



DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN

OPCIÓN I.- TESIS

TRABAJO PROFESIONAL

“DISEÑO DE SISTEMAS DE CONTROL PARA UN
TIPO DE REACCIÓN EN PARALELO REALIZADA EN
UN REACTOR TUBULAR”.

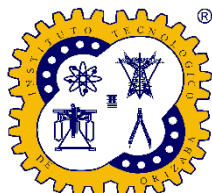
**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS
EN INGENIERÍA QUÍMICA**

PRESENTA:

I.Q. ISAI GARCIA ROJAS

DIRECTOR DE TESIS:

DR. GALO RAFAEL URREA GARCÍA



DEDICATORIA

Dedicado a mi querida novia, IQ. Magdalena Manica Jauregui. En el camino de la vida, tu apoyo constante y amor incondicional han sido faros luminosos que han iluminado mi sendero. Tu inteligencia, gracia y valentía son fuente de inspiración constante. Este logro no solo lleva mi firma, sino también la huella de tu aliento y motivación. Agradezco profundamente tu presencia, tu paciencia y tu amor inquebrantable que han sido la fuerza propulsora detrás de cada logro en mi carrera profesional. Este éxito es nuestro, y estoy agradecido de compartirlo contigo.

Madre querida Ignacia Rojas Rosas, eres la fuente de mi fuerza y la razón de mis logros. Tu sacrificio y dedicación han sido el motor de mi perseverancia. Este logro no solo representa mis esfuerzos individuales, sino también la manifestación de tus enseñanzas y valores que has inculcado en mí desde mi más tierna infancia. Tu amor incondicional y sabiduría han sido mi guía constante. Este éxito te pertenece tanto como a mí, y te dedico con gratitud cada logro alcanzado.

En la senda de la vida, la familia es nuestro mayor tesoro. A mi querido hermano, Jaime, y a su familia, a la pequeña Amaya, agradezco la constante inspiración y apoyo. La unidad y cariño que compartimos han sido fundamentales en mi travesía hacia el logro profesional. Cada paso que doy es también un homenaje a nuestra conexión y afecto inquebrantables. Que este éxito sea un reflejo de nuestro lazo irrompible y del amor que nos une.

A mi respetado tío Oscar, mentor, le dedico este logro con profundo agradecimiento. Su sabiduría, orientación y apoyo incondicional han sido fundamentales en mi desarrollo profesional. Este éxito es también un testimonio de su influencia positiva en mi vida, y le dedico con gratitud cada paso alcanzado en este viaje.

RECONOCIMIENTOS

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento al Dr. Galo Rafael Urrea Garcia por su invaluable orientación y liderazgo durante el desarrollo de mi tesis. Su experiencia, sabiduría y dedicación han sido elementos fundamentales para el éxito de este trabajo de investigación. Dedico este logro a su destacada mentoría y aporte significativo a mi formación profesional.

Mi profundo agradecimiento a la Dra. Ofelia Landeta Escamilla por su guía, compromiso y apoyo continuo a lo largo de mi programa de maestría. Su liderazgo como coordinadora y tutora ha sido esencial para mi desarrollo académico. Este logro refleja la calidad de su instrucción y el impacto positivo que ha tenido en mi formación como profesional.

Dedico este logro al Instituto Tecnológico de Orizaba, cuya excelencia académica y compromiso con la formación integral de sus estudiantes han sido cruciales en mi camino hacia el éxito profesional. Agradezco a la institución por proporcionar un entorno educativo estimulante y por ser la plataforma desde la cual he alcanzado este logro académico.

Quiero expresar mi reconocimiento al Organismo de becas CONACYT por su invaluable respaldo financiero, la beca 1182447, que ha hecho posible mi participación en este programa de maestría. Esta beca ha sido un factor determinante en mi formación académica y en la consecución de mis metas profesionales. Dedico este logro a CONACYT, agradeciendo su contribución significativa a mi desarrollo académico y profesional.

PRESENTACIONES EN CONGRESOS

- 2023 Ponencia Selectivity and yield evaluation in the design of control systems for a type of parallel reaction carried out in a tubular reactor. 9th International Conference on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT) 2023 del 3 al 6 de Julio, Roma, Italia. (García *et. al.*, 2023)
- 2023 Ponencia Evaluation of selectivity and yield in the design of control systems for the production of maleic anhydride carried out in a tubular reactor. 7th World Conference on Smart Trends in Systems, Security, and Sustainability (WorldS4 2023) del 21 al 24 de Agosto, Londres, Reino Unido. (García *et. al.*, 2023)

PUBLICACIONES EN REVISTAS

G. -R. Isai, L. -S. Guadalupe, C. -L. Denis and U. -G. G. R., "Selectivity and Yield Evaluation in the Design of Control Systems for a Type of Parallel Reaction Carried Out in a Tubular Reactor," *2023 9th International Conference on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT)*, Rome, Italy, 2023, pp. 1494-1499, doi: 10.1109/CoDIT58514.2023.10284055.

PUBLICACIONES EN LIBROS

Garcia-Rojas, I., Urrea-Garcia, G.R., Luna-Solano, G., Cantu-Lozano, D. (2024). Evaluation of Selectivity and Yield in the Design of Control Systems for the Production of Maleic Anhydride Carried Out in a Tubular Reactor. In: Nagar, A.K., Jat, D.S., Mishra, D., Joshi, A. (eds) *Intelligent Sustainable Systems. WorldS4 2023. Lecture Notes in Networks and Systems*, vol 803. Springer, Singapore. https://doi.org/10.1007/978-981-99-7569-3_13



EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO

Instituto Tecnológico de Orizaba
División de Estudios de Posgrado e Investigación

Orizaba, Veracruz, **20/febrero/2024**

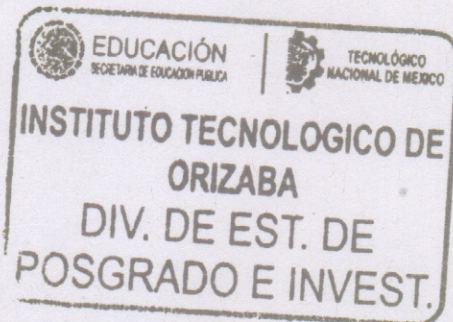
Dependencia: División de Estudios de
Posgrado e Investigación
Asunto: Autorización de Impresión
Opción: I

C. Isaí García Rojas
Candidato a Grado de Maestro en
Ciencias en Ingeniería Química
PRESENTE.-

De acuerdo con el Reglamento de Titulación vigente de los Centros de Enseñanza Técnica Superior, dependiente de la Dirección General de Institutos Tecnológicos de la Secretaría de Educación Pública y habiendo cumplido con todas las indicaciones que la Comisión Revisora le hizo respecto a su Trabajo Profesional titulado:

"Diseño de sistemas de control para un tipo de reacción en paralelo
realizada en un reactor tubular".

Comunico a usted que este Departamento concede su autorización para que proceda a la impresión del mismo.



ATENTAMENTE

Excelencia en Educación Tecnológica®
CIENCIA - TÉCNICA - CULTURA®

Dra. Ofelia Landeta Escamilla
Encargada de la División de Estudios
de Posgrado e Investigación

OLE/NAVC

OC-13-F06



Av. Oriente 9 Núm.852, Colonia Emiliano Zapata. C.P. 94320 Orizaba, Veracruz.
Tel. 01 (272)1105360 e-mail: dir_orizaba@tecnm.mx tecnm.mx | orizaba.tecnm.mx



2024
Felipe Carrillo
PUERTO
REPRESENTANTE DEL PUEBLO
DEL MAGAD



EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO

Instituto Tecnológico de Orizaba
División de Estudios de Posgrado e Investigación

Orizaba, Veracruz, 01/febrero/2024
Asunto: Revisión de trabajo escrito

C. CUAUHTÉMOC SÁNCHEZ RAMÍREZ
JEFE DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS
DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN
P R E S E N T E.-

Los que suscriben, miembros del jurado, han realizado la revisión de la Tesis del (la) C.

ISAÍ GARCÍA ROJAS

La cual lleva el título de:

**DISEÑO DE SISTEMAS DE CONTROL PARA UN TIPO DE REACCIÓN EN PARALELO REALIZADA
EN UN REACTOR TUBULAR**

Y concluyen que se acepta.

ATENTAMENTE

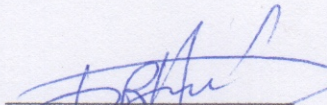

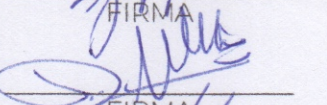
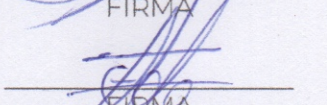
Excelencia en Educación Tecnológica®
CIENCIA - TÉCNICA - CULTURA®

PRESIDENTE: DR. GALO RAFAEL URREA GARCÍA

SECRETARIO: DRA. GUADALUPE LUNA SOLANO

VOCAL: DR. DENIS CANTÚ LOZANO

VOCAL SUP.: DR. EUSEBIO BOLAÑOS REYNOSO


FIRMA

FIRMA

FIRMA

FIRMA

TA-09-18



Av. Oriente 9 Núm.852, Colonia Emiliano Zapata. C.P. 94320 Orizaba, Veracruz.
Tel. 01 (272)1105360 e-mail: dir_orizaba@tecnm.mx tecnm.mx | orizaba.tecnm.mx



Declaración de originalidad y cesión de derechos

Orizaba, Veracruz, el día 22 del mes de Febrero del año 2024.

El(la) que suscribe

C. Isai García Rojas

Declaro que esta tesis, que tiene una extensión de 105 cuartillas, ha sido escrita por mí y constituye el registro escrito del trabajo de la tesis titulada

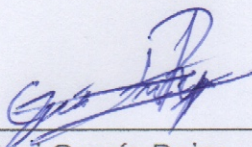
"Diseño de sistemas de control para un tipo de reacción en paralelo realizada en un reactor tubular"

del programa: Maestría en Ciencias en Ingeniería Química bajo la asesoría y dirección del (la) Dr. Galo Rafael Urrea García y no ha sido sometida en ninguna otra institución previamente.

Todos los datos y las referencias a materiales ya publicados están debidamente identificados con su respectivo crédito e incluidos en las notas bibliográficas y en las citas que se destacan como tal y, en los casos que así lo requieran, cuento con las debidas autorizaciones de quienes poseen los derechos patrimoniales. Por lo tanto, me hago responsable de cualquier litigio o reclamación relacionada con derechos de propiedad intelectual, exonerando de toda responsabilidad al Tecnológico Nacional de México campus Orizaba.

También declaro que, al presentar esta tesis, cedo los derechos del trabajo al Tecnológico Nacional de México campus Orizaba para su difusión, con fines académicos y de investigación, bajo las regulaciones propias de la institución y que si existe algún acuerdo de confidencialidad de la información lo haré saber en forma escrita para que se omitan las secciones correspondientes.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y del director del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección: depi_orizaba@tecnm.mx. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente de este.



Isai García Rojas

RESUMEN

Diseño de sistemas de control para un tipo de reacción en paralelo realizada en un reactor tubular

Elaborado por: IQ. Isai Garcia Rojas

Dirigida por: Dr. Galo Rarael Urrea Garcia

El estudio se centra en examinar el impacto de la estructura de control en una reacción en paralelo, abordando específicamente la producción de óxido de etileno en un reactor tubular y la generación de anhídrido maleico a partir de butano. Para llevar a cabo este análisis, se emplea simulación dinámica utilizando Fortran 95, permitiendo la creación de perfiles de concentración y temperatura mediante métodos como Runge-Kutta 4/5 y Euler modificado, y teniendo en cuenta los balances de materia y energía.

La estrategia de control adoptada implica el uso de un controlador en cascada IMC basado en las reglas de Skogestad, específicamente orientado hacia la composición-temperatura. Este controlador busca lograr una respuesta ágil para ajustar la temperatura de la chaqueta o la velocidad de flujo, manteniendo la concentración en el punto óptimo y evaluando su impacto en la selectividad y rendimiento.

Los resultados obtenidos revelan que el control ejerce una influencia significativa en la selectividad y el rendimiento, con posibilidades de incremento o decremento dependiendo de las perturbaciones en la concentración o temperatura de alimentación. Aunque el controlador mantiene la concentración en el set-point deseado, se evidencia su capacidad para afectar la selectividad y rendimiento. En conclusión, la posición del sensor también desempeña un papel clave, indicando que la estructura de control es esencial en la producción de óxido de etileno, con potenciales efectos positivos o negativos en ambos aspectos.

ABSTRACT

Control System Design for a Parallel Reaction Type Conducted in a Tubular Reactor

By: IQ. Isai Garcia Rojas

Advisor: Dr. Galo Rarael Urrea Garcia

The study focuses on examining the impact of the control structure in a parallel reaction, specifically addressing the production of ethylene oxide in a tubular reactor and the generation of maleic anhydride from butane. To conduct this analysis, dynamic simulation using Fortran 95 is employed, allowing the creation of concentration and temperature profiles through methods such as Runge-Kutta 4/5 and modified Euler, while considering material and energy balances.

The adopted control strategy involves the use of a cascade IMC controller based on Skogestad's rules, specifically oriented towards composition-temperature. This controller aims to achieve a prompt response to adjust the jacket temperature or flow rate, maintaining concentration at the optimum point and assessing its impact on selectivity and yield.

The results obtained reveal that the control significantly influences selectivity and yield, with possibilities of increase or decrease depending on disturbances in feed concentration or temperature. Although the controller keeps the concentration at the desired set-point, its capacity to affect selectivity and yield is evident. In conclusion, the sensor's position also plays a crucial role, indicating that the control structure is essential in ethylene oxide production, with potential positive or negative effects on both aspects.

ÍNDICE

INDICE DE FIGURAS	IX
INDICE DE TABLAS	IX
NOMENCLATURA.....	XV
INTRODUCCIÓN	16
OBJETIVOS.....	18
OBJETIVO GENERAL	18
OBJETIVOS ESPECÍFICOS	18
CAPÍTULO 1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS	20
1.1 ANTECEDENTES	20
1.2 ESTADO DEL ARTE	23
1.3 REACCIONES EN PARALELO	27
1.4 REACTORES DE FLUJO CONTINUO.....	31
1.5 REACTOR TUBULAR	31
1.6 ELIMINAR LA INFLUENCIA DE LAS INTERFERENCIAS O PERTURBACIONES EXTERNAS.....	33
1.7 GARANTIZAR LA ESTABILIDAD DE UN PROCESO.....	34
1.8 DISEÑAR UN CONTROLADOR ANTICIPADO PARA UN PROCESO.....	35
1.9 LA NOCIÓN DE ESTABILIDAD	36
1.10 CONTROL PROPORCIONAL (P).....	37
1.11 CONTROL PROPORCIONAL – INTEGRAL (PI).....	40
1.12 CONTROLADOR PROPORCIONAL – INTEGRAL – DERIVATIVO (PID)	42
1.13 CONTROL DE MODELADO INTERNO (IMC)	44
1.14 TIEMPO MUERTO.....	46
1.15 FUNCIÓN ESCALÓN	48
1.16 CONTROL EN CASCADA.....	49
CAPITULO 2 MATERIALES Y MÉTODOS	52
2.1 MATERIALES.....	53
2.2 CASOS DE ESTUDIO.....	53
2.3. MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS	58
2.3.1 MÉTODO RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN	59
2.4. CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO	59
2.5. DISEÑO DEL CONTROLADOR	62
2.6. ERROR DE INTEGRACIÓN MÍNIMA	63
2.7. EVALUACIÓN DE LA SELECTIVIDAD Y RENDIMIENTO	64

CAPITULO 3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	67
3.1 SIMULACIÓN DINÁMICA DEL PROCESO DEL ÓXIDO DE ETILENO	67
3.2 CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DEL ÓXIDO DE ETILENO	70
3.3 DISEÑO DEL CONTROLADOR DEL ÓXIDO DE ETILENO	73
3.4 RESULTADOS DEL CONTROLADOR DEL ÓXIDO DE ETILENO	75
3.5 RESULTADOS DE LA INTEGRAL ABSOLUTA DEL ERROR DEL ÓXIDO DE ETILENO	77
3.6 RESPUESTA DE LA SELECTIVIDAD Y RENDIMIENTO DEL ÓXIDO DE ETILENO	79
3.7 SIMULACIÓN DINÁMICA DEL PROCESO DEL ANHÍDRIDO MALEICO	81
3.8 CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DEL ANHÍDRIDO MALEICO	82
3.9 DISEÑO DEL CONTROLADOR DEL ANHÍDRIDO MALEICO	85
3.10 RESULTADOS DEL CONTROLADOR DEL ANHÍDRIDO MALEICO	87
3.11 RESULTADOS DE LA INTEGRAL ABSOLUTA DEL ERROR DEL ANHÍDRIDO MALEICO	91
3.12 RESPUESTA DE LA SELECTIVIDAD Y RENDIMIENTO DEL ANHÍDRIDO MALEICO	93
3.13 CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DEL ÓXIDO DE ETILENO CAMBIANDO LA VARIABLE MANIPULADA	98
3.14 DISEÑO DEL CONTROLADOR DEL ÓXIDO DE ETILENO CAMBIANDO LA VARIABLE MANIPULADA	101
3.15 RESULTADOS DEL CONTROLADOR DEL ÓXIDO DE ETILENO CAMBIANDO LA VARIABLE MANIPULADA	103
3.16 RESULTADOS DE LA INTEGRAL ABSOLUTA DEL ERROR DEL ÓXIDO DE ETILENO CAMBIANDO LA VARIABLE MANIPULADA	105
3.17 RESPUESTA DE LA SELECTIVIDAD Y RENDIMIENTO DEL ÓXIDO DE ETILENO CAMBIANDO LA VARIABLE MANIPULADA	107
3.18 EVALUACIÓN DE RESULTADOS	110
 CONCLUSIÓN Y RECOMENDACIONES	 114
 REFERENCIAS	 117

INDICE DE FIGURAS

Figura 1.2 Patrones de contacto para varias combinaciones de alta y baja concentraciones de reactivos en operaciones de flujo continuo (Levenspiel, 1999).	30
Figura 1.3 Reactor tubular de flujo pistón (Fogler H. S., 2020).	31
Figura 1.4 Balances de moles en especies j en volumen ΔV (Fogler H. S., 2020).	32
Figura 1.5 Reactor Tubular (Fogler H. S., 2020).	33
Figura 1.6a Respuesta de sistema estable Figura 1.6b Respuestas alternativas de sistemas inestables, (Stephanopoulos, 1984).	35
Figura 1.7 Configuración de control anticipativo, (Stephanopoulos, 1984).	35
Figura 1.8 (a) respuestas estables y 1.8(b) inestables, (Stephanopoulos, 1984).	37
Figura 1.9 Respuestas de K_c variando en un proceso a lo largo del tiempo, (Stephanopoulos, 1984).	39
Figura 1.10 se muestra la respuesta de un proceso del nivel bajo la acción de controladores P y PI, (Stephanopoulos, 1984).	42
Figura 1.11 Diagrama de bloques para el control de modelado interno (IMC), (Stephanopoulos, 1984).	44
Figura 1.12 Proceso térmico, (Smith & Corripio, 1997).	47
Figura 1.13 Respuesta de un proceso térmico a un cambio de escalón en la temperatura de entrada, (Smith & Corripio, 1997).	47
Figura 1.14 Respuesta escalonada de primer orden (Smith & Corripio, 1997).	48
Figura 1.15 Respuesta de la temperatura del reactor a un cambio de -25°C en la temperatura de alimentación al calentador (Smith & Corripio, 1997).	50
Figura 2.1 Diagrama del Proceso.	52
Figura 2.2 Parámetros del modelo POMTM, (Smith & Corripio, 1991).	61
Figura 2.3 Definición de las integrales de error para cambios en la perturbación y al punto de control, Smith y Corripio, (Smith & Corripio, 1991).	64
c)	69
Figura 3.2 a) Perfil de Concentración de Óxido de Etileno, b) Perfil de Concentración del Dióxido de Carbono, c) Perfil de Concentración del Agua.	69
Figura 3.3 Perfil de Temperatura del Reactor.	70
Figura 3.6 a) Salto escalón en la Concentración de Salida del Óxido de Etileno, b) Salto escalón en la Temperatura Interna en el Punto 0.3.	72
Después de realizar los cálculos necesarios para generar la ecuación de primer orden con tiempo muerto, tal como se describe la Ec. 3.1, se obtuvo la Ec. 3.3, que describe la concentración de óxido de etileno.	72
Después de realizar los cálculos necesarios para generar la ecuación de primer orden con tiempo muerto, tal y como se describe la Eco. 3.4, se obtuvo la Ec. 3.6, que describe la temperatura interna en punto 0.3.	72
Figura 3.7 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Óxido de Etileno en el Punto 0.3 con Perturbación en la Concentración Entrada, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con perturbación en la Concentración de Alimentación.	76
Figura 3.8 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Óxido de Etileno en el Punto 0.3 con Perturbación en la Temperatura de Alimentación, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con perturbación en la Temperatura de Alimentación.	77
Figura 3.9 a) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación en la Concentración de Alimentación, b) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación en la Temperatura de Alimentación.	77
Figura 3.10 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación en la Concentración en el Punto 0.3, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación en la Concentración en el Punto 0.3.	79
Figura 3.11 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación en la Temperatura en el Punto 0.3, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación en la Temperatura en el Punto 0.3.	80
Figura 3.12 a) Perfil de Concentración de Butano, b) Perfil de Concentración del Anhídrido Maleico.	81
Figura 3.13 Perfil de Temperatura del Reactor.	82
Figura 3.15 a) Salto escalón en la Concentración de Anhídrido Maleico, b) Salto escalón en la Temperatura Interna en el Punto 0.1.	84

Después de realizar los cálculos necesarios para generar la ecuación de primer orden con tiempo muerto, tal como se describe la Ec. 3.10, se obtuvo la Ec. 3.12, que describe la concentración de anhídrido maleico. _____	84
Después de realizar los cálculos necesarios para generar la ecuación de primer orden con tiempo muerto, tal y como se describe la Ec. 3.13, se obtuvo la Ec. 15, que describe la temperatura interna en punto 0.1. _____	84
Figura 3.16 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Anhídrido Maleico en el Punto 0.1 con Perturbación -5 % en la Concentración de Alimentación, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con Perturbación -5 % en la Concentración de Alimentación. _____	88
Figura 3.17 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Anhídrido Maleico en el Punto 0.1 con Perturbación -5 % en la Temperatura de Alimentación, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con Perturbación -5 % en la Temperatura de Alimentación. _____	89
Figura 3.18 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Anhídrido Maleico en el Punto 0.1 con Perturbación +5 % en la Concentración de Alimentación, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con Perturbación +5 % en la Concentración de Alimentación. _____	90
Figura 3.19 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Anhídrido Maleico en el Punto 0.1 con Perturbación +5 % en la Temperatura de Alimentación, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con Perturbación +5 % en la Temperatura de Alimentación. _____	91
Figura 3.20 a) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación -5 % en la Concentración de Alimentación, b) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación -5 % en la Temperatura de Alimentación. _____	91
Figura 3.21 a) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación +5 % en la Concentración de Alimentación, b) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación +5 % en la Temperatura de Alimentación. _____	92
Figura 3.22a Respuesta del Rendimiento con Perturbación -5 % en la Concentración en el Punto 0.1, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación -5 % en la Concentración en el Punto 0.1. _____	94
Figura 3.23 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación -5 % en la Temperatura en el Punto 0.1, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación -5 % en la Temperatura en el Punto 0.1. _____	95
Figura 3.24a Respuesta del Rendimiento con Perturbación +5 % en la Concentración en el Punto 0.3, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación +5 % en la Concentración en el Punto 0.1. _____	95
Figura 3.25 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación +5 % en la Temperatura en el Punto 0.3, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación +5 % en la Temperatura en el Punto 0.3. _____	96
Figura. 3.26 Esquema del Control en Cascada con la Velocidad del Fluido como Variable Manipulada. _____	99
Figura 3.27 a) Salto escalón en la Concentración de Salida del Óxido de Etileno, b) Salto escalón en la Temperatura Interna en el Punto 0.4. _____	100
Figura 3.28 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Anhídrido Maleico en el Punto 0.4 con Perturbación 10 % en la Concentración de Alimentación, b) Respuesta de la Velocidad del Fluido con Perturbación 10 % en la Concentración de Alimentación. _____	104
Figura 3.29 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Óxido de Etileno en el Punto 0.4 con Perturbación 10 % en la Temperatura de Alimentación, b) Respuesta de la Velocidad del Fluido con Perturbación 10 % en la Temperatura de Alimentación. _____	105
Figura 3.30 a) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación en la Concentración de Alimentación, b) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación en la Temperatura de Alimentación. _____	106
Figura 3.31 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación en la Concentración en el Punto 0.4, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación en la Concentración en el Punto 0.4. _____	108
Figura 3.32 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación en la Temperatura en el Punto 0.4, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación en la Temperatura en el Punto 0.4. _____	109

INDICE DE TABLAS

Tabla 2.1 Parámetros del reactor para la Oxidación de Etileno.	55
Tabla 2.2. Entalpía de las reacciones.	55
Tabla 2.3 Parámetros del reactor para la Oxidación de Etileno.	57
Tabla 2.4. Entalpía de las reacciones.	57
Tabla 3.1 División de Puntos de Interés	70
Tabla 3.2 Parámetros del sistema ante cambio en la temperatura de la chaqueta (+10 %) para el caso de estudio seleccionado.	74
Tabla 3.3 Parámetros del controlador en cascada utilizando los pasos de IMC	75
Tabla 3.4 Integral Absoluto del Error utilizando la Temperatura de la Chaqueta como Variable Manipulada.	78
Tabla 3.5 Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en los puntos de control.	80
Tabla 3.6 División de Puntos de Interés	82
Tabla 3.7 Parámetros del sistema ante cambio en la temperatura de la chaqueta (+5 %) para el caso de estudio seleccionado.	86
Tabla 3.8 Parámetros del controlador en cascada utilizando los pasos de IMC	87
Tabla 3.9 Integral Absoluto del Error con Perturbación -5 %.	92
Tabla 3.10 Integral Absoluto del Error con Perturbación +5 %.	93
Tabla 3.11 Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en los puntos de control con Perturbación -5 %.	97
Tabla 3.12 Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en los puntos de control con Perturbación +5 %.	97
Tabla 3.13 División de Puntos de Interés	98
Tabla 3.14 Parámetros del sistema ante cambio en la velocidad de flujo (+5 %) para el caso de estudio seleccionado.	102
Tabla 3.15 Parámetros del controlador en cascada utilizando los pasos de IMC con la Velocidad de Flujo como Variable Manipulada.	103
Tabla 3.16 Integral Absoluto del Error utilizando la Velocidad de Flujo como Variable Manipulada.	106
Tabla 3.17 Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en los puntos de control.	109
Tabla 3.18 Comparación del Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en la Producción de Óxido de Etileno.	110
Tabla 3.19 Comparación del Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en la Producción de Anhídrido Maleico.	111
Tabla 3.20 Relación de valores de ambas reacciones.	113

NOMENCLATURA

C	Concentración	mol m^{-3}
C_p	Calor específico	$\text{KJ mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
D	Calor de reacción	$\text{KJ mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
ΔH	Coeficiente de difusión de masa	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
k	Velocidad de reacción	m s^{-1}
L	Longitud del reactor	m
R	Constante universal de los gases	$\text{KJ mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
r_0	Radio del reactor	m
T	Temperatura	K
T_j	Temperatura de la chaqueta	K
U	Coeficiente de transferencia de calor	$\text{KJ m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$
v	Velocidad del fluido	m s^{-1}
z	Posición axial del reactor	m
$G(s)$	Representación general de una función de transferencia	
IMC	Internal Model Control	
POMTM	Primer orden más tiempo muerto	
ρ	Densidad del fluido	mol m^{-3}
θ	Tiempo muerto	s
i	1,2, 3, ...,n	
\int	Integral	
T_j, C_o	Composición-temperatura de la chaqueta	
T_j, T_m	Temperatura del reactor-temperatura de la chaqueta	

INTRODUCCIÓN

Los reactores químicos suelen ser el corazón de los procesos químicos, ya que es donde tienen lugar las reacciones químicas y se producen los productos químicos deseados. Se deben determinar las mejores condiciones de funcionamiento para optimizar el rendimiento del producto al tiempo que se limitan los residuos y se evita la escorrentía térmica. Si cualquier proceso químico exotérmico se ve comprometido, una o varias funciones, como un fallo de refrigeración o unas condiciones de funcionamiento inadecuadas, pueden aumentar la tasa de generación de calor en comparación con la tasa de flujo de calor de extracción debido a las reacciones químicas. El aumento de temperatura resultante provoca la descomposición de los compuestos, lo que lleva a la sobrepresurización del reactor y a la explosión, Leveneur *et al.*, (2016).

El objetivo del control automático es regular las variables del proceso y aumentar la fiabilidad operativa. Se han desarrollado configuraciones de control basadas en mediciones de temperatura para superar los inconvenientes de los retrasos en las mediciones de concentración. Estas configuraciones se conocen como esquemas de control en cascada composición-temperatura, Hua y Jutan (2000).

Para que el proceso funcione de forma segura y eficiente se ha investigado la ubicación e implementación de más de un punto de medida de temperatura y se propuso un esquema de control en cascada de seis con cuatro medidas de temperatura en la región del punto caliente para controlar un reactor tubular de lecho fijo, Jesús *et al.*, (2013).

El controlador de modelado interno (IMC, por sus siglas en inglés) es un enfoque de control avanzado que se basa en la modelización del proceso a controlar mediante un modelo interno. Este modelo se usa para diseñar un controlador que ajusta el proceso según las condiciones y requerimientos deseados.

