



**Universidad de Valladolid**



**ESCUELA DE INGENIERÍAS  
INDUSTRIALES**

**UNIVERSIDAD DE VALLADOLID**

**ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES**

**Grado en Ingeniería Química**

# **Diseño Integrado y Control de un Proceso de Reacción Exotérmica**

**Autor:**

**Sancho Albanchez, Marta**

**Tutor:**

**Gutiérrez Rodríguez, Gloria**

**Ingeniería de Sistemas y  
Automática**

**Valladolid, Mayo, 2015.**



## RESUMEN

El diseño habitual en las plantas de proceso sigue tres pasos fundamentales. A partir de unas especificaciones a cumplir se eligen las unidades que constituirán el proceso. Después se calcularán los parámetros y dimensiones de dichas unidades, así como las estructuras de control necesarias. Finalmente se calcularán los costes de todo el proceso diseñado para conseguir las especificaciones marcadas. Si en el último paso no se cumple o se supera un presupuesto, se debería volver a comenzar, y así hasta llegar al óptimo económico y de proceso. El diseño de proceso limita la respuesta dinámica alcanzable, lo cual es un problema importante en plantas con integración energética y másica, donde se necesiten respuestas dinámicas exigentes o en la incorporación de nuevos requerimientos medio ambientales y de seguridad. Para lograr la mejor respuesta dinámica sin violar los requisitos del proceso, la planta y su sistema de control deben diseñarse conjuntamente.

## Palabras clave

**Diseño integrado, Control, Sistemas Multivariables, Diseño de procesos.**



# ÍNDICE

<b>ÍNDICE.....</b>	<b>4</b>
<b>CAPÍTULO 1.- INTRODUCCIÓN:.....</b>	<b>6</b>
1.1.-RESUMEN [1].....	6
1.2.-MOTIVACIÓN Y ESTADO DEL ARTE: [2].....	6
1.3.- OBJETIVOS: .....	9
1.4.- METODOLOGÍA: .....	9
<b>CAPÍTULO 2.- FUNDAMENTOS TEÓRICOS:.....</b>	<b>12</b>
2.1.- DISEÑO DE REACTORES CSTR: [3].....	12
2.2.- INSTRUMENTACIÓN. [4] .....	13
2.3.- CONTROLADORES PID Y SINTONÍA. [5].....	14
2.3.1.- <i>Sintonía del PID</i> [6] .....	15
2.4.-ESTRUCTURAS DE CONTROL AVANZADO. ....	17
2.4.1.- <i>Control en cascada: [7]</i> .....	17
2.5.- SISTEMAS MULTIVARIABLES. MATRIZ RGA [8] .....	18
2.6.- SIMULACIÓN. ....	18
<b>CAPÍTULO 3.- DESCRIPCIÓN DEL PROCESO: [10] .....</b>	<b>20</b>
3.1.-DATOS DE CONSTANTES QUÍMICAS Y FÍSICAS DE REACTIVO Y PRODUCTO:.....	20
3.2.-DATOS DE LA REACCIÓN: .....	20
<b>CAPÍTULO 4.- EJECUCIÓN DEL PROYECTO.....</b>	<b>22</b>
4.1.- ESTUDIO DEL PROCESO. ....	22
4.1.1.- <i>Especificaciones y objetivos del proceso:</i> .....	22
4.2.- PROPUESTAS, ALTERNATIVAS.....	22
DISEÑO A: .....	23
DISEÑO B: .....	23
DISEÑO C: .....	25
4.3.- EVALUACIÓN POR SIMULACIÓN DE TODAS LAS ALTERNATIVAS.....	25
MODELO DEL DISEÑO A: <i>Un único reactor.</i> .....	26
MODELO DEL DISEÑO B: <i>Dos reactores en paralelo.</i> .....	26
MODELO DEL DISEÑO C: <i>Dos reactores en serie.</i> .....	27
4.4.- ANÁLISIS DINÁMICO DEL PROCESO. ....	28
4.4.1.- <i>Valores iniciales de los diseños:</i> .....	28
4.4.2.- <i>Simulación:</i> .....	28
4.4.3.- <i>Matriz RGA:</i> .....	30
4.5.- IMPLEMENTACIÓN DE LOS SISTEMAS DE CONTROL. ....	33
4.6.1.- <i>Sintonía de PI:</i> .....	34
4.6.2.- <i>Experimentos realizados.</i> .....	35
4.6.3.- <i>Estructuras en cascada.</i> .....	40
4.6.4.- <i>Sintonía estructuras en cascada.</i> .....	40
4.6.5.- <i>Experimentos realizados.</i> .....	43
4.6.-EVALUACIÓN ECONÓMICA DE LAS UNIDADES DE PROCESO UTILIZADAS. ....	46
4.6.1.- <i>Precio de los reactores:</i> .....	46

4.6.2.- Precio instrumentación:.....	47
4.6.3.- Precio reactivo, producto y refrigerante: .....	47
4.6.4.- Precio final de cada diseño: .....	48
4.7.-ANÁLISIS Y EVALUACIÓN DE LA OPERACIÓN. ....	49
<b>CAPÍTULO 5.- CONCLUSIONES FINALES. ....</b>	<b>50</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA: .....</b>	<b>52</b>
<b>ANEXO I: CÓDIGOS EN ECOSIMPRO. ....</b>	<b>54</b>
1.-CÓDIGOS EN LAZO ABIERTO:.....	54
Modelo A. (Fichero: Lazo_abierto.el).....	54
Modelo B. (Fichero: Paralelo.el) .....	56
Modelo C. (Fichero: Serie.el).....	59
2.-CÓDIGOS EN LAZO CERRADO.....	62
2.1.- Códigos de lazos cerrados PI simples: .....	62
DISEÑO A: (Fichero: PID.el).....	62
DISEÑO B: (Fichero: Paralelo_PID.el).....	64
DISEÑO C: (Fichero: Serie_PI.el).....	68
2.2.-Códigos en lazo cerrado estructura cascada. ....	71
DISEÑO A: (Fichero: CASCADA.el) .....	71
DISEÑO B: (Fichero: Paralelo_CASCADA.el) .....	74
DISEÑO C: (Fichero: Serie_CASCADA.el).....	77
<b>ANEXO II: SIMBOLOGÍA UTILIZADA.....</b>	<b>86</b>
<b>ANEXO III: TABLA COMPARATIVA.....</b>	<b>87</b>

## CAPÍTULO 1.- Introducción:

### 1.1.-Resumen [1]

El diseño habitual en las plantas de proceso sigue tres pasos fundamentales. A partir de unas especificaciones a cumplir se eligen las unidades que constituirán el proceso. Después se calcularán los parámetros y dimensiones de dichas unidades, así como las estructuras de control necesarias. Finalmente se calcularán los costes de todo el proceso diseñado para conseguir las especificaciones marcadas. Si en el último paso no se cumple o se supera un presupuesto, se debería volver a comenzar, y así hasta llegar al óptimo económico y de proceso.

Por otra parte, el diseño del proceso limita la respuesta dinámica alcanzable, lo cual es un problema importante en plantas nuevas con integración energética y másica, dónde se necesiten respuestas dinámicas exigentes o en la incorporación de nuevos requerimientos medio ambientales y de seguridad. Para lograr la mejor respuesta dinámica sin violar los requisitos del proceso, él mismo y su control deben diseñarse conjuntamente.

Para solucionar esto se propone un diseño integrado. Es decir, que se realicen a la vez el diseño de los equipos, parámetros, dimensionamiento y estructuras de control, y que se vayan teniendo en cuenta los costes que estos implican. Consiguiendo así un óptimo en menos tiempo ya que no será necesario replantear todo el problema desde el principio.

En este trabajo se hace un estudio de interacción entre diseño y control mediante simulación, tomando como objeto de estudio un proceso de reacción exotérmica. En la industria de procesos y concretamente en Petroquímica, los procesos de reacción y separación son los más importantes, ya que mediante ellos se obtienen productos finales o se procesan materias primas para obtener subproductos que puedan suministrarse a consumidores finales o son la base para otras industrias.

Además desde el punto de vista de control, estos procesos son difíciles de controlar por su naturaleza multivariable, y porque son procesos altamente no lineales. Exigen un adecuado diseño del sistema de control para evitar inestabilidad cuando sobre el mismo actúan perturbaciones o cambios bruscos en la operación.

### 1.2.-Motivación y Estado del arte: [2]

El concepto de diseño integrado se encuentra en la literatura desde hace unos 60 años aproximadamente, y ha llegado a la industria hace 40, dónde ya entonces se mencionaba su importancia. En 1943, Zieger y Nichols definieron la controlabilidad como “la capacidad del proceso para alcanzar y mantener el valor de equilibrio deseado”. También introdujeron un factor para

clasificar los procesos en términos de controlabilidad según el controlador utilizado.

Uno de los informes de los problemas en la industria causados por la ausencia de controlabilidad, fue realizado por Anderson (1996). El problema fue que se diseñó inadecuadamente un efluente de alimentación del sistema del intercambiador de calor. La energía de recirculación introducía una realimentación positiva que desestabilizaba el sistema para ciertas condiciones de operación. La planta no comenzó a funcionar a toda capacidad hasta que no se rediseñó el efluente de alimentación del sistema de intercambiador de calor.

Las primeras ideas de introducir la controlabilidad en el diseño fueron planteadas por Ichikawa (1975, 1976).

Durante las dos últimas décadas se han realizado estudios y se han obtenido resultados sobre el efecto del diseño del proceso en la controlabilidad. Varios investigadores han apuntado la necesidad de considerar las características de controlabilidad en las etapas de diseño para alertar a los ingenieros de los problemas potenciales y proporcionar algún medio de selección dentro de las alternativas posibles.

El trabajo de Douglas (1988) y colaboradores sobre la evaluación de la controlabilidad basado en modelos en estado estacionario, describe un procedimiento sistemático para evaluar la controlabilidad del proceso en las etapas de diseño, así como algunos aspectos económicos asociados al control. Para mejorar la controlabilidad en estado estacionario sugirieron tres alternativas.

1. Modificar las líneas de flujos para aumentar el número de variables manipuladas.
2. Rediseñar unidades y piezas del equipamiento para conseguir que las restricciones sobre el proceso nunca se conviertan en activas para todo el rango de perturbaciones.
3. Ignorar la optimización de las variables de operación menos importante ampliando así los grados de libertad del sistema.

El objetivo del análisis de controlabilidad que perseguían era determinar cuál de estas tres alternativas tiene menor efecto en el coste económico.

Sheffield (1992) proporcionó una perspectiva industrial sobre la necesidad de integrar el diseño y el control de sistemas.

Sobre la evaluación de la controlabilidad basada en modelos lineales dinámicos, puede decirse que dado un modelo lineal dinámico del proceso, y dados algunos objetivos relacionados al comportamiento deseado en lazo

cerrado ya algunas restricciones sobre la estructura del controlador, el objetivo es encontrar los parámetros óptimos del controlador y comparar a través de una magnitud de controlabilidad el comportamiento óptimo que se alcanza entre diferentes diseños.

Skogestad y Wolff (1992); han realizado contribuciones importantes en el análisis de la controlabilidad y en el estudio de la capacidad de adaptación dinámica de los sistemas. Ellos han introducido y analizado magnitudes de controlabilidad para la interacción de las variables y el rechazo de perturbaciones. También han investigado las características inherentes a un proceso que limitan su controlabilidad y han propuesto un procedimiento de síntesis de reguladores que consideran la estabilidad robusta en presencia de incertidumbres en los modelos y acciones en las perturbaciones.

Morari (1983) identificó las siguientes características del proceso que limitan el comportamiento del controlador independientemente del diseño del mismo:

- Comportamiento de fase no mínima.
- Limitaciones de los actuadores.
- Incertidumbres del modelo.
- Ocasionalmente la magnitud ruido puede tener un efecto dominante.

Psarris y Floudas (1991), utilizaron como un indicador de la sensibilidad del lazo cerrado sobre el error del modelo, el número de condición de la matriz de transferencia de la planta como una función de frecuencia.

Skogestad (1991) utiliza una combinación de la matriz de ganancias relativas de Bristol dependiente de la frecuencia (RGA) y de la ganancia de perturbación del sistema en lazo cerrado (CLDG) para enjuiciar la controlabilidad relativa de diseños alternativos. Estas herramientas han sido utilizadas en muchos estudios recientes. La RGA la introdujo Bristol (1966), y continúa siendo ampliamente utilizada en la industria como indicador de controlabilidad. CLDG lo introdujo Hovd y Skogestad (1991) basándose en una ganancia relativa de la perturbación que definió McAvoy (1985). También se aprecia que las magnitudes de controlabilidad en lazo abierto más utilizadas han sido introducidas por Skogestad y Morari: número de condición de perturbación y la combinación de la matriz de ganancias relativas de Bristol dependiente de la frecuencia y de la ganancia de perturbación del sistema en lazo cerrado, sumando otras magnitudes conocidas como el número de condición del sistema, los valores singulares, etc. En los casos en los cuales se fija e introduce en el diseño características dinámicas del proceso, es frecuente el uso de reguladores PID y controladores predictivos basados en modelos.

Se puede decir que hasta la fecha, las características de procesos que se han tratado de corregir en el marco del diseño integrado, por ser consideradas como limitantes para el buen comportamiento del control, han sido fundamentalmente los comportamientos en fase no mínima, las limitaciones de los actuadores y los tiempo de retardo, siendo por otro lado el factor de ahorro energético el objetivo económico más evaluado.

### **1.3.- Objetivos:**

El objetivo de este proyecto consiste en evaluar la interacción entre el diseño y control de un proceso de reacción exotérmica mediante simulación.

Partiendo de las especificaciones que se piden del producto final y del punto de operación, se proponen varias alternativas de proceso y se evalúan diferentes estrategias de control.

Se realiza un estudio y una evaluación de los diseños propuestos en cuanto a coste económico de inversión y operación y se evalúa el comportamiento dinámico del proceso en lazo cerrado, ante perturbaciones y frente a cambios de consignas o en el punto de operación.

El resultado de este trabajo confirma la importancia de realizar diseño y dimensionamiento de procesos conjuntamente con el sistema de control y sus parámetros.

### **1.4.- Metodología:**

En este apartado se resumen brevemente los pasos que se siguen en la resolución del TFG.

#### **1.- Estudio de estado del arte, definición:**

Se realiza un estudio del estado actual del diseño integrado y control de un proceso para adquirir los conocimientos necesarios para poder describir un punto de partida correcto para el TFG. (Todo esto ya se ha expuesto en el punto *1.2.- Motivación y Estado del arte.*)

#### **2.- Estudio del proceso:**

Se describe el proceso que se llevará a cabo, así como todas las constantes implicadas necesarias. También se incluyen las especificaciones marcadas así como el objetivo de producción a conseguir.

#### **3.- Propuestas, alternativas:**

Se proponen tres alternativas de posibles estructuras para llevar a cabo el proceso objeto de este TFG.

#### **4.- Evaluación por simulación de todas las alternativas.**

Se expondrán todas las ecuaciones implicadas en cada una de las propuestas que después se escribirán en EcosimPro. Se darán los grados de libertad en cada uno de los modelos y se definirán que variables serán.

#### **5.- Análisis dinámico del proceso.**

Se realizará un análisis a todas las propuestas en lazo abierto, observándose su comportamiento y resultados. Además se incluirá la matriz RGA del proceso que indicará la sensibilidad de las salidas frente a las entradas.

#### **6.-Estudio de los sistemas de control que se van a implementar.**

Se buscará un sistema de control industrial adecuado para el proceso.

#### **7.- Implementación de los sistemas de control.**

Con lo obtenido en el punto anterior se realizará un análisis en lazo cerrado de cada una de las estructuras. Primero se comenzará cerrando en lazo con lazos simples y después se implementará un sistema en cascada.

#### **8.- Evaluación económica de las unidades utilizadas**

Se listarán los precios de las estructuras utilizadas así como todo su equipamiento. Por equipamiento se entiende instrumentación necesaria y sistemas de control.

#### **9.- Análisis y evaluación de operación.**

Por último se realizará una comparativa entre las tres estructuras. Definiéndose finalmente cual será la mejor, atendiendo a criterios de rapidez en el control y economía en la estructura.



## CAPÍTULO 2.- Fundamentos teóricos:

En este capítulo se exponen brevemente las bases necesarias para realizar el proyecto. Estas bases han sido estudiadas en el grado y adquiridas gracias a las siguientes asignaturas: Fundamentos de automática, Diseño de reactores químicos, Control y Simulación de procesos químicos e Informática Industrial.

