



**SEP**  
SECRETARÍA  
DE EDUCACIÓN  
PÚBLICA



---

---

# **INSTITUTO TECNOLÓGICO DE ORIZABA**

**DIVISIÓN DE ESTUDIO DE POSGRADOS E INVESTIGACIÓN**

## **TESIS PROFESIONAL**

**“OBSERVADOR ACOPLADO A ESTRUCTURA DE CONTROL PARA REACTORES DE  
TIPO TUBULAR”**

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

**PRESENTA**

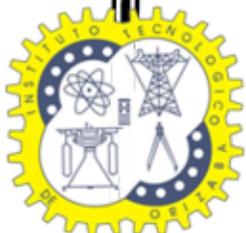
**ING. JOSÉ CORTÉS BARREDA**

**DIRECTOR DE TESIS**

**DR. GALO RAFAEL URREA GARCÍA**

**CODIRECTOR DE TESIS**

**DRA. GUADALUPE LUNA SOLANO**



**ORIZABA, VER.**

**MAYO DEL 2021**

## **DEDICATORIAS**

A Dios porque darne la fuerza para seguir adelante aun en los momentos más difíciles. Por cuidar de mi familia cuando yo estaba trabajando.

A mis padres quienes han sido el motor de mi vida para alcanzar mis metas que vuestro cobijo me ayudo a poder continuar mi camino y su apoyo día con día me hizo ser el hombre que soy ahora.

A mis hermanos, Alejandro, Teresa y Venancio por ser mi compañía, mi apoyo y mi fuerza para seguir adelante.

## **RECONOCIMIENTOS**

A mi asesor el Dr. Galo Rafael Urrea García por su gran ayuda durante todo el desarrollo del proyecto. Le agradezco la paciencia y el tiempo que me regalo en cada consulta que le hacía, así como el apoyo para el desarrollo de mi trabajo.

A los miembros del jurado, Dra. Guadalupe Luna Solano, Dr. Denis Cantú Lozano y Dr. Rosalía Cerecero Enriques por su guía, enseñanza y compromiso.

A CONACYT, por la beca otorgada, con número 932579, perteneciente a la Convocatoria de Becas Nacionales.

Los resultados de esta tesis son parte del proyecto de investigación "Compensación de no linealidades en sistemas de reactores tubulares mediante estructuras adaptables de control en cascada", financiado por el Tecnológico Nacional de México, con clave 7809.20-P

### **PRESENTACIONES EN CONGRESOS**

- 2020 Ponencia Solución numérica del modelo de un reactor tubular para la producción de anhídrido maleico. Memorias del Congreso Internacional de Investigación Academia Journals Chetumal 2020 del 27 al 29 de mayo, Chetumal, Quintana Roo, México (Cortes *et al.*, 2020).
- 2020 Ponencia Implementation of software for the determination of modeling errors in a tubular reactor, Congreso de Internacional de Mejora de Procesos de Software CIMPS 2020 del 21 al 23 de octubre, Mazatlán, Sinaloa, México (Ronald *et al.*, 1999).

### **PUBLICACIONES EN REVISTAS**

Cortes, Barreda, J., Urrea, Garcia, G.R., Luna, Solano, G., Cantu Lozano D. y Cerecero Enriquez R. (2020). Solución numérica del modelo de un reactor tubular para la producción de anhídrido maleico. Academia Journals. **12**(2): 109-114, ISSN 1946-5351, Chetumal, Quintana Roo, México.

## **PUBLICACIONES EN LIBROS**

Cortes, Barreda, J., Urrea, Garcia, G.R., Luna, Solano, G., Cantu Lozano D. y Cerecero Enriquez R.(2020). Solución numérica del modelo de un reactor tubular para la producción de anhídrido maleico. Participación eficaz de la educación superior en problemas de trascendencia nacional e internacional - Chetumal 2020, 109-114, ISBN 978-1-939982-54-4, Chetumal, Quintana Roo, México.

Cortes, Barreda, J., Hernández, Espinosa, J., Urrea, García, G.R., Luna, Solano, G. and Cantú Lozano D.(2020). Implementation of software for the determination of modeling errors in a tubular reactor. New Perspectives in Software Engineering: Proceedings of the 9th International Conference on Software Process Improvement (CIMPS 2020) (Advances in Intelligent Systems and Computing), october 2020. Springer.

## RESUMEN

### **Observador acoplado a estructura de control para reactores de tipo tubular**

**Elaborada por: Ing. José Cortes Barreda**

**Dirigida por: Dr. Galo Rafael Urrea García**

**Co-Dirigida por: Dr. Guadalupe Luna Solano**

La simulación de procesos es parte fundamental del desarrollo de los procesos industriales, en la mayoría de los procesos las reacciones de transformación se llevan a cabo mediante un reactor.

En este trabajo se presentan los resultados del ajuste de temperatura y composición, de un reactor de tipo tubular mediante la aplicación de un observador acoplado a estructura de control, para la compensación de errores de modelización en el proceso de obtención de anhídrido maleico ( $C_2H_2(CO)_2O$ ) mediante la oxidación parcial de benceno en un reactor tipo tubular, para la caracterización del proceso, se realizó un cambio de 1% en la temperatura de la camisa del reactor después de 5 segundos de operación, se obtienen las respuestas de flujo molar del anhídrido maleico y la temperatura del proceso, ajustamos los datos obtenidos mediante un método de incertidumbre para compensar los errores de temperatura y composición.

La aplicación del método de incertidumbre comprobó el error de medición que sufre el proceso de manera convencional en carencias de una estructura de control lo cual se debe a las variaciones de temperatura a lo largo de reactor, que tiende a mitigar la producción de anhídrido maleico y favoreciendo la producción de componentes no deseados.

## **ABSTRACT**

### **Observer coupled to control structure for tubular type reactors**

**By: Ing. José Cortes Barreda**

**Advisor: Dr. Galo Rafael Urrea García**

**Co-Advisor: Dr. Guadalupe Luna Solano**

Process simulation is fundamental part of the development of industrial processes, in most of the processes transformation reactions are carried out by means of a reactor.

In this work presents the results of the temperature and composition of a tubular-type reactor by applying an observer coupled to a control structure for the compensation of modeling errors in the process of obtaining maleic anhydride ( $C_2H_2(CO)_2O$ ) by means of the partial oxidation of benzene in a tubular type reactor, for the characterization of the process, a 1% change in reactor jacket temperature was made after 5 seconds of the operation, the molar flow responses of maleic anhydride and the process temperature is obtained, we adjusted the data obtained using an uncertainty method to compensate the errors for temperature and composition.

The application of the uncertainty method verified the measurement error suffered by the process in a conventional manner in the absence of a control structure, caused by the temperature variations throughout the reactor, which tends to mitigate the production of maleic anhydride. and favoring the production of unwanted components.

## INDICE

<b>LISTA DE FIGURAS</b>	<b>xi</b>
<b>LISTA DE TABLAS</b>	<b>xiii</b>
<b>NOMENCLATURA</b>	<b>xiv</b>
<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>xvii</b>
<b>OBJETIVO GENERAL</b>	<b>xvii</b>
<b>OBJETIVOS ESPECIFICOS</b>	¡Error! Marcador no definido.
<b>CAPÍTULO 1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS</b>	<b>2</b>
1.1. Reactor químico	2
1.2. Diseño de reactores	2
1.3. Clasificación de los reactores	3
1.3.1. Clasificación de los reactores de acuerdo al modo de operación	4
1.3.2. Reactores intermitentes (Batch)	4
1.3.3. Reactores de flujo continuo	5
1.3.4. Reactor continuo de mezcla perfecta	5
1.3.5. Reactor tubular	6
1.3.6. Reactor de lecho empacado	6
1.4. Clasificación de las reacciones	7
1.5. Cinética de la reacción	8
1.6. Variables que afectan la reacción	8
1.6.1. Velocidad de reacción	8
1.6.2. Coeficiente de transferencia de calor	10
1.6.3. Catalizador	10
1.6.3.1. Propiedades del catalizador	10
1.6.4. Entalpia de reacción	10
1.6.5. Capacidad calorífica	11
1.7. Modelado de procesos	11
1.7.1. Modelos de sistemas dinámicos	11
1.7.2. Balance de materia	12
1.7.3. Balance de energía	13
1.8. Sistemas de control	14

1.8.1.	Variable controlada y variable manipulada.	14
1.8.2.	Procesos	14
1.8.3.	La referencia o set point (SP)	15
1.8.4.	Perturbaciones	15
1.9.	Clasificación de los controladores industriales	15
1.9.1.	Acción de control de dos posiciones o de encendido y apagado	15
1.9.2.	Controlador proporcional	16
1.9.3.	Controlador proporcional integral (PI)	17
1.9.4.	Controlador proporcional derivativo	18
1.9.5.	Controlador integral derivativo (PID)	19
1.10.	Control de reactores tubulares	20
1.10.1.	Control en cascada de en reactores tubulares	22
1.10.2.	Tiempo muerto	22
1.10.2.1.	Sistemas de Primer Orden con Tiempo Muerto	22
1.10.3.	Sintonización	23
1.10.4.	Sintonización por control de modelo interno (IMC)	24
1.10.5.	Sistema observable	27
1.10.6.	Observador	27
1.11.	Fortran	27
	<b>CAPÍTULO 2 MATERIALES Y MÉTODOS</b>	<b>29</b>
2.1.	Materiales	29
2.2.	Modelo pseudo homogéneo de un reactor tubular de lecho fijo	29
2.3.	Métodos	32
2.3.1	Solución del modelo	32
2.3.2	Método de diferencias finitas	32
2.3.3	Caracterización del proceso	34
2.3.3.1	Prueba escalón de un proceso	34
2.3.3.2	Método de ajuste 3	35
2.4	Diseño del controlador	36
2.4.1	Estructura de control convencional	37
2.4.2	Estructura de control propuesta	38
2.4.3	Error de integración mínima	39
2.5	Observador acoplado	41

<b>CAPÍTULO 3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN</b>	<b>44</b>
3.1. Caso de estudio seleccionado	44
3.1.1. Solución del modelo matemático.	44
3.1.2. Selección de puntos de medición de temperatura	46
3.1.3. Caracterización del comportamiento dinámico	46
3.2. Funciones de transferencias que caracterizan el proceso	54
3.3. Diseño de controladores	58
3.4. Errores de modelado	59
<b>CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES</b>	<b>62</b>
<b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>63</b>

## LISTA DE FIGURAS

FIGURA		PÁGINA
1.1	Conceptos aplicados en la Ingeniería de la Reacción Química (Navarro, et al. 2017)	3
1.2	Clasificación de los Reactores Químicos (Smith y Corripio, 2014)	3
1.3	Esquema de un reactor intermitente (Fogler, 2008)	4
1.4	Esquema de un reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR) (Fogler, 2008)	5
1.5	Esquema de un reactor tubular (Fogler, 2008)	6
1.6	Esquema de un reactor de lecho empacado (Fogler, 2008)	7
1.7	Diagrama de bloques de un controlador de encendido y apagado	16
1.8	Diagrama de bloque del controlador proporcional	17
1.9	Diagrama de bloque del controlador proporcional-integral (PI)	18
1.10	Diagrama de bloque del controlador proporcional derivativo	19
1.11	Diagrama de bloques del controlador PID (Smith y Corripio, 2014)	20
1.12	Sistema de Primer Orden con Tiempo Muerto (Smith y Corripio, 2014)	23
1.13	Diagrama de bloques para el control con modelo interno (IMC) (Smith y Corripio, 2014)	24
1.14	Estructura de control IMC: (a) básica, (b) reducida	26
2.1	Parámetros del modelo POMTM método de ajuste 3 (Smith y Corripio, 2014)	35
2.2	Definición de las integrales de error para cambios en la perturbación y al punto de control (Smith y Corripio, 2014).	40
3.1	Perfil de temperatura del fluido(a), Perfil de temperatura del catalizador (b), Perfil de flujo molar del anhídrido maleico (c),	45

	Perfil de flujo molar del benceno (d)	
3.2	Respuesta de la concentración del anhídrido maleico	47
3.3	Respuesta de la temperatura en el punto 0.05	47
3.4	Respuesta de la temperatura en el punto 0.10	48
3.5	Respuesta de la temperatura en el punto 0.20	48
3.6	Respuesta de la temperatura en el punto 0.30	49
3.7	Respuesta de la temperatura en el punto 0.40	49
3.8	Respuesta de la temperatura en el punto 0.50	50
3.9	Respuesta de la temperatura en el punto 0.60	50
3.10	Respuesta de la temperatura en el punto 0.70	51
3.11	Respuesta de la temperatura en el punto 0.80	51
3.12	Respuesta de la temperatura en el punto 0.90	52
3.13	Respuesta de la temperatura en el punto 0.95	52
3.14	Error en la temperatura	59
3.15	Señal de error de medición de temperatura	60

## LISTA DE TABLAS

TABLA		PÁGINA
1.1	Clasificación de las reacciones químicas (Levenspiel, 2004)	7
1.2	Definiciones equivalentes de Velocidad de Reacción en función de la magnitud extensiva de interés (estratégica) para cada tipo particular de reactor químico (Navarro, <i>et al.</i> 2017)	9
1.3	Tipos de atrasos para un sistema de primero orden (Smith y Corripio, 2014)	23
2.1	Parámetros de las velocidades de reacción (Van den Berg, <i>et al.</i> 2000)	31
2.2	Parámetros para la oxidación parcial del benceno (Van den berg, <i>et al.</i> 2000)	32
3.1	Parámetros del sistema ante cambios en la temperatura de la chaqueta (+1%)	53
3.2	Parámetros del controlador en cascada utilizando los pasos de IMC.	58

## NOMENCLATURA

LETRA LATINA		UNIDADES
$A$	factor pre exponencial o factor de frecuencia	
$C$	Concentración	$\text{mol/m}^3$
$C_s$	constante del balance de calor en la fase sólida	$\text{sK/J}$
$C_{(s)}$	Controlador	
$C_p$	Calor específico	$\text{J/mol K}$
CRE	ingeniería de reacción química	
$D$	Coefficiente de difusión de masa	$\text{m}^2/\text{s}$
$D_{eff}$	Coefficiente de difusión de masa efectiva	$\text{m}^2/\text{s}$
$E$	Energía de activación	$\text{J/mol}$
$e$	Error	
$f_b$	Flujo molar del benceno	$\text{mol/s}$
$f_m$	Flujo molar de anhídrido maleico	$\text{mol/s}$
$G(s)$	Representación general de una función de transferencia	
$H$	Calor de reacción	$\text{J/mol}$
IMC	Internal Model Control	
$k$	Velocidad de reacción	$\text{s}^{-1}$
$K$	conductividad térmica	$\text{W/m K}$
$K_C$	ganancia del controlador	
$K_{eff}$	coeficiente de difusión de calor efectiva	$\text{m}^2/\text{s}$
$L$	Longitud del reactor	$\text{m}$
$h$	Coefficiente de transferencia de calor	$\text{J/mol K s}$
$m(t)$	salida del controlador	
$\bar{m}$	valor base	
POMTM	Primer orden más tiempo muerto	
$R$	Constante universal de los gases	$\text{J/mol K}$
$R_a$	Relación volumen de la chaqueta/área	$\text{m}$

SISO	Simple Input – Simple Output (una entrada – una salida)	
$t$	Tiempo	s
$T$	Temperatura	K
$T_j$	Temperatura de la chaqueta	K
$T_f$	Temperatura de la fase del fluido	K
$T_s$	Temperatura de la fase solida	K
$U$	Coeficiente de transferencia de calor	J/s m <sup>2</sup> K
$T_{sf}$	coeficiente de transferencia de calor efectiva sólido-fluido	s <sup>-1</sup>
$T_{fw}$	coeficiente de transferencia de calor efectiva fluido-pared	s <sup>-1</sup>
$u$	Señal de salida del controlador	
$v$	Velocidad del fluido	m/s
$z$	Longitud del reactor	m

## LETRA GRIEGA

$\tau$	Constante de tiempo	s
$\rho$	Densidad del fluido	mol/m <sup>3</sup>
$\Delta$	Incremento	
$\theta$	Tiempo muerto	s

## SUBÍNDICE

m	Anhídrido maléico
b	Benceno
D	Derivativo
I	Integral

## INTRODUCCIÓN

La simulación de procesos es importante para el desarrollo de información, en la ingeniería química nos permite conocer el comportamiento físico-químico en los equipos y diferentes etapas de los procesos, la simulación representa una herramienta económicamente más baja, comparada con el desarrollo de datos experimentales y con una precisión considerable al desarrollar información pues mitiga los costos de experimentación que tienden a ser altos en pruebas preliminares.

