



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

# Un problema de Referencia para el Control Multivariable de Procesos

**Susana Lucía Mojica Rendón**

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Minas, Departamento de Procesos y Energía

Medellín, Colombia

2014



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

# A Benchmark for Multivariable Control of Processes

**Susana Lucía Mojica Rendón**

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Minas, Departamento de Procesos y Energía

Medellín, Colombia

2014

# **Un problema de Referencia para el Control Multivariable de Procesos**

**Susana Lucía Mojica Rendón**

Propuesta de trabajo de investigación presentada como requisito parcial para optar al título de:

**Magister en Ingeniería Química**

Director:

Hernán Darío Álvarez

Línea de Investigación:

Control de Procesos Químicos

Grupo de Investigación en Procesos Dinámicos - KALMAN

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Minas, Departamento de Procesos y Energía

Medellín 2014



## Lista de símbolos y abreviaturas

**Símbolos con letras latinas**

Símbolo	Constante	Unidades
$A$	Área de transferencia de calor	$m^2$
$A_{c,i}$	Superficie limpia total requerida para zona $i$ del condensador	$m^2$
$A_j$	Área de transferencia de calor en la chaqueta	$m^2$
$A_R$	Área transversal del reactor	$m^2$
$A_t$	Área transversal del tanque <i>flash</i>	$m^2$
$a$	Área trasversal de los tubos en el intercambiador de calor	$m^2$
$a_s$	Área del flujo por la coraza	$m^2$
$a_t$	Área de flujo total por los tubos	$m^2$
$a_{t1}$	Área de flujo por un tubo	$m^2$
$C_{Ai}$	Concentración de óxido de propileno en la corriente $i$	$mol/l$
$C_{A0}$	Concentración de óxido de propileno en el alimento fresco	$mol/m^3$
$C_{i,k}$	Concentración molar de $i$ en la corriente $k$	$mol/m^3$
$C_{pi}$	Capacidad calorífica de la mezcla en la corriente $i$	$J/(mol \cdot ^\circ C)$
$C_{p-sln}$	Capacidad calorífica de la solución	$J/(mol \cdot ^\circ C)$
$D$	Diámetro del agitador	$m$
$D$	Diámetro interno de cada tubo del intercambiador de calor	$m, in$
$De$	Diámetro equivalente de la coraza	$m, in$
$D_{hor}$	Diámetro de un tanque <i>flash</i> en posición horizontal	$m$
$D_{i,opt}$	Diámetro óptimo de la tubería	$m$
$D_R$	Diámetro del reactor	$m$
$E_a$	Energía de activación	$J/mol$
$f_1$	Factor de fricción en los tubos	adimensional

$f_2$	Factor de fricción en la coraza	adimensional
$F_A$	Flujo molar de óxido de propileno a la salida del reactor	mol/s
$F_{Ai}$	Flujo molar de óxido de propileno en la corriente i	mol/s
$F_{A0}$	Flujo molar de óxido de propileno al ingresar al reactor	Kmol/h
$F_{B0}$	Flujo molar de agua al ingresar al reactor	Kmol/h
$F_{C0}$	Flujo molar de propilenglicol al ingresar al reactor	Kmol/h
$F_{D0}$	Flujo molar de ácido sulfúrico al ingresar al reactor	Kmol/h
$F_i$	Flujo volumétrico total de la mezcla en la corriente i	l/s
$F_K$	Flujo volumétrico de la mezcla en la corriente k	m <sup>3</sup> /s
$F_{Km}$	Flujo molar de la mezcla en la corriente k	mol/s
$f_D$	Factor de Darcy	adimensional
$F_T$	Factor de corrección para la diferencia de temperatura media logarítmica.	adimensional
$f_1$	Factor de fricción en los tubos del intercambiador de calor	adimensional
$f_2$	Factor de fricción en la coraza del intercambiador de calor	adimensional
$G$	Matriz L x m de las ganancias del sistema en estado estacionario.	Según variables
$G_{c2}$	Ganancia del controlador encargado de corregir cualquier desviación en $y_2$ a partir de la manipulación de $u_2$ como resultado del cambio de escalón efectuado sobre $u_1$ .	Según variables
$G_T$	Velocidad másica por área (Flux) del fluido que circula por los tubos del Intercambiador de Calor	Kg/(m <sup>2</sup> .s)
$g$	Fuerza de la gravedad	m/s <sup>2</sup>
$H_R$	Altura del reactor	m
$\hat{h}_{VLF}$	Entalpía del vapor y del líquido en la alimentación del tanque flash	J/kg
$h_{f, tramo}$	Pérdidas de presión en cada tramo	ftwc
$h_i$ $h_{i0}$	Coeficiente de película al interior de los tubos	J/(min.m <sup>2</sup> .°K)

$h_L$	Altura de la piscina del líquido en el tanque flash	m
$h_0$	Coefficiente de película al exterior de los tubos	J/(min.m <sup>2</sup> .°K)
$h_V$	Altura del tanque flash que contiene vapor	m
$h_t$	Altura total del tanque flash	m
$\Delta H_{OP}$	Calor de reacción (por mol de óxido de propileno)	J/mol
$jH$	Factor del Coeficiente de película interior / exterior	adimensional
$K$	Conductividad	J/(s.m <sup>2</sup> .°C.m)
$K$	Constante asociada con las pérdidas de presión en línea y accesorios	lb/in <sup>2</sup>
$K$	Valor de energía por impulso	(\$/KW)
$K_{drum}$	Constante del sistema en el tanque flash	adimensional
$K_i$	Corriente del reparto del componente	adimensional
$K_1$	Constante del método de las 2K	adimensional
$K_\infty$	Constante del método de las 2K	adimensional
$k$	Constante de velocidad de reacción	min <sup>-1</sup>
$k_0$	Factor de frecuencia de la ley de Arrhenius	min <sup>-1</sup>
$k_{ij}$	Magnitud de una perturbación	Según variables
$L$	Longitud de los tubos del intercambiador de calor	m, ft
$L_L$	Nivel del líquido en el tanque flash	m
$L_R$	Altura del líquido en el reactor	m
$M_V$	Peso molecular del vapor en el tanque flash	g/mol
$M_L$	Peso molecular del líquido en el tanque flash	g/mol
$\dot{m}_{sln}$	Flujo másico de la solución	kg/s
$\dot{m}_{s,L}$	Flujo másico de líquido que ingresa al tanque flash	kg/s

$\dot{m}_{s,v}$	Flujo másico de vapor que ingresa al tanque <i>flash</i>	kg/s
$N$	Velocidad del sistema de agitación	Min <sup>-1</sup> , s <sup>-1</sup>
$N_{A0}$	<i>Moles iniciales de óxido de propileno</i>	<i>Mol</i>
$NPSH_A$	Presión disponible en el sistema para que no haya cavitación	<i>ftwc</i>
$N_Q$	Número de bombeo	adimensional
$N_t$	Número total de tubos del intercambiador de calor	adimensional
$N$	Número de pasos del fluido en el intercambiador de calor	adimensional
$P$	Pitch: Distancia de centro a centro de cada tubo en un banco de tubos	in
$P$	Presión de operación del sistema	bar
$P$	Potencia	HP
$P_{ci}$	<i>Presión crítica del componente</i>	<i>bar</i>
$P_D$	<i>Presión en el punto de descarga de la bomba</i>	<i>ftwc</i>
$P_i$	Presión de la mezcla en la corriente <i>i</i>	<i>bar</i>
$P_{LV}$	Presión del líquido y del vapor en el tanque <i>flash</i>	bar
$P_s$	Presión en el ojo de succión	ftwc
$P_{v\ ojo\ succ}$	Presión de vapor de la mezcla en el ojo de succión	ftwc
$P_1$	Presión en el nivel del líquido en el reactor	ftwc
$P_2$	Presión en la válvula ubicada a la entrada del tanque <i>flash</i>	ftwc
$\Delta P$	Caída de presión	Bar
$\Delta P_s$	Caída de presión en la coraza del intercambiador de calor	lb/in <sup>2</sup>
$\Delta P_t$	Caída de presión en los tubos del intercambiador de calor	lb/in <sup>2</sup>
$q_{ci}$	Carga calórica transferida en la zona <i>i</i> del intercambiador	J/s
$Q$	Calor involucrado en el sistema en el tanque <i>flash</i>	J
$\dot{Q}$	Flujo de calor	J/s
$q_{A0}$	Flujo volumétrico inicial de óxido de propileno	m <sup>3</sup> /min



<b>R</b>	Constante universal de los gases	$\text{m}^3\text{Pa}/(\text{mol}\cdot\text{K})$
<b><math>R_d</math></b>	Factor de obstrucción	
<b>Re</b>	Número de Reynolds	adimensional
<b><math>Re_s</math></b>	Número de Reynolds del fluido que circula por la coraza del Intercambiador de Calor	adimensional
<b><math>Re_t</math></b>	Número de Reynolds del fluido que circula dentro de los tubos del Intercambiador de Calor	adimensional
<b>r</b>	Radio del tanque <i>flash</i>	m
<b>s</b>	Gravedad específica del fluido	adimensional
<b>T</b>	Temperatura de operación del sistema	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>T_1</math></b>	Temperatura de entrada del fluido caliente en el intercambiador de calor	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>T_2</math></b>	Temperatura de salida del fluido caliente en el intercambiador de calor	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>T_{ci}</math></b>	Temperatura crítica del componente	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>T_i</math></b>	Temperatura promedio de la mezcla en la corriente i	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>T_{LV}</math></b>	Temperatura del líquido y del vapor en el tanque <i>flash</i>	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>T_{ref}</math></b>	Temperatura de referencia	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>t_1</math></b>	Temperatura de entrada del fluido frío en el intercambiador de calor	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>t_2</math></b>	Temperatura de salida del fluido frío en el intercambiador de calor	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>t_c</math></b>	Temperatura promedio de la solución	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>t_v</math></b>	Temperatura promedio del vapor	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>t_w</math></b>	Temperatura de la pared del tubo	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>\Delta t_{ci}</math></b>	Diferencia de temperatura media logarítmica en la zona i del intercambiador de calor	$^{\circ}\text{C}$
<b><math>\Delta t_{lm}</math></b>	Diferencia de temperatura media logarítmica	$^{\circ}\text{C}$
<b>U</b>	Coeficiente global de transferencia de calor	$\text{J}/(\text{min}\cdot\text{m}^2\cdot^{\circ}\text{K})$

$U_C$	Coeficiente de transferencia de calor limpio	$J/(\text{min} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{K})$
$U_{Ci}$	Coeficiente de transferencia de calor limpio para la zona i del condensador	$J/(\text{min} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{K})$
$U_D$	Coeficiente de transferencia de calor de diseño	$J/(\text{min} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{K})$
$U_j$	Coeficiente global de transferencia de calor en la chaqueta	$J/(\text{min} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{K})$
$U_{\text{vapor,máx}}$	Velocidad máxima de vapor permisible	m/s
$u_i$	Variable i de entrada	Propias de la variable
$V$	Flujo de alimentación al tanque <i>flash</i>	$\text{m}^3/\text{s}$
$V_j$	Volumen de la chaqueta	$\text{m}^3$
$V_R$	Volumen del reactor	$\text{m}^3$
$v$	Velocidad a través de los tubos	m/s
$v$	Caudal volumétrico	$\text{m}^3/\text{h}$
$v_B$	Velocidad de bulto	ft/s
$v_o$	Caudal volumétrico de la alimentación	l/s
$W$	Trabajo aplicado al sistema	J/s
$W_{c,i}$	Fracción mol del componente c en la corriente i	mol/mol
$w_i$	Factor acéntrico del componente	adimensional
$X_A$	Conversión de óxido de propileno	mol/mol
$X_{n-H_2O}$	Fracción volumétrica del agua	mol/mol
$X_{n-H_2SO_4}$	Fracción volumétrica del ácido sulfúrico	mol/mol
$X_{n-OP}$	Fracción volumétrica del óxido de propileno	mol/mol
$X_{n-PG}$	Fracción volumétrica del propilenglicol	mol/mol
$X$	Costo de un metro de tubería del material de 1in de diámetro nominal	\$/m
$x_{ij}$	Medida del grado de interacción que ocurre cuando $u_i$ controla a $y_j$ y $u_j$ controla a $y_i$	adimensional

$x_{n,i}$	Composición de la fase líquida en el tanque <i>flash</i>	mol/mol
$y_{n,i}$	Composición de la fase vapor en el tanque <i>flash</i>	mol/mol
$z_i$	Composición de la alimentación al tanque <i>Flash</i>	mol/mol
$z_1$	Altura de control, corresponde a la salida del reactor	Metros

### Símbolos con Letras griegas

Símbolo	Constante	Unidades
$\gamma_A$	Velocidad de reacción del óxido de propileno.	$mol/(min \cdot m^3)$
$\epsilon$	Rugosidad del material de construcción de la tubería	$m$
$\mu$	Viscosidad	Pa.s, kg/(m.s)
$\mu_{w-sln}$	Viscosidad de la solución a la temperatura de la pared del tubo del intercambiador de calor	Pa.s, kg/(m.s)
$\mu_{w-\tau}$	Viscosidad fluido térmico a la temperatura de la pared del tubo del intercambiador de calor	Pa.s, kg/(m.s)
$\rho$	Densidad	$Kg/m^3, g/ml$
$\rho_i$	Densidad de la mezcla en la corriente i	$Kg/m^3, g/ml$
$\rho_V$	Densidad del vapor en el tanque <i>flash</i>	$g/ml$
$\rho_L$	Densidad del líquido en el tanque <i>flash</i>	$g/ml$
$\rho_1$	Densidad de la mezcla en el reactor	$g/ml$
$\varphi$	Factor de separación	adimensional
$\tau$	Tiempo de residencia	$s$

## **Agradecimientos**

Un agradecimiento muy especial al Ingeniero Químico M. Sc. Ph. D. Hernán Darío Álvarez Zapata porque con la dedicación a su labor, además de acompañarme y asesorarme en el desarrollo de la presente investigación, me ha motivado a continuar, aún en los momentos más difíciles y constituye un ejemplo a seguir tanto profesionalmente como a nivel personal.

*A mi madre y a mi hija*

*Que con su paciencia y amor, me han fortalecido para realizar la presente investigación, y me han animado para no desfallecer a pesar del cansancio y las dificultades.*

## Resumen

La presente tesis presenta un Problema de Referencia o Benchmark, propuesto como modelo para evaluar sistemas de control multivariable. El PdeR propuesto simplifica el análisis y diseño de sistemas de control para procesos químicos. Se caracteriza por su sencillez en cuanto a formulación matemática o planteamiento del proceso a nivel operativo, su fidelidad al reproducir las características de un problema industrial y su autosuficiencia al contar con la formulación matemática suficiente. La planta de proceso tomada como base del problema de referencia es un proceso reactor-separación-reciclo. El problema de referencia sirve como un modelo preciso con un bajo costo computacional y es de fácil escalamiento a nivel de laboratorio o a escala piloto. Sobre el sistema se realiza una simulación, tanto en lazo abierto como en lazo cerrado aplicando un control PID. La simulación permite apreciar la sensibilidad e interacción entre las variables y el efecto del acoplamiento.

## Abstract

This thesis presents a Benchmark, proposed as a model for evaluating multivariable control systems. The benchmark simplifies the analysis and design of control systems for chemical processes. It is characterized by its simplicity in terms of mathematical formulation or process approach to operational level, its fidelity to reproduce the characteristics of an industrial problem and its self-sufficiency by having enough mathematical formulation. The process plant taken as the base of the benchmark is a reactor-separation-recycle process. The benchmark serves as a precise model with low computational cost and ease scaling in the laboratory or pilot scale. About simulation it is performed in both open loop and closed loop applying PID control. Simulations let appreciate the sensitivity and the interaction among variables and the effect of variables coupling.

## Palabras claves

Problema de Referencia, Control Multivariable, Modelado de Procesos, Procesos Químicos.

# Contenido

Lista de Figuras.....	13
Lista de Tablas.....	15
Introducción.....	16
1 Problemas de Referencia (PdR) .....	19
2 Sobre Control Multivariable.....	23
2.1 Interacción en procesos de control Multivariable .....	23
2.2 Estrategias de Control Multivariable .....	25
2.2.1 Matriz de Ganancias Relativas (RGA):.....	26
2.2.2 El Índice Niederlinski (NI):.....	26
2.2.3 Control desacoplado .....	27
2.2.4 Descomposición en valores singulares SVD .....	27
2.2.5 Número de Condición CN.....	28
2.2.6 El Control Predictivo Basado en Modelos (CPBM) .....	28
2.2.7 El Control Óptimo.....	31
2.3 Modelos de los Procesos Multivariables.....	33
2.3.1 Modelo de espacio de estado.....	33
2.3.2 Modelo de la forma Función de Transferencia.....	34
2.4 Pareamiento de lazos de control .....	35
2.5 Control de procesos multivariables.....	38
2.5.1 Control Descentralizado .....	39
2.5.2 Control Distribuido.....	41
2.5.3 Control Centralizado.....	43
2.6 Importancia de un PdeR para simular Control de Procesos Multivariables .....	44
3 Propuesta de un Problema de Referencia para Control Multivariable .....	45
■ .....	46
3.1 Descripción del problema.....	46
3.1.1 Descripción de materias primas y productos del proceso .....	47
3.2 Diseño de Reactor.....	49
3.3 Diseño del Separador <i>Flash</i> Adiabático.....	56
3.3.1 Procedimiento de diseño del Tanque <i>Flash</i> .....	56
3.3.2 Aplicación del procedimiento de diseño del Tanque <i>Flash</i> .....	57
3.3.3 Modelamiento del Tanque <i>Flash</i> .....	62

4	Modelado y Simulación del Problema de Referencia.....	69
4.1	Condiciones de simulación .....	71
4.2	PLANTA EN LAZO ABIERTO .....	76
4.3	Planta en lazo cerrado .....	84
5	CONCLUSIONES.....	98
A.	Anexo: Diseño del sistema de agitación para el reactor .....	99
B.	Anexo: Diseño de la chaqueta del reactor .....	103
C.	Anexo: Diseño intercambiador de calor que calienta la mezcla que ingresará al reactor.....	104
D.	Anexo: Diseño intercambiador de calor que calienta la mezcla que ingresará al tanque flash .....	109
E.	Anexo: Diseño del condensador ubicado a la salida del vapor del tanque flash	113
F.	Anexo: Diseño del sistema de tubería .....	119
6	Bibliografía .....	125



## Lista de Figuras

Figura 2-1 Sistema simple con interacción en el que se requiere controlar dos variables con dos perturbaciones. ....	24
Figura 2-2: Diagrama de bloques de la interacción entre dos lazos de control. ....	24
Figura 2-3: Diagrama de bloques de un reactor de tanque agitado. ....	25
Figura 2-4: P&ID del reactor de tanque agitado. ....	25
Figura 2-5: Estrategias de Control Multivariable .....	26
Figura 2-6: Estructura básica del CPBM. ....	29
Figura 2-7: Sistema de 2 entradas y de 2 salidas. ....	35
Figura 2-8: Funciones de transferencia en lazo cerrado en arreglo descentralizado. ....	35
Figura 2-9: Diagrama de bloques de un sistema con interacciones dinámicas. ....	36
Figura 2-10: Diagrama de Control Descentralizado .....	40
Figura 2-11: Diagrama de control descentralizado con comunicación restringida. ....	40
Figura 2-12: Estructura de Control Distribuido Cooperativo. ....	42
Figura 2-13: Estructura de Control Distribuido Colaborativo. ....	42
Figura 2-14: Estructura de Control Centralizado. ....	43
Figura 2-15: P&ID del reactor de tanque agitado con un esquema de control centralizado .....	44
Figura 3-1: Vista planta de hidrólisis de óxido de propileno para obtención de propilenglicol. ....	46
Figura 3-2: Procedimiento de diseño del tanque flash. ....	57
Figura 3-3: Esquema tanque <i>Flash</i> . ....	60
Figura 3-4: Sistemas de procesos del tanque flash. ....	62
Figura 3-5: Diagrama de bloques de los sistemas de proceso en el tanque flash. ....	62
Figura 4-1: Temperatura a la salida del intercambiador E01. ....	76
Figura 4-2: Nivel de líquido en el reactor R01. ....	77
Figura 4-3: Concentraciones de los componentes a la salida del reactor R01. ....	77
Figura 4-4: Temperatura del reactor R01. ....	78
Figura 4-5: Temperatura a la salida del intercambiador E02. ....	79
Figura 4-6: Nivel de líquido en el tanque flash V01. ....	79
Figura 4-7 Nivel de líquido en el tanque <i>flash</i> V01 controlado. ....	80
Figura 4-8 Acción de control cuando se mantiene controlado el nivel del flash en lazo abierto. ....	81

Figura 4-9 Concentraciones de los componentes en las salidas del tanque flash V01 con nivel del líquido en el tanque flash controlado. ....	81
Figura 4-10: Presión en el tanque flash V01. ....	82
Figura 4-11: Temperatura a la salida del intercambiador E03. ....	82
Figura 4-12: Temperatura a la salida del intercambiador E01. ....	85
Figura 4-13: Flujo energético requerido en el intercambiador E01. ....	85
Figura 4-14: Nivel de líquido en el reactor R01. ....	86
Figura 4-15: Flujo volumétrico de salida en el reactor R01.....	87
Figura 4-16: Concentraciones de los componentes a la salida del reactor R01.....	88
Figura 4-17: Temperatura del reactor R01. ....	89
Figura 4-18: Flujo energético requerido en el reactor R01. ....	89
Figura 4-19: Temperatura a la salida del intercambiador E02. ....	90
Figura 4-20: Flujo energético requerido en el intercambiador E02. ....	90
Figura 4-21: Nivel de líquido en el tanque flash V01. ....	92
Figura 4-22: Flujo volumétrico de líquido a la salida del tanque flash V01.....	92
Figura 4-23: Concentraciones de los componentes en las salidas del tanque flash V01. ....	93
Figura 4-24: Presión en el tanque flash V01. ....	93
Figura 4-25: Flujo volumétrico de vapor a la salida del tanque flash V01. ....	94
Figura 4-26: Temperatura a la salida del intercambiador E03. ....	94
Figura 4-27: Flujo energético requerido en el intercambiador E03. ....	95
Figura 4-28 Diagrama de Control de Lazo Cerrado para el sistema.....	96

## Lista de Tablas

Tabla 3-1 Propiedades del óxido de propileno (OP). .....	48
Tabla 3-2 Propiedades del propilenglicol .....	49
Tabla 3-3 Parámetros cinéticos y de diseño del reactor. ....	53
Tabla 3-4 Especificaciones Tanque <i>Flash</i> .....	61
Tabla 4-1 Variables de estado con las ecuaciones diferenciales correspondientes. ....	72
Tabla 4-2 Continuación variables de estado con las ecuaciones diferenciales correspondientes.....	73
4-3 Tabla de interacciones entre variables de estado.....	75
Tabla 4-4 Pareamientos y Sintonía de los lazos de Control.....	84
Tabla 4-5 Comparación del comportamiento de las variables en lazo abierto y en lazo cerrado.....	96

# Introducción

El control automático resulta imprescindible en los procesos químicos, no solo para controlar variables como la presión, la temperatura, la humedad, entre otras, sino para lograr el control integral de los procesos, de manera que se puedan optimizar cumpliendo los objetivos económicos de la empresa. En el control de procesos, el objetivo principal es mantener el comportamiento real de un sistema lo más aproximado posible a un comportamiento previamente fijado. Para probar las estrategias de control planteadas es necesario contar con un problema de referencia o *benchmark* que consiste en un modelo propuesto para simplificar el análisis y diseño de una situación en particular, con el ánimo de permitir transferir fácilmente cualquier solución hallada al medio industrial. Un Problema de Referencia (PdeR) puede extraerse de la experiencia propia de una industria o de varias industrias, teniendo en cuenta los requerimientos típicos del proceso, llegando incluso a incluir las regulaciones ambientales.

Un PdeR se caracteriza por contar con una formulación matemática *sencilla* a nivel operativo, que permita plantear un modelo preciso, de bajo costo computacional; por su *fidelidad* para reproducir los aspectos básicos de una situación industrial cotidiana; por su *claridad* frente a los mecanismos que participan del proceso, permitiendo una comprensión e interpretación física de los resultados numéricos que conduzca a unas conclusiones concretas con base en las condiciones del proceso real; finalmente, se caracteriza porque es *fácil de escalar a nivel piloto*, con adecuados niveles de seguridad operativa, bajo impacto ambiental, tamaño del montaje reducido y bajos costos de construcción y operacionales (Prett and Morari, 1987; Bupp, Bernstein and Coppola, 1985).

Cada vez, el diseño de procesos es más exigente en las consideraciones económicas y ambientales, lo que conlleva a la existencia de estructuras de recicló. Una de las disposiciones más frecuentes en los procesos químicos consiste en un reactor acoplado a un sistema de separación que permita recuperar los componentes deseados de la corriente de productos. Buckley (1964) fue el ingeniero industrial pionero que reconoció la importancia del diseño de la planta como un todo (Sharifzadeh, 2013), sin embargo, se

continúa diseñando sistemas de control para operaciones unitarias individuales. Las estrategias de control diseñadas para unidades aisladas están sujetas a fallar en el contexto de una planta completa, especialmente en procesos con reciclo, ya que la presencia del lazo del reciclo puede tener un efecto significativo sobre la dinámica del proceso, por ejemplo un aumento en la constante del tiempo (Seki, 2006). Se han realizado avances significativos en la sistematización de los procesos de ingeniería, para lo cual se cuenta con un amplio portafolio de instrumentos de análisis para modelamiento, optimización, diagnóstico y control, los cuales consideran las interacciones completas de la planta para su diseño y control (Sharifzadeh, 2013). Sin embargo, el estado estacionario y los comportamientos dinámicos de unidades interconectadas difieren considerablemente de los de las unidades individuales. Por lo tanto, si el PdeR que se usa para probar el control multivariable no se escoge de manera adecuada, la capacidad de deducir la eficiencia del control es limitada.

Autores como Downs y Vogel (1993), McAvoy and Ye (1993), Price and Georgakis (1993), Liang (1996), han tomado como Problema de Referencia para control multivariable a la planta Tennessee (Álvarez, 2007), que no es más que un sistema reactor/separador/reciclo. Sin embargo este proceso está lejos de cumplir con los criterios anteriormente enunciados como aceptables para calificarlo como un *Benchmark* o PdeR. La Planta Tennessee Eatsman tiene una formulación matemática muy grande y compleja, además de la gran dificultad de escalar dicho proceso a nivel de laboratorio. Por lo tanto, se hace necesario proponer un verdadero PdeR que represente bien a los procesos multivariables y que cumpla con las características que exige un PdeR.

Aunque un sinnúmero de procesos industriales involucran sistemas reactor/separación/reciclo, los problemas que se toman como referencia distan mucho de las situaciones reales, respecto a las restricciones consideradas, a las perturbaciones que se tienen en cuenta, a las aproximaciones realizadas, entre otros, lo cual dificulta evaluar modelos y asegurar su reproducibilidad a nivel industrial. De esta manera, se hace necesario proponer un verdadero PdeR que represente bien a los procesos multivariables, facilitando su generalización y la comparación entre diferentes planteamientos y que a su

vez cumpla con las características que exige un benchmark (Prett and Morari, 1987; Bupp, Bernstein and Coppola, 1985).

Se propone en esta tesis, como mecanismo de separación, un evaporador flash con un reciclo de masa y energía, para ser acoplado al reactor. El proceso resultante cumple con las condiciones de un PdeR puesto que es representativo de procesos químicos multivariables, permitiendo diseñar, a partir de él, su sistema de control y facilitando que diferentes industrias puedan adoptarlo. Calderón (2012) y Moscoso (2013) proponen un benchmark para un sistema reactor/separador/reciclo constituido por un reactor de tanque agitado acoplado a un tanque flash, pero restringen demasiado el problema, llevándolo a determinados puntos de operación, así, el modelo propuesto deja de ser un PdeR, al no ser preciso y claro, asumiendo un proceso adiabático y al no reproducir características de una misma situación industrial, ya que su objetivo era optimizar el diseño alrededor de un punto de operación definido.

# 1 Problemas de Referencia (PdR)

En muchos trabajos realizados en los diferentes campos de investigación, como por ejemplo en los procesos químicos, falta uniformidad en los modelos, en las condiciones y en las restricciones planteadas, lo que dificulta la comparación entre planteamientos similares.

En el campo académico se dispone de los problemas de referencia PdeR o Benchmark, definidos por el Business Dictionary como un estándar o un set de estándares usado(s) como un punto de referencia para evaluar el rendimiento o nivel de calidad. Según Álvarez (2000), que cita y comenta a (Prett and Morari, 1987; Bupp, Bernstein and Coppola, 1985), las principales características de un PdR adecuado son:

- (i) Sencillez en cuanto a formulación matemática o planteamiento del proceso a nivel operativo.
- (ii) Fidelidad al reproducir las características del mismo problema industrial.
- (iii) Autosuficiencia, ya que cuenta con la información suficiente del proceso (formulaciones matemáticas) que permite plantear un modelo preciso pero de bajo costo computacional.
- (iv) Claridad en los mecanismos que participan del proceso, los cuales son fáciles de comprender, así, al simular el proceso se alcanza una interpretación física de los resultados numéricos permitiendo concluir con base en las condiciones del proceso real.
- (v) Fácil de escalar a nivel de laboratorio o montaje piloto, con adecuados niveles de seguridad operativa, bajo impacto ambiental, tamaño del montaje reducido y bajos costos de construcción y operacionales.

El objetivo de plantear un PdeR es que permita transferir fácilmente cualquier solución hallada al medio industrial. Sin embargo, a pesar de su importancia y necesidad en el campo académico y científico, se dispone de una mínima cantidad de PdeR en el área de Control de Procesos.

En el caso de los procesos químicos, recién se empieza a tomar conciencia de la necesidad e importancia de disponer de PdeR. Es Así como Ryong, Kim and Song (2014) presenta un PdeR planteado por la AEN/OCDE para validar dinámicas computacionales de fluidos turbulentos correspondientes a códigos de fluidodinámica computacional (CFC) que les permita desarrollar un problema específico de Guías de Buenas Prácticas (BPG) sobre la base de la KAERI (Instituto de Investigación de Energía Atómica de Corea). El flujo turbulento dentro de un haz de varillas con rejilla separadora es uno de los problemas que desde hace muchos años ha inquietado a la comunidad térmica-hidráulica nuclear. Un adecuado diseño de la rejilla separadora permitiría una mejora de energía de la planta en los reactores nucleares existentes y en los futuros reactores, al afectar considerablemente la refrigerabilidad del combustible nuclear. El fenómeno de flujo relacionado con las estructuras de flujo en subcanales de un haz de barras con paletas y rejillas separadoras puede predecirse correctamente mediante códigos.

Los códigos CFD contienen modelos físicos para describir turbulencia, transferencia de calor, interacción multifase y reacciones químicas. Tales modelos deben ser validados antes de aplicarse en sistemas reales tales como comportamiento térmico-hidráulico en subcanales en el núcleo de un reactor nuclear. La validación necesaria se realiza comparando las predicciones del modelo con datos confiables. Sin embargo, una evaluación confiable del modelo requiere simulación CFD. Esto ha llevado a la OECD/NEA a formar grupos de expertos para evaluar los códigos, determinar la seguridad en las aplicaciones de los reactores nucleares y formar una base de datos para su validación (Smith, et al., 2011, citados por Ryong, Kim and Song, 2014). Los grupos que trabajan en CFD han animado a las comunidades nucleares a conocer los datos de prueba a partir de problemas de referencia. El primer Benchmark internacional llamado IBE-1 fue el "OECD/NEA-Vattenfall T-Junction Benchmark Exercise" y se basó en el experimento Vattenfall para investigar un problema relacionado con flujo turbulento y transferencia de calor en una unión (T. Mahaffy, 2010, citado por Ryong, Kim and Song, 2014).



Otro ejemplo de PdR lo plantea Fahs (2014), quien considera los modelos numéricos instrumentos irremplazables para el modelamiento de densidad de flujo impulsado en medios porosos, los cuales se usan en variedad de análisis de agua marina por ejemplo en los depósitos de residuos nucleares. El desarrollo y uso de estos modelos requiere un paso de validación previo para confirmar que las ecuaciones no lineales que gobiernan sean solucionadas correctamente. Esto se realiza, por lo general, comparando los resultados de los modelos numéricos con los de los Problemas de Referencia existentes. Fahs (2014), cita varios autores que han propuesto Problemas de Referencia para la densidad de flujo impulsado en medios porosos, resaltando los problemas de Henry (1964) y Elder (1967). El problema de Henry describe la intrusión de agua salada en un acuífero costero y ha sido muy usado debido a la existencia de una solución semianalítica, sin embargo, se limita a altos valores del coeficiente de difusión molecular que lo hacen insensible a variaciones de densidad.

Castro and Doyle (2004a) plantearon un PdeR con base en una planta de procesamiento de pulpa dotada tanto de la línea de tratamiento de la fibra como de un área de recuperación de productos químicos con el fin de ponerlo a disposición de la comunidad académica como un *Benchmark* para estudio de sistemas de procesos en ingeniería. El PdeR mencionado se planteó con el fin de facilitar la estimación y modelamiento de procesos, su control y optimización, la realización del diagnóstico de fallas y propósitos educativos y fue utilizado por Castro and Doyle (2004a) para diseñar un Sistema de Control de Planta Completa y posteriormente por Luppi, Zumoffen and Basualdo (2013) para diseñar una Estrategia de Control Descentralizada de Planta Completa a aplicarse en procesos a gran escala. Sin embargo, plantean 8200 estados, 142 entradas y 115 salidas, lo cual atenta contra la sencillez, respecto a la formulación matemática y planteamiento del proceso a nivel operativo, de ahí que es debatible el hecho de que haya sido planteado como un PdR y así lo reconozcan algunos autores. Un trabajo futuro, porque toma un buen tiempo extra, será evaluar si realmente el planteamiento de Castro and Doyle (2004a) puede considerarse como un PdeR, frente a la principales características propuestas por (Prett and Morari, (1987), Bupp, Bernstein and Coppola, (1985).

Sigue siendo cuestionable por qué en otras áreas de la ingeniería, como por ejemplo en los procesos eléctricos, se dispone de un amplio abanico de PdeR, volviéndose cotidiano el apoyarse en un *benchmark* planteado por autores reconocidos, para el desarrollo de investigaciones, mientras que en los procesos químicos hay una carencia de los mismos. Se vislumbra la importancia de construir un banco de Problemas de Referencia que facilite la construcción de prototipos de diseño y la realización de pruebas de estrategias de control.

## 2 Sobre Control Multivariable

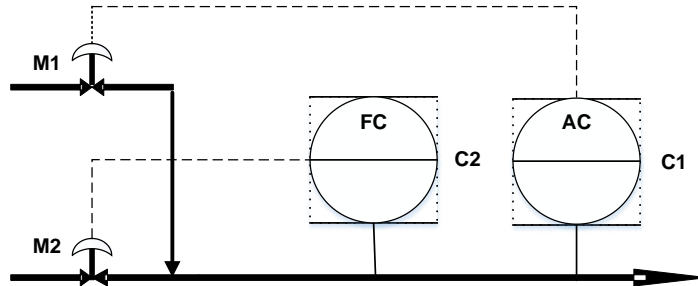
El objetivo principal del control de procesos es mantener el comportamiento real de un sistema lo más próximo posible a un comportamiento previamente fijado. Al analizar un proceso a controlar es indispensable identificar la respuesta dinámica del proceso, para lo cual se especifica las variables de entrada ( $u$ ), se representa el proceso con un modelo y se busca establecer la trayectoria de las variables de salida frente a un cambio en las variables de entrada. El modelamiento del proceso busca establecer una relación matemática entre las variables de entrada y las variables de salida con el fin de permitir que, al controlar el proceso, las variables de salida del mismo se mantengan en un valor deseado.

