

Modelización de Fallas en Reactor Químico con Agitación Continua (CSTR)

Elias Cargnelutti¹, Joaquín Ibarrodo¹, Emanuel Muravschik¹, Raúl A. Garrera^{1,2}

¹ Grupo de investigación de control avanzado de procesos y producción GICAPP, Facultad Regional Córdoba, Maestro M. López esq. Cruz Roja Argentina, (5000) Córdoba, Argentina, utn.gicapp@gmail.com

² Persona a quién debe estar dirigidos los mails

Resumen - La detección de fallas es un problema de gran relevancia en procesos de ingeniería. La detección y diagnóstico temprano de fallas en procesos mientras la planta se encuentra operando en regiones controlables pueden ayudar a evitar las ramificaciones del evento anormal y reducir las pérdidas de productividad. Hoy en día existe una gran cantidad de literatura sobre la detección y diagnóstico de fallas, desde métodos analíticos hasta métodos de acercamiento estáticos. Los métodos de detección y diagnóstico de fallas se clasifican en tres grandes categorías (Venkatasubramanian et al., 2002), métodos basados en modelos cuantitativos, métodos basados en modelos cualitativos y métodos basados en datos históricos. Cada uno de estos métodos se subdividen a su vez en distintos modelos de detección y diagnóstico de fallas. Se ha seleccionado el modelo de reactor químico con agitación continua, el cual es uno de los más usados en la industria química, para modelizar y simular fallas en el proceso para la aplicación de modelos de detección de fallos. Algunos métodos que se estudiaron en el presente trabajo son los filtros de Kalman, Árboles de Falla y la transformada Wavelet. Se concluyó que ningún método constituye, en forma individual, un estudio completo de detección y diagnóstico de fallas. Al contrario, cada uno de ellos pueden complementarse entre sí posibilitando la creación de un método híbrido.

Palabras claves: Detección de fallas, diagnóstico de fallas, fallas

Modeling of Failures in Continuous Stirring Chemical Reactor (CSTR)

Abstract - Fault detection is an important problem in process engineering. The early detection and diagnosis of process faults while the plant is operating in controlled areas can help avoid abnormal event branches and reduce productivity losses. Today there are a lot of literature on the detection and diagnosis of faults, from analytical methods to static methods approach. The methods of detection and diagnosis of faults can be classified into three categories (Venkatasubramanian et al., 2002), quantitative model-based methods, qualitative model-based methods and methods based on historical data. Each of these methods is subdivided in different detection and diagnosis of fault models. Model of chemical reactor with continuous stirring is selected, which is one of the most used in the chemical industry, to model and simulate failures in the application of fault detection models. Some methods that are studied in this work are the Kalman filter, Fault Trees and Wavelet transformed. It was concluded that no method is, individually, a complete study of fault detection and diagnosis. On the contrary, each of them can be complement each other, enabling the creation of a hybrid method.

Keywords: fault detection, fault diagnosis, fault

INTRODUCCIÓN

La detección de fallas es un problema de gran relevancia en procesos de ingeniería. La detección y diagnóstico temprano de fallas en procesos mientras la planta se encuentra operando en regiones controlables pueden ayudar a evitar las ramificaciones del evento anormal y reducir las pérdidas de productividad.

En Venkatasubramanian, (2003) se presenta una clasificación de los métodos de diagnósticos de fallas que han sido utilizados hasta la actualidad encontrándose una gran cantidad de métodos basados en modelos cuantitativos y cualitativos y una tendencia actual de métodos basados en data histórica. Estos últimos tienen una ventaja importante con respecto a los anteriores debido a que no requieren desarrollar un modelo matemático preciso del proceso ni conjuntos de reglas de decisión que en muchos procesos complejos es una tarea titánica.

