

---

---

**DIVISIÓN DE ESTUDIO DE POSGRADOS E INVESTIGACIÓN**

**OPCIÓN I.- TESIS**

**TRABAJO PROFESIONAL**

**“Evaluación de una estructura de control para compensar errores de modelamiento en un reactor tubular”**

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

**PRESENTA:**

**I.Q. Juan Hernández Espinosa**

**DIRECTOR DE TESIS:**

**Dr. Galo Rafael Urrea García**

**CODIRECTOR DE TESIS:**

**Dra. Guadalupe Luna Solano**

FECHA: 12/12/2018  
DEPENDENCIA: POSGRADO  
ASUNTO: Autorización de Impresión  
OPCIÓN: I

C. JUAN HERNANDEZ ESPINOSA  
CANDIDATO A GRADO DE MAESTRO EN:  
CIENCIAS EN INGENIERIA QUIMICA

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

"EVALUACION DE UNA ESTRUCTURA DE CONTROL PARA COMPENSAR ERRORES DE MODELAMIENTO EN UN REACTOR TUBULAR".

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

A T E N T A M E N T E

  
DR. RUBEN POSADA GOMEZ

JEFE DE LA DIV. DE ESTUDIOS DE POSGRADO

C.A. TITULACIÓN



SECRETARIA DE  
EDUCACIÓN PÚBLICA  
INSTITUTO  
TECNOLÓGICO  
DE ORIZABA

ggc

"Año del Centenario de la Promulgación de la Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos"

FECHA : 06/12/2017

ASUNTO: Revisión de Trabajo Escrito

**C. RUBEN POSADA GOMEZ**  
JEFE DE LA DIVISION DE ESTUDIOS  
DE POSGRADO E INVESTIGACION.  
P R E S E N T E

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

**JUAN HERNANDEZ ESPINOSA**

la cual lleva el título de:

**"EVALUACION DE UNA ESTRUCTURA DE CONTROL PARA COMPENSAR ERRORES DE MODELAMIENTO EN UN REACTOR TUBULAR".**

Y concluyen que se acepta.

A T E N T A M E N T E

PRESIDENTE : DR. GALO RAFAEL URREA GARCIA

  
FIRMA


SECRETARIO : DRA. GUADALUPE LUNA SOLANO

  
FIRMA

VOCAL : DRA. ROSALIA CERECERO ENRIQUEZ

  
FIRMA

VOCAL SUP. : M.C. MARIA ELENA GARCIA REYES

  
FIRMA

EGRESADO(A) DE LA MAESTRIA EN CIENCIAS EN INGENIERIA QUIMICA

OPCION: I Tesis



## ÍNDICE

<b>LISTA DE FIGURAS</b>	<b>III</b>
<b>LISTA DE TABLAS</b>	<b>IV</b>
<b>NOMENCLATURA</b>	<b>V</b>
<b>INTRODUCCION</b>	<b>1</b>
<b>CAPITULO 1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS</b>	
1.1. Reacciones químicas	4
1.1.1. Cinética de reacción	5
1.1.2. Constante de velocidad de reacción	5
1.1.3. Coeficiente de transferencia de calor	5
1.1.4. Catalizador	6
1.1.5. Entalpia de reacción	7
1.1.6. Capacidad calorífica	7
1.1.7. Energía de activación	7
1.2. Reactores químicos	8
1.2.1. Clasificación de reactores químicos	9
1.2.2. Reactor de flujo continuo	9
1.2.2.1. Reactor continuo de tanque agitado (CSTR)	9
1.2.2.2. Reactor tubular	10
1.2.2.3. Reactor de cama empacada	11
1.2.3. Reactor Batch	14
1.3. Modelado de procesos	15
1.4. Modelo de sistemas dinámicos	16
1.4.1. Balance de materia	17
1.4.2. Balance de ener	18
1.5. Controlador	19
1.5.1. Tipos de controladores	19
1.5.2. Historia del control	20
1.5.2.1. Control en procesos químicos	21
1.5.3. Control en reactores tubulare	21
1.5.3.1. Errores de modelamiento en reactores tubulares	25

1.5.3.2.	Modelos de parámetros en reactores tubulares	26
1.5.3.3.	Control por retroalimentación	30
1.5.3.4.	Control en cascada	31
1.6.	Modelo de primer orden más tiempo muerto (POMTM)	33
1.7.	Método de sintonizado	34
1.7.1.	Internal Model Control (IMC)	34
<b>CAPITULO 2 MATERIALES Y MÉTODOS</b>		
2.1.	Materiales	39
2.1.1	Desarrollo del modelo matemático	39
2.1.2.	Parámetros de diseño y operación	41
2.2.	Métodos	43
2.2.1.	Solución del modelo	43
2.2.1.1.	Método de diferencias finitas	43
2.2.2.	Caracterización del proceso	44
2.2.3.	Diseño del controlador	47
2.2.3.1.	Estructura de control convencional	48
2.2.3.2.	Estructura de control propuesta	49
<b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>		62

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura</b>		<b>Página</b>
1.1	Esquema de un reactor continuo de tanque agitados CSTR	10
1.2	Esquema de un reactor tubular con flujo tapón	11
1.3	Esquema de un reactor de cama empacada con operación adiabática	12
1.4	Esquema de un reactor multi tubular de cama empacada	13
1.5	Esquema de un reactor batch	14
1.6	Esquema general de un balance	15
1.7	Esquema de control por retroalimentación	29
1.8	Esquema de una estructura de control en cascada en un reactor tubular	31
1.9	Esquema de control en cascada con dos mediciones de temperatura	31
1.10	Estructura de control IMC: (a) básico, (b) reducida	34
2.1	Esquema cinético para la oxidación de o-xileno	37
2.2	Parámetros del modelo POMTM	44

## LISTA DE TABLAS

<b>Tabla</b>		<b>Página</b>
1.1	Clasificación de las reacciones químicas	4
1.2	Principales procesos en reactores de cama empacada	12
1.3	Ventajas y desventajas del control en cascada	29
2.1	Parámetros del reactor para la oxidación de o-xileno	40
2.2	Parámetros cinéticos para la producción de anhídrido ftálico	40



## NOMENCLATURA

<b>Letra latina</b>		<b>Unidades</b>
$C$	Concentración	$\text{mol/m}^3$
$C_p$	Calor específico	$\text{J/mol K}$
$D$	Coeficiente de difusión de masa	$\text{m}^2/\text{s}$
$E_a$	Energía de activación	$\text{J/mol}$
$\Delta H$	Calor de reacción	$\text{J/mol}$
$k$	Velocidad de reacción	$\text{s}^{-1}$
$L$	Longitud del reactor	$\text{m}$
$R$	Constante universal de los gases	$\text{J/mol K}$
$R_a$	Relación volumen de la chaqueta/área	$\text{m}$
$r$	Radio del reactor	$\text{m}$
$T$	Temperatura	$\text{K}$
$T_j$	Temperatura de la chaqueta	$\text{K}$
$U$	Coeficiente de transferencia de calor	$\text{J/s m}^2 \text{K}$
$v$	Velocidad del fluido	$\text{m/s}$
$z$	Posición axial del reactor adimensional	$\text{m}$
$e$	Error	
$G(s)$	Representación general de una función de transferencia	
IMC	Internal Model Control	
POMTM	Primer orden más tiempo muerto	
SISO	Simple Input – Simple Output (una entrada – una salida)	
$x(s)$	Transformada de Laplace de la función de forzamiento o variable de entrada	
$Y(s)$	Transformada de Laplace de la variable de salida	



## Letra griega

$\rho$	Densidad del fluido	mol/m <sup>3</sup>
$\theta$	Tiempo muerto	s
$\mu$	Actividad del catalizador	
$\Delta$	Incremento	
$\varepsilon$	Porosidad	

## Subíndice

D	Derivativo
f	fluido
i	1,2,3,...,n.
l	Integral
in	Entrada
j	Chaqueta
o	Salida
ref	Referencia
s	Catalizador solido
$T_j, C_o$	Composición-temperatura de la chaqueta
$T_j, T_m$	Temperatura del reactor-temperatura de la chaqueta

## INTRODUCCION

Un reactor químico industrial es un dispositivo complejo en el que la transferencia de calor, transferencia de masa, la difusión y la fricción puede ocurrir junto con la reacción química (Perry, 1999). Un tipo de reactor de uso común en procesos industriales es el reactor tubular, consta de un tubo cilíndrico y normalmente opera en estado estacionario, se emplean con mayor frecuencia para reacciones en fase gas. En el reactor tubular, los reactantes son continuamente consumidos conforme fluyen a lo largo del reactor y no se hace intento alguno para inducir el mezclado del fluido en algún punto del reactor. Como consecuencia, todos los elementos del flujo tienen el mismo tiempo de residencia dentro del reactor (Fogler, 2001).

En la mayoría de los procesos industriales químicos los reactores son elementos fundamentales, es precisamente en ellos, donde se lleva a cabo la transformación de las materias primas a productos de interés comercial. Por lo tanto, el diseño y operación de los reactores químicos es de crucial importancia para el éxito de la operación industrial (González, 2004). Debido a las numerosas aplicaciones industriales de reactores químicos tubulares, el problema de monitoreo y control efectivo es de gran importancia económica y de seguridad operacional (Fogler, 2001). Los procesos son de naturaleza dinámica, por lo cual, el objetivo de un control automático del proceso es mantener bajo control las variables del proceso como lo son: temperatura, presión, flujos y compuestos (Smith y Corripio, 2006).

Tomando en cuenta la no linealidad del proceso y su naturaleza distribuida es común la presencia de cierto tiempo de retardo que afecta la respuesta de salida frente a las perturbaciones de alimentación. Es por ello que se han empleado esquemas de control en cascada, el cual está compuesto de un lazo de control de composición (controlador primario) que proporciona un valor de referencia (set point) para la temperatura en un punto a lo largo del reactor. Este valor de referencia es ajustado en base a la desviación de la composición de salida con la composición de

referencia, ocasionado por alguna perturbación en las condiciones de alimentación, siendo estas la concentración o en la temperatura. El lazo (interno) de control de temperatura debe regular la temperatura en un punto del reactor en base al valor de referencia proporcionado por el controlador primario. Esto es realizado comúnmente manipulando el flujo o la temperatura del medio de enfriamiento o calentamiento, lo cual proporciona una mayor rapidez en la variable de respuesta y por lo tanto un mejor desempeño. El problema de esta estructura de control es la ubicación óptima para la medición de la temperatura, ya que si no se selecciona el mejor punto esta estructura se ve afectada en el desempeño frente a las perturbaciones, donde la desactivación del catalizador puede ocasionar el movimiento del perfil de reacción, por lo tanto, puede variar la localización de medición óptima de temperatura. Para aliviar este problema se han estudiado en trabajos anteriores (Urrea *et al.* 2008; Hernández-Martínez *et al.* 2010) la incorporación de múltiples mediciones de temperatura en este tipo de estructuras de control, donde la entrada de control resulta de una sumatoria de  $N$  entradas de cada controlador multiplicada por un factor de ponderación. Actualmente se busca mejorar los esquemas de control lineal, ya que en la mayoría de ellos no toman en cuenta factores de incertidumbre o errores de modelamiento que afectan directamente a la composición de salida del producto.

En el presente trabajo se evaluarán estrategias de control para compensar errores de modelamiento y factores de incertidumbre que afectan la composición del producto de manera que el desempeño del reactor sea aceptable en presencia de perturbaciones.

# **CAPITULO 1**

## **FUNDAMENTOS TEÓRICOS**

## CAPITULO 1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

### 1.1. Reacciones químicas

Los procesos químicos se diseñan con el objetivo de obtener un producto al menor costo posible y con una alta calidad, para ello las materias primas son sometidas a diferentes procesos de tratamiento físicos con la finalidad de prepararlas para que puedan reaccionar dentro de reactor químico, debido a que en ocasiones la materia prima contiene impurezas que pueden afectar la reacción y provocar reacciones indeseadas o diferentes maneras de desactivación del catalizador como: envenenamiento, ensuciamiento, etc. Una de las etapas importantes en cualquier proceso industrial es el reactor químico bajo las condiciones de diseño óptimas para obtener la mayor cantidad de producto útil al menor costo posible. Para cumplir dicho propósito, el ingeniero químico necesita conocer conceptos básicos, como cinética de reacción, orden de reacción y las ecuaciones de diseño de los reactores (Levenspiel, 2004).

El estudio de las reacciones químicas se desglosa en diversas clasificaciones propuestas acerca de los tipos de reacciones. Izquierdo (2004) proponen la clasificación que se presenta en la Tabla 1.1.

Tabla 1.1. Clasificación de las reacciones químicas.

En función del número de fases		Con base a su ecuación cinética	
Homogéneas	Heterogéneas	Elementales	No elementales
Cuando presentan una sola fase.	Cuando presentan más de una fase.	Corresponde a la ecuación estequiometria	No existe relación entre la ecuación cinética y la estequiometria

Por otra parte. Las reacciones catalizadas y no catalizadas pueden considerarse una subdivisión. Las primeras usan materiales denominados catalizadores que actúan

acelerando la reacción. La mayor parte de las reacciones en fase gaseosa suelen ser reacciones homogéneas no catalizadas, mientras que las de fase líquida suelen ser homogéneas catalizadas.

### **1.1.1. Cinética de reacción**

La cinética química es el estudio de las velocidades de reacción química y los mecanismos de reacción (Fogler, 2001). La velocidad de reacción representa la cantidad y el tiempo en el cual los reactivos son transformados a productos. Se consideran como variables clave, la concentración y temperatura de la mezcla reaccionante. La selección de un Sistema de reacción que opera de forma segura y eficiente puede ser la clave para el éxito o fracaso de una planta química (Levespiel, 2001; Avery, 1982).

### **1.1.2. Constante de velocidad de reacción**

La constante de velocidad de reacción no siempre es considerada como una constante, ya que depende de las condiciones en las que se lleve a cabo la reacción, sin embargo, se sabe que es independiente de las concentraciones de las especies que intervienen en la reacción. También es conocida como velocidad de reacción específica, y casi siempre depende de la temperatura; en reacciones en fase gaseosa depende también del catalizador, de la concentración iónica, disolvente, y podría ser función de la presión total. Generalmente, la presión, el medio y el catalizador tienen menor efecto que la temperatura, por lo que para fines prácticos se considera que  $k$  solo depende de la temperatura, lo cual es válido en la mayor parte de las reacciones de laboratorio e industriales (Fogler, 2001).

### **1.1.3. Coeficiente de transferencia de calor**

La transferencia de calor se representa por la adición o eliminación de calor, generalmente por conducción a través de la pared del reactor. El término “coeficiente de transferencia de calor” es una medida de la resistencia que ofrece dicha pared al

paso de calor. Bondy (1983) y Flecher (1987) recopilaron las distintas ecuaciones y parámetros necesarios para la determinación de dicho coeficiente en recipientes con agitación.

Si el coeficiente de transferencia de calor es constante entre el contenido del reactor y el fluido que circula por la camisa, se obtiene la máxima velocidad de transferencia de calor, sin embargo, pueden producirse cambios significativos en las características de la masa reaccionante durante el transcurso de la reacción. La máxima capacidad de transferencia de calor se da cuando el fluido de la camisa se encuentra a la temperatura a la que está disponible el fluido de enfriamiento. El momento en que esto ocurre es el llamado "punto caliente" (hot spot) de la reacción.

