

INTRODUCCIÓN

Uno de los procesos más importantes en la industria es la fabricación de polímeros a partir de sustancias derivadas del petróleo, en este caso moléculas de etileno o monómeros, mediante un proceso de polimerización de radicales libres.

En la actualidad, aproximadamente 200 millones de libras de la síntesis de materiales poliméricos se producen al año en todo el mundo. Estos materiales se realizan a través de numerosos mecanismos químicos, en una amplia variedad de configuraciones de reactor. Los beneficios de mejorar el funcionamiento de un gran mercado son evidentes.

Además, la tendencia actual hacia los productos químicos de especialidad está repercutiendo en el campo de polímero como se mueven hacia los fabricantes de polímeros especiales de alto valor añadido con propiedades únicas dirigidas a mercados muy específicos.

Este tipo de negocio, mientras es rentable, requiere un estricto control de propiedades de los polímeros para satisfacer aplicaciones de uso final muy específicos, estricto control podrán obtenerse a través de una combinación de comprensión de la química y la física del proceso de polimerización, la optimización de la configuración del reactor de polimerización y el funcionamiento y el seguimiento y control digital de la polimerización.

Una cosa importante es que la historia de la polimerización se ha escrito en la distribución del peso molecular, que determinan las propiedades de uso final del polímero. Las propiedades de uso final, a su vez, están determinados por la estructura molecular del polímero. La manipulación de la estructura molecular del polímero durante la polimerización puede ser descrito como la ingeniería de polimerización, y consiste en la cinética química, modelación matemática, diseño de reactores, optimización y control de procesos.

De acuerdo con esto, el presente trabajo trata de adoptar un enfoque de ingeniería al modelo y la simulación de un reactor tubular de alta presión, a través del uso del vinilo polimerización por radicales libres en las presiones sobre 1000 a 3000 atm, y temperaturas de hasta 300oC. Desde un modelo matemático para el balance de masa y un conjunto de ecuaciones no lineales rígidas para el reactor, se construye un modelo para simular y ver el rendimiento de todo el proceso. El sistema considera la interacción con el balance de masa para dar finalmente un modelo útil integrado para examinar el efecto de varias condiciones de funcionamiento de variables críticas, como la temperatura máxima, la distribución del peso molecular, y la conversión de monómero.

Ha habido mucha investigación sobre este campo de la polimerización:

Agrawal y Han , Ehrlich y [Chen], Ray , y Kiparissides [Verros], Yoon, Yoon y Rhee . Sin embargo, para el presente trabajo, el paper de Byung Yoon Hyun y Ku Rhee, "***un estudio del reactor tubular de alta presión***" se ha tomado como documento base para hacer el proyecto actual, introduciendo en él algunas modificaciones que se comentarán más adelante.

Otro paper importante es "***modelo matemático para un reactor tubular multi-zona de alta presión***", escrito por Kiparissides C., que será un documento básico para la investigación futura en modelos mas complejos que este.

1. OBJETIVOS

1.1 OBJETIVO GENERAL

Modelar, simular y controlar un proceso de polimerización a alta presión en un Plug Flow Reactor PFR.

1.2 OBJETIVOS ESPECIFICOS

1. Modelar un proceso de polimerización a alta presión en un Plug Flow Reactor PFR.
2. Simular en Matlab/Simulink el proceso
3. Diseñar un sistema de control multivariable para el proceso de polimerización a alta Presión.

2. EL MODELO DE BALANCE DE MASA

2.1 DESCRIPCION DEL PROCESO

La **figura 2.1** Muestra el diagrama de flujo del proceso para el balance de materiales y la **figura 2.2** muestra el diagrama de flujo mismo, pero en función de la distribución de los diferentes CSTRs. El modelo utiliza 13 CSTRs la mayoría de ellos son separadores, compresores, tanques de mezcla, y un reactor tubular del tipo de flujo en pistón, o también denominado Plug Flow Reactor PFR.

El proceso se inicia con la inyección de etileno (QA1) de un tanque (CSTR 1) en un compresor primario (CSTR 2) cuya función es aumentar la presión del gas de 40 a 300 atm; a continuación, el gas fluye a un tanque de mezcla (CSTR 7) donde se mezcla con los gases procedentes del sistema de reciclaje de gas (CSTRs 4,5, y 6), luego comonomero (o solvente llamado QX2) se agrega al proceso en el reactor de mezcla 8.

Es importante notar aquí que el flujo de salida del CSTR 8 (llamado QS) pasa a través de una bomba volumétrica que fija este flujo siempre en 8,33 kg /s. Esta mezcla se alimenta a un compresor secundario (CSTR 9) donde la presión se incrementa desde 300 hasta 3000 atm; ahora la mezcla esta lista para entrar en el reactor (CSTR 10) donde la reacción química de polimerización se lleva a cabo y se produce el polímero.

Otra observación importante es que en la entrada del reactor, el iniciador se inyecta (en el **apéndice A** se puede observar los principios fundamentales de la química de polimerización), en una pequeña cantidad que puede ser despreciada en el estudio de balance de materiales. Fuera del reactor dos corrientes fluyen, la primera es de polietileno (Qpol), y la segunda, los gases que se reciclan (QSG), ambas corrientes entran en un separador de alta presión (CSTR 3) donde el polietileno se envía a un separador de baja presión (CSTR 11), y el flujo de QSG se divide en dos corrientes nuevas, la primera de ellas (PQ) que se envían al separador de baja presión y la otra (QR) que se envía al sistema de reciclaje de gas.

Así, el polietileno de baja presión del separador se extrae a través de una extrusora a un circuito de corte de agua de pellets, y el flujo de PQ se pasa a un se-

gundo reciclaje del sistema (CSTRs 12 y 13) para ser purificado y se envía al reactor de mezcla CSTR 1 a la alimentación de el sistema de nuevo.

En la **figura 2.2** También se pueden ver las constantes de tiempo para cada dinámica de los reactores. De cada reactor un perfil de concentración x_{ij} , se consigue, donde $i = 1$ (siglas de la concentración de monómero en el reactor de mezcla j) $i = 2$ (siglas de la concentración de disolvente en el reactor de mezcla j), j es el número de CSTRs va desde 1 hasta 13.

Tenemos un tubo de entrada en cada reactor de mezcla con un flujo que tiene dos componentes principales: monómero ($i = 1$) y disolvente ($i = 2$).

2.1.1 Parámetros usados en el balance de masa. Para desarrollar el conjunto de ecuaciones diferenciales que caracterizan el balance de masa, en la **tabla 2.1** se muestra el conjunto de variables requeridas.

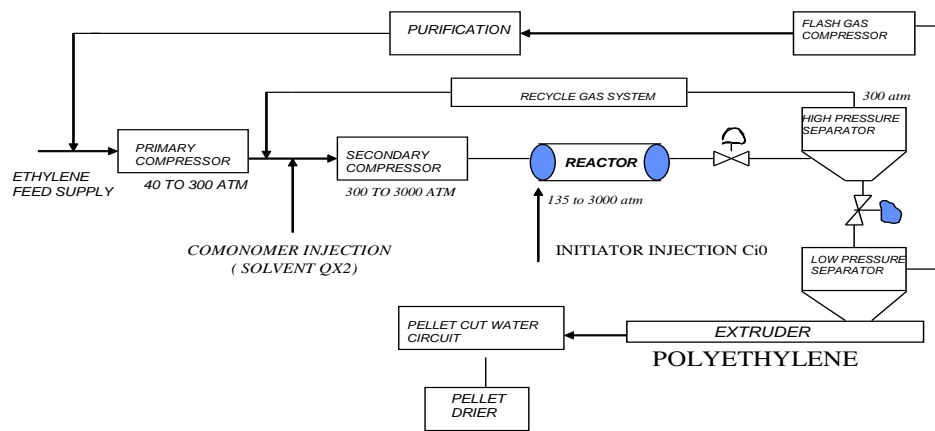


Figura 2.1 Diagrama de proceso

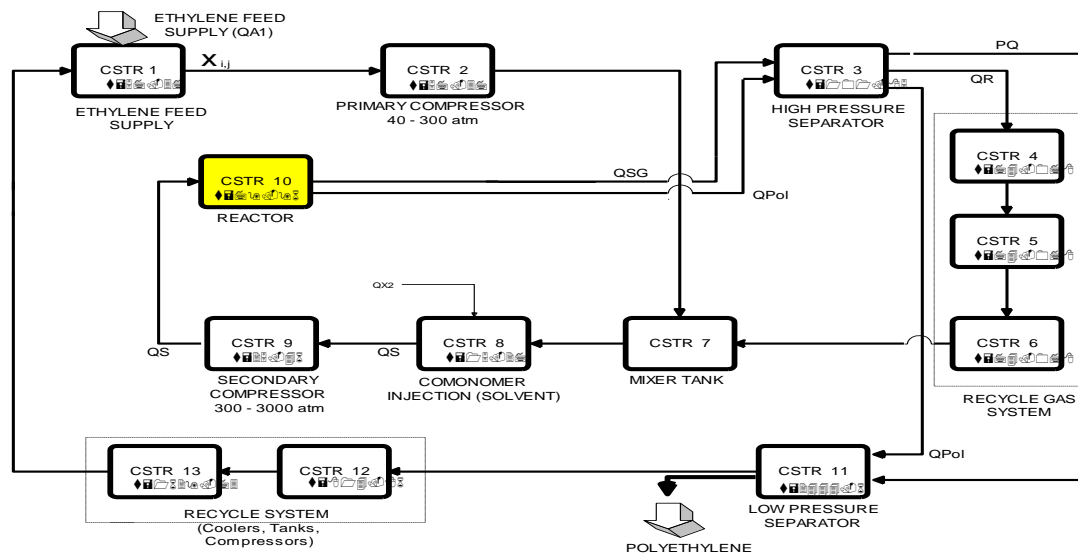


Figura 2.2 Distribución de los CSTRs

SIMBOLO	NOMBRE DE VARIABLE	UNIDADES
1. ρ	Densidad de la mezcla en cada Reactor	Kg/m ³
2. V_j	Volumen del Reactor	m ³
3. $x_{i,j}(t)$	Concentración del producto i en el Reactor j j=1,2,...,13 i=1,2	Weightfrac
4. QA1	Suministro de etileno (materia prima)	Kg/sec
5. QP	Polietileno reciclado desde CSTR 13	Kg/sec
6. Qx2	Inyección de flujo (Disolvente)	Kg/sec
7. QS	Alimentación del compresor secundario	Kg/sec
8. QR	Alimentación a la red de gas de reciclaje	Kg/sec
9. PQ=QP	Alimentación al compresor de gas flash	Kg/sec
10. Qpol	Polietileno	Kg/sec
11. Conv	Conversion	%

Tabla 2.1 Variables para el Balance de Masa

La Conversión de monómero es una variable muy importante, ya que cuantifica la evolución de la polimerización. Esta conversión se define como la fracción del monómero inicial que se ha convertido en un polímero en un momento dado. Es usual decir aquí que esta conversión se dará por el modelo del reactor cuando se integra con el modelo de balance de masa.

2.2 EL CONJUNTO DE ECUACIONES PARA EL MODELO DE BALANCE DE MASA

Usando los diagramas mostrados en la **figura 2.1 y 2.2** y el conjunto de las variables anteriores, el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales de primer orden se establecieron para cada reactor de mezcla, teniendo en cuenta también las relaciones algebraicas más importantes:

$$Q_{pol} = conv * Q_S \qquad Q_P = P_Q = 0.25 * Q_{pol}$$

$$Q_{A1} = Q_{pol} - Q_{X2} \qquad Q_{AA3} = Q_P + Q_{A1}$$

$$Q_{SG} = (1 - conv) * Q_S \qquad Q_R = Q_S - Q_{AA3} - Q_{X2} = Q_{SG} - P_Q$$

Observando estas relaciones, como se dijo antes, Q_S se fija en 8,33 kg /s, y el modelo de simulación de balance de masa siempre cumplirá esta condición.

Todas las ecuaciones de balance de masas tienen la siguiente forma general:

$$\rho * V_j * \frac{dx_{i,j}^*}{dt} = F_j * x_{i,j} - F_{oj} * x_{i,j}^*$$

Donde : ρ = Densidad de la mezcla en cada CSTR (Kg/M3)

V = Volumen del Reactor (m3)

$x_{i,j}$ = Entrada de la concentración del producto i en el reactor de j
(Fracción de peso)

$x_{i,j}^*$ = Salida de la concentración del producto i en el reactor de j
(Fracción de peso)

F_j = Entrada de flujo de masa (Kg/sec)

F_{oj} = Salida de flujo de masa (Kg/sec)

De acuerdo a esto, aquí están algunas de las ecuaciones diferenciales para el balance de masa que será simulado, el conjunto completo de ellos se puede ver en el **apéndice B**.

CSTR 1.....SUMINISTRO DE ETILENO

$$\rho_1 V_1 \frac{dx_{1,1}(t)}{dt} = QP * x_{1,13}(t) + QAI - (QP + QAI) * x_{1,1}(t)$$

$$\rho_1 V_1 \frac{dx_{i,1}(t)}{dt} = QP * x_{i,13}(t) - (QP + QAI) * x_{i,1}(t) \quad i = 2$$

$$\tau = \frac{\rho_1 * V_1}{QP + QAI} = \frac{424.24 * 0.35}{0.520625 + 2.0675} = 57.37 \text{ Sec}$$

CSTR 2.....COMPRESOR PRIMARIO (40-300 atm.)

$$\rho_2 V_2 \frac{dx_{i,2}(t)}{dt} = (QP + QAI) * x_{i,1}(t) - (QP + QAI) * x_{i,2}(t) \quad i = 1,2$$

$$\tau = \frac{\rho_2 * V_2}{QP + QAI} = \frac{424.24 * 0.35}{0.520625 + 2.0675} = 57.37 \text{ Sec}$$

2.3 MODELO Y SIMULACION DEL BALANCE DE MASA

Usando MATLAB / Simulink, este conjunto de ecuaciones diferenciales que caracterizan el balance de masa fue modelado como aparece en la **figura 2.3**.

Una vez que el modelo de balance de masa simulink estaba disponible, con condiciones iniciales para estado estacionario, se observó el siguiente procedimiento:

1. Los volúmenes (v) se pusieron a 1e-6 en el archivo.
2. Las condiciones iniciales para el disolvente se establece en cero, por lo que $x_2, j = 0$.
3. Las condiciones iniciales para el monómero se establece en 1, por lo que $x_1, j = 1$.
4. QX2 se fijó en 0,015 Kg / seg.
5. QS fue arreglado a 8,33 Kg / seg (siempre es constante).
6. conv se fijó en 0,0055 (0,55%).
7. Tiempo de parada para la simulación (st) se fijó en 1 seg.
8. El tamaño de paso mínimo se fijó en 0,0000001 y el paso de tamaño máximo de 0,001.
9. Se uso la rutina RK45.

Después de ejecutar la simulación con condiciones iniciales se encontraron los siguientes resultados.

ic (1,1) corresponde a una concentración X_{1_1} y así sucesivamente.

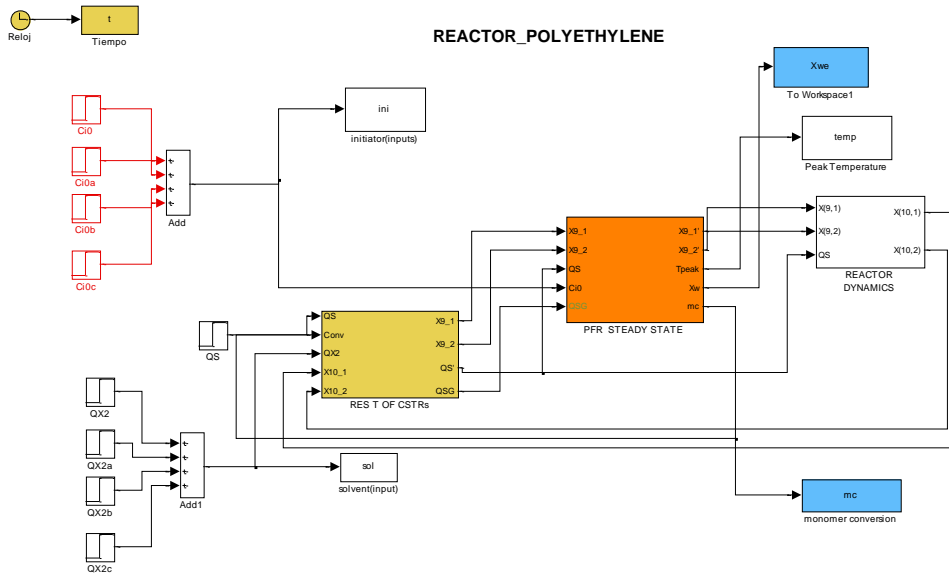


Figura 2.3 Balance de masa de los 13 reactores

2.4 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

El siguiente paso fue poner los volúmenes en sus valores normales, colocando las condiciones iniciales nuevas, aplique un paso en la conversión de 0.0055 ($t = 0$) a 0,1 ($t = 1200$ seg |) y de nuevo 0.0055 ($t = 5000$ segundos) obteniendo como resultado los perfiles de las concentraciones que se pueden ver en la figura. 2,4 y 2,5. Tenga en cuenta que la concentración X_{1_1} vuelve más rápido al estado de equilibrio que la concentración X_{7_1} .

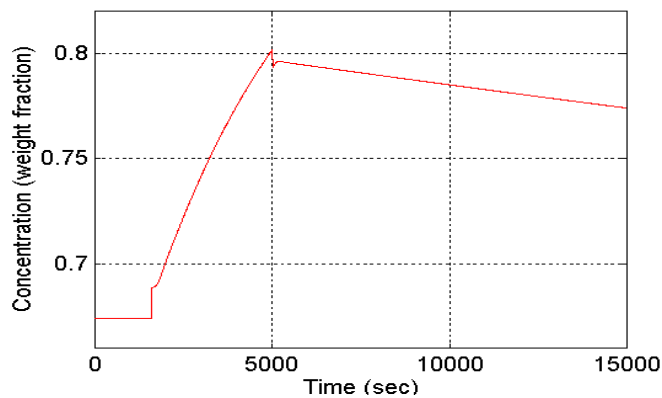


Figura 2.4 Concentración X_{7_1}

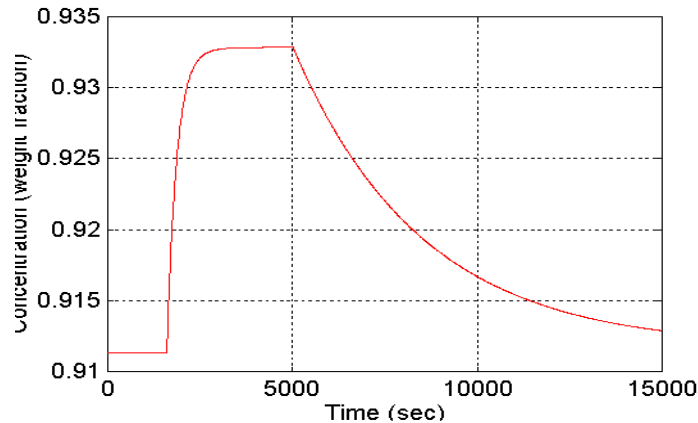


Figura 2.5 Concentración X1_1

Analizando las constantes de tiempo para cada reactor de mezcla (ver **figura 2.2** y el Apéndice B), se observó CSTR 7 (0,51 seg), CSRT 8 (15,27 seg), y CSTR 9 (25.46 seg), constantes que sirven para escoger más adelante el tamaño de paso de la simulación (10 segundos por ejemplo), la dinámica de estos 3 CSTRs se omitió. Como resultado de la figura. 2,6 la concentración X7_1 (concentración de monómero en el reactor de mezcla CSTR7) se puede ver no hay una diferencia importante en la precisión, teniendo en cuenta que el tamaño de paso para la simulación sin la dinámica fue tres veces mayor que la utilizada con dinámica.