Un controlador eficiente debe mantener la salida del proceso dentro de los límites indicados, incluso ante perturbaciones externas o cambios en las condiciones de operación. Además, el controlador debe ser capaz de ajustarse rápidamente para minimizar los tiempos de respuesta y mejorar la eficiencia del proceso.

Cuando se tienen reacciones en paralelo, es decir, varias reacciones que pueden ocurrir simultáneamente, la selectividad se refiere a la capacidad de un reactivo para ser selectivamente consumido en una reacción específica, mientras que el rendimiento se refiere a la cantidad total de producto formado por todas las reacciones.

La selectividad de una reacción en paralelo depende de varios factores, incluyendo la energía de activación y la concentración de los reactivos, así como las características de los catalizadores presentes en el sistema. Una mayor selectividad se logra con catalizadores selectivos y ajustando las condiciones de reacción, como la temperatura y la presión.

En cuanto al rendimiento, se puede optimizar mediante la selección adecuada de los reactivos y catalizadores, y mediante la optimización de las condiciones de reacción. El rendimiento también puede ser mejorado mediante la eliminación de reacciones competitivas no deseadas, ya sea mediante la eliminación de los reactivos involucrados en estas reacciones, o mediante la selección de catalizadores que inhiban estas reacciones.

El presente trabajo consiste en la evaluación del efecto de la posición del sensor de temperatura para el diseño del control en cascada sobre la selectividad y el rendimiento de las reacciones en paralelo.

OBJETIVOS

Objetivo General

Estudiar la relación entre el diseño de sistemas de control con los parámetros de modelos de reacción en paralelo realizadas en un reactor tubular.

Objetivos Específicos

1. Seleccionar el caso de estudio y analizar el modelo matemático que describe el proceso.
2. Implementar algoritmos de solución numérica que describan el comportamiento del proceso realizado en el reactor tubular.
3. Diseñar e implementar una estructura de control en cascada PI en un reactor tubular.
4. Evaluar la estructura de control diseñada frente a la selectividad y rendimiento de la reacción.

CAPITULO 1

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

CAPÍTULO 1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

1.1 Antecedentes

En el estudio presentado por Petric y Karić (2019), han desarrollado un modelo matemático sencillo para simular la síntesis de anhídrido maleico a partir de n-butano en un reactor industrial de lecho fijo y determinar cómo los parámetros de entrada del proceso afectan el rendimiento del reactor. Se han empleado diez modelos cinéticos combinados con un modelo de reactor simplificado. La validación del modelo se realizó utilizando tres conjuntos de datos de proceso obtenidos de un reactor industrial de lecho fijo. Los resultados de la simulación mostraron una buena concordancia con los valores medidos para los tres modelos cinéticos.

Los caudales de entrada de n-butano y oxígeno son los parámetros de entrada más influyentes. Se observó que el rendimiento de anhídrido maleico es más sensible a los cambios en los parámetros de entrada que la conversión de n-butano y la selectividad de anhídrido maleico. Se demostró que al aumentar el flujo molar de entrada de n-butano en un 20 %, la conversión de n-butano y el rendimiento de anhídrido maleico disminuyen en un 3,3 % y un 5,0 %, respectivamente, mientras que la selectividad de anhídrido maleico aumenta en un 6,7 %.

Para aumentar la selectividad del anhídrido maleico, es necesario reducir la temperatura de entrada de la mezcla de reacción, la presión de entrada de la mezcla de reacción y el flujo molar de entrada de oxígeno, y aumentar el flujo molar de entrada de n-butano.

Pérez Sánchez *et. al.* (2022) simularon el proceso de producción de óxido de etileno (EO) a partir de la oxidación catalítica de etileno utilizando el simulador ChemCAD. Se obtuvieron curvas de calor para cada intercambiador de calor de carcasa y tubos utilizados, y se determinaron el caudal y la composición de las corrientes más importantes que intervienen en el proceso productivo.

También se realizó un estudio de sensibilidad para establecer la influencia de una disminución de la temperatura de alimentación del agua de lavado a los absorbedores sobre la cantidad de EO a obtener en la columna de destilación. Aunque el EO se obtuvo de la columna de destilación, para obtener mejor pureza, la reacción se realizó con dos reactores de lecho fijo, cada reactor tenía como principal objetivo, obtener el producto de la reacción paralela, mientras en uno se obtenía el óxido de etileno, en otro producían $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$.

Braide *et. al.* (2021) realizaron el trabajo de investigación para el diseño de una planta de producción de óxido de etileno a partir de etileno de 2375 mol/hr. La planta tiene en cuenta el diseño de cuatro equipos principales: columnas manuales en la planta de óxido de etileno (camisa de enfriamiento, reactor, columna de destilación y depurador empacado).

Las ecuaciones de diseño para las columnas se desarrollaron para determinar el tamaño de las columnas. El modelo de rendimiento y los modelos de parámetros funcionales del reactor se desarrollaron para el proceso de evaluación del rendimiento. Los modelos desarrollados se simularon manualmente y también con un programa de software (MS EXCEL) usando datos de la literatura. También se utilizaron software como Aspen HYSYS y MATLAB para generar algunas soluciones.

Se generó una tabla de rendimiento y también se produjo el dimensionamiento del reactor y las columnas. Los perfiles de los parámetros funcionales del reactor se obtuvieron a partir de los resultados simulados como se muestra en el trabajo de investigación. Cabe señalar que los resultados arrojados concuerdan con el fin y los objetivos de la investigación.

El dimensionamiento de las columnas, el reactor y el sistema de enfriamiento, la camisa de enfriamiento, se desarrollaron desde el primer principio.

Las camisas de enfriamiento se han usado para procesos con reactores de tanque, como sistemas por lotes o CSTR. Los costos más bajos obtenidos al usar una camisa de enfriamiento para mantener el proceso isotérmico frente al uso de un reactor tubular de intercambiador de calor es una ventaja económica importante.

Müller *et. al.* (2021) revisaron y discutieron críticamente el estado actual del modelado de la reacción de oxidación parcial selectiva más exigente aplicada industrialmente: la oxidación parcial de n-butano a anhídrido maleico.

Se examinan las descripciones de modelos teóricos de esta reacción de oxidación parcial que cubren todas las escalas de longitud relevantes: desde la modelización del sitio activo y los pasos elementales, modelos microcinéticos y macrocinéticos, hasta modelos de reactor en todas las escalas de longitud, desde reactores de laboratorio hasta reactores de producción de tamaño industrial.

En el manuscrito se incluyen los últimos desarrollos de CFD para entender mejor la transferencia de calor y masa en los lechos de catalizador industrial y los efectos de la estructura local del lecho. La contribución también cubre hallazgos experimentales relevantes con respecto a las especies o sitios catalíticamente activos en la superficie del catalizador, el mecanismo de reacción, así como consideraciones microcinéticas. Sesenta años de investigación han mejorado enormemente nuestra comprensión de la reacción de oxidación parcial selectiva. Una revisión crítica de la oxidación del n-butano y su catalizador industrialmente revela que aún quedan preguntas sin respuesta en todas las escalas de longitud y que aún existen inconsistencias en nuestra comprensión fundamental.

Esta situación surge del hecho de que el catalizador para la oxidación parcial de n-butano es un sistema altamente complejo y dinámico y su rendimiento depende de todos los detalles de su generación y su historial operativo.

1.2 Estado del arte

Kistanto y Hermawan (2020) describen los procesos de la serie tipo calentador - reactor que se utilizan a menudo en las industrias de procesos químicos. Dado que la temperatura de salida del reactor aumenta como resultado de la reacción exotérmica, esta temperatura debe mantenerse por debajo del límite de temperatura superior para reducir la formación de subproductos y evitar el ensuciamiento en los intercambiadores de calor del siguiente proceso.

Los objetivos del trabajo son proponer el nuevo controlador en cascada y compararlo con el controlador Proporcional - Integral (PI) calentador en serie con el reactor en flujo tapón (Calentador – PFR - Series) para producir benceno a través de la reacción de hidro-desalquilación. de tolueno (HDA).

El modelo A es el controlador PI anterior para mantener la temperatura de entrada del reactor, el modelo B es el nuevo controlador PI para mantener la temperatura de salida del reactor y el modelo C es el nuevo controlador Cascade para mantener las temperaturas de entrada y salida del reactor.

La principal perturbación del caudal de alimentación se realizó para examinar los tres modelos de control. Los tres modelos de control se examinaron rigurosamente en UniSim Design R451. Los parámetros de control PI se ajustaron usando el modo "autotuner" de UniSim.

Romero Bustamante *et. al.* (2017) proponen un esquema de control en cascada basado en un modelo robusto para la regulación de la composición en reactores químicos. El controlador se basa en un control de dos lazos en una configuración de composición y temperatura.

Se introducen observadores de estado para proporcionar robustez al controlador a través de la estimación de las incertidumbres del modelo agrupado. El segundo

bucle se introdujo con una elección favorable de la ecuación de Arrhenius como entrada de control virtual.

El diseño de control se ilustra en base a dos estudios de casos, un reactor tubular que exhibe dos dinámicas de temperatura (cuasilineal y de punto caliente) y un CSTR que presenta múltiples estados estacionarios. Los resultados numéricos indican que el controlador propuesto es robusto frente a perturbaciones externas, cambios de operación e incertidumbres del modelo.

Cuando se comenta sobre los métodos de control, Vasičkaninová *et. al.* (2019) tratan dos métodos de modelo de control predictivo (MPC) para el sistema no lineal representado por un reactor químico tubular de flujo pistón. El modelo matemático del reactor se describe mediante un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales no lineales.

Se estudió la aplicación de una estrategia de control predictivo basado en modelo de red neuronal (NNPC) y un modelo de control predictivo programado de ganancia (GS) para un reactor químico tubular como un sistema con parámetros distribuidos.

Se compararon los resultados de la simulación obtenidos mediante dos estrategias de control predictivo modelos logrados por un controlador PID convencional. La estrategia de control predictivo NNPC produjo las respuestas de control más efectivas, con sobrepasos más reducidos y valores superiores en el criterio de calidad numérico IAE.

Este controlador también aseguró el menor consumo de refrigerante, asegurando así la operación más económica con el menor consumo de energía necesario para lograr el objetivo de control. Como se aplica la técnica de control lineal, solo se asegura la estabilidad local.

Los resultados de la simulación confirman que NNPC como estrategia basada en un modelo no lineal es una buena herramienta para el control exitoso de los

reactores tubulares. Si se pierde el control de la temperatura de reacción, pueden desencadenarse reacciones secundarias o de descomposición que den lugar a una situación de fuga térmica.

Westerterp y Ptasykiski (1984) estudiaron la determinación del óxido de etileno en dos partes. Esta reacción se trabajó en un reactor tubular y cabe mencionar que la reacción es paralela. En la parte I se desarrolló un modelo y criterios para el diseño y operación segura de reactores tubulares refrigerados para múltiples reacciones del tipo paralelo. En esta Parte II, el modelo se extiende a reacciones paralelas con una estequiometría arbitraria.

Los resultados se aplican al proceso industrial de oxidación del etileno con oxígeno puro. Se muestra que los criterios derivados en el método descrito en la parte I está restringido a reacciones paralelas cuyas cinéticas son de primer orden o pueden ajustarse razonablemente bien mediante cinéticas de primer orden. Para reacciones consecutivas próximamente publicaremos un tratamiento similar.

Jelemensky *et. al.* (2006) presentan un enfoque de modelo para el análisis de riesgo y operabilidad basado en el modelado matemático de una unidad de proceso donde se utilizan tanto el análisis de estado estable, incluido el análisis de la multiplicidad de estados estables, como la simulación dinámica. Eligieron un reactor tubular heterogéneo para la producción de óxido de etileno a partir de etileno y oxígeno para identificar los peligros potenciales para el sistema real. Se desarrolló el código informático DYNHAZ que consta de un simulador de procesos y un generador del algoritmo HAZOP. Las desviaciones HAZOP derivadas y sus consecuencias las analizaron de forma similar el código DYNHAZ.

Se investigó teóricamente la posibilidad de mejorar la selectividad en redes de reacción en serie paralela utilizando diferentes estrategias de alimentación de reactivos.

Sascha *et. al.* (2004) consideran reactores tubulares isotérmicos donde los reactivos pueden introducirse en la entrada y encima de la pared. El último método de dosificación se puede realizar, por ejemplo, en un reactor de membrana.

La variable de control considerada es el perfil de dosificación de un reactivo a lo largo de la pared. Como función objetivo típica, se maximiza la fracción molar de un producto intermedio deseado a la salida del reactor. El perfil óptimo se calcula analíticamente bajo algunos supuestos utilizando el principio máximo de Pontryagin. Los resultados permiten comprender cómo las diferentes variables determinan la política de control.

La información de este enfoque se usa después para determinar numéricamente los perfiles óptimos mediante programación cuadrática secuencial en condiciones más generales. Los métodos de optimización discutidos parecen ser aplicables al análisis de problemas concretos.

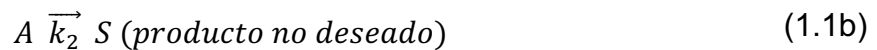
Como suposición esencial, se debe conocer la cinética de reacción subyacente. Los conceptos teóricos se pueden ampliar considerando también enfoques alternativos dirigidos a modular otros parámetros a lo largo de los reactores tubulares.

Aryana *et. al.* (2009) desarrollaron un modelo dinámico para evaluar el rendimiento de un reactor industrial de óxido de etileno, que utiliza un catalizador de plata para la epoxidación del etileno. El modelo combinó ecuaciones de velocidad cinética no lineal para el proceso de oxidación catalítica con ecuaciones de transferencia de masa y calor en el lecho empacado del reactor.

La desactivación del catalizador se modeló como una función no lineal del tiempo de funcionamiento y se comparó con los datos de la planta. El modelo se validó con datos experimentales obtenidos de un reactor industrial de EO y se investigaron las influencias de los parámetros operativos en el rendimiento del reactor. El modelo se utilizó para optimizar el rendimiento del reactor de óxido de etileno para maximizar la tasa de trabajo y la selectividad.

1.3 Reacciones en Paralelo

Las reacciones en paralelo son un tipo de reacciones múltiples donde, para poder entender su comportamiento se necesitan más de una expresión cinética para entender el comportamiento de esta. Si hablamos de reacciones múltiples, pueden haber de dos tipos, como se mencionó las reacciones en paralelo y en serie. Al estudiar este tipo de sistemas y ver lo complicado de sus sistemas también los pueden denominar como serie – paralelo. Las reacciones en paralelo son un estudio cuantitativo sobre la distribución del producto donde consideramos un elemento A por cada uno de los mecanismos de la reacción.



y de las siguientes ecuaciones cinéticas:

$$r_R = \frac{dC_R}{dt} = k_1 C_A^{a_1} \quad (1.2a)$$

$$r_S = \frac{dC_S}{dt} = k_2 C_A^{a_2} \quad (1.2b)$$

Ahora, si se divide la ecuación 1.2b por la ecuación 1.2a, se puede obtener lo que es una medida de las velocidades relativas de las formas S y R:

$$\frac{r_S}{r_R} = \frac{dC_S}{dC_R} = \frac{k_2}{k_1} C_A^{a_2-a_1} \quad (1.3)$$

C_A es el único factor ajustable y controlable en esta ecuación (k_1 , k_2 , a_1 y a_2 son constantes para un sistema específico a una temperatura dada). Mantener una baja concentración de C_A en todo el reactor puede lograrse a través del uso de un reactor

de flujo mixto, altas conversiones, incremento de los inertes en la alimentación o disminución de la presión en los sistemas de fase gaseosa. En contraste, para mantener una alta concentración de C_A se puede utilizar un reactor de flujo pistón o por lotes, mantener bajas conversiones, eliminar inertes de la alimentación o aumentar la presión en los sistemas de fase gaseosa.

En el caso de las reacciones descritas en la ecuación 1.1a, se debe determinar si la concentración de A debe ser alta o baja. Si $a_1 > a_2$, o la reacción deseada es de mayor orden que la reacción no deseada, la ecuación 1.3 indica que es preferible una alta concentración de reactivo para aumentar la relación R/S . En consecuencia, un reactor de flujo pistón o discontinuo favorecería la formación del producto R y requeriría un tamaño mínimo de reactor. Si $a_1 < a_2$, o la reacción deseada es de orden inferior a la reacción no deseada, se necesita una baja concentración de reactivo para favorecer la formación de R. Sin embargo, esto también requeriría un reactor de flujo mixto de gran tamaño.

Si $a_1 = a_2$, o las dos reacciones son del mismo orden, la ecuación 1.3 se convierte

$$\frac{r_S}{r_R} = \frac{dC_S}{dC_R} = \frac{k_2}{k_1} = \text{constante} \quad (1.4)$$

Por lo tanto, la distribución del producto está fijada solo por k_2/k_1 y no se ve afectada por el tipo de reactor utilizado.

También podemos controlar la distribución del producto variando k_2/k_1 . Esto se puede hacer de dos formas:

Existen dos formas de controlar la distribución de productos en una reacción química: cambiando el nivel de temperatura de operación o mediante el uso de un catalizador. Si las energías de activación de las dos reacciones son diferentes, ajustar la temperatura puede modificar la relación k_1/k_2 .

Por otro lado, el uso de un catalizador puede ser una forma más efectiva de controlar la selectividad del proceso al deprimir o acelerar reacciones específicas. Esta es una característica clave de los catalizadores y puede ser más beneficiosa que los métodos anteriormente mencionados.

$$A + B \xrightarrow{k_1} R, \text{ deseada} \quad r_R = \frac{dC_R}{dt} = k_1 C_A^{a_1} C_B^{b_1} \quad (1.5)$$

$$A + B \xrightarrow{k_1} S, \text{ no deseada} \quad r_S = \frac{dC_S}{dt} = k_2 C_A^{a_2} C_B^{b_2} \quad (1.6)$$

Se divide la ecuación 1.5 y 1.6 tenemos:

$$\frac{r_S}{r_R} = \frac{dC_S}{dC_R} = \frac{k_2}{k_1} C_A^{a_2-a_1} C_B^{b_2-b_1} \quad (1.7)$$

y como R es el producto que se desea, se ha de hacer un mínimo de valor de

$$\frac{dC_S}{dC_R} \quad o \quad \frac{k_2}{k_1} C_A^{a_2-a_1} C_B^{b_2-b_1} \quad (1.8)$$

Se resume los hallazgos cualitativos de la siguiente manera:

El control adecuado de la distribución del producto en reacciones en paralelo depende del nivel de concentración de los reactivos. Una concentración alta de reactivo favorece la reacción de mayor orden, mientras que una concentración baja no tiene efecto en la distribución del producto para reacciones del mismo orden.

Si hay dos o más reactivos, se obtienen combinaciones de concentraciones altas y bajas controlando la concentración de los materiales de alimentación, con ciertos componentes en exceso y usando el patrón de contacto correcto de los fluidos reactivos. Las Figuras 1.1 y 1.2 muestran los métodos de contacto de dos fluidos

que reaccionan en operaciones continuas y no continuas que mantienen las concentraciones de estas componentes altas, bajas o una alta y la otra baja.

Antes de lograr el patrón de contacto más deseable, se deben considerar la cantidad de fluidos reactivos involucrados, la posibilidad de reciclado y el costo de posibles configuraciones alternativas. En general, el factor crítico para obtener una distribución favorable de productos en múltiples reacciones es el uso del patrón de contacto adecuado, Levenspiel (1999).

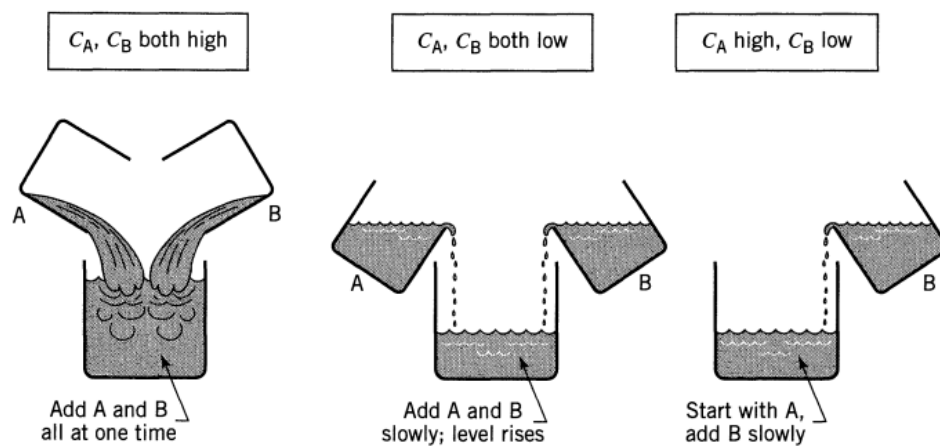


Figura 1.1 Patrones de contacto para varias combinaciones de altas y bajas concentraciones de reactivos en operaciones no continuas (Levenspiel, 1999).

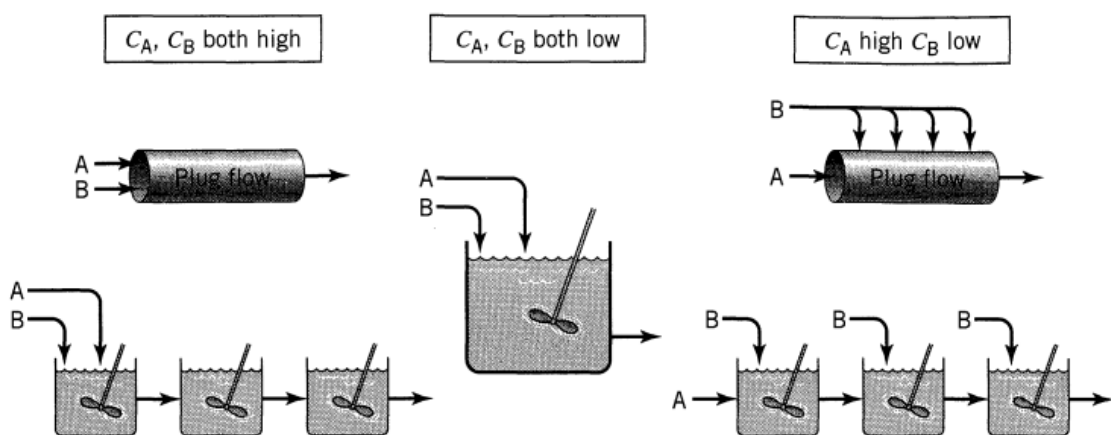


Figura 1.2 Patrones de contacto para varias combinaciones de alta y baja concentraciones de reactivos en operaciones de flujo continuo (Levenspiel, 1999).

1.4 Reactores de Flujo Continuo

Los reactores de flujo continuo casi siempre funcionan en estado estacionario. Consideraremos tres tipos: el reactor de tanque agitado continuo (CSTR), el reactor de flujo pistón (PFR) y el reactor de lecho empacado (PBR).

1.5 Reactor Tubular

Además de los reactores CSTR y discontinuos, otro tipo de reactores usados en la industria es el tubular. Consiste en una tubería cilíndrica y normalmente se opera en régimen permanente, al igual que el CSTR. Los reactores tubulares se utilizan con mayor frecuencia para reacciones en fase gaseosa. En el reactor tubular, los reactivos se consumen continuamente a medida que fluyen a lo largo del reactor.

Al modelar el reactor tubular, asumimos que la concentración varía continuamente en la dirección axial a través del reactor. En consecuencia, la velocidad de reacción, que es una función de la concentración para todas las reacciones excepto las de orden cero (ecuación 1.9), también variará axialmente. A los efectos del material presentado aquí, consideramos sistemas en los que el campo de flujo puede modelarse mediante un perfil de flujo de pistón (velocidad radial uniforme como en el flujo turbulento), como se muestra en la Figura 1.3.

$$-r_A = [\mathcal{K}_A(T)][\text{fn}(C_A, C_B, \dots)] \quad (1.9)$$

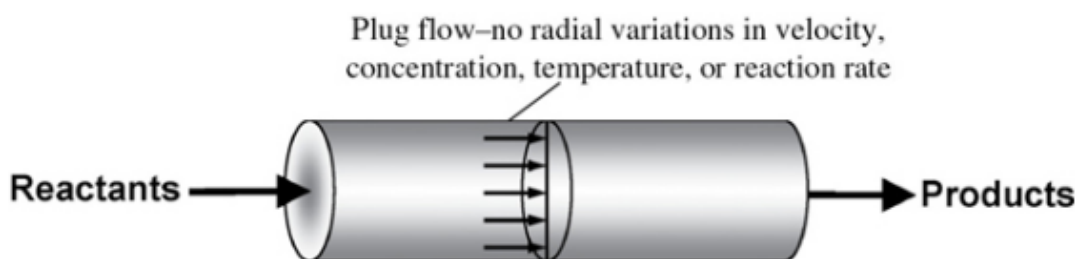


Figura 1.3 Reactor tubular de flujo pistón (Fogler H. S., 2020).

La ecuación general de balance de moles viene dada por la ecuación:

$$F_{j0} - F_j + \int^V r_j dV = \frac{dN_j}{dt} \quad (1.10)$$

La ecuación que usaremos para diseñar PFRs en estado estacionario se puede desarrollar de dos maneras: (1) directamente a partir de la ecuación (1.10) diferenciando con respecto al volumen V y luego reorganizando el resultado o (2) a partir de un balance de moles en especies j en un segmento diferencial del volumen del reactor ΔV .

Se elige la segunda forma de llegar a la forma diferencial del balance molar de PFR. El volumen diferencial, ΔV , que se muestra en la Figura 1.4, se elegirá lo suficientemente pequeño como para que no haya variaciones espaciales en la velocidad de reacción dentro de este volumen. Así, el término de generación, ΔG_j , es

$$\Delta G_j = \int^{\Delta V} r_j dV = r_j \Delta V \quad (1.11)$$

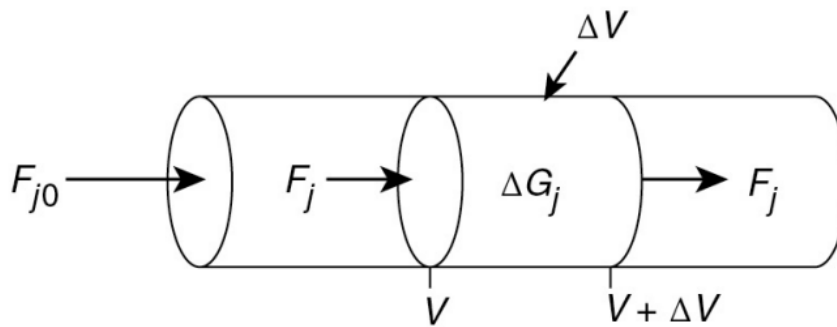


Figura 1.4 Balances de moles en especies j en volumen ΔV (Fogler H. S., 2020).

$$F_{j|V} - F_{j|V+\Delta V} + r_j \Delta V = 0 \quad (1.12)$$

Dividiendo la ecuación (1.12) por ΔV y reordenando

$$\left[\frac{F_{j|V+\Delta V} - F_{j|V}}{\Delta V} \right] = r_j \quad (1.13)$$

se nota que el término entre paréntesis se asemeja a la definición de un derivado

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left[\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \right] = \frac{df}{dx} \quad (1.14)$$

Tomando el límite cuando DV se aproxima a cero, obtenemos la forma diferencial del balance molar en estado estacionario en un PFR

$$\frac{dF_j}{dV} = r_j \quad (1.15)$$

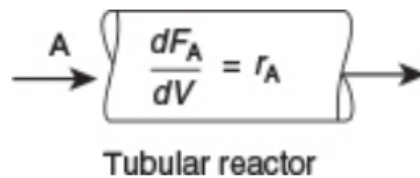


Figura 1.5 Reactor Tubular (Fogler H. S., 2020).

1.6 Eliminar la influencia de las interferencias o perturbaciones externas

En un proceso el objetivo más común de un controlador en una planta química es eliminar la influencia de las interferencias o perturbaciones externas. Tales perturbaciones, que denotan el efecto que el entorno (mundo externo) tiene sobre un reactor, separador, intercambiador de calor, compresor, etc., suelen estar fuera del alcance del operador. En consecuencia, necesitamos introducir un mecanismo de control que haga los cambios apropiados en el proceso para cancelar el impacto negativo que dichas perturbaciones puedan tener en la operación deseada de una planta química.

1.7 Garantizar la estabilidad de un proceso

La estabilidad de un proceso se refiere a la capacidad de un sistema o proceso para mantener su desempeño o comportamiento constante y predecible en el tiempo, pese a variaciones o perturbaciones externas o internas. En la Figura 1.6a, se observa que cuando el tiempo $t = t_0$ el valor constante de x se ve perturbado por algunos factores externos, pero a medida que pasa el tiempo el valor de x vuelve a su valor inicial y permanece allí.

Si x es una variable del proceso como la temperatura, la presión, la concentración o el caudal, decimos que el proceso es estable o se autorregula y no necesita intervención externa para su estabilización. Está claro que no se necesita ningún mecanismo de control para obligar a x a volver a su valor inicial.

A diferencia del comportamiento descrito, la variable representada en la figura 1.6b no regresa a su valor inicial después de que la perturbaran influencias externas. Los procesos cuyas variables siguen el patrón mostrado en la Figura 1.6b (curvas A, B, C) se denominan inestables y necesitan ser controlados externamente para estabilizar su comportamiento.

La explosión de un combustible de hidrocarburo con aire es un sistema tan inestable. Andar en bicicleta es un intento de estabilizar un sistema inestable y lo logramos pedaleando, dirigiendo e inclinando nuestro cuerpo de derecha a izquierda.

