

DEFINICIÓN DE UNA ESTRATEGIA DE CONTROL Y SUPERVISIÓN PARA UN REACTOR DISCONTINUO PARA LA SÍNTESIS ACUOSA DE HEXAMETILENTETRAMINA (HMTA) EN LAS INSTALACIONES DEL LABORATORIO DE INGENIERÍA QUÍMICA (LIQ).

CONTROL AND SUPERVISORY STRATEGY DEFINITION FOR A BATCH REACTOR FOR THE HEXAMETHYLENETETRAMINE (HMTA) AQUEOUS SYNTHESIS IN THE CHEMICAL ENGINEERING DEPARTMENT LABORATORY (LIQ).

RESUMEN

El trabajo es una primera etapa hacia el montaje de un reactor discontinuo y su sistema de control para prácticas de control de procesos y/o de planta piloto en el Laboratorio de Ingeniería Química (LIQ). El sistema reactivo es la síntesis en fase líquida de la HexametilénTetramina (HMTA); se escoge dada la factibilidad de la futura implementación y la existencia de información base cinética, química, termodinámica y física ya que se utiliza la simulación matemática como herramienta de análisis.

La estrategia de control es la ejecución lógica de pasos que disponen al reactor para llevar a cabo la reacción (control secuencial). Dentro de la secuencia se requiere mantener la temperatura en el valor objetivo lo que demanda una segunda estrategia (control de lazo). Para el control de lazo se proponen dos alternativas: un PID convencional, y, uno no lineal (tipo Linealización Entrada/Salida), dada la naturaleza del sistema.

Para evaluar cuantitativamente la sensibilidad paramétrica, y, para elegir la variable controlada se propone una expresión matemática (integral) que arroja un indicador de desempeño ($D\%$).

Tanto el controlador de lazo lineal (PID) como el no lineal (Entrada/Salida, E/S), permiten cumplir los objetivos de control planteados y no presentan diferencias significativas de desempeño. Sin embargo, el análisis de estabilidad realizado favorece al controlador no lineal (E/S); además, su ajuste requiere optimizar un único parámetro (kC) versus tres del PID (kC, kI, kD).

**DEFINICIÓN DE UNA ESTRATEGIA DE CONTROL Y SUPERVISIÓN PARA UN
REACTOR DISCONTINUO**

**CAMILO GODOY VARGAS
ÓSCAR MANUEL GUALDRÓN PINTO**

**Requisito parcial para optar al título de
Ingeniero Químico**

**Directora
DOLLY SANTOS BARBOSA
Ingeniera Química**

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
FACULTAD DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
SANTAFÉ DE BOGOTÁ, D.C.**

2000

NOTA:

La versión digital de este documento puede tener un formato de página y numeración diferente a la copia física que se encuentra en la Biblioteca de la Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá.

Universidad Nacional de Colombia- Sede Bogotá

Ubicación: Biblioteca Central Gabriel García Márquez (Sótano)

Catálogo Sistema Nacional de Bibliotecas (<http://www.catalogo.unal.edu.co>)¹

Número de Sistema del documento: 000063258

Código de Barras del documento: 77011519361035

Contacto recursos: bibrecurso_bog@unal.edu.co

Chat: <https://bibliotecas.unal.edu.co/servicios/chat-con-el-bibliotecario/>

¹ Para consultas utilice la opción "INVITADO". No es obligatorio tener correo institucional.

**DEFINICIÓN DE UNA ESTRATEGIA DE CONTROL Y SUPERVISIÓN PARA UN
REACTOR DISCONTINUO**

**CAMILO GODOY VARGAS
ÓSCAR MANUEL GUALDRÓN PINTO**

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
FACULTAD DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
SANTAFÉ DE BOGOTÁ, D.C.**

2000

**DEFINICIÓN DE UNA ESTRATEGIA DE CONTROL Y SUPERVISIÓN PARA UN
REACTOR DISCONTINUO**

**CAMILO GODOY VARGAS
ÓSCAR MANUEL GUALDRÓN PINTO**

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
FACULTAD DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
SANTAFÉ DE BOGOTÁ, D.C.**

2000

**DEFINICIÓN DE UNA ESTRATEGIA DE CONTROL Y SUPERVISIÓN PARA UN
REACTOR DISCONTINUO**

**CAMILO GODOY VARGAS
ÓSCAR MANUEL GUALDRÓN PINTO**

**Requisito parcial para optar al título de
Ingeniero Químico**

**Directora
DOLLY SANTOS BARBOSA
Ingeniera Química**

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
FACULTAD DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
SANTAFÉ DE BOGOTÁ, D.C.**

2000

NOTA DE ACEPTACIÓN

DIRECTORA DEL PROYECTO

ING. DOLLY SANTOS BARBOSA

JURADO

JURADO

A Jaime, mi padre.
Por todos los años de esfuerzo hechos por
el bienestar de sus hijos.

A Carmenza, mi madre.
Por su comprensión y respaldo, porque
siempre va a estar cerca de mí.

A Kaichiro,
Monito travieso e inquieto.

A Koyomi,
La mujercita de la casa.

A César,
Un muchacho juicioso, con un gran
potencial.

A mi familia,
Pues de una u otra forma me han apoyado
y animado.

A Camilo,
Porque ha sido el fruto de su superación
y dedicación.

A ti, Por lo bello y alegre,
Por lo difícil e ingrato,
Por tu dulce cariño,
Por lo vivido a tu lado.

Camilo Godoy Vargas

A Gloria y Manuel, mis padres,
a todo su amor y a todo su esfuerzo,
A mis hermanos...
fuentes de mi felicidad y de mi inspiración.

A mis tíos, Luz Marina y Arturo, a su gran
corazón.

Óscar Manuel Gualdrón P.

AGRADECIMIENTOS

Los Autores expresan sus agradecimientos a:

Francisco Meluk, Ingeniero Electrónico, Profesor de la línea de profundización en Sistemas Digitales del Departamento de Ingeniería de Sistemas. Por su excelentísima calidad humana y profesional. Por ser maestro, guía y ejemplo.

Dolly Santos, Ingeniera Química, Directora del Proyecto de Grado. Por su apoyo y colaboración.

Carlos Rodríguez, Ingeniero Químico COLSEIN LTDA. Por su colaboración constante y desinteresada.

La Universidad Nacional de Colombia... por todo.

TABLA DE CONTENIDO

	PAG.
INTRODUCCIÓN	
NOMENCLATURA	
1. FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA	1
1.1 FUNDAMENTOS DEL CONTROL DE PROCESOS	1
1.1.1 ¿Por qué controlar?	1
1.1.2 Objetivo del control	2
1.1.3 El Sistema de Control	2
1.1.4 Técnicas de control	4
1.1.4.1 Sistemas de Control por Realimentación (<i>feedback</i>)	5
1.1.4.2 Sistemas de control por adelantamiento (<i>feedforward</i>)	6
1.1.5 Control digital	7
1.1.6 Arquitecturas de control	9
1.1.7 Generalidades de los programas para automatización	11
1.1.7.1 Características comunes de los paquetes de visualización	11
1.1.8 Simulación	12
1.1.8.1 ¿Qué es simulación?	12
1.1.8.2 Objetivos de la simulación	13
1.1.8.3 Etapas de la simulación	13
1.1.8.4 Ventajas y limitaciones	13
1.2 GENERALIDADES Y CONTROL DE PROCESOS DISCONTINUOS	14

1.2.1	Definición de proceso discontinuo	15
1.2.1.1	Terminología básica relacionada	15
1.2.2	Aspectos generales sobre los reactores discontinuos	15
1.2.2.1	Características de operación	16
1.2.3	Consideraciones sobre el control de procesos discontinuos	17
1.2.4	Metodología para el control de procesos discontinuos	17
1.2.4.1	Etapas para el desarrollo de la estrategia	18
1.2.4.2	Diagramas de tiempo y eventos	18
1.3	SISTEMAS NO LINEALES	20
1.3.1	Algunas características del comportamiento lineal y no lineal	20
1.3.2	Ventajas del análisis no lineal	21
1.3.3	Control no lineal mediante linealización entrada salida	21
1.4	INSTRUMENTACIÓN	26
1.4.1	Elementos de medición	26
1.4.1.1	Especificaciones del elemento de medición	26
1.4.1.2	Algunas características de los equipos modernos para medición	28
1.4.2	Elemento final de control	28
2.	ESPECIFICACIÓN DEL PROCESO	30
2.1	DESCRIPCIÓN DEL PROCESO	30
2.1.1	Selección y características del proceso del proceso	31
2.1.1.1	Condiciones de operación para la etapa de reacción	31
2.1.2	Química de formación	32
2.1.3	Información sobre el producto	32
2.1.4	Información sobre materias primas	33
2.1.5	Termodinámica y cinética	34
2.1.6	Seguimiento de la reacción	35
2.1.7	Diagrama de operación	35
2.2	DESCRIPCIÓN DEL EQUIPO	37
2.2.1	Descripción del reactor	38
2.3	SIMULACIÓN DEL SISTEMA	39
2.3.1	Modelo matemático del sistema	39

2.3.1.1	Balance de materia para el sistema	40
2.3.1.2	Balance de energía para el sistema	43
2.3.2	Análisis de la simulación	47
2.3.2.1	Escenario de trabajo	47
2.3.2.1.1	Lote a procesar	47
2.3.2.1.2	Propiedades físicas	48
2.3.2.1.3	Ecuación cinética y calor de reacción	48
2.3.2.1.4	Parámetros del equipo de reacción	48
2.3.2.2	Comportamiento del sistema	49
2.3.2.3	Sensibilidad paramétrica	53
2.3.2.3.1	Evaluación de propiedades físicas de la masa reactiva	54
2.3.2.3.2	Evaluación de parámetros varios	54
2.3.2.3.3	Evaluación de posibles variables manipuladas	55
2.3.2.4	Otras consideraciones	57
3.	DEFINICIÓN DEL PROBLEMA DE CONTROL	58
3.1	OBJETIVO OPERACIONAL	58
3.2	OBJETIVOS DEL SISTEMA DE CONTROL	59
3.2.1	Objetivos del control secuencial	59
3.2.2	Objetivos del control de lazo	59
3.3	RESTRICCIONES PARA EL PROCESO	59
3.4	SELECCIÓN DE LA VARIABLE MANIPULADA	60
3.5	FUENTES Y CARACTERÍSTICAS DE LAS PERTURBACIONES	61
3.6	ASPECTOS DE DESEMPEÑO EXIGIDOS AL CONTROL DE LAZO	61
4.	DISEÑO DEL SISTEMA DE CONTROL	62
4.1	CONTROL SECUENCIAL	62
4.1.1	Definición de elementos de medición y control.	63
4.1.2	Definición del procedimiento.	65
4.1.3	Definición de las operaciones de proceso.	65
4.1.4	Definición del control de lazo	68
4.1.5	Definición de las condiciones de falla.	69
4.1.6	Reportes.	71

4.2 CONTROL DE LAZO	72
4.2.1 El sistema de control	72
4.2.1.1 La planta o proceso a controlar	72
4.2.1.2 Elemento de medición	72
4.2.1.3 Elemento final de control	73
4.2.1.4 El Controlador	73
4.2.2 Diseño del controlador	73
4.2.2.1 Algoritmo de control PID	74
4.2.2.1.1 Ajuste de los parámetros del controlador	75
4.2.2.1.2 Evaluación	78
4.2.2.2 Control no lineal para el reactor	83
4.2.2.2.1 Selección de las constantes del controlador	85
4.2.2.2.2 Evaluación	88
4.2.3 Comparación de las opciones para el control de lazo	93
4.3 MONTAJE DE LA ESTRATEGIA DE CONTROL	94
4.3.1 Aplicaciones creadas	95
4.3.1.1 Aplicación para el control secuencial en InTouch	96
4.3.1.2 Aplicación para el control de lazo en InTouch	99
4.3.1.3 Aplicación para control de lazo entre InTouch y Excel	103
5 REQUERIMIENTOS Y SUGERENCIAS SOBRE LA INSTRUMENTACIÓN	106
5.1 ELEMENTOS BÁSICOS REQUERIDOS	106
5.2 ELEMENTOS DE MEDICIÓN	107
5.2.1 Medición de nivel	107
5.2.2 Medición de temperatura	108
5.2.3 Medición de flujo	109
5.3 ELEMENTO FINAL DE CONTROL	111
5.4 COMENTARIOS SOBRE FUENTES DE INFORMACIÓN	114
CONCLUSIONES	
BIBLIOGRAFÍA	
ANEXOS	

LISTA DE TABLAS

	PAG.
TABLA 2.1 Propiedades físicas del producto	33
TABLA 2.2 Calor de formación y solución del NH ₃ y HCHO	33
TABLA 2.3 Calor específico y densidad de soluciones de NH ₃ y HCHO	34
TABLA 2.4 Especificaciones importantes de los equipos	36
TABLA 2.5 Efecto individual del cambio de propiedades físicas de la masa reactiva sobre T _R	54
TABLA 2.6 Efecto individual del cambio en algunos parámetros sobre T _R	55
TABLA 2.7 Efecto individual de cambios en W, T _e , T ₁ y F _e sobre T _R	55
TABLA 2.8 Efecto individual de cambios en F _e , W y T ₁ sobre T _{R max}	57
TABLA 4.1 Parámetros de ajuste según Ziegler-Nichols	76
TABLA 4.2 Parámetros seleccionados (F _{es} = 0.0045 L/s)	77
TABLA 4.3 Comportamiento aproximado del flujo según valor de k _c	87
TABLA 5.1 Información requerida por el sistema de control y supervisión	107
TABLA 5.2 Comparación entre RTD y termocupla	108
TABLA 5.3 Condiciones de flujo del formol, amoniaco y agua en la línea de transporte	110

LISTA DE DIAGRAMAS

	PAG.
DIAGRAMA 1.1 Clasificación de las variables de un proceso	3
DIAGRAMA 1.2. Diagrama de tiempo y eventos de la sub-operación Calentamiento	19
DIAGRAMA 2.1 Diagrama de flujo del proceso.	36

LISTA DE FIGURAS

	PAG.
FIGURA 1.1 Representación esquemática de un proceso	2
FIGURA 1.2. Sistema por realimentación (<i>Feedback</i>)	5
FIGURA 1.3. Sistema por adelantamiento (<i>Feedforward</i>)	5
FIGURA 1.4. Detalle de un sistema por realimentación	6
FIGURA 1.5. Sistema de control computarizado	7
FIGURA 1.6. Proceso de muestreo	8
FIGURA 1.7. La red en la planta para el sistema de control	10
FIGURA 1.8. Módulos básicos de la simulación	13
FIGURA 1.9. Reactor discontinuo	16
FIGURA 1.10. Equipo para ilustrar un diagrama de tiempo y eventos	19
FIGURA 1.11. Exactitud y precisión	28
FIGURA 2.1 Equipo actual	37
FIGURA 2.2 Reactor R-01	38
FIGURA 2.3 Esquema para el modelamiento de la planta	40
FIGURA 4.1 Diagrama simplificado de los equipos	64
FIGURA 4.2 Representación del sistema de control para su diseño	74
FIGURA 4.3 Imagen de la ventana principal de la aplicación de control secuencial	96
FIGURA 4.4 Ventana principal de la aplicación de control secuencial mostrando la carga de amoniaco	97
FIGURA 4.5 Ventana principal de la aplicación de control secuencial mostrando	

falta en los sensores	97
FIGURA 4.6 Ventana principal de la aplicación de control secuencial mostrando notificación de falla	98
FIGURA 4.7 Imagen de la ventana principal de la aplicación de control de lazo en InTouch	99
FIGURA 4.8 Ventana de parámetros	100
FIGURA 4.9 Mímico de la planta	101
FIGURA 4.10 Ventana de parámetros	102
FIGURA 4.11 Esquema del intercambio de información entre In Touch y Excel	103
FIGURA 4.12 Imagen de la ventana principal de la aplicación conjunta en In Touch	104
FIGURA 4.13 Imagen de la ventana principal de la aplicación conjunta en Excel	105

LISTA DE GRÁFICAS

	PAG.
GRÁFICA 2.1 Efecto de Fe sobre T_R	49
GRÁFICA 2.2 Evolución de TR	51
GRÁFICA 2.3 Evolución de la masa del reactor	51
GRÁFICA 2.4 Evolución de nA	51
GRÁFICA 2.5 Evolución de nA	51
GRÁFICA 2.6 Evolución de nA	51
GRÁFICA 2.7 Evolución de nA	51
GRÁFICA 2.8 Evolución de la fracción másica	52
GRÁFICA 2.9 Evolución de la fracción molar	52
GRÁFICA 2.10 Evolución de $-r_A$	52
GRÁFICA 2.11 Evolución de área de transferencia de calor	52
GRÁFICA 2.12 Evolución de Ud	52
GRÁFICA 2.13 Evolución de T_2	52
GRÁFICA 2.14 Influencia individual del cambio (+10%) en variables manipulables sobre T_R	56
GRÁFICA 2.15 Influencia individual de los cambios (+20%) en variables manipulables sobre T_R	56
GRÁFICA 2.16 Influencia simultánea de cambios en ciertos parámetros sobre T_R	57
GRÁFICA 4.1 Evolución de T_R con diferentes modos de control PID	77

GRÁFICA 4.2 Comportamiento de la Temperatura de la mezcla reactiva	78
GRÁFICA 4.3 Variación de la masa reactiva en el transcurso de la operación	79
GRÁFICA 4.4 Variación en el número de moles durante la operación	79
GRÁFICA 4.5 Exigencia al elemento final de control	79
GRÁFICA 4.6 Comportamiento de T según valor de k cuando coinciden los modelos planta-controlador	86
GRÁFICA 4.7 Comportamiento de T para sobre nivel de 0.5°C según k _c =0.0461	88
GRÁFICA 4.8 Detalle del comportamiento de T para sobre nivel de 0.5°C según k _c = 0.0461	89
GRÁFICA 4.9 Flujo de entrada para sobre nivel de 0.5°C según k=0.0461	89
GRÁFICA 4.10 Desempeño de control P y P1 cuando ΔH _R en la planta	93

INTRODUCCIÓN

La industria utiliza procesos discontinuos para la elaboración de gran variedad de productos (polímeros, químicos finos o especiales, farmacéuticos, alimentos). Además, las tendencias del mercado exigen flexibilidad a los procesos de forma que puedan responder a demandas variables tanto en las propiedades físico-químicas como en las de calidad; comparados con los procesos continuos, los discontinuos permiten satisfacer de forma ventajosa tal necesidad. Esta situación ha permitido a los procesos por lotes ganar importancia y participación en los últimos años a la vez que impulsar estudios sobre el control de los mismos [6].

Dadas las condiciones económicas actuales que exigen a las industrias altos niveles de competitividad y productividad, la automatización es un medio que permite la reducción de productos que no exhiban las características deseadas, el ahorro de tiempo y energía, a la vez que la protección de la integridad de personas y equipos. Así, la automatización se manifiesta en disminución de costos y en el mejoramiento de la seguridad. Una de las herramientas utilizadas dentro de la automatización, son paquetes o programas diseñados para tal fin; entonces se observa la necesidad de explorar y explotar dicha herramienta para los procesos químicos con ánimo de promover su utilización en el departamento de Ingeniería Química.

Con base en lo anterior, este proyecto se concibe como una primera etapa hacia el montaje y utilización, en las instalaciones del laboratorio de Ingeniería Química (LIQ), de un reactor discontinuo y su sistema de control orientado a prácticas de *control de procesos* y/o de *planta piloto*. La utilización de un proceso discontinuo resulta ventajosa, pues los aspectos que involucra el control de este tipo de procesos permite llegar a considerar temáticas relacionadas con el control, tanto bajo condiciones de operación estables como variantes en el tiempo.

El proceso reactivo objeto de estudio es el de la síntesis en fase líquida de la HexametenTetramina (HMTA); éste se escoge teniendo en cuenta aspectos como: la utilidad del producto, el fácil acceso a las materias primas, disponibilidad de equipos y otros recursos físicos en el Laboratorio de Ingeniería Química toda vez que se pretende impulsar la puesta en marcha del proceso y de su estrategia de control. Otro factor que prima en la selección del proceso es la existencia de información relacionada con el sistema reactivo (cinética química y termodinámica entre otras) ya que se utiliza la simulación matemática como herramienta de análisis; sin embargo no es un objetivo del trabajo evaluar ni analizar el proceso o su diseño. Se ha utilizado como objeto de análisis una parte del

proceso de producción de la HMTA, pero el estudio que se realiza pretende presentar una metodología que puede aplicarse a las otras partes del proceso (p.e: evaporación, lavado) e inclusive a otros procesos discontinuos (p.e: procesos de polimerización o esterificación).

En cuanto a la estrategia de control, basada en las necesidades y características de los procesos discontinuos, se puede decir que debe entenderse como la ejecución lógica de pasos que disponen al reactor para llevar a cabo la reacción (control secuencial). Dentro de esta secuencia de pasos se encuentra uno relacionado con un objetivo de proceso, que consiste en mantener la temperatura de reacción en cierto valor con ánimo de aumentar el rendimiento hacia el producto final y evitar reacciones peligrosas; de ahí surge la necesidad de una estrategia para el control de la temperatura (control de lazo). Para el control de lazo se proponen dos alternativas: una basada en el uso de un controlador PID convencional (práctica industrial frecuentemente usada a pesar de que las características del sistema o planta no son lineales) y la otra, una estrategia no lineal, llamada Linealización Entrada/Salida, dada la naturaleza del sistema a controlar.

La estrategia de control secuencial y las dos aproximaciones al control de lazo se simulan en el programa InTouch^{MR}, que hace parte de la familia de programas para automatización FactorySuite 2000^{MR}; la idea de utilizar InTouch, es la de dar a conocer las facilidades que ofrece este programa (para visualización y control entre otras) y la de promover su exploración y aplicación ya que esta herramienta está disponible en la sala de automatización de ingeniería ¹. Se dio una orientación didáctica a las aplicaciones creadas para que el usuario pueda observar, por ejemplo, el desempeño del control de lazo en estado *manual* o *automático*, también es posible experimentar (dentro del control automático) con la aplicación de diferentes modos de control para que el usuario realice análisis y eventualmente modifique los algoritmos de control empleados.

El cuerpo del trabajo se divide en cinco secciones:

- **Fundamentación teórica:** Con la profundidad necesaria para el entendimiento del trabajo, se exponen: fundamentos de control, las arquitecturas de control y las características de los programas para automatización. Se introducen conceptos sobre procesos discontinuos y su control; se hace un aparte para describir las características generales de los sistemas no lineales.
- **Especificación del proceso:** Se presenta el proceso de producción de la HMTA haciendo énfasis en información relacionada con la etapa de reacción y se describen los equipos adecuados que existen en el LIQ (materiales, dimensiones y uso actual entre otras características de interés) para la síntesis. Posteriormente, se inicia la simulación: establecimiento del modelo matemático y análisis del sistema.
- **Definición el problema de control:** Del conocimiento adquirido sobre el proceso mediante la simulación, se realiza la definición del problema de control.

¹ Ubicada en el edificio del laboratorio de Ingeniería Química

- **Diseño del sistema de control:** Utilizando la metodología para el control de procesos discontinuos expuesta en el marco teórico, se diseña la estrategia de control secuencial; también se exponen y evalúan las de control de lazo (PID y Linealización E/S). Finalmente se describe de forma breve, el software donde se simulan las estrategias de control y las aplicaciones generadas.
- **Sugerencias sobre la instrumentación:** Teniendo en cuenta las necesidades del proceso, las de las estrategias de control (secuencial y lazo) y las características de los equipos, se presenta un avance hacia la selección de diferentes instrumentos.

NOMENCLATURA

A_T	=	área transferencia de calor (m ²)
C	=	concentración molar (mol/L)
C_p	=	calor específico (J/(g*°C))
D	=	diámetro (m)
e	=	desviación o error de la variable medida respecto a Ref
E_a	=	energía de activación (J/mol)
F	=	flujo volumétrico (L/s)
ΔH_R	=	calor de reacción (J/mol)
h	=	coeficiente de transferencia de calor (J/(s*m ² * °C))
K_o	=	factor de frecuencia
L	=	altura de la mezcla reactiva en el tiempo t (m)
$MLDT$	=	diferencia media logarítmica de temperatura (°C)
m	=	masa en el tiempo t (g)
n	=	moles en el tiempo t (mol)
N	=	velocidad del agitador (rev/s)
Q	=	flujo de calor (J/s)
r	=	velocidad de reacción (mol/(L*s))
R	=	constante universal de los gases (8.3145 J/mol*K)
R_{cond}	=	resistencia conductiva de la pared interna del reactor (s*°C)/J)
R_d	=	factor de obstrucción combinado ((s*m ² * °C)/J)
Ref	=	valor de referencia o consigna en un sistema de control
t	=	tiempo (s)
T	=	temperatura (°C)
U	=	coeficiente de transferencia de calor (J/(s*m ² * °C))
V	=	volumen de la mezcla reactiva en el tiempo t (L)
w	=	fracción en peso
W	=	flujo másico del fluido térmico (g/s)
x	=	fracción de reactivo convertido en producto: conversión.
λ	=	conductividad térmica (J/(s*m* °C))
μ	=	viscosidad (g/(m*s))
ρ	=	densidad (g/L)

Subíndices

A	=	amoníaco
B	=	formaldehído
C	=	hexamina
D	=	agua
e	=	corriente de entrada
ch	=	chaqueta
i	=	interno
m	=	elemento primario de medida
o	=	externo
p	=	pared del tanque
R	=	mezcla reactiva
w	=	pared interna del reactor
1	=	entrada del fluido térmico
2	=	salida del fluido térmico

1 FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

1.1 FUNDAMENTOS DEL CONTROL DE PROCESOS

El control de procesos constituye un área con identidad propia, no importa en que rama de la ingeniería se aplique se fundamenta en los mismos principios, desde este punto de vista resultan similares el control de una nave espacial, un submarino o una torre de destilación; existen sin embargo dentro de esta área, sectores que se diferencian por sus características y exigencias particulares, resultando diferente por ejemplo, el control de un sistema electrónico al de uno químico.

La automatización constituye un estadio de desarrollo de la técnica, se dice que un sistema es automatizado cuando se ha logrado que funcione de manera relativamente autónoma respecto a la intervención directa del hombre, y se habla de control automático.

1.1.1 ¿Por qué controlar?

Los procesos químicos (en general) constituyen sistemas que naturalmente no alcanzan o mantienen por sí mismos un estado deseado (p.e. que la temperatura que requiere la reacción sea alcanzada, la presión en un tanque no exceda los límites de seguridad o que se mantenga el flujo de alguna corriente que corresponde al óptimo económico), y por tanto deben ser controlados; en resumen el proceso químico de interés responderá de cierta forma, y al serle incorporado el equipo de control deberá responder en la forma deseada.

Mediante la aplicación del control automático se logra un control más preciso de los procesos químicos, obteniendo productos más uniformes y de mejor calidad, además ofrece mayor seguridad.

Básicamente son tres las razones por las que se debe controlar un proceso:

- *Por seguridad:* Permite evitar o mantener bajo control situaciones de riesgo, para el hombre, los equipos o el medio ambiente.

- *Por operabilidad*: Hace posible o facilita la operación de las plantas.
- *Por economía y calidad*: El control se presenta como una herramienta para administrar los recursos y disminuir los costos en una planta química, a la vez que permite garantizar el cumplimiento de requisitos de calidad y pureza en los productos finales.

1.1.2 Objetivo del control

El objetivo de un *sistema de control* es lograr que una o varias *variables* del sistema, por las que se tiene un interés especial justificado, se comporten de manera deseada, por ejemplo mantengan un valor determinado (*control regulador*) o que sigan una trayectoria deseada (*servo-control*), a pesar de las perturbaciones existentes o incertidumbres en el conocimiento del sistema. Esto puede lograrse de dos maneras, a través de un operario que actúe directamente sobre el sistema (*control manual*, que para sistemas complejos puede ser imposible) o de forma automática (*control automático*).

1.1.3 El Sistema de Control

El sistema que se pretende controlar en general se denomina *planta o proceso a controlar*, por ejemplo un reactor, un submarino, un secador, un electrodoméstico o un avión y puede ser representado, desde el punto de vista de control, de la siguiente forma:



FIGURA 1.1 Representación esquemática de un proceso

Las variables de un proceso pueden ser clasificadas como se presenta en el diagrama 1.1. Las denominadas *salidas*, son aquellas cuyo valor es afectado por el de otras variables, pueden ser medibles o no; a este grupo pertenecen las que se quieren controlar y se les denomina *variables controladas*, por ejemplo: temperatura, presión, nivel y flujo (las más comunes), que junto a pH, densidad, composición, humedad, peso y velocidad de giro, son las que normalmente se controlan; las otras salidas, no directamente controladas, también deben ser tenidas en cuenta en el diseño del sistema de control, pues variarán con las acciones de control tomadas.

Todas aquellas variables que afectan el valor de las salidas se denominan *entradas*. Dentro de éstas, algunas son seleccionadas como *variables manipuladas*, aquellas que el control automático variará con el objetivo de actuar sobre la(s) de interés; por ejemplo: el flujo de alguna corriente de proceso o la intensidad eléctrica a través de una resistencia eléctrica.

Todas las variables que afectan a la variable controlada, diferentes a las manipuladas, se denominan *variables de carga o perturbaciones*; sin embargo, es posible que debido a su baja variabilidad o influencia algunas sean apartadas de este grupo en el análisis. La

clasificación se realiza para el proceso de interés, pues una variable controlada en un proceso, puede ser variable de carga para otro.

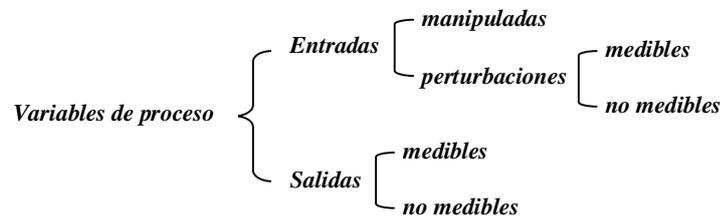


DIAGRAMA 1.1 Clasificación de las variables de un proceso

A **La planta** se adicionan otros componentes que permiten alcanzar los objetivos de control y conforman en conjunto un nuevo sistema, **el sistema de control**. El sistema de control está constituido por los siguientes componentes básicos:

- **La planta.** El sistema a controlar
- **Elementos de medición:** Se les denomina a los sensores, transmisores y otros dispositivos necesarios para el acondicionamiento de señales, como amplificadores, supresores de ruido, etc.
- **El controlador:** Es el dispositivo 'inteligente', encargado de tomar las decisiones necesarias para que la variable controlada alcance el valor deseado.
- **Elemento final de control (EFC):** Es el encargado de manipular directamente la variable seleccionada, conforme a las instrucciones del controlador.

En el diseño básico de un sistema de control se busca responder preguntas como:

- ¿Cuáles son los objetivos que el sistema de control debe cumplir?
- ¿Qué variables serán medidas? Es deseable que sean medidas directamente las variables que representan los objetivos de control; puede suceder que no sean medibles, lo que exigirá que se encuentren relaciones matemáticas, que permitan que éstas sean inferidas a partir de la medición de otras (*control inferencial*).
- ¿Cuáles serán las variables manipuladas? Serán candidatas todas aquellas entradas que puedan ser ajustadas libremente, su selección considera aspectos de instrumentación, seguridad, sensibilidad y viabilidad entre otros. La selección es muy importante pues afectará los resultados obtenidos.
- ¿Cómo debe ser usada la información proveniente de los sensores para ajustar los valores de las variables manipuladas? Es lo que se denomina específicamente *diseño del controlador* y representa el algoritmo que será usado para generar la salida del controlador, llamado *ley de control o algoritmo de control*.

Aunque no es sólo esto, finalmente se deberá tener conformado un sistema al que se le garantice su *estabilidad* y que cumpla con necesidades de *desempeño*. Estos son conceptos

fundamentales en el diseño de sistemas de control, sobre los que existen extensos trabajos [2, 9, 17, 33] y de manera breve se explican a continuación.

Estabilidad: Se dice que un sistema es estable, si para toda señal acotada (aquella que no crece o decrece sin límites), aplicada como entrada, el sistema produce una salida también acotada. Siempre debe analizarse este aspecto debido a que la adición del equipo de control, no garantiza la estabilidad del nuevo sistema, es más, puede incluso hacer de un proceso naturalmente estable un sistema inestable.

Desempeño: Es la manera como se comporta la variable controlada. Está caracterizado por un estado transitorio y uno estable, para los que existen algunos índices (exceso, relación de decrecimiento, tiempo de ascenso, etc.) y figuras de mérito ('ISE', 'ITAE', 'IAE', etc.) que permiten su evaluación. Su definición y comentarios sobre ellos, pueden consultarse en textos de control de procesos. [9, 17, 33]

El análisis y diseño de los sistemas de control suele realizarse basándose en sus modelos matemáticos, los cuales representan la dinámica del sistema. Para obtener este modelo, dos acercamientos son posibles y pueden ser necesarios de manera conjunta:

- El Experimental: Requiere que se cuente con el sistema físico, para la realización de pruebas que permitan analizar su respuesta, al modificar sus entradas.
- El Teórico: Su uso es promovido porque es frecuente que tenga que diseñarse el sistema de control, para un proceso que aún no ha sido instalado. Para proponer el modelo, deben usarse principios básicos, por ejemplo, de la termodinámica, la cinética química, los fenómenos de transporte, entre otros. En su aplicación se hace necesario y prudente, realizar simplificaciones para obtener el modelo. De otra forma puede resultar en uno de alta complejidad y difícil solución.

El modelo del sistema de control completo, está constituido por: las ecuaciones que representan la planta, el controlador y cada uno de los demás dispositivos involucrados; las representaciones matemáticas de estos últimos, sólo se pueden precisar una vez seleccionados tales dispositivos, sin embargo el análisis y diseño puede avanzar basándose en algunas simplificaciones. Una vez especificados todos los componentes del sistema, se pueden afinar los resultados con base en una simulación más rigurosa (modelo más real), pero finalmente debe hacerse con experiencias realizadas sobre el sistema mismo.

Los modelos matemáticos son importantes además, porque muchos controladores usados actualmente, los requieren para ser involucrados en su algoritmo de control; se habla de *control basado en el modelo* ('*model-based control*'). [6, 33, 36]

1.1.4 Técnicas de control

El problema de control puede ser solucionado de dos formas, cada una de las cuales corresponde a una filosofía básica de diseño diferente: la primera sensando la variable a controlar, para así realizar los ajustes necesarios y corregir su desviación. Se conocen

como sistemas de control por realimentación (*feedback*). La segunda midiendo las diferentes variables de carga, para realizar ajustes que contrarresten su efecto sobre la variable a controlar, se les conoce como sistemas de adelantamiento (*feedforward*). Básicamente el primero actúa una vez se presentan las desviaciones, mientras el segundo actúa para evitar que afecten el proceso. En las figuras 1.2 y 1.3, se esquematizan las dos alternativas:

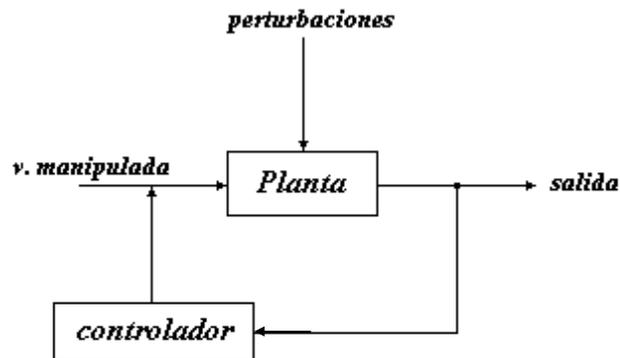


FIGURA 1.2. Sistema por realimentación ('Feedback')

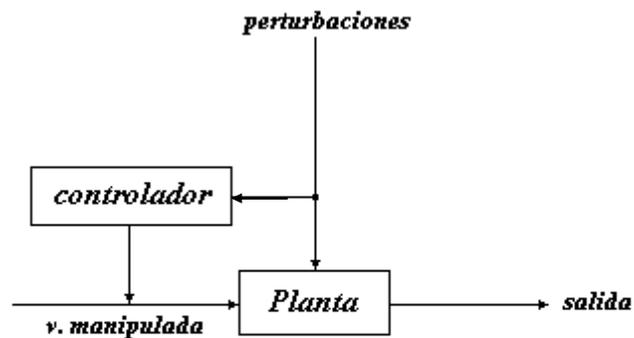


FIGURA 1.3. Sistema por adelantamiento ('Feedforward')

1.1.4.1 Sistemas de Control por Realimentación (*feedback*)

Por simplicidad estos sistemas son más comunes que los de adelantamiento y su estructura se presenta en la figura 1.4.

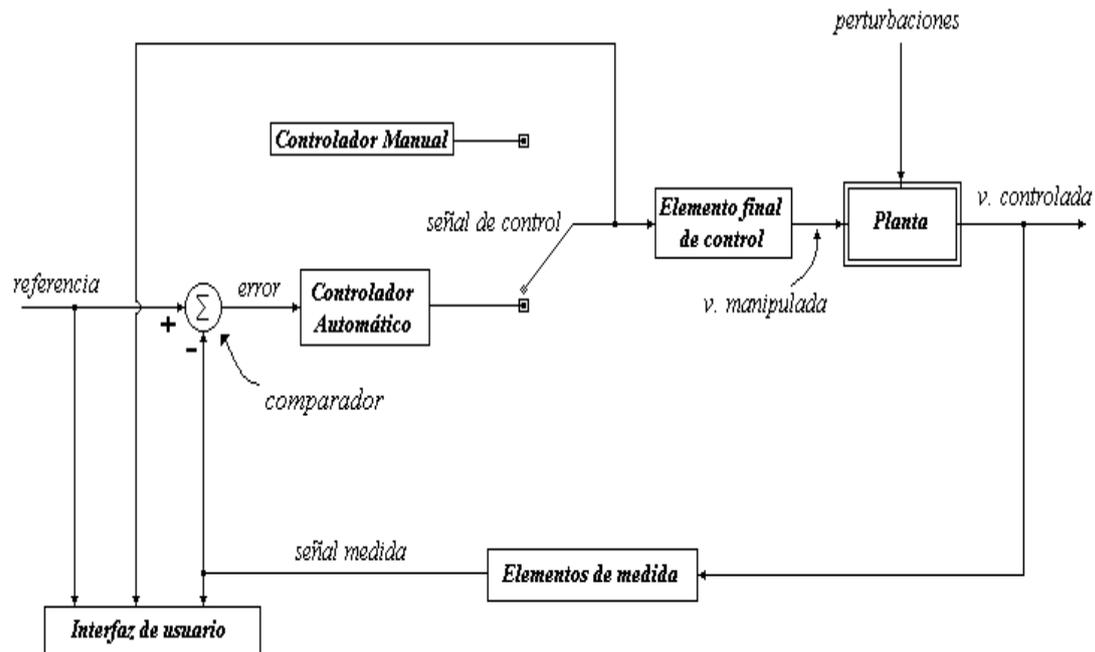


FIGURA 1.4. Detalle de un sistema por realimentación

El sistema de control presentado en la anterior figura, es llamado un *lazo de control*, en él, el valor de la variable medida es realimentado a un dispositivo llamado comparador, donde la variable controlada es comparada con el valor deseado o *referencia*; a la diferencia existente se le denomina *desviación* o *error*, este valor ingresa al *controlador*, que ajusta el *elemento final de control* a fin de llevar la variable controlada al valor deseado.

Existen cuatro modos clásicos de control o respuestas particulares del controlador a cambios en el valor de la desviación o en la variable medida y son: de ***encendido y apagado*** (*on-off*), ***proporcional***, ***integral*** y ***derivativo***. Además varios grados de interacción son posibles entre los modos proporcional, integral y derivativo con el fin de encontrar el control más adecuado para cada situación particular. Una buena explicación de cada uno de estos modos se encuentra en [9, 14, 33]

La principal desventaja de estos sistemas, es que la perturbación entra en el proceso y afecta la salida, y sólo después se toma alguna acción correctiva; sin embargo los límites de variabilidad que muchos procesos manejan, les permite ser controlados por estos sistemas.

1.1.4.2 Sistemas de control por adelantamiento (*feedforward*)

Con base en los valores de las variables de carga y de referencia, el controlador calcula la señal de control; de esta forma, cambios en las variables de carga, causarán cambios directos en la señal de control, sin tener que esperar que la variable controlada sea afectada, por tanto puede obtenerse un mejor control.

En general, esta técnica es más complicada y costosa; requiere un mayor conocimiento del proceso y usualmente es utilizada para aplicaciones críticas.

En algunos casos pueden diseñarse sistemas de control combinados, por realimentación y por adelantamiento, que ya no exigen la medición de todas las perturbaciones y mejoran el desempeño obtenido. La realimentación permite tener en cuenta, el efecto de las variables de carga que no fueron medidas para el control de adelantamiento y también contrarrestar incertidumbres en el modelo. La combinación de estos esquemas produce una respuesta anticipada del controlador (por adelantamiento), más un refinamiento constante de la variable controlada (por realimentación).

1.1.5 Control digital

El controlador ha evolucionado, pasando por el neumático, el electrónico y hoy se habla del controlador basado en microprocesador; éste consiste esencialmente en un computador digital programado para desempeñar las funciones de un controlador de procesos.

El algoritmo de control reside en su memoria, como un programa de computador que se encarga de ejecutar. Hoy la función de controlador es realizada principalmente por los Controladores Lógicos Programables (PLCs) y los Computadores Personales (PCs), que son tipos de ordenadores.

La llegada del computador digital, al control de procesos, ha impulsado vertiginosamente el desarrollo de esta área, ha exigido una revolución en el desarrollo de todos los elementos que componen el sistema de control, y su uso ha requerido involucrar aspectos nuevos en el análisis y diseño de los sistemas de control, ya que ahora deben ser consideradas no sólo señales continuas, o definidas para cualquier tiempo t , sino también señales discretas que necesariamente se presentan.

La entrada y la salida de un controlador neumático o electrónico cambian de manera continua; cuando un computador es usado para implementar una ley de control, la información del mundo exterior debe llevarse al *lenguaje* del computador, por esto es necesario un conversor análogo a digital (A/D), y si además el elemento final de control es de naturaleza continua, es necesario un conversor digital-análogo (D/A) para interpretar los resultados producidos por este controlador.

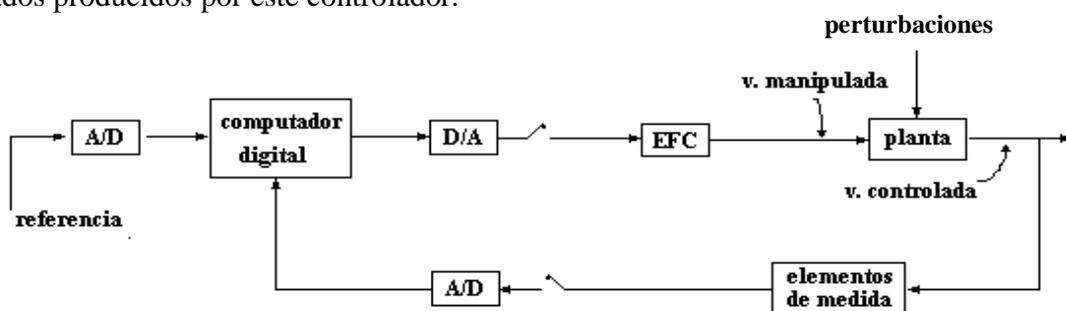


FIGURA 1.5. sistema de control computarizado

En la figura 1.5 se presenta un sistema de control digital de realimentación, en él los elementos típicos: EFC, *planta* y los elementos de medida son continuos; el controlador continuo es reemplazado por un computador digital, en el que puede, por ejemplo, implementarse un control PID. Los interruptores son simplemente simbólicos e indican la naturaleza muestreada de las señales. Otra razón por la que se pueden presentar señales interrumpidas (discreta), son las medidas que no pueden ser hechas de manera continua. Sistemas como estos que involucran los dos tipos de señales (continuas y discretas) se denominan sistemas muestreados (*'sampled-data systems'*). De su estudio se encarga el *control digital*. [9, 26]

Una de las herramientas de análisis para estos sistemas es la transformada Z, que permite hacer análisis en el dominio complejo sobre sistemas totalmente discretos (para hacerlo, los *sistemas muestreados* deben ser discretizados). Esta transformada es a las señales discretas lo que la transformada de Laplace a las señales continuas y ha permitido manejar los sistemas discretos de una manera muy similar.

En el *proceso de muestreo* se obtienen los valores de las variables medidas, y se ejecuta el algoritmo de cálculo para obtener cada vez un nuevo valor como salida del controlador, esto ocurre cada determinado lapso de tiempo (comúnmente uniforme), denominado período de muestreo (**T**).