#### **1.1.4. Catalizador**

Un catalizador es una sustancia que afecta la velocidad de una reacción, pero al final del proceso permanece sin cambio. El catalizador generalmente modifica una velocidad de reacción promoviendo una ruta molecular distinta ("mecanismo") para la reacción. El desarrollo y uso de catalizadores es la parte principal de la constante búsqueda de nuevos métodos para aumentar el rendimiento de los productos y la selectividad de las reacciones químicas (Fogler, 2001).

La actividad de los catalizadores disminuye a medida que se utiliza el catalizador. En ocasiones esta disminución es muy rápida, en el orden de segundos y otras es tan lenta que la regeneración o sustitución del catalizador sólo es necesaria después varios meses de utilización. Los catalizadores que se desactivan con el tiempo es necesario regenerarlos o sustituirlos. Si la desactivación es rápida y es causada por una deposición o por un bloqueo físico de la superficie, el proceso suele denominarse ensuciamiento. Un ejemplo común de ensuciamiento es la deposición de carbón en el craqueo catalítico (Levenspiel, 2004).



### 1.1.5. Entalpia de reacción

En las reacciones químicas que ocurren a presión constante, la transferencia de energía en forma de calor es igual al cambio en la entalpia del sistema. A lo cual se le llama cambio de entalpia de reacción en el proceso. Lassak (2010) demostró que una pequeña variación en el parámetro (entalpia de reacción) provoca gran cantidad de incertidumbre que afecta directamente a los resultados de modelos matemáticos.

El cambio de entalpia de reacción puede ser positivo o negativo. Cuando en una reacción química se libera energía, significa que el sistema transfiere energía en forma de calor hacia los alrededores, por lo tanto, el calor es negativo. Esta pérdida de energía en forma de calor a presión constante se traduce en una disminución de la entalpia. Los productos de la reacción tienen menos entalpia que los reactivos. Como la entalpia final es menor que la inicial, el cambio en la entalpia ( $\Delta H = H_{final} - H_{inicial}$ ) es negativo.

### 1.1.6. Capacidad calorífica

La capacidad calorífica es la cantidad de energía que se requiere darle a una sustancia para que eleve la temperatura en una unidad. Si se especifica que se tiene un gramo de sustancia, entonces se tiene la capacidad calorífica específica. Por su parte la capacidad calorífica específica es la cantidad de energía necesaria para que un gramo de sustancia eleve un grado centígrado su temperatura. Lassak (2010) demostró que una variación en la capacidad calorífica afecta directamente el perfil de temperatura a lo largo del reactor tubular por consiguiente afecta la composición de salida del mismo.

### 1.1.7. Energía de activación

Todas las reacciones químicas tienen una barrera energética que separa a los reactivos de los productos. Esta barrera se denomina energía de activación, que es la mínima cantidad de energía que se requiere para iniciar una reacción, es decir, las

moléculas que reaccionarán en un evento químico, deben contener suficiente energía para sobrepasar la energía de activación del estado de transición en su camino para transformarse en los productos. En general, al disminuir la energía de activación, la mayoría de las moléculas tienen energía suficiente para pasar sobre el estado de transición y por tanto aumenta la velocidad de la reacción. Lassak (2010) determino que pequeñas incertidumbres en parámetros clave del modelo, en este caso energía de activación, pueden causar diferentes predicciones del comportamiento de las cantidades de operación tales como temperatura, presión, concentración.

## **1.2. Reactores químicos**

Un reactor químico industrial es un dispositivo complejo, en el que tienen lugar los diferentes fenómenos de transporte (calor, masa y momentum), los cuales se acoplan con las reacciones químicas. Su operación tiene como funciones principales asegurar el tipo de contacto, garantizar condiciones adecuadas de mezclado, asegurar el tiempo suficiente de contacto entre los reactivos y el catalizador si es que lo contiene. Por último, permite las condiciones de presión, temperatura y composición de modo que la reacción tiene lugar y una velocidad deseada, atendiendo a los aspectos termodinámicos y cinéticos de la reacción (Perry, 2010).

En la mayoría de los procesos industriales químicos los reactores son elementos fundamentales, ya que es precisamente en ellos, donde se lleva a cabo la transformación de las materias primas a productos de interés comercial. Por lo tanto, el diseño y operación de los reactores químicos es de crucial importancia para el éxito de la operación industrial (González-Alatorre, *et al.*, 2004).

El reactor químico es la pieza clave de cualquier planta industrial química. La operación del reactor químico repercute en gran medida en la economía de todo el proceso. Un ligero aumento en el rendimiento, puede representar enormes ahorros en costos de inversión y operación en el resto de la planta (Lechuga, 2008). El

ingeniero químico tiene el propósito de garantizar que la operación se lleve de forma segura, procurando obtener la mayor conversión posible en el proceso (Coulson, 1984).

### **1.2.1. Clasificación de reactores químicos**

Los principales reactores en la industria química son el reactor tanque agitado y el reactor tubular. Para algunas reacciones químicas los reactores tubulares son más eficientes que los reactores tanque agitado, especialmente cuando los volúmenes son iguales. Además, el reactor tubular es relativamente fácil de mantener sin partes móviles y usualmente produce más alta conversión por unidad de volumen que cualquier reactor de flujo continuo (Hernandez-Martínez, 2008).

Los reactores químicos se pueden clasificar en continuos o por lotes. La ventaja que ofrecen los reactores por lotes es su flexibilidad, el reactor puede usarse para realizar diferentes reacciones con cambios mínimos. Los reactores continuos a su vez se pueden clasificar en tubulares o de tanque agitado de los cuales se hablará más adelante (Lechuga, 2008).

### **1.2.2. Reactor de flujo continuo**

Trabajan en estado estacionario (las propiedades del reactor son constantes con el tiempo), suponen un flujo ideal de pistón, y la conversión es función de la posición, la composición del fluido varía de un punto a otro a través de la dirección de flujo.

#### **1.2.2.1. Reactor continuo de tanque agitado (CSTR).**

Un tipo de reactor usado comúnmente en los procesos industriales es el reactor CSTR, es utilizado principalmente para reacciones en fase líquida. Es normalmente operado en estado estacionario y se asume que es una mezcla perfecta, consecuentemente, no tiene dependencia con el tiempo o posición, dependen de la temperatura, la concentración y la velocidad de reacción dentro del reactor. Ver

Figura 1.1. La principal ventaja del reactor CSTR es la distribución homogénea de los reactivos y productos, tal que la composición, temperatura y presión sean la misma en todos los puntos en la mezcla y por ende a la salida. Este tipo de reactores, debido a que se utilizan principalmente para reacciones donde su velocidad es relativamente lenta, frecuentemente se operan a temperatura ambiente. Al ser lenta la reacción y estar diluida la alimentación, el efecto del calor de reacción puede ignorarse.

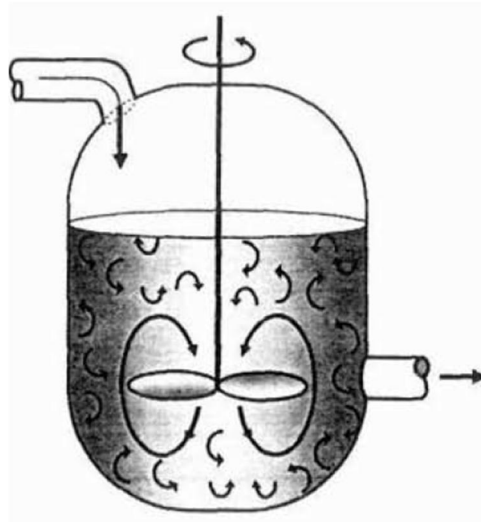


Figura 1.1. Esquema de reactor continuo de tanque agitado (CSTR).

#### 1.2.2.2. Reactor tubular

El reactor tubular se constituye por un cilindro en forma de tubo como se muestra en la Figura 1.2. Tienen una gran variedad de aplicaciones industriales, tales como la petrolera, farmacéutica, tratamiento de desechos y de polímeros. A diferencia del reactor CSTR, en el reactor tubular la concentración y temperatura tienden a variar a lo largo de la posición (Coulson, 1984).

En el reactor tubular, los reactantes son continuamente consumidos conforme fluyen a lo largo del reactor y en el cual no se hace intento alguno para inducir el mezclado del fluido en algún punto del reactor. Para la modelación del reactor, se asume que la concentración varía continuamente en la dirección axial a lo largo del reactor.

Consecuentemente, la velocidad de reacción que es una función de todas las velocidades de reacción también varía axialmente (Fogler, 2001). Dependiendo del diseño propio del reactor, a la entrada se puede distribuir la alimentación a todo el diámetro del reactor. La distribución puede ser tan simple como una expansión con o sin curvatura, hasta distribuidores de tubos múltiples con inyectores o toberas, sin embargo, en la mayoría de los casos esto no es posible (Lechuga, 2008).

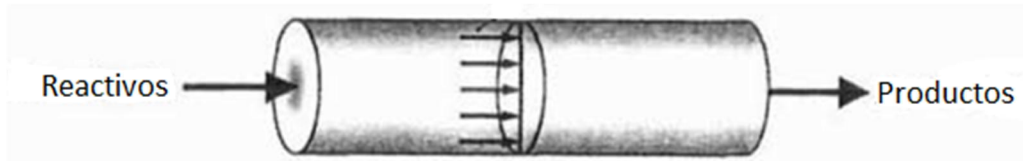


Figura 1.2. Esquema de un reactor tubular con flujo tapón.

Para limitar la complejidad del reactor, se hacen algunas suposiciones:

- a) Las condiciones de reacción son isotérmicas
- b) La densidad de todos los componentes es igual
- c) La mezcla en dirección radial es ideal
- d) No hay mezcla en dirección axial
- e) La velocidad del medio es constante en dirección axial
- f) La dispersión en el reactor puede ser despreciable

Los incisos c, d y f significan que el flujo a través del reactor puede ser considerado como flujo tapón.

### 1.2.2.3. Reactor de cama empacada

La diferencia que existe entre el reactor tubular con reacción homogénea y este tipo de reactor envuelto en una reacción heterogénea fluido-sólido, es que para este tipo de reactor un catalizador sólido es utilizado para llevar a cabo reacciones donde los reactantes son una fase de fluido móvil, comúnmente en fase gaseosa. La reacción toma lugar en la superficie del catalizador, los principales procesos con este tipo de

reactores, se presentan en la Tabla 1.2. Para cuestiones de estudio, en este trabajo se hace referencia al proceso de la industria petroquímica en el que se consideran reactores en los que se produce anhídrido ftálico con una producción de 48,000 Ton anuales (ANIQ, 2017).

Tabla 1.2. Principales procesos en reactores de cama empacada

<b>Industria química básica</b>	<b>Industria petroquímica</b>	<b>Refinación de petróleo</b>
Reformación primaria	Óxido de etileno	Reformación catalítica
Reformación secundaria	Dicloruro de etileno	Isomerización
Conversión de monóxido de carbono	Vinil acetato	Polimerización
Metanación de óxidos de carbono	Butadieno	(Hidro)desulfuración
Síntesis de amoníaco	Anhídrido maléico	Hidrocraqueo
Síntesis de ácido sulfúrico	Anhídrido ftálico	
Síntesis de metanol	Ciclohexano	
	Estireno	

El reactor de cama empacada es el reactor más importante para la síntesis de químicos básicos e intermedios a gran escala. La temperatura de control es uno de los métodos más importantes influenciando las reacciones químicas, los reactores adiabáticos son utilizados únicamente cuando el calor de reacción es pequeño o donde sólo hay un camino de reacción; en este caso no hay efectos adversos en la selectividad o en el rendimiento. La característica de control de reacción adiabática es que el catalizador está presente en forma de una cama fija uniforme siendo recubierta por una chaqueta aislante (Figura 1.3).



Figura 1.3. Esquema de un reactor de cama empacada con operación adiabática

Las reacciones que presentan gran calor de reacción y reacciones que son extremadamente sensibles a la temperatura, son llevados a reactores donde el intercambio de calor indirecto ocurre mediante la circulación de un medio de transferencia de calor integrado en la cama empacada.

El arreglo más común es el reactor multi-tubular de cama empacada, en el que el catalizador se encuentra en cada tubo y donde un medio de intercambio de calor circula a los alrededores de los tubos como se muestra en la Figura 1.4 (Eigenberger, 2007).



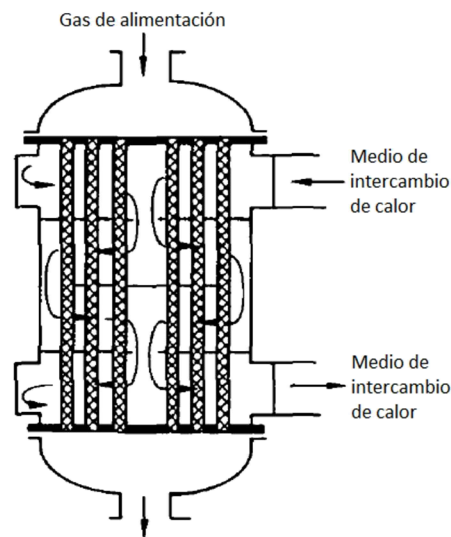


Figura 1.4. Esquema de un reactor multi tubular de cama empacada

### 1.2.3. Reactor Batch

El reactor Batch es un reactor donde no existe flujo de entrada ni de salida, es simplemente un reactor con un agitador que homogeneiza la mezcla. Es esencialmente un tanque en el que se ha permitido que ocurra una reacción. Es usado en operaciones a baja escala, para prueba de nuevos procesos que no han sido completamente desarrollados, para la manufactura de productos caros, y para procesos donde es difícil la conversión de la materia prima a producto en operación continua. El reactor puede ser cargado o relleno a través de huecos en la parte superior del reactor como se muestra en la Figura 1.5. Este reactor tiene la ventaja de altas conversiones que pueden ser obtenidas dejando el reactivo en el reactor por largos periodos de tiempo, pero también tiene la desventaja de un alto costo laboral por cada reactor batch.

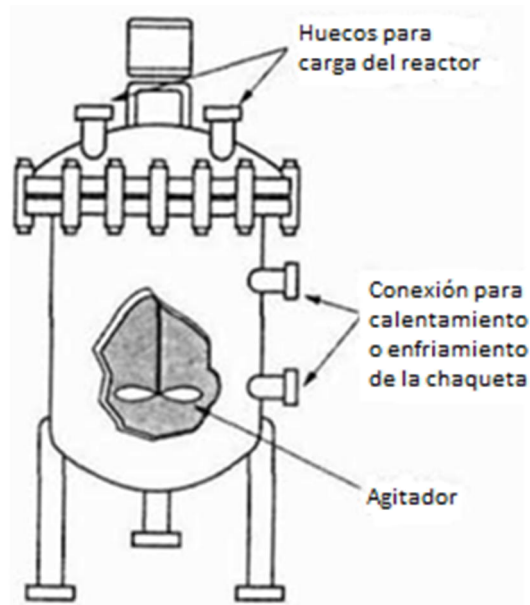


Figura 1.5. Esquema de un reactor Batch

### 1.3. Modelado de procesos

Los modelos de procesos son necesarios siempre que se requiere analizar los sistemas de control. Para realizar un modelo de los procesos industriales generalmente se comienza con el balance de una cantidad que se conserva: masa o energía, como se muestra en la Figura 1.6.