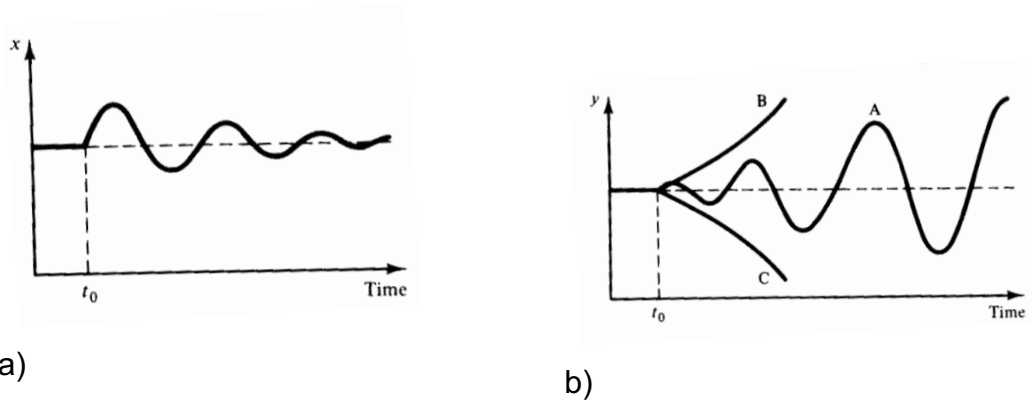


Figura 1.6a Respuesta de sistema estable. Figura 1.6b Respuestas alternativas de sistemas inestables, (Stephanopoulos, 1984) .

1.8 Diseñar un controlador anticipado para un proceso

En el arreglo de un control anticipado que se muestra en la Figura 1.7, se mide el valor de la perturbación y se anticipa a cuál será su efecto en la salida del proceso que queremos controlar.

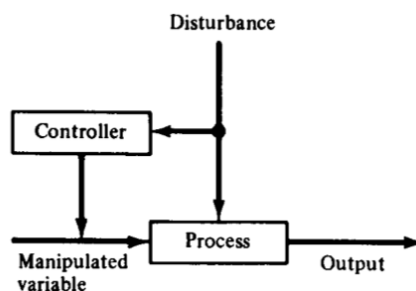


Figura 1.7 Configuración de control anticipativo, (Stephanopoulos, 1984).

Para mantener el valor de esta salida en el nivel deseado, se necesita cambiar el valor de la variable manipulada en una cantidad tal que elimine el impacto que tendría la perturbación en la salida. La manera en la que se debe cambiar la variable manipulada para cancelar el efecto de la perturbación. Es mediante las siguientes dos relaciones:

$$salida = f_1(perturbación) \quad (1.16)$$

$$salida = f_2(variable\ manipulada) \quad (1.17)$$

que los proporciona un modelo matemático del proceso. De hecho, si la salida va a permanecer igual, la variable manipulada debe tomar un valor tal que

$$f_1(perturbación) - f_2(variable\ manipulada) = 0 \quad (1.18)$$

En esta relación se demuestra muy vívidamente cuán importante es el modelado matemático para el diseño de un sistema de control anticipativo. De hecho, sin un buen y preciso modelado matemático no se puede diseñar sistemas de control anticipados eficientes.

1.9 La Noción de Estabilidad

Un sistema se consideraba inestable si, después de haber sido perturbado por un cambio de entrada, su salida "despegaba" y no volvía al estado inicial de reposo. Existen diferentes formas para definir si un sistema es estable o inestable, dependiendo de la rigurosidad matemática de la definición y su utilidad práctica para aplicaciones realistas.

La entrada acotada o estabilidad acotada se considera que un sistema dinámico es estable si por cada entrada acotada produce una salida acotada, independientemente de su estado inicial.

De acuerdo con la definición anterior, un sistema con respuesta como las de la Figura 1.8a es estable, mientras que la Figura 1.8b muestra las respuestas de sistemas inestables. Se considera un sistema dinámico con entrada m y salida y . Su comportamiento dinámico puede describirse mediante una función de transferencia $G(s)$.

$$\bar{y}(s) = G(s)\bar{m}(s) \quad (1.19)$$

La función de transferencia $G(s)$ puede corresponder a un proceso no controlado o puede ser la función de transferencia de circuito cerrado de un sistema controlado (p. ej., G_{sp} o G_{load}). Por lo tanto,

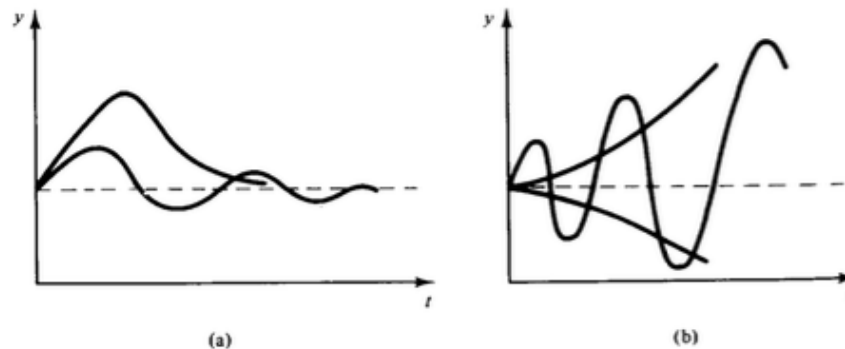


Figura 1.8 (a) respuestas estables y 1.8(b) inestables, (Stephanopoulos, 1984).

Por tanto, la estabilidad de un sistema puede ser tratada de forma unificada independientemente de si está controlada o no controlada.

La ubicación de los polos de una función de transferencia nos da el primer criterio para comprobar la estabilidad de un sistema:

Si la función de transferencia de un sistema dinámico tiene incluso un polo con parte real positiva, el sistema es inestable.

Por lo tanto, todos los polos de una función de transferencia deben estar en la parte izquierda de un plano complejo, para que el sistema sea estable.

1.10 Control Proporcional (P)

El control proporcional (conocido como control P) es un método de control utilizado en ingeniería y automatización industrial para controlar la salida de un proceso según la desviación de la entrada del proceso de su valor deseado.

En términos simples, el control proporcional ajusta la salida del proceso en proporción a la diferencia entre el valor deseado y el valor real de la entrada del proceso. El controlador proporcional calcula un valor de corrección multiplicando la desviación de la entrada por un factor de ganancia proporcional. Este valor de corrección se suma a la señal de control del proceso para ajustar la salida.

El control proporcional es uno de los métodos de control más simples y comunes utilizados en la industria. Sin embargo, tiene algunas limitaciones, como la incapacidad de manejar perturbaciones no lineales y la necesidad de un ajuste cuidadoso del parámetro de ganancia proporcional para evitar la sobrecorrección o la oscilación de la salida del proceso.

La ecuación matemática del control proporcional se puede expresar de la siguiente manera:

$$u(t) = K_c * e(t) \quad (1.20)$$

Donde:

$u(t)$: es la señal de control de salida en el tiempo t

K_c : es el factor de ganancia proporcional del controlador

$e(t)$: es la desviación de la entrada del proceso en el tiempo t (es decir, la diferencia entre el valor deseado y el valor real de la entrada del proceso).

La ecuación muestra que la señal de control de salida es proporcional a la desviación actual de la entrada del proceso, y que la constante de proporcionalidad es el factor de ganancia proporcional K_c . Al aumentar K_c , se aumenta la magnitud de la señal de control de salida en respuesta a una desviación determinada, lo que aumenta la velocidad de respuesta del proceso.

Sin embargo, un valor demasiado alto de K_c puede provocar oscilaciones o sobrecorrección en la salida del proceso. Por lo tanto, es importante ajustar cuidadosamente el valor de K_c para lograr un control preciso y estable del proceso.

La Figura 1.9 presenta tres curvas de respuesta que corresponden a tres valores distintos de K_c . Se observa que, a medida que el valor de K_c aumenta, el corrimiento disminuye. Sin embargo, también se puede observar que, aunque los valores altos de K_c reducen el corrimiento, también provocan una respuesta más oscilatoria en el proceso.

La mayoría de los procesos tienen un valor máximo de K_c , después del cual se vuelven inestables. Por lo tanto, existe un límite para el valor de K_c que se puede asignar y que aún permita mantener la estabilidad del proceso. Por esto, no se puede eliminar completamente el corrimiento.

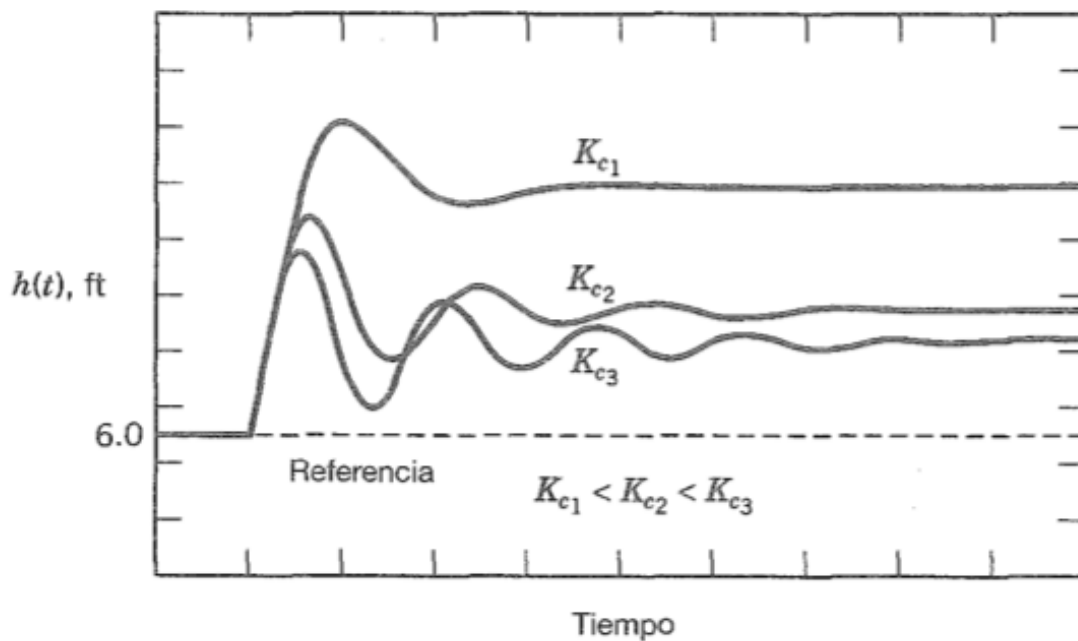


Figura 1.9 Respuestas de K_c variando en un proceso a lo largo del tiempo, (Stephanopoulos, 1984).

1.11 Control Proporcional – Integral (PI)

Control Proporcional Integral o Control PI, es una técnica de control en la que se ajusta la señal de salida de un sistema para minimizar el error entre la salida deseada y la real.

El controlador PI se compone de dos términos para calcular la señal de control: el término proporcional (P) y el término integral (I). El término proporcional varía en función del error actual, mientras que el término integral acumula los errores a lo largo del tiempo. De este modo, el control PI considera tanto el error actual como los errores pasados para determinar la señal de control necesaria para estabilizar el sistema.

El término proporcional es proporcional al error actual, lo que significa que cuanto mayor sea el error, mayor será el término proporcional y, por lo tanto, mayor será la señal de salida. Este término ayuda a controlar la respuesta transitoria del sistema y a reducir el tiempo de establecimiento.

El término integral se suma a lo largo del tiempo el error acumulado. Esto ayuda a controlar la respuesta estacionaria del sistema y a eliminar cualquier error en estado estable. Si hay un error constante en la salida del sistema, el término integral aumenta hasta que se alcanza el valor deseado.

El control PI se utiliza en muchos sistemas de control, como sistemas de control de temperatura, control de nivel de líquido, control de velocidad de motores y muchos otros sistemas. Es una técnica muy efectiva y muy utilizada por su simplicidad y facilidad de implementación.

La fórmula matemática para el control Proporcional Integral (PI) es:

$$u(t) = K_c * e(t) + K_i + \int e(t)dt \quad (1.21)$$

Donde:

$u(t)$: es la señal de control en el instante t .

K_c : es la ganancia proporcional del controlador.

K_i : es la ganancia integral del controlador.

$e(t)$: es el error en el instante t (la diferencia entre el valor deseado y el valor actual de la variable controlada).

$\int e(t)dt$: es la integral del error acumulado hasta el instante t .

La fórmula muestra que la señal de control es la suma de dos términos: el término proporcional, que es proporcional al error actual, y el término integral, que es la integral del error acumulado hasta el instante t . La ganancia proporcional K_c ajusta la contribución del término proporcional y la ganancia integral K_i ajusta la contribución del término integral.

La Figura 1.10 representa la respuesta de un proceso de nivel que es controlado mediante los controladores P y PI. La gráfica que corresponde al controlador P muestra la presencia del corrimiento, mientras que la gráfica correspondiente al controlador PI muestra que el nivel regresa al valor deseado sin corrimiento. Con el controlador PI, mientras exista un error, el controlador sigue ajustando su salida (integrando el error). En el momento en que el error desaparece (se reduce a cero), el controlador deja de ajustar su salida (integra una función con valor cero).

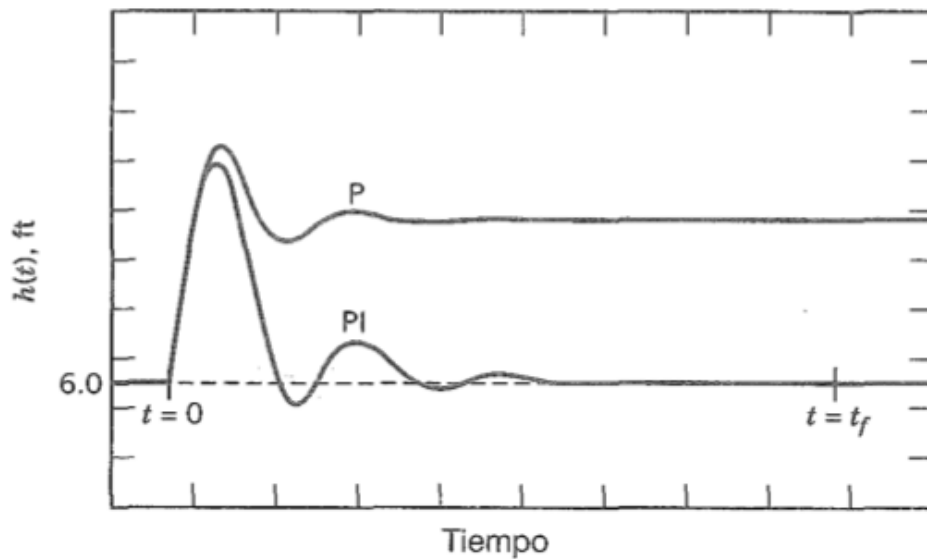


Figura 1.10 se muestra la respuesta de un proceso del nivel bajo la acción de controladores P y PI, (Stephanopoulos, 1984).

1.12 Controlador Proporcional – Integral – Derivativo (PID)

El Control Proporcional Integral Derivativo, también conocido como Control PID, es una técnica de control que ajusta la señal de salida de un sistema en respuesta a la diferencia entre la salida deseada y la real, y a la tasa de cambio del error. Para ello, el control PID utiliza tres términos: el proporcional, relacionado directamente con el error actual; el integral, que acumula los errores en el tiempo; y el derivativo, proporcional a la tasa de cambio del error. De esta forma, el control PID considera el comportamiento pasado y actual del sistema para calcular la señal de control necesaria para alcanzar la salida deseada.

El término proporcional es proporcional al error actual, lo que significa que cuanto mayor sea el error, mayor será el término proporcional y, por lo tanto, mayor será la señal de salida. Este término ayuda a controlar la respuesta transitoria del sistema y a reducir el tiempo de establecimiento.

El término integral se suma a lo largo del tiempo el error acumulado. Esto ayuda a controlar la respuesta estacionaria del sistema y a eliminar cualquier error en estado estable.

El término derivativo es proporcional a la tasa de cambio del error. Esto ayuda a controlar la respuesta dinámica del sistema y a reducir la sobrecorrección. Si el error está disminuyendo rápidamente, el término derivativo se vuelve grande, lo que reduce la señal de salida y ayuda a prevenir la sobrecorrección.

La fórmula matemática para el Control PID es:

$$u(t) = Kp * e(t) + Ki * \int e(t)dt + Kd * \frac{de(t)}{dt} \quad (1.22)$$

Donde:

$u(t)$: es la señal de control en el instante t.

Kp : es la ganancia proporcional del controlador.

Ki : es la ganancia integral del controlador.

Kd : es la ganancia derivativa del controlador.

$e(t)$: es el error en el instante t (la diferencia entre el valor deseado y el valor actual de la variable controlada).

$\int e(t)dt$: es la integral del error acumulado hasta el instante t.

$\frac{de(t)}{dt}$: es la tasa de cambio del error en el instante t.

La fórmula muestra que la señal de control es la suma de tres términos: el término proporcional, proporcional al error actual; el integral, integral del error acumulado hasta el instante t, y el término derivativo, proporcional a la tasa de cambio del error. Las ganancias ajustan la contribución de cada término en la señal de salida.

1.13 Control de Modelado Interno (IMC)

El Control de Modelado Interno (IMC, por sus siglas en inglés Internal Model Control) es un enfoque de control avanzado utilizado en la industria para mejorar el rendimiento del proceso de control.

En lugar de controlar directamente la salida del proceso, el IMC utiliza un modelo matemático interno del proceso para predecir cómo cambiará la salida en respuesta a las entradas del controlador. El controlador utiliza esta información para ajustar la entrada de manera que la salida del proceso se acerque lo más posible a su objetivo.

El IMC es particularmente efectivo en situaciones en las que el proceso es no lineal o difícil de modelar, ya que el modelo interno se puede ajustar para adaptarse a diferentes condiciones de operación. También es útil cuando el proceso tiene retardos significativos, lo que puede dificultar el control convencional.

El IMC requiere que se tenga un buen conocimiento del proceso y se pueda desarrollar un modelo preciso para el proceso en cuestión. Si se realiza correctamente, puede proporcionar un mayor control del proceso y una mejor capacidad para ajustarse a las condiciones cambiantes de operación. En la Figura 1.11 se muestra el diagrama de bloques para el control de modelado interno (IMC).

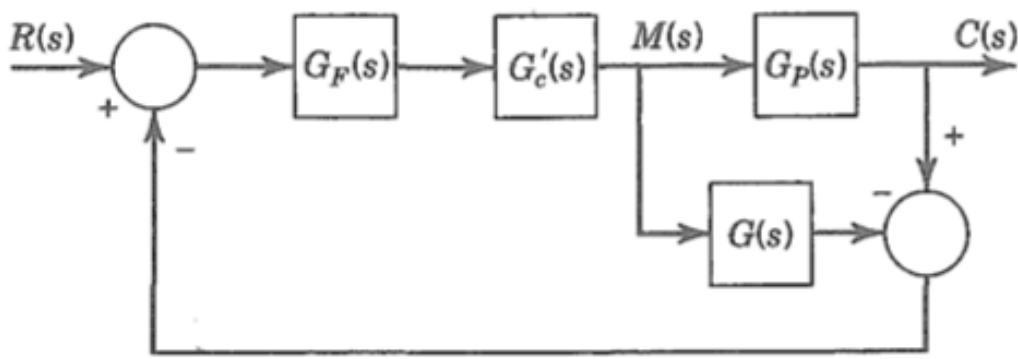


Figura 1.11 Diagrama de bloques para el control de modelado interno (IMC),
(Stephanopoulos, 1984).

El Control de Modelado Interno (IMC) se basa en la utilización de un modelo matemático interno del proceso, por lo que las fórmulas utilizadas pueden variar según el proceso y la aplicación específica. Sin embargo, a continuación, se presentan algunas de las fórmulas comúnmente utilizadas en el IMC:

Modelo del proceso: El modelo del proceso representa la relación entre la entrada y la salida del proceso. Un modelo lineal de primer orden puede ser representado como:

$$y(s) = Gp(s)u(s) \quad (1.23)$$

donde $y(s)$ es la salida del proceso, $u(s)$ es la entrada del controlador y $Gp(s)$ es la función de transferencia del proceso.

Modelo del controlador: El modelo del controlador se utiliza para predecir la señal de control necesaria para lograr la salida deseada. Un controlador PID (Proporcional-Integral-Derivativo) se puede representar como:

$$u(s) = Kp e(s) + Ki/s e(s) + Kds * e(s) \quad (1.24)$$

donde $e(s)$ es el error entre la salida deseada y la salida real, Kp es la constante proporcional, Ki es la constante integral y Kd es la constante derivativa.

Función de transferencia del controlador: La función de transferencia del controlador se utiliza para ajustar la ganancia del controlador y determinar su frecuencia natural. Se puede representar como:

$$Gc(s) = Kc \left(1 + \frac{1}{Tis} + Tds \right) \quad (1.25)$$

donde Kc es la ganancia del controlador, Ti es el tiempo integral y Td es el tiempo derivativo.

Función de transferencia del controlador interno: La función de transferencia del controlador interno se utiliza para representar el modelo interno del proceso y predecir cómo cambiará la salida del proceso en respuesta a las entradas del controlador. Se puede representar como:

$$G_m(s) = \frac{1}{1 + G_p(s) * G_c(s)} \quad (1.26)$$

donde $G_p(s)$ es la función de transferencia del proceso y $G_c(s)$ es la función de transferencia del controlador.

Función de transferencia del controlador externo: La función de transferencia del controlador externo se utiliza para ajustar la ganancia del controlador y determinar su frecuencia natural. Se puede representar como:

$$G_c(s) = G_c(s)G_m(s) \quad (1.27)$$

donde $G_c(s)$ es la función de transferencia del controlador y $G_m(s)$ es la función de transferencia del controlador interno.

Estas son solo algunas de las fórmulas comúnmente utilizadas en el IMC. La elección de las fórmulas adecuadas dependerá del proceso y de las especificaciones de la aplicación.

1.14 Tiempo Muerto

El tiempo muerto en un sistema de control es el tiempo que transcurre desde que se aplica una entrada al sistema hasta que se observa una respuesta en la salida. El siguiente ejemplo muestra como se ve el tiempo muerto.

La Fig. 1.12. muestra un proceso de $T_i(t)$, de cómo responde a los cambios en las temperaturas de entrada y ambiente. Para ello se analizan dos situaciones donde

la primera supone que la tubería está bien aislada y como segunda suposición, el flujo de líquido a través de la tubería es un flujo de pistón ideal sin difusión o dispersión de energía, lo que significa que no hay retromezcla del líquido en la tubería. Bajo estas suposiciones, la respuesta de $T_i(t)$ a las perturbaciones $T_i(t)$ y $T_s(t)$ será la misma que la respuesta de $T(t)$, pero con un retraso en el tiempo. Es decir, habrá un tiempo finito entre la respuesta inicial de $T(t)$ y el cambio de $T_i(t)$, y este retraso se muestra en la Figura 1.13, Smith y Corripio (1997).

En el ejemplo mencionado, el tiempo muerto se refiere al tiempo que tarda el líquido en moverse desde la salida del tanque hasta el punto 1. Este retraso en la respuesta del sistema puede ser crítico en ciertas aplicaciones de control, ya que puede afectar la estabilidad y el rendimiento del sistema. Por lo tanto, es importante tener en cuenta el tiempo muerto al diseñar un sistema de control y ajustar los parámetros del controlador para compensar este retraso en la respuesta del sistema.

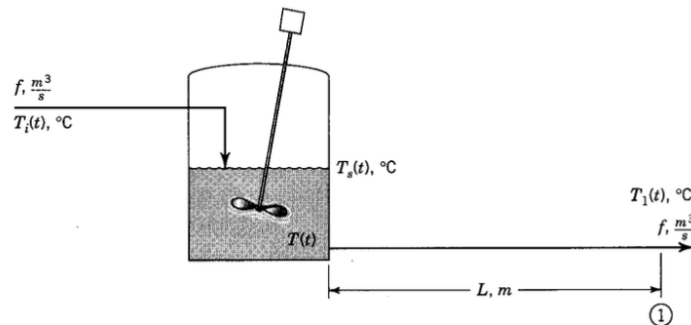


Figura 1.12 Proceso térmico, (Smith & Corripio, 1997).

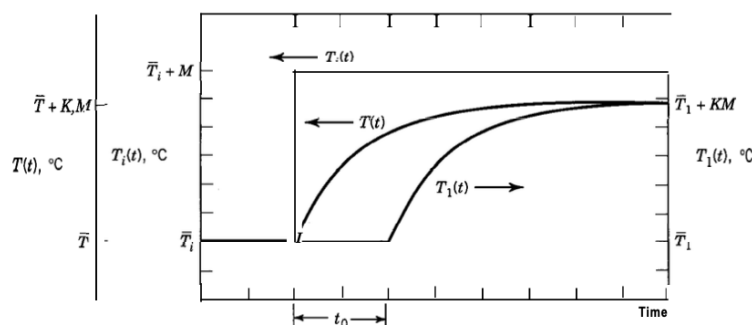


Figura 1.13 Respuesta de un proceso térmico a un cambio de escalón en la temperatura de entrada, (Smith & Corripio, 1997).

1.15 Función Escalón

Para obtener la respuesta escalón de magnitud Δx , se hace que $X(t) = \Delta x u(t)$, donde $u(t)$ representa la función escalón unitario en el tiempo cero. La transformada de la entrada es $X(s) = \Delta x/s$. Sustituye esto en la Ec. 28 y expanda en fracciones parciales para obtener

$$Y(s) = \left[\frac{K}{\tau s + 1} \right] X(s) \quad (1.28)$$

$$Y(s) = \left[\frac{K}{\tau s + 1} \right] \frac{\Delta x}{s} = -\frac{K\Delta x}{s + \frac{1}{\tau}} \frac{K\Delta x}{s} \quad (1.29)$$

Se invierte para coincidir las entradas con $a = 1/\tau$

$$Y(t) = K\Delta x[u(t) - e^{-t/\tau}] \quad (1.30)$$

Este es un resultado muy importante. La Figura 1.14 proporciona un gráfico de la respuesta. Tenga en cuenta que la respuesta comienza con la tasa máxima de cambio justo después de que se aplica el paso, y luego la tasa de cambio disminuye de tal manera que el valor final de estado estacionario de $K\Delta x$ se aproxima exponencialmente Smith y Corripio (1997).

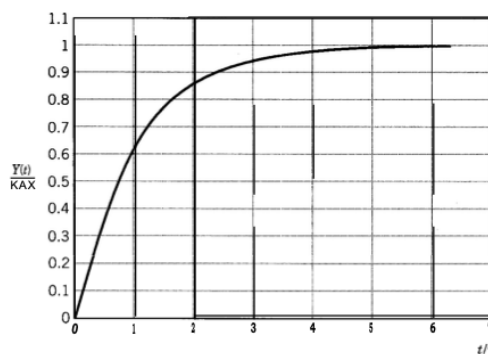


Figura 1.14 Respuesta escalonada de primer orden (Smith & Corripio, 1997).

1.16 Control en Cascada

El control en cascada es una estrategia que mejora, en algunas aplicaciones de manera significativa, el rendimiento proporcionado por el control de retroalimentación. Esta estrategia es bien conocida desde hace mucho tiempo. Las computadoras proporcionan una implementación de control en cascada más simple, más segura y menos costosa que la que se obtiene mediante el uso de instrumentación analógica.

Por lo tanto, el control en cascada se implementa con más frecuencia ahora, con computadoras disponibles, que cuando se usaba solo instrumentación analógica. La Figura 1.15 muestra la respuesta de un proceso a un cambio de $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$ en la temperatura del reactivo de entrada bajo control de retroalimentación simple y bajo control en cascada.

La mejora es muy significativa y probablemente pague los gastos adicionales en muy poco tiempo. Se debe enfatizar lo siguiente: Al diseñar estrategias de control en cascada, la consideración más importante es que el lazo interno debe ser más rápido que el lazo externo y cuanto más rápido, mejor. Este requisito tiene sentido y se extiende a cualquier número de bucles en cascada.

En un sistema con tres lazos en cascada, el lazo terciario debe ser más rápido que el lazo secundario, que debe ser más rápido que el lazo primario Smith y Corripio, (1997).

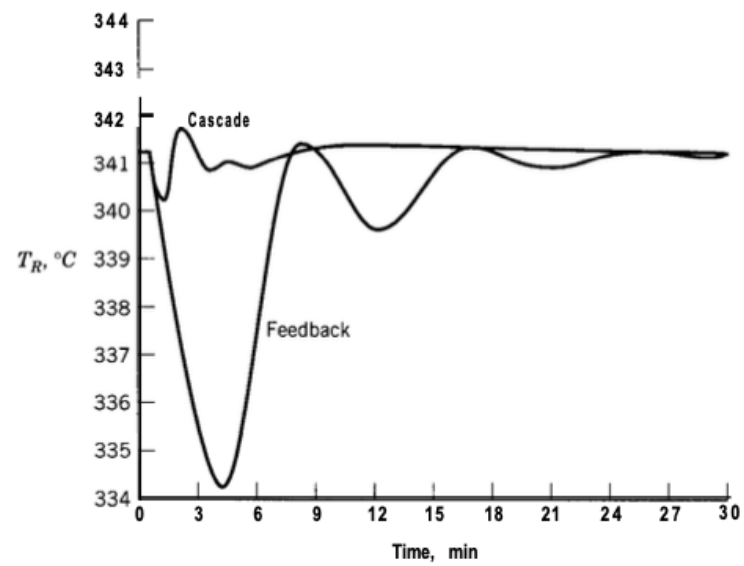


Figura 1.15 Respuesta de la temperatura del reactor a un cambio de -25°C en la temperatura de alimentación al calentador (Smith & Corripio, 1997).

