a variaciones en los valores de referencia o en el flujo de carga. Cuando se presentan perturbaciones y cambios en los valores de referencia, la estrategia que utiliza el algoritmo MDC modificado produce menores valores de IAE, CENT y AMP.

Para analizar mejor el desempeño de las estrategias de control multivariable y multivariable predictivo, se utiliza el error promedio definido como la integral absoluta del error acumulado, dividida entre el tiempo requerido para que el proceso se estabilice:

Error promedio =
$$\frac{IAE}{CENT}$$
 (111)

En la Tabla 5 se presentan los errores promedio en las variables controladas: temperatura y la fracción de Hidrógeno para cuando se realizan cambios en los valores de referencia y cuando se presentan variaciones en el flujo del gas de carga.

Tabla 5. Errores promedio en la temperatura y la fracción de Hidrógeno del producto gaseoso.

Estrategía	CAMBIOS DE REFERENCIA		PERTURBACIONES		
	Temperatura	Fracción de Hidrógeno	Temperatura	Fracción de Hidrógeno	
	Error (K)	Error (% molar)	Error (K)	Error (% molar)	
PID (Medina)	16.82	0.35	10.91	0.04	
Desacoplados	5.95	0.37	7.85	0.16	
DMC	7.40	0.32	11.80	0.19	
DMC- Mod.	7.04	0.33	11.23	0.19	

En la Tabla 5 se observa que la estrategia que utiliza desacopladores presenta el mejor desempeño, reflejado en los menores valores de errores promedio para la temperatura y diferencias poco significativas en la fracción de Hidrógeno, sin embargo, estos se deben configurar en el sistema de control distribuido, en estrategias de control multivariable con controladores PID. La configuración es una actividad compleja que sobrecarga la base de datos del sistema, debido a que

para un sistema de dimensión N X N, se requieren N X (N - 1) desacopladores (Smith, 1997).

La estrategia de control sintonizada por el método de Medina produce el menor error promedio en la fracción de Hidrógeno cuando se presentan perturbaciones al proceso. El método de sintonización propuesto por de Medina solo es útil cuando se tienen solo dos controladores interactuantes. Si se piensa ampliar la dimensión del sistema a 3 X 3, para incluir además del control de temperatura y la fracción de Hidrógeno, el nivel de la caldera, haciendo un mejor uso del calor generado en el horno, el método de sintonización de Medina no es aplicable (Smith, 1997).

Los mayores valores de errores promedio para la temperatura cuando se presentan cambios en los valores de referencia y en las perturbaciones, son los obtenidos en las estrategias de control multivariable predictivo. En las dos situaciones los errores promedio para la fracción de Hidrógeno son similares a los obtenidos por la estrategia que utiliza desacopladores. Para sistemas de dimensiones pequeños, las estrategias de control, basadas en la Matriz Dinámica de Control, presentan un desempeño ligeramente inferior a las no predictivas. Sin embargo, estas estrategias muestran todos sus beneficios cuando trabajan en sistemas con dimensiones mayores.

El error promedio, puede utilizarse para cuantificar económicamente el uso de las cantidades de vapor de agua y gas combustible, que utiliza cada estrategia de control para mantener la calidad del producto y la temperatura de reacción.

Para medir el impacto económico se toma como base los costos derivados de una variación de 1 % en el porcentaje de apertura en las válvulas de vapor y gas combustible en lazo abierto. Los efectos de estos cambios en la temperatura y la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso y el aumento en el volumen de Hidrógeno producido se obtienen a partir de las ganancias del proceso, ver Tabla 6.

	Flujo de Vapor	Flujo de Gas Combustible
∆Apertura, %	1	1
Kg/h	209.3	
U\$	0.48	1.83
∆Temp, % ST	-0.12	0.40
Δ Frac. H ₂ , % ST	-0.27	0.44
H ₂ , m ³ est/h	-34.6	55.9
H ₂ , U\$	-871.2	1405.8
Costo total, U\$	-871.68	1403.97

Tabla 6. Costo asociado a los movimientos de las variables manipuladas.