### 2.1.- Diseño de reactores CSTR: [3]

Un reactor CSTR es un tanque en el cual la masa reaccionante es continuamente agitada que se considera como una mezcla completa y, por lo tanto, se asume que sus propiedades son uniformes en todo el interior del reactor. La ecuación de diseño de un reactor de mezcla completa es:

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\tau}{C_{A0}} = \frac{X_A}{-r_A} \quad (\text{ec. 2.1.1})$$

Siendo  $V$ , el volumen del reactor,  $F_{A0}$ , el flujo molar del reactivo límite,  $\tau$ , el tiempo espacial,  $C_{A0}$ , la concentración del reaccionante A en la corriente de entrada,  $X_A$ , la conversión de A y  $r_A$ , la velocidad de reacción de A.

La velocidad de una reacción no catalítica depende de la concentración de reaccionante. Con respecto al reaccionante A, la ecuación de velocidad de reacción se expresa de la siguiente manera:

$$-r_A = k \cdot C_A^n$$

Siendo  $k$ , la constante específica de velocidad de reacción,  $n$ , el orden cinético de la reacción y  $C_A$ , la concentración del reactivo.

El orden de una reacción se determina experimentalmente y la constante de velocidad de reacción depende de la temperatura de la reacción y se puede calcular con la ecuación de Arrhenius, de la forma:

$$k = A \cdot e^{\left(\frac{-E_a}{R \cdot T}\right)}$$

Siendo  $A$ , el factor pre-exponencial,  $E_a$ , la energía de activación,  $T$ , la temperatura en escala absoluta y  $R$ , la constante universal de los gases.

Para simular un reactor CSTR con reacción de tipo cinético, cuya velocidad depende solamente de la concentración de uno de sus reaccionantes, el número de variables que se requieren para una especificación completa es de seis. Las variables que usualmente se especifican son el flujo calórico en la corriente de energía, la caída de presión en el tanque y el volumen del reactor, además de la energía de activación, el factor pre-exponencial y el orden de la reacción.

## 2.2.- Instrumentación. [4]

La instrumentación industrial es el grupo de elementos que sirven para medir, convertir, transmitir, controlar o registrar variables de un proceso con el fin de optimizar los recursos utilizados en éste. Es la correcta aplicación de los equipos propuestos para apoyar al usuario en la medición, regulación, observación, transformación, etc., de una variable dada en un proceso industrial.

Un sistema de instrumentación es una estructura compleja compuesta por conjuntos de instrumentos, un dispositivo de medida, conexiones entre estos elementos y unos programas que se encargan de automatizar el proceso y de garantizar la repetitividad de las medidas.

Un instrumento de medición es un dispositivo que transforma una variable física de interés, variable medida, en una forma apropiada para registrarla, visualizarla o simplemente detectarla, señal medida.

Un sistema de medición es una herramienta utilizada para cuantificar la variable medida.

El elemento clave fundamental de un sistema de instrumentación, es el elemento sensor. La función del sensor es percibir y convertir la entrada (variable física) percibida por el sensor, en una variable de la señal de salida.

El transductor, convierte la información enviada por el sensor en una señal detectable, la cual puede ser eléctrica, mecánica, óptica, u otra. El objetivo es convertir la información del sensor en una forma que pueda ser fácilmente cuantificada.

Para el correcto funcionamiento de un sistema de control es imprescindible una buena medida de la variable controlada y unas líneas de transmisión efectivas. Existe una gran cantidad de dispositivos de medida y su número aumenta día a día. Difieren entre sí tanto en el principio básico de medida como en su construcción.

<i>Variable de proceso medida</i>	<i>Dispositivo de medida</i>	<i>Comentarios</i>
Temperatura	Termopares Termómetros de resistencia Termómetros bimetalicos	} Sistemas más comunes para temperaturas relativamente bajas
Presión	Manómetros Tubos de Bourdon Diafragmas Elementos piezoeléctricos Elementos piezoresistivos	} Basados en la deformación de materiales elásticos } Utilizados para convertir la presión en una señal eléctrica
Caudal	Placas de orificio Medidores de Venturi Tubos de Dahl Medidores de turbina Ultrasonidos	} Basados en la medida de las pérdidas de carga del fluido
Nivel de líquidos	Medidas de conductividad Medidas dieléctricas Dispositivos de desplazamiento Flotadores	} Buenos con dos fases } Acoplados a convertidores de señal
Composición	Cromatógrafos pHmetros Analizadores IR Analizadores UV	Requiere tiempos de análisis largos } Conveniente para uno o dos compuestos químicos

Tabla 2.1: Lista de principales sensores utilizados en la industria.

### 2.3.- Controladores PID y sintonía. [5]

Un controlador PID se caracteriza por combinar tres acciones (P, I y D) mediante el siguiente algoritmo de control:

$$u(t) = K_p \left[ e(t) + \frac{1}{T_i} \int e(t) dt + T_d \frac{de(t)}{dt} \right] = P + I + D \quad (\text{ec.2.3.1})$$

*Acción proporcional (P):* es la acción que produce una señal proporcional a la desviación de la salida del proceso respecto al punto de consigna.

*Acción integral (I):* es la acción que produce una señal de control proporcional al tiempo que la salida del proceso ha sido diferente del punto de consigna.

*Acción derivativa (D):* es la acción que produce una señal de control proporcional a la velocidad con que la salida del proceso está cambiando respecto del punto de consigna.

*Constante de tiempo integral (Ti):* es el tiempo, generalmente expresado en minutos, que debe transcurrir para que la acción integral alcance (iguale o repita) a la acción proporcional.

*Constante de tiempo derivativa (Td):* es el intervalo de tiempo, generalmente expresado en minutos, en el que la acción derivativa adelanta a la acción proporcional.

Cada acción de control tiene una respuesta característica:

- La acción proporcional varía instantáneamente con el error y alcanza un valor estacionario cuando lo alcanza éste.
- La acción integral tiene en cuenta la historia pasada del error y se anula cuando se hace cero.
- La acción derivativa predice los cambios en el error y se anula cuando alcanza un valor estacionario.

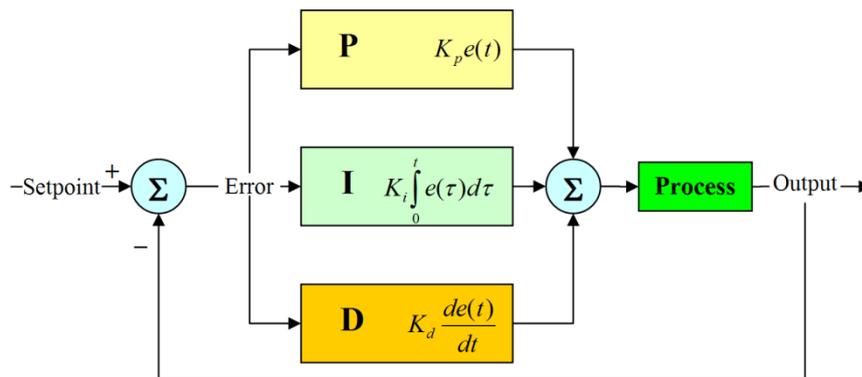


Figura 1: Esquema de la estructura PID

### 2.3.1.- Sintonía del PID [6]

Existen muchos métodos para la sintonía de los PID. A continuación se expondrán brevemente dos de los más utilizados. Estos métodos fueron propuestos por Ziegler y Nichols en 1942, quienes se basaron en la práctica para desarrollarlos.

#### ***Método de Respuesta en Frecuencia y Método de Respuesta al Escalón.***

1.-Método de respuesta en frecuencia: Se basa en un lazo de control solo con ganancia proporcional y de acuerdo a la ganancia utilizada para que el sistema empiece a oscilar y al período de esas oscilaciones, se podrán establecer las ganancias del controlador PID.

Este procedimiento solo es válido para plantas estables a lazo abierto. Se lleva a cabo siguiendo los siguientes pasos:

A) Utilizando solo control proporcional, comenzando con un valor de ganancia pequeño, incrementar la ganancia hasta que el lazo comience a oscilar. Notar que se requieren oscilaciones lineales y que estas deben ser observadas en la salida del controlador.

B) Registrar la ganancia crítica del controlador  $K_p = K_c$  y el período de oscilación de la salida del controlador,  $P_c$ .

C) Ajustar los parámetros del controlador según la Tabla 2.2:

	$K_p$	$T_i$	$T_d$
P	$0.50K_c$		
PI	$0.45K_c$	$\frac{P_c}{1.2}$	
PID	$0.60K_c$	$0.5P_c$	$\frac{P_c}{8}$

Tabla 2.2: Parámetros de ajuste, método de respuesta en frecuencia.

2.-Método de respuesta en escalón (método gráfico): Se basa en experimentar con el sistema en lazo abierto con un escalón unitario. Se calculan algunos parámetros, como la máxima pendiente de la curva y el retardo, y con ellos se establecen las ganancias del controlador PID.

Muchas plantas, pueden ser descritas satisfactoriamente por el modelo:

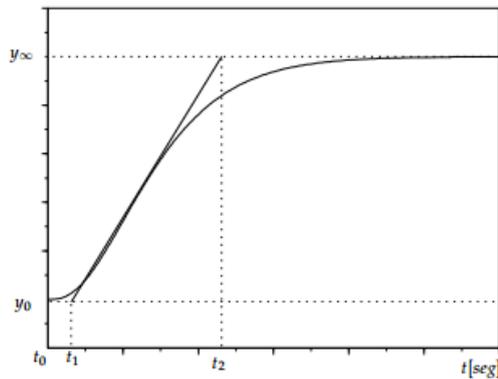
$$G(s) = \frac{K_0 \cdot e^{-s\tau_0}}{v_0 \cdot s + 1} \quad \text{donde } v_0 > 0$$

Este modelo se puede obtener mediante un experimento a lazo abierto, utilizando el siguiente procedimiento:

A) Con la planta a lazo abierto, llevar a la planta a un punto de operación normal. La salida de la planta se estabiliza en  $y(t) = y_0$  para una entrada constante  $u(t) = u_0$ .

B) En el instante inicial  $t_0$ , aplicar un cambio en la entrada de tipo escalón, desde  $u_0$  a  $u_\infty$ .

C) Registrar la salida hasta que se estabilice en el nuevo punto de operación. Se obtendrá una curva llamada curva de reacción del proceso. Calcular los parámetros del modelo de la siguiente forma:



$$K = \frac{\Delta y}{\Delta u}$$

$$\tau = t_1 - t_0$$

$$v_0 = t_2 - t_1$$

Figura 2: Curva de reacción del proceso

El modelo obtenido puede ser utilizado para varios métodos de ajuste de controladores PID. Uno de estos también fue propuesto por Ziegler y Nichols. El objetivo del diseño es alcanzar un amortiguamiento tal que exista una relación de 4:1 para el primer y segundo pico de la respuesta a un escalón. Los parámetros sugeridos por Z-N son los que se muestran en la Tabla 2.3.

	$K_p$	$T_i$	$T_d$
P	$\frac{v_0}{K_0 \tau_0}$		
PI	$\frac{0.9 v_0}{K_0 \tau_0}$	$3 \tau_0$	
PID	$\frac{1.2 v_0}{K_0 \tau_0}$	$2 \tau_0$	$0.5 \tau_0$

Tabla 2.3: Parámetros de ajuste (método curva de reacción)

#### 2.4.-Estructuras de control avanzado.

Se suelen aplicar ciertos cambios en los lazos de control simple buscando ciertas mejoras en el rechazo de perturbaciones, que exista un mantenimiento en las proporciones, que se pueda operar con varios objetos, controladores o actuadores, etc. Para conseguir esto se utilizan las estructuras de control avanzado. Estas pueden ser un control en cascada, un control ratio, un control feedforward, un control selectivo, etc.

##### 2.4.1.- Control en cascada: [7]

Se utiliza este tipo de estructura cuando se busca controlar variables intermedias, corrigiendo el efecto de las perturbaciones que les afectan antes de que afecten a la salida.

Estructura del control en cascada:

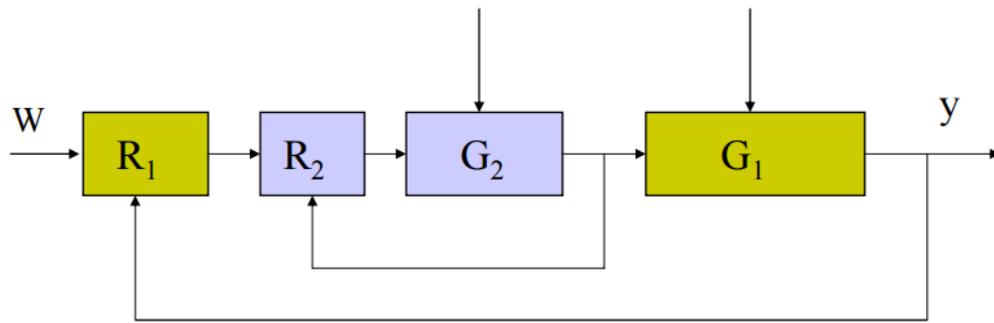


Figura 3: Estructura del control en cascada

El objetivo de esta estructura es corregir los efectos de las perturbaciones en el lazo interno.

Para poder utilizar esta estructura es necesario que la dinámica del lazo interno sea mucho más rápida que la del lazo externo.

### 2.5.- Sistemas multivariables. Matriz RGA [8]

Los sistemas multivariables son aquellos que poseen varias entradas y salidas, en los que una entrada afecta a varias salidas y recíprocamente una salida es afectada por varias entradas.

La interacción entre lazos en estos casos es complicada. El efecto de un lazo de control actúa sobre otro lazo de control que a su vez rebota dicho efecto en el lazo original.

No se pueden sintonizar los controladores de cada lazo de forma independiente. Hacerlo así podría significar inestabilidades en el sistema. Es necesaria una sintonización simultánea.

Para evaluar las interacciones entre variables se utiliza el método de Bristol de ganancias relativas. Este método permite evaluar las interacciones entre lazos en régimen permanente. Se siguen los siguientes pasos:

1. Definición de la matriz de ganancias relativas.
2. Cálculo de la matriz de ganancias relativas.
3. Análisis de la matriz de ganancias relativas.

La matriz de ganancias relativas o matriz RGA dará información sobre el emparejamiento de variables en lazos sencillos. La metodología de cálculo de la misma está explicada en el punto 4.4.3.- Matriz RGA.

### 2.6.- Simulación.

El programa elegido para llevar a cabo la simulación es EcosimPro [9].

Se ha elegido EcosimPro debido a que es una herramienta matemática de modelado y simulación de sistemas dinámicos. Estos han de ser representables por ecuaciones algebraico-diferenciales y eventos discretos.

El lenguaje EL le permite expresar de una manera sencilla las ecuaciones y los eventos que gobiernan cada componente

EcosimPro se encarga internamente de extraer las ecuaciones del modelo final, transformarlas simbólicamente, detectar problemas de exceso de variables, resolver automáticamente lazos algebraicos lineales y no lineales y reducir el índice (por medio de derivación simbólica) cuando se encuentre problemas determinados.

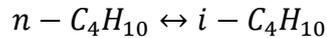
EcosimPro resuelve con el algoritmo de Runge Kutta 4. Todo esto permanece oculto al modelador, con lo cual se puede concentrar en el sistema físico a modelar, dejando a EcosimPro preocuparse de los aspectos complejos de manejo y optimización del modelo matemático.

Para ejecutar simulaciones EcosimPro tiene un monitor donde se puede seguir la evolución de cualquier variable gráficamente, pudiendo interaccionar y cambiar datos con el ratón de forma dinámica.

Además EcosimPro es uno de los programas utilizados en la carrera para la simulación de procesos.

### CAPÍTULO 3.- Descripción del proceso: [10]

La reacción elegida para el estudio es la isomerización de butano normal en fase líquida  $C_4H_{10}$  a isobutano. El isobutano es un producto valioso que se usa en la fabricación de aditivos para gasolina.



Para llevar a cabo la reacción se utiliza un catalizador líquido que aumenta la velocidad de reacción. La mezcla inicial se compone de un 90% en moles de n-butano y un 10% en moles de i-pentano. Este último se considera inerte, por lo que su acción sólo se ve reflejada en el cálculo de la velocidad de reacción.

El butano se introduce en fase vapor al reactor, el cual está presurizado a 10 bares. Para poder llevar a cabo la isomerización es necesario que el butano se encuentre en fase líquida. Por ello el reactor cuenta con un encamisado de refrigeración, que disminuirá la temperatura del butano para conseguir su cambio de fase y conseguir también que se dé la reacción de isomerización.

A la presión de 10 bares, el cambio de fase del butano se da a aproximadamente 353K (80°C).

