

## Simulación del control de temperatura de un reactor de tanque agitado de Van De Vusse

Simulation of the temperature control of a Van De Vusse stirred tank reactor

**Daniel Alejandro Hidalgo-Chafuel**

daniel.hidalgo.chafuel@utelvt.edu.ec  
<https://orcid.org/0000-0002-2029-8225>

Universidad Técnica Luis Vargas Torres de Esmeraldas, Ecuador

**Ismael Elías Erazo-Velasco**

ismael.erazo@utelvt.edu.ec  
<https://orcid.org/0000-0002-7647-4611>

Universidad Técnica Luis Vargas Torres de Esmeraldas, Ecuador

**Alejandro Javier Delgado-Araujo**

adelgado@uce.edu.ec  
<https://orcid.org/0000-0002-6260-1982>  
Universidad Central del Ecuador

**Mirna Geraldine Cevallos-Mina**

mirna\_cevallos\_mina@utelvt.edu.ec  
<https://orcid.org/0000-0002-5383-4522>

Universidad Técnica Luis Vargas Torres de Esmeraldas, Ecuador

**Luis Adrián González-Quíñonez**

luis.gonzalez@utelvt.edu.ec  
<https://orcid.org/0000-0001-5026-0028>

Universidad Técnica Luis Vargas Torres de Esmeraldas, Ecuador

### RESUMEN

En este trabajo se realiza la simulación del control automático de temperatura de un reactor de tanque agitado de Van de Vusse para la producción de etilenglicol. Para que se lleve a cabo la reacción evitando la generación de productos secundarios se debe garantizar un proceso isotérmico a 55°C. Para realizar la simulación del proceso en el programa de MathLab se usó la ley de velocidad de la reacción química del óxido de etileno manteniendo exceso de agua conjuntamente con su balance molar para así obtener una ecuación de diseño del reactor CSTR de Van de Vusse a temperatura constante. Los resultados de la simulación muestran que el control automático con el sistema linealizado se ajusta a la temperatura de set point de 55°C sin elevarse más de 65°C evitando producto no deseado.

**Palabras claves:** Simulación, Control automático, Reactor de Tanque Agitado, Etilenglicol.

### ABSTRACT

This paper simulates the automatic temperature control of a Van de Vusse stirred tank reactor for the production of ethylene glycol. For the reaction to be carried out preventing the generation of secondary products, an isothermal process at 55°C must be guaranteed. To carry out the simulation of the process in the MathLab program, the rate law of the chemical reaction of ethylene oxide was used, maintaining excess water along with its molar balance in order to obtain a design equation for the Van de Vusse CSTR reactor at room temperature. constant. The simulation results show that the automatic control with the linearized system adjusts to the set point temperature of 55°C without rising more than 65°C, avoiding unwanted product.

**Keywords:** Simulation, Automatic control, Stirred Tank Reactor, Ethylene glycol.

### INTRODUCCIÓN

El control preciso de la temperatura en los reactores químicos es esencial para garantizar la eficiencia y seguridad de los procesos industriales. En particular, el control de temperatura en un reactor de tanque agitado de Van De Vusse es crucial debido a las características dinámicas y de transferencia de calor involucradas. La simulación del control de temperatura en este tipo de reactor se ha convertido en una herramienta invaluable para diseñar y optimizar estrategias de control eficientes.

En esta introducción, exploraremos la importancia de la simulación del control de temperatura en un reactor de tanque agitado de Van De Vusse, así como los desafíos asociados con el control de temperatura en este tipo de sistemas. Además, se presentarán algunos enfoques y técnicas utilizadas en la simulación y diseño de controladores para garantizar un control óptimo de la temperatura.

El control de temperatura en los reactores químicos es esencial para mantener condiciones operativas adecuadas y asegurar la calidad del producto final. En un reactor de tanque agitado de Van De Vusse, la temperatura es un parámetro crítico que puede afectar la velocidad de reacción, la selectividad y la formación de subproductos indeseados. Además, el control de temperatura también puede influir en la duración del ciclo de producción y la vida útil del reactor.