Para cuantificar económicamente el desempeño de cada estrategia de control se parte de los errores promedio que se presentaron en la Tabla 5. Con la información de la Tabla 6 se determina las cantidades por hora de vapor y gas combustible utilizadas de acuerdo a los errores promedio en la temperatura y la fracción de Hidrógeno, obtenidos cuando se realizan cambios en las referencias y en la perturbación al proceso. Las cantidades de vapor y gas combustible y sus costos se presentan en la Tabla 7.

Tabla	7.	Costo	asociado	al	desempeño	de	las	estrategias	cuando	se
preser	ntan	perturb	aciones y v	vari	aciones en lo	os va	alore	s de referen	cia.	

CAMBIOS EN LA REFERENCIA								
	Gas Combustible		Vap	or	Costo Total			
	m ³ est/h	U\$	Kg/h	U\$	U\$			
PID (Medina)	95.3	2.62	727.0	1.67	4.29			
Desacoplados	70.2	1.93	443.0	1.02	2.95			
DMC	67.6	1.86	450.4	1.03	2.89			
DMC – Mod	67.0	1.84	441.6	1.01	2.85			
CAMBIOS EN LA PERTURBACION								
	Gas Con	s Combustible		or	Costo Total			
	m ³ est/h	U\$	Kg/h	U\$	U\$			
PID (Medina)	34.4	0.94	332.7	0.76	1.70			
Desacoplados	43.3	1.19	333.2	0.76	1.95			
DMC	58.8	1.62	468.7	1.07	2.69			
DMC – Mod	57.4	1.58	453.7	1.04	2.62			
En los resultados presentados en las Tablas 6 se muestra que al reducir el flujo de vapor aumenta la rentabilidad del proceso, porque aumenta la temperatura y la fracción de Hidrógeno, sin embargo existe un límite para esta reducción porque el vapor es uno de los reactantes. Un mayor flujo de gas combustible aumenta la rentabilidad porque aumenta la temperatura y la fracción de Hidrógeno, a pesar de que aumentan los costos, debido a la gran diferencia entre el precio del gas combustible y el Hidrógeno producido. El límite superior para el flujo de gas combustible debe fijarse para proteger la metalurgia de los tubos del reactor.

Para cuantificar el impacto económico del desempeño de las estrategias de control cuando se ocurren perturbaciones o variaciones en los valores de referencia, se toman solo los costos de las variables manipuladas flujo de gas combustible y flujo de vapor. El objetivo de las estrategias de control es mantener las variables controladas temperatura y la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso en sus valores de referencia.

En costo por hora, los desempeños de las estrategias de control se diferencian en máximo un dólar. Las estrategias basadas en la matriz dinámica de control son ligeramente menos costosas cuando se someten a variaciones en las referencias de las variables controladas. En la estrategia sintonizada por el método de Medina es en la que se obtiene un menor costo cuando se presentan perturbaciones. En la operación normal de estas plantas se presentan cambios en

las referencias de las variables controladas y perturbaciones en el flujo de carga. El costo del desempeño global (perturbaciones y cambios en valores de referencia de la estrategias sintonizada por el método de Medina es el mayor (U\$ 4.29 + U\$ 1.70 = U\$ 5.99), por esta razón no es la más apropiada. El costo del desempeño global de la estrategias con desacopladores el menor (U\$ 2.95 + U\$ 1.95 = U\$ 4.90), Sin embargo, pensando en incluir como variable controlada el nivel de la caldera que produce vapor aprovechando el calor del horno y las variables controladas en las otras secciones de la planta, la tarea de identificar desacopladores y su posterior configuración en el sistema de control se hace muy compleja. El costo del desempeño global de las dos estrategias basadas en la matriz dinámica de control es muy similar (U\$ 2.89 + U\$ 2.69 = U\$ 5.58 para el MDC y U\$ 2.85 + U\$ 2.62 = U\$5.47 para el MDC modificado). Para sistemas con más de dos variables manipuladas y dos variables controladas son más utilizados los controladores multivariables predictivos como los basados en la matriz dinámica de control por su mayor robustez y facilidad. Aunque las diferencias en el costo por hora del desempeño son muy pequeñas (centavos de dólar), al multiplicar por el numero de horas al año y los años que permanece operando un proceso industrial, se pueden ahorrar miles de dólares por poseer la estrategia de control más robusta, más flexible y menos costosa.

