

Sistem de reglare automată pentru reactoare chimice cu funcționare continuă

Descrierea procesului

Reactoarele chimice (figura 6.1) sunt utilaje de mare importanță în instalațiile din industria chimică în care au loc reacții chimice. În aceste reactoare au loc procese complexe caracterizate de transformări chimice, transformări de masă și schimburi de căldură.

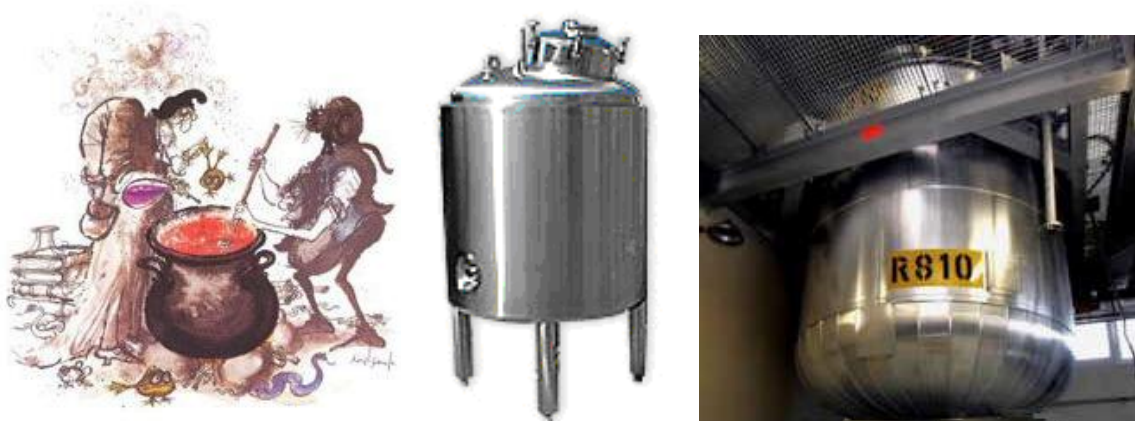
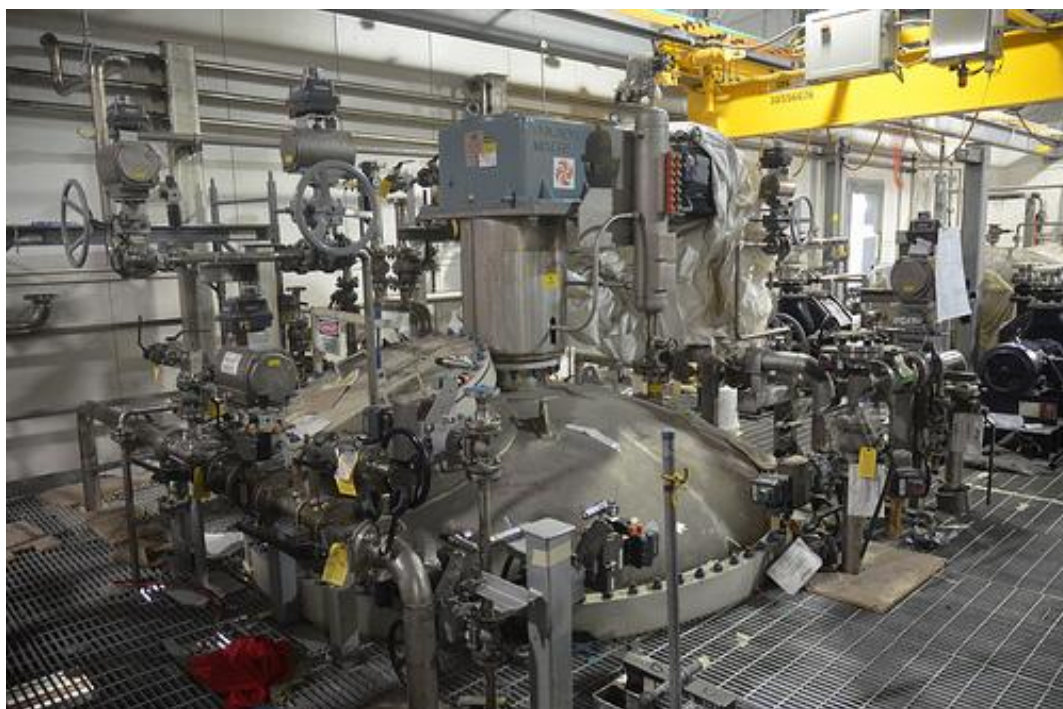


Figura 6.1.



Reactoarele chimice reprezintă fără îndoială cele mai vitale utilaje ale multor procese chimice, biochimice, din industria polimerilor și a petrolului, pentru că ele transformă materii prime în produse chimice de valoare. O mare parte din societatea modernă se bazează pe funcționarea reactoarelor chimice în condiții de siguranță și randament economic.

Industria materialelor, și în special a materialelor chimice utilizează reactoare în aproape toate instalațiile pentru a transforma materii prime în produse. Multe dintre materialele care

sunt utilizate pentru îmbrăcăminte, locuință, automobile, construcții, electronice și asistență medicală provin din procese care folosesc reactoare. Reactoare sunt importante chiar și în industria alimentară și a băuturilor, pentru procesarea și prelucrarea produselor agricole.

De-a lungul timpului au fost publicate foarte multe lucrări care se ocupă cu controlul unei largi varietăți de reactoare chimice. Cu toate acestea, nu există încă un manual care să adune aceste materiale împreună într-o manieră unitară și coerentă. Un motiv important pentru aceasta este varietate foarte largă a tipurilor de reactoare chimice și a produselor chimice obținute cu acestea, ceea ce duce la un număr mare de configurații diferite ale reactoarelor chimice. Ar fi imposibil de a discuta despre controlul acestei multitudini de tipuri de reactoare utilizate în întregul spectru al industriei chimice. Din această cauză, în acest capitol se va discuta despre funcționarea și controlul unuia dintre cele mai importante reactoare chimice generice.

Pentru a înțelege funcționarea rectoarelor chimice trebuie clarificate câteva noțiuni specifice:

reactor chimic – utilaj în care se desfășoară reacțiile chimice;

reactor cu funcționare continuă – reactanții se introduc continuu și produsul se evacuează continuu;

reacție chimică omogenă – este implicată o singură fază;

reacție chimică - exotermă – cu degajare de căldură de reacție;

- *endotermă* – cu absorbție de căldură de reacție;

- *izotermă* – temperatura amestecului de reacție rămâne constantă;

reacție chimică ireversibilă – reacția care se desfășoară într-un singur sens ($A \rightarrow B$);

reacție de ordinul I - reacție prin care un reactant se transformă în unul sau mai mulți produși (de exemplu $A \rightarrow B$ sau $A \rightarrow B + C$).

viteza de reacție – viteza de dispariție a reactantului (viteza de apariție a produsului).

Din punct de vedere cantitativ, viteza unei reacții chimice se poate defini ca fiind variația concentrației în unitatea de timp. Pentru reacțiile ireversibile de ordinul unu viteza de reacție pe unitatea de volum este proporțională cu concentrația reactantului:

$$r = k c_A \quad [\text{mol/m}^3\text{s}] \quad (1)$$

cu k reprezentând constanta de viteză.

În general, viteza reacțiilor chimice se modifică în mod considerabil sub acțiunea temperaturii. Majoritatea reacțiilor chimice au loc cu o viteză mai mare la temperaturi mai ridicate. Influența temperaturii asupra vitezei de reacție apare în constanta de viteză k . Dependența constantei de viteză de temperatură este dată de ecuația lui *Arrhenius*:

$$k = k_0 e^{-E/RT} \quad (2)$$

în care k_0 este coeficientul de viteză caracteristic fiecărei reacții chimice, E – energia de activare, R – constanta gazelor ideale, iar T – temperatura absolută. O creștere a temperaturii implică o creștere a vitezei de reacție.

Pentru majoritatea aplicațiilor industriale, de serie mare, reactoarele chimice se clasifică din punct de vedere al funcționării în:

- *reactoare cu amestecare* (stirred tank);

- *reactoare tubulare* (plug-flow reactors).

Primele se consideră cu amestecare perfectă, cu parametri concentrați, iar cele tubulare se consideră cu parametri distribuiți.

Pentru *procesele cu parametri distribuiți*, la care apar dependențe atât în raport cu timpul cât și în raport cu coordonatele spațiale ale utilajelor, modelele matematice în regim dinamic constau din sisteme de *ecuații diferențiale cu derivate parțiale*.

Reactoarele chimice cu amestecare pot fi modelate prin ecuații sau sisteme de ecuații diferențiale ordinare. Popularitatea reactoarelor chimice cu amestecare se datorează simplității constructive cu acces ușor pentru curățare și mentenanță, costurilor scăzute în exploatare și posibilitatea implementării, relativ simple, a unor sisteme de control automat. Utilizarea variantei cu funcționare continuă în locul variantei de funcționare discontinuă (în șarjă) asigură obținerea unui produs cu proprietăți consistente, permite optimizarea consumului de energie (de exemplu, caldura dezvoltată de o reacție exotermă ar putea fi folosită la încălzirea reactantului), obținerea unei productivități ridicate prin reducerea perioadelor de inactivitate (încărcare, încălzire, răcire, golire).

Reactoarele chimice cu amestecare și funcționare continuă sunt utilizate pe scară largă, în principal în industria chimică organică pentru reacții chimice în care reactanții sunt de cele mai multe ori în faza lichidă. Utilizarea lor este recomandată în special pentru a obține produși de concentrație constantă sau în cazuri în care controlul temperaturii reprezintă un aspect critic. Aceste reactoare pot fi utilizate câte unul singur sau în serie cu alte reactoare similare.

Modelul matematic.

În acest subcapitol se încearcă determinarea comportamentului în regim dinamic al unui reactor chimic cu amestecare și funcționare continuă (RCCA-reactor chimic continuu cu amestecare - fig. 6.2). În acest reactor are loc o reacție chimică de ordinul I în fază lichidă, ireversibilă, exotermă. Pentru a asigura răcirea reactorului acesta va avea pereți dubli pentru circulația agentului de răcire. Amestecarea materialului din reactor se realizează cu ajutorul unui agitator. Acesta este cel mai simplu exemplu posibil. Deși pentru un chimist acest exemplu poate părea nerealist și trivial, oferă totuși posibilitatea analizei efectului principalilor parametri constructivi și funcționali asupra dinamicii reacției și a regimului termic, fiind folosit în lucrări de referință referitoare la proiectarea și controlul reactoarelor chimice.

Se consideră următoarele ipoteze simplificatorii:

- amestecare perfectă. Principalul avantaj este obținerea unei uniformități perfecte a temperaturii și concentrației înăuntrul și la ieșirea reactorului.
- nivelul în reactor este menținut constant; ca urmare debitul de intrare și cel de ieșire vor fi egale;
- se neglijează timpul mort datorat transportului pe conducta de alimentare de la elementul de execuție la reactor;
- debitul agentului de răcire se consideră suficient de mare (teoretic infinit) pentru a considera că temperatura agentului nu se modifică. În practică, chiar dacă temperatura

agentului de răcire la intrarea în mantaua de răcire a reactorului este diferită de cea de la ieșire se poate considera o medie a acestor temperaturi.

- masa pereților metalici ai reactorului este neglijabilă astfel că nu se va lua în considerare inerția termică a pereților reactorului în transferul de căldură între agentul de răcire și amestecul din reactor (de altfel și căldura specifică pentru oțel este cu un ordin de mărime mai mică decât cea a apei)
- pierderile de căldură către mediul înconjurător sunt neglijabile.

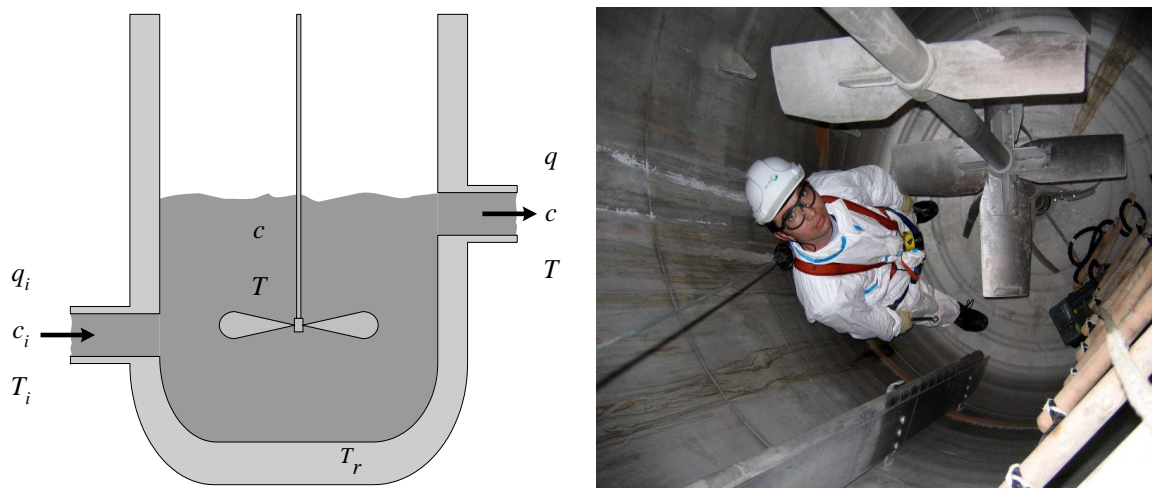


Figura 6.2.

În aceste condiții semnificația mărimilor din fig 5.1. este următoarea:

q – debit de ieșire (de evacuare – un amestec ce conține atât produsul rezultat din reacția chimică cât și cea parte a reactantului care nu s-a transformat în produs - reziduu) [m^3/s],

q_i – debit de intrare (de alimentare) [m^3/s],

c_i – concentrația molară a reactantului A în alimentare [mol/m^3],

c – concentrația molară a componentului A în evacuare [mol/m^3],

m_m – masa moleculară [kg/mol],

T_i – temperatura reactantului în alimentare [K],

T – temperatura amestecului în reactor (aceeași cu temperatura la evacuare a amestecului produs, reactant în reziduu [K],

T_r – temperatura agentului de răcire [K],

V – volumul amestecului din reactor [m^3],

Pentru a pune în evidență desfășurarea unei reacții chimice în timp este suficient să urmărim concentrația unui reactant sau a unui produs (analizând o reacție chimică de ordinal I, așa cum s-a precizat mai sus, vom avea un singur reactant). În ipoteza unei funcționări izoterme ($T = \text{constant}$), descrierea procesului de reacție impune numai un bilanț material (legea conservării masei de substanță din reactor – variația masei reactantului este egală cu diferența dintre fluxul de masă care intră în reactor, cel care iese și cel care se transforma în produs):

$$d \frac{(m_m \cdot V \cdot c)}{dt} = m_m \cdot q \cdot c_i - m_m \cdot q \cdot c - m_m \cdot V \cdot r \quad (3)$$

sau

$$V \frac{dc(t)}{dt} = q(t) \cdot c_i(t) - q(t) \cdot c(t) - V \cdot k \cdot c(t) \quad (4)$$

unde $m_m V r$ reprezintă viteza de dispariție a reactantului, respectiv de apariție a produsului, iar $r = kc$ – viteza de reacție, constantă în cazul reactorului izoterm, $c_i(t)$ și $q(t)$ sunt considerate intrări, iar $c(t)$ ieșire. De menționat că $c(t)$ se referă la concentrația reactantului în reziduu adică reactantul care se elimină din reactor pentru că nu a fost transformat în produs pe timpul de staționare în reactor.

Relația (4) este o ecuație diferențială neliniară întrucât include termeni ce reprezintă produse ale variabilelor procesului. Pentru obținerea funcțiilor de transfer se liniarizează în jurul punctului de funcționare caracterizat de valorile de regim staționar c^0 , c_i^0 , q^0 . Considerând $c = c^0 + \Delta c$, $c_i = c_i^0 + \Delta c_i$, $q = q^0 + \Delta q$, pentru cei doi termeni conținând produse între variabile ale procesului $q(t)c_i(t)$ și respectiv $q(t)c(t)$ vom avea:

$$qc_i = q^0 c_i^0 + \left(\frac{\partial(q \cdot c_i)}{\partial q} \right)_0 \Delta q + \left(\frac{\partial(q \cdot c_i)}{\partial c_i} \right)_0 \Delta c_i$$

$$qc = q^0 c^0 + \left(\frac{\partial(q \cdot c)}{\partial q} \right)_0 \Delta q + \left(\frac{\partial(q \cdot c)}{\partial c} \right)_0 \Delta c$$

Înlocuind în (4), pentru $dc(t)/dt=0$ vom obține valoarea staționară a concentrației produsului în reziduu

$$c^0 = (c_i^0 q^0) / (q^0 + V k)$$

iar pentru regimul dinamic se poate scrie:

$$V \frac{d\Delta c}{dt} = \left(\frac{\partial(q \cdot c_i)}{\partial q} \right)_0 \Delta q + \left(\frac{\partial(q \cdot c_i)}{\partial c_i} \right)_0 \Delta c_i - \left(\frac{\partial(q \cdot c)}{\partial q} \right)_0 \Delta q - \left(\frac{\partial(q \cdot c)}{\partial c} \right)_0 \Delta c - V \cdot k \cdot \Delta c$$

$$V \frac{d\Delta c}{dt} = c_i^0 \Delta q + q_0 \Delta c_i - c^0 \Delta q - q_0 \Delta c - V \cdot k \cdot \Delta c$$

$$V \frac{d\Delta c}{dt} = (c_i^0 - c^0) \Delta q + q_0 \Delta c_i - (q_0 + V \cdot k) \Delta c$$

Considerând ieșirea c , și cele două variabile de intrare c_i și q se obține schema funcțională prezentată în figura 6.3.

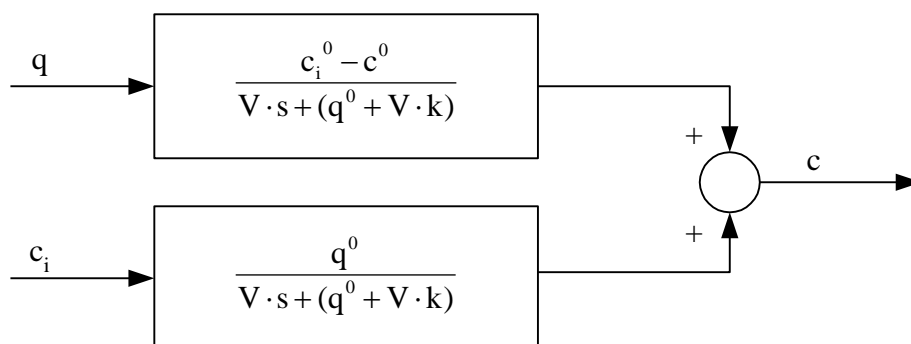


Figura 6.3.

Se poate observa că în modelul liniarizat funcțiile de transfer corespunzătoare ramurii $c_i \rightarrow c$ și respectiv $q \rightarrow c$ sunt caracteristice unor elemente de întârziere de ordinul I cu o constantă de timp $\tau_1 = \tau / (1 + k \tau)$ și valorile coeficientului de proporționalitate (factor de

amplificare static):

$$- K_1 = \frac{c_i^0 - c^0}{q^0 + V \cdot k}, \text{ pentru } q \rightarrow c.$$

$$- K_2 = \frac{q^0}{q^0 + V \cdot k} = \frac{1}{1 + \frac{V}{q^0} k} = \frac{1}{1 + \tau k}, \text{ pentru } c_i \rightarrow c$$

Constanta $\tau = V/q^0$ reprezintă un parametru de construcție important și poartă numele de **timp de staționare**. Inerția reactoarelor chimice, în cazul considerat aici, este mare și depinde de timpul mediu de staționare și de viteza de reacție.

Se poate observa că dinamica procesului este influențată de două efecte: unul de amestecare și unul de cinetica reacției. Pentru valori mici ale vitezei de reacție efectul preponderent este dat de întârzierea de amestecare. Pentru o valoare nulă a constantei vitezei de reacție ($k=0$), adică în lipsa reacției, va rezulta un proces simplu de amestecare.