Un modelo se refiere a la variedad de ecuaciones matemáticas que describen el comportamiento de un proceso, la aplicación del modelo en ingeniería puede ser aplicada en el área de investigación y desarrollo, donde los modelos son usados para la interpretación de conocimientos y mediciones; otra aplicación de los modelos es para el diseño de procesos, por lo general se utilizan para el diseño de plantas industriales y piloto, y evaluar cuestiones de seguridad y aspectos económicos.

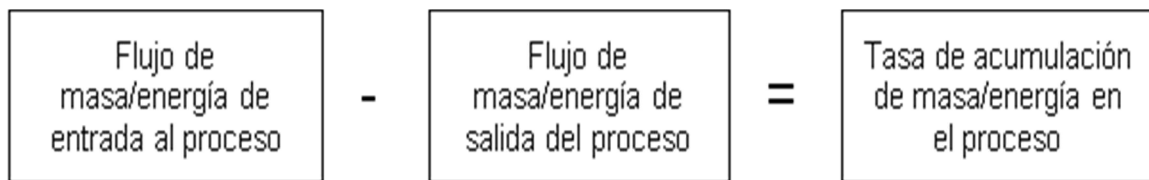


Figura 1.6. Esquema general de un balance.

Una aplicación importante de los modelos es en la optimización de procesos, donde los modelos principalmente deben ser modelos físicos estáticos, aunque para plantas de procesos grandes y pequeños pueden ser modelos dinámicos. En la operación de procesos, los modelos de procesos son usualmente usados para control y predicción, la aplicación de modelos para la predicción es útil cuando es difícil medir cierta calidad de productos, los modelos de los procesos son también utilizados en la aplicación de control de procesos, en base a los modelos se puede obtener el comportamiento dinámico del proceso, y con esto poder diseñar estructuras de control.

#### 1.4. Modelo de sistemas dinámicos

La modelación consiste en formular los efectos dinámicos del sistema considerados dentro de las ecuaciones matemáticas. Las variables de salida del sistema son las variables dependientes que caracterizan y describen la respuesta del sistema. Las variables manipuladas del sistema son las variables independientes ajustables que no dependen del sistema. Las perturbaciones son cambios externos que no pueden ser influenciados, ellos tienen un impacto sobre el comportamiento del sistema.

Para describir un proceso se necesita un conjunto de variables que caractericen el sistema y un conjunto de relaciones que describan como este conjunto de variables interactúan y cambian con el tiempo. Las variables son derivadas de las leyes de conservación (Roffel y Betlem, 2006). El modelo dinámico en reactores tubulares está descrito por ecuaciones diferenciales parciales (PDE) por lo general no lineales. Para el caso unidimensional las ecuaciones diferenciales parciales se pueden

clasificar como del tipo parabólicas cuando el problema es de difusión-reacción o difusión-convección-reacción. Para el caso de convección-reacción las PDE son hiperbólicas.

#### 1.4.1. Balance de materia

Los balances de materia se basan en la ley de conservación de la materia, la cual, rigurosamente hablando, hay que aplicarla al conjunto materia-energía, y no a la materia o energía por separado. La forma del balance a cada uno de los componentes será la misma, excepto cuando existe reacción química, ya que en ese caso habrá que considerar la aparición o desaparición de los componentes individuales por efecto de la reacción (sin embargo, la masa total del sistema nunca variará).

Asumiendo una reacción de primer orden  $A \xrightarrow{k_1} B$ , el término de difusión puede ser descrito mediante una derivada de segundo orden en dirección axial. Por lo tanto:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - v \frac{\partial C_A}{\partial z} - k_1 C_A \quad (1.1)$$

dónde:

$D$	Coeficiente de difusión.
$v$	Velocidad del fluido.
$k_1$	Coeficiente de reacción.
$C_A$	Concentración.
$t$	Tiempo
$z$	Longitud

### 1.4.2. Balance de energía

Los balances de energía son normalmente algo más complejos que los de materia, debido a que la energía puede transformarse de unas formas a otras (mecánica, térmica, química, etc.), lo que obliga a considerar este aspecto en las ecuaciones. En el caso de los reactores químicos, son imprescindibles los balances de energía para su diseño, ya que en cualquier caso habrá que asegurarse de que la temperatura del reactor permanezca dentro del intervalo deseado, especialmente cuando los efectos térmicos de la reacción sean importantes.

Un balance de energía para el fluido, considerando la reacción de primer orden descrito anteriormente, puede ser escrito de la siguiente manera:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = K \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \rho v \frac{\partial T}{\partial z} + \Delta H k_1 C_A - \frac{2h}{R_a} (T_j - T) \quad (1.2)$$

dónde:

$K$	Conductividad térmica.
$\rho$	Densidad del fluido.
$R_A$	Relación volumen de la chaqueta/área.
$C_p$	Calor específico del fluido.
$T_j$	Temperatura de la chaqueta
$T$	Temperatura del fluido.
$\Delta H$	Calor de reacción.
$h$	Coeficiente de transferencia de calor.

## **1.5. Controlador**

Instrumento que compara el valor medido con el valor deseado, en base a esta comparación calcula un error (diferencia entre valor medido y deseado), para actuar a fin de corregir este error. Tiene por objetivo elaborar la señal de control que permita que la variable controlada corresponda a la señal de referencia.

Los controladores son a menudo clasificados por su fuente principal de poder que usan, tales como, electrónica (incluyendo digital), neumática, mecánica o hidráulica. Estos cuatro tipos de controladores tienen velocidades de respuesta que son lo suficientemente rápidas para requerimientos de procesos convencionales, pero en los últimos años los controladores base usados en la mayoría de aplicaciones de control de procesos han sido electrónicos o neumáticos.

El controlador por retroalimentación determina el error entre el set point y la variable medida. La señal de error es entonces usada para producir una señal de control al actuador para operar una válvula y reducir la señal de error. Este tipo de control continuo monitorea la variable medida y tiene tres modos de operación, los cuales son proporcional, integral y derivativo. Los controladores pueden usar una, dos o las tres funciones según se requiera (Reséndiz, 2013).

### **1.5.1. Tipos de controladores**

Los controladores pueden ser de tipo manual, neumático, electrónico; los controladores electrónicos más usados son: computadoras con tarjeta de adquisición de datos, PLC (controladores lógicos programables), microcontroladores (PIC). El tipo de controlador más común es el PLC, el cual es un equipo electrónico basado en microprocesadores, hace uso de memorias programables y regrabables (RAM), donde se almacenan instrucciones a manera de algoritmos que van a permitir seguir una lógica de control.

### 1.5.2. Historia del control

Los esquemas de control fueron desarrollados para mejorar el rendimiento de sistemas poco complejos tales como, la regulación de flujos de relojes de agua, la manipulación de la velocidad de molinos de viento o el control del nivel del líquido de lámparas de aceite (Arantegui, 2011). La producción de los bienes de consumo por medio del uso del control automatizado comenzó a desarrollarse hasta el siglo XVII con la revolución industrial. El primer estudio sistemático del control retroalimentado fue presentado por Maxwell en 1868, se establecieron los primeros criterios de estabilidad (localización de raíces). Más adelante Minorsky (1930), trabajó en controladores automáticos para el guiado de embarcaciones y mostró que la estabilidad puede determinarse a partir de las ecuaciones que describen el sistema. Su trabajo consistió en el reconocimiento de la no linealidad de los sistemas y propuso la linealización mediante el desarrollo de series de Taylor (Smith y Corripio, 2006).

Con el desarrollo de nuevas ideas se fueron asentando fundamentos de la teoría de control automático de la época, dando lugar a modelos matemáticos que representan funciones de transferencia, análisis de estabilidad más complejos y el diseño de controladores simples de una sola entrada-una sola salida (Arantegui, 2011). A partir de 1980 a la fecha, dos técnicas de control han despertado gran interés en la aplicación de sistemas industriales. La primera de ellas es el control predictivo, esta es una metodología de control que trata con dinámicas complejas, interacciones y perturbaciones medibles y es de fácil comprensión para el operario. La segunda técnica es la teoría del control robusto, esta se desarrolló para tomar en cuenta la incertidumbre del modelo, y analizar el efecto sobre la estabilidad y desempeño del sistema de control. Lo cual implica que el controlador debe ser diseñado de modo que las especificaciones de desempeño a lazo cerrado se logren a pesar de condiciones de operación variantes o diferencias entre la planta modelo (Ogata, 2003).



### **1.5.2.1. Control en procesos químicos**

El control ha estado presente en distintas etapas de la humanidad como una herramienta que permite incrementar la eficiencia de muchos procesos necesarios para el avance de la ciencia y tecnología. La automatización en la industria tiene gran importancia en la fabricación de bienes, ha permitido aumentar producciones, mejorar la calidad, reducir costos, cumplir con los requisitos medioambientales, etc. (De Prada, 2004). La instrumentación y el control de procesos están presente en gran variedad de industrias como: alimentaria, farmacéutica, petroquímica, bioquímica, mecánica etc.

En la actualidad la necesidad de controlar de una forma más fácil y efectiva los procesos productivos es cada vez más exigente y las variables de control que más destacan son la temperatura, presión y flujo. El control de procesos ha madurado en los últimos 30 años, y se ha convertido en una de las principales áreas de la ingeniería química. Es decir, cualquier ingeniero químico debe tener conocimientos de diferentes áreas como matemáticas, balances de materia y energía, simulación, física, termodinámica, fenómenos de transporte y entre ellos los fundamentos básicos de la ingeniería de control. Una de las ventajas que trae consigo la ingeniería de control desde una perspectiva de planeación y administración es que involucra maximizar beneficios de operación, garantizar la calidad del producto, incrementar la seguridad, reducir el impacto al medio ambiente y mejorar las condiciones de operación (Fisher, 1991).

### **1.5.3. Control en reactores tubulares**

Actualmente los reactores tubulares son ampliamente utilizados en la industria de procesos químicos. El reactor químico es considerado el corazón de la planta química, teniendo grandes efectos económicos y en la seguridad operacional de los procesos, por lo anterior es que a lo largo del tiempo se han realizado investigaciones que logren optimizar el desempeño de estos mediante la obtención

de perfiles de temperatura, que contienen información adecuada para conocer la ubicación óptima del sensor de temperatura en el proceso a lo largo del reactor tubular. Como se puede notar esta área de optimización de procesos se encuentra fuertemente vinculada con las actividades del control de los procesos, este ámbito se encarga de mantener las variables de control cercanas a un valor deseado.

Por lo mencionado anteriormente, se han llevado a cabo estudios enfocados al control de los reactores tubulares, los cuales han aportado avances al modelamiento matemático en cuanto al comportamiento dinámico, logrando maximizar el desempeño, la operación segura de los reactores y en ciertos casos, la reducción del tiempo de simulación, entre los cuales encontramos los siguientes:

Urrea-García *et al.* (2008) propusieron un esquema de control en cascada para mejorar el rendimiento de control en reactores tubulares. Demostraron que la incorporación de un segundo lazo para regular la temperatura del reactor en una posición interior, mejora el desempeño del controlador haciendo frente a las perturbaciones alimentadas en la composición y temperatura. El esquema contiene un lazo principal que regula la concentración de salida a través de la manipulación de una temperatura de referencia, un lazo secundario mide la temperatura interna del reactor en un punto específico, es comparada con la temperatura otorgada por el lazo principal y se calcula una temperatura de referencia para la camisa. Mostraron que el esquema de control propuesto supera a esquemas de control en cascada con una sola medición de temperatura ya que la medición de temperatura antes del punto caliente reduce los efectos de pérdidas de calor, mientras que la medición de temperatura después del punto caliente mejora la regulación rápida de la composición de salida.

Hernández *et al.* (2008) introdujeron una nueva configuración del esquema de control en cascada basada en el promedio de la medición de tres temperaturas distribuidas a lo largo de la posición axial del reactor tubular ( $W_{av}$ ). Para el promedio de las mediciones de temperatura utilizaron parámetros de ponderación  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ , de los

cuales la suma debe ser la unidad. Observaron que el sistema de control propuesto tiene mejor rendimiento debido a la mayor cantidad de sensores, sin embargo, el problema de la asignación de peso a cada sensor se vuelve más complejo. Demostraron que para dinámicas donde se presenta hot spot es útil colocar el sensor de temperatura cerca de la salía del reactor y para dinámicas con perfil casi-lineal es conveniente colocar el sensor cerca de la entrada del reactor.

Hernández-Martínez *et al.* (2010) diseñaron un esquema de control en cascada basado en una temperatura ponderada a partir de la media de tres mediciones de temperatura distribuida a lo largo del reactor tubular, demostraron que la configuración con la temperatura promedio mejora el comportamiento del esquema de control en cascada clásico realzando el rechazo de perturbaciones. Determinaron que una parte importante en el diseño propuesto de control en cascada es la selección del peso a los parámetros  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ , las pruebas numéricas mostraron mejor rendimiento cuando los parámetros son distribuidos para el centro y salida del reactor.

García *et al.* (2010) estudiaron la estructura jerárquica de control de un reactor de amoniaco formado por un reactor tubular con tres camas de catalizador. El propósito de este control es mejorar el desempeño del reactor aumentando el rango de operación de los controladores, y maximizar la producción de amoniaco.

Loncar *et al.* (2010) presentaron un modelo matemático de las dinámicas de un proceso en un reactor tubular basado en suposiciones de flujo de fluido unidimensional. Mediante simulaciones se muestra que el modelo proporciona una forma realista del proceso. Introdujeron algoritmos de optimización permitiendo rápidos ajustes de los parámetros del modelo del sistema de control, contribuyendo a la calidad y eficiencia del control del proceso.

Reséndiz–Camacho *et al.* (2012a) presentaron una estructura de control en cascada basada en dos mediciones de temperatura para regular la concentración de salida en

un reactor tubular, en el que se lleva a cabo una reacción exotérmica de primer orden. Propusieron un esquema que consta de un lazo primario para regular la concentración a la salida del reactor y un lazo secundario, encargado de regular la temperatura en dos puntos de medición diferentes a lo largo del reactor, la señal del lazo secundario es una combinación de las mediciones en cada punto multiplicadas por un factor de ponderación. Realizaron ajustes simples basados en la desviación de la temperatura en cada punto de control a lo largo del reactor de tal manera que el factor de peso de cada señal sea proporcional a la desviación de la temperatura en cada punto de control.

Jesús *et al.* (2013) propusieron seis esquemas de control en cascada concentración – temperatura con cuatro mediciones de temperatura en la región del punto caliente para el control de un reactor tubular de lecho fijo para la producción de anhídrido ftálico mediante la reacción fuertemente exotérmica de oxidación de o-xileno. Obtuvieron resultados de las simulaciones para los seis esquemas de control en cascada propuestos mostrando el buen desempeño del esquema que considera la concentración deseada de anhídrido ftálico en la salida del reactor y el valor medio de las cuatro mediciones de temperatura (esquema en cascada 5).