En la práctica la implementación de una estrategia de control basado en la matriz dinámica requiere diseñar un programa de pruebas en la planta para obtener las curvas de respuesta que relacionan las variables controladas con las manipuladas,

estas curvas constituyen el modelo de referencia utilizado en el controlador multivariable predictivo. La flexibilidad en los rangos operacionales para efectuar estas pruebas es limitada. Con rangos de operación amplios se puede identificar mejor el proceso y obtener un controlador más robusto, sin embargo estas condiciones no son tan alcanzables en plantas industriales en donde se puede ver comprometida la seguridad de las personas y equipos, y la rentabilidad. Ante esta situación se hace evidente el gran potencial de utilizar modelos rigurosos en las actividades de diseño de las pruebas para realizar las estrictamente necesarias y cubrir con estos modelos rangos más amplios.

Especificamente el horno de reformado industrial utilizado para validar el modelo se presenta una dificultad para medir en línea la composición del gas que sale del reactor. En este caso el modelo riguroso aquí desarrollado puede ser utilizado en línea con el proceso como un sensor virtual para inferir la composición del gas que efluente del reactor. El modelo puede ser validado periódicamente con los datos de control de calidad. El algoritmo modificado del algoritmo de control basado en la matriz dinámica (por la inclusión del factor de aceleración) puede ser implementado en el en el procesador de aplicaciones. Típicamente los algoritmos de control predictivo multivariable se ejecutan con una frecuencia de 1 ò 5 minutos. El periodo de ejecución del controlador aún con valores factores de aceleración de 3 ò 4, no representa problemas por insuficiencia de tiempo para ejecutar el algoritmo.

La implementación del controlador basado en la matriz dinámica de control requiere de realizar las fases de : pruebas en planta, depuración y análisis de la información obtenida, integración del modelo riguroso y la base de datos en tiempo real, validación del modelo en línea, diseño del controlador, validación y evaluación del desempeño del controlador.

6.3 RESUMEN

En este capítulo se definieron los índices que permiten evaluar cuantitativamente el desempeño de una estrategia de control. Se utilizaron los índices IAE y CENT que son proporcionales al error acumulado y al tiempo que tarda el proceso en estabilizarse, luego de sufrir una perturbación. También, se utiliza el índice AMP para medir la mayor desviación de la variable controlada de su valor de referencia. Las estrategias de control se clasificaron en: convencional, multivariables y multivariables predictivas, para facilitar su análisis por medio de los índices de desempeño. Finalmente, se analizaron las estrategias de control multivariable y multivariable predictivo utilizando el error promedio y su impacto en la rentabilidad del proceso. Las estrategias con menores errores promedio son las más adecuadas, para obtener la mejor operación del proceso manteniendo la seguridad, la calidad y la rentabilidad del proceso.

7. CONCLUSIONES

Las conclusiones derivadas del presente trabajo pueden agruparse en dos tópicos: el modelo desarrollado para el reformado de gas natural con vapor de agua y los diferentes esquemas de control utilizados en este proceso.

Modelo:

Al considerar que el área del horno es mucho mayor que la de los tubos y que estos están completamente dentro del horno, (Smith y Corripio, 1985), se puede establecer un balance diferencial de energía en el horno, que junto con los balances diferenciales de energía en el sistema gas reaccionante - catalizador, en la pared metálica del tubo y los balances diferenciales de masa, generan los perfiles de temperaturas dentro la precisión que tolera la instrumentación industrial. Esta consideración, permite disponer de modelos de reformado, que no

utilizan técnicas como: factores de vista y expresiones empíricas para determinar la temperatura de la pared del tubo.