#### 3.1.-Datos de constantes químicas y físicas de reactivo y producto:

La reacción que se lleva a cabo en el reactor ( $A \rightarrow B$ ) ha sido caracterizada por las siguientes constantes obtenidas a través de internet mediante el Chemistry book NIST [11]:

El butano a la entrada del reactor se encuentra a 390K (117°C), a una presión de 10 bares y en estado vapor, sus constantes son:

$$\rho_{butano} = 20.657 \frac{kg}{m^3}; \quad cp_{butano} = 2.287 \frac{kJ}{kg \cdot K}$$

El agua de refrigeración circulará por la camisa del reactor a presión de 1 bar y temperatura igual a 303K (30°C), por lo que será agua líquida.

$$\rho_{refrigeración} = 984.790 \frac{kg}{m^3}; \quad cp_{refrigeración} = 4.184 \frac{kJ}{kg \cdot K}$$

#### 3.2.-Datos de la reacción:

Obtenidos mediante un ejemplo de bibliografía [10]

$$\text{Coeficiente global de transmisión de calor: } U = 2022 \frac{kJ}{h \cdot m^2 \cdot K}$$

$$\text{Energía de activación de la reacción: } Ea = 65700 \frac{kJ}{kg \cdot mol}$$

$$\text{Constante de los gases: } R = 8.314 \frac{kJ}{kg \cdot mol \cdot K}$$

$$\text{Coeficiente de velocidad de reacción: } \beta = 3.03 h^{-1}$$

Calor de reacción:  $\Delta H = -69000 \text{ kJ}$

## CAPÍTULO 4.- Ejecución del proyecto.

En este capítulo se llevarán a cabo todos los puntos explicados en el apartado 1.4.-*Metodología*, basándose en los fundamentos teóricos descritos en el punto 2.-*Fundamentos teóricos*.

### 4.1.- Estudio del proceso.

Se dispone de un reactor de mezcla perfecta exotérmico continuo. En él se lleva a cabo una reacción de primer orden, A para dar B como producto.

Este reactor es parte de una línea de proceso, por lo que la concentración de reactivo A que llega es constante ( $C_{A0}$ ) y también lo es su caudal ( $q$ ). En cambio, la temperatura con la que llega el reactivo ( $T_e$ ) puede variar, por lo que se considerará como una perturbación del proceso.

El reactor lleva instalado un sistema de refrigeración/calefacción mediante un encamisado. En dicho sistema se podrá variar la cantidad de flujo de refrigerante ( $Fr$ ) para conseguir así que la temperatura dentro del reactor ( $T$ ) se mantenga constante e igual a la necesaria para que la reacción se lleve a cabo correctamente. El refrigerante utilizado es agua, el cual puede sufrir fluctuaciones de caudal debido a que procede de una torre de refrigeración instalada en la planta y por lo tanto, la temperatura del refrigerante ( $Tr$ ) podrá variar, siendo otra perturbación posible del proceso.

El producto B, sale del reactor con una concentración  $C_B$  y una temperatura igual a la del interior del reactor ( $T$ ).

#### 4.1.1.- Especificaciones y objetivos del proceso:

Las especificaciones con las que se trabajarán serán las correspondientes a la corriente de alimentación. Se sabe que dicha corriente tiene una concentración de reactivo fija  $C_{A0}$  en  $9.3 \text{ kmol/m}^3$  y que su caudal  $q$  es igual a  $1 \text{ m}^3/\text{h}$ . Inicialmente la temperatura de dicha corriente ( $T_e$ ) será  $390\text{K}$  ( $117^\circ\text{C}$ ).

También se sabe que inicialmente la temperatura con la que llega el refrigerante ( $Tr$ ) es de  $303\text{K}$  ( $30^\circ\text{C}$ ) y su caudal ( $Fr$ ) será de  $1 \text{ m}^3/\text{h}$ .

El objetivo del proceso es conseguir un 85% de conversión, lo que implicará conseguir a la salida del reactor una concentración de producto de aproximadamente  $C_B=7.905 \text{ kmol/m}^3$ .

### 4.2.- Propuestas, alternativas.

En el TFG se exponen tres alternativas del proceso, que consisten en distintas configuraciones desde el punto de vista del número de equipos y el tipo de conexión entre ellos.

A continuación se describen los modelos que describen las tres configuraciones propuestas.

### DISEÑO A:

La primera configuración del diseño del proceso, consta de un reactor exotérmico encamisado, como se muestra en la figura 4.

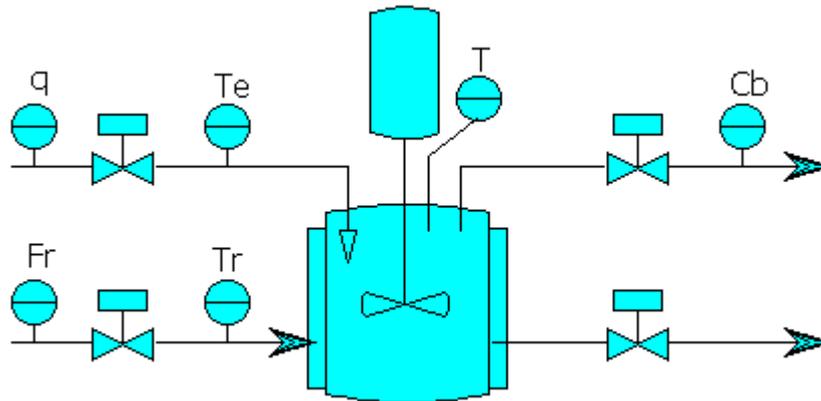


Figura 4: Diseño A, un único reactor.

Sus características geométricas son:

Diámetro:  $D = 0.64m$       Altura:  $L = 1m$

Volumen:  $V = 0.5 m^3$

Área de intercambio de calor:  $A = 2m^2$

Volumen de la camisa:  $V_c = 0.23 m^3$

La instrumentación que se incluye es:

En la línea de alimentación tendremos un medidor de flujo de reactivo ( $q$ ), y un medidor de temperatura ( $T_i$ ) además de la correspondiente válvula de corte. En el propio reactor habrá otro medidor para obtener datos de la temperatura interior ( $T$ ). En la línea de salida de producto se dispondrá de un medidor de concentración para el producto y una válvula de corte.

Para la entrada de refrigerante se disponen dos medidores, uno de caudal ( $Fr$ ) y otro de temperatura inicial ( $T_{re}$ ), y una válvula de corte. Por último en la corriente de salida de refrigerante se incluye un medidor de temperatura ( $Tr$ ) para medir cuánto se ha calentado o no el refrigerante.

### DISEÑO B:

En la figura 5, se muestra el segundo diseño alternativo al proceso, formado por dos reactores exotérmicos encamisados en paralelo. Los reactores son

idénticos de tamaño, y los materiales de los que están contruidos son iguales a la propuesta anterior.

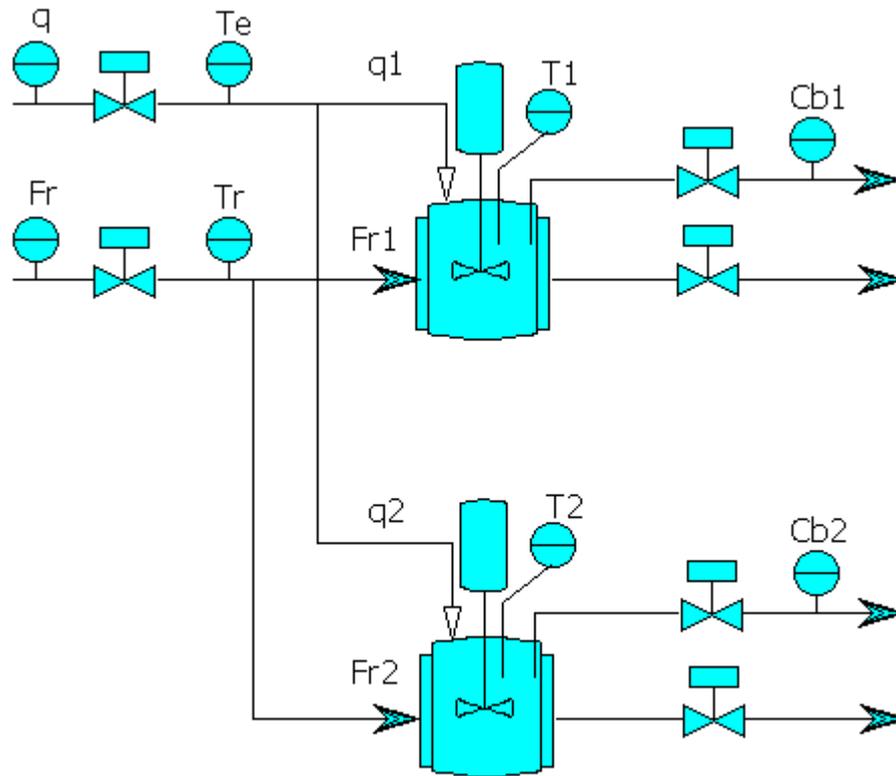


Figura 5: Diseño B, dos reactores en paralelo.

En este caso, la suma de los dos volúmenes de los reactores es igual al volumen del reactor del modelo A.

Sus características geométricas son:

Diámetro:  $D_1 = D_2 = 0.56m$       Altura:  $L_1 = L_2 = 1m$

Volumen:  $V_1 = V_2 = 0.25 m^3$

Área de intercambio de calor:  $A_1 = A_2 = 1m^2$

Volumen de la camisa:  $V_{c1} = V_{c2} = 0.12 m^3$

La instrumentación que se incluye es:

Para cada uno de los reactores se incluirá la misma instrumentación expuesta para el modelo A. Por lo que en este modelo se tendrá el doble de instrumentación que en el anterior.

### DISEÑO C:

La tercera configuración se compone de dos reactores exotérmicos encamisados del mismo material que los anteriores, pero conectados en serie, donde el primero es de mayor tamaño que el segundo, como se puede ver en la figura 6.

La suma de volúmenes es igual al volumen del modelo A. Pero en este caso los reactores no poseen el mismo volumen. El primer reactor es de mayor volumen que el segundo.

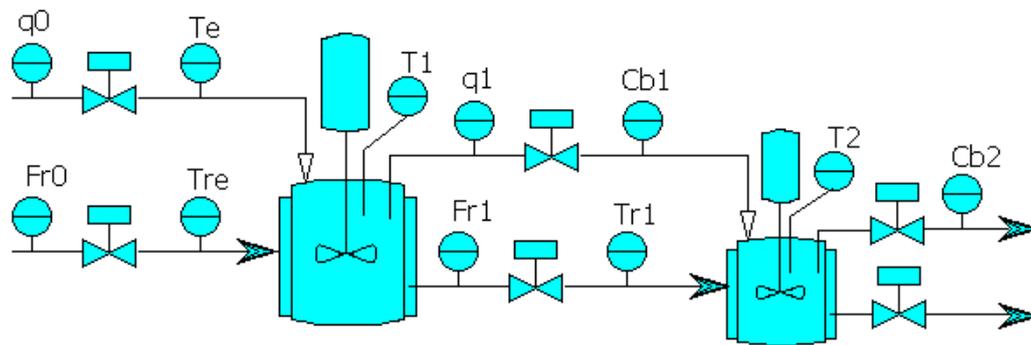


Figura 6: Diseño C, dos reactores en serie.

Sus características geométricas son:

Diámetros:  $D_1 = 0.62 \text{ m}$      $D_2 = 0.50 \text{ m}$     Alturas:  $L_1 = 1 \text{ m}$      $L_2 = 1 \text{ m}$

Volúmenes:  $V_1 = 0.3 \text{ m}^3$      $V_2 = 0.2 \text{ m}^3$

Áreas de intercambio de calor:  $A_1 = 0.6 \text{ m}^2$      $A_2 = 0.4 \text{ m}^2$

Volumen de la camisa:  $V_{c1} = 0.14 \text{ m}^3$      $V_{c2} = 0.09 \text{ m}^3$

La instrumentación que se incluye es:

En total existen seis válvulas de corte, una en cada corriente implicada en el proceso. Cuatro caudalímetros para medir el caudal del refrigerante y de la alimentación en ambos reactores. Seis termómetros encargados de medir las temperaturas del refrigerante y la alimentación. Y por último se dan 2 medidores de concentración dispuestos en las salidas de cada reactor para medir las concentraciones de producto.

*Nota: Todos los modelos dibujados siguen la norma UNE-EN-ISO-10682-2001 [12]*

### 4.3.- Evaluación por simulación de todas las alternativas.

A continuación se presentan los modelos matemáticos que describen los diseños propuestos, y que se resuelven en simulación en EcosimPro.

Los modelos están basados en balances de masa y de energía, junto con ecuaciones algebraicas que describen y dimensionan de la planta

### MODELO DEL DISEÑO A: Un único reactor.

Balances de materia:

$$\text{Compuesto A: } V \cdot C_A = q \cdot (C_{A0} - C_A) - V \cdot k \cdot C_A \quad (\text{ec. 4.3.1})$$

$$\text{Compuesto B: } C_B = C_{A0} - C_A \quad (\text{ec. 4.3.2})$$

Balance de energía en el interior del reactor:

$$V \cdot \rho_A \cdot Cp_A \cdot T' = q \cdot \rho_A \cdot Cp_A \cdot (T_e - T) - V \cdot k \cdot C_A \cdot dH + Q \quad (\text{ec. 4.3.3})$$

Balance de energía en la camisa de refrigeración:

$$V_r \cdot \rho_r \cdot Cp_r \cdot Tr' = Fr \cdot \rho_r \cdot Cp_r \cdot (Tr_e - Tr) - Q \quad (\text{ec. 4.3.4})$$

$$\text{Calor: } Q = U \cdot A \cdot (Tr - T) \quad (\text{ec. 4.3.5})$$

$$\text{Velocidad de reacción del componente A: } k = 3.03 \cdot e^{\left[\frac{dH}{R} \left(\frac{T-333}{333-T}\right)\right]} \quad (\text{ec. 4.3.6})$$

$$\text{Conversión: } x = \frac{C_B}{C_{A0}} \quad (\text{ec. 4.3.7})$$

Se dispone de un sistema compuesto por 7 ecuaciones (balances de masa, de energía, velocidad de reacción, estequiometría,...) y 9 variables, por lo tanto quedan 2 grados de libertad.

$$\text{Grados de libertad} = N^{\circ} \text{ variables} - N^{\circ} \text{ ecuaciones} = 9 - 7 = 2$$

Dichos grados de libertad les corresponden a las variables de flujo, es decir al flujo de refrigerante  $Fr$  y al de alimentación  $q$ .

### MODELO DEL DISEÑO B: Dos reactores en paralelo.

El sistema ahora se compone de 14 ecuaciones y 18 variables por lo que se tienen cuatro grados de libertad. Los cuales los ocuparán las cuatro variables de flujo correspondientes al refrigerante  $Fr_1$  y  $Fr_2$ , y los correspondientes al flujo de alimentación  $q_1$  y  $q_2$ .

Balances de materia:

Compuesto A:

$$\text{Primer reactor: } V_1 \cdot C_{A1} = q_1 \cdot (C_{A0} - C_{A1}) - V_1 \cdot k_1 \cdot C_{A1} \quad (\text{ec. 4.3.8})$$

$$\text{Segundo reactor: } V_2 \cdot C_{A2} = q_2 \cdot (C_{A0} - C_{A2}) - V_2 \cdot k_2 \cdot C_{A2} \quad (\text{ec. 4.3.9})$$

Compuesto B:

$$\text{Primer reactor: } C_{B_1} = C_{A_0} - C_{A_1} \quad (\text{ec. 4.3.10})$$

$$\text{Segundo reactor: } C_{B_2} = C_{A_0} - C_{A_2} \quad (\text{ec. 4.3.11})$$

Balance de energía en el interior del reactor:

$$1^{\text{er}} \text{ reactor: } V_1 \cdot \rho_A \cdot C_{p_A} \cdot T'_1 = q_1 \cdot \rho_A \cdot C_{p_A} \cdot (T_e - T_1) - V_1 \cdot k_1 \cdot C_{A_1} \cdot dH + Q_1$$

$$2^{\text{o}} \text{ reactor: } V_2 \cdot \rho_A \cdot C_{p_A} \cdot T'_2 = q_2 \cdot \rho_A \cdot C_{p_A} \cdot (T_e - T_2) - V_2 \cdot k_2 \cdot C_{A_2} \cdot dH + Q_2$$

Balance de energía en la camisa de refrigeración:

$$1^{\text{er}} \text{ reactor: } V_{r_1} \cdot \rho_r \cdot C_{p_r} \cdot Tr'_1 = Fr_1 \cdot \rho_r \cdot C_{p_r} \cdot (Tr_e - Tr_1) - Q_1 \quad (\text{ec. 4.3.14})$$

$$2^{\text{o}} \text{ reactor: } V_{r_2} \cdot \rho_r \cdot C_{p_r} \cdot Tr'_2 = Fr_2 \cdot \rho_r \cdot C_{p_r} \cdot (Tr_e - Tr_2) - Q_2 \quad (\text{ec. 4.3.15})$$

Calor:

$$1^{\text{er}} \text{ reactor: } Q_1 = U \cdot A_1 \cdot (Tr_1 - T_1) \quad (\text{ec. 4.3.16})$$

$$2^{\text{o}} \text{ reactor: } Q_2 = U \cdot A_2 \cdot (Tr_2 - T_2) \quad (\text{ec. 4.3.17})$$

Velocidad de reacción del componente A:

$$1^{\text{a}} \text{ reacción: } k_1 = 3.03 \cdot e^{\left[ \frac{dH}{R} \cdot \left( \frac{T_1 - 333}{333 \cdot T_1} \right) \right]} \quad (\text{ec. 4.3.18})$$

$$2^{\text{a}} \text{ reacción: } k_2 = 3.03 \cdot e^{\left[ \frac{dH}{R} \cdot \left( \frac{T_2 - 333}{333 \cdot T_2} \right) \right]} \quad (\text{ec. 4.3.19})$$

$$\text{Conversión: } 1^{\text{er}} \text{ reactor: } x_1 = \frac{C_{B_1}}{C_{A_0}} \quad (\text{ec. 4.3.20}) \quad 2^{\text{o}} \text{ reactor: } x_2 = \frac{C_{B_2}}{C_{A_0}} \quad (\text{ec. 4.3.21})$$

**MODELO DEL DISEÑO C: Dos reactores en serie.**

Este modelo varía un poco respecto a los anteriores. En este caso la conversión en el primer tanque se fija, no se calcula, Además las salidas del primer tanque son las entradas del segundo.