La solución numérica del modelo representa la oxidación parcial del benceno para la obtención de anhídrido maleico, el cual es un compuesto principalmente usado en la fabricación de poliéster insaturado y en la fabricación de lubricantes para la industria automotriz, su producción en 2017 se estimó en 1.8 millones de toneladas y se espera una alza debió a la demanda que este tiene (Energy Chemical Technological Center, 2019).

Los reactores químicos representan gran parte de los procesos industriales y por lo general las etapas más significativas de los procesos. Los reactores químicos son diseñados en base la operación que se desea realizar y a los componentes que integraran el proceso. por esta razón debemos disponer de información y conocimientos en diferentes campos de investigación tal como termodinámica, cinética química, mecánica de fluidos, transmisión de calor y económica, con la finalidad de generar un proceso con el mayor beneficio en productos y con la menor cantidad de inversión económica (Levenspiel, 2004).

Un modelo de proceso se describe mediante ecuaciones. Un modelo matemático no es único para un sistema determinado, un sistema puede representarse de muchas formas diferentes, por lo que su representación matemática puede tener diferentes variaciones, dependiendo de cada perspectiva.

El modelo matemático se representa por medio de ecuaciones, estas son obtenidas de leyes físicas y químicas que influyen en mi sistema, la representación de un modelo en base a leyes es lo más importante dentro de la construcción de un proceso. (Ogata, 2003).

En este trabajo se presentan los resultados del ajuste de temperatura y composición, de un reactor de tipo tubular mediante la aplicación de un observador acoplado a estructura de control, para la compensación de errores de modelización en el proceso de obtención de anhídrido maleico ( $C_2H_2(CO)_2O$ ) mediante la oxidación parcial de benceno en un reactor tipo tubular

# **CAPÍTULO 1**

## **FUNDAMENTOS TEÓRICOS**

## CAPÍTULO 1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

### 1.1. Reactor químico

Un reactor químico es un dispositivo en el cual ocurre un cambio en la composición de la materia debido a una reacción química. La reacción química es normalmente el cambio más importante en los procesos, y este dispositivo está diseñado para lograr ese cambio. Un reactor suele ser el centro del proceso pues son operados con el propósito de producir productos químicos (Ronald, *et al.* 1999).

### 1.2. Diseño de reactores

La ingeniería de reacción química (CRE) se ocupa del diseño racional o análisis del rendimiento de los reactores químicos. El diseño racional de éste, está más allá de nuestras capacidades, pero en general el diseño incluye determinar; el tipo de reactor, tamaño, configuración, costo y condiciones de funcionamiento del dispositivo.

Un objetivo de la CRE es permitir predecir, en el sentido de un diseño racional, el rendimiento de un reactor creado en respuesta a requisitos específicos y de acuerdo con un determinado cuerpo de información (Ronald, *et al.* 1999).

El diseño correcto de un reactor químico condiciona el éxito o fracaso del proceso global por lo que debe prestarse especial cuidado en todas las facetas relacionadas con la Ingeniería de reactores como se muestra en la (Figura 1.1), se indican los aspectos que debemos tomar en cuenta para el desarrollo óptimo de un reactor. Una parte fundamental del desarrollo del reactor es el tamaño, las características fisicoquímicas del sistema y en función al diseño se obtendrán, las condiciones de operación y las operaciones adicionales como pueden ser la recuperación y regeneración de agentes catalizadores. (Navarro, *et al.* 2017).



Figura 1.1. Conceptos aplicados en la Ingeniería de la Reacción Química (Navarro, *et al.* 2017)

### 1.3. Clasificación de los reactores

Los reactores químicos pueden tener una gran variedad de tamaños, formas y condiciones de operación, que cumplen funciones específicas de acuerdo al tipo de reacción que se llevara a cabo. También pueden ser clasificados por el número y tipo de fases que intervienen en el proceso (Líquida y gaseosa), así como el tipo de producción generada que puede ser continuo o por lotes (ver Figura 1.2) (Smith y Corripio, 2014).

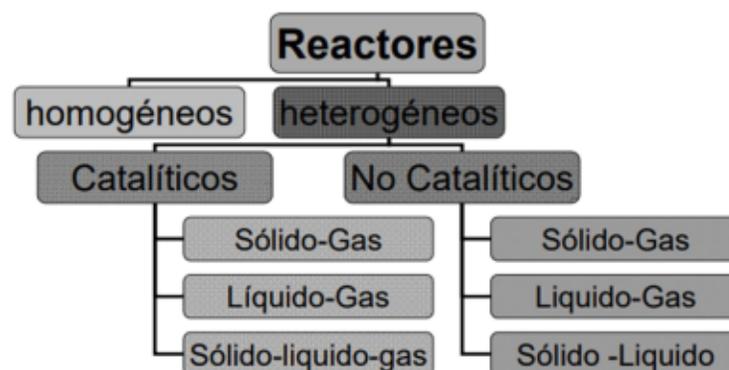


Figura 1.2. Clasificación de los Reactores Químicos (Smith y Corripio, 2014)

### 1.3.1. Clasificación de los reactores de acuerdo al modo de operación

- Intermitentes, por lotes o batch
- Continuos
- Semicontinuos o reactores de flujo no estacionario

### 1.3.2. Reactores intermitentes (Batch)

Un reactor intermitente se emplea en operaciones a pequeña escala para probar procesos que aún no se han desarrollado en su totalidad (En fase experimental), para la fabricación de productos de alto costo y para procesos de difícil conversión en operaciones continuas de larga duración. El reactor se carga por los huecos de la parte superior del mismo como se muestra en la Figura 1.3. El reactor intermitente tiene la ventaja de permitir una alta conversión, que puede obtenerse dejando el reactivo dentro del reactor por periodos prolongados, pero también cuenta con la desventaja del alto costo de mano de obra por lote, la variabilidad del producto de un lote a otro por las condiciones de proceso y con una baja producción en comparación a procesos continuos (Fogler, 2008).



Figura 1.3. Esquema de un reactor intermitente (Fogler, 2008)

### 1.3.3. Reactores de flujo continuo

Los reactores de flujo continuo casi siempre se operan en estado estacionario. Consideraremos tres tipos: el reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR), el reactor de flujo tapón (PFR) y el reactor empacado (PBR).

### 1.3.4. Reactor continuo de mezcla perfecta

El reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR) o reactor de retro mezcla (backmix) es comúnmente usado en procesos industriales para componentes en estado líquido asumiendo que se el proceso realiza una mezcla perfecta entre los componentes del proceso, No presenta dependencia del tiempo, de la temperatura, la concentración u de la velocidad de reacción dentro del reactor. Por lo que todas las variables son iguales en el interior del reactor. Ya que la temperatura y concentración son idénticas en el interior del reactor, son las mismas en el punto de salida. Por lo tanto, la concentración, temperatura y corriente de salida se consideran iguales en el modelo para el interior del reactor. Ver la Figura 1.4. (Fogler, 2008).

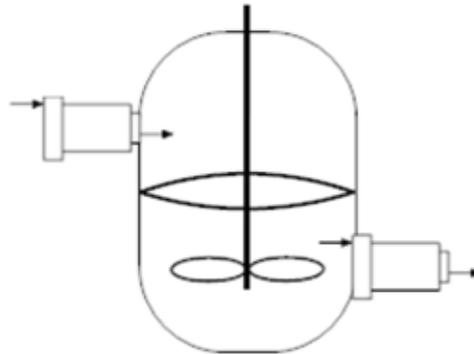


Figura 1.4. Esquema de un reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR) (Fogler, 2008)

### 1.3.5. Reactor tubular

Los reactores tubulares son aplicados en procesos en fase gaseosa, sus propiedades no varían con el tiempo y están conformados de forma física por cilindro trabajando en estado estable.

Los componentes dentro del proceso se consumen de manera continua a lo largo del equipo, Ver la Figura 1.5. Al modelar el reactor tubular se asume que la concentración varía de manera continua en dirección axial a lo largo del reactor. Como consecuencia de ese efecto, la velocidad de reacción, que es una función de la concentración para todas las reacciones, excepto las de orden cero, también variará axialmente (Fogler, 2008).

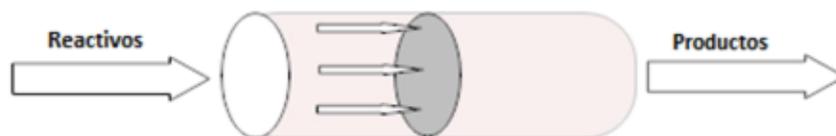


Figura 1.5. Esquema de un reactor tubular (Fogler, 2008)

### 1.3.6. Reactor de lecho empacado

Es un equipo compuesto de uno o más tubos empacados con partículas de catalizador que operan en posición vertical como se muestra en la Figura 1.6. En este las reacciones tiene lugar sobre la superficie del catalizador, Las partículas catalíticas pueden variar en tamaño y forma. El objetivo de este reactor es aumentar la densidad y concentración celular el empaquetamiento: Es una forma menos drástica de inmovilización, pues ésta es parcial. Este reactor permite una producción a gran escala de reactivos primarios o intermediarios (Fogler, 2008).

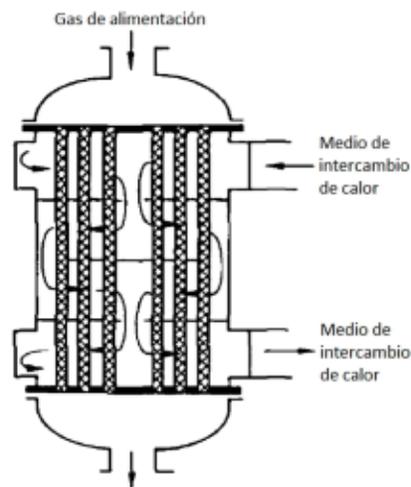


Figura 1.6. Esquema de un reactor de lecho empacado (Fogler, 2008)

#### 1.4. Clasificación de las reacciones

En la Ingeniería de las reacciones químicas, podemos clasificar los sistemas de acuerdo al número y tipo de fases implicadas, en dos grandes grupos: sistemas homogéneos y heterogéneos. Una reacción es homogénea si se efectúa solamente en una fase y es heterogénea si, al menos, se requiere la presencia de dos fases para que transcurra, (ver Tabla 1.1) (Levenspiel, 2004).

Tabla 1.1. Clasificación de las reacciones químicas (Levenspiel, 2004)

	No Catalizadas	Catalizadas
<b>Homogéneas</b>	La mayor parte de las reacciones en forma gaseosa Reacciones rápidas	La mayor parte de las reacciones en forma líquida Reacciones en sistemas coloidales Reacciones con enzimas microbiológicas
<b>Heterogéneas</b>	Combustión Tostación Absorción Reducción	Síntesis Oxidación Cracking

## **1.5. Cinética de la reacción**

Las condiciones de operación apropiadas pueden favorecer la transformación de los componentes de una reacción, esto de la teoría de colisiones que indica que los elementos o compuestos que interviene en el proceso necesitan chocar en la orientación adecuada que favorezca la formación de un compuesto nuevo, si esto ocurre, se ha efectuado una reacción química; en química se estudian estas reacciones considerando su mecanismo, la velocidad, los cambios físicos y energéticos de la reacción.

El conocer el comportamiento de la reacción y las cualidades de los componentes que integran la misma es la parte crucial para el diseño y aplicación de un reactor químico. Si la reacción es suficientemente rápida para que el sistema esté prácticamente en equilibrio, el diseño es muy sencillo, ya que no será necesaria la información cinética y resulta suficiente la información termodinámica del proceso (Levenspiel, 2004).

## **1.6. Variables que afectan la reacción**

La velocidad de una reacción química puede estar afectada por diversas variables. En los sistemas homogéneos las variables son la temperatura, la presión y la composición, mientras que, en los sistemas heterogéneos, como está presente más de una fase (Líquida y gaseosa), el problema será más complejo por la interacción molecular de las diferentes fases del proceso. (Levenspiel, 2004).

### **1.6.1. Velocidad de reacción**

Esta indica la rapidez del consumo molar de una especie o especies químicas (Reactivos), para la formación de otra (Productos). El término especie química representa a cualquier compuesto o elemento químico con una identidad dada. La

identidad de una especie la determinan el tipo, el número y la configuración de los átomos de esa especie (Fogler, 2008).

La velocidad de reacción química  $r_j$ , se entiende como el número de moles de la especie  $j$ -ésima que reaccionan (apareciendo o desapareciendo) por unidad de tiempo y por magnitud estratégica (extensiva), (ver definiciones de velocidad de reacción Tabla 1.2) (Navarro *et al.*, 2017).

Tabla 1.2 Definiciones equivalentes de velocidad de reacción en función de la magnitud extensiva de interés (estratégica) para cada tipo particular de reactor químico (Navarro, *et al.* 2017).

Velocidad	Definición
$r_j = \frac{1}{V} \left( \frac{dN_j}{dt} \right)$	V: volumen de fluido (sistemas homogéneos)
$r'_j = \frac{1}{W} \left( \frac{dN_j}{dt} \right)$	W: masa de sólido (sistemas bifásicos S-F)
$r''_j = \frac{1}{S} \left( \frac{dN_j}{dt} \right)$	S: superficie de interfase (sistemas bifásicos S-F, F-F)
$r'''_j = \frac{1}{V_p} \left( \frac{dN_j}{dt} \right)$	$V_p$ : volumen de partículas (sistemas bifásicos S-F)
$r''''_j = \frac{1}{V_R} \left( \frac{dN_j}{dt} \right)$	$V_R$ : volumen de reactor

### **1.6.2. Coeficiente de transferencia de calor**

Dentro del reactor el calor puede adicionarse o eliminarse debido a las variaciones de temperatura en la pared del equipo. Ya que la pared presenta una resistencia a la transferencia de energía. (Cengel, 2007).

El contenido del reactor y el fluido que circula por la camisa es afectado por la transferencia de calor esto demuestra que un flujo constante de mismo, maximiza la velocidad de transferencia de energía, las variaciones de temperatura pueden favorecer la formación de componentes no deseados.

### **1.6.3. Catalizador**

Es una sustancia que interviene en el curso de la reacción aumentando la velocidad o disminuyéndola, pero no interviene en un intercambio de masa en el proceso, cambiar el curso de la reacción favoreciendo la reacción (Fogler, 2008).

#### **1.6.3.1. Propiedades del catalizador**

La característica principal de catalizador es aumentar la velocidad de una reacción, en relación con la de la reacción no catalizada.

Un catalizador no es cuantificado en la descripción estequiométrica de la reacción, aunque aparece directa o indirectamente, en la ley de velocidad de reacción y en el mecanismo. No es un reactivo o un producto de la reacción en el sentido estequiométrico. La cantidad de catalizador no cambia por la reacción que ocurre, aunque puede sufrir cambios en algunas de sus propiedades.