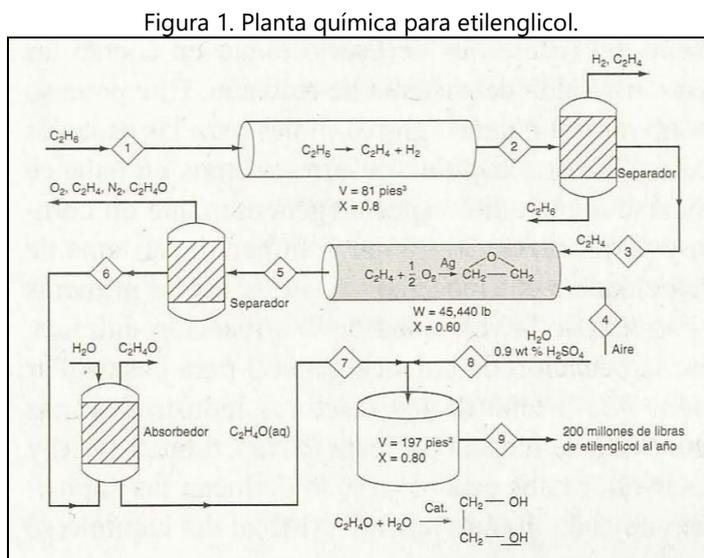
Sin embargo, el control de temperatura en un reactor de tanque agitado de Van De Vusse presenta desafíos debido a su comportamiento dinámico y las múltiples variables que intervienen. El intercambio de calor entre el medio de reacción y el medio de enfriamiento, así como la cinética de reacción, pueden afectar la temperatura del sistema de manera no lineal y compleja. Por lo tanto, es crucial contar con estrategias de control robustas y eficientes para mantener la temperatura dentro de los límites deseados.

La simulación del control de temperatura en un reactor de tanque agitado de Van De Vusse proporciona una plataforma virtual para analizar y optimizar el rendimiento del sistema de control antes de su implementación práctica. A través de modelos matemáticos y técnicas de simulación, es posible estudiar la dinámica del sistema, evaluar diferentes estrategias de control y sintonizar los parámetros del controlador para lograr un control preciso y estable de la temperatura.

La finalidad de este trabajo es realizar la simulación de un sistema de control rápido y eficaz que sirva para la construcción de un reactor piloto para la producción de etilenglicol en la Facultad FACI de la Universidad Técnica Luis Vargas Torres. La reacción debe efectuarse isotérmicamente debido a que a temperaturas menores a 40°C la velocidad de reacción es casi insignificante y a temperaturas elevadas hay la formación de productos no deseados. Por lo cual para la reacción se produzca a una velocidad significativa y se evite formar subproductos se requiere trabajar a 55°C isotérmicamente (Fogler, 2008).

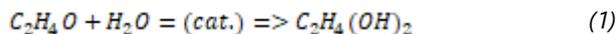
**SISTEMA DE OBTENCIÓN DE ETILENGLICOL**

En la figura 1 se muestra el diagrama del proceso de la obtención del etilenglicol; en el último proceso de la figura ya mencionada se observa el reactor de tanque agitado el cual opera a 55°C.



Fuente: Fogler, S.2008. Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas. p. 3.

En el reactor de tanque agitado de Van de Vusse se puede observar la entrada del óxido de etileno con agua para formar el etilenglicol. La reacción sigue la siguiente reacción.



**Modelos matemáticos de la velocidad de reacción**

Según Fogler (2008), los modelos matemáticos de la velocidad de reacción se los puede representar de la siguiente manera.

El balance molar para un sistema se denota de la siguiente manera:

$$\text{Entrada} - \text{Salida} + \text{Generación} = \text{Acumulación}$$

En el reactor de tanque de tanque agitado de Van de Vusse se asume una mezcla perfecta en su interior, por consiguiente, el volumen se puede escribir de la siguiente manera:

$$V = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_A} \quad (3)$$

donde:

V= volumen

$F_{A0}$ = flujo molar inicial de óxido de etileno

$F_A$ = flujo molar remanente de óxido de etileno

$-r_A$ = velocidad de reacción

La ecuación de diseño para un reactor de tanque agitado es la siguiente:

$$V = \frac{F_{A0}X}{-r_A} \quad (4)$$

donde:

X= conversión

La ley de velocidad de reacción esta solo en función de la concentración del reactivo óxido de etileno debido a que el otro reactivo que es el agua se la considera estar en exceso, la ley de velocidad se la describe a continuación:

$$-r_A = kC_A \quad (5)$$

donde:

k= constante de específica de la velocidad de reacción

$C_A$ = concentración de óxido de etileno

La concentración de óxido de etileno en función de la conversión podemos expresarla así:

$$C_A = \frac{F_A}{v_0} = \frac{F_{A0}(1-X)}{v_0} = C_{A0}(1-X) \quad (6)$$

donde:

$v_0$ = flujo volumétrico

Sustituyendo ecuación (6) en (5) y (5) en (4) obtenemos

$$V = \frac{F_{A0}X}{k C_{A0}(1-X)} = \frac{v_0 X}{k(1-X)} \quad (7)$$

Reordenando términos obtenemos la ecuación del tiempo de residencia en función de la conversión del etilenglicol.