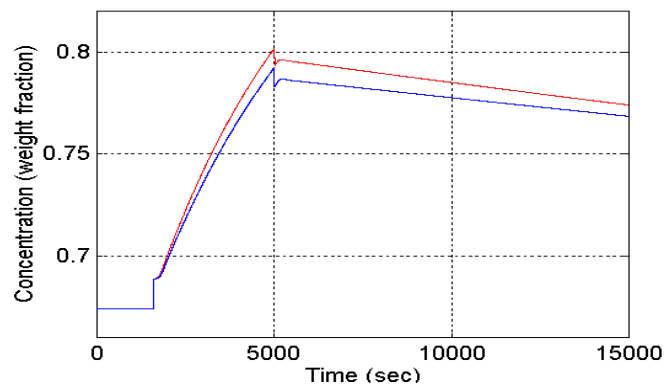


Figura 2.6 Concentración X7_1 con y sin dinámicas de los CSTRs 7/8/9

De la misma manera, la **figura 2.7** muestra la comparación entre la concentración X7_2 (concentración del disolvente en el reactor de mezcla CSTR 7) con y sin dinámica. Aquí también, el resultado es casi el mismo, así que una buena aproximación puede hacerse de esta manera. De todos modos, la idea de esta aproximación es utilizar un tamaño de paso mayor para la simulación del modelo integrado, más adelante. La **figura 2.8** muestra la concentración del monómero en el reactor de mezcla CSTR 5 (X5_1) y se observan los mismos resultados que antes. La concentración X1_1 (concentración del monómero en el reactor

de mezcla CSTR 1) se observa en la **figura 2.9**, se puede observar que no hay diferencia entre las dos graficas, por lo que las concentraciones de este reactor de mezcla no cambian si la dinámica de los CSTRs 7,8, y 9 se omiten.

En resumen, el balance de masa modelo Simulink que va a ser integrado más tarde, con el reactor, corresponde con un modelo sin la dinámica de los CSTRs 7,8, y 9.

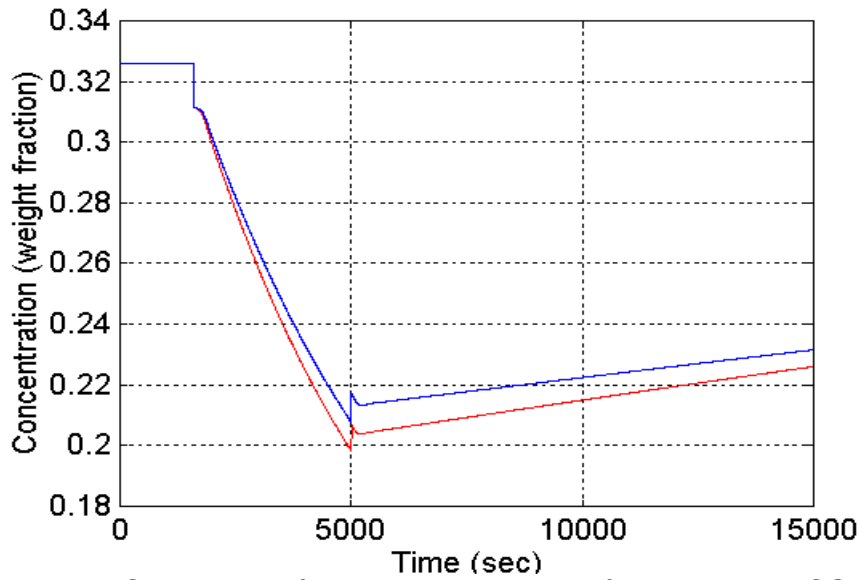


Figura 2.7 Concentración X7_2 con y sin dinámicas de los CSTRs 7/8/9

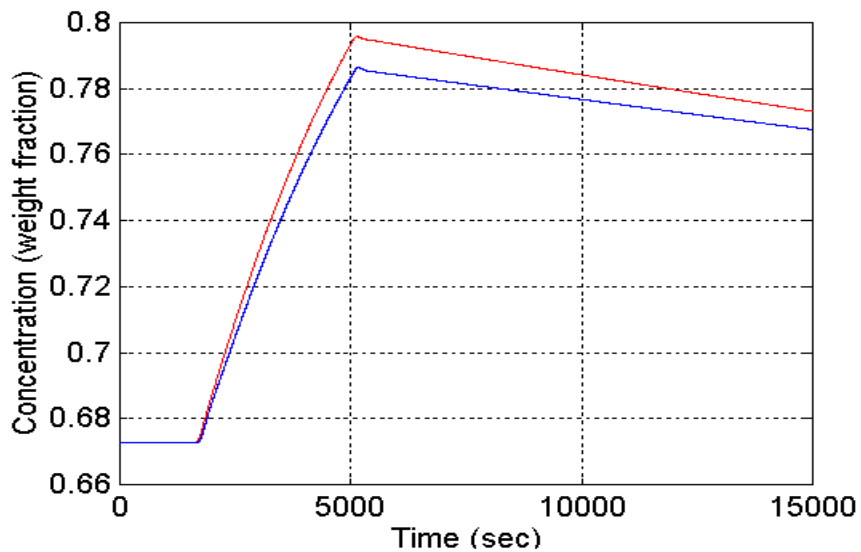


Figura 2.8 Concentración X5_1 con y sin dinámicas de los CSTRs 7/8/9

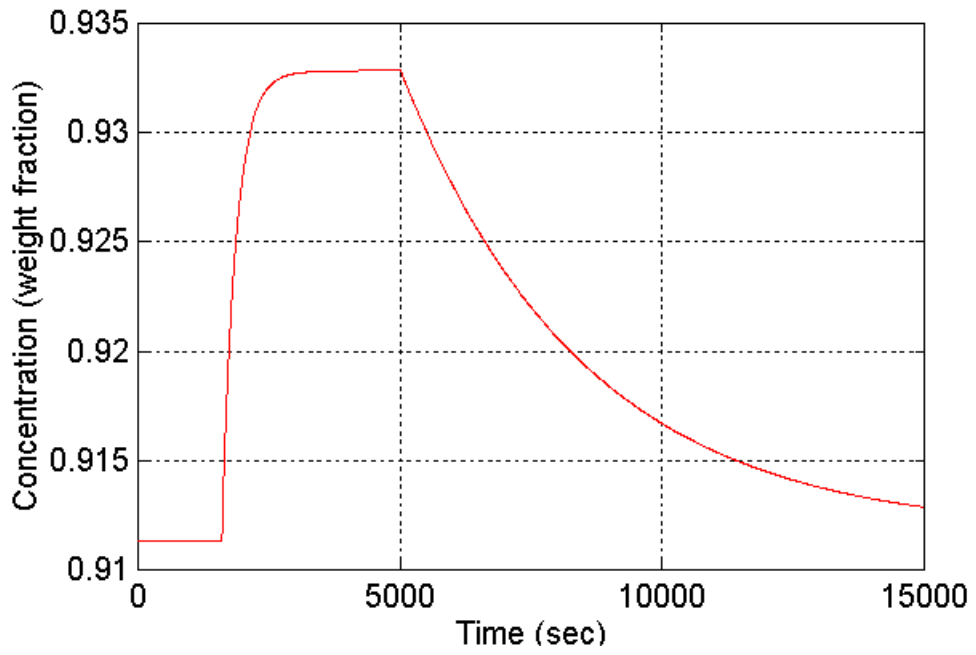


Figura 2.9 Concentración X1_1 con y sin dinámicas de los CSTRs 7/8/9

3. EL MODELO DE REACTOR

3.1 REACTOR TUBULAR (PLUG FLOW REACTOR)

El número de tipos de reactores es muy grande en la industria química. Incluso para la misma operación, tales como la nitración de tolueno, se utilizan diferentes tipos: el reactor discontinuo, el reactor de tanque agitado continuo (CSTR), y una cascada de tanques agitados, reactores de flujo del tipo tubular se utilizan para estos procesos tan diferentes como la nitración de la glicerina, la sulfonación de aromáticos, o reacciones en fase gaseosa como polimerización, craqueo térmico o la nitración de parafinas.

El modelado de los reactores químicos no se basa en la forma exterior del aparato ni de la reacción que tiene lugar en ella, ni siquiera sobre la naturaleza del medio homogéneo o no. Centrándose en los fenómenos que tienen lugar en el reactor reduce la aparente diversidad en un pequeño número de modelos o tipos básicos de reactores.

Los fenómenos que tienen lugar en un reactor pueden dividirse en la reacción, la transferencia de masa, calor y movimiento. El modelado y diseño de los reactores se basa por tanto en las ecuaciones que describen estos fenómenos: la ecuación de velocidad de reacción, la continuidad, la energía, y las ecuaciones de movimiento.

El primer paso hacia la respuesta a lo que la conversión de M (monómero) en el reactor será, consiste en aplicar la ley de conservación de la masa en un volumen de elementos del reactor, fijo en el espacio:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Amount_of_M} \\ \text{introduced_per} \\ \text{unit_time} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Amount_of_M} \\ \text{leaving_per} \\ \text{unit_time} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Amount_of_M} \\ \text{converted_per} \\ \text{unit_time} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Amount_of_M} \\ \text{accumulated_per} \\ \text{unit_time} \end{array} \right]$$

En términos matemáticos, esto es nada más que la ecuación de continuidad con M como la cantidad de material. En el presente caso la reacción se lleva a cabo sólo en fase gaseosa.

El cruce de líneas de corriente diferentes, y la mezcla de elementos de fluido con características diferentes que resultan de este cruce, son puntos difíciles en el diseño de reactores químicos. Por tanto, es natural considerar, para una primera aproximación, dos casos extremos: una primera donde no hay mezcla de las líneas de corriente, un segundo, cuando la mezcla es completa. Estos dos extremos se pueden visualizar con suficiente aproximación por el reactor tubular con flujo de pistón y de flujo continuo tanque agitado con una mezcla completa. En el presente estudio se considera el reactor tubular o plug flow reactor PFR.

En el reactor de flujo en pistón, todos los elementos del fluido se mueven a lo largo de líneas de corriente en paralelo con la misma velocidad v . El flujo de pistón es el único mecanismo para el transporte de masa y no hay mezcla entre elementos del fluido. La reacción por tanto, sólo da lugar a un gradiente de concentración en el sentido de flujo axial. Para condiciones de estado estable, para el que no hay acumulación por unidad de tiempo, la ecuación de continuidad es una ecuación de primer orden, ecuaciones diferenciales ordinarias con la coordenada axial como variable. Para las condiciones de no-estado estacionario, la ecuación de continuidad es una ecuación diferencial parcial con coordenadas axiales y tiempo como variables. En este estudio, el primer caso se considera, es decir, la condición de estado estable para el reactor de flujo en pistón. El **apéndice C** muestra el aspecto matemático del reactor tubular.

La **figura. 3.1** muestra el diagrama general de un reactor tubular. Es importante señalar que, en flujo de pistón con velocidad constante, cada rebanada delgada de líquido se mueve a través del vaso y sin ninguna interacción con las rebanadas de los vecinos. El sistema es totalmente separado, cada rebanada delgada debe comportarse de la misma forma como en un reactor discontinuo.

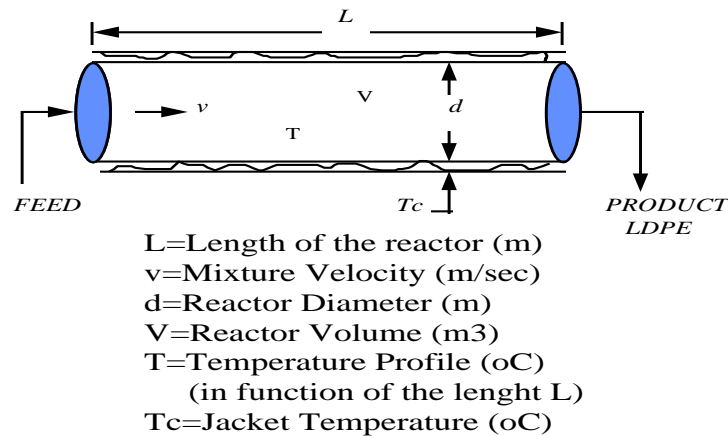


Figura 3.1 Plug Flow Reactor

La relación L/v da el tiempo de permanencia en el reactor, o también denominado tiempo de residencia. El balance de energía se establece de acuerdo al paper de Yoon y será descrito en el conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales en la sección siguiente.

3.1.1 Parámetros para el modelo de reactor.

En la **Tabla 3.1** se condensan los parámetros que intervienen en el modelo del PFR.

SIMBOLO	NOMBRE VARIABLE	UNIDADES	
1. F_i	Flujo molar del iniciador	mol/sec	
2. F_{si}	Flujo molar del disolvente	mol/sec	
3. F_m	Flujo molar del monomero m	mol/sec	
4. F_R	Molar de Flujo de los radicales	mol/sec	
5. C_i	Concentracion para el iniciador	mol/l	
6. C_{si}	Concentracion para el disolvente	mol/l	
7. C_m	Concentracion para el monomero m	mol/l	
8. C_R	Concentracion de los radicales	mol/l	
9. K_d	Tasa constante de disociación del iniciador	1/sec	
10. K_{tsi}	Tasa Constante de transferencia de cadena al solvente	l/mol sec	
11. K_{tm}	Tasa constante de transferencia de cadena al monomero	l/mol sec	
12. K_i	Radicales constantes de velocidad	l/mol sec	
13. K_{ip}	Constante para la transferencia de la cadena de polimero	l/mol sec	
14. K_p	Constante de velocidad de Propagacion	l/mol sec	
15. K_r	Constante de velocidad de terminación por combinación	l/mol sec	
16. v	Velocidad de reacción en el mezclado	cm/sec	Constant
17. d	Diametro interior del tubo	cm	Constant
18. A	Sección transversal del tubo	cm ²	Constant
19. f_i	Iniciador de eficiencia	--	
20. L	Longitud del reactor	cm	Constant
21. z	Adimensional distancia axial, x/L		
22. ρ	Densidad de la mezcla de reacción	g/cm ³	Constant
23. C_p	Calor especifico	cal/g.°C	Constant
24. T	Reacción de temperatura	°C	
25. T_c	Chaqueta de la temperatura	°C	
26. $(-\Delta H_p)_{r,T}$	Propagacion entalpía de reacción	cal/mol	Constant
27. U	Coeficiente de transmission termica	cal/cm ² .	Constant

28. ΔE	La activación de la energía	sec.°C	Constant
29. R_g	Constante universal de gas	cal/mol K	Constant
30. λ_n	n-moment con respecto a la NCLD de vida del polimero	mol/l	
31. $F_{\lambda n}$	Flujo Molar de la n-moment con respecto a la NCLD de vida del polímero.	mol/sec	
32. μ_n	n-moment con respecto a la NCLD de muertes del polimero	mol/l	
33. $F_{\mu n}$	Flujo Molar de la n-moment con respect a la NCLD de muerte del polimero	mol/sec	
34. K	$10^3 \text{ cm}^3/\text{l}$ (para unidad de conversión)		Constant
35. x	Distancia axial	cm	
36. X_n	Numero medio del grado de polimerización		
37. X_w	Promedio de peso grado de polimerización		
38. D	Polidispersidad		
39. y1	$(C_{i0}-C_i)/C_{i0}$, Iniciador de conversión		
40. y2	$(C_{m0}-C_m)/C_{m0}$, Monomero de conversión		

Tabla 3.1 Parámetros para el modelo de reactor

Los flujos molares de cualquier especie (monómero, el iniciador o solvente) están relacionados con las concentraciones de las especies correspondientes por la ecuación, $F_j = A.v.C_j$

Donde : F_j es el flujo molar del componente j (mol / s)

A es el área de la sección (m²)

v es la velocidad de la mezcla (m / seg)

C_j es la concentración de la especie respectiva (mol / l)

Uno de los problemas más importantes en la simulación de la operación de reactores industriales LDPE de alta presión es la selección de valores apropiados para las constantes de velocidad diferentes. Pese a la gran cantidad de documentos que han sido publicadas en el modelado de los reactores de LDPE (ver Apéndice D), un conjunto coherente de constantes de velocidad aún no se ha establecido en la bibliografía. En la **tabla 3.2** se reportan los valores de los parámetros cinéticos utilizados en el presente estudio, de acuerdo a la información que la EXXON permite hacer pública.

Cinética constante de velocidad		K_{x0}	E (cal/mol)
K_d	Iniciación	$1.60 \cdot 10^{16} \text{ sec}^{-1}$	38400
K_i		$2.95 \cdot 10^7 \text{ l/(mol.sec)}$	7091
K_p	Propagación	$2.95 \cdot 10^7 \text{ l/(mol.sec)}$	7091
K_{tm}	Traslado a la cadena de monómero	$5.83 \cdot 10^5 \text{ l/(mol.sec)}$	10090
K_{tp}	Transferencia a la cadena de polímero	$9.00 \cdot 10^5 \text{ l/(mol.sec)}$	9000
K_r	Combinación	$1.60 \cdot 10^9 \text{ l/(mol.sec)}$	2400
K_{tsi}	Transferencia de cadena para solvente	$3.41 \cdot 10^7 \text{ l/(mol.sec)}$	12820
$R=1.987 \text{ cal/(mol}^\circ\text{K)}$		T_{abs} in $^\circ\text{K}$	REMARK: $T_{\text{abs}} = T + 273.15 \text{ }^\circ\text{C}$
$k = k_{x0} e^{-E/RT_{\text{abs}}}$		Ecuación de Arrhenius	

Tabla 3.2 Conjunto de constantes cinéticas

En el **apéndice A** se puede observar los principios químicos de la polimerización, y ahí se definió el conjunto de ecuaciones que rigen el proceso de polimerización, y por cada reacción la respectiva constante cinética.