El conocimiento básico que es necesario para el diagnóstico de fallas es un conjunto de fallas y la relación entre las observaciones (síntomas) y las fallas. Un sistema de diagnóstico podrá tener explícitamente (como en un cuadro de búsqueda) o podrá ser inferido desde alguna fuente de dominio de conocimiento. El dominio de conocimiento a priori podrá ser desarrollado desde un entendimiento fundamental del proceso utilizando principios primarios del conocimiento. Dicho conocimiento es referido como el conocimiento profundo, causal o basado en un modelo (Milne, 1987).

Por otro lado podrá ser inferido de experiencias pasadas con el proceso.

El conocimiento basado en un modelo a priori puede ser ampliamente clasificado como cualitativo o cuantitativo. Dicho modelo es usualmente desarrollado en base a algún entendimiento fundamental de la física del proceso. En modelos cuantitativos este entendimiento es expresado en términos de relaciones de funcionalidad matemática entre las entradas y salidas del sistema.

En contraste, en el modelo cualitativo, estas relaciones son expresadas en términos de funciones cualitativas centradas alrededor de diferentes unidades en un proceso. El modelo cualitativo puede ser desarrollado tanto como modelo cualitativo causal o jerarquía de abstracción.

La Fig. 1 muestra la taxonomía del dominio del conocimiento basado en dos amplias categorías.

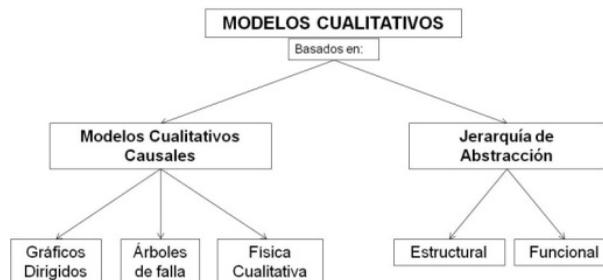


Figura 1 - Formas de conocimiento cualitativo

El modelo cualitativo aplicado al caso de estudio, tanque de agitación continua (CSTR), es el “Análisis de Árboles de Falla (Fault Tree Analysis).

En los métodos basados en data histórica la detección y diagnóstico de falla se realiza mediante el procesamiento de un gran volumen de datos. Existen diferentes formas en que estos datos pueden ser transformados y presentados como un conocimiento a priori para un sistema de diagnóstico. Esto se conoce como extracción de características. Este proceso de extracción puede ser cualitativo o cuantitativo dependiendo de la naturaleza de los datos.

Dentro del análisis histórico de información de tipo cualitativa se podría implementar la transformada Wavelet que permite la detección de anomalías mediante el filtrado de las señales. Además permite distinguir

dos fallas diferentes ocurridas en el mismo período de tiempo y reducir el ruido. Las señales que se pueden analizar en el modelo pueden ser variadas como el nivel del fluido dentro del tanque, la concentración final del producto, etc.

Por otra parte, de los métodos de naturaleza cuantitativa, el Análisis de Componentes Principales (PCA) es una técnica estadística multivariable que ha sido aplicada en la detección y diagnóstico de fallas. PCA es usado para realizar la detección de fallas utilizando las gráficas de control Hotelling (T²), que es una medida de variación entre un modelo PCA del proceso en estado normal de funcionamiento y en una condición de falla.

Estas dos técnicas se aplicaron en modelos del reactor químico con agitación continua con resultados satisfactorios (Gouveia, Padilla, Camacho, 2007).

MÉTODOS PARA DETECCIÓN Y DIAGNÓSTICO DE FALLAS

Filtros de Kalman

El método fue descrito por Rudolf E. Kalman en 1958. Lo que hace al filtro tan interesante es precisamente su habilidad para predecir el estado de un sistema en el pasado, presente y futuro, aún cuando la naturaleza precisa del sistema modelado es desconocida. En la práctica las variables estado individuales de un sistema dinámico no pueden ser exactamente determinadas por una medición directa. Dado lo anterior su medición se realiza por medio de procesos estocásticos que involucran algún grado de incertidumbre en la medición.