Muchos de los sistemas de control en las unidades de proceso se pueden analizar mediante relaciones una entrada-una salida (sistemas SISO, single input/single output), lo que les permite ser implementados fácilmente mediante algoritmos PID estándar, otros sistemas son multivariables, es decir, cuentan con múltiples entradas y salidas (sistemas MIMO, multiple input/multiple output), por ejemplo los relacionados con columnas de destilación, unidades de cracking catalítico, unidades de coquización retardada, entre otras (Acedo, 2003).

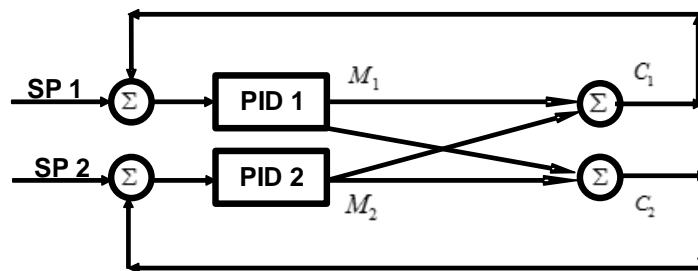
### 2.1 Interacción en procesos de control Multivariable

Generalmente los lazos de control instalados en procesos presentan interacción entre ellos, por ejemplo en una torre de destilación ningún lazo de control se comporta de manera independiente (Acedo, 2003). En la Figura 2-1 **Sistema simple con interacción en el que se requiere controlar dos variables con dos perturbaciones.** se presenta un sistema simple típico con interacción, en el cual se requiere controlar caudal y composición de una mezcla manipulando dos válvulas ubicadas en las dos corrientes que aportan producto a la mezcla. Se observa que cada una de las válvulas afecta las dos variables controladas, por ejemplo, al aumentar el punto de ajuste de caudal ( $C2$ ) y cambiar el valor del flujo másico  $M2$ , también se modifica la composición ( $C1$ ), ya que el aporte del componente que controla esta composición ( $M1$ ), aumenta o disminuye respecto al caudal principal ( $M2$ ). Lo mismo ocurre cuando se modifica el punto de ajuste

de la composición (C1) respecto al caudal (C2). En el diagrama de bloques de la Figura 2-2 se muestra la interacción entre los dos lazos de control.



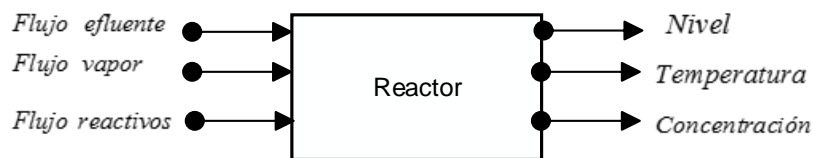
**Figura 2-1** Sistema simple con interacción en el que se requiere controlar dos variables con dos perturbaciones.



**Figura 2-2:** Diagrama de bloques de la interacción entre dos lazos de control.

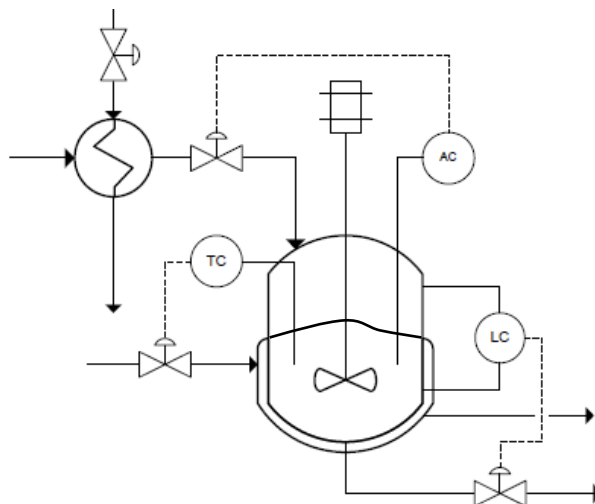
La interacción genera efectos indeseables cuando los lazos de control actúan en modo automático. El desacoplamiento se puede realizar relajando la sintonía de uno de los controladores para que su actuación sea lenta comparada con el otro lazo, de manera que se minimice la oscilación entre las variables.

Considere que se tiene un reactor de tanque agitado en el cual se requiere controlar el nivel, la temperatura y la composición del efluente del reactor. Se tiene como variables manipuladas el flujo de la corriente de producto, la carga térmica del medio de calentamiento y el flujo de los reactivos, lo cual se representa mediante el diagrama de bloques de la Figura 2-3.



**Figura 2-3:** Diagrama de bloques de un reactor de tanque agitado.

En la Figura 2-4 se representa el P&ID del reactor de tanque agitado, aplicando control descentralizado, del cual se hablará más adelante. Se propone que el flujo de efluente controle el nivel, el flujo de vapor la temperatura del reactor y el flujo de reactivos la concentración (Calderón, 2009). Note la fuerte interacción que se presenta las tres variables de salida: nivel, temperatura y concentración.

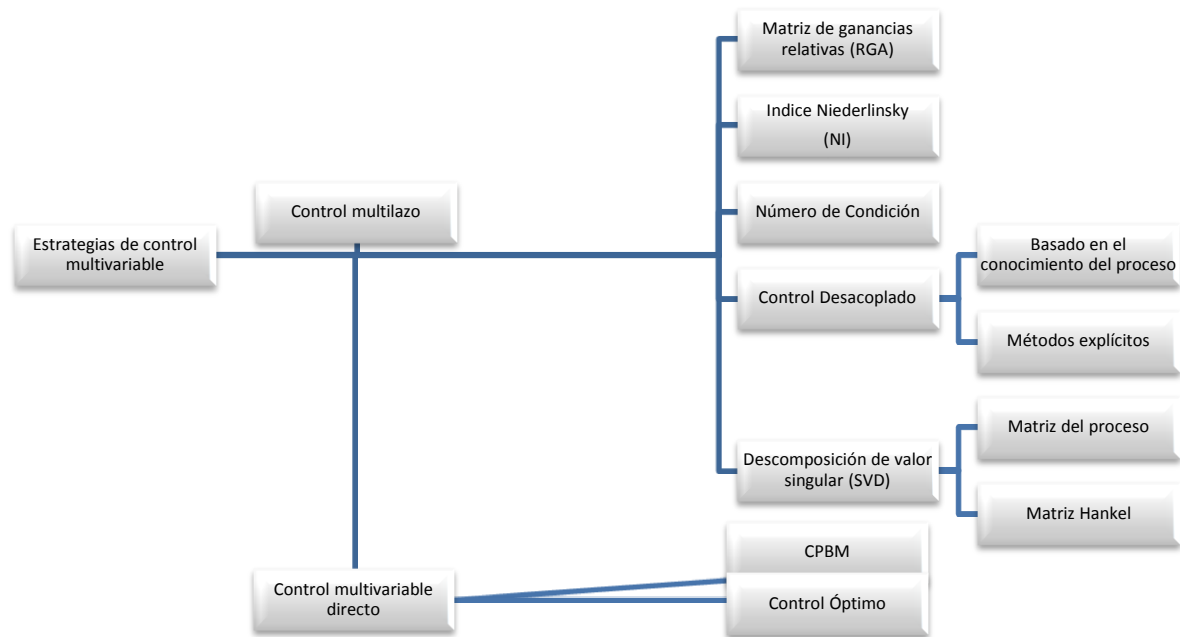


**Figura 2-4:** P&ID del reactor de tanque agitado.

## 2.2 Estrategias de Control Multivariable

El control automático de procesos multivariables mediante controladores PID se dificulta por la presencia de tiempos muertos, interacciones y restricciones (Ogunnaike and Ray, 1994), por lo cual es crítica la selección de los pareamientos más adecuados entrada-salida para los lazos de control independientes, lo cual se realiza teniendo en cuenta no todas las interacciones sino aquellas que tengan la mayor influencia en el desempeño de los controladores y sus unidades de sintonía del proceso (Moscoso, 2013). De ahí que el control automático de Procesos Multivariables se aborde básicamente dos maneras: a partir de control multilazo, en el cual se establecen varios lazos de control y de control

Multivariable, en el cual un sólo controlador decide los valores de todas las variables manipuladas en el proceso. Esta división se representa en la Figura 2-5: **Estrategias de Control Multivariable** y a continuación se describen las estrategias de control multivariable más utilizadas.



**Figura 2-5: Estrategias de Control Multivariable**

### 2.2.1 Matriz de Ganancias Relativas (RGA):

Es una matriz basada en la respuesta del proceso en estado estacionario, la cual busca obtener el mejor pareamiento de variables para desacoplar la interacción entre lazos (Ogunnaike and Ray, 1994).

### 2.2.2 El Índice Niederlinski (NI):

Es una condición necesaria para analizar la estabilidad de configuraciones de control. Este análisis involucra las ganancias de estado estacionario del proceso. Si el NI resultante es negativo el lazo de control será inestable. El NI se define como:

$$NI = \frac{\det \mathbf{G}}{\prod_{i=1}^n g_{ii}} \quad (1)$$

Donde  $\mathbf{G}$  es la matriz  $l \times m$  de las ganancias del sistema en estado estacionario de manera que la variable  $i$  controlada es pareada con la variable  $i$  de entrada. La ventaja de este método de pareamiento es que considera la estabilidad del sistema pero no considera el comportamiento dinámico del sistema.

### 2.2.3 Control desacoplado

Que considera las interacciones entre las dinámicas del proceso existentes en el sistema. Este método opera eliminándolas de manera que los controladores no las perciben. Para el sistema desacoplado, se definen las variables menos relevantes del sistema y los controladores correspondientes son sintonizados de manera más relajada (Erikson, 1999). El desacoplamiento es muy sensible a los errores de modelamiento y a las incertidumbres.

### 2.2.4 Descomposición en valores singulares SVD

Método que cuantifica la controlabilidad y observabilidad del proceso, permitiendo la localización de sensores y el pareamiento entrada-salida en un proceso (Erikson, 1999). El método de la SVD por lo general se aplica a sistemas sobre el dominio de la frecuencia, usando la matriz  $\mathbf{G}$  y su factorización de la forma:

$$\mathbf{G} = \mathbf{U} \Sigma \mathbf{V}^T \quad (2)$$

Aquí  $\mathbf{U}$  y  $\mathbf{V}$  son matrices ortonormales donde cada columna representa un vector singular de  $\mathbf{G}$  y  $\Sigma$  es una matriz diagonal cuyos elementos son los valores singulares de  $\mathbf{G}$  obtenidos como las raíces cuadradas no negativas de los valores propios de  $\mathbf{G}\mathbf{G}^T$ . Las matrices  $\mathbf{U}$  y  $\mathbf{V}$  son bases ortonormales para el espacio de columna (espacio de salida) y para el espacio de la fila (espacio de entrada de  $\mathbf{G}$ ) (Moscoso, 2013).

Los valores singulares  $\mathbf{G}$  se refieren a las diferentes maneras en que una planta responde a diferentes situaciones, es decir que una dirección dada de cambios de entrada generará una determinada dirección de las salidas de la planta. La dirección de estos movimiento se indica mediante el signo de los componentes de vector singular, donde los componentes positivos representan un incremento y los valores negativos una disminución sobre las entradas de la planta (componentes del vector  $\mathbf{V}_i$ ) o sobre las

salidas (componentes del vector  $\mathbf{U}_i$ ). Los valores singulares más altos significan modos de operación más probables y son los primeros componentes de la matriz  $\Sigma$ . Los modos correspondientes a valores singulares muy pequeños son muy difíciles de alcanzar mediante un sistema de control (Moscoso, 2013).

### 2.2.5 Número de Condición CN

Evalúa un conjunto de entradas y salidas a partir del número de condición  $\gamma$  de la matriz de ganancias del proceso en el dominio de la frecuencia,  $\mathbf{G}$ . El CN de una matriz puede ser calculado como la relación entre los valores singulares máximo y mínimo (Moscoso, 2013).

$$\gamma(\mathbf{G}) = \frac{\bar{\sigma}(\mathbf{G})}{\underline{\sigma}(\mathbf{G})} \quad (3)$$

Donde  $\underline{\sigma}$  es el valor singular más bajo de  $\mathbf{G}$  y  $\bar{\sigma}$  es el valor singular más alto. Así, un sistema para el cual el CN es grande es un sistema difícil de controlar, ya que hay modos de operación que dificultan mantener las condiciones de operación del proceso. En estos casos se recomienda aplicar control predictivo basado en modelo o control óptimo que se presentan a continuación.

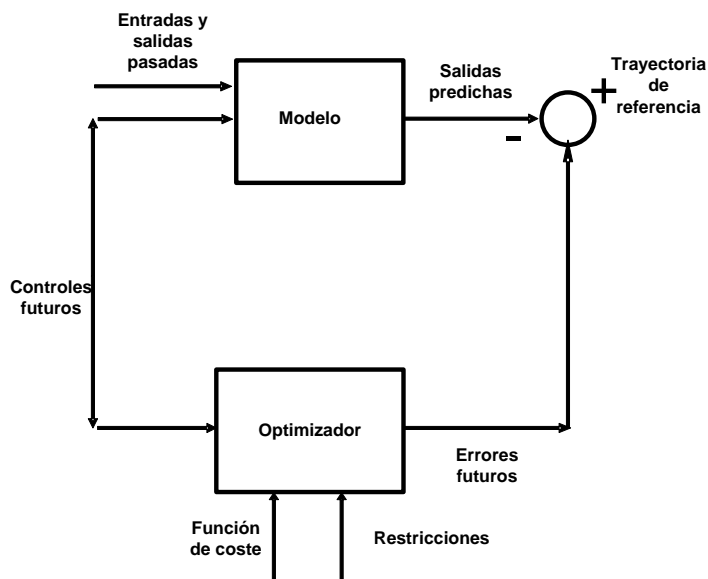
### 2.2.6 El Control Predictivo Basado en Modelos (CPBM)

Utiliza un modelo explícito para predecir cuál será el comportamiento del proceso a lo largo del tiempo, se basa en un modelo del proceso a controlar con el fin de predecir la evolución futura del estado o de las salidas, de ahí que dicho modelo se conozca como modelo de predicción. La evolución de las salidas se predice en un intervalo de tiempo denominado horizonte de predicción  $N$ .

La secuencia de valores futuros de la salida se calcula a partir de la información de la evolución de proceso hasta el tiempo  $t$ , es decir, a partir de los valores pasados de las entradas o actuaciones del proceso y de los valores presentes y pasados de las salidas del proceso. También se emplea una secuencia de actuaciones o señales de control futuras. Se suele considerar un *horizonte de control*  $N_u < N$ , de forma que para los



momentos futuros más allá del horizonte de control se supone que la señal de control es constante. Estos conceptos se resumen en la Figura 2-6 (Rodríguez, 2014).



**Figura 2-6:** Estructura básica del CPBM.

El conjunto de señales de control futuras se calcula optimizando un determinado criterio dentro del cual se pretende mantener el proceso lo más próximo posible a la trayectoria de referencia  $w(t+k)$ . Por lo general el criterio toma la forma de una función cuadrática de los errores entre la salida predicha y la trayectoria de referencia pre-especificada, a veces se incluye el esfuerzo de control. Si el criterio es cuadrático, el modelo es lineal y no existen restricciones, se puede obtener una solución explícita, de otra manera se debe aplicar un método iterativo de optimización. Además se hace alguna suposición sobre la estructura de la ley de control futura, por ejemplo que a partir de cierto instante será constante. La primera señal de control de la secuencia  $u(t|t)$  es enviada al proceso mientras que las siguientes señales de control calculadas son desechadas dado que en el siguiente instante de muestreo se conoce  $y(t+1)$  y se repite el primer paso con este nuevo valor y todas las secuencias son actualizadas. Se calcula  $u(t+1|t+1)$  que será diferente al  $u(t+1|t)$  al disponer de nueva información, haciendo uso del concepto de horizonte deslizante (Rodríguez, 2014).

Los controladores PID tradicionales no se recomiendan para el control de procesos con varias restricciones porque el operador se tarda en reconocer y responder a las perturbaciones de entrada al proceso. La ventaja del CPBM frente a estos controladores es que a partir del modelo se predice la salida del proceso para cierto periodo de tiempo (horizonte de predicción), se define una trayectoria para el futuro inmediato de las salidas del proceso con el fin de llevarlas a su punto de ajuste o a un valor límite y se calcula un vector de movimientos futuros para minimizar el error; el ciclo puede repetirse para predecir nuevamente las salidas del proceso (Acedo, 2003).

Entre las ventajas del CPBM se tiene que permiten dar solución a problemas de interacción Multivariable, incluso aquellos con comportamientos no usuales, realiza la compensación de tiempos muertos, responde adecuadamente a procesos con respuesta inversa y finalmente constituye una vía para efectuar acción de control *feedforward* compensando las perturbaciones del proceso.

En la construcción del modelo dinámico es necesario incluir todas las interacciones significativas entre variables, con el fin de que este permita predecir el comportamiento de una variable controlada en lazo abierto en un tiempo futuro tal que los cambios efectuados en el pasado sobre las variables manipuladas y las de perturbación se estabilicen y permitan que se alcance el estado estacionario, de manera que el controlador pueda predecir y evitar que las variables de control se alejen de su punto de ajuste o que se salgan de sus límites superior e inferior (Acedo, 2003).

El modelo del sistema real puede dividirse en dos submodelos: el modelo del proceso y el modelo de las perturbaciones. *El modelo del proceso* relaciona la respuesta de proceso con las variables de entrada medidas. *El modelo de las perturbaciones* busca explicar la respuesta del proceso que no puede ser explicada por el modelo del proceso, lo cual incluye los efectos de perturbaciones no medidas, ruido e incluso, errores de modelado.

Si el proceso es lineal e invariante en el tiempo, se puede representar mediante una función de transferencia de la forma:

$Y(t) = G(q) * u(t) + v(t)$  (4) ; donde:

$Y(t)$  es la respuesta del sistema

$G(q)$  es la función de transferencia que representa la parte determinista de la dinámica del proceso.

$u(t)$  es la entrada que se manipula o la variable de perturbación medida.

$v(t)$  representa el efecto de todas las perturbaciones no medidas que actúan sobre el sistema (incluyendo el ruido).

La propuesta de Acedo (2003) para implementar un control Multivariable consiste, en primer lugar, construir el modelo dinámico del proceso para predecir el comportamiento futuro de las variables controladas bajo los efectos de las variables manipuladas, aplicando los principios de linealidad y superposición y teniendo en cuenta el historial de los cambios en las variables independientes hasta lograr el estado estacionario. El siguiente paso consiste en calcular en el algoritmo de control las referencias óptimas en estado estacionario para todas las variables controladas y manipuladas, sus límites de operación, al igual que la información del costo de materia prima, productos y servicios auxiliares. Finalmente se desarrolla un plan detallado de la acción de control para las variables manipuladas de manera que se minimice la diferencia entre el comportamiento futuro predicho por el controlador y el comportamiento deseado como referencia para las variables controladas. Así, el error de cada variable controlada será igual a la diferencia entre el set point en estado estacionario y la predicción. Si la acción de control logra el efecto deseado, el error se elimina completamente, la variable controlada alcanza de inmediato la referencia en estado estacionario y se mantiene a lo largo del horizonte temporal.

### 2.2.7 El Control Óptimo

Con el control óptimo se busca generar una entrada de control óptima que permita la obtención de un mínimo o un máximo de una medida de desempeño sujeto a las dinámicas del sistema en estudio, con determinadas especificaciones y restricciones. Así, en control óptimo se busca una trayectoria de control admisible  $\mathbf{u}: [t_a, t_b] \rightarrow \Omega \subseteq \mathcal{R}^m$  tal que la dinámica descrita por un modelo de espacio de estado no lineal  $\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t)$  sea transferida al estado inicial  $\mathbf{x}(t_a) = \mathbf{x}_a$  en un estado final admisible  $\mathbf{x}(t_b) \in S \subseteq \mathcal{R}^n$  y tal que la trayectoria de estado correspondiente  $\mathbf{x}(\cdot)$  satisfaga la restricción de estado  $\mathbf{x}(t) \in \Omega_x(t) \subseteq \mathcal{R}^n$  En todos los tiempos  $t \in [t_a, t_b]$  y tal que el

costo funcional  $j(\mathbf{u})$  sea minimizado a  $j(\mathbf{u}) = K(\mathbf{x}(t_b), t_b) + \int_{t_a}^{t_b} L(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t)$  (Moscoso, 2013).

$t_a$  y  $t_b$  son el tiempo inicial y el tiempo final del intervalo de tiempo de interés respectivamente,  $\mathbf{x}(t_a) = \mathbf{x}_a$  y  $\mathbf{x}(t_b) = \mathbf{x}_b$  son los estados inicial y final del proceso respectivamente  $\Omega_x$  y  $\Omega$  son los conjuntos admisibles para las variables de estado y entrada respectivamente. Se asume que las funciones  $f$ ,  $K$  y  $L$  dependen de sus argumentos y del problema de interés. En cuanto a  $S$ , es un conjunto de objetivos específicos que pueden ser una restricción para el estado final.

Según las características del problema se presentan cuatro tipos de problemas de control óptimo, el primero cuando el estado final es fijo donde  $\mathbf{x}^o(t_b) = \mathbf{x}_b$ , donde el superíndice indica la solución óptima, en segundo lugar cuando el estado final es libre, en tercer lugar cuando el estado final se ve obligado a mentir en un conjunto de destino especificado  $S$  y finalmente cuando los estados están sujetos a  $\mathbf{x}^o(t) \in \Omega_x(t)$  en todos los momentos adicionales a la restricción del estado final que pertenece a un conjunto  $S$ .

Según Moscoso (2013), un problema de control óptimo se puede resolver usando el Principio Mínimo de Pontryagin's que indica lo siguiente:

- Se formula el problema de control óptimo.
- Se determina si el problema puede tener solución.
- Se formula las condiciones necesarias del basadas en la definición de la función Hamiltonian  $H$  que se define así:  $\mathbb{R}^n \times \Omega \times \mathbb{R}^n \times 0,1 \times [t_a, t_b] \rightarrow \mathbb{R}$  donde

$H(\mathbf{x}(t), \lambda(t), \lambda_0, t) = \lambda_0 L(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t) + \lambda^T(t) f(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t)$  donde  $\lambda \in \mathbb{R}^n$  son los multiplicadores de Lagrange del sistema.

El Principio Mínimo de Pontryagin's pone las condiciones que deben cumplir la solución óptima  $\mathbf{u}^o: [t_a, t_b] \rightarrow \Omega$  y  $\lambda_0 \rightarrow \mathbb{R}^n$ .

- Luego se minimiza globalmente la función Hamiltoniana  $H$  para todos los  $t \in [t_a, t_b]$ 

$$\mathbf{u}^o(\mathbf{x}^o(t), \lambda^o(t), \lambda_0^o, t) = \mathbf{arg} \min_{\mathbf{u} \in \Omega} H(\mathbf{x}^o(t), \lambda^o(t), \lambda_0^o, t)$$
- Se determina dónde puede tener el problema una solución singular, por ejemplo, verificando si se tiene alguna de las siguientes condiciones  $\lambda^o = 0$  ó  $H \neq H(\mathbf{u})$  para  $t \in [t_a, t_b]$ .

- Se resuelve el problema de valor límite de dos puntos para  $x^o(\cdot)$  y  $\lambda^o(\cdot)$ . Este problema resulta a partir de reemplazar la ley de control  $u^o(t)$  en las ecuaciones diferenciales.
- Eliminar localmente las soluciones óptimas.
- Si es posible, convertir el control de lazo abierto óptimo  $u^o(t)$  en un control de lazo cerrado óptimo  $u^o(x^o(t), t)$  usando feedback.

## 2.3 Modelos de los Procesos Multivariables

Por lo general, los modelos usados para representar el comportamiento dinámico de los procesos multivariables pertenecen a la forma espacio de estado o a la forma función de transferencia.

### 2.3.1 Modelo de espacio de estado

Según Ogunnaike and Ray, (1994), un sistema Multivariable lineal se representa en el espacio de estado como:

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + Bu(t) + rd(t) \quad (5)$$

$$y(t) = Cx(t) \quad (6)$$

Donde el punto representa la diferenciación con respecto al tiempo, además

**X** es el vector de dimensión l de variables de estado

**u** es el vector de dimensión m de variables de entrada

**y** es el vector de dimensión n de variables de salida

**d** es el vector de dimensión k de variables perturbación

**A**, **B**, **C** y **r** son las matrices del sistema dimensionadas apropiadamente, de acuerdo con el orden respectivo a partir de la multiplicación de los vectores.

Los sistemas multivariables se representan mediante ecuaciones diferenciales no lineales, así:

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x, u, d) \quad (7)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{h}(\mathbf{x}(t)) \quad (8)$$

Donde  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{d})$  y  $\mathbf{h}(\mathbf{x}(t))$  por lo general son vectores de funciones no lineales.

### 2.3.2 Modelo de la forma Función de Transferencia

El modelo de función de transferencia relaciona la transformada de Laplace del vector de variables de entrada al de variables de salida, como lo indica la siguiente expresión:

$$\mathbf{y}(s) = \mathbf{G}(s)\mathbf{u}(s) + \mathbf{G}_d(s)\mathbf{d}(s) \quad (9)$$

donde para un sistema con  $m$  entradas y  $n$  salidas,  $\mathbf{G}(s)$  es una matriz de función de transferencia  $m \times n$  con los elementos:

$$\mathbf{G}(s) = \begin{bmatrix} g_{11}(s) & \cdots & g_{1m}(s) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n1}(s) & \cdots & g_{nm}(s) \end{bmatrix}$$

$\mathbf{G}_d(s)$  es una matriz de función de transferencia  $n \times k$ .

Tal como en sistemas de única entrada, única salida es posible convertir la representación del modelo en el espacio de estado a la forma de la función de transferencia tomando las transformadas de Laplace y re-arreglándolas. Tomando las transformadas de Laplace de las ecuaciones 5 y 6, asumiendo que las matrices involucradas son constantes y que se tienen condiciones de cero inicial se obtiene:

$$s\mathbf{x}(s) = \mathbf{A}\mathbf{x}(s) + \mathbf{B}\mathbf{u}(s) + \mathbf{r}\mathbf{d}(s) \quad (10)$$

$$\mathbf{y}(s) = \mathbf{C}\mathbf{x}(s) \quad (11)$$

Si se aplica las leyes del álgebra matricial se obtiene:

$$\mathbf{y}(s) = [\mathbf{C}(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{B}]\mathbf{u}(s) + [\mathbf{C}(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{r}]\mathbf{d}(s) \quad (12)$$

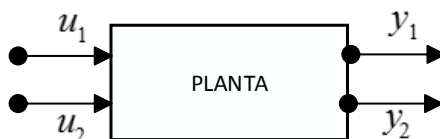
Mediante comparación con la ecuación 9 se obtienen la relación entre las matrices función de transferencia y las matrices en el espacio de estado.

$$\mathbf{G}(s) = [\mathbf{C}(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{B}] \quad (13)$$

$$\mathbf{G}_d(s) = [\mathbf{C}(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{r}] \quad (14)$$

## 2.4 Pareamiento de lazos de control

Considere que se requiere analizar el problema de control a lazo cerrado de un sistema de dos entradas y dos salidas, representado en la Figura 2-7: **Sistema de 2 entradas y de 2 salidas**. y definidas por las funciones de transferencia dadas por las expresiones (15) y (16) (Calderón, 2009).

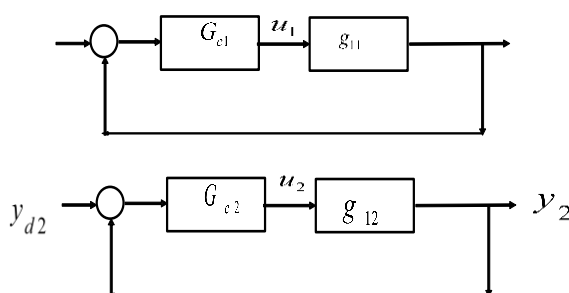


**Figura 2-7:** Sistema de 2 entradas y de 2 salidas.

$$y_1(s) = g_{11}(s) * u_1(s) + g_{12}(s) * u_2(s) \quad (15)$$

$$y_2(s) = g_{21}(s) * u_1(s) + g_{22}(s) * u_2(s) \quad (16)$$

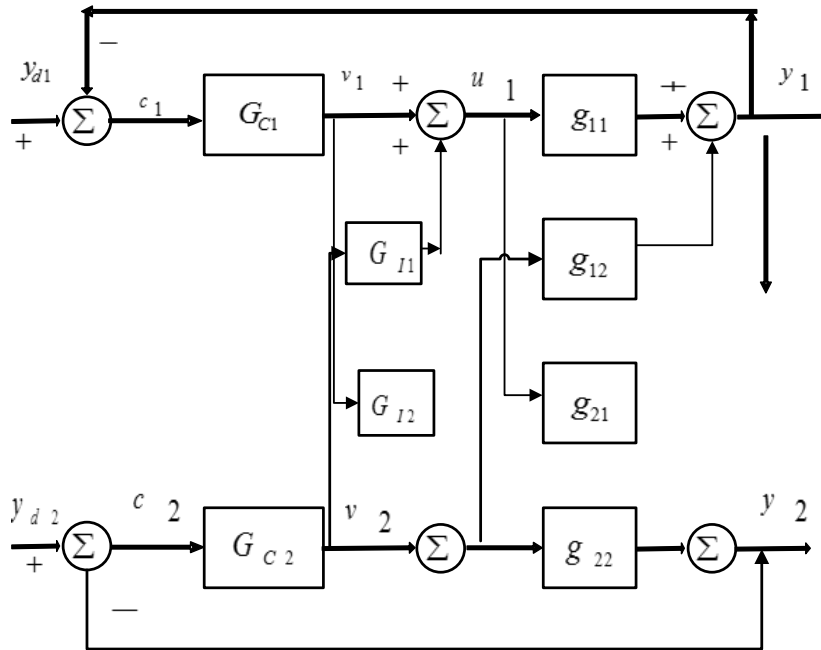
Si cada una de las entradas ( $u_1, u_2$ ) tiene influencia sobre cada una de las variables de salida ( $y_1, y_2$ ), la magnitud de la influencia dependerá de las ganancias de las funciones de transferencia. Si se diseña cada lazo de control independiente, es decir suponiendo los pareamientos  $u_1 \rightarrow y_1$ ,  $u_2 \rightarrow y_2$  se puede representar los lazos mediante el diagrama de bloques mostrado en la Figura 2-8.



**Figura 2-8:** Funciones de transferencia en lazo cerrado en arreglo descentralizado.

Si se tienen en cuenta las interacciones dinámicas entre las entradas y las salidas, el sistema se puede representar mediante el diagrama de bloques de la Figura 2-9, el cual es un diagrama expandido que permite enfatizar los efectos individuales de cada

elemento de  $\mathbf{G}(s)$  sobre cada salida, al mostrar explícitamente los efectos interactivos de  $u_2$  sobre  $y_1$  y de  $u_1$  sobre  $y_2$ . Este tipo de diagrama de bloque es útil para el análisis de la interacción y para diseñar las compensaciones de la interacción (Ogunnaike y Ray, 1994).



**Figura 2-9:** Diagrama de bloques de un sistema con interacciones dinámicas.

Como se mencionó previamente, en estrategias de control multivariable, el principal asunto es el diseño de los lazos de control individuales, los que posteriormente serán conectados de manera que las interacciones entre ellos se minimicen. En esta acción es decisivo establecer los pareamientos entrada – salida aplicando la técnica de control multilazo que más convenga en cada caso, tal como la matriz de ganancias relativas (RGA), el índice Niederlinski, el control desacoplado, la descomposición en valores singulares (SVD) y el número de condición (CN). Esta selección de la estrategia a aplicar debe tener en cuenta las interacciones entre variables, las que pueden generar efectos indeseables, de su elección apropiada para cada sistema depende el éxito del control del proceso asegurando que las variables puedan mantenerse en su punto de ajuste.



Cuando el sistema presenta interacciones la selección del pareamiento no será inmediata. Para comprenderlo consideremos que se presenta la siguiente situación: se requiere analizar el problema de control a lazo cerrado de un sistema de dos entradas y dos salidas representado en la Figura 2-8, con todos los lazos abiertos se realiza una perturbación tipo escalón  $u_1$ , de manera que cambian  $y_1$  y  $y_2$ . Si el sistema es estable se alcanzará una respuesta final en  $y_1$  denotada por  $\Delta y_{1u}$ , con magnitud de ganancia  $k_{11}$  (Calderón, 2009).

Con el lazo 2 cerrado, es decir  $u_2 \rightarrow y_2$ , se realiza el mismo tipo de perturbación. El controlador  $G_{c2}$  tendrá la función de corregir cualquier desviación en  $y_2$  a partir de la manipulación de  $u_2$  como resultado del cambio de escalón efectuado sobre  $u_1$ . Se observa que  $u_1$  tiene un efecto directo y un efecto indirecto sobre  $y_1$  mediante la acción de control  $u_2$ . Por lo tanto, es necesario tener en cuenta que  $y_1$  cambia a través de  $g_{11}$  y  $y_2$  cambia a través de  $g_{21}$ . Al aplicarse control retroalimentado el lazo 2 siente el efecto de la interacción sobre  $y_2$  por lo cual manipula  $u_2$  hasta que  $y_2$  regresa al punto de ajuste. Los cambios efectuados en  $u_2$  afectan a  $y_1$  a través de  $g_{12}$ . Así,  $y_2$  recibe dos efectos: la consecuencia directa de  $u_1$  sobre  $y_1$ , denotada como  $\Delta y_{1u}$  y la consecuencia indirecta que se genera cuando el controlador 2 busca eliminar la perturbación  $u_1$  afectando con esto a  $y_1$ , lo cual se denota como  $\Delta y_{1r}$ . Cuando se alcanza el estado estacionario del proceso, la respuesta en  $y_1$ , denotada por  $\Delta y_1$  será:

$$\Delta y_1 = \Delta y_{1u} + \Delta y_{1r} \quad (17)$$

Una medida adecuada del grado de interacción del proceso es  $\lambda_{ij}$ , donde  $i$  se refiere a la variable de salida del proceso  $y_i$  y  $j$  a la variable manipulada  $u_j$ , relacionando las ganancias de estado estacionario cuando las variables de entrada son constantes al igual que todas las variables del proceso (lazo cerrado):

$$\lambda_{11} = \frac{\Delta y_{1u}}{\Delta y_{1u} + \Delta y_{1r}} \quad (18)$$

La cantidad  $\lambda_{11}$  proporciona una medida del grado de interacción que ocurre cuando  $u_1$  controla a  $y_1$  y cuando  $u_2$  controla a  $y_2$ . Para seleccionar los pareamientos entrada-salida en (Moscoso, 2013) se presentan las siguientes recomendaciones:

$\lambda_{ij} < 0$ : signos diferentes del numerador y el denominador indican pareamientos inestables. Por lo tanto, el sistema estará sujeta a retroalimentación positiva y su control es complicado cuando se establecen otros lazos de control.

$\lambda_{ij} = 0$  las variables de entrada y salida no están relacionadas, se requieren variables de entrada diferentes para controlar la variable del proceso.

$\lambda_{ij} = 1$  es la situación ideal, porque no hay correlación con otros lazos de control y éste lazo se puede diseñar sin considerar los otros.

$0 < \lambda_{ij} < 0.67$  indica que hay fuertes interacciones con los otros lazos de control presentándose retroalimentación negativa, por lo que se requiere aplicar una estrategia que permita desacoplar el sistema.

$0.67 < \lambda_{ij} < 1.5$  indica que las interacciones con otros lazos son relativamente pequeñas permitiendo un rendimiento adecuado para el lazo de control de interés.