Sensibilitatea statică a ieșirii față de intrări (dată de valoarea factorului de amplificare static) scade odată cu creșterea vitezei de reacție. Pentru $k=0$ rezultă $K_2=1$, ieșirea c fiind complet sensibilă față de intrarea c_i .

Dacă este vorba de un reactor ce lucrează într-un regim neizoterm, pe lângă bilanțul de material trebuie luat în considerare și bilanțul termic. Efectele termice în aceste reactoare sunt rezultatul cantităților de căldură introduse prin reactanți, extrase prin produși, absorbite sau generate în timpul reacției.

Pentru reactoarele continue cu amestecare perfectă ecuația bilanțului termic este o ecuație diferențială ordinară. În cazul reactoarelor exoterme pe care le vom analiza în continuare, ecuația bilanțului termic are forma:

$$\rho \cdot V \cdot c_p \frac{dT(t)}{dt} = Q_p - Q_e \quad (5)$$

$$Q_p = (-\Delta H) \cdot V \cdot r = (-\Delta H) \cdot V \cdot k_0 \cdot e^{-E/RT(t)} \cdot c(t) \quad (6)$$

$$Q_e = -\rho \cdot q(t) \cdot c_p \cdot T_i(t) + \rho \cdot q(t) \cdot c_p \cdot T(t) + k_T \cdot A \cdot [T(t) - T_r(t)] \quad (7)$$

unde : Q_p – căldura produsă de reacția chimică [J/s];

Q_e – căldura evacuată [J/s] (diferența dintre căldura introdusă prin alimentare și cea evacuată prin extragerea produsului, cumulată cu căldura schimbată cu agentul de răcire);

Se poate observa ca atât Q_p cât și Q_e reprezintă de fapt fluxuri de căldură, adică reprezintă cantitatea de căldură raportată la unitatea de timp.

ρ – densitatea medie a produsului [kg/m^3];

c_p – căldura specifică medie [J/kgK];

ΔH – entalpia de reacție, specifică fiecărui amestec de reactanți [J/mol];

$(-\Delta H) > 0$ pentru o reacție exotermă

$(-\Delta H) < 0$ pentru o reacție endotermă

A – aria suprafeței de transfer termic a agentului de răcire [m^2];

k_T – coeficient de transfer termic [$\text{W/m}^2\text{K}$].

În concluzie, pentru reactorul chimic exoterm cu funcționare continuă și amestecare

totală prezentat în figura 6.2 se poate adopta modelul matematic neliniar:

$$\begin{aligned} V \frac{dc(t)}{dt} &= q(t) \cdot c_i(t) - q(t) \cdot c(t) - V \cdot k_0 \cdot e^{-E/RT(t)} \cdot c(t) \\ \rho V c_p \frac{dT(t)}{dt} &= \rho q(t) c_p [T_i(t) - T(t)] + k_T A [T_r(t) - T(t)] + (-\Delta H) V k_0 e^{-E/RT(t)} c(t) \end{aligned} \quad (8)$$

Ca și în cazul ecuației (4), relațiile date în (8) sunt neliniare întrucât includ termeni ce reprezintă produse ale variabilelor procesului. De această dată însă temperatura amestecului din reactor nu rămâne constantă, iar neliniaritatea modelului (8) este dată în principal de cinetica reacției sau altfel spus viteza de reacție $r(c, T) = kc = k_0 e^{-E/RT} c$, care are o dependență polinomială, sau rațională în funcție de c , dar o dependență puternic neliniară față de temperatura amestecului T , dată de ecuația lui Arrhenius. Datorită acestei neliniarități RCCA pot manifesta o dinamică ce va pune în evidență multiplicitatea stărilor staționare sau condițiilor de echilibru, unele stabile dar altele instabile. Pentru dezvoltarea sistemului de control, o etapă importantă o reprezintă analiza dinamicii reactorului în spațiul stărilor, inclusiv stările staționare multiple, fenomenele de bifurcație și histerezis. Această analiză va contribui la creșterea eficienței procesului și a siguranței în funcționare.

Modelul liniar

Pentru obținerea unui model liniar de tip intrare-stare-ieșire, se liniarizează modelul neliniar în jurul punctului de funcționare caracterizat de valorile de regim staționar, q^0, c_i^0, T_i^0, T_r^0 , respectiv c^0, T^0 . Se va obține un model de forma:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= Ax + Bu \\ y &= Cx + Du \end{aligned} \quad (9)$$

cu $x^T = y^T = [c \ T]$, $u^T = [q \ c_i \ T_i \ T_r]$

Matricile A, B, C, D au fost obținute prin liniarizarea modelului neliniar dat de relația (6) urmând aceleași calcule prezentate pentru liniarizarea modelului reactorului izoterm și având în vedere că pentru liniarizarea vitezei de reacție r se pot utiliza relațiile:

$$r = kc = k_0 e^{-E/RT} c$$

$$\Delta r = \left[\frac{\partial r(t)}{\partial T(t)} \right]_{T^0, c^0} \Delta T + \left[\frac{\partial r(t)}{\partial c(t)} \right]_{T^0, c^0} \Delta c$$

$$\Delta r = \frac{k_0 E c^0}{RT^{0^2}} e^{-E/RT^0} \Delta T + k_0 e^{-E/RT^0} \Delta c$$

Rezultă matricile A, B, C, D de forma:

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{q^0}{V} - k_0 \cdot e^{-E/RT^0} & -k_0 \cdot e^{-E/RT^0} \frac{E c^0}{RT^{0^2}} \\ \frac{(-\Delta H)}{\rho c_p} k_0 \cdot e^{-E/RT^0} & -\frac{q^0}{V} - \frac{k_T A}{\rho V c_p} + \frac{(-\Delta H)}{\rho c_p} k_0 \cdot e^{-E/RT^0} \frac{E c^0}{RT^{0^2}} \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} \frac{c_i^0 - c^0}{V} & \frac{q^0}{V} & 0 & 0 \\ \frac{T_i^0 - T^0}{V} & 0 & \frac{q^0}{V} & \frac{k_T A}{\rho V c_p} \end{bmatrix} \quad (10)$$

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Pentru determinarea unui model liniar intrare ieșire, se poate folosi funcția *ss2tf*. Calculele se pot realiza în Matlab utilizând programul *rcca_l.m*, după o rulare prealabilă a programului *rcca0.m*, prezentat mai jos, în care se fac inițializările valorilor parametrilor constructivi și cinetici, a valorilor variabilelor de intrare și se calculează valorile staționare ale ieșirilor.

rcca_l.m

A=zeros(2,2);

B=zeros(2,4);

C=eye(2,2);

D=zeros(2,4);

*A(1,1)=-q/V-(k0*exp(-EdR/T0));*

*A(1,2)=-k0*exp(-EdR/T0)*EdR*c0/T0^2;*

*A(2,1)=(mdH/rcp)*k0*exp(-EdR/T0);*

*A(2,2)=-q/V-hA/(rcp*V)+mdH*k0*exp(-EdR/T0)*EdR*c0/(T0^2*rcp);*

B(1,1)=(ci-c0)/V;

B(1,2)=q/V;

B(2,1)=(Ti-T0)/V;

B(2,3)=q/V;

*B(2,4)=hA/(rcp*V);*

[NUM,DEN] = ss2tf(A,B,C,D,4)

numtrc=NUM(1,1:3); numtrt=NUM(2,1:3); den=DEN;

HTrc=tf(numtrc,den)

HTrt=tf(numtrt,den)

Pentru modelul dat de (8) se poate considera o schemă bloc de forma:

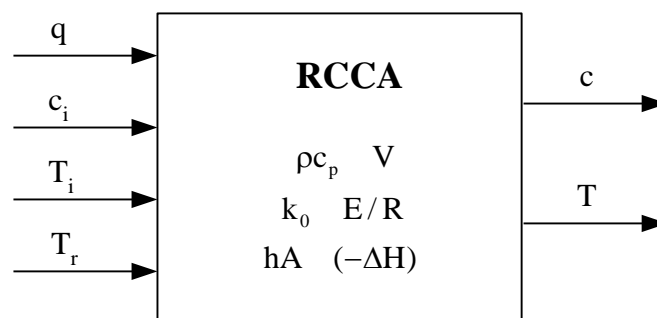


Figura 6.4

Variabilele de ieșire sunt c (concentrația reactantului în amestecul de evacuare) și T (temperatura amestecului în reactor), iar variabilele de intrare sunt q , c_i , T_i și T_r (debitul de alimentare, concentrația reactantului în alimentare, temperatura reactantului în alimentare și temperatura agentului de răcire).

Coeficientul de conversie al reactantului în produs se definește conform relației:

$$\chi = \frac{c_i^0 - c^0}{c_i^0}$$

Varianța uzuală de proiectare a RCCA corespunde situației în care se dau condițiile de alimentare a reactorului (debit, temperatură și concentrație de alimentare), informații privind parametrii cinetici ai reacției și coeficientul de conversie dorit. În aceste condiții se vor determina temperatura de lucru și dimensiunile reactorului.

Pentru a înțelege funcționarea unui astfel de proces este utilă mai întâi o analiză a regimului staționar de funcționare, din care rezultă cu necesitate studiul stabilității termice pentru reactoarele neizoterme. Regimul staționar corespunde aceluși regim al sistemelor dinamice în care starea fie nu se modifică în timp, fie variază periodic. Se va analiza regimul staționar al reactoarelor în care starea nu se modifică în timp. În acest caz concentrația reactanților și temperatura amestecului se mențin constante cu toate că au loc modificări chimice, transferuri de masă și schimburi de căldură. Regimul staționar se deduce prin anularea derivatelor. Dacă regimul termic este staționar, atunci $dT/dt = 0$, iar ecuația (5) devine:

$$Q_p = Q_e$$

Din relația (7) se observă că $Q_e(T)$ reprezintă o dreaptă. Pentru a reprezenta $Q_p(T)$ conform relației (6) să observăm din fig 6.3 că, în condiții de regim staționar se poate scrie:

$$c_0(T) = K_2(T) c_i^0 = c_i^0 \cdot q^0 / [q^0 + V k(T)] = c_i^0 \cdot q^0 / (q^0 + V k_0 e^{-E/RT}) \quad (11)$$

Reprezentarea grafică a celor doi termeni Q_e și Q_p este dată în figura 6.5, variabila independentă fiind T - temperatura amestecului din reactor. Pentru graficul din figura 6.5.b, au fost utilizate următoarele valori ale parametrilor reactorului [Amiya K. Jana, Chemical Process Modelling and Computer Simulation, Prentice-Hall of India Private Limited, New Delhi, 2008, ISBN-978-81-203-3196-9]:

- $S = 4.28$ – aria secțiunii transversale a reactorului [m^2];
- $d = 2.335$ – diametrul reactorului de formă cilindrică [m];
- $E = 49584$ – energia de activare [kJ/kmol];
- $h = 2.335$ – nivelul amestecului din reactor [m];
- $-\Delta H = 24953$ – entalpia de reacție [kJ/kmol];
- $R = 8.32$ – constanta gazelor ideale [kJ/(kmol)(K)];
- $k_0 = 34930800$ – coeficient de viteză de reacție [1/h];
- $\rho \cdot c_p (rcp) = 2093$ – produsul dintre densitatea amestecului din reactor și căldura specifică medie a acestuia [kJ/(m^3)(K)];
- $k_T = 293$ – coeficient de transfer termic [kJ/(m^2)(K)(h)];

Cu aceste valori se pot calcula:

- $V = S \cdot h = 10$ – volumul amestecului din reactor [m^3]
- $A = S + \pi \cdot d \cdot h = 21.4$ - aria suprafeței de transfer termic al agentului de răcire (considerând că reactorul are fundul și pereții laterali dubli) [m^2]

S-au considerat următoarele valori pentru variabilele de intrare:

- $c_i^0 = 10$ – concentrația molară a reactantului la intrare [$kmol/m^3$];
- $q^0 = 10$ – debitul de intrare [m^3/h];
- $T_i^0 = 25 + 273$ – temperatura reactantului în alimentare [K];
- $T_r^0 = 25 + 273$ – temperatura agentului de răcire [K];

Exprimarea unităților de măsură s-a dovedit a fi corectă prin verificarea în cele două ecuații ale modelului.

Modificând valorile variabilelor de intrare:

- $q^1 = 10/4$ – debitul de intrare [m^3/h];
- $T_r^1 = 10 + 273$ – temperatura agentului de răcire [K].

și păstrând valorile celorlalți parametri se obține egraficul din figura 6.5.a. Reprezentarea grafică a fost realizată în MATLAB, utilizând programul *rcca0.m*. Programul calculează de asemenea valoarea temperaturii (T_0) și a concentrației de ieșire (c_0) corespunzătoare punctului de echilibru stabil P_1 .

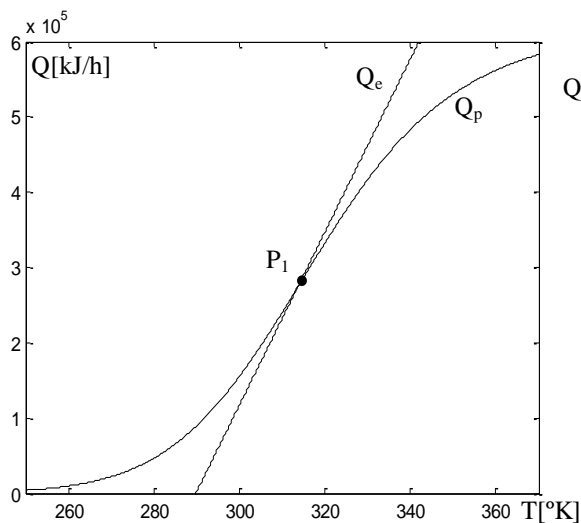


Figura 6.5.a

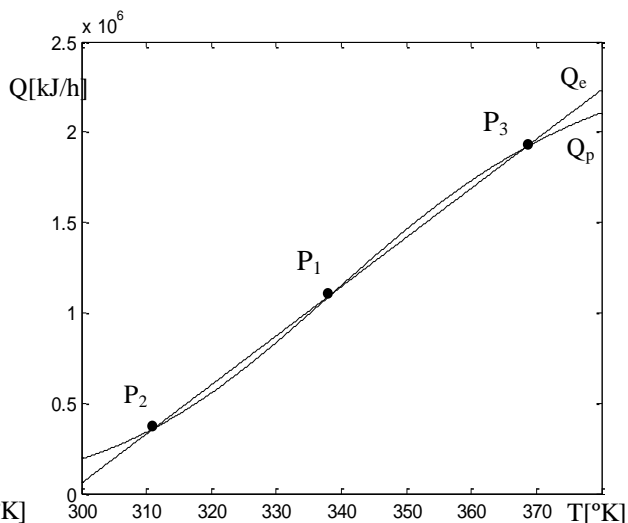


Figura 6.5.b

rcca0.m

```
clear; clf
rccp=2093;
V=10;
k0=34930800;
EdR= 49584/8.32;
At=21.4;
kT=293;
hA=kT*At;
mdH=24953;
```

```
q=8;
ci=10;
```

```

Ti=25+273;
Tr=25+273;
Tv=300:0.001:500;

cv=(q*ci)./(q+V*k0*exp(-EdR./Tv));
Q1=-(rcp*q*(Ti-Tv)-kT*At*(Tv-Tr));
Q2=mdH*V*k0*exp(-EdR./Tv).*cv;
cx=-(rcp*q*(Ti-Tv)-kT*At*(Tv-Tr))./(mdH*V*k0*exp(-EdR./Tv));
figure(1)
plot(Tv,[Q1',Q2']);
xlabel('T [K]');ylabel('Q [kJ/h]')
figure(2)
plot(Tv,cv,Tv,cx)
xlabel('T [K]');ylabel('c [kmol/m3]')

buf=sign(Q1-Q2);
buf=diff(buf);
buf=find(buf~=0);
if length(buf)==1
T0=Tv(buf(1));
c0=cv(buf(1));
else
T0=Tv(buf(2));
c0=cv(buf(2));
end

```

În regim staționar termic, punctul de funcționare (P) rezultă la intersecția dreptei $Q_e(T)$ cu curba $Q_p(T)$. Dacă panta dreptei este mai mare decât panta maximă a curbei ele se vor intersecta într-un singur punct; în caz contrar vom avea două sau trei puncte de intersecție.

Un punct de funcționare este stabil numai dacă în punctul respectiv panta dreptei $Q_e(T)$ este mai mare decât panta curbei $Q_p(T)$, caz în care, la o creștere accidentală a temperaturii ($\Delta T > 0$), $Q_e(T) > Q_p(T)$, respectiv debitul caloric evacuat fiind mai mare decât cel produs, reactorul poate fi răcit mai intens și readus la punctul inițial. Dacă în punctul de intersecție (P), panta dreptei $Q_e(T)$ este mai mică decât panta curbei $Q_p(T)$ rezultă că la o creștere accidentală ($\Delta T > 0$) a temperaturii, $Q_p(T) > Q_e(T)$, respectiv debitul caloric produs este mai mare decât cel evacuat, iar temperatura se mărește în continuare. Ca urmare se intensifică reacțiile chimice (considerate exoterme) ceea ce va ridica în continuare temperatura, fenomenul devine cumulativ, iar funcționarea nu mai revine la punctul anterior, ci se stabilizează într-un alt punct de intersecție unde panta dreptei $Q_e(T)$ este mai mare decât a curbei $Q_p(T)$. În consecință, pentru figura 6.5.a, rezultă o singură intersecție în punctul P_1 ($T^0=313.522$, $c_0=5.63$) care este stabil. Pentru figura 6.5.b avem puncte de funcționare multiple, punctul P_1 ($T^0=338.742$, $c_0=5.5589$) este nestabil iar punctele P_2 ($T^0=311.267$, $c_0=8.5538$) și P_3 ($T^0=368.292$, $c_0=2.3378$) sunt stabile. T^0 este exprimat în [K] iar c_0 în [kmol/m³].

Modificarea dreptei $Q_e(T)$ se poate face, fie prin modificarea temperaturii T_r a agentului termic, caz în care se obține o familie de trepte translate pe orizontală și de pantă constantă, fie prin modificarea debitului de reactant, caz în care se modifică panta dreptei dar și forma curbei $Q_p(T)$.

Mai puțin sugestivă dar mai completă este reprezentarea punctelor de echilibru în reprezentarea grafică a concentrației amestecului din reactor în funcție de temperatură. În condiții de regim staționar, din ecuația de bilanț material rezultă:

$$c(T) = c_i^0 \cdot q^0 / (q^0 + V k_0 e^{-E/RT})$$

iar din ecuația de bilanț termic:

$$c(T) = \frac{k_r A [T - T_r^0] - \rho q^0 c_p [T_i^0 - T]}{(-\Delta H) V k_0 e^{-E/RT}}$$

Reprezentând grafic cele două curbe, intersecția lor determină punctele de echilibru staționar. Cu valorile date de (12) se obține graficul din fig 6.6 în care sunt puse din nou în evidență cele trei puncte de echilibru staționar P₁ (T⁰=338.742, c₀=5.5589), P₂ (T⁰=311.267, c₀=8.5538) și P₃ (T⁰=368.292, c₀=2.3378)

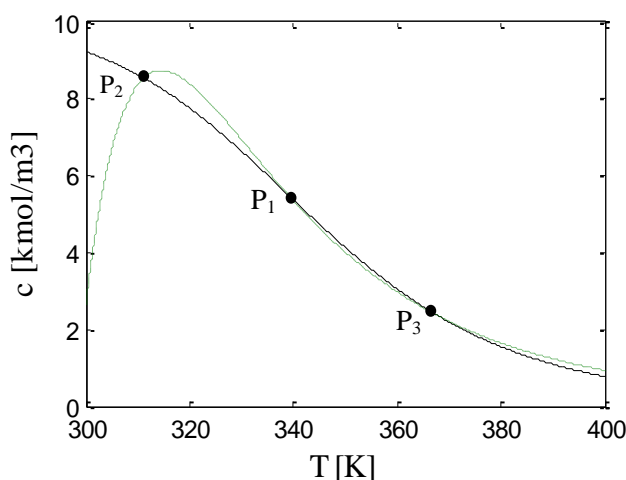


Figura 6.6

Pentru a demonstra stabilitatea punctului de funcționare se poate folosi modelul liniar (10). Calculând matricea A, putem obține polinomul caracteristic și valorile proprii pentru fiecare punct de funcționare. Procesul este într-o situație de echilibru staționar stabil dacă valorile proprii ale matricii A au toate partea reală negativă. În tabelul 6.1 este prezentată situația analizei satabilității pentru fiecare punct de funcționare din graficul 6.5.b sau 6.6.