El período de muestreo afecta tanto a la estabilidad como al desempeño del sistema de control; desde el punto de vista del comportamiento del sistema de control, conviene que T sea tan pequeño como sea posible, pues las acciones de control se toman cada T unidades de tiempo, mientras que desde el punto de vista de la disponibilidad del computador para otras funciones, los períodos de muestreo grandes son preferibles. La figura 6 pretende aclarar esta situación, en ella se esquematizan los sucesos que ocurren durante un periodo de muestreo T.

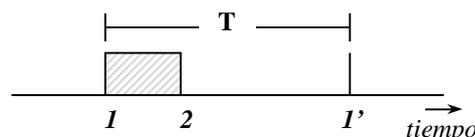


FIGURA 1.6. Proceso de muestreo

Nota: La zona rayada representa el tiempo utilizado por el computador para realizar sus cálculos.

La secuencia de etapas del muestreo es la siguiente: en el tiempo I son muestreadas tanto la referencia como la variable medida, al tiempo 2 el computador ha terminado sus cálculos encontrando el valor de la variable manipulada correspondiente, y en I' empieza nuevamente la secuencia. Desde 2 hasta I' se tiene el equipo disponible, por ejemplo para controlar otro lazo o realizar otras funciones.

Sin embargo un sistema de control con pequeño T, como 0.1 a 0.25s (valores típicos usados en la práctica), puede ser considerado como continuo para muchos procesos químicos [9], caracterizados normalmente por sus grandes constantes de tiempo. El comportamiento del sistema de control tiende al de uno continuo a medida que disminuye T.

1.1.6 Arquitecturas de control

La organización del hardware y del software desde la llegada de los computadores ha evolucionado, y de forma continua y acelerada en los últimos años. Los esfuerzos realizados en la búsqueda de mejores formas de control industrial de procesos, han producido ya varios tipos de soluciones de control, desde el control manual hasta los actuales sistemas de control distribuido (DCS - *Distributed Control System*).

Existen dos tipos generales de arquitecturas: en la primera prácticamente todas las tareas de control se concentran en un sólo punto, el computador, conformando los denominados **sistemas centralizados**, mientras que en la segunda las funciones son delegadas a diferentes equipos y a estos se les llama **sistemas distribuidos**.

Implementar un *sistema de control centralizado* exige el uso de potentes equipos. Debido a su gran poder de manejo de variables y de cálculo, pueden gobernar varios procesos y además permiten implementar algoritmos complejos de control. Este equipo recibe como entradas todas las señales provenientes de los diferentes elementos de medida, ejecuta los cálculos apropiados y produce salidas que se dirigen a los diferentes elementos finales de control; no sólo realiza el control, sino que se convierte en el administrador del proceso, toma datos, analiza, almacena, comunica información. Su principal desventaja es que el computador central se convierte en un punto crítico de falla, pues su mal funcionamiento puede estropear todo el proceso. Este problema se ha solucionado utilizando un equipo suplente para casos de falla del principal (*redundancia*), pero resulta ser una solución muy costosa; otra desventaja que se presenta, es la dificultad para realizar expansiones del sistema.

Se hizo notable la necesidad de distribuir las funciones en los sistemas, y aparece como alternativa el *control supervisor*, que usa controladores individuales para controlar el proceso, y el computador básicamente para administrar las consignas o referencias. Sin embargo, realizar el control directamente en el computador tiene varias ventajas. *El control de proceso distribuido* se apropia de ellas sin comprometer la confiabilidad del sistema y ofreciendo una mayor flexibilidad. Los grandes computadores dan paso a los computadores personales (PCs) y a los controladores lógicos programables (PLCs); estos ordenadores asumen la función de controlador y se comunican a través de redes de información con otros dispositivos. *Sistema de Control Distribuido* ('DCS')

El concepto básico de estos sistemas, como se mencionó anteriormente, consiste en dividir una gran aplicación en múltiples subsistemas, cada uno de los cuales ejecuta una parte de las funciones. Cuando alguna de ellas falla, la operación puede continuar en modo semiautomático. Para que puedan trabajar como unidad existe la red de datos del sistema, que les permite comunicarse entre sí. La expansión del sistema se facilita porque se trabaja con base en pequeñas unidades.

Se habla de sistemas distribuidos haciendo referencia tanto al reparto de funciones específicas de control, como a la ubicación de los datos. Los sistemas de control distribuido se ubican en el nivel 1 de lo que se ha denominado el '*modelo jerárquico*' del sistema de

información de algunas industrias [13]. Este modelo típicamente involucra cuatro niveles, desde los instrumentos de campo (algunas veces referido como nivel cero) hasta el sistema de información corporativo que es el de mayor cobertura, conocido más comúnmente como MIS "*Managment Information System*"; coordina la información administrativa, financiera, ventas y desarrollo de productos en el ámbito corporativo y así gobierna los demás niveles.

Los elementos típicos que hoy constituyen un DCS incluyen:

- Dispositivos de entrada y salida. (monitores, impresoras, teclados, indicadores, etc)
- Controladores individuales (ej. PLCs y controladores de lazo digitales o tarjetas electrónicas).
- Software con su **Interfaz Gráfica del Usuario** ('*GUI*').
- Servidores y computadores personales.
- Redes para intercambio de información local o remota.

Para lograr la comunicación entre el operador y el sistema se utilizan *los dispositivos de entrada y salida*, el usuario interactúa con el sistema a través de lo que se conoce como *interfaz gráfica de usuario ('GUI')*, por medio de ella el operador vigila, atiende alarmas, imprime reportes, observa tendencias de las variables y realiza cambios en consignas del proceso, conforme su nivel de acceso; estas tareas son soportadas por software, al que se hace referencia simplemente como '*HMI*' (*Human Machine Interfaz*), que se opera normalmente desde un computador personal; estas aplicaciones juegan un papel importante como puerta de enlace o interfaz entre los DCS y sistemas de información de otros niveles, permitiendo la integración.

Sin lugar a dudas en un sistema conformado por muchas unidades (como los DCS), *las redes* de comunicación (figura 1.7) cumplen un papel esencial, a ella son anclados los diferentes dispositivos. Las redes ofrecen disponibilidad de datos en tiempo real, reducen el cableado e incrementan la facilidad para expandir el sistema.

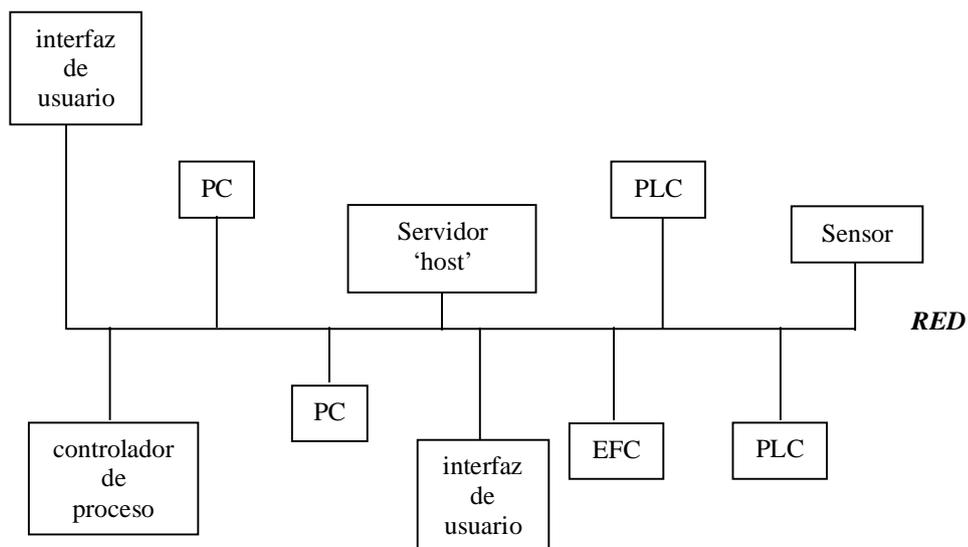


FIGURA 1.7. La red en la planta para el sistema de control

Aunque los DCS hicieron su aparición y evolucionan desde los 70s, su uso en procesos por lotes es relativamente nuevo con no más de 10 años [22], los DCS pueden ser implementados sobre procesos continuos, sobre procesos *batch* o en híbridos. Algunas diferencias los caracterizan: los DCS sobre procesos batch se orientan hacia el control de secuencias, almacenamiento de datos y a un manejo de un mayor número de dispositivos discretos; las señales discretas conforman entre el 65% y el 85% [8], mientras que en los continuos predominan las señales de tipo análogo.

Para un proceso por lotes "*batch*" ciertas características son normalmente exigidas o deseadas:

- Interfaz I/O al proceso
- Control de lazo.
- Control secuencial.
- Interfaz Hombre-Maquina.
- Almacenamiento de datos del proceso e históricos de lotes (Elaboración de reportes sobre la operación).
- Administración de recetas (creación, edición y visualización) y poder de edición en línea.
- Detección y manipulación automática de fallas (autodiagnóstico).

1.1.7 Generalidades de los programas para automatización

La tendencia de los últimos años, es la de ofrecer un conjunto de componentes de software que permita la recolección de datos, su visualización, el almacenamiento, el análisis y finalmente el control de los procesos de una planta de producción. Este conjunto debe integrar también los sistemas de negocios de una compañía.

Los programas ofrecidos en el mercado han evolucionado, desde la visualización y administración de consignas, pasando por un único paquete que manejaba todos los aspectos de la automatización (supervisión, adquisición de datos, manejo de datos, control), hasta la división en componentes específicos para las tareas básicas de automatización, que pueden actuar de forma integrada. Se puede decir que el elemento básico de estos paquetes es el programa de visualización **HMI** (*'Human - Machine Interface'*), pues posee la mayoría de las facilidades que se pueden esperar y necesitar en un programa para automatización, aunque limitadas si se compara con los programas especializados.

1.1.7.1 Características comunes de los paquetes de visualización

El centro o motor de estos programas, es la base de datos en donde se ven representadas las características relevantes de los objetos del sistema real (p.e: temperatura, nivel, flujo, voltaje, corriente) y también variables propias de la aplicación (p.e: señales de salida para ejercer control). Entonces, el manejo eficiente y robusto de la base de datos es el pilar del

buen desempeño de estos programas. En la base de datos las variables, internas o externas, se asocian a una etiqueta o "tag", que no es mas que el nombre que se le asigna a tal variable.

Los programas tienen, usualmente, dos módulos: primero el de desarrollo, donde se crea y configura la interfaz; el segundo, es el módulo de ejecución. El vínculo entre el proceso y el usuario es la Interfaz Gráfica del Usuario ('GUI'), en ésta se presenta información requerida por un usuario específico (p.e: el comportamiento de ciertas variables de interés para ingenieros de procesos o cantidades procesadas y empacadas para el departamento de ventas) y la forma de actuar sobre el proceso.

Otras de las características del software de visualización son:

- Administración de alarmas: Se manejan niveles de prioridad para los eventos y alarmas.
- Administración de datos de proceso: Para la generación de informes y la presentación gráfica de datos de interés (históricos o en tiempo real) en la interfaz del usuario.
- Administración de seguridad: Se manejan diferentes niveles de acceso a recursos según el usuario.
- Interoperabilidad : Integración con hojas de cálculo, procesadores de texto, bases de datos y lenguajes de programación. También el reaprovechamiento de procedimientos o aplicaciones por otros programas.
- Edición en línea: Modificación de los componentes de la aplicación (gráficos, tendencias, tags, etc.) sin necesidad de parar el proceso.
- Capacidad de programación para manejo y manipulación de expresiones (matemáticas, lógicas, estadísticas) que permiten generar algoritmos de control.
- Interoperabilidad de hardware: Poseen gran número de protocolos para comunicación con equipos de campo de diferentes marcas (Filosofía del Sistema Abierto).
- Trabajo en red.

1.1.8 Simulación

Siendo la **simulación matemática** la herramienta de análisis utilizada para obtener las características y el comportamiento del sistema de interés (el reactor discontinuo a escala piloto), además de servir para el diseño y evaluación de las estrategias de control de lazo, se hace adecuado presentar un pequeño enfoque sobre ella. Lo que se expone a continuación se orienta a la simulación por computadora de sistemas propios de la ingeniería, sin que quiera esto decir que se pierde la generalidad de los conceptos.

1.1.8.1 ¿ Qué es simulación?

En líneas generales, la simulación puede ser considerada como una forma o proceso de adquirir conocimiento. Los sistemas a ser estudiados pueden existir, o pueden estar concebidos en el ámbito teórico.

1.1.8.2 Objetivos de la simulación

La simulación ofrece un método para adquirir, verificar o mejorar la comprensión de un sistema. Por medio de esta herramienta se puede:

- Predecir el curso y resultados de ciertas acciones
- Entender por qué sucede lo que se observa
- Identificar problemas de diseño
- Explorar los efectos de modificaciones sobre el sistema

1.1.8.3 Etapas de la simulación

El Proceso de simular se divide en tres módulos mayores íntimamente relacionados (ver figura 1.8):

1. Obtención del modelo del sistema de interés; este remeda la conducta del sistema, cuando cambia de un estado a otro a través de tiempo. La complejidad del modelo es acorde a la información requerida.
2. El establecimiento de un procedimiento o algoritmo de ejecución.
3. Validación de resultados y posterior análisis.

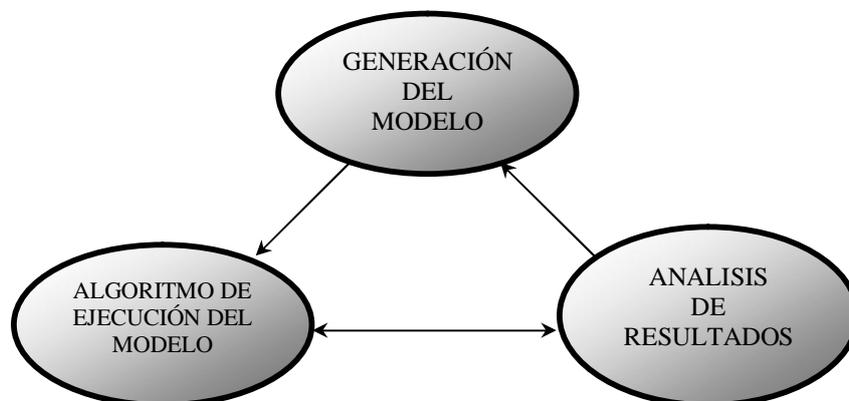


FIGURA 1.8. Módulos básicos de la simulación

1.1.8.4 Ventajas y limitaciones

La simulación por computadora puede presentar las siguientes ventajas con respecto a la experimentación directa:

- La reducción de riesgos físicos (seguridad).
- Obtener información sobre el sistema, en un tiempo mayor o menor que el requerido por el sistema real.

- Modificar el sistema de forma rápida para validar diseños.
- Experimentar con un sistema que puede estar en etapa de diseño y por tanto no estar a disposición.
- Planear y orientar la experimentación real.
- Consecuencia de los anteriores puntos, **ahorro de dinero**.

Sin embargo, al operar el modelo y obtener respuestas, la fidelidad con la que se remeda el mundo real está limitada a la exactitud del modelo y a las suposiciones realizadas para su construcción y manipulación.

1.2 GENERALIDADES Y CONTROL DE PROCESOS DISCONTINUOS

El interés despertado por las operaciones discontinuas se origina, entre otras cosas, por lo lucrativos que son muchos productos que exigen este tipo de operación (farmacéuticos, químicos finos, químicos especiales, polímeros, alimentos), productos cuya demanda y/o calidades especificadas por el mercado son variables. Contrario a lo que se podría pensar, desde el punto de vista académico, la industria posee un alto porcentaje de materiales producidos por esta vía [29]. Además, el arranque, la estabilización y parada de unidades de trabajo continuo, son tareas que involucran fenómenos de naturaleza discontinua.

Para describir un proceso por lotes, es bueno hacer un paralelo con las operaciones continuas: en una operación continua los vínculos entre equipos y etapas están firmemente establecidos desde el diseño. La cantidad de materias primas procesadas y de producto final, es relativamente constante durante largos períodos de tiempo. El reprocesamiento de productos es casi imposible sin alterar significativamente las características de los equipos y/o las condiciones de proceso.

Por el contrario, un proceso discontinuo está concebido para convivir con la variabilidad del mercado en el que se desenvuelve; algunos ejemplos de esta adaptación son [30]:

- El manejo de diferente escala de producción: para determinada sustancia la producción puede ser de varias toneladas diarias o de unos cuantos kilos por mes.
- La generación de varios productos, y dentro de un mismo tipo de producto, diferentes características físico - químicas y/o de calidad.

De lo anterior se desprende que se pueden utilizar diferentes operaciones y número de equipos según sea el producto final deseado.

La flexibilidad que deben exhibir los procesos discontinuos es un reto para la ingeniería pues el diseño y optimización del desempeño de unidades individuales o de secuencias de operaciones demanda gran esfuerzo en el ámbito de planeación, operación y control del proceso.

Una crítica frecuentemente hecha a los procesos discontinuos, es la falta de reproducibilidad, y por tanto, la resultante fluctuación de la calidad en el producto final. Esta característica negativa ahora puede ser minimizada, mediante el uso de sistemas basados en computadoras que supervisan y controlan todo el proceso o gran parte de él. Sumado a esto, se ha impulsado la creación de estándares que proveen terminología, conceptos y modelos. Con esta normalización, se pretenden hacer más sencillas, económicas y eficientes labores de producción, planeación, operación, control y de otras actividades en el ámbito administrativo. Ejemplos son los estándares SP88 y el SP95 (en diseño) desarrollados por la *Instrumentation Society of America* ('ISA').

1.2.1 Definición de proceso discontinuo

En breves líneas, es una secuencia de operaciones (físicas, químicas o biológicas), basadas en tiempos y otros parámetros (p.e: cantidad de materias primas, temperatura, presión) para la transformación, transporte y/o almacenamiento de energía y/o materia, en donde se generan cantidades finitas (lotes) de producto [35].

A diferencia de un proceso continuo, el estado de avance hacia el producto final depende del tiempo de operación en el que se encuentre el proceso, o de las características deseadas.

1.2.1.1 Terminología básica relacionada

Los términos aquí presentados son de uso común en la ingeniería de procesos discontinuos.

- Receta: Conjunto de pasos que definen de forma única los requerimientos (p.e: unidades y sus características, cantidad y calidad de materiales, secuencias de operaciones, tiempos) para la producción de un producto específico.
- Unidad: Equipo de proceso y su instrumentación (sensores, transmisores, controladores) que actúa relativamente independiente, de otras unidades.
- Operación de proceso: Aquella que usualmente involucra cambios físicos y/o químicos en el material a procesar. Se compone de acciones de proceso o fases.
- Procedimiento: La estrategia de llevar a cabo un proceso mediante operaciones de proceso.
- Fase: Conforman operaciones de proceso y consisten en acciones tales como *llenar*, *vaciar*, *pesar*, *calentar* entre otras. Algunas se relacionan directamente con operaciones unitarias.
- Lote: Material que está siendo o fue producido en un proceso discontinuo.

1.2.2 Aspectos generales sobre los reactores discontinuos

Se denomina reactor químico al equipo en el cual se lleva a cabo una reacción química de interés, pueden ser clasificados de muy diversas maneras. Según el método de operación los reactores químicos se dividen en continuos y discontinuos; en los primeros las propiedades

de la mezcla reactiva (temperatura, conversión, etc.) no son función del tiempo y eventualmente varían con la posición, mientras que los segundos se caracterizan porque existe una variación de ellas con el tiempo.

En general un reactor discontinuo de tanque agitado puede esquematizarse así:

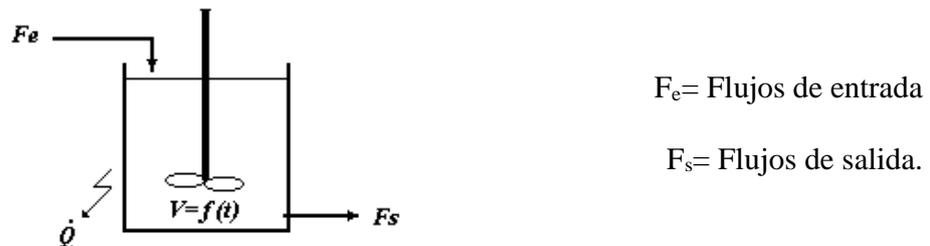


FIGURA 1.9. Reactor discontinuo

En este tipo de reactor, cuando los flujos de entrada y salida no existen, se habla de reactores por lotes ('batch') y si el volumen de la mezcla reactiva varía con la operación del reactor, por causa de un desbalance en los flujos másicos, se les denomina reactores en operación semicontinua ('semibatch').

Los reactores discontinuos normalmente se usan para sistemas en fase líquida por lo que en su análisis, es usual despremiar los cambios de densidad debidos a la reacción química. Los reactores de tanque no son los más ventajosos en cuanto a transferencia de calor, y rara vez se utilizan en escala comercial para reacciones en fase gaseosa, pues la cantidad de producto obtenido resulta muy pequeña en un reactor de tamaño razonable (su principal uso es en estudios de cinética).

Su control puede ser más exacto que el de un reactor continuo, debido a que las acciones de control influirán sobre **la misma** masa reactiva que presenta la desviación.

1.2.2.1 Características de operación

La operación por lotes o semicontinua es más flexible que un proceso continuo por las siguientes razones:

- Se puede variar la velocidad de reacción mediante la adición de reactivos o la remoción de productos.
- Permite que en su operación se sigan perfiles de temperatura como función del tiempo.
- El tiempo de contacto puede modificarse dentro de un amplio intervalo.

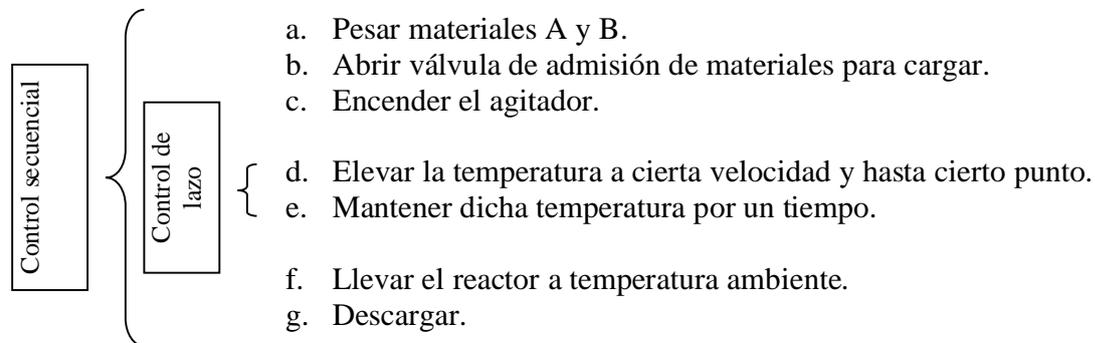
Son estas características las que permiten por ejemplo optimizar la producción, variar la calidad de un producto o cambiar a uno nuevo; sin embargo sus costos de operación son más elevados. [21]

Son muchas las políticas de operación que son aplicables en un reactor discontinuo y dependen del sistema en cuestión. Los flujos másicos, las temperaturas de alimentación o la velocidad de transferencia de calor se pueden variar en el transcurso de un lote, para lograr el funcionamiento deseado del reactor.

1.2.3 Consideraciones sobre el control de procesos discontinuos

Debido a que el estado de una operación en un proceso discontinuo varía ampliamente entre el inicio y fin de la marcha, las herramientas no lineales de análisis y control deben ser tenidas en cuenta. Sin embargo, antes de desplegar el esfuerzo necesario para implementar ciertas estrategias de control, es aconsejable evaluar los potenciales beneficios de las mismas, pues en la práctica un sistema de control es juzgado por su condición de ser o no adecuado para el proceso y no por la sofisticación del mismo. Vale recordar que el control es un medio para lograr un objetivo de proceso pero no necesariamente es el único. Por ejemplo el cambio en las condiciones o diseños de la operación, el mejoramiento de equipos, el control de materias primas y la capacitación de personal, pueden ser una forma menos costosa y más efectiva para llegar a cumplir esa meta [29].

Otra característica de estos procesos es la combinación de tareas que precisan de control secuencial y de lazo; como ilustración se presenta una operación de un procedimiento para la producción de cierto material en un reactor, que como materia prima utiliza dos sustancias (A y B); de forma simplificada los pasos son:



Como se aprecia, las secuencias son la base del control de procesos discontinuos (por esto el nombre de control secuencial), en éstas, las acciones se inician en respuesta a eventos tales como periodos de tiempo o cumplimiento de ciertas condiciones.

1.2.4 Metodología para el control de procesos discontinuos

Recientemente se han tratado de generar formas de trabajo mas estructuradas para crear estrategias de control para procesos por lotes, como la que se expone a continuación.

1.2.4.1 Etapas para el desarrollo de la estrategia

Se expone una adaptación de la metodología encontrada en [35] y [8]:

- Definición de elementos de medición y control. Con los planos de tuberías e instrumentación ('*P&ID*') de los equipos, se genera una lista de aparatos discretos (motores, válvulas ON/OFF) y continuos (motores, válvulas proporcionales, sensores).
- Definición de procedimientos. Consiste en establecer la estrategia de producción. Valioso cuando se producen varios productos pues se pueden utilizar diferentes métodos de producción y control para cada uno. Definición de operaciones de proceso.
- Definición del control de lazo.
- Definición de condiciones de falla. Se agregan a los diagramas de tiempo y eventos (sección 1.2.4.2) para generar procedimientos de re-inicio, alarmas, cancelación u otras acciones adecuadas.
- Reportes.

1.2.4.2 Diagramas de tiempo y eventos

Los diagramas de *tiempo y eventos* proporcionan información mas ordenada y entendible para las tareas secuenciales; la estrategia de control de un proceso discontinuo puede ser definida en términos de una secuencia, basada en tiempos y eventos, de acciones de control secuencial y/ o de lazo. La simbología utilizada en los diagramas de tiempo y eventos, se encuentra en el anexo A; se puede encontrar información adicional, con mas detalle y ejemplos, en [35] y [8].

Para ilustrar estos diagramas tómesese el ejemplo de la sección 1.2.3. Cada uno de estos pasos, o un conjunto relacionado de ellos, se puede trabajar como una sub-operación con el objeto de dejar claro su desarrollo. Por ejemplo, llámese a los pasos d. y e. la sub-operación de calentamiento, cuyos requerimientos son:

- Velocidad de aumento de temperatura: 3 °C / minuto
- Temperatura estable de trabajo: 100 °C
- Tiempo de trabajo a 100 °C: 1 hora.

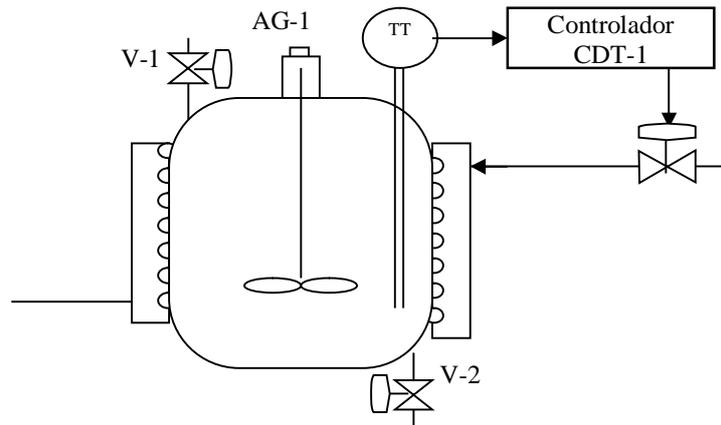


FIGURA 1.10. Equipo para ilustrar un diagrama de tiempo y eventos

Teniendo en cuenta la figura 1.10 y los requerimientos anteriormente mencionados el diagrama de tiempo y eventos se presenta en el diagrama 1.2.

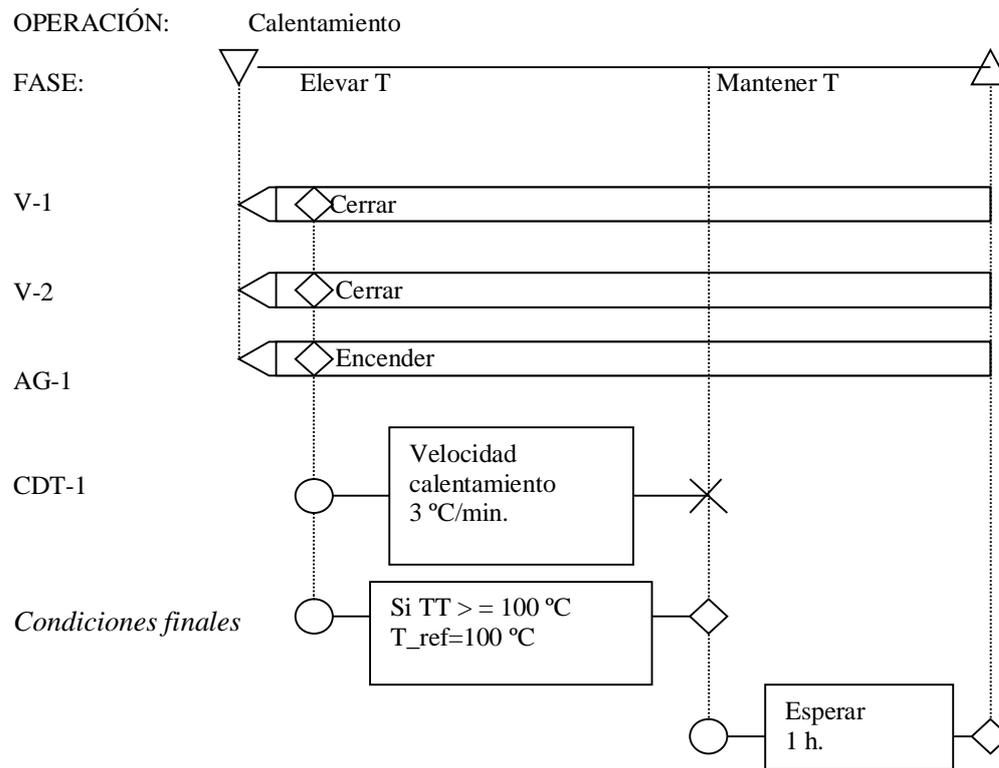


DIAGRAMA 1.2. Diagrama de tiempo y eventos de la sub-operación calentamiento

1.3 SISTEMAS NO LINEALES

Son aquellos donde el principio de superposición y aditividad **no** se cumple. Contrariamente, para un sistema lineal, la respuesta a la acción de dos entradas es la misma que la suma de las respuestas a las entradas individuales. Por ejemplo si $Y_1(t)$ es la respuesta a una entrada $X_1(t)$ y $Y_2(t)$ corresponde a $X_2(t)$, entonces, la respuesta del sistema a $b_1X_1(t) + b_2X_2(t)$ es $b_1Y_1(t) + b_2Y_2(t)$.

Un sistema no lineal es descrito por ecuaciones no lineales; una ecuación diferencial lineal tiene la siguiente forma:

$$a_n(t)\frac{d^n y}{dt^n} + a_{n-1}(t)\frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}} + \dots + a_1(t)\frac{d^1 y}{dt^1} + a_0(t)y = \Psi(x(t))$$

donde:

- $y(t)$ representa la respuesta del sistema
- $\psi(t)$ la entrada : $b_m(t)\frac{d^m x}{dt^m} + \dots + b_0(t)x$
- t es la variable independiente.

Como se observa, la variable dependiente “y” y todas sus derivadas son de primer grado, o sea, la potencia de cada término en la variable dependiente es uno. Además, si los coeficientes que multiplican las derivadas son funciones explícitas del tiempo el sistema es **variante en el tiempo**, esto implica que la respuesta a una entrada que se aplica en un tiempo t_0 puede ser diferente cuando se aplica la misma entrada en el tiempo t_1 . Cuando los coeficientes son constantes, el sistema se conoce como **invariante en el tiempo**.

Existen elementos propios de un sistema que le imprimen la cualidad de no ser lineal, estas se llaman *no linealidades inherentes*; si dentro del sistema se introducen elementos no lineales se catalogan como *no linealidades intencionales*. En términos de sus propiedades matemáticas las no linealidades se pueden clasificar como *continuas* (p.e: válvulas de sensibilidad creciente o igual porcentaje) o *discontinuas* (p.e: saturación e histéresis en válvulas), debido a que las discontinuas no se pueden linealizar (aproximar localmente) se conocen como *no linealidades rígidas*.

1.3.1 Algunas características del comportamiento lineal y no lineal

Gracias a la utilidad y facilidad de las herramientas de análisis y diseño lineal es común analizar sistemas que no son lineales como si lo fueran, por ejemplo cuando el sistema se desenvuelve en zonas de operación no muy grandes, cuando las no linealidades tienen poco peso en el comportamiento del sistema y/o cuando se contrarrestan las no linealidades con elementos que anulen tal comportamiento (p.e: una válvula de igual porcentaje en un

sistema de transporte de líquido por tubería, donde las pérdidas de energía por flujo son considerables).

Algunas características de los sistemas lineales invariantes en el tiempo son [31]:

- Se satisface el principio de superposición y aditividad.
- Existe un solo punto de equilibrio.
- El punto de equilibrio es estable, si todos los polos de la ecuación característica tienen parte real negativa. Como respuesta a toda entrada acotada, el sistema tiene una salida acotada.
- Una entrada tipo seno produce una salida tipo seno con la misma frecuencia pero con un ángulo de fase y una amplitud diferente.

Un sistema no lineal tiene un comportamiento diferente. Algunas características son:

- Puntos de equilibrio múltiples.
- La estabilidad depende de las condiciones iniciales.
- Ciclos límite. Un sistema no lineal puede exhibir oscilaciones de amplitud y periodo fijo sin que haya una acción externa.

El modelo de un sistema de comportamiento no lineal se deduce y analiza en el **anexo B**.

1.3.2 Ventajas del análisis no lineal

Si el sistema de interés se tiene que desempeñar en un amplio conjunto de ambientes, como sucede en un reactor discontinuo, o si existen comportamientos que no se pueden aproximar linealmente (no linealidades rígidas) **es posible** que un controlador lineal trabaje deficientemente o, aún peor, genere inestabilidad. Por esto, el diseño del controlador con herramientas no lineales es más adecuado para este tipo de escenarios.

Otro punto importante es que un sistema de control lineal basado en parámetros relativamente imprecisos puede desempeñarse pobremente. En el algoritmo de control se pueden introducir no linealidades para que se admitan dichas imprecisiones; ejemplos de tales controladores son los adaptivos y los robustos [31]. También se puede permitir el uso de elementos menos costosos en el sistema de control pero de características no lineales (p.e una válvula ON/OFF) ya que se puede estudiar la estabilidad y el desempeño por medio de herramientas no lineales de análisis.

1.3.3 Control no lineal mediante linealización entrada salida

Esta estrategia no-lineal de control consiste en intervenir algebraicamente el modelo no lineal que describe el sistema para convertirlo en uno que cumpla el principio de superposición; la relación lineal resultante se da entre la salida de interés y la señal del controlador. Esta transformación tiene un fondo diferente a la linealización conseguida

cuando se aproxima la dinámica del sistema cerca del punto de operación (Series de Taylor)¹ pues se realiza sin sacrificar la exactitud aunque el sistema se pueda desempeñar en un amplio conjunto de escenarios. Información completa sobre las ventajas y limitaciones de esta técnica se encuentran en [31].

Con ánimo de explicar la técnica considérese un sistema no lineal de primer orden descrito por el siguiente modelo:

$$\dot{x} = f(x) + g(x) U \quad (1.1)$$

donde:

- $\dot{x} = \frac{dx}{dt}$ = velocidad de cambio de la variable de estado x .
- $f(x), g(x)$ = funciones no lineales de la variable x .
- U = entrada escalar de control.

Se propone que, $U = \frac{1}{g(x)}[V - f(x)]$, entonces (1.1) se transforma en $\dot{x} = V$. La ley de control $V = -K*x$ da origen a un sistema lineal estable para todo $K > 0$:

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = -K*x \Rightarrow \frac{dx}{x} = -K dt \xrightarrow{C.I. = 0} x = e^{-Kt}; \text{ cuando } t \text{ tiende a infinito } x \text{ tiende a cero.}$$

Con la transformación realizada, el sistema puede recibir la aplicación de técnicas lineales como el *Lugar de las Raíces* para el diseño del controlador.

Un punto al que se debe prestar atención es el valor que puede tomar la función $g(x)$ pues si se hace cero, la entrada de control U queda indeterminada y por ende el sistema de control colapsa.

Ahora, para introducir otro concepto considérese el sistema:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f(x) + g(x) U \\ y &= h(x) \end{aligned} \quad (1.2)$$

donde y es la salida de interés.

Como el objetivo de control está ligado con el comportamiento deseado de y , se debe buscar una relación directa entre U y y para que dicho objetivo se pueda cumplir. Si tal relación no es explícita se procede a derivar y tantas veces como sea necesario con objeto de generarla; el número de veces que se requiera derivar se conoce como el **grado relativo "r"**. Para ilustrar, tómesese el modelo matemático no lineal que representa el movimiento

¹ [9] página 378.

vibratorio forzado con amortiguación de un objeto unido a un resorte y expuesto a una fuerza exterior ¹:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\beta}{m} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{k}{m} x = \frac{f}{m}$$

donde

- m = masa del cuerpo
- β = Constante de amortiguación
- k = constante del resorte que sigue la ley de Hooke.
- f = fuerza externa
- x = posición de desplazamiento

Se desea controlar la velocidad del cuerpo, dx/dt, mediante la acción de f.

Para aplicar lo expuesto se procede a transformar el sistema de segundo orden en dos ecuaciones diferenciales de primer orden; si $x_1 = x$, entonces:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -\frac{\beta}{m}(x_2)^2 - \frac{k}{m}x_1 + \frac{f}{m} \\ y &= x_2 \end{aligned} \quad (1.3)$$

Derivando y una vez se tiene que:

$$\dot{y} = -\frac{\beta}{m}(x_2)^2 - \frac{k}{m}x_1 + \frac{f}{m}$$

Así se obtiene la relación entre la salida (x_2) y la entrada (f) de forma que el orden relativo del sistema es uno $r=1$. La anterior ecuación tiene la forma de (1.1) por lo que se puede escribir:

$$f = \frac{1}{\left(\frac{1}{m}\right)} \left[V - \left(-\frac{\beta}{m}(x_2)^2 - \frac{k}{m}x_1 \right) \right] = m \left[V + \frac{\beta}{m}(x_2)^2 + \frac{k}{m}x_1 \right] \Rightarrow \dot{y} = V$$

Vale recordar que el sistema original es de segundo orden mientras que la dinámica resultante para el diseño es de grado menor. Esto conlleva a que una parte de la dinámica del sistema se vuelva no observable y se denomina **dinámica interna**; si esta es estable el controlador efectuará eficazmente su labor, de lo contrario surgen inconvenientes. El estudio de la estabilidad interna se lleva a cabo más fácilmente mediante la introducción del concepto de la *dinámica cero*; su uso y fondo matemático esta fuera del alcance de este trabajo por lo que sólo se resalta que cuando el orden relativo **r** es igual al orden del sistema no se genera dinámica interna lo que hace más directo el diseño del controlador.

¹ [43] página 177 y 187

Una vez presentados varios conceptos se procede a formalizar, un poco, la matemática detrás de la linealización E/S para sistemas de una entrada una salida ('SISO').

Para tal efecto, sea $h(\mathbf{x})$ una función, de un conjunto de "n" variables de estado " \mathbf{x} " con derivadas parciales continuas de cualquier orden, cuyo gradiente se representa:

$$\nabla h = \frac{\partial h}{\partial \mathbf{x}} = \left[\frac{\partial h}{\partial x_1} \quad \frac{\partial h}{\partial x_2} \quad \dots \quad \frac{\partial h}{\partial x_n} \right] \quad (1.4)$$

Ahora, sea un vector $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ con derivadas parciales, de cualquier orden, continuas.

$$f(x) = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

Dados $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ y $h(\mathbf{x})$, se define una nueva función escalar llamada *derivada Lie* de $h(\mathbf{x})$ respecto a $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ así:

$$L_f h = (\nabla h) f = \left[\frac{\partial h}{\partial x_1} \quad \frac{\partial h}{\partial x_2} \quad \dots \quad \frac{\partial h}{\partial x_n} \right] \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} \quad (1.5)$$

La derivada Lie de orden superior se define:

$$L_f^i h = L_f (L_f^{i-1} h) = \left(\nabla \left(L_f^{i-1} h \right) \right) f \quad (1.6)$$

Para un sistema de la forma de (1.2) al cual se pretende aplicar la linealización E/S se procede a derivar la salida y , cuantas veces sea necesario, con objeto de relacionar U y y :

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \dot{y} = \dot{h} = \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = (\nabla h) \dot{x} = (\nabla h) (f(x) + g(x)U) = (\nabla h) f(x) + (\nabla h) g(x)U$$

retomando la definición de derivada Lie se tiene:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \dot{y} = \dot{h} = \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = L_f h + \left(L_g h \right) U$$

Para que la relación entre U y y exista el término $L_g h$ debe ser diferente de cero, si no es así se debe derivar dos veces y :

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = \ddot{y} = \ddot{h} = \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} = \nabla \left(L_f h \right) \dot{x} = L_f^2 h + (L_g L_f h) U$$

Así se continúa hasta que para algún entero “r” $\{L_g L_f^{r-1} h\}$ es diferente a cero de tal forma que se obtiene la relación buscada:

$$\frac{\partial^r y}{\partial t^r} = y^{(r)} = h^{(r)} = \nabla \left(L_f^{r-1} h \right) \dot{x} = L_f^r h + (L_g L_f^{r-1} h) U \quad (1.7)$$

Si se propone que:

$$U = \frac{1}{L_g L_f^{r-1} h} \left[v - L_f^r h \right] \quad (1.8)$$

se obtiene de (1.7) que

$$y^{(r)} = v \quad (1.9)$$

Como el objetivo de control es que y se comporte de cierta forma deseada, llámese y_d la trayectoria deseada cuyas derivadas, al menos hasta cierto orden “r”, son definidas; así, llamando la desviación $e = y_d - y$, se define v como:

$$v = y_d^{(r)} + k_{r-1} e^{(r-1)} + k_{r-2} e^{(r-2)} + \dots + k_0 e \quad (1.10)$$

reemplazando en (1.9) resulta:

$$e^{(r)} = -k_{r-1} e^{(r-1)} - k_{r-2} e^{(r-2)} - \dots - k_0 e \quad (1.11)$$

Se asegura que e tiende a cero a medida que el tiempo tiende a infinito (estabilidad del sistema) si todas las raíces del polinomio $s^r + k_{r-1} s^{r-1} + k_{r-2} s^{r-2} + \dots + k_0$ tienen parte real negativa, o sea, se ubican en el semiplano izquierdo del plano complejo.

1.4 INSTRUMENTACIÓN

Estas líneas están lejos de ser una presentación completa de un área tan compleja y especializada como lo es la instrumentación, por tanto se hace una pequeña introducción de algunos de los tópicos de interés.

1.4.1 Elementos de medición

Para controlar una variable de un proceso, debe haber información sobre la misma, esta información se obtiene midiendo la variable. Para tal efecto se debe disponer un elemento de medición, este es un conjunto de dispositivos interconectados cada uno de los cuales realiza una labor específica para obtener la cuantificación del estado de la variable de interés. Entre los dispositivos encontrados se resaltan el **sensor** que es el elemento primario de medición y se halla, usualmente, en contacto directo con el sistema al que se desea medir una propiedad. El sensor mide la propiedad de interés y envía una señal no estandarizada al **transductor**, esta señal puede ser *análoga* (p.e: presión, intensidad lumínica, voltaje, altura) , o una señal discreta. El transductor convierte una señal de cierta forma física a una diferente (se cambia la naturaleza de la señal); la información no estandarizada del sensor se transforma en una convencional. Las señales estandarizadas más comunes son: 4-20 miliamperios y 3-15 psig. Si se requiere una señal *digital* la señal se cambia a una forma digital equivalente. Finalmente el **transmisor** termina el proceso de adecuación (amplificación, atenuación y filtración entre otras) de la señal con objeto de hacer llegar la información de la variable al lugar deseado.

Una diferencia importante entre los sistemas de transmisión eléctricos y neumáticos es el tiempo requerido para la transmisión. En un sistema eléctrico, básicamente, no hay ningún retraso, en cambio para la transmisión neumática, a medida que el camino de transmisión aumenta se generan tiempos de retraso importantes. Sin embargo si el ambiente de la planta presenta riesgos de explosión se utiliza instrumentación neumática por seguridad.

1.4.1.1 Especificaciones del elemento de medición

Al seleccionar el elemento de medición, deben considerarse varios factores elementales, entre otros:

- **Intervalo de operación:** Es la región dentro de la cual la propiedad será medida, expresada con los límites superior e inferior. Tanto la variable como el instrumento de medida tienen un intervalo. Como un ejemplo, si un proceso normalmente tiene una presión entre 200 y 300 psi, un sensor que mide de 150 a 350 psi sería adecuado; esto permite que tanto condiciones extremas como normales puedan ser medidas. La diferencia algebraica entre el valor más bajo y más alto de la variable de interés que corresponde al 100% de la salida del elemento de medición, se conoce como alcance o '*span*', para el instrumento del ejemplo el alcance es de 2-00 psi.