CAPITULO 2

MATERIALES Y MÉTODOS

CAPITULO 2 MATERIALES Y MÉTODOS

El procedimiento para el cumplimiento de los objetivos se describe en la Figura 2.1.

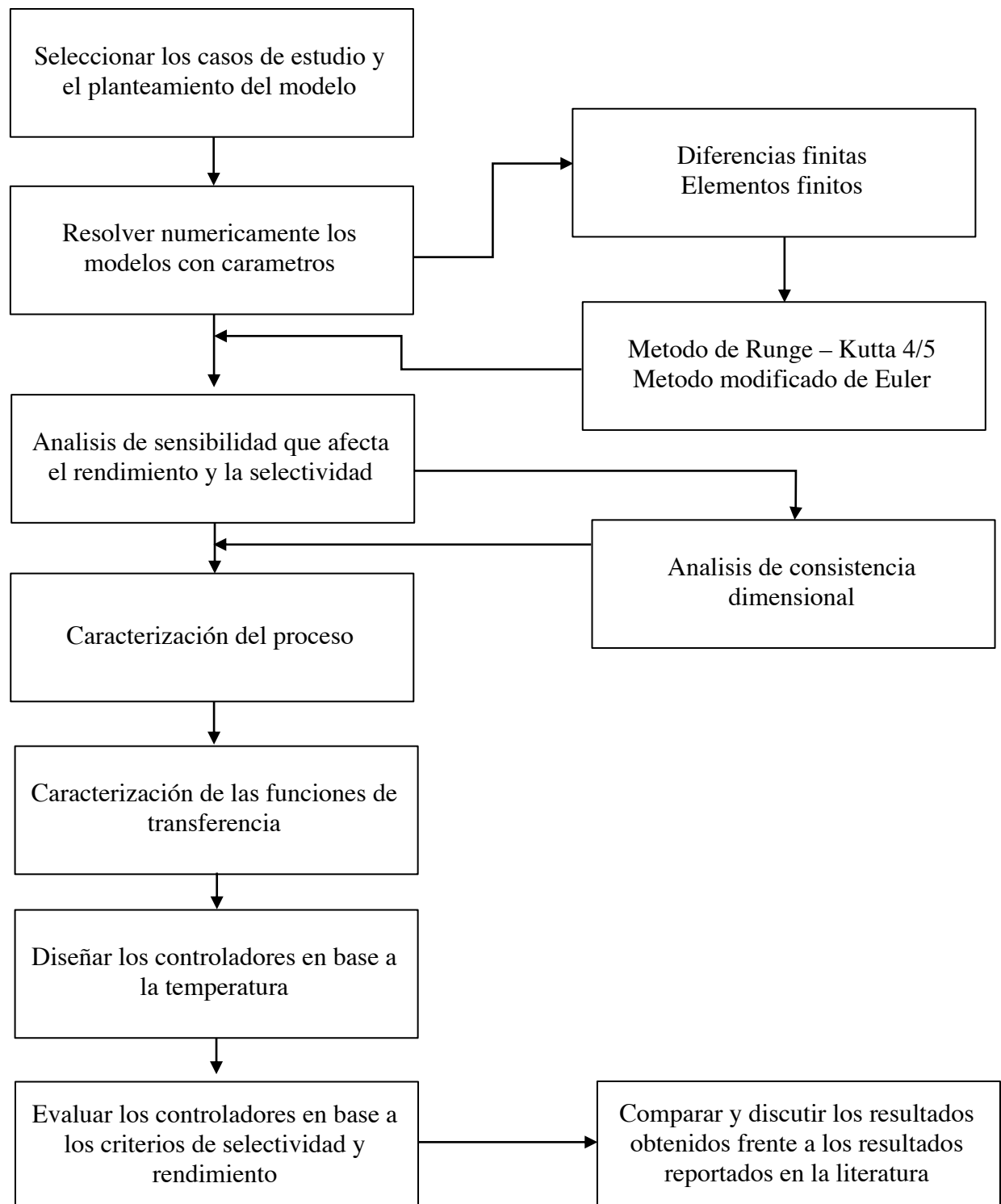


Figura 2.1 Diagrama del Proceso.

2.1 Materiales

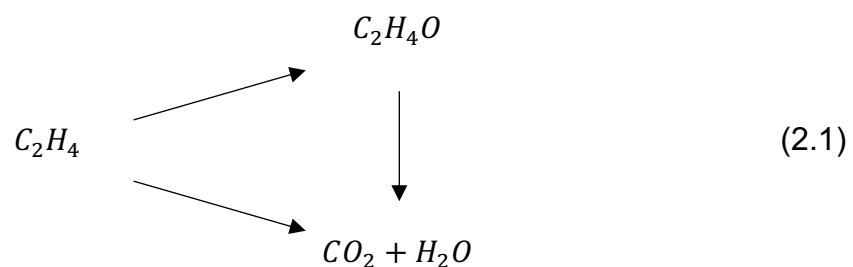
En este capítulo se muestran los casos seleccionados para este trabajo, los esquemas de control, el comportamiento dinámico y la selección del reactor tubular. Se describirá el comportamiento que se tiene a la salida del reactor para verificar la selectividad y el rendimiento de los productos deseados.

Los materiales con los que se cuentan para el desarrollo de este proyecto son:

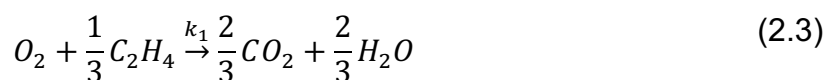
1. Equipo de cómputo personal una MacBook Pro Mid 2012.
2. Lenguaje de Programación FORTRAN. El lenguaje de programación se modificará de anteriores proyectos realizados. Se podría hacer un registro ante INDAUTOR, aunque, este no forma parte de los objetivos establecidos.

2.2 Casos de estudio

El primer caso de estudio a trabajar será la obtención de óxido de etileno, la cual se basa en la oxidación directa del etileno en fase gaseosa con un catalizador a base de plata, los principales subproductos son CO_2 y H_2O formados, la reacción consta del siguiente mecanismo:



El esquema de reacción (2.1) puede ser simplificado a un sistema de dos reacciones paralelas:



La reacción deseada es la reacción 2.2, y la reacción no deseada es la 2.3 del etileno. Se considera un balance para cada compuesto que está presente en las reacciones descritas, también el balance de energía, que describe el comportamiento dinámico de los compuestos y de la temperatura.

$$\varepsilon \frac{\partial C_i}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} - v \frac{\partial C_i}{\partial z} - \sum_{j=1}^{Nr} w_{ji} \xi v_j \quad (2.4)$$

$$C_p \bar{p} \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - v \sum_{i=1}^{Nc} C_i C_{pi} \frac{\partial T}{\partial z} + \sum_{j=1}^{Nr} -\Delta H_j \xi v_j - \frac{4U}{dr} (T - T_w) \quad (2.5)$$

donde:

$$\xi v_1 = C_{O_2} 5.7 \times 10^4 e^{\left(-\frac{7200}{T}\right)} \quad (2.6)$$

$$\xi v_2 = C_{O_2} 4.0 \times 10^7 e^{\left(-\frac{10800}{T}\right)} \quad (2.7)$$

Con las siguientes condiciones de frontera:

$$v C_i = v C_i - D \frac{\partial C_i}{\partial z} \quad z = 0, t \geq 0 \quad (2.8)$$

$$v \sum_{i=1}^{N_I} C_i C_{pi} T = v \sum_{i=1}^{N_I} C_i C_{pi} T - k \frac{\partial T}{\partial z} \quad z = 0, t \geq 0 \quad (2.9)$$

$$D \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} = 0 \quad z = 12, t \geq 0 \quad (2.10)$$

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0 \quad z = 12, t \geq 0 \quad (2.11)$$

Con las condiciones iniciales:

$$C_{O_2} = 14 \text{ mol m}^{-3} \quad (2.12)$$

$$C_{C_2H_4} = 220 \text{ mol m}^{-3} \quad (2.13)$$

$$C_{C_2H_4O} = 0 \text{ mol m}^{-3} \quad (2.14)$$

$$C_{CO_2} = 0 \text{ mol m}^{-3} \quad (2.15)$$

$$C_{H_2O} = 0 \text{ mol m}^{-3} \quad (2.16)$$

$$T = 497 \text{ K} \quad (2.17)$$

Para estudiar la simulación dinámica en el reactor tubular de oxidación de etileno a óxido de etileno, se requirieron ciertos parámetros. En particular, se consideraron los parámetros propuestos por Westerterp y Ptasiński (1984), que se muestran en las Tablas 2.1 y 2.2.

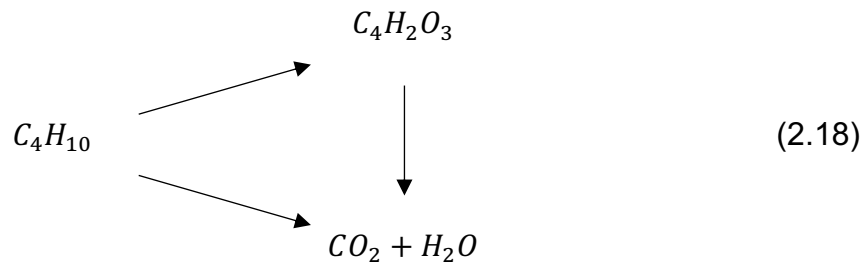
Tabla 2.1 Parámetros del reactor para la Oxidación de Etileno.

Parámetros	Valor (unidades)
Velocidad del fluido, v	$1.3 \text{ (m s}^{-1}\text{)}$
Porosidad, ε	0.528 (–)
Diámetro del reactor, d_r	0.0508 (m)
Longitud del reactor, L	12 (m)
Densidad del fluido, ρ	$56.1797 \text{ (mol m}^{-3}\text{)}$
Coefficiente efectivo de difusión de masa, D	$0.001844 \text{ (m}^2\text{s}^{-1}\text{)}$
Coefficiente efectivo de difusión de calor, K	$0.017 \text{ (W m}^{-1} \text{K}^{-1}\text{)}$
Coefficiente global de transferencia de calor, U	$290 \text{ (J s}^{-1} \text{m}^{-2} \text{K}^{-1}\text{)}$
Capacidad de calor medio del catalizador, C_p	$125.1268 \text{ (J mol}^{-1} \text{K}^{-1}\text{)}$

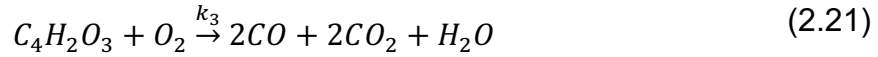
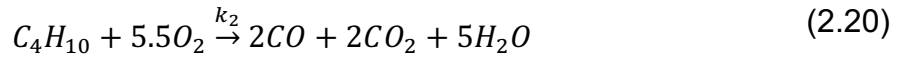
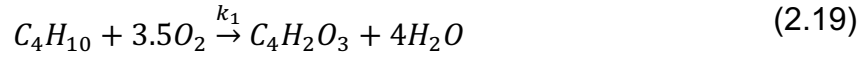
Tabla 2.2. Entalpía de las reacciones.

Reacción	Entalpía de reacción, ΔH
1	$210,300 \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$
2	$473,000 \text{ (J mol}^{-1}\text{)}$

El segundo caso de estudio a trabajar será la obtención de anhídrido maleico, la cual se basa en la oxidación parcial del butano con un catalizador de óxido de vanadio, los principales subproductos son CO_2 y H_2O formados, la reacción consta del siguiente mecanismo:



El esquema de reacción (2.18) puede ser simplificado a un sistema de dos reacciones paralelas:



La reacción deseada es la reacción 2.19, y la reacción no deseada es la 2.10 y 2.21. Se considera un balance para cada compuesto que está presente en las reacciones descritas, también el balance de energía, que describe el comportamiento dinámico de los compuestos y de la temperatura.

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = -v \frac{\partial C_B}{\partial z} + rC_B \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial C_{AM}}{\partial t} = -v \frac{\partial C_{AM}}{\partial z} - rC_B C_{AM} \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -v \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\Delta H * rC_B C_{AM}}{\rho C_p} + \frac{2U}{r_0 \rho C_p} (T_c - T) \quad (2.24)$$

donde:

$$r = k_i \exp (E_i/RT) \quad (2.25)$$

Con las siguientes condiciones de frontera:

$$\frac{\partial C_i}{\partial z} = 0 \quad z = 0, t \geq 0 \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad z = 0, t \geq 0 \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial z} = 1 \quad z = 0.7, t \geq 0 \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 1 \quad z = 0.7, t \geq 0 \quad (2.29)$$

Con las condiciones iniciales:

$$C_{C_4H_{10}} = 0.5803 \text{ mol } m^{-3} \quad (2.30)$$

$$C_{C_4H_2O_3} = 0 \text{ mol } m^{-3} \quad (2.31)$$

$$T = 727 \text{ K} \quad (2.32)$$

Para estudiar la simulación dinámica en el reactor tubular de oxidación de etileno a óxido de etileno, se requirieron ciertos parámetros. En particular, se

consideraron los parámetros propuestos por Chin *et. al.*, (2001) , que se muestran en las Tablas 2.3 y 2.4.

Tabla 2.3 Parámetros del reactor para la Oxidación de Etileno.

Parámetros	Valor (unidades)
Velocidad del fluido, v	0.2446 ($m\ s^{-1}$)
Radio del reactor, r_0	0.013 (m)
Longitud del reactor, L	0.7 (m)
Densidad del fluido, ρ	7.23 ($mol\ m^{-3}$)
Coefficiente global de transferencia de calor, U	0.022 ($KJ\ s^{-1}\ m^{-2}\ K^{-1}$)
Capacidad de calor del fluido, C_p	0.0649723 ($KJ\ mol^{-1}\ K^{-1}$)

Tabla 2.4. Entalpía de las reacciones.

Reacción	Entalpía de reacción, ΔH
1	1303.774 ($KJ\ mol^{-1}$)
2	586.1784 ($KJ\ mol^{-1}$)
3	1889.912 ($KJ\ mol^{-1}$)

Para resolver ecuaciones diferenciales parciales, se requiere de un método de aproximación numérica que permita obtener soluciones aproximadas para estas ecuaciones. Uno de los métodos más utilizados es el de diferencias finitas, el cual implica la discretización de las variables de posición. Esto significa que se divide el espacio en pequeñas partes finitas, lo que permite aproximar las soluciones de las ecuaciones diferenciales parciales a través de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Cuando se obtienen estas ecuaciones, se usa un método numérico para resolverlas. En este caso, se utiliza el método de Runge-Kutta 4/5, que es uno de los métodos más eficientes y precisos para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias.

2.3. Método de diferencias finitas

El proceso inicial implica la división de la longitud del reactor, representada por L , en un total de N secciones de longitud Δz ,

$$\Delta z = \frac{L}{N} \quad (2.32)$$

Existen tres alternativas para realizar la estimación de la diferencia finita de la derivada en un punto específico j dentro del reactor:

Diferencia hacia adelante:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta z} \quad (2.33)$$

Diferencia hacia atrás:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta z} \quad (2.34)$$

Diferencia central:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{x_{j+1} - x_{j-1}}{2\Delta z} \quad (2.35)$$

Se utilizó el método de diferencias finitas central, las ecuaciones diferenciales parciales se aproximan mediante el método de diferencias finitas central:

$$\frac{\partial^2 x}{\partial z^2} = \frac{x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1}}{\Delta z^2} \quad (2.36)$$

Una vez transformadas las ecuaciones diferenciales parciales en ecuaciones ordinarias mediante la discretización, el siguiente paso consiste en integrar este conjunto de ecuaciones. Para ello, se pueden emplear diferentes métodos, como los métodos de Runge-Kutta o de Euler, Smith y Corripio, (1991).

2.3.1 Método Runge-Kutta de cuarto orden

También llamado método clásico RK de cuarto orden, donde y es la condición inicial en $x=0$, h es el tamaño de paso, definimos la ecuación general:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 3k_3 + k_4)h \quad (2.37)$$

donde:

$$k_1 = f(x_i, y_i) \quad (2.38)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h\right) \quad (2.39)$$

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2h\right) \quad (2.40)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + k_3h) \quad (2.41)$$

Las constantes "k" representan una pendiente, y la ecuación principal (2.37) calcula un promedio ponderado de estas constantes para determinar la pendiente óptima, según lo propuesto por Chapra y Canale, (2007).

2.4. Caracterización del proceso

Para describir el proceso, se realizaron pruebas en los puntos de medición específicos a lo largo del reactor para evaluar las respuestas de la composición y las temperaturas ante una perturbación en forma de escalón. Para modelar estas respuestas, se emplea el modelo de primer orden más tiempo muerto (POMTM) y se obtuvieron las ecuaciones correspondientes para la composición y la temperatura:

$$\frac{c(s)}{T_j(s)} = G_{T_j, C_o}(s) = \frac{K_{T_j, C}}{\tau_{T_j, C}s + 1} e^{-\theta_{T_j, C_o}s} \quad (2.38)$$

$$\frac{T_m(s)}{T_j(s)} = G_{T_j, T_m}(s) = \frac{K_{T_j, T_m}}{\tau_{T_j, T_m}s + 1} e^{-\theta_{T_j, C_o}s} \quad (2.39)$$

donde T_m representa la temperatura medida en un punto específico a lo largo del reactor, $\theta_{T_j, C}$ corresponde al tiempo muerto debido a las mediciones y al

transporte interno. K_{T_j, C_o} y K_{T_j, T_m} son las ganancias del proceso en estado estacionario entre la temperatura de la chaqueta y la composición, y entre la temperatura de la chaqueta y la temperatura en el reactor, respectivamente. τ_{T_j, C_o} y τ_{T_j, T_m} son las constantes de tiempo del proceso.

Para determinar estos parámetros, se llevó a cabo una prueba escalón en la variable controlada (la temperatura de la chaqueta, T_j), mientras se registraba la respuesta de la señal de salida del transmisor $C(t)$ en un gráfico en función del tiempo. Es importante destacar que durante la prueba el sistema operaba en lazo abierto. El gráfico obtenido debe abarcar todo el período de la prueba para realizar el análisis y determinar los parámetros del modelo, siguiendo el enfoque propuesto por Smith y Corripio, (2005).

Se puede describir un cambio escalón de magnitud Δm utilizando un modelo de primer orden más tiempo muerto (POMTM), que se expresa mediante una ecuación:

$$C(s) = \frac{K e^{-\theta s}}{\tau_1 + 1} \cdot \frac{\Delta m}{s} \quad (2.40)$$

La siguiente expresión se utiliza para calcular la ganancia del proceso (K):

$$K = \frac{\Delta C_s}{\Delta m} \quad (2.41)$$

Se eligen los valores de θ y τ de manera que la respuesta del modelo y la respuesta real se correspondan en la región donde se produce una tasa de cambio alta. Para encontrar estos puntos se utilizan las siguientes fórmulas:

$$\Delta c(\theta + \tau) = K \Delta m [1 - e^{-1}] = 0.632 \Delta C_s \quad (2.42)$$

$$\Delta c\left(\theta + \frac{1}{3}\tau\right) = K \Delta m [1 - e^{-1/3}] = 0.283 \Delta C_s \quad (2.43)$$

Para poder encontrar la posición de dos puntos, en la Figura 2.2 corresponden a los tiempos t_1 y t_2 , respectivamente.

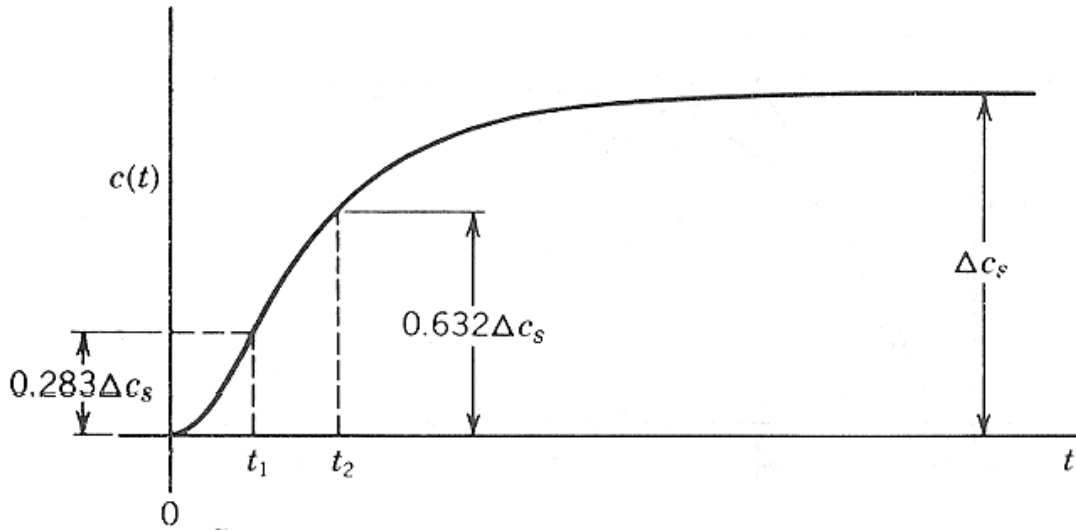


Figura 2.2 Parámetros del modelo POMTM, (Smith & Corripio, 1991).

Los valores de t_2 , t_1 y τ se obtienen mediante la resolución del siguiente sistema de ecuaciones:

$$\tau = 1.5 (t_2 - t_1) \quad (2.44)$$

$$\theta = t_2 - \tau \quad (2.45)$$

dónde:

$$t_1 = \text{tiempo en el cual } \Delta c = 0.283\Delta c_s$$

$$t_2 = \text{tiempo en el cual } \Delta c = 0.632\Delta c_s$$

Se puede caracterizar la relación entre la temperatura y la composición de salida en un punto específico a lo largo del reactor utilizando una función de transferencia en el lazo primario. Esta función de transferencia se obtiene al dividir la ecuación (2.46) entre la ecuación (2.47), lo que resulta en:

$$\frac{G_{T_j, C_o}(s)}{G_{T_j, T_m}(s)} = G_{T_m, C_o}(s) = K_{T_m, C} \frac{\tau_{T_j, T_m}s + 1}{\tau_{T_j, C_o}s + 1} e^{-\theta_{T_j, C_o}s} \quad (2.46)$$

Para dar solución al siguiente cociente se deben ajustar las variables $(\tau_{T_j, T_m}s + 1)/(\tau_{T_j, C_o}s + 1)$ aplicando las siguientes reglas de sintonizado de Skogestad, (2003).

$$\frac{T_0 s + 1}{\tau_0 s + 1} \approx \begin{cases} T_0/\tau_0 & T_0 \geq \tau_0 \geq \theta & \text{Regla - T1} \\ T_0/\theta & T_0 \geq \theta \geq \tau_0 & \text{Regla - T1a} \\ 1 & \theta \geq T_0 \geq \tau_0 & \text{Regla - T1b} \\ T_0/\tau_0 & \tau_0 \geq T_0 \geq 5\theta & \text{Regla - T2} \\ \frac{(\tilde{\tau}_0/\tau_0)}{(T_0 - \tau_0)s + 1} & \tau_0 \stackrel{\text{def}}{=} \min(\tau_0, 5\theta) \geq T_0 & \text{Regla - T1a} \end{cases}$$

2.5. Diseño del controlador

Una combinación de dos lazos de control en serie se conoce como una estructura de control en cascada composición-temperatura convencional. El lazo primario se encarga del control de la composición y se controla midiendo la composición en la salida del reactor, así como la señal de control para el lazo secundario (temperatura). El lazo secundario regula la temperatura de un medio refrigerante en la chaqueta del reactor para mantener la temperatura requerida en un punto específico a lo largo del reactor.

Para diseñar los controladores en esta estructura, se utiliza el método de ajuste de control PI/P basado en el procedimiento de Control de Modelo Interno (IMC) propuesto por Skogestad, (2003).

Para un controlador PI con la ganancia y el tiempo integral están dados por:

$$K_c = \frac{1}{K} \frac{\tau_I}{2\theta} \quad \tau_I = \min\{\tau_I, 8\theta\} \quad (2.47)$$

donde y_m es la temperatura medida en el reactor (K), y_{ref} es la temperatura de referencia (K), τ_c es la constante de tiempo (s), K_c es la ganancia del controlador, θ es el tiempo muerto (s) y τ_I es la constante del tiempo integral (s) Skogestad y Grimholt, (2012).

La ganancia del control PI es calculada de la misma forma que el control PI con sus datos correspondientes.

$$K_c = \frac{1}{K} \frac{\tau_I}{2\theta} \quad (2.48)$$

2.6. Error de integración mínima

Para describir el procedimiento, se emplean parámetros del modelo de primer orden junto con el tiempo muerto, para lograr una respuesta en circuito cerrado que presente un error, oscilación o desviación mínima de la variable controlada en comparación con el punto de control. Para reducir al mínimo el error a lo largo del tiempo de respuesta, se busca minimizar la suma de los errores en cada momento, lo cual se representa como el área sombreada en la Figura 2.3. Dicha área se calcula integrando el error en función del tiempo, siguiendo la fórmula que se presenta a continuación:

Integral del valor absoluto del error (IAE, Integrated Absolute Error)

$$IAE = \int_0^{\infty} |e(t)| dt \quad (2.49)$$

Integral del cuadrado del error (ISE, Integrated Square Error)

$$ISE = \int_0^{\infty} e^2(t) dt \quad (2.50)$$

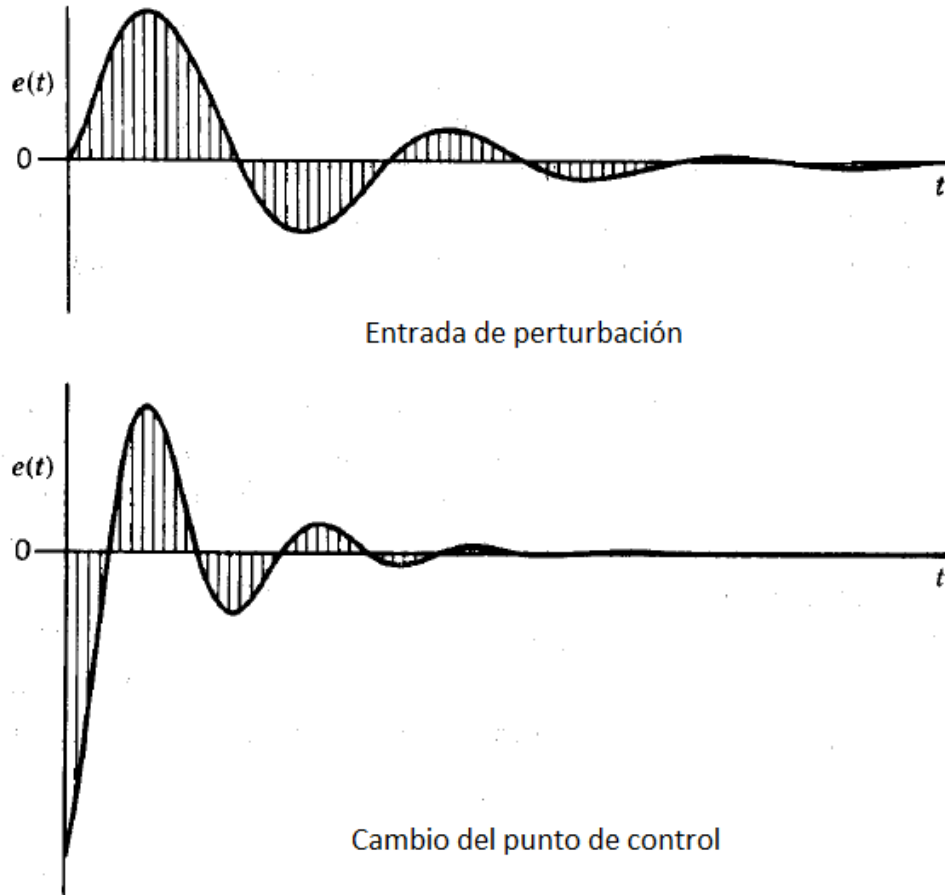


Figura 2.3 Definición de las integrales de error para cambios en la perturbación y al punto de control, Smith y Corripio, (Smith & Corripio, 1991).

2.7. Evaluación de la selectividad y rendimiento

Para la evaluación de la selectividad en el caso de reacciones paralelas en la que dos reactivos A y B se están consumiendo para producir el producto deseado D y no deseado U, el parámetro de selectividad se define mediante:

$$r_D = k_1 C_A^{\alpha_1} C_B^{\beta_1} \quad (2.51)$$

$$r_U = k_2 C_A^{\alpha_2} C_B^{\beta_2} \quad (2.52)$$

$$S_{DU} = \frac{r_D}{r_U} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{\alpha_1 - \alpha_2} C_B^{\beta_1 - \beta_2} \quad (2.53)$$

El rendimiento se calculará como el cociente de la velocidad de reacción de un producto dado entre la velocidad de reacción del reactivo clave:

$$Y_D = \frac{r_D}{-r_A} \quad (2.54)$$

El rendimiento de una reacción basado en las velocidades de flujo molar es el cociente de moles de producto entre moles del reactivo clave, Fogler, (2020):

$$\tilde{Y}_D = \frac{F_D}{F_{A0} - F_A} \quad (2.55)$$

Otras de la manera de calcular la selectividad a través de las concentraciones de la reacción sería de la siguiente manera:

$$s = \frac{C_{SB}}{C_{EA} - C_{SA}} * 100 \quad (2.56)$$

Donde:

C_{SB} = Concentración de Salida del Producto Deseado

C_{EA} = Concentración de Entrada del Reactivo Limitante

C_{SA} = Concentración de Salida del Reactivo Limitante

Y el rendimiento para las concentraciones se calcula de la siguiente manera:

$$s = \frac{C_{SB}}{C_{EA}} * 100 \quad (2.57)$$

C_{SB} = Concentración de Salida del Producto Deseado

C_{EA} = Concentración de Entrada del Reactivo Limitante

CAPITULO 3

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CAPITULO 3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de toda la simulación dinámica y la resolución numérica de los dos casos de estudios descritos en el capítulo anterior, la oxidación de etileno a óxido de etileno y la oxidación parcial de butano a anhídrido maleico.