$2 < \lambda_{ij} < 10$  indica que las interrelaciones entre los lazos de control anulan el efecto de la variable de entrada sobre la variable controlada, por lo que se recomienda una estrategia de desacople.

## 2.5 Control de procesos multivariables

La operación óptima y segura de los procesos químicos industriales requiere que las variables de operación permanezcan en valores óptimos, en el mismo sentido, actualmente el diseño de dichos procesos tiende a integrar operaciones de reciclaje y consideraciones energéticas, lo cual complica aún más la tarea de control. Es así como surge el concepto PWC (Plant Wide Control) el cual se refiere a la síntesis y diseño de un sistema de control para una planta completa, que considere las interacciones existentes entre las diferentes unidades. PWC implica la selección de las variables controladas, la

selección de las variables manipuladas, la selección de las variables medidas y finalmente la configuración del controlador (Moscoso, 2013).

En algunos sistemas grandes, complejos y en red se acostumbra resolver el problema de control realizando una división en subsistemas y aplicando modelos y técnicas de control locales a los subsistemas, sin embargo, esta configuración no necesariamente permite intercambiar la información adecuada, conduciendo a un comportamiento inesperado. De ahí que hayan surgido diferentes alternativas para la descomposición de proceso. La primera es la descomposición horizontal, en la cual la planta se divide en piezas individuales del equipo, lo que permite esquemas de control cuya efectividad disminuye en la medida en que se eleva la integración de niveles de masa y energía. La segunda alternativa consiste en la descomposición jerárquica, en la cual el proceso es dividido bajo cinco patrones posibles: diferente nivel de abstracción, complejidad, capacidad de toma de decisiones, descomposición funcional del problema y basado en cuestiones temporales (Moscoso, 2013).

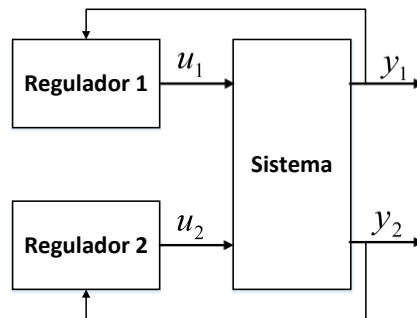
Es así como las estructuras PWC se pueden clasificar de acuerdo con la configuración del sistema de control en control descentralizado, distribuido y control centralizado (Calderón, 2009, Moscoso, 2013), que se describen a continuación.

### **2.5.1 Control Descentralizado**

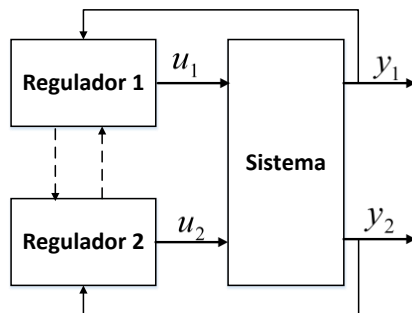
En el control descentralizado las variables manipuladas o acciones de control ( $u$ ) y las variables controladas ( $y$ ) se encuentran agrupadas en diferentes conjuntos y se acoplan los conjuntos para producir pares no superpuestos para los que se diseñan reguladores que operen en forma independiente. Este tipo de control se caracteriza por presentar comunicación restringida, es decir, existen restricciones en la transferencia de información entre cierto tipo de sensores y actuadores. Adicionalmente, si las interacciones tanto dinámicas como estáticas son depreciables el diseño es sencillo, pero si las interacciones son fuertes es posible que no se logre alcanzar la estabilidad o el buen desempeño de la estructura de control descentralizado. En la Figura 2-10 se representa una estructura de control descentralizado sin comunicación entre controladores, en la cual la variable medida  $y_1$  es usada para crear la ley de control  $u_1$  y

la variable  $y_2$  para crear la ley de control  $u_2$ . En contraste, en la Figura 2-11 se representa la misma estructura de control descentralizado presentando alguna transferencia de información restringida entre controladores, estructura que recibe el nombre de descentralización parcial (Calderón, 2009).

En la figura 2-4 se representó el P&ID del reactor de tanque agitado, aplicando control descentralizado. El inconveniente de aplicar este tipo de control es que el problema se limita a proponer el “pareamiento de los lazos de control”, es decir, a elegir qué variable manipulada controlará a qué variable controlada, diseñando cada lazo de control de manera independiente, sin tener en cuenta que las dinámicas hacen que el desempeño de cada lazo afecte a los demás, lo que afecta la sintonía independiente de los lazos, tal como en este ejemplo en el cual es clara la fuerte interacción que se presenta entre las variables nivel, concentración y temperatura.



**Figura 2-10:** Diagrama de Control Descentralizado



**Figura 2-11:** Diagrama de control descentralizado con comunicación restringida.

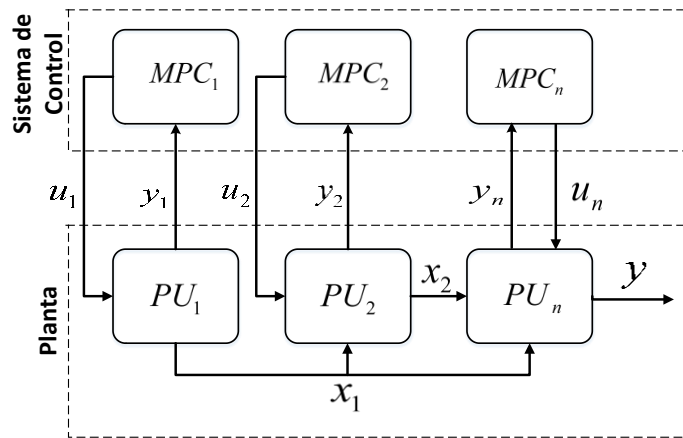
Sin embargo, algunos autores presentan como ventajas de la estructura descentralizada el permitir manejar el proceso como un sistema completo, mejorar la eficiencia y calidad de todo el proceso si sus lazos individuales se sintonizan adecuadamente y reportar y analizar el desempeño del proceso. El control descentralizado responde a que en sistemas a gran escala no es posible ejercer control sobre todas las dinámicas porque existen restricciones sobre la transferencia de información entre cierto grupo de sensores y actuadores. Es así como el control descentralizado está muy relacionado con la retroalimentación (Calderón, 2009).

Downs and Skogestad (2011), citados por Luppi, P.A.; Zumoffen, D.A.R. and Basualdo, M.S. (2013), sostienen que el control descentralizado necesita metodologías para el diseño de control total de planta (PWC) que no utilizan la tecnología de control complejo y que no requieren de la participación de expertos en control, por lo cual aseguran que el enfoque descentralizado sigue siendo predominante en la industria, al ser la más simple de las estructuras de PWC.

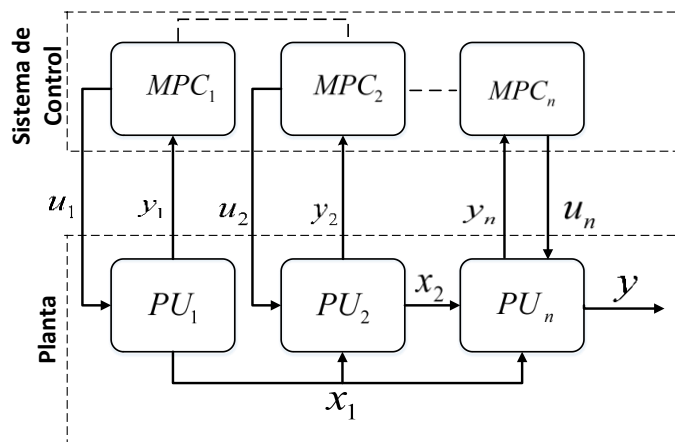
### **2.5.2 Control Distribuido**

El control distribuido se aplica cuando se utilizan controladores predictivos basados en modelo como controladores locales, de manera que mientras alguno de ellos resuelve su propio problema de optimización también está intercambiando información sobre sus predicciones con los demás controladores, a diferencia de las estructuras de control descentralizado. Esto permite a cada controlador conocer la posible ruta que tendrán otras dinámicas que pueden influir directamente sobre acciones correctivas antes de que actúen las perturbaciones (Calderón, 2009).

En el control distribuido, en cada instante de tiempo el controlador debe realizar tres actividades: computar las entradas de control locales, transmitir sus decisiones acerca de las acciones de control local y negociar con otro controlador la acción de control que será aplicada. Según el protocolo de comunicación hay dos formas de control distribuido: el cooperativo y el colaborativo, los cuales se representan en la Figura 2-12 y en la Figura 2-13 (Moscoso, 2013).



**Figura 2-12:** Estructura de Control Distribuido Cooperativo.



**Figura 2-13:** Estructura de Control Distribuido Colaborativo.

Las estructuras cooperativas se basan en que cada controlador MPC optimiza la misma función objetivo pero sin haber comunicación real entre ellos, así, el sistema considera el efecto de las interacciones sobre el proceso completo durante la resolución de cada problema de optimización de los controladores. Con estas estructuras la planta logra un Pareto óptimo para operar como si contara con una estructura centralizada, pero requieren un tiempo muy alto para alcanzar la convergencia. En cuanto a las estructuras colaborativas o coordinadas, cada controlador  $MPC_i$  para cada variable controlada o unidad de proceso  $PU_i$  tiene una función objetivo local con comunicación entre unidades a través de un modelo interno al modelo de cada controlador. Sin embargo, se puede generar un comportamiento de lazo cerrado inestable porque estos sistemas pueden converger hacia un punto de equilibrio no deseado, aunque se han aplicado

satisfactoriamente en sistemas eléctricos y en algunos sistemas químicos (Moscoso, 2013).

### 2.5.3 Control Centralizado

La estructura de control centralizado pretende resolver el problema de las interacciones dinámicas, mediante la influencia de todas las variables medidas en el cálculo de todas las acciones de control, es decir que el efecto de cualquier perturbación puede contrarrestarse con una o varias acciones de control, para lo cual generalmente se aplica Control Predictivo Basado en Modelo (CPBM), de manera que se proporcione un funcionamiento óptimo de la estructura de control a partir de un gran conjunto de acciones de control posibles. Su estructura se representa en la Figura 2-14.

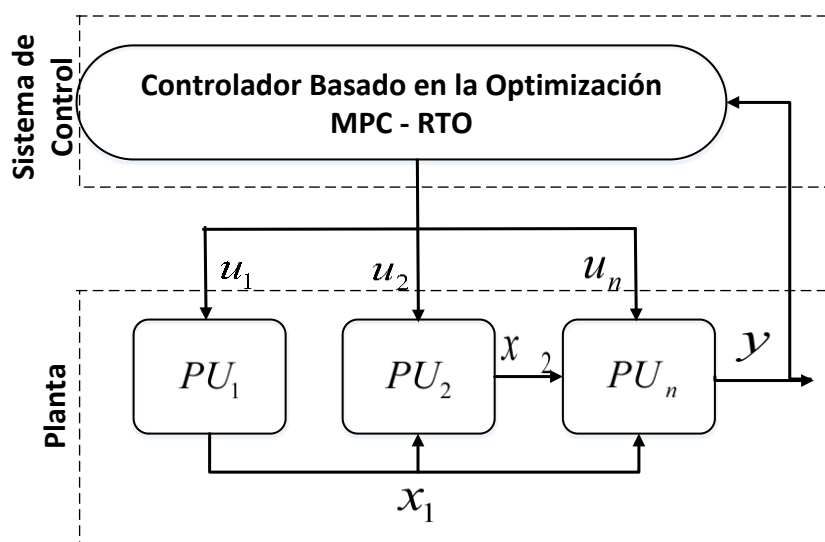
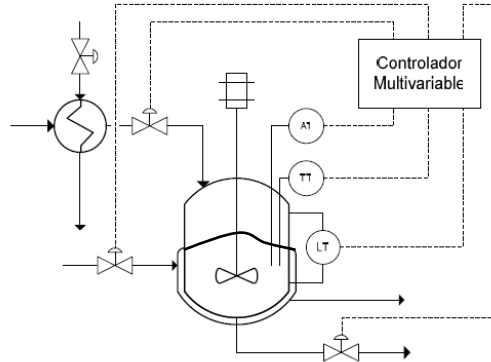


Figura 2-14: Estructura de Control Centralizado.

En la Figura 2-15 se ilustra una estructura de control centralizado aplicada al ejemplo del reactor de tanque agitado representado en la Figura 2-4. Con el control centralizado se hace uso de un único controlador para accionar simultáneamente todas las variables manipuladas cuando una o varias de las variables controladas se alejan de su respectivo punto de ajuste. De este modo se logra compensar el efecto de las interacciones. El grado de compensación depende del diseño del control.



**Figura 2-15:** P&ID del reactor de tanque agitado con un esquema de control centralizado.

La principal desventaja de una estructura de control centralizado es su vulnerabilidad ya que depende totalmente de un sistema computarizado central, factor que tiene asociada una segunda desventaja que consiste en su alto costo computacional.

## 2.6 Importancia de un PdeR para simular Control de Procesos Multivariables

Los sistemas multivariable con frecuencia se simplifican y se abordan como el agregado de varios sistemas de una sola variable, sin tener en cuenta la relación entre las variables, definida como interacción dinámica, lo que constituye el principal inconveniente al momento de diseñar un controlador para sistemas MIMO (Calderón, 2012). De ahí la importancia de contar con un PdeR que permita simular el funcionamiento de Controles Multivariables antes de implementarlos, ya que evaluar su pertinencia directamente en el proceso real no es rentable, resulta demasiado costoso y poco práctico. Contar con un Problema de Referencia (PdeR o *Benchmark*) que permita simular una planta real que requiere control multivariable, es de vital importancia para el desarrollo de estrategias de control multivariable cada vez más ajustadas a las condiciones de los procesos reales. Aunque se han hecho intentos de plantear un PdeR para control multivariable, hasta la fecha ninguno de los encontrados cumple con las características aceptadas como mínimas para que un modelo de proceso sea considerado un PdeR.



### 3 Propuesta de un Problema de Referencia para Control Multivariable

Para probar las estrategias de control planteadas es necesario contar con un problema de referencia o benchmark que consiste en un modelo propuesto por el investigador para simplificar el análisis y diseño de una situación en particular.

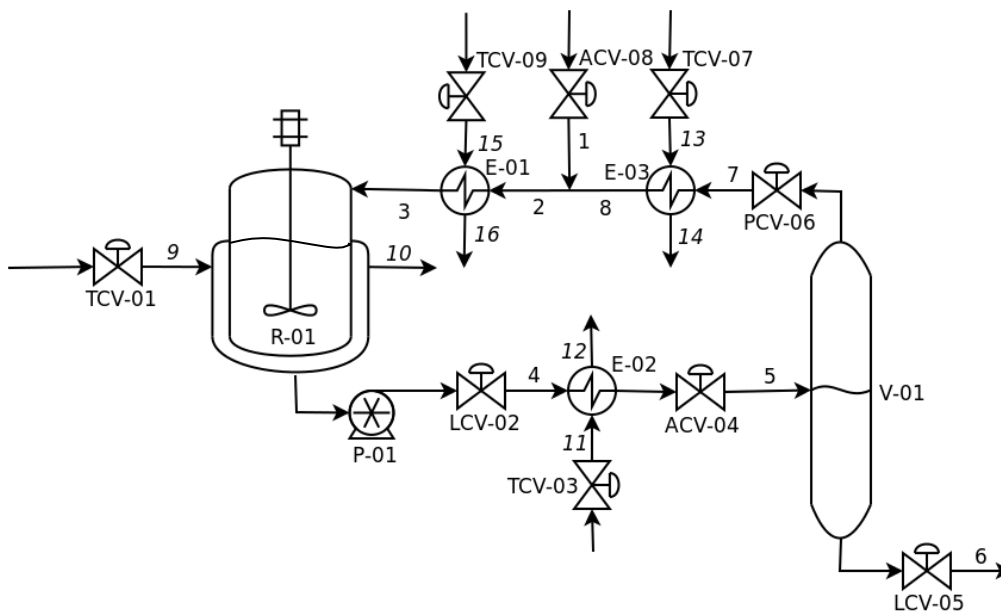
Downs y Vogel (1993), con base en la Planta Tennessee Eatsman, propusieron un sistema como Problema de Referencia (PdeR) para control de planta completa (*plantwide control problem*), conformado por un tanque reactor agitado acoplado a una torre de destilación y a un reciclo. Liang (1996) también planteó un modelo similar y lo propuso como PdeR para estudiar la causa del efecto “bola de nieve” en un sistema reactor/separador/reciclo y para proponer una estructura de control y un procedimiento sistemático de sintonía de controlador. Sin embargo, los modelos propuestos por los autores mencionados distan de ser PdeR, al no cumplir los requisitos (i) y (iv) mencionados en el capítulo 1, que debe considerar un sistema para constituirse como un *benchmark*, debido a su formulación matemática densa y compleja y la dificultad de escalarlos a nivel de laboratorio (Prett and Morari, 1987 y Bupp, Bernstein and Coppola, 1985).

Para solucionar el inconveniente a estos dos requisitos, Calderón, J. C. (2012), y Moscoso (2013) proponen un PdeR para un sistema reactor/separador/reciclo constituido por un reactor de tanque agitado acoplado a un tanque flash. Sin embargo, consideran que la masa reactiva dentro del reactor es un parámetro constante, que el reactor tiene nivel constante y no consideran los cambios de presión, lo que restringe demasiado el problema de referencia, llevándolo a situaciones muy particulares. Así, el problema propuesto por estos autores no cumple la característica (iii) pedida a un PdeR, al no ser preciso y claro puesto que la explicación de la planta no resulta clara para un usuario con conocimientos básicos, pues la planta misma es inherentemente compleja. Tampoco cumple el ítem (ii) al no reproducir características de una misma situación industrial, ya que su objetivo se limitó a optimizar el diseño alrededor de un determinado punto de operación. La presente propuesta retoma el trabajo de estos dos autores sin restringir el

problema a un punto de operación, es decir, teniendo en cuenta las variaciones de la masa reactiva en el reactor, el nivel en el reactor y los cambios de presión. Además, adiciona los elementos necesarios para hacer de dicho proceso un Problema de Referencia (PdeR) para control multivariable.

### 3.1 Descripción del problema

El presente Problema de Referencia, esquematizado en la Figura 3-1, se basa en la hidrólisis de óxido de propileno con el fin de obtener propilenglicol (PG). Al reactor RO1 ingresa la corriente 3 con 1,42906 kmol/h de óxido de propileno (OP) y agua en exceso en una relación volumétrica de 2,5:1,0 de acuerdo con las recomendaciones de Fogler (2008), lo que corresponde a 35,05438 kmol/h. Cuando se alcanza el estado estable recirculan 0,0347 kmol/h de propilenglicol, corriente que ingresa a 34°C y 1,0 atm de presión, condiciones a las cuales ocurre la reacción, la cual es catalizada con ácido sulfúrico, que de acuerdo con Fogler (2008), corresponde al 10% w/w con relación al agua, es decir, 0,644 kmol/h.



**Figura 3-1:** Vista planta de hidrólisis de óxido de propileno para obtención de propilenglicol.

Dentro del reactor se alcanza una conversión del 85%, es decir que a la salida del mismo se tiene una corriente con 0,21436 kmol/h de OP, 33,84 kmol/h de agua, 1,2147 kmol/h de PG y 0,644 kmol/h de ácido sulfúrico. Una bomba P-01 eleva la presión de la mezcla de 1,0 atm a 2,0 atm. El flujo de salida del reactor es regulado por la válvula LCV-02 y direccionado hacia un intercambiador de tubos y coraza E-02 en el cual la mezcla alcanza una temperatura de 107°C. La presión de la mezcla baja hasta 1,3 atm, en una válvula de alivio ACV-04 con el fin de permitir la separación de los componentes en un tanque *flash* V-01. La presión de operación del *flash* se regula mediante una válvula PCV-06.

La corriente líquida 6 de salida del tanque *flash* contiene 0,033 kmol/h de OP, 16,92 kmol/h de agua, 1,18 kmol/h de PG y la totalidad del ácido sulfúrico que ingresó al reactor. El flujo se regula con una válvula LCV-05 que permite mantener controlado el nivel de líquido en el *flash*. La corriente 7 en fase de vapor que sale del flash contiene 0,1816 kmol/h de OP, 16,92 kmol/h de agua y 0,0347 kmol/h de PG y se dirige a un condensador de tubos y coraza E-03 que reduce la temperatura de 107°C a 34°C. Esa reducción de temperatura causa la condensación total de la corriente. Este flujo de líquido se une con la corriente 1 de la alimentación en la cual se suministran 1,24746 kmol/h de OP, 18,13438 kmol/h de agua y 0,644 kmol/h de ácido sulfúrico. Un intercambiador de calor de tubos y coraza E-01 asegura que los productos, antes de ingresar al reactor, se encuentren a 34°C. Una chaqueta asegura que la mezcla del reactor conserve la temperatura de operación de la reacción química.

### 3.1.1 Descripción de materias primas y productos del proceso

*Óxido de propileno.* El óxido de 1,2-propileno (OP), es un líquido incoloro, muy volátil a temperatura ambiente y presión atmosférica normal. En estado líquido es muy inflamable y con vapor de agua forma una mezcla explosiva en presencia de aire. Algunas de sus propiedades se presentan en la Tabla 3-1 **Propiedades del óxido de propileno (OP)**..

**Tabla 3-1** Propiedades del óxido de propileno (OP).

Propiedad	Valor
Masa Molar	58.08 g/mol
Punto de ebullición (101.3 kPa)	34.2°C
Temperatura Crítica	209.1°C
Presión Crítica	4920 kPa
Solubilidad del Óxido de Propileno en agua a 20°C	40.5% peso
Solubilidad de agua en Óxido de Propileno a 20°C	12.8% peso
Densidad (20°C)	0.83 g/cm <sup>3</sup>

**Propilenglicol.** Los glicoles son compuestos que se caracterizan por tener dos grupos hidroxilos separados, lo que les permite una alta solubilidad en agua, alta higroscopía y gran reactividad frente a compuestos orgánicos. El propilenglicol, es un líquido claro, viscoso, de baja presión de vapor, ligero aroma y suave sabor. Se utiliza en el sector textil, en la producción de tintas, como aditivo en alimentos y en productos farmacéuticos por no ser tóxico. También se utiliza en la producción de polímeros y de resinas anticongelantes. El propilenglicol se obtiene a partir de la hidrólisis de óxido de propileno (producto derivado de la refinación del petróleo) generalmente a alta temperatura y presión (2170Kpa, 120-190°C), con un exceso de agua, a través de un medio no catalítico. Sin embargo, cuando se realiza en presencia de ácido sulfúrico como catalizador se puede realizar a baja temperatura y presión. Para obtener una mezcla de mono-di y tripropilenglicol se utiliza un exceso de agua, el cual se retira, una vez finaliza la reacción, mediante torres de secado. Los glicoles se purifican mediante destilación al vacío. Sus propiedades se presentan en la Tabla 3-2.

**Tabla 3-2** Propiedades del propilenglicol

Propiedad	Valor
Masa Molar	76,10 g/mol
Punto de ebullición (101.3 kPa)	187.4°C
Temperatura Crítica	351.5 °C
Presión Crítica	6080 kPa
Gravedad específica 20/20 °C en agua	1.038
25/4 °C en agua	1.033
60/4 °C en agua	1.007
Viscosidad 25°C	48.6 cp
60 °C	8.42 cp
Calor específico (25°C)	0.60 Btu/lb/°F

### 3.2 Diseño de Reactor

El reactor CSTR (*continuous stirred Tank reactor*) o reactor continuo ideal de tanque con agitación, es aquel en el cual su contenido está perfectamente agitado y su composición es la misma en todos los puntos del reactor, por lo tanto, la corriente de salida del reactor tiene igual composición que el fluido contenido en el mismo. Así, al flujo se le denomina *flujo en mezcla completa* y al reactor también se le conoce como *de flujo de mezcla completa* (Levenspiel, 1987).

Considerando un reactor CSTR en estado estacionario, como el fluido está perfectamente agitado, la composición es uniforme en cada instante, y el balance de masa puede aplicarse refiriéndolo a todo el reactor.

$$\text{entrada} = \text{salida} + \text{desaparición} - \text{acumulación} \quad (19)$$

Considerando que no hay acumulación, la ecuación 19 se reduce a:

*entrada = salida + desaparición (20)*

Tomando el caudal molar del óxido de propileno (componente A) en la alimentación:

$F_{A0} = v_0 C_{A0}$ , las moles de entrada del mismo  $F_{A0}$ , las moles de salida de A  $F_A = F_{A0}(1 - X_A)$  La desaparición del componente A por reacción ( $\gamma_A V$ ) será igual a:

$$F_{A0} = F_A + \gamma_A V \quad (21) \text{ que se reduce a:}$$

$$F_{A0} X_A = \gamma_A V \quad (22), \text{ de donde:}$$

$$V = \frac{F_{A0} X_A}{\gamma_A} \quad (23)$$

En términos de la nomenclatura presentada en la Figura 3-1, considerando que el flujo molar de OP que ingresa al reactor es  $F_{A3}$  y el flujo molar de OP que sale del reactor es  $F_{A4}$  se tiene:

$$F_{A3} - F_{A4} - \gamma_A V = 0 \quad (24), \text{ de donde se establece la ecuación de diseño (expresión 25):}$$

$$V = \frac{F_{A3} - F_{A4}}{\gamma_A} \quad (25)$$

Considerando que la conversión del componente A es igual a:

$$X_A = \frac{F_{A3} - F_{A4}}{F_{A3}} \quad (26)$$

y que a partir de la estequiometría:

$$C_{A4} = C_{A3}(1 - X_A) \quad (27)$$

la ecuación 25 puede expresarse en términos de concentraciones así:

$$V = \frac{X_A F_{A3}}{\gamma_A} \quad (28)$$

Si se considera que la ley de velocidad de la reacción es de primer orden respecto a la concentración de OP (que denotaremos con A) y de orden cero respecto a la concentración de agua y usando una expresión tipo Arrhenius se tiene:

$$-\gamma_A = k C_A = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) C_{A,0} (1 - X_A) \quad (29)$$

Reemplazando 29 en 28 y considerando que la nomenclatura presentada en la Figura 3.1, la ecuación de diseño 29 se convierte en:

$$V = \frac{F_{A3} X_A}{k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) C_{A,3} (1 - X_A)} \quad (30)$$

Según Fogler (2008), el tiempo de residencia es  $\tau = \frac{V}{v_0}$ , es decir,

$$\tau = \frac{F_{A3} X_A}{v_0 (-r_A)} \quad (31)$$

y considerando que  $C_{A3} = \frac{F_{A3}}{v_0}$ , dicho tiempo de residencia puede expresarse así:

$$\tau = \frac{C_{A3} X_A}{k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) C_{A,3} (1-X_A)} \quad (32)$$

Cuando se buscan las condiciones óptimas para el diseño de un reactor se debe tener en cuenta que el tamaño y tipo de reactor, al igual que la temperatura y presión de reacción, son decisivos en la conversión y distribución de productos que se obtiene. También se debe tener en cuenta que los efectos caloríficos que acompañan las reacciones químicas afectan la temperatura de la mezcla reaccionante (Levenspiel, 1987).

En reacciones simples como la hidrólisis de OP interesa conocer el grado de conversión y la estabilidad del reactor, mas no constituye un problema la distribución del producto. Siendo la hidrólisis del OP una reacción exotérmica, el calor que se desprende durante el desarrollo de la misma depende de la naturaleza del sistema reaccionante (OP y agua), de la cantidad de sustancia que reacciona y de la temperatura y presión del sistema, determinándose a partir del calor de reacción  $\Delta H_r$ . Dada una reacción  $aA \rightarrow rR + sS$  el calor de reacción a una temperatura T se define como el calor suministrado al sistema reaccionante cuando a moles de A desaparecen para formar r moles de R y s moles de S, siendo  $\Delta H_r$  positivo si la reacción es endotérmica o  $\Delta H_r$  negativo si la reacción es exotérmica (Levenspiel, 1987).

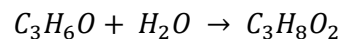
El tamaño del reactor necesario para cierta reacción y progresión de temperatura determinada se calcula de la manera siguiente (Levenspiel, 1987):

Se determina la trayectoria de la reacción, llamada *línea de operación*, en una gráfica de  $X_A$  (conversión del reactivo A) frente a la temperatura (T).

Para reactores de mezcla perfecta la línea de operación se reduce a un punto. Se calcula la velocidad de reacción para diferentes valores de  $X_A$  a lo largo de esta trayectoria. Se representa la curva de  $1/(-r_A)$  frente a  $X_A$  para este camino. Se calcula el área bajo esta curva que equivale a  $V/F_{A0}$ .

Siendo la hidrólisis de OP exotérmica, al momento de diseñar es necesario plantear tanto las expresiones del balance de materia como las de energía, considerando que si durante el progreso de la reacción no es posible disipar todo el calor liberado, la temperatura del fluido reaccionante se elevará a medida que aumenta la conversión. Dicho balance de energía se presenta más adelante, en la ecuación (43).

En la presente reacción se considera que en el CSTR ocurre la hidrólisis de óxido de propileno (OP), para obtener propilenglicol (PG), reacción que es exotérmica. Se asumirá que se cataliza con ácido sulfúrico en solución acuosa, lo que permite que se realice a bajas temperaturas, para ello es necesario que el agua se encuentre en exceso. Se asumirá que la reacción química es irreversible:



Furusawa (1969), citado por Fogler (2008), recomienda una relación volumétrica mínima de 2,5:1,0 entre el agua y el OP, lo que permite considerar la reacción de primer orden respecto a la concentración de óxido, y de orden cero respecto al agua en exceso. El diseño de reactor se realizó aplicando la ecuación 30 y los parámetros cinéticos y de diseño presentados en la Tabla 3-3, los cuales se basan en Fogler (2008) y en Bequette (2002), para una concentración inicial de OP correspondiente a  $2068 \text{ kmol/m}^3$  y un flujo del mismo de  $1,42906 \text{ kmol/h}$ , lo cual se aproxima a las recomendaciones de Bequette (2002), obteniéndose un reactor de  $0,98 \text{ m}$  de diámetro y  $2,94 \text{ m}$  de altura total y una altura del líquido de  $1,96 \text{ m}$ , con un volumen de  $1,48 \text{ m}^3$ .

Es necesario tener en cuenta que el OP es una sustancia con un punto de ebullición muy bajo. Al respecto, Fogler (2008), recomienda para este proceso no exceder una temperatura de operación de  $125^\circ\text{F}$  ( $51.7^\circ\text{C}$ ) para evitar la pérdida excesiva de óxido de



propileno por vaporización a través del sistema de ventilación. Por lo tanto la reacción se llevará a cabo a 34,2°C, de manera que no se requiera calentar hasta una temperatura muy alta el OP, con el fin de minimizar las cargas calóricas para el fluido térmico y la pérdida de reactivo. Es importante tener en cuenta que aunque la temperatura de ebullición del OP puro, a 101,3 kPa es 34,2°C, se diseña el reactor para que la reacción ocurra a 34°C considerando que se trata de una mezcla, lo que asegura que el OP en el agua se encuentre en fase líquida, además lo esperado es que el reactor se encuentre a una presión ligeramente superior a 1 atm.

**Tabla 3-3** Parámetros cinéticos y de diseño del reactor.

Símbolo	Descripción	Valor	Unidades
$E_a$	Energía de activación de la reacción	75361,14	$J/mol$
$K_o$	Factor de frecuencia de la ley de Arrhenius	$2,827 \cdot 10^{11}$	$1/min$
$R$	Constante de los gases	8,3174	$m^3 Pa/mol K$
$q_{a0}$	Flujo volumétrico inicial de OP	0,1	$m^3/min$
$F_{a0}$	Flujo molar de OP que ingresa al reactor	1,42906	$kmol/h$
$F_{b0}$	Flujo másico de agua que ingresa al reactor	35,05438	$kmol/h$
$F_{d0}$	Flujo másico de ácido sulfúrico	0,644	$Kmol/h$
$C_{A0}$	Concentración de reactivo en el alimento fresco	2068	$mol/m^3$
$T_3$	Temperatura alimento a la entrada al reactor	34,2	$^{\circ}C$
$X_A$	Conversión de OP	0,85	<i>Adimensional</i>
$D_R$	Diámetro del reactor	0,98	$m$
$H_R$	Altura del reactor	2,94	$m$
$L_R$	Altura del líquido en el reactor	1,96	$m$
$V_R$	Volumen del reactor	1,5	$m^3$
$-\Delta H_{pO}$	Calor de reacción (por mol de OP)	84.648,6	$J/mol-OP$
$U$	Coefficiente global transferencia de calor	$2,56 \cdot 10^4$	$J/min.m^2K$

*Selección del material de construcción del reactor.* Para seleccionar el material de construcción del reactor se consideró su compatibilidad química con los componentes de la mezcla, teniendo presente la concentración y la temperatura de cada uno de ellos. Con base en la tabla Detailed Corrosion Data on Construction Material PROPERTIES OF MATERIALS (Perry, 1963), se observa que el material compatible con todos los componentes de la mezcla es el **Acero Inoxidable 316**, por tanto, se escoge este material.

En el anexo A se presenta el Diseño del sistema de agitación para el reactor y en el anexo B el diseño de la chaqueta.

Para el modelamiento del reactor, adoptando la siguiente notación para los componentes: A (óxido de propileno), B (agua), C (Propilenglicol), y el esquema de la planta presentado en la Figura 3-1, se plantean los siguientes balances. Considerando que 1 es la corriente que alimenta al sistema desde el exterior, 8 la corriente proveniente del reciclo del tanque *flash* y que estas dos corrientes se unen para formar la corriente 2, la cual es precalentada en el intercambiador de calor E-01 antes de ingresar al reactor, se tiene el siguiente balance de masa general y los siguientes balances de masa por componentes:

$$F_2 = \frac{\rho_1 F_1 + \rho_8 F_8}{\rho_2} \quad (34)$$

$$\dot{m}_2 * \dot{w}_{A,2} = \dot{m}_1 * w_{A,1} + \dot{m}_8 * w_{A,8} \quad (35)$$

$$\dot{m}_2 * \dot{w}_{B,2} = \dot{m}_1 * w_{B,1} + \dot{m}_8 * w_{B,8} \quad (36)$$

$$\dot{m}_2 * \dot{w}_{C,2} = \dot{m}_1 * w_{C,1} + \dot{m}_8 * w_{C,8} \quad (37)$$

$$T_2 = \frac{\dot{m}_1 C_{p1} (T_1 - T_{ref})}{\dot{m}_2 C_{p2}} + \frac{\dot{m}_8 C_{p8} (T_8 - T_{ref})}{\dot{m}_2 C_{p2}} + T_{ref} \quad (38)$$

Ahora, siendo 3 la corriente que ingresa al reactor, 4 la corriente que sale del mismo,  $\rho_3$ ,  $F_3$ ,  $\dot{m}_3$  y  $C_{A,3}$  la densidad (g/ml), el flujo volumétrico (l), el flujo másico (kg/s) de la mezcla y la concentración de OP en la corriente 3 y en forma análoga  $\rho_4$ ,  $F_4$ ,  $\dot{m}_4$  y  $C_{A,4}$  para la corriente 4, A el área transversal del reactor (m<sup>2</sup>) y h el nivel del líquido en el reactor, se tiene el siguiente balance general para el mismo y los siguientes balances por componentes:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4}{\rho_4 A} \quad (39)$$

$$\frac{dC_{A,4}}{dt} = \frac{(F_3 C_{A,3} - F_4 C_{A,4})}{Ah} - k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) C_{A,4}}{\rho_4 Ah} \quad (40)$$

$$\frac{dC_{B,4}}{dt} = \frac{(F_3 C_{B,3} - F_4 C_{B,4})}{Ah} - k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) C_{B,4}}{\rho_4 Ah} \quad (41)$$

$$\frac{dC_{C,4}}{dt} = \frac{(F_3 C_{C,3} - F_4 C_{C,4})}{Ah} + k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) C_{C,4}}{\rho_4 Ah} \quad (42)$$

Considerando que  $T_4$  y  $C_{p4}$  son la temperatura (°C) y la capacidad calorífica de la corriente que sale del reactor (J/mol\*°K),  $T_3$  y  $C_{p3}$  la temperatura (°C) y la capacidad calorífica (J/mol\*K) de la corriente que ingresa al reactor,  $T_{ref}$  una temperatura cualquiera de referencia (°C),  $U_j$ ,  $A_j$  y  $V_j$  el coeficiente global de transferencia de calor de la chaqueta (J/min\*m<sup>2</sup>\*°K), el área de transferencia de calor de la chaqueta (m<sup>2</sup>) y el volumen de la chaqueta (m<sup>3</sup>),  $T_9$  y  $T_{10}$  las temperaturas de ingreso y de salida del fluido térmico en la chaqueta (°C), correspondientemente, se tienen los siguiente balances de energía, tanto para el reactor, como para la chaqueta:

$$\frac{dT_4}{dt} = \frac{\rho_3 F_3 C_{p3} (T_3 - T_{ref})}{\rho_4 Ah C_{p4}} - \frac{\rho_4 F_4 C_{p4} (T_4 - T_{ref})}{\rho_4 Ah C_{p4}} + \frac{k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} \Delta H_r}{\rho_4 C_{p4}} - \frac{Q_{chaq}}{\rho_4 Ah C_{p4}} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) T_4}{Ah} \quad (43)$$

$$\frac{dT_{10}}{dt} = \frac{\rho_9 F_9 C_{p9} (T_9 - T_{ref})}{\rho_{10} V_j C_{p10}} - \frac{\rho_{10} F_{10} C_{p10} (T_{10} - T_{ref})}{\rho_{10} V_j C_{p10}} + \frac{\dot{Q}}{\rho_{10} V_j C_{p10}} \quad (44)$$

De este modo queda completo el diseño del reactor y su modelo, que luego será utilizado dentro del Problema de Referencia planteado en esta tesis.