Vernieres *et al.* (2015) estudiaron un observador construido para sistemas de parámetros distribuidos descritos por representación no lineal. El observador fue aplicado a un reactor químico tubular para estimar la temperatura máxima de la mezcla reaccionante y su posición en régimen estacionario y transitorio. Probaron la convergencia y la robustez de este estimador experimentalmente con errores de inicialización y modelización. La convergencia rápida del observador fue obtenida a pesar de los errores de inicialización en las temperaturas y concentraciones.

Ramírez - Castelán *et al.* (2016) estudiaron el problema de la ubicación del sensor de temperatura en un reactor tubular para la configuración de control en cascada utilizando el análisis fractal de la serie de tiempo obtenida por azar. Utilizaron de referencia un modelo de dispersión axial con diferentes perfiles de temperatura. Los

resultados numéricos mostraron que el sensor de temperatura para un sistema de control en cascada composición-temperatura debe ser colocado adelante del punto caliente ya que mejora las capacidades de rechazo a perturbaciones.

#### **1.5.3.1. Errores de modelamiento en reactores tubulares**

En la industria los sistemas de control van más allá de las tareas básicas de monitoreo y regulación, estos son utilizados para mantener los procesos dentro del rango de operación, con seguridad operacional, calidad y optimización de la productividad del proceso. Esta investigación está enfocada al estudio de control de un reactor tubular mediante simulación dinámica, se busca que el sistema de control compense perturbaciones que se reflejan en la composición de salida del reactor, como parte de dichas perturbaciones pueden mencionarse las siguientes: desactivación del catalizador, errores de modelamiento y factores de incertidumbre.

En la mayoría de las investigaciones se busca que los modelos sean simples o sencillos, por lo cual se descartan factores como la desactivación de los catalizadores, variación en los coeficientes de transferencia de calor y masa o simplemente se toman como constantes al igual que los parámetros cinéticos. Muchas veces son simplificaciones o errores que no se toman en cuenta en los modelos a simular, por lo cual se tienen algunos trabajos que son considerados de mayor interés para llevar a cabo esta investigación.

Reséndiz–Camacho *et al.* (2012b) presentaron una estructura de control variable en cascada para controlar la composición de salida del reactor. Como caso de estudio consideraron la reacción de oxidación parcial del benceno en la producción de anhídrido maleico. Utilizaron el factor de peso  $\alpha_j$  el cual se ajusta mediante la desviación de la temperatura de referencia con la temperatura medida en cierto punto, dicho factor es proporcional a la desviación de la temperatura. Observaron que ningún control convencional presento el mejor desempeño para las secuencias de perturbaciones, en cambio, la estructura de control propuesta se aproximó al

mejor desempeño en todas las secuencias de perturbaciones en la alimentación del reactor.

Urrea-García *et al.* (2015) exploraron la aplicación de una estructura de control en cascada variable para reactores tubulares, a partir de múltiples mediciones de temperatura. La estructura propuesta permite que el controlador pueda adaptarse a las variaciones de error de temperatura lo largo del reactor tubular. Diseñaron N número de controladores convencionales para obtener diferentes valores de la temperatura de flujo de refrigerante ( $T_j$ ) por lo cual propusieron un promedio de las mediciones de temperatura, en la estructura de promedio cada medición de temperatura es afectada por un factor de ponderación. Asignaron el factor de ponderación basándose en una señal de error relativo de los sensores de temperatura integrados en una estructura de múltiples lazos de control. Propusieron una función de normalización para ajustar el factor de ponderación a cada punto de acuerdo al valor absoluto de la señal de error de temperatura. Consideraron dos casos de estudio, primer caso, reacción exotérmica irreversible con cinética de primero orden, segundo caso, tres reacciones exotérmicas en fase gas para la producción de anhídrido maleico mediante la oxidación parcial del benceno.

La estructura propuesta está dotada de parámetros dinámicos por lo tanto es capaz de incorporar en el lazo de retroalimentación información sobre la propagación de la perturbación y cambios en los parámetros distribuidos, por ejemplo, efecto de los cambios en la actividad del catalizador o cambios en los coeficientes de transferencia de calor. Demostraron que la asignación de un factor de ponderación mayor a la ubicación del sensor con el error más grande mejora el rendimiento de una estructura de control en cascada con múltiples mediciones de temperatura.

### **1.5.3.2. Modelos de parámetros en reactores tubulares**

Diversos estudios de control en cascada en reactores tubulares mediante simulación, han analizado las perturbaciones presentes en la alimentación de los reactivos o en

el medio de enfriamiento. Desafortunadamente no se han analizado otras perturbaciones que influyen directamente en la composición del producto como los factores de incertidumbre entre los cuales podemos encontrar la desactivación del catalizador o variación en los coeficientes de transferencia de calor y masa pues se toman en cuenta como constantes ya que muchas veces se busca que los modelos sean simples o sencillos.

Es de gran importancia profundizar en el estudio del control en los reactores tubulares químicos para así lograr cumplir con las condiciones de diseño, seguridad en la operación y lograr satisfacer la demanda de calidad de los productos que cada vez es más exigente. Este trabajo se enfocará en llevar a cabo una implementación de una estructura de control en cascada que trabaje bajo ciertos factores de incertidumbre o errores de modelamiento que surgen como resultado de simplificaciones en los modelos, es decir que hay factores que no están incluidos en los modelos. Por lo cual se tienen algunos trabajos que mencionan la importancia de los diferentes parámetros cinéticos que constituyen un modelo matemático los cuales son de suma importancia para esta investigación.

Budman (2008) estudiaron el control de vibración, es una técnica a lazo abierto, por lo que no se necesita medir una variable con el propósito de retroalimentación. El control de vibración puede proteger al reactor contra perturbaciones aleatorias puesto que el controlador de vibración mantendrá el sistema dentro de los límites de la región de multiplicidad reducida.

Lassak (2010) analizaron la influencia de las incertidumbres en los parámetros del modelo en la predicción de las magnitudes operativas por modelos matemáticos con comportamiento no lineal. El primer análisis de la influencia de la incertidumbre en los parámetros del modelo se realizó con la entalpia de reacción ( $\Delta H_R$ ). Utilizaron variación relativa de 4%, 5%. Se analizó la energía de activación ( $E_1$ ), observaron que si la variación relativa de  $E_1 = 1\%$ , se obtienen resultados similares cuando  $(\Delta H_R) = 5\%$ . Notaron que el modelo es más sensible a  $E_1$  que  $(\Delta H_R)$ . Los parámetros

---

energía de activación ( $E_2$ ), capacidad calorífica específica ( $C_p$ ) y el factor pre exponencial ( $K^\infty$ ), también fueron analizados. Observaron que la variación relativa de  $E_2 = 2\%$ ,  $C_p = 4\%$  y  $K^\infty = 9\%$ , se obtiene resultados similares a  $E_1$  y  $\Delta H_R$ . de estos resultados se deduce que el modelo es más sensible a las incertidumbres  $E_1$  y  $C_p$  que a  $\Delta H_R$  y es menos sensible a la incertidumbre en  $K^\infty$ .

Determinaron que pequeñas incertidumbres en parámetros clave del modelo, en este caso  $E_1$ , pueden causar diferentes predicciones del comportamiento de las cantidades de operación tales como temperatura, presión, concentración. Concluyeron que para predecir un correcto comportamiento del reactor de lecho fijo se necesitan valores precisos principalmente de  $E_1$  y  $E_2$ , por que se ha demostrado que una variación relativa de 2% puede causar diferentes predicciones en el comportamiento de las cantidades de operación, como la temperatura en el interior del reactor.

Fernández (2012) realizaron una comparación entre dos modelos de desactivación de catalizador, modelos basados en el tiempo y modelos de coque sobre el catalizador. Utilizaron un modelo dinámico matemático de FCC previamente presentado y validado. Desarrollaron modelos para describir la cinética de craqueo de materias primas. Sin embargo, debido a la presencia de un gran número de especies, tanto en la alimentación y en los productos hace que sea imposible el desarrollo de una expresión cinética exacta para describir el proceso. Por otra parte, la rápida desactivación del catalizador hace difícil estudiar y determinar las velocidades de reacción y la desactivación del catalizador. La desactivación del catalizador a corto plazo se describe matemáticamente multiplicando las tasas cinéticas por los coeficientes de actividad del catalizador  $\Phi$ .

Chao (2015) diseñaron un reactor de pirolisis de flujo de chorro y simularon numéricamente la dinámica de fluidos (presión y velocidad) dentro del reactor utilizando un método computacional de dinámica de fluidos. Utilizaron el modelo de turbulencia k- $\epsilon$  para simular los campos de presión y velocidad en el reactor de



pirolisis de chorro. Determinaron que, para utilizar plenamente el calor generado por la combustión durante la pirolisis del cloruro de tierras raras, se debe imponer una cierta cantidad de presión  $p = v$  en la entrada de alimentación, para mantener la velocidad de alimentación por unidad de tiempo.

Thiagalingam (2015) estudiaron una nueva expresión exacta y no local para el número de pared Nusselt para tener una visión profunda de los mecanismos físicos que rigen la transferencia de calor de la pared. Demostraron que la desviación media del flujo y la dispersión mecánica juegan un papel clave en la transferencia de calor de la pared. La mayoría de los modelos en uso son deterministas y pseudo-homogéneos. El modelo clásico es el modelo de coeficientes  $\lambda_r - h_w$ , para el cual la transferencia de calor radial entera se agrupa en la conductividad térmica efectiva en masa constante  $\lambda_r -$  y el coeficiente de transferencia de calor de pared aparente  $-h_w$ . Uno de los métodos frecuentemente utilizados para determinar  $\lambda_r - h_w$  consiste en fijar el perfil de temperatura sobre los datos experimentales. Por lo tanto, los dos parámetros se estiman por método de mínimos cuadrados. En este trabajo se investigan los mecanismos físicos que contribuyen a la transferencia de calor de la pared en reactores tubulares de bajo diámetro de tubo.

Hui (2016) desarrollaron un modelo de dinámica de fluido computacional tridimensional del proceso de gasificación por supercrítico (GCSG) del glicerol. Detallaron el campo de flujo, el campo de temperatura y las distribuciones de especies químicas en el interior del reactor. Compararon cuatro modelos de turbulencia (estándar k-  $\epsilon$ , realizable k-  $\epsilon$ , RNG k-  $\epsilon$  y Launder-Sharma) que podrían describir con precisión el proceso SCWG comparando resultados numéricos con datos experimentales obtenidos en SKLMFPE. Observaron que los resultados obtenidos por el modelo RNG k-  $\epsilon$  mejoraron y que la temperatura de salida aumentó linealmente con la temperatura de la pared del reactor.

### 1.5.3.3. Control por retroalimentación

Un control por retroalimentación convencional es la manera más fácil de automatizar un proceso. En la Figura 1.7 se muestra un control por retroalimentación, el sensor o dispositivo de medición está instalado físicamente en el proceso para medir valores actuales de la variable controlada. Estos valores actuales son transmitidos al hardware del control por retroalimentación, y este hardware hace una comparación automática entre el punto de ajuste (set point) de la variable controlada y el valor actual de esta misma variable. Basado en el error entre el valor actual y el valor deseado de la variable controlada, el hardware de control por retroalimentación calcula la señal que refleje el valor necesario de la variable manipulada. Estos son transmitidos automáticamente para ajustar el elemento final de control que manipule las entradas al proceso.

El control por retroalimentación presenta una serie de ventajas y desventajas las cuales se presentan en la Tabla 1.3.

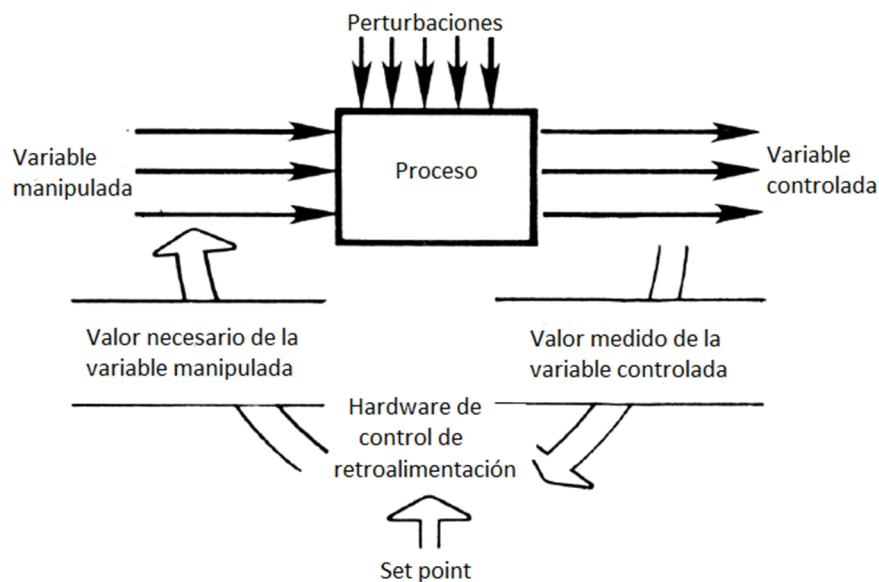


Figura 1.7. Esquema de control por retroalimentación.

Tabla 1.3. Ventajas y desventajas del control en cascada.

Ventajas	Desventajas
<ul style="list-style-type: none"> <li>• No es necesario tener conocimiento a priori de la dinámica del proceso.</li> <li>• Se produce acción correctora ante cualquier perturbación que afecte a la variable controlada.</li> <li>• El control PID es un sistema muy robusto.</li> <li>• Para que aparezcan inestabilidades han de producirse cambios importantes en la dinámica del proceso.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• El comportamiento no suele ser aceptable en procesos con grandes retardos puros.</li> <li>• El controlador no puede adelantarse a ninguna de las perturbaciones aun que estas puedan ser conocidas y medidas.</li> <li>• Es imposible evitar el error inicial en la variable controlada.</li> <li>• Sólo se produce corrección cuando la variable controlada se ha desviado de su punto de consigna.</li> </ul>

Por todos los puntos antes mencionados se tienen una serie de técnicas de control avanzado que mejoran el comportamiento del control básico. Entre las técnicas de control avanzado se encuentran las siguientes:

- Feedforward (por adelanto).
- En cascada.
- De relación.
- Selectivo.
- Por restricciones.
- Inferencial.

#### 1.5.3.4. Control en cascada

Debido a la falta de dispositivos de medición en línea, la medición de la concentración presenta retardos, con el propósito de evitar esta desventaja se han propuesto configuraciones de controladores que adopten mediciones en línea

disponibles, tal como la temperatura. A estas configuraciones se les conoce como esquemas de control en cascada composición-temperatura (Hua y Jutan, 2000). El control en cascada es una técnica de control muy común. Su objetivo principal es eliminar los efectos de las perturbaciones haciendo que el controlador alcance la referencia deseada evitando romper con la estabilidad del mismo.

Este tipo de controlador está compuesto por dos entradas virtuales de control (Urrea, 2008). La entrada principal describe el lazo primario (lazo maestro), donde éste es manejado por la medición de una variable a la salida del sistema ( $y_{ref}$ ) y calcula los requerimientos de una segunda variable ( $w$ ). La siguiente entrada de control describe el lazo secundario (lazo esclavo), que manipula la salida de una variable, con la información obtenida del lazo maestro, llevando al punto de referencia la variable calculada en el lazo primario y en el lazo secundario. Este enfoque, es ampliamente usado en la industria de procesos y es particularmente muy útil cuando las perturbaciones están asociadas con la variable manipulada o cuando el elemento final de control exhibe un comportamiento no lineal (Dale et al., 2004). En la Figura 1.8 se puede observar una estructura de control en cascada convencional implementada en un reactor tubular.