Árboles de Falla

Los árboles de fallas son utilizados para analizar la confiabilidad del sistema y la seguridad. El análisis del árbol de fallas fue originalmente desarrollado en los Laboratorios de Bell Telephone en 1961. Es un árbol lógico que propaga eventos primarios o fallas al evento principal o un peligro. Proporciona un marco lógico para expresar combinaciones de las fallas de los componentes que pueden llevar a fallas del sistema. El árbol usualmente tiene capas de nodos. En cada nodo son realizadas diferentes operaciones lógicas tales como AND (y) y OR (o) para la propagación. Los árboles de fallas han sido utilizados en una variedad de evaluación de riesgos y estudios de análisis de confiabilidad (Ulerich y Powers, 1988).

Los árboles de falla proporcionan un buen marco para los análisis cualitativo y cuantitativo porque tienen una base algebraica booleana y probabilística bien definida que relata los cálculos de probabilidad a funciones lógicas booleanas.

La Transformada Wavelet

La técnica de la transformada Wavelet descompone la señal en diferentes sub-bandas de frecuencia y estudia separadamente sus características.

La transformada Wavelet es una herramienta que permite analizar señales no estacionarias ya que realiza una representación tiempo-frecuencia de la señal con múltiples resoluciones, es decir, tamaños de ventanas variables.

Análisis de Componentes Principales

PCA es una técnica lineal de reducción de dimensionalidad óptima en términos de capturar la variabilidad de datos y aplicada para realizar la etapa de Extracción de Características. PCA determina un conjunto de vectores ortogonales que son combinaciones lineales de las variables originales. Son ordenados por la cantidad de varianza explicada en las direcciones de dichos componentes. El estadístico Hotelling representa una medida

de la variación entre un modelo PCA lo que permite que sea usado para realizar la detección de fallas en procesos multivariados.

CASO DE ESTUDIO

Para probar la eficiencia de estas técnicas estadísticas es necesario contar con gran cantidad de datos históricos de un proceso real afectado por fallas. En la práctica el acceso a dichos datos se torna complicado debido a que no toda empresa cuenta con una base de datos sobre fallas de sus procesos. Para sortear estas dificultades se armó un modelo empírico que genere variaciones apreciables, y por ende mensurables, permitiendo el análisis mediante alguna de las técnicas que este proyecto aborda. Este modelo es el proceso de un tanque de reacción no isotérmico agitado continuamente (CSTR) para generar a partir de él los datos históricos necesarios. El modelo estudiado y las consideraciones se describen en el informe de Peña T., Eliana; Pérez R., Aída R; Miranda, Ander J.; Sánchez L., José H. (2008).

El modelo del reactor tipo tanque continuo agitado estudiado se limita sólo a dos etapas: la primera etapa es la de formación de producto y la segunda la de transferencia de calor a través de una chaqueta.

Por ser un proceso continuo siempre existe entrada de reactante y salida de producto del sistema por lo que el volumen en el tanque varía de acuerdo con el nivel de la mezcla. El modelo considera que el sistema ya está en estado estacionario, es decir que las fases de arranque y parada no son tomadas en cuenta para este estudio.

Por tal razón se parte del punto en que la mezcla ya ha alcanzado un nivel de temperatura para el cual la reacción genera calor (reacción exotérmica). Luego que la reacción comienza a liberar calor, éste será retirado mediante la apertura de la válvula de agua fría de la chaqueta con la finalidad de mantener la temperatura del reactor dentro del rango de operación que fije el proceso.

Los objetivos de control son: lograr una conversión adecuada del producto formado y mantener al sistema operando alrededor de sus condiciones de estado estacionario. Estas condiciones de estado estacionario involucran distintas variables: concentraciones, nivel dentro del tanque, temperaturas, flujos. En este sentido la conversión se ve reflejada en la concentración del producto mientras que por otra parte es necesario asegurar, debido a la entrada continua de reactante al tanque, que no se produzca una acumulación tal que el nivel de la mezcla se desborde.