Balances de materia:

Compuesto A:

$$\text{Primer reactor: } V_1 \cdot C_{A_1} = q \cdot (C_{A_0} - C_{A_1}) - V_1 \cdot k_1 \cdot C_{A_1} \quad (\text{ec. 4.3.22})$$

$$\text{Segundo reactor: } V_2 \cdot C_{A_2} = q \cdot (C_{A_1} - C_{A_2}) - V_2 \cdot k_2 \cdot C_{A_2} \quad (\text{ec. 4.3.23})$$

Compuesto B:

$$\text{Primer reactor: } C_{B_1} = C_{A_0} - C_{A_1} \quad (\text{ec. 4.3.24})$$

$$\text{Segundo reactor: } C_{B_2} = C_{B_1} + (C_{A_1} - C_{A_2}) \quad (\text{ec. 4.3.25})$$

Balance de energía en el interior del reactor:

$$1^{\text{er}} \text{ reactor: } V_1 \cdot \rho_A \cdot C_{p_A} \cdot T'_1 = q \cdot \rho_A \cdot C_{p_A} \cdot (T_e - T_1) - V_1 \cdot k_1 \cdot C_{A_1} \cdot dH + Q_1$$

$$2^{\circ}\text{reactor: } V_2 \cdot \rho_A \cdot Cp_A \cdot T'_2 = q \cdot \rho_A \cdot Cp_A \cdot (T_1 - T_2) - V_2 \cdot k_2 \cdot C_{A2} \cdot dH + Q_2$$

Balance de energía en la camisa de refrigeración:

$$1^{\text{er}}\text{reactor: } V_{r1} \cdot \rho_r \cdot Cp_r \cdot Tr'_1 = Fr \cdot \rho_r \cdot Cp_r \cdot (Tr_e - Tr_1) - Q_1 \quad (\text{ec. 4.3.28})$$

$$2^{\circ}\text{reactor: } V_{r2} \cdot \rho_r \cdot Cp_r \cdot Tr'_2 = Fr \cdot \rho_r \cdot Cp_r \cdot (Tr_1 - Tr_2) - Q_2 \quad (\text{ec. 4.3.29})$$

Calor:

$$1^{\text{er}}\text{reactor: } Q_1 = U \cdot A_1 \cdot (Tr_1 - T_1) \quad (\text{ec. 4.3.30})$$

$$2^{\circ}\text{reactor: } Q_2 = U \cdot A_2 \cdot (Tr_2 - T_2) \quad (\text{ec. 4.3.31})$$

Velocidad de reacción del componente A:

$$1^{\text{a}} \text{ reacción: } k_1 = 3.03 \cdot e^{\left[\frac{dH}{R} \cdot \left(\frac{T_1 - 333}{333 \cdot T_1}\right)\right]} \quad (\text{ec. 4.3.32})$$

$$2^{\text{a}} \text{ reacción: } k_2 = 3.03 \cdot e^{\left[\frac{dH}{R} \cdot \left(\frac{T_2 - 333}{333 \cdot T_2}\right)\right]} \quad (\text{ec. 4.3.33})$$

$$\text{Conversión: } 1^{\text{er}} \text{ reactor: } x_1 = \frac{C_{B1}}{C_{A0}} \quad (\text{ec. 4.3.34}) \quad 2^{\circ} \text{ reactor: } x_2 = \frac{C_{B2}}{C_{A0}} \quad (\text{ec. 4.3.35})$$

El sistema tiene 14 ecuaciones y 16 variables por lo que los grados de libertad serán 2, ocupados por las variables de flujo Fr y q.

#### 4.4.- Análisis dinámico del proceso.

Se estudia el lazo abierto de todos los modelos. Se introducen las especificaciones dadas (punto 4.1.1) y se observan los resultados obtenidos.

##### 4.4.1.- Valores iniciales de los diseños:

Diseño A	Diseño B	Diseño C
$q = 1 \frac{m^3}{h}$	$q_1 = 0.5 \frac{m^3}{h} \quad q_2 = 0.5 \frac{m^3}{h}$	$q = 1 \frac{m^3}{h}$
$Fr = 1 \frac{m^3}{h}$	$Fr_1 = 0.5 \frac{m^3}{h} \quad Fr_2 = 0.5 \frac{m^3}{h}$	$Fr = 1 \frac{m^3}{h}$
$C_{A0} = 9.3 \frac{kmol}{m^3}$	$C_{A0} = 9.3 \frac{kmol}{m^3}$	$C_{A0} = 9.3 \frac{kmol}{m^3}$
$Te = 390K$	$Te = 390K$	$Te = 390K$
$Tr_e = 303K$	$Tr_e = 303K$	$Tr_e = 303K$

Los códigos completos se encuentran en el **Anexo 1**, en el apartado **1.Códigos en lazo abierto**.

##### 4.4.2.- Simulación:

Conversiones alcanzadas en cada diseño:

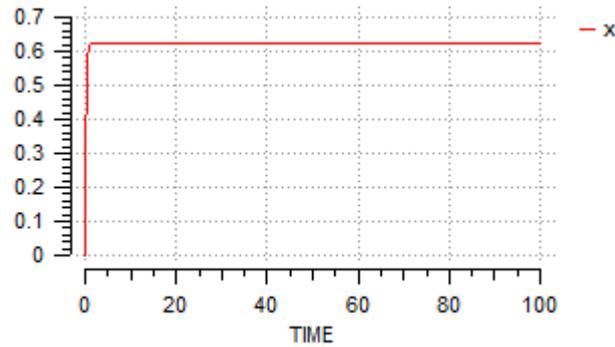


Figura 7: Conversión alcanzada en diseño A

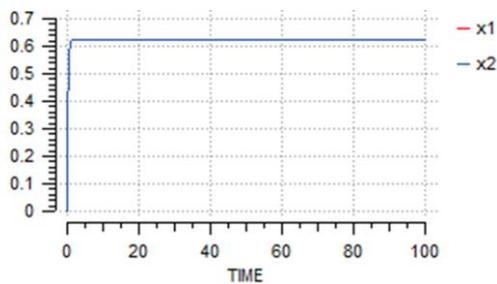


Figura 9: Conversión alcanzada diseño B

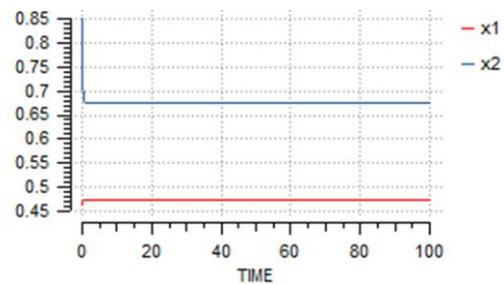


Figura 8: Conversión alcanzada diseño C

Ninguno de los tres diseños consigue llegar a la conversión objetivo del 85%. Los modelos A y B, consiguen una conversión igual al 62%. En el diseño C, en el primer reactor se consigue una conversión del 47% y en el segundo reactor la conversión sube hasta 68%. (En el modelo C la conversión del segundo tanque es igual a la global de toda la reacción, puesto que no se calcula independientemente del primer reactor, si no que  $x_2$  es la suma de lo ya alcanzado anteriormente más lo reaccionado en el segundo tanque).

Para los tres diseños es posible alcanzar los valores necesarios de las variables cumpliéndose el objetivo del 85% en conversión. El problema es que los procesos están sujetos a perturbaciones, y cuando el proceso está sin un sistema de control automático, el mismo no es capaz de mantener la operación en las especificaciones pedidas. Por ello se requiere un sistema de control automático capaz de mantener todas las variables en los valores deseados.

A continuación se exponen los valores obtenidos en el diseño A y un ejemplo de perturbación:

Para conseguir  $x=0.85$  basta con disminuir el caudal de alimentación  $q$  de  $1\text{m}^3/\text{h}$  hasta  $0.32\text{m}^3/\text{h}$ , manteniendo el resto de variables en los valores iniciales.

En  $\text{TIME}=100$  se produce una perturbación en la temperatura de entrada del refrigerante,  $T_{re}$ , que pasa de 300 K a 323 K. (Fig.10)

Se observa en las figuras 11 y 12, como el sistema cambia, pero el valor de la temperatura no recupera su valor de operación. Podría lograrse manualmente pero realizar esta tarea en la industria no es viable.

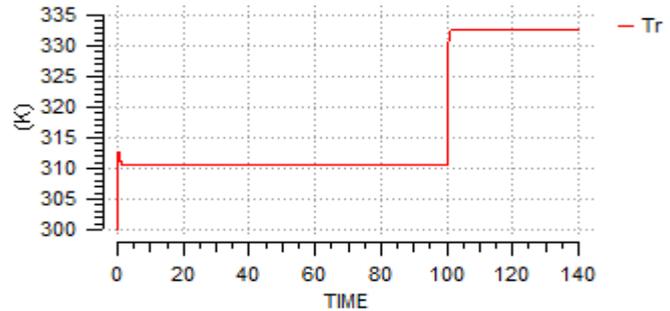


Figura 10: Perturbación Tr

La conversión aumenta, así como lo hace la temperatura.

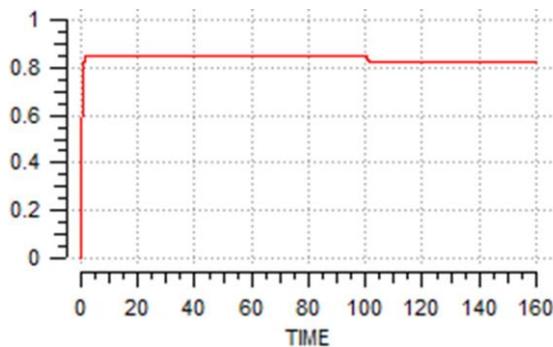


Figura 11: Cambio conversión ante perturbación

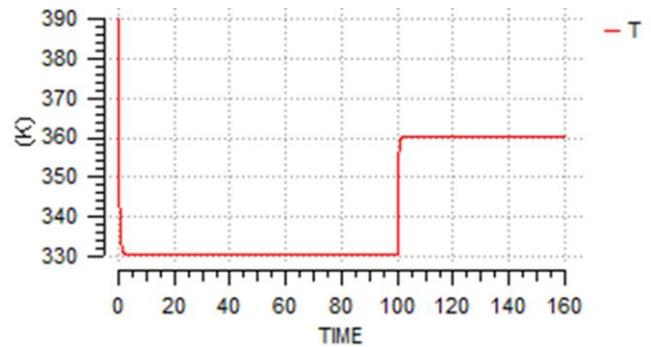


Figura 12: Cambio T ante perturbación

La temperatura aumenta debido a que el refrigerante entra más caliente, por lo que la diferencia de temperaturas entre reactor y camisa es menor. El intercambio de calor es menor.

Debido al aumento de temperatura la conversión baja, esto es así ya que al haber más temperatura la isomerización de A a B no se produce en la misma cantidad. Se necesita una temperatura baja (en comparación a los 390K de entrada de la alimentación) para conseguir una mayor cantidad de producto, y por lo tanto una mayor conversión.

Como puede verse, este sistema es un sistema multivariable y por lo tanto existe una gran interacción entre las variables del proceso, por lo que para determinar dicho nivel de interacción y los posibles emparejamientos, se requiere calcular la matriz de ganancias estacionarias de Bristol.

#### 4.4.3.- Matriz RGA:

La matriz RGA o matriz de ganancias relativas se utiliza para emparejar variables en lazos sencillos. La metodología de cálculo de la misma es la siguiente:

1.- Se localizan las entradas y las salidas del sistema: En este caso, como entradas se tienen el caudal de refrigerante  $F_r$  y el caudal de alimentación  $q$ .

Las salidas son la concentración de producto  $C_b$  y la temperatura que lleva dicha corriente,  $T$ .

2.- Se dan saltos a las entradas y se observan las salidas para obtener los parámetros del modelo por métodos experimentales, donde la ganancia del modelo se obtiene como  $K = \frac{\Delta y}{\Delta u}$ , como se observa en la figura 13, la constante de tiempo del sistema  $\tau = 1.5 \cdot (t_2 - t_1)$ , y el retardo  $d = t_2 - \tau$ .

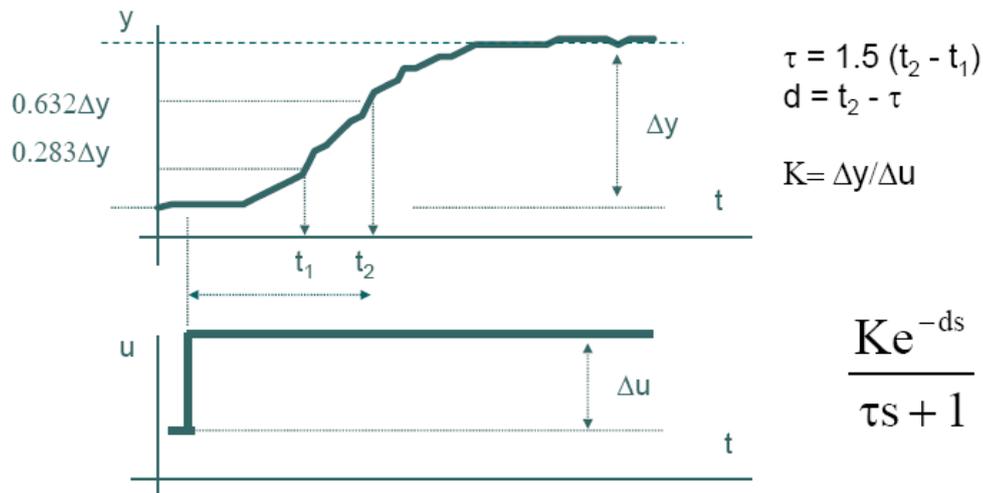


Figura 13: Método de identificación Ziegler-Nichols

En las figuras 15 y 16 se muestran los experimentos realizados ante un salto negativo en  $q$ , de  $1\text{m}^3/\text{h}$  a  $0.5\text{m}^3/\text{h}$ .

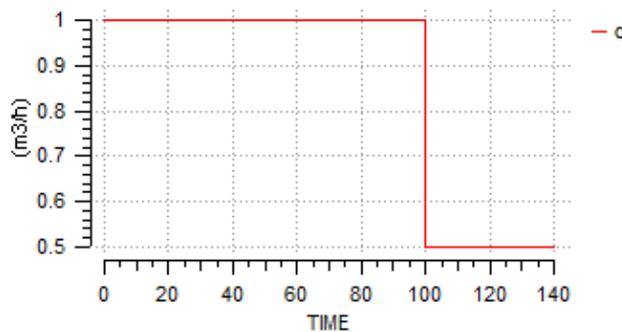


Figura 14: Salto en  $q$

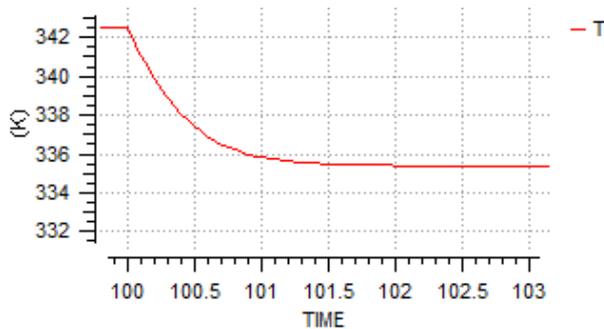


Figura 15: Cambio en  $T$  frente a  $q$

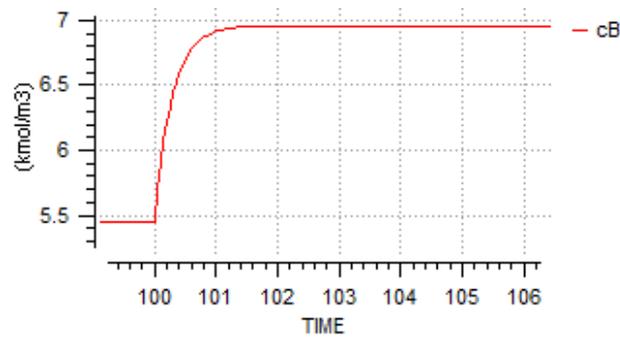
El modelo que relaciona la temperatura con el caudal de alimentación es el siguiente:

$$K = -14.260$$

$$\tau = 0.384, d = 0.19$$

$$G_{22} = \frac{-14.23 \cdot e^{-0.19s}}{0.384s + 1} \quad (\text{ec. 4.4.1})$$

Siendo la ecuación ec.4.4.2 el modelo que relaciona el caudal con la concentración de producto a la salida.



$$K = 3.040$$

$$\tau = 0.291$$

$$d = -0.004$$

$$G_{12} = \frac{3.04 \cdot e^{0.004s}}{0.291s + 1} \quad (\text{ec. 4.4.2})$$

Figura 16: Cambio en Cb frente a q

Para obtener los modelos que relacionan el caudal de refrigerante con la temperatura y concentración se realizaron los mismos experimentos cuyos resultados pueden verse en las figuras 18 y 19..