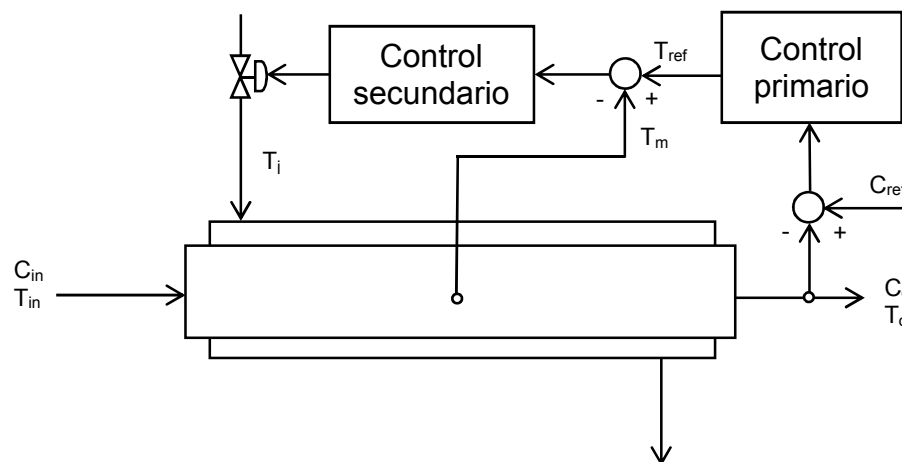


Figura 1.8. Esquema de una estructura de control en cascada en un reactor tubular.

Urrea *et al.* (2008) y Hernandez *et al.* (2010) demostraron que agregando dos mediciones de temperaturas más en el esquema de control en cascada clásico se logra mejorar el comportamiento del control incrementando la capacidad de rechazo a perturbaciones del componente secundario de control, como se muestra en la Fig. 1.9. Desarrollaron la configuración del controlador en el cual se aprovecha la información proporcionada por los dos sensores de temperatura adicionales localizados cerca de la posición de alimentación y salida del reactor tubular. El sensor de temperatura localizado cerca de la entrada del reactor proporciona al esquema una rápida detección de las perturbaciones en la alimentación. El sensor de temperatura cerca de la salida contiene información de las condiciones de concentración y temperatura en la corriente de salida del reactor.

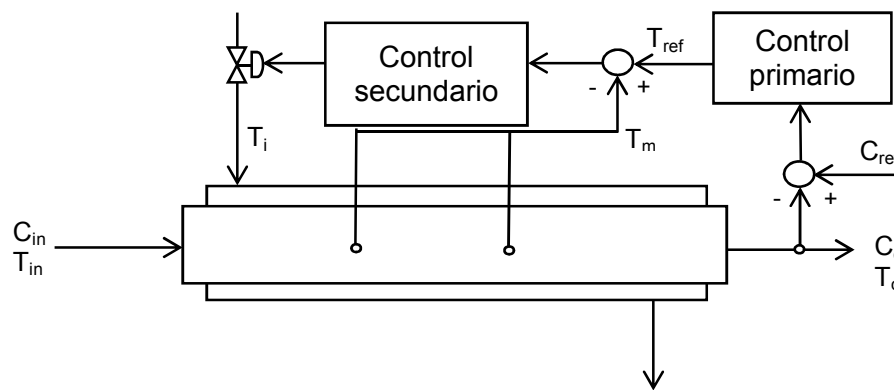


Figura 1.9. Esquema de control en cascada con dos mediciones de temperatura.

### 1.6. Modelo de primer orden más tiempo muerto (POMTM)

El modelo POMTM (ecuación 1.3) es base para la mayoría de las fórmulas de ajuste de controladores. En este modelo el proceso se caracteriza mediante tres parámetros: la ganancia  $K$ , el tiempo muerto  $\theta$  y la constante de tiempo  $\tau$ .

$$G(s) = \frac{K e^{-\theta s}}{\tau s + 1} \quad (1.3)$$

De modo que el problema consiste en la manera en que se pueden determinar dichos parámetros para un circuito particular, la solución consiste en realizar algunas

pruebas dinámicas en el sistema real o la simulación del circuito en un programa; la prueba más simple que se puede realizar es la de escalón.

### **1.7. Método de sintonizado**

La operación satisfactoria de un lazo de control realimentado requiere de una adecuada sintonización del controlador, procedimiento para el cual es necesario determinar primeramente el tipo de controlador que se empleará, cuál será el funcionamiento requerido del sistema, servomecanismo o regulador, y cual criterio se empleará para medir su desempeño.

El controlador más empleado en la industria es el PID (Proporcional-Integral-Derivativo), el cual en muchos de los casos opera simplemente como un controlador PI debido a las dificultades encontradas normalmente en la utilización del modo derivativo en aplicaciones donde las señales pueden contener ruido de medición (Arrieta, 2003).

El sintonizado de los procesos químicos puede realizarse mediante una función de transferencia de primer orden más tiempo muerto, este tipo de modelo representa la dinámica de varios procesos que resulta útil para el diseño de un controlador por retroalimentación. Hay una regla de sintonizado (Skogestad, 2003) para un modelo de primer orden y segundo orden más tiempo muerto, la cual consta de dos pasos:

- Obtener un modelo de primer orden o de segundo orden más tiempo muerto.
- Derivar el modelo basado en los ajustes del controlador. El ajuste de un controlador PI resulta de un modelo de primer orden, mientras que el ajuste de un control PID es obtenido mediante un modelo de segundo orden.

#### **1.7.1. Internal Model Control (IMC)**

El enfoque del IMC tiene la ventaja que permite incertidumbres en el modelo y compensación entre el desempeño y robustez. La idea básica del control del modelo

interno, IMC es el uso de la función de transferencia de un modelo del proceso a lazo abierto  $G_{M(s)}$  de tal manera que el rendimiento especificado de la respuesta a lazo cerrado sea físicamente realizable en un controlador por retroalimentación.

La Figura 1.10 muestra una estructura del IMC. El modelo del proceso  $\tilde{G}_{M(s)}$  se ejecuta en paralelo con el proceso real. La salida del modelo  $\tilde{x}$  es sustraído de la salida real del proceso  $x$  y esa señal es retroalimentada dentro del controlador  $C_{(s)}$ . Esa señal es, en un sentido, el efecto de la cantidad de perturbaciones a la salida (debido a que se sustrajo el efecto de la variable manipulada). Esa señal es  $x_L$ , la función de transferencia proviene de la salida del proceso, la cual es igual a  $G_{L(s)}L_{(s)}$ . De estudios anteriores se conoce el control por retroalimentación, que si se realiza un cambio en la variable manipulada  $M_{(s)}$  mediante la relación:

$$M_{(s)} = \left( \frac{-G_L}{G_M} \right)_{(s)} L_{(s)} \quad (1.4)$$

Se podrá tener un control perfecto de la salida  $x(s)$ . Esto indica que, si se puede ajustar el controlador,

$$C_{(s)} = \frac{1}{G_{M(s)}} \quad (1.5)$$

se puede obtener un control perfecto ante las perturbaciones.

Además, el uso de  $C_{(s)}$  proporciona un control perfecto ante las perturbaciones en el valor de referencia, la función de transferencia total entre el valor de referencia  $x^{set}$  y  $x$  es simplemente la unidad.

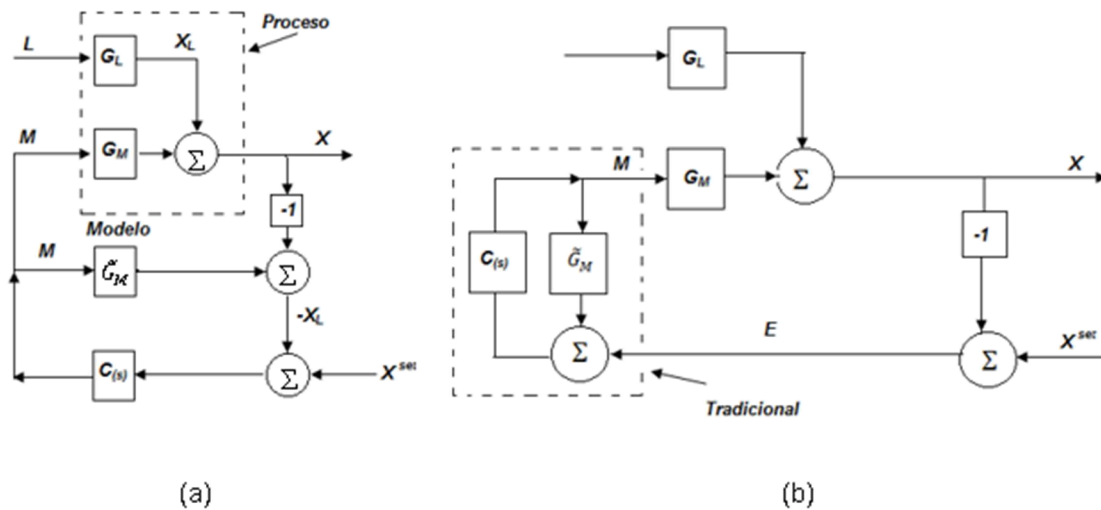


Figura 1.10. Estructura de control IMC: (a) básica, (b) reducida.

Hay dos problemas prácticos con la elección ideal del controlador por retroalimentación  $C_{(s)}$ . Primeramente, se asume que el modelo es perfecto. También se asume que el modelo inverso de la planta  $G_{M(s)}$  es físicamente realizable. Esto casi nunca es verdad ya que muchas plantas contienen tiempo muerto y/o polinomios en el numerador que son de más bajo orden que el polinomio del denominador (Luyben, 1990).

Desde la perspectiva del IMC simplemente se divide la función de transferencia del controlador  $C_{(s)}$  en dos partes. La primera parte es la inversa de  $G_{M(s)}$ . La segunda parte, es llamada “filtro”, el cual es elegido para hacer  $C_{(s)}$  físicamente realizable. La segunda parte se apaga para ser una función de transferencia servo a lazo cerrado ( $S_{(s)}$ ), la cual se muestra a continuación. Se asume que  $G_{M(s)} = \tilde{G}_{M(s)}$ .

$$x = G_L L + G_M M = x_L + G_M C_{(s)} (x^{set} - x_L) \quad (1.23)$$

$$x = [G_M C_{(s)}] x^{set} + [1 - G_M C_{(s)}] x_L \quad (1.24)$$

Si la función de transferencia del controlador  $C(s)$  es seleccionada como:



$$C_{(s)} = \frac{1}{G_{M(s)}} S_{(s)} \quad (1.25)$$

Entonces, la ecuación anterior quedará como:

$$x_{(s)} = [S_{(s)}]x_{(s)}^{set} + [1 - S_{(s)}]G_{L(s)}L_{(s)} \quad (1.26)$$

Así que la función de transferencia servo a lazo cerrado  $S_{(s)}$  debe elegirse como  $C_{(s)}$ , la cual es físicamente realizable.

La estructura del IMC es una manera alternativa de ver el diseño de controladores. La sintonización del controlador  $C_{(s)}$  se reduce a una selección razonable de la función de transferencia servo a lazo cerrado.

El diagrama de bloques reducido de la estructura del IMC (Figura 1.10b) muestra que hay una relación precisa entre el controlador tradicional por retroalimentación y el controlador  $C_{(s)}$  usado en el IMC:

$$\frac{M_{(s)}}{E_{(s)}} = B_{(s)} = \frac{C_{(s)}}{1 - C_{(s)}\tilde{G}_{M(s)}} \quad (1.27)$$

El signo negativo en el denominador proviene de la retroalimentación positiva en el lazo interno del controlador.

Los controladores basados en modelos dependen fuertemente de la validación del modelo. Si se tiene un modelo pobre o los parámetros de la planta cambian, el desempeño de los controladores basados en el modelo es seriamente afectado, es menos robusto que los controladores PI convencionales. Esta falta de robustez puede ser un problema en los lazos de una entrada-una salida (SISO) (Reséndiz, 2013).

## **CAPITULO 2**

### **MATERIALES Y MÉTODOS**

## CAPITULO 2 MATERIALES Y MÉTODOS

### 2.1. Materiales

En este capítulo se hará una detallada descripción de los esquemas de control en cascada implementados, de igual manera se realizará una descripción del modelo matemático que describe el comportamiento dinámico del caso estudiado seleccionado de reactor tubular, mediante la solución de los modelos se puede conocer el perfil de concentración y temperatura a lo largo del reactor, facilitar el control de las variables y mantener un buen desempeño del reactor. Así mismo se comentan las reglas de sintonizado utilizados.

Se aplicarán cambios en escalón a diferentes parámetros cinéticos que afectan el comportamiento del perfil de temperatura y en consecuencia la composición de salida del reactor tubular, los parámetros se seleccionaran de acuerdo a las referencias bibliográficas.

#### 2.1.1 Desarrollo del modelo matemático

Se considera un modelo pseudo homogéneo de un reactor tubular con una chaqueta de enfriamiento, que describe el proceso para producir anhídrido ftálico mediante la oxidación del o-xileno, donde se asume que la difusión axial de reactantes y la pérdida de calor del reactor son despreciables. Las cinéticas de reacción son denotadas como pseudo primer orden. En este reactor se llevan a cabo tres reacciones mostradas en la Figura 2.1 donde se observa que existen reacciones en paralelo y consecutivas.

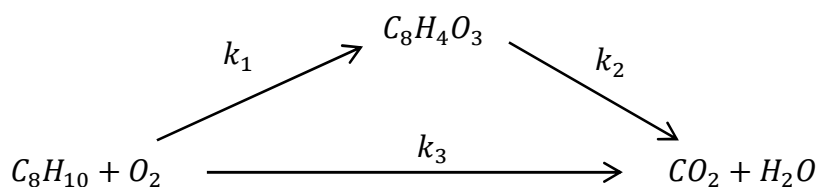


Figura 2.1. Esquema cinético para la oxidación de o-xileno.