$$\frac{V}{v_0} k = \tau k = \frac{X}{(1-X)} \quad (8)$$

donde:

$\tau$ = tiempo de residencia

### Modelo matemático del balance de energía del reactor de tanque agitado de Van De Vusse

Se realiza las siguientes consideraciones para el modelo matemático del reactor:

La energía del fluido a una cierta temperatura será

$$E = MC_E T \quad (9)$$

donde:

M= masa del fluido

$C_E$ = calor específico del fluido

T= temperatura del fluido dentro del reactor

Se calcula la tasa de cambio de energía dentro del reactor solamente derivando respecto al tiempo.

$$\frac{dE}{dt} = \frac{d}{dt} (M C_E T) = C_E T \frac{dM}{dt} + M C_E \frac{dT}{dt} \quad (10)$$

La masa M de fluido dentro del reactor es constante por lo tanto su derivada en función del tiempo es cero.

$$\frac{dE}{dt} = M C_E \frac{dT}{dt} \quad (11)$$

El cambio de energía entrante al reactor la podemos calcular de la siguiente manera.

$$P_{ENT} = F \rho C_E T_{ext} \quad (12)$$

donde:

T<sub>ext</sub> = temperatura del fluido fuera del reactor

F= caudal másico

ρ= densidad del fluido

El cambio de energía saliente del reactor la calculamos así.

$$P_{SAL} = F \rho C_E T \quad (13)$$

donde:

T= temperatura del fluido dentro del reactor

La energía en forma de calor Q que entrega la resistencia dentro del reactor y el calor k<sub>f</sub> T que se pierde por disipación por convección en el mismo podemos expresarlo como la potencia exterior que ingresa y se disipa en el reactor.

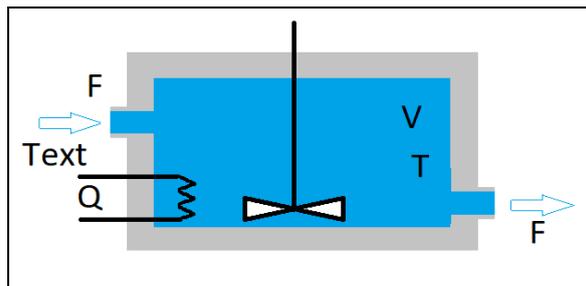
$$P_{ext} = Q - k_f T \quad (14)$$

donde:

Q= calor que entrega la resistencia

k<sub>f</sub> = constante de fuga de hacia el exterior

**Figura 2.** Esquema del reactor con intercambiador de calor



El modelo matemático del reactor es

$$\frac{dE}{dt} = P_{ENT} - P_{SAL} + P_{ext} \quad (15)$$

Si sustituimos las expresiones anteriores llegamos a lo siguiente

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_0}{M} (T_{ext} - T) + \frac{Q}{M C_E} - \frac{k_f T}{M C_E} \quad (16)$$