Los siguientes resultados presentan la caracterización del proceso de la reacción en un reactor tubular mediante una perturbación de forma escalón aplicado a la temperatura de la chaqueta. También se muestra el controlador P/PI siguiendo las reglas de sintonizado de Skogestad, el controlador en IMC. Y la evaluación del sistema de controlador frente a perturbaciones observando si la selectividad y rendimiento de los productos deseados cambia.

Las reacciones de los casos de estudios se llevaron a cabo con un lenguaje de programación llamado Fortran 95 para hacer la resolución numérica más eficiente y de una manera más rápida. Para la oxidación de etileno a óxido de etileno, se obtuvieron los perfiles de etileno, oxígeno, óxido de etileno, agua y dióxido de carbono a lo largo del reactor.

3.1 Simulación Dinámica del Proceso del Óxido de Etileno

En la Fig. 3.1a se muestra el perfil de etileno. La concentración inicial de etileno en el reactor es de 220 mol m^{-3} y se observó como este se iba consumiendo a lo largo del reactor. El reactor se considera de 12 metros de longitud y se muestra que al final la concentración de etileno es de 212 mol m^{-3} . El etileno no se agotó en el reactor, aunque se oxido, aún estaba bastante concentrado.

La Fig. 3.1b muestra el perfil de oxígeno, como este se va consumiendo a lo largo del reactor en 12 metros. La concentración de oxígeno inicial es de 14 mol m^{-3} y se consume hasta alrededor de 8.4 mol m^{-3} .

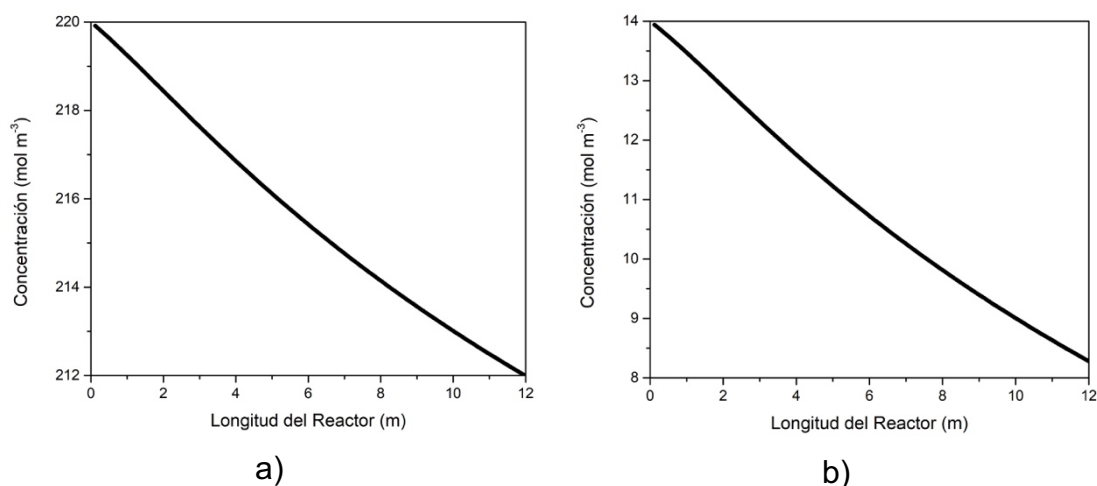


Figura 3.1 a) Perfil de Concentración de Etileno, b) Perfil de Concentración del Oxígeno.

En la Fig. 3.2a se muestra el perfil de concentración de óxido de etileno, como este se formó en los 12 metros del reactor. El óxido de etileno alcanza una concentración máxima de 7.4 mol m^{-3} . En comparación al reactivo que es el etileno, se produce poco óxido de etileno.

El perfil de óxido de etileno es la reacción deseada en la simulación, pero como esta es una reacción en paralelo, se obtiene productos no deseados como lo son el agua y el dióxido de carbono. La Fig. 3.2b y 3.2c muestra los perfiles del agua y del dióxido de carbono. Al ser el producto no deseado se mantienen en la misma concentración a lo largo del reactor.

La concentración máxima que alcanzan estos dos es de 1.38 mol m^{-3} , algo muy beneficioso, tomando en cuenta que son los productos no deseados y que la reacción tomo buen camino para seleccionar al óxido de etileno.

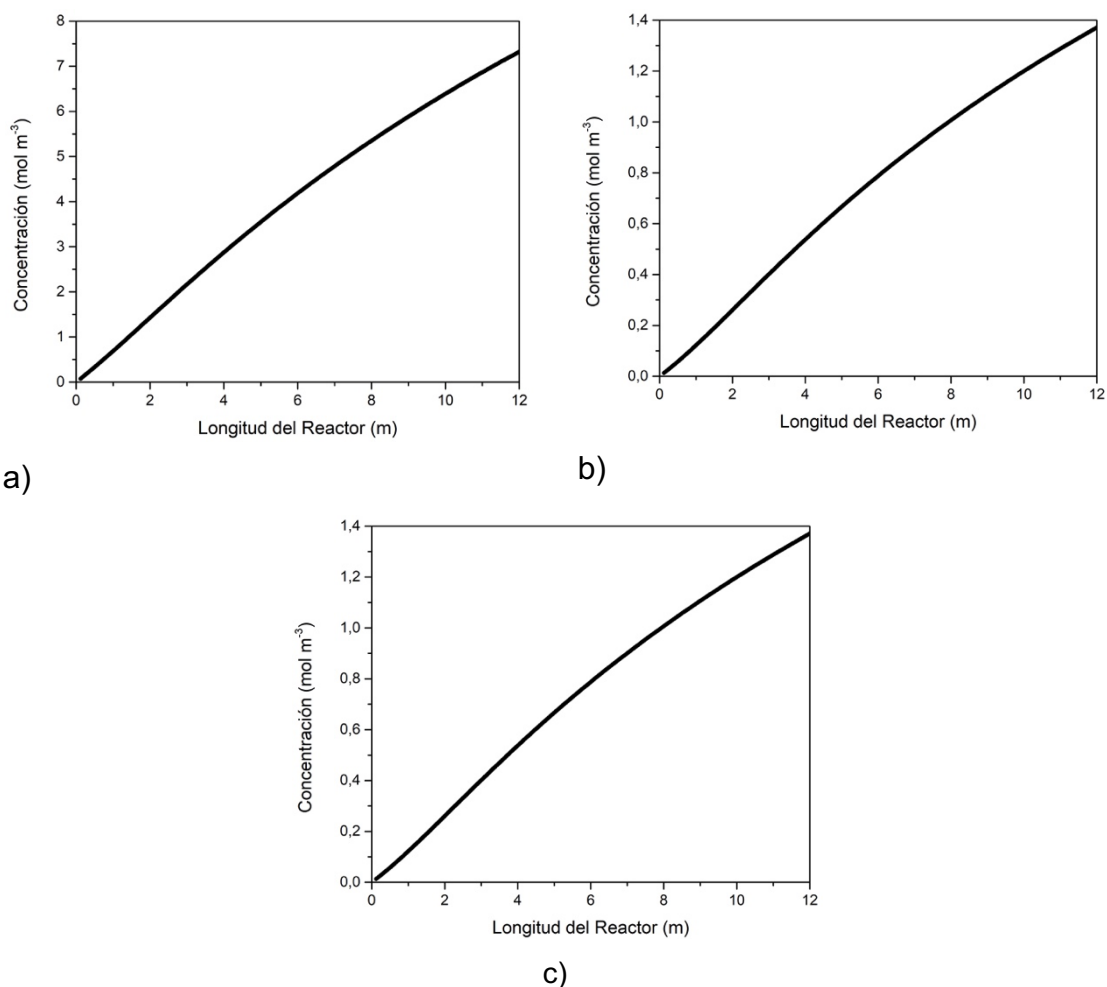


Figura 3.2 a) Perfil de Concentración de Óxido de Etileno, b) Perfil de Concentración del Dióxido de Carbono, c) Perfil de Concentración del Agua.

En la Fig. 3.3 se muestra el perfil de temperatura a lo largo del reactor. Se observó que la temperatura inicia en 498 K y esta aumenta teniendo un pico, este pico se le conoce como hot spot o punto caliente, este llega a 507 K y después desciende hasta los 503 K.

El punto caliente se encuentra a los 3.5 metros del reactor, el punto caliente se forma debido a que en esa distancia del reactor tubular se libera mucha energía, ahí se produce más la reacción.

Este punto es muy importante a considerar debido a que podría ser el punto más inestable del reactor. Ante una perturbación este puede oscilar y jamás estabilizarse. Es por eso que en esta tesis tomamos esto en cuenta para poder desarrollar un controlador P/PI composición – temperatura, para mantener

estable la temperatura de la chaqueta y mantener la composición en su concentración máxima.

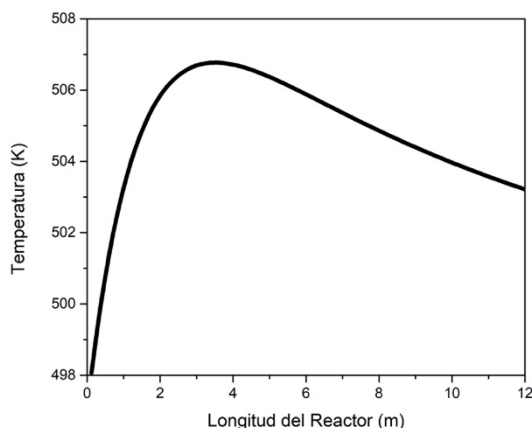


Figura 3.3 Perfil de Temperatura del Reactor.

3.2 Caracterización del Proceso del Óxido de Etileno

Para la caracterización del proceso se realizó un cambio escalón positivo del 5 % en la temperatura de la chaqueta del reactor a los 10 segundos, a partir del cual se obtienen las respuestas del flujo molar a la salida del reactor y de las temperaturas en los 11 puntos a lo largo del reactor.

Se tomará en cuenta el punto más cercano al punto caliente debido a que es el de mayor interés y también el más inestable a controlar. A continuación, se muestra la Tabla 3.1 de la división de los once puntos y donde se encuentran en el reactor.

Tabla 3.1 División de Puntos de Interés

Puntos de medición	0.05	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	0.95
Longitud del reactor (metros)	0.6	1.2	2.4	3.6	4.8	6.0	7.2	8.4	9.6	10.8	11.4

En la Fig. 3.4 se muestra los puntos de interés o los sensores de los que se hizo el controlador. El control en cascada se utilizó para un control más preciso y rápido en el proceso. La Fig. 3.5 muestra el esquema del control en cascada que consta de dos lazos de control: el lazo externo y el lazo interno.

El lazo externo controla la variable de proceso principal, en este caso la concentración de salida de etileno, que tiene una respuesta más lenta pero estable. Detecta las desviaciones entre la variable de proceso y la referencia deseada y genera una señal de control para el lazo interno.

El lazo interno controla una variable secundaria del proceso que sería la temperatura interna de cualquiera de los puntos de medición, que tiene una respuesta más rápida. Su objetivo es mantener la variable secundaria en su valor deseado siendo la temperatura de la chaqueta utilizando la señal de control proporcionada por el lazo externo.

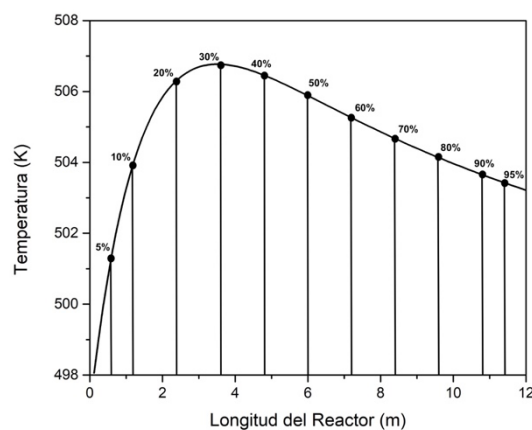


Figura. 3.4 División de los Puntos de Medición en la Temperatura.

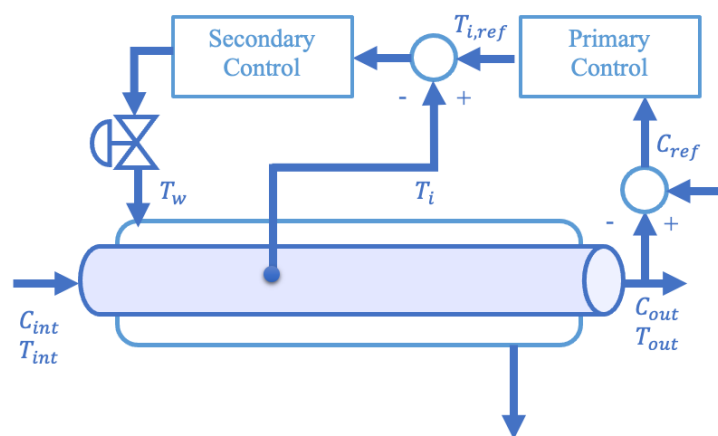


Figura. 3.5 Esquema del Control en Cascada.

El salto escalón en la composición y en la temperatura se realiza con el propósito de diseñar el controlador, su fin es mantener la concentración en su máximo

punto, mantener la temperatura interna y la temperatura de la chaqueta. Además de evaluar las respuestas ante perturbaciones.

La Fig. 3.6a muestra el salto en escalón de la composición de óxido de etileno para obtener los parámetros y formar una ecuación de primer grado más tiempo muerto. La Fig. 3.6b muestra el salto en escalón de la temperatura interna en el punto 0.3 para obtener los parámetros y formar una ecuación de primer grado más tiempo muerto.

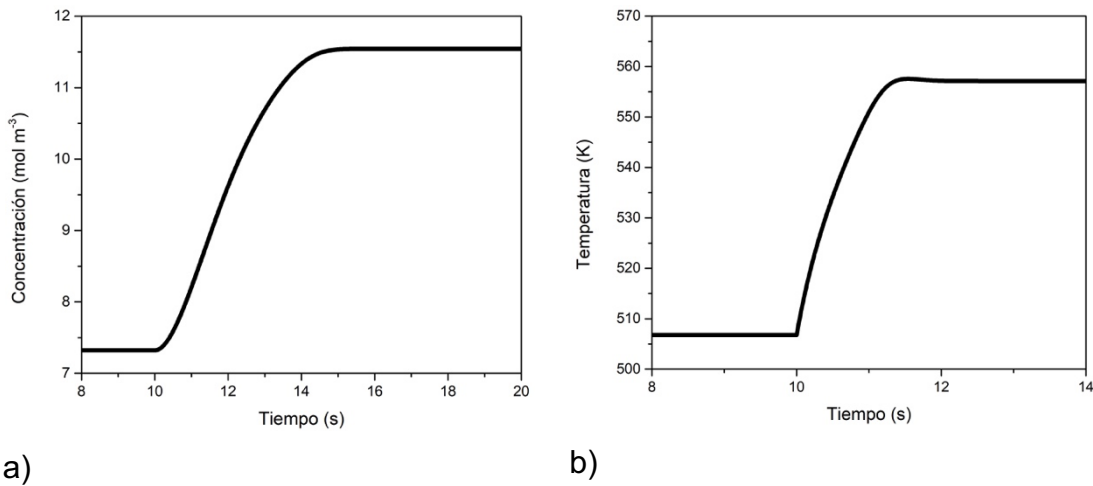


Figura 3.6 a) Salto escalón en la Concentración de Salida del Óxido de Etileno, b) Salto escalón en la Temperatura Interna en el Punto 0.3.

Después de realizar los cálculos necesarios para generar la ecuación de primer orden con tiempo muerto, tal como se describe la Ec. 3.1, se obtuvo la Ec. 3.3, que describe la concentración de óxido de etileno.

$$G_{com}(s) = \frac{K}{\tau_1 s + 1} e^{-\theta s} \quad (3.1)$$

$$G_{com}(s) = \frac{0.169855}{1.63995s + 1} e^{-0.67005s} \quad (3.2)$$

$$\frac{C(s)}{T_j(s)} = G_{T_j, C_o}(s) = \frac{0.169855}{1.63995s + 1} e^{-0.6s} \quad (3.3)$$

Después de realizar los cálculos necesarios para generar la ecuación de primer orden con tiempo muerto, tal y como se describe la Ec. 3.4, se obtuvo la Ec. 3.6, que describe la temperatura interna en punto 0.3.

$$G_{tem}(s) = \frac{K}{\tau_1 s + 1} e^{-\theta s} \quad (3.4)$$

$$G_{tem}(s) = \frac{2.026082}{0.5997s + 1} e^{-0.015s} \quad (3.5)$$

$$\frac{T_m(s)}{T_j(s)} = G_{T_j, T_m}(s) = \frac{2.026082}{0.5997s + 1} e^{-0.015s} \quad (3.6)$$

Las Ec. 3.3 y 3.6 representan un modelo de primer orden con tiempo muerto para la concentración y la temperatura. Estos modelos serán fundamentales para el diseño del controlador.

3.3 Diseño del Controlador del Óxido de Etileno

Control Proporcional (P)

En el diseño del control proporcional, solo es necesario la Ec. 3.6 de la temperatura interna, debido a que la respuesta de la temperatura debe ser más rápido que el de la concentración.

Realizando los cálculos, se obtuvo una ganancia proporcional de $K_c = 9.866328$ de valor adimensional para el controlador secundario.

Control Proporcional – Integral (PI)

En el diseño del controlador proporcional – integral, se necesita la relación de la Composición – Temperatura lo que es la Ec. 3.3 y 3.6.

Realizando los cálculos necesarios, se obtuvo lo siguiente, una ganancia proporcional de $K_p = 9.471 \text{ m}^3 \text{ K mol}^{-1}$ y un tiempo integral de $\tau_I = 1.04025 \text{ seg}$ para el diseño del controlador primario.

Los valores anteriores representan los parámetros esenciales requeridos para configurar el controlador y mitigar las perturbaciones en el sistema. Todos los cálculos de los puntos se han realizado y resumido en una tabla que contiene dichos parámetros. En la Tabla 3.2 se presentan los parámetros del sistema frente a variaciones en la temperatura de la chaqueta, mientras que en la Tabla 3.3 se detallan los parámetros del controlador.

Tabla 3.2 Parámetros del sistema ante cambio en la temperatura de la chaqueta (+10 %) para el caso de estudio seleccionado.

	Parámetros		
	K	τ	θ
Concentración	0.169855 (mol/m ³ K)	1.63995 (s)	0.67005 (s)
Punto (0.05)	0.570780 (adimensional)	0.1188 (s)	0.013 (s)
Punto (0.10)	0.990237 (adimensional)	0.21945 (s)	0.02155 (s)
Punto (0.20)	1.639123 (adimensional)	0.429 (s)	0.0235 (s)
Punto (0.30)	2.026082 (adimensional)	0.5997 (s)	0.015 (s)
Punto (0.40)	1.932251 (adimensional)	0.58725 (s)	0.00925 (s)
Punto (0.50)	1.559533 (adimensional)	0.43725 (s)	0.01445 (s)
Punto (0.60)	1.264421 (adimensional)	0.32595 (s)	0.01765 (s)
Punto (0.70)	1.103995 (adimensional)	0.2718 (s)	0.0181 (s)
Punto (0.80)	1.025338 (adimensional)	0.24795 (s)	0.01775 (s)
Punto (0.90)	0.985967 (adimensional)	0.23745 (s)	0.01725 (s)
Punto (0.95)	0.973762 (adimensional)	0.23475 (s)	0.01685 (s)

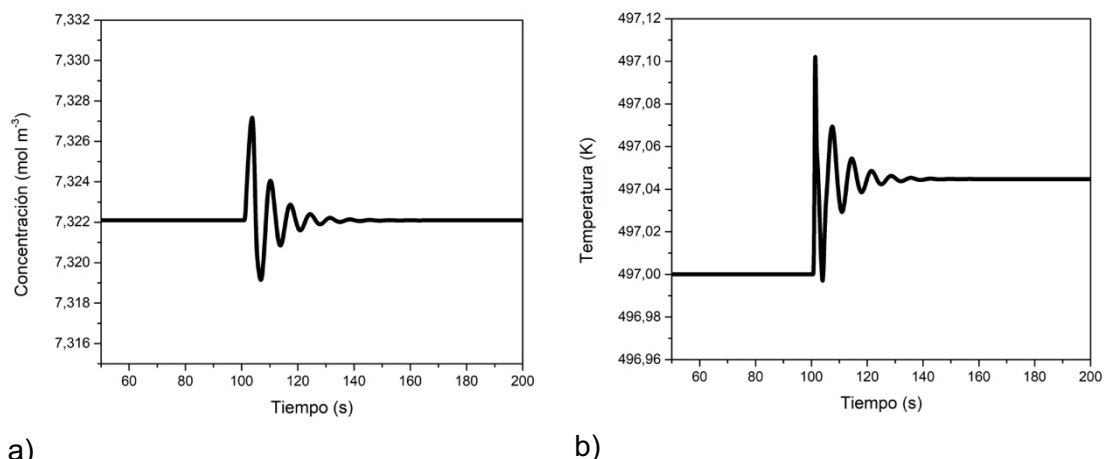
Tabla 3.3 Parámetros del controlador en cascada utilizando los pasos de IMC

Punto de Medición	Controlador Primario (PI)		Controlador Secundario (P)
	$K_p(\text{m}^3 \text{ K mol}^{-1})$	$\tau_I(\text{s})$	$K_c(\text{adimensional})$
0.05	3.890	1.52115	8.005235
0.10	6.385	1.4205	5.141844
0.20	9.037	1.21095	5.568622
0.30	9.471	1.04025	9.866328
0.40	9.061	1.0527	16.428114
0.50	8.422	1.2077	9.701465
0.60	7.497	1.314	7.302716
0.70	6.820	1.36815	6.801014
0.80	6.441	1.392	6.811906
0.90	6.236	1.4025	6.980566
0.95	6.166	1.4052	7.153566

3.4 Resultados del Controlador del Óxido de Etileno

La Fig. 3.7a presenta la respuesta de la concentración de la salida de óxido de etileno. En esta respuesta, se le aplicó una perturbación positiva de 10 % a la concentración de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la concentración en su valor máximo.

La respuesta de la temperatura de la chaqueta se muestra en la Fig. 3.7b. En esta respuesta, se le aplicó una perturbación positiva de 10 % a la concentración de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la temperatura de la chaqueta.



a)

b)

Figura 3.7 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Óxido de Etileno en el Punto 0.3 con Perturbación en la Concentración Entrada, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con perturbación en la Concentración de Alimentación.

La Fig. 3.8a presenta la respuesta de la concentración de la salida de óxido de etileno. En esta respuesta se le aplicó una perturbación positiva de 10 % a la temperatura de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la concentración en su nivel máximo.

La respuesta de la temperatura de la chaqueta se muestra en la Fig. 3.8b. En esta respuesta se le aplicó una perturbación positiva de 10 % a la temperatura de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la temperatura de la chaqueta.

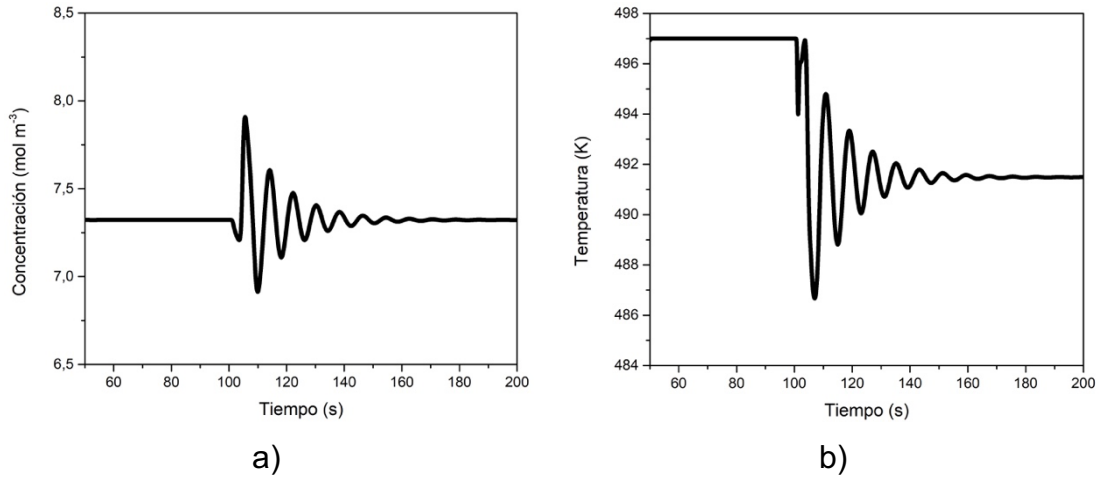


Figura 3.8 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Óxido de Etileno en el Punto 0.3 con Perturbación en la Temperatura de Alimentación, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con perturbación en la Temperatura de Alimentación.

3.5 Resultados de la Integral Absoluta del Error del Óxido de Etileno

Después de observar la respuesta del controlador ante la concentración y la temperatura, se evaluó el error del controlador. La evaluación se hizo con la Integral Absoluta del Error. La Fig. 3.9a presenta el error del controlador ante la perturbación positiva del 10 % en la concentración de alimentación alcanzando los 0.748720. Y la Fig. 3.9b muestra el error del controlador ante perturbación en la temperatura de alimentación alcanzando los 13234.403164.

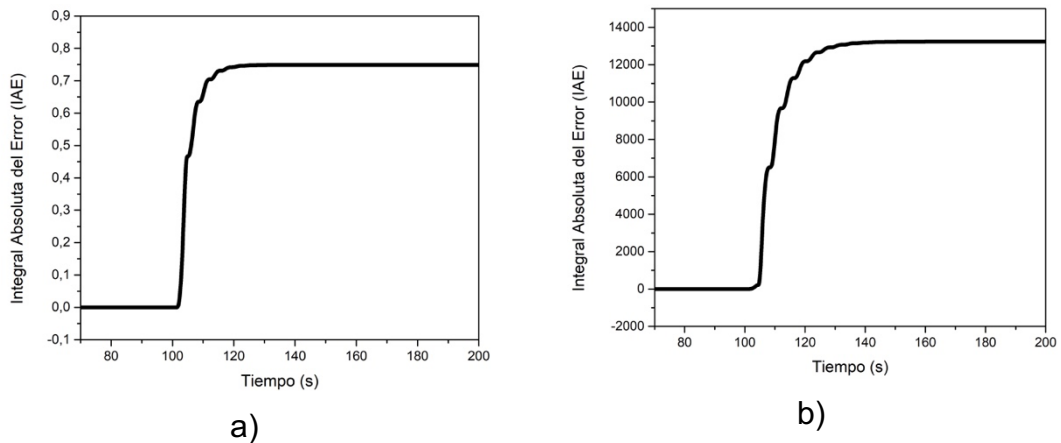


Figura 3.9 a) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación en la Concentración de Alimentación, b) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación en la Temperatura de Alimentación.

Los resultados de los once puntos con la Integral Absoluta del Error se registran en la Tabla 3.4

Tabla 3.4 Integral Absoluto del Error utilizando la Temperatura de la Chaqueta como Variable Manipulada.

Punto de Medición	IAE Concentración (mol m^{-3})	IAE Temperatura (K)
0.05	35.633132	353380.470848
0.10	18.725821	62161.002497
0.20	4.451745	9748.123904
0.30	0.748720	13234.403164
0.40	0.476806	18637.138232
0.50	1.106928	17469.693584
0.60	1.698741	16754.806219
0.70	1.940646	16353.789870
0.80	1.856416	15760.378421
0.90	1.614993	15045.901529
0.95	1.479642	14693.317164

Los resultados sugieren una reducción en el error del controlador al aplicarse a la salida del reactor. Se observa que, al comienzo del reactor, el error es más significativo, lo cual se atribuye al inicio del proceso y la dinámica inicial del sistema en ese punto. Esta tendencia indica que a medida que el proceso avanza y el sistema se estabiliza, el controlador logra mitigar y corregir de manera más efectiva las variaciones y perturbaciones en la concentración de óxido de etileno y en la temperatura de la chaqueta. En consecuencia, se logra mantener la concentración en su punto óptimo y estabilizar la temperatura de la chaqueta para asegurar un desempeño adecuado del reactor. Estos hallazgos son esenciales para optimizar el control del proceso y garantizar una operación estable y eficiente.

3.6 Respuesta de la Selectividad y Rendimiento del Óxido de Etileno

El objetivo de la tesis es observar y analizar si en los puntos de control, el controlador modifica la selectividad y rendimiento o si esta la mejora. El controlador no debería afectar esto, porque en una reacción paralela se debe mantener una selectividad alta y rendimiento considerable según los resultados obtenidos.

La Fig. 3.10a muestra la respuesta del rendimiento ante la perturbación positiva al 10 % en la concentración de alimentación en el Punto 0.3. Se observa que el rendimiento obtenido de 3.3 % baja a 3 %. En cambio, la selectividad se mantiene en 92 %. Esto se observa en la Fig. 3.10b que presenta la respuesta de la selectividad ante la perturbación positiva al 10 % en la concentración de alimentación en el Punto 0.3. La perturbación se aplica a los 100 segundos del proceso.