Para el análisis del modelo de reactor tubular se tiene que dependiendo de los parámetros usados el perfil de temperatura puede exhibir un punto caliente o perfil cuasi-lineal. El hot spot o punto caliente se da cuando existe una elevación de la temperatura debido al desprendimiento de energía dentro del reactor. Para la descripción dinámica de los compuestos y la temperatura se tienen los siguientes balances:

Balances de materia.

$$\varepsilon \frac{\partial C_A}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A}{\partial z} + \mu(1 - \varepsilon)(-R_1 - R_3) \quad (2.1)$$

$$\varepsilon \frac{\partial C_B}{\partial t} = -v \frac{\partial C_B}{\partial z} + \mu(1 - \varepsilon)(R_1 - R_2) \quad (2.2)$$

Balance de energía.

$$L_e \frac{\partial T}{\partial t} = -v \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\mu(1 - \varepsilon)}{\rho_f C_{p_f}} \sum_{i=1}^3 (-\Delta H_i) R_i + \frac{2UL}{r_0 C_{p_f}} (T_w - T) \quad (2.3)$$

donde:

$$R_1 = k_1 C_A e^{\left(-\frac{E_1}{RT}\right)} \quad (2.4)$$

$$R_2 = k_2 C_B e^{\left(-\frac{E_2}{RT}\right)} \quad (2.5)$$

$$R_3 = k_3 C_A e^{\left(-\frac{E_3}{RT}\right)} \quad (2.6)$$

$$L_e = \frac{(1 - \varepsilon)\rho_s C_{p_s} + \varepsilon\rho_f C_{p_f}}{\rho_f C_{p_c}} \quad (2.7)$$

Con las siguientes condiciones iniciales:

$$C_A = 0.181 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \quad (2.8)$$

$$C_B = 0 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3} \quad (2.9)$$

$$T = 628 \text{ K} \quad (2.10)$$

donde:

$L$	Longitud del reactor.
$\varepsilon$	Porosidad.
$\rho_f$	Densidad del fluido.
$\rho_s$	Densidad del catalizador.
$Cp_f$	Capacidad calorífica del fluido.
$Cp_c$	Capacidad calorífica del medio de enfriamiento.
$Cp_s$	Capacidad calorífica del catalizador.
$r_0$	Radio del reactor.
$U$	Coefficiente de transferencia de calor general.
$\mu$	Actividad del catalizador.
$R$	Constante universal de los gases.
$V$	Velocidad del fluido.

### 2.1.2. Parámetros de diseño y operación

Para el caso de estudio seleccionado (Wu W. y Chen C., 2007; Rutzler W., 1986; Wu W. y Huan M., 2003) consideraron un reactor tubular cubierto por una chaqueta de enfriamiento donde se lleva a cabo una reacción exotérmica en el que se produce anhídrido ftálico a partir de la oxidación del o-xileno, considerando un modelo pseudo homogéneo de un reactor tubular donde la difusión axial, la pérdida de calor del reactor y la capacidad de la pared son despreciables. Para la solución de este caso

se consideraron los parámetros de diseño y operación del reactor dado en la Tabla 2.1.

Tabla 2.1. Parámetros del reactor para la oxidación de o-xileno.

Parámetros	Valor (unidades)
Longitud del reactor, $L$	4 (m)
Porosidad, $\varepsilon$	0.35 (adimensional)
Densidad del fluido, $\rho_f$	0.582 (Kg m <sup>-3</sup> )
Densidad del catalizador, $\rho_s$	836 (Kg m <sup>-3</sup> )
Capacidad calorífica del fluido, $C_{p_f}$	1045 (J Kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
Capacidad calorífica del medio de enfriamiento, $C_{p_c}$	483.559 (J Kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
Capacidad calorífica del catalizador, $C_{p_s}$	836 (J Kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
Radio del reactor, $r_0$	0.0125 (m)
Coefficiente de transferencia de calor general, $U$	96.02 (J Kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )
Actividad del catalizador, $\mu$	1 (adimensional)
Constante universal de los gases, $R$	8.314 (J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
Velocidad del fluido, $v$	2.06 (m s <sup>-1</sup> )

Las cinéticas de reacción son consideradas como pseudo primer orden, los parámetros cinéticos de las reacciones presentes en el reactor se muestran en la Tabla 2.2. Se presentan valores para las tres reacciones que se llevan a cabo en proceso, remarcando que la reacción deseada es la numero uno.

Tabla 2.2. Parámetros cinéticos para la producción de anhídrido ftálico.

Parámetros	Reacción	Valor (unidades)
Calor de reacción, $\Delta H$	1	-1.285 x 10 <sup>6</sup> (J kmol <sup>-1</sup> )
	2	-3.276 x 10 <sup>6</sup> (J kmol <sup>-1</sup> )
	3	-4.561 x 10 <sup>6</sup> (J kmol <sup>-1</sup> )
Energía de activación, $E$	1	1.129 x 10 <sup>5</sup> (J mol <sup>-1</sup> )
	2	1.313 x 10 <sup>5</sup> (J mol <sup>-1</sup> )
	3	1.196 x 10 <sup>5</sup> (J mol <sup>-1</sup> )
Velocidad de reacción, $k$	1	2.418 x 10 <sup>9</sup> (s <sup>-1</sup> )

2	$2.706 \times 10^9 \text{ (s}^{-1}\text{)}$
3	$1.013 \times 10^9 \text{ (s}^{-1}\text{)}$

## 2.2. Métodos

En esta parte del capítulo se presenta de manera detallada el método a utilizar para la solución de los balances de materia y energía con el objetivo de obtener un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales.

### 2.2.1. Solución del modelo

Para la solución de las ecuaciones diferenciales parciales se utilizó un método de aproximación numérica, el método empleado es de diferencias finitas, en el cual se discretizan las variables de posición, de manera que cada ecuación diferencial parcial se convierte en varias ecuaciones diferenciales ordinarias. Una vez que se obtiene el conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias se procede a utilizar el método de Runge-Kutta 4/5 orden.

#### 2.2.1.1. Método de diferencias finitas

El método de diferencias finitas, es un método de aproximación numérica para utilizado en ecuaciones diferenciales parciales, en el cual se discretizan las variables de posición, de manera que cada ecuación diferencial parcial se convierte en varias ecuaciones diferenciales ordinarias.

El primer paso consta en dividir la longitud del reactor,  $L$ , en  $N$  incrementos de longitud  $\Delta z$ ,

$$\Delta z = \frac{L}{N} \quad (2.11)$$

Se tienen tres opciones para hacer la aproximación de la diferencia finita de la derivada en un punto  $j$  a lo largo del reactor:

Diferencia hacia adelante:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta z} \quad (2.12)$$

Diferencia hacia atrás:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta z} \quad (2.13)$$

Diferencia central:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{x_{j+1} - x_{j-1}}{2\Delta z} \quad (2.14)$$

Se utilizó el método de diferencias finitas central, ya que es la más exacta en términos de error de truncamiento de la expansión de la serie de Taylor, aplicándolas a las ecuaciones diferenciales parciales de los balances de materia y energía.

Para el caso en que se tiene una ecuación diferencial parcial de segundo orden, la aproximación mediante el método de diferencias finitas central, es:

$$\frac{\partial^2 x}{\partial z^2} = \frac{x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1}}{\Delta z^2} \quad (2.15)$$

Ya que se han discretizado las ecuaciones diferenciales parciales y se obtuvieron un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias, se programa en el lenguaje de programación Fortran, el siguiente paso es la integración de este conjunto de ecuaciones mediante el método de Runge-Kutta 4/5 orden.

### 2.2.2. Caracterización del proceso

Para la caracterización del proceso se realizó un cambio escalón en el sistema y se evaluaron las respuestas de la composición y las temperaturas en los puntos de medición seleccionados, cerca de la entrada y salida del reactor, y antes y después



del punto caliente, los cuales se aproximaron como un modelo de primer orden más tiempo muerto (POMTM) representada en la siguiente ecuación,

$$G(s) = \frac{K e^{-\theta s}}{\tau_1 + 1} \quad (2.16)$$

el cual es caracterizado mediante tres parámetros:

$K$	ganancia
$\theta$	tiempo muerto
$\tau$	constante de tiempo

Para determinar dichos parámetros se realizó una prueba escalón en la variable manipulada (temperatura de la chaqueta,  $T_j$ ) encontrándose el sistema a lazo abierto. Se registra mediante una gráfica la respuesta de la señal de salida del transmisor  $c(t)$  contra el tiempo, la cual debe cubrir el período completo de la prueba (Smith y Corripio, 1991).

La ecuación para un cambio escalón de magnitud  $\Delta m$  y un modelo POMTM es la siguiente:

$$C(s) = \frac{K e^{-\theta s}}{\tau_1 + 1} \cdot \frac{\Delta m}{s} \quad (2.17)$$

Donde la ganancia del proceso ( $K$ ) se calcula mediante la siguiente expresión:

$$K = \frac{\Delta C_s}{\Delta m} \quad (2.18)$$

Los valores de  $\theta$  y  $\tau$  se seleccionan de tal manera que la respuesta del modelo y la respuesta real coincidan en la región de alta tasa de cambio. Los dos puntos que se recomiendan son en los tiempos  $(\theta + 1 / 3 \tau)$  y  $(\theta + \tau)$ , y para localizar dichos puntos se utilizan las siguientes ecuaciones:

$$\Delta c(\theta + \tau) = K\Delta m[1 - e^{-1}] = 0.632\Delta c_s \quad (2.19)$$

$$\Delta c\left(\theta + \frac{1}{3}\tau\right) = K\Delta m[1 - e^{-1/3}] = 0.283\Delta c_s \quad (2.20)$$

Estos dos puntos, se localizan en la Figura 2.2 en los tiempos  $t_1$  y  $t_2$ , respectivamente.

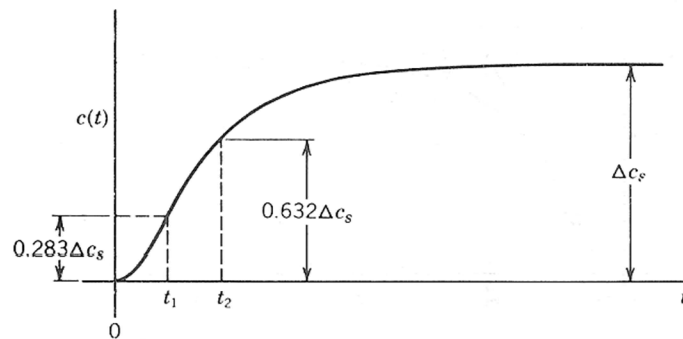


Figura 2.2. Parámetros del modelo POMTM.

Los valores de  $\theta$  y  $\tau$  se obtienen mediante la resolución del siguiente sistema de ecuaciones:

$$\tau = \frac{3}{2}(t_2 - t_1) \quad (2.21)$$

$$\theta = t_2 - \tau \quad (2.22)$$

Dónde:

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

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

### 2.2.3. Diseño del controlador

Para el diseño de los controladores se emplea el procedimiento de sintonizado de control PI/PID basado en el método IMC (internal model control) (Skogestad, 2003) se realiza mediante los siguientes pasos:

1. Obtener el modelo aproximado de primer orden más tiempo muerto, de la forma:

$$G(s) = \frac{K e^{-\theta s}}{(\tau_1 s + 1)} \quad (2.23)$$

2. Derivar los ajustes del controlador con base en el modelo.

Para el caso de compensación PI, se especifica una respuesta deseada de primer orden de la forma:

$$\frac{y_m(s)}{y_{ref}(s)} = \frac{1}{\tau_c s + 1} \exp(-\theta s) \quad (2.24)$$

Lo cual conduce al controlador:

$$C(s) = \frac{\tau_1}{K(\tau_c + \theta)} \left[ 1 + \frac{1}{\tau_1 s} \right] \quad (2.25)$$

Este es un controlador PI con la ganancia y el tiempo integral dados por:

$$K_c = \frac{\tau_1}{K(\tau_c + \theta)} \quad y \quad \tau_I = \tau_1 \quad (2.26)$$

Para obtener una respuesta rápida con buena robustez, se recomienda elegir la constante de tiempo a lazo cerrado  $\tau_c = 0$ . Para procesos con retardo dominante con  $\tau_1/\theta \gg 1$ , se recomienda el tiempo integral modificado  $\tau_I = 4(\tau_c + \theta)$ . La regla de sintonizado SIMC resultante es:

$$K_c = \frac{1}{K} \frac{\tau_I}{2\theta} \quad \tau_I = \min\{\tau_I, 8\theta\} \quad (2.27)$$

donde

$y_m$  temperatura medida en el reactor

$y_{ref}$  temperatura de referencia

$\tau_c$  constante de tiempo

$K_c$  ganancia del controlador

$\theta$  tiempo muerto

$\tau_I$  constante del tiempo integral

### 2.2.3.1. Estructura de control convencional

Una estructura de control en cascada convencional composición-temperatura está compuesta por un lazo de control primario (composición), el cual es manipulado mediante la medición de la composición a la salida del reactor, proporcionando la temperatura requerida en cierto punto a lo largo del reactor; y por un lazo secundario (temperatura) que manipula la temperatura de un medio de enfriamiento en la chaqueta del reactor.

Para el diseño se considera un modelo POMTM para la composición de salida ( $c$ ) y mediciones de temperatura ( $T_m$ ) en un punto a lo largo del reactor, calculado de un cambio escalón en la temperatura de la chaqueta ( $T_j$ ).

$$\frac{c(s)}{T_j(s)} = G_{T_j, c_o}(s) = \frac{K_{T_j, c}}{\tau_{T_j, c} s + 1} e^{-\theta_{T_j, c_o} s} \quad (2.28)$$

$$\frac{T_m(s)}{T_j(s)} = G_{T_j, T_m}(s) = \frac{K_{T_j, T_m}}{\tau_{T_j, T_m} s + 1} \quad (2.29)$$

donde  $T_m$  es la temperatura medida en un punto a lo largo del reactor,  $\theta_{T_j,C}$  es el tiempo muerto debido a las mediciones y el transporte interno.  $K_{T_j,C_o}$  y  $K_{T_j,T_m}$  son las ganancias del proceso en estado estacionario de la temperatura de la chaqueta a la composición y de la temperatura de la chaqueta a la temperatura en el reactor.  $\tau_{T_j,C_o}$  y  $\tau_{T_j,T_m}$  son las constantes de tiempo del proceso.

Para el lazo primario, la función de transferencia que describe la relación entre la composición de salida y la temperatura en un punto a lo largo del reactor puede ser descrito mediante el cociente de la ecuación (2.28) y (2.29), por lo tanto:

$$\frac{G_{T_j,C_o}(s)}{G_{T_j,T_m}(s)} = G_{T_m,C_o}(s) = K_{T_m,C} \frac{\tau_{T_j,T_m}s + 1}{\tau_{T_j,C_o}s + 1} e^{-\theta_{T_j,C_o}s} \quad (2.30)$$

donde  $K_{T_m,C_o} = K_{T_j,C_o}/K_{T_j,T_m}$ . Para condiciones cerca del estado estacionario se puede considerar  $(\tau_{T_j,T_m}s + 1)/(\tau_{T_j,C_o}s + 1) \approx 1$ , por lo tanto, la dinámica del retardo domina la dinámica global. Entonces:

$$G_{T_m,C}(s) = K_{T_m,C_o} e^{-\theta_{T_j,C_o}s} \quad (2.31)$$

El objetivo del lazo secundario es manipular la temperatura de la chaqueta ( $T_j$ ) para ajustar la temperatura medida a la dinámica de temperatura requerida por el lazo primario, y de esta manera lograr la regulación de la concentración de salida del reactor. El diseño del lazo secundario es basado en la ecuación (2.29). Un controlador proporcional (P) es suficiente para lograr cubrir con las necesidades de control.