### 3.3 Diseño del Separador *Flash* Adiabático

Los evaporadores flash son parte integral de diversos procesos industriales, por ejemplo en la fabricación de papel, productos farmacéuticos, desalinización y procesamiento de productos lácteos y alimenticios (Gautami and Khanam, 2012). El proceso de separación más sencillo está dado por aquel en el cual las dos fases en contacto alcanzan el equilibrio físico, seguido por la fase de separación. Para que ocurra una separación en un tanque flash es necesario someter una corriente de un líquido saturado a una reducción en la presión y luego pasarlo a través de una válvula de estrangulación u otro dispositivo de estrangulamiento que se encuentre a la entrada de un recipiente sometido a presión, de manera que la evaporación flash ocurra al interior del recipiente. La separación flash recibe este nombre porque la vaporización es extremadamente rápida. Si el líquido saturado es un líquido multicomponente, el vapor obtenido será más rico en el componente más volátil. Ya que en el tanque flash el líquido y el vapor están en contacto, el sistema estará muy próximo a una etapa de equilibrio. El vapor se retira por la parte superior de la cámara mientras el líquido se drena por la parte inferior. Para evitar que gotas de líquido sean arrastradas en el vapor se utiliza un antivaho o eliminador de arrastre (Wankat, 2011).

#### 3.3.1 Procedimiento de diseño del Tanque Flash

Para diseñar el tanque flash es necesario encontrar las condiciones de operación, es decir temperatura y presión, a las cuales ocurre la separación, para lo cual se aplica el algoritmo de Rachford & Rice (Seader, 2006) que se esquematiza en la Figura 3-2, en la cual  $T_{LV}$  representa la temperatura del líquido y del vapor,  $P_{LV}$  la presión del líquido y del vapor,  $\psi$  el factor de separación,  $V$  el flujo del alimento,  $z_i$  la composición en el alimento del componente  $i$ ,  $K_i$  la constante de reparto del componente  $i$ ,  $x_i$  la composición del componente  $i$  en el líquido,  $y_i$  la composición del componente  $i$  en el vapor,  $Q$  es el calor involucrado en el sistema y finalmente  $\hat{H}_{VLF}$  la entalpía del vapor y del líquido en el alimento.

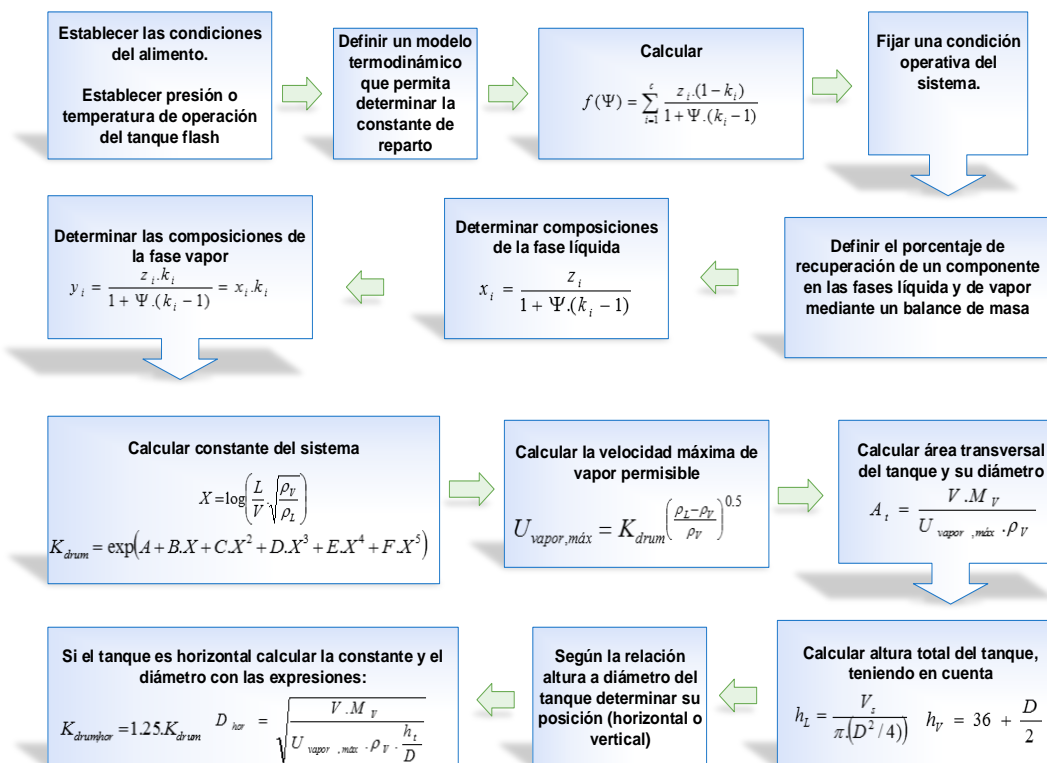


Figura 3-2: Procedimiento de diseño del tanque flash.

### 3.3.2 Aplicación del procedimiento de diseño del Tanque *Flash*

Para desarrollar el algoritmo de Rachford & Rice, máximo se pueden desconocer dos de las tres siguientes condiciones: la temperatura, presión y factor de separación. En este caso las tres son incógnitas, pero se puede especificar una presión de operación de 1,3 atm, indicando que la válvula de choque disminuye la presión hasta este valor, además se garantiza que el vapor abandone el tanque para mantener la presión constante. Con esto, se hace necesario encontrar una de dos: la temperatura o el factor de separación al cual opera el tanque flash. El factor de separación se define como la relación entre el flujo de vapor y el flujo del alimento, es decir, de lo que se alimentó, qué tanto se convirtió en vapor. Como se supone que la mezcla dentro del tanque está en equilibrio mecánico y termodinámico, se debe definir un modelo termodinámico que determine la constante de reparto  $K_i$ . Para esto se propone usar la relación de Wilson aplicable puesto que se está operando a baja presión (Ahmed, 2007). Dicha relación es función de la presión y temperatura crítica del componente ( $P_{ci}$  y  $T_{ci}$ ), su factor acéntrico ( $w_i$ ), y la temperatura y presión de operación ( $P$  y  $T$ ) del proceso, como se muestra a continuación.

$$K_i = \frac{P_{ci}}{P} \exp \left[ 5.37(1 + w_i) \left( 1 - \frac{T_{ci}}{T} \right) \right] \quad (45)$$

*Establecer condiciones del alimento y una de las condiciones de operación del tanque flash.* Para diseñar un tanque flash con su respectiva válvula de choque, es necesario conocer la presión y temperatura tanto del producto que ingresa como al interior del tanque flash y determinar las composiciones de los flujos de líquido y vapor. La presión del alimento debe ser tal que este se encuentre por debajo del punto de ebullición y permanezca líquido mientras que la presión en el tanque flash sea tal que el líquido se encuentre por encima de su punto de ebullición y vaporice. Como la energía de vaporización proviene del alimento, si el alimento está lo suficientemente caliente y/o la presión de tanque flash es muy baja, no se requieren ni bomba ni calentador antes del tanque; en todo caso, la presión del tanque debe estar por debajo de la presión crítica de la mezcla (Wankat, 2011).

En el presente Problema de Referencia (PdeR) se ingresa al tanque flash una corriente 3 compuesta por 0,21436 kmol/h de OP, 33,83968 kmol/h de agua, 1,2147 kmol/h de PG y 0,644 kmol/h de ácido sulfúrico. La corriente se encuentra en estado líquido a 107°C y 2,0 atm y al pasar por la válvula de choque su presión se disminuye hasta 1,3 atm para provocar el cambio de fase parcial de la mezcla en el tanque flash y para asegurar que la fase de vapor abandone el tanque.

*Establecer las condiciones restantes de operación del tanque flash.* Se aplica la cuarta ecuación de la Figura 3-3, la cual es función del factor de separación y de la constante de reparto, la que a su vez es función de la temperatura y la presión. Como se conoce la presión, la función general del algoritmo se puede expresar en términos del coeficiente de reparto y de la temperatura de operación. Para encontrar estos dos valores se fija una condición operativa del sistema y se define la recuperación ( $\psi$ ) de uno de los componentes de la mezcla en el vapor y en el líquido mediante un balance de masa. Así se tiene:

$$\psi = \frac{\% \text{ Recuperación en el vapor}}{\% \text{ Recuperación en el líquido} * K_i + \% \text{ Recuperación en el vapor}} \quad (46)$$

La ecuación 46, al igual que la tercera ecuación de la Figura 3-3, relacionan el factor de separación con la constante de reparto, de manera que la constante queda únicamente en función de la temperatura, lo que permite establecer un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas: la temperatura de operación del tanque flash y el factor de separación. Considerando que resulta muy difícil vaporizar el ácido sulfúrico, se asume que todo este componente se evacúa en la fase líquida del tanque flash, por lo cual no se incluye en los cálculos.

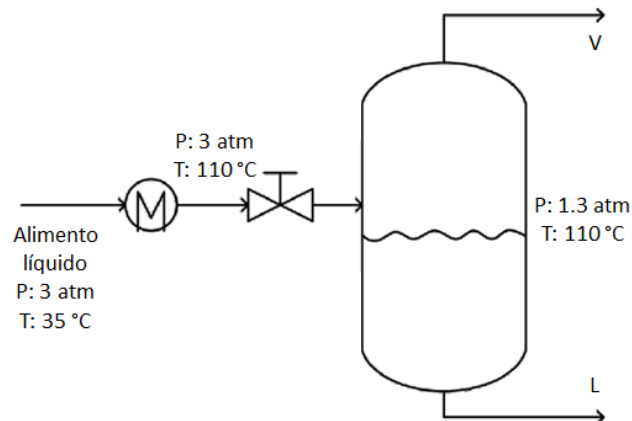
Estableciendo el porcentaje de recuperación de agua en la fase líquida en un 50% y considerando que la presión de operación del tanque es de 1,3 atm, se encuentra que la temperatura de operación del tanque flash es 107°C y que el factor de separación es  $\psi=0,49$ , es decir que el flujo de la corriente corresponde a 18,13 kmol/h y el flujo del vapor a 17,14 kmol/h. De esta manera las fracciones molares en el líquido, sin tener en cuenta el ácido sulfúrico, son  $x_{n-OP}=0,0018$ ,  $x_{n-H_2O}=0.9331$ ,  $x_{n-PG}=0.0651$  y las fracciones molares en el vapor son  $y_{n-OP}=0,0106$ ,  $y_{n-H_2O}=0.9874$ ,  $y_{n-PG}=0.0020$ . Se asume que todo el ácido sulfúrico es arrastrado en la corriente líquida del tanque flash, ya que es muy difícil de vaporizar.

*Calcular la velocidad máxima de vapor permisible.* Para diseñar el tanque se aplicó el procedimiento presentado en Branan (2005) y en Wankat (2012), el cual inicia con el cálculo de la velocidad máxima de vapor permisible, la cual es función de la constante  $K_{drum}$ , la que a su vez depende de los coeficientes A, B, C, D, E y F cuyos valores son -1,942936, -0,814494, -0,179390, -0,0123790, 0,000386235 y 0,000259550 respectivamente. Siguiendo el procedimiento, se obtiene una velocidad máxima de vapor permisible igual a 4,61 m/s, sin embargo, como criterio de diseño se toma el 85% de este valor, con el fin de asegurar un tanque flexible a cambios en la operación, es decir, 3,92 m/s

*Calcular las dimensiones del tanque.* Se encuentra un área transversal para el tanque cilíndrico de  $0,0307m^2$ , es decir que el diámetro del tanque es 0,198m, sin embargo Wankat (2012), sugiere adicionar 6 pulgadas al diámetro, es decir que su dimensión será 0,35m. Es necesario tener en cuenta que las expresiones para determinar la altura del

tanque que contiene vapor y la altura de la piscina, presentadas en la Figura 3-2, permiten obtener valores en pulgadas. La altura de la piscina del líquido se determina a partir de un volumen de líquido definido por el diseñador, el cual se establece en  $0,03 \text{ m}^3$ , obteniéndose así un valor para dicha altura de  $0,31 \text{ m}$ . Se encuentra que la altura del tanque que contiene vapor es igual a  $1,089 \text{ m}$ . La altura entre el punto de alimento y la piscina de líquido se sugiere  $12 \text{ pulgadas}$  ( $0,3048 \text{ m}$ ), según Branan (2005) y Wankat (2012), así, la altura total del tanque equivale a  $1,7 \text{ m}$ .

Para determinar la posición del tanque (cilindro horizontal o cilindro vertical), se analiza la relación entre su altura y diámetro, si dicha relación es menor a 3, se debe aumentar el volumen de la piscina del líquido, si la relación se encuentra entre 3 y 5, se diseña un tanque vertical, como lo es en este caso (relación altura/diámetro:  $4,86$ ). Si la relación entre la altura y el diámetro es mayor que 5 se diseña un tanque horizontal y para determinar sus dimensiones se usa la constante  $K_{\text{drum,hor}}$  y el diámetro del tanque se calcula a partir de la última ecuación indicada en la Figura 3-2.



**Figura 3-3:** Esquema tanque *Flash*

Tras todos los cálculos previos, queda diseñado el tanque *flash*, a continuación, en la

Tabla 3-4, se presenta la tabla de especificaciones de dicho tanque flash.



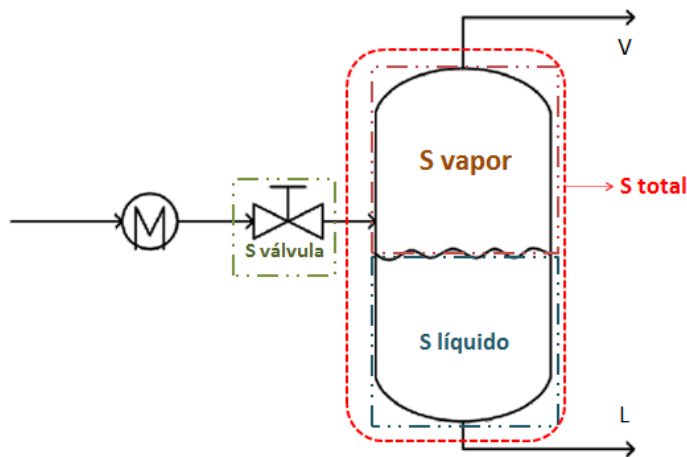
**Tabla 3-4** Especificaciones Tanque *Flash*

<b>Tanque Flash</b>	
<b>Presión Operación</b>	1.3 atm
<b>Temperatura Operación</b>	107°C
<b>Flujo de alimentación</b>	OP 0,21436 Kmol/h H <sub>2</sub> O 33,83960 Kmol/h PG 1,2147 Kmol/h H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 0,644 Kmol/h
<b>Flujo de líquido a la salida del tanque</b>	18,13 Kmol/h
<b>Flujo de vapor a la salida del tanque</b>	17,14 Kmol/h
<b>Fracciones molares en el líquido (sin tener en cuenta el ácido sulfúrico)</b>	$x_{n-OP} = 0,0018$ $x_{n-H_2O} = 0.9331$ $x_{n-PG} = 0.0651$
<b>Fracciones molares en el vapor</b>	$y_{n-OP} = 0,0106$ $y_{n-H_2O} = 0.9874$ $y_{n-PG} = 0.0020$
<b>Velocidad máxima de vapor permisible</b>	4,61 m/s (15,11 ft/s)
<b>Posición del tanque</b>	Vertical
<b>Dimensiones del tanque</b>	Diámetro: 0,35 m  Alto: 1,7 m Altura del vapor 1,089 m Altura entre punto de alimentación y piscina del líquido 0,3048m (12 in) Altura de la piscina del líquido: 0,31 m

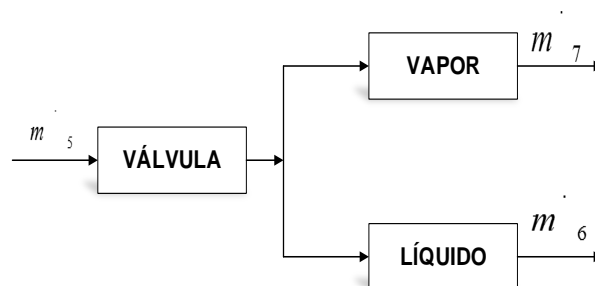
### 3.3.3 Modelamiento del Tanque Flash

Para el modelamiento se asume que el proceso inicia en la válvula de choque y culmina en el tanque flash, además, se consideran las siguientes suposiciones: i) No se tiene en cuenta el comportamiento del ácido sulfúrico considerando que no se vaporiza, es decir, todo el ácido alimentado abandona el tanque por la parte inferior como líquido, ii) Se conserva el flujo molar y la presión al atravesar el intercambiador de calor, iii) En ningún momento hay reacción química, y iv) La separación es adiabática, por tanto no hay transferencia de calor con el ambiente. En la Figura 3-4 se representan los sistemas de procesos del tanque flash.

Para realizar el modelado, se toman cuatro sistemas de Procesos: sistema total, la fase vapor, la fase líquida y la válvula de choque, ilustrados en la Figura 3-5. Obsérvese que las fases están limitadas por las fronteras físicas del tanque. En dicha figura se presenta el diagrama de bloques, con la respectiva numeración que será utilizada en los principios de conservación.



**Figura 3-4:** Sistemas de procesos del tanque flash.



**Figura 3-5:** Diagrama de bloques de los sistemas de proceso en el tanque flash.

Los balances de masa y energía para cada uno de los sistemas son los siguientes:

**Sistema total (S total):**

▪ **Balance de masa total:**

$$\frac{dM}{dt} = \dot{m}_{5v} + \dot{m}_{5L} - \dot{m}_7 - \dot{m}_6 \quad (47)$$

- **Balances por componentes:** En todos los balances  $w_{c,i}$  representa la fracción mol del componente  $c$  en la corriente  $i$ .

▪ **Óxido de propileno (A):**

$$\frac{dM_A}{dt} = \dot{m}_{5v} * W_{A,5v} + \dot{m}_{5L} * W_{A,5L} - \dot{m}_6 * W_{A,6} - \dot{m}_7 * W_{A,7} \quad (48)$$

▪ **Agua (B):**

$$\frac{dM_B}{dt} = \dot{m}_{5v} * W_{B,5v} + \dot{m}_{5L} * W_{B,5L} - \dot{m}_6 * W_{B,6} - \dot{m}_7 * W_{B,7} \quad (49)$$

▪ **Balance de energía:**

$$\frac{dQ}{dt} - \frac{dW}{dt} + \dot{m}_{5L} * \hat{H}_{5L} + \dot{m}_{5v} * \hat{H}_{5v} - \dot{m}_6 * \hat{H}_6 - \dot{m}_7 * \hat{H}_7 = \frac{dE_T}{dt} \quad (50)$$

**Sistema vapor (S vapor):**

▪ **Balance total:**

$$\frac{dM_7}{dt} = \dot{m}_{5v} - \dot{m}_7 \quad (51)$$

Se sabe que:

$$M_7 = \rho_V * V_V \quad (52)$$

Donde,  $\rho_V$  es la densidad del vapor y  $V_V$  es el volumen del tanque ocupado por el vapor. Además, por la ley de los gases ideales se sabe que:

$$\rho_V = \frac{M_V * P}{R * T} \quad (53)$$

Sabiendo que:  $M_V$  es el peso molecular de la mezcla de vapor,  $P$  la presión en el tanque,  $R$  la constante universal de los gases y  $T$  la temperatura de operación.

Reemplazando (53) en (52) y derivando se tiene que:

$$\frac{dM_7}{dt} = \frac{M_v}{R * T} * \left( P \frac{dV_V}{dt} + V_V \frac{dP}{dt} \right) \quad (54)$$

Ahora, reemplazando (54) en (51) y despejando  $\frac{dP}{dt}$  se tiene:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{1}{V_V} * \left( \frac{R * T}{M_V} * \dot{m}_{5v} - \frac{R * T}{M_V} * \dot{m}_7 - P * \frac{dV_V}{dt} \right) \quad (55)$$

**Balance por componentes:**

Óxido de propileno (A):

$$\frac{dM_{A,7}}{dt} = \dot{m}_{5v} * W_{A,5v} - \dot{m}_7 * W_{A,7} \quad (56)$$

Donde  $M_{A,7} = W_{A,7} * M_7$ . Para  $M_7$  se sigue el mismo tratamiento que en el balance total, resultado:

$$M_{A,7} = W_{A,7} * M_7 = W_{A,7} * \rho_V * V_V = W_{A,7} * \frac{M_V * P}{R * T} * V_V \quad (57)$$

Derivando la ecuación anterior, se tiene que:

$$\frac{dM_{A,7}}{dt} = \frac{M_V}{R * T} * \left( P * V_V * \frac{dW_{A,7}}{dt} + W_{A,7} * V_V * \frac{dP}{dt} + W_{A,7} * P * \frac{dV_V}{dt} \right) \quad (58)$$

Igualando (46) en (44) y despejando  $\frac{dW_{A,7}}{dt}$  se tiene

$$\frac{dW_{A,7}}{dt} = \frac{1}{P * V_V} \left( \frac{R * T}{M_V} * \dot{m}_{5v} * W_{A,5v} - \frac{R * T}{M_V} * \dot{m}_7 * W_{A,7} - W_{A,7} * V_V * \frac{dP}{dt} - W_{A,7} * P * \frac{dV_V}{dt} \right) \quad (59)$$

Agua (B): De forma análoga al óxido de propileno se obtiene:

$$\frac{dW_{B,7}}{dt} = \frac{1}{P * V_V} \left( \frac{R * T}{M_V} * \dot{m}_{5v} * W_{B,5v} - \frac{R * T}{M_V} * \dot{m}_7 * W_{B,7} - W_{B,7} * V_V * \frac{dP}{dt} - W_{B,7} * P * \frac{dV_V}{dt} \right) \quad (60)$$

**Sistema líquido (S líquido):**

**Balance total:**

$$\frac{dM_6}{dt} = \dot{m}_{8L} - \dot{m}_6 \quad (61)$$

Donde  $M_6 = \rho_L * V_L$  (49 a), siendo  $\rho_L$  la densidad del líquido y  $V_L$  es el volumen ocupado por el líquido; entonces:  $V_L = \pi * r^2 * L_L$  (62)

Siendo  $r$  el radio del tanque y  $L_L$  el nivel del líquido. Derivando la ecuación (62) y reemplazando en la ecuación (61), se tiene que:

$$\frac{dL_L}{dt} = \frac{1}{\rho_L * \pi * r^2} * (\dot{m}_{5L} - \dot{m}_6) \quad (63)$$

**Balance por componentes:**

Óxido de propileno (A):

$$\frac{dM_{A,6}}{dt} = \dot{m}_{5L} * W_{A,5L} - \dot{m}_6 * W_{A,6} \quad (64)$$

Se tiene que:  $M_{A,9} = W_{A,L} * M_L$  (65), donde  $M_L$  es el peso molecular del líquido. Por tanto:  $M_{A,9} = W_{A,L} * \rho_L * V_L = W_{A,L} * \rho_L * \pi * r^2 * L_L$  (66), y derivando respecto al nivel del líquido y la composición, se tiene que:

$$\frac{dM_{A,6}}{dt} = \rho_L * \pi * r^2 * L_L * \frac{dW_{A,6}}{dt} + \rho_L * \pi * r^2 * W_{A,6} * \frac{dL_L}{dt} \quad (67)$$

Reemplazando (53) en (51), y despejando  $\frac{dW_{A,6}}{dt}$  se llega a:

$$\frac{dM_{A,6}}{dt} = \frac{1}{\rho_L * \pi * r^2 * L_L} * \left( \dot{m}_{5L} * W_{A,5L} - \dot{m}_6 * W_{A,6} - \rho_L * \pi * r^2 * W_{A,6} * \frac{dL_L}{dt} \right) \quad (68)$$

*Agua (B)*: De forma análoga al óxido de propileno, se obtiene:

$$\frac{dM_{B,6}}{dt} = \frac{1}{\rho_L * \pi * r^2 * L_L} * \left( \dot{m}_{5L} * W_{B,5L} - \dot{m}_6 * W_{B,6} - \rho_L * \pi * r^2 * W_{B,6} * \frac{dL_L}{dt} \right) \quad (69)$$

### **Válvula de choque (S válvula):**

Debido a que la dinámica del sistema es muy rápida, sólo se tiene que:

$$\Delta P = P_4 - P_5 \quad (70)$$

Para seleccionar las ecuaciones dinámicas de balance representativas se tiene en cuenta que el flash es adiabático y el modelo no relaciona el comportamiento de la temperatura, no se tendrá en cuenta el balance de energía, tampoco se considerarán los balances del sistema total porque no contribuyen al objetivo de modelado. Así, las ecuaciones dinámicas de balance representativas son:

El cambio de la presión respecto al tiempo: ecuación (55).

El cambio de la composición de OP en el vapor respecto al tiempo: ecuación (59).

El cambio de la composición de agua en el vapor respecto al tiempo: ecuación (60).

El cambio del nivel del líquido respecto al tiempo (63).

El cambio de la composición de óxido de propileno en el líquido respecto al tiempo: ecuación (68).

El cambio de la composición de agua en el líquido al tiempo: ecuación (69).

Considerando  $F_k$  el flujo volumétrico de la corriente  $k$ ,  $F_{km}$  el Flujo molar de la corriente  $k$ ,  $C_{i,k}$  la Concentración molar de  $i$  en la corriente  $k$  se tiene:

### Separación instantánea del alimento: Algoritmo de Rachford-Rice

$$F_{5m} = F_{5m,L} + F_{5m,V} \quad (71)$$

$$F_{5m}z_i = F_{5m,L}x_i + F_{5m,V}y_i \quad (72)$$

$$y_i = K_i x_i \quad (73)$$

$$K_i = f(P) \quad (74)$$

### Dinámicas en la fase líquida

$$\frac{dL_L}{dt} = \frac{F_{5L} - F_6}{A} \quad (75)$$

$$\frac{dC_{A,6}}{dt} = \frac{F_{5L}(C_{A,5L} - C_{A,6})}{AL_L} \quad (76)$$

$$\frac{dC_{B,6}}{dt} = \frac{F_{5L}(C_{B,5L} - C_{B,6})}{AL_L} \quad (77)$$

$$\frac{dC_{C,6}}{dt} = \frac{F_{5L}(C_{C,5L} - C_{C,6})}{AL_L} \quad (78)$$

### Dinámicas en la fase vapor

$$\frac{dP}{dt} = \left( \frac{RT}{V_t - AL_L} \right) (F_{5Vm} - F_{7im}) + \left( \frac{P}{V_t - AL_L} \right) (F_{5L} - F_6) \quad (79)$$

$$\frac{dC_{A,7}}{dt} = \frac{F_{5V}C_{A,5V} - F_7C_{A,7}}{V_t - AL_L} + \frac{C_{A,7}(F_{5L} - F_6)}{V_t - AL_L} \quad (80)$$

$$\frac{dC_{B,7}}{dt} = \frac{F_{5V}C_{B,5V} - F_7C_{B,7}}{V_t - AL_L} + \frac{C_{B,7}(F_{5L} - F_6)}{V_t - AL_L} \quad (81)$$

La dinámica del líquido solo depende de lo que entra, de lo que sale y del área transversal del tanque, en cambio en la fase de vapor se debe tener en cuenta la temperatura, la cual afecta la presión de vapor y por lo tanto la velocidad de flujo del mismo. Es necesario tener en cuenta la dinámica de las dos fases porque son dos sistemas diferentes y si se omite la dinámica del vapor no se va a percibir en el sistema el cambio de temperatura.

En los anexos C, D y F se presentan los diseños de los intercambiadores de calor. En esta tesis se asume que la respuesta de los intercambiadores de calor es instantánea comparada con la de los demás equipos, por lo que el modelo de los intercambiadores será una ecuación algebraica que da el valor del calor transferido bajo cada condición de operación. Dichos calores serán las acciones de control  $u_i$  de los sistemas de control instalados. Por lo tanto, el modelo del intercambiador de calor será:

$$u_i = \frac{dQ_i}{dt} \quad (82)$$



## 4 Modelado y Simulación del Problema de Referencia

La simulación se basó en las expresiones (39), (49), (41) y (42) correspondientes a los balances en el reactor, la expresión (55) que representa la variación de presión en el tanque flash, las expresiones (59) y (60) que indican los balances de la fase vapor en el tanque flash, la expresión (63) que considera la variación de nivel en dicho tanque, las ecuaciones (68) y (69) que indican los balances de la fase líquida en el mismo, la ecuación (70) que indica el cambio de presión en la válvula de choque, las expresiones (75), (76), (77) y (78) que indican la dinámica de la fase vapor del tanque flash y las expresiones (79), (80) y (81) que indican la dinámica de la fase líquida de dicho tanque y la expresión (82), considerando que en los intercambiadores solo se modeló la temperatura de la corriente del proceso, de manera que únicamente se recalcularon los flujos energéticos necesarios para suministrar dicha temperatura.

$$\frac{dh}{dt} = \frac{\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4}{\rho_4 A} \quad (39)$$

$$\frac{dC_{A,4}}{dt} = \frac{(F_3 C_{A,3} - F_4 C_{A,4})}{Ah} - k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) C_{A,4}}{\rho_4 Ah} \quad (40)$$

$$\frac{dC_{B,4}}{dt} = \frac{(F_3 C_{B,3} - F_4 C_{B,4})}{Ah} - k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) C_{B,4}}{\rho_4 Ah} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{C,4}}{dt} &= \frac{(F_3 C_{C,3} - F_4 C_{C,4})}{Ah} + k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} \frac{dT_4}{dt} \\ &= \frac{\rho_3 F_3 C_{p3} (T_3 - T_{ref})}{\rho_4 Ah C_{p4}} - \frac{\rho_4 F_4 C_{p4} (T_4 - T_{ref})}{\rho_4 Ah C_{p4}} + \frac{k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} \Delta H_r}{\rho_4 C_{p4}} - \frac{Q_{chaq}}{\rho_4 Ah C_{p4}} \\ &\quad - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) T_4}{Ah} \quad (43) - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) C_{C,4}}{\rho_4 Ah} \end{aligned} \quad (42)$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{1}{V_V} * \left( \frac{R * T}{M_V} * \dot{m}_{5v} - \frac{R * T}{M_V} * \dot{m}_7 - P * \frac{dV_V}{dt} \right)$$

$$\frac{dW_{A,7}}{dt} = \frac{1}{P * V_V} \left( \frac{R * T}{M_V} * \dot{m}_{5v} * W_{A,5v} - \frac{R * T}{M_V} * \dot{m}_7 * W_{A,7} - W_{A,7} * V_V * \frac{dP}{dt} - W_{A,7} * P * \frac{dV_V}{dt} \right)$$

$$\frac{dW_{B,7}}{dt} = \frac{1}{P \cdot V_V} \left( \frac{R \cdot T}{M_V} * \dot{m}_{5v} * W_{B,5v} - \frac{R \cdot T}{M_V} * \dot{m}_7 * W_{B,7} - W_{B,7} * V_V * \frac{dP}{dt} - W_{B,7} * P \frac{dV_V}{dt} \right)$$

$$\frac{dL_L}{dt} = \frac{1}{\rho_L * \pi * r^2} * (\dot{m}_{5L} - \dot{m}_6)$$

$$\frac{dM_{A,6}}{dt} = \frac{1}{\rho_L * \pi * r^2 * L_L} \cdot \left( \dot{m}_{5L} * W_{A,5L} - \dot{m}_6 * W_{A,6} - \rho_L * \pi * r^2 * W_{A,6} * \frac{dL_L}{dt} \right) \quad (68)$$

$$\frac{dM_{B,6}}{dt} = \frac{1}{\rho_L * \pi * r^2 * L_L} * \left( \dot{m}_{5L} * W_{B,5L} - \dot{m}_6 * W_{B,6} - \rho_L * \pi * r^2 * W_{B,6} * \frac{dL_L}{dt} \right) \quad (69)$$

$$\Delta P = P_4 - P_5 \quad (70)$$

$$\frac{dL_L}{dt} = \frac{F_{5L} - F_6}{A} \quad (75)$$

$$\frac{dC_{A,6}}{dt} = \frac{F_{5L}(C_{A,5L} - C_{A,6})}{AL_L} \quad (76)$$

$$\frac{dC_{B,6}}{dt} = \frac{F_{5L}(C_{B,5L} - C_{B,6})}{AL_L} \quad (77)$$

$$\frac{dC_{C,6}}{dt} = \frac{F_{5L}(C_{C,5L} - C_{C,6})}{AL_L} \quad (78)$$

### Dinámicas en la fase vapor

$$\frac{dP}{dt} = \left( \frac{RT}{V_t - AL_L} \right) (F_{5v\dot{m}} - F_{7\dot{m}}) + \left( \frac{P}{V_t - AL_L} \right) (F_{5L} - F_6) \quad (79)$$

$$\frac{dC_{A,7}}{dt} = \frac{F_{5V}C_{A,5V} - F_7C_{A,7}}{V_t - AL_L} + \frac{C_{A,7}(F_{5L} - F_6)}{V_t - AL_L} \quad (80)$$

$$\frac{dC_{B,7}}{dt} = \frac{F_{5V}C_{B,5V} - F_7C_{B,7}}{V_t - AL_L} + \frac{C_{B,7}(F_{5L} - F_6)}{V_t - AL_L} \quad (81)$$

$$u_i = \frac{dQ_i}{dt} \quad (82)$$

## 4.1 Condiciones de simulación

La planta fue simulada en MATLAB, mediante los comandos *ode15s* y *fsolve*, este último aplicado solamente a las variables de estado del tanque flash. La simulación se realizó en un sistema de ecuaciones diferenciales, a partir de 19 ecuaciones diferenciales acopladas por un tiempo de 0,123 horas, correspondiente al tiempo de residencia requerido en el reactor para cumplir una conversión del 85%. Las ecuaciones diferenciales son: seis ecuaciones en el reactor (nivel, temperatura y cuatro concentraciones: óxido de propileno, agua, propilenglicol y ácido sulfúrico), diez en el tanque flash (presión del vapor, nivel del líquido, cuatro concentraciones en la fase líquida y cuatro concentraciones en la fase de vapor) y una para cada intercambiador (solo la dinámica de temperatura del lado de los tubos, no se tiene en cuenta la dinámica de la coraza por considerarse un servicio); en las Tabla 4-1 y en Tabla 4-2 se presentan las 19 variables de estado con las 19 ecuaciones diferenciales correspondientes. Se utilizaron como condiciones iniciales los puntos de operación de cada variable. El tamaño de paso de solución fue de 5 segundos. Se hizo un rasgado de la corriente de reciclo, con el fin de que la corriente 2 sea la entrada del simulador y posteriormente se determinaron las condiciones de la corriente 1 necesarias para mantener las condiciones de la corriente 2. En el punto de mezcla se despreció la dinámica de mezclado por ser muy rápida, con lo cual la ecuación correspondiente es algebraica. Aunque el diseño del tanque flash se hizo considerando condiciones adiabáticas (para lo cual se asume que se encuentra recubierto con material aislante) teniendo en cuenta que la presión depende de la temperatura, al momento de simularlo se consideran pequeñas variaciones de la presión y se asume que la temperatura permanece constante debido a que el sistema está controlado. Así, al dejar libre a la variable presión, se permite una ecuación dinámica

para este equipo y las variaciones mínimas de temperatura permiten simplificar el modelo de la planta completa, de lo contrario, en cada paso de la solución se debe resolver un sistema de ecuaciones no lineales. En los equipos de intercambio de calor sólo se modeló la temperatura de la corriente de proceso, por lo que se asume que únicamente se recalculan los flujos energéticos  $\dot{Q}$  que se requiere suministrar para alcanzar dicha temperatura.