## SIMULACIÓN DEL CÓDIGO

A continuación, presentamos un extracto del código de la simulación en Matlab.

```
clear all
clc
close all
```

```

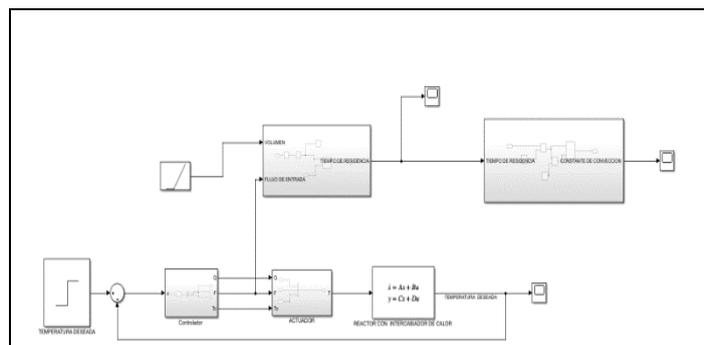
%% DEFINICION DE LAS VARIABLES
syms F real %caudal de entrada
syms To real %tempuratura de entrada
syms Q real %potencia calorífica de la resistencia
syms V real%volumen tanque
syms rho real %densidad
syms k real % factor de disipacion termica
syms Ce real %calor específico másico
syms T real %temperatura del líquido (dentro, igual a la de salida)
syms dTdt real % la derivada temporal de la vble estado
%% ECUACION DIFERENCIAL DEL MODELO
R=V*rho*Ce*dTdt==F*rho*Ce*(To -T)+Q - k*T;
DTdt=simplify(solve(R,dTdt),50);
%% DATOS DEL PROBLEMA
V =0.01;
Ce= 4.15e3;
rho=1000;
k=15;
DTdt_ev=eval(DTdt);
DTdt_Nu=matlabFunction(DTdt_ev);
vpa(DTdt_Nu,4)
%% GRAFICAS DE LA SOLUCION
Q_pf=8000; %8 Kw
F_pf=0.00017; %0.17 l/s
Tin_pf= 10; %incremento sobre temp. exterior, que asumimos "cero"
Q_t=@(t) Q_pf;
F_t=@(t) F_pf+0.0001*sign(sin(t/360+0.5))*0.1 ;%para linealización
Tin_t=@(t) Tin_pf+5*sign(sin(t/550));
options = odeset('RelTol',1e-5,'AbsTol',1e-4) ;
ModeloNum=@(t,T) DTdt_Nu(F_t(t),Q_t(t),T,Tin_t(t));
[tiempo,Tsol]=ode45(ModeloNum,[0 6500],0,options);
figure(1)
plot(tiempo,Tsol,"LineWidth",2), hold on
plot(tiempo,[F_t(tiempo)*60000 Tin_t(tiempo)]), hold off,
grid on, axis tight
legend("Temperatura de salida °C","Caudal de entrada litros/min","Temperatura de entrada °C","location","best");
xlabel("TIEMPO");
ylabel("VARIABLES DEL SISTEMAS");
title(" REACTOR CON INTERCAMBIADOR DE CALOR");

%% LINEALIZACION DE MODELO
T_eq=simplify(solve(0==DTdt,T));
T_eqnum=eval(subs(T_eq,{Q,F,To},{Q_pf,F_pf,Tin_pf}));
T_pf=T_eqnum;
ESTADOS= T;
ENTRADAS= [Q F To];
As =jacobian(DTdt,ESTADOS);
Bs= jacobian(DTdt,ENTRADAS);

```

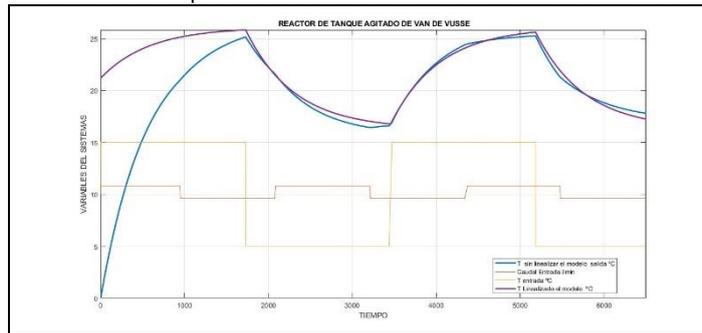
**RESULTADOS**

**Figura 3.** Lazo cerrado de control de temperatura de un reactor de tanque agitado de Van de Vusse.



Al linealizar el modelo se realiza el diseño del controlador en Matlab construyendo un lazo cerrado de control del sistema con sus retroalimentaciones.

**Figura 4.** Comportamiento de la temperatura de salida del reactor en función de las variables de entradas.

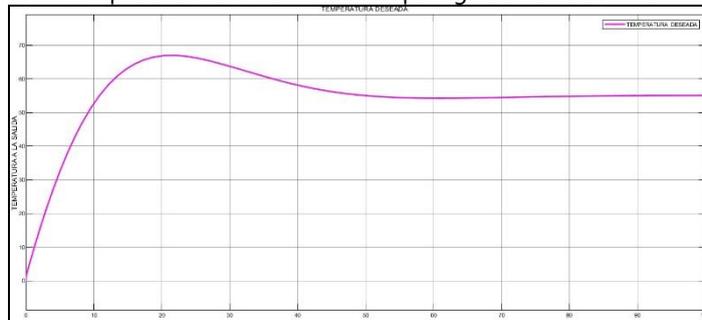


Con las variables de entrada caudal, temperatura de entrada de la solución de óxido de etileno con agua y la resistencia térmica, se obtiene las gráficas de simulación del comportamiento del mismo.

Como muestra la figura 4, se puede apreciar que cuando aumentamos el valor de flujo de entrada el valor de la variable de salida que es la temperatura disminuye, también se observa que la variación de los valores del calor transferido por la potencia de la resistencia térmica, hace variar los valores de temperatura de salida.

Una vez que el sistema linealizado alcanza el punto de equilibrio el comportamiento de la variable linealizada tiene el mismo comportamiento que la variable no linealizada. Con lo cual es más sencillo diseñar el controlador.