### 2.2.3.2. Estructura de control variable

La estructura de control variable a utilizar está basada en varios controladores en cascada donde cada uno consta de un lazo primario para regular la concentración a la salida del reactor y de un lazo secundario, el cual se encarga de regular la

temperatura en un punto a lo largo del reactor. La señal de entrada ( $u$ ) en el controlador propuesto resulta de una combinación de cada entrada de control convencional ( $u_i$ ) multiplicada por un factor de ponderación ( $\alpha_i$ ).

$$u = \sum_{i=1}^N u_i \alpha_i \quad (2.32)$$

donde los parámetros de  $\alpha_i \in [0,1]$ , son parámetros a ser ajustados y que deben cumplir la siguiente restricción:

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i = 1 \quad (2.33)$$

El factor de ponderación se ajusta de forma dinámica con base en la desviación de temperatura en cada punto de control a lo largo del reactor de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\alpha_i = \frac{|\varepsilon_i|}{\sum_{i=1}^N |\varepsilon_i|} \quad (2.34)$$

donde  $|\varepsilon_i| = |T_{ref,i} - T_i|$  es el valor absoluto del error de regulación de la temperatura en el punto  $i$ , en el que  $T_{ref,i}$  es la temperatura de referencia en el punto  $i$  y  $T_i$  es la temperatura medida en el punto  $i$ .

#### 2.2.4. Comparación de las estructuras de control

El desempeño de la estructura de control variable en cascada utilizada es comparado con el desempeño de estructuras de control es cascada convencional. Para realizar esta comparación se diseñaron tres estructuras de control en cascada convencionales, de las cuales cada una tiene la medición de temperatura en un sólo punto a lo largo del reactor, los puntos de medición fueron cerca de la entrada del reactor, antes del punto caliente y después de este, y cercano a la salida del reactor.

La comparación de desempeño de cada estructura de control se realizó en cuanto a la concentración de salida del reactor ante una serie de variaciones en parámetros que son conocidos como errores de modelamiento ya que surgen como simplificaciones de los modelos matemáticos, otros parámetros a los cuales se les aplico variaciones son aquellos que provocan incertidumbre en los procesos como los coeficientes de transferencia de calor y masa. Estas variaciones se combinaron con perturbaciones en la temperatura y concentración de alimentación siendo las mismas para cada estructura de control convencional y para la propuesta.

### 2.2.5. Calculo de la Integral absoluta del error

A fin de caracterizar el proceso se utilizan parámetros de modelos de primer orden más tiempo muerto (POMTM), la especificación de respuesta, en un lazo cerrado es un error o desviación mínima de la variable controlada, respecto al punto de control. Debido a que el error está en función del tiempo que dura la respuesta, la suma del error en cada instante se debe minimizar; dicha suma es, por definición, la integral del error en tiempo y se representa mediante el área sombreada en la Figura 2.3. Puesto que la integral del error se trata de minimizar mediante la utilización de las relaciones de ajuste, estas se conocen como ajuste del error de integración mínimo; sin embargo, la integral de error no se puede minimizar de manera directa, ya que un error negativo muy grande se volvería mínimo. Para evitar los valores negativos en la función de desempeño, se toma en cuenta el siguiente planteamiento de la integral:

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

$$IAE = \int_0^{\infty} |e(t)| dt \quad (2.35)$$

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

$$ISE = \int_0^{\infty} e^2(t) dt \quad (2.36)$$

Las integrales se extienden desde el momento en que ocurre la perturbación o cambio en el punto de control ( $t=0$ ), hasta un tiempo posterior muy largo ( $t=\infty$ ), debido a que no se puede fijar de antemano la duración de las respuestas. El único problema con la definición de la integral, es que se vuelve indeterminada cuando no se fuerza el error a cero lo cual ocurre únicamente cuando no hay acción de integración en el controlador, debido a la desviación o el error de estado estacionario; en este caso, en la definición se reemplaza el error por la diferencia entre la variable controlada y su valor final de estado estacionario.

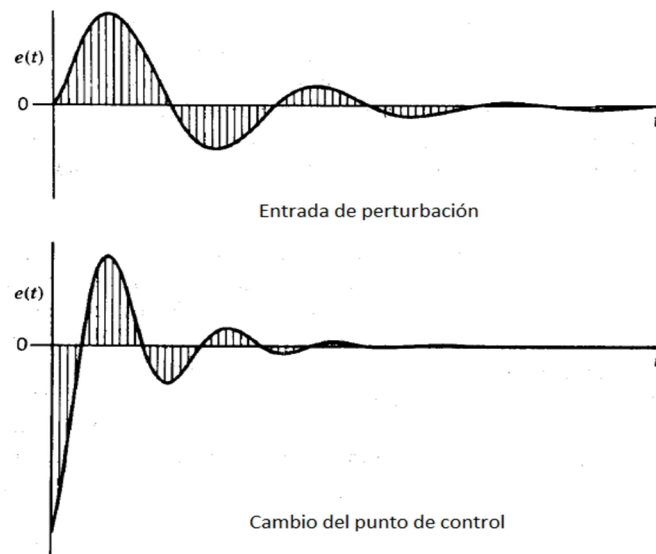


Figura 2.3. Definición de las integrales de error para cambios en la perturbación y al punto de control

La diferencia entre el criterio IAE y el ISE, consiste en que con el ISE se tiene más ponderación para errores grandes, los cuales se presentan generalmente al inicio de la respuesta, y menor ponderación para errores pequeños, los cuales ocurren hacia el final de la respuesta. Para tratar de reducir el error inicial, el criterio ISE mínima da por resultado una alta ganancia del controlador y respuestas muy oscilatorias (una razón de asentamiento alta), en las cuales el error oscila alrededor del cero por un tiempo relativamente largo. De este fenómeno se deduce que en tal criterio de



desempeño debe existir una compensación para el tiempo que transcurre desde el inicio de la respuesta.

Uno de los criterios mencionados será usado dependiendo en las características del sistema que se planea controlar y algunos requerimientos adicionales que se imponen en la respuesta del controlador del proceso.

Si se desea suprimir fuertemente errores grandes, el criterio ISE es mejor que el IAE, debido a que el error es elevado al cuadrado y por lo tanto contribuye más al valor de la integral.

Para la supresión de errores pequeños, el criterio IAE es mejor que el ISE, porque cuando el error es pequeño y es elevado al cuadrado, el error tiende a ser incluso más pequeño.

#### **2.2.6. Selección del punto de medición de temperatura**

Van den Berg *et al.*, (2000) demostró que en los reactores tubulares que exhiben perfiles de temperatura con punto caliente, la medición de la temperatura puede ser realizada cerca de este, ya que esta área es la más sensible. Urrea *et al.*, (2008) propuso una estructura de control en cascada temperatura-composición, donde emplea dos puntos de medición de temperatura ubicados antes y después del punto caliente.

Mientras que Hernandez-Martinez *et al.*, (2010) propuso una estructura de control en cascada con tres mediciones de temperatura a lo largo del reactor, donde dos mediciones de temperatura se ubican a la entrada y la salida del reactor. Donde el sensor de temperatura cercano a la entrada del reactor proporciona a la estructura una rápida detección de las perturbaciones, y el sensor ubicado cerca de la salida del reactor proporciona las condiciones de concentración y temperatura a la salida del reactor.

Tomando en cuenta estos trabajos se tuvieron los siguientes criterios para la selección de los puntos de medición de temperatura:

- Un sensor de temperatura debe estar cercano a la entrada del reactor.
- Otro sensor de debe ubicar cerca de la salida del reactor.
- Se debe tener un sensor localizado cercano al punto caliente, siendo antes y después este.

## **CAPITULO 3**

## **RESULTADOS**

---

## CAPITULO 3 RESULTADOS Y DISCUSIONES

En este capítulo se presentan los resultados de las simulaciones numéricas realizadas para el caso de estudio mencionado en el capítulo anterior, se muestra la caracterización del comportamiento dinámico del proceso mediante un cambio escalón en la variable manipulada (temperatura de la chaqueta  $T_j$ ), también se analiza la comparación del desempeño mostrado por la estructura de control variable en cascada utilizada para este trabajo frente a varias estructuras de control convencionales, en presencia de variaciones en parámetros que surgen como simplificaciones de los modelos matemáticos llamados errores de modelamiento, también, se representaran variaciones en parámetros que provocan incertidumbre en los procesos y varias secuencias de perturbaciones en la temperatura y composición de alimentación para todas las estructuras de control.

### 3.1. Caso de estudio seleccionado

Con el propósito de estudiar la compensación de errores de modelamiento y factores de incertidumbre que afectan el proceso de producción de anhídrido ftálico en una simulación, se implementa una estructura de control variable en cascada en un reactor tubular en el que se lleva a cabo la reacción de oxidación de o-xileno para producir anhídrido ftálico, teniendo como principal objetivo mantener la composición de salida en un valor de  $0.121 \text{ Kmol/m}^3$ .

#### 3.1.1. Selección de puntos de medición de temperatura

Los puntos de medición de temperatura se seleccionaron de acuerdo a los estudios de Urrea *et al.*, (2008) y Hernandez-Martinez *et al.*, (2010), en el primer estudio se analizó la implementación de dos mediciones de temperatura a una estructura de control en cascada, localizadas antes y después del punto caliente. En el segundo estudio propusieron la implementación de dos mediciones de temperatura a una estructura de control convencional, en donde las mediciones de temperatura se

ubicaban cerca de la entrada y la salida del reactor y una tercera medición a la mitad del reactor.

Se resolvieron los modelos que describen el comportamiento dinámico en el reactor tubular del caso de estudio seleccionado, obteniendo los perfiles de concentración de o-xileno y de anhídrido ftálico y perfil de temperatura del reactor, los cuales se presentan en la Figura 3.1.

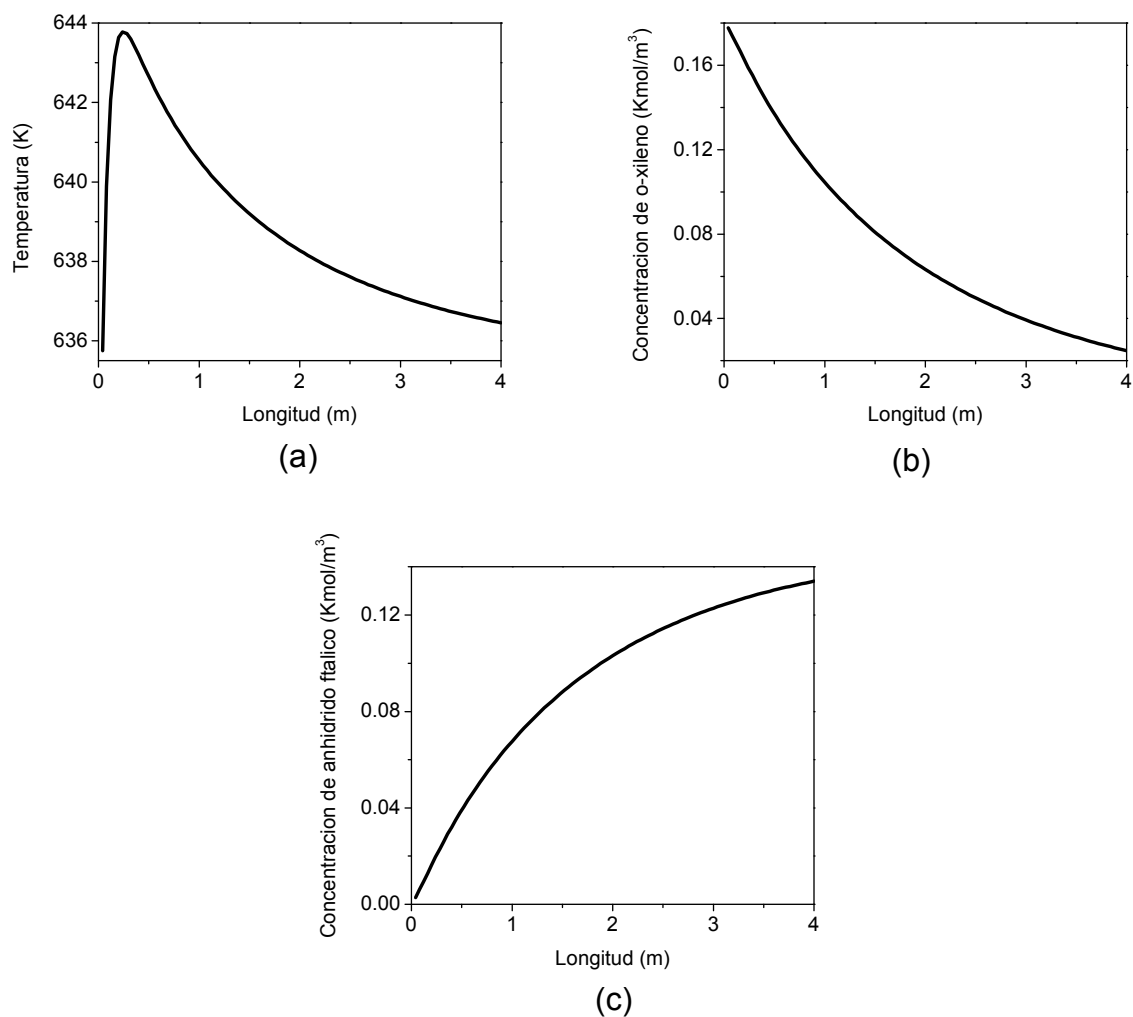


Figura 3.1. Perfil (a) de temperatura; perfil de concentración (b) de o-xileno y (c) de anhídrido ftálico

---

En la Figura 3.1a que representa el perfil de temperatura del reactor, se observa un máximo de temperatura a una longitud de 0.4 m, equivalente a una longitud adimensional de 0.1, por lo tanto, se selecciona un punto de medición de temperatura a 0.2 m (0.05 adimensional), los puntos 0.50 y 0.95 están ubicados después del punto caliente y cercano a la salida del reactor, respectivamente. En la Figura 3.1b, se puede observar el consumo del reactivo (o-xileno) y en la Figura 3.1c la formación del producto (anhídrido ftálico) a lo largo del reactor.

### 3.1.1. Caracterización del comportamiento dinámico

De acuerdo a los criterios de selección de puntos de medición de temperatura a lo largo del reactor tubular, un punto de control se debe localizar antes del punto caliente y otro cercano a la entrada, debido a la localización del punto caliente muy cercano a la entrada de la alimentación estos dos criterios se cubrirán con la medición en el punto 0.05 adimensional y los otros puntos seleccionados son: 0.50 y 0.95 adimensional, después del punto caliente y cerca de la salida del reactor, respectivamente. Se aproximó la respuesta de las temperaturas de los puntos de control seleccionados y la composición a la salida del reactor como un modelo de primer orden. Se realizó un cambio escalón en la temperatura de la chaqueta de +20% encontrándose el sistema a lazo abierto. La respuesta de la concentración ante este cambio en la variable manipulada se puede observar en la Figura 3.2a, y las respuestas dinámicas de la temperatura en los puntos seleccionados se muestran en las Figuras 3.2b-d.

El cambio escalón realizado a la temperatura de la chaqueta fue con el propósito de diseñar los controladores de los lazos primarios y secundarios para cada estructura de control en cascada en cada punto de medición de temperatura seleccionado, esto se realiza mediante la obtención de los parámetros que caracterizan el proceso, los cuales son: ganancia ( $K$ ), constante de tiempo ( $\tau$ ) y tiempo muerto ( $\theta$ ) de acuerdo a las ecuaciones 2.18, 2.21 y 2.22 mencionadas en el capítulo anterior,

respectivamente. Al obtener estos parámetros se procede a diseñar los controladores de la estructura de control en cascada.