**Tabla 4-1 Variables de estado con las ecuaciones diferenciales correspondientes.**

Variable de estado	Ecuación diferencial
$T_3$	$\frac{dT_3}{dt} = \frac{\rho_2 F_2 C_{p2} (T_2 - T_{ref})}{\rho_3 A h C_{p3}} - \frac{\rho_3 F_3 C_{p3} (T_3 - T_{ref})}{\rho_3 A h C_{p3}} + \frac{Q_{E01}}{\rho_3 A h C_{p3}}$
$h$	$\frac{dh}{dt} = \frac{\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4}{\rho_4 A}$
$C_{A,4}$	$\frac{dC_{A,4}}{dt} = \frac{(F_3 C_{A,3} - F_4 C_{A,4})}{Ah} - k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) C_{A,4}}{\rho_4 A h}$
$C_{H2O,4}$	$\frac{dC_{H2O,4}}{dt} = \frac{(F_3 C_{H2O,3} - F_4 C_{H2O,4})}{Ah} - k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) C_{H2O,4}}{\rho_4 A h}$
$C_{B,4}$	$\frac{dC_{B,4}}{dt} = \frac{(F_3 C_{B,3} - F_4 C_{B,4})}{Ah} + k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) C_{B,4}}{\rho_4 A h}$
$C_{cat,4}$	$\frac{dC_{cat,4}}{dt} = \frac{(F_3 C_{cat,3} - F_4 C_{cat,4})}{Ah} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) C_{cat,4}}{\rho_4 A h}$
$T_4$	$\frac{dT_4}{dt} = \frac{\rho_3 F_3 C_{p3} (T_3 - T_{ref})}{\rho_4 A h C_{p4}} - \frac{\rho_4 F_4 C_{p4} (T_4 - T_{ref})}{\rho_4 A h C_{p4}} + \frac{k_0 e^{\frac{-E_a}{RT_4}} C_{A,4} \Delta H_r}{\rho_4 C_{p4}} - \frac{Q_{chaq}}{\rho_4 A h C_{p4}} - \frac{(\rho_3 F_3 - \rho_4 F_4) T_4}{Ah}$
$T_5$	$\frac{dT_5}{dt} = \frac{\rho_4 F_4 C_{p4} (T_4 - T_{ref})}{\rho_5 A h C_{p5}} - \frac{\rho_5 F_5 C_{p5} (T_5 - T_{ref})}{\rho_5 A h C_{p5}} + \frac{Q_{E02}}{\rho_5 A h C_{p5}}$
$h_F$	$\frac{dh_F}{dt} = \frac{\rho_5 F_{5L} - \rho_6 F_6}{\rho_6 A}$
$C_{A,6}$	$\frac{dC_{A,6}}{dt} = \frac{F_{5L} (C_{A,5L} - C_{A,6})}{AL_L}$

**Tabla 4-2 Continuación variables de estado con las ecuaciones diferenciales correspondientes.**

Variable de estado	Ecuación diferencial
$C_{H2O,6}$	$\frac{dC_{H2O,6}}{dt} = \frac{F_{5L}(C_{H2O,5L} - C_{H2O,6})}{AL_L}$
$C_{B,6}$	$\frac{dC_{B,6}}{dt} = \frac{F_{5L}(C_{B,5L} - C_{B,6})}{AL_L}$
$C_{cat,6}$	$\frac{dC_{cat,6}}{dt} = \frac{F_{5L}(C_{cat,5L} - C_{cat,6})}{AL_L}$
$P_F$	$\frac{dP}{dt} = \left( \frac{RT}{V_t - AL_L} \right) (F_{5V\dot{m}} - F_{7\dot{m}}) + \left( \frac{P}{V_t - AL_L} \right) (F_{5L} - F_6)$
$C_{A,7}$	$\frac{dC_{A,7}}{dt} = \frac{F_{5V}C_{A,5V} - F_7C_{A,7}}{V_t - AL_L} + \frac{C_{A,7}(F_{5L} - F_6)}{V_t - AL_L}$
$C_{H2O,7}$	$\frac{dC_{H2O,7}}{dt} = \frac{F_{5V}C_{H2O,5V} - F_7C_{H2O,7}}{V_t - AL_L} + \frac{C_{H2O,7}(F_{5L} - F_6)}{V_t - AL_L}$
$C_{B,7}$	$\frac{dC_{B,7}}{dt} = \frac{F_{5V}C_{B,5V} - F_7C_{B,7}}{V_t - AL_L} + \frac{C_{B,7}(F_{5L} - F_6)}{V_t - AL_L}$
$C_{cat,7}$	$\frac{dC_{cat,7}}{dt} = \frac{F_{5V}C_{cat,5V} - F_7C_{cat,7}}{V_t - AL_L} + \frac{C_{cat,7}(F_{5L} - F_6)}{V_t - AL_L}$
$T_8$	$\frac{dT_8}{dt} = \frac{\rho_7 F_7 C_{p7} (T_7 - T_{ref})}{\rho_8 Ah C_{p8}} - \frac{\rho_8 F_8 C_{p8} (T_8 - T_{ref})}{\rho_8 Ah C_{p8}} + \frac{Q_{E03}}{\rho_8 Ah C_{p8}}$

En la 4-3 Tabla de interacción de las variables de estado. Estas aparecen tanto en la fila inicial como en la columna final y en sus intersecciones se indica con el número 1 cuando una variable depende de otra.

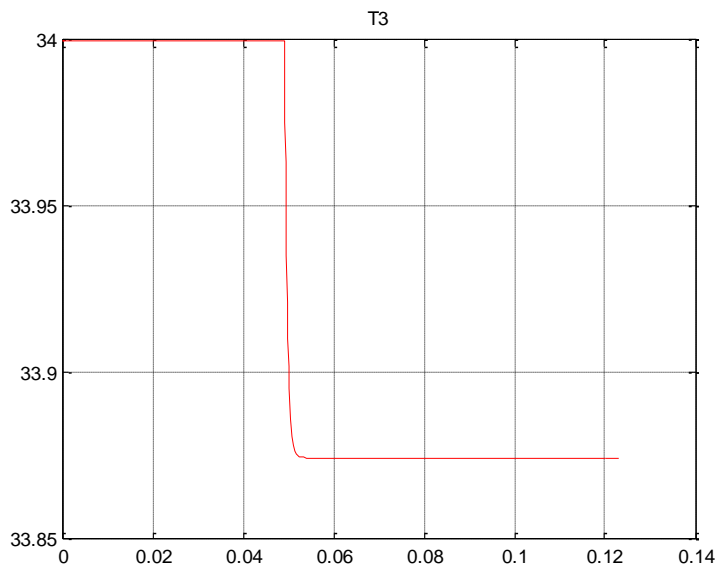


4-3 Tabla de interacciones entre variables de estado.

	$T_3$	$h$	$C_{A,4}$	$C_{H2O,4}$	$C_{B,4}$	$C_{cat,4}$	$T_4$	$T_5$	$h_F$	$C_{A,6}$	$C_{H2O,6}$	$C_{B,6}$	$C_{cat,6}$	$P_F$	$C_{A,7}$	$C_{H2O,7}$	$C_{B,7}$	$C_{cat,7}$	$T_8$	
$T_3$	1																			
$h$		1	1	1	1															
$C_{A,4}$		1	1	1	1	1														
$C_{H2O,4}$		1	1	1	1	1														
$C_{B,4}$		1	1	1	1	1														
$C_{cat,4}$		1	1	1	1	1														
$T_4$			1	1	1	1	1	1												
$T_5$																				
$h_F$			1	1	1	1			1	1	1	1	1							
$C_{A,6}$			1						1	1										
$C_{H2O,6}$				1					1		1									
$C_{B,6}$					1				1			1								
$C_{cat,6}$						1			1				1							
$P_F$									1					1						
$C_{A,7}$			1					1	1					1	1					
$C_{H2O,7}$				1				1	1					1		1				
$C_{B,7}$					1			1	1					1			1			
$C_{cat,7}$						1		1	1					1					1	
$T_8$								1							1	1	1	1	1	1

## 4.2 PLANTA EN LAZO ABIERTO

Para realizar la simulación de la planta en lazo abierto se situaron todas las variables del sistema en sus respectivos puntos de operación, como ya se mencionó. Considerando que se programó con flujos volumétricos, se realizó una perturbación tipo escalón en la variable del flujo volumétrico de la corriente 2,  $F_2$  incrementando su valor nominal de  $0,76785483 \text{ m}^3/\text{h}$  en un 2%, es decir, elevando el flujo a  $0,7832119266 \text{ m}^3/\text{h}$ . Nótese la alta precisión de los valores de las variables que se debe usar. Si eso no se respeta, aparecen desviaciones del estado estacionario debido a la propagación de error numérico ocasionada por la realimentación de masa y energía en el proceso. Finalmente se analizó la respuesta de cada equipo a la perturbación. La perturbación tipo escalón se aplicó en un tiempo correspondiente a  $0,0492 \text{ h}$ . En la Figura 4-1, se muestra la respuesta dinámica de la temperatura a la salida del intercambiador E01, se observa que la temperatura varía en  $0,12^\circ\text{C}$  aproximadamente, cambio que puede considerarse despreciable.

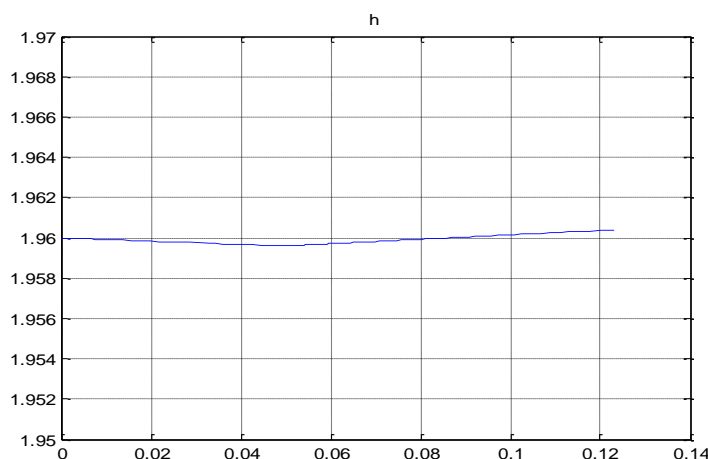


**Figura 4-1:** Temperatura a la salida del intercambiador E01.

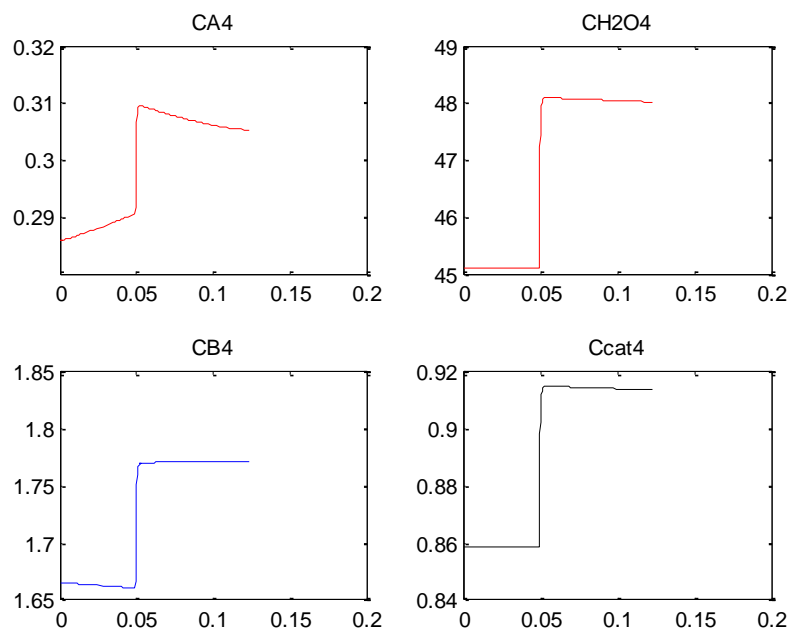
En la Figura 4-2, se muestra la respuesta del nivel de líquido en el reactor R01 a la perturbación; se observa que al realizar la perturbación, el nivel del líquido pasa de  $1,9596$  a  $1,9604\text{m}$ , es decir que la variación es despreciable. En la Figura 4-3 se muestran las concentraciones en la corriente 4, a la salida del reactor y se señalan en rojo las correspondientes a los reactivos, en azul al producto (propilenglicol) y en negro la



correspondiente al catalizador. Se observa que al perturbar el sistema la concentración de óxido de propileno cambia de 0.39 a 0.31  $\text{kmol/m}^3$  y la de agua de 45 a 48  $\text{kmol/m}^3$ , cambio que es más significativo que el anterior. La disminución inicial del nivel, antes de ser perturbado, muy seguramente se debe a un error numérico al realizar la simulación, indicando que el punto de equilibrio no corresponde a un nivel de 1,96m sino a un valor inferior, el cuál se desplaza debido al método numérico de solución acoplado.

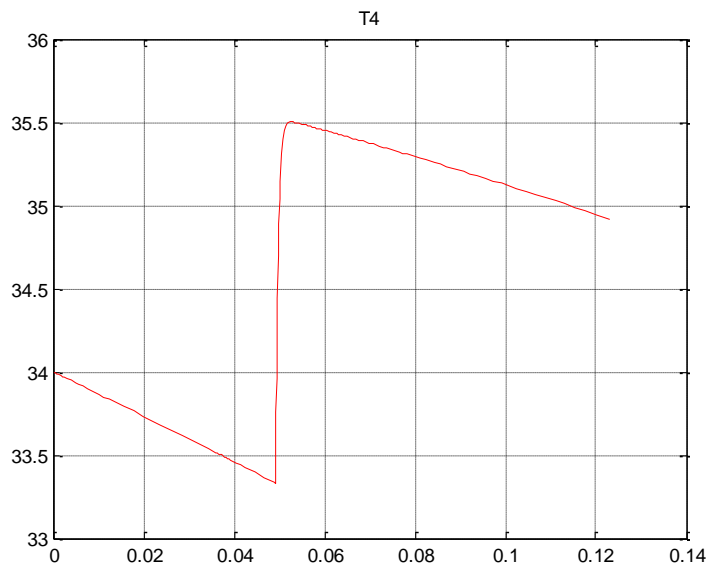


**Figura 4-2:** Nivel de líquido en el reactor R01.



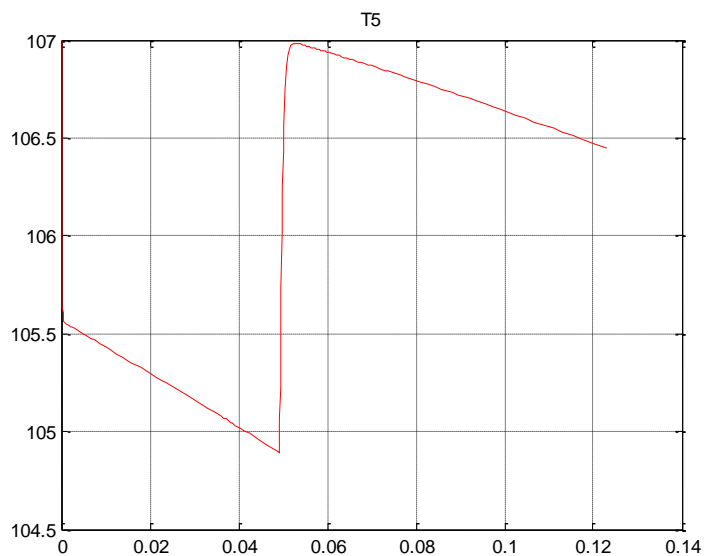
**Figura 4-3:** Concentraciones de los componentes a la salida del reactor R01.

En la Figura 4-4 se esquematiza la respuesta de la temperatura del reactor para una tasa de retiro de calor constante, observándose que al perturbar el sistema la temperatura varía en  $1.5^{\circ}\text{C}$ , cambio que es considerable, teniendo en cuenta que de esta temperatura depende el avance de la reacción.



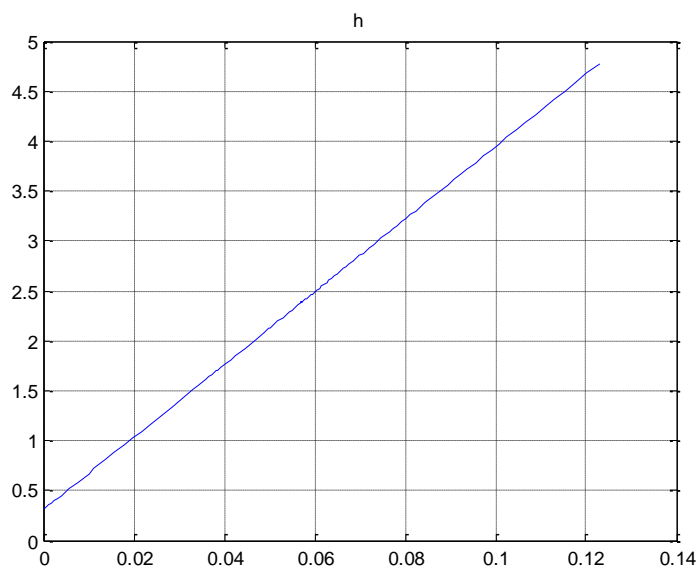
**Figura 4-4:** Temperatura del reactor R01.

En la Figura 4-5 se muestra la temperatura de salida del intercambiador de calor E02, el cual precalienta la mezcla líquida antes de ser pasada por la válvula de choque o "flash". Se observa que al realizar la perturbación dicha temperatura se eleva en  $2,2^{\circ}\text{C}$  aproximadamente, valor que es significativo considerando que la temperatura de la solución a la entrada del tanque flash determina la separación de los componentes en este equipo.



**Figura 4-5:** Temperatura a la salida del intercambiador E02.

En la Figura 4-6 se representa el nivel de líquido en el tanque flash. Se puede observar que, como consecuencia de la perturbación, el nivel del líquido aumenta de 2,2m a 4,8m, lo cual es muy representativo.



**Figura 4-6:** Nivel de líquido en el tanque flash V01.

En la Figura 4-7 se presenta el comportamiento del nivel del líquido si se mantiene controlado y en la Figura 4-8 la acción de control cuando se mantiene controlado el nivel del flash en lazo abierto.

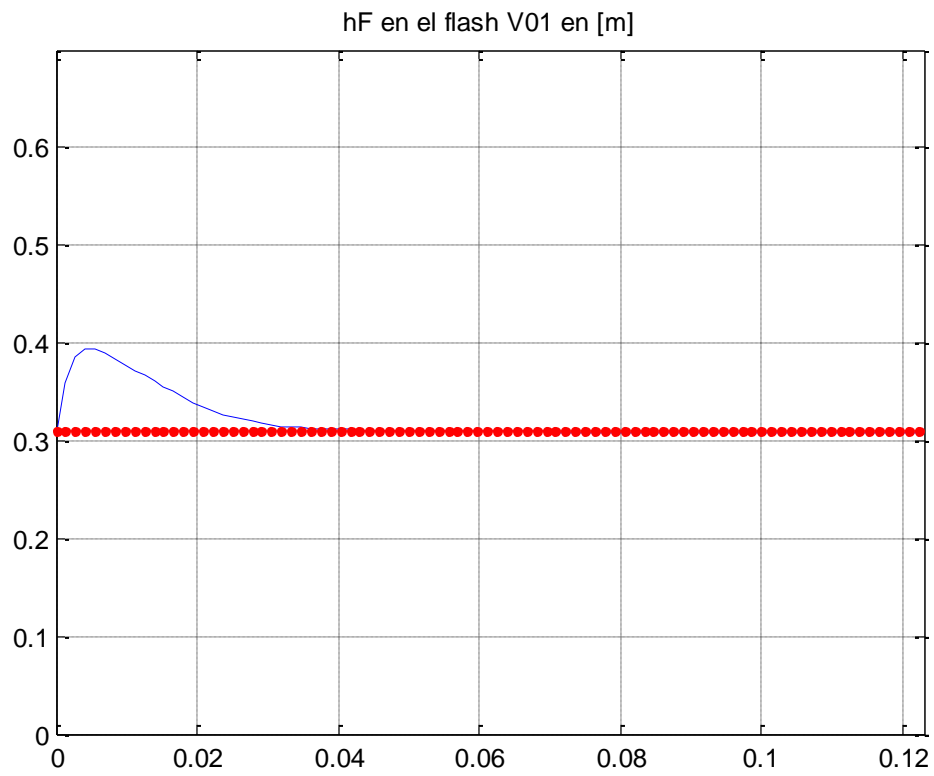
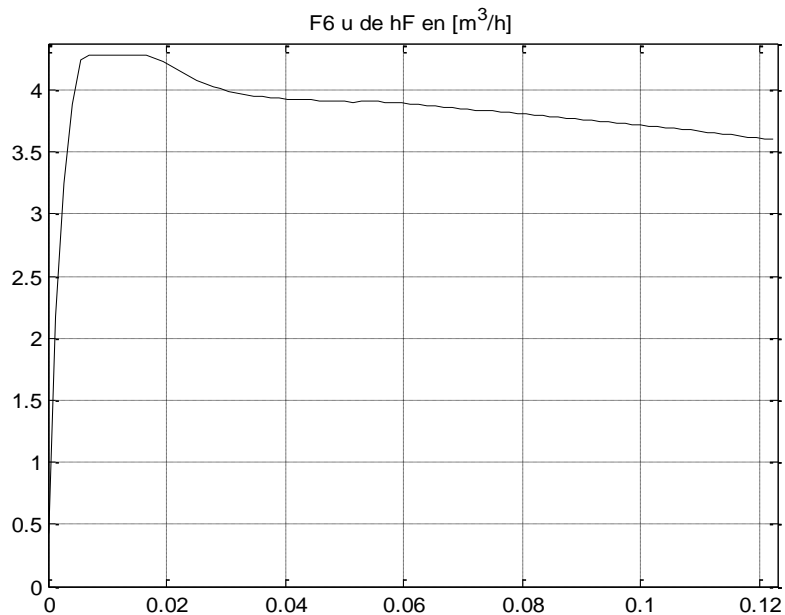
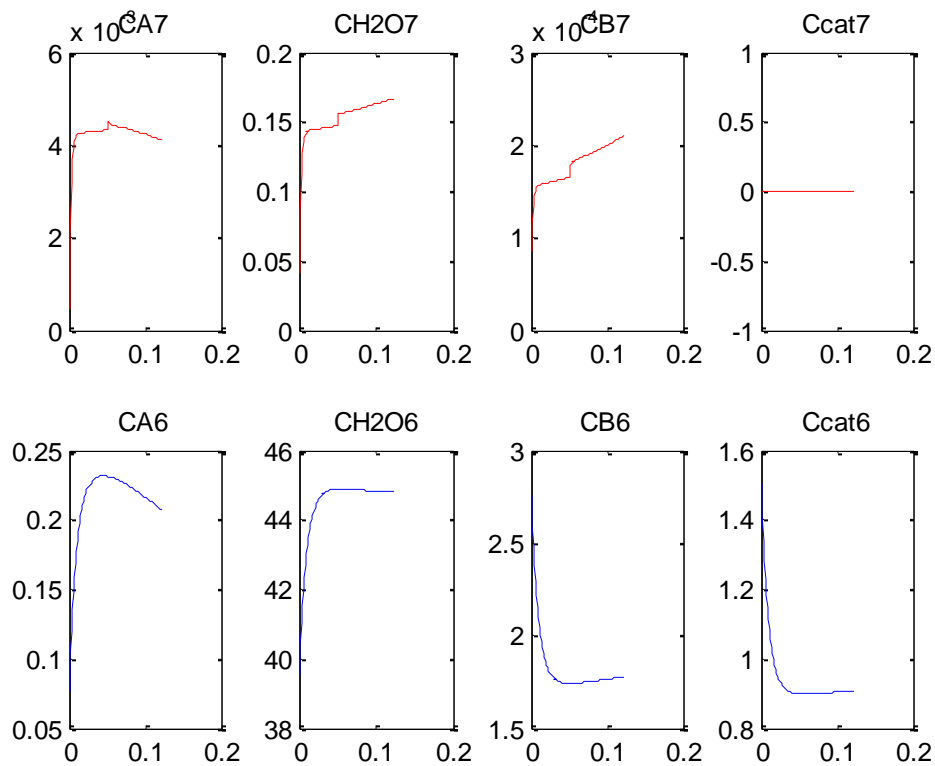


Figura 4-7 Nivel de líquido en el tanque *flash* V01 controlado.



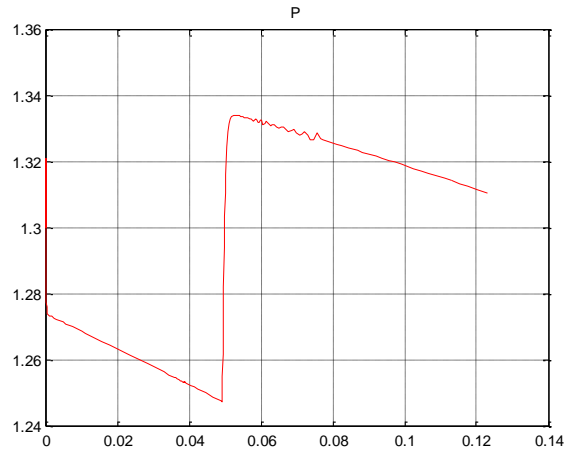
**Figura 4-8** Acción de control cuando se mantiene controlado el nivel del flash en lazo abierto.



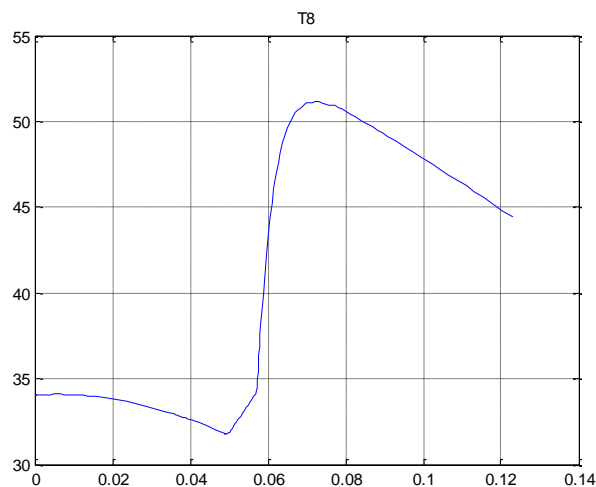
**Figura 4-9** Concentraciones de los componentes en las salidas del tanque flash V01 con nivel del líquido en el tanque flash controlado.

En la Figura 4-9 se representan las concentraciones de salida de todos los componentes, tanto por la corriente de vapor (7) como por la corriente líquida (6) en el tanque “flash”.

En la Figura 4-10 se muestra la respuesta dinámica de la presión del tanque flash. Se observa que al ser perturbado el sistema, la presión en el tanque flash se eleva en 0,09 atm, cambio que puede considerarse despreciable.



**Figura 4-10:** Presión en el tanque flash V01.



**Figura 4-11:** Temperatura a la salida del intercambiador E03.

Finalmente, en la Figura 4-11, se muestra la respuesta de la temperatura de la mezcla una vez se condensa en el intercambiador E03. Se observa que al ser perturbado el sistema dicha temperatura se eleva en 19°C, valor que es muy significativo,

considerando que el óxido de propileno presenta un punto de ebullición muy bajo y en el intercambiador E03 no se subenfria la mezcla, solamente se asegura que se condensen todos los componentes.

Se concluye entonces la importancia y necesidad de contar con un control, ya que en lazo abierto la planta es muy sensible, la interconexión contagia las perturbaciones, de manera que una perturbación tan solo del 2% en el flujo F2 ocasiona una variación del 0,12°C en la temperatura de salida del intercambiador E01 que precalienta la mezcla antes de ingresar al reactor, una variación despreciable en el nivel del reactor, una variación en 2,2°C en la temperatura de salida del intercambiador E02 que precalienta la mezcla que ingresará al tanque flash, lo que resulta crítico porque de esta temperatura depende la separación de componentes en el equipo, una variación en el nivel del líquido del tanque flash de 2,2 a 4,8m, lo cual es muy representativo, más aún si se considera la capacidad del tanque, una variación despreciable en la presión del tanque flash y un aumento de 19°C en la temperatura, una vez se condensa en el intercambiador E03, lo cual es considerable al tener el óxido de propileno un punto de ebullición muy bajo, de manera que con este incremento se podría, en un momento dado, incluso tener el óxido de propileno en forma de vapor a la entrada del reactor.

Se observa que el error numérico presentado al realizar la simulación, ocasiona un desplazamiento del punto de equilibrio, de manera que no corresponde a un nivel en el reactor de 1,96m sino a un valor inferior; como consecuencia se presenta una disminución en el nivel inicial antes de que el sistema sea perturbado. Dicho error numérico también ocasiona que la concentración de propilenglicol en la corriente 7 (salida de vapor del tanque flash) pase de un valor mínimo positivo a un valor negativo.

### 4.3 Planta en lazo cerrado

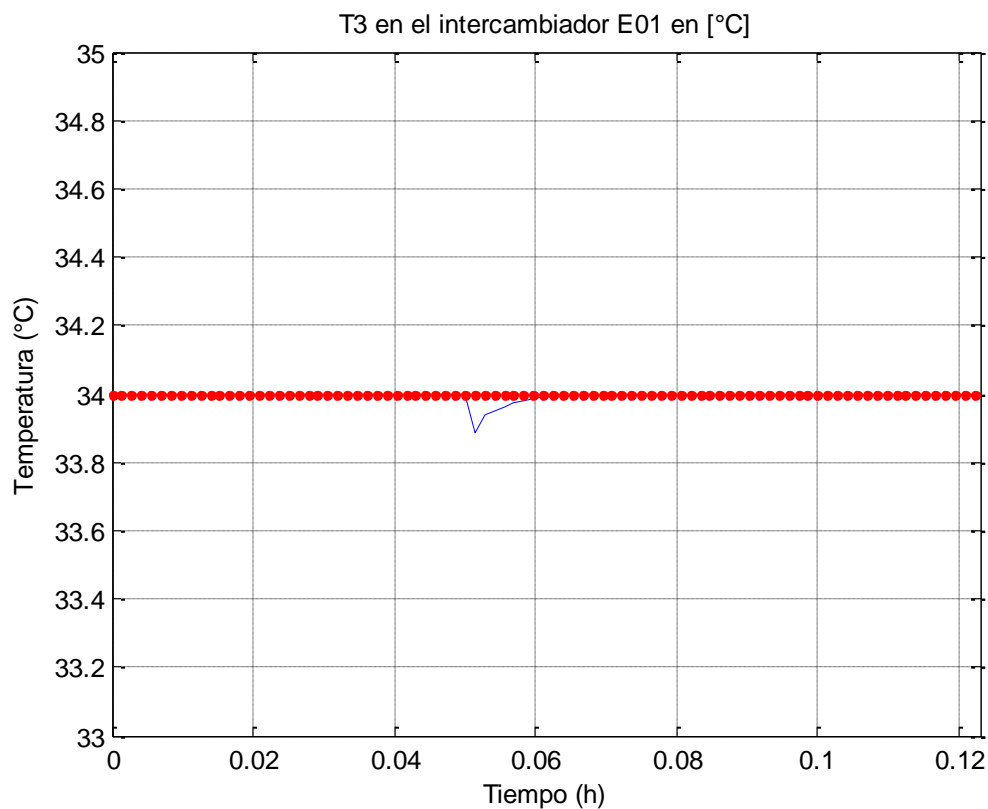
Para todos los lazos de control se usaron controladores PID debido a su simplicidad y alta aplicabilidad en la industria. El objetivo de control es mantener todas las variables controladas en sus puntos de operación correspondientes al diseño. En la Tabla 4-4 se presentan los lazos de control propuestos con sus respectivos pareamientos y sintonía.

**Tabla 4-4 Pareamientos y Sintonía de los lazos de Control**

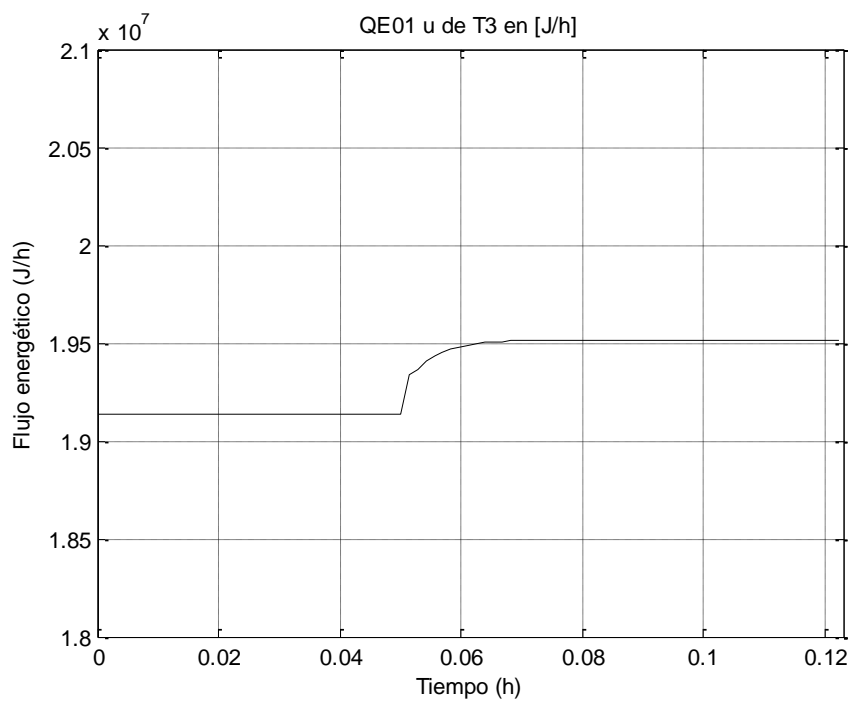
Equipo	Tipo	Variable Controlada	Variable Manipulada	Banda Proporcional (BP%)	Tiempo integral (h)	Tiempo derivativo (h)
E01	Temperatura	T3	$\dot{Q}_{E01}$	350	0.001	0
R01	Nivel	H	$F_4$	0.7	0.01	0
R01	Temperatura	T4	$\dot{Q}_{chaq}$	0.5	0.001	0
E02	Temperatura	T5	$\dot{Q}_{E02}$	6550	0.0001	0
V01	Nivel	$h_F$	$F_6$	10	0.01	0
V01	Presión	$P_F$	$F_7$	10	0.01	0
E03	Temperatura	T8	$\dot{Q}_{E03}$	150	0.003	0

En la Figura 4-12 se muestra la respuesta dinámica de la temperatura a la salida del intercambiador E01 y en la Figura 4-13 la respectiva acción de control. Considerando que la señal del valor deseado se indica con rojo y el comportamiento de la variable con color azul, se observa que después de la perturbación, la temperatura a la salida del intercambiador E01 desciende de 34 a 33,8°C. El flujo de calor para conservar la temperatura a la salida del intercambiador E03 en el valor deseado varía de  $1,92 \times 10^7$  J/h a  $1,96 \times 10^7$  J/h. Se observa que se ejerce una buena acción de control, ya que después de la perturbación, la variable vuelve a su estado estacionario.