La comparación entre los datos de la planta y la información generada por el horno – reactor de reformado desarrollado en esta tesis, permite evaluar la distribución de compuestos y temperatura a través de un reactor con una buena precisión.

Dadas las limitaciones en la obtención y almacenamiento de la información y la escasa flexibilidad operacional para realizar pruebas dinámicas en planta, la información que se obtuvo de la prueba en planta, muestra que el modelo reproduce bien el comportamiento dinámico de la planta.

El modelo puede utilizarse para analizar estrategias de control esistentes y diseñar novedosas estrategias multivariables que permitan eliminar la interacción entre los lazos de control, beneficiando la seguridad, la calidad de los productos y la rentabilidad del proceso. Además el modelo se constituye en una herramienta útil para el análisis operacional cuando se evalúa el comportamiento del reactor por cambios en las condiciones del proceso.

Estrategias de Control:

Del análisis de la estrategia de control convencional y del estudio de la interacción del lazo de control de temperatura y la fracción de Hidrógeno del gas producto, se hace evidente que controlar únicamente la temperatura del producto gaseoso, no es suficiente para mantener los niveles de conversión deseados, por lo cual se necesita un relacionador para mantener la relación molar entre el vapor y la carga constante.

Las estrategias de control multivariable (temperatura y la fracción de Hidrógeno) que utilizan controladores PID, como las sintonizadas por el método de Medina y las que utilizan desacopladores se desempeñan bien pero no se pueden utilizar o se hacen muy complejas cuando hay más de dos lazos interactuantes.

Las estrategias de control multivariable predictivo tienen un desempeño ligeramente inferior a las que utilizan desacopladores pero pueden desempeñarse bien cuando hay más de dos lazos interactuantes.

La estrategia que utiliza el algoritmo MDC modificado por la adición del parámetro factor de aceleración reduce el error acumulado en la fracción de Hidrógeno y el tiempo de estabilización debido a que el factor de aceleración actúa de forma similar a la acción integral de un controlador PID.

El factor de aceleración utiliza, Ω veces la respuesta de la variable controlada en los cálculos de la corrección del modelo y de los incrementos en la variable manipulada antes de enviar un nuevo valor a la salida del controlador. En el caso de que Ω es igual a uno (1) los cálculos de los vectores de errores predichos y de incrementos, y la actualización de la variable manipulada se hacen una sola vez como en el algoritmo MDC original.

El parámetro Ω es equivalente al inverso de la constante de tiempo en lazo cerrado, utilizado en el método de sintonización de síntesis para controladores PID . Este parámetro compensa la demora en la integración del algoritmo. Se recomienda su uso en procesos que son lentos en lazo abierto

El factor de aceleración puede mejorar el desempeño de procesos en donde el vector de datos recopilados presenta gran parte de los valores en estado estable, si el proceso es altamente no lineal se debe utilizar valores pequeños para el factor de aceleración (2 ò 3). Además, si el proceso es lento se pueden utilizar valores más altos para el factor de aceleración.

Para sintonizar los parámetros del controlador MDC modificado se utilizan las reglas propuestas por Cutler (1983) para el horizonte de control y factor de

supresión. Para seleccionar el factor de aceleración inicial, en este trabajo, se propone tomar un valor de dos (2) que corresponde a utilizar doble vez la repuesta de la variable controlada en los cálculos de la corrección del modelo y de los incrementos en la variable manipulada antes de enviar un nuevo valor a salida del controlador, y se calcula el IAE. El cálculo del IAE se repite aumentando cada vez el factor de aceleración en una unidad. Posteriormente se gráfica el IAE contra el factor de aceleración, de esta gráfica se selecciona el factor de aceleración para el cual se obtiene el mínimo IAE.

En este trabajo, se encontró que una vez se selecciona el factor de aceleración, si se incrementa su valor (se ejecuta el algoritmo más veces), el tiempo total que requiere el controlador para estabilizar el proceso no varia significativamente debido a que se obtiene una respuesta del controlador mas conservadora.