3.2 CONJUNTO DE ECUACIONES PARA EL MODELO DE REACTOR NO LINEAL

Teniendo en cuenta el tipo de reactor utilizado en este estudio y el conjunto de parámetros que intervienen, el conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales para el modelo del reactor tubular son las siguientes:

$$\frac{dC_i}{dz} = -\left(\frac{L}{v}\right)K_d C_i \quad (\text{Eq. 3.1})$$

$$\frac{dC_m}{dz} = -\left(\frac{L}{v}\right)(K_i C_R + K_p \lambda_0 + K_{tm} \lambda_0) C_m \quad (\text{Eq. 3.2})$$

$$\frac{dC_{si}}{dz} = -\left(\frac{L}{v}\right)(K_{tsi} \lambda_0 C_{si}) \quad (\text{Eq. 3.3})$$

$$\frac{dC_R}{dz} = \left(\frac{L}{v}\right)(2f_i K_d C_i - K_i C_R C_m) \quad (\text{Eq. 3.4})$$

$$\frac{d\lambda_0}{dz} = \left(\frac{L}{v}\right)(K_i C_R C_m - K_r \lambda_0^2) \quad (\text{Eq. 3.5})$$

$$\frac{d\lambda_1}{dz} = \left(\frac{L}{v}\right) [K_i C_R C_m + K_p \lambda_0 C_m - K_{tm} C_m (\lambda_1 - \lambda_0) + K_{tp} (\lambda_0 \mu_2 - \lambda_1 \mu_1) - K_r \lambda_0 \lambda_1 - K_{tsi} C_{si} (\lambda_1 - \lambda_0)] \quad (\text{Eq. 3.6})$$

$$\frac{d\mu_0}{dz} = \left(\frac{L}{v}\right)(K_{tm} \lambda_0 C_m + 0.5 K_r \lambda_0^2 + K_{tsi} C_{si} \lambda_0) \quad (\text{Eq. 3.7})$$

$$\frac{d(\lambda_1 + \mu_1)}{dz} \cong \frac{d\mu_1}{dz} = \left(\frac{L}{v}\right)(K_i C_R C_m + K_p \lambda_0 C_m + K_{tm} \lambda_0 C_m + K_{tsi} C_{si} \lambda_0) \quad (\text{Eq.3. 8})$$

$$\frac{d(\lambda_2 + \mu_2)}{dz} \cong \frac{d\mu_2}{dz} = \left(\frac{L}{v}\right)(K_{tm} \lambda_0 C_m + K_{tsi} \lambda_0 C_{si} + K_i C_R C_m + K_p C_m \lambda_0 + 2K_p C_m \lambda_1 + K_r \lambda_1^2) \quad (\text{Eq. 3.9})$$

$$\frac{dT}{dz} = \left(\frac{1}{\rho C_p}\right) \left(\frac{L}{v}\right) \left\{ (-\Delta H_p) K_p C_m \lambda_0 - \frac{4U}{d} (T - T_c) K \right\} \quad (\text{Eq. 3.10})$$

$$X_n = \frac{\lambda_1 + \mu_1}{\lambda_0 + \mu_0} \quad (\text{Eq. 3.11})$$

$$X_w = \frac{\lambda_2 + \mu_2}{\lambda_1 + \mu_1} \approx \frac{\mu_2}{\lambda_1 + \mu_1} \quad (\text{Eq. 3.12})$$

Es importante señalar aquí que el conjunto original de ecuaciones que fue la base para esta formulación, incluyó sólo 8 ecuaciones. El presente estudio adiciona dos ecuaciones más que involucran el disolvente en el sistema.

3.3 EL MODELO DE SIMULACION DEL REACTOR

Para la simulación del reactor, en primer lugar el conjunto de ecuaciones no lineales del estudio realizado por Yoon fue simulado en MATLAB, utilizando la rutina ODE15S, de la colección de ODESUITE MATLAB. El **apéndice D** muestra los diferentes resultados obtenidos por Yoon en su paper.

El conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales que describen la dinámica del reactor como se puede ver arriba, están escritas en función de la longitud del reactor ($z = 0$ en la entrada y $z = L$ en la salida). Esto se llama un sistema rígido de ecuaciones diferenciales, debido a las grandes variaciones que se pueden presentar en un tiempo muy corto, por lo que tenemos aquí pendientes grandes, gradientes grandes, lo que no sucede en el caso del conjunto de ecuaciones diferenciales que representan el balance de masa. Por eso, para el reactor, las rutinas de simulación como RK23, RK45 o RK113 no funcionan.

Por último, para efectuar la simulación del reactor, en la **Tabla 3.3** se tienen los parámetros usados.

SIMBOLO	UNIDAD	VALOR PARAMETRO
1. $-\Delta H_P$		22000
	cal/mol	
2. f_i	---	0.5
3. ΔC_P	cal/l °C	600
4. d	cm	5
5. L/v	sec	80
6. U	cal/cm ² sec °C	0.03
7. C_{m0}	mol/l	18
8. C_{i0}	mol/l	5×10^4
9. T_0	°C	100
10. T_C	°C	190
11. R_g	cal/mol °K	1.987
12. K	<i>ScalingFactor</i>	10^3

Tabla 3.3 Parámetros para la simulación del reactor

3.4 RESULTADOS DE LA SIMULACION.

Como se comentó antes, el conjunto de ecuaciones no lineales fue escrito en el entorno de MATLAB utilizando la rutina ODE15S. Las **figuras 3.2 a 3.6** muestran los resultados.

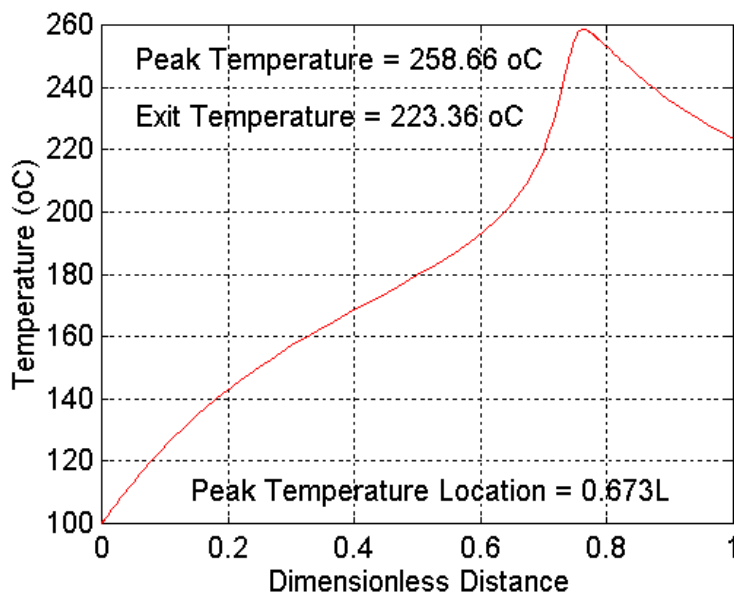


Figura 3.2 Perfil de Temperatura

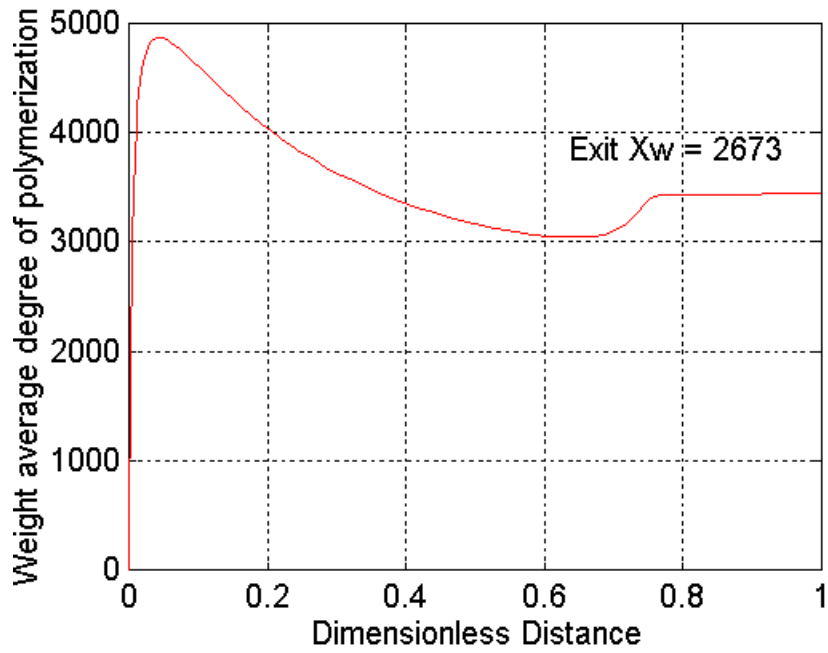


Figura 3.3 Peso promedio de grado de polimerización

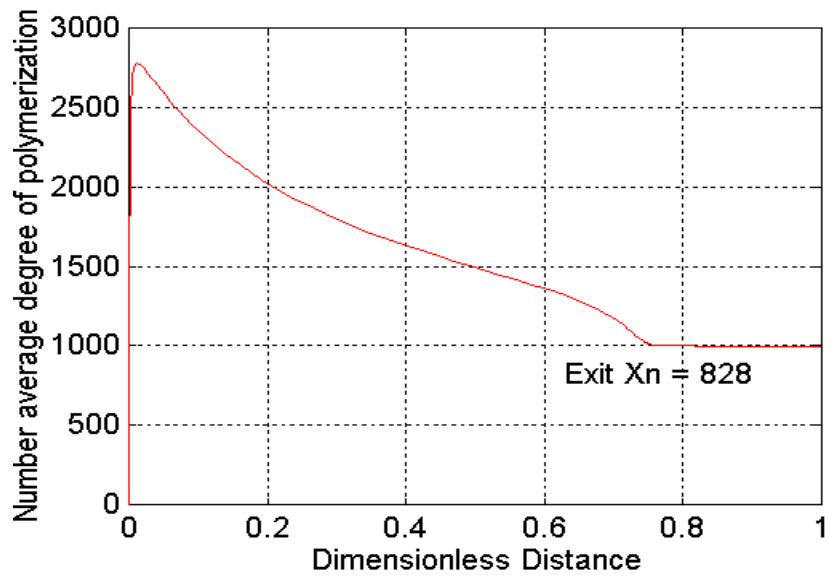


Figura 3.4 Cantidad promedio grado de polimerización

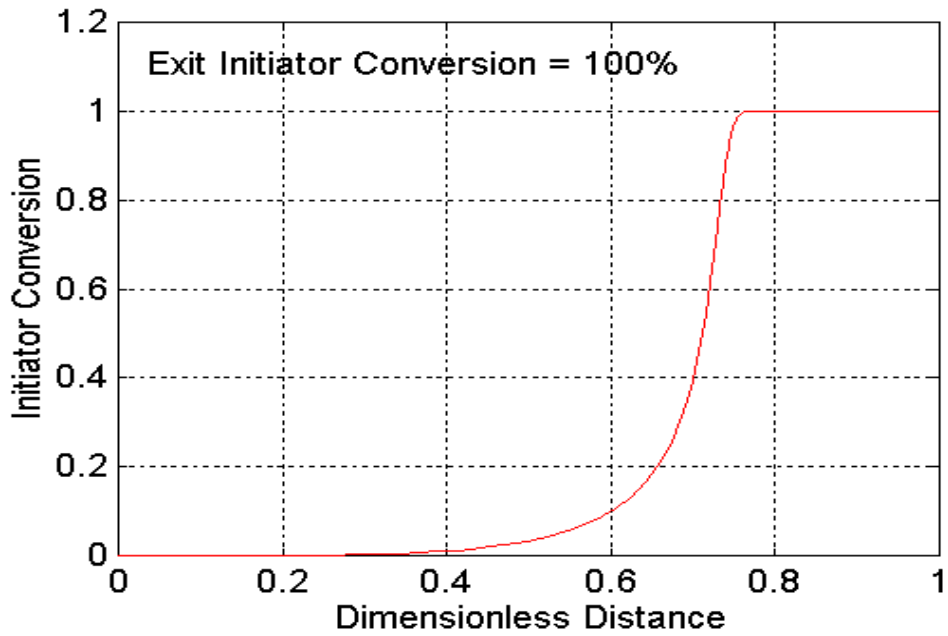


Figura 3.5 Conversión del iniciador

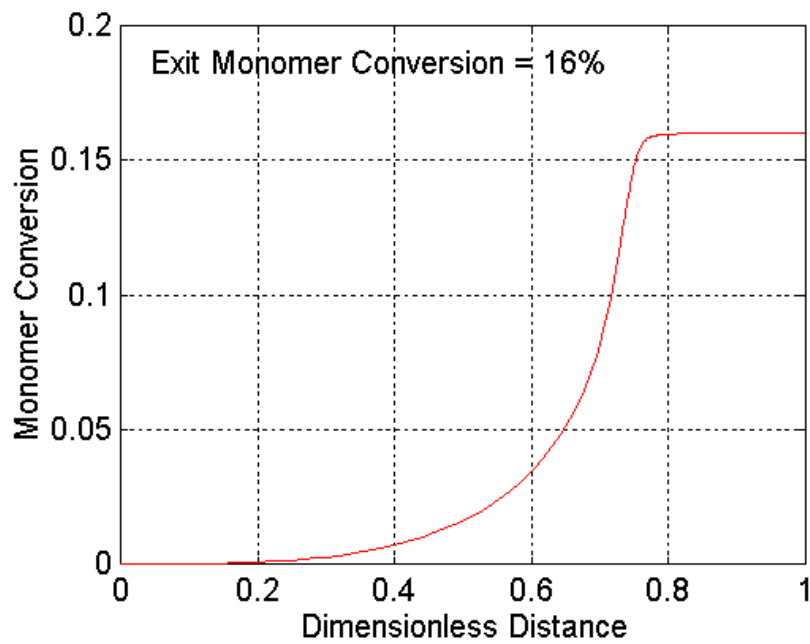


Figura 3.6 Conversión de monómero

La **Tabla 3.4** muestra la comparación de resultados entre el modelo de Yoon (**apéndice E**) y los resultados del conjunto de ecuaciones del presente estudio.

RENDIMIENTO	MODELO YOON	PRESENTE ESTUDIO	DIFERENCIA?
1. Salida conversión monomero	16%	16%	NO
2. Salida Conversion del Iniciador	100%	100%	NO
3. Temperatura de salida	223.36 °C	223.36°C	NO
4. Pico de Temperatura	258.66°C	258.66°C	NO
5. Pico ubicación de Temperatura	0.706L	0.673L	SI
6. Salida Xn	997	828	SI
7. Salida Xw	2059	2673	SI

Tabla 3.4 Desempeño del Reactor del modelo de Yoon's y el presente estudio (con disolvente)

De estos resultados se puede observar que el impacto de disolvente (CSI en el conjunto de ecuaciones para el modelo de reactor) en Xn (grado promedio de polimerización) y en Xw (grado de polimerización peso medio) es importante. En la **figura 3.7** se puede ver la diferencia entre Xw del modelo de Yoon y Xw del presente estudio (uso o no de disolvente).

Observe que cuando el disolvente se incrementa, disminuye Xn.

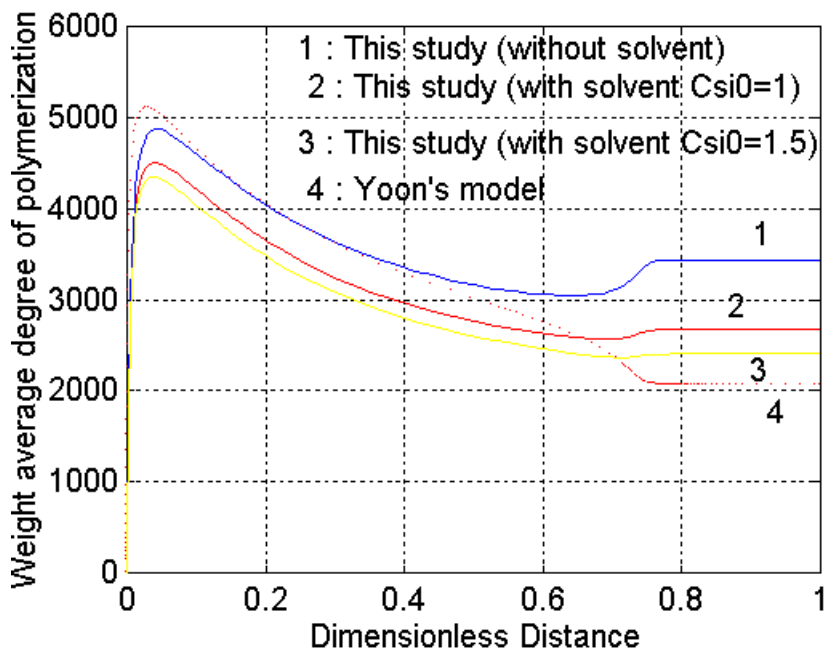


Figura 3.7 Peso promedio de grado de polimerización

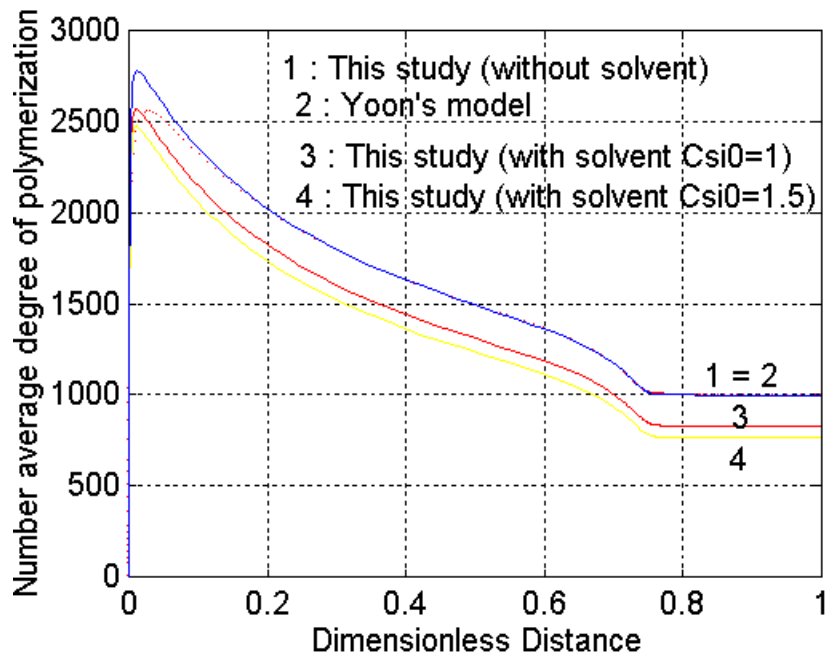


Figura 3.8 Cantidad promedio grado de polimerización

En el capítulo siguiente se integra el balance de masa con la dinámica del reactor, en lo que se denomina un modelo integrado.

4. EL MODELO INTEGRADO

4.1 DESCRIPCIÓN DE LA INTEGRACIÓN

La principal contribución de este trabajo es el hecho de tener un modelo completo de balance de masa, donde interactúa dinámicamente con el reactor. La mayoría de los estudios realizados antes, se enfocan principalmente en el desempeño del reactor.

Otra observación importante es que el conjunto de ecuaciones diferenciales que caracterizan el modelo de balance de masa están escritas en función del tiempo, mientras que el conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales que caracterizan el modelo de reactor están escritas en función de la longitud del reactor. De esta manera, el modelo integrado ejecuta las ecuaciones de balance de masa como una función del tiempo, y funciona el reactor en función de la longitud del reactor.

¿Cómo se hace esta integración?. **La figura 2.3** mostró el modelo de balance de masa en simulink, los dos primeros puertos de salida que salen del bloque "Resto del CSTRs" son las concentraciones X_{9_1} (concentración de monómero en CSTR 9) y X_{9_2} (concentración de disolvente en CSTR 9).

Estas dos concentraciones son, al mismo tiempo, los dos primeros puertos de entrada al bloque de "Reactor Dinámico", como puede verse en la **figura 2.3**. La idea era poner el conjunto de ecuaciones no lineales del reactor (reactor de modelo descrito en el capítulo 3), entre el reactor de mezcla CSTR 9 (compresor secundario) y el CSTR 10 (Reactor).