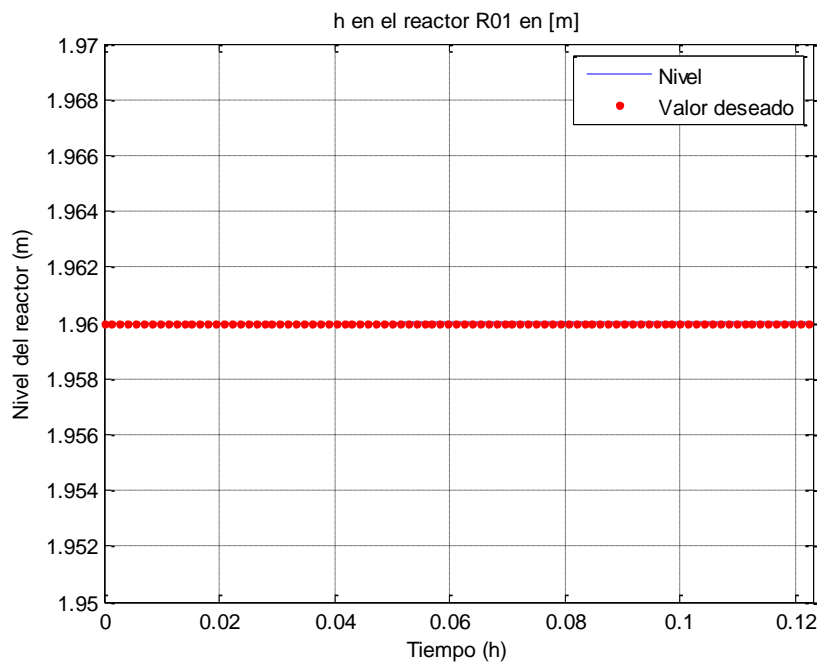


**Figura 4-12:** Temperatura a la salida del intercambiador E01.

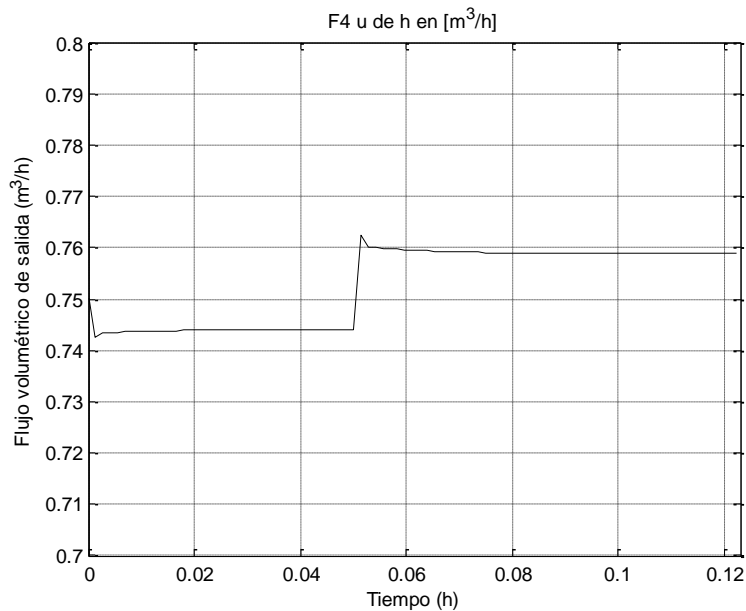


**Figura 4-13:** Flujo energético requerido en el intercambiador E01.

En la Figura 4-14 se muestra la dinámica de nivel del reactor, cuya variable manipulada es el flujo de salida del reactor  $F_4$ , la cual se muestra en la Figura 4-15. No se observa el valor real del nivel porque en la gráfica se superpone por encima el valor deseado, ya que coinciden exactamente, lo que indica que el control para esta variable funciona perfectamente. Se observa que, después de la perturbación, para conservar el nivel del reactor, el flujo volumétrico, a la salida del mismo, se debe variar desde  $0,743 \text{ m}^3/\text{h}$  hasta  $0,76 \text{ m}^3/\text{h}$  aproximadamente. La desviación inicial que se observa en flujo volumétrico de salida del reactor se debe a que el punto inicial no corresponde exactamente al punto de equilibrio.

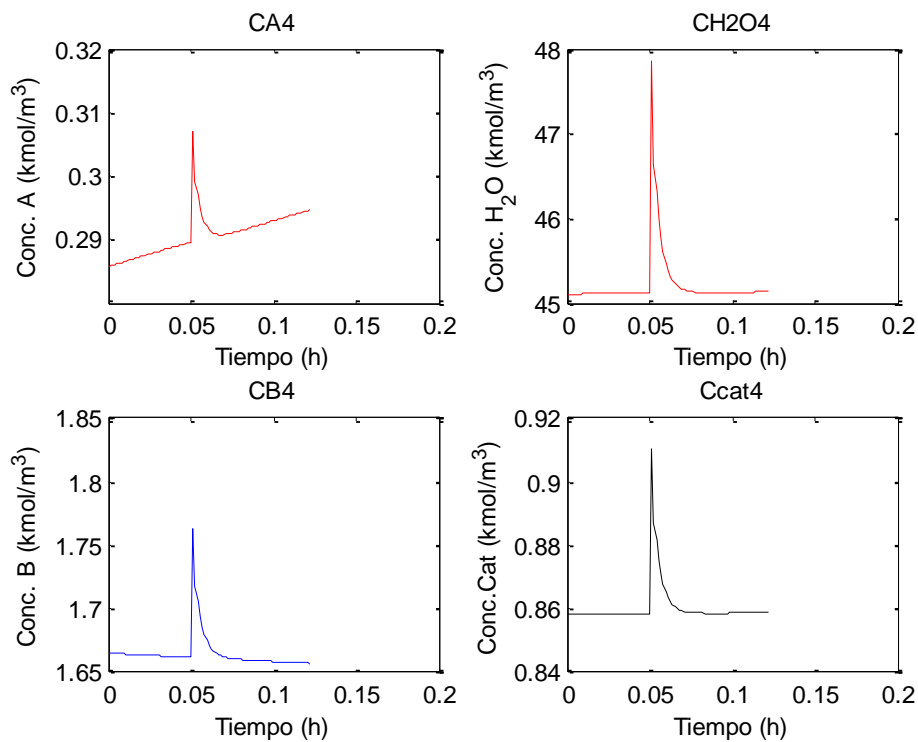


**Figura 4-14:** Nivel de líquido en el reactor R01.



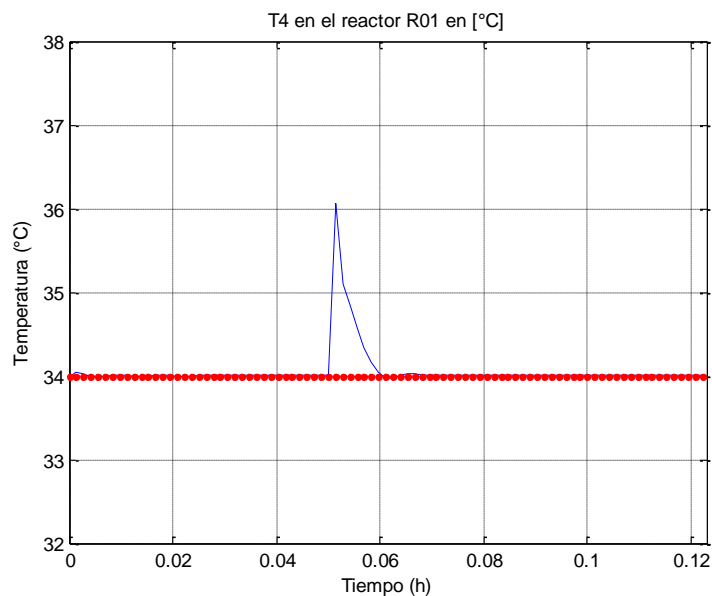
**Figura 4-15:** Flujo volumétrico de salida en el reactor R01.

En la Figura 4-16 se muestran las concentraciones en la corriente 4 a la salida del reactor. En rojo aparecen los reactivos, en azul el producto y en negro el catalizador. Se observa que después de la perturbación, hay sobre impulsos en la concentración de óxido de propileno de 0,29 a 0,38 kmol/m<sup>3</sup> aproximadamente, en la de agua de 45 a 47,9 kmol/m<sup>3</sup>, mientras el propilenglicol lo hace de 1,66 kmol/m<sup>3</sup> a 1,76 kmol/m<sup>3</sup> y el ácido sulfúrico de 0,859 kmol/m<sup>3</sup> a 0,915 kmol/m<sup>3</sup> aproximadamente. Las concentraciones de agua, óxido de propileno y ácido sulfúrico, en la corriente 4, después de la perturbación, regresan a su estado estacionario previo, mientras que la de óxido de propileno no retorna a su estado inicial, el cual, como se observa, no es estacionario, lo cual es consecuencia del error numérico involucrado en la simulación. Se debe tener en cuenta que el flujo volumétrico de agua es 2,5 veces el del óxido de propileno, lo cual explica el comportamiento de las gráficas, ya que al tener la concentración de óxido de propileno un valor mucho menor, es más sensible frente a un error numérico.

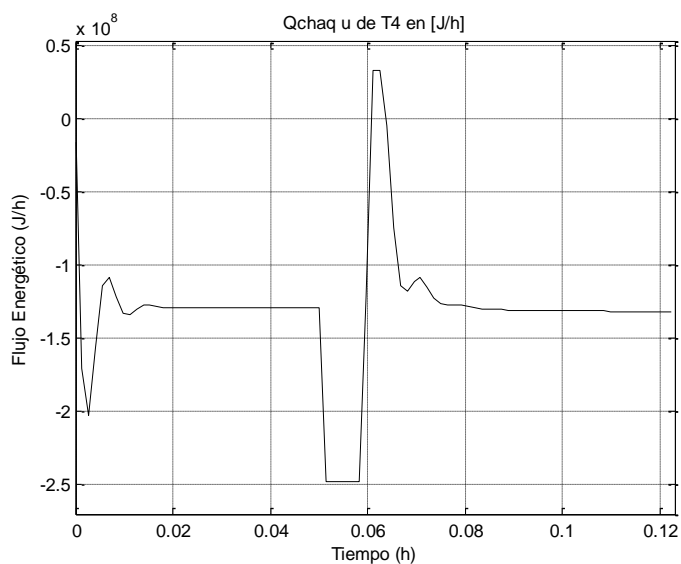


**Figura 4-16:** Concentraciones de los componentes a la salida del reactor R01.

En la Figura 4-17 se esquematiza la respuesta de la temperatura del reactor, para una tasa de retiro de calor (acción de control), definida por el controlador PID, representada en la Figura 4-18. Se observa que la respuesta de la temperatura del reactor tiene un sobre impulso de 34 a 36°C, para lo cual la chaqueta pasa de retirar  $1,3 \times 10^8$  J/h a  $2,5 \times 10^8$  J/h. Luego la variable retorna a su punto de ajuste. La variación inicial que presenta la gráfica en la Figura 4-18 se debe a que el punto inicial no corresponde exactamente al punto de equilibrio. Se observa que en cuanto se presenta la perturbación ocurre una saturación de la acción de control, lo cual hace que se presente la desviación de la variable controlada.



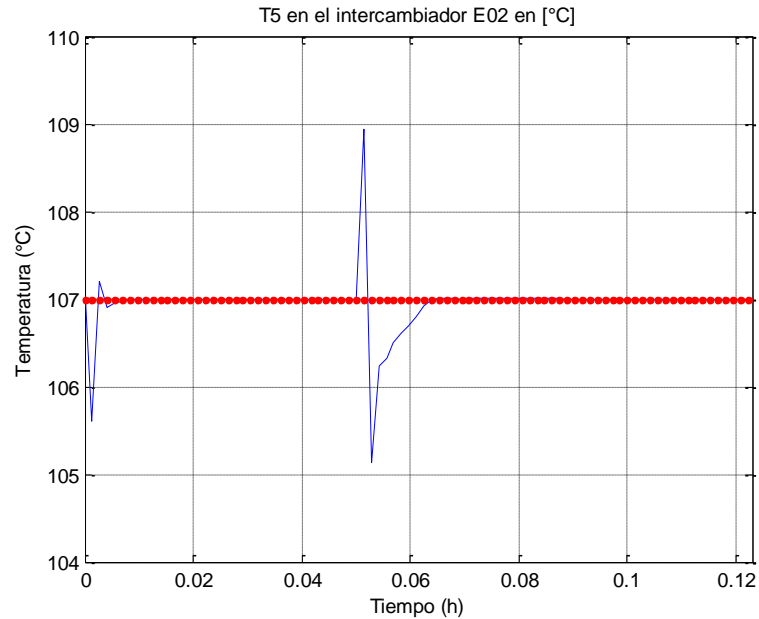
**Figura 4-17:** Temperatura del reactor R01.



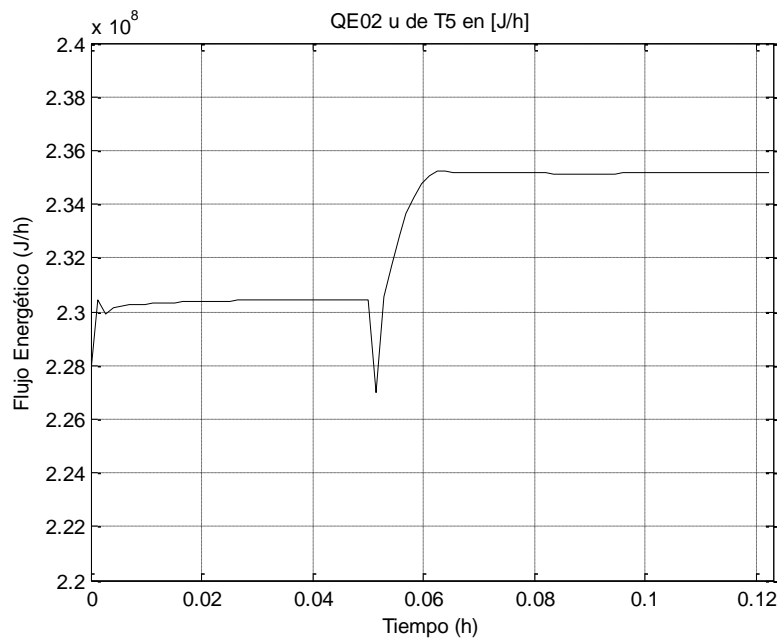
**Figura 4-18:** Flujo energético requerido en el reactor R01.

En la Figura 4-19 se muestra la temperatura de salida del intercambiador de calor E02, el cual precalienta la mezcla líquida antes de ser pasada por la válvula flash. La acción de control para dicha variable se muestra en la Figura 4-20. Se observa que con la perturbación la temperatura pasa de 105°C a 109°C antes de retornar a su estado estacionario. Para lograr controlar dicha temperatura el flujo energético debe elevarse de

$2,3 \times 10^8$  J/h a  $2,355 \times 10^8$  J/h aproximadamente. El descenso observado al principio de la curva se debe a que el punto inicial no corresponde exactamente al punto de equilibrio, tal como se explicó previamente.



**Figura 4-19:** Temperatura a la salida del intercambiador E02.



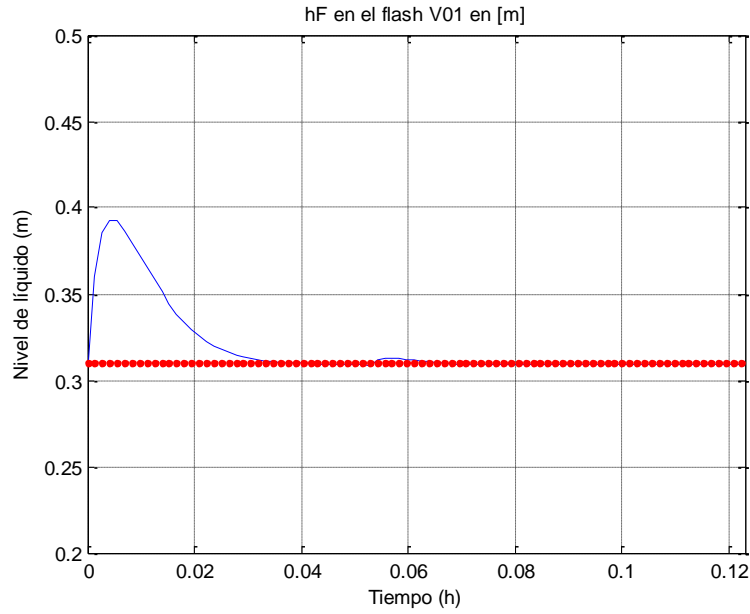
**Figura 4-20:** Flujo energético requerido en el intercambiador E02.

En la Figura 4-21 se puede observar el nivel de líquido en el tanque flash. El flujo de salida del flash ( $F_6$ ) actúa como acción de control, lo cual se muestra en la Figura 4-22. En la Figura 4-21 se observa una desviación del punto inicial, incluso en este punto se satura la acción de control. Como consecuencia, en el flujo volumétrico se presenta una saturación que se detecta por un desplazamiento horizontal de dicho flujo volumétrico frente al tiempo. Al realizarse la perturbación, el flujo volumétrico de líquido a la salida del tanque flash pasa de  $3,6 \text{ m}^3/\text{h}$  a  $3,8 \text{ m}^3/\text{h}$  aproximadamente para asegurar que la altura de líquido en el tanque flash permanezca en  $0,3\text{m}$ . Después de la perturbación la variación en el nivel del líquido es mínima y regresa a su estado estacionario inicial.

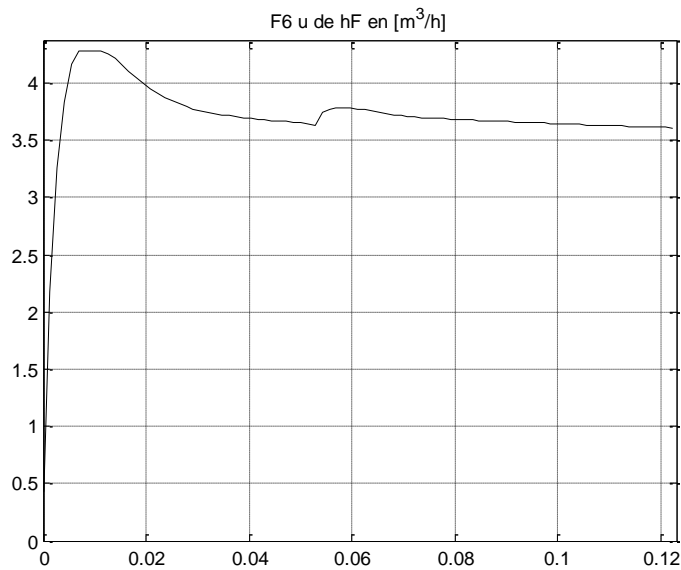
En la Figura 4-23 se representan las concentraciones de salida de todos los componentes, tanto por la corriente de vapor (7) como por la corriente líquida (6). En estas variables también se refleja el hecho de que el punto inicial no corresponda exactamente con el punto de equilibrio, excepto en la concentración de agua en la corriente 7, que parte de un estado estacionario, presenta un sobreimpulso de  $0,16$  a  $0,15 \text{ kmol}/\text{m}^3$  después de la perturbación y retorna al estado estacionario inicial y la concentración de ácido sulfúrico, que antes y después de la perturbación, en la corriente 6, permanece en cero. Al realizarse la perturbación, en la corriente 7 (salida de vapor) se observa que la concentración de óxido de propileno pasa de  $3,5$  a  $3 \text{ kmol}/\text{m}^3$ , la de propilenglicol de  $1,9$  a  $1,8 \text{ kmol}/\text{m}^3$ , mientras la de agua casi no varía. En la corriente 6, al perturbarse el sistema, la concentración de propilenglicol pasa de  $0,2$  a  $0,16 \text{ kmol}/\text{m}^3$ , la de agua de  $44,8$  a  $44 \text{ kmol}/\text{m}^3$ , la de propilenglicol de  $1,8$  a  $1,9 \text{ kmol}/\text{m}^3$ , mientras la concentración de ácido sulfúrico pasa de  $0,95$  a  $1,35 \text{ kmol}/\text{m}^3$  aproximadamente, ninguna de ellas parte de un estado estacionario ni regresa después de perturbarse a su estado inicial.

La presión en el lado del vapor o presión de operación en el tanque flash se muestra en la Figura 4-24. Si bien hay un error de estado estacionario, la presión se logra mantener cerca de su punto de ajuste. La respectiva acción de control  $F_7$  se muestra en la Figura 4-25. La variación inicial, también se debe a que el punto inicial no corresponde exactamente al punto de equilibrio. Al perturbarse el sistema la presión del vapor en el tanque "flash" cambia de  $1,24 \text{ atm}$  a  $1,4 \text{ atm}$  hasta volver a su estado estacionario. Esta variable es controlada por la acción del flujo volumétrico de vapor a la salida del tanque *flash*. En la Figura 4-25 es evidente que el error numérico de no tener con suficiente

precisión el estado estacionario de las variables, se propaga en la simulación de la planta completa. Como ya se mencionó, esto se debe a que la realimentación de masa y energía arrastra dicho error numérico provocando su acumulación.

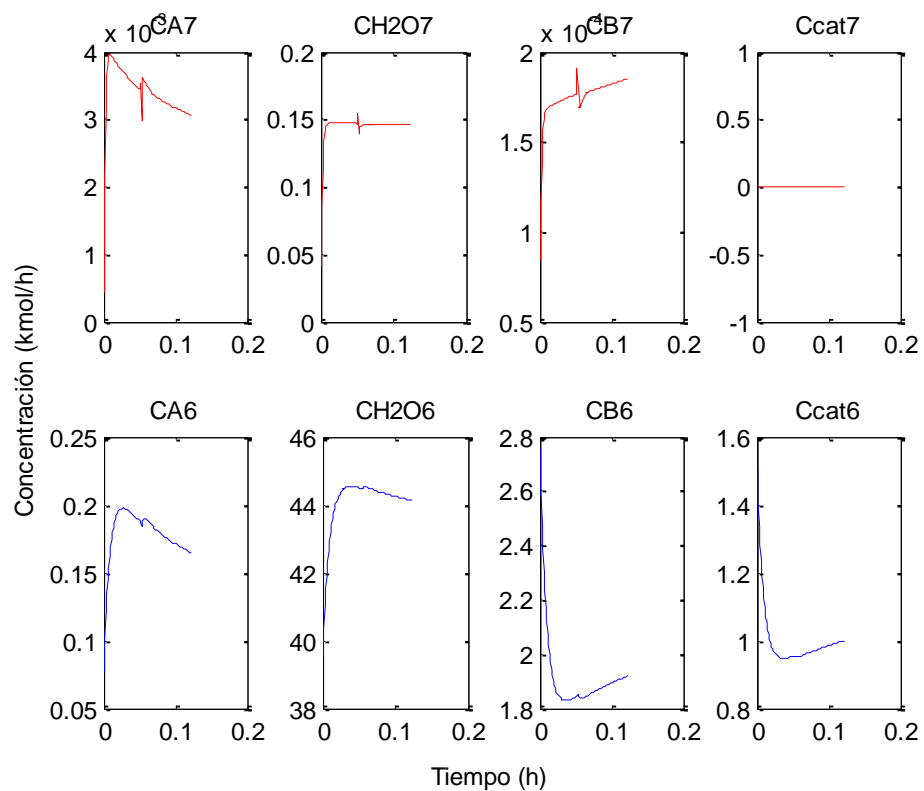


**Figura 4-21:** Nivel de líquido en el tanque flash V01.

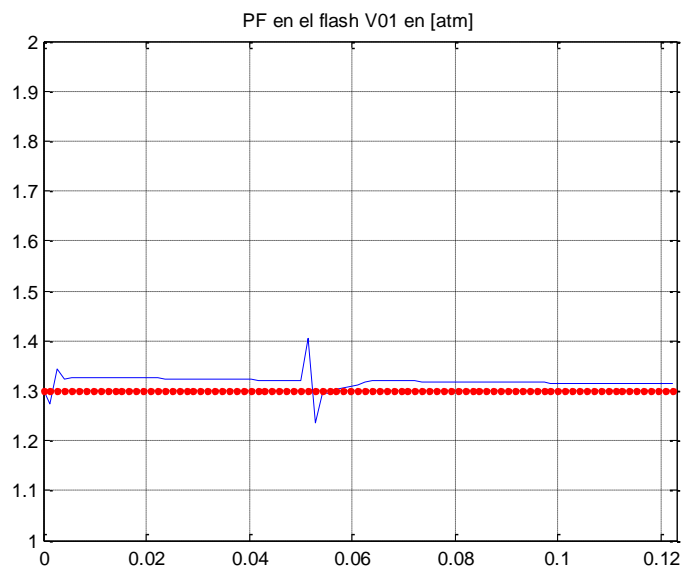


**Figura 4-22:** Flujo volumétrico de líquido a la salida del tanque flash V01.

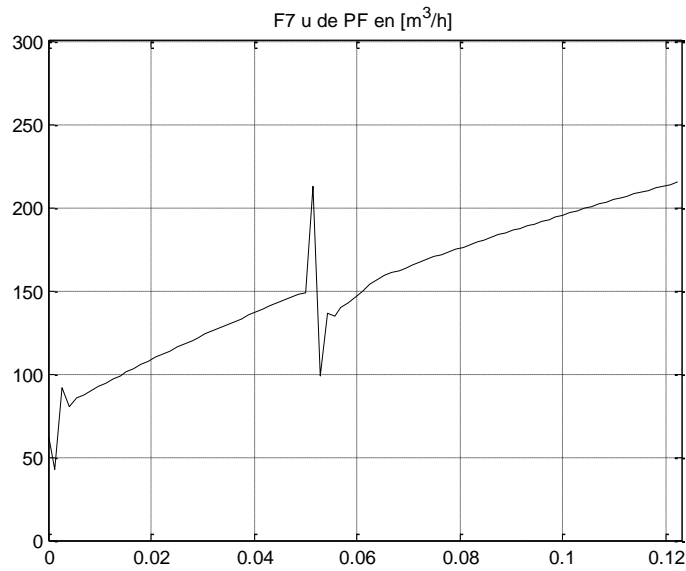




**Figura 4-23:** Concentraciones de los componentes en las salidas del tanque flash V01.

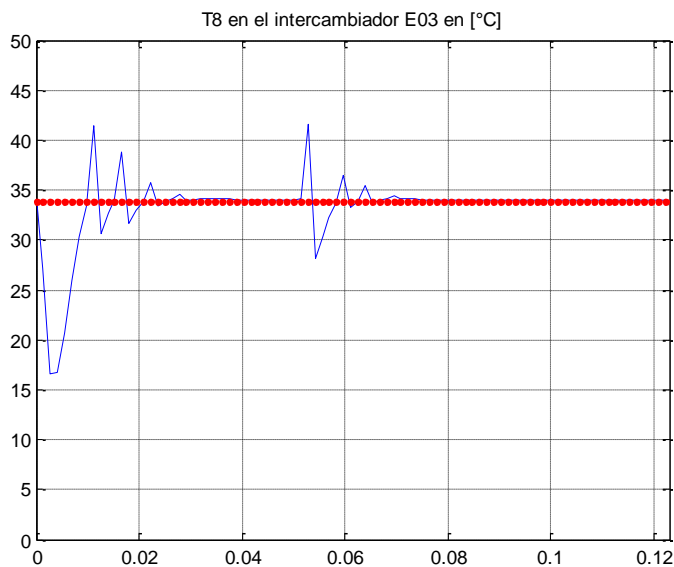


**Figura 4-24:** Presión en el tanque flash V01.

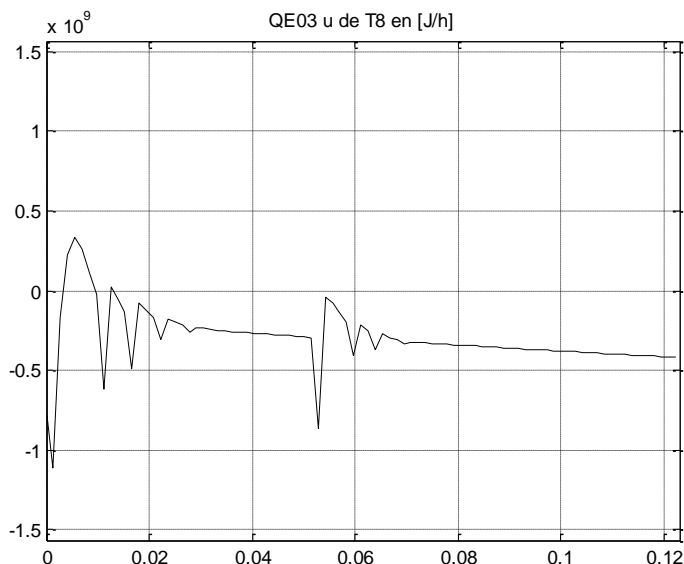


**Figura 4-25:** Flujo volumétrico de vapor a la salida del tanque flash V01.

Finalmente, en la Figura 4-26 se muestra la respuesta de la temperatura de la mezcla una vez se condensa en el intercambiador E03. La respectiva acción de control se muestra en la Figura 4-27. Nuevamente se hace evidente que el error numérico de no tener con suficiente precisión el estado estacionario de las variables se propaga en la simulación de la planta completa.



**Figura 4-26:** Temperatura a la salida del intercambiador E03.



**Figura 4-27:** Flujo energético requerido en el intercambiador E03.

En la Tabla 4-5 se establece una comparación del comportamiento de las variables en lazo abierto y en lazo cerrado. En general se observa que en lazo cerrado el sobreimpulso es mayor, sin embargo, la mayoría de las variables vuelven a su estado estacionario inicial, excepto la presión en el tanque flash y la temperatura de la mezcla una vez se condensa en el intercambiador E03, esto como consecuencia del error numérico al realizar la simulación, el cual, como ya se comentó, desplaza el punto de equilibrio inicial. En cambio, en lazo abierto, aunque los sobreimpulsos sean menores, las variables no regresan al estado estacionario, excepto algunas concentraciones. Se observa que la alta sensibilidad persiste en algunas variables, también el efecto fuerte del acoplamiento y la interacción entre variables, sin embargo, se logra el control, incluso con PID. Es claro que esos controladores deberían sintonizarse mejor, pero ese es justamente el reto que deja abierto un Benchmark para control multivariable.

En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** se muestra el diagrama del lazo de control cerrado para el sistema.

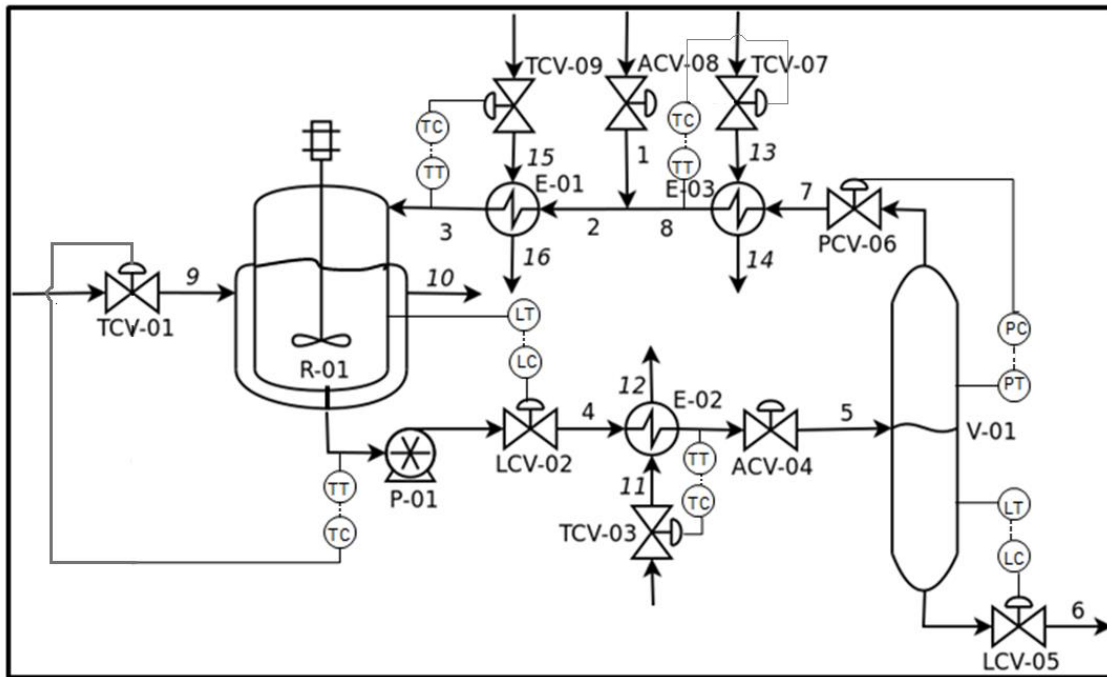


Figura 4-28 Diagrama de Control de Lazo Cerrado para el sistema

Tabla 4-5 Comparación del comportamiento de las variables en lazo abierto y en lazo cerrado.