- **Tiempo de respuesta:** Es la cantidad de tiempo requerida para responder completamente¹ a un cambio en la entrada. Este tiempo es la combinación, suma algebraica, de los tiempos de respuesta de todas las partes del elemento de medición incluyendo el tiempo muerto. En general, un sistema de medición con un tiempo de respuesta corto será más caro pero beneficiará el desempeño del sistema de control.
- **Constante de tiempo:** Tiempo requerido para registrar el 63.2% del valor final de la variable medida cuando se aplica un cambio tipo paso en el sensor. Transcurrida otra constante de tiempo, el elemento de medida registra 63.2% de la diferencia restante, y así sucesivamente.
- **Precisión :** La precisión es una medida de la consistencia del valor que ofrece un elemento de medición cuando se expone al mismo ambiente (la misma entrada durante el mismo tiempo y en la misma dirección), es la máxima desviación con respecto al promedio de medidas registrado. Así, una medida precisa puede estar mal, pero es consistente. La precisión es sinónimo de repetibilidad y puede especificarse como un porcentaje del alcance. Ver figura 1.11
- **Exactitud :** Es una medida de que tanto se acerca la variable registrada al valor real; es la máxima desviación (exceso y defecto) del valor real. La exactitud se define en términos de inexactitud especificándose como un porcentaje (+, -) del alcance. Ver figura 1.11
- **Sensibilidad :** Relación entre un cambio en la entrada y el que sucede en la salida. A mayor sensibilidad, mayor la reacción del elemento de medida a un estímulo de la entrada.
- **Resolución :** Cual es el cambio más pequeño en la variable de interés que se puede medir.
- **Costo :** Además de los factores anteriores, el costo debe ser considerado también. No sólo el costo de la compra inicial, también el costo de mantenimiento del instrumento.
- **Problemas de instalación:** Pueden incluir problemas especiales en el ambiente como humedad, vibración, presión, temperatura, o polvo. También pueden relacionarse con espacio disponible y acceso.
- **Otros :** Distancias de transmisión, tipo y número de señales que deben manejar, protocolos y medios de comunicación. También cuenta el respaldo que se tenga en el proveedor. La resistencia a condiciones agresivas (p.e: vibración) o robustez.

¹ Se suele utilizar entre: +/- 5 % y +/- 2 % del valor final.

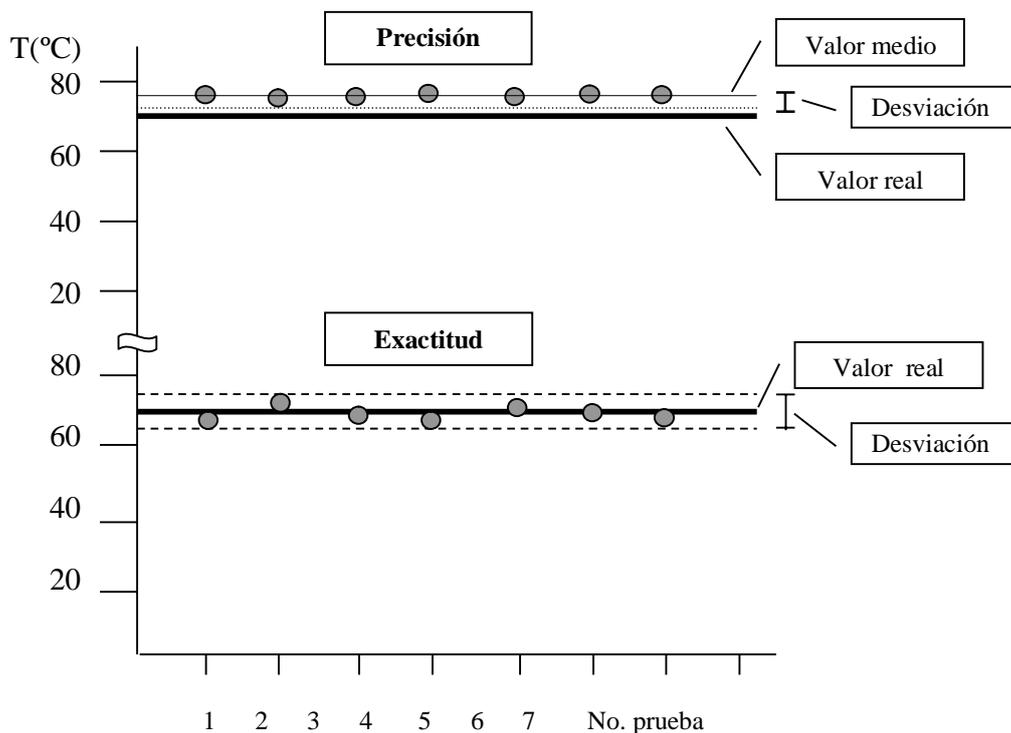


FIGURA 1.11. Exactitud y precisión

1.4.1.2 Algunas características de los equipos modernos para medición

- Pueden convertir señales a su forma digital directamente para transmitir al centro de control, simultáneamente pueden manejar información análoga.
- La integridad y exactitud de la información se puede mejorar mediante el uso de estos dispositivos.
- Otra facilidad es la configuración remota, o sea, no se debe acceder al sitio donde se encuentra el dispositivo pues se puede manipular gracias a comunicación por red.
- Son menos susceptibles a los efectos de temperatura, vibración y humedad que los dispositivos análogos.
- Las últimas tendencias apuntan a integrar el elemento de medida y el controlador dentro de un mismo aparato.
- Finalmente, pueden auto-diagnosticarse.

1.4.2 Elemento final de control

El elemento final de control es el dispositivo que altera el valor de la variable manipulada, en respuesta a la señal de salida del controlador automático, a la señal de salida de un mecanismo de control manual o a su manipulación directa. En sistemas automatizados, consta normalmente de dos partes:

- Un actuador, encargado de convertir en una acción, la señal dada por el controlador; generalmente comprende una gran fuerza o la manipulación de una energía de mayor magnitud.
- Un dispositivo que responde a la salida del accionador, y afecta directamente el valor de la variable manipulada.

El elemento final de control más comúnmente utilizado es la válvula de control, y el procedimiento de la sección 5.2, ha sido preparado para guiar su selección.

2 ESPECIFICACIÓN DEL PROCESO

Teniendo presente que este trabajo pretende impulsar la implementación real del sistema de control, se busca un proceso cuya factibilidad de montaje sea alta. Los lineamientos que marcan la factibilidad son:

- Que las características del producto sean atractivas industrialmente.
- Que exista información disponible (p.e: termodinámica, cinética) con sustento experimental.
- Facilidad para adquisición de materias primas. Economía.
- Que los equipos y recursos necesarios para el mismo, puedan ser conseguidos en el Laboratorio de Ingeniería Química.
- Que las condiciones de operación del proceso disminuyan el riesgo de accidentalidad.

Para la búsqueda del proceso se recurrió a varias fuentes de información, entre otras:

- Ingenieros químicos vinculados a la universidad con experiencia en el área de procesos químicos orgánicos e inorgánicos.
- Profesionales en el departamento de química y farmacia.
- Revisión bibliográfica de tesis de pre y postgrado en Ingeniería química y química.
- Revisión de libros de procesos químicos.
- Revisión de revistas.

2.1 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

En esta sección se presenta el proceso objeto de estudio, la producción de la HMTA. Puesto que la etapa en la que se centra la atención es la reacción se hace énfasis en la descripción de la misma; se presentan de forma concisa varios aspectos, tanto teóricos como prácticos, con ánimo de facilitar el acceso a información que se utiliza en la simulación y en el establecimiento del problema de control.

2.1.1 Selección y características del proceso

Existen muchos procesos de síntesis para la producción de HMTA tanto continuos como semicontinuos [32]; se selecciona la reacción en fase líquida entre $NH_3(sln)$ y $HCHO (sln)$ debido a:

- Disponibilidad de materias primas. Es relativamente fácil conseguirlas a nivel nacional; se ofrecen soluciones de amoníaco entre 20 y 28 %, y para el formol entre 30 y 40%.
- Seguridad en el manejo de materias primas. El almacenamiento y manipulación de soluciones de las materias prima requiere de equipos y medidas de seguridad menos exigentes, si se comparan con las necesarias para las materias primas en estado gaseoso.
- Requerimiento de equipos en planta piloto. En el Laboratorio de Ingeniería Química existen equipos que pueden utilizarse para llevar a cabo el proceso de producción.
- Mayor facilidad para transferencia de calor comparada con la reacción en fase gaseosa. Además, el calor normal de reacción en fase gaseosa es aproximadamente tres veces el de fase líquida; estos dos factores hacen necesario (para la reacción gaseosa) mayores tiempos de reacción para una capacidad limitada del sistema de intercambio de calor, o equipos y servicios adicionales para mejorar (aumentar) la remoción de energía.
- Información. Existen disponibles varias fuentes de información sobre el proceso (p.e: [12] y [32]).

Algunas de las características del proceso reactivo son:

- La reacción es fuertemente exotérmica.
- La temperatura de operación debe ser inferior a 30°C con el objeto de aumentar la selectividad, inhibir reacciones colaterales peligrosas, evitar pérdidas de materias primas y descomposición del producto. Entonces el control de la temperatura se convierte en un aspecto de interés.
- El trabajo a pH alcalino y baja temperatura promueve la formación de HMTA pues la constante de equilibrio aumenta. Bajo estas condiciones la reacción es altamente irreversible.
- Es una reacción compleja cuyo mecanismo concibe varios pasos y, además, dependiendo del reactivo en exceso, la vía de formación cambia.

2.1.1.1 Condiciones de operación para la etapa de reacción

Las condiciones para llevar a cabo la síntesis se establecen con base en información experimental [12]:

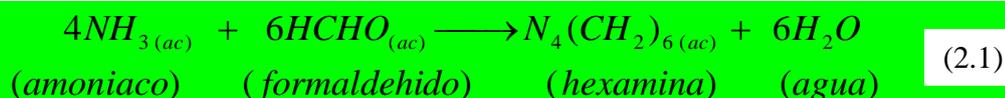
- Temperatura de operación: 23 °C. Como fue mencionado, la reacción de interés es exotérmica e irreversible, para este tipo de reacciones la temperatura de operación corresponde a la máxima permisible; con base en la limitación de temperatura impuesta

por reacciones colaterales y de las particularidades del fenómeno de transferencia de calor propias del equipo disponible (presentadas en la sección 2.3.2.2), la temperatura máxima permisible se fija en 23°C; en términos prácticos significa lograr una mayor conversión, para el mismo tiempo de reacción, respecto a temperaturas inferiores. Esta temperatura es inferior a la máxima recomendada por [12] y hace que no sea necesaria la utilización de equipos adicionales para el intercambio de calor.

- Presión de operación: Atmosférica.
- Relación molar: [NH_3 (1.2) : $HCHO$ (1.5)], exceso de amoniaco.
- Mezcla de reactivos: Debido a la conveniencia de trabajar a pH alcalino, en cuanto a rendimiento y calidad del producto final, el formaldehído es vertido sobre el amoniaco que ha sido cargado previamente en el reactor.
- Catalizador : La gran velocidad de reacción, confirmada experimentalmente por [12] y [32], no concibe el uso de estos agentes; tampoco por selectividad si se tiene buen control de temperatura.

2.1.2 Química de formación

El formaldehído es un compuesto altamente reactivo, entre las reacciones en las que participa, clasificadas como de condensación, se encuentra la interacción con grupos amino. La HMTA se sintetiza, de forma directa, por reacción entre Amoniaco y Formaldehído.

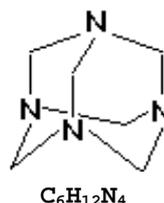


2.1.3 Información sobre el producto

En forma breve se presenta el producto de interés. Información más detallada puede encontrarse en [12, 32, 37, 38¹, 39²], por ejemplo propiedades físicas, químicas, reacciones en las que participa, etc.

FAMILIA QUIMICA: Aminas Terciarias

PESO MOLECULAR: 140.19



SINONIMOS: Hexamina, Urotropina, Metenamina, HMTA, HMT, Aminoformo, Cistamina, Cistógeno, Hexa, Formin.

¹ Vol. A2. Pg. 17

² Pg. 284

La hexamina es un sólido cristalino blanco, no tóxico y sin olor. Se quema fácilmente cuando se pone en contacto con fuego, presentando llama azulosa. Es usada principalmente como fuente de amoníaco o formaldehído ($C_6H_{12}N_4 + 6H_2O \rightleftharpoons 6CH_2O + 4NH_3$), por ejemplo en la producción de resinas fenólicas y de urea-Formaldehído. Se usa como:

- agente de curado o catalizador en la industria de los plásticos.
- acelerador en la vulcanización del hule.
- agente químico en la industria textil.
- antiséptico en la industria alimenticia.
- materia prima en la fabricación de explosivos.
- absorbente de gases venenosos.
- agente anticorrosivo.

Incluye importantes usos en la producción de resinas y adhesivos a prueba de agua y de varios medicamentos; en general es un producto que ha sido aplicado ampliamente [32]. El producto industrial por lo general es del 90% de pureza.

TABLA 2.1 Propiedades físicas del producto

PROPIEDADES FÍSICAS			
PUNTO DE EBULLICION:	Sublima 280°C con descomposición parcial.		
PRESION DE VAPOR:	No volátil	ESTADO FISICO:	Polvo Seco
DENSIDAD APARENTE:	0.625 g/cm ³	COLOR:	Blanco
SOLUBILIDAD EN AGUA: (12°C)	81.3 g/100mL, decrece al aumentar la temperatura. La presencia de amoníaco disminuye su solubilidad.		
PH a 25°C.	7.2 a 8.2	OLOR:	Inodoro
SOLUBLE: Agua, alcohol, cloroformo.	INSOLUBLE: éter, cetona, gasolina.		
CALOR DE FORMACIÓN = 124 kJ/mol [38]	CALOR DE SOLUCIÓN = -20.1 kJ/mol [39]		

Información sobre algunas propiedades químicas, manejo y toxicidad se encuentra en el anexo C-1.

2.1.4 Información sobre materias primas

TABLA 2.2 Calor de formación y solución del NH₃ y HCHO

Sustancia	PM	$\Delta H_f^{\circ 1}$	$\Delta H_{sln}^{\circ 1}$
Amoníaco (g)	17,03	-46,22	-34,67
Formaldehído (g)	30,03	-118,44	-62,8

ΔH_f° a 25 °C, 1 Atm (kJ/mol) ΔH_{sln}° a 25 °C, 1 Atm, dilución infinita (kJ/mol)

Para propiedades como Cp y la densidad de soluciones acuosas de las materias primas, se encuentra información que se referencia en la tabla 2.3.

¹ [15] página 310-316

TABLA 2.3 Calor específico y densidad de soluciones de NH₃ y HCHO

Sustancia	Cp	Densidad
Amoniaco(sln)	$f(\% \text{ peso, Temperatura})^1$	$f(\% \text{ peso, Temperatura})^2$
Formaldehído(sln)	Estimaciones ³	$f(\% \text{ Formol, \% Metanol, temperatura})^4$

Información sobre otras propiedades físicas y lo que concierne a manejo y toxicidad de las materias primas se encuentran en el anexo C-2.

2.1.5 Termodinámica y cinética

La factibilidad termodinámica de la reacción representada por la ecuación (2.1), fue comprobada por [12] y [3]. El calor normal de reacción (25 °C, 1 Atm) en fase líquida calculado con base en los datos de las tablas 2.1 y 2.2 es: -208.84 kJ/mol HMTA. Aunque algunas fuentes, [12] y [38], reportan: -230.3 kJ/mol HMTA no se especifican las condiciones de los reactivos.

Para obtener el valor de parámetros (k_0 y E_A/R) para la ecuación cinética tales que sean adecuados para representar la velocidad de reacción en cualquier tiempo y a cualquier temperatura, se hace uso de la información ofrecida por [12] (sobre de la velocidad inicial de reacción a diferentes temperaturas) para establecer E_A/R y, además, de datos cinéticos globales a una temperatura fija [3] (basados en diferentes relaciones molares iniciales y tiempos de reacción entre 30 y 45 minutos) para definir k_0 .

Como las expresiones cinéticas de las dos fuentes son básicamente iguales y asumiendo el mismo valor para E_A , la relación de los coeficientes cinéticos k es constante para cualquier temperatura. Las dos referencias ofrecen datos para k a 0 °C, entonces, esta relación es:

$$\frac{(k_0 * \exp^{(-E_A / RT)})'}{(k_0 * \exp^{(-E_A / RT)})} \frac{(velocidad\ inicial)}{(velocidad\ global)} = \frac{k_0'}{k_0} \frac{(velocidad\ inicial)}{(velocidad\ global)} = 3.612 \cdot$$

Con esto se obtiene el valor de k_0 utilizado en el modelo matemático despejando de la anterior expresión $k_0 = k_0' / 3.612 = 56.6 / 3.612 = 15.7$ ($l^{2.025} / s * mol^{2.025}$). ; entonces se tiene:

$$-r_A = \left\{ k_0 * \exp \left(\frac{-E_A}{R * T} \right) \right\} * C_A^{1.025} * C_F^2 \quad (2.2)$$

¹ [25] Tomo 1: Tabla 3-194

² [38] Tomo 1: Tabla 3-32

³ [28]

⁴ [38] Volumen A11 página 62

donde:

- A , F = Amoniaco, formaldehído.
- $-r_A$ = velocidad de reacción del amoniaco (mol/(L*s)).
- k_0 = 15.7 (L^{2.025}/s*mol^{2.025}).
- E_A/R = 2639.6 K
- C_i = Concentración (mol/L).

2.1.6 Seguimiento de la reacción

La reacción puede seguirse mediante valoración del amoniaco (reactivo en exceso) [12].

2.1.7 Diagrama de operación

El procesamiento de un lote comprende los siguientes pasos (ver Diagrama de flujo 2.1):

1. Caracterización y pretratamiento de materia prima
2. Carga de amoniaco (sln) al reactor.
3. Adición de formol al reactor.
4. Seguimiento de la reacción hasta finalización de la misma.
5. Generación de vacío y calentamiento circulando vapor en la chaqueta de forma que la Temperatura de ebullición sea 50 °C.
6. Terminación del calentamiento y el vacío.
7. Centrifugación en caliente.
8. Lavado de los cristales con solución de amoniaco al 25% o mayor, y/o agua caliente.
9. Secado directo.
10. Caracterización del producto final.

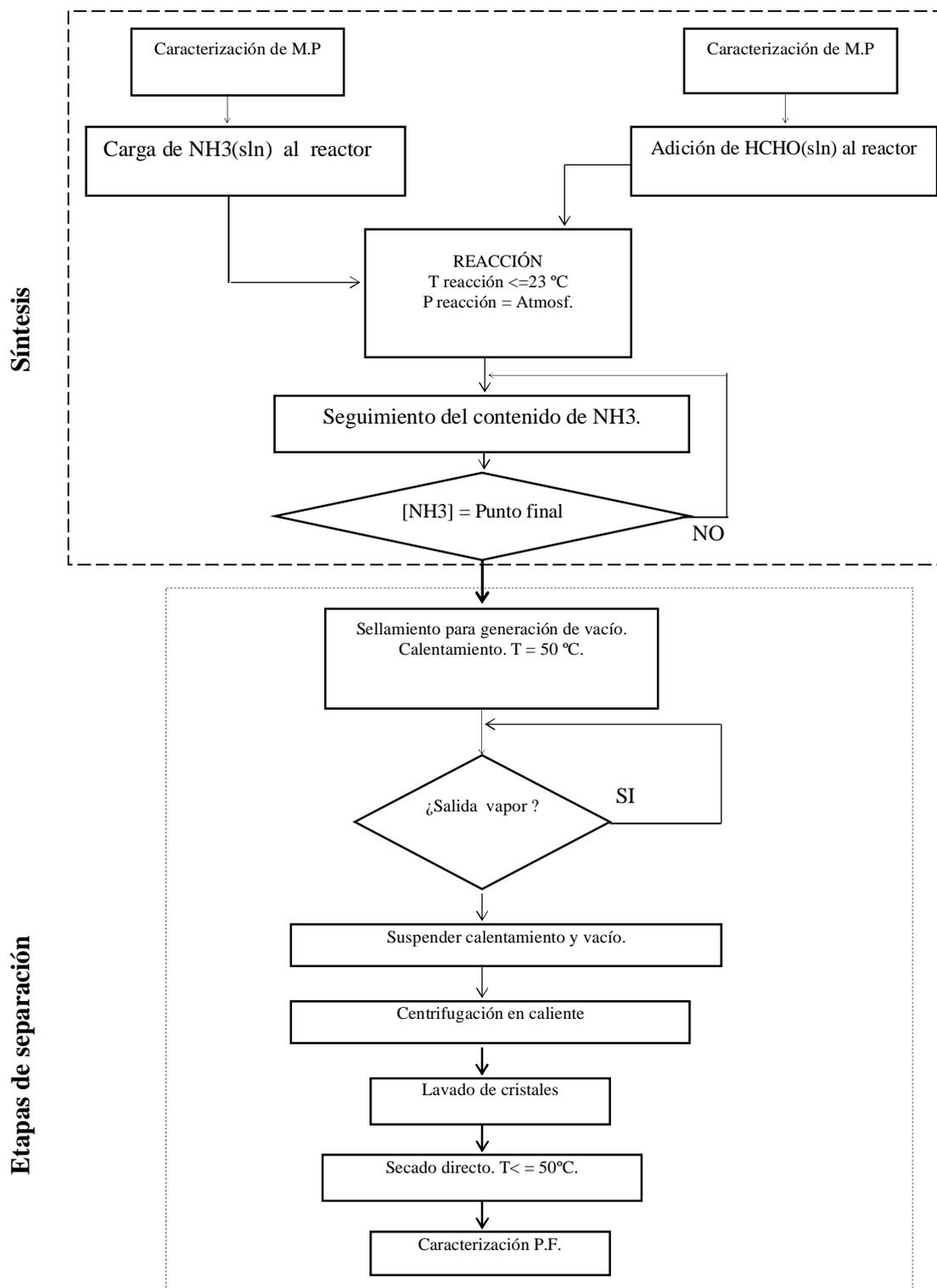


DIAGRAMA 2.1 Diagrama de flujo del proceso.

2.2 DESCRIPCIÓN DEL EQUIPO

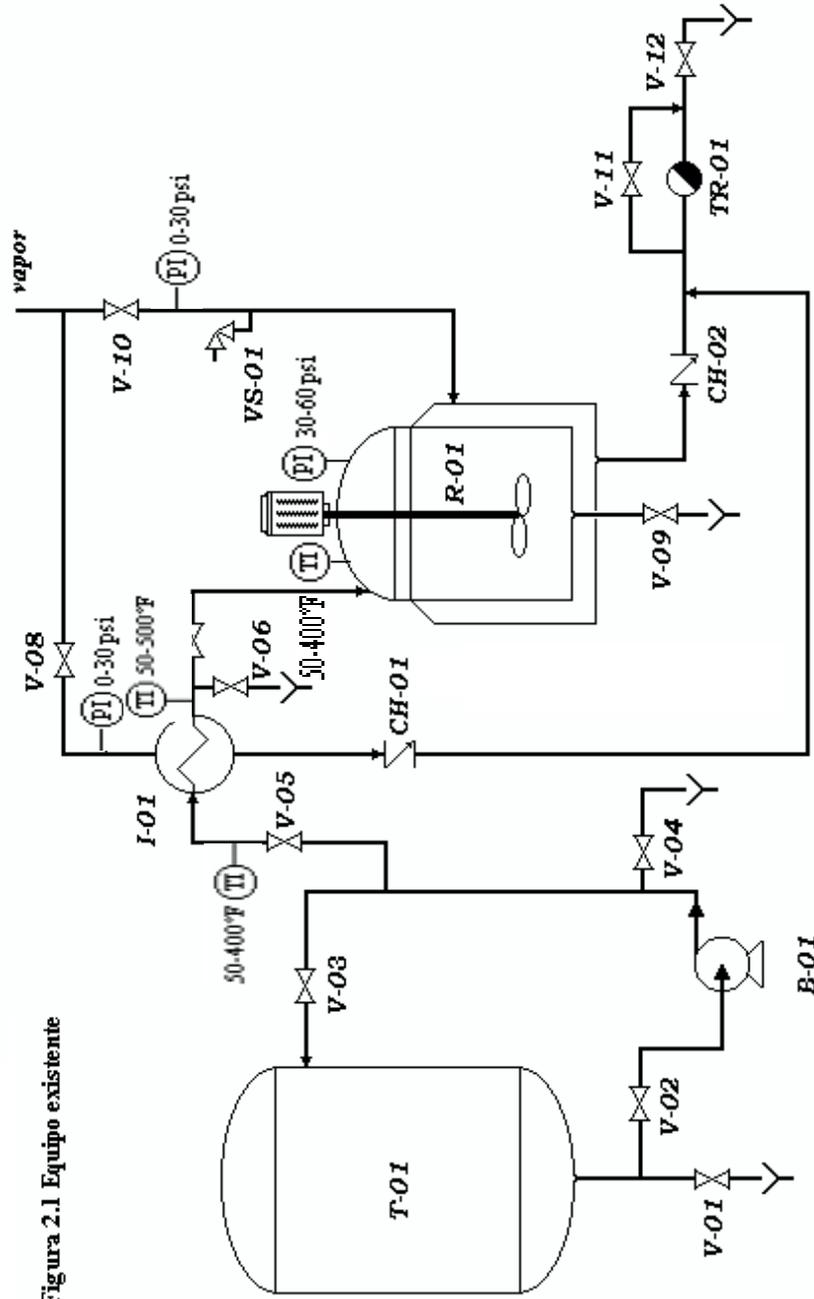
Parte del equipo necesario para llevar a cabo el proceso de síntesis, esta instalado en el Laboratorio de Ingeniería Química. A continuación se presenta el equipo disponible y especificaciones necesarias para obtener el modelo matemático de este sistema.

La instalación de interés es expuesta en la figura 2.1. El reactor R-01 es el equipo principal, puede ser alimentado con el reactivo almacenado en el tanque T-01 mediante la bomba B-01, y puede utilizarse el intercambiador I-01, si el reactivo debe ser calentado. El vapor disponible es de 50-75 psig., alimenta al I-01 y a la chaqueta del R-01, cada uno con su respectiva válvula de cheque (válvula de retención) y una trampa para vapor conjunta para mantener la eficiencia de estos equipos de calentamiento. Todos los instrumentos de medición son de tipo indicador, no existe ningún transmisor o elementos primarios de medida para control automático. En la tabla 2.4 se presentan especificaciones de los equipos importantes.

TABLA 2.4 Especificaciones importantes de los equipos

REACTOR R-01	TANQUE DE ALIMENTACIÓN T-01
Tipo: tanque agitado con chaqueta Capacidad: 25 litros Diámetro interior: 30 cm Diámetro agitador: 13 cm Velocidad del agitador: 170 rpm Volumen de la chaqueta: 2.3 litros Área de la pared: 3298 cm ² Material interior: acero inoxidable tipo 316 Área de la base: 707 cm ² Espesor de la pared: 1.5 mm Motor del agitador: 1.8 hp y 1700 rpm Agitador: tipo hélice de tres aspas. Reductor de velocidad: 1:10	Capacidad: 50 litros Diámetro interior: 35 cm Material: acero inoxidable tipo 304
	INTERCAMBIADOR I-01
	Servicio: calentador del reactivo del T-01 Fluido coraza: vapor Fluido tubos: fluido de proceso
	BOMBA B-01
	Tipo: Centrífuga Potencia del motor: 0.4 hp Velocidad del motor: 1640 rpm

Figura 2.1 Equipo existente



- AG = Agitador
- I = Intercambiador de calor
- TR = Trampa para vapor
- T = Tanque
- TX = Transmisor. Donde X = P (presión), T (temperatura), M (Nivel), F (Flujo)
- XI = Indicador. Donde X = P (presión), T (temperatura), M (Nivel), F (Flujo)
- CH = Válvula Cheque
- R = Reactor
- VS = Válvula de seguridad
- V = Válvula
- B = Bomba

2.2.1 Descripción del reactor

El reactor es de tipo tanque agitado en acero inoxidable 316 (más resistente a la corrosión que el tipo 304 del T-01), tiene una capacidad de 25 litros aproximadamente; posee cuatro baffles igualmente espaciados entre sí y una camisa que puede utilizarse para calentamiento o enfriamiento, que actualmente sólo tiene instalado el servicio de vapor para calentamiento. En la parte superior esta acoplado un motor a un agitador concéntrico tipo hélice de tres aspas, de 1700 rpm (velocidad del motor) con reductor a 170 rpm (velocidad del agitador). La figura 2.2 se presenta información sobre este equipo.

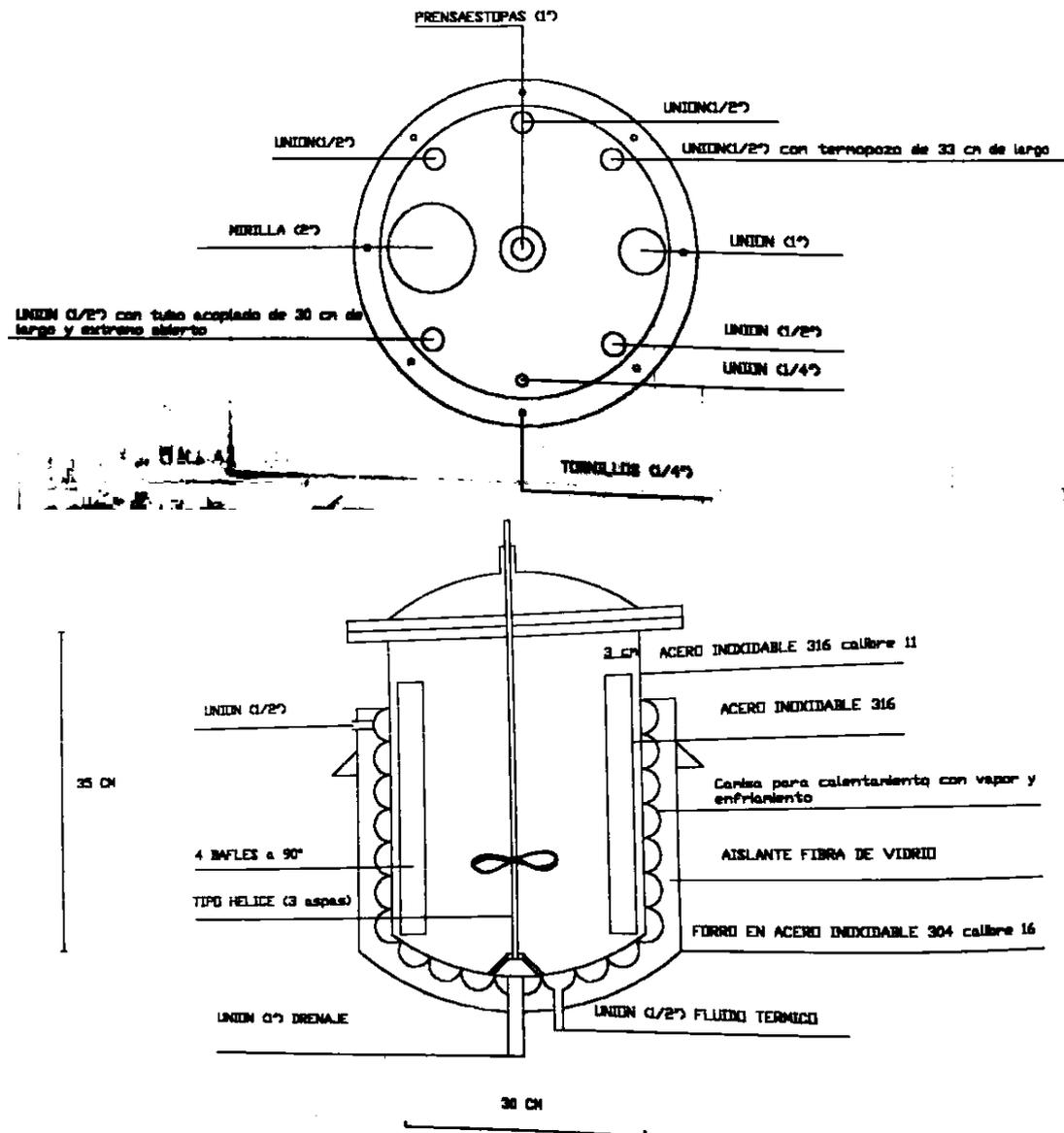


FIGURA 2.2 Reactor R-01

2.3 SIMULACIÓN DEL SISTEMA

2.3.1 Modelo matemático del sistema

La etapa de síntesis en el proceso de producción de hexamina es aquella que será automatizada, entonces se obtiene su modelo matemático para soportar la simulación, el análisis y el diseño del sistema de control. Con base en el modelo desarrollado se toman decisiones acerca de la estrategia a utilizar, se realiza el ajuste de los parámetros de las estrategias seleccionadas y su evaluación.

El modelo matemático derivado resulta del análisis teórico del sistema de interés, fundamentalmente desarrollando sus balances de materia y energía. En su obtención fueron consideradas las siguientes suposiciones y simplificaciones:

- El reactor es de mezcla completa, las propiedades de la mezcla reactiva son uniformes.
- No se intercambia calor con los alrededores (el reactor esta bien aislado).
- Las reacciones colaterales no son significativas respecto a la principal (la temperatura de reacción es siempre inferior a 30°C).
- Las propiedades de la solución de formaldehído, almacenado en el tanque T-01 son uniformes y adicionalmente su concentración es constante.
- El área de transferencia de calor del reactor coincide con el área húmeda interna, cuando el agitador está apagado.
- Se aproxima el área de la base del reactor utilizando el área de un círculo con el diámetro interno del reactor.
- Para el subsistema 1 (figura 2.3), el único intercambio de energía con el medio es a través del calor transferido Q .
- La contribución energética en las formas potencial y cinética en la corriente de entrada es despreciable.
- La diferencia entre la variación de la energía interna y la variación de entalpía en el sistema es poco importante.[21, 34]
- La densidad de la mezcla reactiva permanece constante durante la reacción, al igual que la viscosidad, la conductividad térmica y el calor específico.
- El calor de reacción es constante.
- La conductividad térmica de la pared interna del reactor es constante.
- La capacidad calorífica de la pared interna del reactor se considera despreciable respecto a la capacidad calorífica de la mezcla reactiva.

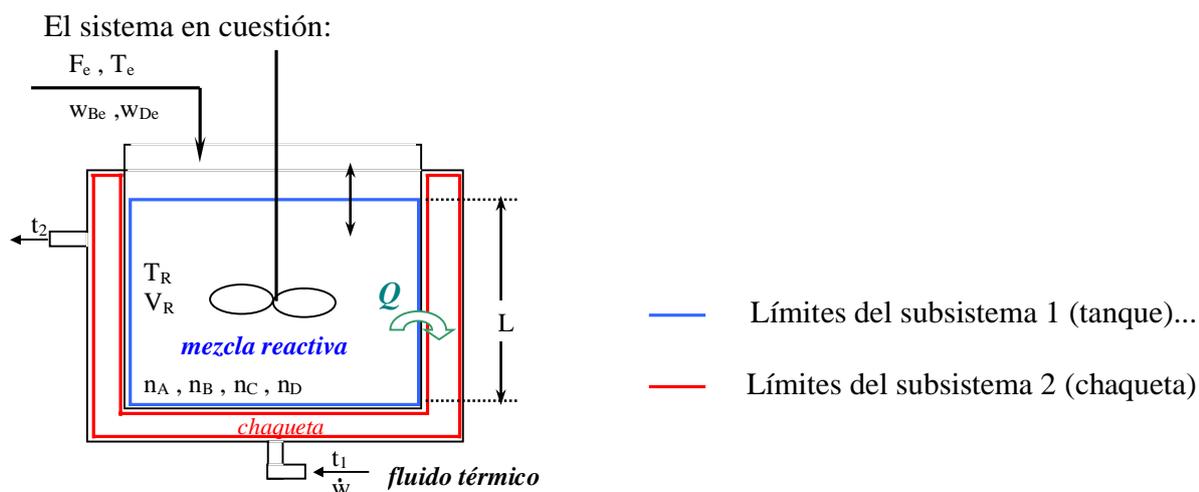
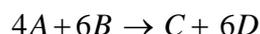


FIGURA 2.3 Esquema para el modelamiento de la planta

En el reactor se lleva a cabo la reacción exotérmica presentada en la ecuación 2.1, y para facilitar el manejo en el desarrollo del modelo, se realiza la siguiente correspondencia:



Así, A=Amoniaco, B=Formaldehído, C=Hexamina y D=Agua. La simbología restante utilizada se presenta al inicio del documento.

En el modelamiento de reactores químicos, cuando el volumen de la mezcla reactiva cambia con el tiempo, resulta más conveniente matemáticamente, usar como variable en los balances, la cantidad de moles de una especie i (n_i) en lugar de su concentración (C_i). [21]¹.

2.3.1.1 Balance de materia para el sistema

- Balance de materia para el subsistema 1 (el tanque reactor)

Al hacer el análisis sobre todas las ecuaciones que pueden obtenerse, se observa que los únicos balances de masa necesarios para la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales, son el de un componente y el balance global; simples relaciones estequiométricas permiten obtener la información de los restantes. Sin embargo, se presentan los de todos los componentes; debe observarse cómo ellas reflejan el hecho de que en estos sistemas semicontinuos la composición varía no sólo por el desarrollo de la reacción, sino también por el flujo de sustancias.

¹ pg. 194

En general se tiene el siguiente balance de masa para una especie i sobre un elemento de volumen, el tamaño de éste es tal que la concentración y la temperatura sean uniformes en toda su extensión; por la primera suposición se hace aplicable a todo el tanque reactor.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{velocidad de alimentación} \\ \text{de } i \text{ al elemento de volumen} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{velocidad de salida de } i \text{ del} \\ \text{elemento de volumen} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{velocidad de producción de } i \\ \text{en el elemento de volumen} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{velocidad de acumulación de } i \\ \text{en el elemento de volumen} \end{array} \right\}$$

Se debe tener en cuenta que antes de iniciar la reacción, el amoniaco que participará en el lote es vertido completamente dentro del reactor. La reacción comienza al caer la primera gota de formaldehído y desde este instante el modelo representa la dinámica del sistema.

Para el componente A (amoniaco)

$$r_A V_R = \frac{d n_A}{d t} \quad (2.3)$$

Para el componente B (formaldehído)

$$F_e \rho_e \frac{w_{Be}}{PM_B} + r_B V_R = \frac{d n_B}{d t} \quad (2.4)$$

Para el componente C (hexamina)

$$r_C V_R = \frac{d n_C}{d t} \quad (2.5)$$

Para el componentes D (agua)

$$F_e \rho_e \frac{(1 - w_{Be})}{PM_D} + r_D V_R = \frac{d n_D}{d t} \quad (2.6)$$

Global:

$$F_e \rho_e = \rho_R \cdot \frac{d V_R}{d t} \quad (2.7)$$

Para conformar el modelo matemático final, se ha seleccionado el balance de masa del componente B (el formaldehído), pero el de cualquier otro también resultaría adecuado. Otras relaciones, en términos de este componente, que serán útiles para monitorear de forma completa el sistema y que se obtienen a partir de la estequiometría son:

$$n_A = n_{A_0} - \frac{4}{6} (C_{Be} \int_0^t F_e dt - n_B) \quad (2.8)$$

$$n_B = n_B \quad (2.9)$$

$$n_C = \frac{1}{6} (C_{Be} \int_0^t F_e dt - n_B) \quad (2.10)$$

$$n_D = n_{D_0} + \frac{6}{6} (C_{Be} \int_0^t F_e dt - n_B) + C_{De} \int_0^t F_e dt \quad (2.11)$$

Para que la conversión sirva como indicativo del avance de la reacción y pueda tomar valores entre 0 y 1, debe definirse con base en el reactivo límite (B) y respecto a la cantidad total de moles dispuestas para el lote a procesar (moles de B disponibles). Para este fin se define en función de la variable utilizada para el seguimiento de la reacción, el contenido de amoniaco.

$$X_B = \frac{\frac{6}{4} (n_{A_0} - n_A)}{\text{moles de B disponibles}} \quad (2.12)$$

Moles de B disponibles = 1.25 moles de amoniaco cargadas (correspondiendo al corte en la adición de B, para un exceso del 20%)

• Balance de materia para el subsistema 2 (la chaqueta)

Al iniciar la reacción la chaqueta está llena de agua (fluido térmico) y su balance de masa para la etapa de reacción es bastante simple:

$$W_1 = W_2 = W \quad (2.13)$$

2.3.1.2 Balance de energía para el sistema

• Balance de energía para el subsistema 1 (el tanque reactor)

Para la representación matemática de la primera ley, aplicada al sistema estudiado, puede escribirse un enunciado verbal similar al utilizado para el balance de masa y desarrollarlo hasta obtener la ecuación matemática que representa su balance de energía:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{energía en las corrientes de} \\ \text{entrada al elemento de volumen} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{energía transferida de los} \\ \text{alrededores al elemento de volumen} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{acumulación de energía} \\ \text{en el elemento de volumen} \end{array} \right\}$$

Nuevamente el elemento de volumen es el mayor volumen dentro del cual la variación de cualquier propiedad sea despreciable; por la primera suposición se hace aplicable a todo el tanque reactor.

balance de energía para el subsistema 1:

$$F_e \rho_e C p_e (T_e - T_R) - Q = V_R \rho_R C p_R \frac{dT_R}{dt} - \Delta H_{R_B} r_B V_R \quad (2.14)$$

Nota: téngase en cuenta que las velocidades de reacción presentan signo negativo para reactivos y positivo para productos y por convención el calor de reacción para reacciones exotérmicas es negativo y para endotérmicas positivo.

• Balance de energía para el subsistema 2 (la chaqueta)

En equipos pequeños, la respuesta dinámica de la chaqueta es muy corta y su estado estable ($\frac{dT_{ch}}{dt} = 0$) se alcanza rápidamente [19], por lo tanto puede usarse simplemente el balance de energía en estado estable:

$$Q = W \cdot C p_{agua} \cdot (T_2 - T_1) \quad (2.15)$$

• Relación entre los dos sistemas

Los dos subsistemas se relacionan a través de Q , para obtener el modelo del sistema de interés. El calor transferido puede suponerse representado por:

$$Q = U \cdot A_T \cdot MLDT \quad (2.16)$$

Diferencia media logarítmica de temperatura (MLDT):

$$MLDT = \frac{(T_R - T_1) - (T_R - T_2)}{\ln \frac{T_R - T_1}{T_R - T_2}} = \frac{T_2 - T_1}{\ln \frac{T_R - T_1}{T_R - T_2}} \quad (2.17)$$

Área de transferencia de calor

Estando la chaqueta llena de agua y suponiendo además que el calor transferido a través de la fase gaseosa es despreciable, entonces de:

$$A_T = \frac{\pi D_R^2}{4} + \pi D_R L \quad \text{y} \quad V = \frac{\pi D_R^2 L}{4 \times 10^{-3}}$$

Se obtiene:

$$A_T = \frac{\pi D_R^2}{4} + \frac{4 \times 10^{-3} V_R}{D_R} \quad (2.18)$$

Coefficiente de transferencia global

Se define a partir del hecho de que la resistencia total ofrecida por resistencias en serie, es igual a la suma de cada una de ellas:

$$\frac{1}{UA_T} = \frac{1}{h_i A_T} + R_{cond} + \frac{1}{h_o A_{T_o}} + \frac{R_d}{A_T} \quad (2.19)$$

La resistencia total es el resultado de dos resistencias convectivas, una conductiva (R_{cond}) y otra debida a la suciedad (R_d/A_T); el coeficiente global de transferencia de calor queda definido como:

$$U = \frac{h_i h_{oi}}{h_i + A_T \cdot \left(R_{cond} + \frac{R_d}{A_T} \right) \cdot h_i \cdot h_{oi} + h_{oi}} \quad (2.20)$$

donde $h_{oi} = \frac{A_{T_o}}{A_T} \cdot h_o$ y $R_{cond} = \frac{\ln(r_o/r_i)}{2 \cdot \pi \cdot k \cdot L}$ ¹

La R_{cond} involucra la resistencia ofrecida por el cilindro lateral y por su base semiesférica. La variable L' en la ecuación para la resistencia conductiva, considera a L más un aporte constante de 7.5 cm, para tener en cuenta la base del tanque reactor, esto es equivalente a considerar un modelo para resistencias en paralelo.

¹ [16] pg. 31

Coefficiente transferencia de calor interno:

En la literatura pueden encontrarse diversas expresiones para estimar este coeficiente en tanques de mezclado con calentamiento o enfriamiento, pero se debe ser cauteloso en su utilización puesto que la transferencia de calor para líquidos, depende no sólo del tipo y diseño del agitador sino también de la forma del tanque contenedor.