El catalizador no afecta la naturaleza química de los productos. Esto debe calificarse si es posible más de una reacción (conjunto de productos), porque el catalizador generalmente afecta la selectividad de la reacción (Ronald *et al.*, 1999).

#### 1.6.4. Entalpía de reacción

En una reacción el cambio de entalpía puede ser positivo o negativo de acuerdo a los componentes que la conformen. Si la reacción química libera energía, el calor del sistema pasará a los alrededores, entonces el calor será negativo dentro del sistema, la pérdida de energía en forma de calor a presión constante es la disminución de la entalpía del proceso. Los productos tienen menos entalpía que los reactivos, el cambio en la entalpía se representa ( $\Delta H = H_{final} - H_{inicial}$ ) un proceso exotérmico (Cengel y Boles, 2012).

#### 1.6.5. Capacidad calorífica

La cantidad de energía que se necesita para aumentar la temperatura de una sustancia o compuesto determinado esta varia con las propiedades del compuesto, los cambios de la capacidad calorífica del sistema hacen más complicada la determinación de los perfiles de temperatura dentro de los procesos y como resultado la afectación de los productos finales de la reacción Laššák *et al.*, (2010)

### 1.7. Modelado de procesos

Los modelos de procesos dinámicos pueden ser utilizados para estudios de simulación, para obtener información del comportamiento del proceso; los modelos pueden ser utilizados para estudio de control y optimización de procesos químicos y mecánicos (Mehrotra, 1989).

Los modelos matemáticos pueden encontrar aplicaciones en todos los procesos desde investigación, desarrollo, hasta diseño y operación de plantas, para su aplicación en los modelos de procesos, estos se adaptan tomando en cuenta los procesos fundamentales de la termodinámica, física y química para la correcta interpretación matemática del sistema (Mehrotra, 1989).

En investigación y desarrollo, los modelos encuentran aplicaciones en:

- Determinación de mecanismos y parámetros cinéticos químicos
- Exploración de los efectos de diferentes condiciones de operación en el proceso.
- Cálculos de escalamiento.

En el área de diseño, estos pueden usarse para:

- Explorar el dimensionamiento y la disposición del equipo de proceso.
- Estudiar la interacción de varios componentes del proceso.
- Evaluar estrategias de control alternativas.

En las operaciones de la planta, los modelos se utilizan para:

- La resolución de problemas y en problemas de procesamiento.
- En el control del proceso
- La optimización de la planta operación

### **1.7.1. Modelos de sistemas dinámicos**

Un modelo matemático de un sistema dinámico se representa mediante ecuaciones diferenciales, un modelo matemático no es único para un sistema determinado pues hay muchas variables que afectan los procesos incluso desde su ubicación. Así como hay diferente manera de revolver un sistema matemática, más de un sistema puede representar un modelo que satisfaga al sistema. La dinámica se describe en términos de ecuaciones diferenciales. La cuales se obtienen a partir de leyes físicas que gobiernan el sistema (Ley de Newton, Ley de termodinámica etc.), Un modelo matemático razonable es la parte más importante dentro del análisis del sistema (Ogata, 2003).

### 1.7.2. Balance de materia

El balance de materia contabiliza la cantidad de materia que está dentro del sistema. Suponiendo una reacción de primer orden, la concentración del material (A) está en función del coeficiente de difusión, la velocidad del fluido y el coeficiente de la reacción. Utilizada en trabajos previos por Reséndiz *et al.*, (2012)

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:  $C_A$  es la concentración del reactivo ( $\text{mol/m}^3$ ),  $t$  es el tiempo (s),  $D$  es el coeficiente de difusión ( $\text{m}^2/\text{s}$ ), y  $z$  es la longitud del reactor (m),  $v$  es la velocidad del fluido (m/s) y  $k_1$  es el coeficiente de reacción ( $\text{s}^{-1}$ ).

### 1.7.3. Balance de energía

La cantidad de energía que está dentro del sistema se representa en función al balance de materia obtenido de la ecuación 1.1 y se describe en función a la conductividad térmica, coeficiente de transferencia de calor y temperatura del proceso.

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:  $\rho$  es la densidad del fluido ( $\text{mol/m}^3$ ),  $T$  es la temperatura del fluido (K),  $t$  es el tiempo (s),  $K$  es la conductividad térmica ( $\text{W/m}\cdot\text{K}$ ),  $z$  es la longitud del reactor (m),  $\rho$  es la densidad del fluido ( $\text{mol/m}^3$ ),  $v$  es la velocidad del fluido (m/s),  $\Delta H$  es el calor de reacción ( $\text{J/mol}$ ),  $k_1$  es el coeficiente de reacción ( $\text{s}^{-1}$ ),  $C_p$  es el calor específico del fluido ( $\text{J/mol}\cdot\text{K}$ ),  $h$  es el coeficiente de transferencia de calor

(J/mol·K·s)  $R_a$  es la relación volumen de la chaqueta/área (m) y  $T_j$  es la temperatura de la chaqueta. Utilizada en trabajos previos por Reséndiz, *et al* (2012).

## 1.8. Sistemas de control

Los tres componentes básicos de todo sistema de control (Ogata, 2003). Éstos son:

- Transmisor y sensor
- El controlador
- Elemento de control un ejemplo son las bombas, bandas de transporte y resistencias eléctricas. (Ogata, 2003).

La importancia de estos componentes radica en que realizan las tres operaciones básicas que deben estar presentes en todo sistema de control (Ogata, 2003). Estas operaciones son:

1. La medición de la variable por controlar se realiza, en general con la combinación de un sensor y un transmisor. En algunos sistemas la señal del sensor se puede alimentar directamente al controlador y no se necesita un transmisor
2. Decisión con base en la medición, el controlador decide qué hacer para mantener la variable en el valor deseado
3. Acción como resultado de la decisión del controlador, el sistema debe entonces realizar una acción. Esta acción por lo general la realiza el elemento final de control

### 1.8.1. Variable controlada y variable manipulada.

La variable controlada es la salida del sistema, el medir el valor de una variable del sistema y someter a cambios la variable manipulada con la finalidad de mitigar el error de los valores obtenidos con el set point (SP) del sistema (Ogata, 2003).

### **1.8.2. Procesos**

Es una operación, que tiene una serie de etapas este puede ser natural o artificial, el mismo conduce a un resultado determinado y se desarrolla de forma continua, lo que se busca está determinado desde el inicio de la operación y presenta un propósito. (Ogata, 2003).

### **1.8.3. La referencia o set point (SP)**

El valor que se desea mantener. La tarea del sistema de control es mantener en (SP) esta puede ser representada mediante temperatura, presión velocidad etc. (Smith y Corripio, 2014).

### **1.8.4. Perturbaciones**

Representa una señal negativamente a un sistema, si la perturbación se genera dentro se denomina interna, y si se genera afuera es externa ubicada en una entrada. (Ogata, 2003).

## **1.9. Clasificación de los controladores industriales**

Los controladores industriales se clasifican, de acuerdo con sus acciones de control como: (Ogata, 2003).

- De dos posiciones o controladores on-off
- Controladores proporcionales
- Controladores proporcionales-integrales
- Controladores proporcionales-derivativos
- Controladores proporcionales-integrales-derivativos

### **1.9.1. Acción de control de dos posiciones o de encendido y apagado**

Es un control de dos posiciones, encendido y apagado, ver Figura 1.7. Este controlador es relativamente simple, razón por la cual su uso es extendido en

sistemas de control tanto industriales como domésticos debido a su bajo costo. Supóngase la salida del controlador  $u(t)$  y que la señal de error es  $e(t)$ .

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} u(t) &= U_1, & \text{para } e(t) > 0 \\ u(t) &= U_2, & \text{para } e(t) < 0 \end{aligned}$$

Estos controladores son ampliamente usados en el campo de la electrónica. (Ogata, 2003).

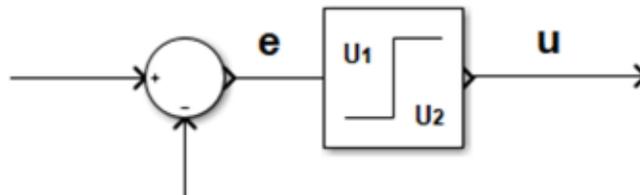


Figura 1.7. Diagrama de bloques de un controlador de encendido y apagado (Ogata, 2003)

### 1.9.2. Controlador proporcional

Este controlador es el más sencillo de aplicar (ver figura 1.8). Se representa mediante la ecuación 1.3

$$m(t) = \bar{m} + K_C e(t) \quad (1.3)$$

Donde:  $K_C$  representa la ganancia,  $e$  es el error,  $m(t)$  señal de salida y  $\bar{m}$  el valor inicial.

La ecuación 1.3 muestra la proporcionalidad es otorgada por la ganancia del controlador. Tomando en cuenta la definición del error, si el valor de la ganancia es positivo resultara en un incremento en la variable controlada y una disminución de la salida del controlador. Esto indica que se genero un controlador de acción inversa.

Por lo que para obtener un controlador directo la ganancia del controlador debe ser negativa.

Un controlador proporcional presenta un parámetro único de ganancia, lo cual presenta un efecto negativo sobre el controlador ya que desvía los valores de la señal de referencia. Ver Figura 1.8 Diagrama de bloque del controlador proporcional ver Figura 1.8 (Smith y Corripio, 2014).

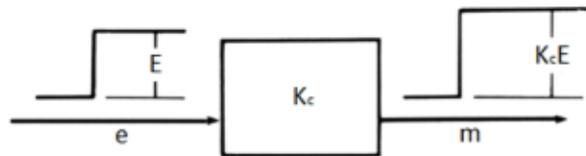


Figura 1.8. Diagrama de bloque del controlador proporcional (Smith y Corripio, 2014)

### 1.9.3. Controlador proporcional integral (PI)

Los procesos que no se controlan en la referencia presentan una desviación muy grande, para solucionar esto se agrega una nueva inteligencia al control, la acción integral que convierte al controlador proporcional en uno controlados proporcional integral. (Smith y Corripio, 2014).

La ecuación que lo describe es:

$$m(t) = \bar{m} + K_C e(t) + \frac{K_C}{\tau_I} \int e(t) dt \quad (1.4)$$

Donde  $\tau_I$  es el tiempo integral (o de reajuste). La mayoría de las veces, la unidad de tiempo utilizada es minutos; menos frecuente es el uso de segundos. Las unidades utilizadas dependen del fabricante. Por lo tanto, el controlador PI tiene dos parámetros,  $K_C$  y  $\tau_I$ , y ambos deben ajustarse para obtener un control satisfactorio (ver Figura 1.9).

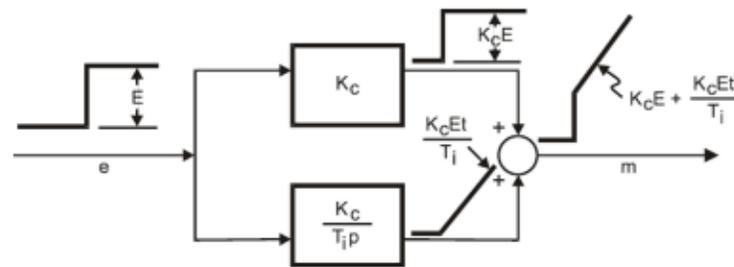


Figura 1.9. Diagrama de bloque del controlador proporcional-integral (PI) (Smith y Corripio, 2014)

Si agregamos una señal de error al inicio del proceso, la salida del control será igual a la ganancia del proceso. esto por la proporcionalidad del sistema y conforme el tiempo aumenta, la señal de salida crece en forma de escalón. Ver Figura 1.9.

Los controladores PI solo presentan ganancia y tiempo integral o tasa de integración. Su ventaja es que la integración elimina el corrimiento. Cerca del 85% de los controladores en uso son de este tipo (Smith y Corripio, 2014).

#### 1.9.4. Controlador proporcional derivativo

Aplicado en procesos donde se emplea un controlador P, se acepta un desplazamiento del estado estacionario en el cual se requiere una cantidad de anticipación y sin perturbaciones. (Smith y Corripio, 2014). La ecuación (1.5) lo describe:

$$m(t) = \bar{m} + K_c e(t) + K_c \tau_D \frac{d}{dt} e(t) \quad (1.5)$$

Dónde:  $\tau_D$  es la constante de tiempo de derivación,  $K_c$  es la ganancia del controlador,  $e$  es el Error,  $m(t)$  es la salida del controlador y  $\bar{m}$  es el valor base (ver Figura 1.10).

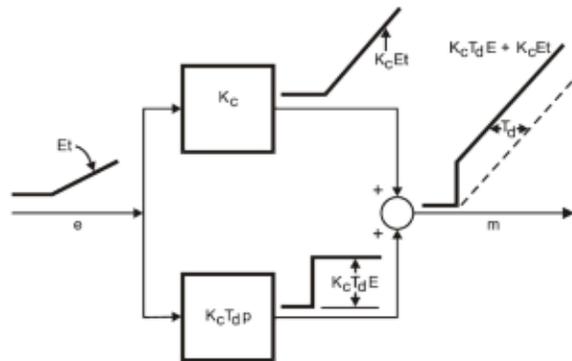


Figura 1.10. Diagrama de bloque del controlador proporcional derivativo (Smith y Corripio, 2014)

### 1.9.5. Controlador integral derivativo (PID)

La acción derivativa se le añade a procesos proporcionales integrales, esta tasa de cambio tiene como objetivo predecir el comportamiento del sistema mediante el análisis de la tasa de cambio del error. La ecuación que representa este sistema de control es:

$$m(t) = \bar{m} + K_C e(t) + \frac{K_C}{\tau_I} \int e(t) dt + K_C \tau_D \frac{d}{dt} e(t) \quad (1.6)$$

Dónde:  $\tau_D$  es la constante de tiempo de derivación,  $\tau_I$  es el tiempo integral (o de reajuste),  $K_C$  es la ganancia del controlador,  $e$  es el Error,  $m(t)$  es la salida del controlador y  $\bar{m}$  es el valor base.

Los controladores proporcionales integrales derivativos tienen mejores resultados en procesos lentos, donde las perturbaciones son mínimas. El tiempo derivativo, la ganancia y el tiempo son parámetros para la sintonización de controladores PID (ver Figura 1.11), los controladores PID se recomiendan para procesos sin ruido. La ventaja del modo derivativo es la anticipación (Smith y Corripio, 2014)

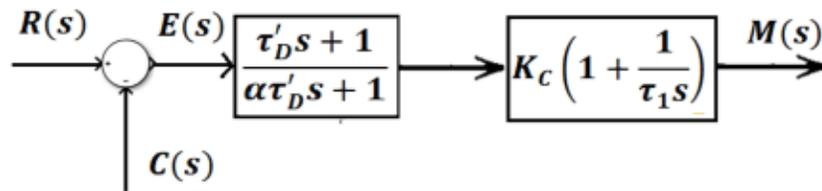


Figura 1.11. Diagrama de bloques del controlador PID (Smith y Corripio, 2014)

### 1.10. Control de reactores tubulares

Los reactores químicos en la industria tienen gran importancia, debido a que son el centro del proceso, se han realizado estudios con la finalidad de mejorar el rendimiento de los mismos, esto con ayuda de modificaciones en los lazos de control convencionales, para mejorar el rechazo de perturbaciones, las operaciones con varios objetos y las operaciones con varios controladores.