4.2 EL MODELO INTEGRADO.

La **figura 4.1** muestra el modelo integrado en simulink. Se puede ver en el medio, el reactor en forma de s-function, el mismo modelo descrito en el capítulo 3.

Para tener consistencia en las unidades, se diseñaron dos interfases. La primera, convierte las concentraciones X_{9_1} y X_{9_2} que están en fracción de peso, a C_{m0} concentraciones iniciales (concentración inicial del monómero en el modelo de reactor) y C_{s0} (concentración inicial para el disolvente en el modelo de reactor), que debe estar en mol / l. Este último, convierte una vez más las

dos concentraciones de salida del reactor (C_m y C_{SI}), que están en mol / l, en las concentraciones $X9_1$ y $X9_2$ que deben estar en fracción de peso, cerrando el ciclo de conversión de unidades.

El modelo de balance de masa se resuelve en el entorno de **SIMULINK**, mientras que el reactor en estado estacionario se ha resuelto en **MATLAB**. Como puede verse, el modelo de reactor está incrustado en el balance de masa, para construir el modelo integrado.

El modelo integrado es simulado, digamos 360 veces, y cada vez (tamaño de paso), el reactor se resuelve. Usted puede ver que hay un bloque de retraso, que corresponde al tiempo de residencia del reactor.

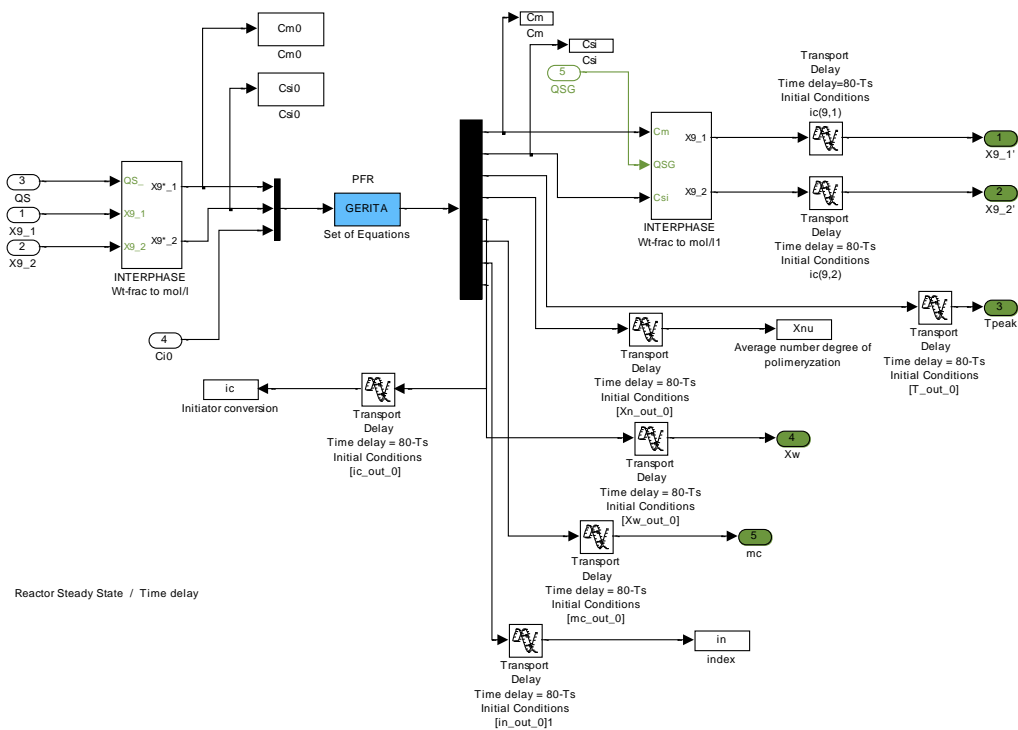
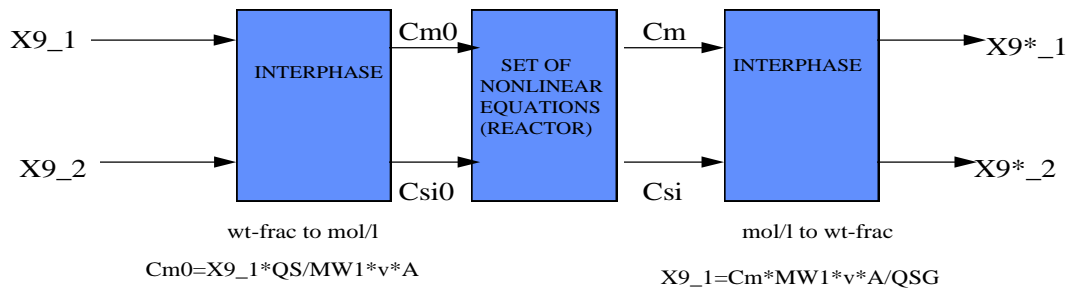


Figura 4.1 Modelo Integrado

En el **apéndice D** se muestra la relación de algunos parámetros del modelo de balance de masa y el modelo del reactor.



- X9_1 : Monomer concentration going out CSTR 9 (weight fraction)
- X9_2 : Solvent concentration going out CSTR 9 (weight fraction)
- Cm0 : Initial condition for monomer concentration inside the steady state reactor model (mol/l)
- Csi0 : Initial condition for solvent concentration inside the steady state reactor model (mol/l)
- Cm : Monomer concentration going out the steady state reactor (mol/l)
- Csi : Solvent concentration going out the steady state reactor (mol/l)
- X9*_1 : Monomer concentration going out the steady state reactor (weight fraction)
- X9*_2 : Solvent concentration going out the steady state reactor (weight fraction)
- MW1 : Monomer molecular weight (g/mol)
- QS : Feed to the secondary compressor (Kg/sec)
- v : Mixture velocity (m/sec)
- A : Section area of the reactor (m²)

Figura 4.2. Esquema de integración

En la **figura 4.2** se describe mejor la integración entre el modelo de balance de masa en simulink y el modelo de estado estacionario del reactor. La integración se realizó con una S-Function, que puede verse en el archivo gerita.m. Las instrucciones sobre cómo utilizar la S-Function se pueden ver en la Guía del usuario de Simulink.

En el interior de la S-función, el reactor (conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales) fue discretizado para ejecutarse cada tiempo de muestreo Ts.

Obviamente, al igual que el modelo integrado se resuelve cada tamaño de paso (10 segundos por ejemplo), entonces el reactor se debe ejecutar todos los Ts = 10 seg.

El software necesario para ejecutar el modelo integrado se puede encontrar en los siguientes archivos que están disponibles:

Polyethylene.mdl: Contiene el bloque de Simulink con el modelo integrado.

gerita.m: que define la S-function para ejecutar el reactor. Esta S-función, tiene tres entradas (Ci0 - iniciador inicial, Cm0 - monómero inicial y Csi0 disolvente inicial), utilizando la rutina del odesuite ODE15S, se resuelve el reactor, y como resultado, se calculan 8:

a) la concentración de monómero Cm (que va a la interfase y luego al reactor de mezcla CSTR 10).

- b) la concentración de disolvente C_{si} (que va a la interfase y luego al reactor de mezcla CSTR 10).
- c) la temperatura máxima (temp) dentro del reactor (llamado temperatura pico).
- d) la ubicación de pico (en), es decir, la posición en la longitud del reactor, donde la temperatura máxima se registra.
- e) El número de peso promedio de polimerización (X_{We}).
- f) El número promedio de polimerización (X_{nu}).
- g) La conversión del monómero (m_c), que va directamente al modelo de balance de masa para sustituir la variable conv.
- h) La conversión de iniciador (i_c)

Es importante saber que todas estas 8 salidas están en función del tiempo.

PFR_init.m: Contiene condiciones iniciales para las concentraciones, los volúmenes de reactor, el tiempo de muestreo para el funcionamiento del reactor y las condiciones iniciales para el retardo utilizado en el modelo integrado.

4.3 RESULTADOS DE LA SIMULACION

4.3.1 Resultados del Estado Estacionario. Si el reactor se ejecuta con iniciador cero, lo que significa $C_{i0} = 0$, entonces no hay reacción y todos los estados se mantendrán constantes. Por lo tanto, vamos a examinar lo que ocurre con las diferentes salidas.

Perfil de Temperatura dentro del reactor: la **Figura 4.3** muestra este perfil, se puede observar que la temperatura va a 190 grados Centígrados, es decir, va a la temperatura de la camisa lo que se considera normal.

Perfil de concentración del iniciador en el reactor: Como se puede observar en la **figura 4.4** este perfil es cero, porque no hay iniciador.

Concentración de monómero en el reactor: Como no hay reacción de la concentración de monómero se mantiene constante como se puede ver en la **figura 4.5**.

Concentración radical: **Figura. 4.6** muestra que no hay formación de radicales.

Concentración de disolvente en el interior del reactor: Esta concentración también se mantiene constante ya que ninguna reacción se lleva a cabo (ver figura 4.7).

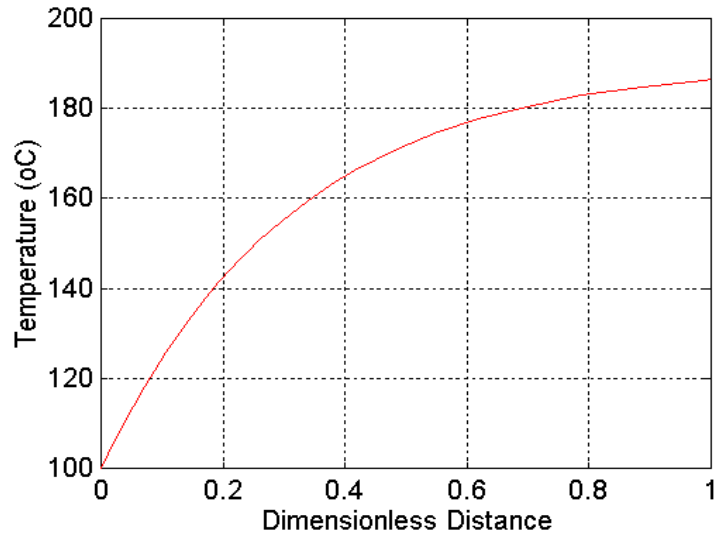


Figura 4.3 Perfil de temperatura en el estado de equilibrio dentro del reactor

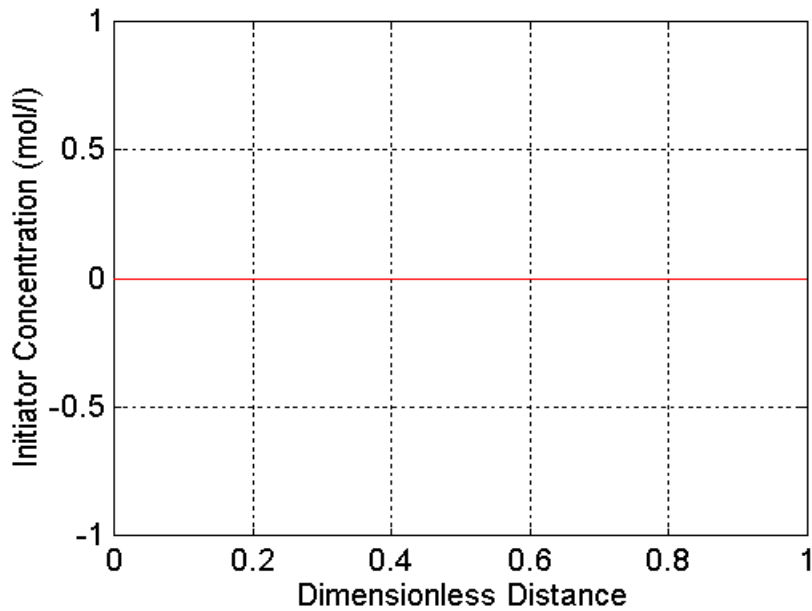


Figura 4.4 Perfil de concentración del iniciador en el estado de equilibrio dentro del reactor

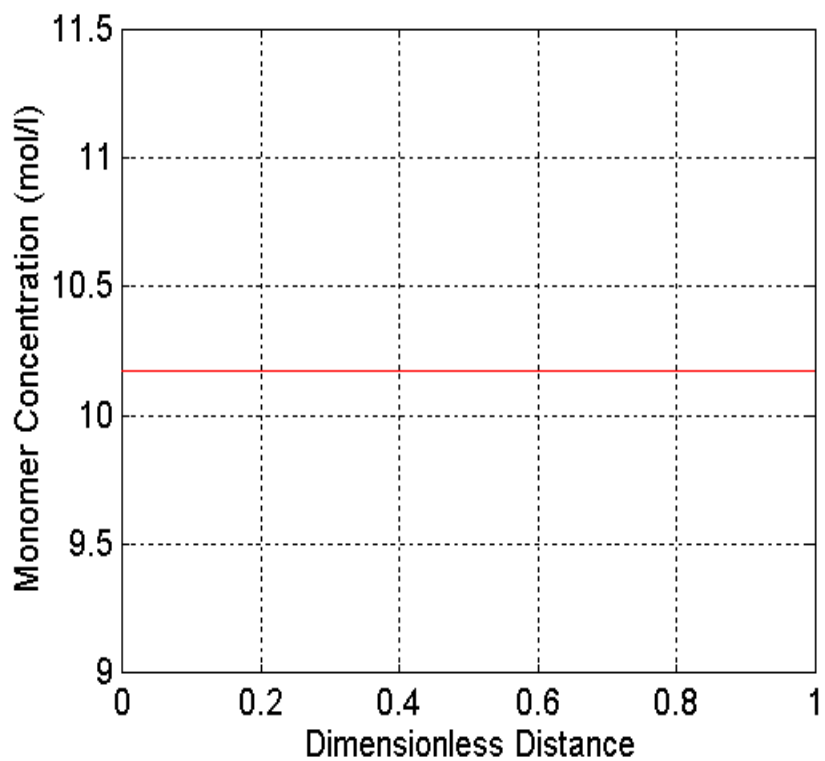


Figura 4.5 Perfil de concentración del monómero en el estado de equilibrio dentro del reactor

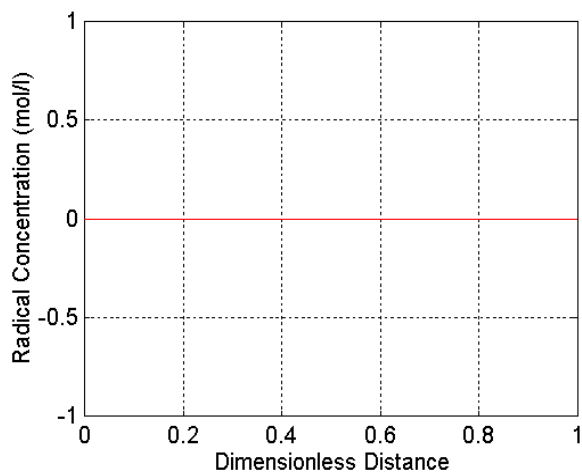


Figura 4.6 Concentración de Radical en el estado de equilibrio dentro del reactor

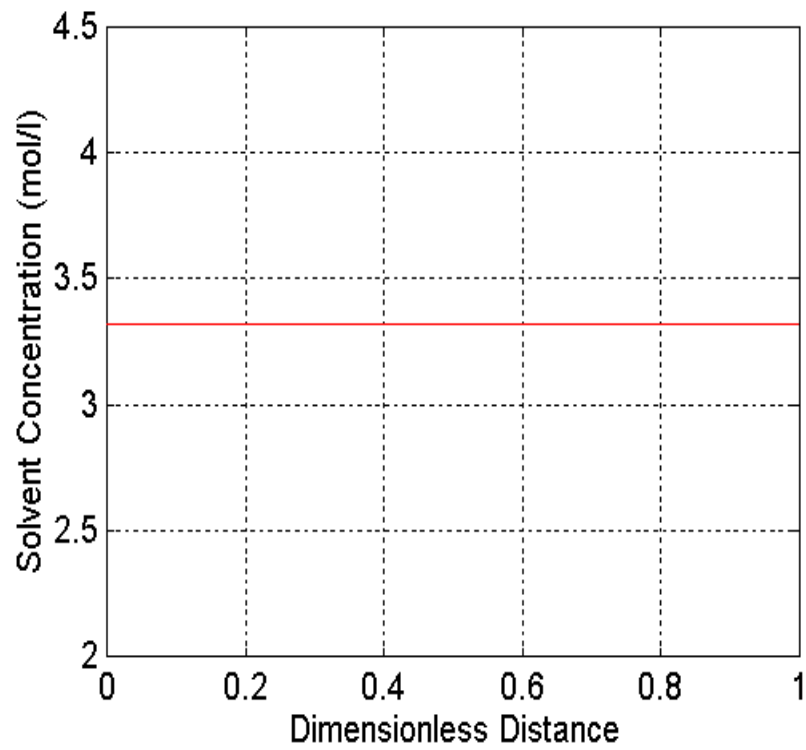


Figura 4.7 Perfil de concentración de disolvente en el estado de equilibrio dentro del reactor

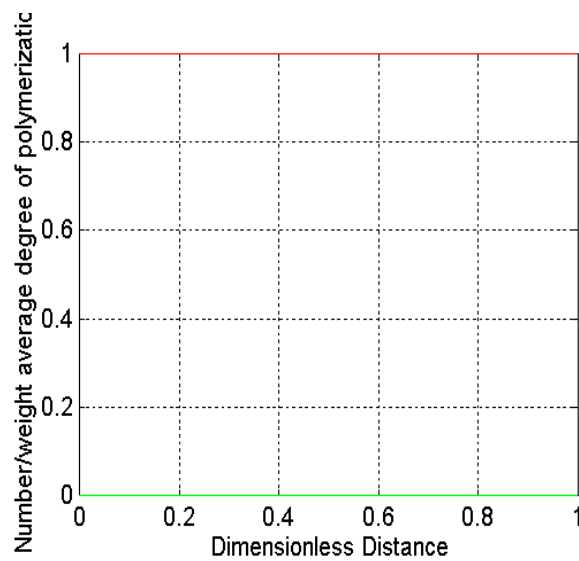


Figura 4.8 Peso y el grado promedio de polimerización en el estado de equilibrio dentro del reactor.

Número y grado de polimerización media de peso: la **Figura. 4.8** muestra que no hay formación de X_w y X_n debido al hecho de que no hay iniciador.

Ahora, veamos lo que sucede fuera del reactor con salidas en función del tiempo.

Pico de temperatura: Como se puede observar en la **Figura. 4.9** un perfil constante se consigue con su máximo en $186,33^\circ\text{C}$.

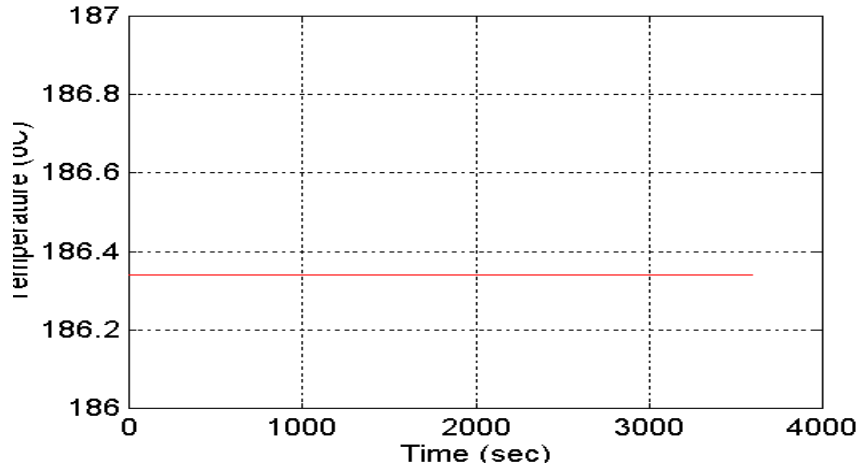


Figura 4.9 Pico de temperatura en estado estacionario

Peso promedio de grado de polimerización: perfil constante en cero como se puede ver en la **figura. 4.10**.