Se da un salto positivo a Fr, pasa de 1m<sup>3</sup>/h a 2m<sup>3</sup>/h.

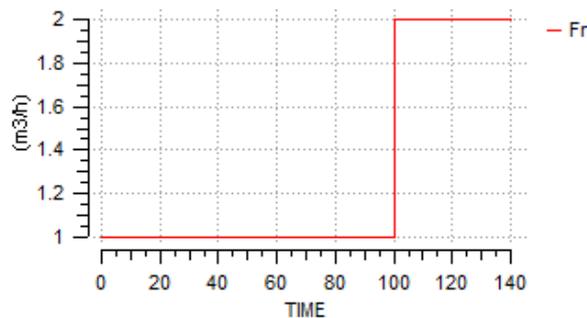
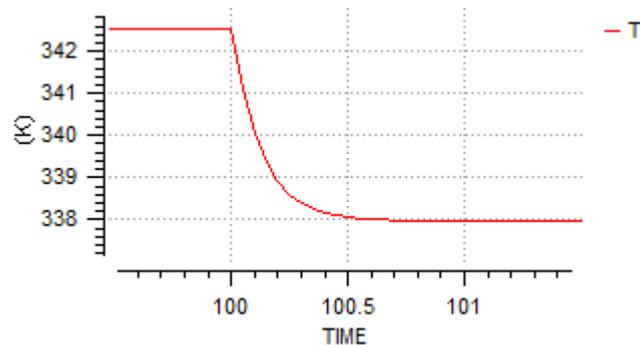


Figura 17: Salto en Fr

Los modelos obtenidos son los siguientes. La ecuación ec.4.4.3 describe el modelo que relaciona temperatura interior con el caudal de refrigerante.



$$K = -4.56$$

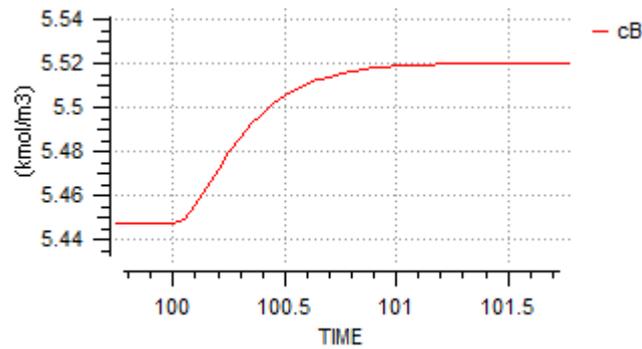
$$\tau = 0.126$$

$$d = 0.006$$

$$G_{21} = \frac{-4.56 \cdot e^{-0.006s}}{0.126s + 1} \quad (\text{ec. 4.4.3})$$

Figura 18: Cambio en T frente a Fr

La ecuación ec.4.4.4 es el modelo que relaciona la concentración final de producto con el caudal de refrigerante utilizado.



$$K = 0.074$$

$$\tau = 0.245$$

$$d = 0.109$$

$$G_{11} = \frac{0.074 \cdot e^{-0.109s}}{0.245s + 1} \quad (\text{ec. 4.4.4})$$

Figura 19: Cambio en  $C_B$  frente a  $F_R$

La matriz de ganancias estacionarias  $G$  queda:

$$\begin{bmatrix} C_B \\ T \end{bmatrix} = G \cdot \begin{bmatrix} F_R \\ q \end{bmatrix}; \quad G = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.074 & 3.04 \\ -4.56 & -14.23 \end{bmatrix}$$

3.-Utilizando de Matlab, se obtiene la matriz de ganancias relativas (RGA) mediante la siguiente expresión:  $RGA = G \cdot \text{pinv}(G)'$

$$RGA = \begin{bmatrix} -0.082 & 1.082 \\ 1.082 & -0.082 \end{bmatrix}$$

Donde las columnas se corresponden con los caudales  $F_R$  y  $q$  respectivamente y las filas a las salidas  $C_B$  y  $q$ .

Se observa que el elemento (1,1) de la matriz es negativo, lo que implica que ese emparejamiento no es deseable, al igual que el (2,2). Por lo que es evidente que la concentración de producto final debe ser controlada con el caudal de alimentación  $q$  y la temperatura en el interior del reactor se debe controlar con el caudal de refrigerante  $F_R$ .

#### 4.5.- Implementación de los sistemas de control.

Teniendo en cuenta las perturbaciones que pueden producirse en el sistema, para obtener un mayor rechazo de las mismas, se implementará una estructura de control automático que pueda operar automáticamente el sistema garantizando que las variables principales del mismo se mantengan en el rango requerido. Por tal motivo se implementan reguladores basados en señales, en este caso reguladores PID. Como se ha visto antes las parejas de los lazos están formadas por Temperatura con caudal de refrigerante y concentraciones con caudal de producto a la entrada.

Para los tres diseños se realizan los mismos experimentos modificando con funciones tipo salto a la perturbación, concretamente la temperatura de entrada del refrigerante ( $T_{re}$ ) y al valor de referencia de las variables controladas. Con el objetivo de valorar la respuesta dinámica del sistema en lazo cerrado.

Los códigos completos están incluidos al final del escrito en el **ANEXO I.- 2.- CÓDIGOS EN LAZO CERRADO: PI simples.**

**4.6.1.- Sintonía de PI:**

Diseño A: Figura 20

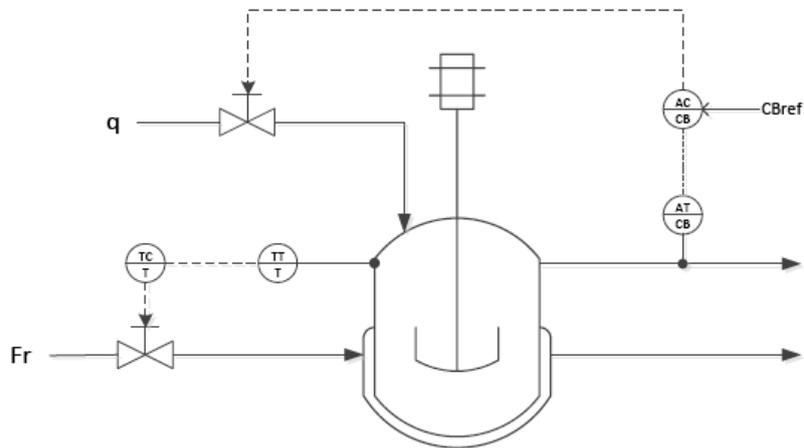


Figura 20: Esquema de control del diseño A

DISEÑO B: Figura 21

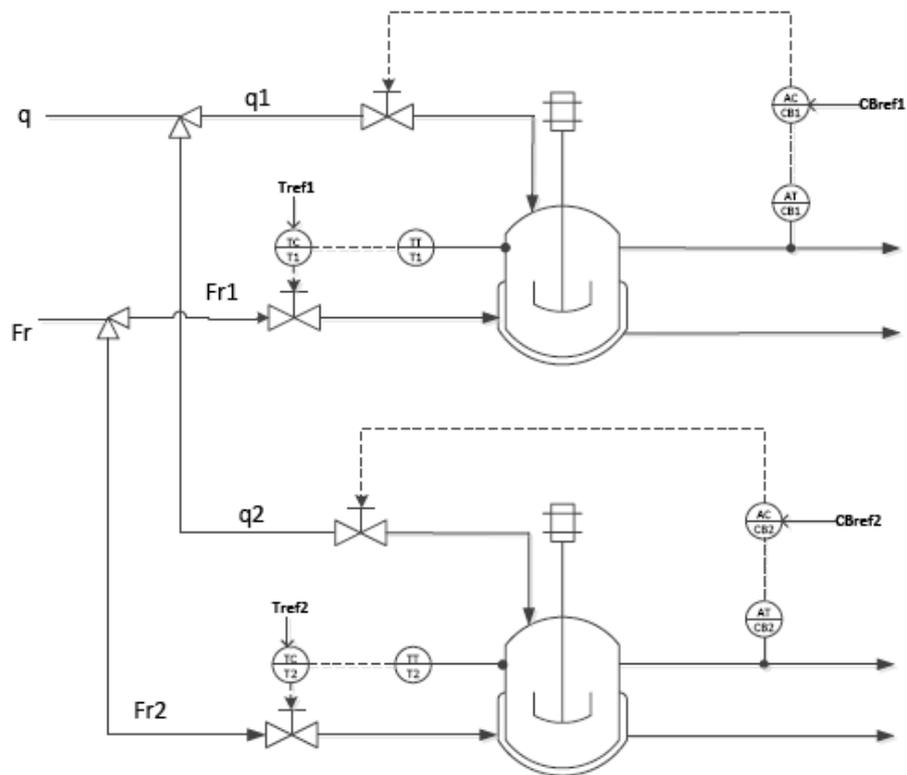


Figura 21: Esquema de control del diseño B

## DISEÑO C: Figura 22

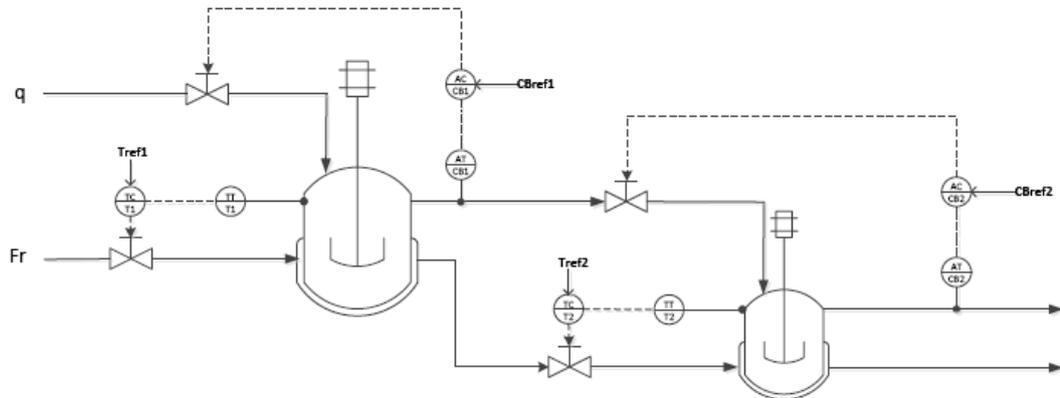


Figura 22: Esquema de control diseño C

Mediante experimentos realizados en simulación y por métodos de prueba y error se obtuvieron los siguientes parámetros de sintonía de los reguladores.

Para el diseño A las ganancias y los tiempos integrales son los siguientes:

$$K_{pT} = -5 \quad T_{iT} = 0.8$$

$$K_{pcb} = -0.2 \quad T_{icb} = 0.5$$

En el caso del diseño B los parámetros de sintonía de los reguladores son los siguientes:

$$K_{pT1} = -1 \quad T_{iT1} = 6 \quad K_{pT2} = -1 \quad T_{iT2} = 6$$

$$K_{pcb1} = -0.4 \quad T_{icb1} = 2 \quad K_{pcb2} = -0.4 \quad T_{icb2} = 2$$

Por último, en el diseño C, la sintonía obtenida es la que se muestra a continuación:

$$K_{pT1} = -2 \quad T_{iT1} = 6 \quad K_{pT2} = -120 \quad T_{iT2} = 8$$

$$K_{pcb1} = -6 \quad T_{icb1} = 1 \quad K_{pcb2} = -10 \quad T_{icb2} = 1$$

#### 4.6.2.-Experimentos realizados.

De cara a validar el funcionamiento del sistema en lazo cerrado, se realizaron experimentos ante cambios en el punto de consigna y ante perturbaciones.

1.- Salto en la consigna:  $C_{bref}=7.905 \text{ kmol/m}^3 \rightarrow 7.7 \text{ kmol/m}^3$ .

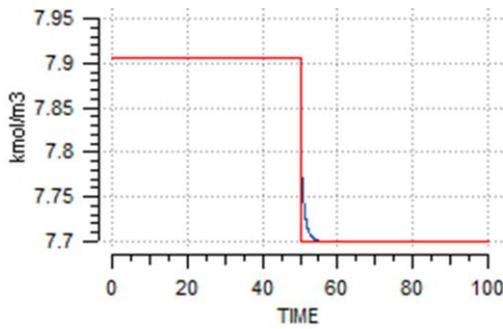


Figura 23: Cambios consigna Cbref diseño A

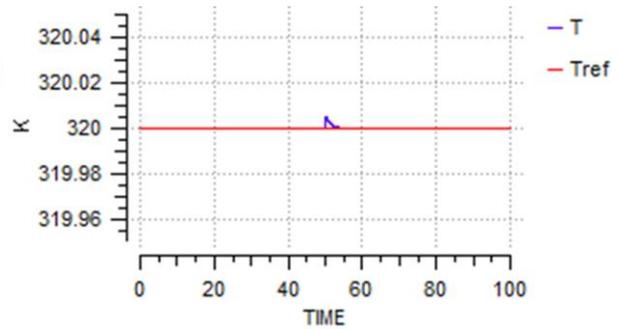


Figura 24: Cambios en T diseño A

En las figuras 23 y 24 se muestran la concentración del producto y su temperatura a la salida con sus respectivas referencias del diseño A.

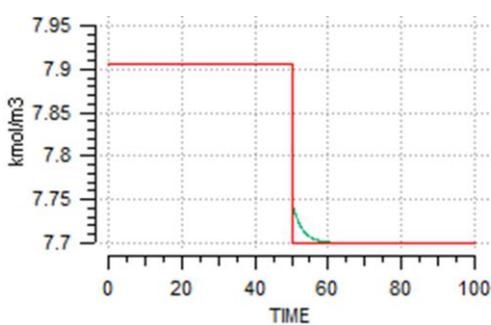


Figura 25: Cambios en Cbref1 y Cbref2 diseño B

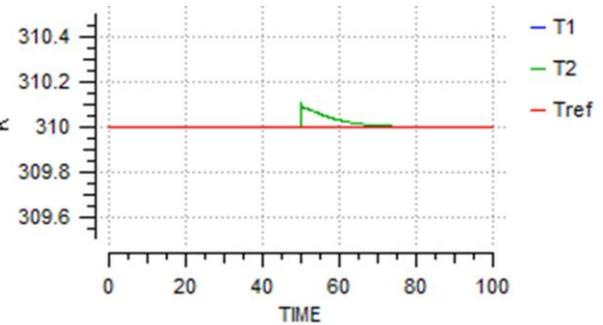


Figura 26: Salto en T1 y T2 en el diseño B

Las figuras 25 y 26 muestran la evolución de concentración de producto y su temperatura para el modelo B. Cb1 no se ve en los gráficos porque Cb2 esta superpuesta a ella, ambas variables siguen el mismo comportamiento.

Comparando estas figuras con las anteriores del diseño A, se observa que para regular la concentración el diseño B es más rápido, llega antes al nuevo valor. Pero en el caso del regulador de temperatura el diseño A es más eficiente. Como se observa en la figura 24, vemos que la variación que toma la temperatura es inferior a 0.02 °C mientras que en la figura 26 dicha variación llega a 0.1°C. También añadir que el tiempo en el que se alcanza la referencia en el diseño A es mucho menor que en el B.