Se trabajará con la siguiente expresión obtenida por Brown¹

$$\frac{h_i D}{\lambda_R} = 0.54 \left(\frac{D_{AG}^2 n \rho_R}{\mu_R} \right)^{0.67} \left(\frac{C_{pR} \mu_R}{\lambda_R} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\mu_R}{\mu_{Rw}} \right)^{0.14} \quad (2.21)$$

Es aplicable a un contenedor de fondo convexo con agitador tipo hélice de cuatro aspas planas a 45 grados de inclinación, flujo turbulento y provisto de chaqueta.

Coefficiente de transferencia de calor externo:

Teniendo en cuenta el tipo de chaqueta del reactor, la expresión utilizada se obtiene correlacionando los datos de la figura 25 en [16], que utiliza agua como fluido térmico a través de un tubo (para un diámetro de 1/2" y en términos de W). Se obtiene la siguiente expresión:

$$h_o = 5.67 \left((1.041(1.8T_{ch} + 32) + 95.652) \left(\frac{W}{38.6} \right) + 1.014(1.8T_{ch} + 32) + 85.335 \right) \quad (2.22)$$

A continuación se compendian las ecuaciones necesarias para obtener la dinámica del sistema mediante su solución matemática:

Ecuaciones diferenciales:

Conforman el sistema de ecuaciones diferenciales las relaciones ya presentadas:

$$(2.4) \quad \frac{dn_B}{dt} = f(V_R, r_B, Fe)$$

$$(2.7) \quad \frac{dV_R}{dt} = f(Fe)$$

$$(2.14) \quad \frac{dT_R}{dt} = f(Q, r_B, Fe, T_R, Te, V_R)$$

¹ [27] compendio tabla 1, pg. 534

Ecuaciones algebraicas:

$$(2.2) \quad r_B = f(T_R, n_B, V_R)$$

combinando las ecuaciones 2.15,2.16,2.17 y 2.18 se puede obtener:

$$Q = f(T_R, W, V_R, T_1, U)$$

combinando las ecuaciones 2.18,2.21 y 2.22 se puede obtener:

$$U = f(V_R, T_R, W, n_B)$$

grados de libertad: w, Fe, Te y T₁ .

Nota: El manejo de las propiedades de las sustancias se presenta en la sección 2.3.2.1.2

2.3.2 Análisis de la simulación

En esta sección se formaliza el escenario de trabajo para la etapa de reacción. Una vez esto, se utiliza el modelo matemático consignado en la sección anterior para obtener información ¹ del comportamiento del sistema (p.e: evolución de la temperatura de reacción, capacidad de intercambio de calor del reactor, temperatura final en operación adiabática, tiempo de operación esperado). Conocidas las características del sistema, se describe como se controlaría la temperatura de forma manual.

El análisis se enfoca hacia validación de suposiciones hechas en el modelo, cuantificación del efecto de varios parámetros con incertidumbre en su magnitud y valoración de variables manipulables para ejercer el control de la temperatura del reactor.

2.3.2.1 Escenario de trabajo

Las características y condiciones del sistema se formalizan a continuación:

2.3.2.1.1 Lote a procesar

Carga inicial: 7 kg. (conforme a la capacidad del reactor) de A al 26%, Temperatura² = 19 °C

Exceso estequiométrico de A: 20 %

Cantidad total de B: 10.84 kg. al 37%, Temperatura² = 19 °C

¹ Resolución por medio de métodos numéricos: a. Runge-Kutta cuarto orden, y b. Método de Euler.

² Valor esperado según mediciones hechas en el laboratorio

2.3.2.1.2 Propiedades físicas

Para ver las fuentes de información que sirven de base en el establecimiento de la magnitud de las propiedades ver el anexo D.

- **Masa reactiva**

El valor resulta del promedio aritmético entre su valor inicial (al iniciar la reacción) y final (al finalizar la reacción):

- $C_p = 3.91 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)}$
- $\mu = 1.6 \text{ cP}$
- $\lambda = 0.486 \text{ J/(m s } ^\circ\text{C)}$
- $\rho = 0.972 \text{ g/cm}^3$

- **De la corriente de entrada**

- $\rho = 1.11 \text{ g/cm}^3$
- $C_p = 3.53 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)}$

2.3.2.1.3 Ecuación cinética y calor de reacción

$$\bullet \quad -r_A = \left\{ k_0 * \exp\left(\frac{-E_A}{R*T}\right) \right\} * C_A^{1.025} * C_B^2 \quad (2.2)$$

donde:

- $-r_A$: Velocidad de desaparición de amoniaco ($\text{mol}/[\text{L*s}]$).
 - k_0 : Factor de frecuencia de la ecuación de Arrhenius = $15.7 \text{ (L}^{2.025}/\text{s*mol}^{2.025})$
 - E_A/R : Energía activación/Constante universal de los gases
= $[21946.95 \text{ (J/mol)} / 8.3145 \text{ (J/mol*K)}] = 2639.6 \text{ K}$.
 - C_i : Concentración (mol/L)
- $\Delta H^\circ_R = -208.84 \text{ kJ/mol HMTA}$

2.3.2.1.4 Parámetros del equipo de reacción

De la descripción del equipo, sección 2.2, se tiene:

- $D_o = 0.303 \text{ m}$
- $D_i = 0.3 \text{ m}$
- Velocidad de agitación = 170 RPM.

Por otro lado, para la pared interna del reactor:

- $C_p = 0.444 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)}$, [25, Tabla 3-194]
- $\lambda = 0.014 \text{ kJ/(m s } ^\circ\text{C)}$, [16, página 906]
- $\rho = 7.83 \text{ g/cm}^3$, [25, Tabla 3-32]
- Volumen de la pared y de la base = $5.52 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$.

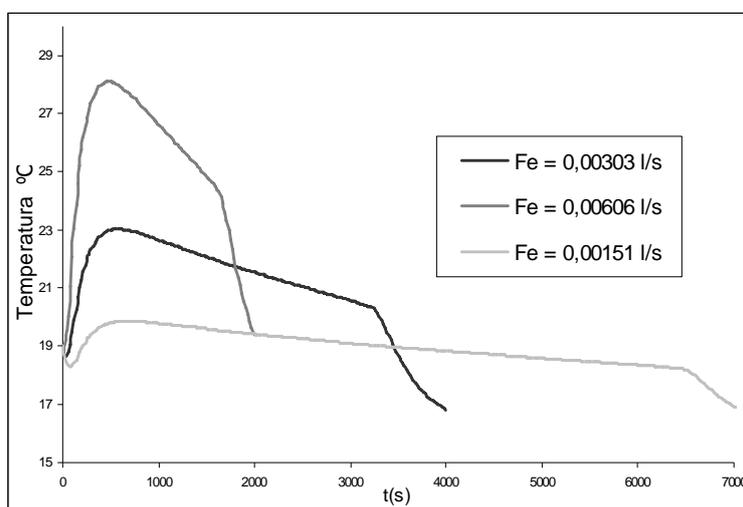
Para el equipo de intercambio de calor:

- Flujo de agua ¹ = 0.25 L/s
- Temperatura del agua a la entrada ¹ = 16 °C
- Factor de suciedad ² = 0.18 m² °C/kW

2.3.2.2 Comportamiento del sistema

Para obtener información sobre el comportamiento del sistema falta especificar el valor del flujo de entrada en el modelo, se trabajan diferentes flujos constantes para observar la incidencia que tiene, Fe, sobre las características del sistema; además, se pretende hallar un flujo constante que respete la condición de temperatura máxima y haga que el tiempo de reacción sea el menor posible y así disponer de un escenario base adecuado para realizar el análisis durante la simulación.

En la siguiente gráfica se presenta la evolución de la temperatura para algunos flujos de entrada:



GRÁFICA 2.1 Efecto de Fe sobre T_R

Con $Fe=0.00303$ (L/s) resulta una temperatura máxima de 23.01 °C y un tiempo de reacción de 3224 s. Este valor de Fe puede verse como **el mejor flujo constante** que no supera las

¹ Valor esperado según mediciones hechas en el laboratorio

² Valor típico de servicio para agua de pozo, [16] página 950

condiciones de operación y permite que el tiempo de reacción sea el mínimo; además, se ve que a partir de cierto tiempo (600 s) el flujo de entrada debe aumentar paulatinamente para mantener la temperatura en el valor deseado.

Para el flujo de entrada = 0.00303 L/s se presenta información relevante adicional (gráficas 2.2 a 2.13) que describe el comportamiento del sistema:

Del estudio del comportamiento del sistema utilizando diferentes flujos de entrada constantes se puede decir que:

- La concentración de formol tiene un valor máximo al final de la adición, este valor aumenta a medida que aumenta Fe. Sin embargo la presencia de formol en el reactor es despreciable lo que lleva a excluirlo en la estimación de las propiedades físicas de la masa reactiva.
- La velocidad de reacción en todo el volumen ($-r_A V$) es prácticamente constante durante toda la operación.

Fe (L/s)	$r_A V$ inicial ¹	$r_A V$ al final de la adición	Diferencia porcentual ²
0,00151	-0,01344	-0,011	18.1
0,00303	-0,0269	-0,02252	16.3
0,00606	-0,05225	-0,0446	14.6

La velocidad de reacción en todo el volumen del reactor puede ser representada aproximadamente así: $-r_A V = C \cdot Fe$, donde C es una constante, es decir que todo el material reactivo que entra se transforma instantáneamente. De esta forma se puede hablar de una reacción de pseudo orden cero.

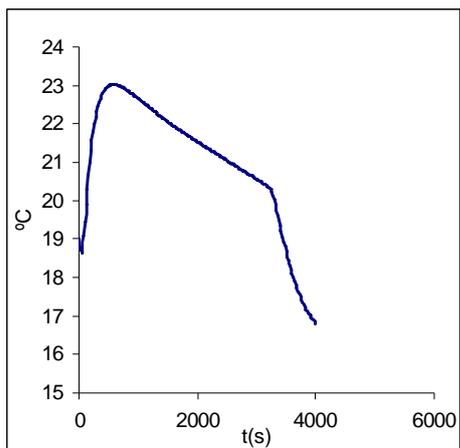
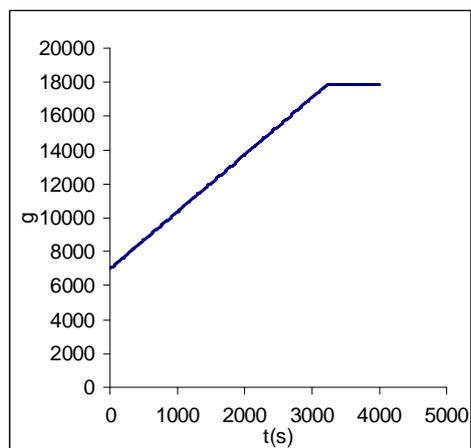
Fe (L/s)	$r_A V$ media ³	$r_A V \cong C \cdot Fe$	Diferencia Porcentual
0,00151	-0,01348759	-0,013767	7.4
0,00303	-0,02586196	-0,027626	8.8
0,00606	-0,05120915	-0,05525	11.7

- La temperatura final del reactor en operación adiabática, bajo el escenario establecido en 2.3.21, es 83 °C.

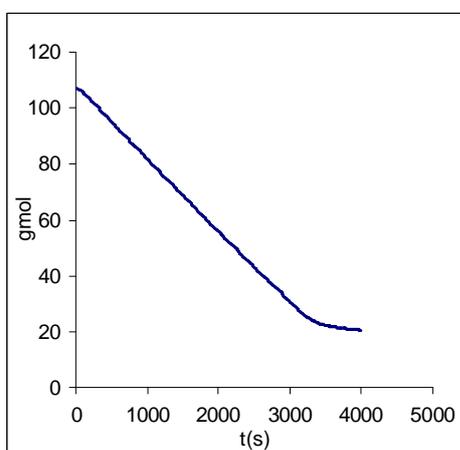
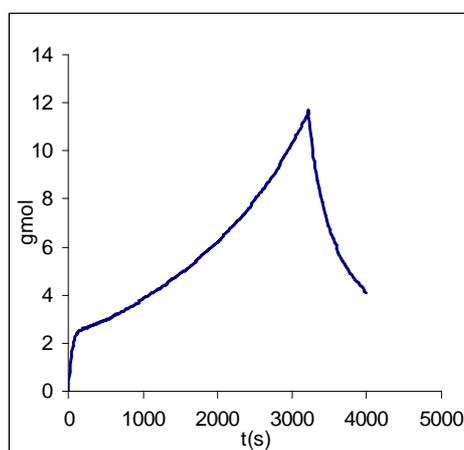
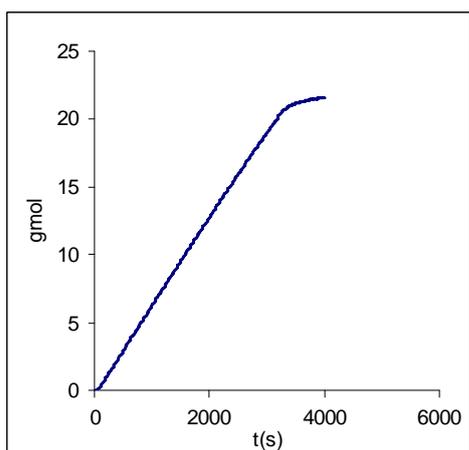
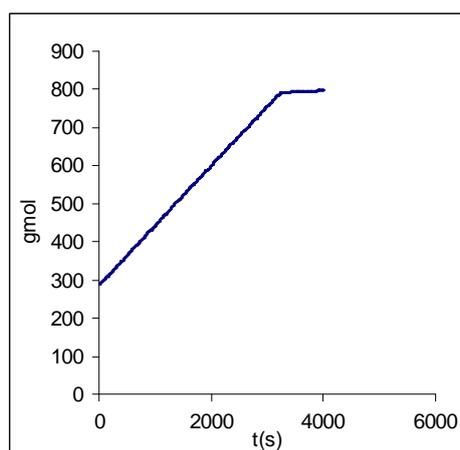
¹ Velocidad máxima de reacción después de iniciada la adición

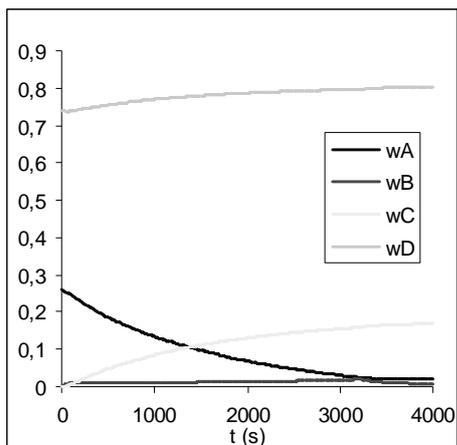
² $100 \cdot (\text{Inicial} - \text{final}) / \text{inicial}$

³ Utilizando el teorema del valor medio; se integra entre $t = 0$ y $t = \text{fin de la adición}$

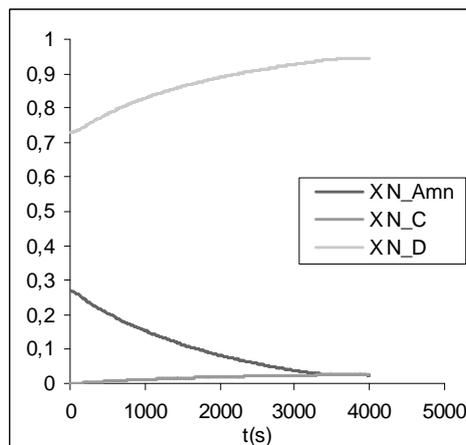
GRÁFICA 2.2 Evolución de T_R 

GRÁFICA 2.3 Evolución de la masa del reactor

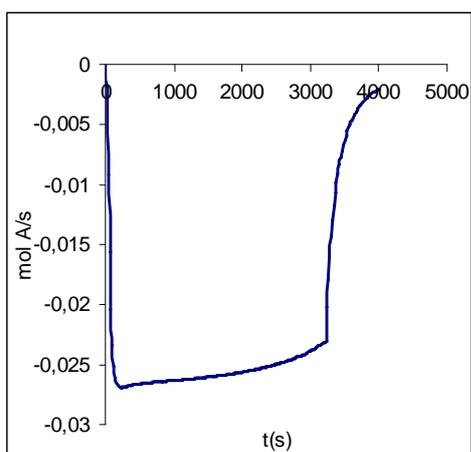
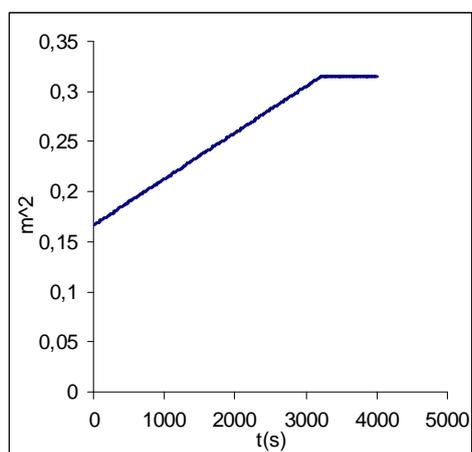
GRÁFICA 2.4 Evolución de n_A GRÁFICA 2.5 Evolución de n_B GRÁFICA 2.6 Evolución de n_C GRÁFICA 2.7 Evolución de n_D



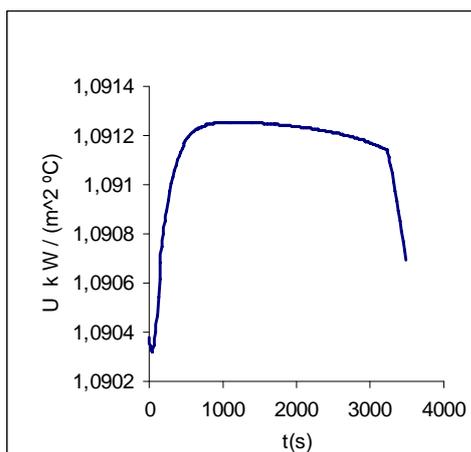
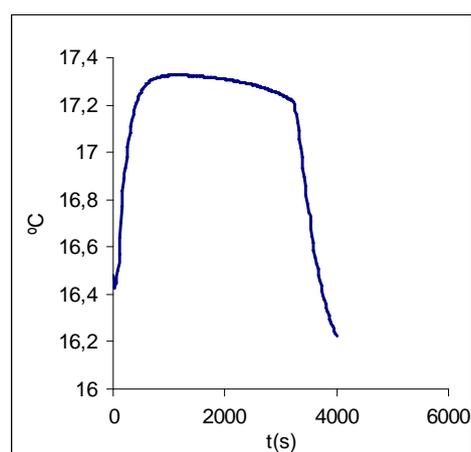
GRÁFICA 2.8 Evolución de la fracción másica



GRÁFICA 2.9 Evolución de la fracción molar

GRÁFICA 2.10 Evolución de $-r_A V$ 

GRÁFICA 2.11 Evolución del área de transferencia de calor

GRÁFICA 2.12 Evolución de U_d GRÁFICA 2.13 Evolución de T_2

Otras observaciones son:

- Existe un intervalo de tiempo en el cual variables como T_2 y U_d exhiben un valor constante. A medida que aumenta el valor de Fe este intervalo disminuye.
- Aunque todas las resistencias son relativamente influyentes, la dinámica de la transferencia de calor esta limitada, principalmente, por el coeficiente de transferencia interno h_i . Resistencia interna $=1/h_i= 0.54 \text{ m}^2 \text{ }^\circ\text{C/kW}$; Resistencia externa $=1/h_o= 0.15 \text{ m}^2 \text{ }^\circ\text{C/kW}$ Resistencia de la pared $= 0.106 \text{ m}^2 \text{ }^\circ\text{C/kW}$; Resistencia de lodos $= R_d =0.18 \text{ m}^2 \text{ }^\circ\text{C/kW}$. Con esto, $U_d = 1.09 \text{ kW}/(\text{m}^2 \text{ }^\circ\text{C})$.
- La capacidad de remoción de calor por parte de la chaqueta no es suficiente, para retirar el liberado por la reacción para cualquier flujo constante superior a 0.00303 (L/s) .
- La influencia que tiene la capacidad calorífica de la pared del reactor, $(mCp)_{\text{pared}}$, en el comportamiento del sistema es mínima pues su valor es casi nulo comparado con el de la masa reactiva.

	Inicialmente	Al final de la reacción.
$(mCp)_{\text{masa reactiva}}/(mCp)_{\text{pared}}$	15.2 : 1	33.85 : 1

- Al inicio de la reacción, la temperatura del reactor desciende alcanzando un mínimo para luego ascender. Esto se debe principalmente a que en las primeras etapas de la reacción la velocidad de generación de calor ($-r_A V \Delta H_R$) es menor que la de remoción ($U_d A \Delta T$).
- Entre 200 y 300 s después de llegar a la temperatura máxima y hasta el final de la reacción, la velocidad de enfriamiento es relativamente constante ($dT_R/dt = \text{Constante}$).
- Propiciar condiciones favorables para la remoción de calor, como trabajar con el mayor flujo de agua disponible y mantener el máximo potencial de temperatura (entre el reactor y la chaqueta) durante el mayor tiempo posible, se ve reflejado en la reducción del tiempo de la operación.
- El proceso exige la manipulación continua de por lo menos una de sus entradas para conseguir durante el todo el desarrollo de la operación la condición de temperatura establecida para la reacción. Un operador puede encargarse de esto, pero esta asignación promueve la variabilidad de la composición obtenida entre lotes y posibilita el alcance de condiciones que degraden el producto; entonces es justificado que sea efectuado por equipo de control automático, evitando además que el operador deba dedicarse a una tarea tan rutinaria y repetitiva.

2.3.2.3 Sensibilidad paramétrica

Esta sección tiene por objeto:

- Validar la suposición hecha en la sección 2.3.2.2 de trabajar el modelo con propiedades físicas de la masa reactiva (C_p, μ, ρ, λ) constantes .
- Determinar el efecto de la incertidumbre en la magnitud de varios parámetros.
- Evaluar cuál de las variables, candidatas a ser manipuladas para ejercer control, tiene mayor incidencia sobre la temperatura.

Para evaluar cuantitativamente cambios en la temperatura del reactor se **propone** como indicador la siguiente expresión:

$$Diferencia (\%) = D_{\%} = \frac{\left[\int_0^{t_{final}} T_{Sistema\ de\ referencia} dt - \int_0^{t_{final}} T_{Sistema\ evaluado} dt \right]}{\int_0^{t_{final}} (T_{Sistema\ de\ referencia} - 18) dt} * 100$$

donde **T** es la temperatura del reactor, y, **t_{final}** es 3500 (s) a menos que se especifique otra cosa. El estudio se realiza con base en la respuesta que se obtuvo en la sección anterior para Fe= 0.00303 L/s (sistema de referencia).

2.3.2.3.1 Evaluación de propiedades físicas de la masa reactiva

Sobre el escenario de trabajo se modificó el valor de una de las propiedades dejando las otras tres con el valor promedio entre el principio y fin de la reacción. La propiedad juzgada se evaluó dos veces (para cada valor extremo). Los resultados son:

TABLA 2.5 Efecto individual del cambio de propiedades físicas de la masa reactiva sobre T_R

Cp J/(g °C)	D%	μ cP	D%	λ J/(m s °C)	D%	ρ g/ml	D%
4.174	2	1.4	4.9	0.452	-5.6	0.908	6.2
3.644	-2.3	1.796	-4.5	0.52	4.7	1.036	-5.8

Se observa que la propiedad de mayor incidencia es la densidad, sin embargo el índice no supera el 7%.

Cuando se simula con todas las propiedades físicas del principio ó del final, el valor absoluto de $D_{\%}$ no supera el 7.6%; entonces, es acertada la suposición de mantener constantes las propiedades físicas.

2.3.2.3.2 Evaluación de parámetros varios

Para los parámetros juzgados se optó por modificar el valor base en (+/-) 10% (se espera que los posibles cambios no superen el 10%). En la tabla 2.6 se enseñan los resultados.

TABLA 2.6 Efecto individual del cambio en algunos parámetros sobre T_R

Vel. Agitación (rev/s)	D%	E_A/R K	D%	C_{pB} J/(g °C)	D%
3.12	6.9	2904	10.7	3.88	1
2.55	-8.1	2376	-7.5	3.18	-1.32
Rd (m ² °C/kW)	D%	k_0	D%	ΔH°_R kJ/mol A	D%
0.198	-4.13	17.27	-0.9	-57.43	-24.7
0.162	4.14	14.13	1.1	- 46.9	25

- El calor de reacción tiene la mayor influencia sobre la temperatura del reactor; este parámetro tiene un fuerte peso sobre el tiempo de operación pues para respetar $T_{R \max}$ se debe reducir el flujo de entrada, esto representa un aumento del tiempo de reacción.
- Comparado con otros, E_A de la expresión cinética y la velocidad de agitación sobresalen.
- Menor influencia ejercen C_{pB} , la temperatura de entrada del alimento y el factor de obstrucción.
- El factor de frecuencia, k_0 , de la expresión cinética no se manifiesta de forma observable en el comportamiento del sistema.
- La variación, de la misma magnitud pero en sentido opuesto, del valor de algunos parámetros, tiene efecto diferente sobre el valor de T_R .

2.3.2.3.3 Evaluación del efecto de algunas variables enfocado a la selección de la variable manipulada

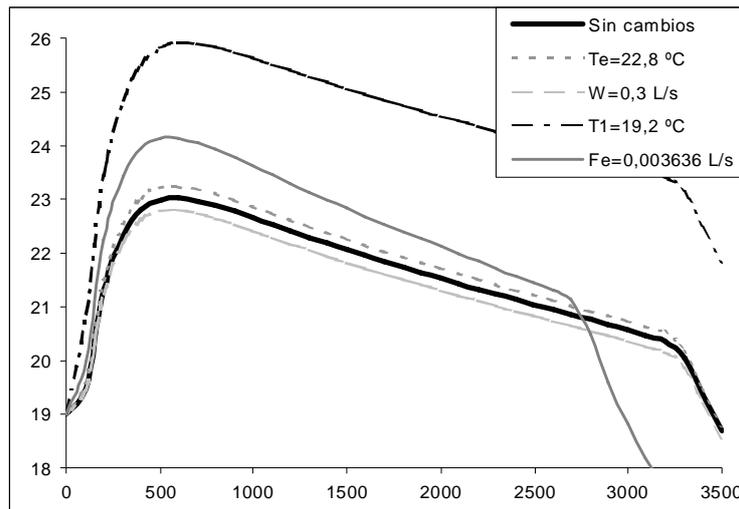
El objeto de esta valoración es puramente numérico, no se tienen en cuenta aspectos operativos puesto que éstos se tratan en el capítulo 3. Por ello, las candidatas analizadas son aquellas entradas, según el modelo matemático: T_1 , T_e , W y Fe . Para todas se modificó en (+/-) 10% y (+/-) 20% el valor base (ver tabla 2.7).

TABLA 2.7 Efecto individual de cambios en W , T_e , T_1 y Fe sobre T_R ¹

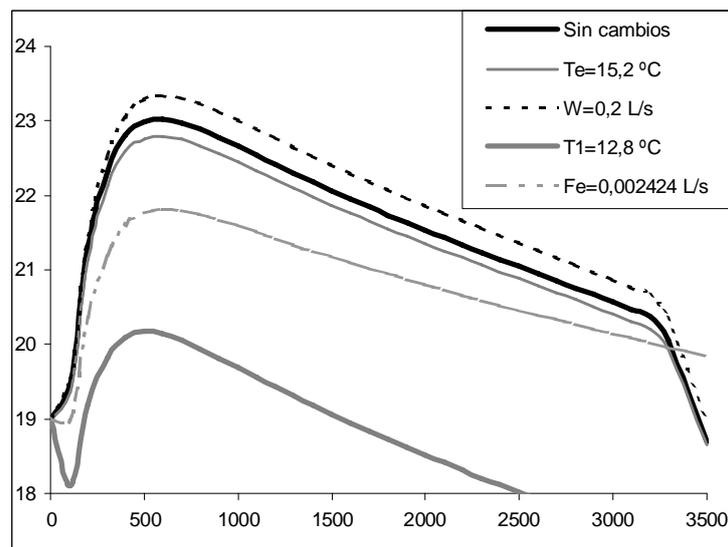
	W (L/s)	D%	T_e °C	D%	T_1	D%	Fe (L/s)	D%
+ / -	0.275	5.2	20.9	-4.2	17.6	-65	0.00333	-16.9
10 %	0.225	-6.3	17.1	4.2	14.4	66	0.002727	17.3
+ / -	0.3	9.6	22.8	-8.4	19.2	-130	0.003636	-37
20 %	0.2	-14	15.2	8.64	12.8	>130	0.002424	36.9

¹ Para cambios positivos de la variable el tiempo final de integración, es el final de la adición de formol; para cambios negativos el tiempo final de integración es 3223 (s).

- La temperatura del agua de refrigeración tiene la incidencia mas fuerte en el desarrollo de la operación.
- La influencia de Fe es mayor que la de W o la de Te .
- La relación entre las variables de entrada y la salida T_R , es aproximadamente lineal según $D\%$.



GRÁFICA 2.14 Influencia individual del cambio (+20%) en variables manipulables sobre T_R



GRÁFICA 2.15 Influencia individual de los cambios (-20%) en variables manipulables sobre T_R

2.3.2.4 Otras consideraciones

Con el objetivo de observar el comportamiento no lineal del sistema excitado con cambios en el Flujo de entrada o Flujo de refrigerante, o temperatura de entrada del agua de refrigeración, se realizaron simulaciones con cambios individuales, los resultados son:

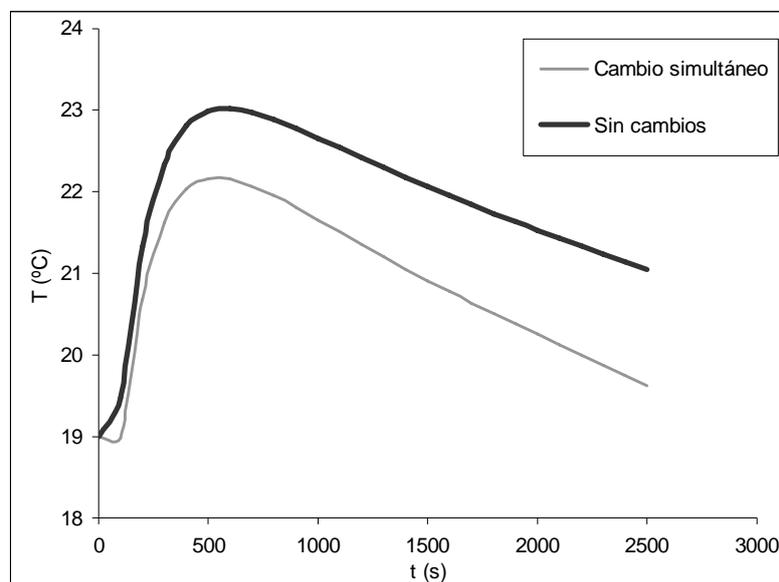
TABLA 2.8 Efecto individual de cambios en Fe, W y T₁ sobre T_{R max}

Fe (L/s)	T _{R max}	ΔT _{R max} ¹
0,00341	23.73	0.714
W (L/s)	T _{R max}	ΔT _{R max}
0,219	23.2	0.185
T ₁ (°C)	T _{R max}	ΔT _{R max}
14	21.23	-1.79

Se realiza otra prueba con las tres (W, Fe, T₁) actuando al mismo tiempo; si existiera un comportamiento lineal el ΔT_{Total} sería la suma de las contribuciones individuales al cambio de temperatura, esto es:

$$\Delta T_{\text{Total}} = \Delta T_{\text{Fe}} + \Delta T_{\text{W}} + \Delta T_{\text{T}_1} = (0.714 + 0.185 - 1.79) \text{ °C} = -0.89 \text{ °C}$$

El valor máximo alcanzado es de 22.18 °C, o sea ΔT_{Total} = -0.84 °C; el cambio es del -6%.



GRÁFICA 2.16 Influencia simultánea de cambios en ciertos parámetros sobre T_R

¹ Tomando como referencia el escenario base, T_{R max} = 23.018 °C.

3 DEFINICIÓN DEL PROBLEMA DE CONTROL

Con base en la descripción y simulación del proceso de interés (capítulo 2), se asignan las tareas que el sistema de control debe realizar. Están dadas por los objetivos, las restricciones y las exigencias de desempeño, presentadas en este capítulo. Para orientar sobre cómo ejecutar las tareas, se realiza un análisis que conduce a la selección de la variable manipulada y se comentan las características de las perturbaciones.

El objetivo de este proceso de síntesis no es comercial sino mas bien académico e investigativo, y aunque no existe interés de tipo económico, se consideran aspectos propios de un proceso industrial.

El sistema de control conformado debe encargarse de la ejecución automática de la etapa síntesis (preparación, inicialización y desarrollo de la reacción química), en el proceso de producción de hexamina; recordando que este es un proceso discontinuo, es necesario utilizar técnicas de control secuencial y de control de lazo (tipo regulador para este caso).

3.1 OBJETIVO OPERACIONAL

- Automatizar la ejecución de la etapa de síntesis del proceso de producción de HMTA, empleando un tiempo de aproximadamente 45 minutos, que se considera adecuado para la realización de una práctica de laboratorio.

Mediante esta automatización pueden lograrse un menor índice de variabilidad de composición entre lotes y evitar condiciones de operación que promuevan la degradación del producto, aunque no considera todas las etapas necesarias para la obtención del producto final.

3.2 OBJETIVOS DEL SISTEMA DE CONTROL

El tiempo empleado por el sistema de control, para cumplir los objetivos que se especifican a continuación, deberá ser alrededor de 45 minutos, que se considera adecuado para la realización de una práctica de laboratorio.

Considerando el anterior objetivo operacional, se definen y especifican las funciones que el sistema de control debe asumir.

3.2.1 Objetivos del control secuencial

La intención es ejecutar el procedimiento de operación, consignado en la sección 2.1.7, de forma segura y eficiente. Por ello se establecen los siguientes objetivos:

- Asegurar el correcto cumplimiento de la receta de producción.
- Verificar el buen funcionamiento de los equipos y dispositivos involucrados.

3.2.2 Objetivos del control de lazo:

- El sistema de control debe regular la temperatura de la mezcla reactiva durante el desarrollo de la etapa de síntesis, alrededor de 23 °C con un margen de error de +/- 0.5 °C (o con una variabilidad de máximo 0.5 °C). Por las razones expuestas en el numeral 2.1.1.1

3.3 RESTRICCIONES PARA EL PROCESO

Existen valores que el proceso nunca debe alcanzar, porque inhabilitan su operabilidad o porque comprometen seriamente su eficiencia; se especifican para que sirvan como base en el establecimiento de las operaciones de atención de fallas del control secuencial. Los valores son sugeridos por la simulación del sistema o por exigencias del proceso:

- Temperatura máxima de reacción: 40 °C
- Flujo mínimo del agua de enfriamiento: 0.15 g/s
- Temperatura máxima del agua de enfriamiento: 20 °C

3.4 SELECCIÓN DE LA VARIABLE MANIPULADA

Mediante el modelo matemático del sistema se realiza la siguiente clasificación de las variables fundamentales de la planta; el valor de otras variables puede obtenerse a partir de éstas.

- Entradas:
 - Flujo de adición del reactivo B (F_B)
 - Temperatura de la corriente de entrada (T_e)
 - Flujo del fluido térmico (W)
 - Temperatura de entrada del fluido térmico (T_1)
- Variables de salida:
 - Temperatura de la mezcla reactiva (T_R), (**Variable controlada**)
 - Volumen de la mezcla reactiva (V_R)
 - Moles de formaldehído en el reactor (N_B)
 - Velocidad de reacción (r_B)
 - Flujo de calor del subsistema 1 al subsistema 2 (Q)
 - Coeficiente global de transferencia de calor (U)

Aquellas que no pertenecen a los grupos anteriores resultan ser los parámetros en el modelo: Las constantes y todas aquellas 'perturbaciones' descartadas (p.e. W_{Be} , N , D).

La salida de interés T_R , es la variable a controlar, y es afectada por: T_1 , F_B , W y T_e ; y en este orden se puede ejercer mayor influencia sobre T_R (análisis de sensibilidad sección 2.3.2.3). Como las variables manipulables directamente son: F_B y W , se concluye que la primera candidata a considerar es F_B .

La necesidad de mantener un nivel de producción determinado no existe, por tanto no se considera que F_B deba eliminarse como candidata; esta variable influye directamente en el tiempo empleado para la producción de un lote, y si la necesidad mencionada existiera, se haría más complicado garantizar su cumplimiento, en caso de actuar como variable manipulada.

El flujo volumétrico del reactivo adicionado (F_B), permite ajustar la cantidad de formaldehído disponible para reaccionar, afectando de manera directa a la velocidad de reacción y como consecuencia a la cantidad de energía liberada por la reacción química. La sensibilidad del proceso a controlar es alta respecto a las variaciones realizadas sobre F_B , y esto posibilita la obtención de un mejor control sobre el sistema. La temperatura de entrada del agua a la chaqueta del reactor (T_1) también posee esta característica, pero convertirla en variable manipulada exige el uso de equipo adicional no existente, para que mediante la manipulación de otra variable, se afecte a T_1 ; si F_B resulta efectiva como variable manipulada, la selección de T_1 complica el sistema y genera costos innecesarios. Además controlar de manera directa la reacción, facilita las labores de atención de falla en el sistema (p.e. detener la generación de calor más rápidamente). F_B se selecciona inicialmente como

variable manipulada, pero si no es posible satisfacer las necesidades propuestas, se deben buscar y examinar otras alternativas.

3.5 FUENTES Y CARACTERÍSTICAS DE LAS PERTURBACIONES

Todas las entradas diferentes a Fe son consideradas variables de carga y se considera que los cambios en el valor de T_1 , W y T_e , son poco frecuentes. La magnitud del cambio que se espera, se encuentra a continuación; su influencia se presenta en la sección 2.3.2.3.3.

- **Temperatura de entrada del agua de enfriamiento (T_1):** La temperatura de este servicio está alrededor de 16°C ; se espera que varíe en un intervalo de $13\text{-}19^\circ\text{C}$ y si cambia, lo hace de manera paulatina, por ejemplo aumentando con una pendiente de $0.1^\circ\text{C}/\text{min}$.
- **Flujo del agua de enfriamiento (W):** Las condiciones de operación normal obtenidas (escenario típico de operación), establecen un valor medio de 250 g/s ($\approx 0.25\text{L/s}$) para esta entrada. Podrá ser alterada por la acción manual de un operador o por cambios en la demanda al sistema de suministro (cuando sean utilizados otros equipos en la planta), posibilitando cambios súbitos en su magnitud. Valor límite mínimo 0 g/s , Valor límite máximo 270 g/s ($\approx 0.27\text{L/s}$) (medido).
- **Temperatura de entrada del formaldehído (T_e):** Esta asociada a la temperatura ambiente pero con una menor variabilidad; se esperan cambios alrededor de un valor medio de 19°C , pero de manera aún más lenta que los sucedidos en T_1 . Se consideran los siguientes límites: Valor mínimo: 16°C y valor máximo: 22°C .

3.6 ASPECTOS DE DESEMPEÑO EXIGIDOS AL CONTROL DE LAZO:

- La temperatura de reacción debe ser mantenida en el valor deseado durante la mayor parte del tiempo de operación; esta exigencia se debe a que temperaturas superiores al valor de referencia, disminuyen la calidad del producto (por aumento de la importancia relativa de reacciones secundarias [12]) y temperaturas inferiores, alejan la síntesis de HMTA de la temperatura óptima de operación. La especificación de esta necesidad se realiza mediante algunos índices de desempeño:

Tiempo de ascenso máximo: 4 minutos (240s)

Tiempo de asentamiento (+/- 2%) máximo: 7 minutos (420s)

Exceso permitido: 1°C

- La respuesta a cambios en las variables de carga no debe exhibir desviaciones superiores a +/- 0.5°C .

4 DISEÑO DEL SISTEMA DE CONTROL

Después de conocer el proceso de síntesis (Capítulo 2) y de definir el problema de control (Capítulo 3), se establecen las estrategias de control secuencial (sección 4.1) y de lazo (sección 4.2). Ambas estrategias son implementadas a nivel de software.

El diseño de las estrategias, hace necesario tener en cuenta algunas consideraciones sobre instrumentos y equipos básicos, requeridos para el control automático del proceso (p.e: medidores de nivel para los tanques de almacenamiento o sensores de temperatura para el reactor), estas consideraciones se hacen sin dar pautas para la selección ¹; o sea que no se pretende dar información más allá de la necesaria para el correcto entendimiento de este capítulo.

A nivel industrial el encargado del control secuencial y/o de lazo es un controlador electrónico (p.e: Un PLC o un PC), y el de la supervisión un P.C. Sin embargo, debido a la relativa sencillez del proceso y a las características y facilidades ofrecidas por el programa utilizado (sección 4.3), todo el control podría ser ejercido desde un computador personal apto para tal fin.

4.1 CONTROL SECUENCIAL

Utilizando la metodología expuesta en la sección 1.2.4, *Metodología para control de procesos discontinuos*, se concibe y formaliza la estrategia de control secuencial; el punto de referencia obligado es el 2.1.7, *Diagrama de operación*, por esto es recomendable leerlo primero para facilitar el entendimiento de esta sección.

¹ En el capítulo cinco se dan sugerencias orientadas a la selección de instrumentos

4.1.1 Definición de elementos de medición y control.

En la página siguiente se presenta un esquema simplificado, figura 4.1, de los equipos e instrumentos necesarios para llevar a cabo la etapa de reacción; en el esquema se presentan elementos que aún no están instalados y se identifican por un símbolo (&).

- Elementos discretos:

Medición		Otros	
Nivel de amoniaco:	TN11	Motor de la bomba:	M11
Nivel de formol:	TN22	Motor del agitador:	M22
		Válvula de admisión amoniaco:	V11
		Válvula de admisión de agua:	V22
		Válvula de drenaje del reactor:	V33

- Elementos continuos:

Medición		Otros	
Flujo volumétrico de agua:	FV11	Válvula proporcional para flujo	V44
Flujo volumétrico de amoniaco ¹ :	TZ11	de formol (Elemento final de	
Flujo volumétrico de formol ¹ :	TZ22	control):	
Temperatura del reactor:	TT11		
Temperatura del agua:	TT22		

- Controlador: **CT-B**

Como se anotó, un computador personal va a llevar a cabo la estrategia de control secuencial y de lazo

¹ La totalización volumétrica se puede llevar a cabo internamente en el computador de control.