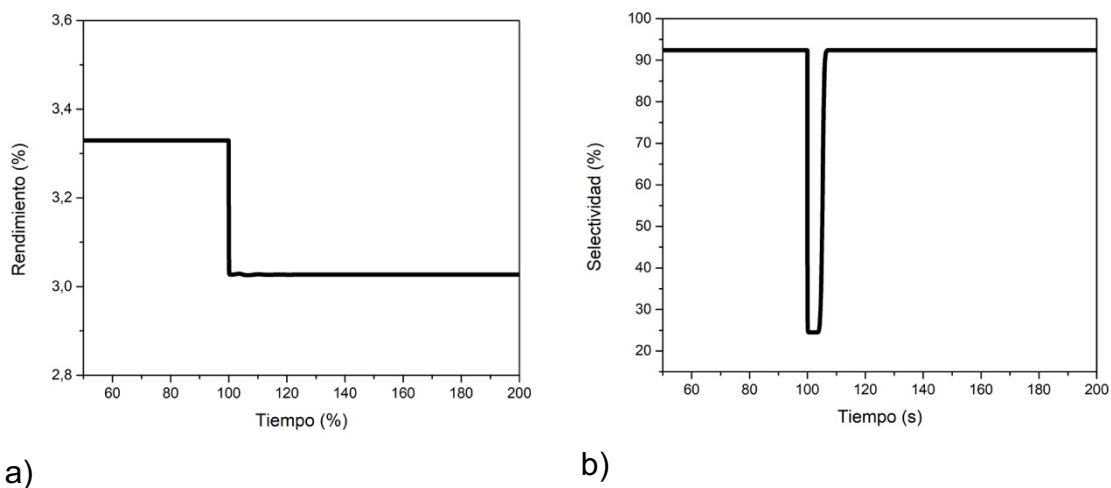


Figura 3.10 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación en la Concentración en el Punto 0.3, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación en la Concentración en el Punto 0.3.

La Fig. 3.11a muestra la respuesta del rendimiento ante la perturbación positiva al 10 % en la temperatura de alimentación en el Punto 0.3. La perturbación se aplicó a los 100 segundos del proceso. Se observó que la respuesta oscila después de los 100 segundos, pero rendimiento obtenido de 3.3 % se mantiene, este no incrementa o decrementa.

Por el otro lado, la Fig. 3.11b muestra la respuesta de la selectividad ante perturbación positiva al 10 % en la temperatura de alimentación en el punto 0.3. Se observó que la respuesta de la selectividad después de los 100 segundos de haber aplicado la perturbación oscila y aumenta de 92 % a 94 %.

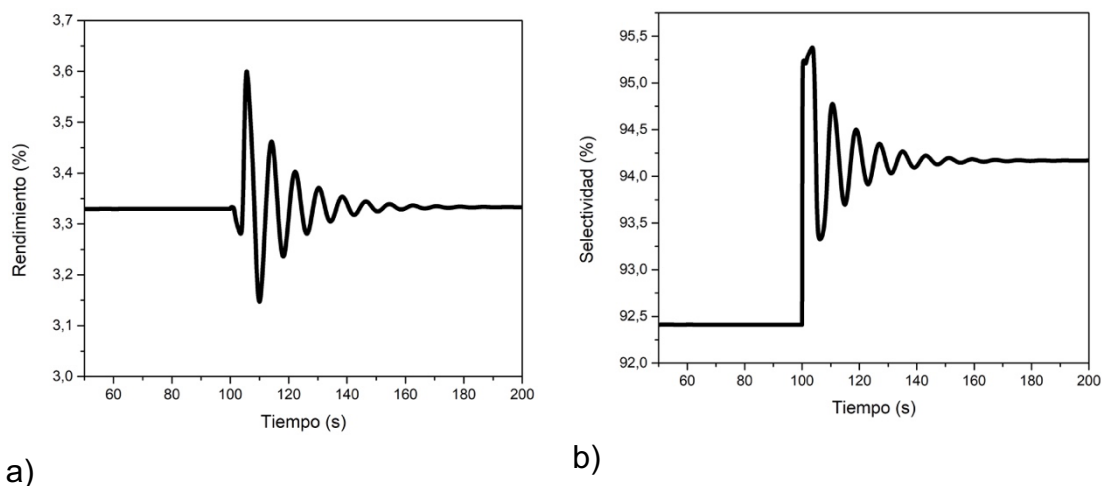


Figura 3.11 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación en la Temperatura en el Punto 0.3, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación en la Temperatura en el Punto 0.3.

Se obtuvieron los valores de la selectividad y rendimiento para todos los puntos de control, los cuales se han consolidado en la Tabla 3.5.

Tabla 3.5 Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en los puntos de control.

Puntos de Control	Rendimiento (%)		Selectividad (%)	
	Concentración	Temperatura	Concentración	Temperatura
0.05	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722
0.10	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722
0.20	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722
0.30	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722
0.40	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722
0.50	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722
0.60	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722
0.70	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722
0.80	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722
0.90	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722
0.95	3.026708	3.33296	92.410799	94.16722

3.7 Simulación Dinámica del Proceso del Anhídrido Maleico

En la Fig. 3.12a se muestra el perfil de butano. La concentración inicial de butano en el reactor es de $0.5803 \text{ mol m}^{-3}$. Se observó como este se iba consumiendo a lo largo del reactor. El reactor se considera de 7 metros de longitud y se muestra que al final la concentración de anhídrido maleico es de 0.385 mol m^{-3} .

La Fig. 3.12b muestra el perfil del anhídrido maleico, como este se va produciendo a lo largo del reactor. La concentración final que alcanza el anhídrido es de 0.16 mol m^{-3} .

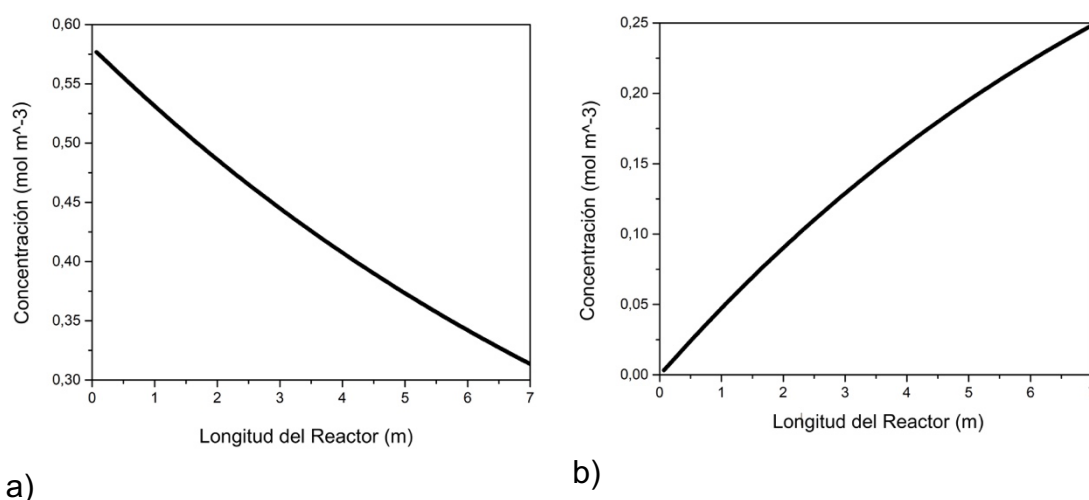


Figura 3.12 a) Perfil de Concentración de Butano, b) Perfil de Concentración del Anhídrido Maleico.

En la Fig. 3.13 se muestra se muestra el perfil de temperatura a lo largo del reactor. Se observó que la temperatura inicia en 727 K y esta aumenta, teniendo un pico, a esto se le conoce como hot spot o punto caliente, este llega a 740 K y después desciende hasta los 733 K.

El punto caliente se encuentra a 0.8 metros del reactor. Este se forma debido a que en esa distancia del reactor tubular se libera mucha energía, y ahí se produce más la reacción.

Este punto es muy importante a considerar debido a que podría ser el punto más inestable del reactor. Ante una perturbación el hot spot puede oscilar y jamás estabilizarse. Es por eso que en esta tesis tomamos esto en cuenta para poder desarrollar un controlador P/PI composición – temperatura, para mantener estable la temperatura de la chaqueta y mantener la composición en su máxima concentración.

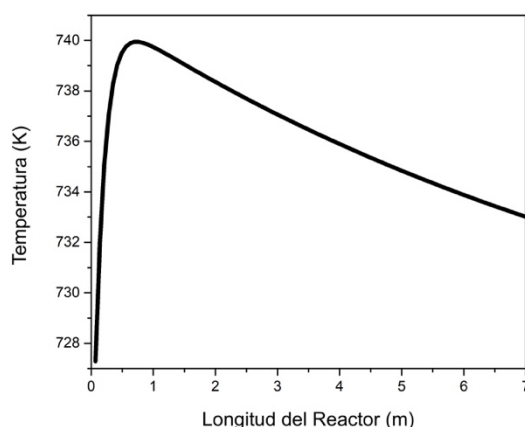


Figura 3.13 Perfil de Temperatura del Reactor.

3.8 Caracterización del Proceso del Anhídrido Maleico

Para la caracterización del proceso se realizó un cambio escalón negativo del 5 % en la temperatura de la chaqueta del reactor a los 20 segundos, a partir del cual se obtienen las respuestas de concentración a la salida del reactor y de la temperatura en los 11 puntos a lo largo del reactor. Se tomará en cuenta el punto más cercano al punto caliente, ya que es el de mayor interés y también el más inestable a controlar. A continuación, se muestra la Tabla 3.6 de la división de los once puntos y donde se encuentran en el reactor.

Tabla 3.6 División de Puntos de Interés

Puntos de medición	0.05	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	0.95
Longitud del reactor (metros)	0.35	0.7	1.4	2.1	2.8	3.5	4.2	4.9	5.6	6.3	6.65

En la Fig. 3.14 se muestra los puntos de interés o los sensores de los que se hizo el controlador. El control en cascada se utilizó para un control más preciso y rápido en el proceso.

El lazo externo controla la variable de proceso principal, en este caso la concentración de salida de etileno, que tiene una respuesta más lenta pero estable. Detecta las desviaciones entre la variable de proceso y la referencia deseada y genera una señal de control para el lazo interno.

El lazo interno controla una variable secundaria del proceso que sería la temperatura interna de cualquiera de los puntos de medición, que tiene una respuesta más rápida. Su objetivo es mantener la variable secundaria en su valor deseado siendo la temperatura de la chaqueta utilizando la señal de control proporcionada por el lazo externo.

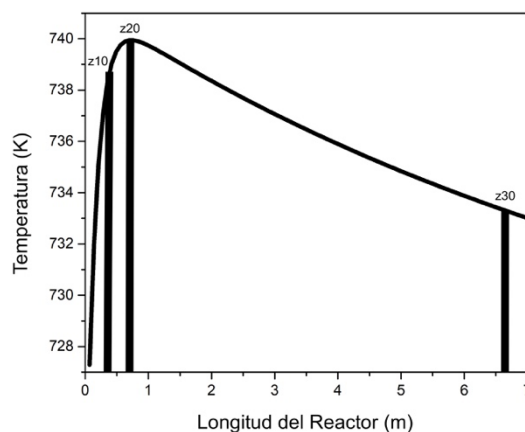


Figura. 3.14 División de los Puntos de Medición en la Temperatura.

La Fig. 3.15a muestra el salto en escalón de la composición de etileno para obtener los parámetros y formar una ecuación de primer grado más tiempo muerto. La Fig. 3.15b muestra el salto en escalón de la temperatura interna en el punto 0.1 para obtener los parámetros y formar una ecuación de primer grado más tiempo muerto.

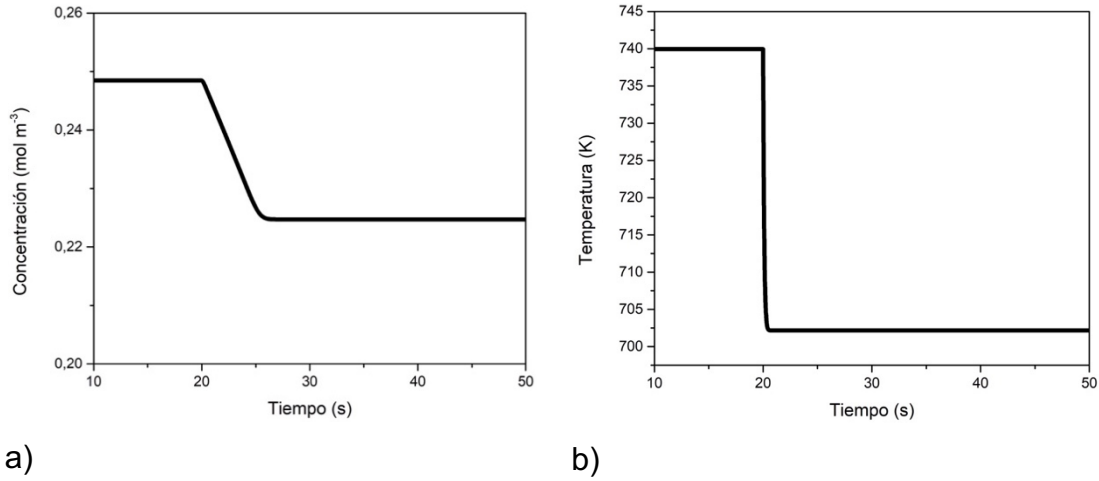


Figura 3.15 a) Salto escalón en la Concentración de Anhídrido Maleico, b) Salto escalón en la Temperatura Interna en el Punto 0.1.

Después de realizar los cálculos necesarios para generar la ecuación de primer orden con tiempo muerto, tal como se describe la Ec. 3.10, se obtuvo la Ec. 3.12, que describe la concentración de anhídrido maleico.

$$G_{com}(s) = \frac{K}{\tau_1 s + 1} e^{-\theta s} \quad (3.10)$$

$$G_{com}(s) = \frac{0.000657151}{2.775s + 1} e^{-0.675s} \quad (3.11)$$

$$\frac{C(s)}{T_j(s)} = G_{T_j, C_o}(s) = \frac{0.000657151}{2.775s + 1} e^{-0.675s} \quad (3.12)$$

Después de realizar los cálculos necesarios para generar la ecuación de primer orden con tiempo muerto, tal y como se describe la Ec. 3.13, se obtuvo la Ec. 15, que describe la temperatura interna en punto 0.1.

$$G_{tem}(s) = \frac{K}{\tau_1 s + 1} e^{-\theta s} \quad (3.13)$$

$$G_{tem}(s) = \frac{1.04472852}{0.09675s + 1} e^{-0.00165s} \quad (3.14)$$

$$\frac{T_m(s)}{T_j(s)} = G_{T_j, T_m}(s) = \frac{1.04472852}{0.09675s + 1} e^{-0.00165s} \quad (3.15)$$

Las Ec. 3.12 y 3.15 representan un modelo de primer orden con tiempo muerto para la concentración y la temperatura. Estos modelos son fundamentales para el diseño del controlador.

3.9 Diseño del Controlador del Anhídrido Maleico

Control Proporcional (P)

En el diseño del control proporcional solo es necesario la Ec. 3.15 de la temperatura interna, debido a que la respuesta de la temperatura debe ser más rápido que el de la concentración.

Realizando los cálculos se obtuvo una ganancia proporcional de $K_c = 28.0629668$ adimensional para el controlador secundario.

Control Proporcional – Integral (PI)

En el diseño del controlador proporcional – integral, es necesario la relación de la Composición – Temperatura, que se encuentra en la Ec. 3.12 y 3.15 para poder diseñar un controlador del tipo PI.

Realizando los cálculos se obtuvo una ganancia proporcional de $K_p = 2852.980 \text{ m}^3 \text{ K mol}^{-1}$ y un tiempo integral de $\tau_I = 2.67825 \text{ seg}$ para el diseño del controlador primario.

Los valores anteriores representan los parámetros esenciales requeridos para configurar el controlador y mitigar las perturbaciones en el sistema. Todos los cálculos de los puntos se han realizado y resumido en una tabla que contiene dichos parámetros. En la Tabla 3.8 se presentan los parámetros del sistema frente a variaciones en la temperatura de la chaqueta, mientras que en la Tabla 3.7 se detallan los parámetros del controlador.

Tabla 3.7 Parámetros del sistema ante cambio en la temperatura de la chaqueta (+5 %) para el caso de estudio seleccionado.

	Parámetros		
	K	τ	θ
Concentración	0.000657151 (mol/m ³ K)	2.775 (s)	0.675 (s)
Punto (0.05)	0.936479668 (adimensional)	0.0807 (s)	0.0021 (s)
Punto (0.10)	1.044728520 (adimensional)	0.09675 (s)	0.00165 (s)
Punto (0.20)	1.052623458 (adimensional)	0.0977415 (s)	0.0008585 (s)
Punto (0.30)	1.046541826 (adimensional)	0.0982065 (s)	0.0004935 (s)
Punto (0.40)	1.040875076 (adimensional)	0.0982005 (s)	0.0002995 (s)
Punto (0.50)	1.035762351 (adimensional)	0.097566 (s)	0.000334 (s)
Punto (0.60)	1.031150927 (adimensional)	0.0969045 (s)	0.0003955 (s)
Punto (0.70)	1.026991452 (adimensional)	0.0965190 (s)	0.000381 (s)
Punto (0.80)	1.023240138 (adimensional)	0.0959625 (s)	0.0004375 (s)
Punto (0.90)	1.019857787 (adimensional)	0.0956865 (s)	0.0004135 (s)
Punto (0.95)	1.018293859 (adimensional)	0.0837000 (s)	0.0043000 (s)

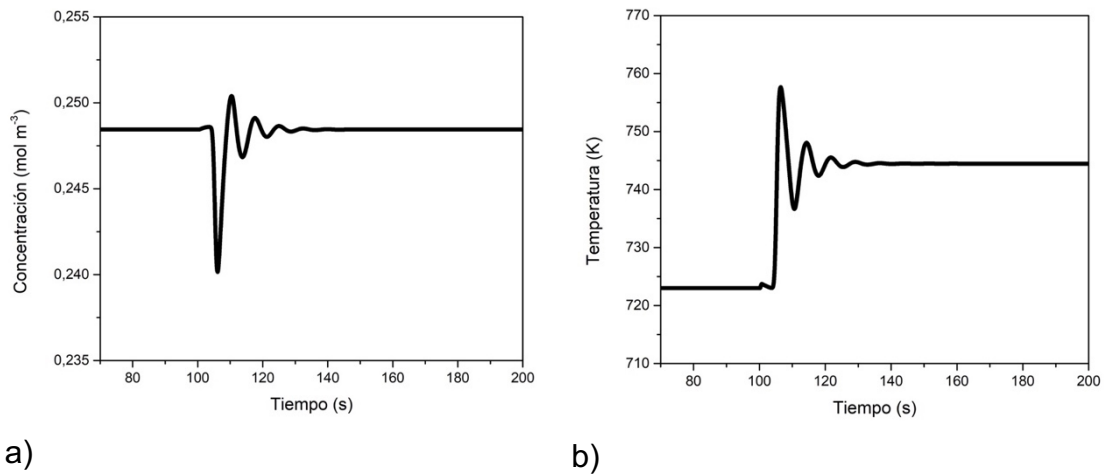
Tabla 3.8 Parámetros del controlador en cascada utilizando los pasos de IMC

Punto de Medición	Controlador Primario (PI)		Controlador Secundario (P)
	$K_p(\text{m}^3 \text{ K mol}^{-1})$	$\tau_I(\text{s})$	$K_c(\text{adimensional})$
0.05	2852.980	2.6943	20.5175685
0.10	3161.686	2.67825	28.0629668
0.20	3180.660	2.677285	54.0798727
0.30	3160.023	2.6767935	95.0750343
0.40	3142.016	2.6767995	157.502796
0.50	3127.484	2.677434	141.013898
0.60	3114.613	2.6780995	118.807874
0.70	3102.429	2.678481	123.336328
0.80	3091.998	2.6790375	107.180538
0.90	3081.985	2.6790375	113.450273
0.95	3108.937	2.6913	9.55771073

3.10 Resultados del Controlador del Anhídrido Maleico

Para este caso específico de producción de anhídrido maleico, se hizo dos evaluaciones con respecto a la perturbación. Se trabajó con perturbaciones negativas y positivas para observar si existía algún efecto en la selectividad y rendimiento. La Fig. 3.16a muestra la respuesta de la concentración de la salida de anhídrido maleico. Para esta respuesta, se le aplicó una perturbación negativa del 5 % a la concentración de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la concentración de anhídrido maleico.

La respuesta de la temperatura de la chaqueta se muestra en la Fig. 3.16b. Para esta respuesta se le aplicó una perturbación negativa de 5 % a la concentración de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la temperatura de la chaqueta.



a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Anhídrido Maleico en el Punto 0.1 con Perturbación -5 % en la Concentración de Alimentación,
 b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con Perturbación -5 % en la Concentración de Alimentación.

La Fig. 3.17a presenta la respuesta de la concentración de la salida de anhídrido maleico. La respuesta muestra una perturbación negativa del 5 % en la temperatura de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la concentración de anhídrido maleico.

La respuesta de la temperatura de la chaqueta se muestra en la Fig. 3.17b. La respuesta muestra una perturbación negativa de 5 % en la temperatura de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la temperatura de la chaqueta.

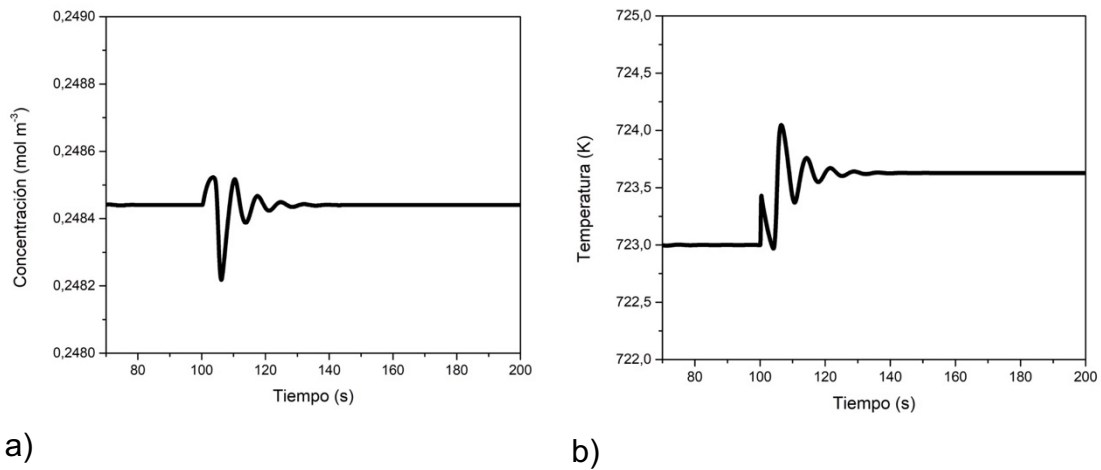


Figura 3.17 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Anhídrido Maleico en el Punto 0.1 con Perturbación -5 % en la Temperatura de Alimentación, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con Perturbación -5 % en la Temperatura de Alimentación.

La Fig. 3.18a muestra la respuesta de la concentración de la salida de anhídrido maleico. Para esta respuesta se le aplicó una perturbación positiva del 5 % en la concentración de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la concentración de anhídrido maleico.

La respuesta de la temperatura de la chaqueta se muestra en la Fig. 3.18b. Para esta respuesta se le aplicó una perturbación positiva del 5 % en la concentración de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la temperatura de la chaqueta.

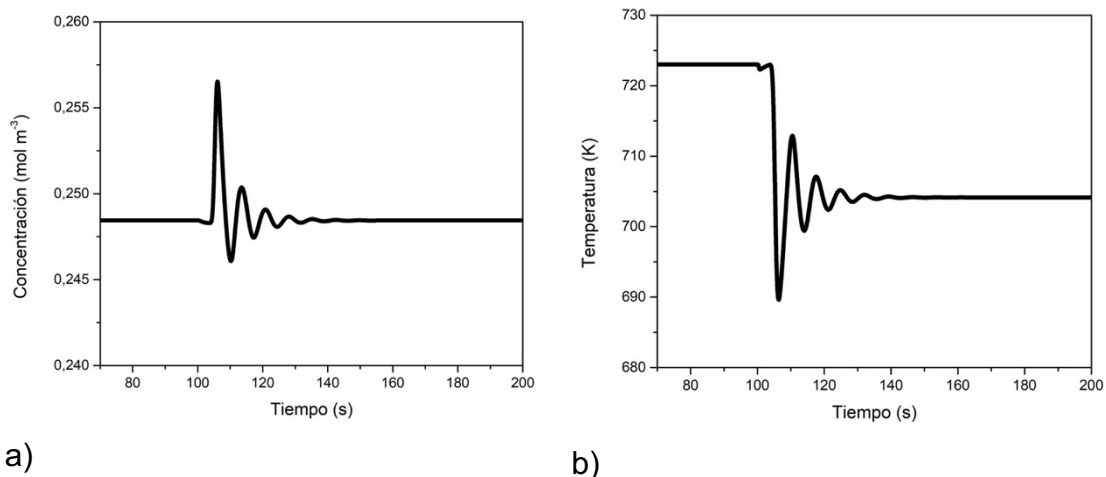
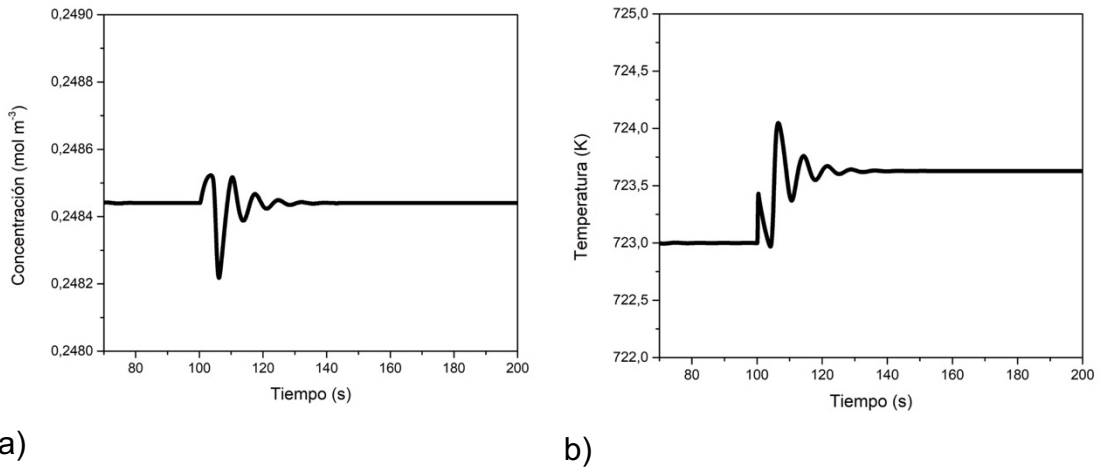


Figura 3.18 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Anhídrido Maleico en el Punto 0.1 con Perturbación +5 % en la Concentración de Alimentación, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con Perturbación +5 % en la Concentración de Alimentación.

La Fig. 3.19a muestra la respuesta de la concentración de la salida de anhídrido maleico. Para esta respuesta se le aplicó una perturbación positiva de 5 % a la temperatura de alimentación a los 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la concentración de anhídrido maleico.

La respuesta de la temperatura de la chaqueta se muestra en la Fig. 3.19b, para esta respuesta se le aplicó una perturbación positiva de 5 % a la temperatura inicial en el tiempo 100 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la temperatura de la chaqueta.

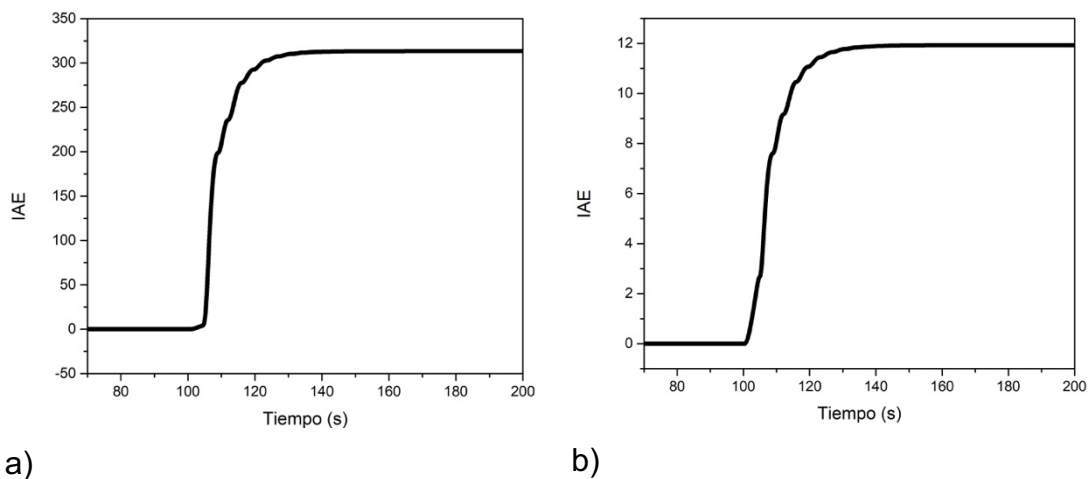


a) b)

Figura 3.19 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Anhídrido Maleico en el Punto 0.1 con Perturbación +5 % en la Temperatura de Alimentación, b) Respuesta de la Temperatura de la Chaqueta con Perturbación +5 % en la Temperatura de Alimentación.