Tabelul 6.1

Punctul de echilibru	Polinomul caracteristic	Valorile proprii	stabilitate
P1	$\lambda^2 + 0.348 \lambda - 0.412 = 0$	$\lambda_1 = -0.8395, \lambda_2 = 0.4909$	instabil
P2	$\lambda^2 + 1.408 \lambda + 0.458 = 0$	$\lambda_1 = -0.8962, \lambda_2 = -0.5119$	stabil
P3	$\lambda^2 + 1.563 \lambda + 1.545 = 0$	$\lambda_1 = -0.7817 + 0.9666i$ $\lambda_2 = -0.7817 - 0.9666i$	stabil

Analiza stabilității este importantă, deoarece punctul de echilibru instabil poate duce la procesul de producție optim.

Ar trebui observat că valoarea concentrației reactantului în amestecul de ieșire (reziduu) scade odată creșterea temperaturii amestecului din reactor și intensificarea reacției chimice, respectiv crește odată cu scăderea temperaturii amestecului din reactor.

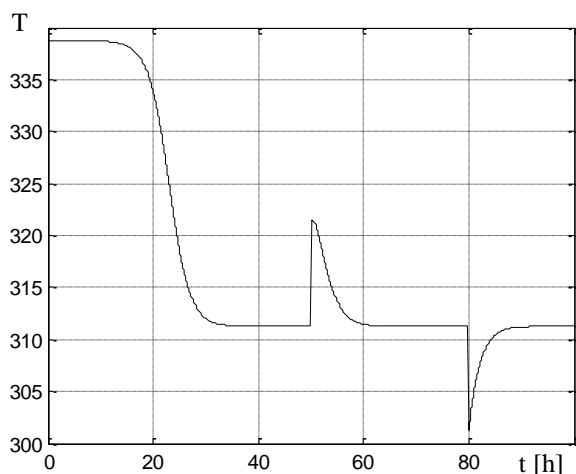


Figura 6.7.a

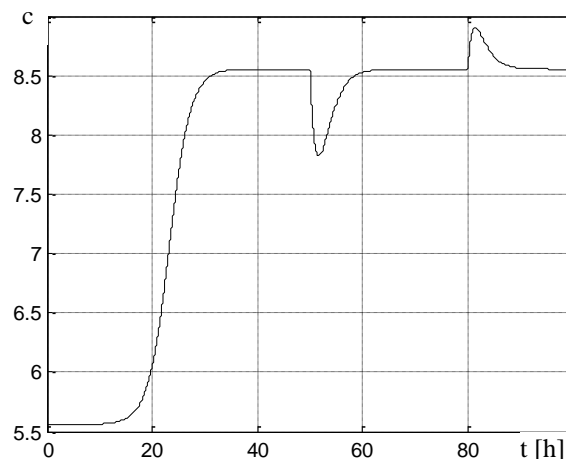


Figura 6.7.b

Referitor la comportarea reactorului în punctele de funcționare stabile sau în cele instabile, în figura 6.7 se poate observa cum o perturbație aditivă negativă pe ieșirea T (temperatura amestecului din reactor) de numai -10^{-3} grade K la momentul de timp $t=0$ va determina modificarea celor două ieșiri (temperatura amestecului din reactor – figura 6.7.a și respectiv concentrația reactantului în rezidu – figura 6.7.b.) de la valorile corespunzătoare punctului de echilibru instabil P_1 ($T^0=338.742$, $c_0=5.5589$) din figura 6.5.b la cele ale punctului de echilibru stabil P_2 ($T^0=311.267$, $c_0=8.5538$). Deoarece P_2 este un punct stabil se poate observa că perturbații aditive de -10 grade K la momentul de timp $t=50$ respectiv $+10$ grade K la momentul de timp $t=80$ pe temperatură nu vor scoate procesul din acest punct de funcționare, el revenind în mod automat, de fiecare dată, la condițiile de funcționare date de punctul P_2 . Simulările au fost realizate cu modelul simulink din figura 6.8. Temperatura este exprimată în grade K iar concentrația în kmol/m^3 .

În cazul unui astfel de proces, cu o dinamică neliniară și stări staționare multiple, este necesară analiza traiectoriilor de stare în vecinătăți ale punctelor de echilibru și analiza fenomenelor de bifurcație și histerezis. Pentru studiul comportării dinamice a RCCA, modelul neliniar (8), obținut prin modelare matematică va fi implementat pentru simulare în mediul *MATLAB/SIMULINK*. Pentru aceasta pot fi urmate două căi: utilizând funcțiile *ode* din Mtlab sau implementând în *SIMULINK* modelul neliniar. În ambele variante trebuie cunoscute condițiile inițiale care se pot determina cu *rcca0.m*.

1. Utilizând funcțiile *ode* din Mtlab (programul *rccaode.m*)

```
rccaode.m
tspan=0:0.01:100;
[tplot,Y]=ode23('rcca',tspan,[c0; T0]);
subplot(2,1,1);plot(tplot,Y(:,1));
subplot(2,1,2);plot(tplot,Y(:,2));
```

```
rcca.m
function Xdot=rcca(tplot,X);
```

```

c=X(1); T=X(2); if c<0, c=0; end;
k=k0*exp(-EdR/T);
cdot=(q*(ci-c)-V*k*c)/V;
Tdot=(rcp*q*(Ti-T)+hA*(Tr-T)+mdH*V*k*c)/(rcp*V);
Xdot=[cdot;Tdot];

```

2. Implementând în SIMULINK modelul neliniar (*rccas.mdl* – fig.6.5).

Pentru modelarea procesului s-au realizat 3 subsisteme *k*, *cdot* și *Tdot*, conectate ca în figura 6.8. Se pot observa cele 4 intrări ale procesului (q , c_i , T_i și T_r) și cele 2 ieșiri (c și T).

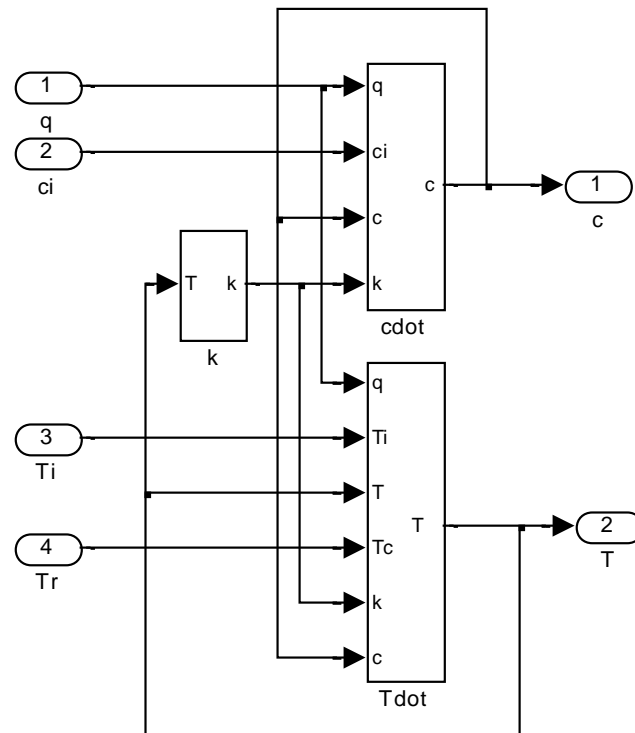


Figura 6.8

Subsistemul *k* realizează calculul vitezei de reacție conform relației:

$$k = k_0 e^{-E/RT}$$

Are o intrare (T) și o ieșire (k).

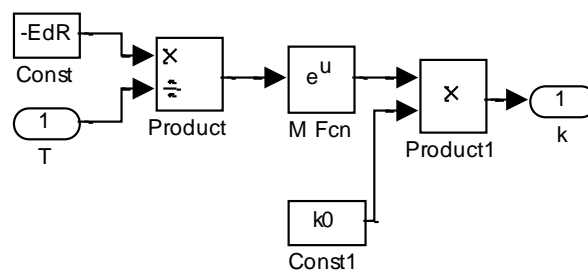


Figura 6.9.

Subsistemul *cdot* implementează ecuația de bilanț masic:

$$\frac{dc(t)}{dt} = \frac{1}{V} (q(t) \cdot c_i(t) - q(t) \cdot c(t) - V \cdot k_0 \cdot e^{-E/RT(t)} \cdot c(t))$$

Are o 4 intrări (q , c_i , c , k) și o ieșire (c).

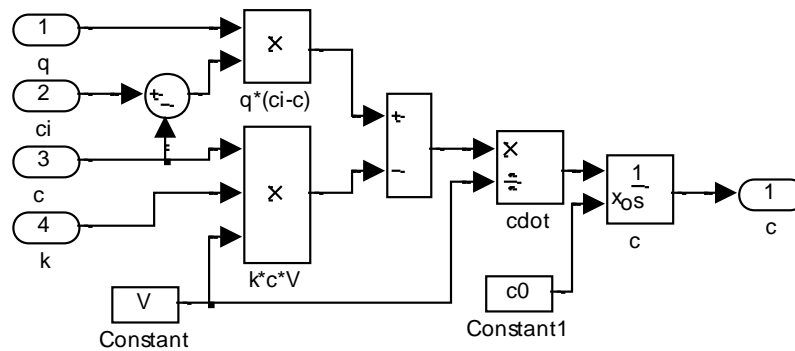


Figura 6.10.

Subsistemul $Tdot$ implementează ecuația de bilanț termic:

$$\frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{\rho V c_p} \left(\rho q(t) c_p [T_i(t) - T(t)] + k_r A [T_r(t) - T(t)] + (-\Delta H) V k_0 e^{-E/RT(t)} c(t) \right)$$

Are 4 intrări (k , c , q , T_i , T , T_r) și o ieșire (T).

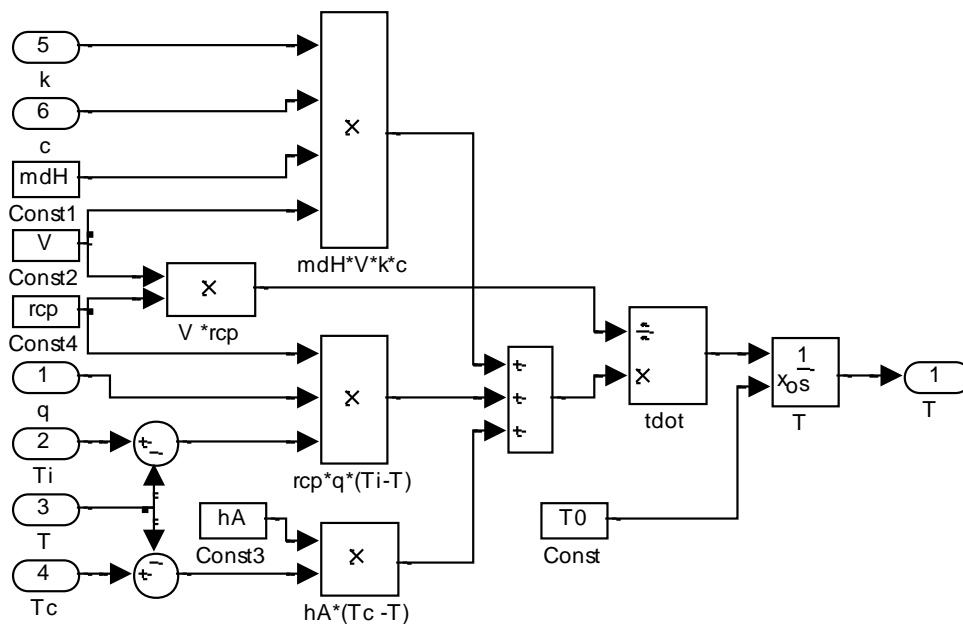


Figura 6.11.

Pentru a verifica modelul realizat inițializăm valorile parametrilor și ale intrărilor la valorile date de (13). Vom considera pentru început doar un proces de amestecare ($k_0=0$). Pentru a putea compara rezultatele vom aplica pe intrarea c_i o treaptă de 10% față de valoarea de regim staționar $c_i^0 = 5.63 \text{ [kmol/m}^3]$. Se va ajunge la o nouă valoare de regim staționar a ieșirii c de $5.63 \cdot 1.1 = 6.193$ (figura 6.12, linia continuă). Constanta de timp a procesului va fi $V/q^1 = 10/2.5 = 4$ și se verifică pe grafic. Revenim la valoarea $c_i^0 = 10$ pe intrarea c_i și considerăm reacție chimică izotermă. Pentru aceasta anulăm restricția ($k_0=0$), revenind la valoarea dată de (12), deconectăm intrarea T a subsistemului k de la ieșirea subsistemului $Tdot$ și o conectăm la o constantă $T = T^l = 313.522$. Pentru o treaptă de 10% pe intrarea c_i se obține răspunsul din figura 6.12, linie punctată. Constanta de timp a procesului calculată din acest grafic are aceeași

valoare cu cea calculată conform Figurii 6.2, $V/(q^1 + V \cdot k) = 10/(2.5 + 10 \cdot 0.195) = 2.247$, și are o valoare mai mică decât în cazul procesului de amestecare datorită aportului reacției chimice în modificarea concentrației. Aceeași constantă de timp se va obține și în cazul răspunsului la o perturbație de tip treaptă pe debitul de alimentare q .

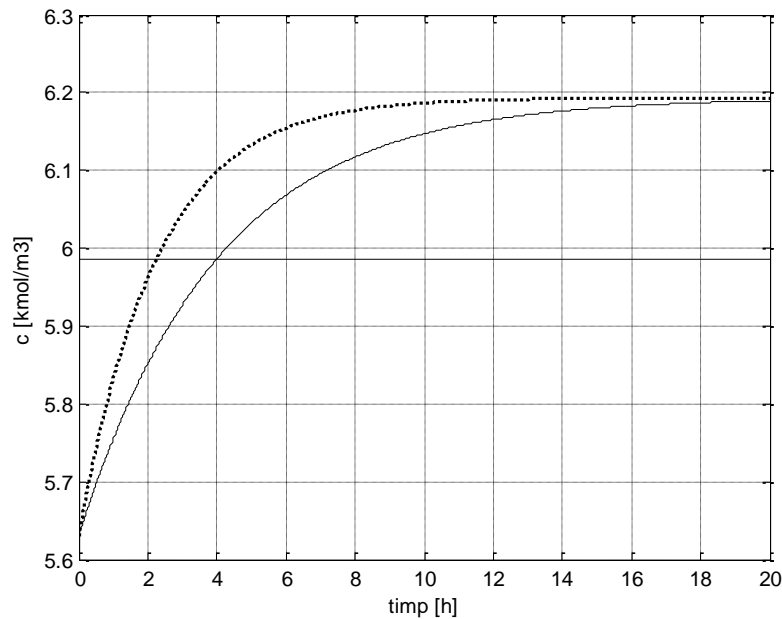


Figura 6.12.

Pentru determinarea aproximațiilor liniare în jurul punctelor de echilibru se pot folosi relațiile analitice de calcul așa cum s-a procedat la determinarea modelului liniar dat de (10). Aproximația liniară poate fi de asemenea obținută cu ajutorul comenzii *linmod* având sintaxa de apelare:

$[A,B,C,D]=\text{linmod}('rccas',x0,u0);$

unde A , B , C , D sunt matricile aproximației liniare rezultate, 'rccas' este numele diagramei SIMULINK asociate sistemului neliniar, iar $x0$ și $u0$ reprezintă valorile asociate stării și intrărilor corespunzătoare punctului de echilibru în jurul căruia se face liniarizarea. Intrările și ieșirile diagramei SIMULINK trebuie definite utilizând blocurile *Inport* și *Outport*.

Trasarea portretului global de stare, constând dintr-un număr cât mai mare de traiectorii semnificative ale stării, este laborioasă și în consecință greu aplicabilă. Deoarece interesează în mod deosebit stabilitatea punctelor de echilibru, se pot trasa doar porțiuni ale portretului de stare în vecinătăți ale punctelor de echilibru; adică portrete locale. Traiectoriile de stare obținute în urma a efectuării unor simulări succesive folosind modelul *rccas* sunt reprezentate în figura 6.13. În figura 6.13.a se poate observa punctul de echilibru stabil P_2 iar în figura 6.13.b ambele puncte de echilibru stabil P_2 și P_3 prezentate și în figura 6.6. Traiectoriile de stare au fost obținute modificând condițiile inițiale ale simulării. Se poate observa că plecând din condiții inițiale diferite procesul ajunge în stări de echilibru corespunzătoare unuia din cele două puncte de echilibru stabil. Menținerea procesului în condițiile punctului de echilibru instabil (P_1 din figura 6.6) poate fi realizată doar prin implementarea unui sistem de control corespunzător.

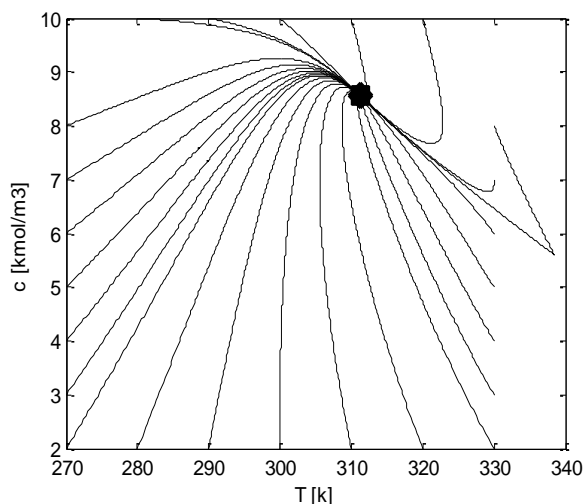


Figura 6.13.a.

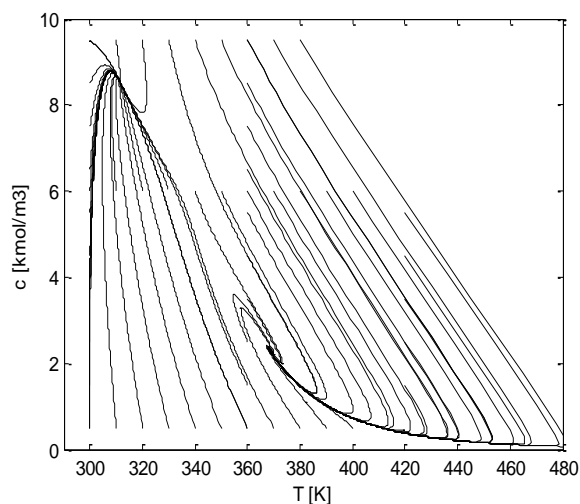


Figura 6.13.b.

Fenomenele de bifurcație și histerezis pot fi analizate în graficele prezentate în figurile 6.14 și 6.15. Figura 6.14 reprezintă evoluția variabilelor de stare (în cazul nostru coincid cu variabilele de ieșire) corespunzătoare punctelor de echilibru staționar în funcție de temperatura agentului de răcire. Datele pentru simulare sunt cele date de (12) iar temperatura agentului de răcire T_r s-a modificat între 285K și 310K cu un pas de 0.1K. Figura 6.15 reprezintă evoluția variabilelor de stare corespunzătoare punctelor de echilibru staționar în funcție de debitul de alimentare cu reactant.