Por todo lo mencionado anteriormente, se han llevado a cabo estudios enfocados en controlar la temperatura en los reactores tubulares asistido por medio de control de cascada, para lograr maximizar el desempeño de la operación entre los cuales encontramos los siguientes:

Jin *et al.*, (2016) Crearon un modelo tridimensional del proceso de gasificación supercrítico del glicerol. Representado de manera detallada el comportamiento de la de temperatura y concentración de cada componente en el interior del reactor, compararon 4 modelos de turbulencia (estándar, realizable, gas natural renovable y Launder-Sharma) describiendo con precisión el proceso de gasificación de agua supercrítica, comparando la información obtenida con datos experimentales. Observaron que la temperatura de salida aumento con a temperatura de la pared del reactor.

Israel *et al.*, (2016) Estudiaron el problema de regular las excursiones de perfil de temperatura y la concentración de salida para un reactor tubular empaquetado en fase gaseosa. Sobre la base de un modelo por etapas, se aplicó la teoría de control avanzada para resolver el problema de control robusto FF-OF no lineal, proporcionando condiciones de solvencia de pasividad y observabilidad con criterio de ubicación del sensor. Luego, el comportamiento del controlador avanzado se aproximó con una realización construida de acuerdo con un modelo simplificado adaptado de acuerdo con las propiedades de pasividad y observabilidad. El resultado fue un controlador de temperatura PI con compensación dinámica del punto de ajuste impulsado por la perturbación de la temperatura de alimentación medida.

Castelán *et al.*, (2016) Mediante análisis fractal de series de tiempo aleatorio, se estudia la posición del sensor de temperatura en el reactor tubular con configuración de control en cascada. Utilizaron el modelo de dispersión axial con diferentes curvas de temperatura como referencia. Los resultados numéricos muestran que el sensor colocarse frente al punto caliente, porque mejora la capacidad de suprimir la interferencia e introduce un nuevo método para estudiar la ubicación del sensor.

Thiagalingam *et al.*, (2015) Estudiaron una nueva expresión para el número de Nusselt con la finalidad de poder comprender mejor los fenómenos físicos que afectan a la transferencia de calor de la pared. Demostrando que la desviación media del flujo y la dispersión forman parte fundamental de los fenómenos calóricos dentro del sistema. La mayoría de los modelos en uso son deterministas, 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  $-h_w$ . En este trabajo se estudió el efecto que tienen los mecanismos físicos de transferencia de calor en la pared de reactores del tipo tubular.

### 1.10.1. Control en cascada de en reactores tubulares

Hernández *et al.*, (2017) Implementaron un modelo para la regulación la concentración de salida frente a perturbaciones en la alimentación y variación en la entalpia de reacción en un reactor tubular en el que se llevan a cabo reacciones múltiples en paralelo que representan la oxidación de etileno. Compararon la estructura de control variable contra varios esquemas de control convencional frente a perturbaciones en la alimentación combinadas con una variación en la entalpia de reacción, apreciando que el esquema de control variable mitiga las perturbaciones dentro del sistema y obtuvieron mediante simulación dinámica en base a la solución numérica del modelo del reactor tubular que representan la oxidación de etileno para la producción de óxido de etileno.

Romero, (2017) Aplicaron un modelo para la regulación de la composición en reactores químicos. El controlador se basa en un control de dos bucles en una configuración de temperatura de composición. Los observadores de estado se presentan para proporcionar robustez al control por medio de incertidumbres del modelo agrupado. El segundo bucle se introduce con una opción favorable de la ecuación de Arrhenius como entrada de control virtual. El diseño de control se ilustra con base en dos estudios de casos, un reactor tubular que muestra dos dinámicas de temperatura (cuasi lineal y punto caliente) y un CSTR que presenta múltiples estados estables y obtuvieron un esquema de control de cascada de composición de temperatura basado en modelos para la regulación de la concentración en reactores.

### 1.10.2. Tiempo muerto

Un fenómeno que se presenta muy a menudo en los sistemas de flujo es el del atraso por transporte, que se conoce también como tiempo muerto (Smith y Corripio, 2014). Este forma parte del proceso, aunque una gran cantidad del mismo puede provocar problemas en el controlador.

### 1.10.2.1. Sistemas de Primer Orden con Tiempo Muerto

Si en la respuesta de un sistema se considera tanto atraso dinámico como por transporte, el atraso total corresponde dos atrasos y pueden representarse de la siguiente manera para un sistema de primer orden (Smith y Corripio, 2014).

De acuerdo al algebra de las funciones de transferencia, para un sistema de primer orden como el cómo se ve en la Figura 1.12 en la Tabla 1.3 podemos apreciar los diferentes tipos de atrasos para un sistema de primer orden.

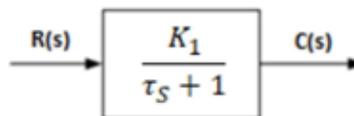


Figura 1.12 Sistema de Primer Orden con Tiempo Muerto (Smith y Corripio, 2014).

Tabla 1.3 Tipos de atrasos para un sistema de primero orden (Smith y Corripio, 2014)

Atraso dinámico	$G(s) = \frac{K}{\tau s + 1}$
Atraso total	$G(s) = \frac{K e^{-\theta s}}{\tau s + 1}$

Donde  $K$  es la ganancia,  $\theta$  el tiempo muerto y  $\tau$  es la constante de tiempo.

### 1.10.3. Sintonización

Ajusta los parámetros del controlador, para la obtención de la respuesta en lazo cerrado, un ejemplo es ajustar el sonido de las bocinas en un estéreo, ajustar el audio de la radio. Cuando más sofisticado es el equipo y el proceso que se desea desarrollar mayor será la dificultad para sintonizarlo pues el número de parámetros aumenta. En la sintonización de procesos la ganancia y tiempo integral son más difíciles de ajustar, que cuando se debe ajustar un solo parámetro. Y si un proceso

requiere el ajuste de tres parámetros como en el caso del controlador (PID) la dificultad aumenta aún más (Smith y Corripio, 2014).

#### 1.10.4. Sintonización por control de modelo interno (IMC)

Este método tiene la ventaja de permitir incertidumbres en el modelo, que es compensado mediante en desempeño, el uso de la función transferencia del proceso en lazo abierto  $G_{M(s)}$  el objetivo del modelo interno, lo que favorece que la respuesta en el sistema a lazo cerrado se pueda realizar de manera física por medio de un controlador.

La estructura del IMC para el modelo de proceso  $\tilde{G}_{M(s)}$  se ejecuta en paralelo con el proceso. La salida del proceso  $\tilde{x}$  es tomada de la salida real del proceso  $x$  y la señal es retroalimentada al controlador  $C(s)$ . La función transferencia proviene de la salida es  $G_{L(s)}L(s)$  Ver figura 1.13

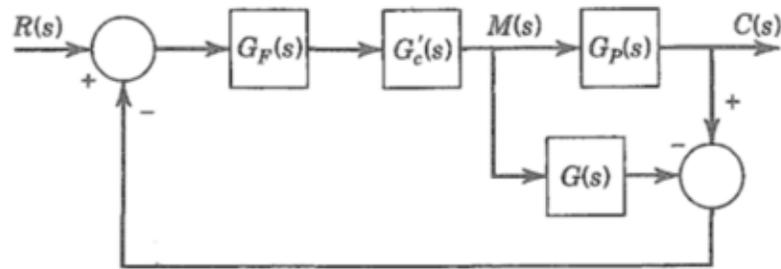


Figura 1.13. Diagrama de bloques para el control con modelo interno (IMC) (Smith y Corripio, 2014)

El control por retroalimentación, ante un cambio en la variable manipulada  $M(s)$  es representado mediante la siguiente relación:

$$M(s) = \left( \frac{-G_L}{G_M} \right)_{(s)} L(s) \quad (1.7)$$

Para la obtención de un control perfecto en la salida  $x(s)$ , por lo cual se puede ajustar el controlador mediante la siguiente relación:

$$C_{(s)} = \frac{1}{G_{M(s)}} \quad (1.8)$$

Se puede obtener un control perfecto ante las perturbaciones.

Para seleccionar el control por retroalimentación  $C_{(s)}$ , se considera un proceso perfecto, que el modelo es inverso de la planta es físicamente posible, esto no siempre es cierto pues muchas plantas tienen bastante tiempo muerto o polinomios que son de bajo orden con respecto a los obtenidos en el denominador.

El método IMC divide la función de transferencias del controlador  $C_{(s)}$  en dos partes. La primera en parte es la inversa  $G_{M(s)}$  y la segunda es llamada "filtro", elegido para hacer  $C_{(s)}$  físicamente posible este se apaga para ser función de transferencias a lazo cerrado ( $S_{(s)}$ ) y se asume  $G_{M(s)} = \tilde{G}_{M(s)}$  obteniendo:

$$x = G_L L + G_M M = x_L + G_M C_{(s)} (x^{set} - x_L) \quad (1.9)$$

$$x = [G_M C_{(s)}] x^{set} + [1 - G_M C_{(s)}] x_L \quad (1.10)$$

La función de transferencia del controlador  $C_{(s)}$  se representa mediante:

$$C_{(s)} = \frac{1}{G_{M(s)}} S_{(s)} \quad (1.11)$$

La ecuación 1.10 en función del controlador es equivalente a:

$$x_{(s)} = [S_{(s)}] x_{(s)}^{set} + [1 - S_{(s)}] G_{L(s)} L_{(s)} \quad (1.12)$$

La función de transferencia servo  $S_{(s)}$  debe adaptarse a  $C_{(s)}$  lo cual es físicamente posible.

La representación del sistema reducido IMC se presenta en la figura 1.14b, Indica que el controlador por retroalimentación y controlado se relacionan directamente.

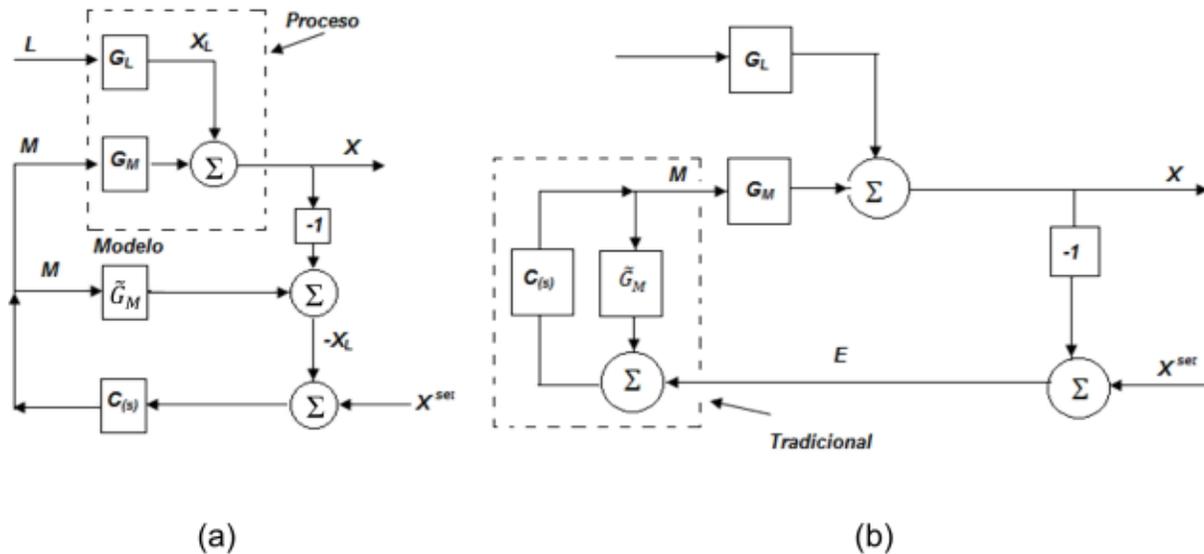


Figura 1.14. Estructura de control IMC: (a) básica, (b) reducida (Grimholt y Skogestad, 2018)

Para la sintonización del controlador se reduce a la función de transferencias servo en lazo cerrado para el proceso y representa por medio:

$$\frac{M(s)}{E(s)} = B(s) = \frac{C(s)}{1 - C(s)\tilde{G}_M(s)} \quad (1.13)$$

La función de transferencias presenta un signo negativo proveniente de la retroalimentación en el lazo interno del controlador. (Grimholt y Skogestad, 2018)

**1.10.5. Sistema observable**

La estimación de variables de estado no medibles se denomina observación, se dice que un sistema es observable en el tiempo  $t_0$  si, con el sistema en el estado  $x(t_0)$ , es posible determinar este estado a partir de la observación de la salida durante un intervalo de tiempo finito (Ogata, 2003).

**1.10.6. Observador**

Un dispositivo (o un programa de computador) que estima u observa las variables de estado se llama un observador de estado, estima las variables de estado basándose en las mediciones de las variables de salida y de control (Ogata, 2003).

**1.11. Fortran**

Fortran es el abuelo de todos los lenguajes de computación científicos. El nombre Fortran se deriva de FORMula TRANSlation, que indica que el lenguaje fue pensado desde el principio para traducir ecuaciones científicas en códigos de computadora (Chapman, 2018)

## **CAPÍTULO 2**

### **MATERIALES Y MÉTODOS**

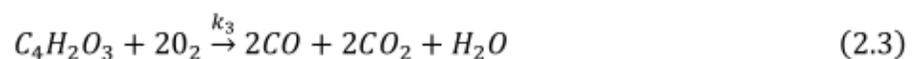
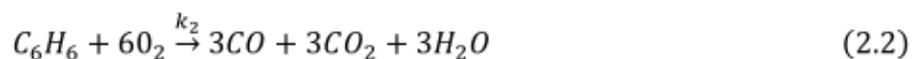
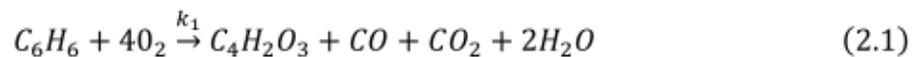
## CAPÍTULO 2 MATERIALES Y MÉTODOS

### 2.1. Materiales

En este capítulo se presenta los modelos para la representación del comportamiento dinámico del reactor tubular, y el método para la obtención de los perfiles de temperatura y concentración, se describe el modelo para la producción de anhídrido maleíco en un reactor tubular, mediante la oxidación parcial del benceno en exceso de oxígenos, para el proceso se asumieron tres reacciones como pseudo primer orden. Así mismo se presenta el método de sintonización del proceso (Van den Berg *et al.*, 2000).