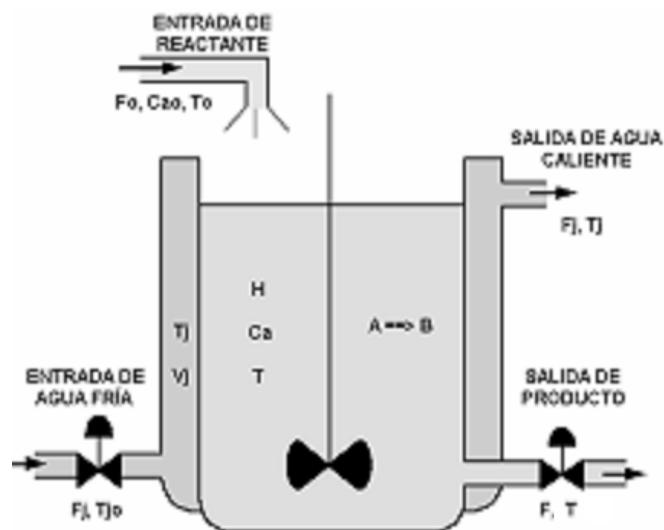


Figura 2 - Proceso del CSTR

ECUACIONES DEL MODELO Y VARIABLES

A continuación se muestran las ecuaciones que describen el funcionamiento del reactor tipo tanque con agitación continua:

Balance del Componente A

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_o (C_{Ao} - C_A) - V k C_A \quad (1)$$

siendo V el volumen de la mezcla, C_{Ao} la concentración inicial del reactante (mol/m^3), C_A la concentración final del reactante y k la velocidad de reacción específica ($1/\text{h}$).

Balance de Energía en el reactor

$$\rho C_p V \frac{dT}{dt} = \rho C_p F_o (T_o - T) - \lambda V k C_A - UA (T - T_j) \quad (2)$$

donde T_o es la temperatura de alimentación, T_j la temperatura de la chaqueta, ρ la densidad de la mezcla reaccionante (lb/m^3), C_p la capacidad calórica promedio de la mezcla reaccionante ($\text{J}/\text{kg.K}$), U el coeficiente pelicular de transferencia de calor ($\text{J}/\text{h} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}$), A el área de transferencia de calor y λ el calor exotérmico de reacción (J/mol).

Balance de energía en la camisa de enfriamiento

$$\rho_j C_{pj} V_j \frac{dT_j}{dt} = \rho_j C_{pj} F_j (T_{jo} - T_j) + UA (T - T_j) \quad (3)$$

siendo F_j el flujo volumétrico de alimentación de la chaqueta, T_{jo} la temperatura de alimentación de la chaqueta, ρ_j la densidad del líquido dentro de la chaqueta, C_{pj} la capacidad calórica del líquido dentro de la chaqueta y V_j el volumen de la chaqueta.

Ecuación de la velocidad de reacción específica

$$k = \alpha \exp \left(\frac{-E}{RT} \right) \quad (4)$$

donde T es la temperatura dentro del tanque (K), α el factor pre-exponencial de Arrhenius, E la energía de activación (J/mol) y R la constante universal de los gases. ($\text{J}/\text{mol.K}$).

CLASIFICACIÓN DE LAS VARIABLES

Las variables a considerar para el desarrollo de la simulación son las siguientes:

| | | | | | | | |
|----------|---|----------|--------------|-----------|---|------------|-----------|
| F_o | = | 1,13 | m^3/h | λ | = | (-) 31.650 | J/mol |
| CA_o | = | 17,64 | mol/ m^3 | A | = | 23,24 | m^2 |
| V | = | 1,36 | m^3 | T_p | = | 954 | K |
| F_j | = | 1,41 | m^3/h | T_o | = | 954 | K |
| R | = | 1,17 | J/mol.K | C_p | = | 0,98 | J/kg.K |
| V_j | = | 0,11 | m^3 | C_{pj} | = | 1,3 | J/kg.K |
| α | = | 7,08 E10 | 1/h | ρ | = | 793,97 | kg/ m^3 |
| E | = | 31.650 | J/mol | ρ_j | = | 989,29 | kg/ m^3 |
| U | = | 945,84 | J/h. $m^2.K$ | | | | |