Equipo	Variable controlada	Comportamiento lazo abierto	Sobreimpulso lazo abierto	Comportamiento lazo cerrado	Sobreimpulso lazo cerrado
E01	Temperatura a la salida	No regresa al (E.E.) estado estacionario	0.12°C	Vuelve a su estado estacionario	0.2°C
R01	Nivel	No hay E.E., inicial. Al perturbar no regresa al punto inicial	Indeterminada	Vuelve a su estado estacionario	Despreciable
R01	Concentraciones componentes	OP: No hay E.E., Inicial. Al perturbar no regresa al punto inicial. H <sub>2</sub> O, PG, H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> Vuelven a su E.E., inicial	OP: 0.08 kmol/m <sup>3</sup> , H <sub>2</sub> O: 3 kmol/m <sup>3</sup> , PG: 0.11 kmol/m <sup>3</sup>	OP no tiene E.E., inicial. Al perturbar no regresa al punto inicial H <sub>2</sub> O, PG, H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> Vuelven a su E.E., inicial	OP: 0.09 kmol/m <sup>3</sup> , H <sub>2</sub> O: 2.9 kmol/m <sup>3</sup> , PG: 0.056 kmol/m <sup>3</sup>

<b>R01</b>	Temperatura	No hay E.E., inicial. Al perturbar no regresa al punto inicial	1.5°C	Vuelven a su E.E., inicial	2°C
<b>E02</b>	Temperatura	No hay E.E., inicial. Al perturbar no regresa al punto inicial	2.2°C	Vuelven a su E.E., inicial	4°C
<b>V01</b>	Nivel		2.6°C	Vuelven a su E.E., inicial	0.07m
<b>V01</b>	Presión	No hay E.E., inicial. Al perturbar no regresa al punto inicial	0.09 atm	Error de E.E., sin embargo, la presión se mantiene cerca del punto de ajuste.	0.19 atm
<b>E03</b>	Temperatura	No hay E.E., inicial. Al perturbar no regresa al punto inicial	19°C	Error de E.E., sin embargo, la temperatura de la mezcla se mantiene cerca del punto de ajuste.	13°C

## 5 CONCLUSIONES

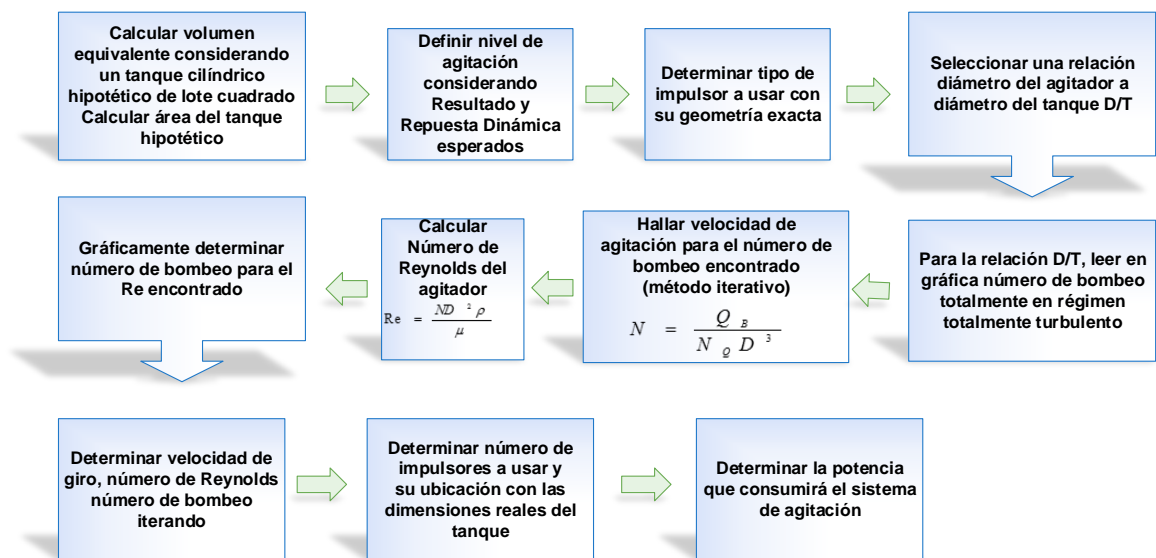
Aunque varios autores proponen PdeR para los procesos químicos, es importante cuestionar su pertinencia frente a los ítems que los caracterizan según Prett and Morari (1987) y Bupp, Bernstein and Coppola (1985), tales como sencillez en la formulación matemática, fidelidad en la reproducción de características de un mismo problema industrial, autosuficiencia al contar con la información suficiente para plantear un modelo preciso pero de bajo costo computacional, claridad en los mecanismos que participan del proceso y fácil de escalar.

A partir de la simulación se observa que el Problema de Referencia planteado facilita la evaluación de sistemas de control, con la ventaja, frente a otros diseños de planta (Calderón, 2009, Moscoso, 2013), de representar con fidelidad una situación industrial como lo es un sistema acoplado reactor-separación-reciclo, sin limitarse a determinados puntos de operación, sino teniendo en cuenta las verdaderas variaciones a las cuales está sujeto dicho sistema.

Al realizar la simulación se aprecia que cuando el sistema está en lazo abierto, al ser perturbado el sistema, las variables no regresan al estado estacionario, en cambio, al evaluar en lazo cerrado con control PID, aunque los sobreimpulsos son mayores, las variables regresan a sus estado estacionario. Se observa que la alta sensibilidad persiste en algunas variables, también el efecto fuerte del acoplamiento y la interacción entre variables, sin embargo, se logra el control, incluso con PID. Es claro que esos controladores deberían sintonizarse mejor, pero ese es justamente el reto que deja abierto un Benchmark para control multivariable.

## A. Anexo: Diseño del sistema de agitación para el reactor

Con el fin de asegurar una transferencia de calor y masa eficientes en el reactor de manera que se alcance un rendimiento adecuado de la hidrólisis del OP para obtener PG, se diseñó un sistema de agitación siguiendo el procedimiento sugerido por R.W. Hicks, J.R. Morton y J.G. Fenic (Hicks et al., 1976), que se esquematiza en la Figura A-1.



**Figura A-1** Procedimiento de diseño del sistema de agitación (Hicks et al., 1976).

El procedimiento de diseño aplicado es el siguiente:

1. *Cálculo del volumen equivalente considerando un tanque cilíndrico hipotético tipo lote cuadrado.* Se tiene un volumen real a agitar de  $1,48\text{m}^3$  en un tanque de  $0,98\text{m}$  de diámetro y  $2,94\text{m}$  de alto, en el cual el líquido alcanza una altura de  $1,96\text{m}$ . De ahí que el tanque cilíndrico hipotético de lote cuadrado tenga una altura y un diámetro de  $1,24\text{m}$ .
2. *Área del tanque hipotético de lote cuadrado.* El tanque cilíndrico hipotético de lote cuadrado tendrá un área transversal de  $1,21\text{m}^2$ .
3. *Resultado y respuesta dinámica esperados para la agitación.* Se asume que las propiedades de la mezcla son las del agua, ya que esta se encuentra en un

porcentaje muy alto respecto a los otros componentes en la solución reactiva, como se evidencia al revisar las fracciones molares de los componentes a la entrada del reactor:  $x_{n-OP} = 0.0385$ ,  $x_{n-PG} = 0.00093$  y  $x_{n-H_2SO_4} = 0.017$ . El reactor será agitado con el fin de asegurar la homogeneidad de la mezcla líquida y asegurar una transferencia de masa eficiente. También se requiere una adecuada transferencia de calor que permita que la chaqueta de enfriamiento asegure que la hidrólisis de OP, la cual es exotérmica, ocurra a la temperatura de diseño: 34°C. Como la operación en el reactor es crítica se requiere una alta velocidad de fluido. Se elige entonces un nivel 7 de agitación (Hicks et al., 1976), es decir una velocidad de bulbo de 0.7ft/s ( $v_B = 0,7ft/s$ ).

4. *Seleccionar el tipo de agitador adecuado.* Como el fluido tiene una viscosidad baja (inferior a 100cp) se propone un impulsor tipo turbina, por tener un consumo de energía moderado y considerando que cuando se diseña apropiadamente tiende a hacer la mezcla casi instantánea. Su desventaja es su estructura que hace más difícil su limpieza y su costo inicial que por lo general es más alto, (Perry, 1974). Se elige, entonces, un impulsor de turbina de seis (6) aspas por ser, además de lo mencionado previamente, el más utilizado en procesos industriales.
5. *Determinación de la velocidad de giro de los impulsores instalados.* Con el área del tanque hipotético y la velocidad de bulbo correspondiente al nivel 7 se obtuvo una capacidad de bombeo requerida de 0,2582m<sup>3</sup>/s, valor que se mantiene fijo durante todo el procedimiento de diseño del agitador, ya que es la mínima capacidad de bombeo requerida para lograr la escala de agitación seleccionada. Considerando que la literatura recomienda una relación diámetro del agitador al diámetro del tanque hipotético entre 0,2 y 0,6 se elige un valor de 0.33, obteniéndose un diámetro del impulsor de 0,4092m.
6. En la gráfica de número de bombeo  $N_Q$  en función del número de Reynolds (Figura 10.7 de Hicks et al., 1976), se lee el número de bombeo para la relación diámetro del agitador al diámetro del tanque hipotético dado previamente, y considerando régimen totalmente turbulento con el fin de iniciar las iteraciones que permitan determinar la velocidad de giro. Se inicia, entonces, con un número de bombeo de 0,74 que



corresponde a un Reynolds de 20.000, a partir del cual la gráfica ya no cambia. El método converge cuando el número de Reynolds es de 1200, el número de bombeo es 0,7 y la velocidad del agitador es 322,8 rpm (5,38 rps).

7. *Determinación del diámetro final del impulsor.* Como se obtuvo un número de Reynolds superior a 700, el factor de corrección por viscosidad es igual a 1,0. Se obtiene, entonces, un impulsor de 0,4092m (16,11 in) de diámetro.
8. *Determinación del número de impulsores a usar y su ubicación.* Como la viscosidad de la mezcla es inferior a 25.000 cP y la relación entre la altura y el diámetro del tanque se encuentra entre 1.4 y 2.1 se usan dos (2) impulsores. El impulsor inferior se ubica a una altura correspondiente a la tercera parte del diámetro, es decir a 0,33m del fondo; el impulsor superior se ubica a una altura igual a las dos terceras partes de la altura total del líquido, es decir, a 1,31m del fondo.
9. *Determinación de la potencia que consumirá el sistema de agitación.* Se obtuvo un requerimiento de potencia de 3,84HP por lo cual se elige un motor de 5HP, puesto que comercialmente no existen motores con la potencia exacta requerida.

Finaliza así el diseño del sistema de agitación. En la Tabla A-1 se presentan sus especificaciones.

**Tabla A-1** Especificaciones del sistema de agitación.

<b>HOJA DE ESPECIFICACIONES SISTEMA DE AGITACIÓN</b>	
<b>Volumen a agitar</b>	1,48 m <sup>3</sup>
<b>Diámetro del tanque</b>	0,98m
<b>Altura del líquido</b>	2,94m
<b>Respuesta dinámica esperada</b>	Homogeneidad de la mezcla Transferencia de masa y calor eficientes
<b>Nivel de agitación</b>	7 (valor velocidad de bulto: 0,7 ft/s)
<b>Tipo de agitador</b>	Impulsor de turbina de seis aspas
<b>Capacidad de bombeo requerida</b>	0,2582 m <sup>3</sup> /s
<b>Diámetro de cada impulsor</b>	0,4092m
<b>Velocidad de giro de impulsores</b>	323 pm
<b>Número de impulsores</b>	Dos (2)
<b>Altura primer impulsor</b>	Ubicado a 0,33 m del fondo
<b>Altura segundo impulsor</b>	Ubicado a 1,31 m del fondo
<b>Potencia requerida</b>	3,84 HP
<b>Motor</b>	5,0 HP

## B. Anexo: Diseño de la chaqueta del reactor

Únicamente se realizó el diseño mecánico básico de la chaqueta puesto que a través de ella se provee al reactor de un fluido de servicio que se asume realiza el enfriamiento eficientemente. Considerando que la hidrólisis del OP es exotérmica, se requiere dotar al reactor de una chaqueta que asegure que la masa reactiva dentro del tanque permanezca siempre a 34°C, con el fin de que la reacción ocurra a las mismas condiciones. Si el reactor enchaquetado opera en régimen estacionario, es decir, la entrada y salida de materiales es constante, como en el Problema de Referencia (PdeR) que se plantea en la presente investigación, el dato del coeficiente global de transferencia de calor (U) puede incorporarse a la ecuación del flujo de calor:

$$Q = U.A.\Delta T \quad (33)$$

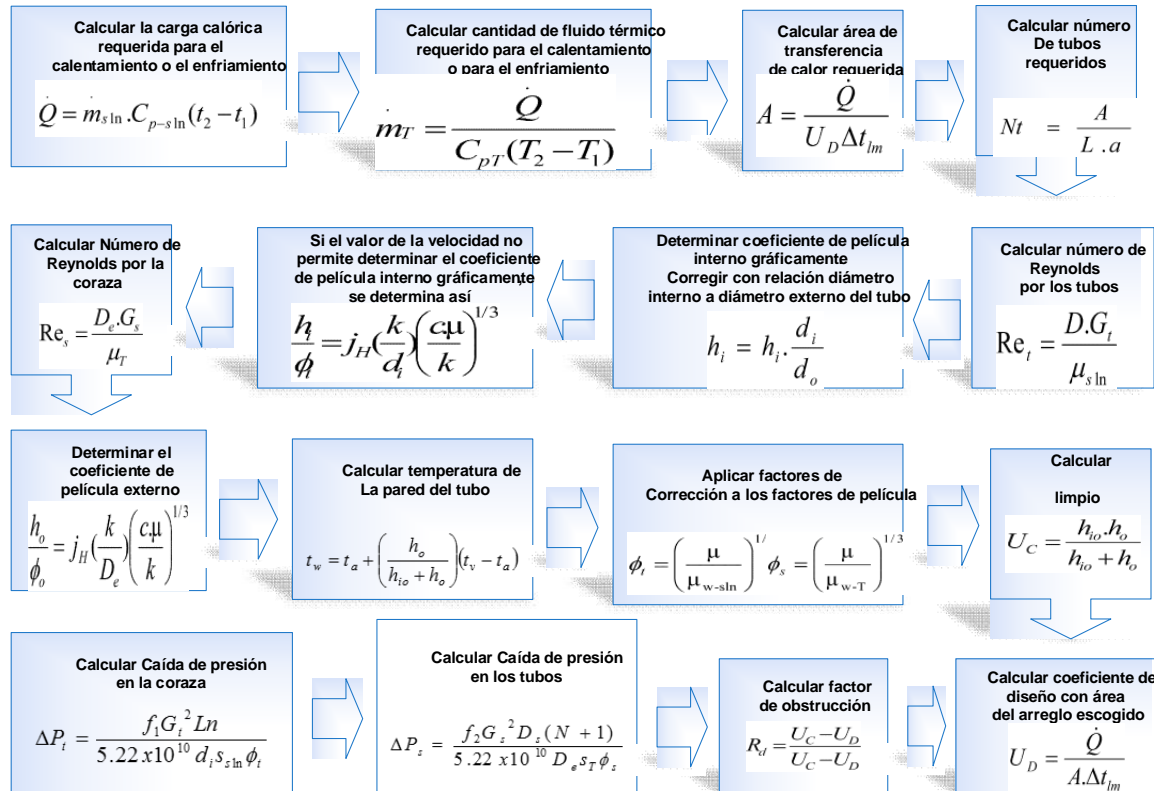
De acuerdo con la bibliografía, para soluciones acuosas cuyas propiedades sean próximas a las del agua en un recipiente enchaquetado sin agitación mecánica, el coeficiente total limpio se encuentra entre 75 y 80 Btu/(h\*ft<sup>2</sup>) (Kern, 1999). Se tomará un valor de U=80 Btu/(h\*ft<sup>2</sup>) de esta recomendación, sabiendo que el tanque real es agitado, lo que asegura incluso un valor mayor de U. Eso generará un diseño conservativo para la transferencia de calor de la masa reactiva a la chaqueta.

El calor de reacción de la hidrólisis de OP es igual a  $-9,0712 \times 10^4$  J/mol y como se sabe que reaccionan 182,2 mol/h de OP, se requiere retirar  $1,652 \times 10^7$  J/h. Si a la chaqueta del reactor se ingresa agua a 25°C y se retira a 32°C, dado que la capacidad calorífica del agua, a una temperatura promedio de 28.5°C es 4,1786 J/(g\*°C), para el enfriamiento se requiere circular 850,2 kg/h de agua.

Para obtener el flujo másico deseado a través de la chaqueta, de manera que se transfiera el calor con una caída de presión límite, es necesario dividir la chaqueta en un número de zonas paralelas o multipasos. Suponiendo separaciones entre deflectores de 5cm y con la altura útil de los deflectores se requiere utilizar 35 baffles que rodeen el reactor, cada uno con una altura de 2,205 in y un ancho de 3 in (es decir con un área de flujo para el agua de 0,004267m<sup>2</sup>), a través de los cuales circula el agua de enfriamiento a 0,055m/s. Con esto se obtiene un coeficiente de transferencia de calor global (U) adecuado.

### C. Anexo: Diseño intercambiador de calor que calienta la mezcla que ingresará al reactor.

El intercambiador de calor que calienta la mezcla que se alimentará al reactor se diseñó con base en Kern (1999), bajo el procedimiento presentado en la Figura C-1



**Figura C-1** Procedimiento de diseño de los intercambiadores de calor.

La aplicación del procedimiento de diseño presentado en Figura C-1 es la siguiente.

1. *Cálculo de la carga calórica requerida para el calentamiento.* Considerando que antes de ingresar al reactor se tiene una mezcla de 37,16 kmol/h compuesta por OP, agua, PG y ácido sulfúrico con fracciones molares de 0,0385, 0,943, 0,0093 y 0,017 respectivamente a 27,6°C y su temperatura se debe elevar a 34°C con el fin de garantizar que en el reactor se lleve a cabo la reacción a las condiciones de diseño, se requiere diseñar un intercambiador de calor que asegure la transferencia de una carga calórica de 5593 J/s.

2. *Cálculo de la cantidad de agua requerida para el calentamiento.* Considerando que se debe asegurar una carga calórica de 5593 J/s utilizando agua que ingrese al reactor a 80°C y salga a 60°C y que la capacidad calorífica del agua a una temperatura promedio de 70°C es 863,1 J/(kg\*°C), se requiere 0,067 kg/s de agua.
3. *Cálculo del área de transferencia de calor y del número de tubos requeridos.* Si se utilizan tubos con un diámetro nominal de 1/8 in, cédula 10S de 10ft de largo, los cuales tienen un diámetro interno de 0,307 in (0,0078m) y un diámetro externo de 0,405 in (0,0103m), es decir que su área superficial lineal es de 0,106ft<sup>2</sup>/(ft\*in), para cumplir con una área de transferencia de calor requerida de 0,148 m<sup>2</sup> y un arreglo de 3 tubos, en arreglo triangular con Pitch de 0,6075 in (0,0154m) en coraza de un paso con un diámetro interno de 1,687 in (0,0428 m) y diámetro externo de 2,375 in (0,0603 m), es decir que escogemos como coraza un tubo con tamaño nominal de 2 in, cédula 160.
4. *Cálculo del número de Reynolds por el lado de los tubos.* Considerando que para tubos con tamaño nominal de 1/8 in, cédula 10S el área de flujo a través un tubo es de 0.074 in<sup>2</sup> (4,77x10<sup>-5</sup>m<sup>2</sup>), el área total de flujo a través de los tres (3) tubos, con un solo paso es de 0,0015ft<sup>2</sup> (1,39x10<sup>-4</sup>m<sup>2</sup>) y la velocidad másica por área es 1512 kg/(s\*m<sup>2</sup>), por lo tanto, el número de Reynolds a través de los tubos es 13839 y la velocidad del fluido a través de los mismos es de 4,95ft/s (1,5m/s). Este Reynolds está muy cercano al completamente turbulento que empieza en 14.000.
5. *Determinación del factor del coeficiente de película interno.* A partir de la Figura 25 del apéndice de Kern (1999), con la velocidad de la mezcla a través de los tubos y aplicando la corrección a partir de la relación entre el diámetro interno y externo de los tubos, se encuentra que el coeficiente de película interno a través de los tubos es de 5541 J/(s\*m<sup>2</sup>\*°C).
6. *Cálculo de la caída de presión en los tubos.* Para un Reynolds de 13839 por los tubos, de la Figura 26 del apéndice de Kern (1999), se obtiene un factor de

fricción de 0,00024. Con ese valor, la velocidad másica por área a través de los tubos, la longitud de los tubos, que hay un solo paso, el diámetro interno de cada tubo, la gravedad específica de la solución (la cual se aproxima a 1,0) y que el factor de corrección de pared en los tubos es 1,0 se obtiene una caída de presión a través de los tubos igual a 2,22 lb/in<sup>2</sup>.

7. Con la velocidad másica por área a través de los tubos y a partir de la Figura 27 de Kern (1994), se obtiene un valor de 0,13 para el factor  $v^2/(2 \cdot g)$  en lb/in<sup>2</sup>, así la caída de presión residual en los tubos es igual a 0,52 lb/in<sup>2</sup> y la caída de presión total en los mismos asciende a 2,75 lb/in<sup>2</sup>.
8. *Cálculo del número de Reynolds por el lado de la coraza.* Teniendo en cuenta que el diámetro interno de la coraza es 1,687 in (0,048m) el *pitch* es de 0.6075in (0,0154m), el espacio entre los tubos en la coraza es de 0,2025 in (0.0051m) y los baffles distan uno de otro 12 in (0,3048m), el área de flujo por la coraza es de 0,0197 ft<sup>2</sup> (0,0018m<sup>2</sup>)y el diámetro equivalente de la misma es 0,0494 ft (0,0151m). Así, la velocidad másica por área del agua de calentamiento a través de la coraza es de 11105 lb/(h\*ft<sup>2</sup>) (15,1kg/s\*m<sup>2</sup>) y se alcanza un Reynolds de 578.
9. *Determinación del factor del coeficiente de película externo.* A partir de la Figura 28 del apéndice de Kern (1999) y con el número de Reynolds a través de la coraza se obtiene un factor de la transferencia de calor  $j_H$  igual a 73,8 J/(s\*m<sup>2</sup>\*°C). Considerando que a 70°C (temperatura promedio del agua de calentamiento), la conductividad, la viscosidad y el calor específico del agua son respectivamente 7,26 J/(s\*m<sup>2</sup>\*°C\*m), 4x10-4 kg/(m\*s) y 906,2 J/(kg\*°C) unidades, el coeficiente de película externo es igual a 800,5 J/(s\*m<sup>2</sup>\*°C).
10. Considerando que las propiedades de la mezcla se asumieron próximas a las del agua pura, debido a su composición y que por la coraza circula el agua de calentamiento, no se hace necesario calcular la temperatura de la pared y se asume que el factor de corrección por viscosidades  $\left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0.14}$  es próximo a uno.
11. *Cálculo de los coeficientes de transferencia de calor limpio y de diseño y del factor de obstrucción.* Como se obtuvo un coeficiente de película interno de 5541

$J/(s \cdot m^2 \cdot ^\circ C)$  y un coeficiente de película externo de  $73,8 J/(s \cdot m^2 \cdot ^\circ C)$  el coeficiente de transferencia de calor limpio es igual a  $698 J/(s \cdot m^2 \cdot ^\circ C)$ .

Teniendo en cuenta que el área superficial lineal de los tubos es igual a  $0,106 ft^2/(ft \cdot in)$ , que su longitud es  $10 ft$  ( $3,048 m$ ) y que se dispondrá de un banco de 3 tubos, el área real de transferencia de calor es igual a  $0,295 m^2$  y el coeficiente total de diseño es igual a  $567,6 J/(s \cdot m^2 \cdot ^\circ C)$ . Se obtiene un factor de ensuciamiento de  $3,35 \times 10^{-4} (s \cdot m^2 \cdot ^\circ C)/J$ .

*12. Caída de presión en la coraza.* Con un Reynolds de 578 por la coraza se obtiene un factor de fricción de 0,0036. Con este valor, considerando la velocidad másica del agua en los tubos la longitud de los tubos, que la coraza tiene un diámetro interno de  $1,687 in$  ( $0,0498 m$ ), su diámetro equivalente es  $0,0494 ft$  ( $0,0151 m$ ) y que es de un solo paso se determina la caída de presión por la coraza que corresponde a  $0,00025 lb/in^2$ .

De ese modo se termina el diseño. En la Tabla C-1 se presenta la hoja de especificaciones del intercambiador.

**Tabla C-1.** Hoja de Especificación Intercambiador de Calor que Precalienta Mezcla Antes de Ingresar al Reactor

<b>INTERCAMBIADOR QUE PRECALIENTA MEZCLA ANTES DE INGRESAR AL REACTOR</b>		
	Lado de los tubos	Lado de la coraza
<b>Fluido circulado</b>	Mezcla agua, OP, PG Y ácido sulfúrico	Agua en estado líquido
<b>Fluido total de entrada</b>	631 Kg/h (37,16 kmol/h)	0,067 kg/s
<b>Estado del fluido</b>	Líquido	Líquido
<b>Composición molar del fluido <math>X_n</math></b>	0.0385 OP, 0.943 agua, 0.0093PG, 0.017 ácido sulfúrico	100% agua líquida
<b>Vapor condensado</b>	Ninguno	Ninguno
<b>Gravedad específica del líquido</b>	1,0 (aprox. agua)	1,0
<b>Viscosidad del líquido</b>	0.43 cp (70.5°C)	0,42 cp (70°)
<b>Calor específico de líquidos</b>	Mezcla 98.06 J/(mol*°K) OP: 167,85 J/(mol*°K) Agua: 75.47 J/(mol*°K) PG: 190.48 J/(mol*K) A. sulfúrico 167.2 J/(mol*°K)	
<b>Temperatura de entrada</b>	27.6°C	80°C
<b>Temperatura de salida</b>	34°C	60°C
<b>Arreglo:</b>	3 tubos	Arreglo triangular
<b>Tamaño nominal</b>	1/8 in, cédula, 10S	2 in, cédula 160
<b>Diámetro interno</b>	0,307 in (0,0078 m)	1,687 in (0,0428m)
<b>Diámetro externo</b>	0,405 in (0,0103 m)	2,375 in (0,0603 m)
<b>Longitud</b>	3,048m (10 ft)	3,048m (10 ft)
<b>Distancia entre bafles</b>	Sin bafles	12 in (0.3048 m) Pitch 0,6075 in (0,0154 m)
<b>Presión de operación</b>	1atm	
<b>Número de pasos</b>	1	1
<b>Velocidad</b>	1.5m/s	
<b>Calor intercambiado</b>	5593 J/s	
<b>Caída de presión</b>	2,75 lb/in <sup>2</sup>	0,00025 lb/in <sup>2</sup>



## D. Anexo: Diseño intercambiador de calor que calienta la mezcla que ingresará al tanque flash

El intercambiador de calor que calienta la mezcla que alimentará al tanque flash se diseñó con base en Kern (1999), siguiendo el mismo procedimiento presentado previamente en la Figura C-1.

1. *Cálculo de la capacidad calorífica requerida para el calentamiento.* Considerando que antes de ingresar al tanque flash se tiene una mezcla de 35.91 kmol/h compuesta por OP, agua, PG y ácido sulfúrico con fracciones molares de 0.057, 0.894, 0.032 y 0.017 respectivamente a 34°C y su temperatura se debe elevar a 107°C con el fin de que ocurra la separación de fases en el tanque *flash*, se requiere diseñar un intercambiador de calor que asegure la transferencia de una carga calórica de 66095 J/s
2. *Cálculo de la cantidad de vapor requerido para el calentamiento.* Considerando que se debe asegurar una carga calórica de 66095 J/s, utilizando vapor de agua a 150°C como fluido de servicio, temperatura a la cual su calor latente es de  $2,114 \times 10^6$  J/kg, se requiere 0,0312 kg/s de vapor de agua.
3. *Cálculo del área de transferencia de calor y del número de tubos requeridos.* Si se utilizan tubos con un tamaño nominal de 1/8 in, cédula 10S de 10ft de largo, los cuales tienen un diámetro interno de 0,307 in (0,0078 m) y un diámetro externo de 0,405 in (0,0103 m), es decir que su área superficial lineal es de  $0,106 \text{ft}^2/(\text{ft} \cdot \text{in})$ , se requiere un área de transferencia de calor de  $8,52 \text{ft}^2$  ( $0,7915 \text{m}^2$ ) y un arreglo de 3 tubos. con tamaño nominal de 1/8 in, cédula 10S de 10ft de largo, en arreglo triangular con Pitch de 0,6075 in (0,0154m) en coraza de un paso con un diámetro interno de 1,687 in (0,0428 m) y diámetro externo de 2,375 in (0,0603m), es decir que escogemos como coraza un tubo con tamaño nominal de 2 in, cédula 160.
4. *Cálculo del número de Reynolds por el lado de los tubos.* Considerando que para tubos con tamaño nominal de 1/8 in, cédula 10S el área de flujo a través un tubo es de  $0,074 \text{in}^2$  ( $4,77 \times 10^{-5} \text{m}^2$ ), el área total de flujo a través de los tres tubos, con un solo paso es de  $0,0015 \text{ft}^2$  ( $1,39 \times 10^{-4} \text{m}^2$ ) y la velocidad másica por área es 1507

$\text{kg}/(\text{s}\cdot\text{m}^2)$ , por lo tanto, el número de Reynolds a través de los tubos es 27264 y la velocidad del fluido a través de los mismos es de 4,93ft/s (1,5m/s).

5. *Determinación del factor del coeficiente de película interno.* A partir de la Figura 25 del apéndice de Kern (1999), con la velocidad de la mezcla a través de los tubos y aplicando la corrección a partir de la relación entre el diámetro interno y externo de los tubos, se encuentra que el coeficiente de película interno a través de los tubos es de  $8970 \text{ J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$ . A partir de la Figura 24 del apéndice de Kern y con el número de Reynolds a través de los tubos se obtiene un factor de la transferencia de calor  $j_H$  igual a  $510,9 \text{ J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$ . Considerando que a  $70,5^\circ\text{C}$  (temperatura promedio de la mezcla a calentar), la conductividad, la viscosidad y el calor específico del agua son respectivamente  $7,34 \text{ J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot^\circ\text{C}\cdot\text{m})$ ,  $4,31\times 10^{-4} \text{ kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$  y  $906,2 \text{ J}/(\text{kg}\cdot^\circ\text{C})$ , el coeficiente de película externo es igual a  $8400 \text{ J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$ , valor aproximado al encontrado gráficamente. Ver corrección de este factor más adelante.
6. *Cálculo del número de Reynolds por el lado de la coraza.* El área de flujo del vapor se determina sustrayendo el área de los tubos al área de la coraza obteniéndose  $0,0013 \text{ m}^2$ . Así, la velocidad másica por área del vapor es  $24,08 \text{ kg}/(\text{s}\cdot\text{m}^2)$ . Se obtiene un diámetro equivalente para a coraza de  $0,0494 \text{ ft}$  ( $0,0151\text{m}$ ) considerando que los tubos se disponen en un arreglo triangular con un pitch de  $0,6075 \text{ in}$  ( $0,0154 \text{ m}$ ), alcanzándose por la coraza un Reynolds de 25493.
7. *Determinación del factor del coeficiente de película externo.* Ya que por la coraza pasa vapor, el coeficiente de película externo puede considerarse igual a  $8516 \text{ J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$ , además, si por la coraza circula vapor y por los tubos la mezcla, que tiene propiedades similares al agua líquida, se hace necesario determinar la temperatura de la pared  $t_w$  la cual tiene un valor próximo a  $230^\circ\text{F}$  ( $110^\circ\text{C}$ ). Así, el factor de corrección  $\left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0.14}$  es igual a 1,098 y el coeficiente de película interno corregido es igual a  $9220 \text{ J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$ .
8. *Cálculo de los coeficientes de transferencia de calor limpio y de diseño y del factor de obstrucción.* Como se obtuvo un coeficiente de película interno de 9220

y el coeficiente de película externo es igual a  $8516 \text{ J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$ , el coeficiente de transferencia de calor limpio es igual a  $4428 \text{ J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$ . Teniendo en cuenta que el área superficial lineal de los tubos es igual a  $0,106\text{ft}^2/(\text{ft}\cdot\text{in})$ , que su longitud es 10ft y que se dispondrá de un banco de 3 tubos, el área real de transferencia de calor es igual a  $0,2954 \text{ m}^2$  el coeficiente total de diseño es igual a  $3043 \text{ J}/(\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$ . Se obtiene un factor de obstrucción de  $10216 (\text{s}\cdot\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})/\text{J}$ .

9. *Caída de presión en la coraza.* Con un Reynolds de 25493 por la coraza se obtiene un factor de fricción de 0,0017. Con este valor, considerando la velocidad másica del agua en los tubos la longitud de los tubos, que la coraza tiene un diámetro equivalente de 0,0151 m, y que es de un solo paso y que la gravedad específica del vapor que pasa por la coraza a  $150^\circ\text{C}$  es igual a  $2,548\times 10^{-3}$  se determina la caída de presión por la coraza que corresponde a  $0,81\text{lb}/\text{in}^2$ .
10. *Caída de presión en los tubos.* Para un Reynolds de 27264 por los tubos, de la Figura 26 del apéndice de Kern (1999), se obtiene un factor de fricción de 0,00021. Con ese valor, la velocidad másica por área a través de los tubos, la longitud de los tubos, que hay un solo paso, el diámetro interno de cada tubo, la gravedad específica de la solución (la cual se aproxima a 1,0) y que el factor de corrección de pared en los tubos es 1,098 se obtiene una caída de presión a través de los tubos igual a  $1,73 \text{ lb}/\text{in}^2$ .
11. Con la velocidad másica por área a través de los tubos y a partir de la Figura 27 de Kern (1994), se obtiene un valor de 0,16 para el factor  $v^2/(2\cdot g)$  en  $\text{lb}/\text{in}^2$ , así la caída de presión residual en los tubos es igual a  $0,64 \text{ lb}/\text{in}^2$  y la caída de presión total en los mismos asciende a  $2,3 \text{ lb}/\text{in}^2$ .

A continuación, en la Tabla D-1, se presentan las especificaciones del intercambiador de calor que precalienta la mezcla antes del tanque flash.

**Tabla D-1** Hoja de Especificación Intercambiador Calor que Calienta la Mezcla que Ingresa al Tanque Flash

<b>INTERCAMBIADOR DE CALOR QUE CALIENTA MEZCLA QUE INGRESA AL TANQUE FLASH</b>		
	Lado de los tubos	Lado de la coraza
<b>Fluido circulado</b>	Mezcla agua, OP, PG Y ácido sulfúrico	Vapor de agua
<b>Fluido total de entrada</b>	776,96 Kg/h (35,96 kmol/h)	0,0312 kg/s
<b>Estado del fluido</b>	Líquido	Vapor
<b>Composición molar del fluido <math>X_n</math></b>	0,057 OP, 0,894 agua, 0,032 PG, 0,017 H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	100% vapor de agua
<b>Vapor condensado</b>	Ninguno	112,54 lb/h
<b>Gravedad específica del líquido</b>	1,0	
<b>Viscosidad</b>	0,43 cP (70,5°C)	0,0142 cp (150°C)
<b>Calor específico de líquidos</b>	Mezcla 98,06 J/(mol*°K) OP: 167,85 J/(mol*°K) Agua: 75,47 J/(mol*°K) PG: 190,48 J/(mol*°K) A. sulfúrico 167,2 J/(mol*°K)	
<b>Temperatura de entrada</b>	34°C	150°C
<b>Temperatura de salida</b>	107°C	150°C
<b>Presión de operación</b>	1atm	
<b>Número de pasos</b>	1	1
<b>Velocidad</b>	64 m/s en fase vapor	
<b>Calor intercambiado</b>	66095 J/s	
<b>Arreglo:</b>	3 tubos	Arreglo triangular Pitch 0,6075 in
<b>Tamaño nominal</b>	1/8 in, cédula, 10S	2 in, cédula 160
<b>Diámetro interno</b>	0,307 in (0,0078 m)	1,687 in (0,0428 m)
<b>Diámetro externo</b>	0,405 in (0,0103 m)	2,375 in (0,0603 m)
<b>Longitud</b>	3,048m (10 ft)	3,048m (10 ft)
<b>Distancia entre bafles</b>	Sin bafles	12 in (0,3048 m)
<b>Caída de presión</b>	2.3 lb/in <sup>2</sup>	0,81 lb/in <sup>2</sup>

## E. Anexo: Diseño del condensador ubicado a la salida del vapor del tanque flash

El condensador a la salida de la corriente de vapor de tanque flash se diseñó con base en Kern (1999), bajo el procedimiento presentado en la Figura E-1.