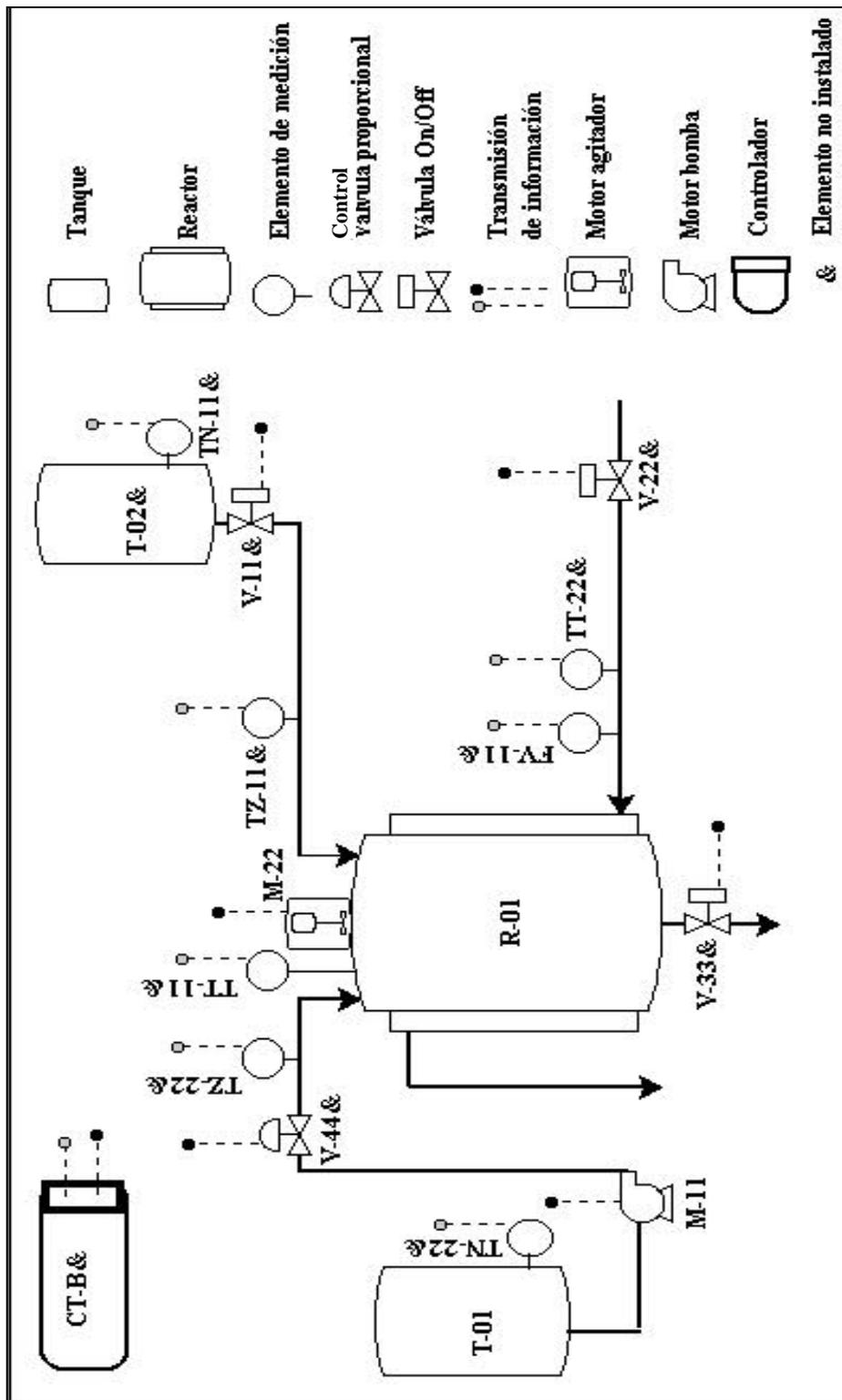
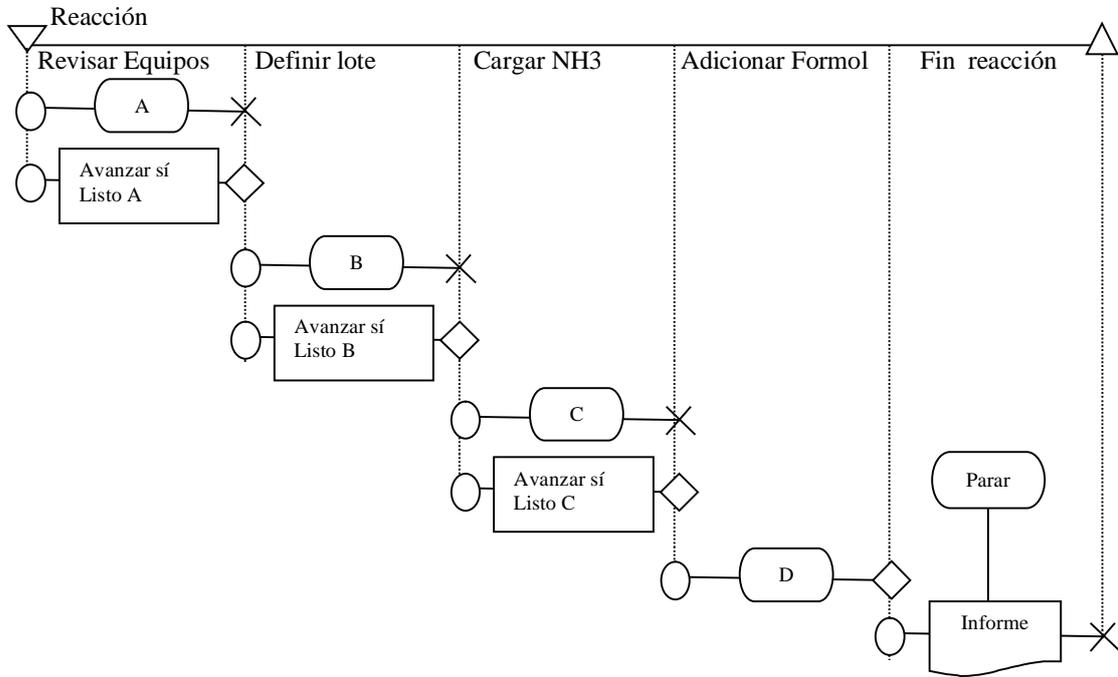
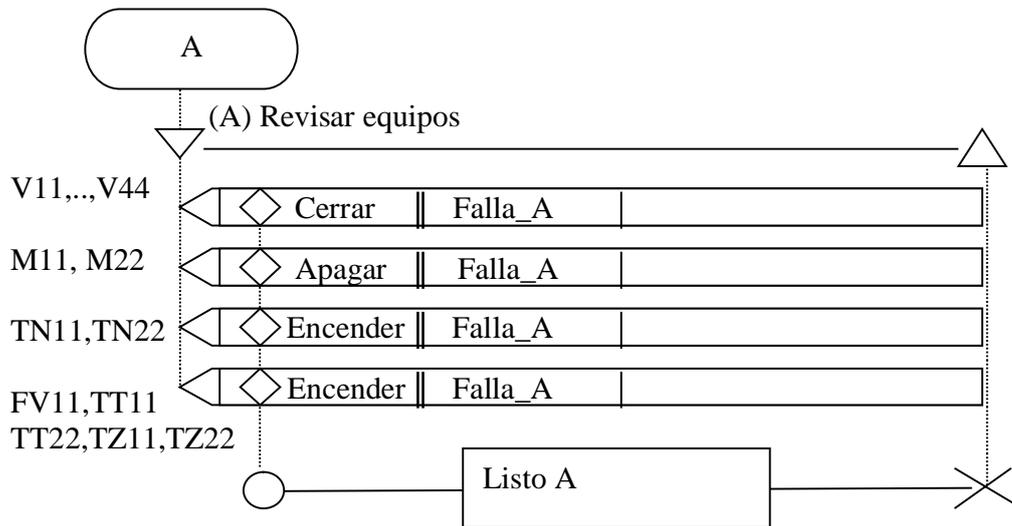


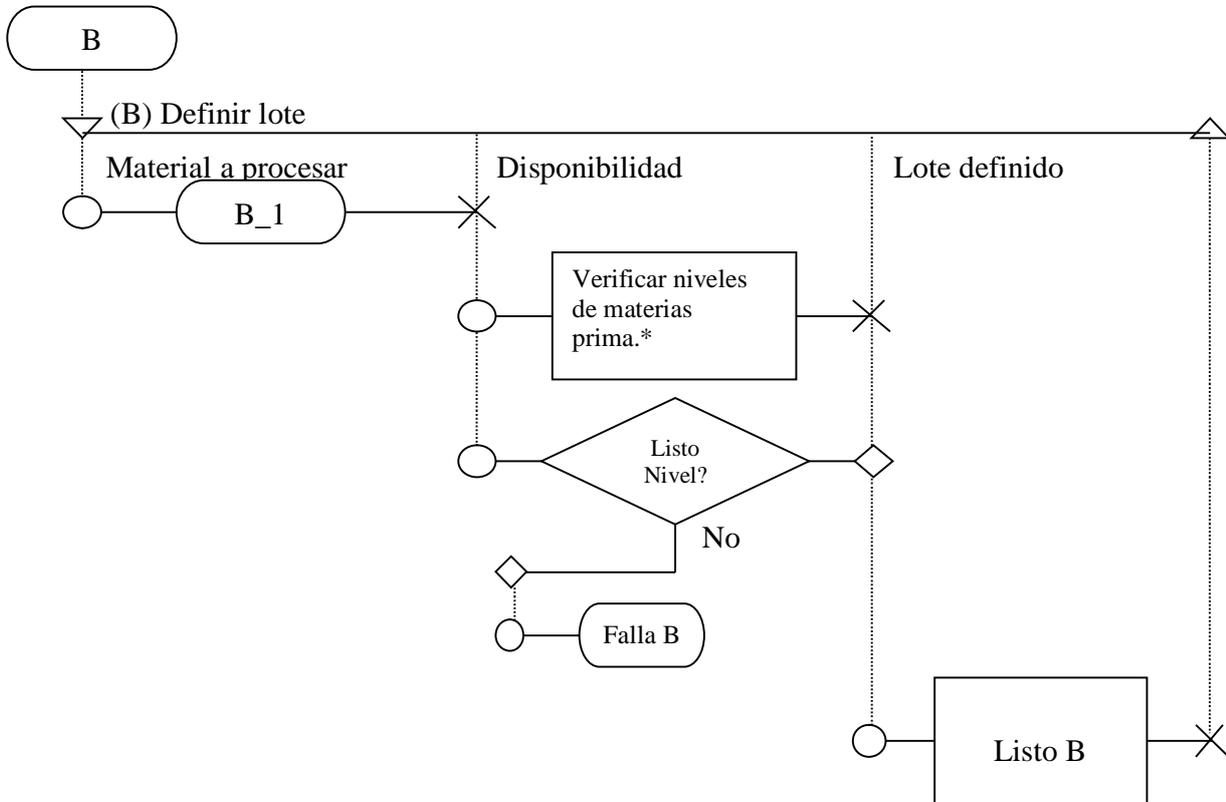
FIGURA 4.1 Esquema simplificado de los equipos

4.1.2 Definición del procedimiento.

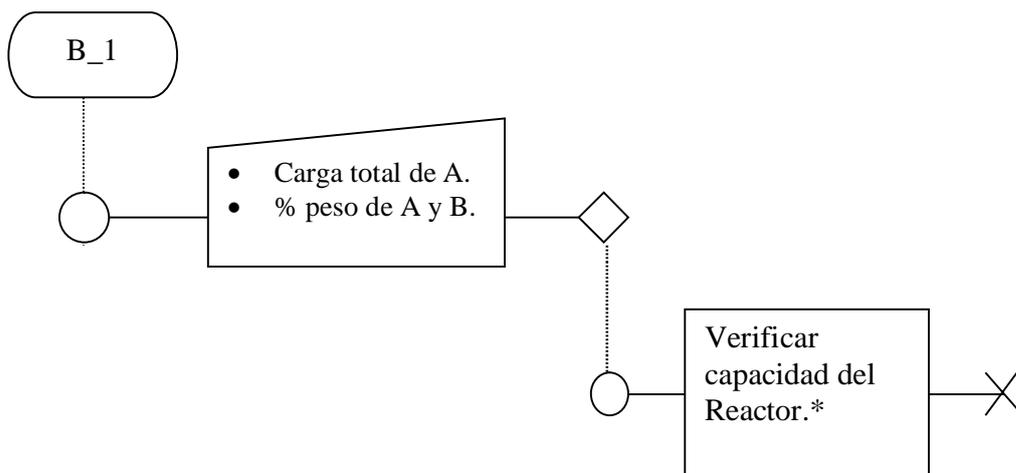


4.1.3 Definición de las operaciones de proceso.

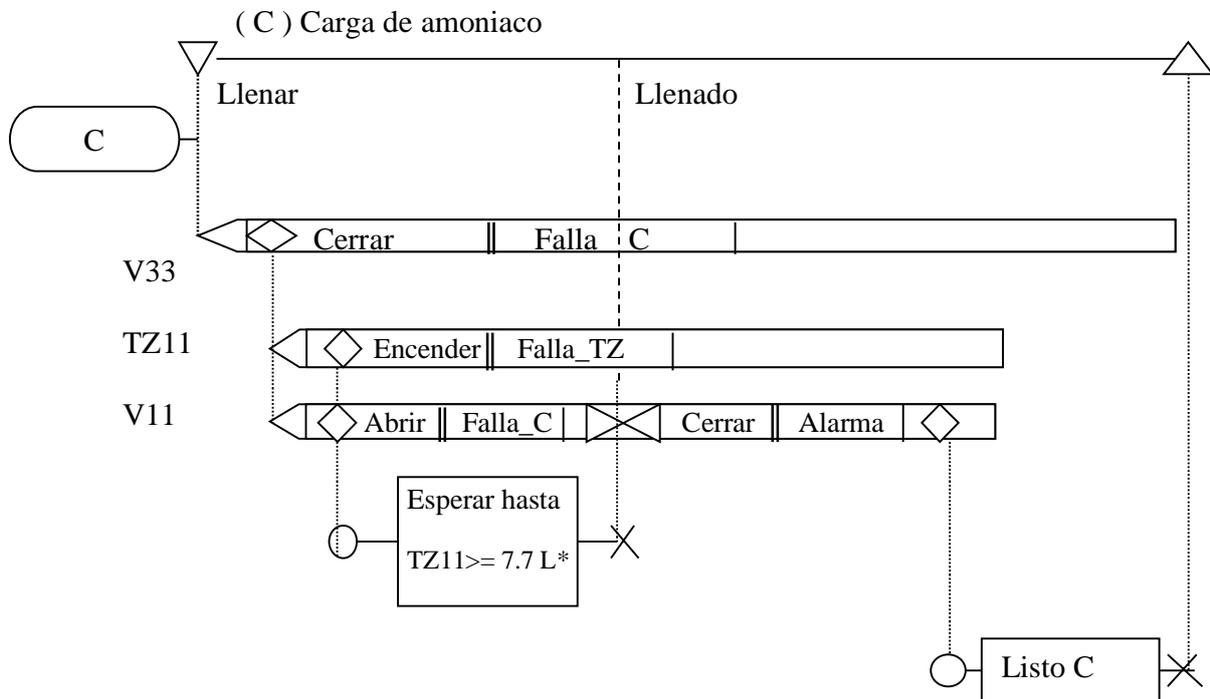




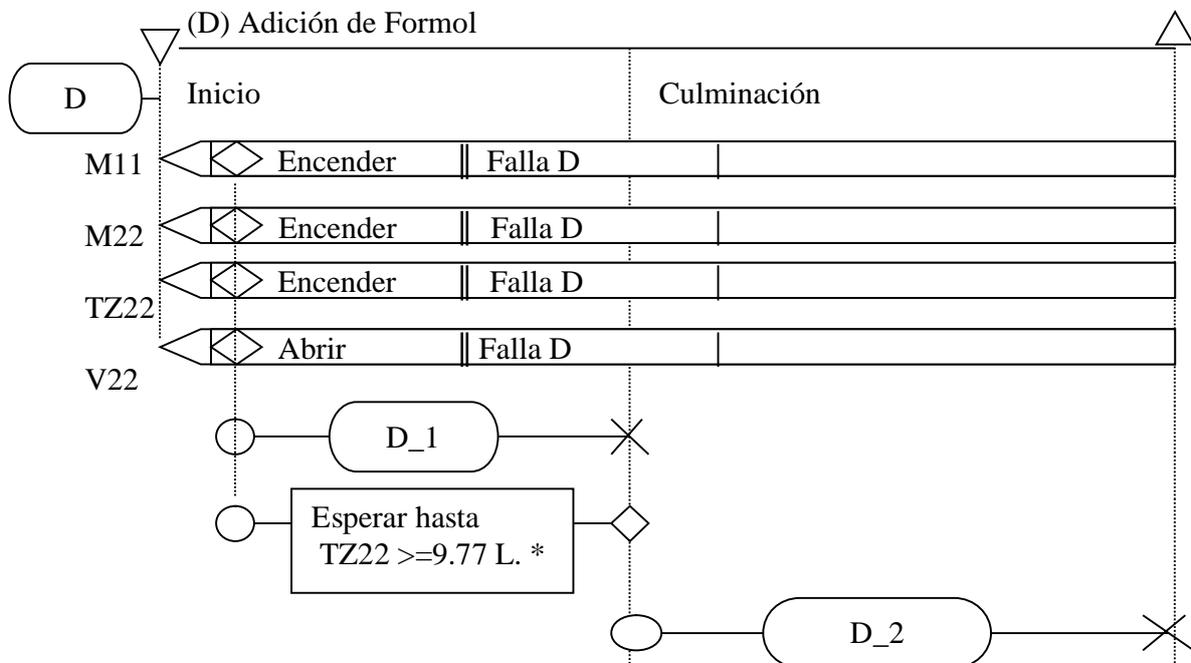
* Se realiza mediante la lectura de nivel de los tanques. La altura mínima de formol en el tanque de almacenamiento T-01 es de 13 cm según: la capacidad del reactor, las concentraciones esperadas de materias primas (A= 25-27% y B= 36-38%) y exceso estequiométrico de amoníaco del 20%; este valor incluye 20% más del mínimo para protección de la bomba. La altura mínima de amoníaco en T-02 es de 12 cm (para un tanque de 30 cm de diámetro que debe contener al menos 7700g de NH₃)



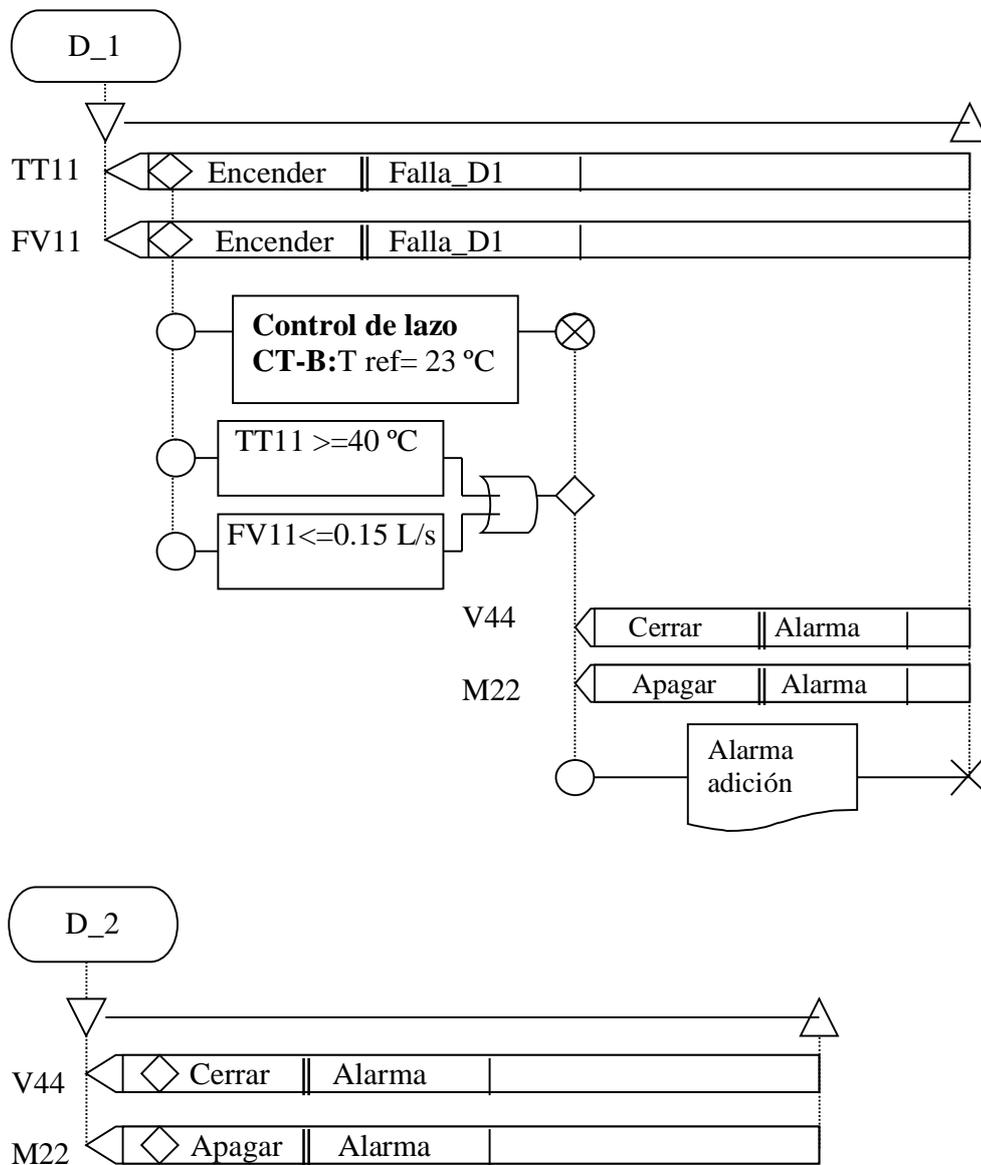
* La carga de amoníaco está limitada; la máxima cantidad, 7536 g, según capacidad del reactor y la mínima, 7000 g, por la altura del agitador respecto al fondo. Ambas consideraciones se hacen teniendo en cuenta el balance de materia, la concentración esperada de materias primas (A= 25-27% y B= 36-38%) y el uso de la capacidad máxima del reactor (80% del volumen total).



* La finalización de la carga, verificada por el totalizador, depende de la carga inicial establecida y de la concentración del amoniaco (de la densidad); el valor escrito corresponde al de la simulación del proceso (sección 2.3.2.1.1).



* La finalización de la adición, verificada por el totalizador, depende de la carga inicial de amoniaco establecida y de la concentración del formol (de la densidad); el valor escrito corresponde al de la simulación del proceso (sección 2.3.2.1.1).

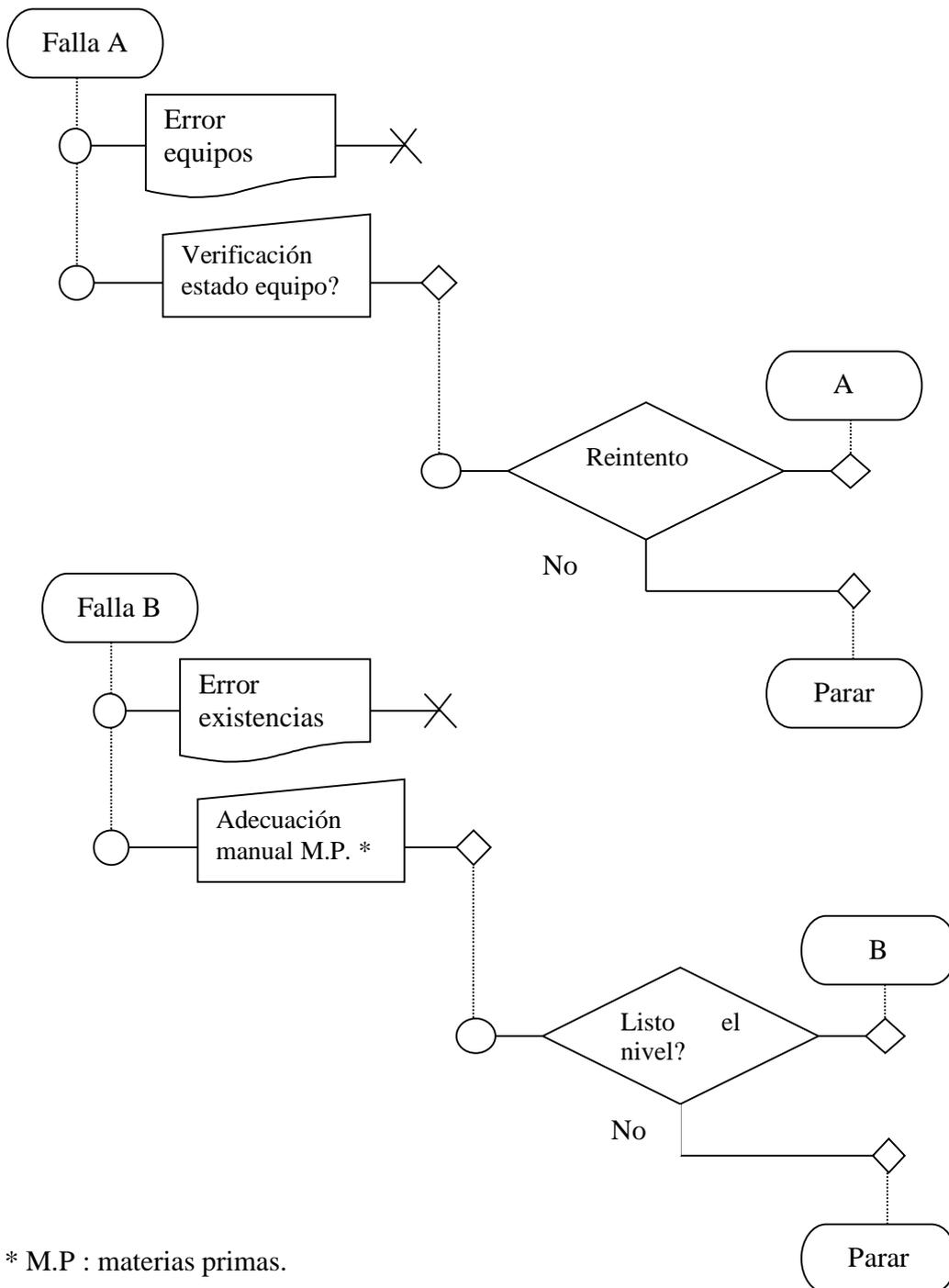


4.1.4 Definición del control de lazo

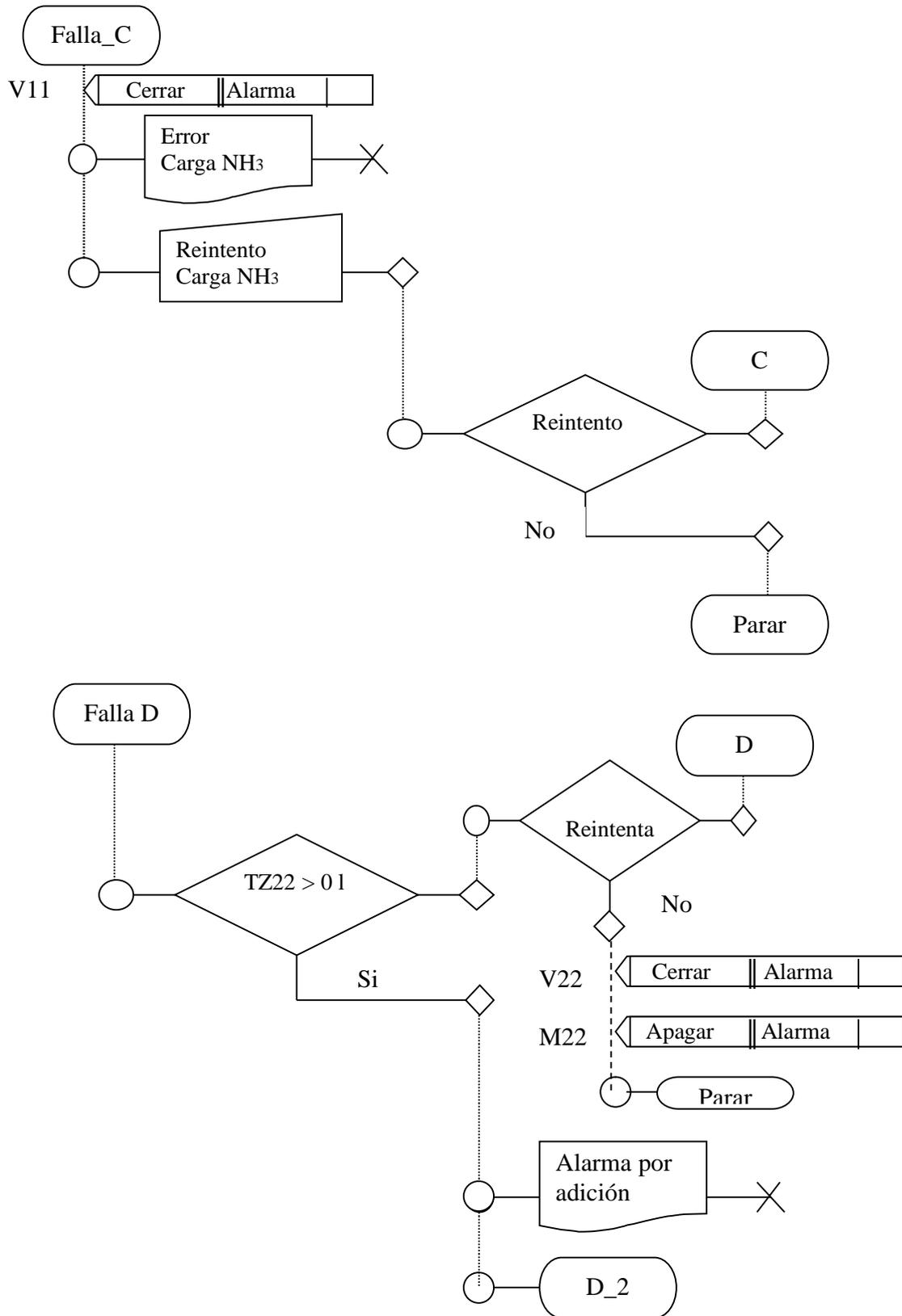
La estrategia de control continuo se trata con detalle en la sección siguiente 4.2, *Control de lazo*; para objeto de entender esta sección no es necesario explicarla aquí.

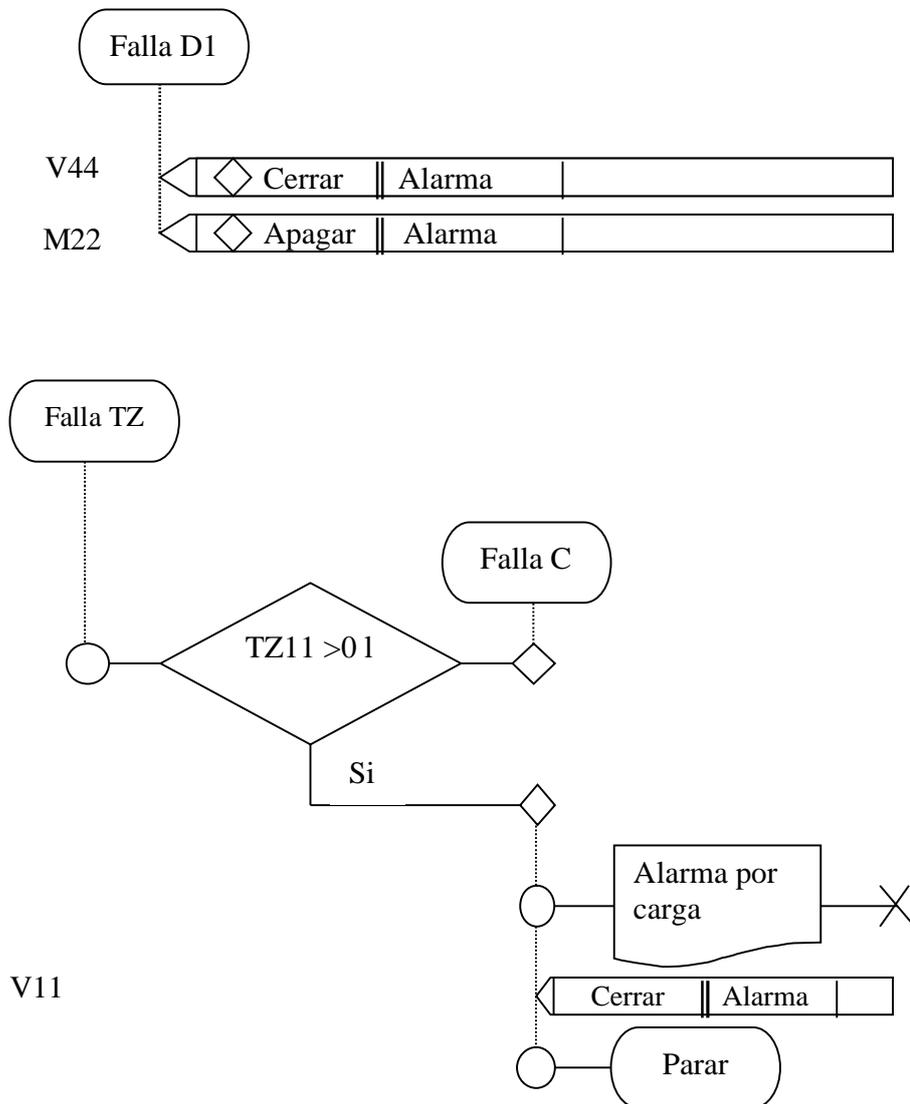
4.1.5 Definición de las condiciones de falla.

En cualquier condición de falla y/o alarma se guardan los valores actuales que definen el estado de los equipos, así como el valor que registran los elementos de medición para tomar acciones correctivas adecuadas y/o de reiniciar el proceso.



* M.P : materias primas.





4.1.6 Reportes.

- Estado de equipos (válvulas, motores, sensores)
- Resumen de alarmas y fallas
- Cantidad de producto obtenido
- Cantidad de materias primas procesadas
- Reservas de materia prima (nivel mínimo)
- Tiempo de operación
- Cantidad de agua de proceso utilizada

4.2 CONTROL DE LAZO

Con base en la etapa de análisis de la planta, se realizó la validación del modelo simplificado que se utiliza en esta sección, para el diseño del controlador; sin embargo, el desempeño presentado corresponde siempre al comportamiento del sistema de control, utilizando la versión completa del modelo y no la simplificada; esto ahorra tiempo y facilita el análisis. El diseño no está dirigido específicamente a enfrentar el efecto de las variables de carga, debido a sus características (sección 3.5). Se ajusta para un desempeño satisfactorio ante la naturaleza cambiante del sistema y se comprueba luego frente a la existencia de perturbaciones.

La suposición de características ideales para los diferentes dispositivos necesarios en la implementación del sistema de control, ofrece un grado de aproximación suficientemente bueno como para conducir un proceso de diseño ordinario¹. Además, el afinamiento en el ajuste de los parámetros de los controladores propuestos, debe realizarse sobre el sistema físico, una vez implementado el sistema de forma completa y así se tendrá en cuenta la dinámica real de los diferentes elementos. De esta manera se lleva a cabo este diseño, y a continuación se presentan las simplificaciones realizadas.

4.2.1 El sistema de control

A continuación se presenta la forma como será tomada en cuenta la dinámica de los dispositivos comunes a todo sistema de control, y que orienta el diseño del controlador.

4.2.1.1 La planta o proceso a controlar

Su modelo ya ha sido presentado (sección 2.3.1). Permite realizar el ajuste de los parámetros del controlador o ser utilizado para definir la ley de control.

4.2.1.2 Elemento de medición

Para el diseño, se supone que el elemento sensor de la temperatura es de tipo lineal, porque se selecciona para operación en un intervalo de característica lineal, o porque se condiciona a que por software o por hardware, se obtenga este comportamiento.

Como ya se había comentado en el inicio del documento, es preferible medir directamente la variable controlada; es posible hacerlo en este caso, utilizando un sensor de temperatura.

¹ [9] pg. 126

Este elemento de medida sensa la temperatura del lote y transmite una señal al controlador. Como se comentó anteriormente se supone que:

$$T_{mR} = T_R$$

Para la información adicional que requiere el controlador No lineal (T_1 y W), se hace la misma consideración sobre los elementos de medida.

4.2.1.3 Elemento final de control

La válvula de control es el elemento más comúnmente seleccionado para actuar sobre un flujo; otra alternativa es una bomba de velocidad variable, mediante el uso de un variador de frecuencia.

Si el EFC es una válvula de control, se supone que su característica instalada es de tipo lineal. Su modelo se involucra directamente en el controlador.

4.2.1.4 El Controlador

El software para automatización utilizado en el desarrollo de este proyecto, permite que el PC cumpla la función de controlador; ambas herramientas están disponibles en la sala de automatización de ingeniería y son utilizadas para implementar la ley de control resultante de la etapa de diseño. Las relaciones matemáticas que representan la dinámica de este controlador son obtenidas y presentadas en la siguiente sección.

La representación del sistema de control utilizada en el diseño, puede ser observada en la figuras 4.2A y 4.2B.

4.2.2 Diseño del controlador

La lista para seleccionar el algoritmo de control, generalmente contiene al de tipo PID o sus derivados dentro de las primeras alternativas a considerar; se dice que el 80% de los problemas de control pueden solucionarse de esa manera [19], y se les prefiere por su utilización generalizada y la experiencia ya adquirida a nivel industrial; por esto además, el desempeño obtenido mediante propuestas diferentes se compara con el que ofrece un controlador tipo PID.

Al querer seleccionar el algoritmo a utilizar, es bastante prudente consultar literatura técnica en busca de aquellos más comúnmente usados en aplicaciones similares, y de alguna manera usar la experiencia ya adquirida por otros ingenieros. En el control de temperatura de reactores por lotes es común encontrar soluciones implementadas con base en controladores PID en cascada, utilizando a W como variable manipulada [6]. Se empieza explorando los resultados obtenidos mediante controladores PID, por su relativa

simplicidad y porque al usar a F_e como variable manipulada, y al ser la reacción altamente exotérmica, el efecto de una variable de carga puede contrarrestarse rápidamente, lo que sugiere que puede no ser necesario el uso de un controlador en cascada; además la perturbación relacionada con la corriente que está siendo manipulada, T_e , es poco influyente en la variable controlada. Debido a que el modelo de la planta es no lineal y no puede ser linealizado alrededor de un punto de operación por las características del proceso, se utiliza también una técnica de control no lineal y se comparan los resultados.

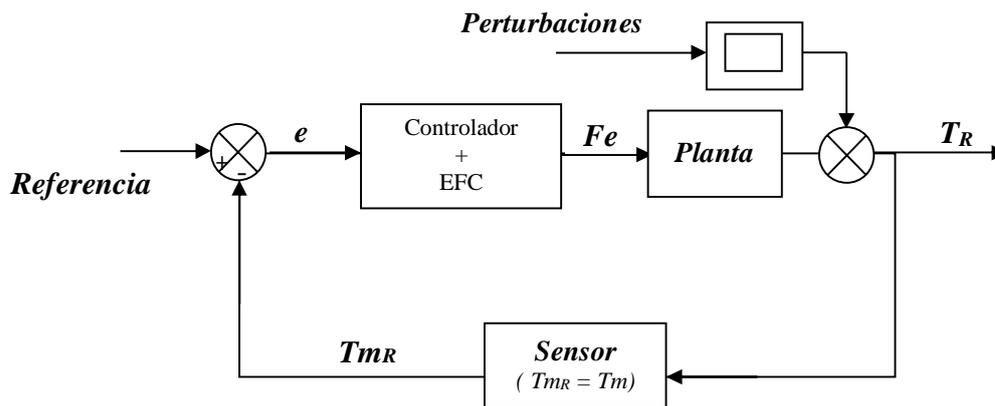


FIGURA 4.2A. Representación del sistema de control PID para su diseño.

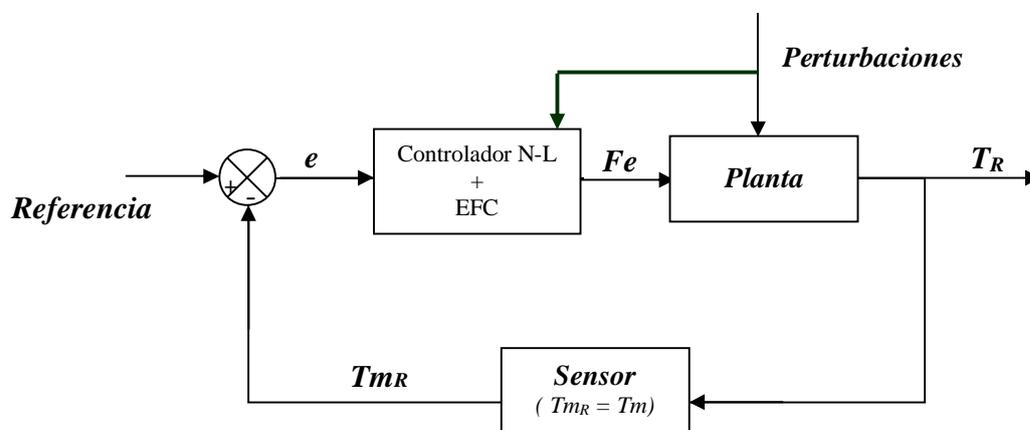


FIGURA 4.2B Representación del sistema de control no lineal para su diseño.

4.2.2.1 Algoritmo de control PID

Se generó una aplicación para desarrollar el modelo matemático que representa al sistema de control, utilizando a Visual Basic como lenguaje de programación; esto permite que diferentes modos de control PID y leyes de control diferentes, puedan ser fácilmente simulados. Los resultados obtenidos en las diferentes corridas, son evaluados utilizando

facilidades para representación gráfica y de manejo de datos ofrecidas por Excel. El resultado final se implementa en InTouch para su simulación. (sección 4.3.1.2)

Los modelos matemáticos utilizados para representar la acción del controlador PID, son:

Proporcional sobre el error

$$F_e = F_{e_s} + K_c \cdot e$$

(Proporcional + integral) sobre el error

$$F_e = F_{e_s} + K_c \left(e + \frac{1}{\tau_I} \int e dt \right)$$

(Proporcional + integral + derivativo) sobre el error

$$F_e = F_{e_s} + K_c \left(e + \frac{1}{\tau_I} \int e dt + \tau_D \frac{de}{dt} \right)$$

Donde :

- F_{e_s} : Respuesta del controlador cuando el aporte de los modos de control sea cero
- K_c : Ganancia proporcional, τ_I : Tiempo integral y τ_D : Tiempo derivativo, son tres parámetros cuyo ajuste permite asignar diferente peso a cada uno de los modos del PID.
- $e = Ref - T_{mr}$ y $Ref = consigna$

4.2.2.1.1 Ajuste de los parámetros del controlador

Existen varias metodologías para encontrar el conjunto de parámetros que se deben especificar y van desde el ensayo y error, hasta técnicas de optimización basadas en funciones objetivo (control óptimo); dentro de éstas se encuentra el método de Ziegler y Nichols (Z-N) y el de Cohen y Coon (C-C) [9] que requieren que el sistema de control alcance un estado estable en el nivel normal de operación y son comúnmente utilizados; pero un proceso por lotes por definición es un proceso de cambio permanente.

En el método Z-N los valores de K_U y P_U se deben obtener mediante experiencias realizadas con el sistema, una vez encontrados se puede usar la tabla 4.1. Lo importante es observar que los resultados obtenidos por Ziegler y Nichols sugieren una relación entre las diferentes constantes del controlador a través de estos dos parámetros, y esto se puede aprovechar para orientar una búsqueda por ensayo y error.

Se debe encontrar un conjunto de parámetros que permita cumplir los objetivos del sistema de control, y al tener implementada la simulación del sistema, se facilita la aplicación de una metodología basada en el ensayo y error, pero especificar tres o más parámetros resulta

difícil; se considera entonces que la utilización de una técnica combinada puede dar resultado y efectivamente así es. Se combinaron el ensayo y error y los valores propuestos por el método de Z-N, presentados en la Tabla 4.1.

TABLA 4.1. Parámetros de ajuste según Ziegler y Nichols ¹

MODO DE CONTROL	K_c	τ_I	τ_D
Proporcional (P)	$0.5K_U$		
Proporcional-Integral (PI)	$0.45K_U$	$P_U / 1.2$	
Proporcional-Integral-Derivativo (PID)	$0.6K_U$	$P_U / 2$	$P_U / 8$

- *Técnica utilizada*

Se empieza por ajustar un controlador proporcional por medio de ensayo y error, esto significa especificar dos parámetros: F_{es} y K_c . Se simula a un controlador proporcional actuando sobre la planta y se realizan diferentes corridas fijando uno de ellos mientras se realiza un barrido sobre el otro; se varía el valor fijado anteriormente y se repite el proceso. De esta manera se logra una exploración completa de ambas variables; mediante el análisis de las tendencias observadas, los valores correspondientes a las respuestas de mayor calidad (aquellas con un menor tiempo de operación, un menor exceso ('overshoot') o respuestas que en general poseen una menor desviación en el transcurso del lote), son seleccionados. Se obtiene un valor para K_U que permite fijar el parámetro K_c para el controlador PI, e iniciar así una exploración por ensayo y error para obtener τ_I , con la ventaja de no ser más compleja que la utilizada para ajustar un controlador proporcional; de la misma manera se continúa para lograr ajustar un controlador PID.

Al aplicar nuevamente esta técnica, puede tenerse en cuenta que los resultados iniciales insinúan un valor para F_{es} , pues sin importar el seleccionado, el valor medio de la respuesta del controlador se mantiene aproximadamente constante entre corridas.. El orden de magnitud de K_c es sugerido por los errores esperados. Así se puede necesitar menos tiempo en el ensayo y error.

Orientado hacia la implementación real del sistema, en la selección de los parámetros se tuvo en cuenta tanto la calidad de la respuesta obtenida, como la salida del controlador (la exigencia al EFC), pues pueden obtenerse dos respuestas similares, pero una requerir mucha más actividad del elemento final de control que la otra; se prefiere la menos activa porque el desgaste y el mantenimiento de los dispositivos implicados serán menores.

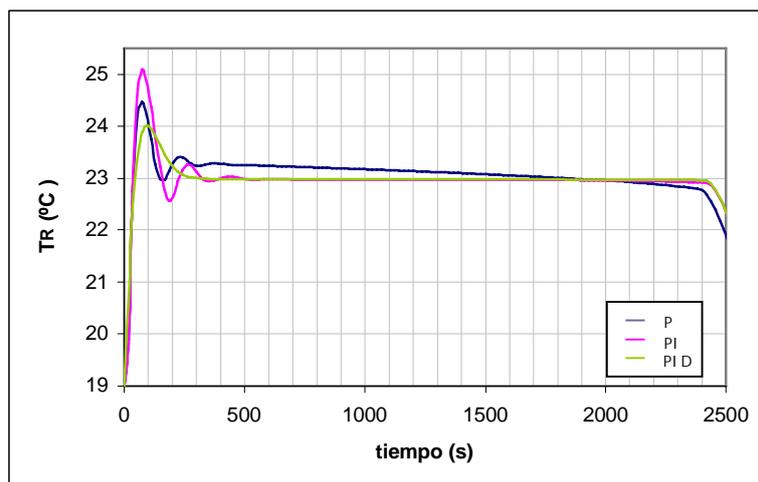
¹ [9] pg. 287

- *Resultados obtenidos*

Aplicando la técnica descrita anteriormente, se obtienen los valores de los parámetros consignados en la tabla 4.2, y la representación gráfica de su desempeño, se muestra en la gráfica 4.1.