### 2.2. Modelo pseudo homogéneo de un reactor tubular de lecho fijo

Modelo pseudo homogéneo de un reactor tubular de lecho fijo, asumiendo tres reacciones como pseudo primer orden para la producción de anhídrido maléico a partir de la reacción de oxidación parcial del benceno:



La reacción deseada es la (2.1), las reacciones (2.2) y (2.3) son reacciones no deseadas, ya que oxidan tanto reactivo como el producto contribuyendo a la generación de CO, CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O (Van den Berg *et al.*, 2000)

Para la descripción de las velocidades de reacción se utilizara la ecuación de Arrhenius en las reacciones 2.1 - 2.3, la ecuación es la siguiente:

$$k_i(t, x) = A_i \cdot e^{\left(\frac{-E_i}{R \cdot T_s(t, x)}\right)} \quad (2.4)$$

El comportamiento másico del benceno ( $f_b$ ) y del anhídrido maléico ( $f_m$ ) para la representación del comportamiento del flujo se describen mediante las siguientes ecuaciones diferenciales parciales siguientes:

$$\frac{\partial f_b}{\partial t} = D_{eff} \frac{\partial^2 f_b}{\partial x^2} - v \frac{\partial f_b}{\partial x} - k_1 f_b - k_2 f_b \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial f_m}{\partial t} = D_{eff} \frac{\partial^2 f_m}{\partial x^2} - v \frac{\partial f_m}{\partial x} + k_1 f_b - k_3 f_m \quad (2.6)$$

El comportamiento de la temperatura de la fase del fluido ( $T_f$ ) y del catalizador en fase solida ( $T_s$ ), se describe mediante dos balances de calor como se muestra en las siguientes ecuaciones.

$$\frac{\partial T_f}{\partial t} = K_{eff} \frac{\partial^2 T_f}{\partial x^2} - v \frac{\partial T_f}{\partial x} - U_{fw}(T_f - T_j) - U_{sf}(T_s - T_f) \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = -U_{sf}(T_s - T_f) + c_s(\Delta H_1 k_1 f_b + \Delta H_2 k_2 f_b + \Delta H_3 k_3 f_m) \quad (2.8)$$

Las siguientes condiciones de frontera son:

$$D_{eff} \frac{\partial^2 f_b}{\partial x^2} = 0 \quad z = 0, \quad t \geq 0 \quad (2.9)$$

$$D_{eff} \frac{\partial^2 f_b}{\partial x^2} = 0 \quad z = 0, \quad t \geq 0 \quad (2.10)$$

$$K_{eff} \frac{\partial^2 T_f}{\partial x^2} = 0 \quad z = 0, \quad t \geq 0 \quad (2.11)$$

$$D_{eff} \frac{\partial^2 f_b}{\partial x^2} = 0 \quad z = 1, \quad t \geq 0 \quad (2.12)$$

$$D_{eff} \frac{\partial^2 f_b}{\partial x^2} = 0 \quad z = 1, \quad t \geq 0 \quad (2.13)$$

$$K_{eff} \frac{\partial^2 T_f}{\partial x^2} = 0 \quad z = 1, \quad t \geq 0 \quad (2.14)$$

Con las siguientes condiciones iniciales:

$$f_b = 0.009 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$$

$$f_m = 0.0 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$$

$$T_f = 733 \text{ K}$$

$$T_s = 660 \text{ K}$$

Donde  $f_b$  es el flujo del benceno (mol/s),  $f_m$  es el flujo del anhídrido maléico (mol/s),  $T_f$  es la temperatura de entrada del fluido (K) y  $T_s$  representa la temperatura del catalizador sólido (K).

Reséndiz, *et al* (2012) estudiaron la producción de anhídrido maleico mediante la oxidación parcial el benceno en un reactor tubular, todas las reacciones que ocurren en el reactor son asumidas como pseudo primer orden, para este proceso se consideró que la temperatura en la chaqueta del reactor es uniforme a lo largo del equipo.

Los parámetros considerados para realizar su modelado se ilustran en las Tablas 2.1 y 2.2.

Tabla. 2.1. Parámetros de las velocidades de reacción (Van den Berg, 2000)

Reacción	$A_i(\text{s}^{-1})$	$E_i(\text{J mol}^{-1})$	$\Delta H_i(\text{J mol}^{-1})$
<b>Ec. (2.9)</b>	86,760	71,711.7	-1,490,000
<b>Ec. (2.10)</b>	37,260	71,711.7	-2,322,000
<b>Ec. (2.11)</b>	149.4	36,026.3	-832,000

Tabla. 2.2. Parámetros para la oxidación parcial de benceno (Van den Berg *et al.*, 2000)

<b>Parámetros</b>	<b>Valor (unidades)</b>
<b>Velocidad del gas, <math>v</math></b>	2.48 ( $\text{m s}^{-1}$ )
<b>Coeficiente efectivo de difusión de masa, <math>D</math></b>	0.00317 ( $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ )
<b>Coeficiente efectivo de difusión de calor, <math>K</math></b>	0.0317 ( $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ )
<b>Coeficiente efectivo de transferencia de calor de la fase del fluido- temperatura de la pared, <math>U_{fw}</math></b>	26 ( $\text{s}^{-1}$ )
<b>Temperatura de la pared, <math>T_j</math></b>	733 (K)
<b>Coeficiente efectivo de transferencia de calor del solido-fase del fluido, <math>U_{sf}</math></b>	30 ( $\text{s}^{-1}$ )
<b>Constante del balance de calor solido-fase, <math>c_s</math></b>	0.729 ( $\text{s K J}^{-1}$ )

## 2.3. Métodos

### 2.3.1 Solución del modelo

Las ecuaciones que representan el comportamiento de la materia y energía en proceso, se les aplicó el método de diferencias finitas en el cual, la ecuación diferencial parcial que describe el problema es reemplazada por un número finito de ecuaciones diferenciales, en términos de variables independiente en puntos seleccionados (Steven y Raymond, 2007).

Posteriormente se procede a integrar las ecuaciones diferenciales ordinarias obtenidas mediante el método de Runge-Kutta de 4° orden.

### 2.3.2 Método de diferencias finitas

Este método de aproximación numérica es utilizado en ecuaciones diferenciales parciales, tiene como finalidad la discretización de las variables de posición, por lo

que ahora cada ecuación diferencial parcial se puede describir mediante varias ecuaciones diferenciales ordinarias. (Steven y Raymond, 2007).

Primeramente se divide la longitud del reactor  $L$ , en  $M$  incrementos

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

$$\Delta z = \frac{L}{M} \quad (2.15)$$

El método de diferencias finitas de la derivada de un punto  $K$  se puede aplicar mediante tres opciones

Diferencia adelante:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{x_{k+1} - x_k}{\Delta z} \quad (2.16)$$

Diferencia atrás:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{x_k - x_{k-1}}{\Delta z} \quad (2.17)$$

Diferencia central:

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{x_{k+1} - x_{k-1}}{2\Delta z} \quad (2.18)$$

Se seleccionó método de diferencia finitas central para la solución de las ecuaciones diferenciales que representar en comportamiento de la materia y energía en el proceso.

La siguiente formula se aplica para una ecuación diferencial parcial de segundo orden, y su solución mediante el método central de diferencias finitas.

$$\frac{\partial^2 x}{\partial z^2} = \frac{x_{k+1} - 2x_k + x_{k-1}}{\Delta z^2} \quad (2.19)$$

Una vez discretizadas las ecuaciones diferenciales y con las ecuaciones diferenciales ordinarias obtenidas se procede a la integración mediante el método de Runge-Kutta de 4° orden.

### 2.3.3 Caracterización del proceso

#### 2.3.3.1 Prueba escalón de un proceso

Esta prueba se realizará mediante un cambio en la temperatura del sistema a los 5 segundos del proceso, se graficará y se verán los cambios en los puntos seleccionados, que serán aproximados mediante el método POMTM para la obtención de las variables de control de proceso.

Para la caracterización del sistema se agregó un cambio escalón al proceso en lazo abierto y se obtuvieron las respuestas de la composición y temperatura, se aplicó el método (POMTM) para la obtención de los parámetros de control del proceso.

$$G(s) = \frac{K e^{-\theta s}}{\tau_1 + 1} \quad (2.20)$$

Dónde: ganancia  $K$ , tiempo muerto ( $\theta$ ) y la constante de tiempo ( $\tau$ ).

Se realizará un cambio escalón del 1% en la camisa del reactor en lazo abierto, la respuesta se registra mediante una gráfica que indica el comportamiento de la concentración y temperatura contra el tiempo. (Smith y Corripio, 2014).

La ecuación que representa un cambio escalón es la siguiente:

$$C(s) = \frac{K e^{-\theta s}}{\tau_1 + 1} \cdot \frac{\Delta m}{s} \quad (2.21)$$

La ganancia del proceso  $K$  se calcula mediante la siguiente expresión:

$$K = \frac{\Delta C_s}{\Delta m} \quad (2.22)$$

### 2.3.3.2 Método de ajuste 3

Del modelo real se obtiene las respuestas del modelo de proceso, esta se encuentra en la región de alta de cambio. Estudios previos indican que los puntos en los tiempos  $(\theta + 1/3\tau)$  y  $(\theta + \tau)$  han mostrado buenos resultados, los cuales son determinados mediante las siguientes formulas.

$$\Delta c(\theta + \tau) = K\Delta m[1 - e^{-1}] = 0.632\Delta c_s \quad (2.23)$$

$$\Delta c\left(\theta + \frac{1}{3}\tau\right) = K\Delta m[1 - e^{-1/3}] = 0.283\Delta c_s \quad (2.24)$$

En la Figura 2.1 se puede ver la localización de los puntos en los tiempos  $t_1$  y  $t_2$ .

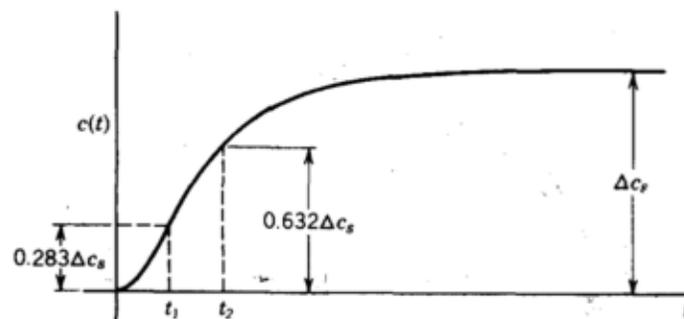


Figura 2.1. Parámetros del modelo POMTM método de ajuste 3 (Smith y Corripio, 2014)

Los valores de  $\theta$  y  $\tau$  se determinan mediante:

$$\tau = \frac{3}{2}(t_2 - t_1) \quad (2.25)$$

$$\theta = t_2 - \tau \quad (2.26)$$

Dónde:  $t_1$  es el tiempo en el cual  $\Delta c = 0.283\Delta c_s$  y  $t_2$  es el tiempo en el cual  $\Delta c = 0.632\Delta c_s$

## 2.4 Diseño del controlador

Los controladores son diseñados mediante el método IMC (internal model control), empleando el procedimiento de sintonizado PI/PID (Grimholt y Skogestad, 2018). Los pasos para obtenerlos son los siguientes:

1. Obtención de los parámetros de control para el modelo aproximado de primer orden más tiempo muerto.

$$G(s) = \frac{Ke^{-\theta s}}{(\tau_1 s + 1)} \quad (2.27)$$

2. Derivación de los ajustes del controlador con base en el modelo.

Para la compensación proporcional integral (PI), se especifica una respuesta de primer orden de la siguiente forma:

$$\frac{y_m(s)}{y_{ref}(s)} = \frac{1}{\tau_c s + 1} \exp(-\theta s) \quad (2.28)$$

Que es representada mediante el siguiente controlador:

$$C(s) = \frac{\tau_1}{K(\tau_c + \theta)} \left[ 1 + \frac{1}{\tau_1 s} \right] \quad (2.29)$$

Este controlador Proporcional Integral (PI), con ganancia y el tiempo integral determinados por:

$$K_c = \frac{\tau_1}{K(\tau_c + \theta)} \quad y \quad \tau_I = \tau_1 \quad (2.30)$$

Se resuelve el sistema con  $\tau_c = 0$ . Para obtener una respuesta rápida y  $\tau_1/\theta \gg 1$  para procesos con retardo dominante,  $\tau_I = 4(\tau_c + \theta)$  para el tiempo integral modificado. La regla de sintonizado (IMC) resultante es:

$$K_c = \frac{1}{K} \frac{\tau_I}{2\theta} \quad \tau_I = \min\{\tau_I, 8\theta\} \quad (2.31)$$

### 2.4.1 Estructura de control convencional

Se aplicará una estructura de control que relaciones la composición y temperatura, conformada por 2 lazos de control, que manipulan la composición en el reactor y evalúa la composición en la salida del proceso, el comportamiento de la temperatura es manipulado mediante un enfriante en la chaqueta del reactor y controlado mediante un lazo secundario (Reséndiz *et al.*, 2012).

Para el diseño del lazo primario y secundario se estableció el proceso de primer orden más tiempo muerto para la temperatura en cada sección y para la composición de salida, considerando las variables obtenidas del cambio escalón del proceso se obtienen las siguientes ecuaciones.

$$\frac{c(s)}{T_j(s)} = G_{T_j, C_o}(s) = \frac{K_{T_j, C}}{\tau_{T_j, C} s + 1} e^{-\theta_{T_j, C} s} \quad (2.32)$$

$$\frac{T_m(s)}{T_j(s)} = G_{T_j, T_m}(s) = \frac{K_{T_j, T_m}}{\tau_{T_j, T_m} s + 1} \quad (2.33)$$

Dónde:  $T_m$  representa la temperatura en cada punto seleccionado.  $K_{T_j, C_o}$  y  $K_{T_j, T_m}$  representan la ganancia del proceso de la temperatura y composición  $\theta_{T_j, C}$  el tiempo

muerto resultante por las mediciones y el transporte interno del fluido.  $\tau_{T_j, C_o}$  y  $\tau_{T_j, T_m}$  la constante de tiempo muerto en la temperatura y composición respectivamente.

El control en el lazo primario se genera a partir la relación de la temperatura y composición en cada sección del reactor y se representa mediante ecuaciones (2.32) y (2.33), obteniendo:

$$\frac{G_{T_j, C_o}(s)}{G_{T_j, T_m}(s)} = G_{T_m, C_o}(s) = K_{T_m, C} \frac{\tau_{T_j, T_m} s + 1}{\tau_{T_j, C_o} s + 1} e^{-\theta_{T_j, C_o} s} \quad (2.34)$$

donde  $K_{T_m, C_o} = K_{T_j, C_o} / K_{T_j, T_m}$ . Para condiciones aproximadas al estado estacionario se considera la siguiente relación  $(\tau_{T_j, T_m} s + 1) / (\tau_{T_j, C_o} s + 1) \approx 1$ , es decir la dinámica del retardo prevalece sobre la dinámica global. Por lo que:

$$G_{T_m, C}(s) = K_{T_m, C_o} e^{-\theta_{T_j, C_o} s} \quad (2.35)$$

El control del lazo secundario manipula la temperatura de la chaqueta  $T_j$ . Con la finalidad de ajustar la temperatura medida, con la temperatura requerida en el lazo primario, para lograr la regulación de la concentración de salida. Su diseño es basado mediante la ecuación (2.35).

#### 2.4.2 Estructura de control propuesta

La estructura de control se basa en colocar controladores de lazo primario en la concentración de salida y de lazo secundario en la temperatura de cada sección del reactor, para regular la concentración de salida de anhídrido maleico. La entrada del controlador es una respuesta de la unión entre el control convencional ( $u_i$ ) multiplicada la variable ( $\alpha_i$ ) (Reséndiz *et al.*, 2012).

$$u = \sum_{i=1}^N u_i \alpha_i \quad (2.36)$$

Los parámetros del factor de ponderación  $\alpha_i \in [0,1]$ , deben ser ajustados para cumplir con la restricción:

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i = 1 \quad (2.37)$$

Se ajusta de forma dinámica el factor de ponderación en base a la desviación de la temperatura en cada punto de control del reactor mediante la siguiente ecuación.

$$\alpha_i = \frac{|\varepsilon_i|}{\sum_{i=1}^N |\varepsilon_i|} \quad (2.38)$$

Dónde: el valor absoluto del error de regulación en el punto seleccionado  $|\varepsilon_i|$ ,  $T_{ref,i}$  Temperatura de control en cada sección y  $T_i$  es la temperatura medida en el punto  $i$   $|T_{ref,i} - T_i|$  lo que da paso a la siguiente relación  $|\varepsilon_i| = |T_{ref,i} - T_i|$  (Reséndiz *et al.*, 2012).

### 2.4.3 Error de integración mínima

Para caracterizar el proceso se utilizaron los parámetros de primero orden más tiempo muerto, su especificación en lazo cerrado es un error de la variable controlada respecto al lazo abierto, el error es una función en el tiempo de respuestas y es necesario minimizar los errores de tiempo. Este puede ser determinado mediante la integral del error en el tiempo como se muestra en la figura 2.2. ya que el objetivo de la sintonización del proceso es minimizar la integral del error.