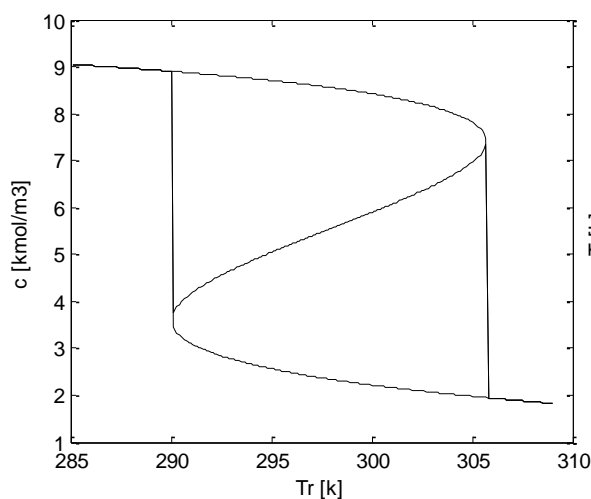


Figura 6.14.a.

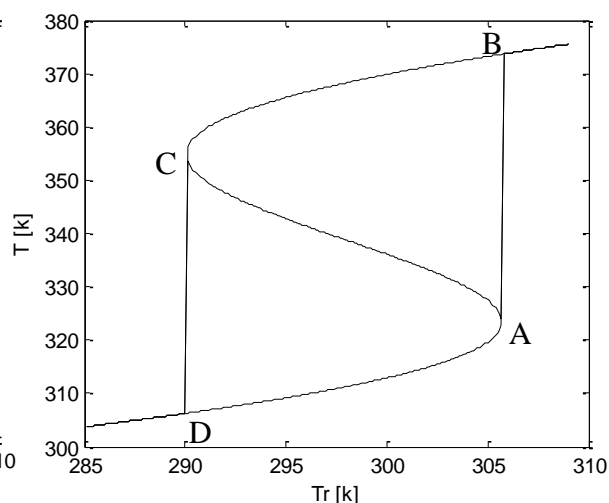


Figura 6.14.b.

Dacă se analizează din figura 6.14.b. evoluția temperaturii în reactor în funcție de temperatura agentului de răcire (T_r), se poate observa că dacă T_r crește încet de la 285K și se așteaptă de fiecare dată să se ajungă în regim staționar, temperatura reactorului corespunzătoare acestor stări de echilibru staționar crește încet, prin punctul D, până se ajunge în punctul A ($T_r = 305.7, T = 324.1K$). În acest punct apare o modificare abruptă, deoarece la o mică modificare a lui T_r următoarea stare staționară va corespunde punctului B ($T_r = 305.8, T = 373.7K$), care este departe de A. Apariția acestui salt de valoare mare în temperatura reactorului (49.6K) este denumită *inflamare* sau *aprindere*. O creștere în continuare a lui T_r nu

va mai determina modificări semnificative în temperatura de regim staționar reactorului, aceasta crește în continuare lent. Dacă T_r scade lent de la 310K astfel ca la fiecare modificare să se ajungă în regim staționar, temperatura de regim staționar a reactorului scade și ea treptat, trece prin punctul B și scade până se ajunge în punctul C ($T_r = 290.1, T = 356.2K$). Are loc și de această dată un salt brusc la punctul D ($T_r = 290, T = 306.2K$), dar acum se înregistrează o scădere bruscă a temperaturii în reactor (fenomenul este denumit înghețare sau stingere). Fenomenul de histerezis este pus în evidență prin faptul că la creșterea temperaturii agentului de răcire se parcurge graficul pe porțiunea DAB iar la scăderea temperaturii pe porțiunea BCD. Se poate observa că nu au fost atinse stările staționare care se găsesc între punctele A și C, aceasta deoarece acestea sunt puncte de echilibru staționar instabile.

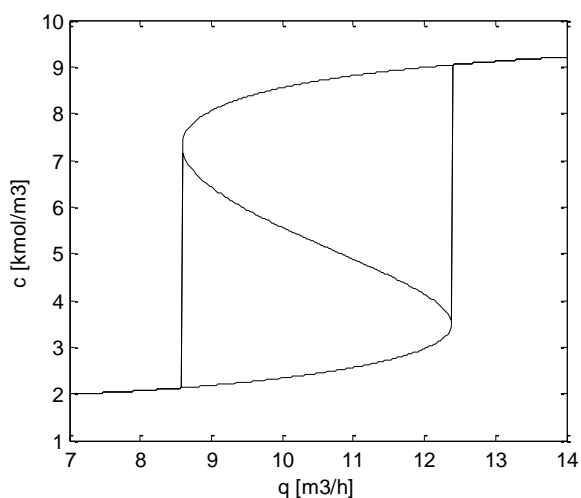


Figura 6.15.a.

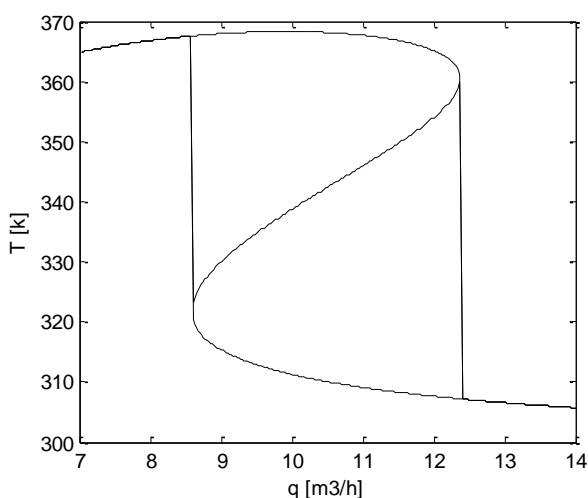


Figura 6.15.b.

În figura 6.16 se poate observa mai clar fenomenul de histerezis: la creșterea debitului de alimentare se parcurge graficul pe curba cu linie continuă iar la scăderea debitului de alimentare pe curba cu linie întreruptă.

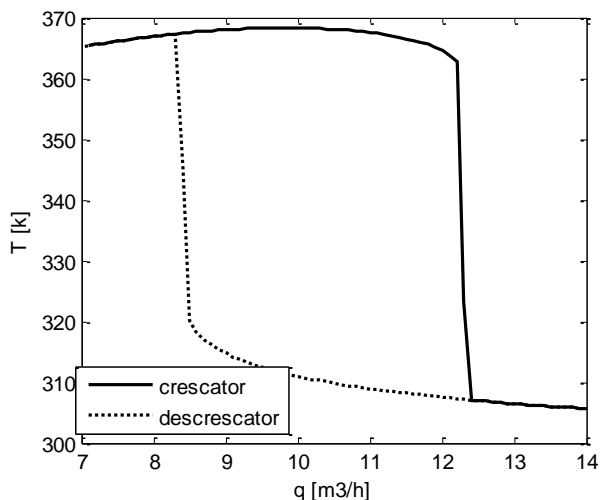


Figura 6.16.a.

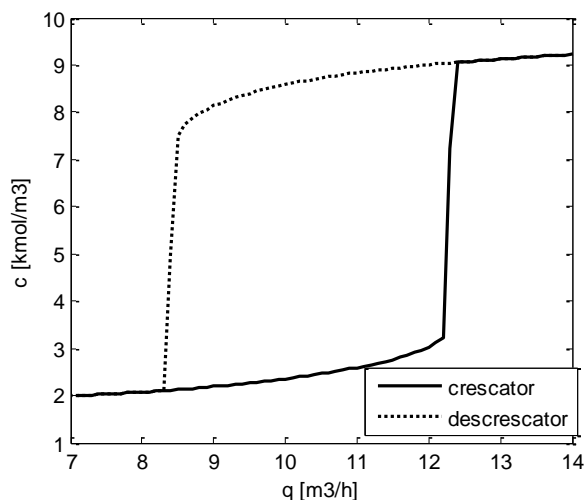


Figura 6.16.b.

Controlul RCCA

Din cele prezentate până acum referitor la funcționarea RCCA se poate desprinde ideea că proiectarea corectă a reactorului și alegerea echipamentelor de proces au ca și consecință un efect mai mare în obținerea unui sistem de control eficient decât o fac regulatoarele care sunt atașate la proces sau algoritmi care sunt implementați în aceste regulatoare.

Sarcina sistemului de control automat este diferită în funcție de tipul reactorului. Sistemele de reglare pentru reactoarele chimice cu amestecare și funcționare discontinuă sunt sisteme de urmărire sau mai exact sisteme de reglare după program deoarece temperatura și/sau concentrația trebuie să urmărească o anumită traiectorie prestabilită în raport cu timpul. Problema sistemelor de reglare pentru reactoarele chimice cu amestecare și funcționare continuă este mai mult una de reglare, în care temperatura și/sau concentrația sunt menținute la valorile dorite în prezența acțiunii perturbațiilor.

Coeficientul de conversie al reactantului în produs se definește conform relației:

$$\chi = \frac{c_i^0 - c^0}{c_i^0}$$

Pentru a simula timpul de răspuns al traductorului de temperatură am introdus un element de întârziere de ordinul întâi, cu constanta de timp de 60 sec. Valoarea timpului de răspuns depinde de tipul și dimensiunile traductorului de caracteristicile și condițiile mediului în care se măsoară temperatura. Cu cât dimensiunile senzorului sunt mai mari cu atât senzorul are un răspuns mai lent. La aceleași dimensiuni, răspunsul unui termocuplu este cu cca 20% mai rapid decât al unei termorezistențe. De regulă însă, mai ales în aplicații industriale traductoarele de temperatură se introduc în teci de protecție din material ceramic și/sau de oțel pentru a asigura o protecție mecanică și/sau chimică. Utilizarea tecilor de protecție duce la o creștere considerabilă a timpului de răspuns, creștere care depinde atât de materialul și dimensiunile tecii, cât și de capacitatea de transfer termic între elementul sensibil (termocuplu sau termorezistență) și teacă. Pentru a îmbunătăți acest reansfer termic se introduce uneori o substanță specială între teacă și senzor (vaselină conductivă sau pastă termică).

Timpul de răspuns al traductoarelor de temperatură depinde de asemenea și de mediul în care se fac măsurătorile, dacă acesta este staționar sau în mișcare relativă față de senzor, iar în ultimul caz și de viteza de deplasare a mediului față de senzor. În fișele de catalog sau manualele de utilizare ale traductoarelor sunt prezentate de regulă valorile a doi parametri legați de timpul de răspuns t_{05} și t_{09} . Primul parametru reprezintă timpul după care ieșirea senzorului ajunge la o valoare reprezentând 50% din variația temperaturii aplicată pe senzor, iar al doilea la o valoare de 90%. În tabelul 6.2. se prezintă valorile timpului de răspuns date de o companie producătoare de senzori de temperatură de uz general – IFM. Valorile prezentate sunt pentru un senzor cu teacă din oțel cu diametrul exterior de 10mm. Nu se specifică în ce mediu sunt realizate măsurătorile dar corelate cu valorile date de alte firme se pare că mediul ar fi apa. S-a prezentat acest tabel deoarece pune în evidență influența tecii de protecție și a pastei termice asupra valorii timpului de răspuns.

Tabelul 6.2

Parametru	Fara teacă	Cu teacă, fără pastă termică	Cu teacă și cu pastă termică
t_{09}	25 sec	125 sec	63 sec

În tabelul 6.3 sunt prezentate valorile timpului de răspuns pentru traductoare de temperatură de tip termorezistență date de o firmă specializată în producția de traductoare de

temperatură, Rueger, cu precizarea că aceste valori sunt doar orientative și se pot modifica cu până la 30% sau și mai mult. De asemenea se precizează că timpul de răspuns pentru termocupluri de aceleași dimensiuni cu termorezistențele prezentate în tabel, poate avea valori reduse cu 10 până la 20%. Valorile prezentate sunt pentru o termorezistență de diametru 6 sau 8 mm și teacă de protecție de diametru exterior 17-22 mm.

Tabelul 6.3

parametru	Termorezistență		termorezistență cu teacă	
	în apă aprox. 0.2 m/s	în aer aprox. 1 m/s	în apă aprox. 0.2 m/s	în aer aprox. 1 m/s
t _{0.9}	16 s	200 s	140 s	1350 s

Având în vedere că discutăm despre o reacție în fază lichidă și considerând că este necesară teaca de protecție, alegem t_{0.9}=140 sec. Cum t_{0.9} este de aproximativ 2.2 ori mai mare decât constanta de timp, se va obține pentru constanta de timp a traductorului de temperatură o valoare T_T= 140 sec/2.2=63.6 sec. Rotunjim la 60 sec.

Se va considera pentru început cazul cel mai simplu, RCCA izoterm (figura 6.17).

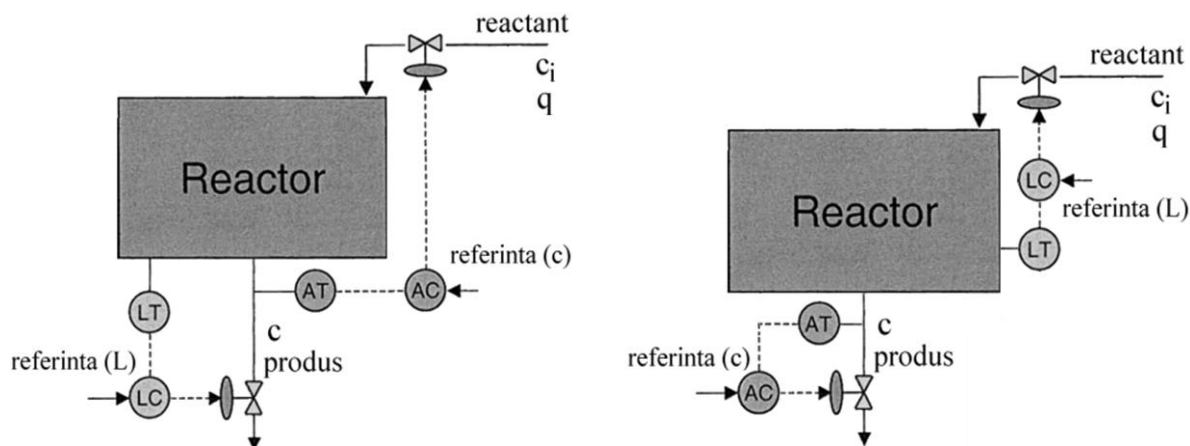


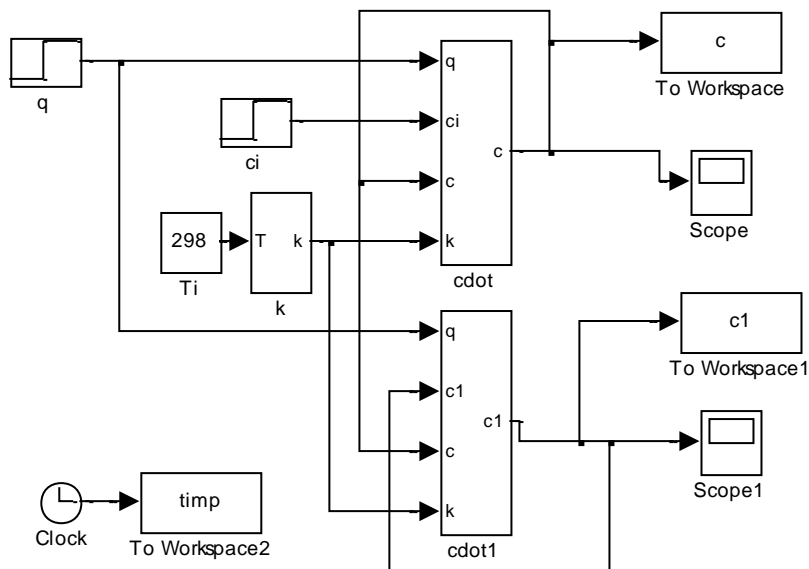
Figura 6.17

În capitolul referitor la modelarea RCCA s-a precizat că se va considera debitul de intrare egal cu debitul de ieșire, fiind implementată o buclă de reglare a nivelului în reactor. Despre controlul nivelului s-a discutat în alt capitol și nu se va mai relua. Pentru reglarea concentrației, mărimea de control sau mărimea manipulată se consideră a fi debitul de reactant. Pentru simularea cu model neliniar se poate folosi modelul Simulink din figura 6.8. Pentru a obține cazul izoterm deconectăm intrarea T a subsistemului k de la ieșirea subsistemului $Tdot$ și o conectăm la o bloc de valoare constantă (blocul $Tdot$ poate fi șters). Ecuația de echilibru masic (4) urmărește doar concentrația reactantului; pentru a urmări și concentrația produsului (c_1), se consideră încă o ecuație de echilibru masic referitoare la produs rezultând:

$$V \frac{dc(t)}{dt} = q(t) \cdot c_i(t) - q(t) \cdot c(t) - V \cdot k \cdot c(t)$$

$$V \frac{dc_1(t)}{dt} = -q(t) \cdot c_1(t) + V \cdot k \cdot c(t)$$

Schema Simulink este prezentată în figura



Valorile parametrilor constructivi, cinetici și ale intrărilor se vor considera cele date în (12) adică:

- $E = 49584$ – energia de activare [kJ/kmol];
- $h = 2.335$ – nivelul amestecului din reactor [m];
- $R = 8.32$ – constanta gazelor ideale [kJ/(kmol)(K)]
- $k_0 = 34930800$ – coeficient de viteza de reacție [1/h]
- $V = S \cdot h = 10$ – volumul amestecului din reactor [m³]
- $c_i^0 = 10$ – concentrația molară a reactantului la intrare [kmol/m³];
- $q^0 = 10$ – debitul de intrare [m³/h];
- $T_i^0 = 25 + 273$ – temperatura reactantului, care va fi și temperatura din reactor [K].

Modelul liniarizat este cel prezentat în figura 3, o funcție de transfer de ordinul întâi cu o constantă de timp:

$$T_{RI} = \tau / (1 + k \tau) \quad (\tau = V/q \text{ reprezintă timpul de staționare})$$

și factor de amplificarea static:

$$K_1 = \frac{c_i^0 - c^0}{q^0 + V \cdot k}$$

În aceste condiții, din:

$$q^0 \cdot c_i^0 - q^0 \cdot c^0 - V \cdot k \cdot c^0 = 0$$

va rezulta o valoare de regim staționar a concentrației în reziduu la ieșire de $c_0 = 9.32$ kmol/m³.

Asta înseamnă un coeficientul de conversie al reactantului în produs (rata de conversie) de:

$$\chi = \frac{c_i^0 - c^0}{c_i^0} = \frac{10 - 9.3276}{10} = 0.0672$$

ceea ce înseamnă o conversie prea mică pentru ca un astfel de proces să fie rentabil. Dacă se mărește volumul reactorului sau se micșorează debitul de reactant de 10 ori, crește valoarea timpului de staționare și se ajunge la o valoare $c_0 = 5.81$ kmol/m³ și $\chi = 0.419$, situație mai convenabilă, pe care o vom considera mai departe în simulări. În figura 6.a? este reprezentat

răspunsul reactorului în buclă deschisă la o treaptă de 10% pe debitul de intrare (q), obținut cu modelul neliniar (linie continuă), respectiv cu modelul liniar (linie întreruptă). Pentru modelul liniar de la q la c a rezultat $K_1 = 0.243$ iar $T_{RI} = 5.81$ h. În figura 6.?.b. este reprezentat răspunsul reactorului la o treaptă de 10% pe concentrația reactantului la intrare (c_i), obținut cu modelul neliniar (linie continuă), respectiv cu modelul liniar (linie întreruptă). Pentru modelul liniar de la c_i la c a rezultat $K_2 = 0.581$ iar $T_{RI} = 5.81$ h. În figura 6.?.b. se observă aceeași dinamică a modelului liniar cu cea a modelului neliniar (linia punctată și cea întreruptă sunt suprapuse). Aceasta se întâmplă deoarece, așa cum se poate vedea din figura 6.3, parametrii modelului liniar (funcția de transfer în acest caz) nu depind de valoarea concentrației reactantului ci numai de debitul de intrare. Treapta de 10% pe concentrația reactantului, sau de orice valoare nu va modifica modelul liniar. În figura 6. este reprezentată evoluția concentrației produsului la ieșirea din reactor în buclă deschisă la o treaptă de 10% pe debitul de intrare (fig 6. .a.) respectiv pe concentrația reactantului la intrare (fig 6. .b.). de reținut că în regim staționar, suma concentrației produsului și a reactantului în reziduu va fi egală cu concentrația reactantului la intrare.