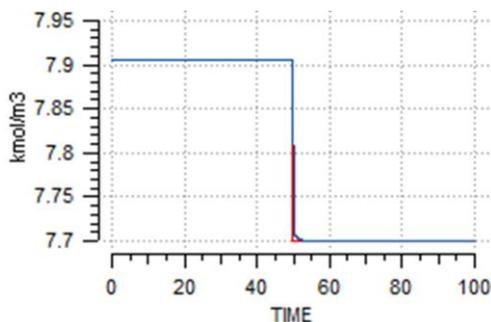


Figura 28: Cambios en consigna Cbref2 diseño C

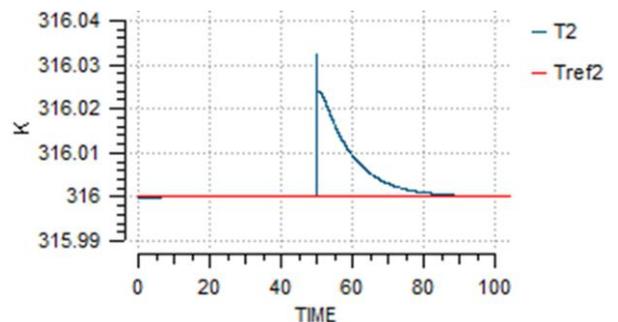
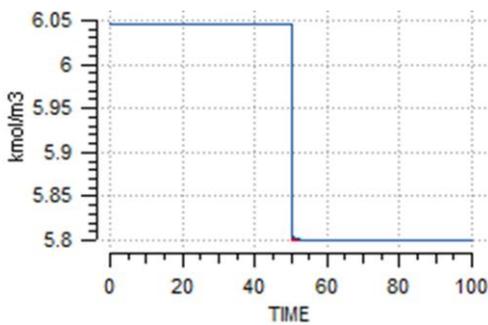
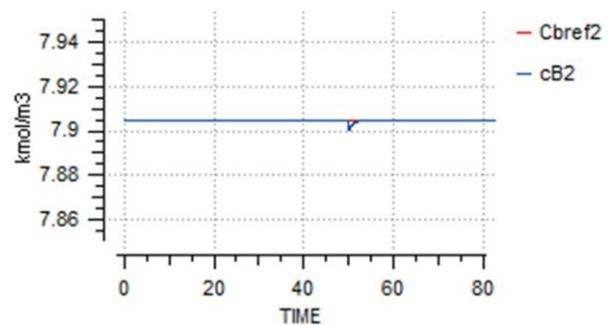
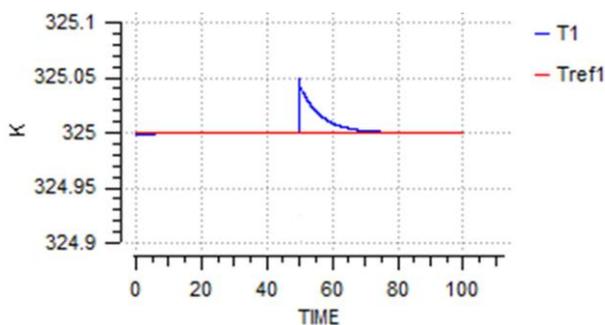
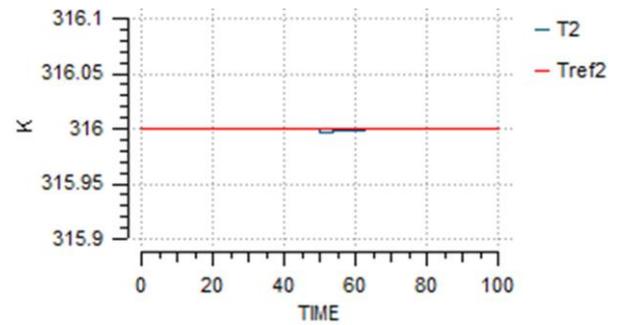


Figura 27: Cambios en T diseño C

Las figuras 27 y 28 muestran el cambio en la consigna del segundo tanque del modelo C. Solo se ha realizado el salto en este tanque debido a que es el de más interés, ya que es el encargado de conseguir el 85% de conversión como que además soporta todos los cambios en el primer tanque.

Comparando estas últimas graficas con las obtenidas para los modelos anteriores se observa que el diseño C es el más rápido para el ajuste de concentración, no existe apenas desviación de la variable y la consigna se alcanza casi instantáneamente. En cambio para la regulación de temperatura se ve que tarda mucho más en alcanzar la consigna, necesita más tiempo. Aunque su desviación es solo de  $0.03^{\circ}\text{C}$ , mucho más baja que la obtenida en el diseño B.

Para observar la dependencia en el diseño C entre el segundo reactor y el primero se ha dado un salto a la consigna  $C_{bref1}$  correspondiente al primer reactor.  $C_{bref1}$  baja de  $6.045\text{kmol}/\text{m}^3$  a  $5.8\text{ kmol}/\text{m}^3$ .

Figura 29: Salto en  $C_{bref1}$  diseño CFigura 30: Cambio en  $C_{bref2}$  modelo CFigura 32: Modificación  $T1$  diseño CFigura 31: Modificación  $T2$  modelo C

Se observa en las figuras 29 y 30 que el diseño asume muy bien los cambios en consigna, apenas hay variación en la variable y el valor se alcanza rápidamente. En la temperatura se ve que el lazo del segundo tanque no se ve tan afectado por el cambio. En el primer tanque se produce un cambio en la variable pero es pequeño de  $0.05^{\circ}\text{C}$ , pero sí que tarda más en alcanzar la consigna de nuevo, es más lento que en el segundo tanque.

## 2.- Salto en la perturbación $T_{re}$ , temperatura de entrada del refrigerante.

En este apartado se llevará a cabo el siguiente salto en la perturbación  $T_{re}$ . El rango de maniobra de esta perturbación es pequeño, debido a los valores obtenidos para la temperatura interior del tanque. La diferencia entre ambos valores es pequeña y nuestros saltos no podrán ser superiores a  $10^{\circ}\text{C}$ . Por lo que el salto será:  **$T_{re}$  de 300 K se enfriará hasta 290K.**

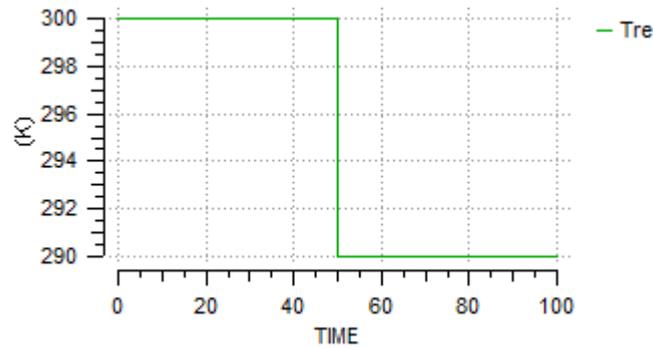


Figura 33: Salto en  $T_{re}$ , perturbación para todos los diseños.

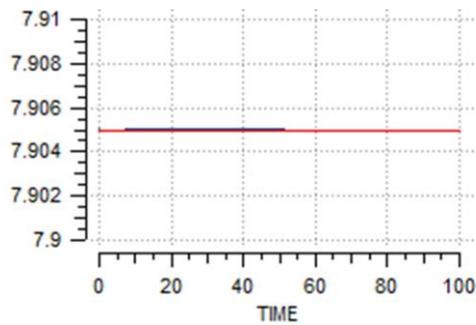


Figura 35: Cambios en  $C_b$  diseño A

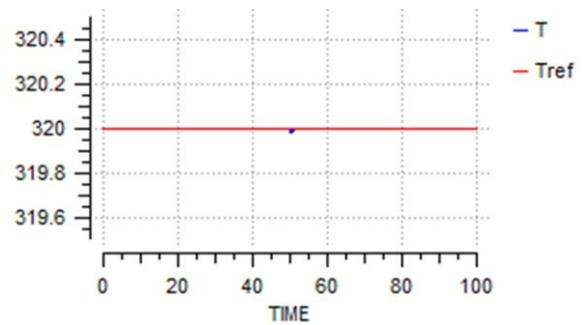


Figura 34: Cambios en  $T$  diseño A

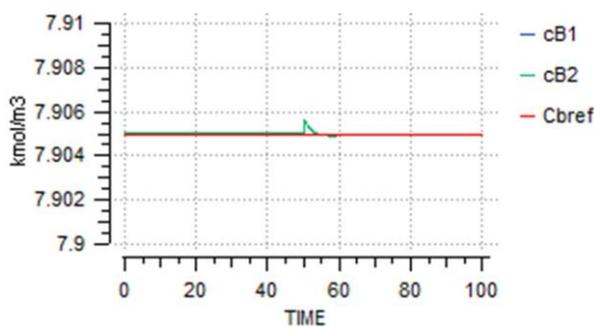


Figura 36: Cambios en  $C_{bref1}$  y  $C_{bref2}$  diseño B

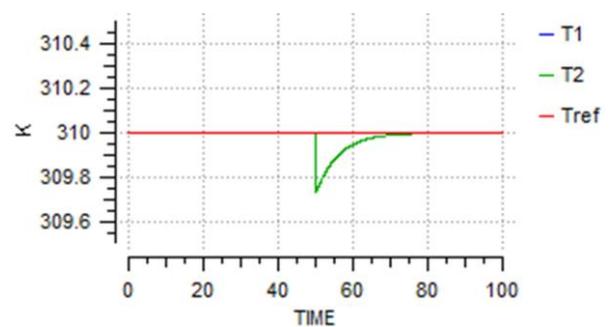


Figura 37: Cambios en  $T_1$  y  $T_2$  diseño B

Tras el salto se obtiene en las figuras 34 y 35 correspondientes al diseño A, una regulación rápida y sin apenas variación. Para el diseño B, figuras 36 y 37, la regulación en comparación al diseño A es más lenta y la variable se desvía más de su valor. En el caso de la concentración esa desviación es menor a una milésima, algo aceptable y que en la gráfica se ve exagerado por

la escala tomada para la comparación. Para la temperatura la desviación es más alta, de aproximadamente 0.3 °C.

Las posteriores figuras de la 38 a la 41 corresponden al modelo C, en este caso si se observa la evolución en ambos reactores puesto que el refrigerante se comparte para ambos, es decir, el caudal de refrigeración también está en serie. Se decidió utilizarlo así puesto que a la salida del primer reactor el refrigerante se calienta muy poco y sigue teniendo un diferencial de temperatura respecto a la temperatura interior del segundo reactor suficiente para sus necesidades. De hecho, a la vista de las gráficas vemos que el reactor más afectado por esta perturbación es el primero, el cual la asume perfectamente.

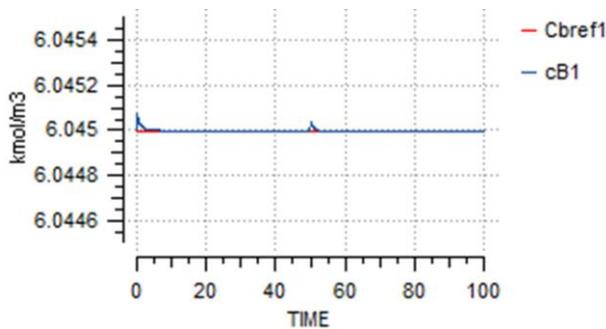


Figura 39: Cambios en Cbref1 modelo C

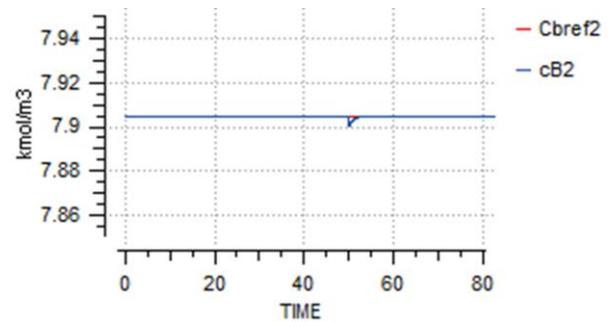


Figura 38: Cambios Cbref2 diseño C

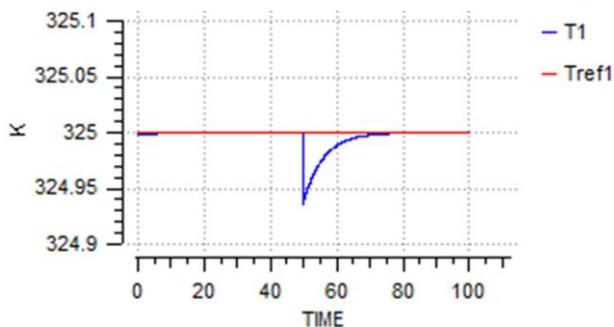


Figura 41: Cambios en T1 diseño C

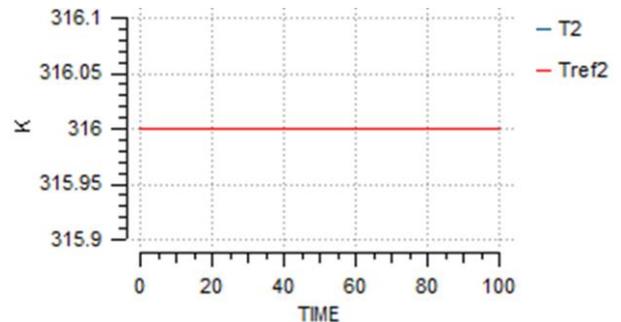


Figura 40: Evolución T2 modelo C

En la figura 38 se observa como la variable modifica poco su valor ante la perturbación y además vuelve a alcanzar la consigna rápidamente. Lo mismo ocurre en el segundo reactor (figura 39), el controlador es rápido y eficaz. En el caso de la temperatura se ve (figura 40) que el primer reactor es el que más variación tiene, como se ha descrito anteriormente, esto es debido a que la perturbación se recibe directamente en este reactor. En este caso la variable sufre una pequeña variación de 0.07°C, la cual es asumible, pero el tiempo de establecimiento es algo alto. Que el tiempo sea alto es algo normal debido al tipo de variable que se está controlando, la temperatura, la cual es

una variable lenta. Por ejemplo, se tarda mucho en subir o bajar la temperatura de todo un reactor un solo grado.

#### 4.6.3.- Estructuras en cascada.

En el apartado anterior, se explica como a pesar de un buen control en la concentración, el control en la temperatura puede variar y estropear el sistema. Para solucionar esto se implementarán estructuras en cascada en todos los modelos.

Gracias a estas estructuras en cascada se conseguirá controlar  $C_b$  y se calculará  $T$  en función de los cambios que sufra  $C_b$ .

La estructura en cascada, consta de dos lazos, uno interno y otro externo. El lazo externo será el que controle la concentración de producto a la salida. Calculará con el dato de concentración, el error producido entre consigna y valor real para después calcular la consigna de temperatura correspondiente para el lazo interno. El lazo interno recibirá esa consigna y modificará  $T$  cuanto sea necesario. Para ello regulará el caudal de refrigerante de entrada a la camisa del reactor.

En estas estructuras el caudal de alimentación será constante, no variará. El caudal que se impondrá en cada modelo será igual al obtenido en lazo abierto para conseguir un 85% de conversión.

#### 4.6.4.-Sintonía estructuras en cascada.

Se sintonizan de nuevo los PI. El procedimiento para la correcta sintonización es el siguiente:

Se comienza regulando el lazo interno, en este caso corresponde al lazo de concentración. Todos los lazos del sistema deberán estar en modo manual. Cuando ya se ha conseguido regular el lazo, este se pasa a automático.

Después se sintonizará el lazo externo, es decir, el de temperatura. Cuando se hayan conseguido las constantes de los reguladores se pondrá todo el sistema en automático y ya estará listo para comenzar.