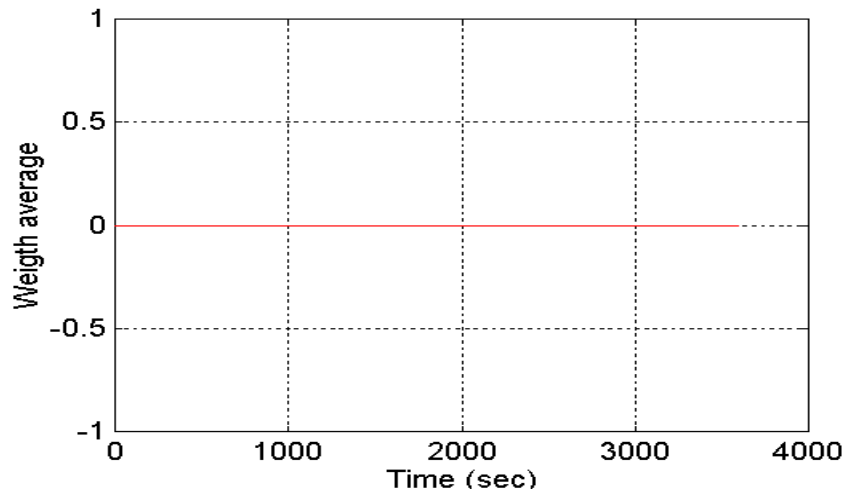


Figura 4.10 Peso promedio de grado de polimerización en estado estacionario

Número de grado medio de polimerización: Este perfil también es plano, pero en 1 como se observa en la **Figura. 4.11**.

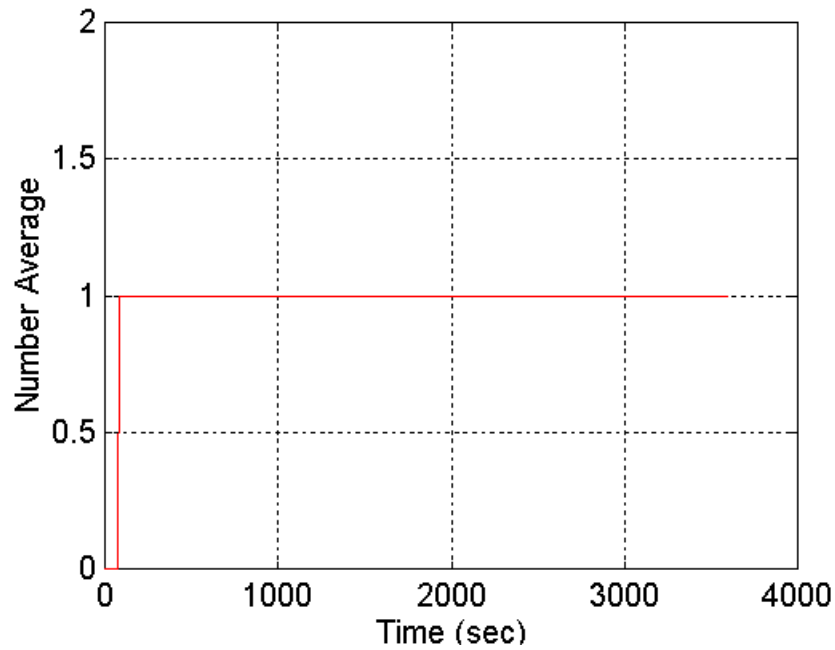


Figura 4.11 Número promedio de grado de polimerización en estado estacionario

Conversión monómero: Cero todo el tiempo ya que no hay reacción alguna (ver **figura 4.12**).

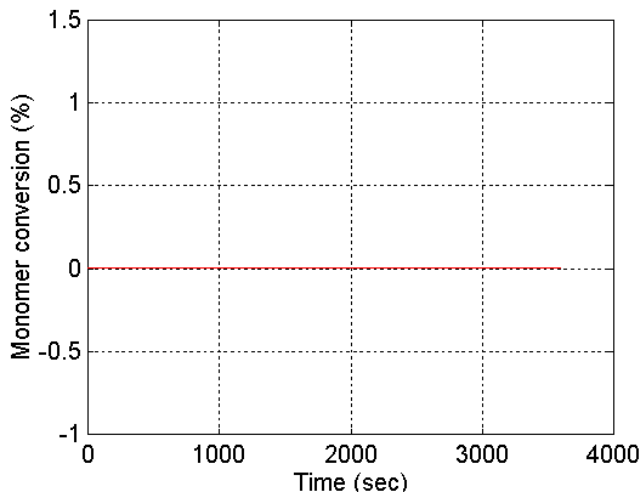


Figura 4.12 Conversión de monómero en estado estacionario

Temperatura: La ubicación del pico para el perfil de temperatura siempre se mantiene en 1 como se puede observar en la **Figura 4.13**.

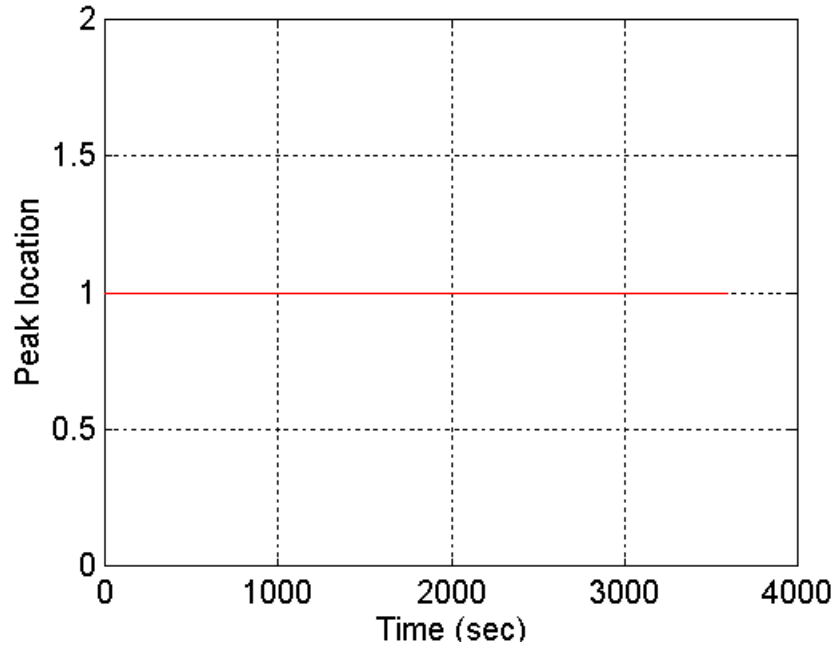


Figura. 4.13 Lugar de la temperatura Pico en estado estacionario

Conversión del iniciador: **Figura. 4.14** muestra un perfil plano desde cero ya que no hay iniciador.

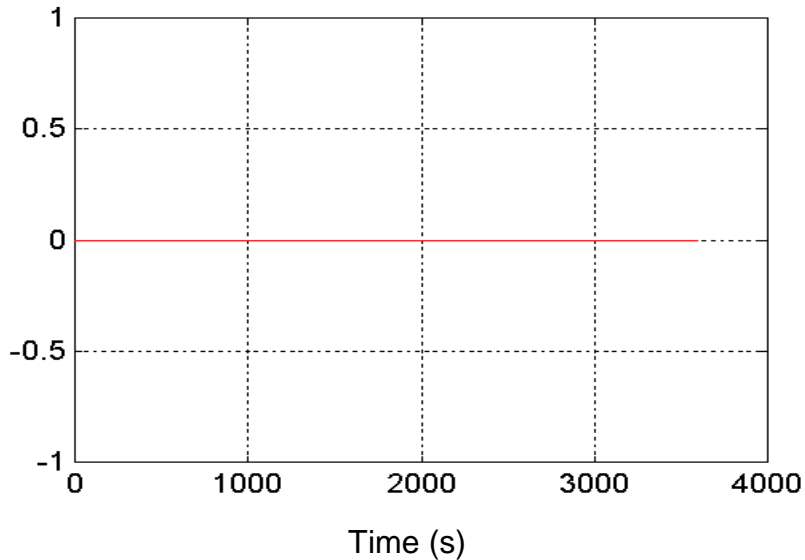


Figura 4.14 Conversión del iniciador en estado estacionario

Polidispersidad: La polidispersidad se define como el cociente entre X_w (grado de polimerización media de peso) para X_{nu} (grado promedio de polimerización), y en este caso del estado estacionario, se mantiene en cero como se puede ver en la **Figura 4.15**. Los valores normales para polidispersidad (D) son entre 12% y 15%. Polidispersidad es una muy buena aproximación de el bien llamado índice de fusión, por eso es tan importante desde el punto de vista de control.

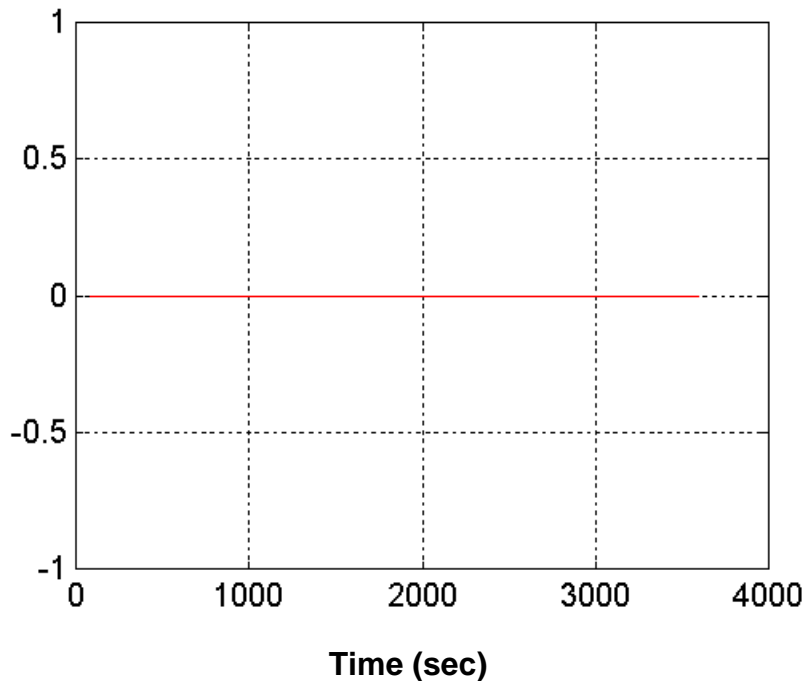


Figura. 4.15 Polidispersidad en estado estacionario

Concentraciones: En el modelo de estado estacionario del reactor si el iniciador es cero, la conversión del monómero es también cero. Sin embargo, tal como se expuso en el capítulo 2, la conversión nunca puede ser cero en el modelo de balance de masa en simulink y este debe satisfacer la siguiente relación:

$$\text{conv} \geq \text{QX2/QS}$$

Como el QS se fija en el 8,33 Kg / seg, que significa conv depende del valor tomado por QX2. Suponiendo que QX2 podría tomar un valor máximo de 0,045 Kg / seg, entonces conv debe ser $\geq 0,0054$. Esa es la razón por la que conv se fijó en 0,0055 (0,55% de conversión) para encontrar el estado de equilibrio del balance de masa. La **figura 4.16** muestra la concentración X7_2 y la concentración X3_1 se puede ver en la **figura 4.17**.

4. 3.2 Efecto del iniciador. En estado estacionario, se aplicó un paso al iniciador y el resultado se muestra en la **figura. 4.18**.

Perfil de temperatura pico: la figura. 4.19 muestra que a medida que el iniciador se incrementa la temperatura máxima también tiende a aumentar, lo que significa más calor añadido al sistema, a continuación, más radicales libres se forman y se acelera la polimerización.

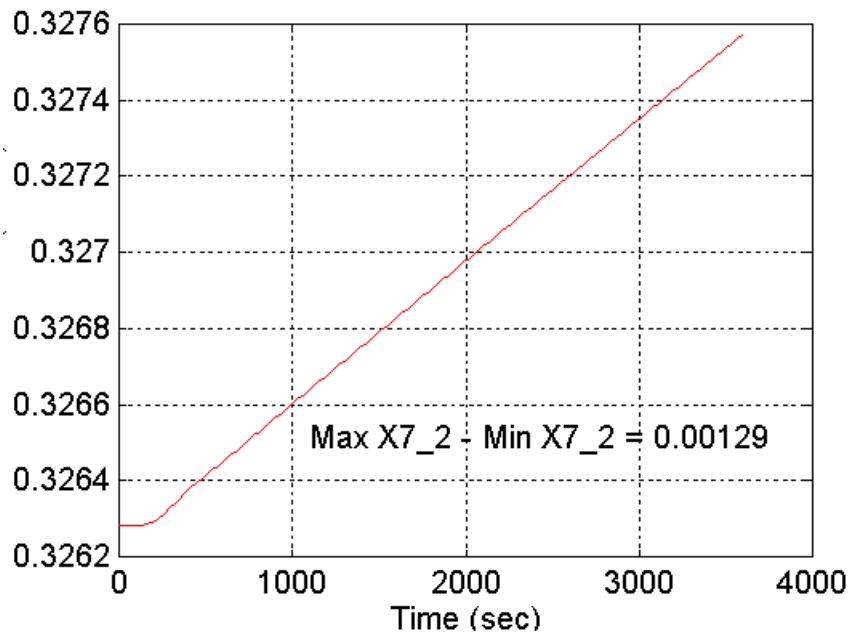


Figura 4.16 Concentración X7_2 en estado estacionario

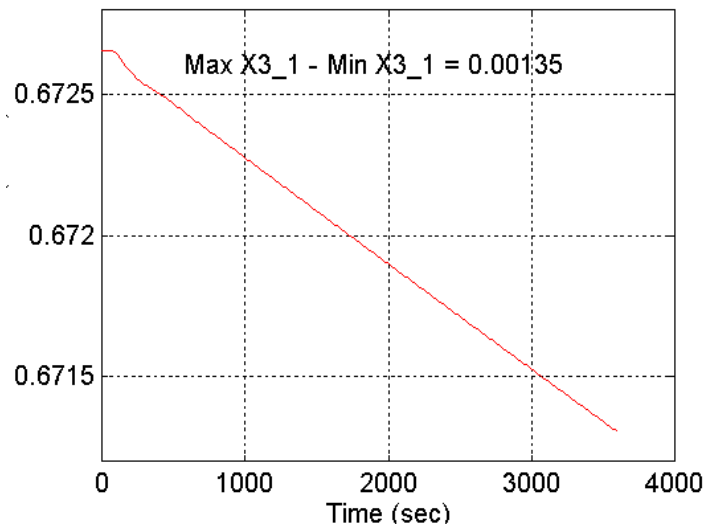


Figura 4.17 Concentración X3_1 en estado estacionario

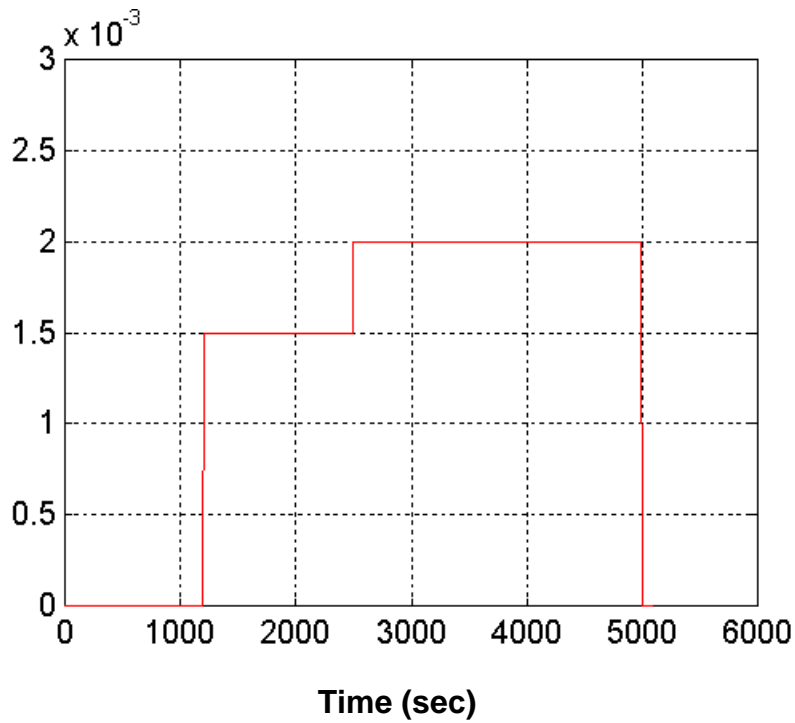


Figura 4.18 Paso aplicado al iniciador (Kg /s)

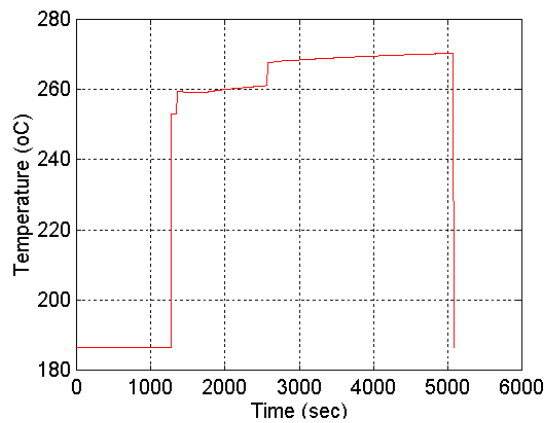


Figura 4.19 Perfil de temperatura pico

Peso promedio de grado de polimerización: Como se muestra en la **figura 4.20**, el peso promedio del grado de polimerización no sufre variación drástica en la temperatura máxima, lo que significa el poco efecto de iniciador en esta variable. De todas formas, aumenta un poco.

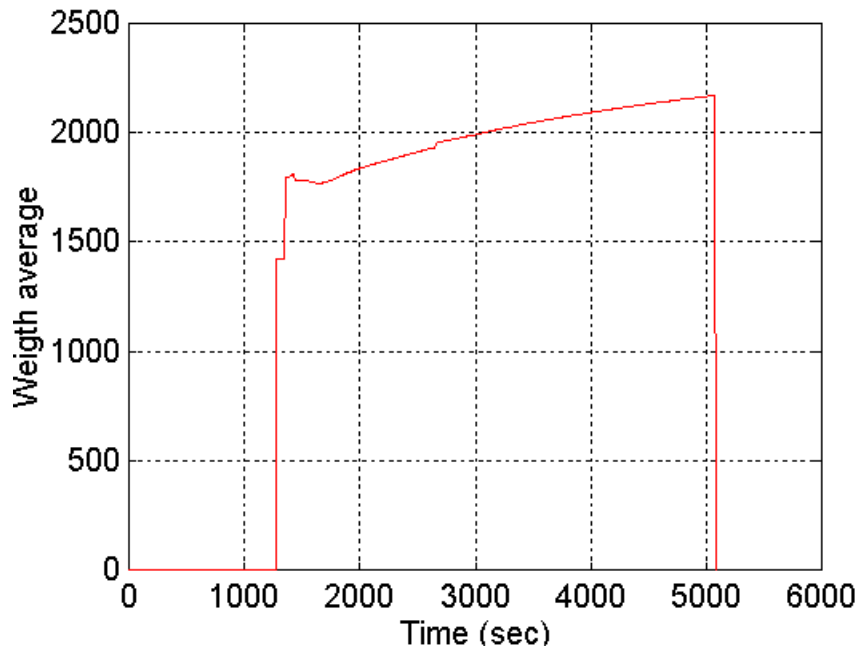


Figura 4.20 Peso promedio de grado de polimerización

Número medio grado de polimerización: la figura. 4.21 muestra el efecto de iniciador en el número de grado medio de polimerización. Se puede observar que esta variable es sensible a los cambios en el iniciador. Se disminuye cuando aumenta el iniciador.