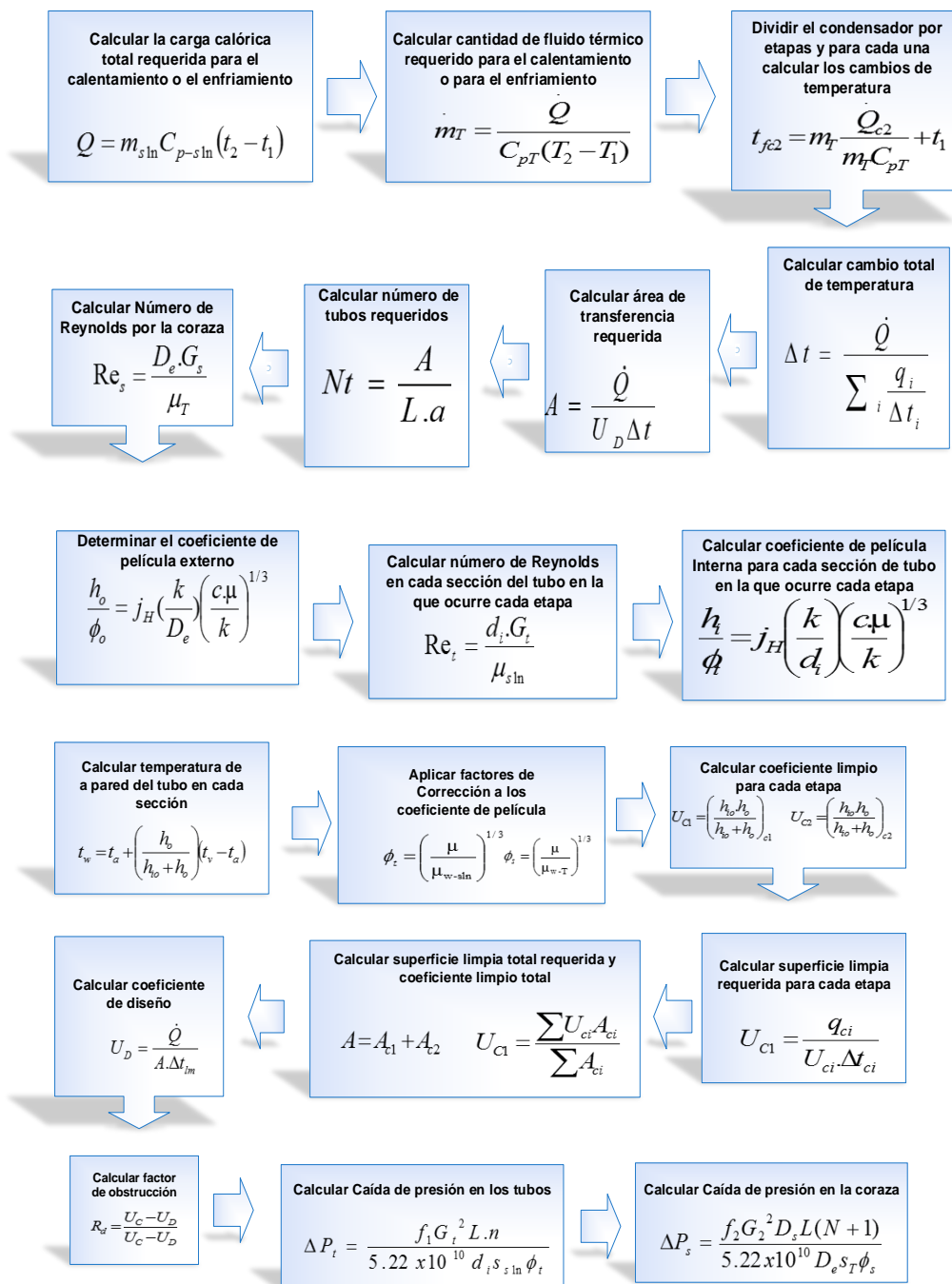


Figura E-1 Procedimiento de diseño del Condensador.

La aplicación del procedimiento de diseño presentado en la Figura E-1 para el condensador ubicado a la salida de la corriente de vapor del tanque *flash* es la siguiente:

1. *Cálculo del requerimiento calorífico necesario para la condensación.* Considerando que en el vapor del tanque *flash* se tiene una mezcla de 17,14 kmol/h compuesta por OP, agua y PG con fracciones molares de 0,0106, 0,9874 y 0,002 respectivamente a 107°C y su temperatura se debe reducir hasta 34°C con el fin de condensar todos sus componentes, se requiere diseñar un intercambiador de calor que permita retirar una carga calórica de 216890 J/s. Se requiere retirar 191980 J/s para subenfriar la mezcla de 107 a 100°C y para condensar el vapor de agua a 100°C. Esto implica suponer que el PG líquido que tiene una temperatura de ebullición de 189°C, se encuentra disuelto en el vapor de agua, debido a que se encuentra en muy baja proporción respecto al mismo. La carga calórica restante que se debe retirar, es decir, 24918 J/s, permite subenfriar la mezcla desde 100°C hasta 34°C y condensar a 34°C el PG presente en la mezcla.
  
2. *Cálculo de la cantidad de agua requerida para la condensación.* Considerando que se debe asegurar una carga calórica de 216890 J/s., utilizando agua que ingrese condensador a 16°C y salga a 32°C y que la capacidad calorífica del agua a una temperatura promedio de 24°C es 863,1 J/(kg\*°C), se requiere 3,25 kg/s de agua.
  
3. *Cálculo del área de transferencia de calor y del número de tubos requeridos.* Si se utilizan tubos con un tamaño nominal de 1/4 in, cédula 10S de 10ft de largo, los cuales tienen un diámetro interno de 0,410 in (0,0104 m) y un diámetro externo de 0,540 in (0,0137 m), es decir que su área superficial lineal es de 0,1414ft<sup>2</sup>/(ft\*in), se requiere un área de transferencia de calor de 4,5 m<sup>2</sup>, por lo cual se utilizará un arreglo de 37 tubos, de manera que el área de transferencia de calor será igual a 4,83 m<sup>2</sup>.

Los tubos se dispondrán en arreglo cuadrado con Pitch de 0,81 in (0,0206 m) en coraza de un paso con un diámetro interno de 6,813 in (0,1731 m) y diámetro externo de 8,625 (0,2191 m) in, es decir que se escoge como coraza un tubo con tamaño nominal de 8 in, cédula 160.

4. *Cálculo del número de Reynolds por el lado de la coraza.* Teniendo en cuenta que el diámetro interno de la coraza es 6,813 in, el pitch es de 0,81 in, el espacio entre los tubos en la coraza es de 0,27 in (0,0069 m) y los baffles distan uno de otro 12 in (0,3048 m), el área de flujo por la coraza es de 0,1893 ft<sup>2</sup> (0,0176 m<sup>2</sup>) y el diámetro equivalente de la misma a un tubo circular es 0,084 ft (0,0256 m). Así, la velocidad másica por área del agua de calentamiento a través de la coraza es de 135805 lb/(h\*ft<sup>2</sup>) (184,6 kg/(s\*m<sup>2</sup>)) y se alcanza un Reynolds de 4834.
5. *Determinación del factor del coeficiente de película externo.* A partir de la Figura 28 del apéndice de Kern (1999) y con el número de Reynolds a través de la coraza se obtiene un factor de la transferencia de calor  $j_H$  igual a 210 J/(s\*m<sup>2</sup>\*°C). Considerando que a 24°C (temperatura promedio del agua de enfriamiento), la conductividad, la viscosidad y el calor específico del agua son respectivamente 652 J/(s\*m<sup>2</sup>\*°C\*m), 9,78x10<sup>-4</sup> kg/(m\*s) y 863,06 J/(kg\*°C) unidades, el coeficiente de película externo es igual a 1652 J/(s\*m<sup>2</sup>\*°C).
6. *Cálculo del número de Reynolds por el lado de los tubos.* Considerando que para tubos con tamaño nominal de 1/4 in, cédula 10S el área de flujo a través un tubo es 8,52x10<sup>-5</sup> m<sup>2</sup>, el área total de flujo a través de los tubos, con un solo paso es de 1,4x10<sup>-4</sup> m<sup>2</sup> y la velocidad másica por área es 28,01 kg/(s\*m<sup>2</sup>), por lo tanto, el número de Reynolds a través de los tubos es 22913.
7. *Factor de corrección del coeficiente de película externo.* Ya que por la coraza circula agua y por los tubos vapor, se hace necesario determinar la temperatura de la pared  $t_w$  ; esta tiene un valor próximo a 147°F (64°C). Así, el factor de corrección  $\left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0.14}$  es igual a 1,11 y el coeficiente de película externo corregido es igual a 1839 J/(s\*m<sup>2</sup>\*°C).
8. *Determinación del factor del coeficiente de película interno.* Considerando que durante la primera condensación por los tubos se condensa vapor se asume que el coeficiente de película interno es igual a 8516 J/(s\*m<sup>2</sup>\*°C). Al iniciar la segunda condensación, se asume que el OP gaseoso se encuentra disuelto en la fase líquida considerando que su proporción respecto al agua es muy pequeña. A partir de la Figura 28 del apéndice de Kern (1999) y con el número de Reynolds a

través de los tubos en la segunda etapa se obtiene un factor de la transferencia de calor  $j_H$  igual a  $14,8 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ . Se asume que las propiedades de la mezcla son aproximadamente las del agua pura a  $67^\circ\text{C}$  (temperatura promedio de la mezcla por los tubos en la segunda etapa) la conductividad, la viscosidad y el calor específico del agua son respectivamente  $7,21 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C} \cdot \text{m})$ ,  $4,5 \times 10^{-4} \text{ kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$  y  $863,1 \text{ J}/(\text{kg} \cdot ^\circ\text{C})$ , el coeficiente de película interno es igual a  $238 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ .

9. Considerando que la temperatura promedio del agua de enfriamiento es  $24^\circ\text{C}$ , que en la segunda etapa la mezcla se encuentra a una temperatura promedio de  $67^\circ\text{C}$  y que los coeficientes de película externo e interno en esta etapa son  $8516 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$  y  $238 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ , respectivamente, la temperatura de la pared es  $63^\circ\text{C}$ , así la viscosidad de la mezcla a la temperatura de pared es  $4,72 \times 10^{-4} \text{ kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$  y el factor de corrección  $\left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0.14}$  es igual a  $0,9939$ , por lo tanto, el coeficiente de película interno corregido sigue siendo aproximadamente igual a  $238 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ .

10. *Cálculo de los coeficientes de transferencia de calor limpio y de diseño y del factor de obstrucción.* Como se divide el proceso en dos condensaciones, para cada etapa se hace necesario calcular el coeficiente total limpio y la superficie limpia requerida. Para la primera condensación, teniendo en cuenta que el coeficiente de película interno es igual a  $8516 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$  y el coeficiente de película externo es igual a  $1839 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ , en esta etapa el coeficiente total limpio es igual a  $1510 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$  y se requiere una superficie limpia de  $17,6 \text{ ft}^2$ . Para la segunda condensación, teniendo en cuenta que el coeficiente de película interno es igual a  $238 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$  y el coeficiente de película externo es igual a  $2781 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$  (no cambia), en esta etapa el coeficiente total limpio es igual a  $210 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$  y se requiere una superficie limpia de  $2,87 \text{ m}^2$ . Así, la superficie limpia total requerida es igual a  $45 \text{ m}^2$  y el coeficiente limpio total requerido es  $675,6 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ .

Con el arreglo considerado se dispone de un área de transferencia de calor igual a  $4,83 \text{ m}^2$ , obteniéndose un coeficiente total de diseño igual a  $630 \text{ J}/(\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ . Así, el factor de obstrucción es igual a  $0,00012 (\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})/\text{J}$ .



11. *Caída de presión en la coraza.* Con un Reynolds de 4834 por la coraza se obtiene un factor de fricción de 0,0024. Con este valor, considerando la velocidad másica del agua en los tubos, la longitud de los tubos, que la coraza tiene un diámetro interno de 6,813 in (0,1731 m), su diámetro equivalente y el factor de corrección del coeficiente de película en esta zona se determina la caída de presión por la coraza que corresponde a 0,052 lb/in<sup>2</sup>.
12. *Cálculo de la caída de presión en los tubos.* La caída de presión se calcula para cada etapa determinando la longitud de los tubos que corresponde a cada una de ellas. Se encuentra que la primera condensación ocurre en los 1,04 m iniciales de la tubería, es decir en una fracción del tubo correspondiente a 0,34, de ahí que la expresión para determinar la caída de presión en la primera etapa se multiplica por esta fracción y en la segunda etapa por 0,66.

Se tiene en cuenta que en la primera parte de la tubería se tiene vapor entre 107 y 100°C con gravedad específica igual 0,00066 y en la segunda etapa se tiene un líquido cuya gravedad específica es 1,0. Con los correspondientes números de Reynolds se encuentra que los factores de fricción para la primera y segunda etapa son 0,00022 y 0,00078 ft<sup>2</sup>/in<sup>2</sup>. Los factores de corrección de los coeficientes de película internos son respectivamente 1,0 y 0,9939. Considerando además la velocidad másica por área por los tubos, la longitud y diámetro interno de los tubos y que la mezcla realiza un solo paso se obtiene una caída de presión de 0,27 lb/in<sup>2</sup> en la primera etapa y un valor despreciable de 0,0012 lb/in<sup>2</sup> en la segunda etapa. El valor de la caída de presión residual también es despreciable, considerando que velocidad másica por área por los tubos es inferior a 122 kg/(s\*m<sup>2</sup>).

Con todo lo anterior, queda diseñado el condensador. A continuación, en Tabla E-1, se presenta su hoja de especificaciones.

**Tabla E-1** Hoja de Especificación Condensador a la Salida del Vapor del Tanque Flash

<b>CONDENSADOR A LA SALIDA DEL VAPOR DEL TANQUE FLASH</b>		
	Lado de los tubos	Lado de la coraza
<b>Fluido circulado</b>	Mezcla agua, OP, PG Y ácido sulfúrico	Agua
<b>Fluido total de entrada</b>	17,14 kmol/h	3,25 kg/s
<b>Estado del fluido</b>	Vapor	Líquido
<b>Composición molar del fluido <math>X_n</math></b>	0,0106 OP, 0,9874 agua, 0,0082PG	100% agua líquida
<b>Vapor condensado</b>	17,14 kmol/h	Ninguno
<b>Gravedad específica</b>		1,0
<b>Viscosidad</b>	0,0127 cp (fase vapor) 0,45 cp (fase líquida)	0,94 cp (24°C)
<b>Calor específico de líquidos</b>	Mezcla 98,06 J/(mol*°K) OP: 88,55 J/(mol*°K) Agua: 34,64 J/(mol*°K) PG: 35,39 J/(mol*°K)	
<b>Temperatura de entrada</b>	107°C	16°C
<b>Temperatura de salida</b>	34°C	32°C
<b>Presión de operación</b>	1atm	
<b>Número de pasos</b>	1	1
<b>Velocidad</b>	64 m/s en fase vapor	
<b>Calor intercambiado</b>	216890 J/s	
<b>Arreglo:</b>	37 tubos	Arreglo cuadrado
<b>Tamaño nominal</b>	1/4 in, cédula, 10S	8 in, cédula 80S
<b>Diámetro interno</b>	0,410 in (0,0104 m)	6,813 in (0,1731 m)
<b>Diámetro externo</b>	0,540 in (0,0137 m)	8,625 in (0,2191 m)
<b>Longitud</b>	3,048m (10 ft)	3,048m (10 ft)
<b>Distancia entre baffles</b>	Sin baffles	12 in (0,3048 m) Pitch 0,81 in (0,0206 m)
<b>Caída de presión</b>	0,27 lb/in <sup>2</sup>	0,052 lb/in <sup>2</sup>

## F. Anexo: Diseño del sistema de tubería

Para diseñar la tubería se aplicó el siguiente procedimiento:

1. *Selección del material de construcción de la línea.* Para seleccionar el material de la línea se consideró su compatibilidad química con los componentes de la mezcla, teniendo presente la concentración y la temperatura de cada uno de ellos. Con base en *Detailed Corrosion Data on Construction Material PROPERTIES OF MATERIALS*, (Perry,1963), se observa que el material compatible con todos los componentes de la mezcla es el **Acero Inoxidable 316**, por tanto, se escoge este material. Aunque la bibliografía recomienda usar cédula 80 cuando hay presencia de Óxido de Propileno, por su alta corrosividad, se elige para la tubería una cédula 40, considerando que las presiones que se manejan en la línea no son altas y que las concentraciones de OP son muy bajas a lo largo de toda la línea. Así, se evita las de gran peso y altos costos de las tuberías con cédula 80.
2. *Determinación del diámetro óptimo de la tubería.* Para hallar el diámetro óptimo se utilizó el método de Roy (Crane, 1987), el cual requiere el costo de la energía por kilowatio hora (información que se obtiene a través de EPM) y el costo de una tubería de 1" (la cual se obtuvo con Tuvacol, empresa especialista en tuberías y válvulas).

Para el diseño de la línea se decidió utilizar niples de 40cm en el tramo comprendido entre la salida del reactor y el tanque flash. Para el tramo entre la salida del flash y la entrada al reactor se utilizaron niples de 30cm. Se decidió ubicar la válvula de choque utilizada para la disminución de presión, directamente unida al tanque flash para evitar las grandes caídas de presión que se generan cuando hay flujo en dos fases en la línea, evitando grandes caídas de presión o regímenes de flujo no deseados.

Calculados los parámetros anteriores y a partir de la ecuación de Roy se determina el Diámetro óptimo, para lo cual se asume en un principio régimen de flujo en cada línea turbulento, suposición que se corrobora al finalizar el procedimiento.

$$D_{i,opt} = 0,0144 * \dot{v}^{0,45} \rho^{0,13} \left( \frac{K}{X} \right)^{0,16} \quad (83)$$

Donde  $v$  es el caudal volumétrico en  $m^3/h$ ,  $\rho$  es la densidad en  $Kg/m^3$ ,  $K$  es el valor de energía por impulso,  $X$  lo que costaría un metro de tubería del material de 1 in de diámetro nominal, es decir que la relación  $K/X$  tiene unidades  $m/KW$ . Los resultados obtenidos se ilustran en la **Tabla** Tabla F-1.

**Tabla F-1** Parámetros para el diseño de la tubería

Corriente	T prom (°C) corriente	Densidad Promedio ( $kg/m^3$ )	Viscosidad promedio	Diámetro Óptimo (m)
Desde entrega bomba hasta entrada intercambiador E-02	34°C	997,999	0,00073	0,015
Desde intercambiador E-02 hasta entrada tanque flash.	107°C	953,597	0,00028	0.0156
Salida de vapor del tanque flash hasta entrada al condensador E-03	107°C	0,758	$1,57 \times 10^{-5}$	0.1025
Salida del condensador hasta Tee de alimentación ACV-08	35°C	986,557	0.00073	0,0103
Desde Tee de alimentación hasta Entrada intercambiador E-01	25°C	979,066	0.000897	0,0155
Desde salida del intercambiador E- 01 hasta entrada del reactor R-01	34°C	994,844	0,000701	0.0145
Corriente de alimentación ACV-08		997,999	0,000730	0,0154
Corriente líquida de salida del tanque flash	107°C	961,087	0,000277	0,0123

Considerando los diámetros óptimos obtenidos para cada tramo se procede a tomar el diámetro mayor, por lo cual se selecciona un diámetro de  $\frac{1}{2}$  pulgada para toda la línea, exceptuando la línea de la salida del *flash*, para la cual se elige un diámetro de 4 pulgadas. Usando el mismo criterio de diseño que para las demás

líneas, este diámetro es mayor para garantizar que no haya condensación en la línea de salida del tanque flash.

3. *Cálculo de las pérdidas de presión.* Se procede a recalcularse las pérdidas con los diámetros escogidos. Para ello se determina para cada tramo el número de Reynolds, el factor de fricción de Darcy a partir de la ecuación de Shacham (Crane, 1987) y posteriormente las pérdidas en líneas y accesorios. Todos los accesorios se consideraron roscados y en las líneas desde intercambiador E-02 hasta entrada tanque flash, desde Tee de alimentación hasta entrada intercambiador E-01 y salida de vapor del tanque flash hasta entrada de condensador E-03 se sumaron a las pérdidas del tramo las caídas de presión generadas por los intercambiadores de calor y por el condensador que correspondieron a 5psi cada una de ellas. Para el cálculo de la línea de tubería, se asumió, de manera conservativa, esta pérdida máxima para cada intercambiador de calor. Igualmente en las corrientes desde intercambiador E-02 hasta entrada tanque flash y desde la tee de entrada hasta el intercambiador E-01 se sumaron las pérdidas causadas por los accesorios. Los resultados para las pérdidas obtenidas en cada tramo se presentan en la Tabla F-2.

Considerando que  $\dot{m}$  es el flujo másico y  $\mu$  la viscosidad del fluido que circula por la tubería y  $D_i$  el diámetro de la misma, el número de Reynolds a través de la tubería se determina a partir de la siguiente expresión:

$$Re = \frac{4 * \dot{m}}{\pi * D_i * \mu} \quad (84)$$

Considerando que  $\epsilon$  es la rugosidad de la tubería y  $D$  el diámetro de la tubería, el Factor de fricción de Darcy se calcula utilizando la ecuación de Shacham:

$$f_D = \left\{ -2 \log \left[ \frac{\frac{\epsilon}{D}}{3,71} - \frac{5,02}{Re} \log \left( \frac{\frac{\epsilon}{D}}{3,71} + \frac{14,5}{Re} \right) \right] \right\}^{-2} \quad (85)$$

Las pérdidas en la línea y accesorios se calculan así:

Para líneas rectas se tiene:

$$K = f_D * \frac{L}{D_i} \quad (86)$$

**Tabla F-2** Pérdidas en cada tramo de la tubería.

TRAMO	$h_f$ (psi)
Salida del reactor hasta ojo de succión de la bomba	0,2976
Desde intercambiador E-02 hasta entrada tanque flash	3,0059
Desde intercambiador E-02 hasta entrada tanque flash+ E-02 +FT – Válvula Cheque).	7,5357
Salida de vapor del tanque flash hasta entrada al condensador E-03 + E-03	5,1055
Salida del condensador hasta Tee de alimentación ACV-08	0,0397
Desde Tee de alimentación hasta entrada intercambiador E-01. + E-01 +FT	7,5665
Desde salida del intercambiador E-01 hasta entrada del reactor R-01	0,7374
Corriente líquida de salida del tanque flash	(No se consideran)
Corriente de alimentación	(No se consideran)

Para hallar las pérdidas en los accesorios, utilizamos principalmente el método de las 2K:

$$K = \frac{K_1}{Re} + K_\infty \left( 1 + \frac{1}{D_i(in)} \right) \quad (87)$$

De forma tal que las pérdidas en la línea y accesorios se calculan con:

$$h_{f_{Tramo}} = K_{Total,tramo} * \frac{g^2}{2} \quad (88)$$

4. *Selección de la máquina impulsora.* Para diseñar la bomba se define las condiciones de operación que corresponden a la temperatura de operación, es decir, 34°C y la presión de vapor del componente más volátil, que es el OP, en el ojo de succión. Esta última se determina a partir de la ecuación de Antoine, (los valores de las constantes A, B y C para OP son 3,55046, 802,487 y -81,348, respectivamente) encontrándose un valor de 0,9920 bar (99200 Pa).

$$\text{Log}_{10} \left( P_{V_{\text{ojosucc}}} \right) = A - \left( \frac{B}{T+C} \right) \quad (89); \quad P_v [=] \text{Bar}$$

En el punto de descarga de todo el sistema se alcanza una presión de 3 atm (303975Pa). El caudal de diseño corresponde a 2,71x10-4m<sup>3</sup>/s (16.29 l/min). Se establece que se requiere un servicio continuo y que el fluido a bombear es corrosivo, abrasivo y no depositante.

Desde la salida del reactor hasta el ojo de succión de la bomba (punto en el cual la viscosidad es 0,00073 Pa s) se aplica la ecuación de Bernulli, tomando como punto 1 el nivel de líquido en el reactor, punto en el cual se puede decir que la velocidad es cero ya que se realizará control de nivel. El reactor opera a 1 atm, la densidad en los dos puntos es igual y se asumirá como altura de control la salida del reactor, es decir, Z<sub>1</sub> es 1,66 atm y Z<sub>2</sub> es cero. En este tramo no se tiene la presencia de máquina impulsora, así la presión en el ojo de succión es Ps igual a 114515,8Pa (38.30 ftwc). Considerando la expresión:

$$\mathbf{NPSH_A} = H_S - P_{V_{\text{OjoSucción}}} \quad (90)$$

la presión disponible en el sistema para que no haya cavitación es NPSH<sub>A</sub> igual a 5,12 ftwc.

$$\frac{P_1}{\rho_1} + \frac{v_1^2}{2} + g * Z_1 + \eta \widehat{W} = \frac{P_s}{\rho_s} + \frac{v_s^2}{2} + g * Z_s + h_f \quad (91)$$

Para calcular la cabeza total que la bomba debe aportar se realiza un balance de energía mecánica que permita calcular  $P_D$  (en el punto de descarga de la bomba). Desde el punto de descarga de la bomba hasta la válvula ubicada a la entrada al tanque flash, antes de llegar a esta:

$$\frac{P_D}{\rho_D} + \frac{v_D^2}{2} + g * Z_D + \eta \widehat{W} = \frac{P_2}{\rho_2} + \frac{v_2^2}{2} + g * Z_2 + h_{fd,2} \quad (92)$$

Al realizar el análisis se desprecia el término de la máquina impulsora, pues para este tramo no se cuenta con este equipo, además de eso se considera el nivel de referencia a la altura de descarga de la bomba y se considera que el líquido debe llegar con una presión de 3 atm a la válvula (la válvula tumba presión de 3 atm a 1,3 atm aproximadamente). Se obtiene un valor para la presión en el punto de descarga  $P_D$  igual a 395970 Pa (132,447 ftwc).

La cabeza total que el sistema debe aportar está dado por la ecuación:

$$P = P_D - P_S \quad (93)$$

Considerando que  $H_D$  es igual a 132,45 ftwc y  $H_s$  es igual a 38,39 ftwc, la cabeza total del sistema será igual a 94.15 ftwc.

Con la cabeza dinámica total (H) hallada y el caudal de diseño deseado, se procede a buscar en la literatura y en catálogos comerciales especializados, una bomba que satisfaga las necesidades con un grado de eficiencia alto. Se decide utilizar la bomba IHM modelo CD1-1.



## 6 Bibliografía

Business Dictionary, [Online] Disponible en:

<<http://www.businessdictionary.com/definition/benchmark.html>> [Consultado el 15 de marzo de 2014]

ACEDO SÁNCHEZ, J. 2003. Control Avanzado de Procesos. Teoría y Práctica. Editorial Díaz de Santos. Instituto Superior de la Energía. Madrid – España.

AHMED, T., 2007. Equations of State an PVT Analysis. Applications for Improved Reservoir Modeling. Gulf Publishing Company. Houston, Texas.

ALVAREZ ZAPATA, H.D., 2000. Control Predictivo basado en Modelo Borroso para el Control del pH. Tesis para optar al título de Doctor en Ingeniería. Universidad Nacional de San Juan – Argentina.

ALVAREZ, M. 2007., A design procedure for a supervisory control structure in plantwide control. Thesis work presented as partial requirement form the degree of Master of Engineering – Chemical Engineering. Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Minas.

ARNOLD, D. 2012., Hierarchical benchmark case study for history matching, uncertainty quantification and reservoir characterisation. *Computers & Geosciences* 50 (2013) 4–15.

BEQUETTE, B.W., May 8-10, 2002. Behavior of a CSTR sith a Recirculating Jacket Heat Transfer System. *Proceedings of the American Control Conference*. Anchorage, AK.

BUPP, R., Bernstein, D. y COPPOLA, V., 1985. A benchmark problem for nonlinear control design: Problem statement, experimental testbed and passive nonlinear compensation. *Proc. American Control Conference*, vol. 5, pp 4363 – 4367.

BRANAN, C., 2005. Separators/Accumuladores. *Rules of thumb for Chemical Engineers. A manual of quick, accurate solutions to everyday process engineering problems*, pp 142 – 152.

CALDERÓN, J.M., 2009. Control de Procesos Multivariables mediante un Sistema de Control Distribuido Modificado. Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de Magister en Ingeniería Química. Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Minas.

CALDERON, J.M., 2012. Una aproximación al diseño y control total de planta usando controlabilidad de estado. Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de Doctor en Ingeniería – Sistemas Energéticos. Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Minas.

CARLSON, E.C., Octubre,1999. Don't gamble with physical properties for simulations. *Chemical Engineering Progress*. pp 35-46.

CASTRO, J y DOYLE, F (2004a). A pulp mill Benchmark problem for control: Application of plantwide control design. *Journal of Process Control*. 14 (3), pp 329-347.

CASTRO, J y DOYLE, F (2004b). A pulp mill Benchmark problem for control: Problem description. *Journal of Process Control*. 14 (1), pp 17-29.

CRANE, 1987. División de Ingeniería. Flujo de Fluidos en Válvulas, Accesorios y Tuberías. McGraw Hill, México, pp. 3.

CRUZ. F.A y col., 2014. A new viscoelastic benchmark flow: Stationary bifurcation in a cross-slot. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics xxx (2014) xxx-xxx*.

DIRECTRICES PARA LA DISTRIBUCIÓN DE ÓXIDO DE PROPILENO. Revisión final – septiembre 2009. Grupo Sectorial de Cefic para el Óxido de Propileno. Disponible en:

<[http://www.petrochemistry.eu/ftp/pressroom/Guidelines\\_PO\\_SP\\_WEB.pdf](http://www.petrochemistry.eu/ftp/pressroom/Guidelines_PO_SP_WEB.pdf)>

DOWNS J.J., and VOGEL E.F. A plant/wide industrial process control problem. *Computers Chemical Engineering*. 17 (3), pp 245-255.

DOWNS J.J., and SKOGESTAD S. An industrial and academic perspective on plantwide control. *Annual Reviews in Control*, 35(1):99-110, 2011. ISSN 1367-5788.

ERIKSON, K. y HEDRICK, J., 1999. Plantwide Process Control. John Wiley & Sons, Inc., New York.

FAHS, M., YOUNES, A., ALEX, T., 2014. A new benchmark semi/analytical solution for density/driven flow in porous media. *Advances in Water Resources* 70 (2014) 24/35.

FLOGER, H.S., 2008. Elementos de Ingeniería de las Reacciones. Ed., Pearson Prentice Hall, Cuarta edición. México.

GAUTAMI, G. y KHANAM, S., 2012. Selection of optimum configuration for multiple effect evaporator system. *Desalination* 288 16 – 23. 2012

GODOY, S., RODRÍGUEZ, N. y SCENNA, N., 2008. Propiedades Termodinámicas de Equilibrio: Determinación de Estados de Equilibrio de Fases. UTN. Facultad Regional Rosario. Cátedra: Integración IV.

HICKS R.W., MORTON J.R., and FENIC J.G. How to design agitators for desired process response. *Chemical Engineering*, April 26, 1976, pp. 102.

## INTRODUCCIÓN A LA INGENIERÍA QUÍMICA.

Disponible en <<http://iqtma.uva.es/introiq/bd.pdf>>

J.J.; VOGEL, E.F., 1993. A Plant-wide industrial process control problem. *Computers Chem Eng* 17, 245 – 255 (1993).

ÓXIDO DE PROPILENO: *Guía para la salud y la seguridad.*, 1993. No. 15. Organización Panamericana de la salud. Metepec, México.

KERN, D., 1999. *Procesos de Transferencia de Calor.* McGraw Hill Book Company, INC. Trigésima Primera Reimpresión. México.

LEVENSPIEL, O., 1987. *Ingeniería de las Reacciones Químicas.* Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Oregón. Ediciones REPLA. S.A. México. D.F.

LIANG, K. and CHENG-CHING Y., 1996. Reactor/Separator Process with Recycle – 1. Candidate Control Structure for Operability. *Computers chemical Engineering* Vol. 20. No. 11, pp 1291 – 1316.

LUPPI, P., ZUMOFFEN. D.A.R., Y BASUALDO, M.S.,2013. Decentralized plantwide control strategy for large-scale processes. Case study: Pulp mill benchmark problem. *Computers & Chemical Engineering, Volumen 52, Mayo 10 de 2013, pp 272/285.*

McAVOY, T.J. y Ye, N., 1994. Base control for the Tennessee Eastman problem. *Computers chem Eng.*, 18(5), pp. 383 – 413.

MOSCOSO, H., 2013. A design procedure for a supervisory control structure in plantwide control. Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de Magister en Ingeniería – Ingeniería Química. Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Minas.

OCHOA, S., WOZNY, G. y REPKE, J., 2010. Plantwide optimizing control of a continuous bioethanol production process. *Journal of Process Control*, 20(9): 983-998. ISSN 09591524.

OGUNNAIKE, B y RAY, W.H. 1994. *Process Dynamics, Modeling and Control*. Oxford University Press, Inc. ISBN 0-19-509119-1.

OWENS, D.H., 1981. *Multivariable and Optimal Systems*. Academic Press, England. ISBN 978-0-125-31722-1.

PALENCIA, A., CANTERO, K.M. y CHAMORRO, R., 2010. Control por Matriz Dinámica (DMC): Sistemas de lazo simple y Multivariable. *Prospect*. Vol. 8, No. 2, Julio - Diciembre de 2010, pp. 69-75.

PERRY, J.H., 1974. *Manual del Ingeniero Químico*. Ed., McGraw Hill. México.

PRETT, D.M; MORARI, M., 1987. *Proc. Shell Process Control Workshop*. Butterworth, USA, pp 105 – 119.

PRICE R., and GEORGAKIS C. Plantwide regulatory control design procedure using a tiered framework. *Ind. Engng. Chem. Res.* 32 (1993), pp. 2693/2706.

RAWLIN, J.B. y STEWART, B.T., 2008. Coordinating multiple optimization-based controllers: New opportunities and challenges. *Journal of Process Control*, 18:839–845. ISSN 09591524.

RODRÍGUEZ, D. 2014. Perspectiva General del Control Predictivo. Curso de Doctorado 'Control avanzado de Procesos Industriales'. Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática.

RYONG, J; KIM, J; SONG, C. Synthesis of the turbulent mixing in a rod bundle with vaned spacer grids based on the OECD-KAERI CFD benchmark exercise. *Nuclear Engineering and Design* 279 (2014) 3-18.

R.W. Hicks, J.R. Morton y J.G. Fenic. How to design agitators for desired process response. *Ch. Eng.*, April 26, 1976. Pp. 22-30.

SADATI, N.; RAMEZANI, M.H., 2010. Novel interaction prediction approach to hierarchical control of a large-scale systems. *IET Control Theory & Applications*, 42(2): 228-243, 2010. ISSN.G

SEADER, J.D. y HENLEY, E.J., 2006. Separation Process Principles. Second Edition. Editorial John Wiley & Sons, Inc. United States of America.

SEKI, H. y NAKA, Y., 2006. A Hierarchical Controller Design for a Reactor/Separator System with Recycle. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2006, 45, 6518-6524.

SELECCIÓN DE MODELOS TERMODINÁMICOS. Disponible en:

<<https://www.google.com.co/webhp?sourceid=chrome-instant&ion=1&espv=2&ie=UTF-8#q=termodinamica%20del%20ELV%20.%20M%C3%A9todos%20de%20predicci%C3%B3n&safe=active>>

SOAVE, G. y COTO, B. SRK., 2007. después de muchos años - ¿Qué se puede mantener y qué se debe cambiar? *An. Quím.* 103(4), 14-21. Real Sociedad Española de Química 2007.

SHARIFZADEH, M., 2013. Integration of Process Design and Control: A Review. *Chemical Engineering Research and Design* 91 (2013) 2515 – 2549.

STEWART, B.T., et, al., 2010. Cooperative distributed model predictive control. *Systems & Control Letters*, 59(8): 460 – 469, 2010. ISSN 01676911.

VALENCIA ARROYE, F., 2012. *Game theory based distributed model predictive control: An approach to large – scale systems control*. Ph.D. Tesis, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia.

VENKAT, A.N., 2006. *Distributed model predictive control: Theory and applications*. Ph.D. thesis, University of Wisconsin – Madison, Madison, USA.

WANKAT, P., 2012. *Separation Process Engineering*. Third Edition. Prentice Hall. United States.