TABLA 4.2. Parámetros seleccionados para el controlador PID ($F_{es}=0.0045$ L/s)

MODO DE CONTROL	K_c	τ_I	τ_D
Proporcional (P)	0.005		
Proporcional-Integral (PI)	0.0045	143	
Proporcional-Integral-Derivativo (PID)	0.006	86	21.43



GRÁFICA 4.1 Evolución de T_R con diferentes modos de control PID

Por las muchas respuestas observadas, es claro que existe un compromiso entre calidad y exceso en la respuesta obtenida, que no permite satisfacer todas las necesidades (capítulo 3) mediante un controlador tipo P o PI; pero mediante el controlador PID, el cumplimiento está cerca, según se observa en la figura 4.1.

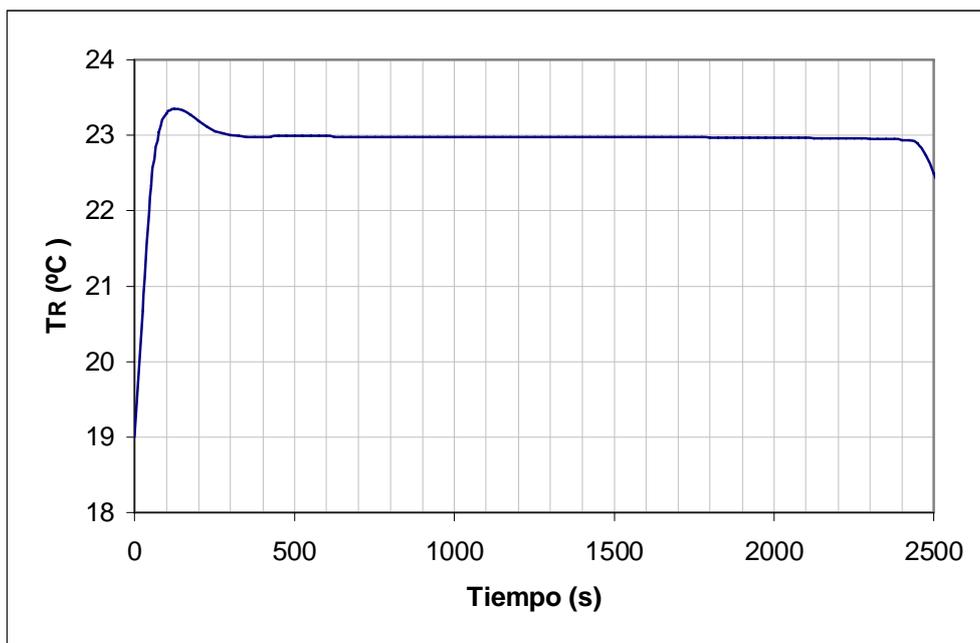
El análisis de los resultados indica que puede mejorarse el desempeño, utilizando un ajuste diferente en los primeros momentos de la síntesis; porque inicialmente el controlador opera sobre valores grandes de desviación (e), que provocan respuestas que necesariamente deben sobrepasar el valor de referencia durante esta etapa. La acción integral inicialmente acumula un error positivo ($\text{Referencia} > T_R$) que provoca uno significativo de signo contrario ($T_R > \text{Referencia}$) para que cese su acción, por esto es un modo relacionado directamente con el exceso, que al ser eliminado en la etapa inicial permite conseguir una mejor respuesta. De las simulaciones, el momento seleccionado para realizar la transición del modo PD al PID es luego de 2 minutos de iniciada la reacción, y de esta forma el exceso se lleva a los

límites permitidos. *El esquema final es entonces un controlador PID sobre el error, que durante los primeros dos minutos elimina su acción Integral.* Y se conforma así el algoritmo de control a utilizar, que en adelante se referirá simplemente como PID.

4.2.2.1.2 Evaluación

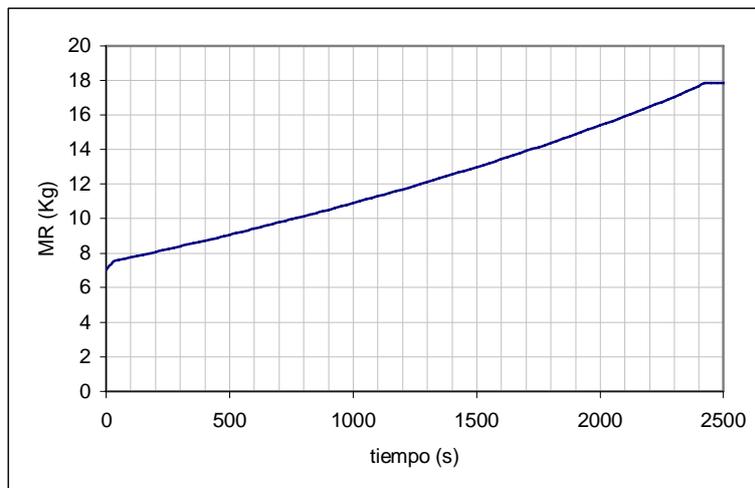
El proceso exige una evaluación con atención en su comportamiento frente a perturbaciones más que a cambios de consigna. Inicialmente se presenta el desempeño del sistema en las condiciones normales de operación (gráficas 4.2, 4.3, 4.4 y 4.5) y luego frente a la actuación de la variables de carga (con índices de desempeño), utilizando señales de prueba que resulten adecuadas para representar a la perturbación analizada, conforme a sus características (sección 3.5).

Desempeño del sistema ante la naturaleza cambiante de la operación únicamente¹

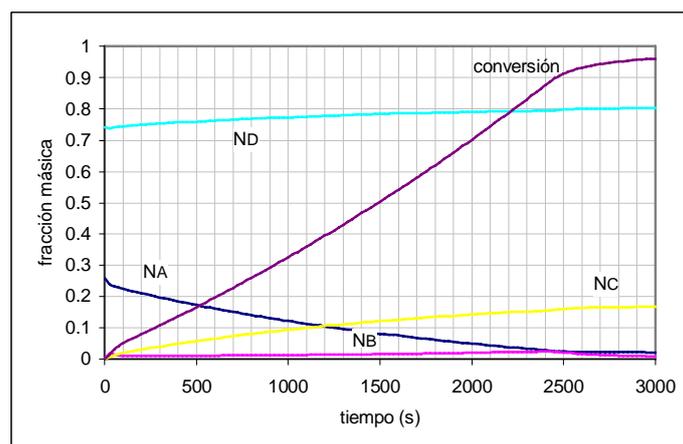


GRÁFICA 4.2 Comportamiento de la Temperatura de la mezcla reactiva

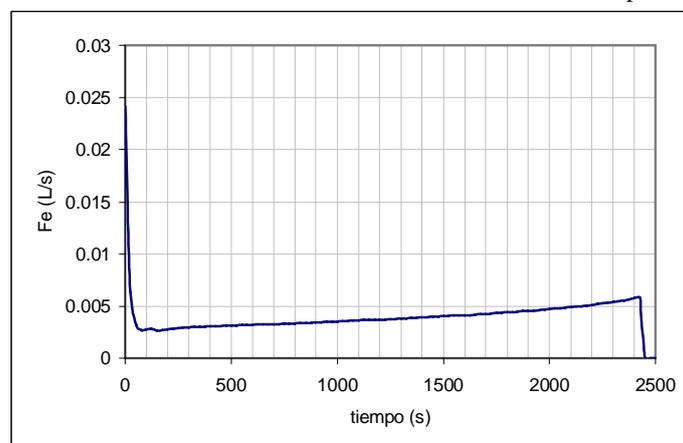
¹ Escenario típico de operación, sección 2.3.2.1, entradas: W=250 g/s, Te= 19°C y T₁ = 16°C



GRÁFICA 4.3 Variación de la masa reactiva en el transcurso de la operación



GRÁFICA 4.4 Variación en el número de moles durante la operación



GRÁFICA 4.5 Exigencia al elemento final de control

Los índices correspondientes al desempeño obtenido son:

$t_{\text{ascenso}} = 75 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 50 \text{ s}$	exceso = 0.35 °C	$t_{\text{operación}} = 2450 \text{ s}$
-------------------------------------	--	-------------------------	---

El controlador PID permite cumplir con los objetivos propuestos, sin embargo su ajuste no dependió de la existencia ni de la magnitud de las perturbaciones consideradas y ahora se analiza justo esto (su comportamiento frente a las perturbaciones). El análisis de cada perturbación se realiza para dos diferentes momentos de aparición de la misma, debido a las características cambiantes del sistema analizado, y sobre el escenario típico de operación.

Desempeño del sistema frente a cambios en la temperatura del agua de enfriamiento (T_1)

Se observa el comportamiento del sistema para casos extremos en la temperatura del agua disponible para enfriamiento: 12°C y 20°C. Recordando el tipo de cambio que puede presentar esta variable de carga, también se utiliza una señal de prueba tipo rampa.

- Rampa 16-20 °C a los 900 s (pendiente: 0.1°C/min)

$t_{\text{asentamiento/p}}^1 = 0$	$t_{\text{operación}} = 2800 \text{ s}$	$e_{\text{max/perturbación}}^2 = \text{despreciable}$
-----------------------------------	---	---

- Rampa 16-20 °C a los 1800 s (pendiente: 0.1°C/min)

$t_{\text{asentamiento/p}} = 0$	$t_{\text{operación}} = 2525 \text{ s}$	$e_{\text{max/perturbación}} = \text{despreciable}$
---------------------------------	---	---

- Rampa 16-12 °C a los 900 s (pendiente: -0.1°C/min)

$t_{\text{asentamiento/p}} = 0$	$t_{\text{operación}} = 2250 \text{ s}$	$e_{\text{max/perturbación}} = 0.11 \text{ °C}$
---------------------------------	---	---

- Rampa 16-12 °C a los 1800 s (pendiente: -0.1°C/min)

$t_{\text{asentamiento/p}} = 0$	$t_{\text{operación}} = 2375 \text{ s}$	$e_{\text{max/perturbación}} = 0.10 \text{ °C}$
---------------------------------	---	---

- Toda la reacción a 12°C

$t_{\text{ascenso}} = \text{no llega a } 23 \text{ °C}$	$t_{\text{asentamiento}} = 60 \text{ s}$	exceso = 0	$t_{\text{operación}} = 1525 \text{ s}$
---	--	-------------------	---

- Toda la reacción a 20°C

$t_{\text{ascenso}} = 40 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 180 \text{ s}$	exceso = 0.73 s	$t_{\text{operación}} = 5860 \text{ s}$
-------------------------------------	---	------------------------	---

¹ Luego de la perturbación.

² Debido a la perturbación.

Desempeño del sistema frente a cambios en el flujo del agua de enfriamiento (W)

Se ha mencionado que la válvula V-22 en el transcurso de la reacción, opera totalmente abierta, pero debido a la utilización de otros equipos en la planta, el flujo máximo de agua disponible puede ser por ejemplo 200 g/s; el comportamiento del sistema para esta condición, se presenta a continuación. Recordando el tipo de cambio que puede presentar esta variable de carga, también se utiliza una señal de prueba tipo escalón.

- Toda la reacción con $w=200\text{g/s}$

$t_{\text{ascenso}} = 65 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 47 \text{ s}$	exceso = 0.36 °C	$t_{\text{operación}} = 2525 \text{ s}$
-------------------------------------	--	-------------------------	---

- Escalón 250-200 g/s los 900s

$T_{\text{asentamiento/p}} = 0$	$t_{\text{operación}} = 2500 \text{ s}$	e _{max/perturbación} = despreciable
---------------------------------	---	---

- Escalón 250-200 g/s a los 1800s

$T_{\text{asentamiento/p}} = 0$	$t_{\text{operación}} = 2475 \text{ s}$	e _{max/perturbación} = despreciable
---------------------------------	---	---

Desempeño del sistema frente a cambios en la temperatura del reactivo adicionado (Te)

El cambio en T_e es poco probable y posiblemente se observará sólo al comparar su valor en lotes no consecutivos, de ahí que se observe el comportamiento del sistema para diferentes valores constantes que afectan todo el transcurso de la operación. Se presentan los resultados para $T_e=22^\circ\text{C}$ y para $T_e=15^\circ\text{C}$ (escalones en $t=0$). Por los resultados que se enseñan a continuación, por el comportamiento esperado de esta perturbación y por su baja influencia, no se justifica usar otra señal de prueba, por ejemplo tipo rampa.

- Toda la reacción con $T_e=22^\circ\text{C}$

$t_{\text{ascenso}} = 60 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 50 \text{ s}$	exceso = 0.36 °C	$t_{\text{operación}} = 2525 \text{ s}$
-------------------------------------	--	-------------------------	---

- Toda la reacción con $T_e=15^\circ\text{C}$

$t_{\text{ascenso}} = 65 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 45 \text{ s}$	exceso = 0.32 °C	$t_{\text{operación}} = 2350 \text{ s}$
-------------------------------------	--	-------------------------	---

Desempeño del sistema frente a cambios en la consigna del sistema (Ref)

Un lote se desarrolla a una temperatura deseada constante y prefijada, y este diseño se realiza para una temperatura seleccionada de 23°C (sección 2.1.1.1); sin embargo es válida una exploración de variaciones ligeras en la consigna, pues es lógico esperar que luego de

la implementación real de un sistema y luego de su operación, algunos ajustes por ejemplo en su consigna, sean realizados.

- Para una temperatura deseada de 22°C

$t_{\text{ascenso}} = 55 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 40 \text{ s}$	Exceso = 0.45 °C	$t_{\text{operación}} = 2900 \text{ s}$
-------------------------------------	--	-------------------------	---

- Para una temperatura deseada de 24°C

$t_{\text{ascenso}} = 75 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 55 \text{ s}$	Exceso = 0.24°C	$t_{\text{operación}} = 2100 \text{ s}$
-------------------------------------	--	------------------------	---

Desempeño del sistema frente a un cambio en un parámetro de la planta (Calor de reacción)

Se escoge que el calor de reacción en la planta sea el parámetro evaluado, debido a que en la simulación sección 2.3.2.3.2, éste fue el que más afectó el comportamiento.

- Para $\Delta H_R = -57.43 \text{ kJ/molA}$

$t_{\text{ascenso}} = 63 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 46 \text{ s}$	exceso = 0.37 °C	$t_{\text{operación}} = 2613 \text{ s}$
-------------------------------------	--	-------------------------	---

- Para $\Delta H_R = -46.9 \text{ kJ/molA}$

$t_{\text{ascenso}} = 79 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 53\text{s}$	exceso = 0.22 °C	$t_{\text{operación}} = 2090 \text{ s}$
-------------------------------------	--	-------------------------	---

Los resultados presentados anteriormente, permiten finalizar esta evaluación realizando las siguientes consideraciones:

La simulación realizada para llevar a cabo la evaluación presentada, da la confianza para considerar adecuado el comportamiento del sistema en cuanto a su estabilidad. La aplicación de herramientas de análisis no lineal resulta más compleja y no fue considerada.

Siempre que la capacidad de la chaqueta del reactor para retirar calor disminuya, por ejemplo a causa de una disminución en W , T_R o un aumento en T_1 , el controlador actúa disminuyendo el flujo de calor generado por la reacción, a través de F_c , y por tanto modifica el tiempo de operación necesario. Los datos presentados anteriormente reflejan dicho comportamiento, pero en general el tiempo que será necesario operar, corresponde a valores considerados adecuados (próximos a 45 minutos); la perturbación que puede llegar a comprometer seriamente el tiempo de operación es T_1 , por lo que es considerada restricción a la operación y ya había sido sugerida por la simulación de la planta.

Otra consecuencia de la disminución en la cantidad de calor transferido (Q), es un mejor tiempo de ascenso, pero va de la mano de un mayor exceso; y justamente T_1 , es aquella que más fácilmente acerca la respuesta al límite permitido, reforzando así la decisión de que ella conforme una restricción. Las decisiones tomadas respecto al valor de W y a la no

utilización de Te, en las restricciones, también se ven reforzadas: se puede trabajar el lote con un flujo de refrigerante de 200 g/s, o en los límites esperados de Te, satisfaciendo siempre las exigencias hechas.

También se observa que además de la magnitud del cambio en una variable de carga, la dirección en que se presenta, afecta de manera diferente a la repuesta obtenida; algo que resulta característico de los sistemas no lineales.

Sin embargo, el resultado más importante es que la exploración realizada en esta evaluación, da la seguridad necesaria para considerar que resulta satisfactoria la utilización del PID, como controlador del sistema. Y además, algunos de los cambios esperados, seguramente no serán apreciables de manera práctica.

4.2.2.2 Control no lineal para el reactor

A continuación se realiza una simplificación del modelo de la planta (sección 2.3.1), con objeto de aplicar la linealización entrada salida al reactor. Se sigue el procedimiento expuesto en la sección 1.3.3.

En la simulación se comprueba que la velocidad de reacción en todo el volumen del reactor $-r_A V$ se puede aproximar por la expresión: $-Q_e \rho_e \frac{w_{Be}}{PM_B} \frac{4}{6}$, o sea que todo el formol disponible en el reactor se consume de forma instantánea. Esta simplificación permite escribir el modelo del sistema así:

$$\frac{dm}{dt} = F_e \rho_e \quad (4.1)$$

$$\frac{dn_A}{dt} = -F_e \rho_e \frac{w_{Be}}{PM_B} \frac{4}{6} = -\frac{w_{Be}}{PM_B} \frac{4}{6} \frac{dm}{dt} \quad (4.2)$$

$$\frac{dn_B}{dt} = 0 \quad (4.3)$$

$$\frac{dn_C}{dt} = F_e \rho_e \frac{w_{Be}}{PM_B} \frac{4}{6} * \frac{1}{4} = \frac{w_{Be}}{PM_B} \frac{1}{6} \frac{dm}{dt} \quad (4.4)$$

$$\frac{dn_D}{dt} = F_e \rho_e \frac{(1-w_{Be})}{PM_D} + F_e \rho_e \frac{w_{Be}}{PM_B} \frac{4}{6} \frac{6}{4} = \left[\frac{(1-w_{Be})}{PM_D} + \frac{w_{Be}}{PM_B} \right] \frac{dm}{dt} \quad (4.5)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q}{(mCp)_R} + \frac{\left(Cp_e(T_e - T_R) - \frac{w_{Be}}{PM_B} \frac{4}{6} \Delta H^0_R \right)}{(mCp)_R} * \rho_e F_e \quad (4.6)$$

Integrando las ecuaciones (4.2) a (4.5) resulta:

$$\begin{aligned}n_A &= n_{A0} - \frac{w_{Be}}{PM_B} \frac{4}{6} (m - m_0) \\n_B &= n_{B0} \\n_C &= n_{C0} + \frac{w_{Be}}{PM_B} \frac{1}{6} (m - m_0) \\n_D &= n_{D0} + \left[\frac{(1 - w_{Be})}{PM_D} + \frac{w_{Be}}{PM_B} \right] (m - m_0)\end{aligned}$$

De esta forma las ecuaciones diferenciales se reducen a dos (4.1) y (4.6); las ecuaciones relacionadas con la transferencia de calor se encuentran en la sección 2.3.1.

Como la salida de interés es la temperatura del reactor se tiene:

$$\begin{bmatrix} \dot{m} \\ \dot{T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \alpha \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \rho_e \\ \beta \end{bmatrix} F_e \quad (4.7)$$

$$y = h(T) = T$$

donde:

- $\alpha = \frac{Q}{(mCp)_R}$
- $\beta = \frac{\left(Cp_e(T_e - T_0) - Cp_R(T - T_0) - \frac{w_{Be}}{PM_B} \frac{4}{6} \Delta H^0_R \right)}{(mCp)_R} * \rho_e$

Con $r = 1$ la ecuación (1.7) es:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \dot{y} = \dot{h} = L_f^1 h + (L_g L_f^0 h) F_e$$

Desarrollando los términos de la anterior expresión:

$$L_f T = \frac{\partial h}{\partial m} 0 + \frac{\partial h}{\partial T} \alpha = \alpha \quad ; y$$

$$L_g L_f^0 T = L_g T = \frac{\partial h}{\partial m} \rho_e + \frac{\partial h}{\partial T} \beta = \beta \neq 0 \quad ; \text{ entonces, el orden relativo es uno } r=1.$$

Finalmente:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \dot{y} = \alpha + \beta F_e \quad (4.8)$$

De (1.8) resulta:

$$F_e = \frac{1}{L_g L_f^0 h} [v - L_f^1 h] = \frac{1}{\beta} [v - \alpha] \quad (4.9)$$

Reemplazando v (según se propone en (1.10)) y (4.9) en la expresión (4.8), se llega a:

$$\dot{e} = \frac{d e}{d t} = -k e ; \text{ integrando resulta:}$$

$$e(t) = e(0) \exp^{(-kt)} \quad (4.10)$$

donde $e(0)$ es la desviación al tiempo cero. Esta ecuación manifiesta que para todo $k > 0$ el valor de e tiende a cero.

Tres puntos a considerar antes de especificar la constante del controlador (k_c) son, la información sobre la planta que necesita el controlador no lineal, el valor que toma β y el comportamiento de la dinámica interna:

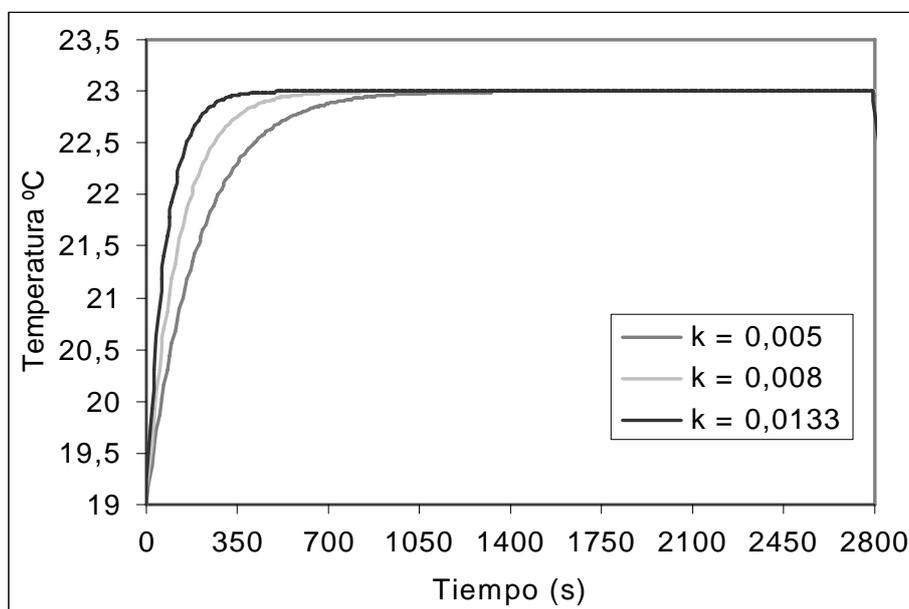
- A excepción de la información relacionada con la temperatura de entrada del formol, el control no lineal no requiere de instrumentación adicional diferente a la que solicita la estrategia de control secuencial. Del análisis hecho en la simulación a variables como W , T_1 , F_e y T_e (sección 2.3.2.3.4), ésta última es la que menor influencia tiene sobre la temperatura de reacción y por tanto se propone no medirla.
- Utilizando la expresión de β (página anterior), el valor de T_R que hace que $\beta = 0$ (indeterminando el valor de F_e), es 129.34 °C. Como el punto de operación (23 °C) está lo suficientemente alejado de este valor y, además, la temperatura adiabática final del reactor para el escenario base de trabajo es aproximadamente 83 °C, se puede afirmar con relativa seguridad que no se presentarán inconvenientes.
- En cuanto a la dinámica interna la justificación de su estabilidad se efectúa, al tener presente que se tiene una cantidad limitada de material reactivo ingresando al reactor, por tanto $\frac{dm}{dt} \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow \infty$.

4.2.2.2.1 Selección de las constantes del controlador

Suponiendo que el modelo utilizado en la linealización E/S y el de la planta fueran exactamente el mismo, el diseño del controlador se limita a la selección de un solo parámetro para el controlador, k (k_c). A medida que aumenta el valor de k_c el sistema llega

a la temperatura deseada con mayor rapidez (ver gráfica 4.6). El k_c seleccionado está limitado por la capacidad para ejercer la acción de control, o sea, limitado por el flujo de entrada disponible.

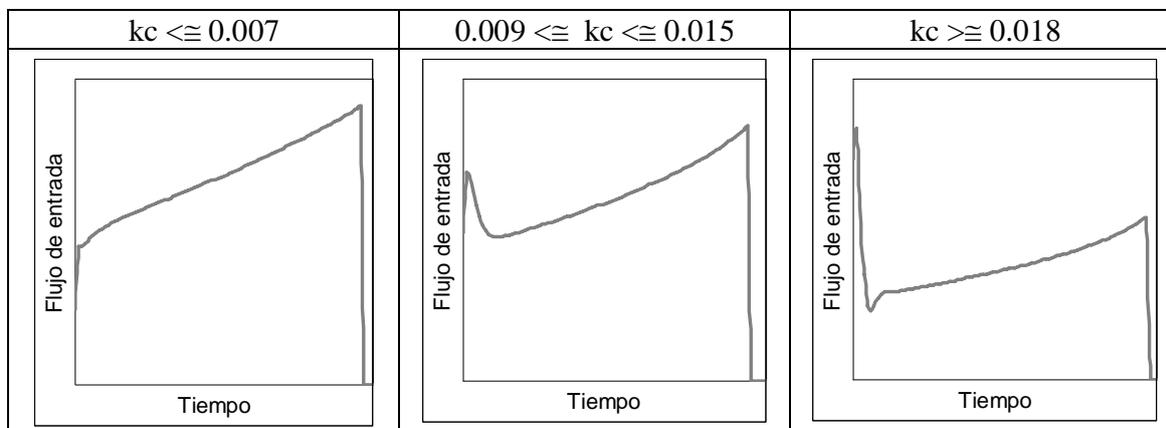
Debido a que $-r_{AV}$ no es exactamente representada si se supone que todo el formol que ingresa reacciona instantáneamente (ver sección 2.3.2.2, *comportamiento del sistema*), se recurre al método de ensayo y error para el establecimiento de la constante del controlador. Teniendo presente la anterior consideración, el fin es obtener una respuesta adecuada, sin contemplar otras diferencias entre los modelos de planta y controlador. Sin embargo, el sistema de control también se prueba (en la evaluación) cuando el calor de reacción es diferente en el modelo de la planta.



GRÁFICA 4.6 Comportamiento de T según valor de k_c cuando coinciden los modelos planta-controlador

Antes de presentar el valor encontrado para k_c , se anotan algunas características del comportamiento del sistema (Planta/Controlador) observadas, según la exploración hecha para hallar dicha constante:

- A medida que aumenta k_c , el patrón de flujo de entrada tiene tres tendencias que se diferencian principalmente por el comportamiento inicial del flujo de entrada, ver tabla 4.3.

TABLA 4.3 Comportamiento aproximado del flujo según valor de k_c 

- Como es de esperar a medida que aumenta k_c se cumple mejor la tarea de control de lazo; esto se refleja en la figura de mérito utilizada (ISE^1) para comparación.

k_c	ISE
0.0075	3065.8
0.015	1535.6
0.03	827.4

- A partir de $k_c > 0.019$, el sistema presenta una pequeña oscilación y se excede el valor de la temperatura de referencia (sobre nivel).

El proceso utilizado, teniendo en cuenta la información anterior, consiste en buscar un controlador proporcional que llegue a la temperatura de operación en el menor tiempo posible y que no exceda en más de $0.5\text{ }^\circ\text{C}$ el valor de la temperatura de referencia ($23\text{ }^\circ\text{C}$).

- Mejor valor de k_c (control proporcional dentro del algoritmo no lineal) que tiene un sobre nivel máximo de $0.5\text{ }^\circ\text{C}$

K_C	$F_{e\max}(\text{L/s})$	$F_{e\text{Minino}}$	T_{\max}	T_{final}	$\theta_{\text{total}}(\text{s})$
0.0461	0.01275	0.001265	23.499	22.8	2485

¹ [9] página 285

4.2.2.2.2 Evaluación

Bajo la misma filosofía de la sección 4.2.2.1.2 se realiza la evaluación.

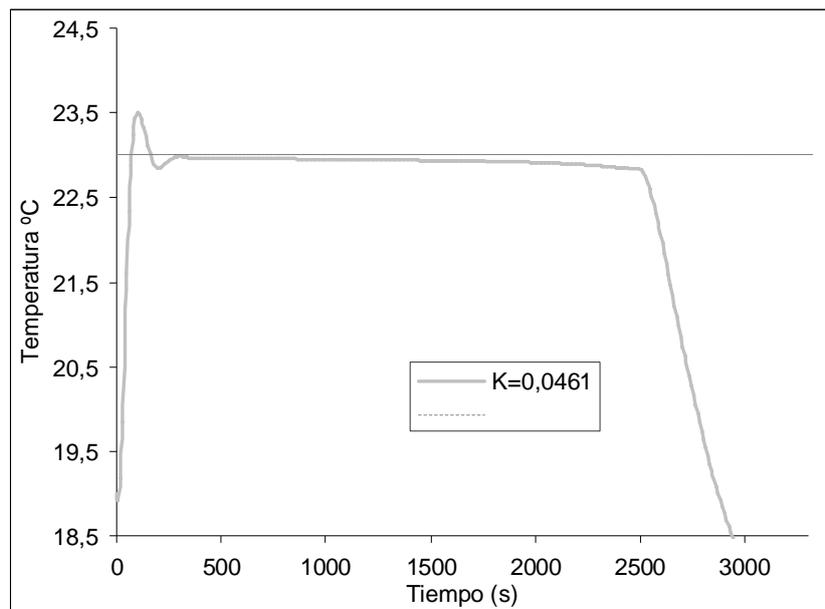
Desempeño del sistema ante la naturaleza cambiante de la operación únicamente¹

$W = 250 \text{ g/s}$	$T_e = 19 \text{ °C}$	$T_i = 16 \text{ °C}$
-----------------------	-----------------------	-----------------------

Los valores de los índices de desempeño son:

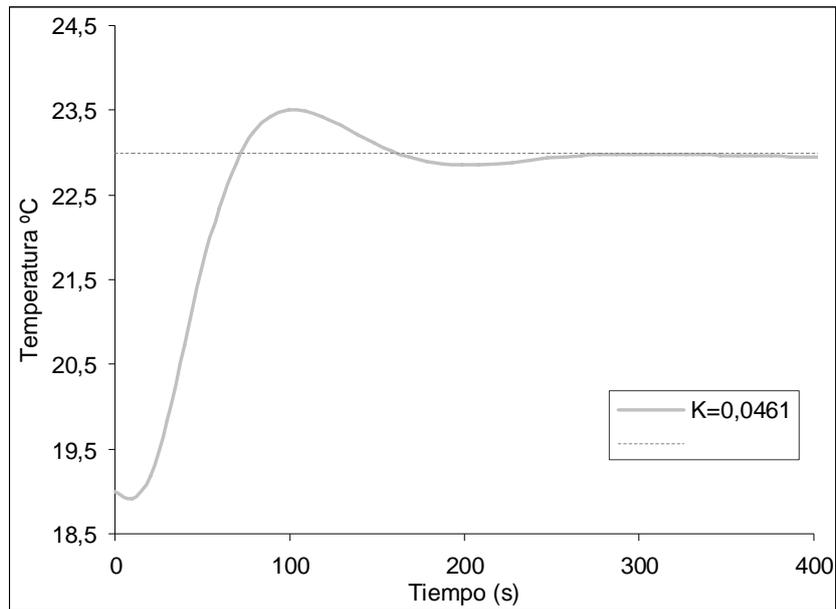
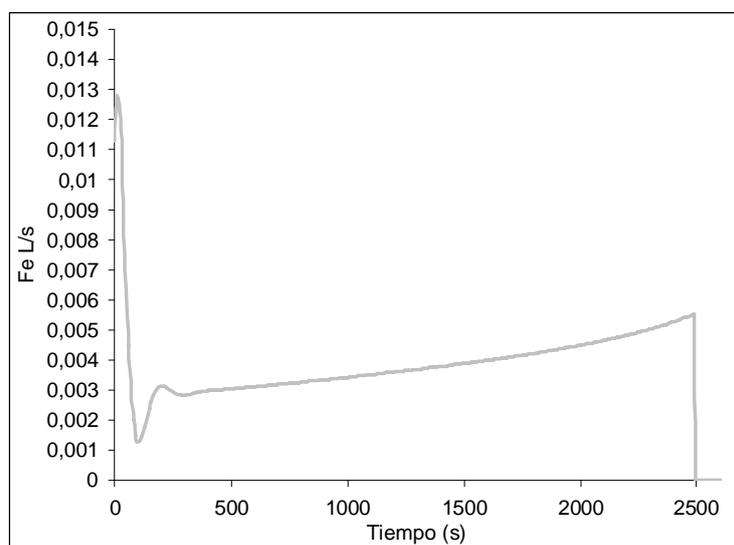
$t_{\text{ascenso}} = 72 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 62 \text{ s}$	$\text{exceso} = 0.5 \text{ °C}$	$t_{\text{operación}} = 2485 \text{ s}$
-------------------------------------	--	----------------------------------	---

El controlador **P** permite cumplir con los objetivos propuestos (ver gráficas 4.7 a 4.9).



GRÁFICA 4.7 Comportamiento de T_R según $k_c=0.0461$

¹ Escenario típico de operación

GRÁFICA 4.8 Detalle del comportamiento de T_R según $kc=0.0461$ GRÁFICA 4.9 Flujo de entrada para sobre nivel de 0.5°C según $kc=0.0461$

Desempeño del sistema frente a cambios en la temperatura del agua de enfriamiento(TI)

- Rampa 16-20 °C a los 900 s (pendiente: 0.1°C/min)

$t_{\text{asentamiento/p}}^1 = 0$	$t_{\text{operación}} = 3158 \text{ s}$	$e_{\text{max/perturbación}}^2 = \text{despreciable}$
-----------------------------------	---	---

- Rampa 16-20 °C a los 1800 s (pendiente: 0.1°C/min)

$t_{\text{asentamiento/p}} = 0$	$t_{\text{operación}} = 2574 \text{ s}$	$e_{\text{max/perturbación}} = \text{despreciable}$
---------------------------------	---	---

- Rampa 16-12 °C a los 900 s (pendiente: -0.1°C/min)

$t_{\text{asentamiento/p}} = 0$	$t_{\text{operación}} = 2247 \text{ s}$	$e_{\text{max/perturbación}} = 0.11 \text{ °C}$
---------------------------------	---	---

- Rampa 16-12 °C a los 1800 s (pendiente: -0.1°C/min)

$t_{\text{asentamiento/p}} = 0$	$t_{\text{operación}} = 2425 \text{ s}$	$e_{\text{max/perturbación}} = \text{despreciable}$
---------------------------------	---	---

- Toda la reacción a 12°C

$t_{\text{ascenso}} = 74$	$t_{\text{asentamiento}} = 55 \text{ s}$	$\text{exceso} = 0.41 \text{ °C}$	$t_{\text{operación}} = 1554 \text{ s}$
---------------------------	--	-----------------------------------	---

- Toda la reacción a 20°C

$t_{\text{ascenso}} = 69 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 100 \text{ s}$	$\text{exceso} = 0.6 \text{ s}$	$t_{\text{operación}} = 5960 \text{ s}$
-------------------------------------	---	---------------------------------	---

Desempeño del sistema frente a un cambio en el flujo del agua de enfriamiento (W)

- Toda la reacción con $w=200\text{g/s}$

$t_{\text{ascenso}} = 69 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 90 \text{ s}$	$\text{exceso} = 0.52 \text{ °C}$	$t_{\text{operación}} = 2643 \text{ s}$
-------------------------------------	--	-----------------------------------	---

- Escalón 250-200 g/s a los 900s

$t_{\text{asentamiento/p}} = 0$	$t_{\text{operación}} = 2594 \text{ s}$	$e_{\text{max/perturbación}} = \text{despreciable}$
---------------------------------	---	---

- Escalón 250-200 g/s a los 1800s

$t_{\text{asentamiento/p}} = 0$	$t_{\text{operación}} = 2534 \text{ s}$	$e_{\text{max/perturbación}} = \text{despreciable}$
---------------------------------	---	---

¹ Luego de la perturbación.

² Debido a la perturbación.

Desempeño del sistema frente a un cambio en la temperatura del reactivo adicionado (T_e)

- Toda la reacción con $T_e=22^\circ\text{C}$

$t_{\text{ascenso}} = 74 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 50 \text{ s}$	exceso = 0.47°C	$t_{\text{operación}} = 2564 \text{ s}$
-------------------------------------	--	--------------------------------------	---

- Toda la reacción con $T_e=15^\circ\text{C}$

$t_{\text{ascenso}} = 72 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 90 \text{ s}$	exceso = 0.54°C	$t_{\text{operación}} = 2386 \text{ s}$
-------------------------------------	--	--------------------------------------	---

Desempeño del sistema frente a un cambio en la consigna del sistema (Ref)

- Para una temperatura deseada de 22°C

$t_{\text{ascenso}} = 70 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 80 \text{ s}$	exceso = 0.56°C	$t_{\text{operación}} = 2980 \text{ s}$
-------------------------------------	--	--------------------------------------	---

- Para una temperatura deseada de 24°C

$t_{\text{ascenso}} = 80 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 60 \text{ s}$	exceso = 0.42°C	$t_{\text{operación}} = 2128 \text{ s}$
-------------------------------------	--	--------------------------------------	---

Desempeño del sistema frente a un cambio en un parámetro de la planta (Calor de reacción)

- Para $\Delta H_R = -57.43 \text{ kJ/molA}$

$t_{\text{ascenso}} = 66 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 58 \text{ s}$	exceso = 0.7°C	$t_{\text{operación}} = 2640 \text{ s}$
-------------------------------------	--	-------------------------------------	---

- Para $\Delta H_R = -46.9 \text{ kJ/molA}$

$t_{\text{ascenso}} = 81 \text{ s}$	$t_{\text{asentamiento}} = 68 \text{ s}$	exceso = 0.3°C	$t_{\text{operación}} = 2146 \text{ s}$
-------------------------------------	--	-------------------------------------	---

Los comportamientos observados permiten decir que:

- Para los escenarios evaluados, el comportamiento del control P es bueno, según se observa en los valores de los índices. Sobresale el comportamiento exhibido cuando $T_1 = 20^\circ\text{C}$ en donde se presentan valores más grandes para el tiempo de asentamiento y el exceso.
- El comportamiento del control no es afectado de forma sensible por los cambios en W evaluados.

- El trabajo del controlador no pierde efectividad a pesar de ser perturbado por una variable de entrada cuya variación no se tiene en cuenta en el algoritmo de control, Te.
- El parámetro evaluado, ΔH_R , incide de forma importante en el desempeño del sistema de control según se observa en el exceso y el tiempo de asentamiento.

Con objeto de compensar la inexactitud del modelo utilizado en el algoritmo de control, la entrada auxiliar, v , puede incluir acción integral como se propone en [24]:

$v = \dot{y}_d + ke + k_I \int_0^t e dt$ ¹ (nótese la similitud de los dos últimos términos con la salida de un controlador PI). Reemplazando v y (4.9) en la expresión (4.8) y tomando la transformada de Laplace se llega a:

$$e(s) = \frac{se(0)}{s^2 + ks + k_I} \quad (4.11)$$

Teóricamente, el sistema no es inestable debido a que para todo valor de k_C y de k_I las raíces se encuentran en el semiplano izquierdo.

De la simulación se observa que el aporte de k_I al sistema de control no es notablemente positivo si actúa desde el principio de la operación pues se presenta exceso (sobre nivel) debido a la saturación del modo integral ('*Windup*' ²). De forma similar como se aborda este inconveniente en el diseño del controlador PID lineal, se busca (mediante ensayo y error) un escenario en el que sea adecuado comenzar a aplicar la acción integral. Dicho estado, se alcanza cuando el controlador **P** estabiliza al reactor en la temperatura de operación, esto sucede aproximadamente, 180 (s) después de iniciada la operación.

Para la obtención de k_I se trabaja bajo la siguiente condición:

- $\Delta H_R = -52.21$ kJ/mol A, en el controlador
- $\Delta H_R = -49.2$ kJ/mol A, en la planta

Se escoge que el calor de reacción en la planta sea menor para el diseño, debido a que en la evaluación del controlador **P**, éste fue el que más afectó el desempeño del control:

K_C	ΔH_R en la planta	ISE
0.0461	-57.43 kJ/mol A	557.9
0.0461	-49.2 kJ/mol A	660.5

¹ $k_I = k/\tau_I$

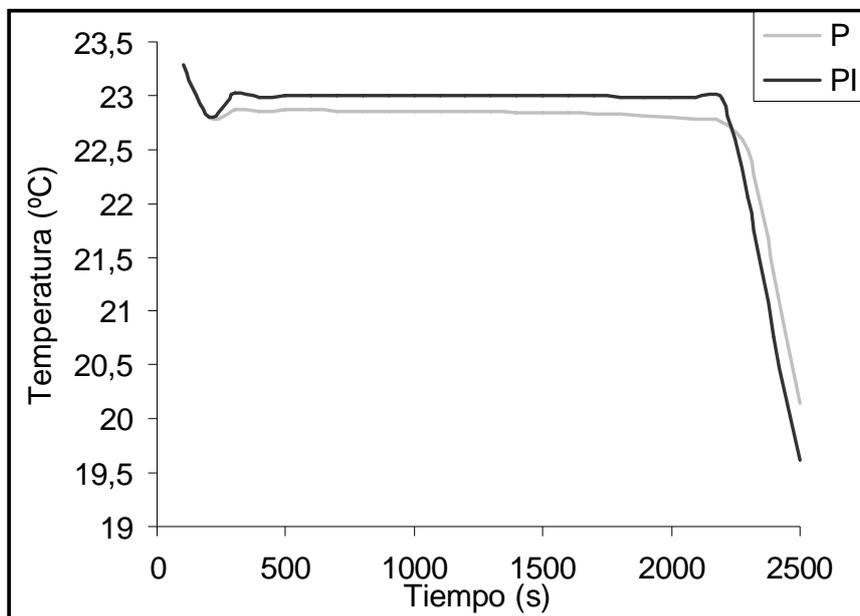
² [9] página 551

Mediante ensayo y error, se encuentra que existe un valor de k_I que minimiza el ISE:

- Mejor valor de k_c y k_I (habilitado a partir de 180 (s)) cuando ΔH_R en el controlador $>$ ΔH_R en la planta

k_c	k_I	ISE
0.0461	0.0005	608

El comportamiento de las dos opciones para el controlador, se puede observar en la gráfica 4.10.



GRÁFICA 4.10 Detalle del desempeño de control P y PI cuando ΔH_R en el controlador $>$ ΔH_R en la planta

4.2.3 Comparación de las opciones para el control de lazo

Se supondría que el PID puede tener dificultades para ejercer correctamente su labor dadas las características no lineales de la planta, sin embargo el desempeño mostrado es muy similar al del controlador no lineal. Los comportamientos evaluados según el conjunto cambios en las condiciones de operación muestran que tanto el control PID como el control no lineal se desempeñan de forma adecuada.

Una diferencia entre las dos opciones para el control de lazo es el esfuerzo requerido para el diseño de las constantes del controlador. En el PID se debieron evaluar bastantes comportamientos para establecer el valor más adecuado de $F_{e,s}$, k_c , k_I y k_D que permitiera cumplir con los objetivos de control; por el contrario para el controlador no lineal sólo se debió explorar una constante, k_c .

4.3 MONTAJE DE LA ESTRATEGIA DE CONTROL

El programa utilizado para el montaje de las estrategias de control a nivel de software, **InTouch™**¹, es el programa especializado en visualización que hace parte de la familia de paquetes para automatización **FactorySuite 2000™**¹. InTouch permite la interacción con el proceso de interés mediante representaciones gráficas de los objetos del mundo real, estas se crean bajo el concepto estándar de ventanas de Windows de forma que las aplicaciones ofrecen un ambiente de manejo intuitivo.

Cuenta con tres módulos básicos:

- Explorador de proyectos: Para abrir y crear aplicaciones; también se configuran algunos parámetros de la misma (entre otros: resolución de pantalla, nodos para trabajo en red).
- Ambiente de desarrollo: Para crear y configurar la interfaz del usuario o '*GUI*'.
- Ambiente de ejecución: En él se corre o ejecuta la aplicación.



InTouch



InTouch
WindowMaker



InTouch
WindowViewer

A continuación se hace una breve descripción del ambiente de desarrollo²:

En el ambiente de diseño se dispone de herramientas para la creación de la interfaz ('*GUI*') (dibujos, objetos prediseñados, controles...) mediante el uso de objetos (botones, figuras, cuadros de texto..), que permiten interactuar con el proceso representado. Algunos objetos presentes en la aplicación se pueden asociar a un código, de forma que cuando se hace "clic" sobre ellos se ejecutan las líneas de código asociado; varios objetos tienen propiedades para animación (tamaño, posición en la pantalla, visibilidad..).