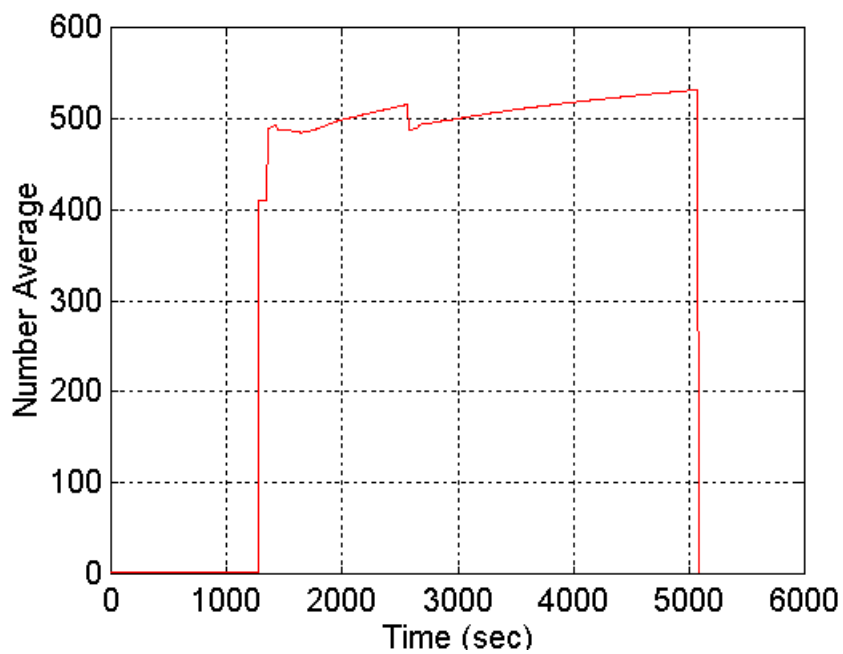


Figura 4.21 Número promedio de grado de polimerización

Conversión monómero: En la figura 4.22 se puede ver que cuando el iniciador se incrementa existe una conversión de más monómero, debido al hecho de que más calor se pone en el sistema y por tanto, más radicales libres se forman para llevar a cabo el proceso de polimerización

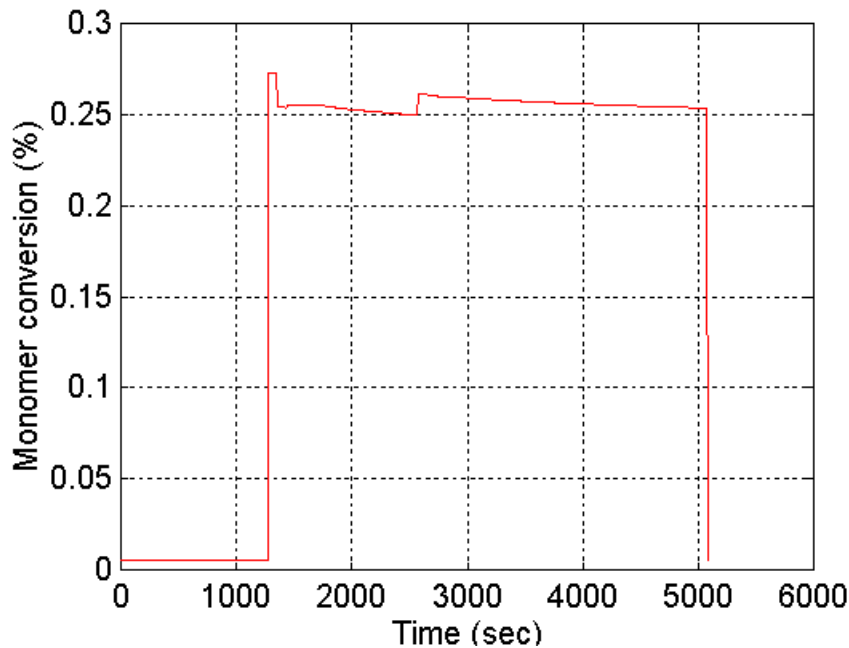


Figura 4.22 Conversión de monómero

Temperatura máxima de localización: Observando la figura 4.23 se puede ver que cuando el iniciador se incrementa, disminuye la temperatura máxima de ubicación, lo que significa que la temperatura máxima se mueve de izquierda a derecha en el interior del reactor.

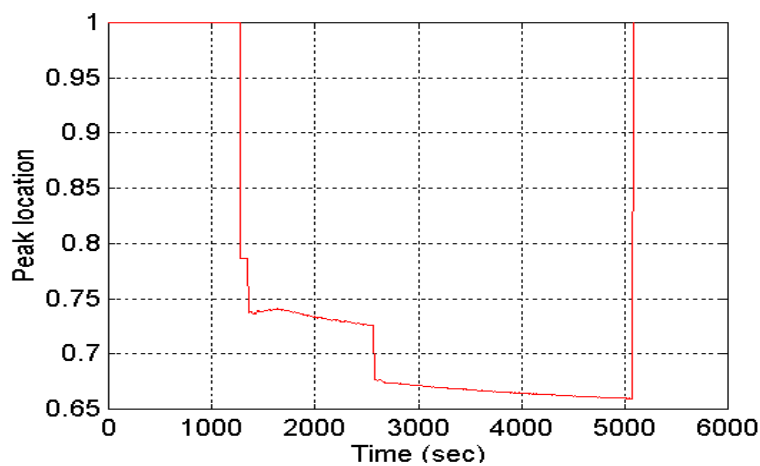


Figura 4.23 Localización del pico de temperatura

Iniciador de conversión: Desde que el iniciador aparece dentro del reactor la conversión es siempre el 100% como se puede ver en la **figura 4.24**.

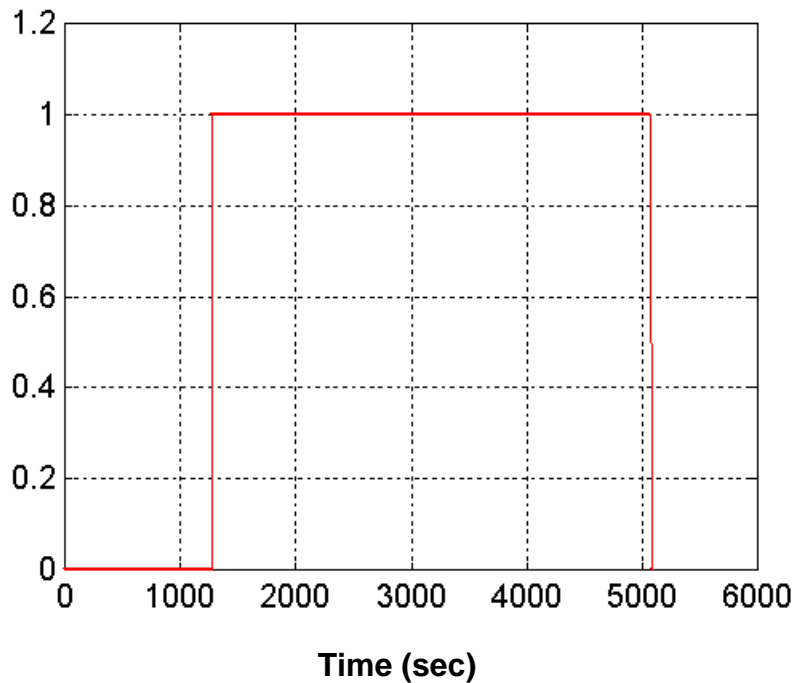


Figura 4.24 Conversión del iniciador

Polidispersidad: la **figura 4.25** muestra los aumentos de polidispersidad cuando el iniciador también aumenta, por lo que se puede correlacionar con incrementos del punto de fusión también.

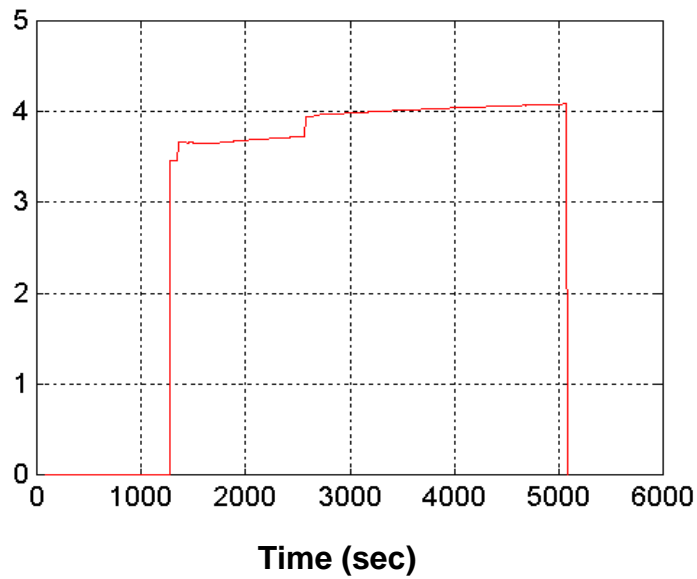


Figura 4.25 Polidispersidad

Concentraciones: las **figuras 4.26** y **4.27** muestran las concentraciones X3_1 y X7_2 respectivamente.

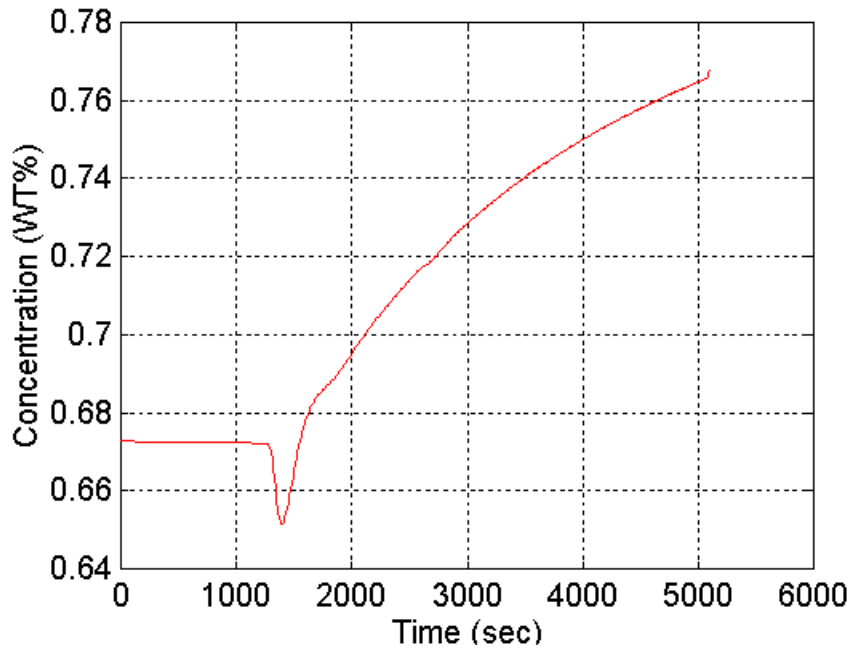


Figura 4.26 Concentración X3_1

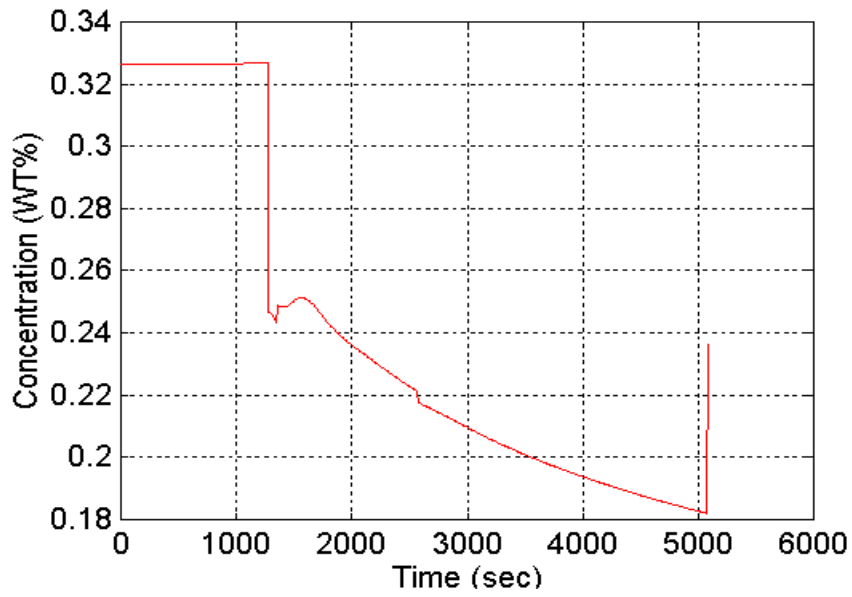


Figura 4.27 Concentración X7_2

4. 3.3 Efecto de Solvente. Se aplico un poco de solvente ($1e-5$ Kg / seg), con el siguiente resultado.

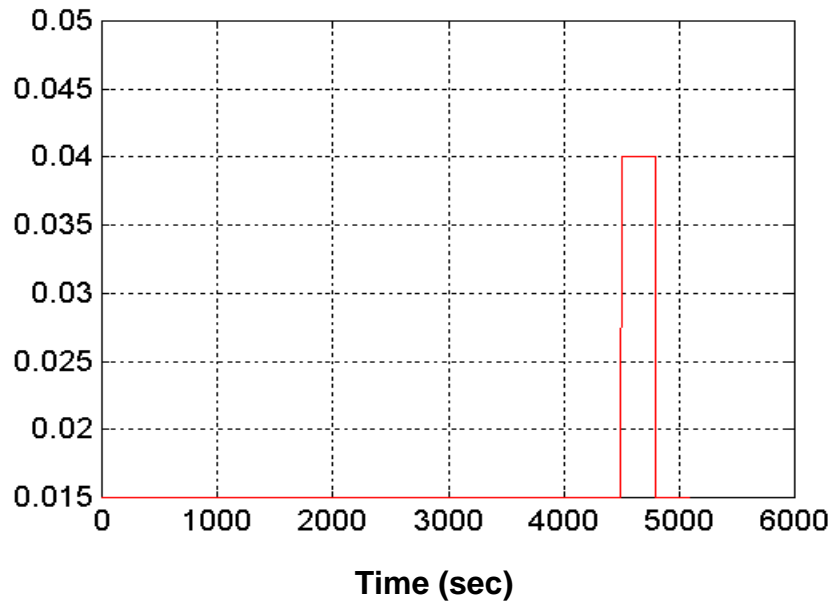


Figura 4.28 Paso en el solvente (Kg /s)

Pico perfil de temperatura: la **figura 4.29** muestra el efecto del paso de disolvente en el perfil de temperatura máxima. Se disminuye, lo que significa que el solvente esta parando la polimerización y por lo tanto menos calor se genera.

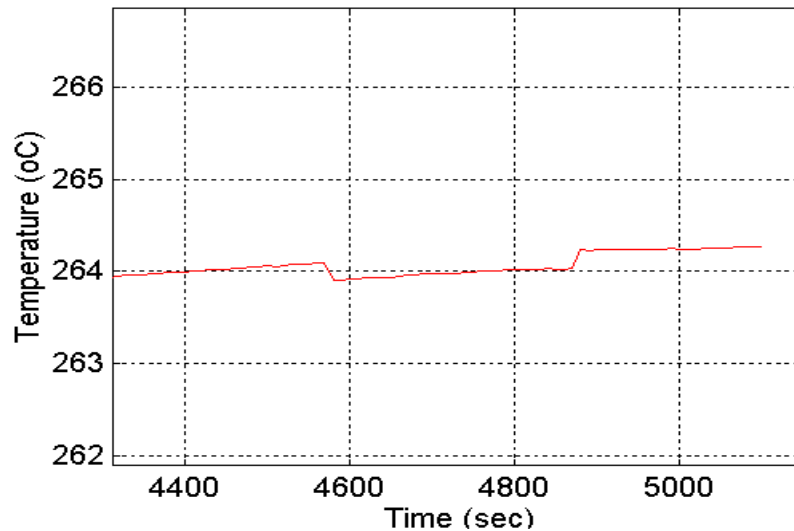


Figura 4.29 Perfil de temperatura

Peso promedio de grado de polimerización: la **figura 4.30** muestra el efecto del solvente en el peso promedio del grado de polimerización. Disminuye a medida que aumenta el disolvente.

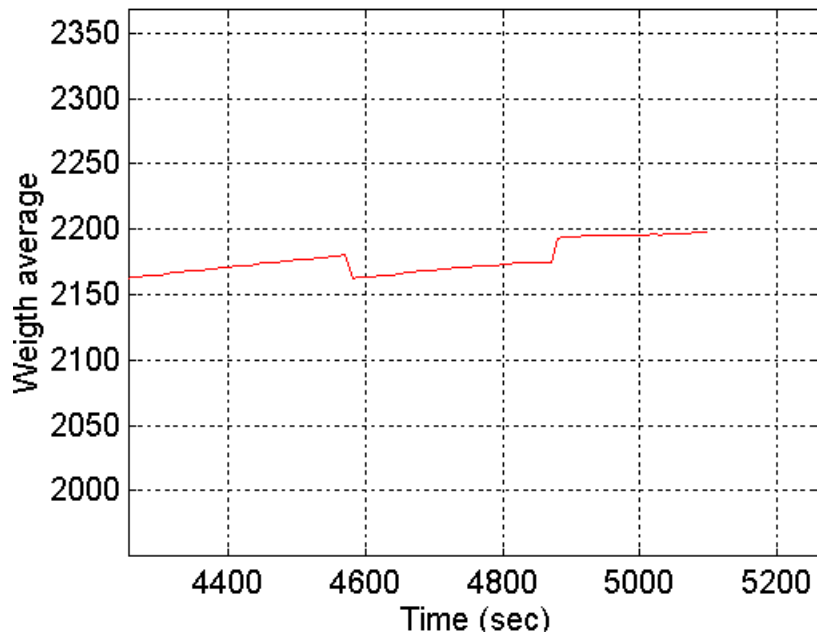


Figura 4.30 Peso promedio de grado de polimerización

Número medio grado de polimerización: la **figura 4.31** muestra que cuando aumenta el grado de solvente, el promedio de de polimerización decrece.