Debido a la dificultad para estudiar analíticamente la estabilidad de un sistema multivariable controlador MDC y proceso, y así mismo el efecto del factor de aceleración en la estabilidad en lazo cerrado, se utilizan los resultados de la simulación para verificar si el sistema se estabiliza cuando se realizan cambios en las referencias de las variables controladas y en las perturbaciones al proceso, de acuerdo a las sugerencias de Cutler (1983).

Es interesante avanzar en el manejo de las perturbaciones desarrollando en el algoritmo de control modificado el control por adelanto, con el fin de mejorar el desempeño de este controlador.

La metodología seguida en este trabajo, establece una guía para estudiar analizar y mejorar la operación de plantas industriales, debido a que se parte de la reseña del estado del arte en los modelos del proceso, se proponen modificaciones que mejoran su acercamiento a la realidad y se verifica a nivel industrial. Posteriormente se analizan las estrategias de control existentes y se proponen estrategias que permiten obtener las ventajas de un esquema de control basado en modelos del proceso. La selección de la mejor estrategia se hace utilizando índices que permiten cuantificar el impacto económico de su desempeño manteniendo la seguridad y la calidad de productos.

BIBLIOGRAFÍA

ALATIQUI I. M., Meziou A. M. and Gasmelseed G. A. Modelling, Simulation and Sensitivity Analysis of Steam Methane Reformers. Int. J. Hydrogen Energy, Vol. 14. 1989. pp. 241-256.

ALLEN, D. W., Gerhard E. R. and Likins M. R. Jr., Ind. Chem. Process Des. Dev., Vol. 14, 1975, pp. 256.

ANON. Physical and Thermodynamics Properties of Various Elements and Compounds. Girdler Catalyst, Chemical Corporatión Products. División of Chemetron Corp. 1954.

BEEK J. Advances in Chemistry in Chemical Engineering. Academic Press. New York, Vol. 24. 1962. pp. 234.

CHANDRA P. P. S. and Deoki N. S. Simulation of Side Fired Steam-Hydrocarbon Reformers. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 18. No. 1. 1979.

CHAUVEL and Lefebvre G., Petrochemical Processes 1 Synthesis - Gas Derivates and Major Hydrocarbons. Editions Technip, Second Ed, Paris. 1989.

CUTLER C. Ray, Dynamic Matrix Control: an Optimal Multivariable Control Algorithm with Constraints. Thesis (Ph. D.), University of Houston. 1983.

DEMICHELLI M. C., Ferreti O. A. And Laborde M. A., Efecto de la Transferencia de Calor sobre el Comportamiento de un Reactor de Reformado de Gas Natural, Rev. Latinoam. Transferencia de Calor y Matería, Vol. 7, No. 34. 1983. pp. 281-296.

Dixion, D.a. and Séller, D. Computacional Chemistry and Process Design, Chem, eng. Sci.

ELNASHAIE S. S. E. H., AI-Ubaid, A. S., Soliman, M. A. and Adris, A. M., On the Kinetics and Reactor Modelling of the Steam Reforming of Methane - A Review, Journal of Eng. Sci., Vol. 14, No. 2. 1988. pp. 247-273.

ERGUN S., Chem. Eng. Progr., Vol. 48, No. 89. 1952.

GROSDIDIER P. y Morari M., Closed – Loop Properties from Steady – State Gain Information, Ind. Eng. Chem. Fundam. Vol. 24, 1985. pp. 221 – 235.

HALDOR T., Some Aspects of Catalityc Cracking, The institution of gas engineers, 31st Autumn Research Meeting, Communication 698, Nov. 1965.

HARTH R., Kugeler, K., et al, Nucl. Technol. Vol. 38, 1978. pp. 252.

HYMAN, M. H., Simulate Methane Reformer Reactions, Hyd. Procs., Vol. 47, No. 7, 1968. pp. 131-137.

JOHN Mc Ketta (ed.), Encyclopedia of Chemical Processing and Design, Marcel Dekker Inc., Vol. 20, New York. 1984.