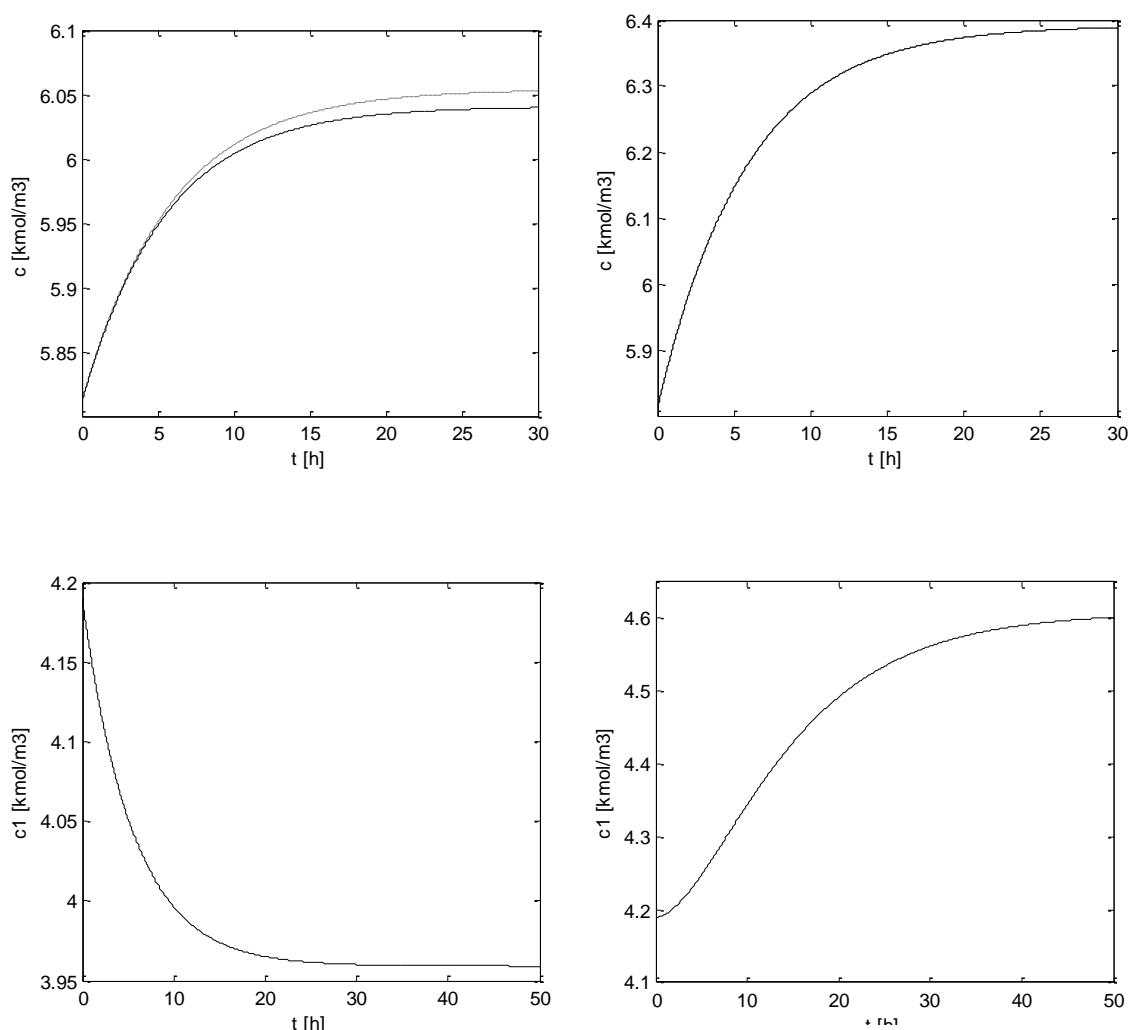


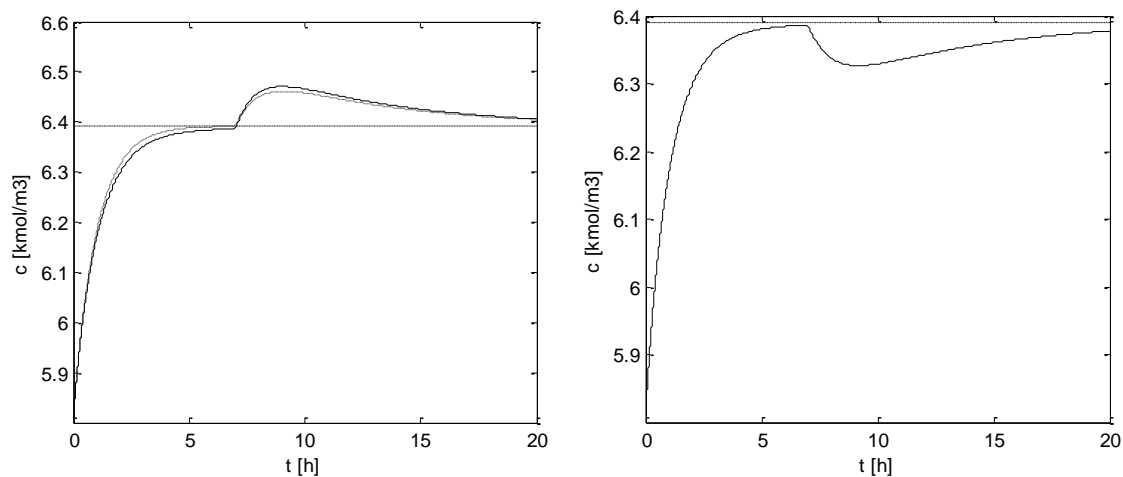
Figura6.

Pentru a analiza comportamentul procesului în buclă închisă vom considera un regulator acordat prin metoda H_0 impus. Dacă se impune un timp de răspuns în buclă închisă astfel încât dinamica sistemului în buclă închisă să fie de aproximativ 6 ori mai rapidă, va rezulta o

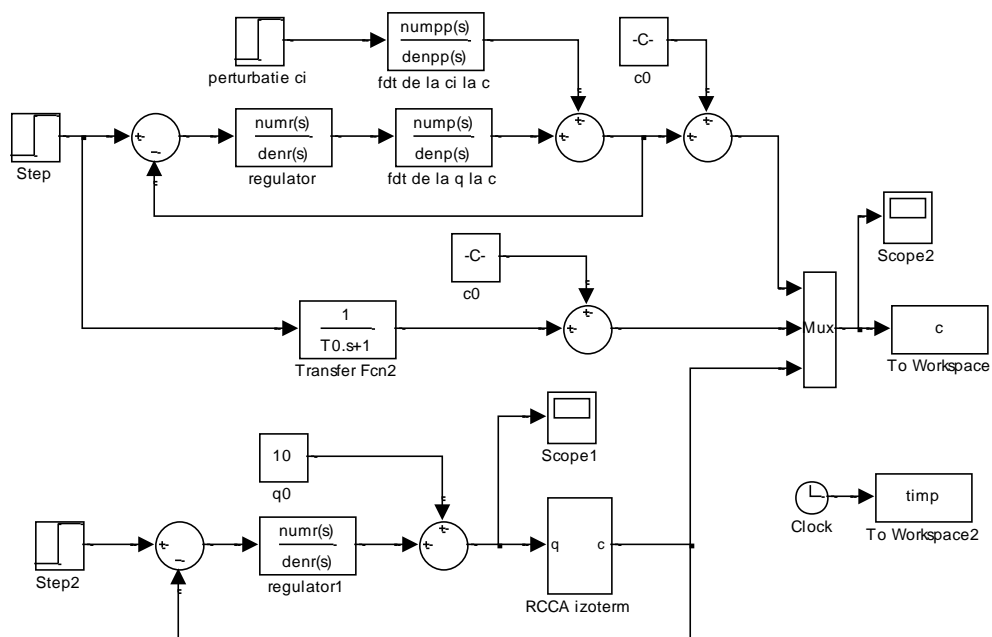
constantă de timp a sistemului în buclă închisă $T_0 = 1h$, iar pentru parametrii de acord ai regulatorului se va obține:

$$k_R = \frac{T_p}{T_0 \cdot k_p} = 23.9, \quad T_i = T_p = 5.81h \quad ()$$

În figura 6.? se prezintă răspunsul sistemului în buclă închisă la o treaptă pe referință de 10% din valoarea de regim staționar a ieșirii, aplicată la $t=0$ și o perturbație de tip treaptă crescătoare de 10% pe concentrația de intrare (c_i) la momentul $t=7h$. Cu linie continuă sunt reprezentate rezultatele obținute utilizând modelul liniar iar cu linie întreruptă modelul neliniar. Se poate observa că atât în buclă închisă cât și în buclă deschisă nu există diferențe semnificative între comportamentul modelului liniar și a celui neliniar pentru modificări de 10% ale mărimilor de intrare. În figura 6.? Este reprezentat răspunsul sistemului în buclă închisă la o treaptă pe referință de 10% din valoarea de regim staționar a ieșirii, aplicată la $t=0$ și o perturbație de tip treaptă crescătoare de 10% pe temperatura reactantului (T_i) la momentul $t=7h$.



Simulările au fost obținute utilizând schema din figura6.?.



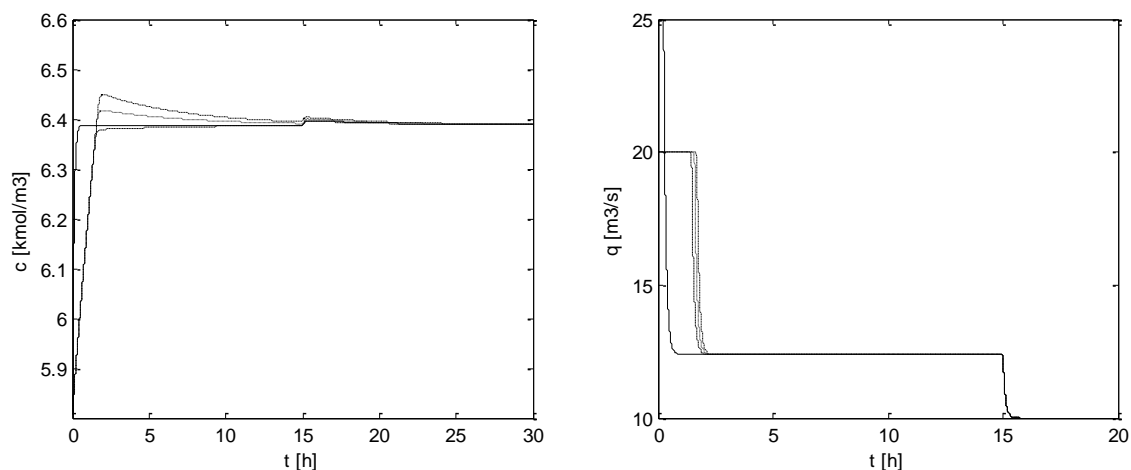
Se reamintește din nou că ieșirea procesului se referă la concentrația reactantului în

reziduu adică reactantul care se elimină din reactor pentru că nu a fost convertit în produs pe timpul de staționare în reactor. Evoluția acestei concentrații este complementară cu evoluția concentrației produsului dată de relația $c_r - c$.

Analizând performanțele sistemului în buclă închisă se constată o rejectare lentă a perturbațiilor. Se poate impune un timp de răspuns mai scurt, dar în acest caz s-ar putea să apară probleme la modificarea referinței, elementul de execuție poate ajunge la saturație deformând răspunsul sistemului în buclă închisă. Pentru a elimina efectul saturației elementului de execuție se pot considera două cazuri: utilizarea unor regulatoare care să aibă implementate tehnici de desaturare sau reabordarea regulatorului având în vedere restricțiile impuse de saturarea elementului de execuție.

Pentru a ilustra prima metodă, s-au utilizat în simulare trei variante de regulatoare PID (figura 6.): varianta de regulator PID continu din biblioteca Simulink Extras/Additional Linear (linie întreruptă și punctată), varianta de PID discret din biblioteca SimPower Systems/Extra Library/Discrete Control Blocks (linie punctată) și o varință dezvoltată pentru a implementa aceeași tehnică de desaturare ca în cazul blocului de regulator PID din Step 7 dezvoltat de Siemens pentru PLC-urile din seria S7 300 (linie întreruptă). Cu linie continuă s-a reprezentat răspunsul ideal, fără limitarea semnalului de comandă. Pentru toate regulatoarele s-au folosit aceiași parametri de acord obținuți din relația () pentru $T_0 = 0.1h$. Limitele fixate pentru debitul de intrare, considerat ca mărime de execuție sunt 0 și 20 m³/h.

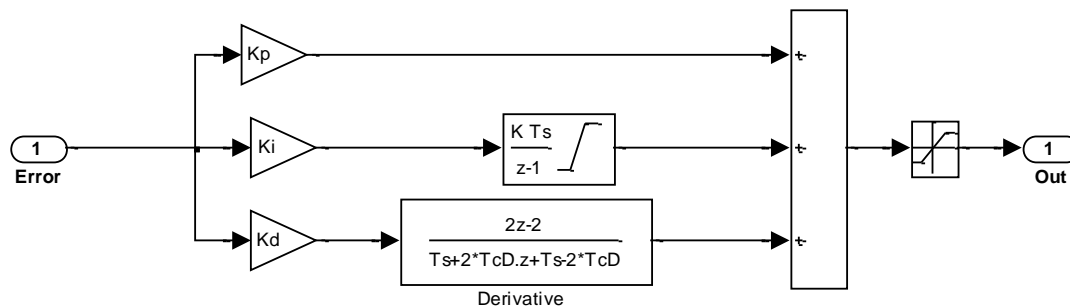
S-a simulat și de această dată răspunsul sistemului în buclă închisă la o treaptă pe referință de 10% din valoarea de regim staționar a ieșirii, aplicată la $t=0$ și o perturbație de tip treaptă crescătoare de 10% pe temperatura reactantului (T_i) la momentul $t=15h$ (ca și în figura 6.).



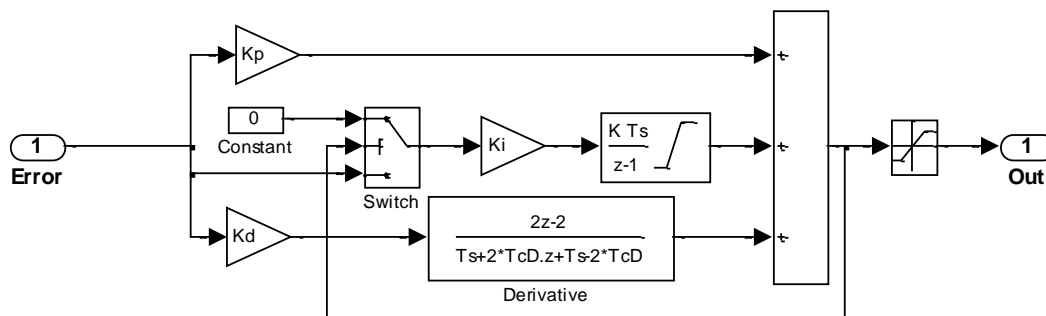
Se poate observa în primul rând o bună rejectare a perturbației, aproape că nu sunt observabile efectele acestora la $t=15h$. La rejectarea perturbației toate cele 3 variante de regulator PID se comportă identic (de fapt identic cu cazul ideal) deoarece așa cum se vede din figura 6.?.b comanda nu depășește nici pe departe limitele acceptate. În ceea ce privește urmărirea referinței varianta a treia de PID se pare că asigură cele mai bune performanțe.

Regulatorul PID continu nu are implementată nici o tehnică de desaturare. Prima varianta de regulator discret este prezentată în figura 6.?. Tehnica de desaturare implementată constă în limitarea ieșirii și a efectului integrator prin utilizarea unor blocuri de saturație, ambele

blocuri având fixate aceleași limite.



A doua variantă de regulator discret fig 6.? a fost dezvoltată pentru a implementa tehnica de desaturare utilizată în blocurile PID din Step 7, adică are în plus blocarea efectului integrator atunci când ieșirea regulatorului depășește limitele de saturație ale elementului de execuție.



Se introduce metoda din Matlab cu optimizare in prezenta restrangerilor (??).

Varianta uzuală de proiectare a RCCA corespunde situației în care se dau condițiile de alimentare a reactorului (debit, temperatură și concentrație de alimentare), informații privind parametrii cinetici ai reacției și coeficientul de conversie dorit. În aceste condiții se vor determina temperatura de lucru și dimensiunile reactorului.

În general, temperatura din reactor este stabilită în moduri diferite care depind foarte mult de considerente de chimie și cinetică. Pentru o reacție simplă, ireversibilă în varianta izotermă, în care singura problemă este de a realiza conversia dorită, s-ar părea că temperatura reactorului ar trebui să fie cât mai ridicată. Acest lucru ar oferi cea mai mare viteză de reacție și prin urmare cea mai mică dimensiune a reactorului, minimizând astfel investițiile de capital. Cu toate acestea, există și considerente legate de controlabilitatea dinamicii reactorului care trebuie luate în considerare în stabilirea valorii temperaturii reactorului în punctul de funcționare. Ar putea deci exista o limită a operabilității în creșterea temperaturii reactorului în scopul de a reduce investițiile de capital. În cazul unei reacții ireversibile și exoterme pot apare probleme majore în controlul temperaturii. Aceste procese nu sunt în mod inherent cu auto-reglare, deoarece o creștere în temperatură crește viteza de reacție, ceea ce va duce din nou la creșterea temperaturii, declanșând ambalarea reactorului. Potențialul pentru ambalarea reactorului este deosebit de ridicat în cazul în care reactorul este exploatat la un nivel scăzut de conversie. În acest caz, cantitatea mare de reactant care nu reacționează poate oferi din abundență "combustibil" pentru ambalarea reactorului.

Pentru a analiza controlabilitatea reactorului în funcție de rata de conversie și temperatura la care operează vom considera cazuri de proiectare diferite. Se va testa rejectarea unor perturbații în debitul de alimentare și/sau referința regulatorului de temperatură, și se va analiza și abaterea maximă a temperaturii din reactor.

Proiectarea reactorului pentru o temperatură mai scăzută va conduce la un reactor de dimensiuni mai mari și implicit cu o suprafață de transfer termic mărită, situație în care reactorul va fi mai ușor controlabil.

O structură simplă a sistemului de control a temperaturii pentru un RCCA exoterm este dată în figura 6.17. În controlul unui reactor neizoterm problema esențială este controlul temperaturii. Temperatura este o variabilă dominantă și trebuie să fie controlată eficient pentru a realiza valorile dorite ale concentrațiilor, coeficienților de conversie și randamentului economic în condiții de funcționare consecventă și în siguranță a reactoarelor chimice. În multe tipuri de reactoare, eficiența controlului se realizează asigurând o suprafață de schimb termic suficient de mare și suficient agent de schimb termic astfel încât perturbațiile dinamice să nu constituie o problemă. Odată ce controlul temperaturii a fost realizat, asigurând o funcționare stabilă, pot fi specificate și alte obiective suplimentare pentru sistemul de control. Aceste pot fi specificații privind proprietățile fizice ale produsului (densitate, vâscozitate, distribuția greutatea moleculare, etc) sau obiective economice (conversie, randament, selectivitate, etc).