Los códigos completos de estos diseños se encuentran en el **ANEXO I.- 2.2-CÓDIGOS EN LAZO CERRADO: Estructura en cascada.**

Diseño A: Figura 42

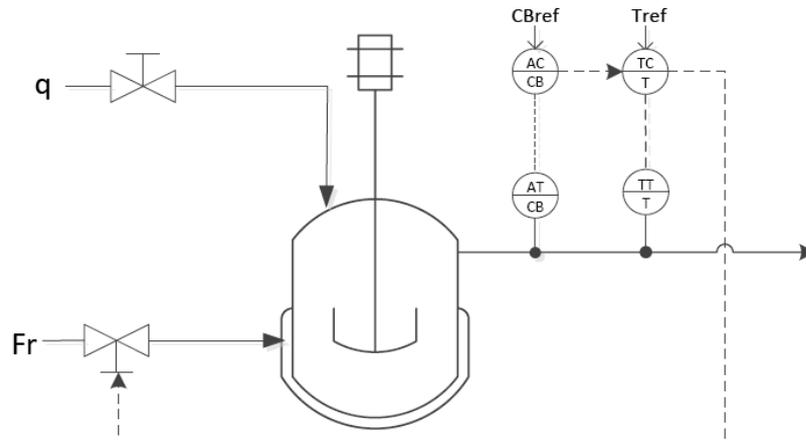


Figura 42: Estructura en cascada Diseño A

Diseño B: Figura 43

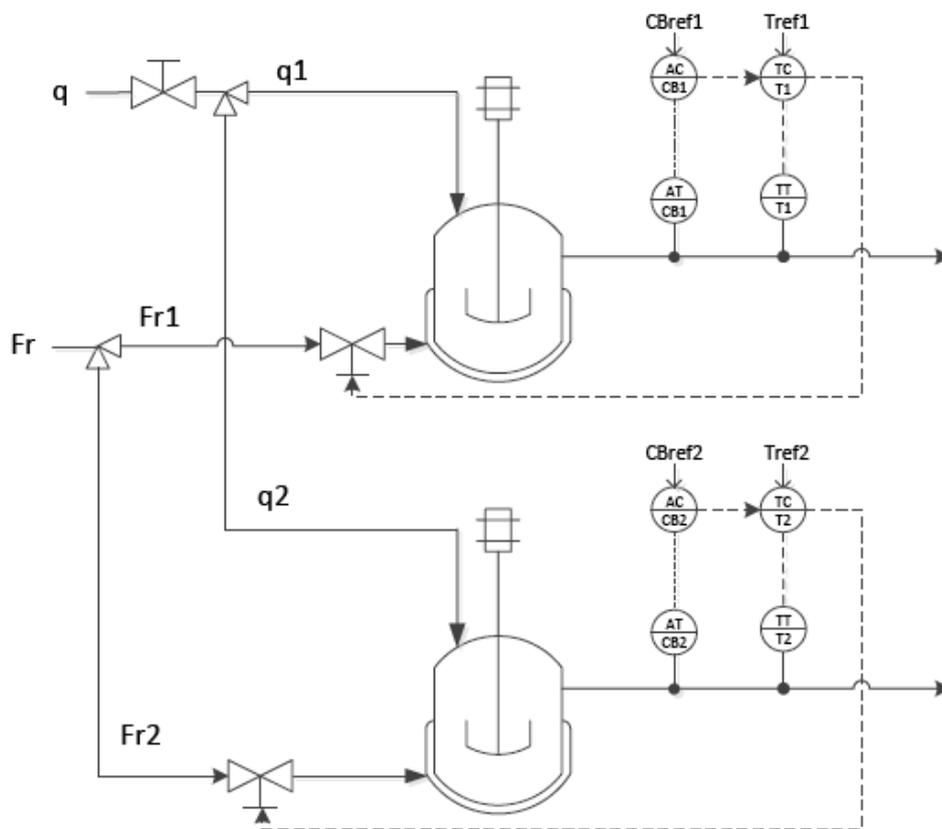


Figura 43: Estructura en cascada Diseño B

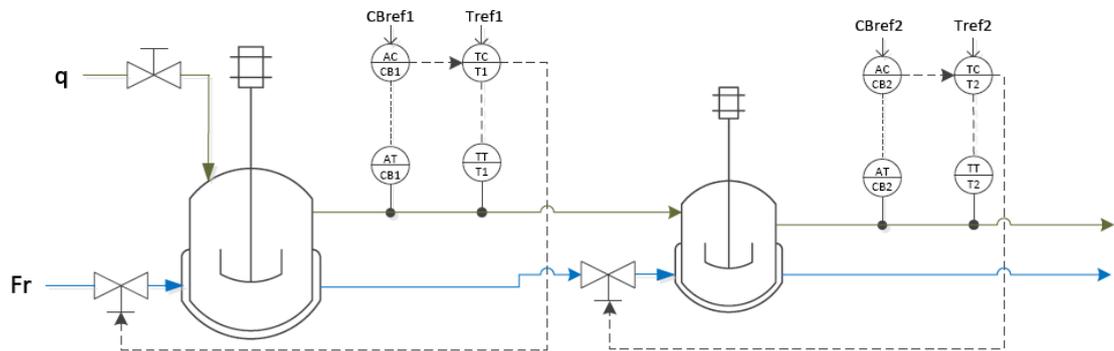
Diseño C: Figura 44.

Figura 44: Estructura en cascada Diseño C

Mediante experimentos realizados en simulación y por métodos de prueba y error se obtuvieron los siguientes parámetros de sintonía de los reguladores.

Para el diseño A las ganancias y los tiempos integrales son los siguientes:

$$K_{pT} = -1 \quad T_{iT} = 5$$

$$K_{pCb} = -2 \quad T_{iCb} = 0.05$$

El diseño B cuenta con 4 reguladores PI y los valores obtenidos para sus ganancias y tiempos integrales son:

$$K_{pT1} = -1 \quad T_{iT1} = 6 \quad K_{pT2} = -1 \quad T_{iT2} = 6$$

$$K_{pCb1} = -0.4 \quad T_{iCb1} = 2 \quad K_{pCb2} = -0.4 \quad T_{iCb2} = 2$$

Por último para el diseño C se han obtenido los siguientes valores:

$$K_{pT1} = -50 \quad T_{iT1} = 1 \quad K_{pT2} = -50 \quad T_{iT2} = 1$$

$$K_{pCb1} = -100 \quad T_{iCb1} = 1 \quad K_{pCb2} = -100 \quad T_{iCb2} = 1$$

#### 4.6.5.- Experimentos realizados

##### 1.- Salto en la consigna: $C_{bref} = 7.905 \text{ kmol/m}^3 \rightarrow 7.7 \text{ kmol/m}^3$

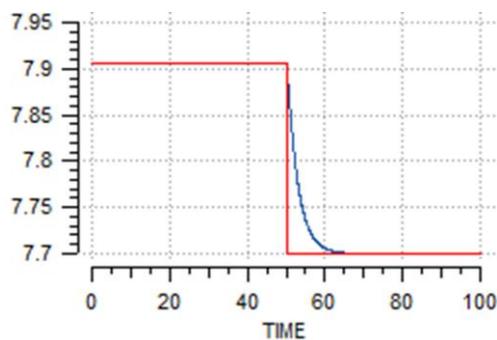


Figura 46: Salto en Cbref diseño A

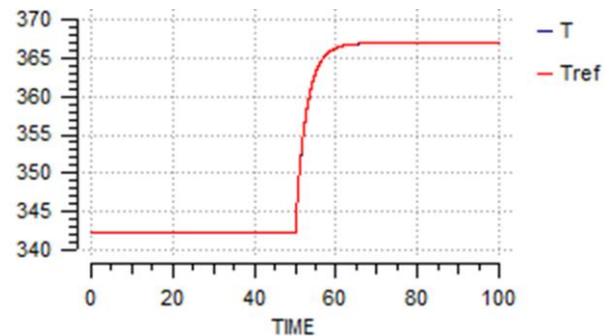


Figura 45: Evolución de T diseño A

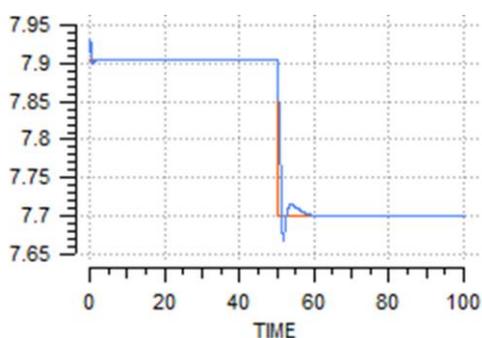


Figura 48: Saltos Cbref1 y Cbref2 diseño B

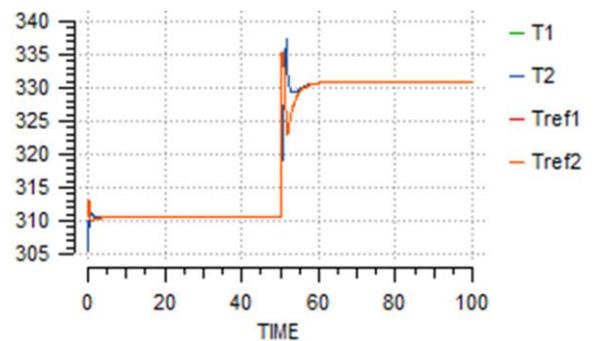


Figura 47: Evolución T1 y T2 diseño B

Se recuerda que en este tipo de estructura la referencia de temperatura cambia al cambiar la referencia de concentración.

Las figuras 45 y 46 corresponden al diseño A. En ellas se observa como la estructura en cascada ha mejorado el control de temperatura interior del tanque en comparación a los lazos simples de PI, el control en concentración de producto tiene las mismas características que en el apartado anterior.

Para el diseño B, correspondiente a las figuras 47 y 48, al introducir el sistema en cascada, el sistema pasa a comportarse como un sistema de segundo orden con fase no mínima. En el control de temperatura se dan mayores fluctuaciones en la variable pero estas se dan en un espacio temporal muy pequeño, después se consigue el control.

Por último las figuras 49 y 50 exponen lo sucedido en el diseño C para el mismo cambio en la consigna del segundo tanque Cbref2.

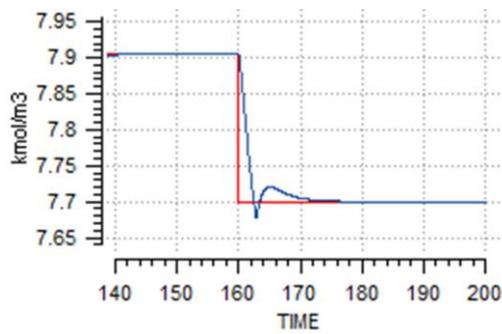


Figura 50: Salto en Cbref2 diseño C

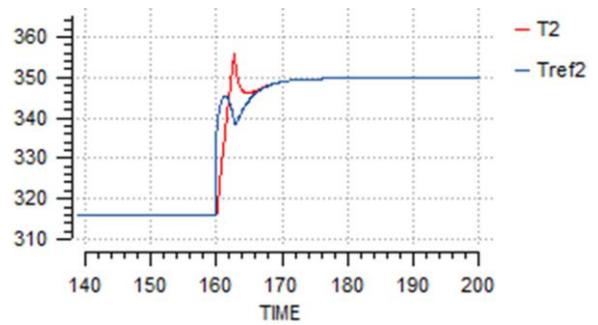


Figura 49: Evolución T2 diseño C

Para el caso del diseño C, representado por las figuras 49 y 50, se observa también un comportamiento de sistema de segundo orden. Este diseño es el más complicado de los tres propuestos, puesto que lo que pase en el primer reactor afecta al segundo reactor.

Las gráficas están tomadas a partir del segundo 140 puesto que es lo que tarda este sistema al completo en llegar al punto estacionario. Primero se da el estacionario en el reactor 1 y después ya se empieza a estabilizar el segundo reactor.

El control de concentración de producto es bastante bueno, no se da mucha variación en la variable, aunque se da una fase no mínima. No es muy lento pues sigue a la nueva consigna en unos 10 segundos que es lo mismo que tardan los diseños A y B. Para la temperatura se obtiene unos 5 segundos de fluctuación de la variable. Esta fluctúa en 10°C, algo que es bastante corriente en sistemas de este tipo, además la consigna se alcanza más rápido que en el diseño B.

## 2.- Salto en la perturbación Tre (Temperatura del refrigerante a la entrada).

El salto de Tre será negativo. Se pasará de 300 K a 290K.

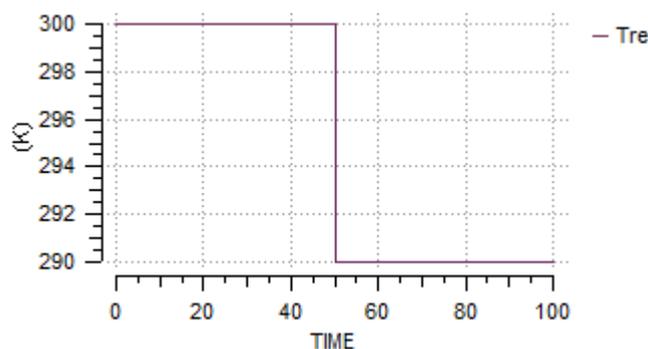


Figura 51: Salto en Tre dado para todos los diseños

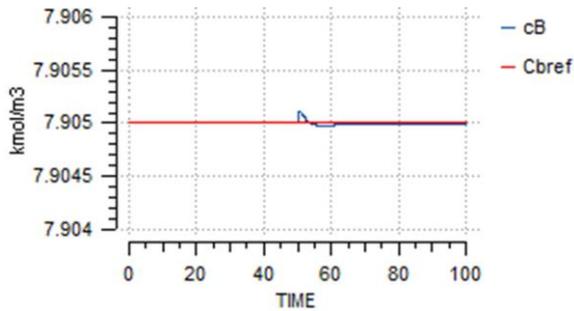


Figura 53: Cambio en Cbref diseño A

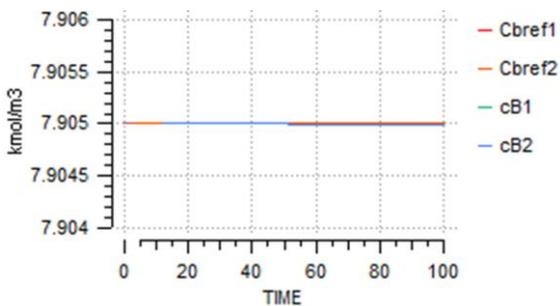


Figura 54: Cambios en Cb1 y Cb2 diseño B

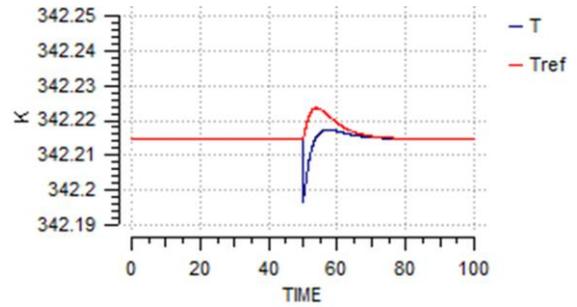


Figura 52: Evolución en T diseño A

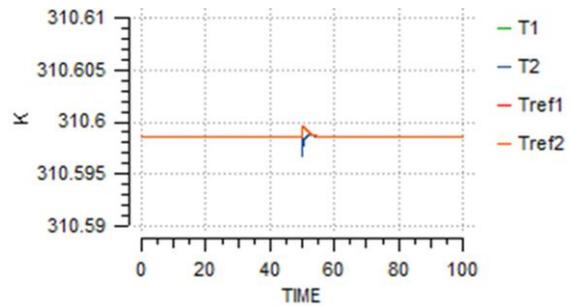


Figura 55: Evolución T1 y T2 en diseño B

Las figuras 52 y 53 corresponden al diseño A, y las figuras 54 y 55 al diseño B. Comparando las figuras 52 y 54 vemos que el diseño B en el lazo de concentración, sufre mucha menos perturbación que el diseño A, aunque la variación que toma la variable en dicho diseño es muy pequeña y aceptable. En la realidad no existe medidor de concentración que distinga en la cuarta cifra.

Comparando las gráficas correspondientes a la evolución de la temperatura (figuras 53 y 55), se observa de nuevo que el diseño A sufre mayor oscilación en la variable, de aproximadamente  $0.03^{\circ}\text{C}$ , que el diseño B. Ambos lazos consiguen regular la variable pero el lazo del diseño A es mucho más lento que el lazo del diseño B.

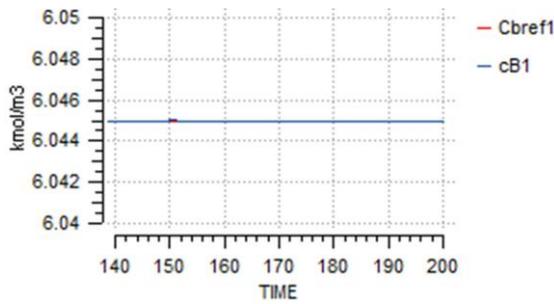


Figura 57: Cambios en Cb1 diseño C

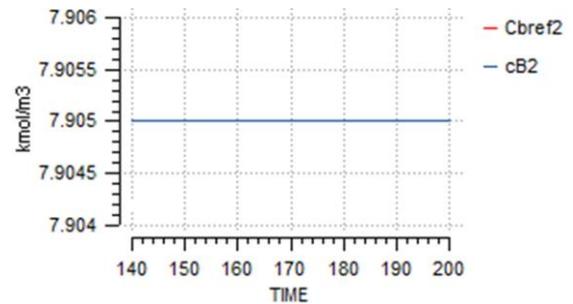


Figura 56: Cambio en Cb2 diseño C

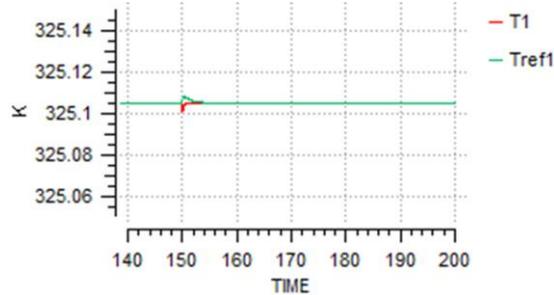


Figura 59: Evolución T1 diseño C

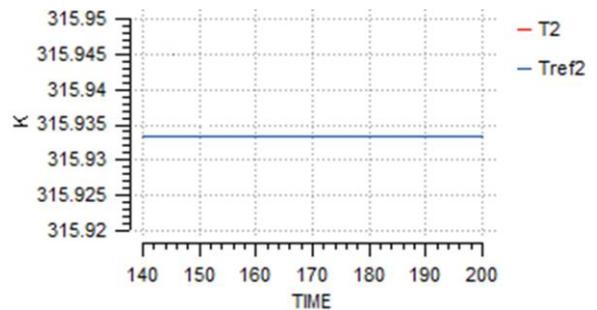


Figura 58: Evolución T2 diseño C

El conjunto de figuras de la 56 hasta la 59 representan el diseño C ante la perturbación.