JOHANSEN T., Raghuraman K. S. y Hackett L. A., Trends in Hydrogen Plant Design, Hyd. Procs., august, 1992. pp. 119-127.

LABORDE M. A., Amadeo N. E. and Gabitto J. F., Simulación de un Reactor de Reformado de Gas Natural Empleando un Modelo Bidimensional, Departamento de Ingeniería Química (CONICET - FI – UBA), Buenos Aires, Argentina, 1983.

LJUNG Lennart, System Identification. 2nd Ed. Prentice Hall, PTR. 1999.

LOGTEMBERG, S.A., and Dixon, A. G., Computacional fluid dynamics studies of fixed bed heat transfer, Chem. Eng. Proc., Vol. 37, 1998.

LOGTEMBERG, S.A., Nijemeisland, M. and Dixon, A.G., Computational fluid dynamics simulations of fluid flow and heat transfer at the wall-particle contac points in a fixed bed reactor, Chem. Eng. Sci., Vol. 54, 1999.

LUYBEN W. L. y Luyben M. L., Essentials of Process Control, Mc Graw Hill. 1997.

MAURATH P. R., Mellichamp D. A. And Seborg D. E, Predictive Controller Design for Single Input/ Single Output (SISO) Systems, Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 27. No. 6. 1988.

MEDINA Maximino, A tuning technique for decentralized multivariable control, Thesis (Ph. D.), University of South Florida, 1991.

MOE J. M., Chem. Eng. Prog. Vol. 58, No. 33, 1962.

MOE J. M., y Gerhard, E. R., Chemical Reaction and Heat Transfer Rates in the Steam Methane Reaction, AIChE Symposium, 56th National Meeting, San Francisco, California, 1965.

MURRAY A. P. y Snyder, T. S., Steam Methane Reformer Kinetic Computer Model with Heat Transfer and Geometry Options, Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., Vol. 24, No. 2, 1985. pp. 286-294.

OBLAD A. G., Oil Gas J. Vol. 54, No. 16, 1967. pp 164.

OLESEN O. L. y Sederquist R. A., The UTC Stream Reformer, United Technologies Corporation, Windsor, CT. 1979.

OGUNNAIKE B. A. y Ray W. H., Process Dynamics, Modelling and Control, Oxford University Press. 1994.

PLEHIERS P. M. and Froment G., Coupled Simulation of Heat Transfer and Reaction in a Steam Reformer Furnace, Chem. Eng. Technol., Vol. 12, 1989. pp. 20-26.

RANADE, V.V., Modeling of flow mal-distribution in a fixed bed reactor using PHOENICS, J. Phoenics, Vol. 7, No. 3, 1994.

RANADE, V.V., Improve reactor via CFD, Chem. Eng., Vol. 104, No. 5, 1997, pp 96 – 102.

REID C. R., Prausnitz, J. And Poling, B. E., The Properties of Gases & Liquids, 4th ed. Mc Graw Hill. 1987.

RUTHVEN D. M., Can. J. Chem. Eng., Vol. 47. 1969, pp. 327.

SANJUAN Marco, Considerations about stability and control improvement when implementing cascade control in a feedback control system. University of South Florida, Industrial Engineering Department, 1999.

SHAMPINE. L. F. And Gordon M. K., Computer Solution of Ordinary Differential Equations, W. H. Freeman & Co. 1975. pp. 246.

SINGH and Deoki N. Saraf,. Simulation of Side Fired Steam-hydrocarbon Reformers, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. Vol. 18, No. 1. 1979.

SMITH C. A. and Corripio A. B., Principles and Practice of Automatic Process Control, 1st –2nd Ed. John Wiley & Sons. 1985-1997.

SMITH W. N. and Santangelo, J. G., ACS Symp. Ser. No. 116, 1980. pp. 147-176.

TINDALL B. M. y King D. L., Designing Steam Reformers for Hydrogen Production, Hyd. Procs., july, 1994. pp. 69-75.

XU J., Froment G. F., AIChe J., 1989.