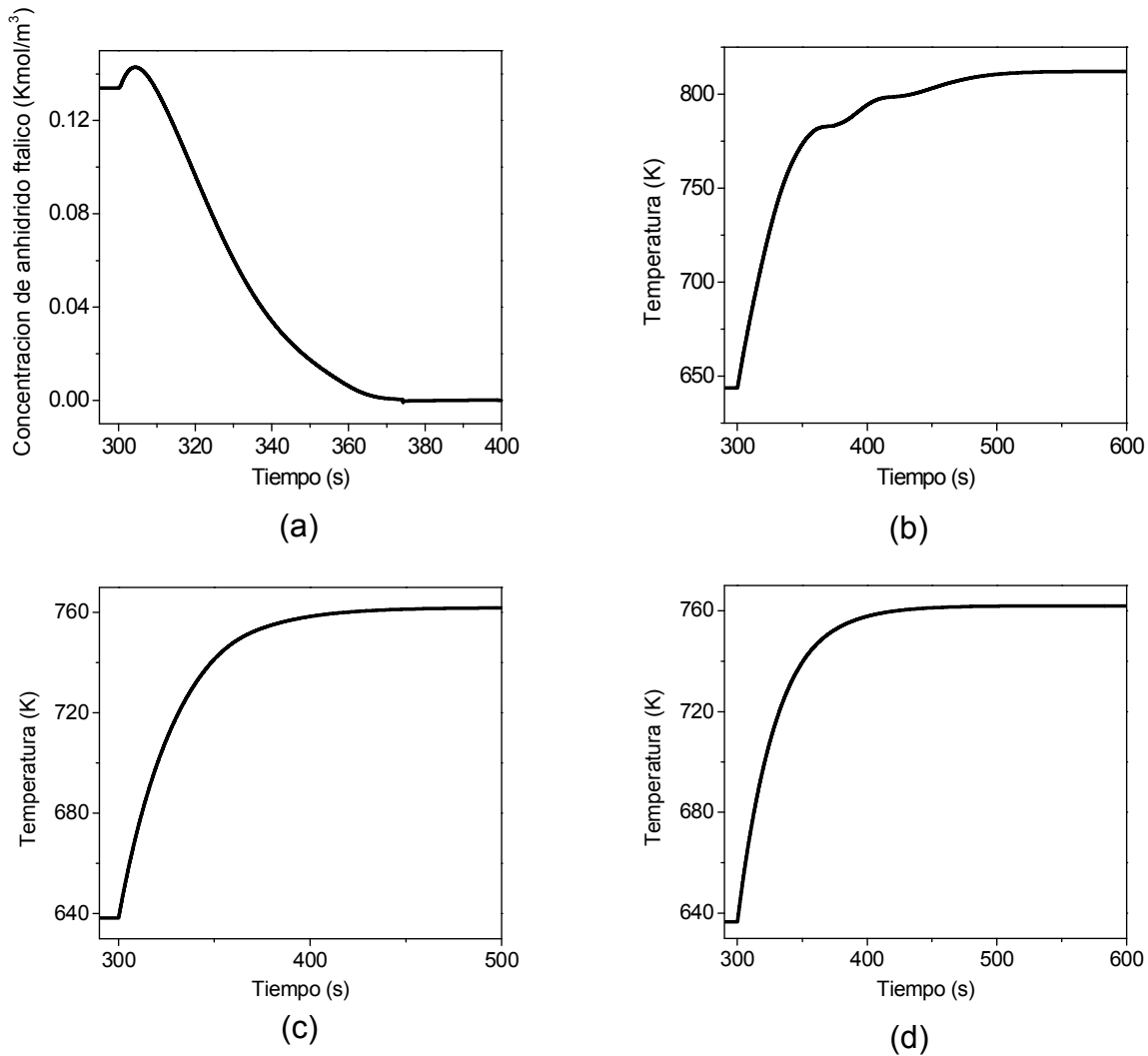


Figura 3.2. Respuesta de (a) concentración del anhídrido ftálico, de la temperatura en (b) punto 0.05, (c) punto 0.50 y (d) punto 0.95 del caso de estudio seleccionado.

En base a las respuestas de la concentración y la temperatura en los puntos seleccionados, se obtuvieron los parámetros del modelo de primer orden más tiempo muerto, mostrados en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1. Parámetros del sistema ante cambio en la temperatura de la chaqueta (+20%) para el caso de estudio seleccionado.

Parámetros	Concentración	Temperatura (0.05)	Temperatura (0.50)	Temperatura (0.95)
<b>K</b>	-0.001054 (Kmol/m <sup>3</sup> K)	1.326521 (adimensional)	0.973955 (adimensional)	0.9876 (adimensional)
<b>T</b>	20.43 (s)	32.22 (s)	28.83 (s)	29.31 (s)
<b>Θ</b>	313.29 (s)	302.22 (s)	300.21 (s)	300.21 (s)

Las funciones de transferencia obtenidas para las respuestas de la concentración de salida y de las temperaturas en cada punto de control son las siguientes:

Función de transferencia que relaciona la concentración con la temperatura de la chaqueta:

$$G_{C_o,T_J}(s) = \frac{C_o(s)}{T_J(s)} = \frac{-0.001054}{20.43s + 1} e^{-313.29s} \quad (3.1)$$

Función de transferencia que relaciona la temperatura en el punto 0.05 con la temperatura de la chaqueta:

$$G_{T_{0.05},T_J}(s) = \frac{T_{0.05}(s)}{T_J(s)} = \frac{1.326521}{32.22s + 1} e^{-302.22s} \quad (3.2)$$

Función de transferencia que relaciona la temperatura en el punto 0.50 con la temperatura de la chaqueta:

$$G_{T_{0.50},T_J}(s) = \frac{T_{0.50}(s)}{T_J(s)} = \frac{0.9739}{28.83s + 1} e^{-300.21s} \quad (3.3)$$

Función de transferencia que relaciona la temperatura en el punto 0.95 con la temperatura de la chaqueta:



$$G_{T_{0.95}, T_J}(s) = \frac{T_{0.95}(s)}{T_J(s)} = \frac{0.9876}{29.31s + 1} e^{-300.21s} \quad (3.4)$$

Las funciones de transferencia que describen la relación entre la composición y las temperaturas en cada punto se describen mediante el cociente de las ecuaciones (3.1) y (3.2) – (3.4).

$$G_{C_o, T_i}(s) = \frac{G_{C_o, T_J}(s)}{G_{T_i, T_J}(s)} \quad (3.5)$$

Función de transferencia de la concentración y la temperatura en el punto 0.05.

$$G_{C_o, T_{0.05}}(s) = \frac{\frac{-0.001054}{20.43s + 1} e^{-313.29s}}{\frac{1.326521}{32.22s + 1} e^{-302.22s}} = -7.945596 \times 10^{-4} e^{-11.07s} \quad (3.6)$$

Función de transferencia del flujo molar y la temperatura en el punto 0.50.

$$G_{C_o, T_{0.50}}(s) = \frac{\frac{-0.001054}{20.43s + 1} e^{-313.29s}}{\frac{0.9739}{28.83s + 1} e^{-300.21s}} = -1.082246 \times 10^{-3} e^{-13.095s} \quad (3.7)$$

Función de transferencia del flujo molar y la temperatura en el punto 0.95.

$$G_{C_o, T_{0.95}}(s) = \frac{\frac{-0.001054}{20.43s + 1} e^{-313.29s}}{\frac{0.9876}{29.31s + 1} e^{-300.21s}} = -1.067233 \times 10^{-4} e^{-13.08s} \quad (3.8)$$

---

**REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- ANIQ. 2012. Asociación Nacional de la Industria Química A. C. Anuario 2012. Estadístico de la Industria Química Mexicana.
- Arántegui, J. (2011). "Historia del control de procesos". Control de procesos.
- Arrieta, O. O., Alfaro, R. V. M. (2003). Sintonización de controladores PI y PID utilizando los criterios integrales IAE e ITAE. *Ingeniería*. 13(1), 31-39.
- Avery, H. E. (1982). *Cinética química básica y mecanismos de reacción*. Reverte.
- Bondy, F. y S. Lippa. Heat Transfer in Agitated Vessels. *Chemical Engineering*, pp. 62- 71, (4 April 1983).
- Budman, H., Silveston, P. L. (2008). Control of periodically operated reactors. *Chemical Engineering Science*. 63, 4942-4954.
- Chao, L., Zhao, Q. Y., Zhang, Z. M., Dou, Z. H., Zhang, T. A., Zhao, H. L. (2015). Numerical simulation of fluid dynamics in rare earth chloride solution in jet-flow pyrolysis reactor. *ScienceDirect*. 25, 997-1003
- Coulson, J. M., y Richardson, J. F. (1984). *Ingeniería química* (Vol. 3). Reverte.
- Dale E. S., Thomas F. E. y Duncan A. M. 2004. *Process Dynamics and Control*. 2da ed. Wiley. ISBN: 0-471-00077-9.
- De Prada, C. (2004). "El futuro del control de procesos". *Revista iberoamericana de automática e informática industrial*, 1(1), 5-14.
- Eigenberger G. 2007. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 7ma ed. Wiley. ISBN: 9783527306732.
- Fernandes, J. L., Domingues, L. H., Pinheiro, C. I. C., Oliveira, N. M. C., & Ribeiro, F. R. (2012). Influence of different catalyst deactivation models in a validated simulator of an industrial UOP FCC unit with high-efficiency regenerator. *Fuel*, 97, 97–108.
- Fisher, D. G. (1991). "Process control: an overview and personal perspective". *Can. J. Chem. Res.*, 69, 5-26.
- Fletcher, P. Heat Transfer Coefficients of Stirred Batch Reactor Design. *The Chemical Engineer*, pp. 33-36, (April 1987).

- Fogles, H., 2001. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. 3 ed. Prentice Hall. México.
- García, J., Fernández, A. G., Vargas, V. F. D., Orduña, E. (2010). Estructura de control jerárquico aplicado a un reactor de amoníaco, tipo tunular, con enfriamiento intermedio. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 9, 329-341.
- González, A. G., Serrato, J. A., Sámano, H. A., Alvizar, P. C. (2004). Nitrosación de la dimetilurea en un reactor tubular que opera isotérmicamente en estado estacionario y suponiendo flujo pistón. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, Volume 3, pp. 249-256.
- Hernandez-martinez, E., Puebla, H., & Alvarez-ramirez, J. (2010). Cascade Control Scheme for Tubular Reactors with Multiple Temperature Measurements. *International journal of chemical reactor engineering*, 8(1), 1542–6580.
- Hernández, E. M., Urrea, R. Álvarez, J. R. (2008). Mejora en el control en cascada para reactores tubulares. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 7(1), 309–318.
- Hua, X. y Jutan, A. (2000). Nonlinear inferential cascade control of exothermic fixed bed reactors. *AIChE Journal*, 46(5), 980-996.
- Izquierdo, J. F., y Torres, J. F. I. (2004). *Cinética de las reacciones químicas* (Vol. 16). Edicions Universitat Barcelona.
- Jesus, J. M., Santana, P. L., & Silva, F. V. (2013). Different approaches in concentration-temperature cascade control of a fixed bed reactor for the phthalic anhydride synthesis. *Chemical Engineering Transactions*, 32, 1387–1392.
- Jin, H., Guo, S., Gou, L., Cao, C. (2016). A mathematical model and numerical investigation for glycerol gasification in supercritical water with a tubular reactor. *The journal of supercritical fluids*. 107, 526-533.
- Laššák, P., Labovský, J., & Jelemenský, L. (2010). Influence of parameter uncertainty on modeling of industrial ammonia reactor for safety and operability analysis. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 23(2), 280–288.

- Lechuga, F. T. (2008). ABC para comprender reactores químicos con multireacción. Reverte.
- Levenspiel O. 2004. Ingeniería de las reacciones químicas. 3ra ed. Limusa Wiley.
- Loncar, Drazen; Ban, Marko and Horvat, Kristijan. (2010). "Mathematical model and simulation of the dynamics of the low-density polyethylene polymerization process in the tubular reactor", *Strojarstvo* 52 (3) 315-325 (2010).
- Luyben W. L. 1990. Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers. 2da ed. McGraw-Hill. ISBN: 0-07-100793-8.
- Minorsky, N. (1930). "Automatic steering tests," *J. Amer. Soc. of Naval Engineers*. 285-310, 42.
- Ogata, K. (2003). "Ingeniería de control moderna". Pearson Educación.
- Perry, R. H., 1999. Manual del ingeniero Químico. 7 ed. McGraw-Hill. North America.
- Ramirez-Castelan, C. E., Moguel-Castañeda, J., Puebla, H., & Hernandez-Martinez, E. (2016). A study of temperature sensor location based on fractal analysis for cascade control schemes in tubular reactors. *Chemical Engineering Science*, 141, 195–204.
- Reséndiz-Camacho, S. (2013). "Simulación dinámica y control para un reactor tubular". Tesis de grado. Maestría en Ciencias en Ingeniería Química. Instituto tecnológico de Orizaba.
- Reséndiz-Camacho, S. Urrea-García, G.R. Luna-Solano, G. Bolaños-Reynoso, E. (2012a). Control en cascada composición-temperatura para un tipo de reactor tubular. XXXIII Encuentro Nacional Y 2do Congreso Internacional AMIDIQ, 2–7.
- Reséndiz-Camacho, S. Urrea-García, G.R. Luna-Solano, G. Bolaños-Reynoso, E. (2012b). Estructura de control variable en cascada para reactores tubulares. *Memorias Del Congreso Nacional de Control Automático 2012*, 1, 113–118.
- Roffel B. y Betlem B., 2006. Process Dynamics and Control. Modeling for Control and Prediction. Wiley. ISBN: 978-0-470-01663-3.

- Rutzler W. 1986. Nonlinear and Adaptive Parameter Estimation Methods for Tubular Reactors. *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 26, No. 2, 325-333.
- Skogestad S. 2003. Simple analytic rules for model reduction and PID controller tuning. *Journal of Process Control* 13, 291-309.
- Smith-Carlos, A. & Corripio-Armando, B., (2006). *Principles and Practice of Automatic*. 3 ed. s.l.:Limusa.
- Thiagalingam, I., Dallet, M., Bennaceur, I., Cadalen, S., Sagaut, P. (2015). Exact non local expression for the wall heat transfer coefficient in tubular catalytic reactors. *International journal of heat and fluid flow*. 54, 97-106.
- Urrea, R., Alvarez, J., & Alvarez-Ramirez, J. (2008). Linear Pi Temperature-Concentration Cascade Control for Tubular Reactors. *Chemical Engineering Communications*, 195(7), 803–820.
- Urrea-García, G. R., Reséndiz-Camacho, S., Álvarez-Ramírez, J., & Luna-Solano, G. (2015). Variable Cascade Control Structure for Tubular Reactors. *Chemical Engineering & Technology*, 38(3), 521–529.
- Vernieres, H. L., Seguin, M. D., Abdelghani, I. A., Mouhab, N. (2015). Estimation and localization of maximum temperature in a tubular chemical reactor by Luenberger state observer. *Chemical Engineering Communications*, 212, 70-77.
- Wu W. y Chen C. 2007. Measurement-Based Optimization and Predictive Control for an Exothermic Tubular Reactor System. *Ind. Eng. Chem. Res.* 46, 2064-2076.
- Wu W. y Huan M. 2003. Nonlinear inferential control for an exothermic packed-bed reactor geometric approaches. *Chem. Eng. Sci.* 58, 2023-2034.