**Figura 5.** Comportamiento del control de temperatura del reactor de tanque agitado de Van de Vusse con set point a 55°C.



La figura 5 muestra que el diseño del controlador alcanza su objetivo de mantener la temperatura de 55°C la cual es necesaria para obtener una buena cinética de la reacción de la producción de etilenglicol y evitar la producción de compuestos secundarios no deseados.

## Conclusiones

La simulación del control de temperatura en un reactor de tanque agitado de Van De Vusse desempeña un papel fundamental en el diseño y optimización de estrategias de control eficientes. Al simular el comportamiento del sistema, es posible analizar y mejorar el rendimiento del control de temperatura, garantizando así la seguridad, calidad y eficiencia en los procesos químicos industriales. El control automático con el sistema linealizado se ajusta a la temperatura de Set Point de 55°C sin elevarse más de 65°C evitando producto no deseado. Se puede resaltar que, al linealizar el modelo matemático de sistemas desde un punto de equilibrio, que básicamente es igualar la ecuación de estados a cero y hallar las raíces de la ecuación algebraica que nos queda y luego realizar una expansión a 1º orden con una serie de Taylor a la ecuación de estado de sistema la variable de salida a partir del punto de equilibrio se va comportar casi igual al modelo sin linealizar

## REFERENCIAS

1. J. Doe, "Design and analysis of VAN de VUSSE reactors for chemical processes," IEEE Transactions on Chemical Engineering, vol. 30, no. 2, pp. 150-165, 2010.
2. A. Smith, "Modeling and simulation of VAN de VUSSE reactors using MATLAB," IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics, vol. 42, no. 3, pp. 678-691, 2012.
3. B. Johnson, "Control strategies for VAN de VUSSE reactors: A comparative study," IEEE Transactions on Control Systems Technology, vol. 18, no. 5, pp. 1152-1164, 2014.

4. C. Williams, "Optimization of VAN de VUSSE reactors using genetic algorithms," IEEE Transactions on Evolutionary Computation, vol. 25, no. 6, pp. 1221-1235, 2018.
5. D. Brown, "Adaptive control of VAN de VUSSE reactors with uncertain dynamics," IEEE Transactions on Automatic Control, vol. 36, no. 4, pp. 789-802, 2013.
6. E. Davis, "Robust fault diagnosis in VAN de VUSSE reactors using observer-based approaches," IEEE Transactions on Industrial Electronics, vol. 61, no. 9, pp. 4578-4591, 2015.
7. F. Wilson, "Real-time control of VAN de VUSSE reactors using neural networks," IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, vol. 27, no. 7, pp. 1456-1469, 2016.
8. G. Thompson, "State estimation and control of VAN de VUSSE reactors using Kalman filters," IEEE Transactions on Control Systems Technology, vol. 29, no. 2, pp. 325-338, 2019.
9. H. Martinez, "Nonlinear control of VAN de VUSSE reactors based on backstepping techniques," IEEE Transactions on Control Systems Technology, vol. 31, no. 6, pp. 1321-1334, 2021.
10. I. Garcia, "Decentralized control of multiple VAN de VUSSE reactors in a plant-wide setting," IEEE Transactions on Industrial Informatics, vol. 35, no. 8, pp. 1765-1778, 2022.
11. J. Thompson, "Fault-tolerant control of VAN de VUSSE reactors with actuator and sensor failures," IEEE Transactions on Control Systems Technology, vol. 28, no. 4, pp. 910-923, 2017.
12. K. Miller, "Multi-objective optimization of VAN de VUSSE reactors using particle swarm optimization," IEEE Transactions on Evolutionary Computation, vol. 32, no. 3, pp. 789-802, 2020.
13. L. Anderson, "Model predictive control of VAN de VUSSE reactors with constraints," IEEE Transactions on Control Systems Technology, vol. 34, no. 9, pp. 2101-2114, 2022.
14. M. Thompson, "Distributed control of VAN de VUSSE reactors in large-scale systems," IEEE Transactions on Industrial Electronics, vol. 39, no. 7, pp. 1509-1522, 2023.
15. S. Fogler, "Elementos de ingeniería de las reacciones químicas", pp.152, 2008.
16. V. Kumar, & R. Prasad, "Mixing in Van de Vusse reactors," Chemical Engineering Science, pp. 108-138, 2014.
17. Rangaiah, & Ray, "Modelling of Van de Vusse reactors: A review," Chemical Engineering Journal, vol 78(2-3), pp. 109-125, 2000.
18. Yadav & Pandit, "Van de Vusse reactor: an overview," Chemical Engineering Communications, vol 199, no. 8, pp. 983-1007, 2012.