InTouch ofrece facilidades para programación; se puede generar un programa bajo eventos como:

- Cumplimiento de cierta condición por parte de una variable (p.e: si la altura de líquido en un tanque es inferior a un límite de seguridad)
- Cambio de valor de un variable (p.e: si un motor pasa de encendido a apagado)
- Tocar objetos (botones, cuadros de texto)

¹ Marca registrada propiedad de **Wonderware® Corporation**

² Información mas detallada se encuentra en los manuales en línea disponibles con el software y en [41].

También se pueden crear subrutinas que no responden a un evento específico, sino que pueden llamarse desde cualquier parte del programa principal (conocidas dentro de InTouch como '*Quick Functions*').

Por otro lado, el *Diccionario de Tags*, es el administrador de las variables creadas dentro de la aplicación, éste permite definir las, cambiarles el nombre y modificarles propiedades. También se establecen opciones para: el registro histórico de valores, condiciones de alarma y la asociación de una variable a un grupo de alarmas. Si el valor de las variables viene de una fuente externa (variable remota) se pueden crear vínculos para obtener la información, entonces se ofrecen facilidades de comunicación con otras aplicaciones (p.e: Excel, Access, Visual Basic) y/o con servidores que manejan datos relacionados con equipos e instrumentos de campo.

Como se expresó se pueden configurar condiciones de alarma y, según suceda una, se pueden generar reportes de alarmas; también se puede grabar información relevante sobre el comportamiento de las variables para posterior análisis.

Por otro lado, el manejo gráfico de la información (p.e: la evolución de las variables en el tiempo) se puede representar de dos formas:

- Tendencias en tiempo real.
- Tendencias históricas.

Finalmente, se puede restringir el acceso a la aplicación o a ciertas partes de la misma (p.e: para cambiar la referencia de un controlador) mediante la asignación de un nombre de usuario y de una clave. Cada usuario tiene un nivel de acceso dependiendo de su interés por la aplicación.

4.3.1 Aplicaciones creadas

Más que crear programas que simulen el comportamiento del sistema, un objetivo del proyecto de grado al utilizar InTouch, es el de promover el uso de este tipo de herramientas en proyectos de automatización reales, mediante la implementación y evaluación de las estrategias de control diseñadas (sección 4.1 y 4.2).

Las aplicaciones creadas pretenden mostrar varias opciones y herramientas que ofrece el paquete y para su desarrollo, se hace uso de la información adquirida en el estudio al proceso de interés.

Se presenta un programa, en donde se simula la estrategia de control secuencial y dos programas para la estrategia de control de lazo. Todas las aplicaciones están orientadas a usuarios que se desempeñen en las áreas de ingeniería de procesos y/o control y se exponen a continuación.

4.3.1.1 Aplicación para el control secuencial en InTouch

Basándose en lo expuesto en la sección 4.1, *Estrategia de control secuencial*, se simula la ejecución del procedimiento de la etapa de síntesis de la HMTA. Se presenta una ventana principal con el mímico¹ de los equipos e instrumentos involucrados en tal operación (ver figura 4.3).

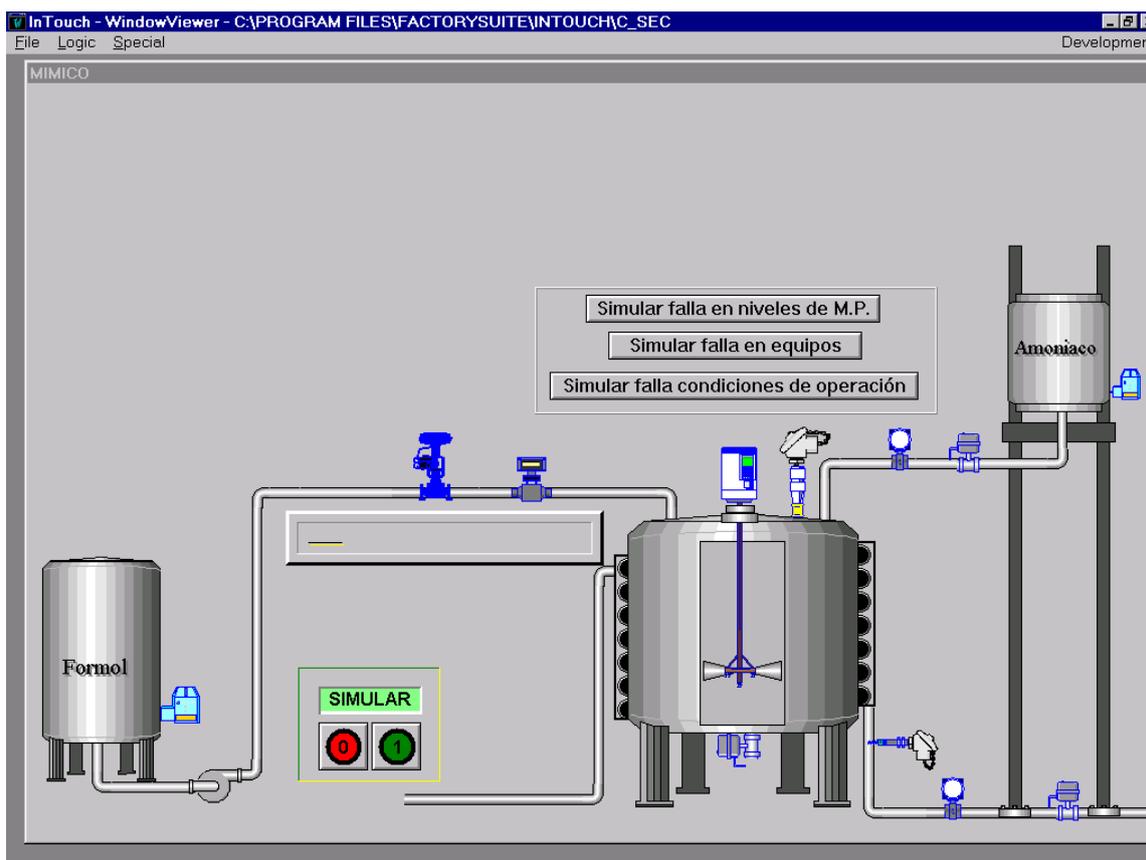


FIGURA 4.3 Imagen de la ventana principal de la aplicación de control secuencial

En la ventana principal se presenta el avance de las diferentes operaciones de proceso (p.e: definición del lote a procesar, carga de formol) y la forma de simular fallas en los diferentes instrumentos (p.e: en el medidor de flujo de formol, en el sensor de temperatura del reactor) o condiciones del sistema (p.e: temperatura del reactor, cantidad de materias primas almacenadas).

Los objetos tienen vínculos de animación de forma que por ejemplo, cuando se carga el amoniaco al tanque se puede ver como sube el nivel (ver figura 4.4) o que cuando se simula una falla en un sensor éste empieza a titilar y su color cambia a rojo (ver figura 4.5). Si se generan condiciones de falla se notifica tal evento por medio de ventanas auxiliares (ver figura 4.6).

¹ Representación aproximada de un objeto que guarda sus características más relevantes

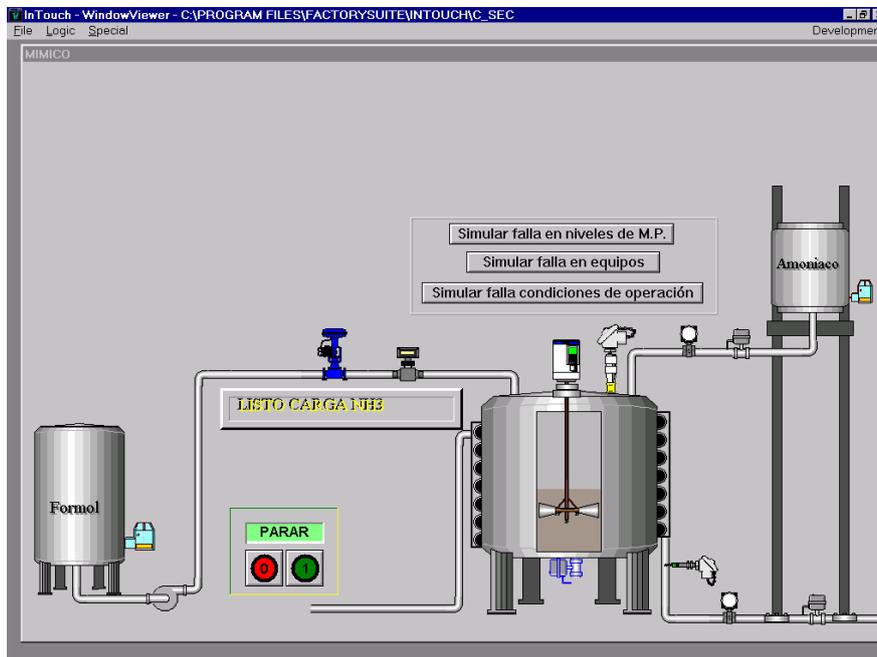


FIGURA 4.4 Ventana principal de la aplicación de control secuencial mostrando la carga de amoniaco

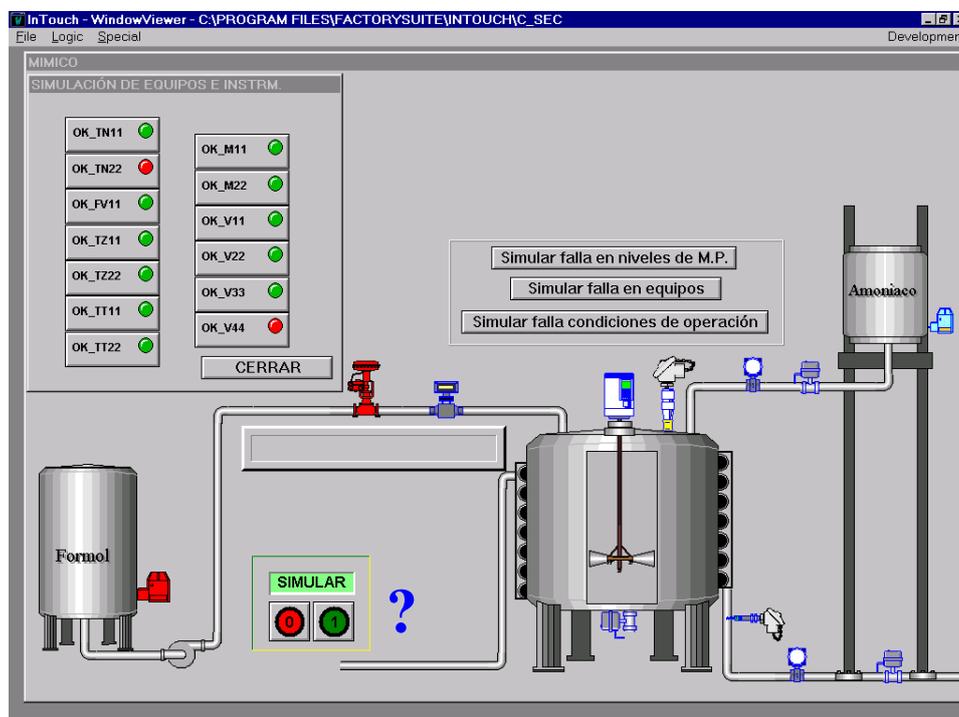


FIGURA 4.5 Ventana principal de la aplicación de control secuencial mostrando falla en sensores

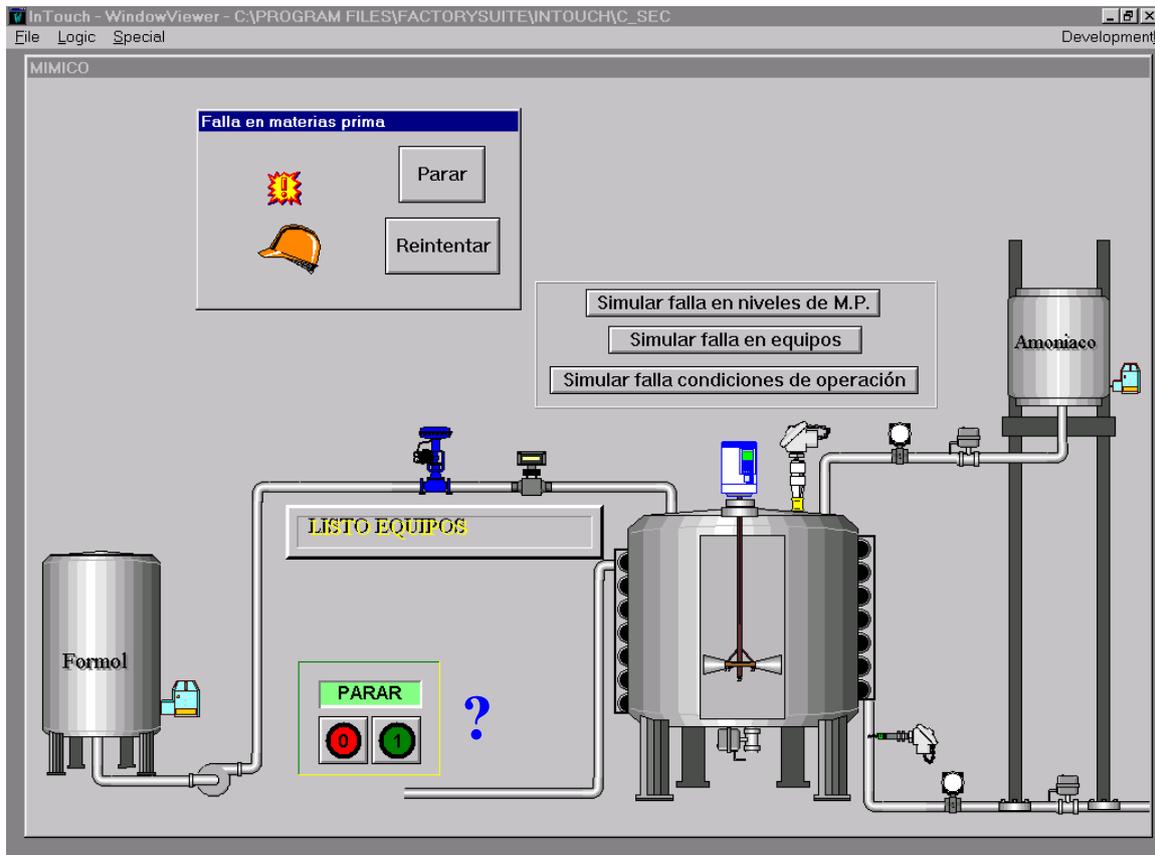


FIGURA 4.6 Ventana principal de la aplicación de control secuencial mostrando notificación de falla

Los pasos para ejecutar la simulación del control secuencial en InTouch ¹ son:

Paso	Evento
1	En el escritorio de Windows NT, ejecutar el Icono del explorador de proyectos de Intouch.
2	Seleccionar la aplicación de InTouch "Secuencial II" y ejecutarla para que aparezca el Window Maker de InTouch..
3	Abrir la ventana llamada Mímico (principal)
4	En la esquina superior derecha de la ventana de Window Maker aparece la opción para correr el programa (<i>Runtime</i>)
5	Ejecutar la aplicación o leer la ayuda.

¹ El software se encuentra instalado en la sala de automatización de Ingeniería, LIQ.

4.3.1.2 Aplicación para control de lazo en InTouch

En esta se presenta una Interfaz Gráfica del Usuario ('GUI') que contiene las siguientes ventanas:

- Principal (ver figura 4.7)
- De parámetros (ver figura 4.8)
- Mímico (ver figura 4.9)
- Alarmas (ver figura 4.10)

En la ventana principal (ver figura 4.7), se presentan variables del proceso como flujo de formol o flujo de refrigerante cuyo valor puede modificarse en cualquier momento con objeto de ver su influencia sobre el comportamiento del sistema. También se puede escoger que la simulación se efectúe con el flujo de formol establecido manualmente, o, determinado por el controlador. Cuando se elige control automático hay opción para el uso de un control PID lineal, o, el uso de la estrategia de control No lineal (Linealización Entrada/Salida) con PI; en ambos casos, se pueden elegir los valores de las constantes (k_c , k_I , k_D) del controlador.

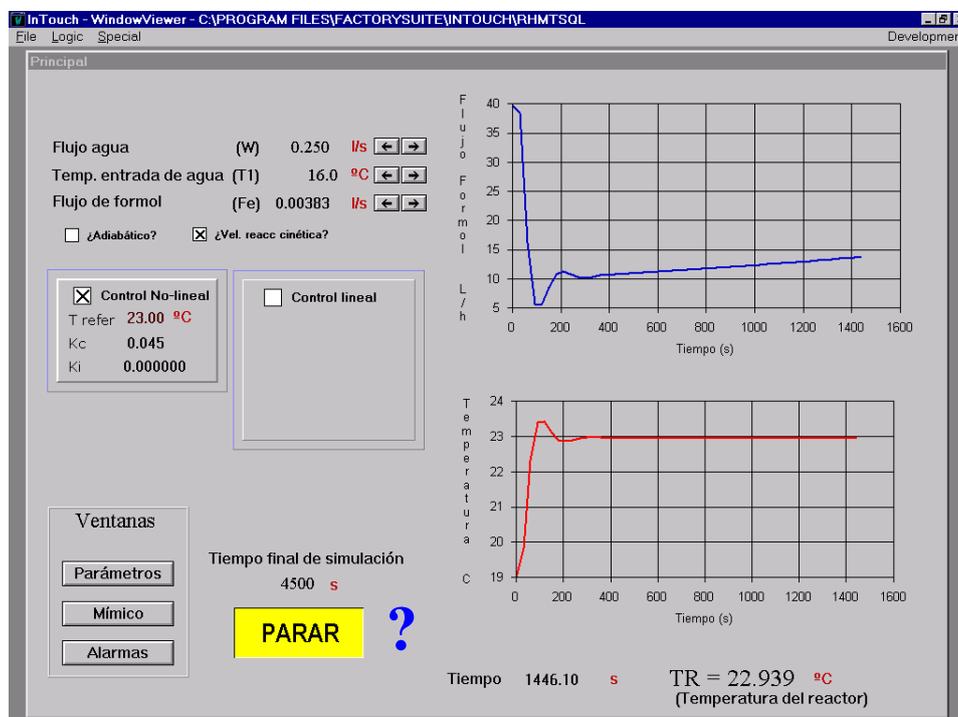


FIGURA 4.7 Imagen de la ventana principal de la aplicación para control de lazo en InTouch

Otras posibilidades son, primero que en el modelo se utilice una expresión cinética (con parámetros fijos) para la velocidad de reacción, o suponer que todo el formol que llega al reactor se consume inmediatamente; se puede establecer que la operación sea adiabática o no y se encuentra el acceso a las otras ventanas.

En la segunda ventana se establecen algunos parámetros del modelo (ver figura 4.8) como:

- Carga inicial de amoniaco
- Fracción en peso de materias primas (formol y amoniaco)
- Calor específico, conductividad térmica, viscosidad y densidad de la masa reactiva
- Calor de reacción estándar por mol de amoniaco
- Calor específico y densidad del formol
- Factor de suciedad del intercambiador y conductividad térmica de la pared del reactor

El valor de los anteriores parámetros puede ser modificado.

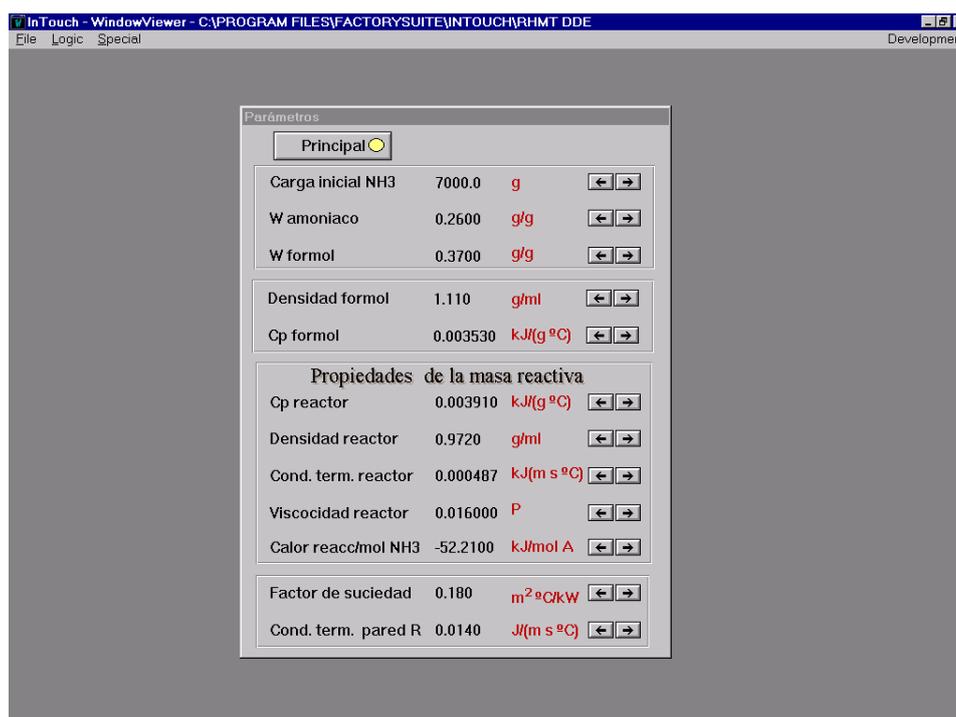


FIGURA 4.8 Ventana de parámetros

La tercer ventana (ver figura 4.9) presenta un mímico¹ del equipo encontrado en las instalaciones del edificio del Laboratorio de Ingeniería Química, en este se incluyen varios instrumentos y equipos necesarios para el sistema de control y supervisión. Varios de los

¹ Basado en la figura 4.1

objetos presentados ofrecen información al tocarlos, por ejemplo cuando se hace "clic" sobre el medidor de flujo de agua se presenta el valor actual de dicho flujo.

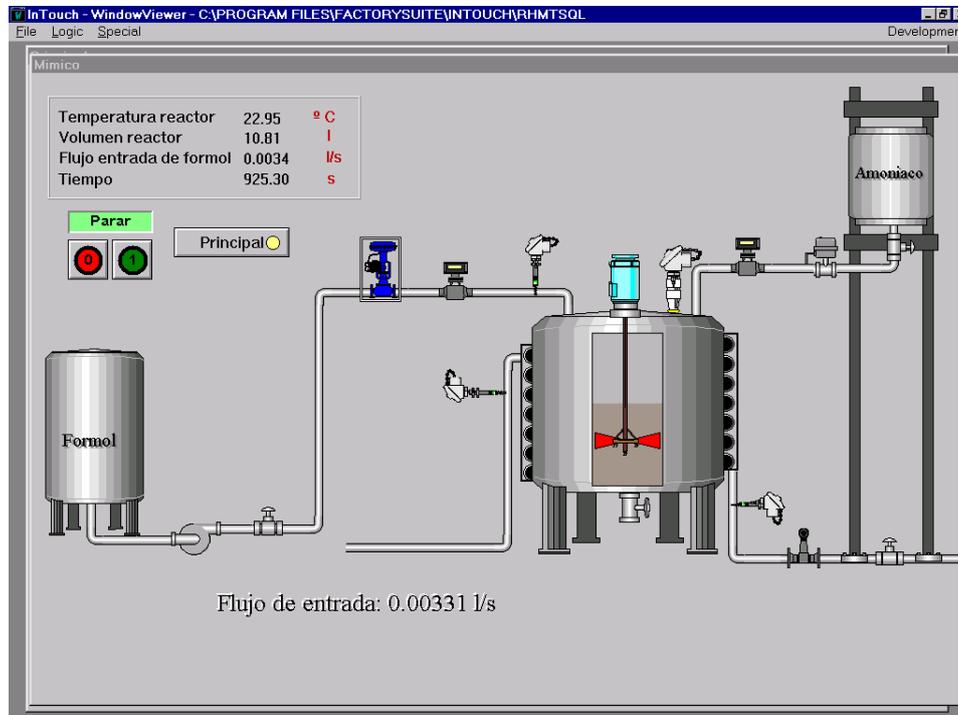


FIGURA 4.9 Mímico de la planta

La última ventana (ver figura 4.10) presenta los registros de alarma y eventos, las variables a monitorear se asocian al grupo de alarmas de Proceso ó de Control. Los límites y condiciones para las alarmas están determinados bajo consideraciones hechas en el capítulo 3. Adicionalmente se presentan alarmas asociadas a la carga inicial de amoniaco y a la temperatura de referencia con objeto de mostrar la flexibilidad de esta herramienta.

	Variable	Eventos asociados a las alarmas
Proceso	Temperatura del reactor	Límite superior (Hi) = 35 °C Límite superior superior (Hi Hi) = 40 °C
	Flujo de agua	Límite inferior (Lo) = 0.2 l/s Límite inferior inferior (Lo Lo) = 0.15 l/s
	Temperatura de entrada del agua	Límite superior (Hi) = 18 °C Límite superior superior (Hi Hi) = 20 °C
	Masa inicial del reactor (NH ₃)	Límite superior (Hi) = 7.54 kg Límite inferior (Lo) = 7 kg
Control	Temperatura de referencia	Límite superior (Hi) = 25 °C Límite superior superior (Hi Hi) = 30 °C
	Modo automático de control	Estado de seleccionado o no seleccionado. Tanto para control con PID como para No lineal con PI

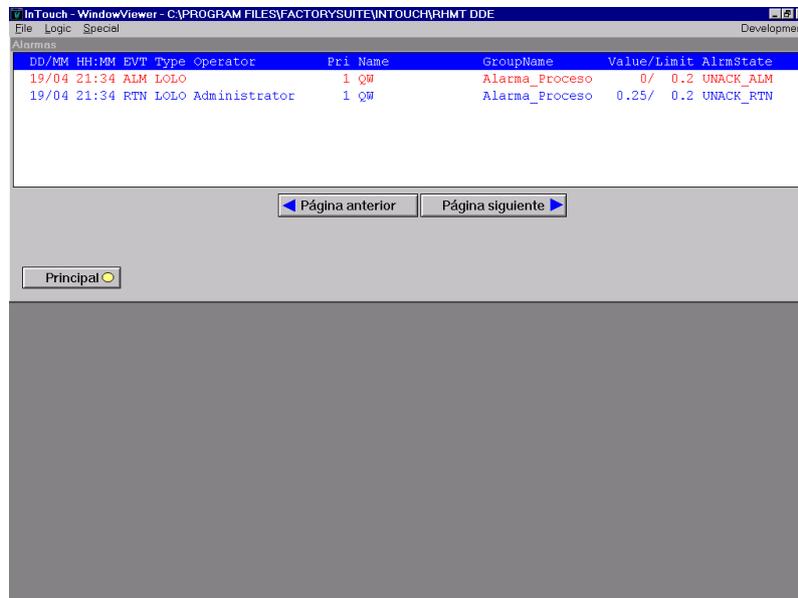


FIGURA 4.10 Ventana de alarmas

Según se establezca en el programa, el registro de alarmas puede mostrar información como:

- Fecha y hora del suceso
- Tipo de alarma (Límite superior, Límite inferior, On/Off)
- Nombre de la variable y del grupo de alarmas al que pertenece (proceso o control)
- Valor de la variable que causa la alarma y el límite que se excedió
- Nombre del operario registrado

Los pasos para ejecutar la simulación del control de lazo en InTouch ¹ son:

Paso	Evento
1	En el escritorio de Windows NT, ejecutar el Icono del explorador de proyectos de Intouch.
2	Seleccionar la aplicación de InTouch "RHMT SQL" y ejecutarla para que aparezca el Window Maker de InTouch..
3	Abrir la ventana Principal
4	En la esquina superior derecha de la ventana de Window Maker aparece la opción para correr el programa (<i>Runtime</i>)
5	Ejecutar la aplicación o leer la ayuda.

¹ El software se encuentra instalado en la sala de automatización de Ingeniería, LIQ.

4.3.1.3 Aplicación para control de lazo entre InTouch y Excel

El modelo de la planta se encuentra en Excel, mientras que el algoritmo de control se ejecuta en InTouch. Por esta razón se realiza una simulación interconectando aplicaciones, bajo la filosofía de Intercambio Dinámico de Datos (*DDE*), ambos programas actúan como clientes (reciben información) y como servidores (envían información).

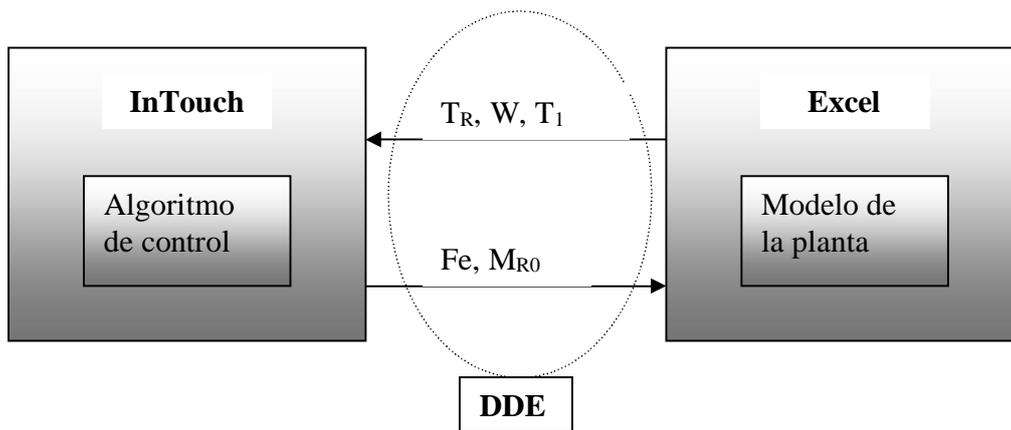


FIGURA 4.11 Esquema del intercambio de información entre InTouch y Excel

En Excel se simula la planta y se envía la información solicitada por InTouch (T_R, W^1, T_1^1) que recibe los datos y, según sea el algoritmo de control, determina el flujo de formol. El flujo de entrada (Formol) puede establecerse tanto manual como automáticamente.

El programa en InTouch tiene básicamente la misma presentación (ver figura 4.12) descrita en la sección anterior ²; en Excel se presenta una interfaz (ver figura 4.13) en la que se pueden manipular variables como flujo de refrigerante, temperatura de entrada del agua de refrigeración y parámetros del modelo. De esta forma, se intenta ver el comportamiento cuando se lleva a cabo la comunicación (transmisión/recepción) entre la planta y el controlador desarrolladas en ambientes diferentes. Con esto también se quiere presentar al sistema de control ejerciendo su acción, cuando algunos parámetros dentro del modelo utilizado para el diseño del controlador, son diferentes a los de la planta; esta situación se debe esperar en la vida real y lo que se pretende es facilitar el cambio del valor de dichos parámetros en las ventanas de cada aplicación dispuestas para ello. De esta forma se pretende facilitar una evaluación del sistema de control orientada a ver la robustez del diseño.

¹ Información adicional para la estrategia No lineal de control.

² Se presentan las ventanas: principal, de parámetros y de alarmas.

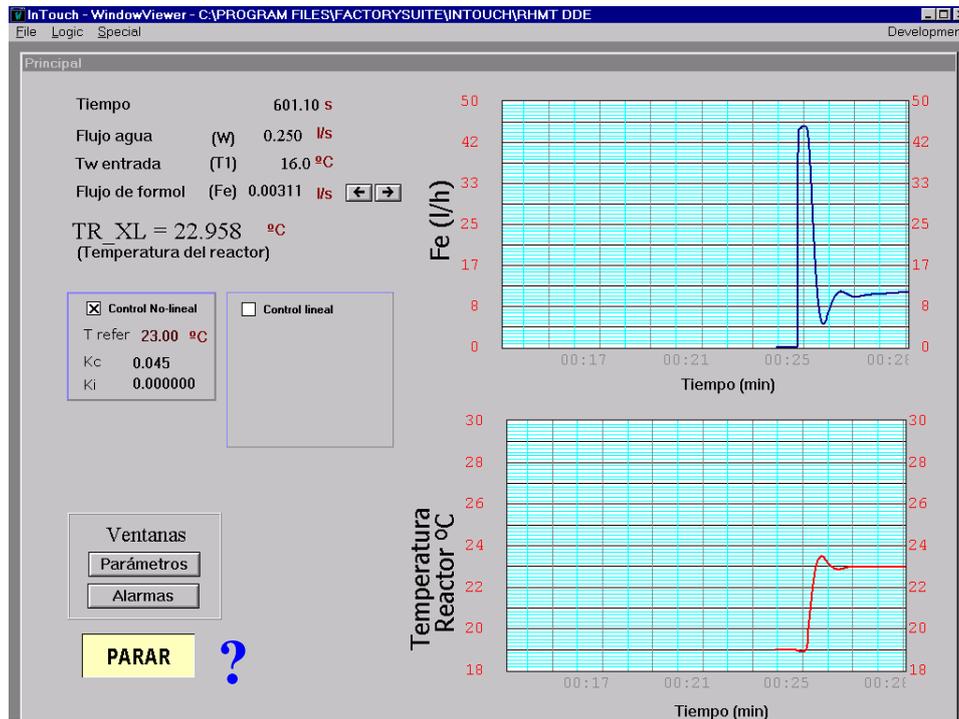


FIGURA 4.12 Imagen de la ventana principal de la aplicación conjunta en InTouch

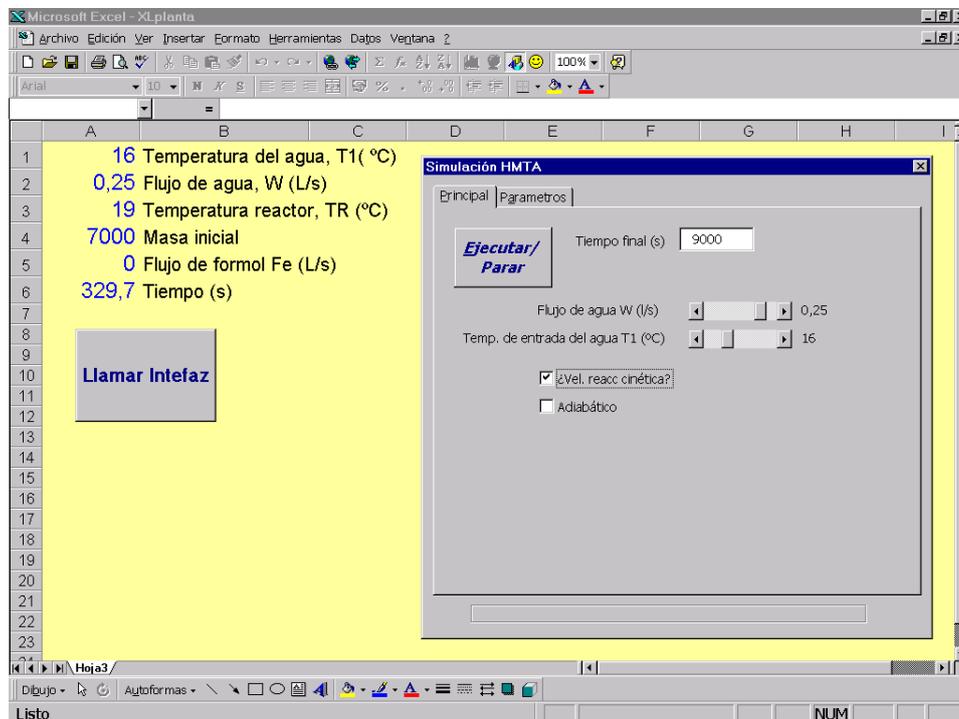


FIGURA 4.13 Imagen de la ventana principal de la aplicación conjunta en Excel

Los pasos para ejecutar la simulación entre InTouch y Excel son:

Paso	Evento
1	En el escritorio de Windows NT, ejecutar el Icono del explorador de proyectos de Intouch.
2	Seleccionar la aplicación de InTouch "RHMT DDE " y ejecutarla para que aparezca el Window Maker de InTouch..
3	Abrir la ventana Principal
4	Una vez en la aplicación de Excel (Xlplanta.xls) aceptar la actualización de datos.
5	Llamar la interfaz gráfica en Excel y establecer parámetros y opciones de simulación de la planta.
6	Desde InTouch se determina la carga inicial de amoniaco y se configuran las constantes del controlador y parámetros del algoritmo de control. En el menú <i>Special</i> ejecutar el comando <i>Reinitialize I/O</i> para comunicar InTouch con Excel.
7	Ejecutar simulación del controlador (InTouch). Ejecutar simulación de la planta (Excel). Leer la ayuda si se desea información adicional.
8	Excel simula la planta con el valor actual de Fe que proporciona InTouch.
9	Excel envía la información necesaria a InTouch vía DDE y espera el siguiente Fe.
10	Desde InTouch se determina el flujo de entrada, Fe, adecuado (control manual ó automático).
11	InTouch envía tal Fe a Excel.

AUTOMÁTICO

Para terminar la simulación, primero detener la aplicación de Excel y luego la de InTouch. Para cerrar los programas: primero InTouch y luego XL.

Si se instalan las aplicaciones que vienen con la tesis, en medio electronico, estas deben ubicarse en:

- Control secuencial: "C:\Program Files\Factory Suite\InTouch\C_SEC"
- Control de lazo en InTouch: "C:\Program Files\Factory Suite\InTouch\RHMT SQL"
- Control de lazo en InTouch: "C:\Program Files\Factory Suite\InTouch\RHMT DDE" y planta en Excel: " C:\WinNT\Cml\XLPLANTA.xls"

Sin embargo, las aplicaciones se encuentran ¹ actualmente instaladas.

¹ Sala de automatización de Ingeniería, LIQ.

5 REQUERIMIENTOS Y SUGERENCIAS SOBRE LA INSTRUMENTACIÓN

En esta sección se presentan algunas consideraciones relacionadas con la instrumentación requerida por la estrategia de control secuencial y de lazo. No se pretende realizar la selección de los diferentes elementos sino resaltar las necesidades y características relevantes del proceso para orientar dicha selección; tampoco se sugiere una marca, mas bien, si es el caso, el tipo de elemento adecuado.

Se debe tener presente que el sistema de control y supervisión objeto de estudio, se apoya en el uso de un computador personal, cuyo hardware y software están habilitados para tal labor, lo que implica que la información que llega del sistema (p.e: la señal de un sensor) debe ser llevada hasta el lugar donde reside el computador y, además, convertida a su representación digital. Una necesidad similar surge cuando la información va en dirección contraria, o sea, enlazar las señales de control del PC con los elementos finales de control, esto implica la necesidad de una red que maneje señales continuas y digitales cuyos protocolos de comunicación sean compatibles con el software. Entonces, se trata de un problema de integración y manejo de información relativamente complejo que requiere de personal especializado; vale anotar que este punto no se contempla dado el alcance del proyecto.

5.1 ELEMENTOS BÁSICOS REQUERIDOS

Con base en las necesidades de la estrategia de control y supervisión (figura 4.1) y en la descripción del equipo instalado (figura 2.1), estos son los elementos básicos adicionales ¹:

- Medición de nivel de punto (de dos estados) para tanques de materias primas.
- Sensor de temperatura y de flujo para el agua.
- Sensor de flujo para la línea de formol.

¹ El objetivo de esta sección es hacer sugerencias relacionadas con los elementos de medición y las válvulas de control únicamente.

- Sensor para el flujo de amoniaco.
- Válvula proporcional de control (línea de formol)
- Válvula ON/OFF para el agua.
- Válvula ON/OFF para la línea de amoniaco.
- Válvula ON/OFF para descarga del reactor.
- Tanque de amoniaco y tubería para conectarlo al reactor.
- Línea para el agua de enfriamiento.

Es adecuado referirse a la sección donde se describen los equipos de interés (sección 2.2), para tener en cuenta dimensiones y posición relativa de los mismos, esta información es necesaria a la hora de especificar los diferentes instrumentos. En la siguiente tabla se resume la información necesaria para definir los requerimientos de elementos de medición y las condiciones a las que se exponen.

Tabla 5.1 Información requerida por el sistema de control y supervisión

Equipo en cuestión	Información	Sustancias a las que se expone el sensor	Temperatura	Presión	Otros
Tanque de formol	<ul style="list-style-type: none"> • Nivel de punto (nivel mínimo) 	Solución formol (30-40 %): pH ácido, corrosivo.	16-25 °C	Atm.	
Tanque de amoniaco	<ul style="list-style-type: none"> • Nivel de punto (nivel mínimo) 	Solución Amoniaco (20-28 %): pH básico, corrosivo.	16-25 °C	Atm.	
Tubería formol	<ul style="list-style-type: none"> • Flujo volumétrico 	Formol: pH ácido, corrosivo.	16-25 °C	>Atm	Uso de bomba en la línea
Tubería amoniaco	<ul style="list-style-type: none"> • Flujo volumétrico 	Amoniaco: pH básico, corrosivo.	16-25 °C	Atm.	
Tubería Fluido térmico (H ₂ O)	<ul style="list-style-type: none"> • Flujo volumétrico • Temperatura de entrada del agua 	Agua de pozo.	14-25°C	>Atm	Uso de bomba en la línea
Reactor	<ul style="list-style-type: none"> • Temperatura 	Solución acuosa de amoniaco y HMTA en solución.	16-90 °C ¹	Atm.	Agitación vibración

5.2 ELEMENTOS DE MEDICIÓN

5.2.1 Medición de nivel

La información encontrada mediante la revisión bibliográfica hecha sobre los sensores de nivel, sugiere a los dispositivos tipo palanca y eje (hacen parte de la familia de los dispositivos de flotador). Son comúnmente utilizados para la medición de nivel de punto, por ser económicos y robustos.

¹ La temperatura final en operación adiabática es 83 °C aproximadamente.

Algunas características de estos medidores son [23]:

- Adecuados para líquidos con densidades relativas entre 0.3 y 2.4
- Temperaturas de operación entre (-) 40 °C y 300 °C
- Presión manométrica de operación (-)100 kPa y 14700 kPa
- Exactitud de +/- (2-5) milímetros

Las partes móviles en contacto se deben recubrir con materiales protectores para aumentar su vida útil; por disponibilidad de espacio y facilidad para el manejo de los tanques (llenado y limpieza) la orientación del instrumento debe ser horizontal para los tanques de almacenamiento de materia prima, para el reactor el sensor debe estar en forma vertical.

5.2.2 Medición de temperatura

A continuación se presenta una comparación entre los sensores más comúnmente utilizados para medición de temperatura, teniendo presente características del equipo de reacción; la bibliografía básica de referencia es [4], [8] y [40].

TABLA 5.2 Comparación entre RTD y termocuplas

Instrumento	☑ Ventajas	☒ Desventajas
Termocupla	<ul style="list-style-type: none"> • No es afectada por la vibración • Es robusta • Los costos (compra, instalación, mantenimiento) son relativamente bajos • Debido a que el intervalo de temperatura a trabajar es pequeño se puede lograr un desempeño (precisión, exactitud, linealidad) mejorado mediante calibración y utilizando las de tipo premium 	<ul style="list-style-type: none"> • Comparado con las RTD la precisión desempeño y estabilidad es deficiente (más apreciable a temperaturas cercanas a la ambiente), sobre todo si se necesita un control fino de la temperatura.
RTD	<ul style="list-style-type: none"> • Buena precisión y exactitud (+/- 0.001 °C sobre el punto de calibración) • Buena estabilidad (desviación: < 0.1 % del alcance en 5 años) • Los problemas de autocalentamiento disminuyen debido a que existen buenas condiciones de transferencia de calor. • Disponibles para intervalos de operación relativamente pequeños 	<ul style="list-style-type: none"> • Costos (compra, instalación, operación y mantenimiento) elevados, generalmente (3-4):1 comparado con las termocuplas. • Sensibles a la vibración

En cualquier caso se debe utilizar un elemento que aíse el sensor del contacto directo con el medio a medir, dadas las condiciones agresivas a las que se expone.

Por costo y robustez, aunque se pueda sacrificar el desempeño, se sugiere el uso de una termocupla Tipo E (Chromel/Constantan) o J (Iron/Constantan) que se desempeñan bien en temperaturas no lejanas a la ambiente. La tipo E trabaja adecuadamente en atmósferas oxidantes e inertes, es la termocupla que tiene la mayor sensibilidad ($\Delta V/\Delta T$) y es usada para intervalos pequeños de medición de temperatura [8]. La tipo J es la termocupla más ampliamente usada industrialmente, resiste atmósferas oxidantes y reductoras hasta 760 °C [8].

5.2.3 Medición de flujo

La correcta selección de un medidor de flujo es compleja dada la gran variedad de instrumentos disponibles para tal labor, así mismo se esperaría la existencia de uno más conveniente para una necesidad específica [8].

Un punto adicional a los expuestos en la sección 1.4.1.1, para escoger el medidor es la caída de presión a través del aparato. Los medidores invasivos o de contacto son los que proporcionan más pérdidas de energía en la línea de transporte, según el diseño se hace más pronunciada dicha pérdida (p.e: entre los medidores por diferencia de presión el de Venturi causa el menor efecto). Por otro lado los sensores ultrasónicos y magnéticos, por nombrar algunos no invasivos, no causan caídas de presión notables.