Tabla 1 - Constantes del proceso CSTR

• Perturbaciones:

– Concentración de entrada del reactante (C_{AO})

• Variables de entrada fijas:

– Temperatura de entrada del reactante (T_o)

– Temperatura de entrada del agua fría a la chaqueta (T_{jo})

• Variables de salida:

– Concentración del producto

– Temperatura del reactor (T)

– Temperatura de la chaqueta (T_j)

MODELADO EN SIMULINK

Mediante la utilización del programa SIMULINK se ha simulado el proceso del tanque de reacción continua teniendo en cuenta las ecuaciones presentadas.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Filtros de Kalman

Desde los métodos cualitativos disponibles para el estudio de las perturbaciones del tanque se propone utilizar el método de los filtros de Kalman. Para llevar a cabo el estudio de los fallos por el filtro de Kalman se hace necesario un conjunto de ecuaciones matemáticas que provean una solución recursiva eficiente del método de mínimos cuadrados para la comparación del proceso anterior utilizando una especie de control de retroalimentación, esto es, estimar el proceso a algún momento en el tiempo y entonces se obtiene la retroalimentación por medio de los datos observados.

Procurando satisfacer estos objetivos se trató de utilizar un banco de filtros de Kalman estándar. Al tratar de utilizarlo se puso en evidencia el no poder estimar la función de activación y detectar, localizar y estimar fallas simultáneamente. Se evaluará la posibilidad de encarar el problema a través de la utilización de un banco de filtros de Kalman desacoplados (López Zapata, 2009).

Árbol de Falla

Los arboles de fallas han sido utilizados en una variedad de evaluación de riesgos y estudios de análisis de confiabilidad.

Antes de la construcción del árbol de fallas el analista debería poseer un completo entendimiento del siste-

ma. De hecho, una descripción del sistema también es parte de la documentación del análisis (Bennetts, 1974).

El árbol de falla es construido al hacerle preguntas tales como qué podría causar un evento de alto nivel. En respuesta a esta pregunta uno genera otros eventos conectados por nodos o puertas lógicas. El árbol es expandido de esta manera hasta que uno encuentra eventos básicos (primarios) que no necesitan ser desarrollados posteriormente (Lapp & Powers, 1977).

Una definición del sistema es el primer paso para generar el árbol de fallas. El completo entendimiento del sistema es necesario para la creación de un diagrama sistemático que describa gráficamente el funcionamiento del proceso que estamos analizando.

Una primera aproximación es la Fig. 4 que detalla el funcionamiento del tanque de agitación continua (CSTR) descripto anteriormente.

La construcción propiamente dicha del árbol de falla parte prioritariamente de:

1. Describir el Evento de la Falla.
2. Describir los Modos de la Falla.
3. Hacer una lista de las causas potenciales y verificar (esto puede requerir varios niveles).
4. Causa(s) Raíz Física: Verificar mecanismo de falla en el nivel de componentes.
5. Causa(s) Raíz Humana: Verificar punto de acción indebida o error humano.
6. Causa(s) Raíz del Sistema: Verificar defecto en el sistema de administración.

Las preguntas para construir un árbol de falla son simples y consistentes. Algunas de ellas son “Como pudo ocurrir la falla”, “Porque ocurrió la falla”, entre otras.

La investigación se encuentra en construcción del árbol de fallas. Se están determinando las fallas que pudiesen ocurrir en el sistema para los eventos de fallas básicas y poder establecer puntos de control predefinidos.