APENDICE A

Método de MEDINA

PID 2x2 Tuning (PID-PID)

El lazo con la menor relación t_0/τ se denomina primario y se sintoniza con las reglas estándar. El lazo secundario se sintoniza con las siguientes reglas:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{K_{P12}K_{P21}}{K_{P11}K_{P22}} \\ t_d &= t_{012} + t_{021} - t_{022} \\ \gamma &= \frac{t_{011}}{t_{022}} \\ \theta &= \frac{t_{012}}{t_{021}} \\ \eta &= \frac{t_{021}t_{012}}{t_{011}t_{022}} \\ \delta &= \frac{\tau_{21}\tau_{12}}{\tau_{11}\tau_{22}} \\ \varphi &= \frac{\tau_{11}}{\tau_{22}} \\ \ln\left(\frac{\Gamma}{t_{012}}\right) &= 1.4\alpha + 1.0335\,\alpha^2 + 0.515\gamma + 0.068\eta - 0.105\,\delta - 0.345\,\varphi \\ K_{C2} &= \frac{\tau_2}{K_{P2}} \times \frac{1}{1-\alpha} \times \frac{1}{\Gamma + t_{02}} \\ T_{12} &= \tau_2 \\ T_{D2} &= \frac{t_d}{2} \end{aligned}$$

APENDICE B

Nomenclatura

- $a_{i,i,k}$ coeficiente de la respuesta escalón
- A matriz dinámica
- A_i , B_i , C_i , D_i constantes para el cálculo de la capacidad calorífica del componente i.
- A_{T} área transversal del tubo, [m]
- C(t), c(t) señal de la salida del transmisor, [% ST]
- C^0 valor de inicio de la variable controlada, [% ST]
- *C** señal de referencia, [% ST]
- CENT Centroide de respuesta
- C_p capacidad calorífica del producto gaseoso, [J/mol°K]
- C_{p_i} capacidad calorífica del componente i, [J/mol°K]
- $C_{P_{u}}$ capacidad calorífica del material del tubo, [J/kg°K]

 $C_{P_{\nu}}$ capacidad calorífica del material del horno, [J/kg°K]

 d_e , d_i diámetro externo e interno del tubo, [m]

- *d*_{*p*} diámetro equivalente de la partícula de catalizador, [m]
- D(z) función de transferencia discreta del controlador MDC
- e(t) error, [% ST]
- E_{a1} energía de activación para la producción de CO, [36750.8 J/mol]
- E_{a2} energía de activación para la producción de CO₂,[58150 J/mol]
- $f_i(t)$ señal de flujo en Kg/h para vapor y M3estd/h para gases.
- $F_{\mathcal{Q}_{i}}^{0}$ factor para el cálculo de la viscosidad del componente i
- F_c flujo volumétrico del gas de carga, [M³estd/h]
- F_{g} flujo volumétrico del gas combustible, [M³estd/h]
- F_{H} flujo másico del combustible, kg/h
- G velocidad másica superficial, [kg/h m²]
- G(s) función de transferencia del proceso
- h_i coeficiente de transferencia de calor referido a la pared interior del tubo, [J/h m² °K]
- \hat{h}_i entalpía del componente i, [J/mol]

- $\hat{h}_{f_i}^0$ entalpía de formación del componente i, [J/mol]
- *H* entalpía del gas producto, [J/kg]
- H_F poder calorífico inferior del gas combustible, [J/kg]
- *k* movimientos futuros en la variable manipulada, horizonte de control
- *k*₀₁ factor pre-exponencial, [1.2534 Kg-mol/Kg-catal. h kPa]
- *k*₀₂ factor pre-exponencial, [30.0141 Kg-mol/Kg-catal. h kPa]
- k_1 constante para la velocidad de reacción
- k_2 constante para la velocidad de reacción
- k_f conductividad térmica del producto gaseoso, [W/m °K]
- *K* ganancia de estado estacionario, % ST / %SC.
- *K*` ganancia en lazo cerrado, % ST / %SC.
- K_1 , K_2 constantes de equilibrio, [kPa]
- K_C ganancia del controlador, [% SC / % ST]
- K_{f_i} conductividad térmica del componente i, [W/m °K]
- K_T ganancia del transmisor, [% ST / K para temperatura, % ST / % mol Hidrógeno en el producto gaseoso]
- K_{TFg} ganancia entre la temperatura y el flujo de gas combustible, [% ST / % SC]
- K_{TV} ganancia entre la temperatura y el flujo de vapor, [% ST / % SC]