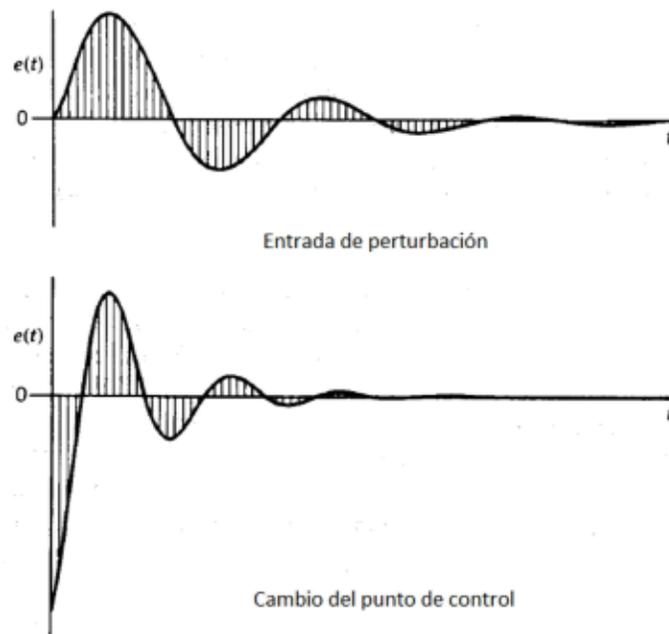


Figura 2.2. Definición de las integrales de error para cambios en la perturbación y al punto de control (Smith y Corripio, 2014).

Para evitar los valores negativos se calcula la integral del valor absoluta del error (IAE), y se representa por medio de la ecuación 2.39

$$IAE = \int_0^{\infty} |e(t)| dt \quad (2.39)$$

Otro método en la determinación del error cuadrático (ISE) y de las integrales ponderadas descrita mediante la ecuación 2.40

$$ISE = \int_0^{\infty} e^2(t) dt \quad (2.40)$$

La integral se determina cuando ocurre un cambio o perturbación en las referencias ( $t = 0$ ) hasta un tiempo ( $n = \infty$ ). Esto ya que no se puede determinar con anticipación las respuestas. Uno de los problemas que representa esta integral es cuando el valor no es forzado a ser cero pues se transforma en una integral indeterminada. Esto por la carencia de un controlador de acción integral por el error de estado estacionario. Por lo que el error se reemplaza con la diferencia de la variable controlada y su valor al final del proceso en estado estacionario (Smith y Corripio, 2014).

## 2.5 Observador acoplado

Introducir un observador de órdenes reducidas de alta ganancia del tipo Luenberger para obtener una estimación de la anulación  $\tilde{\eta}_1(t)$  de incertidumbres del modelo  $\eta_1(t)$ . Donde  $\tau_{e,1}$  es un parámetro estimador que se utiliza para la modulación de establecer la velocidad de estimación deseada de las incertidumbres del modelo.

El propósito del observador puede ser escrito como:

$$\frac{d\tilde{\eta}_1}{dt} = -\tau_{e,1} \left[ \tilde{\eta}_1(t) - \frac{de_1}{dt} + \frac{dCm(t)_{ref}}{dt} - \tilde{f}_1 - \tilde{g}_1 u_1 \right] \quad (2.41)$$

Introduciendo la variable  $w_1(t) = \tau_{e,1}^{-1} \tilde{\eta}_1(t) - e_1(t)$  Se obtiene una forma práctica del observador de orden reducido para estimar las incertidumbres del modelo.

$$\frac{dw_1(t)}{dt} = \tau_{e,1}^{-1} \frac{d\tilde{h}}{dt} - \frac{de_1}{dt} = \frac{dCm(t)}{dt} + \tilde{f}_1 + \tilde{g}_1 u_1 - \tilde{\eta}_1(t) \quad (2.42)$$

Dónde:

$$\tilde{\eta}_1(t) = \tau_{e,1} (w_1(t) + e_1(t)) \quad (2.43)$$

Usando la estimación de las incertidumbres del modelo, el primer ciclo de control viene dado por:

$$u_1(t) = \left[ \frac{dCm_{ref}}{dt} + \tau_{c1}e_1(t) - \tilde{f}_1 + \tilde{\tau}e_1^{-1} \frac{d\tilde{h}_1(t)}{dt} + \tau_{c1}(w_1(t) + e_1(t)) \right] \tilde{g}_1^{-1} \quad (2.44)$$

Considerando

$$\tilde{f}_1 = -\frac{1}{\tau_1} Cm(t) \quad (2.45)$$

$$\tilde{f}_2 = -\frac{1}{\tau_2} T_i(t) \quad (2.46)$$

$$\tilde{g}_1 = \frac{k_1}{\tau_1} \quad (2.47)$$

$$\tilde{g}_2 = \frac{k_2}{\tau_2} \quad (2.48)$$

El bucle secundario se deriva siguiendo las ideas literales descritas en las ecuaciones (10) - (15) (Romero, 2017). Por lo tanto, el controlador propuesto del bucle secundario es

$$u_2(t) = \left[ \frac{dCm_{ref}}{dt} + \tau_{c2}e_2(t) - \tilde{f}_2 + \tilde{\tau}e_2^{-1} \frac{d\tilde{h}_2(t)}{dt} + \tau_{c2}(w_2(t) + e_2(t)) \right] \tilde{g}_2^{-1} \quad (2.49)$$

$$\frac{dw_2(t)}{dt} = \tau_{e2}^{-1} \frac{d\tilde{h}}{dt} - \frac{de_2}{dt} = \frac{dCm(t)}{dt} + \tilde{f}_2 + \tilde{g}_2 u_2 - \tilde{\eta}_2(t) \quad (2.50)$$

$$\tilde{\eta}_2(t) = \tau_{e,2}(w_2(t) + e_2(t)) \quad (2.51)$$

## **CAPÍTULO 3**

### **RESULTADOS Y DISCUSIÓN**

---

## CAPÍTULO 3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A continuación se presentan los resultados obtenidos del modelo, para la obtención de anhídrido maleíco mediante la oxidación parcial del benceno, la información obtenida del comportamiento dinámico del proceso, la generación de parámetros de control y caracterización del proceso, aplicación del Método Internal Model control (IMC) para el diseño de controladores, determinación de la eficiencia del observador acoplado en la estructura de control en presencia de perturbaciones en la composición y temperatura de alimentación.

### 3.1. Caso de estudio seleccionado

La estructura de control se implementó en un reactor tubular donde el fluido de alimentación es el benceno el cual es oxidado mediante exceso de oxígeno, esto para la producción de anhídrido maleíco, el objetivo del control es mantener el flujo molar constante de anhídrido maleíco en 0.00237mol/s.

#### 3.1.1. Solución del modelo matemático.

La solución del modelo se realizó mediante el método de diferencias finitas, discretizando las variables de posición de las ecuaciones diferenciales parciales que representan el comportamiento de la materia y energía, convirtiéndolas en ecuaciones diferenciales ordinarias, posteriormente obtenidas se integraron mediante el método de Runge Kutta de 4° orden obteniendo así los perfiles del flujo molar del benceno y del anhídrido maléico y los perfiles de temperatura del fluido y del catalizador en el reactor tubular.

El modelo se programó en lenguaje fortran y los datos obtenidos se graficaron mediante OriginPro. En la (Figura 3.1a) se puede apreciar el perfil temperatura del fluido, en la gráfica se observa que el punto caliente se localiza a 0.64 m de la longitud del reactor, por lo que el uso de controladores de temperatura-composición

en esta sección podría otorgarnos una mejor respuesta en la obtención de anhídrido maleico, la temperatura del catalizador a lo largo de reactor (Figura 3.1b), se observa el perfil de flujo molar de generación de anhídrido maleico en el reactor (Figura 3.1c) y como es que el benceno se va consumiendo (Figura 3.1d).

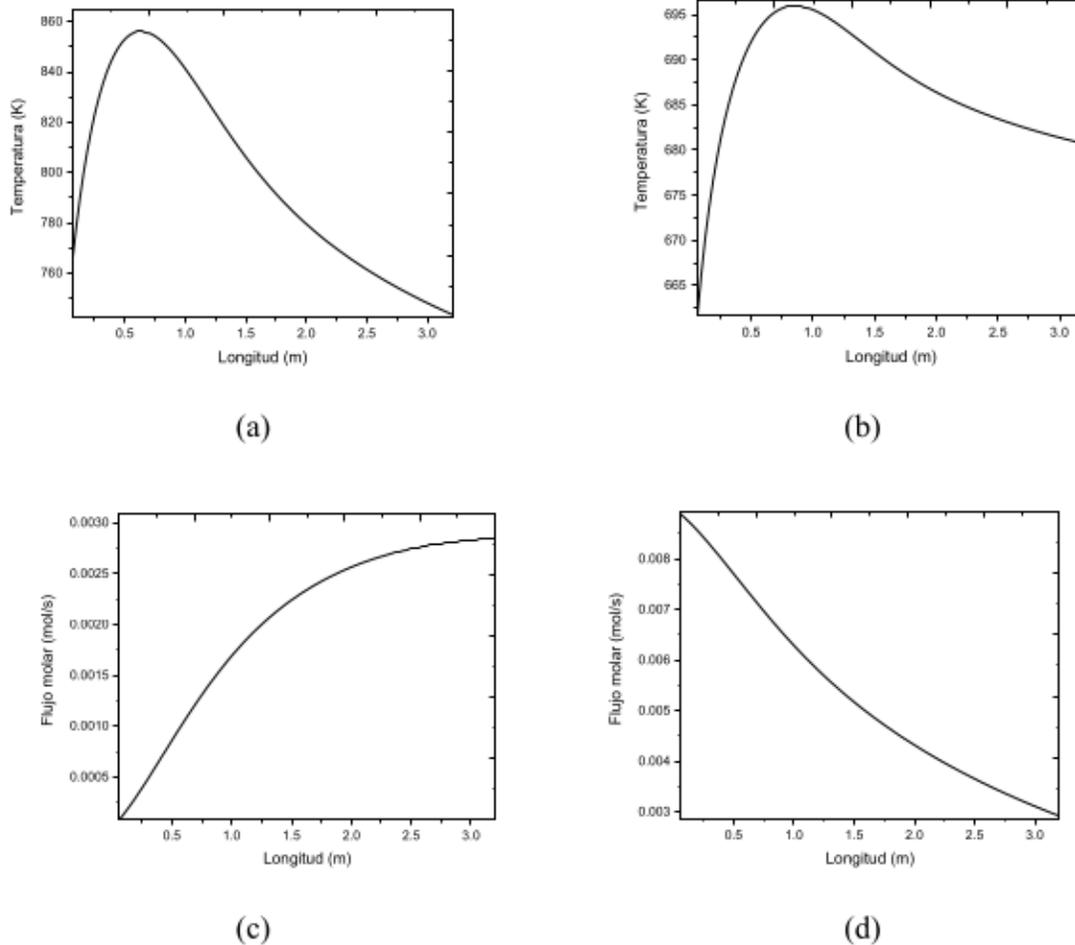


Figura 3.1. Perfil de temperatura del fluido(a), Perfil de temperatura del catalizador (b), Perfil de flujo molar del anhídrido maleico (c), Perfil de flujo molar del benceno (d)

### 3.1.2. Selección de puntos de medición de temperatura

De acuerdo a (Resendiz, *et al.*, 2012) propusieron la implementación de cinco mediciones de temperatura a una estructura de control convencional, en donde las mediciones de temperatura se ubicaban antes del punto caliente a una distancia de 0.32 m (0.10 adimensional) considerando que la longitud del reactor es de 3.2 m, después del punto caliente 1.28 m (0.40 adimensional), cercano en la entrada 0.16 m (0.05 adimensional) y a la salida del reactor 3.04 m (0.95 adimensional).

De acuerdo a la Figura 3.1a, se analizaran diez puntos de mediciones de temperatura en el reactor en los localizados en la entrada 0.16 m (0.05 adimensional) a lo largo de reactor 0.32 m (0.10 adimensional), 0.64 m (0.20 adimensional), 0.96 m (0.30 adimensional), 1.28 m (0.40 adimensional), 1.6 m (0.50 adimensional), 1.92 m (0.60 adimensional), 2.24 m (0.70 adimensional), 2.56 m (0.80 adimensional), 2.88 m (0.90 adimensional) y a la salida del reactor 3.04 m (0.95 adimensional), esto para mitigar las perturbaciones que se generan en los puntos lejanos al punto caliente y reducir los cambios de la temperatura-composición en el reactor para una mejor producción de anhídrido maleico.

### 3.1.3. Caracterización del comportamiento dinámico

Para la caracterización del sistema se aproximaron la respuesta de la composición de salida y los de 10 puntos de medición de temperatura a un Modelo POMTM, se realizó un cambio escalón del +1% en la temperatura de la chaqueta del reactor a los 5 segundos, obteniendo, las respuestas del flujo molar del anhídrido maléico a la salida del reactor y de la temperatura en los 10 puntos de control seleccionados anteriormente, la respuesta de la concentración de salida se puede ver en la Figura 3.2 y el comportamiento dinámico de la temperatura en las Figuras 3.3-3.13, El proceso se caracterizó con ayuda del método de ajuste 3 visto en el capítulo anterior,

estos parámetros serán utilizados para el desarrollo de los controladores del proceso.