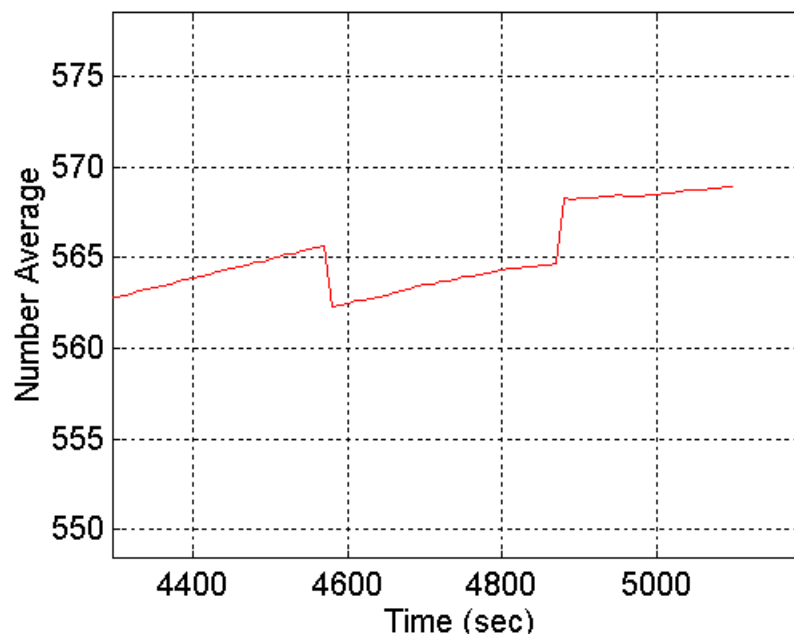


Figura 4.31 Número promedio de grado de polimerización

Conversión monómero: En la **figura 4.32** se puede ver que la conversión de monómero aumenta cuando aumenta un poco el disolvente.

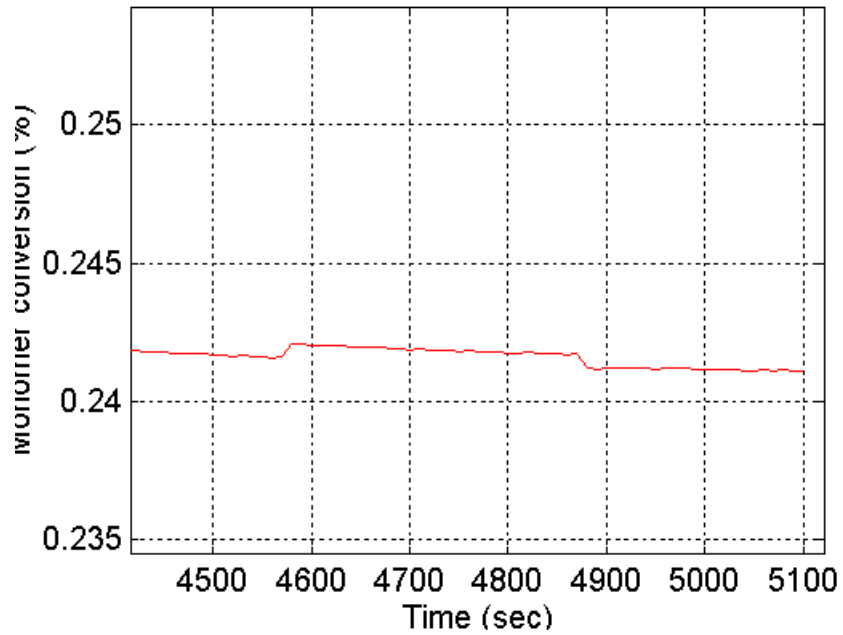


Figura 4.32 Conversión de monómero

Localización del Pico de Temperatura: Cuando se añade el disolvente, la ubicación de la temperatura máxima se incrementa un poco y las temperaturas máximas comienzan a moverse de derecha a izquierda (**ver fig. 4.33**).

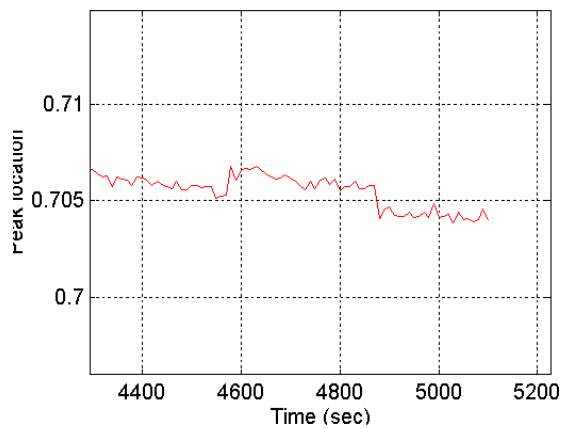


Figura 4.33 Localización pico de temperatura

Polidispersidad: En la **figura 4.34** se puede observar que la polidispersidad disminuye muy suavemente cuando aumenta el disolvente.

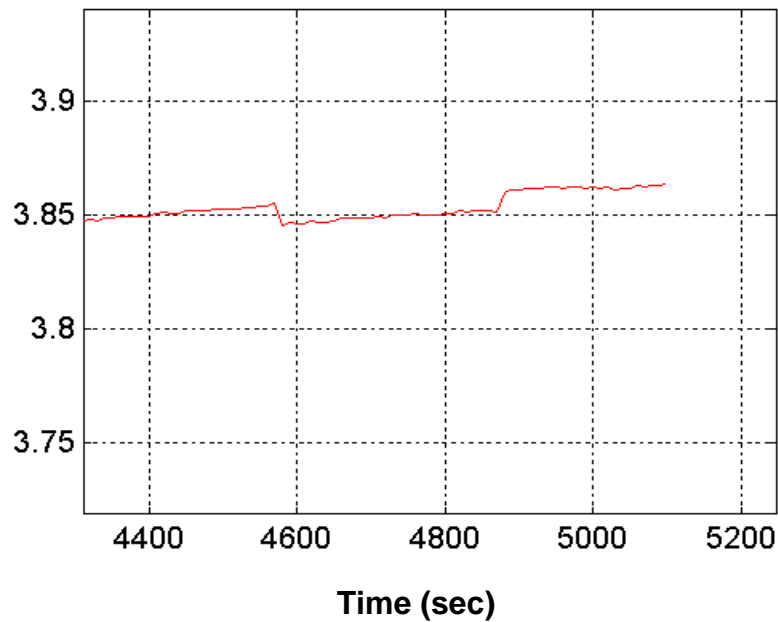


Figura 4.34 Polidispersidad

4.3.4 Efecto del tiempo de muestreo. Sólo para ver el efecto de diferentes períodos de muestreo (o tamaños de paso), una simulación se realizó con $T_s = 10, 15$ y 20 segundos. Los resultados pueden verse en las **figuras 4.35, 4.36 y 4.37**.

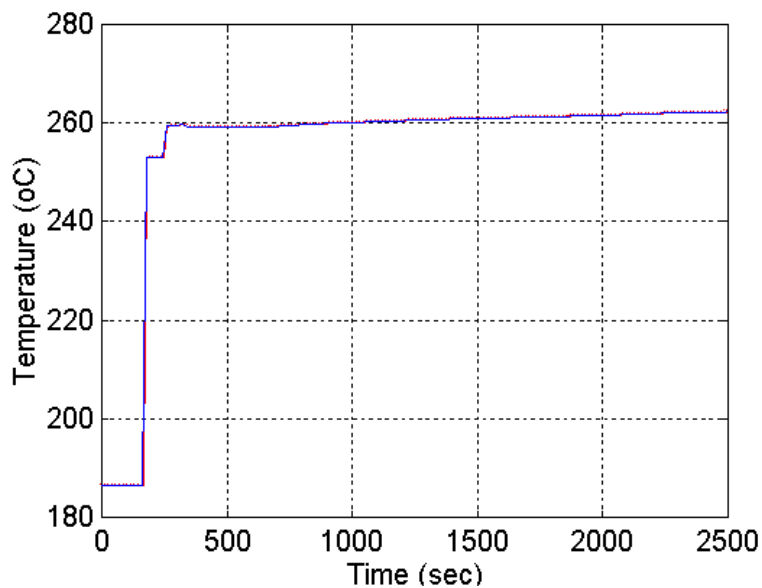


Figura 4.35 Efecto de diferentes períodos de muestreo en el perfil de temperatura máxima

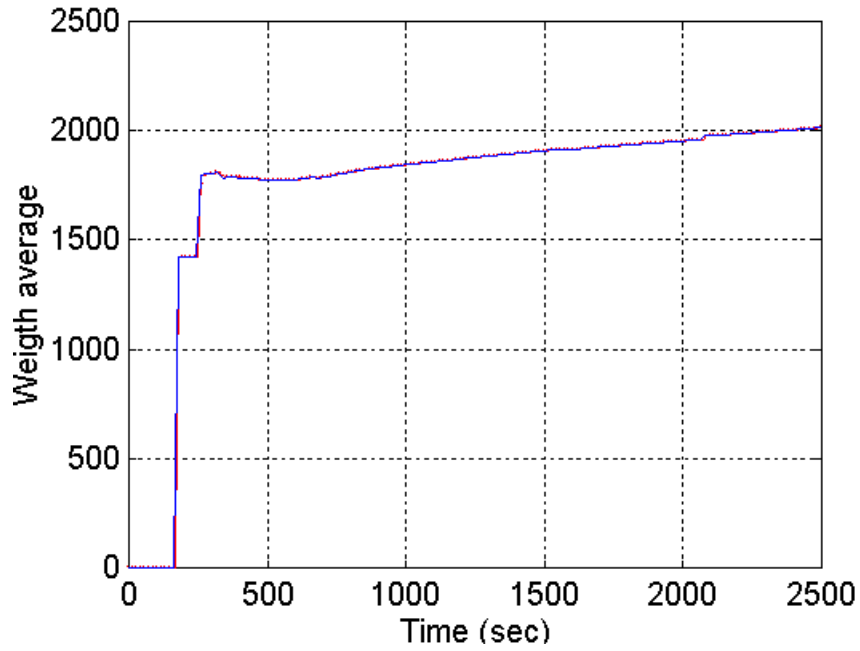


Figura 4.36 Efecto de diferentes períodos de muestreo en el peso promedio del grado de polimerización

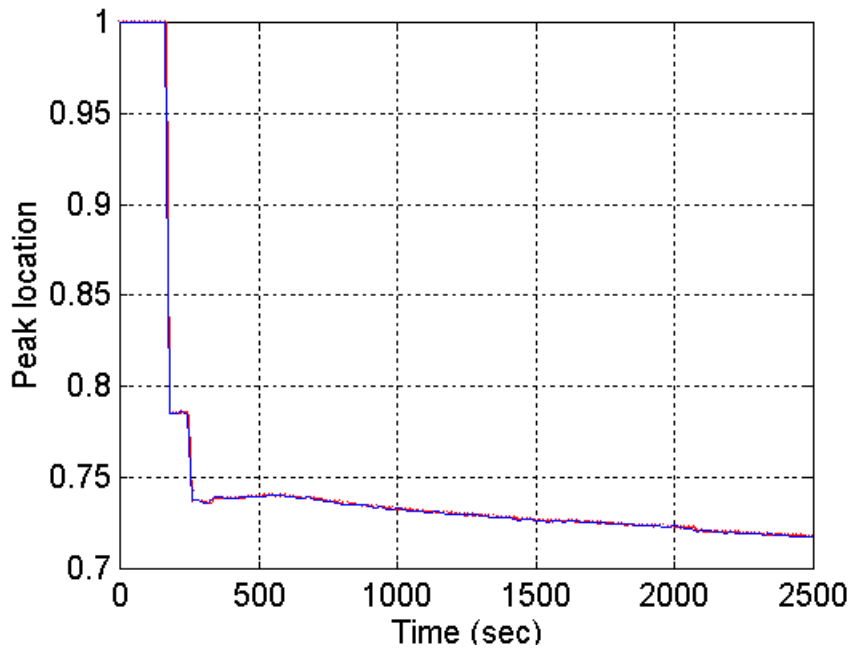


Figura. 4.37 Efecto de diferentes períodos de muestreo en el lugar de temperatura máxima

No se observaron diferencias, lo que significa que el tamaño de paso para la simulación se puede tomar 20 segundos sin ningún problema. Todo el sistema gasta 6 a 10 segundos (tiempo de CPU) en la simulación de un tamaño de paso, lo que significa que el sistema puede ejecutar dos veces más rápido que en la realidad, así que hay tiempo para un controlador de tomar las medidas de control adecuadas.

Por último, en la **tabla 4.1** se hace un breve resumen de los resultados obtenidos mediante la simulación utilizando el modelo de pasos en el iniciador y el disolvente.

Variable	Initiator step	Solvent step	
1. Temperature profile	Increases	Decreases	**
2. Weigth average degree..	Increases	Decreases	**
3. Number average de- gree..	Decreases	Decreases	
4. Monomer Conversion	Increases	Increases	
5. Polydispersity	Increases	Decreases	**

Tabla 4.1 Resumen de los resultados de la simulación

**** La mayoría de las variables importantes para el análisis de control.**

5. ESTRATEGIA DE CONTROL MULTIVARIABLE

En la producción de polietileno, el principal objetivo del proceso de polimerización es producir un polímero que tenga ciertas propiedades para una aplicación específica. De ahí que sea necesario determinar el tipo de materia prima a emplear (monómero, iniciador/catalizador), y ese polietileno con esas características especiales no podrá producirse hasta tanto no se tengan condiciones rigurosas de control.

Para el modelo descrito en los capítulos precedentes de este trabajo, se desarrollará una estrategia de control multivariable, comparando un PID desacoplado con un Controlador Lineal Cuadrático Gaussiano LQRG.

5.1 ESTRUCTURA DE CONTROL

Lo primero es definir la estructura de control a seguir, tal y como se muestra en la **Figura 5.1**. Las **ENTRADAS** al proceso de polimerización se dividen en dos clases, a saber: **a) variables manipuladas**, las cuales serán ajustadas ya sea automática o manualmente, a fin de mantener la variable controlada en sus valores deseados o set-points. En la industria de los polímeros y en general en los procesos de polimerización, estas variables pueden ser flujos de enfriamiento o calentamiento (T_c o temperatura de la chaqueta del reactor), flujos de líquido o gas para control de presión, rata de alimentación de monómero (QA1 en este trabajo), flujo de solvente (QX2), flujo de iniciador (Ci0) y en algunas ocasiones velocidades de los agitadores o mezcladores, para tener una mezcla uniforme en todo el recorrido; **b) variables de perturbación**, que son aquellas variables sobre las cuales como ingenieros de control no tenemos margen de maniobra.

Estas Pueden ser estocásticas (son naturales y van con la variabilidad del proceso) o deterministas (provenientes de causas conocidas, algunas de las cuales se pueden identificar y luego eliminar, denominadas en control de calidad causas asignables de variación). Otras no son susceptibles de eliminarse y se debe tener entonces un control robusto que las mantenga en ciertos niveles aceptables.

En cuanto a las **SALIDAS**, se pueden dividir en 3 categorías, a saber: **a) propiedades de uso final**, con las que debe quedar todo polímero para que cumpla con las especificaciones requeridas por el cliente, dependiendo de la aplicación; tales propiedades se refieren por ejemplo al esfuerzo tensil, la solubilidad, la extrudabilidad, etc. En la gran mayoría de los casos estas propiedades no pue-

den medirse online **b) variables controladas que afectan la calidad del producto**, las que desde el punto de vista de control, son las más importantes porque afectan directamente las propiedades de uso final del polímero. Estas son las variables que tendremos en cuenta en este trabajo como, peso promedio de grado de polimerización (**Wwe**), conversión de monómero (**conv**) y polidispersidad (**D**), las que son muy costosas de medir online-, **c) variables controladas** que tienen que ver con condiciones de operación, asociadas directamente con el procesos como perfil de temperatura pico (temp), presiones, flujos, las cuales son medibles directamente y controladas en lazo cerrado.

Es bueno anotar que las variables manipuladas pueden tener sus propias restricciones. Por ejemplo, en un reactor de polimerización, la rata de alimentación de flujo del iniciador (C_{i0}) se manipula para controlar tanto el peso promedio de grado de polimerización (**Wwe**) como la conversión de monómero (**conv**). Sin embargo, en ocasiones, cuando el calor de polimerización ΔH_p excede la capacidad de transferencia de calor del reactor, se hace necesario restringir la rata de alimentación del iniciador para mantener la estabilidad térmica del reactor. A veces también es necesario tener restricciones sobre variables controladas.

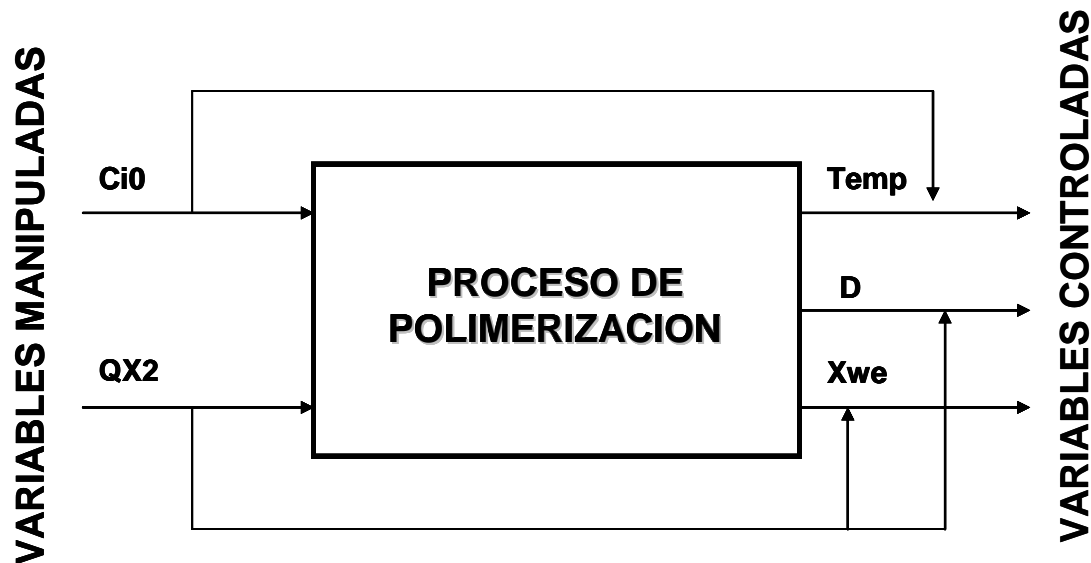


Figura 5.1 Estructura de control para el proceso de polimerización

- C_{i0}** : Rata de alimentación del flujo de iniciador (kg/s)
- Q_{X2}** : Rata de alimentación de solvente (kg/s)
- Temp** : Temperatura ($^{\circ}\text{C}$)
- D** : Polidispersidad
- Xwe** : Peso promedio del grado de polimerización

Como se observa, la idea es usar como **variables manipuladas** el flujo de solvente (**QX2**) y la alimentación del iniciador al reactor (**Ci0**).

Como **variables controladas** se tendrán la temperatura (**temp**), el peso promedio de grado de polimerización (**Xwe**) y la polidispersidad (**D**). Se tiene de esta forma un proceso MIMO de 3 X 3. Sin embargo, solamente se controlaran la temperatura y el grado de polimerización.