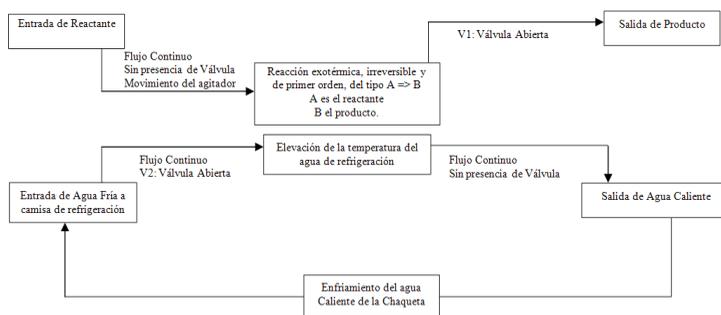


Figura 4 - Modo de operación de CSTR

Detección de fallas utilizando la Transformada Wavelet

Para esta técnica se considera como ejemplo de perturbación del modelo del CSTR una variación en la concentración del reactante $C_A(t)$.

Esta perturbación se puede ver en la Fig. 5.

Se aplicó una Transformada Wavelet de la familia Daubechies descomponiendo la señal en cinco niveles y luego del cálculo de los umbrales se aplica el filtro quedando como resultado el gráfico de la Fig. 6.

En el gráfico se visualiza cada descomposición de la señal filtrada donde cada uno tiene un nivel de detalle. Se puede observar que, a medida que se aumenta el nivel de detalle ($d5$), la perturbación se hace más evidente.