3.11 Resultados de la Integral Absoluta del Error del Anhídrido Maleico

Después de observar la respuesta del controlador ante la concentración y la temperatura, se evaluó el error del controlador. La evaluación se hizo con la Integral Absoluta del Error. La Fig. 3.20a presenta el error del controlador ante la perturbación positiva del 10 % en la concentración de alimentación alcanzando los 313.233375. Y la Fig. 3.20b muestra el error del controlador ante perturbación en la temperatura de alimentación alcanzando los 11.923638.



a) b)

Figura 3.20 a) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación -5 % en la Concentración de Alimentación, b) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación -5 % en la Temperatura de Alimentación.

La Fig. 3.21a presenta el error del controlador ante la perturbación positiva del 10 % en la concentración de alimentación alcanzando los 335.946460. Y la Fig. 3.21b muestra el error del controlador ante perturbación en la temperatura de alimentación alcanzando los 12.066094.

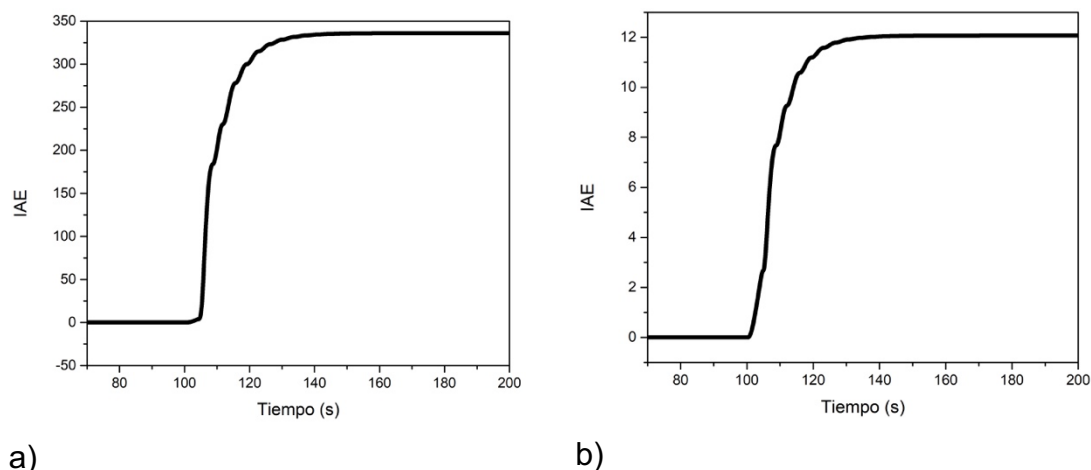


Figura 3.21 a) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación +5 % en la Concentración de Alimentación, b) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación +5 % en la Temperatura de Alimentación.

Los resultados de los once puntos con la Integral Absoluta del Error ante la Perturbación -5 % se registran en la Tabla 3.9 y ante la Perturbación +5 % en la Tabla 3.10.

Tabla 3.9 Integral Absoluto del Error con Perturbación -5 %.

Puntos de Medición	Integral Absoluta del Error	
	Concentración (mol m^{-3})	Temperatura (K)
0.05	318.277702	46.280210
0.10	313.233375	11.923638
0.20	310.644452	10.255754
0.30	309.902978	10.359795
0.40	309.197503	10.373408
0.50	309.059420	10.366155
0.60	309.369831	10.334217
0.70	310.042229	10.282708
0.80	310.837914	10.217770
0.90	324.219828	46.864022
0.95	311.179689	10.067907

Tabla 3.10 Integral Absoluta del Error con Perturbación +5 %.

Puntos de Medición	Integral Absoluta del Error	
	Concentración (mol m^{-3})	Temperatura (K)
0.05	342.103068	46.379278
0.10	335.946460	12.066094
0.20	333.318112	10.406184
0.30	333.077355	10.511155
0.40	332.341847	10.524421
0.50	332.374871	10.516705
0.60	332.892322	10.484134
0.70	333.778848	10.431920
0.80	334.639267	10.366197
0.90	354.005464	46.983295
0.95	331.832618	10.213497

Los resultados sugieren una reducción en el error del controlador al aplicarse a la salida del reactor. Se observa que, al comienzo del reactor, el error es más significativo, lo cual se atribuye al inicio del proceso y la dinámica inicial del sistema en ese punto. Esta tendencia indica que a medida que el proceso avanza y el sistema se estabiliza, el controlador logra mitigar y corregir de manera más efectiva las variaciones y perturbaciones en la concentración del anhídrido maleico y en la temperatura de la chaqueta. En consecuencia, se logra mantener la concentración en su punto óptimo y estabilizar la temperatura de la chaqueta para asegurar un desempeño adecuado del reactor. Estos hallazgos son esenciales para optimizar el control del proceso y garantizar una operación estable y eficiente.

3.12 Respuesta de la Selectividad y Rendimiento del Anhídrido Maleico

El objetivo de la tesis es observar y analizar si en los puntos de control, el controlador modifica la selectividad y rendimiento o si esta la mejora. El controlador no debe afectar esto porque en una reacción paralela se debe mantener una selectividad alta y rendimiento considerable según los resultados obtenidos.

La Fig. 3.22a muestra la respuesta del rendimiento con perturbación -5 % en la concentración de alimentación en el Punto 0.1; se observa que el rendimiento, que era del 43 % y aumenta a 45 %, el controlador adopta el rendimiento como si fuera la respuesta más rápida. En cambio, la selectividad la mantiene en 94 % poniéndola en prioridad. Esto se observa en la Fig. 3.22b la respuesta de la selectividad con perturbación negativa de 5 % en la concentración de alimentación en el Punto 0.1 a los 100 segundos.

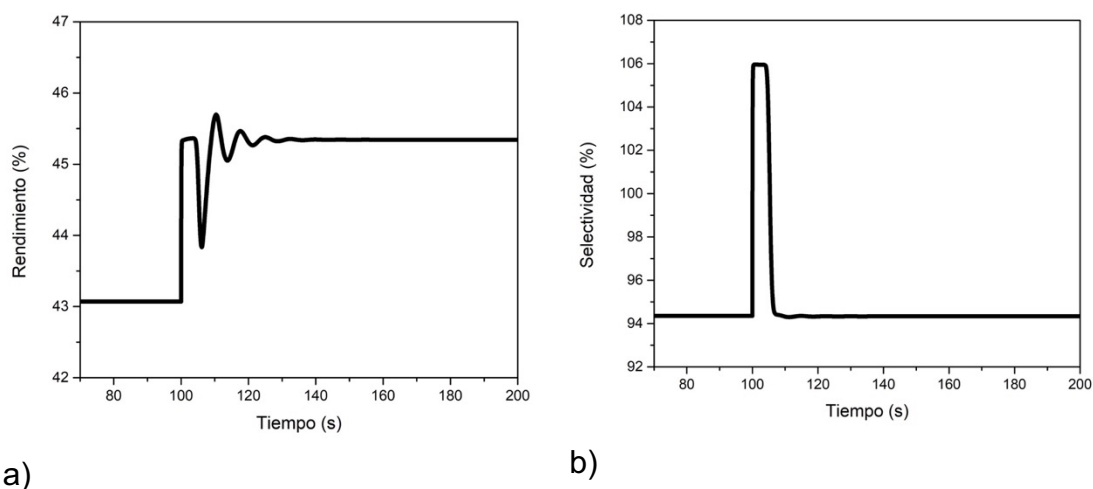
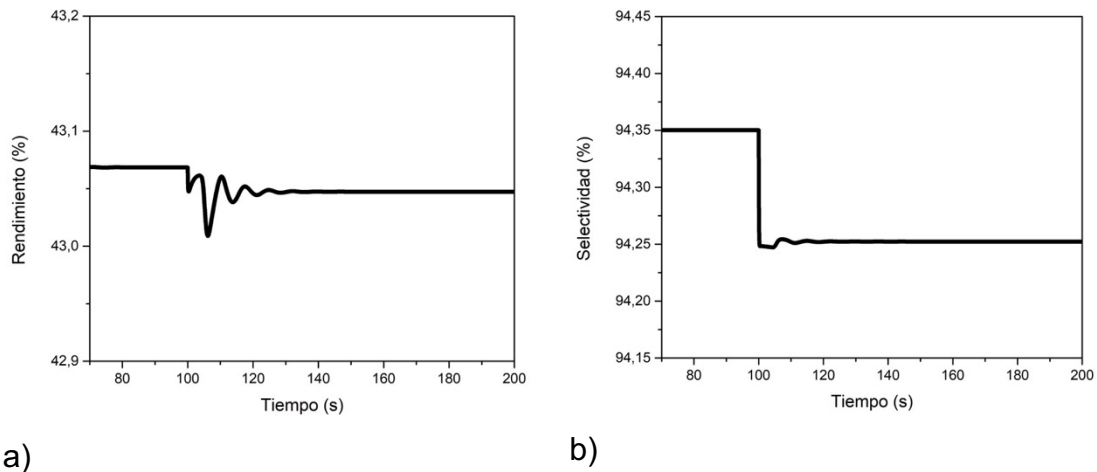


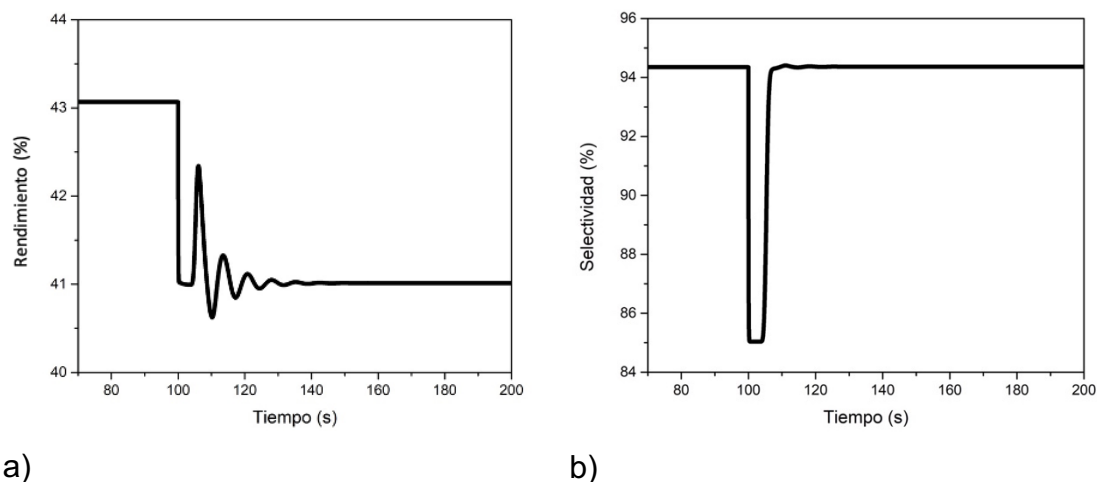
Figura 3.22a Respuesta del Rendimiento con Perturbación -5 % en la Concentración en el Punto 0.1, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación -5 % en la Concentración en el Punto 0.1.

La Fig. 3.23a muestra la respuesta del rendimiento con perturbación negativa de 5 % en la temperatura de alimentación en el punto 0.1, se observó que el rendimiento de 43 % obtenido se mantiene, en este caso es opuesto al anterior, donde la perturbación está en la concentración de alimentación. Por el otro lado, la Fig. 3.23b muestra la respuesta de la selectividad con perturbación en la temperatura inicial en el punto 0.3, se observó que la selectividad disminuye de 94.35 % a 94.25 %.



a) b)
 Figura 3.23 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación -5 % en la Temperatura en el Punto 0.1, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación -5 % en la Temperatura en el Punto 0.1.

La Fig. 3.24a muestra la respuesta del rendimiento con perturbación positiva de 5 % en la concentración de alimentación en el Punto 0.1, se observa que el rendimiento de 43 % desciende a 41 %, el controlador adopta el rendimiento como si fuera la respuesta más rápida. En cambio, la selectividad la mantiene en 94 % poniéndola en prioridad. Esto se observa en la Fig. 3.22b la respuesta de la selectividad con perturbación positiva de 5 % en la concentración de alimentación en el Punto 0.3 a los 100 segundos.



a) b)
 Figura 3.24a Respuesta del Rendimiento con Perturbación +5 % en la Concentración en el Punto 0.3, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación +5 % en la Concentración en el Punto 0.1.

La Fig. 3.25a muestra la respuesta del rendimiento con perturbación -5 % en la temperatura de alimentación en el punto 0.1, se observó que el rendimiento de 43 % obtenido se mantiene, en este caso es opuesto al anterior, donde la perturbación está en la concentración de alimentación. Por el otro lado, la Fig. 3.23b muestra la respuesta de la selectividad con perturbación en la temperatura inicial en el punto 0.1, se observó que la selectividad aumenta de 94.35 % a 94.45 %.

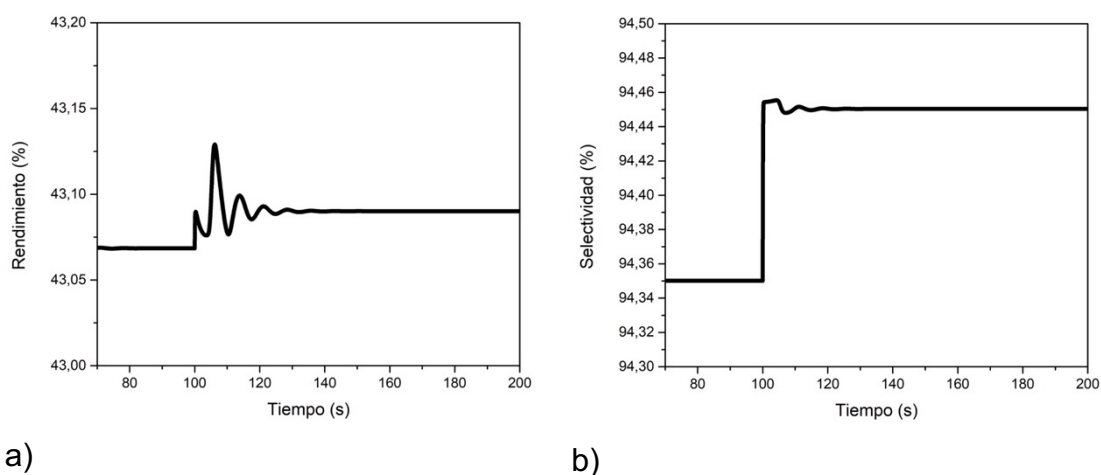


Figura 3.25 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación +5 % en la Temperatura en el Punto 0.3, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación +5 % en la Temperatura en el Punto 0.3.

Se obtuvieron todos los valores de la selectividad y rendimiento de todos los puntos ante la perturbación de -5 % y se concentraron en la Tabla 3.11, por otro lado, ante la perturbación +5 % se encuentra en la Tabla 3.12.

Tabla 3.11 Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en los puntos de control con Perturbación -5 %.

Puntos de Control	Selectividad (%)		Rendimiento (%)	
	Concentración	Temperatura	Concentración	Temperatura
0.05	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261
0.10	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261
0.20	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261
0.30	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261
0.40	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261
0.50	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261
0.60	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261
0.70	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261
0.80	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261
0.90	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261
0.95	94.330800	94.252230	45.342570	43.047261

Tabla 3.12 Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en los puntos de control con Perturbación +5 %.

Puntos de Control	Selectividad (%)		Rendimiento (%)	
	Concentración	Temperatura	Concentración	Temperatura
0.05	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060
0.10	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060
0.20	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060
0.30	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060
0.40	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060
0.50	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060
0.60	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060
0.70	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060
0.80	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060
0.90	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060
0.95	94.360696	94.450302	41.011750	43.090060

3.13 Caracterización del Proceso del Óxido de Etileno Cambiando la Variable Manipulada

En los dos casos de estudios anteriores, se trabajó la temperatura de la chaqueta como variable manipulada para caracterizar el proceso. En el caso de estudio de la producción de óxido de etileno se cambió la variable manipulada. Este cambio se implento para observar si de igual manera utilizando la velocidad del fluido de alimentación en vez de la temperatura de la chaqueta se podría estabilizar el proceso ante alguna perturbación.

Para la caracterización del proceso se realizó un cambio escalón positivo del 5 % en la velocidad de flujo de alimentación del reactor a los 20 segundos, a partir del cual se obtienen las respuestas de la concentración a la salida del reactor y de la temperatura en los 11 puntos a lo largo del reactor.

Se tomará en cuenta el Punto 0.4 a los 4.8 metros de longitud del reactor, debido a que está cerca del punto caliente y es de mayor interés. A continuación, se muestra la Tabla 3.13 de la división de los once puntos y donde se encuentran en el reactor.

Tabla 3.13 División de Puntos de Interés

Puntos de medición	0.05	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	0.95
Longitud del reactor (metros)	0.6	1.2	2.4	3.6	4.8	6.0	7.2	8.4	9.6	10.8	11.4

La Fig. 3.26 muestra el esquema del control en cascada que consta de dos lazos de control: el lazo externo y el lazo interno.

El lazo externo controla la variable de proceso principal, en este caso la concentración de salida de etileno, que tiene una respuesta más lenta pero estable. Detecta las desviaciones entre la variable de proceso y la referencia deseada y genera una señal de control para el lazo interno.

El lazo interno controla una variable secundaria del proceso que sería la temperatura interna de cualquiera de los puntos de medición, que tiene una respuesta más rápida. Su objetivo es mantener la variable secundaria en su valor deseado siendo la velocidad del fluido utilizando la señal de control proporcionada por el lazo externo.

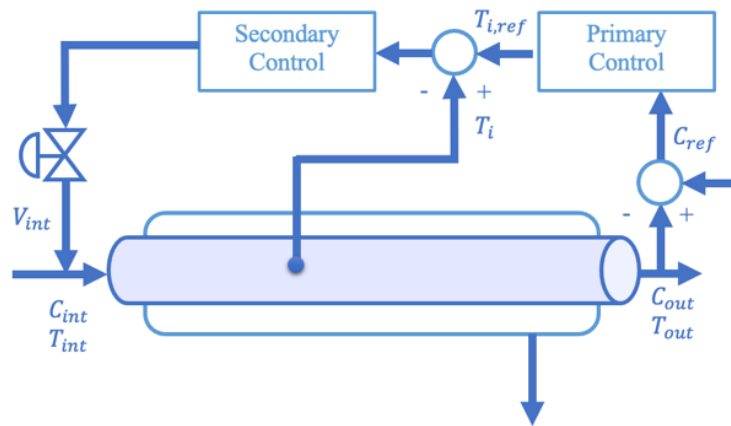
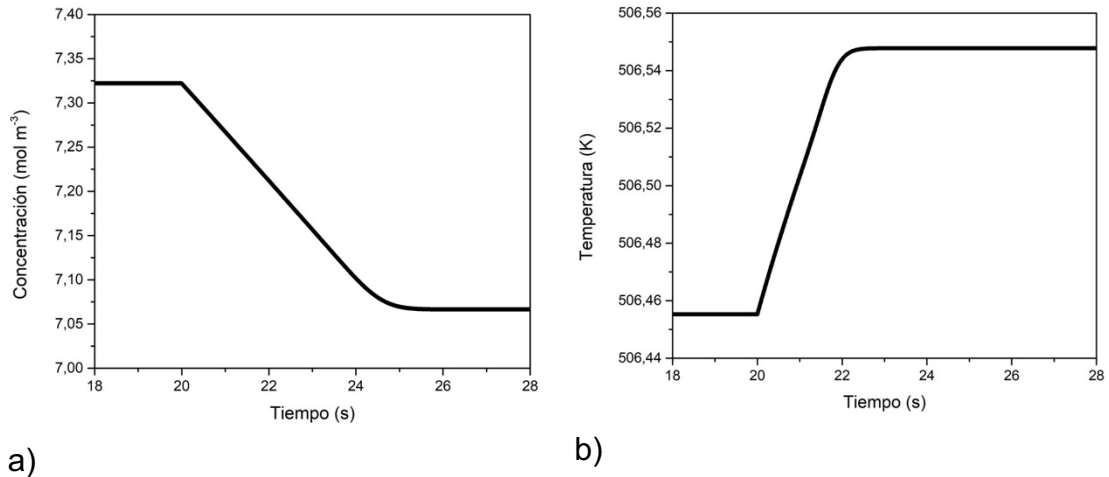


Figura. 3.26 Esquema del Control en Cascada con la Velocidad del Fluido como Variable Manipulada.

El salto escalón en la composición y en la temperatura es para diseñar el controlador, su fin es mantener la concentración de salida en su setpoint y la velocidad del fluido. Además de evaluarlas las respuestas ante perturbaciones.

La Fig. 3.27a muestra el salto en escalón de la composición de óxido de etileno para obtener los parámetros y formar una ecuación de primer grado más tiempo muerto. La Fig. 3.27b muestra el salto en escalón de la temperatura interna en el punto 0.4 para obtener los parámetros y formar una ecuación de primer grado más tiempo muerto.



a) b)
 Figura 3.27 a) Salto escalón en la Concentración de Salida del Óxido de Etileno, b) Salto escalón en la Temperatura Interna en el Punto 0.4.

Después de realizar los cálculos necesarios para generar la ecuación de primer orden con tiempo muerto, tal como se describe la Ec. 3.19, se obtuvo la Ec. 3.21, que describe la concentración de óxido de etileno.

$$G_{com}(s) = \frac{K}{\tau_1 s + 1} e^{-\theta s} \quad (3.19)$$

$$G_{com}(s) = \frac{-3.932738}{2.415s + 1} e^{-0.515s} \quad (3.20)$$

$$\frac{C(s)}{V_f(s)} = G_{V_f, C_o}(s) = \frac{-3.932738}{2.415s + 1} e^{-0.515s} \quad (3.21)$$

Después de realizar los cálculos necesarios para generar la ecuación de primer orden con tiempo muerto, tal y como se describe la Ec. 3.22, se obtuvo la Ec. 3.24, que describe la temperatura interna en punto 0.3.

$$G_{tem}(s) = \frac{K}{\tau_1 s + 1} e^{-\theta s} \quad (3.22)$$

$$G_{tem}(s) = \frac{1.422830}{1.065s + 1} e^{-0.165s} \quad (3.23)$$

$$\frac{T_m(s)}{V_f(s)} = G_{V_f, T_m}(s) = \frac{1.422830}{1.065s + 1} e^{-0.165s} \quad (3.24)$$

Las Ec. 3.21 y 3.24 representan un modelo de primer orden con tiempo muerto para la concentración y la temperatura. Estos modelos serán fundamentales para el diseño del controlador.

3.14 Diseño del Controlador del Óxido de Etileno Cambiando la Variable Manipulada

Control Proporcional (P)

En el diseño del control proporcional solo es necesario la Ec. 3.24 de la temperatura interna, debido a que la respuesta de la temperatura debe ser más rápido que el de la concentración.

Realizando los cálculos se obtuvo una ganancia proporcional de $K_c = 2.268205$ adimensional para el controlador secundario.

Control Proporcional – Integral (PI)

En el diseño del controlador proporcional – integral se necesita la relación de la Composición – Temperatura lo que es la Ec. 3.21 y 3.24.

Realizando los cálculos necesarios se obtuvo lo siguiente, una ganancia proporcional de $K_p = -0.698$ y un tiempo integral de $\tau_I = 1.350 \text{ seg}$ para el diseño del controlador primario.

Los valores anteriores representan los parámetros esenciales requeridos para configurar el controlador y mitigar las perturbaciones en el sistema. Todos los cálculos de los puntos se han realizado y resumido en una tabla que contiene dichos parámetros. En la Tabla 3.15 se presentan los parámetros del sistema frente a variaciones en la temperatura de la chaqueta, mientras que en la Tabla 3.14 se detallan los parámetros del controlador.

Tabla 3.14 Parámetros del sistema ante cambio en la velocidad de flujo (+5 %) para el caso de estudio seleccionado.

	Parametros		
	K	τ	θ
Concentración	-3.932738 (mol s/m ⁴)	2.415 (s)	0.515 (s)
Punto (0.05)	-2.366630 (K s/m)	0.015 (s)	0.045 (s)
Punto (0.10)	-2.835553 (K s/m)	0.030 (s)	0.010 (s)
Punto (0.20)	-1.642846 (K s/m)	0.030 (s)	0.220 (s)
Punto (0.30)	0.1613692 (K s/m)	0.030 (s)	1.220 (s)
Punto (0.40)	1.422830 (K s/m)	1.065 (s)	0.165 (s)
Punto (0.50)	2.255969 (K s/m)	0.930 (s)	0.330 (s)
Punto (0.60)	2.711138 (K s/m)	1.470 (s)	0.270 (s)
Punto (0.70)	2.936969 (K s/m)	1.680 (s)	0.340 (s)
Punto (0.80)	3.038723 (K s/m)	2.355 (s)	0.245 (s)
Punto (0.90)	3.077276 (K s/m)	1.095 (s)	0.805 (s)
Punto (0.95)	3.083400 (K s/m)	2.295 (s)	0.465 (s)

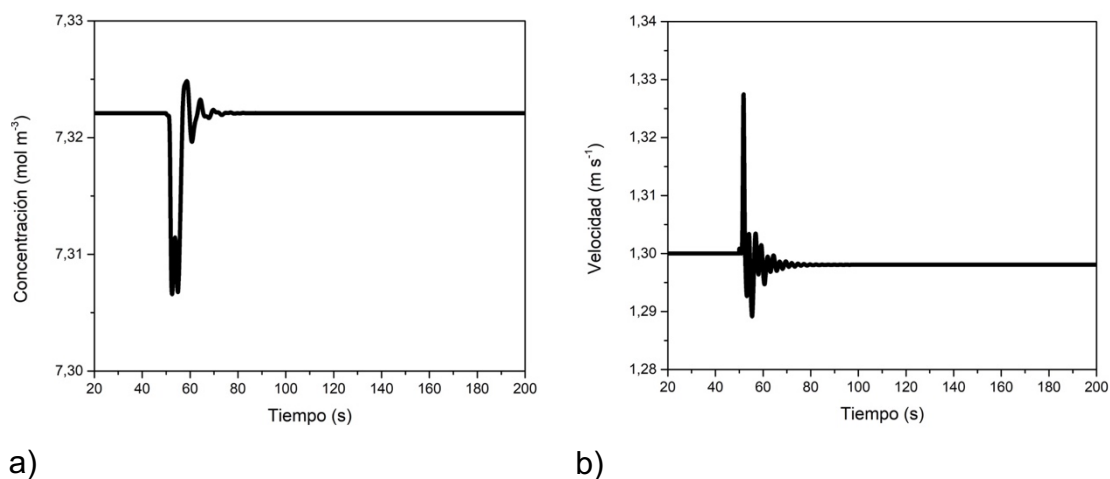
Tabla 3.15 Parámetros del controlador en cascada utilizando los pasos de IMC con la Velocidad de Flujo como Variable Manipulada.

Punto de Medición	Controlador Primario (PI)		Controlador Secundario (P)
	$K_p (\text{m}^3 \text{ K mol}^{-1})$	$\tau_I (s)$	$K_c (m \text{ K}^{-1} s^{-1})$
0.05	1.536	2.400	-0.070423
0.10	2.072	2.385	-0.052899
0.20	1.689	2.385	-0.041502
0.30	-1.869	2.285	0.076192
0.40	-0.698	1.350	2.268205
0.50	-2.302	1.485	0.624605
0.60	-1.330	0.945	1.004088
0.70	-1.568	0.735	0.841203
0.80	-0.086	0.060	1.581625
0.90	-1.781	1.320	0.221014
0.95	-0.941	0.120	0.800331

3.15 Resultados del Controlador del Óxido de Etileno Cambiando la Variable Manipulada

La Fig. 3.28a muestra la respuesta de la concentración de la salida de óxido de etileno. Para esta respuesta se le aplicó una perturbación positiva de 10 % a la concentración de alimentación a los 50 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la concentración de óxido de etileno.

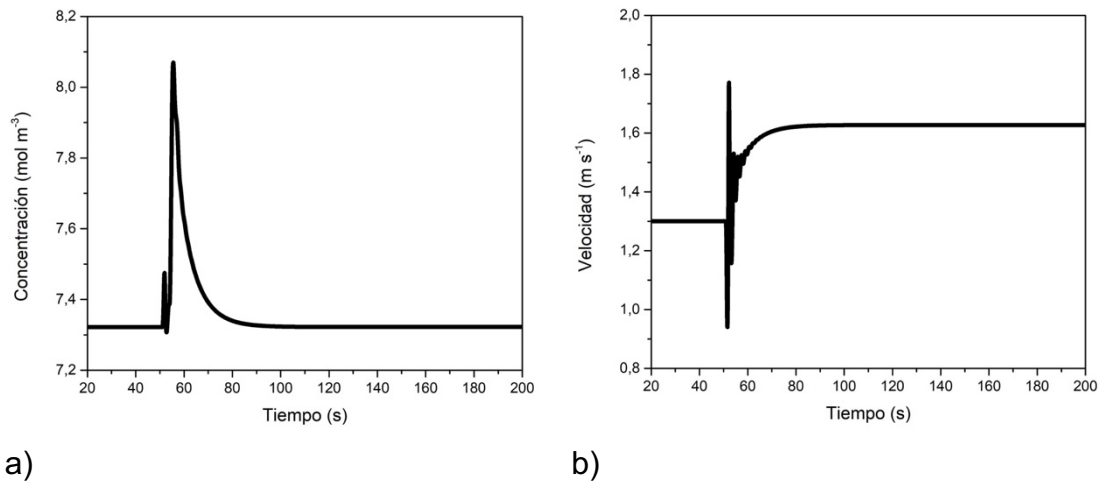
La respuesta de la velocidad del fluido se muestra en la Fig. 3.28b. Para esta respuesta se le aplicó una perturbación positiva de 10 % a la concentración de alimentación a los 50 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la velocidad del fluido.



a) b)
 Figura 3.28 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Anhídrido Maleico en el Punto 0.4 con Perturbación 10 % en la Concentración de Alimentación, b) Respuesta de la Velocidad del Fluido con Perturbación 10 % en la Concentración de Alimentación.