Se controla el sistema alrededor del siguiente punto de operación:

XWe : 10%
 T : 100 °C
 F_s : 100 mol/s
 F_i : 115.2 mol/s

De esta forma el sistema queda definido así:

Estados : Xwe, T, D
 Salidas : XWe, T
 Entradas : F_s, F_i

El propósito es comparar especificaciones de desempeño del sistema ante sistemas de control clásico como el PID y sistemas multivariables como el LQR sencillo y con el filtro de Kalman.

Luego de linearizar el sistema, se obtuvo el siguiente conjunto de matrices en espacio de estado:

A =

-11.2530	-0.0824	-0.0100
879.4300	9.8456	2.1358
0	0	-0.7849

B =

0.0100	0
-1.1530	-1.1432
1.0000	0

C =

1	0	0
0	0	1

D =

0	0
0	0

5.2 CONTROLABILIDAD Y OBSERVABILIDAD

Efectuando el **análisis de controlabilidad**, se observa que el rango de la matriz de controlabilidad es 3, por lo cual se concluye que el sistema es controlable.

$Co=[A \ A^*B \ A^2*B]$; $rank(Co)=3$.

Para el **análisis de observabilidad**:

```
% Matrices de controlabilidad y observabilidad
n=length(A); %Numero de estados
fprintf('Hay %d estados\r\r',n)
Co=[]; % Matriz de Controlabilidad
Ob=[]; % Matriz de observabilidad

for i=1:n
    Co=[Co A^(i-1)*B];
    Ob=[Ob;C*A^(i-1)];
end
% Condiciones de controlabilidad y observabilidad

if rank(Co)==n, fprintf('Sistema Controlable, Rango de C=%d \r\r',Rank(Co)),else, fprintf('sistema incontrol-
able, Rango de C=%d \r\r',Rank(Co)),end

if rank(Ob)==n, fprintf('Sistema Observable, Rango de O=%d \r\r',rank(Ob)),else, fprintf('sistema inobserva-
ble, Rango de O=%d \r\r',rank(Ob)),end
```

En conclusión el sistema es observable y controlable.

5.3 ANALISIS DE GANANCIAS RELATIVAS

Este análisis arroja una matriz

RGA =

$$\begin{bmatrix} -1.7692 + 1.1538i & 2.7692 - 1.1538i \\ 2.7692 - 1.1538i & -1.7692 + 1.1538i \end{bmatrix}$$

Las filas son las entradas F_i y F_s y las columnas son las salidas X_{We} y T . Se concluye que con el flujo de iniciador F_i (variable manipulada) se va a controlar la temperatura T (variable controlada) y con el flujo de solvente F_s (variable manipulada) se va a controlar el grado de polimerización X_{We} (variable controlada).

5.4 DISEÑO DEL CONTROLADOR PID CON DESACOPLE ESTÁTICO

La **figura 5.2** muestra el diagrama de bloques en simulink del sistema de control con desacople estático.

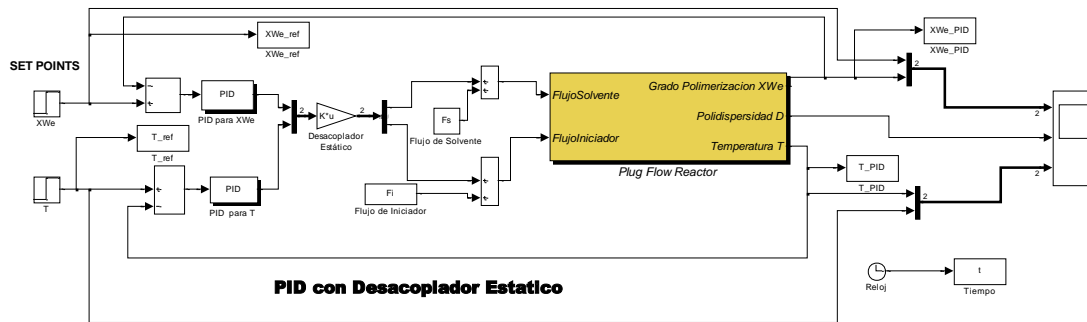


Figura 5. 2 Diagrama simulink para el sistema de control con PID desacoplado

El desacoplador diseñado es

D =

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0.9870 \\ 1.0000 & 4.4879 \end{bmatrix}$$

Los parámetros usados para los dos PID's diseñados por Ziegler-Nichols para el sistema desacoplado son como se muestra en la tabla 5.1.

	Kp	Ti	Td
Lazo de T	1.2	2	0
Lazo de XWe	183.4	1.46	2.774

Tabla 5.1. Parámetros para los controladores PID

5.5 DISEÑO DEL CONTROLADOR LQR

Se controlan dos variables (temperatura T y grado de polimerización XWe) con cero error de estado estacionario. Esto implica la construcción de un controlador por realimentación de estado que incluya un par de integradores sobre las variables que se desea. El sistema extendido queda:

$$\begin{bmatrix} \dot{x} \\ e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & 0 \\ -C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ e \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B \\ D \end{bmatrix} u + \begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} XWe \\ T \end{bmatrix}$$

$$y = \begin{bmatrix} C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ e \end{bmatrix} + Du$$

Con e significando la integral del error de seguimiento, definido para este caso como:

$$\dot{e} = \begin{bmatrix} \dot{e}_{XWe}(t) \\ \dot{e}_T(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} XWe_{setpoint}(t) - XWe(t) \\ T_{setpoint}(t) - T(t) \end{bmatrix}$$

Se definen las matrices de la función de costo

$$J = \int_0^{\infty} [x(t)^T Q x(t) + u(t)^T R u(t)] dt$$

Así:

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}; \quad R = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

De donde se obtiene la matriz de realimentación K:

K =

$$\begin{bmatrix} 153.5413 & 0.9292 & 1.4970 & 58.0275 & -0.9657 \\ -257.9776 & -1.8432 & -0.1256 & -215.9463 & -0.2595 \end{bmatrix}$$

Las primeras 3 columnas corresponden a la realimentación de los 3 estados del sistema (grado de polimerización XWe , temperatura T y polidispersidad D), lo que conforma entonces la matriz K_s . Las últimas 2 columnas son la retroalimentación de las integrales de los errores de seguimiento, es decir conforman la matriz K_i .

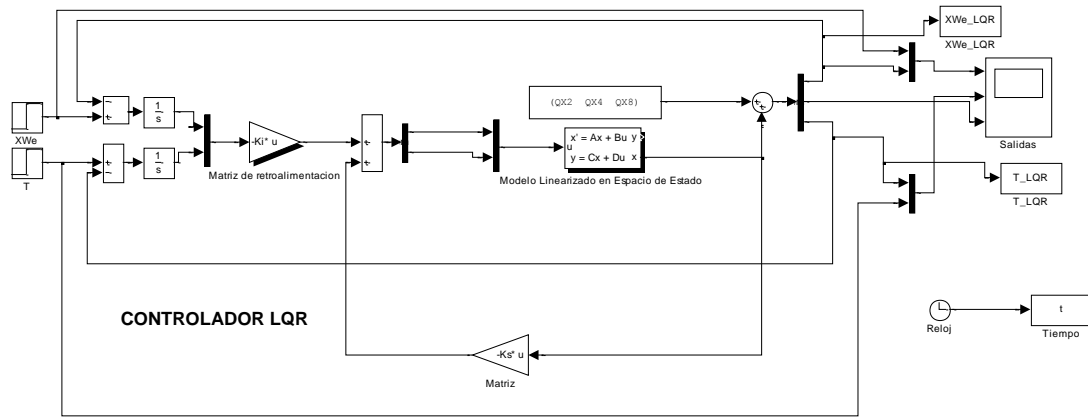


Figura 5. 3 Diagrama simulink para el sistema de control LQR

La **figura 5.3** muestra el diagrama de bloques de esta estrategia de control.

5.6 DISEÑO DEL CONTROLADOR LQR CON FILTRO DE KALMAN

Esta estrategia de control se muestra en el diagrama de bloques siguiente (**figura 5.4**)

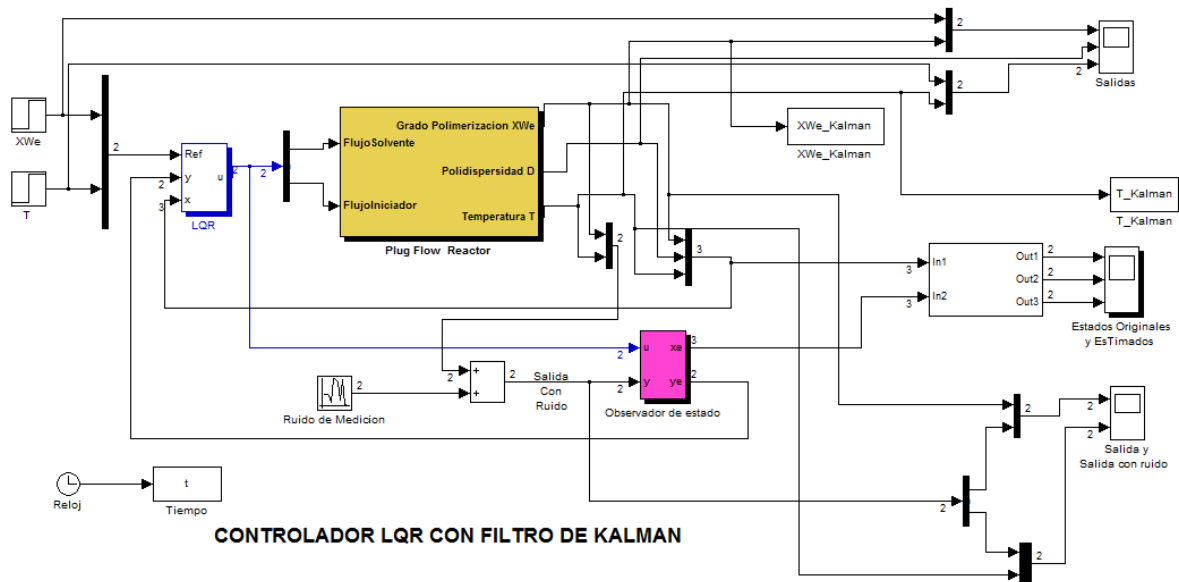


Figura 5. 4 Diagrama simulink para el sistema de control con filtro de Kalman

En la construcción del observador se supone un ruido de medición de las salidas como:

$$v_{XWe} = 1/1000$$

$$v_T = 8 \text{ } ^\circ\text{C}$$

El ruido de los estados se supone así:

$$\omega_{XW_e} = 4/1000;$$

$$\omega_T = 2;$$

$$\omega_D = 1.8;$$

Se asume que estos ruidos no están correlacionados por lo que la matriz de covarianza puede entonces definirse como:

$$R_w = \mathcal{E}\{w(t)w(t)^T\} = \begin{bmatrix} \omega_{XW_e}^2 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_T^2 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_D^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.6 \times 10^{-5} & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 3.24 \end{bmatrix}$$

$$R_v = \mathcal{E}\{v(t)v(t)^T\} = \begin{bmatrix} \nu_{XW_e}^2 & 0 \\ 0 & \nu_T^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10^{-6} & 0 \\ 0 & 64 \end{bmatrix}$$

Con el siguiente programa se obtienen las matrices L y P:

```
Q =diag([1 1 1 50000 1]);
R =diag([1 1]);

K = LQR(Ae,Be,Q,R);
Ks = K(:,1:3);
Ki = K(:,4:5);

vv =[0.001;11];
ww = [0.007 4 1.5];

Rw = diag((ww.*ww));
Rv = diag((vv.*vv));

sysk = ss(A,[B eye(3)],C,[D zeros(2,3)]);
[Kest,L,P] = kalman(sysk,Rw,Rv);
```

Dando

L =

1.0e+003 *

```
0.0179 -0.0000
-6.6979 -0.0000
-0.2423 0.0000
```

P =

0.0000	-0.0067	-0.0002
-0.0067	3.6815	-0.2668
-0.0002	-0.2668	2.1530

5.7 RESULTADOS

En la **figura 5.5** se observa el resultado del control en la temperatura para las 3 estrategias de control implementadas. La mejor estrategia de control es el filtro de Kalman, que permite pasar de 100°C a 110°C en 6 segundos y sin ningún sobreimpulso.

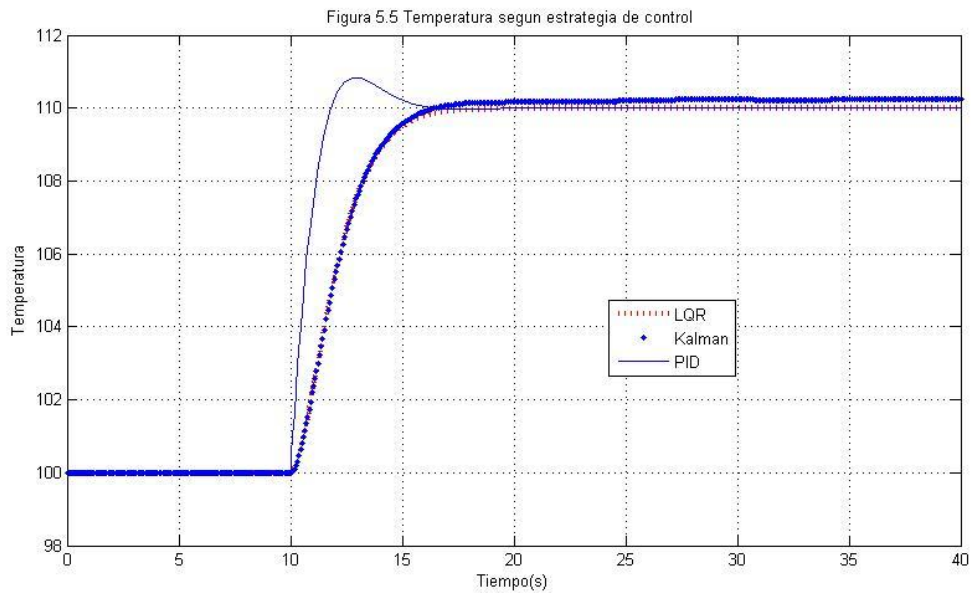


Figura 5.5 Respuesta controlada de la temperatura según estrategia de control

En la figura 5.6 se presenta el resultado del control del grado de polimerización para cada estrategia de control. Se observa también que el filtro de Kalman es la mejor, pues pasa del 1% al 12% en grado de polimerización en 8 segundos.

El control clásico PID aunque funciona, presenta un desempeño del 50% con respecto al control multivariable cuadrático lineal.

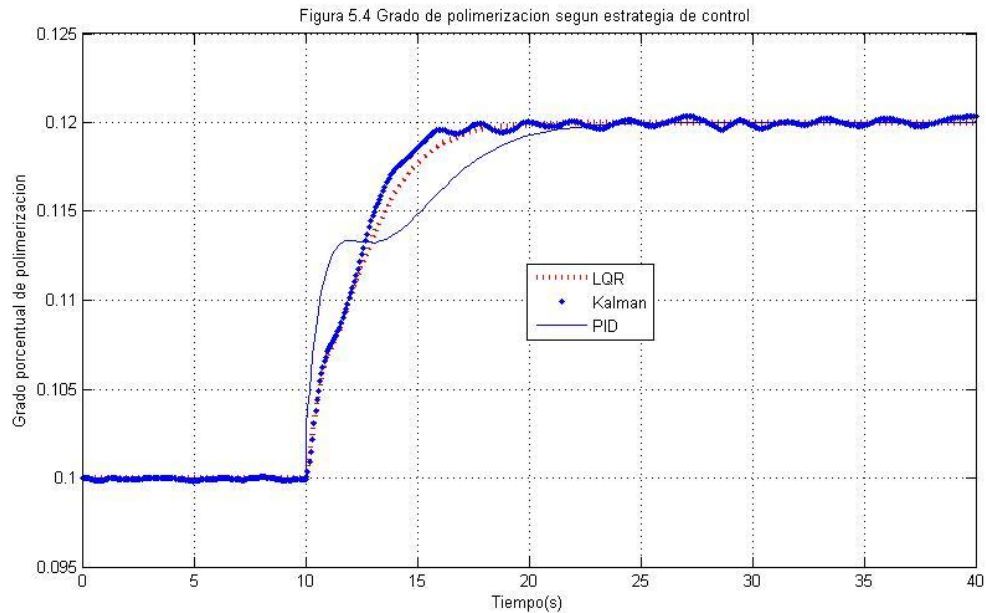


Figura 5.6 Respuesta controlada del grado de polimerización según estrategia de control

5.8 TRABAJO FUTURO

Este trabajo sirve como base para la implementación de otras estrategias de control como:

- Control adaptivo y predictivo
- Control inteligente con Fuzzy y Redes Neuronales

Adicionalmente, también como trabajo futuro se propone adicionar los efectos de la dispersión axial sobre el desempeño del reactor, los efectos de la transferencia de calor y los fenómenos de transporte involucrados, de tal forma que se pueda diseñar una política óptima de control integrado de temperatura, polidispersidad y grado de polimerización.

6. CONCLUSIONES

La principal contribución de este trabajo es el modelado y la simulación de un reactor tubular de alta presión para producir polietileno, donde el balance de masas ha sido integrado con el comportamiento no lineal de un reactor tubular. El objetivo del proyecto es disponer de un modelo básico para el futuro diseño de estrategias de control moderno como control predictivo basado en redes neuronales, control adaptativo y enfoques no lineales.

Debe perfeccionarse aun más el modelo de balance de masa, a fin de incluir fenómenos de transporte de masa y calor.

Todo el sistema debe ser más realista, ya que funciona con 13 CSTRs (en la práctica puede tener de 25 a 30). De la misma manera, el conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales que describen el reactor consta de 10 ecuaciones, cuando en realidad pueden estar alrededor de 30 o más.

Estos son aspectos a tener en cuenta para la mejora de este modelo por lo que es cada vez más y más complejo.

Para la investigación futura e inmediata, el modelo descrito por Kiparissides [4], debe ser modelado y simulado como una extensión del presente trabajo.

7. BIBLIOGRAFIA

1. Agrawal, S., and Han, C.D., (1995), "Analysis of the high pressure polyethylene tubular reactor with axial mixing", *AIChE J.*, 21,449.
2. Chen, C.H., Vermeychuk, J.G., Howell, J.A., and Ehrlich, P., (1976), "Computer Model for Tubular High Pressure Polyethylene Reactors", *AIChE J.*, 22, 463.
3. Ray, W.H., (1972), "On the Mathematical Modeling of Polymerization Reactors," *J. Macromol. Sci.-Revs. Macromol. Chem.*, C8, 1-56 .
4. Kiparissides, C., Verros, G., Kalfas, G., Koutoudi, M., and Kantzia, C., (1992), "A Comprehensive Mathematical Model for a Multizone Tubular High Pressure LDPE Reactor", *Dep. of Chem. Eng., Aristotle University of Thessaloniki*.
5. Yoon, B. J., (1982), "Modeling and optimization of high pressure polyethylene tubular reactors", *M.S. Thesis, Seoul National University, Seoul, Korea*.
6. Yoon, B.J., and Rhee, H., (1984), "A Study of the High Pressure Polyethylene Tubular Reactor", *Dep. of Chem. Eng., Seoul National University, Seoul, Korea*.
7. THE MATHWORKS INC., (1993), "SIMULINK Dynamic System Simulation Software", *User's Guide, chapter 3 on advanced topics*.
8. Schork, F.,J., Deshpande, B.,D.,and, Leffew K.,W., (1993), "Control of Polymerization Reactors", *School of Chemical Engineering, Georgia Institute of Technology, 101*.