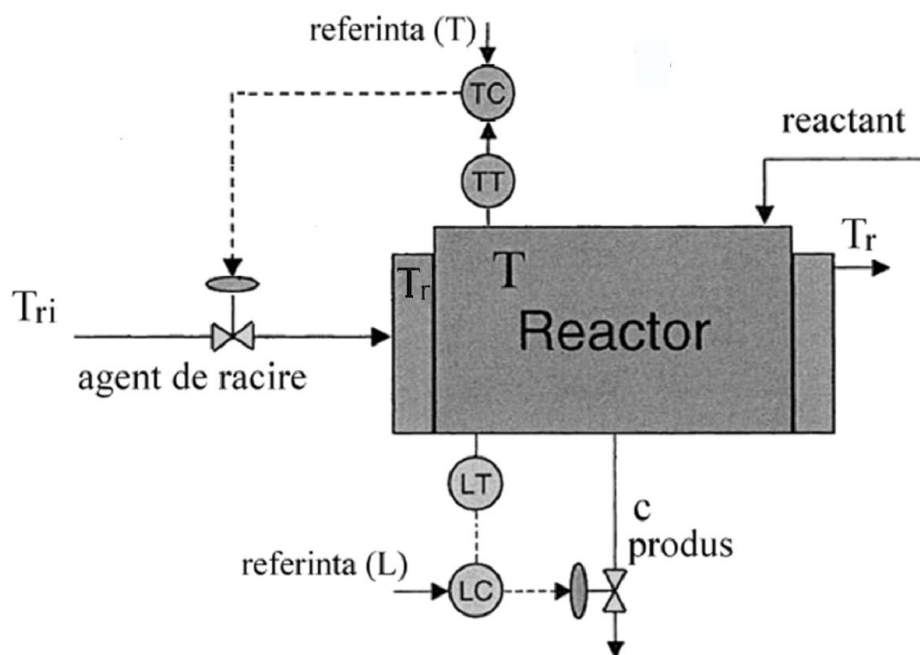


Figura 6.17

În figura 6.17 se poate observa că în bucla de control a temperaturii, mărimea manipulată este debitul agentului de răcire. În modelul neliniar al RCCA, în ecuația de bilanț termic s-a luat în considerare o valoare medie a temperaturii agentului de răcire, pe care am notat-o cu T_r . Pentru a obține modelul dinamic pentru manta, având ca intrare debitul agentului de răcire q_r și ca ieșire temperatura agentului de răcire în manta T_r , se scrie ecuația de bilanț termic:

$$\rho_r V_m c_{pr} \frac{dT_r(t)}{dt} = \rho_r q_r(t) c_{pr} [T_{ri}(t) - T_r(t)] + k_T A [T(t) - T_r(t)] \quad ()$$

unde: $q_r = 10$ - debitul agentului de răcire [m^3/h]

$\rho_r = 1000$ - densitatea medie a agentului de răcire [kg/m^3];

$c_{pr} = 3.8$ - căldura specifică medie a agentului de răcire [kJ/kgK];

$V_m = 3$ - volumul mantalei [m^3];

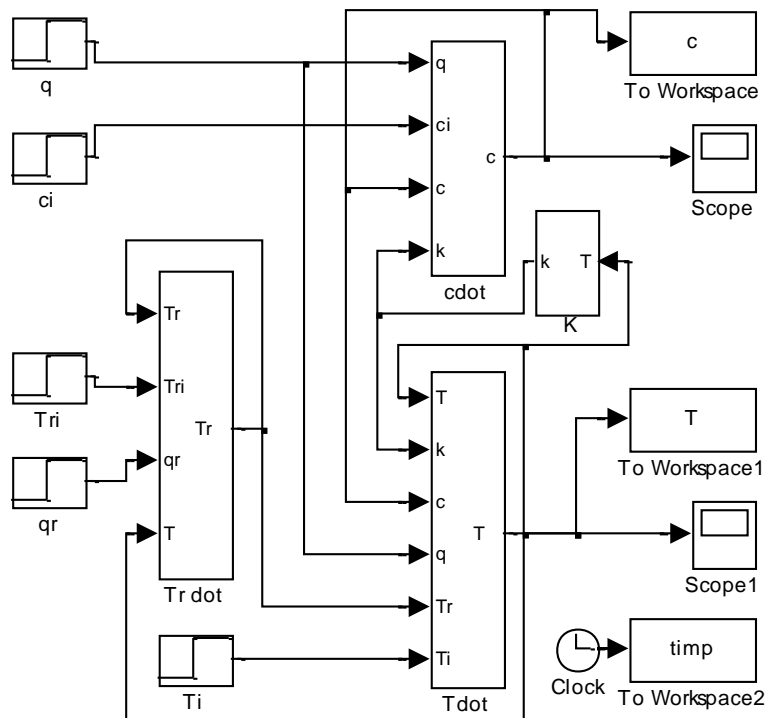
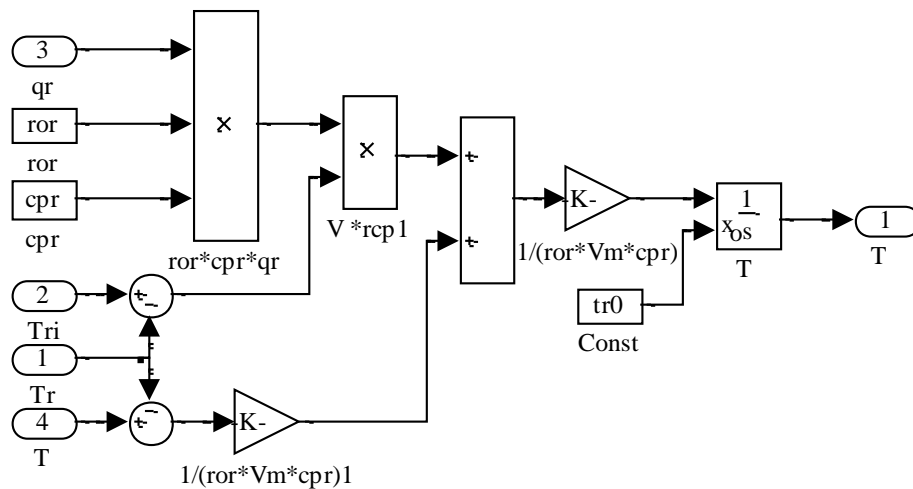
$T_{ri} = 298$ - temperatura agentului de răcire la intrarea în manta [K];

T_r - temperatura agentului de răcire în manta și la ieșirea din manta [K].

Celelalte notații au semnificația cunoscută deja. Modelul neliniar al procesului se poate scrie acum sub forma:

$$\begin{aligned} V \frac{dc(t)}{dt} &= q(t) \cdot c_i(t) - q(t) \cdot c(t) - V \cdot k_0 \cdot e^{-E/RT(t)} \cdot c(t) \\ \rho V c_p \frac{dT(t)}{dt} &= \rho q(t) c_p [T_i(t) - T(t)] + k_T A [T_r(t) - T(t)] + (-\Delta H) V k_0 e^{-E/RT(t)} c(t) \\ \rho_r V_m c_{pr} \frac{dT_r(t)}{dt} &= \rho_r q_r(t) c_{pr} [T_{ri}(t) - T_r(t)] + k_T A [T(t) - T_r(t)] \end{aligned} \quad ()$$

Pentru modelarea procesului s-a realizat subsistemul *Trdot* (figura). Modelul neliniar al procesului incluzând și subsistemele *k*, *cdot* și *Tdot* are acum configurația din figura 6.8



Liniazând relația () se obține:

$$\rho_r V_m c_{pr} \frac{d\Delta T_r}{dt} = \rho_r c_{pr} [\Delta q_r (T_{ri}^0 - T_r^0) + q_r^0 (\Delta T_{ri} - \Delta T_r)] + k_T A [\Delta T - \Delta T_r]$$

Modelul mantalei are trei intrări (T_{ri} , T , q_r) și o ieșire T_r . Funcția de transfer de la Δq_r la ΔT_r este de ordinul întâi având constanta de timp și factorul de amplificarea:

$$T_{pr} = \frac{\rho_r V_m c_{pr}}{\rho_r c_{pr} q_r^0 + k_T A}, \quad k_{pr} = \frac{\rho_r c_{pr} (T_{ri}^0 - T_r^0)}{\rho_r c_{pr} q_r^0 + k_T A} \quad ()$$

Se consideră din nou valorile parametrilor constructivi, cinetici și ale variabilelor de intrare date în (12) :

$V=10 \text{ m}^3$, $A= 21.4 \text{ m}^2$, $V_m = 3 \text{ m}^3$, $E=49584 \text{ kJ/kmol}$, $-\Delta H = 24953 \text{ kJ/kmol}$, $R = 8. \text{ kJ/(kmol)(K)}$, $k_0 = 34930800 \text{ l/h}$, $\rho \cdot c_p = \text{kJ/(m}^3\text{)(K)}$, $k_T = 293 \text{ kJ/(m}^2\text{Kh)}$, $\rho_r = 1000 \text{ kg/m}^3$, $c_{pr} = 3.8 \text{ kJ/kgK}$, $c_i^0 = 10 \text{ kmol/m}^3$, $q^0 = 10 \text{ m}^3/\text{h}$, $T_i^0 = 298 \text{ K}$, $T_{ri}^0 = 298 \text{ K}$, $q_r^0 = 10 \text{ m}^3/\text{h}$.

S-a considerat valoarea temperaturii agentului de răcire dată de (12) ca fiind valoarea temperaturii agentului de răcire la intrarea în manta. Cu aceste valori, din condițiile de regim staționar rezultă: $T_0=332.015$, $c_0= 6.4129$, $T_{r0}=302.82 \text{ K}$. Cu această valoare a concentrației reactantului la ieșire se obține o valoare a coeficientului de conversie de $\chi = 0.358$.

Comportarea în regim de echilibru termic este identică cu cea din figura 6.5.b, doar valorile de regim staționar fiind puțin schimbate întrucât acum temperatura agentului de răcire în manta este cu 4.82 K mai mare. Creșterea lui T_r duce la translatarea drepte Q_e spre dreapta însă datorită formei curbei Q_p , punctul P_1 se deplasează în jos conducând în mod surprinzător la o scădere a temperaturii în reactor (ar fi fost de așteptat ca o creștere a temperaturii agentului de răcire să ducă la o creștere a temperaturii în reactor).

Pentru dezvoltarea sistemelor de control vom determina funcțiile de reansfer pentru cele două ieșiri, utilizând modelul obținut prin liniarizare și programul rcca_l.m. rezultatele obținute sunt prezentate în tabelul ??

Intrare/ieșire	c	T
q	$H_{qc} = \frac{0.3585s + 0.2965}{s^2 + 0.5476s - 0.2849}$	$H_{qT} = \frac{-3.4s - 2.9113}{s^2 + 0.5476s - 0.2849}$
ci	$H_{ci} = \frac{s - 1.0113}{s^2 + 0.5476s - 0.2849}$	$H_{ciT} = \frac{-4.4e-16s + 6.6634}{s^2 + 0.5476s - 0.2849}$
Ti	$H_{Tic} = \frac{-0.1938}{s^2 + 0.5476s - 0.2849}$	$H_{TiT} = \frac{s + 1.5589}{s^2 + 0.5476s - 0.2849}$
Tr	$H_{Trc} = \frac{-0.0581}{s^2 + 0.5476s - 0.2849}$	$H_{TrT} = \frac{0.2998s + 0.4673}{s^2 + 0.5476s - 0.2849}$

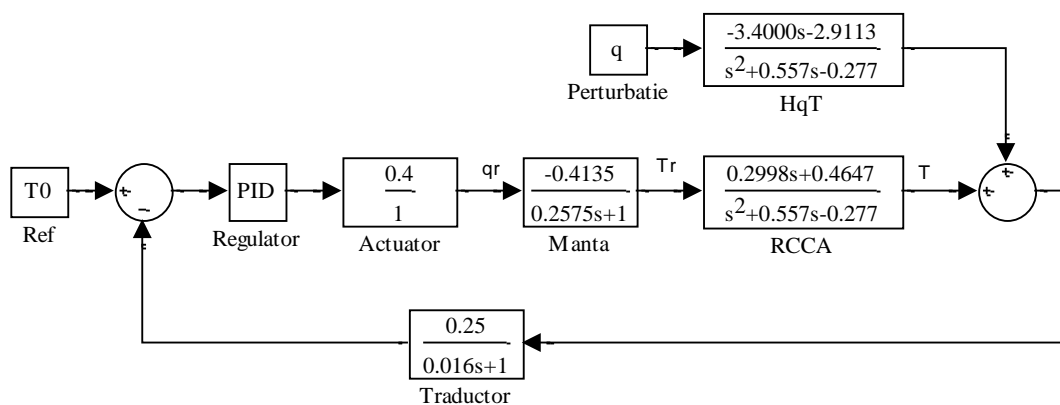
Din (), se calculează funcția de transfer a mantalei reactorului

$$H_{qrTr} = \frac{-0.4135}{0.2575s + 1}$$

Schema bloc pentru bucla de control a temperaturii în reactor pentru cazul modelului liniar este prezentată în figura. S-a considerat o constantă de timp a traductorului de

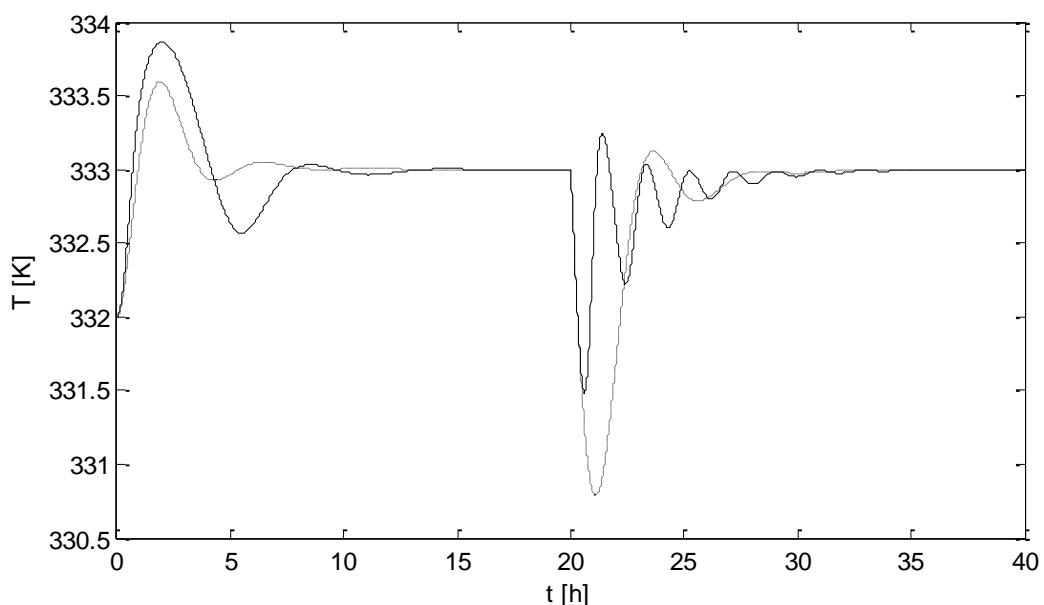
temperatură de cca 1 minut și s-a neglijat constanta de timp a actuatorului (servorobinet cu acționare pneumatică). Semnalul dat de traductor cat și cel dat de regulator s-a considerat între 0 și 100, exprimat în procente. Important este să fie același tip de semnal, gama semnalului se va simplifica în calculul amplificării funcției de transfer a părții fixate (la traductor apare la numărător iar la actuator la numitor). S-a considerat valoarea maximă a debitului agentului de răcire o valoare de patru ori mai mare decât valoarea în punctul de funcționare considerat ($q_{\max}=40 \text{ m}^3/\text{h}$). Acordarea regulatorului s-a realizat utilizând metoda de optimizare implementată în Simulink /Simulink Response Optimization /Demos/PID tuning with actuator constraints. Procesul fiind instabil, pentru a obține o comportare stabilă în buclă închisă se consideră pentru început intervalul de optimizare mare (100h) iar apoi inițializând parametrii de acord cu valorile determinate, pentru a obține performanțele dorite se fixează intervalul de optimizare egal cu timpul de răspuns în buclă închisă.

Parametrii determinați au valorile $kr=110$, $T_i=3.1429\text{h}$, $T_d=0.0364\text{h}$.

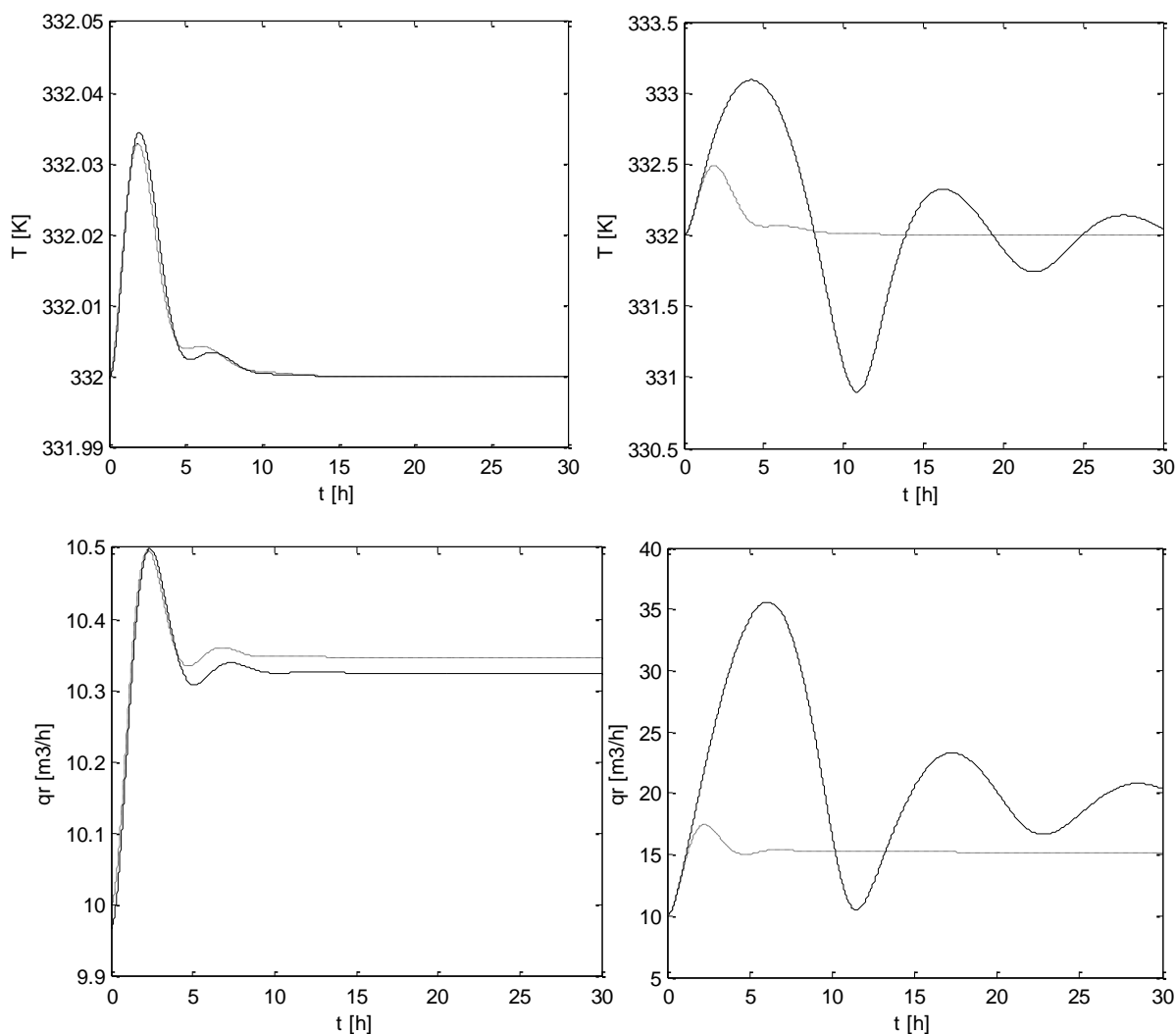


Figura

În figura 6.7 se prezintă răspunsul sistemului în buclă închisă la o treaptă pe referința de temperatură de +1K față de valoarea de regim staționar a ieșirii, aplicată la $t=0$ și o perturbare de tip treaptă crescătoare de 10% pe debitul de reactant la intrare (q) la momentul $t=20\text{h}$. Cu linie continuă sunt reprezentate rezultatele obținute utilizând modelul neliniar iar cu linie întreruptă modelul liniar prezentat în figura. Se poate observa că nu există diferențe semnificative între comportamentul modelului liniar și a celui neliniar pentru aceste modificări.