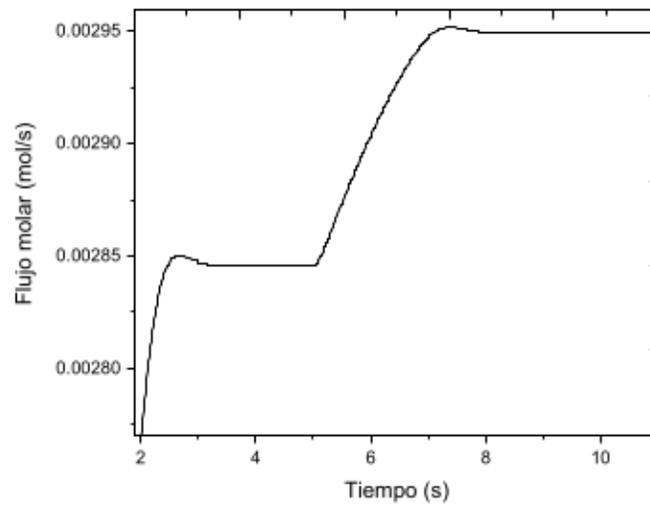


Figura 3.2. . Respuesta de la concentración del anhídrido maleico

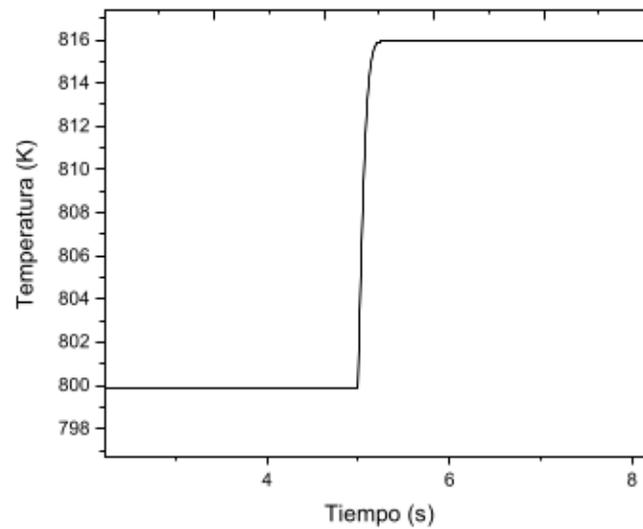


Figura 3.3. Respuesta de la temperatura en el punto 0.05

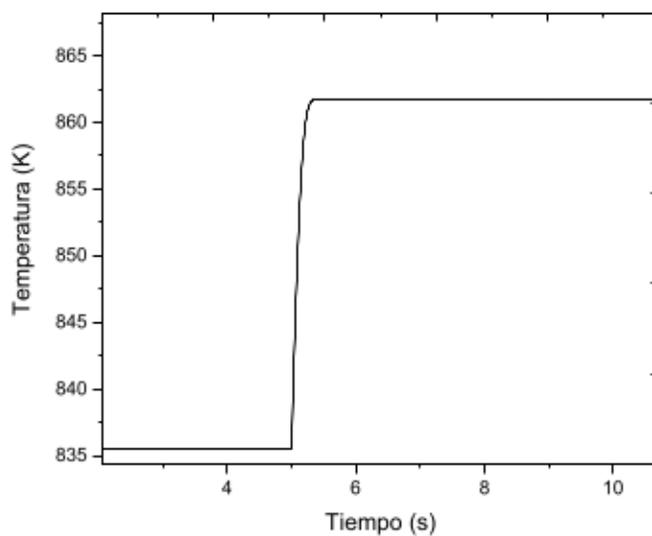


Figura 3.4. Respuesta de la temperatura en el punto 0.10

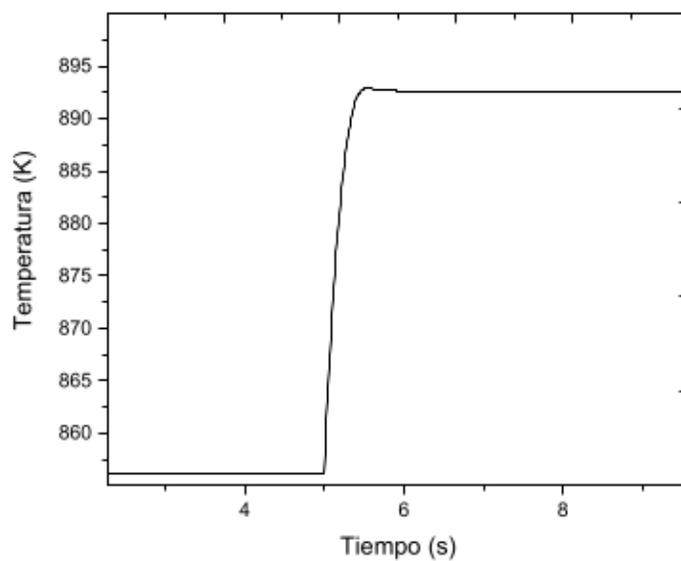


Figura 3.5. Respuesta de la temperatura en el punto 0.20

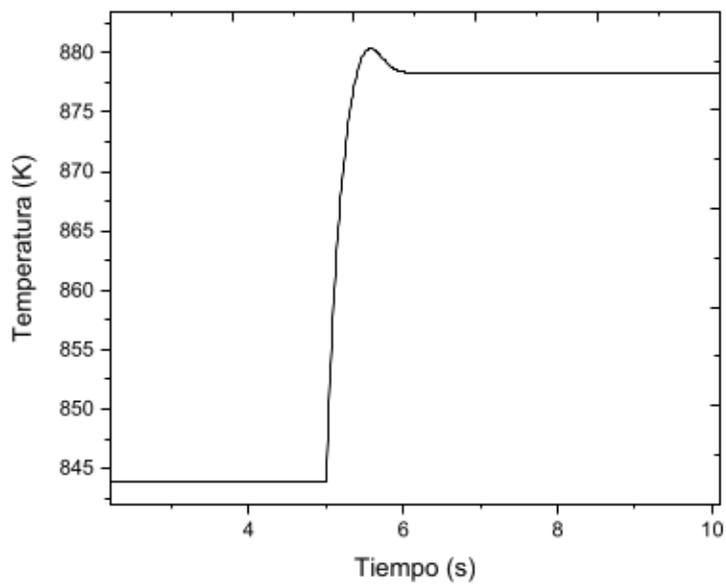


Figura 3.6. Respuesta de la temperatura en el punto 0.30

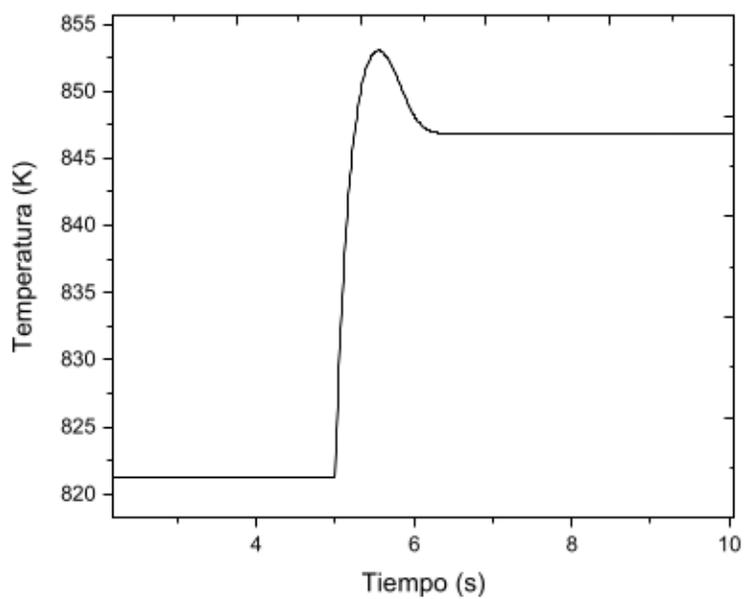


Figura 3.7. Respuesta de la temperatura en el punto 0.40

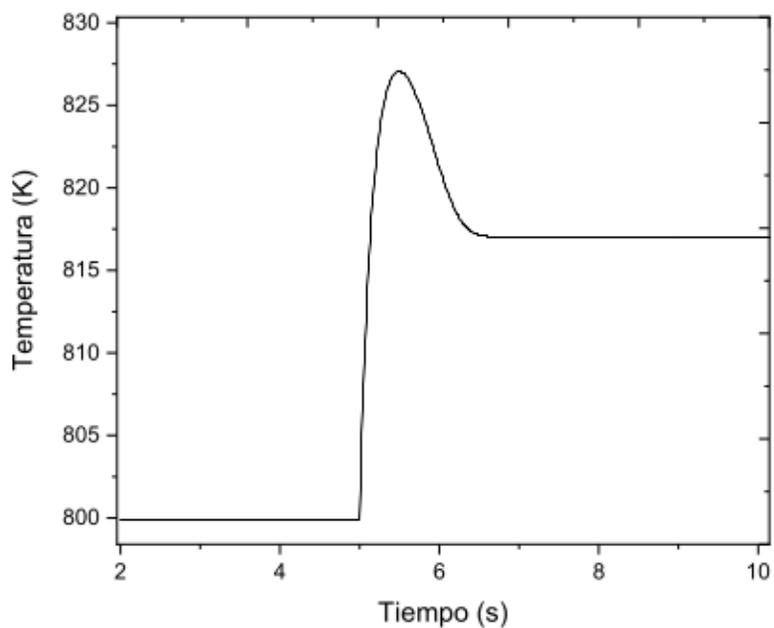


Figura 3.8. Respuesta de la temperatura en el punto 0.50

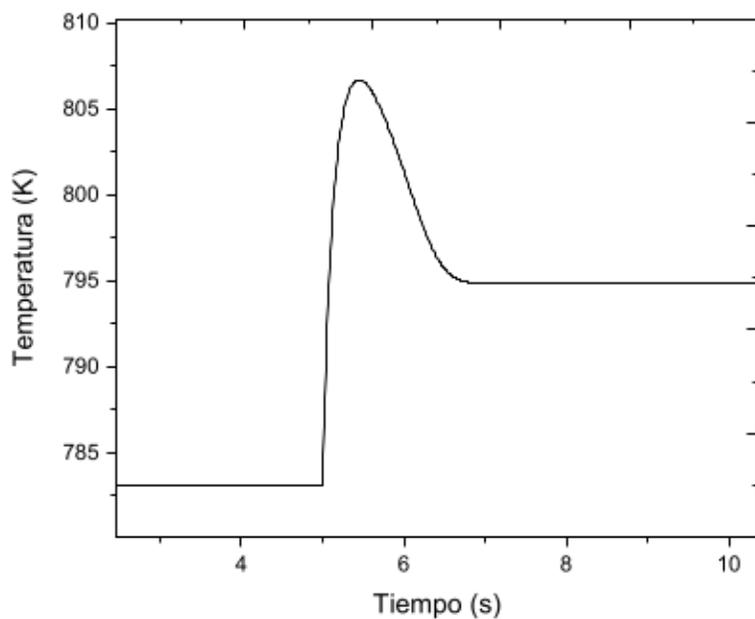


Figura 3.9. Respuesta de la temperatura en el punto 0.60

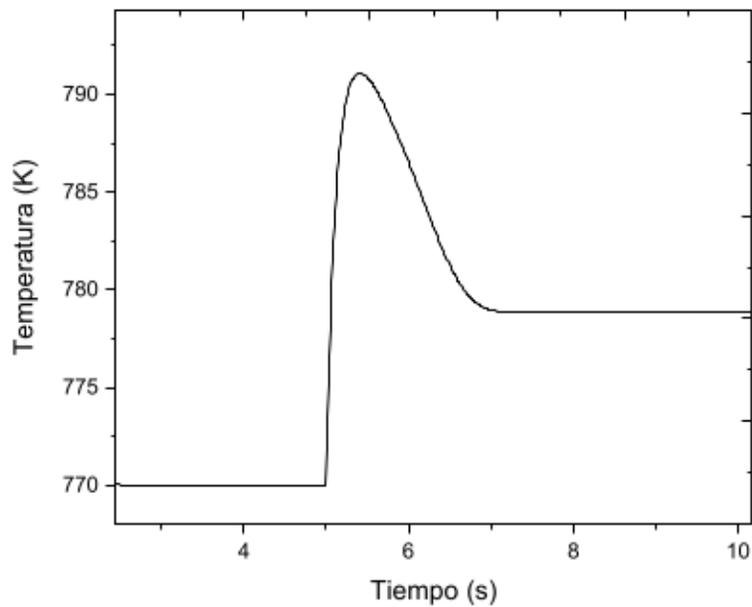


Figura 3.10. Respuesta de la temperatura en el punto 0.70

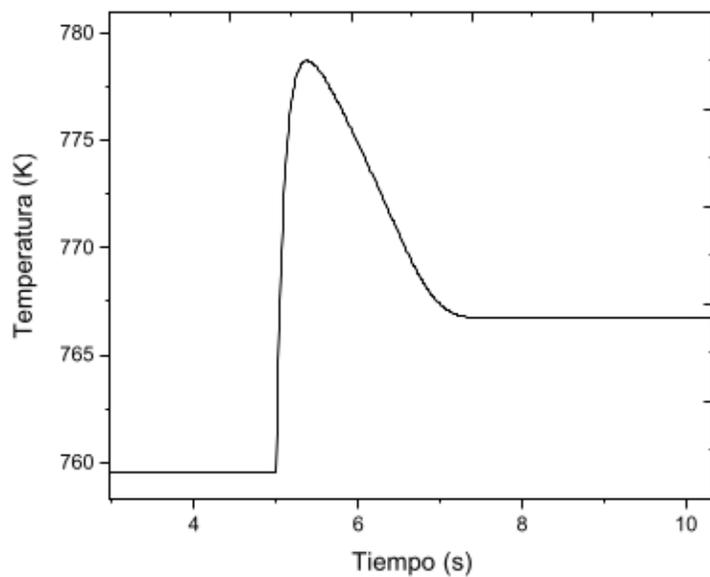


Figura 3.11. Respuesta de la temperatura en el punto 0.80

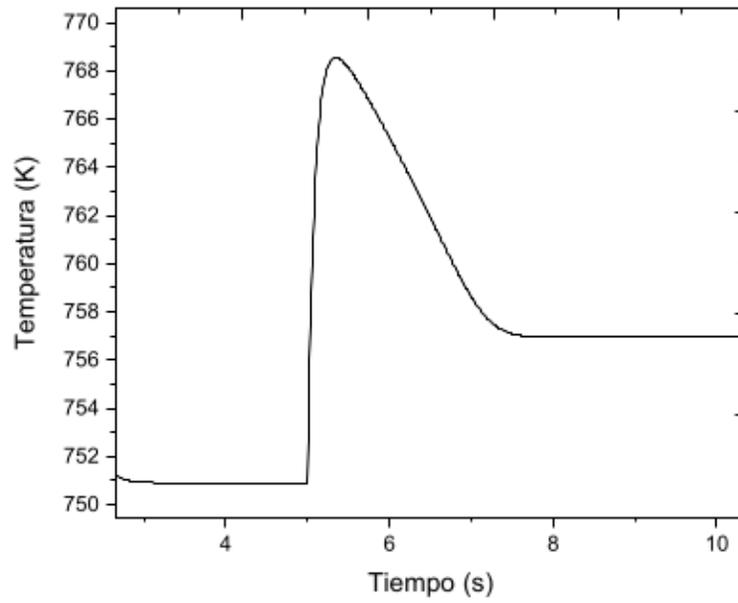


Figura 3.12. Respuesta de la temperatura en el punto 0.90

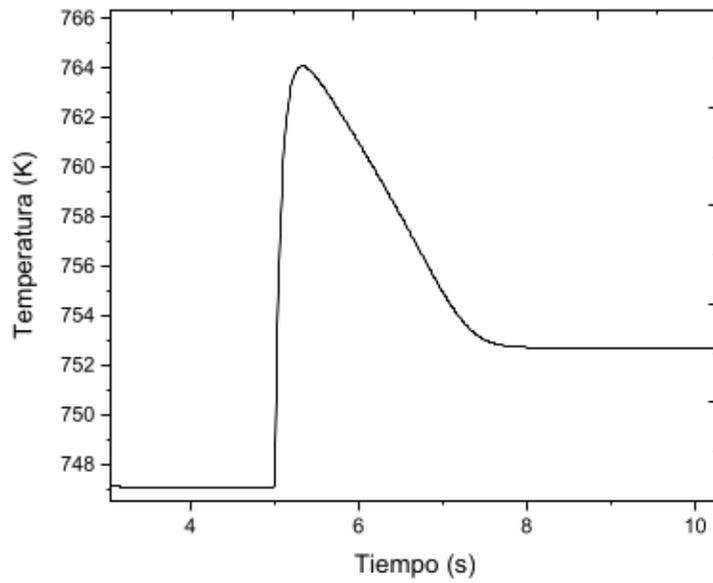


Figura 3.13. Respuesta de la temperatura en el punto 0.95

Del cambio escalón se obtuvieron los parámetros ganancia (K), constante de tiempo ( $\tau$ ) y tiempo muerto ( $\theta$ ) calculados a partir de las ecuaciones 2.22, 2.25 y 2.26 que caracterizan el proceso, estos parámetros serán ocupados para la generación de controladores de lazo primario y secundario de la estructura de control, para la temperatura y concentración en los puntos seleccionados anteriormente.