- K_{XFg} ganancia entre la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso y el flujo de gas combustible, [% ST / % SC]
- *K_{XV}* ganancia entre la fracción de Hidrógeno en el producto gaseoso y el flujo de vapor , [% ST / % SC]
- K_{ν} ganancia de la válvula, [(Kg/h) / % SC, para vapor o (M3est/h) / % SC para gases].
- L longitud del reactor, [m]
- *LIR* límite inferior del rango.
- M(t),m(t) señal de salida del controlador, [% SC]
- M_B masa efectiva del horno, [kg]
- \overline{M} peso molecular, [kg/kgmol]
- N numero de términos muestreados en la respuesta escalón
- N_i moles del componente i, [kgmol]
- \dot{N}_i flujo molar de i, [kgmol/h]
- P presión , [Kpa]
- P_{C_i} presión crítica del componente i, [bar]
- P_i presión parcial, [Kpa]
- R constante de los gases = 8.314 [J/mol°K]

- R_i velocidad de reacción del componente i, [kgmol/kgcatalizador h]
- R_{vc} relación vapor carga, [mol/mol]
- *s* operador de laplace
- *t* tiempo, [minutos]
- *t*_o = tiempo muerto del proceso, [min.]
- *T* temperatura del producto gaseoso, [°K]
- T_{C_i} temperatura crítica del componente i, [°K]
- T_{ri} temperatura reducida del componente i
- T_R temperatura radiante del horno, [°K]
- T_w temperatura en la superficie exterior del tubo, [°K]
- U energía interna del producto gaseoso, [J]
- \hat{u}_{f}^{0} energía interna de formación del componente i, [J/mol]
- \hat{u}_i energía interna del componente i, [J/mol]
- V volumen del tubo reactor, [m³]
- *X* fracción global de metano convertido
- *X_c* apertura de la válvula del flujo de carga, [% SC]
- X_g apertura de la válvula del flujo de gas combustible, [% SC]
- X_v apertura de la válvula del flujo de vapor, [% SC]

- *y_i* fracción molar del componente i
- z longitud desde la entrada del tubo, [m]
- Δ delta de variación
- ΔC variación en la variable controlada, [% ST]
- Δ Frac. H₂ variación en la fracción de Hidrógeno, [% ST]
- ΔM variación en la variable manipulada, [% SC]
- ΔM_0 variación inicial en la variable manipulada, [% SC]
- ΔT variación en la temperatura de salida del reactor, [% ST]
- ΔZ longitud del elemento diferencial, [m]
- ε emisividad de la superficie del tubo, considerada constante
- Φ_{ii} factor para el cálculo de la viscosidad del producto gaseoso
- $\eta_{\scriptscriptstyle F}$ eficiencia de la unidad
- μ viscosidad del producto gaseoso, [P]
- ρ densidad del producto gaseoso, [kg/m³]
- ρ_c densidad del catalizador, [kg/m³]
- ρ_{M} densidad del material del tubo, [kg/m³]
- σ constante de Stefan Boltzman = 1.38 x 10⁻²³ [J/K]

- τ constante de tiempo del proceso, [min.]
- τ_I tiempo integral, [min]
- τ_D tiempo derivativo, [min]
- τ_T constante de tiempo del transmisor, [min.]
- τ_v constante de tiempo de la válvula, [min.]
- v fracción vacía en el catalizador
- *ω* ganancia relativa
- Ω factor de aceleración
- ψ perturbación al proceso, [% ST]
- ξ_i factor para el cálculo de la viscosidad del componente i