În figura 6.7 se prezintă răspunsul sistemului în buclă închisă la perturbație de tip treaptă crescătoare pe concentrația reactantului la intrare (c_i) la momentul $t=0$. Cu linie continuă sunt reprezentate rezultatele obținute utilizând modelul neliniar iar cu linie întreruptă modelul liniar. În graficul din partea stângă amplitudinea perturbației este de numai 0.1%, modelul liniar are o comportare aproape identică cu a modelului neliniar. În graficul din dreapta amplitudinea perturbației este de 1.5%, se poate observa că apar diferențe semnificative între comportarea modelului liniar și a celui neliniar. La perturbații mai mari de 2% modelul neliniar nu mai este controlabil. Încercând să obținem un regulator mai robust se poate ajunge să se asigure controlabilitatea procesului pentru perturbații de cca 3%.



Deși regulatorul PID obținut se comporta bine pe modelul liniar, pe modelul neliniar nu poate asigura stabilitatea în buclă închisă decât pentru perturbații care nu modifică sensibil punctul de funcționare. Problema va fi reluată la studiile de master când se va încerca utilizarea unor algoritmi avansați de control automat pentru o rezolvare corespunzătoare a acestei probleme.

În figura sunt prezentate graficele ce prezintă evoluția marimii manipulate, debitul de agent de răcire (q_r), pentru cele două situații prezentate în figura . Se poate observa o slabă controlabilitate a sistemului, adică pentru a compensa o perturbație de 1.5% pe concentrația de

intrare a reactantului marimea manipulată epuizează în regim tranzitoriu aproape întreg domeniul de variație (asa cum s-a precizat $q_{\max}=40 \text{ m}^3/\text{h}$).

Un parametru foarte important pentru comportarea RCCA este denumit indicele de stabilitate a reactorului (ISR). Acesta se definește ca raportul a două diferențe de temperatură: diferența dintre temperatura reactorului și temperatura agentului de răcire în manta raportată la diferența de temperatură între temperatura reactorului și temperatura agentului derăcire la intrare:

$$ISR = \frac{\Delta T_{\text{proiectat}}}{\Delta T_{\text{maxim}}} = \frac{T - T_r}{T - T_{ri}}$$

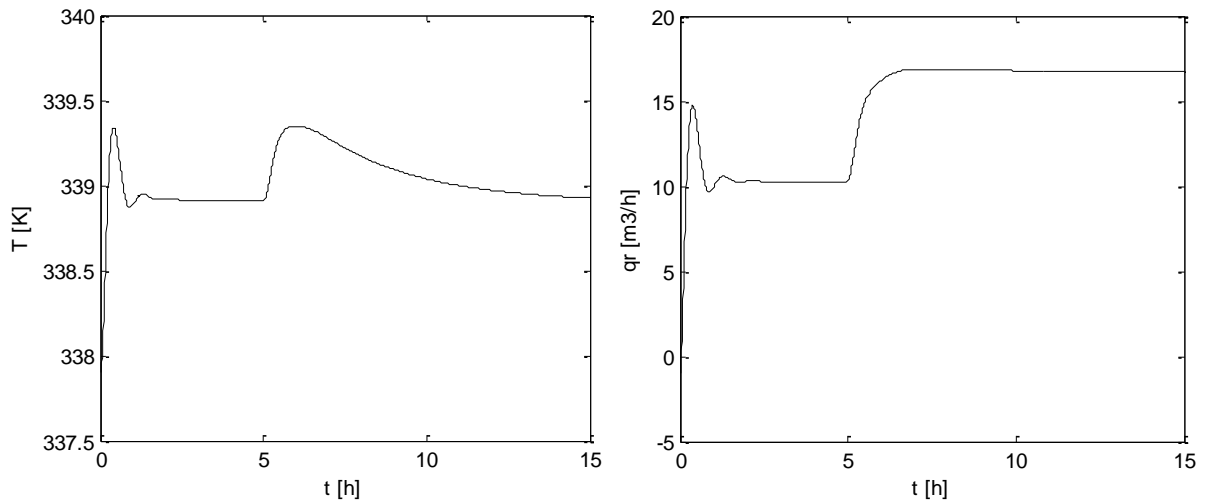
Calculând valoarea ISR pentru cazul considerat acum rezultă $ISR=(332.015-302.82)/(332.015-298)=0.858$, valoare considerată a fi prea mare. Asta înseamnă că există puțină rezervă în variația temperaturii agentului de răcire față de temperatura amestecului din reactor pentru a face față acțiunii unor factori perturbatori. În aceste condiții este de așteptat ca performanțele obținute în controlul temperaturii să fie nesatisfăcătoare. Creșterea suprafeței de transfer termic a agentului de răcire sau a coeficientului de transfer termic duce la micșorarea ISR. De regulă, pentru o anumită variantă constructivă, creșterea temperaturii în reactor sau creșterea coeficientului de conversie duc la o creștere a IRS și o înrăutățire a performanțelor de control. O valoare a IRS în jur de 0.5-0.6 se consideră a fi acceptabilă.

Pentru a obține o valoare mai scăzută a indicelui de stabilitate a reactorului vom considera o valoare de 4 ori mai mare a produsului dintre suprafața de transfer termic a agentului de răcire și coeficientul de transfer termic. Suprafața de transfer termic este reprezentată de suprafața laterală plus suprafața bazei reactorului de formă cilindrică. Până acum s-a considerat înălțimea reactorului egală cu diametrul. Creșterea suprafeței de transfer termic, păstrând aceeași valoare pentru volum, se poate obține modificând aspectul reactorului, adică raportul dintre diametru și înălțime. Modificarea valorii coeficientului de transfer termic se poate realiza prin utilizarea unor materiale mai bune conducătoare de căldură pentru pereții reactorului.

Pentru a rămâne în situația prezentată în figura 6.5.b se va considera o valoare a concentrației de intrare a reactantului de 1.33 ori mai mare ($c_i^0=1.33 \cdot 10 \text{ kmol/m}^3$). Va rezulta $ISR=0.6$. Pentru modelul liniarizat se obține:

$$H_{TrT} = \frac{0.2998s + 0.4673}{s^2 + 0.5476s - 0.2849} \quad H_{qrTr} = \frac{-0.6023}{0.1807s + 1}$$

Păstrăm regulatorul determinat pentru cazul precedent ($kr=110$, $T_i=3.1429\text{h}$, $T_d=0.0364\text{h}$), deși acum modelul liniarizat are un factor de amplificare mai mare. Regulatorul va fi mai agresiv așa cum se poate observa din fig . În această figură este prezentat răspunsul sistemului în buclă închisă, folosind modelul neliniar, la o modificare treaptă de 1K pe referință la $t=0$ și la o treaptă de 10 % pe concentrația de intrare a reactantului (c_i). Se poate observa o controlabilitate a procesului mult îmbunătățită ($ISR=0.6$) față de cazul precedent ($ISR=0.85$) când controlabilitatea era asigurată doar pentru perturbații de maxim 3% pe c_i . O



îmbunătățire a controlabilității procesului se poate observa și din evoluția semnalului de comandă (q_r) prezentat în figura b.

Se va considera în continuare cazul prezentat în figura 6.5.a, adică punctul de funcționare a reactorului este unul stabil. Valorile parametrilor constructivi, cinetici și ale variabilelor de intrare date în (13) :

$V=10 \text{ m}^3$, $A= 21.4 \text{ m}^2$, $V_m = 3 \text{ m}^3$, $E = 49584 \text{ kJ/kmol}$, $-\Delta H = 24953 \text{ kJ/kmol}$, $R = 8. \text{ kJ/(kmol)(K)}$, $k_0 = 34930800 \text{ 1/h}$, $\rho \cdot c_p = \text{kJ/(m}^3\text{)(K)}$, $k_T = 293 \text{ kJ/(m}^2\text{Kh)}$, $\rho_r = 1000 \text{ kg/m}^3$, $c_{pr} = 3.8 \text{ kJ/kgK}$, $c_i^0 = 10 \text{ kmol/m}^3$, $q^0 = 10/4 \text{ m}^3/\text{h}$, $T_i^0 = 298 \text{ K}$, $T_r^0 = 283 \text{ K}$, $q_r^0 = 10 \text{ m}^3/\text{h}$. Din condițiile de regim staționar rezultă: $T_0=328.5.015$, $c_0= 3.513$, $T_r=289.44 \text{ K}$. În aceste condiții coeficientul de conversie are valoarea de $\chi = 0.648$ iar $\text{ISR}=0.85$ ceea ce indică o slabă controlabilitate.

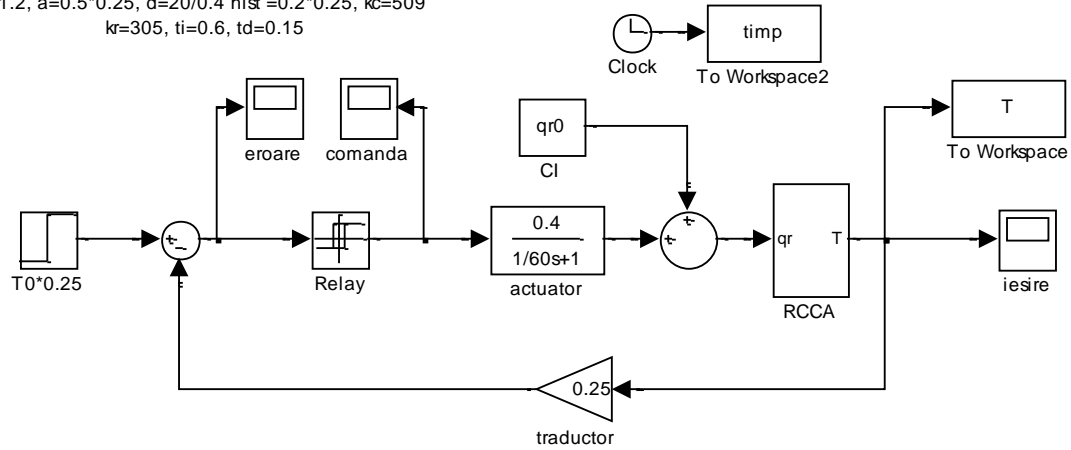
Pentru modelul liniarizat se obține:

$$H_{TrT} = \frac{0.2998s + 0.2133}{s^2 + 0.1936s + 0.1243} \quad H_{qrTr} = \frac{-0.8583}{0.2575s + 1} ,$$

la care se adaugă funcția de transfer a traductorului de temperatură și a elementului de execuție.

În cazul precedent, când comportarea procesului în buclă deschisă era instabilă, a fost necesară utilizarea modelului procesului pentru acordarea regulatorului. În cazul unei funcționări stabile, acordarea regulatorului se poate realiza pe baza unor date experimentale, fără o cunoaștere exactă a modelului procesului. Datele experimentale pot reprezenta răspunsul procesului la o intrare de tip treaptă sau rezultatele unui experiment care aduce procesul la limita de stabilitate, asigurând pe ieșirea procesului oscilații întreținute. Un astfel de experiment este experimentul de tip rețea în care procesul este controlat pe intrarea de comandă prin intermediul unui element de tip rețea bipozițional fig.

$t_c=1.2$, $a=0.5 \cdot 0.25$, $d=20/0.4$ hist $=0.2 \cdot 0.25$, $k_c=509$
 $k_r=305$, $t_i=0.6$, $t_d=0.15$

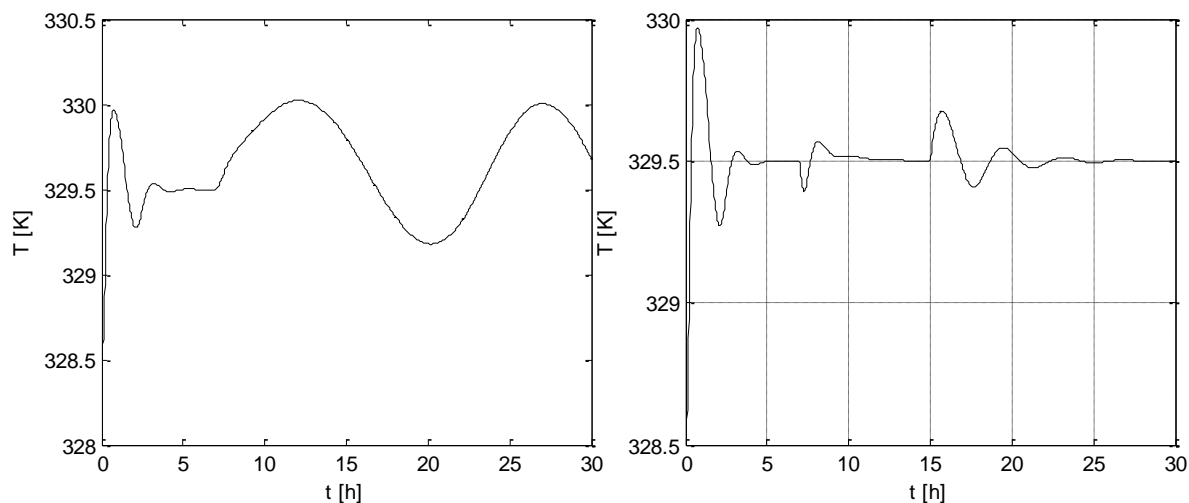


Deoarece blocul Simulink de tip funcție de transfer în s nu acceptă condiții inițiale nenule, nu poate fi utilizat pentru simularea traductorului deoarece la startarea simulării ieșirea lui pleacă din 0 și nu de la valoarea $T_0 \cdot 0.25$. Din această cauză, numitorul funcției de tranfer a traductorului de temperatură a fost inclus în funcția de transfer a elementului de execuție, aceasta nu influențează comportamentul sistemului în buclă închisă.

Presupunând o precizie a traductorului de temperatură de $0.1K$, s-au considerat pragurile de basculare ale releului de $+0.1 \cdot 0.25$ respectiv $-0.1 \cdot 0.25$. Amplitudinea comenzii data de releu a fost fixată la $d=20/0.4$ (adică ieșirea releului între $-10/0.4$ și $10/0.4$) ceea ce va duce la valori ale debitului de agent de răcire de 0 și respectiv $20 \text{ m}^3/h$, simetrice față de valoarea de regim staționar $q_r^0 = 10 \text{ m}^3/h$. A rezultat la ieșirea procesului o oscilație de amplitudine $0.5K$ (la ieșirea traductorului o amplitudine $a=0.47 \cdot 0.25$) și o perioadă de oscilație $t_c=1.2h$ (figura). Valoarea factorului de amplificarea critic se poate calcula cu relația $k_c=4d/(\pi a)=542$. Pentru acordarea regulatorului se folosesc formulele Ziegler Nichols:

$$k_r = 0.6 \cdot k_c = 325, \quad T_i = 0.5 \cdot t_c = 0.6h, \quad T_d = 0.25 \cdot T_i = 0.15h$$

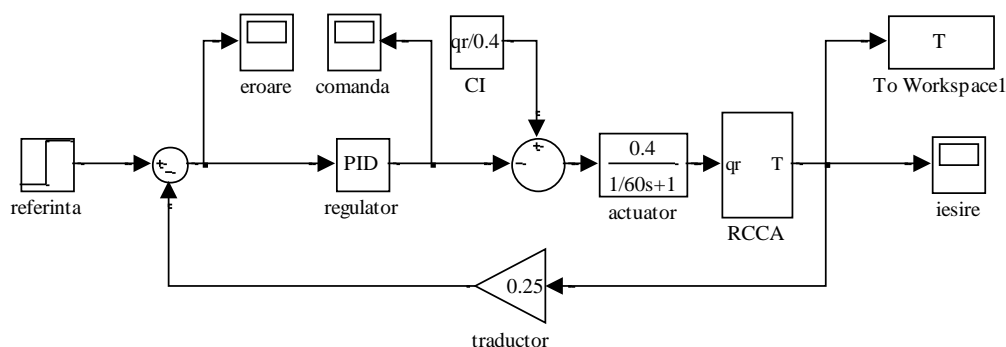
Cu regulatorul astfel acordat se obține graficul din figura . La $t=0$ sa aplicat o treapta de 1K pe referință, la $t=7h$ o perturbăție treaptă de 10% pe intrarea q iar la $t=15h$ o perturbăție treaptă de 2 K pe intrarea T_i . Pentru o perturbăție de 10% pe intrarea c_i , aplicată la $t=7h$,



procesul este greu contolabil (figura .a)

Pentru a obține o valoare mai scăzută a indicelui de stabilitate a reactorului ($ISR=0.6$) vom considera o valoare de 4 ori mai mare a produsului dintre suprafața de transfer termic a agentului de răcire și coeficientul de transfer termic. Din pacate valoarea coeficientului de conversie este de $\chi = 0.16$. Pentru a crește valoarea coeficientului de conversie vom considera o valoare mai mare a temperaturii agentului de răcire, $T_{ri}^0 = 313$ K. Se obține în acest caz un coeficient de conversie $\chi = 0.66$. Controlabilitatea procesului este mult îmbunătățită așa cum se poate observa din fig .b.

Simulările pentru comportarea în buclă închisă au fost obținute folosind schema din fig



Pentru ultima variantă de reactor folosit mai sus

O structură avansată a sistemului de control pentru un RCCA exoterm este dată în figura 6.17.