Los parámetros obtenidos para la caracterizan del proceso de la concentración y temperatura en los puntos de medición seleccionados se reportan en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1. Parámetros del sistema ante cambios en la temperatura de la chaqueta (+1%)

Parámetros	Flujo molar	Temperatura (0.05)	Temperatura (0.10)	Temperatura (0.20)	Temperatura (0.30)
K	0.0000149254 (mol/s K)	2.395437313 (adimensional)	3.915274627 (adimensional)	5.437483582 (adimensional)	5.131926866 (adimensional)
$\tau$	0.75255 (s)	0.058782463 (s)	0.103101188 (s)	0.161908172 (s)	0.157610421 (s)
$\theta$	0.26745 (s)	0.00664788(s)	0.00960225 (s)	0.00898515 (s)	0.00704628 (s)

Parámetros	Temperatura (0.40)	Temperatura (0.50)	Temperatura (0.60)	Temperatura (0.70)	Temperatura (0.80)
K	3.812328358 (adimensional)	2.547373134 (adimensional)	1.75298209 (adimensional)	1.316137313 (adimensional)	1.063397015 (adimensional)
$\tau$	0.107666873 (s)	0.063052953 (s)	0.039611818 (s)	0.028253541 (s)	0.022297462 (s)
$\theta$	0.00736012 (s)	0.00707125 (s)	0.00580809 (s)	0.00479054 (s)	0.00398953 (s)

Parámetros	Temperatura (0.90)	Temperatura (0.95)
K	0.901365672 (adimensional)	0.840692537 (adimensional)
$\tau$	0.01863696 (s)	0.017234589 (s)
$\theta$	0.00342775 (s)	0.00324009 (s)

### 3.2. Funciones de transferencias que caracterizan el proceso

La respuesta de la composición de salida y la variación de temperatura a lo largo del reactor, se representa mediante la siguiente función de transferencia.

$$G_{C_o, T_J}(s) = \frac{\Delta C_o(s)}{T_J(s)} = \frac{K}{\tau s + 1} e^{-\theta s} \quad (3.1)$$

La relación entre concentración de salida y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{C_o, T_J}(s) = \frac{\Delta C_o(s)}{T_J(s)} = \frac{0.0000149254}{0.75255 s + 1} e^{-0.26745s} \quad (3.2)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.05 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.05}, T_J}(s) = \frac{T_{0.05}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{2.395437313}{0.058782463 s + 1} e^{-0.00664788s} \quad (3.3)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.10 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.10}, T_J}(s) = \frac{T_{0.10}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{3.915274627}{0.103101188 s + 1} e^{-0.00960225s} \quad (3.4)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.20 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.20}, T_J}(s) = \frac{T_{0.20}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{5.437483582}{0.161908172 s + 1} e^{-0.00898515s} \quad (3.5)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.30 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.30}, T_J}(s) = \frac{T_{0.30}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{5.131926866}{0.157610421 s + 1} e^{-0.00704628s} \quad (3.6)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.40 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.40}, T_J}(s) = \frac{T_{0.40}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{3.812328358}{0.107666873s + 1} e^{-0.00736012s} \quad (3.7)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.50 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.50}, T_J}(s) = \frac{T_{0.50}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{2.547373134}{0.063052953s + 1} e^{-0.00707125s} \quad (3.8)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.60 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.60}, T_J}(s) = \frac{T_{0.60}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{1.75298209}{0.039611818s + 1} e^{-0.00580809s} \quad (3.9)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.70 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.70}, T_J}(s) = \frac{T_{0.70}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{1.316137313}{0.028253541s + 1} e^{-0.00479054s} \quad (3.10)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.80 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.80}, T_J}(s) = \frac{T_{0.80}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{1.063397015}{0.022297462s + 1} e^{-0.00398953s} \quad (3.11)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.90 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.90}, T_J}(s) = \frac{T_{0.90}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{0.901365672}{0.01863696s + 1} e^{-0.00342775s} \quad (3.12)$$

La relación entre la temperatura en el punto 0.95 y la temperatura de la chaqueta del reactor se representa mediante la siguiente función transferencia:

$$G_{T_{0.95}, T_J}(s) = \frac{T_{0.95}(s)}{\Delta T_J(s)} = \frac{0.840692537}{0.017234589s + 1} e^{-0.00324009s} \quad (3.13)$$

La relación entre la composición de salida y temperatura en los diferentes puntos del reactor se representan mediante la siguiente función transferencia.

$$G_{C_o, T_i}(s) = \frac{G_{C_o, T_j}(s)}{G_{T_i, T_j}(s)} \quad (3.14)$$

Aplicada a las ecuaciones (3.2) para la composición y (3.3) – (3.13) temperatura en cada punto del reactor.

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.05.

$$G_{C_o, T_{0.05}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{2.395437313}{0.058782463s + 1} e^{-0.00664788s}} = \frac{0.0000062307 e^{-0.26080212s}}{0.781941232s + 1} \quad (3.15)$$

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.10.

$$G_{C_o, T_{0.10}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{3.915274627}{0.103101188s + 1} e^{-0.00960225s}} = \frac{0.00000381209 e^{-0.25784795s}}{0.804100594s + 1} \quad (3.16)$$

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.20.

$$G_{C_o, T_{0.20}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{5.437483582}{0.161908172s + 1} e^{-0.00898515s}} = \frac{0.00000274494 e^{-0.2584648s}}{0.833504086s + 1} \quad (3.17)$$

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.30.

$$G_{C_o, T_{0.30}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{5.131926866}{0.157610421s + 1} e^{-0.00704628s}} = \frac{0.00000290834 e^{-0.2604037s}}{0.831355211s + 1} \quad (3.18)$$

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.40.

$$G_{C_o, T_{0.40}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{3.812328358}{0.107666873s + 1} e^{-0.00736012s}} = \frac{0.00000391504 e^{-0.26008988s}}{0.806383437s + 1} \quad (3.19)$$

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.50.

$$G_{C_o, T_{0.50}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{2.547373134}{0.063052953s + 1} e^{-0.00707125s}} = \frac{0.00000585913e^{-0.2603787s}}{0.784076477s + 1} \quad (3.20)$$

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.60.

$$G_{C_o, T_{0.60}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{1.75298209}{0.039611818s + 1} e^{-0.00580809s}} = \frac{0.00000851429e^{-0.26164191s}}{0.772355909s + 1} \quad (3.21)$$

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.70.

$$G_{C_o, T_{0.70}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{1.316137313}{0.028253541s + 1} e^{-0.00479054s}} = \frac{0.0000113403e^{-0.26265946s}}{0.766676771s + 1} \quad (3.22)$$

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.80.

$$G_{C_o, T_{0.80}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{1.063397015}{0.022297462s + 1} e^{-0.00398953s}} = \frac{0.0000140356e^{-0.26346047s}}{0.763698731s + 1} \quad (3.23)$$

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.90.

$$G_{C_o, T_{0.90}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{0.901365672}{0.01863696s + 1} e^{-0.00342775s}} = \frac{0.0000165587e^{-0.26402225s}}{0.76186848s + 1} \quad (3.24)$$

Relación entre la composición de salida y la temperatura del reactor en el punto 0.95.

$$G_{C_o, T_{0.95}}(s) = \frac{\frac{0.0000149254}{0.75255s + 1} e^{-0.26745s}}{\frac{0.840692537}{0.017234589s + 1} e^{-0.00324009s}} = \frac{0.0000177537e^{-0.26420991s}}{0.761167295s + 1} \quad (3.25)$$

### 3.3. Diseño de controladores

Los controladores se diseñaron mediante internal model control (IMC). (Grimholt y Skogestad, 2018). Se empleó la estructura de control conformada por un lazo de control primario (Proporcional Integral) y de un lazo secundario (Proporcional).

Cálculo de la ganancia proporcional integral del lazo primario relación de la composición y temperatura en cada sección del reactor (3.14) – (3.24).

$$K_{C_p} = \frac{1}{K} \left( \frac{\tau}{2 * \theta} \right) \quad (3.25)$$

Cálculo de la ganancia proporcional del lazo secundario aplicado a función de transferencia que relaciona la temperatura en un punto determinado del reactor con la temperatura de la chaqueta (3.2) – (3.12).

$$K_{C_s} = \frac{1}{K} \left( \frac{\tau}{2 * \theta} \right) \quad (3.36)$$

En la Tabla 3.2 se pueden observar los parámetros obtenidos para el desarrollo del controlador.

Tabla 3.2. Parámetros del controlador en cascada utilizando los pasos de IMC.

Control	Punto de medición	Controlador primario		Controlador secundario
		$K_{C_p}$ ( $m^3 K mol^{-1}$ )	$\tau_I$	$K_{C_s}$ ( $m^3 K mol^{-1}$ )
$C_{z1}$	0.05	240600.2976	0.781941232	1.84565193
$C_{z2}$	0.10	409028.8073	0.804100594	1.37119252
$C_{z3}$	0.20	587412.7816	0.833504086	1.6569732
$C_{z4}$	0.30	548863.3944	0.831355211	2.17928775
$C_{z5}$	0.40	395960.5741	0.806383437	1.91856673
$C_{z6}$	0.50	256974.3388	0.784076477	1.75019597

---

$C_{z7}$	0.60	173353.1464	0.772355909	1.94528825
$C_{z8}$	0.70	128695.9022	0.766676771	2.2405633
$C_{z9}$	0.80	103263.2117	0.763698731	2.62789655
$C_{z10}$	0.90	87133.11593	0.76186848	3.01602491
$C_{z11}$	0.95	81135.72925	0.761167295	3.16356433

---

### 3.4 Errores de modelado

En la Figura 3.14 se representan los errores de proceso para la producción de anhídrido maleico, la temperatura sufre variaciones importantes de longitud (0.7-1.5 m), esto provocado por la reacción exotérmica del proceso, provocando errores en las medidas de temperatura y desviando la estabilidad del modelo

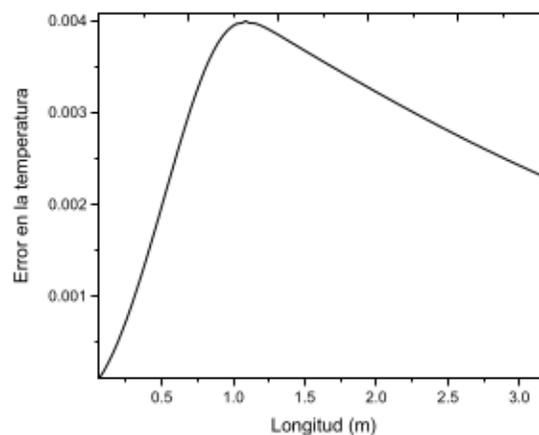


Figura 3.14. Error en la temperatura

El modelo presenta un error constante en las medidas de concentración, provocado por variaciones de temperatura en el reactor que se puede apreciar en la Figura 3.15

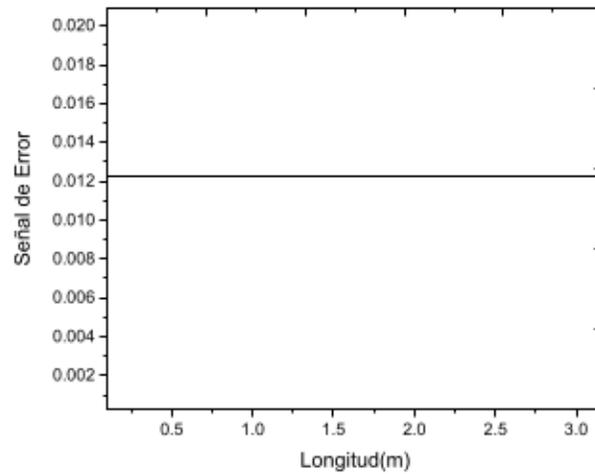


Figura 3.15. Señal de error de medición de temperatura

## **CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

## CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

La solución de modelos matemáticos para la comprensión del comportamiento dinámico de los procesos es de vital importancia para tener un panorama del proceso antes de la determinación experimental de datos ya que permite entender el comportamiento de los procesos sin necesidad de hacer gastos innecesarios en pruebas preliminares en procesos reales.

La solución obtenida para el modelo de producción de anhídrido maleico, mostró una respuesta similar a previas investigaciones por lo cual su modelamiento es válido con este método de solución numérica.

La caracterización del sistema por medio del cambio de temperatura en la chaqueta del reactor provoco un favorecimiento en la producción de anhídrido maleico, además de mitigar la producción de componentes no deseados, esto provocado por la competencia que existe entre las reacciones en el proceso. Lo que demuestra que las perturbaciones de temperatura afectaran la producción final de anhídrido maleico y disminuirá la producción de carbono y dióxido de carbono.

El método de solución de oxidación parcial de benceno mostró un error en la concentración y en la temperatura con respecto a los valores estimados en circuito abierto, por lo que se espera una menor concentración de anhídrido maleico a la salida del reactor debido a variaciones de temperatura en el proceso.

Para el seguimiento del proyecto, se recomienda explorar alternativas para la mitigación de componentes no deseados en el proceso, así como el aumento en la temperatura en la chaqueta del reactor para verificar si esta tiende a aumentar la producción de anhídrido maleico

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Castelan, R, C. E. Miguel, J. Puebla, y H. Martinez. 2016. A study of temperature sensor location based on fractal analysis for cascade control schemes in tubular reactors. *Chemical Engineering Science*. **141**(15): 195–204.

Cengel A. Y. 2007. Transferencia de Calor y Masa. McGraw-Hill, Nevada, USA.

Chapman, J. S. 2018. Fortran for Scientists and Engineers. McGraw-Hill, New York, USA

Grimholt C. y S, Skogestad. 2018. Optimal PI and PID control of first-order plus delay processes and evaluation of the original and improved SIMS rules. *Journal of process control*. **70**(5): 36-46

Fogler H., (2008). Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. 4 ed. Prentice Hall. México.

Hernandez, Espinoza, J., Urrea, Garcia, G.R. y Luna, Solano, G. (4-6 de octubre del 2017). Estructura de Control Variable en Cascada para Compensar Variaciones en Parámetros en un Reactor Tubular. Congreso Nacional de Control Automático. Monterrey, Nuevo León, Mexico

Israel, N., Alvares, J. R., Baratti, I. A. y C, Gutierrez. 2016. Control of an exothermic packed-bed tubular reactor. *ScienceDirect*. **49**(7): 278-283

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**(23): 526-533.

Laššák P., Labovský J. y 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**(1): 280–288.

Levenspiel, O. 2004. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. Limusa Wiley. México, Mexico

Luyben W. L. 1996. Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers. McGraw-Hill. New York, USA

Mehrotra A. 1989. Role of mathematical modelling in metallurgy. *springer link* **12**(3):353-368.

Navarro, L. J., C. Uribe, O. Navarro e. 2017. Cinética Química y Catalisis de modelos cinéticos en sistemas homogéneos. Universidad Politécnica de València, Valencia, España.

Ogata, K. 2003. Ingeniería de Control Moderna. Prentice Hall, Minnesota, USA

Reséndiz Camacho S., Urrea-García G.R., Luna-Solano G. y Bolaños-Reynoso E. 2012. Control en cascada composición-temperatura para un tipo de reactor tubular. *Memorias Del Congreso Nacional de Control Automático*. **34**(1): 113–118.

Romero, B., C. Moguel., H. Puebla y E. Hernández. 2017. Robust cascade control for chemical reactors: an approach based on modelling error compensation. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*. **15**(6): 1–6

Ronald, D. M., A. Mins, A. Saville. 1999. Chemical Reaction Engineering and Kinetics. John Wiley & Sons, Inc, Toronto, USA.

Smith C. A. y Corripio A. B., 2014. Control Automático de Procesos. Teoría y Práctica. Limusa Mexico, Mexico.

Steven C. C. y Raymond P. C., 2007. Métodos numéricos para ingenieros. McGraw-Hill, Mexico, Mexico.

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**(4): 97-106.

Van den Berg F. W. J, Hoefsloot H. C. J, Boelens H. F. M. y Smilde A. K. 2000. Selection of Optimal Sensor Position in a Tubular Reactor Using Robust Degree of Observability Criteria. *Chemical Engineering Science*. **55**(2): 827-837.