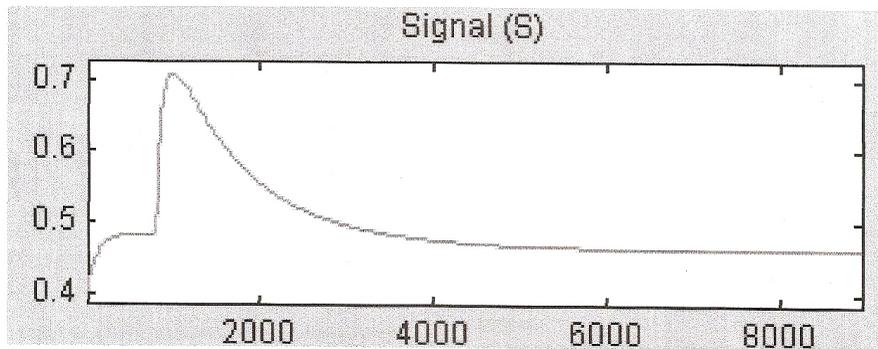


Figura 5 - Perturbación de la concentración

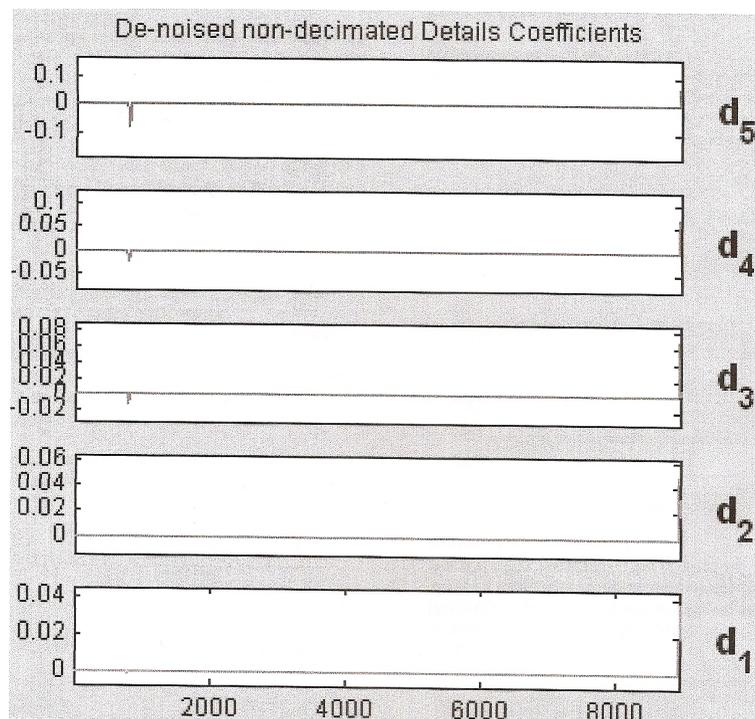


Figura 6 - Descomposición de la señal

Esta técnica también se puede aplicar en modelos en donde se necesite reducir el ruido para su análisis.

Sin embargo, si bien es aplicable a la detección de fallas no permite clasificar y determinar la naturaleza del fallo por lo que es necesario complementar con otra técnica para completar el análisis de anomalías.

Análisis de Componentes principales

La adaptación del análisis de componentes principales (ACP) es dudosa. La razón reside en que son métodos invariantes en el tiempo, por lo cual se lo debe utilizar de forma reiterada y se podría convertir en un trabajo lento y engorroso. Sin embargo existe bibliografía que trata de algoritmos para el ACP recursivo que agilizarían los cálculos, los cuales deberían ser estudiados (Li et al., 2000).

CONCLUSIONES

Es importante destacar que ningún método constituye, en forma individual, un estudio completo de detección y diagnóstico de fallas. Al contrario, cada uno de ellos pueden complementarse entre sí posibilitando la creación de un método híbrido.

Se utilizaron los filtros de Kalman en modelo CSTR sin poder estimar la función de activación y detectar fallas simultáneamente; se considerará para el futuro la posibilidad de encarar el problema a través de un banco de filtros de Kalman desacoplados.

Se demostró la aplicabilidad de la transformada Wavelet en el modelo simulado concluyendo en la elevada eficacia del método en la detección de fallas pero identificando la imposibilidad de determinar la causa raíz de las mismas. Para ello se utiliza el método de Árbol de fallas.

Por último, en el análisis de componentes principales (ACP) se determinó como un método invariante en el tiempo, pero se considerarán para el futuro algoritmos para el análisis de componentes principales recursivos que podrían mejorar y agilizar los cálculos.

REFERENCIAS

Venkatasubramanian, Raghunathan Rengaswamy, Surya Kavuri, Kewen Yin, "A review of process fault detection and diagnosis", *Computers and Chemical Engineering*, (2003).

Milne, "Strategies for diagnosis", *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics* 17 (3), 333-339, (1987).

Gouveia, Padilla, Camacho, "Detección y Diagnóstico de fallas utilizando técnicas estadísticas multivariantes a partir de data histórica", *Facultad de Ingeniería, Universidad de los Andes - Mérida, Venezuela*, (2007).

Ulerich & Powers, "Online hazard aversion and fault diagnosis in chemical processes: the digraph/fault tree method", *IEEE Transactions on Reliability* 37 (2), 171-177, (1988).

Peña, Pérez, Aida, Miranda, Ander, Sánchez, "Modelado de un reactor químico tipo CSTR y evaluación del control predictivo aplicando Matlab-Simulink", *Ingeniería UC, Vol. 15, (3)*, 97-112, (2008).

López Zapata, "Desarrollo de un Sistema de Detección de Fallas Utilizando un Enfoque Multi-Modelos LIT Aplicado a un Intercambiador de Calor", *Cuernavaca, Morelos, México*, (2009).

Bennetts, "Comment on the evaluation of fault trees", *IEEE Transactions on Reliability* 23 (1), 54-55, (1974).

Lapp & Powers, "Computer-aided synthesis of fault trees", *IEEE Transactions on Reliability* 26 (1), 2-13, (1977).

Li, Yue, Valle Cervantes & Qin, "Recursive PCA for adaptive process monitoring", *Journal of Process Control* 10 (5), 471-486, (2000).