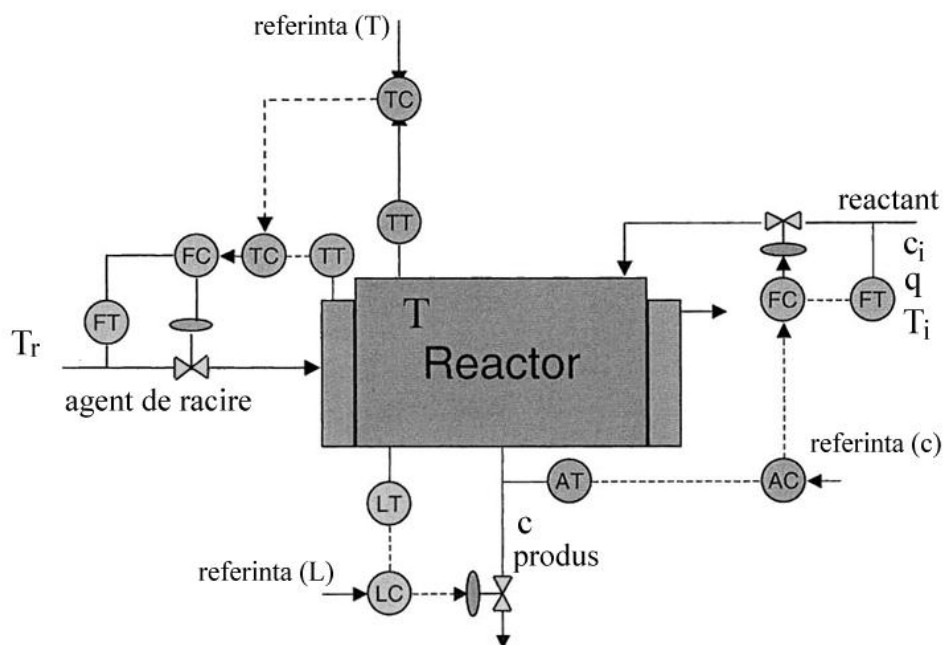


Figura 6.17

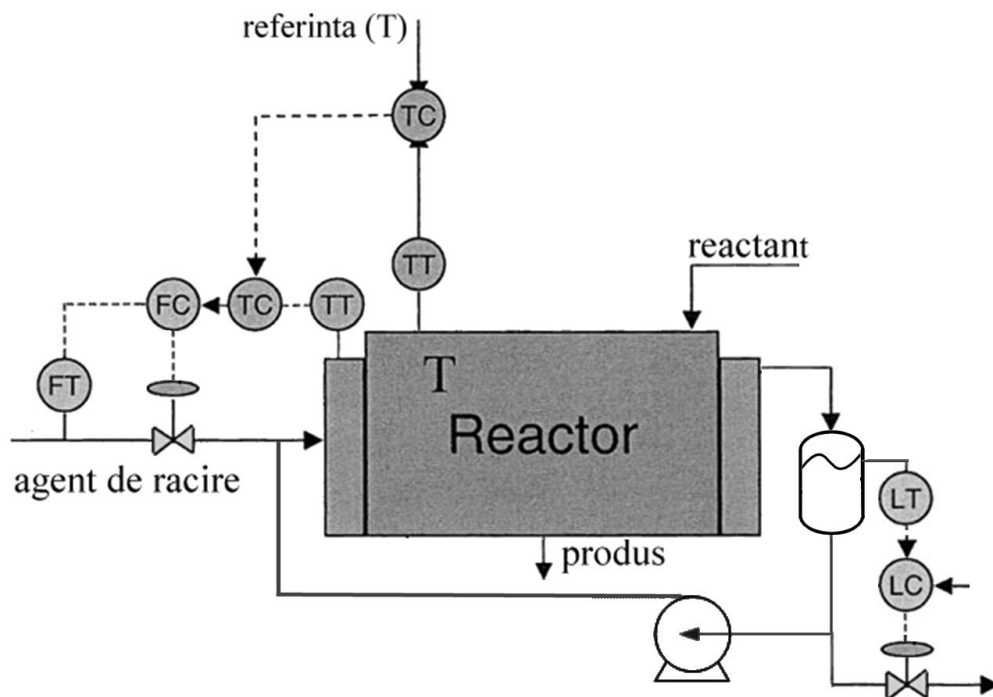
Se consideră din nou ultima variantă de reactor folosit mai sus: $V=10 \text{ m}^3$, $A= 42.8 \text{ m}^2$, $V_m = 3 \text{ m}^3$, $E = 49584 \text{ kJ/kmol}$, $-\Delta H = 24953 \text{ kJ/kmol}$, $R = 8. \text{ kJ/(kmol)(K)}$, $k_0 = 34930800 \text{ 1/h}$, $\rho \cdot c_p = \text{kJ/(m}^3\text{)(K)}$, $k_T = 586 \text{ kJ/(m}^2\text{Kh)}$, $\rho_r = 1000 \text{ kg/m}^3$, $c_{pr} = 3.8 \text{ kJ/kgK}$, $c_i^0 = 10 \text{ kmol/m}^3$, $q^0 = 10/4 \text{ m}^3/\text{h}$, $T_i^0 = 298 \text{ K}$, $T_{ri}^0 = 313 \text{ K}$, $q_r^0 = 10 \text{ m}^3/\text{h}$. Din condițiile de regim staționar rezultă: $T_0=329.3$, $c_0= 3.413$, $T_r=319.484 \text{ K}$. În aceste condiții coeficientul de conversie are vafi de $\chi = 0.66$ iar $\text{ISR}=0.6$ ceea ce indică o bună controlabilitate.

Pentru modelul liniarizat se obține:

$$H_{TrT} = \frac{1.1990s + 0.8782}{s^2 + 1.1025s + 0.7915} \quad H_{qrTr} = \frac{-0.6023}{0.1807s + 1} ,$$

Pentru regulatorul din bcla interna se obține cu metoda H_0 impuls $K_r=-7.5$ și $T_i = -0.18 \text{ h}$

pentru T_0 impuls de 0.04 h , adică $H_{10} = \frac{H_{PID1} H_{qrTr}}{1 - H_{PID1} H_{qrTr}} = \frac{1}{0.04s + 1} .$



Pentru implementarea unui sistem de reglare automată se va considera că mărimea reglată este concentrația c , variabila de control este temperatura agentului de răcire T_r , iar debitul de intrare q este considerat perturbație. Schema SIMULINK corespunzătoare modelului liniarizat este prezentă în figura 6.10.

O posibilitate de a acorda regulatorul constă în realizarea unui experiment cu un regulator de tip releu. Pentru aceasta se va folosi schema bloc prezentată în figura 6.9.

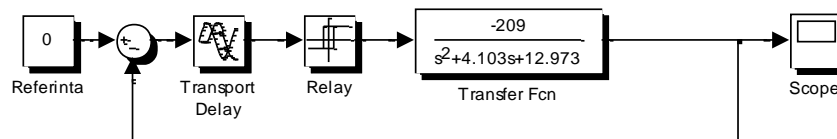


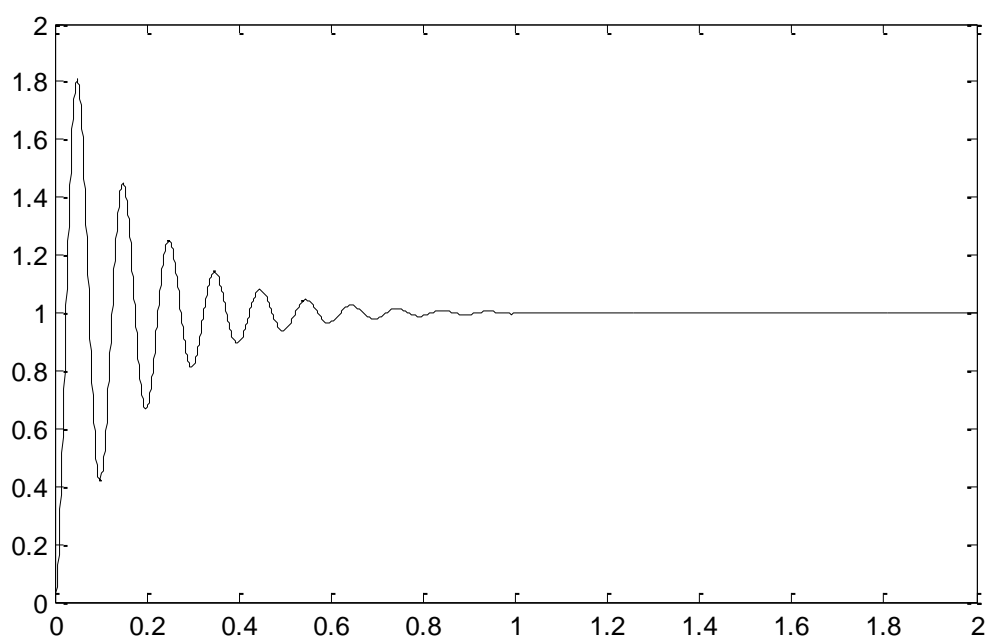
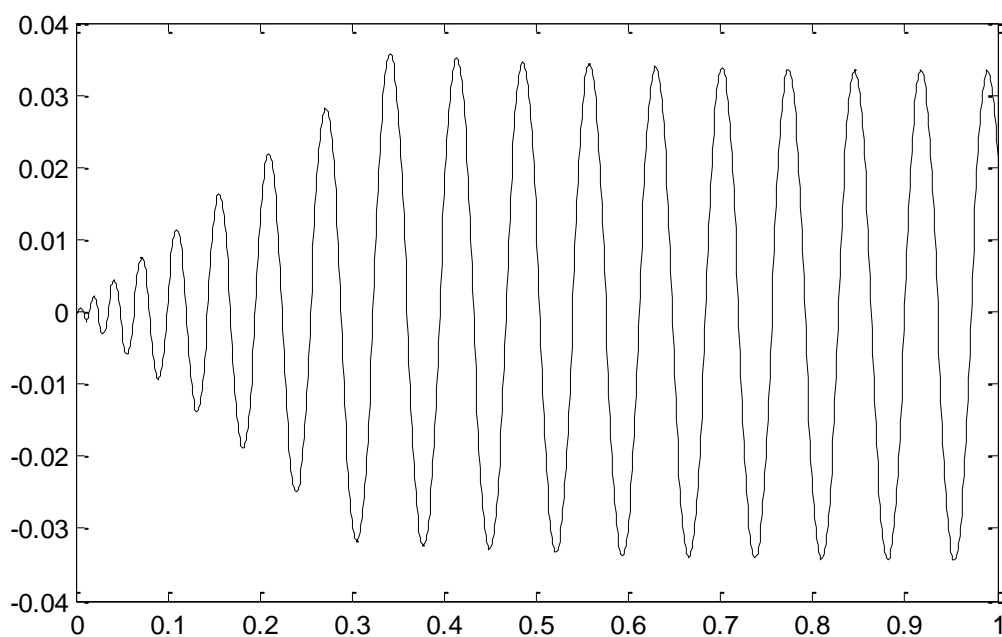
Figura 6.9

Pentru metoda Ziegler-Nichols, nu se introduce timp mort suplimentar ($T_m=0$). Teoretic metoda nu se poate aplica, procesul fiind doar de ordinul 2, sistemul nu va oscila. Datorită constantei de integrare finite introdusă în meniul pentru parametrării simulării, sistemul va oscila totuși. Oscilațiile sunt însă mici și depind puternic de valoarea constantei de integrare, iar performanțele obținute vor fi modeste. Amplitudinea releului va fi $d=1$, iar histereza releului $2*eps$. Din reprezentarea grafică a ieșirii sistemului se determină amplitudinea oscilațiilor a și perioada de oscilație T_c . Cu relația $K_c = 4d/\pi a$ se determină valoarea câștigului critic, iar din tabelul 6.1 se determină parametrării regulatorului PID.

Tabelul 6.1.

Regulator	K_R	T_i	T_d
P	$0.5 K_c$		
PI	$0.4 K_c$	$0.8 T_c$	
PID	$0.6 K_c$	$0.5 T_c$	$0.12 T_c$

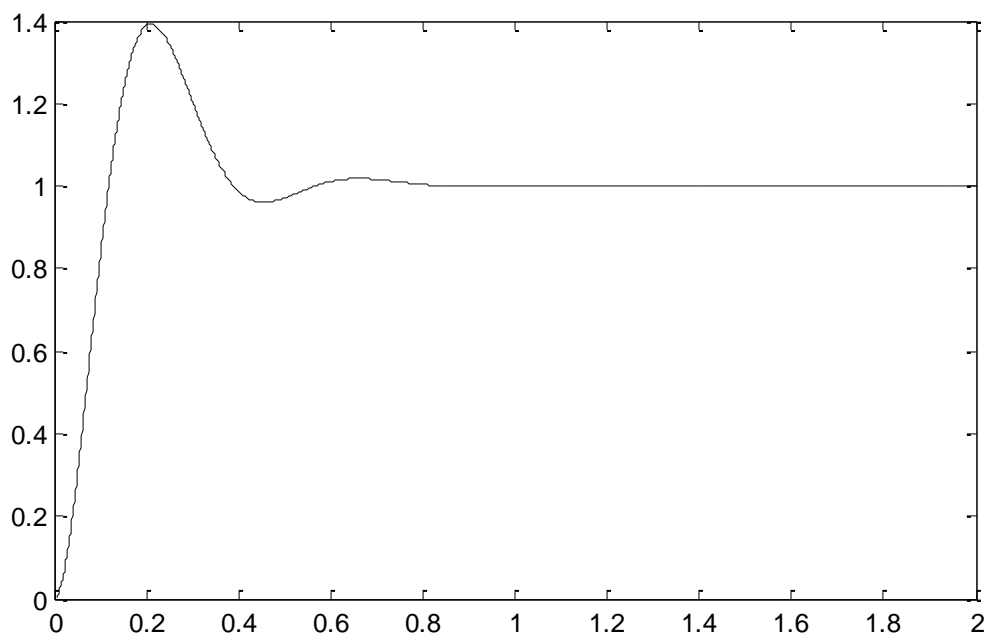
Rezultatele experimentului cu comandă de tip releu sunt prezentate în figura iar comportarea sistemului în buclă închisă în figura.



Rezultate mai bune se pot obține prin introducerea unui timp mort suplimentar. Se explică aici numai modul de utilizare a metodei. Prin încercări succesive se crește valoarea T_m din blocul *Transport Delay* până se obține o valoare $\varphi=360T_m/T_c=10$. Se determină și de această dată T_c și K_c , după care se calculează parametrii regulatorului conform tabelului

<i>Regulator</i>	K_R	T_i	T_d
PID	$0.8 K_c$	$0.64 T_c$	$0.16 T_c$

Rezultatele privind comportarea sistemului în buclă închisă, utilizând regulatorul acordat prin această metodă sunt prezentate în figura.



Pentru ambele regulatoare calculate aici se poate analiza răspunsul la o treaptă pe referință sau perturbație, utilizând modelul liniarizat (fig. 6.10). Se consideră mărimea manipulată temperatura agentului de răcire T_r iar perturbație debitul de intrare q . Parametrii funcției de transfer de la intrarea T_r la ieșirea c sunt dați de relația (12), iar de la intrarea q la ieșirea c se determină din (11).

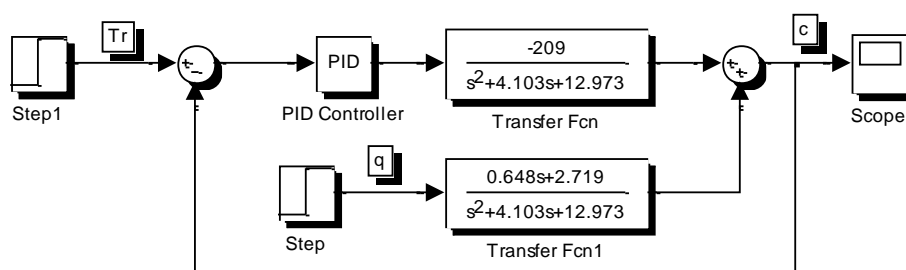
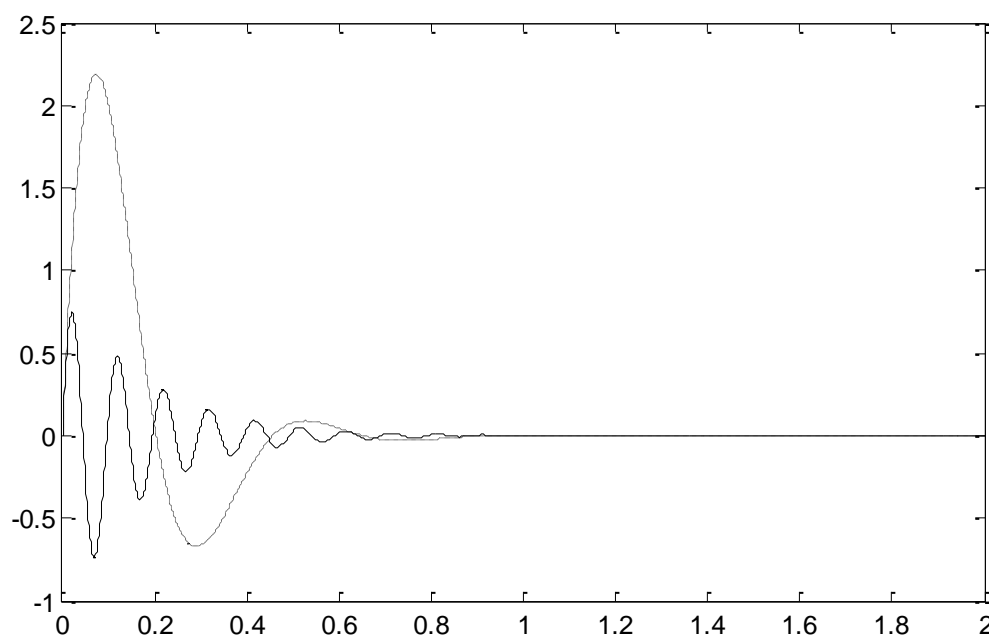


Figura 6.10

Răspunsul sistemului în buclă închisă la o perturbație de 10% pe intrarea q utilizând regulatorul acordat cu metoda Ziegler-Nichols (linie continuă) și regulatorul acordat cu cea de a doua metodă prezentată mai sus (linie întreruptă) sunt prezentate în figura. Se poate observa cam aceeași valoare a timpului de răspuns, suprareglaj mai mic pentru metoda Ziegler-Nichols dar comportament mai oscilant, ceea ce poate duce la solicitarea mai intensă a elementelor de execuție.



Situația prezentată în figura 6.10 este o situație ipotetică, folosită aici doar pentru a exemplifica cele două posibilități de acordare a regulatorului. O altă posibilitate pentru controlul concentrației (ieșirea c) este acționând asupra debitului de intrare a reactantului q , iar celelalte trei intrări (c_i , T_i și T_r) se vor considera ca fiind perturbatii. Se recomandă acordarea regulatorului pentru funcția de transfer de la intrarea q la ieșirea c , și considerând ca mărime de control debitul q să se analizeze răspunsul la diferite perturbatii aplicate pe intrările c_i , T_i și T_r .

În ceea ce privește sistemul de răcire, în practică variabila de control pentru bucla de reglare a temperaturii în reactor este debitul de agent de răcire. Neglijând pierderile de căldură prin pereții exteriori, în regim termic staționar căldura cedată de amestecul din reactor este preluată de agentul de răcire:

$$k_T A [T^0 - T_r^0] = q_r^0 \rho_r c_r \Delta T_r^0 \quad (13)$$

ρ_r – densitatea medie a agentului de răcire [kg/m^3];

c_r – căldura sa specifică medie [J/kgK];

ΔT_r – diferența dintre temperatura agentului de răcire la ieșirea din mantaua de răcire a reactorului și cea de la intrare.

Spre exemplu, considerând apa ca agent de răcire ($\rho_r = 1000 \text{ kg/m}^3$, $c_r = 4186 \text{ J/kgK}$), în punctul de funcționare P_1 figura 6.3.a (pentru care $T^0 = 371.6$ iar $T_r^0 = 92 + 273 = 365$) se poate determina din relația (13) valoarea $\Delta T_r^0 = 2.1 \text{ K}$ la un debit al agentului de răcire q_r de 4 litri/secundă (240 litri/min). Cu aceste valori se poate înlocui termenul $k_T A [T(t) - T_r(t)]$ cu $q_r(t) \rho_r c_r \Delta T$ în modelul (6) și se lucrează cu q_r ca variabilă de intrare în loc de T_r .

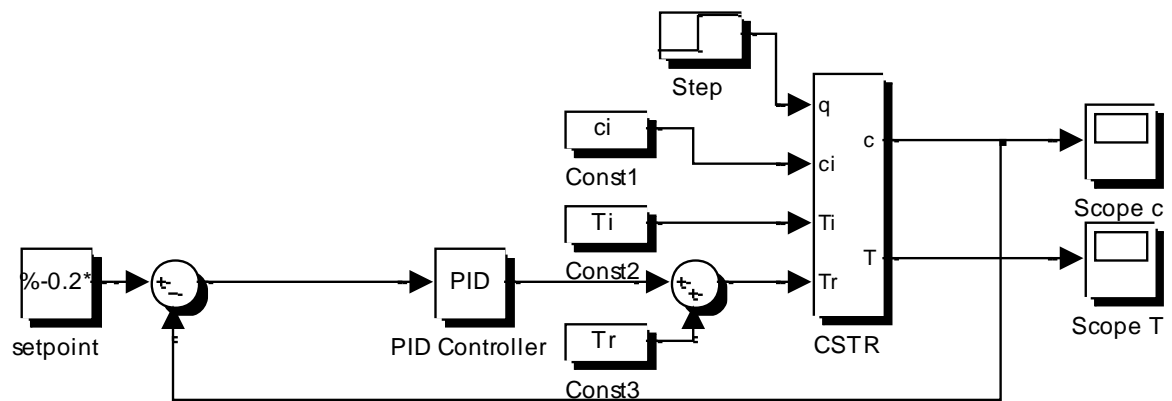


Figura 6.11.