La Fig. 3.29a presenta la respuesta de la concentración de la salida de anhídrido maleico. La respuesta muestra una perturbación positiva de 10 % a la temperatura de alimentación a los 50 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la concentración de óxido de etileno.

La respuesta de la temperatura de la chaqueta se muestra en la Fig. 3.29b. La respuesta muestra una perturbación positiva de 10 % a la temperatura de alimentación a los 50 segundos. Se observa en la respuesta que el control desvía la perturbación y mantiene estable la velocidad del fluido.



a)

b)

Figura 3.29 a) Respuesta del PI de la Concentración de Salida del Óxido de Etileno en el Punto 0.4 con Perturbación 10 % en la Temperatura de Alimentación, b) Respuesta de la Velocidad del Fluido con Perturbación 10 % en la Temperatura de Alimentación.

3.16 Resultados de la Integral Absoluta del Error del Óxido de Etileno Cambiando la Variable Manipulada

Después de observar la respuesta del controlador ante la concentración y la temperatura, se evaluó el error del controlador. La evaluación se hizo con la Integral Absoluta del Error. La Fig. 3.30a presenta el error del controlador ante la perturbación positiva del 10 % en la concentración de alimentación alcanzando los 7.562442. Y la Fig. 3.30b muestra el error del controlador ante perturbación en la temperatura de alimentación alcanzando los 18338.681042.

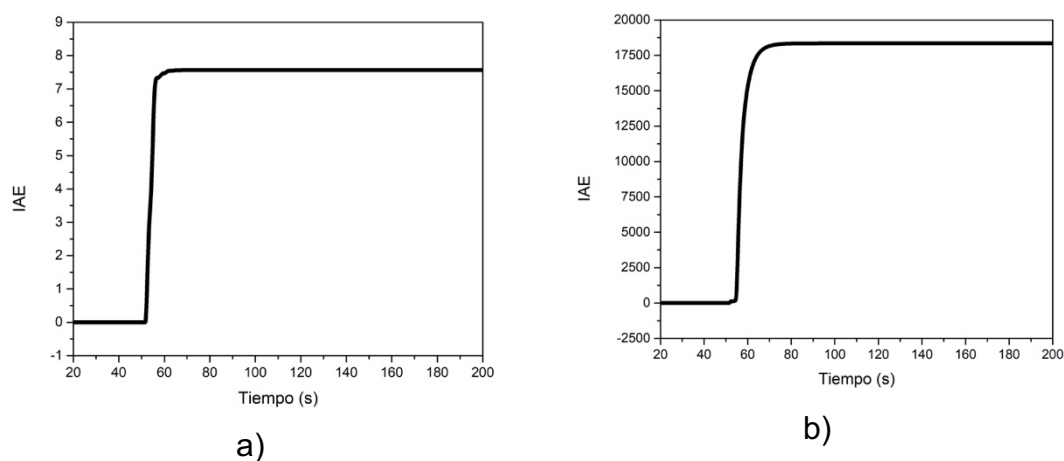


Figura 3.30 a) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación en la Concentración de Alimentación, b) Integral Absoluta del Error (IAE) con Perturbación en la Temperatura de Alimentación.

Los resultados de los once puntos con la Integral Absoluta del Error se registran en la Tabla 3.16

Tabla 3.16 Integral Absoluta del Error utilizando la Velocidad de Flujo como Variable Manipulada.

Punto de Medición	IAE Concentración (mol m^{-3})	IAE Temperatura (K)
0.05	108.805659	1016737.506191
0.10	94.099263	394084.439479
0.20	51.018166	78734.797312
0.30	36.923663	79496.400875
0.40	7.562442	18338.681042
0.50	0.755820	2438.284849
0.60	4.043848	1670.442669
0.70	2.551777	852.002666
0.80	8.220083	774.593753
0.90	2.712066	3853.104468
0.95	2.765417	6409.179228

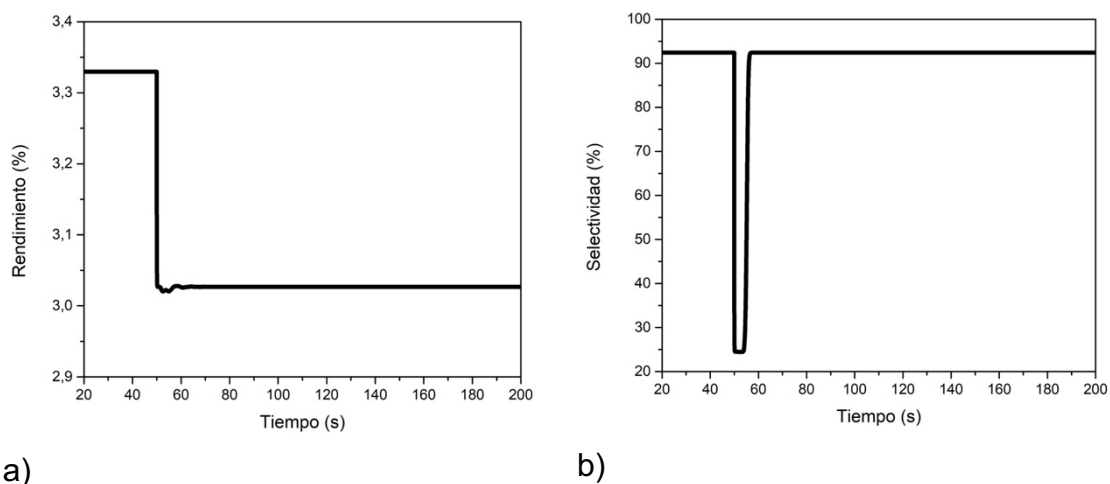
Los resultados sugieren una reducción en el error del controlador al aplicarse a la salida del reactor. Se observa que, al comienzo del reactor, el error es más significativo, lo cual se atribuye al inicio del proceso y la dinámica inicial del

sistema en ese punto. Esta tendencia indica que a medida que el proceso avanza y el sistema se estabiliza, el controlador logra mitigar y corregir de manera más efectiva las variaciones y perturbaciones en la concentración de óxido de etileno y en la temperatura de la chaqueta. En consecuencia, se logra mantener la concentración en su punto óptimo y estabilizar la temperatura de la chaqueta para asegurar un desempeño adecuado del reactor. Estos hallazgos son esenciales para optimizar el control del proceso y garantizar una operación estable y eficiente.

3.17 Respuesta de la Selectividad y Rendimiento del Óxido de Etileno Cambiando la Variable Manipulada

El objetivo de la tesis es observar y analizar si en los puntos de control, el controlador modifica la selectividad y rendimiento o si esta la mejora. El controlador no debe afectar esto porque en una reacción paralela se debe mantener una selectividad alta y rendimiento considerable según los resultados obtenidos.

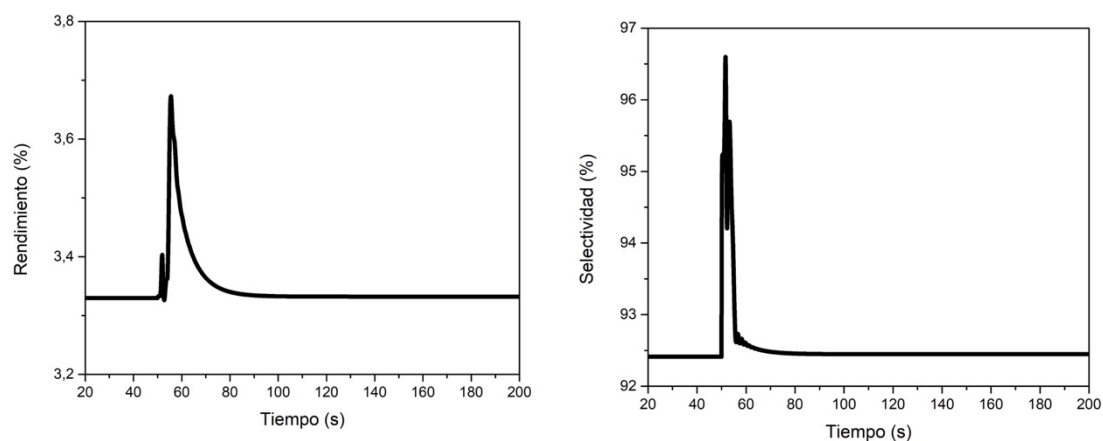
La Fig. 3.31a muestra la respuesta del rendimiento ante la perturbación positiva al 10 % en la concentración de alimentación en el Punto 0.3. Se observa que el rendimiento obtenido de 3.3 % baja a 3 %. En cambio, la selectividad se mantiene en 92 %. Esto se observa en la Fig. 3.31b que presenta la respuesta de la selectividad ante la perturbación positiva al 10 % en la concentración de alimentación en el Punto 0.4. La perturbación se aplica a los 100 segundos del proceso.



a) b)
 Figura 3.31 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación en la Concentración en el Punto 0.4, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación en la Concentración en el Punto 0.4.

La Fig. 3.32a muestra la respuesta del rendimiento ante la perturbación positiva al 10 % en la temperatura de alimentación en el Punto 0.4. La perturbación se aplicó a los 50 segundos del proceso. Se observó que la respuesta oscila después de los 50 segundos, pero rendimiento obtenido de 3.3 % se mantiene, este no incrementa o decrementa.

Por el otro lado, la Fig. 3.32b muestra la respuesta de la selectividad ante perturbación positiva al 10 % en la temperatura de alimentación en el Punto 0.4. Se observó que la respuesta de la selectividad después de los 50 segundos después de haber aplicado la perturbación oscila y aumenta de 92.41 % a 92.44 %.



a)

b)

Figura 3.32 a) Respuesta del Rendimiento con Perturbación en la Temperatura en el Punto 0.4, b) Respuesta de la Selectividad con Perturbación en la Temperatura en el Punto 0.4.

Se obtuvieron los valores de la selectividad y rendimiento para todos los puntos de control, los cuales se han consolidado en la Tabla 3.17.

Tabla 3.17 Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en los puntos de control.

Punto de Medición	Selectividad (%)		Rendimiento (%)	
	Concentración	Temperatura	Concentración	Temperatura
0.05	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108
0.10	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108
0.20	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108
0.30	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108
0.40	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108
0.50	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108
0.60	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108
0.70	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108
0.80	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108
0.90	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108
0.95	92.418431	92.446832	3.026709	3.332108

3.18 Evaluación de Resultados

Se observó durante la evaluación del control, el control mejoraba o se comportaba de mejor manera a la salida que a la entrada, mientras más avanzara el control es mejor y su error es menor tanto la producción de óxido de etileno como en la producción de anhídrido maleico.

Los resultados de selectividad y rendimientos son favorables, para la selectividad demuestra un gran porcentaje hacia el producto deseado. Mientras que para el rendimiento es diferente, el resultado es bueno, pero en la producción de óxido de etileno demuestra ser poco comparado con la concentración que ingresa de etileno. Por otra parte, el anhídrido sí demuestra tener un gran porcentaje comparándolo con la concentración que ingresa de butano.

Los resultados se compararon con otras bibliografías para observar si los resultados pudieran ser aún más favorables ante otros. En la producción de óxido de etileno el sistema de control ha evaluado en selectividad y rendimiento, obteniendo los siguientes valores 92 % y 3.3 %, respectivamente. Estos parámetros han sido superiores a los de trabajos anteriores de Peschel. *et. al.*, (2011), en los que se han diseñado reactores multinivel para la reacción al óxido de etileno y se han obtenido valores de selectividad cercanos al 82 %. Yusuff. *et. al.* (2015) han estudiado la mejora de la selectividad para esta misma reacción, pero utilizando un catalizador de plata en diversas condiciones de funcionamiento y han notificado valores entre el 38 y el 47 % según cada condición dada. En la Tabla 3.18 se demuestran todos estos valores.

Tabla 3.18 Comparación del Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en la Producción de Óxido de Etileno.

Estudios	Selectividad (%)	Rendimiento (%)
Este Trabajo	94.330800	3.33296
Peschel. <i>et. al.</i> , (2011)	82	-----
Yusuff <i>et. al.</i> , (2015)	47.0 – 38.0	-----

En la producción de anhídrido maleico los valores de rendimiento declarados son superiores a los comunicados por Chin *et. al.* (2001) muestran un rendimiento del 36 % y este estudio del 43 %, una diferencia de rendimiento del 7 %.

Aunque a pesar de este buen rendimiento es mucho menor que los reportados en Petric y Karić (2019) teniendo un rendimiento del 87 %, aun así, el autor no aplica un control para saber si su rendimiento no se ve afectado porque todavía puede aumentar o disminuir. Pero durante su simulación con diferentes períodos, disminuyó al 77 %. La selectividad de Petric y Karić (2019) es casi igual al 94 % obtenido, pero en la simulación se modificaron datos como la temperatura y ésta disminuyó al 85 %. Demostrando que se obtuvo la selectividad más alta. En la Tabla 3.19 se demuestran todos estos valores.

Tabla 3.19 Comparación del Porcentaje de Selectividad y Rendimiento en la Producción de Anhídrido Maleico.

Estudios	Rendimiento (%)	Selectividad (%)
Este Trabajo	45.342570	94.330800
Chin <i>et. al.</i> , (2002)	36.000000	-----
Petric y Karić (2019)	87.0 – 77.0	94.0 – 87.0

En la Tabla 3.20, se presentan los valores de las ganancias de los controladores primarios y secundarios, y la entalpía de reacción. La interacción del controlador con la selectividad y rendimiento se explica mediante la relación entre estos parámetros. Las reacciones descritas son altamente veloces, con una velocidad de reacción notablemente alta en ambas. Dado que se trata de reacciones exotérmicas, liberan más energía, lo que conlleva un aumento de la temperatura y una aceleración en la reacción tanto de los productos deseados como de los no deseados.

En presencia de una perturbación positiva en la concentración, ya sea del 5%, 10%, o incluso del 20%, se produce un aumento en el reactivo limitante, impactando en la reacción y en la concentración final, la cual experimenta un aumento junto con la selectividad y rendimiento. Aunque la selectividad aumenta, un mayor reactivo limitante favorece a los productos no deseados, disminuyendo

la presencia del producto deseado. De manera inversa, una perturbación negativa en la concentración, es decir, una disminución, reduciría el reactivo limitante y podría disminuir la concentración de salida del producto. En este caso, la selectividad puede disminuir, favoreciendo a los productos no deseados, pero potencialmente aumentando el rendimiento. No obstante, la presencia de más productos no deseados no mejora la reacción.

En consecuencia, si la perturbación cambia y no afecta la concentración de alimentación, sino la temperatura de alimentación, los efectos serían los mismos pero en sentido opuesto. Aumentar la selectividad podría disminuir los rendimientos y viceversa. Por ello, se implementa un diseño de controlador en cascada para mantener una respuesta rápida frente a la reacción veloz. Sin embargo, el controlador afecta la respuesta de la selectividad y rendimiento ya que, ante perturbaciones, la concentración de salida debe estar en cierto valor conocido como el setpoint. El controlador desvía y mitiga la perturbación, alterando las respuestas de la selectividad y rendimiento, que adquieren otro comportamiento. Dependiendo del caso de las perturbaciones, ya sea la concentración o la temperatura, ya sea positiva o negativa, estas aumentan o disminuyen más de los valores calculados, pero en la transición alguna de las dos logra mantenerse. Aunque se desvíe de su punto, esta logra mantenerse en el punto de inicio, mientras que la otra aumenta o disminuye más.

En este contexto, se manipuló la velocidad de flujo para observar si había algún cambio, pero los resultados se mantenían consistentes. Los sensores o puntos de medición arrojaron resultados similares en cada parte del reactor. La única diferencia notoria fue la respuesta transitoria, donde algunos resultados fueron mejores que otros debido a variaciones en la velocidad de respuesta, oscilaciones más reducidas o incluso tiempos de reacción más cortos. Esto se atribuyó a los valores del controlador, ya que, si se aumentaran las ganancias del controlador secundario y primario, y se incrementara el tiempo integral, las respuestas podrían ser más rápidas y tener un efecto positivo en la selectividad y rendimiento. En este escenario, la concentración de salida se mantendría en el valor deseado por menos tiempo, mitigando así los efectos de las perturbaciones y generando respuestas como si la perturbación no afectara significativamente

al reactor. Esto, siempre y cuando se cumplan los valores del controlador, ya que si estos superaran el límite permitido podrían no funcionar adecuadamente y el controlador podría tener un impacto negativo.

Es por esto que los valores presentes en la Tabla 3.20 guardan una relación entre sí, ocasionando que las perturbaciones, el controlador y la velocidad de reacción influyan en la cinética de la reacción, así como en la selectividad y rendimiento.

Tabla 3.20 Relación de valores de ambas reacciones.

Reacción	Variable manipulada	Tiempo integral τ_I	Control primario K_p	Control secundario K_C	Entalpia de reacción ΔH_R
Oxidación parcial de etileno a óxido de etileno	Temperatura de la chaqueta	1.5 – 1.0 (s)	9.4 – 3.8 ($m^3 K mol^{-1}$)	9.8 – 5.1 (adimensional)	210 300 473 000 ($J mol^{-1}$)
	Velocidad de flujo	2.4 – 0.1 (s)	2.0 – -2.3 ($m^3 K mol^{-1}$)	2.2 – -0.7 ($m K^{-1} s^{-1}$)	
Oxidación parcial de butano a anhídrido maleico					1303.774
	Temperatura de la chaqueta	2.7 – 2.6 (s)	3180 – 2852 ($m^3 K mol^{-1}$)	157 – 9.5 (adimensional)	586.1784 1889.912 ($KJ mol^{-1}$)

CONCLUSIÓN Y RECOMENDACIONES

A través de este estudio se implementó un controlador en cascada para un lazo primario y un lazo secundario diseñado a partir de un Control de Modelado Interno (IMC) con las reglas de Skogestad. Esto se aplicó a un reactor tubular para observar la influencia que tenía con la dinámica de la simulación de una reacción paralela. Conocer si el control afecta la selectividad y rendimiento de la reacción por la importancia que se tiene dentro del reactor.

De acuerdo con los objetivos planeados, los resultados demuestran que el controlador afecta la selectividad y el rendimiento. Dependiendo de la perturbación que esta pueda presentar es la manera en cómo se comporta la reacción. Cuando la reacción presenta perturbaciones en la concentración de alimentación la selectividad puede mantenerse estable o el rendimiento estable, pero algunas de las dos pueden aumentar o disminuir. Por otro lado, si la perturbación que presenta es la temperatura de alimentación esta puede comportarse de manera similar.

A partir de esta evidencia, se hizo otro análisis en la producción de anhídrido maleico a partir de butano, donde las perturbaciones podían ser positivas y negativas para conocer si presentaba resultados iguales o similares, afectar positivamente la concentración de alimentación y la temperatura.

Tras el análisis expuesto, los resultados dieron de manera opuesta. Se observó que cuando la perturbación era positiva la selectividad y rendimiento disminuían, pero cuando la perturbación era negativa esta podía aumentarlas. Se concluyó que dependiendo de la perturbación indicada los valores podían ser de una manera o de otra.

Consecutivamente, se observó si en todos los puntos de control presentaba el mismo fenómeno. La conclusión fue que sí, independientemente del punto de control todos presentaban eran afectados de la misma manera. La una diferencia presentada fue la respuesta del control, debido a que algunos puntos presentaron mejor manejo ante las perturbaciones, las oscilaciones eran mayor

o menor. Los mejores puntos siempre fueron los de salida, debido a que presentaban menor error.

Por último, se aplicó un cambio en la variable manipulada observando si el control podría mitigar las perturbaciones presentes en el reactor. Además de verificar si cambiando la variable este nuevo control no presentaría alteraciones en la selectividad y rendimiento. La simulación comprobó que el diseño de una nueva variable manipulada mitiga las perturbaciones, pero sigue habiendo cambio en la selectividad y rendimiento. Por ello, cuando las perturbaciones están presentes positivamente o negativamente, la respuesta se comporta de la misma manera y casi dando los mismos resultados manejando tanto la temperatura de la chaqueta como variable manipulada y la velocidad del fluido.

En resumidas palabras, los resultados indican el control influyó en el rendimiento y la selectividad. A pesar de esto, se observó que la elección de la posición del sensor de temperatura no tuvo un impacto significativo en la selectividad y el rendimiento. Estos hallazgos sugieren que la estructura de control es un factor crítico en la producción de óxido de etileno y del anhídrido maleico, por lo que se puede tener un efecto positivo o negativo en ambos aspectos.

Basándome en las conclusiones y hallazgos que has compartido sobre el estudio de control en cascada y su impacto en la selectividad y rendimiento en un reactor tubular para los dos casos de estudio, se recomiendan estas observaciones.

Se sugiere realizar un análisis detallado de los parámetros que influyen en la dinámica del proceso y en las respuestas de selectividad y rendimiento. Explorar cómo diferentes combinaciones de parámetros pueden afectar el comportamiento del controlador y la producción de productos en el reactor.

Investigar y comparar el desempeño del controlador en cascada con otros métodos de sintonización más robustos. Pueden explorarse técnicas avanzadas de sintonización de controladores PID o incluso enfoques de control no lineal para evaluar si se pueden mejorar las respuestas de selectividad y rendimiento ante perturbaciones.

Realizar estudios de optimización para determinar la estructura de control óptima que maximice la selectividad y el rendimiento del proceso. Esto puede implicar la modificación de la topología del controlador o la introducción de elementos adicionales en la estructura de control.

Extender la investigación para analizar más detenidamente cómo diferentes puntos de control pueden influir en la respuesta del proceso y en la eficacia del control. Evaluar si existen puntos óptimos de colocación del sensor que maximicen la eficiencia del control.

Explorar el efecto de otras variables manipuladas en el proceso y cómo podrían afectar la selectividad y el rendimiento. Investigar si hay combinaciones específicas de variables manipuladas que puedan optimizar estos aspectos.

Realizar experimentos a escala piloto o industrial para validar los resultados obtenidos a través de simulaciones. La validación experimental es fundamental para garantizar que las conclusiones del estudio sean aplicables en situaciones prácticas.

Investigar la interacción entre el diseño del reactor y las estrategias de control. Evaluar cómo ciertos diseños de reactor pueden interactuar de manera óptima con determinadas estrategias de control para mejorar la selectividad y el rendimiento.

Estas recomendaciones podrían contribuir a futuras investigaciones y ayudar a mejorar la comprensión y eficiencia del control en procesos químicos para la producción de productos específicos.

REFERENCIAS

- Chapra, S., & Canale, R. (2007). *Métodos numéricos para ingenieros*. México D.T.: The McGraw-Hill Companies.
- Carberry, J. J., & White, D. (1969). On the Role of Transport Phenomena in Catalytic Reactor Behavior; Digital Simulation of Naphthalene Oxidation Over V₂O₅. *INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY*, VOL. 62 - NO. 7, DOI: <https://doi.org/10.1021/ie50715a008>.
- Leveneur, S., Vernieres-Hassimi, L., & Salmi, T. (2016). Mass & energy balances coupling in chemical reactor for a better understanding of thermal safety. *Educ. Chem. Eng*, 17 - 28.
- Levenspiel, O. (1999). *Chemical Reaction Engineering*. New York: John Wiley & Sons, Inc.
- Chin, I., Chung, J., & Lee, K. (2001). Model Predictive Control of a Fixed-Bed Reactor with Nonlinear Quality Inference. *Korean J. Chem. Eng.*, 213-220, <https://doi.org/10.1007/BF02698404>.
- Aryana, S., Ahmadi, M., Gomes, V. G., Romagnoli, J. A., & Ngian, K. (2009). Modelling and Optimisation of an Industrial Ethylene Oxide Reactor. *Chemical Product and Process Modeling*, Vol. 4: Iss. 1, Article 14, DOI: 10.2202/1934-2659.1231.
- Barozzi, M., Scotton, M. S., & Copelli, S. (2022). Runaway Boundaries for PI Controlled Tubular Reactors. *CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS*, 583 - 588, doi : 10.3303/CET2290098.
- Braide, D. T., Goodhead, T. O., Ademiluyi, F. T., & Ukpaka, C. P. (2021). Computer Aided Design of a Packed Bed Reactor for the Production of Ethylene Oxide. *Journal of Scientific and Engineering Research*, 121-139, DOI: <https://doi.org/10.3303/CET2290098>.
- Fogler, H. (2008). *Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas*. México: Pearson.
- Fogler, H. S. (2020). *Elements of Chemical Reaction Engineering*. Michigan: Pearson Education, Inc.

- Hua, X., & Jutan, A. (2000). Nonlinear inferential cascade control of exothermic fixed bed reactors. *AIChE Journal*, 980 - 996.
- JELEMENSKY, L., LABOVSKY, J., & MARKOS, J. (2006). Safety Analysis and Risk Identification for a Tubular Reactor Using the HAZOP Methodology. *VERSITA*, 30 - 36, DOI: 10.2478/s11696-006-0082-0.
- Jesus, J. M., Santana, P. L., & Silvia, F. V. (2013). Different approaches in concentration-temperature cascade control of a fixed bed reactor for the phthalic anhydride synthesis. *Chemical Engineering Transactions*, 1392.
- Kristanto, D., & Hermawan, Y. D. (2020). Comparative Analysis Between PI Conventional and Cascade Control in Heater-PFR-Series. *Reaktor*, 129-137, DOI: <https://doi.org/10.14710/reaktor.20.3.129-137>.
- Müller, M., Kutscherauer, M., Böcklein, S., Wehinger, G., Turek, T., & Mestl, G. (2021). Modeling the selective oxidation of n-butane to maleic anhydride: From active site to industrial reactor. *Catalysis Today, ELSEVIER*, 82 - 106, <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2021.04.009>.
- Pérez Sánchez, A., Baltá García, J. G., Montalván Viart, J. R., Ranero González, E., & Pérez Sánchez, E. J. (2022). Simulation of the ethylene oxide production process in ChemCAD® simulator. *RECyT*, 15 - 24, DOI: <https://doi.org/10.36995/j.recyt.2022.37.002>.
- Peschel, A., Karst, F., Freund, H., & Sundmacher, K. (2011). Analysis and optimal design of an ethylene oxide reactor. *Chemical Engineering Science, ELSEVIER*, 6453-6469, DOI:10.1016/j.ces.2011.08.054.
- Petric, I., & Karić, E. (2019). Simulation of commercial fixed-bed reactor for maleic anhydride synthesis: application of different kinetic models and industrial process data. *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis, Springer*, 1027–1054, <https://doi.org/10.1007/s11144-019-01533-9>.
- Romero Bustamante, J. A., Moguel Castañeda, J. G., Puebla, H., & Hernandez Martinez, E. (2017). Robust Cascade Control for Chemical Reactors: An Approach based on Modelling Error Compensation. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 60 - 67, DOI:10.1515/ijcre-2017-0082.
- Sascha, T., Subramaniam, P., & Seidel-Morgenstern, A. (2004). Performance Improvements of Parallel-Series Reactions in Tubular Reactors Using

- Reactant Dosing Concep. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 969-979, DOI: <https://doi.org/10.1021/ie020878u>.
- Shamsuzzoha, M., & Skogestad, S. (2010). The setpoint overshoot method: A simple and fast method for closed-loop PID tuning. *J. Process Control* 20, 1220–1234.
- Skogestad, S. (2003). Simple analytic rules for model reduction and PID. *Elsevier*, 291 - 309.
- Skogestad, S., & Grimholt, C. (2011). The SIMC method for smooth PID controller tuning. En R. Vilanova, & A. Visioli, *PID Control in the Third Millennium. Advances in Industrial Control*. (págs. 147 - 176). London: Springer.
- Skogestad, S., & Grimholt, C. (2012). *PID Control in the Third Millennium*. London: Advances in Industrial Control (Eds: R. Vilanova, A. Visioli).
- Smith, C. A., & Corripio, A. B. (1991). *Control Automático de Procesos Teoría y Práctica*. Mexico, D.F.: LIMUSA, S.A. DE C.V.
- Smith, C. A., & Corripio, A. B. (1997). *Principles and Practice of Automatic Process Control*. New York: John Wiley & Sons Inc.
- Smith, C. A., & Corripio, A. B. (2005). *Principles and Practice of Automatic Process Control*. Wiley.
- Stephanopoulos, G. (1984). *Chemical Process Control An Introduction to Theory and Practice*. New Jersey: PTR PRENTICE HALL.
- Vasičkaninová, A., Bakošová, M., Oravec, J., & Mészáros, A. (2019). Model Predictive Control of a Tubular Chemical Reactor. *International Conference on Process Control*, 60 - 65, DOI:10.1109/PC.2019.8815033.
- WESTERTERP, K. R., & PTASINSKI, K. J. (1984). SAFE DESIGN OF COOLED TUBULAR REACTORS FOR EXOTHERMIC, MULTIPLE REACTIONS; PARALLEL REACTIONS-II. *CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE*, 245 - 252, [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(84\)80024-X](https://doi.org/10.1016/0009-2509(84)80024-X).
- Wu, Z., Tran, A., Ming Ren, Y., Barnes, C. S., Chen, S., & Christofides, P. D. (2019). Model predictive control of phthalic anhydride synthesis in a fixed-bed catalytic reactor via machine learning modeling. *Chemical Engineering Research and Design*, 173 – 183, DOI:<https://doi.org/10.1016/j.cherd.2019.02.016>.

- Yusuff, A., Adeyi, A., & Jeffrey, O. (2015). Ethylene oxide Selectivity Enhancement from Oxidation of Ethylene on Silver Catalyst By Mathematical Modeling. *International Journal of Scientific & Engineering Research*,, 1626-1642.
- Yuwana, M., & Seborg, D. E. (1982). A new method for on-line controller tuning. *AIChE Journal* 28, 434–440.