Los medidores volumétricos son atractivos, por costos, comparados con los másicos; adicionalmente se sugiere su uso, porque se espera que los posibles cambios en las variables que afectan su medición (p.e: temperatura), no alteren significativamente la precisión al estimar el flujo másico.

Una característica importante del sistema en cuestión, es que las velocidades de flujo son muy bajas para amoniaco y formol, este factor tiene un fuerte peso en el desempeño del sensor. La mayoría de equipos requieren que para valores aceptables de precisión y exactitud, el número de Reynolds debe superar 5000. Las condiciones del sistema se resumen en la tabla 5.3.

TABLA 5.3 Condiciones de flujo del formol, amoniaco y agua en la línea de transporte

Línea	Diámetro Nominal (plg)	Diámetro interno ¹ (cm)	Velocidad (cm/s)	Temperatura	Densidad Promedio (g/mL)	Viscosidad Promedio (Poise)	Número de Reynolds NRe
NH ₃	½	1.58	15-30 ²	16-22°C	0.91	0.014	1540-3080
HCHO	½	1.58	0.765-7.65 ³	16-22°C	1.11	0.022 ⁴	61-610
H ₂ O	½	1.58	51 – 203	14-22°C	1	0.01	8060-32240

Según la revisión hecha, los medidores presentados a continuación se consideran aptos para la tarea:

- Los medidores para condiciones de flujo laminar, donde el diseño debe ser tal que se mantenga dicho régimen para poder determinar el flujo de forma correcta mediante la aplicación de la ecuación de Bernoulli. La medición del flujo se realiza al tener la caída de presión entre dos puntos donde:
 - Sólo existen pérdidas por fricción
 - No hay trabajo de bomba
 - El área es constante

ΔP y el flujo volumétrico guardan una relación lineal ⁵.

- Los medidores de rueda giratoria o rotor (*'Paddle-wheel'*), utilizan el mismo principio de las turbinas con la diferencia de que el elemento que gira es perpendicular al flujo del fluido.

Algunas características son [23]:

- Exactitud = +/- (1- 5) %.
- Precisión = +/- (½-1) %.
- Caída de presión máxima = (7-35) psi dependiendo del flujo.
- Relación de flujos, máximo: mínimo (*'Turn down ratio'*) = 20:1.
- Disponibles para flujos desde 0.1 L/min hasta 125 L/min.
- Costo bajo comparativamente.
- Algunos necesitan (aproximadamente) 50 diámetros antes y 5 después de tubería recta, para obtener buen desempeño y linealidad.
- Son sensibles a cambios en la viscosidad.

¹ [16] página 949

² Valores típicos para flujo por gravedad, [23] página 190.

³ Basadas en los flujos de entrada requeridos por el control de lazo, adicionalmente se dio un margen de seguridad.

⁴ [15] Vol A11 página 622

⁵
$$\Delta P = 128 \frac{Q \mu \Delta L}{g_c \pi D^3}$$

- Los que utilizan luz infrarroja para medir la velocidad de giro del rotor, se usan con fluidos que permitan el paso de luz infrarroja (fluidos claros o translúcidos, bajo contenido de sólidos).

5.3 ELEMENTO FINAL DE CONTROL

Al ser considerados las válvulas de control como los EFC a utilizar, se requieren 3 de tipo *todo o nada* ('on-off') y una de tipo proporcional. La capacidad de flujo, la presión de operación, la hermeticidad, el tipo de actuador y los materiales necesarios, son aspectos a tener en cuenta en la selección de una válvula tipo *todo o nada*. Las consideraciones que se realizan a continuación, respecto a válvulas de control, centran su atención en las de tipo proporcional, pero resultan de carácter general.

VÁLVULAS DE CONTROL (tipo proporcional)

Los proveedores de válvulas de control suministran catálogos que orientan el proceso de selección y deben ser consultados, pues en ellos se encuentra información técnica necesaria para realizar la selección; además, con base en especificaciones que solicitan a través de formatos, ej. DIN EN 60 534-7, ellos realizan recomendaciones; sin embargo es el cliente quien decidirá y es conveniente que conozca del tema. (en el anexo E a manera de ejemplo se presenta un formato para datos de acuerdo con la norma DIN mencionada, e información de una válvula de control para aplicación en plantas piloto).

A continuación se presenta un algoritmo de selección de válvulas de control de aplicación general, que ha sido preparado con base en [9,42,44], para guiar esta etapa en el proceso de implementación del sistema de control para el reactor discontinuo trabajado. Sin embargo, es adecuado que el interesado revise los conceptos sobre válvulas de control, para un correcto entendimiento de lo que se expone a continuación. (p.e. [9] y [42])

Algoritmo de selección de válvulas de control

1. Calcular el valor requerido de C_{v_c} .

A fin de especificar el tamaño de una válvula, en términos del flujo que puede manejar cuando está totalmente abierta, se usa la siguiente ecuación:

$$C_V = Q \cdot \sqrt{\frac{S}{\Delta P_v}} \quad (5.1)$$

Donde:

Q = flujo volumétrico, en gpm.

S = densidad relativa del fluido.

ΔP_v = caída de presión a través de la válvula totalmente abierta, en psi.

C_v = factor asociado con la capacidad de la válvula.

Esta ecuación es de utilización generalizada, y para líquidos poco viscosos, resulta satisfactoria para dimensionar una válvula para diferentes fluidos; para otros casos los mismos fabricantes suministran las fórmulas con las correcciones adecuadas.

Para calcular el C_{vc} (factor asociado a aperturas diferentes al 100%), se utiliza la ecuación (5.1), o una análoga, usando las condiciones de operación normal del sistema donde será instalada la válvula. En el caso tratado en este trabajo, se utiliza el flujo medio de operación (F_{e_s}) y debe verificarse que los valores obtenidos para los flujos extremos, correspondan a aperturas que permiten controlabilidad (por ejemplo en el intervalo: 30%–80%).

Para el diseño de sistemas con bomba, donde tanto la válvula de control como la bomba deben ser especificadas, la caída de presión asociada a la válvula de control es una decisión que se debe tomar, esta asignación es importante pues afecta a los costos de bombeo y al desempeño del sistema de control. Si la bomba ya existe, la caída de presión a través de la válvula estará fijada. (corresponde a la diferencia entre la curva obtenida de pérdidas en la instalación para diferentes flujos (denominada 'curva del sistema') y la curva característica de la bomba (cabeza dinámica total vs. caudal).

2. Seleccionar el valor de C_v con base en los catálogos suministrados por el proveedor.

Los fabricantes, para cada una de sus válvulas, obtienen y suministran estos valores en sus catálogos. La válvula seleccionada deberá tener un coeficiente de flujo C_v , entre 1.25 y 2 veces el C_{vc} . En otras palabras debe seleccionarse una válvula para que **no** opere cerca de las posiciones de apertura o de cierre total, a condiciones normales (si se selecciona la válvula con $C_v=C_{vc}$, operará totalmente abierta en condiciones normales de operación); porcentajes de apertura entre 50% - 80% son típicos para operación normal. Además se debe tener en cuenta que las listas de valores suministradas por los fabricantes, corresponden a un determinado tipo de característica inherente.

La 'rangoabilidad' de la válvula, relación entre el máximo y el mínimo flujo controlables, debe ser verificada, para garantizar la controlabilidad en todas las diferentes condiciones de operación que se esperan. Una amplia rangoabilidad puede ser necesaria cuando se requiere manejar grandes variaciones de flujo en operación o para manejar la combinación de diferentes etapas de operación. En general las válvulas rotatorias tienen una mayor rangoabilidad que las de tipo de vástago móvil.

En algunos catálogos es posible encontrar directamente C_{vc} vs %apertura, y con certeza puede verificarse que el dimensionamiento de la válvula es adecuado (porcentaje de apertura correspondiente entre 50%-80%).

3. Seleccionar el tipo de característica inherente de la válvula, con base en las características del sistema a controlar.

La selección de la característica inherente de una válvula puede tener una gran influencia en la estabilidad o controlabilidad del proceso, ya que esta representa el cambio de la ganancia de la válvula cuando se opera. El aspecto importante a tener en cuenta es que cuando la caída de presión a través de la válvula es poco significativa respecto a las del sistema donde está presente, la desviación que experimenta su característica instalada respecto a la inherente es grande. (Al instalarse, una válvula de característica inherente de igual porcentaje tiende a comportarse como lineal y la lineal hacia característica de apertura rápida).

Algunas recomendaciones fueron recopiladas y se presentan a continuación:

- La característica de apertura rápida se utiliza en *control todo o nada*.
- Sistemas de control de nivel: La característica recomendable es la lineal a menos de que $\Delta P_{V_{max}} / \Delta P_{V_{min}}$ sea mayor de 2.5:1, en cuyo caso se recomienda igual porcentaje.
- Sistemas de control de presión: Cuando la válvula debe manejar distintas caídas de presión (por encima de una relación de 2:1) para poder satisfacer los requisitos del sistema donde se instala, debe utilizarse una válvula de igual porcentaje, en caso contrario se utiliza una con característica inherente lineal.
- Sistemas de control de flujo: Si el elemento de medición está en serie con la válvula se recomienda una válvula lineal; si la válvula está en una derivación (cierra para aumentar el caudal sentido por el elemento primario) y el medidor es lineal entonces seleccionar una válvula lineal, si el elemento es de raíz cuadrada entonces una de igual porcentaje; Si el flujo es pequeño y la variación de ΔP_v es grande entonces se recomienda una válvula lineal.
- Sistemas de control temperatura: En general se recomienda características de igual porcentaje.

4. *Seleccionar la posición segura de la válvula para el caso de falla de la fuente de suministro que la opera, con base en criterios de seguridad o económicos.*

5. *Determinar la caída de presión máxima que deberá asumir la válvula y seleccionar el actuador.*

La máxima caída de presión que la válvula puede absorber, es un aspecto que deberá verificarse con base en la información que suministra el proveedor en sus catálogos y a partir de esta seleccionar el actuador. Las válvulas de vástago móvil son generalmente superiores a las rotatorias en este aspecto.

6. *Especificar el grado de hermeticidad que la válvula debe ofrecer.*

Se ofrecen válvulas con diferentes características de hermeticidad, clasificadas según estándares (p.e. ANSI B16.104) y la selección se realiza conforme los requerimientos de la aplicación)

7. *Determinar los materiales a ser usados, basándose en aspectos de corrosión, erosión, presión y temperatura.*

Las tablas que sirven para este fin se encuentran en la información suministrada por el fabricante. El material de la tubería generalmente indica el material del cuerpo, sin embargo debido a que la velocidad es más alta en las válvulas, otros factores deben ser considerados.

En el caso de válvulas de control para pequeños flujos, utilizadas por ejemplo en plantas piloto o en investigaciones técnicas, los proveedores suministran estas válvulas normalmente en acero inoxidable, pero se pueden solicitar en el material deseado.

8. Seleccionar el equipo adicional que requiera, como posicionadores, interruptores limitantes, etc. Si son necesarios.

Los posicionadores aumentan la velocidad de respuesta del EFC, son útiles en muchas aplicaciones y son requeridos para ciertos tipos de actuadores, que presentan histéresis (la cual puede causar desgaste en la válvula). Sin embargo, estos elementos agregan costo y complejidad al sistema y su utilización debe ser estudiada.

9. Generalmente una vez desarrolladas estas etapas, se diligencia un formulario con la información hasta aquí obtenida, u otra adicional por solicitud, y se envía al proveedor.

CONSIDERACIONES ADICIONALES

- Los actuadores neumáticos son los utilizados más ampliamente, aventajados especialmente en áreas peligrosas, además al fallar el aire de instrumentos se cierran o abren totalmente. Los actuadores eléctricos son una opción cuando no hay disponible aire comprimido.
- Las válvulas de control suelen tener el mismo diámetro nominal o un tamaño menor (hasta la mitad) que el del tubo donde se instala, pero nunca más grande.
- Se recomienda instalar una válvula de control manual en derivación (bypass) a la automática, por cuestiones de mantenimiento o falla.
- La cavitación puede producir graves daños, y puede suceder cuando se llega cerca de la presión de vapor del fluido dentro del cuerpo. Existen factores que permiten verificar esta condición. Por ejemplo para líquidos, ΔP_v deberá ser menor que ΔP_c (caída de presión crítica, calculada con base en información suministrada por los fabricantes) para que no se presenten problemas de cavitación.

5.4 COMENTARIOS SOBRE FUENTES DE INFORMACIÓN

Para todo lo referente a instrumentación se recomienda la búsqueda de información en Internet, el contacto con los departamentos especializados (flujo, temperatura, adquisición de datos o presión y nivel) es de gran utilidad. Existen bastantes fuentes de información pero se recomienda la página www.omega.com ya que posee una buena estructura para atención al cliente, para solución a problemas de medición específicos o especiales

(también para el área de control de procesos en general) y bastante información técnica y práctica completamente gratis. También el contacto con representantes de ventas locales y la información ofrecida por literatura especializada son valiosos.

CONCLUSIONES

- La naturaleza del proceso es cambiante en el tiempo, y aunque es viable matemáticamente la linealización alrededor de un punto, no resulta útil para solucionar el problema de control trabajando con el acercamiento clásico de variables de desviación y análisis bajo transformada de Laplace. Se hizo necesaria la aplicación de herramientas diferentes a las utilizadas sobre modelos linealizados. Para el sistema no lineal controlado, la aplicación de la simulación matemática como herramienta de análisis y diseño, resultó satisfactoria; exige un esfuerzo importante para la obtención del modelo a utilizar, lo que aporta conocimiento útil sobre el proceso a controlar. Aunque es de esperar que el modelo conseguido contenga inexactitudes en sus parámetros y en las mismas relaciones que lo conforman, su comportamiento general puede ser observado, y su análisis permite tomar decisiones sobre el diseño y la estrategia de control a aplicar. La misma herramienta permitió mediante el análisis de sensibilidad paramétrica, brindar confianza en el uso del modelo utilizado.
- En la definición de una estrategia de control y supervisión para un reactor discontinuo es necesario involucrar aspectos tanto de control secuencial como de lazo. Después de desarrollada la metodología se considera que puede ser aplicada a otras etapas del proceso de producción de HMTA o inclusive a otros procesos.

- La aplicación de la metodología planteada para el establecimiento de la estrategia de control secuencial, alcanzó el objetivo propuesto sin ser necesarios desarrollos complejos para su cumplimiento. Debe quedar claro que fue consecuencia de trabajar una sola operación y una única unidad, y no debe generalizarse esto mismo para la automatización, bajo control secuencial, de procesos o plantas químicas completas.
- El flujo de formol como variable manipulada permite obtener un control de buena calidad. Su elección se justificó por cuestiones operativas, de seguridad y por la sensibilidad (según el índice propuesto, $D_{\%}$) que tiene sobre la temperatura de reacción.
- Se diseñan dos controladores que pueden utilizarse en la automatización de la etapa de síntesis del proceso de producción de HMTA, uno de tipo lineal (PID) y otro de tipo no lineal basado en el modelo. El controlador PID tuvo un desempeño adecuado a pesar de que la naturaleza del sistema no es lineal. La poca desviación respecto a un comportamiento lineal, observada a través de la relación entre las variables de entrada y la salida del sistema, presentada en las tablas 2.7 y 2.8, explica su buen funcionamiento. Los fundamentos de control de procesos adquiridos en el curso básico, permitieron la exploración de una técnica no lineal que dio solución al problema de control de lazo. Tanto el controlador lineal como el no lineal, permiten cumplir los objetivos de control planteados y no presentan diferencias significativas en su desempeño. El esfuerzo realizado para implementar ambas estrategias a nivel de Software, no favorece con claridad a ninguno de los dos controladores; sin embargo, el análisis de estabilidad con fundamento matemático, que pudo realizarse para el controlador de linealización de E/S (no lineal), brinda una mayor confianza en él. Además, el controlador no lineal resulta más sencillo que el controlador PID, por permitir su ajuste mediante un único parámetro.
- La aplicación de la técnica propuesta, planteada para el ajuste de los parámetros del controlador PID, produjo resultados satisfactorios. Guió el proceso de ensayo y error, permitiendo el ajuste del controlador de tres parámetros (PID) con la misma sencillez

que el de un sólo parámetro (P). Resulta ilustrativa y facilita un mejor entendimiento del sistema de control.

- Considerar que la velocidad de reacción en la totalidad del volumen del reactor, es igual a la velocidad de adición del formaldehído ($-r_B \cdot V \cong \left(\frac{w \rho}{PM}\right)_B \cdot Fe$) permitió reducir el número de ecuaciones diferenciales del modelo para la aplicación directa de la técnica no lineal de control (linealización entrada - salida).
- El éxito de la técnica no lineal se basa en la fidelidad con la que el modelo representa la planta real. La introducción de la acción integral en el controlador no lineal, permitió disminuir el efecto de la imprecisión del modelo utilizado dentro del algoritmo de control. Se puede pensar en aplicar otras alternativas para el control que tengan en cuenta imprecisiones en el modelo, por ejemplo control robusto.
- Los buenos resultados obtenidos por ambos controladores diseñados, PID y de linealización entrada-salida, fortalecen la idea de lo adecuado que resulta consultar las soluciones dadas por otros ingenieros, a problemas similares, teniendo en cuenta la cantidad de alternativas que se pueden explorar para realizar el control automático de una *planta* de interés.
- El equipo a utilizar para la realización de la etapa de síntesis, determina el tiempo requerido para llevar a cabo la reacción química a una temperatura dada, y esta relacionado directamente con su capacidad para transferir calor. Si de alguna manera se mejora este aspecto, por ejemplo haciendo circular la masa reactiva a través de un intercambiador externo, el proceso de producción de hexamina podrá desarrollarse en un menor tiempo, ya que para mantener la temperatura deseada, el sistema de control debe aumentar la velocidad de adición de reactivo. Conforme a estos comentarios, están los bajos flujos de adición de formol obtenidos, y que respecto a la válvula de control correspondiente, establecen la necesidad de considerar una rangoabilidad suficiente,

para permitir su utilización en corridas de otros procesos con flujos más típicos de operación en tubería de 1/2".

- La implementación real de este proyecto, seguramente requerirá una inversión significativa de capital, y un análisis de beneficio vs. costo deberá ser realizado para cada uno de los nuevos dispositivos a utilizar. Un punto a considerar es la comunicación entre los instrumentos de campo (cuyos requerimientos básicos han sido dados) y el PC de la sala de automatización. En cuanto al manejo de la información debe tenerse en cuenta que es necesario utilizar señales tanto análogas como digitales, y que el software dispone de ciertos protocolos de comunicación. Se sugiere que un estudiante de Ingeniería Química y uno de Ingeniería Eléctrica o Electrónica, desarrollen esta etapa entendiendo muy bien lo realizado y alcancen el objetivo final buscado. Deberá también considerarse la ayuda económica que algunas instituciones pueden brindar para este tipo de proyectos.
- Se sugiere para posterior estudio, la aplicación de una idea encontrada en la literatura [40], para la simulación física de una reacción exotérmica en fase líquida, orientada al estudio de sistemas de control de temperatura. Consiste en determinar la cantidad de calor liberado por una reacción de interés y simular su efecto sobre la masa reactiva, mediante el suministro de vapor directo al reactor. La cantidad de vapor es estimada al realizar balances de energía y materia (ambos relacionados con la reacción a simular) según se conozca el estado o valor de las variables relevantes dentro del modelo. Para el caso de síntesis estudiado en este trabajo, tanto la masa reactiva como el flujo de entrada pueden ser sustituidos por agua teniendo presente que se debe evaluar el efecto de la diferencia entre el valor de las propiedades del agua y las del sistema que se desea simular. Extendiendo esta idea al estudio de otros procesos reactivos sujetos a un lazo de control de temperatura, se pueden mejorar las condiciones de seguridad al posibilitar la simulación de reacciones en las que intervengan sustancias peligrosas o altamente corrosivas. También se manifiesta en economía al reducir los costos relacionados con el uso de materias primas. Esta aproximación puede ser igualmente útil y aplicable a

reacciones endotérmicas con la diferencia de que en este caso se debe estimar la energía a retirar.

- En casos donde es aplicable la linealización entrada-salida, pero U no se puede ajustar de forma directa (p.e: un flujo de calor), se puede recurrir a la manipulación de una variable que afecte a U , para ejercer de esta forma las acciones adecuadas de control. El valor de la variable manipulada se establece conociendo el valor de U , determinado por la ley de control, y un modelo que las relacione.
- Se considera que el software utilizado para las estrategias de control, puede ser utilizado con fines académicos aunque este concebido para aplicaciones industriales.
- Se encontró dificultad a la hora de adquirir información sobre el equipo disponible en planta piloto, debido a que no se halla documentada formalmente.
- La sustentación pública de los proyectos de grado ahora necesaria, resulta además adecuada porque favorece la continuación de trabajos que así se plantean; al respecto puede considerarse la posibilidad de exigir a los estudiantes, que sugieran que su labor sea continuada, la elaboración de un breve documento donde se presente tal propuesta, con el fin de crear una base de datos o similar, para ser consultada por estudiantes que buscan tema para proyecto de grado.

BIBLIOGRAFÍA

1. Afonso P. et al, "Model predictive control of a pilot plant reactor with a simulated exothermic reaction", Computers and Chemical Engineering, Vol. 20, Suplemento, 1996, pag.. 769-774.
2. Aris R. Y Amundson N., "An analysis of chemical reaction stability" I y II, Chemical Engineering and science, Vol. 7, 1958, pag. 121-155.
3. Baur E. y Rutschi W., "Über bildung und zerfall von Hexamethylenetetramin", Helvetica Chimica Acta, Vol. 24, 1941, pag.. 754-767.
4. Bediones , "Criteria for the selection between thermocouples and RTD's", ", Instrument Society of America- ISA proceedings, Parte 1,1991, pag. 1-11.
5. Bequette W., "Operability analysis for an exothermic semibatch reactor", Computers and Chemical Engineering, Vol. 20, Suplemento, 1996, pag.. 1583-1588.
6. Berber R., " Control of batch reactors: a review", Transactions of industrial chemical engineering, Vol. 74, Parte A, Enero de 1990, pag. 3-20.
7. Condom, "Engineering Workstations, ", Chemical Engineering, mayo 1989, pag. 104-108.
8. Considine Douglas, Process Industrial Instruments and Control Handbook, McGraw Hill,4 ed., Estados Unidos,1993.
9. Coughanowr D., Process systems analysis and control, McGraw Hill, Singapore, 1991
10. Chang S., " Heat capacities and thermodynamic properties of globular molecules; I Adamante and Hexamethylenetetramine", Journal of Phys. Chem., Vol. 64, 1960, pag. 1547-1551.

11. Finh Sandra, "Specifying batch process control strategies", InTech, Octubre 1982, pag.. 57-63.
12. Fonnegra L. y Sarmiento D., Establecimiento de las condiciones de reacción y estudio cinético para la producción de Hexametilentetramina, Universidad Nacional de Colombia, Tesis de grado, Ingeniería Química, 1993.
13. Funk J., "Controlling continuous process with DCS", Chemical Engineering, mayo 1989, pag. 90-96
14. Gordon L., "Feed-back control modes", Chemical Engineering, Agosto 8 1983, pag. 79-85
15. Hougen O.A. et al, Principios de los procesos químicos, Tomo 1, Editorial Reverte, Barcelona, 1994.
16. Kern D., Procesos de transferencia de calor, Editorial Continental, México, 1995.
17. Kuo B. , Automatic control systems, Prentice Hall, New Jersey, 1987
18. Levenspiel O., Ingeniería de las reacciones químicas, Editorial Reverté, Mexico, 1986
19. Luyben W., Process modeling simulation and control, McGraw Hill, New York, 1990.
20. McCabe W. Et al, Operaciones unitarias en ingeniería química, McGraw Hill, Madrid, 1981.
21. Smith J., Chemical engineering kinetics, McGraw Hill, Singapore, 1981
22. Modell D., "DCS for batch process control", Chemical Engineering, mayo 1989, pag. 97-103.
23. Omega, WWW.OMEGA.COM, Diciembre de 1999, (Pagina de Internet)
24. Palanki S. y Kravaris C., "Controller synthesis for time varying systems by input/output linearization", Computers and Chemical Engineering, Vol. 21, No. 8, 1997, pag.. 891-903.
25. Perry Chilton et al, Manual del Ingeniero Químico, McGraw Hill, México, 1992
26. Powel F., Digital control of dynamic systems, Wesley, EUA, 1990.
27. Strek F. , " Heat transfer in liquid mixers- study of a turbine agitator with six blades", International Chemical Engineering, Vol. 3, No. 4, Octubre 1963, pag. 533-555.
28. Reid et al, The properties of gases and liquids, McGraw Hill, Singapore, 1988.

29. Rippin D.W.T, "Control of batch processes ", Proceedings IFAC symposium Dynamics and control of chemical reactors, Dycord 1989, pag.. 131.
30. Rippin D.W.T, "Simulation of single and multiproduct batch chemical plants for optimal design and operation ", Computers and Chemical Engineering, Vol. 7, No 3, pag.. 463-481.
31. Slotine J. y Li W., Applied nonlinear control, Prentice Hall, New Jersey, 1991.
32. Meissner F. et al, " Continuous production of Hexametylenetetramine", Industrial and engineering chemistry, Vol. 46, No 4, pag.. 724-727.
33. Stephanopolus G., Chemical process control, an introduction to theory and practice, Prentice Hall, New Jersey, 1984.
34. Rase H., Chemical reactor design for process plants, John Wiley & Sons, New York, 1977.
35. Strothman Jim, "Batch standards group agrees on terminology", Intech, Agosto 1995, pag.. 34-40.
36. Szeifert F., "Process dynamics and temperature control of fed batch reactors", Computers and Chemical Engineering, Vol. 19, suplemento, 1995. Pag. 447-452.
37. Toxic and Hazardous, International technical information institute, Japón, 1976, pag.. 28-30, 249-250.
38. Ullmann et Al, Ullman's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Alemania, 1987.
39. Walker F., Formaldehyde, Reinhold Publishing Co., New York, 1944.
40. Wang T., "Criteria for selection of temperature sensors", Instrument Society of America ISA proceedings, Parte 1,1990, pag. 112-128.
41. Wonderware's InTouch User's Guide. Irvine, CA. Abril 1995
42. Z.Greene Richard, Válvulas, selección, uso y mantenimiento. McGraw Hill 1992, Mexico.
43. Zill Dennis, Ecuaciones diferenciales con aplicaciones, Grupo ed. Iberoamérica, México D.F., 1988.
44. Zorval Lovett, "Control valves", Chemical Engineering, mayo 1989, pag. 97-103, 11 de octubre de 1971 por

ANEXO A. DIAGRAMA DE TIEMPO Y EVENTOS SIMBOLOGÍA Y EJEMPLOS

Contiene: Artículo referenciado en el capítulo 1 (sección 1.2.4.2)

ANEXO B. EJEMPLO DE UN SISTEMA NO LINEAL

Considérese un tanque para almacenamiento de un líquido.

El balance de materia alrededor del tanque es:

$$\rho_e F_e - \rho_s F_s = \frac{d(V\rho_s)}{dt} \quad (\text{B.1})$$

donde:

- F_e y F_s : flujos volumétricos de entrada y salida
- ρ_e y ρ_s : densidad del líquido a la entrada y a la salida
- V : volumen del líquido en el tanque

Suponiendo constantes el área transversal y la densidad ($\rho_e = \rho_s$) se tiene:

$$F_e - F_s = A_T \frac{d(H)}{dt} \quad (\text{B.2})$$

donde:

- A_T : área transversal del tanque
- H : altura del líquido en el tanque

Para generar la relación de interés, entre F_e y H , se tiene que en condiciones de flujo turbulento el flujo de salida se puede expresar como ¹:

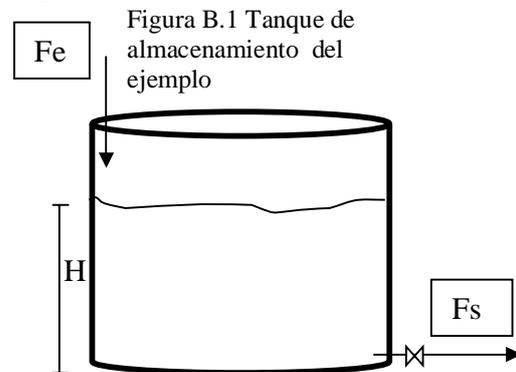
$$F_s = \frac{\sqrt{H}}{R} \quad (\text{B.3})$$

donde R es la resistencia al flujo. Entonces se obtiene:

$$F_e - \frac{\sqrt{H}}{R} = A_T \frac{d(H)}{dt} \quad (\text{B.4})$$

que es una ecuación diferencial no lineal.

Para probar la conservación del principio de superposición y la bondad del uso de ecuaciones linealizadas, se perturba el sistema, que se encuentra trabajando en estado



¹ [9] página 64

estable, con un cambio tipo paso en el flujo de entrada. El comportamiento de la altura será representado por la ecuación no lineal y por una lineal.

Las condiciones son:

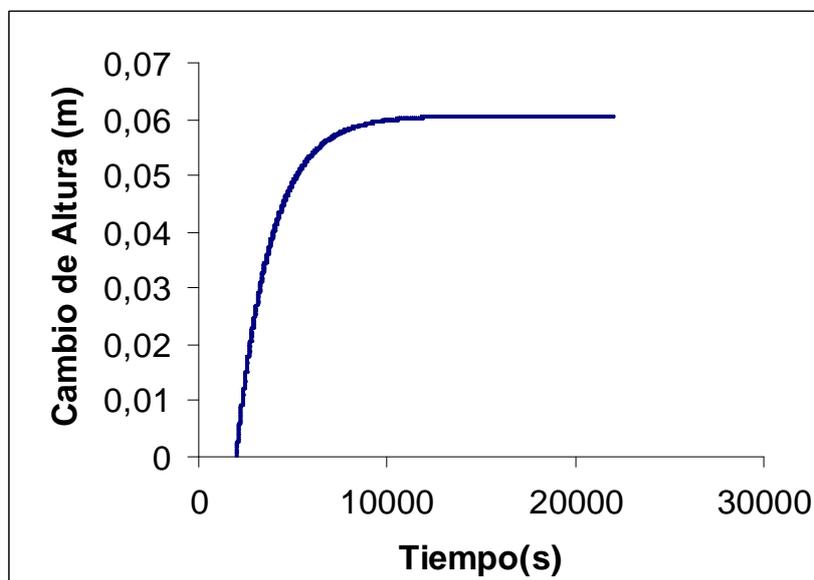
- F_e (estado estable) = $5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s} = 5 \text{ L/s}$
- H (estado estable) = 1.5 m
- $A_T = 3 \text{ m}^2$
- $R = 244.949 \text{ s/m}^{2.5} = 0.2449 \text{ s} \cdot \text{m}^{0.5}/\text{L}$
- Tiempo en el cual se aplica la perturbación o cambio en el flujo de entrada = 2000 s.

La ecuación diferencial linealizada es:

$$F_e - \frac{\left(\frac{1.5}{2\sqrt{1.5}} + \frac{H}{2\sqrt{1.5}} \right)}{R} = A_T \frac{d(H)}{dt} \quad (\text{B.5})$$

- **Respuesta a un cambio pequeño del F_e**

Para un cambio en el flujo de entrada, $\Delta F_e = 0.1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s} = 0.1 \text{ L/s}$, la respuesta de los modelos no lineal y lineal es (ver gráfico B.1) :



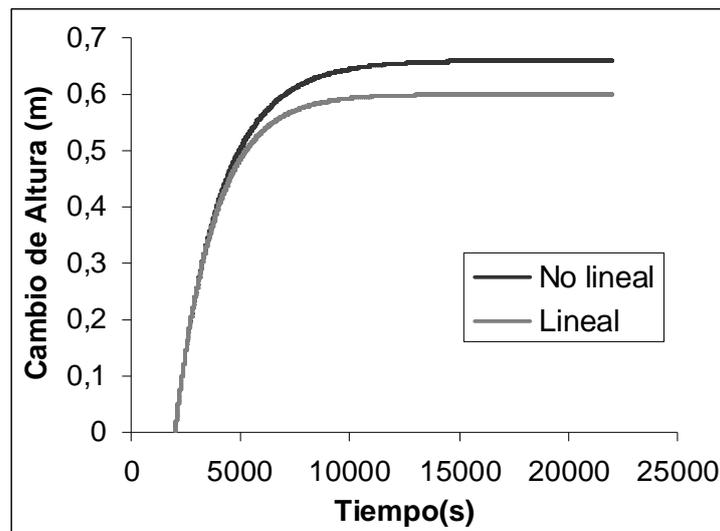
GRÁFICA B.1 Evolución de la altura del fluido al aplicar una perturbación pequeña

- H final (no lineal) = 1.5606 m; ΔH (no lineal) = 0.0606 m
- H final (lineal) = 1.560 m; ΔH (lineal) = 0.06 m

Ambas ecuaciones, (B.5) y (B.4), representan el comportamiento del sistema de forma semejante en el escenario anteriormente propuesto. La diferencia entre el $\Delta H_{\text{no lineal}}$ y ΔH_{lineal} es de 1 % = $(\Delta H_{\text{no lineal}} - \Delta H_{\text{lineal}}) / \Delta H_{\text{no lineal}}$.

- **Respuesta a un cambio grande en el Fe**

Para un aumento en el flujo de entrada, $\Delta Fe = 1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s} = 1 \text{ L/s}$, las repuestas son (ver Gráfico B.2) :



GRÁFICA B.2 Comportamiento lineal y no lineal cuando crece Fe

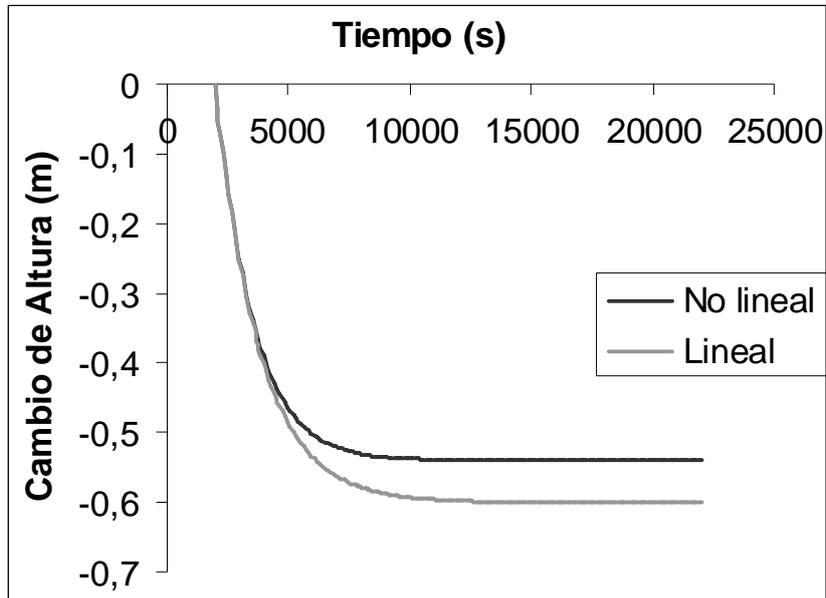
- H final (no lineal) = 2.16 m; ΔH (no lineal) = 0.66 m
- H final (lineal) = 2.1 m; ΔH (lineal) = 0.60 m

Si la relación salida/entrada fuera lineal el ΔH para cambio grande en Fe sería 10 veces el ΔH para el cambio pequeño. La diferencia entre el $\Delta H_{\text{no lineal}}$ y ΔH_{lineal} es de 9.1%.

Ahora, para disminución en el Fe, $\Delta Fe = -1 \text{ L/s}$, las repuestas son (ver gráfico B.3) :

- H final (no lineal) = 0.96 m; ΔH (no lineal) = - 0.54 m
- H final (lineal) = 0.9 m; ΔH (lineal) = - 0.60 m

La diferencia entre el $\Delta H_{\text{no lineal}}$ y ΔH_{lineal} es de 11.1%.



GRÁFICA B.3 Comportamiento lineal y no lineal cuando decrece F_e

Se puede anotar que el sistema no lineal puede responder de forma diferente al lineal según sea el sentido y la magnitud de la perturbación.

ANEXO C-1. PROPIEDADES, TOXICIDAD Y MANEJO DEL PRODUCTO (HEXAMINA) [37,38].

PROPIEDADES QUÍMICAS

<i>PROPIEDADES QUÍMICAS</i>
CONDICIONES A EVITAR: La Hexamina se hidroliza en presencia de ácidos ó en ambientes ácidos. Este producto se descompone a temperaturas medias (150-300°C) en presencia de agua.
INCOMPATIBILIDAD: Con ácidos fuertes.
DESCOMPOSICION EN PRODUCTOS PELIGROSOS: A temperaturas extremas como las usales en la industria de la fundición, puede formar compuestos nitrosos tales como la N-nitrosodimetilamina.
REACCIÓN PELIGROSA CON YODOFORMO: se enciende y explota por mezcla y calentamiento a 178 °C

MANEJO Y TOXICIDAD

Es básicamente no tóxico, por ingestión pueden presentarse los siguientes síntomas: diarrea, hematuria, eritema, prurito, albuminuria y ampollas o manchas en la piel.

<i>PELIGROS PARA LA SALUD</i>
INGESTION ORAL: Inducir al vomito, suministrar a la victima 2 vasos de agua y presionar con los dedos la garganta.
CONTACTO CON LA PIEL: Algunos individuos susceptibles pueden sufrir irritación en la piel. Evitar la exposición prolongada con la piel. Lavar con agua y jabón después de entrar en contacto, Retirar la ropa contaminada. Para el manejo de éste producto se recomienda el uso de cubrepolvos y guantes de hule.
CONTACTO CON LOS OJOS: Lavar inmediatamente con bastante agua por lo menos durante 15 min.
INHALACION: Evitar respirar su polvo; Si el individuo no respira dar respiración artificial con oxígeno. Sacar a la victima a un área bien ventilada.
Buscar atención medica en todos los casos de contacto.

PROTECCION PERSONAL	
PROTECCION RESPIRATORIA: Aire, cubre-polvos ó mascarilla contra gases orgánicos.	
GUANTES: largos de hule latex	PROTECCION PARA OJOS: lentes de seguridad
OTRO EQUIPO DE PROTECCION: Camisa de manga larga.	

PELIGROS DE FUEGO Y EXPLOSION	
PUNTO DE IGNICION: 410°C (copa cerrada)	Es combustible. Mantener lejos de fuentes de ignición
MEDIO DE EXTINCION: Agua Espuma □ Halon CO ₂ Polvo Químico Seco □ Otros	
EQUIPO ESPECIAL DE PROTECCION PARA COMBATE DE INCENDIOS: Equipo de respiración autónomo y equipo completo contra incendios. La concentración de polvo puede formar una nube y constituye un peligro de explosión. Este producto es inflamable y puede tener ignición cuando una flama es aplicada.	
RESULTADOS DE LA COMBUSTION: Se desprende cianuro de hidrogeno a temperaturas mayores de 800°C, también se presentan como resultado de combustión el Monoxido y Dioxido de Carbóno, Amoniac, Formaldehido y NOx.	

PROCEDIMIENTOS PARA FUGAS O DERRAMES
Barrer el area, evitar hacer nubes de polvo. Poner los desechos en contenedor cerrado. Como alternativa se tiene: esparcir encima suficiente bisulfato de sodio, rociar agua y verter a la alcantarilla con abundante agua.

CONSIDERACIONES ADICIONALES
Mantener este producto alejado de fuentes de calor, ignición ó flama abierta. La hexamina es higroscópica por lo que se debe almacenar en un sitio fresco, seco y bien ventilado. El producto tiene una vida de anaquel superior a 12 semanas antes de apelmazarse. Cuando se incorpora agente anti-apelmazante, el producto puede almacenarse por varios meses antes de consumirse.

**ANEXO C-2 PROPIEDADES, TOXICIDAD Y MANEJO DEL
FORMOL Y AMONIACO [37].**

Sustancia	Propiedades	Toxicidad y manejo
Amoniac	Gas incoloro, de olor irritante fácilmente soluble en agua, también en metanol, etanol y cloroformo, Temperatura de ignición 651°C, Límites de inflamabilidad 16-25%, Inflamable	<p>Altamente irritante para la piel, las mucosas y los ojos,</p> <p>En caso de contacto con los ojos, lavarlos con agua y luego humectarlos con aceite de oliva. Lavar áreas contaminadas de la piel con agua y jabón,</p> <p>Debe almacenarse en lugares frescos y bien ventilados, libres de combustibles o fuentes de ignición,</p> <p>Cualquier derrame neutralizarlo con HCl, descargarlo a la alcantarilla con bastante agua</p> <p>Para manejo directo se recomienda el uso de guantes, máscara con filtro y ropa que cubra todo el cuerpo,</p>
Formaldehído	Gas incoloro, de olor desagradable, muy soluble en agua, soluble en etanol y éter, muy reactivo, Punto de ebullición 300 °C, Límites de inflamabilidad: 7-73%, Inflamable	<p>El contacto con los ojos produce quemaduras, lavar con agua,</p> <p>En la piel se genera decoloración y alergia, lavar con agua y jabón,</p> <p>Por inhalación pérdida del olfato, y se desarrollan dolor de cabeza y debilidad, por ingestión se presenta vómito y diarrea,</p> <p>En el almacenaje, procurar separarlo de agentes oxidantes o alcalinos, combustible y fuentes de ignición,</p> <p>Las temperaturas de almacenaje no deben superar 35 °C,</p> <p>En caso de derrame secar con material adsorbente y luego quemarlo,</p> <p>Se recomienda el uso de guantes, máscara con filtro y ropa que proteja todo el cuerpo,</p>

ANEXO D. PROPIEDADES FÍSICAS (MASA REACTIVA Y CORRIENTE DE ENTRADA)

- **Estado inicial de la masa reactiva**

Como el estado de partida es A al 26% y 19 °C los valores de las propiedades de interés son:

- $C_p = 4.174 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)}$, [25, Tabla 3-194]
- $\mu = 1.4 \text{ cP}$, [16, Nomograma página 928]
- $\lambda = 0.452 \text{ J/(m s } ^\circ\text{C)}$, [16, página 197]
- $\rho = 0.908 \text{ g/cm}^3$, [25, Tabla 3-32]

- **Estado final de la masa reactiva**

El estado final, según el balance de materia, es: $w_A = 0.017$, $w_B = 0.0$, $w_C = 0.175$, $w_D = 0.808$; la temperatura se toma como la máxima permisible (23 °C) con el objeto de hacer mas pronunciados los cambios de las propiedades.

- $C_p = w'_D C_{pD'} + (1 - w'_D) C_{pC}$, [16, según recomendación página 197]

En la anterior ecuación w'_D es $(w_A + w_D)$ o sea una solución de amoniaco en agua en las condiciones finales.

$$C_{pD'} = 4.186 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)} ; C_{pC} = 1.09 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)} , \quad [10, \text{ página 1547}]$$

entonces: $C_p = 3.644 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)}$

- $\mu^1 = 2 \mu_{\text{Agua}} = 1.796 \text{ cP}$, [16, según recomendación página 197]
- $\lambda^1 = 0.85 \lambda_{\text{Agua}} = 0.52 \text{ J/(m s } ^\circ\text{C)}$, [16, sugerencia página 906]

- $\rho = \frac{1}{\frac{w'_D}{\rho_D} + \frac{(1-w'_D)}{\rho_C}}$, [25, según recomendación página 3-320]

$$\rho_D = 0.989 \text{ g/cm}^3 ; \rho_C = 1.331 \text{ g/cm}^3 , \quad [38, \text{ Vol. A2 página 17}]$$

entonces: $\rho = 1.036 \text{ g/cm}^3$.

¹ Como w_A es muy baja, aproximadamente 0.017, se opta por usar las propiedades del agua en la estimación de las de la mezcla ya que la acción del amoniaco sobre las propiedades es pequeña; lo anterior se confirmó con el programa de simulación HYSIM.

- **De la corriente de entrada**

- $\rho = 1.11 \text{ g/cm}^3$, [38, Vol. A11 página 634]

Para estimar el calor específico de la solución de formol se utilizó la misma recomendación de [16]; para hallar el C_p del formol, en el estado hipotético líquido en las condiciones de la solución, se siguió el método de Missenard consignado en [28, página 139]:

$C_{pB} = 2.42 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)}$ a $19 \text{ } ^\circ\text{C}$, entonces:

- $C_p = (0.37 * 2.42 + 0.63 * 4.186) \text{ J/(g } ^\circ\text{C)} = 3.53 \text{ J/(g } ^\circ\text{C)}$

ANEXO E. INFORMACIÓN TÉCNICA SOBRE INSTRUMENTACIÓN

Contiene:

Ejemplo de medidores de nivel de punto
Ejemplo de medidores de flujos bajos
Hoja de datos para una válvula de control
Ejemplo de válvula de control para planta piloto