Comparando las gráficas 56 y 57 vemos que en el segundo reactor no se da cambio alguno a la variable, sigue en su estado estacionario inicial, mientras que en el primer tanque si se representa la perturbación pero es demasiado pequeña como para hacer comparaciones. Para el caso de las temperaturas (figuras 58 y 59) vemos que el primer reactor sufre un leve cambio mientras que el segundo permanece inalterado.

Este diseño con esta estructura de control absorbe muy bien las perturbaciones. La perturbación producida se traduce en un cambio en el flujo de refrigerante, que al tener más frío refrigera mejor por tanto con menos caudal se consigue el mismo resultado.

#### 4.6.-Evaluación económica de las unidades de proceso utilizadas.

En la evaluación económica se recogen los precios de los distintos reactores, de la instrumentación utilizada y el precio de las materias primas. También se dará el precio de venta del producto.

##### 4.6.1.- Precio de los reactores:

Para calcular el precio de los reactores se utiliza el Programa CAPCOST. Este programa está incluido en Microsoft Excel, y proporciona precios de equipos de proceso.

El problema de este programa es que trabaja con volúmenes de equipos muy altos comparados con los utilizados en este TFG. Se decidió sacar una ecuación de relación precio-volumen de reactor según Capcost y después se extrapoló a los volúmenes aquí utilizados. Los reactores serán de acero inoxidable, contruidos de forma vertical.

En la siguiente ecuación, no sólo se relaciona el volumen del tanque con su precio sino que además ya tiene añadido el valor del agitador incluyendo toda su mecánica.

$$y = 13699 \cdot x^{0.6127} \quad (\text{ec. 4.7.1})$$

Siendo y el precio en € y x el volumen del reactor.

Los precios finales son:

Diseño A: Un reactor de  $V=0.5\text{m}^3 \rightarrow$  Coste: **8960€**

Diseño B: Dos reactores iguales de  $V=0.25\text{m}^3$

Coste/unidad=5860€  $\rightarrow$  Coste total=**11720€**

Diseño C: Un reactor  $V=0.3\text{m}^3 \rightarrow$  Coste=6550€  
 Un reactor  $V=0.2\text{m}^3 \rightarrow$  Coste=5110€ } Coste total=**11660€**

#### 4.6.2.- Precio instrumentación:

La instrumentación básica utilizada en todos los diseños consta de termómetros, medidores de concentración, valvulas y controladores.

Descripción	Precio unitario	Bibliografía
Sonda Temperatura	225€	[13]
Control Temperatura	96€	[14]
Válvulas de paso	300€	[13]
Medidor-controlador de concentración	430€	[15]
Caudalímetro	1200€	[13]

TABLA: 4.1.- Precios instrumentaciones

Cada reactor incluye 3 sensores de temperatura y su control, un medidor/controlador de concentración, 4 válvulas y 2 caudalímetros; por lo que el precio por reactor es:

PRECIO INSTRUMENTACIÓN 1 REACTOR: 4993€

#### 4.6.3.- Precio reactivo, producto y refrigerante:

Se busca en bibliografía [16] el precio del reactivo y del producto obtenido:

Precio n-butano:  $1\text{m}^3/\text{h} \rightarrow 15.60€$

Precio i-butano (producto):  $1\text{m}^3 \rightarrow 23.14€$

Precio del agua de refrigeración industrial [17]:

$$1\text{m}^3/\text{h} \rightarrow 1.53\text{€}$$

#### 4.6.4.- Precio final de cada diseño:

Se calcula el global de cada uno de los diseños:

	DISEÑO A	DISEÑO B	DISEÑO C
<b>Reactor (€)</b>	8960	11720	11660
<b>Instrumentación(€)</b>	4993	4993x2	4993x2
<b>Total Fijo (€)**</b>	<b>13953</b>	<b>21706</b>	<b>21646</b>
<b>Refrigerante(€/día)*</b>	24.48		24.48
<b>Alimentación (€/día)*</b>	79.88		129.8
<b>Total consumo diario</b>	<b>104.36</b>		<b>154.30</b>
<b>Producción (€/día)*</b>	118.4		192.5
<b>Beneficio diario</b>	<b>14.04</b>		<b>38.2</b>

**TABLA: 4.2.- Precios totales**

\*\*Los costes fijos serán amortizables.

\*Un día se considera como 16h, dos turnos de 8h. El dato escrito en la tabla ya es directamente el precio por el caudal que se utiliza. El caudal escogido es el que usan los reactores en lazo abierto para conseguir el 85% de producción (punto 4.6.2).

#### 4.7.-Análisis y evaluación de la operación.

Se elegirá qué estructura sería la más conveniente para el proceso estudiado en lo que se refiere a economía y buen control.

El tiempo de establecimiento ( $t_s$ ) y el sobreimpulso ( $s_i$ ) se han calculado en todos los casos para la variable  $C_b$  correspondiente de cada diseño. Se ha distinguido entre cambios en la consigna y perturbaciones.

A la hora de elegir se le dará mucha más importancia un mejor control en perturbaciones que en consignas puesto que en un proceso real las perturbaciones se podrán tener a diario mientras que un cambio de consigna no. Puede que no se cambie la consigna nunca, o se haga cada varios meses.

Ver la tabla adjunta en **ANEXO III: TABLA COMPARATIVA**.

A la vista de la tabla anterior vemos que las estructuras en cascada en cualquiera de los tres diseños, son mucho más efectivas que la estructura de lazos simples de PI. Por lo que la estructura de control elegida será CASCADA.

La comparación queda ahora en términos económicos. Se valoran los precios de los tanques así como es beneficio diario obtenido.

En la última fila de la tabla se encuentra la amortización de cada uno de los equipos y gracias a ella se elige el diseño C. Se amortiza en un mes más que el diseño A, pero los beneficios conseguidos serán mayores.

Hay que recordar que el diseño C funciona y se adapta muy bien siempre y cuando el sistema sufra perturbaciones pequeñas o no se le den cambios de consigna positivos. Para el caso de la consigna se debe a que es necesario que entre ambos reactores haya diferencia. Por ejemplo intentar en el primer reactor llegar a una concentración de  $7 \text{ kmol/m}^3$  (75% de conversión) manteniendo la concentración buscada en el segundo reactor a  $7.905 \text{ kmol/m}^3$  (85% de conversión), el proceso da muchas fluctuaciones, se vuelve más lento y puede que no llegue nunca a regular. La diferencia mínima que admite el proceso en conversión es que en el segundo reactor se convierta un 20% más que en el primero. También hay que añadir que este diseño no admite más de un 90% de conversión final.

El diseño C es el más difícil de controlar en comparación a los demás ya que existe una gran dependencia entre los reactores y las corrientes que utilizan son las mismas. Es un proceso más inestable y por eso se obtuvieron comportamientos de sistema de segundo orden al realizar los saltos.

## CAPÍTULO 5.- CONCLUSIONES FINALES.

La metodología de diseño integrado y control, como ya se ha explicado en el punto 1.1, sostiene que la síntesis del proceso y el dimensionamiento deben llevarse a cabo conjuntamente con el sistema de control. Esto se aprecia en los resultados obtenidos.

Volviendo a la Tabla comparativa incluida en el Anexo III, como ya se ha expuesto en el punto 4.7, el diseño elegido sería el C con estructura en cascada por su gran comportamiento ante perturbaciones y por los beneficios que produce. Hay que recordar que los volúmenes de reactor aquí tratados son muy pequeños, válidos para laboratorios, pero se pueden extrapolar los resultados a volúmenes mayores de reactor que traten mayores flujos.

Se buscaba justificar la importancia del diseño integrado. En este TFG se ha utilizado un método de simulación con ecuaciones algebraicas para tratar el problema y conseguir los resultados, este procedimiento no es el más correcto a la hora de integrar diseño, control y presupuesto. Para realizar un diseño integrado real se utilizan métodos matemáticos que optimizan una función de costo. En dicha función de costo se integran tanto el presupuesto económico para el proyecto, como su control automático y el diseño de los equipos involucrados. Al optimizar se busca cumplir el presupuesto (y si es posible minimizarlo) obteniendo un equilibrio en control y dimensiones. Es decir, se busca un tamaño adecuado de unidad de proceso cuyo control de proceso sea sencillo. Esto no se ha utilizado en este TFG puesto que está fuera del alcance académico de la carrera estudiada. Esta optimización se estudia en cursos superiores.

A pesar de esto, sí se consigue justificar parte del diseño integrado. No se ha tenido un presupuesto fijo, y a la hora de elegir económicamente se ha elegido el proceso que más beneficios produjera. Lo que si se ha buscado ha sido el equilibrio entre control y dimensionamiento de los equipos. Se propuso un volumen fijo y se intentó regular para las especificaciones dadas inicialmente (punto 4.1.1). No se alcanzaba el objetivo, por lo que las especificaciones tuvieron que cambiar, de hecho los flujos obtenidos en todos los experimentos son menores que los marcados inicialmente. Esto indica que de haber realizado todo el diseño de los equipos proponiendo un volumen, hubiera tocado rediseñar puesto que se conseguiría el objetivo número uno, conseguir una conversión del 85%. Si se hubiera realizado mediante la función de costo de optimización, enseguida se hubiera obtenido qué volumen era el necesario para esas especificaciones en un solo paso.

Este proyecto ha sido realizado ajustándose a los niveles en control y automática estudiados en la carrera de Ingeniería Química. Aunque se

obtiene una solución viable, realmente no es aplicable. Un reactor de estas características es un sistema difícil de controlar, y en cualquier industria su control no se realizaría con PI, si no que se utilizarían sistemas de control mucho más complejos y, a la par, más fiables.



**BIBLIOGRAFÍA:**

- [1] ISA: <http://www.isa.cie.uva.es/~prada/disenolIntegrado.pdf>
- [2] “Diseño integrado y síntesis de procesos aplicado al proceso de fangos activados”. Autora: Gloria Gutiérrez Rodríguez. Trabajo para acceder al doctorado por la Universidad de Valladolid. Editado en el 2000. (Fecha de consulta: 24 de abril del 2015).
- [3]Galeon:[http://www.galeon.com/mcoronado/PRACTICAS\\_1/13Practica13.pdf](http://www.galeon.com/mcoronado/PRACTICAS_1/13Practica13.pdf) (Fecha de consulta: 2 de Junio del 2015)
- [4]Control de procesos:  
[http://web.udl.es/usuarios/w3511782/Control\\_de\\_procesos/Unidades\\_files/Cap02\\_10-11.pdf](http://web.udl.es/usuarios/w3511782/Control_de_procesos/Unidades_files/Cap02_10-11.pdf) (Fecha de consulta: 2 de Junio del 2015)
- [5] Universidad de León: <http://www.lra.unileon.es/es/book/export/html/268>
- [6] Universidad Nacional de Quilmes:  
<http://www.eng.newcastle.edu.au/~jhb519/teaching/caut1/Apuntes/PID.pdf>  
(Fecha de consulta: 2 de Junio del 2015)
- [7]Universidad politécnica de Madrid: [http://ocw.upm.es/ingenieria-de-sistemas-y-automatica/control-de-procesos-industriales/Contenidos/Documentos/7\\_control\\_avanzado\\_con\\_variables\\_auxiliares.ppt](http://ocw.upm.es/ingenieria-de-sistemas-y-automatica/control-de-procesos-industriales/Contenidos/Documentos/7_control_avanzado_con_variables_auxiliares.ppt) (Fecha de consulta: 2 de Junio del 2015)
- [8] Universidad politécnica de Madrid:  
<http://www.elai.upm.es/webantigua/spain/Asignaturas/ControlProcesos/archivos/Transparencias/Tema4.pdf> (Fecha de consulta: 2 de Junio del 2015)
- [9] EcosimPro: [http://www.ecosimpro.com/description\\_es.php](http://www.ecosimpro.com/description_es.php) (Fecha de consulta: 29 de abril del 2015).
- [10] H.Scott Fogler “Elementos en Ingeniería de las reacciones químicas” 3ª Edición (2001), Editorial Prentice Hall. (Capítulo 8, sección 6) (Fecha de consulta: 4 de mayo de 2015).
- [11] Chemistry Web Book, NIST: <http://webbook.nist.gov/chemistry/> (Fecha de consulta: 4 de mayo de 2015).
- [12] Norma UNE-EN-ISO 10628. AENOR. “Diagramas de flujo de plantas de proceso. Reglas generales. “; Septiembre del 2001. (Fecha de consulta 4 Abril 2015)
- [13] Gesa: <https://www.termometros.com> (Fecha consulta: 28 de mayo 2015)

[14] OMEGA: <http://es.omega.com/Temperature> (Fecha consulta: 28 de mayo 2015)

[15] JUMO.S.A: <http://www.jumo.es/productos/> (Fecha consulta: 28 de mayo 2015)

[16] REPSOL:  
<http://www.repsol.com/sa/herramientas/listadopreciosbutanoopropanoenvasado/precios.aspx> (Fecha consulta: 28 de mayo 2015)

[17] Ministerio de agricultura, alimentación y medio ambiente Español:  
[http://servicios2.marm.es/sia/indicadores/ind/ficha.jsp?cod\\_indicador=50b&factor=respuesta](http://servicios2.marm.es/sia/indicadores/ind/ficha.jsp?cod_indicador=50b&factor=respuesta) (Fecha consulta: 28 de mayo 2015)

## ANEXO I: Códigos en EcosimPro.

## 1.-CÓDIGOS EN LAZO ABIERTO:

## Modelo A. (Fichero: Lazo\_abierto.el)

```

USE MATH

COMPONENT Lazo_abierto

DATA

    -- Constantes químicas y físicas reactivo y producto
    REAL rho = 20.657          "Densidad de la corriente
de alimentación, butano (kg/m3) "
    REAL rhor = 984.79       "Densidad de la corriente de
refrigerante, agua (kg/m3) "
    REAL Cp = 2.2867         "Capacidad calorífica de la
mezcla de reacción (kJ/kg K) "
    REAL Cpr = 4.1837        "Capacidad calorífica del
refrigerante (kJ/kg K) "
    -- Constantes de la reacción exotérmica
    REAL DH = -6900          "Calor de reacción de la reacción
(kJ/kmol) "
    REAL U = 2022            "Coeficiente global de
transmisión de calor (kJ/h m2 K) "
    REAL Ea=65700            "Energía de activación en
(kJ/kmol) "
    REAL R=8.314             "Constante de los gases"
    -- Constantes geométricas del reactor.
    REAL A=2                 "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
    REAL Vr=0.23             "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
    REAL V =0.5              "Volumen del reactor (m3) "
    -- El diámetro del reactor= 0.64 m y la altura es de 1m.
    La separación entre camisa-reactor es de 0.1m.
    -- Cálculo del volumen del reactor
    -- V = PI*D*D*L /4
    -- calculo de la superficie
    -- A = PI*D*L
    -- Cálculo del volumen de la camisa
    -- Vr = PI*(D+2*dc)*(D+2*dc)*L/4 - PI*D*D*L/4

    -- Variables a la entrada
    REAL Te = 390            "Temperatura de entrada de la
alimentación (K) "
    REAL cA0 = 9.3           "Concentración del componente
A en la alimentación (kmol/m3) "
    REAL Tre = 300           "Temperatura del refrigerante a
la entrada del reactor(K) "

```

**DECLS**

```

REAL q                                "Flujo volumétrico de la
alimentación (m3/h) "
REAL Fr                                "Flujo volumétrico del
refrigerante (m3/h) "

REAL cA                                "Concentración del
componente A en la mezcla de reacción (kmol/m3) "
REAL cB                                "Concentración del
componente B en la mezcla de reacción (kmol/m3) "
REAL x                                "Conversion cB/cA0"

REAL Tr                                "Temperatura media del
refrigerante en el encamisado (K) "
REAL T                                  "Temperatura (K) "

REAL Heat                              "calor intercambiado (kJ/h) "
REAL k                                  "velocidad de reaccion
(1/h) "

```

**INIT**

```

T = 390
Tr = 300
cA = 9.3

```

**CONTINUOUS**

```

-- calculo de x
x = cB/cA0
-- calculo de cB
cB = cA0 - cA
-- Velocidad de reacción del componente A
k = 3.03 * exp((DH/R)*((T-333)/(T*333)))

-- balance de masa de A
V*cA' = q*(cA0 - cA) - V*k*cA
-- balance de energia en el reactor
V*rho*Cp*T' = q*rho*Cp*(Te - T) - V*k*cA*DH + Heat
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat = U*A*(Tr-T)
-- balance de energia en la camisa de refrigerante
V*rhor*Cpr*Tr' = Fr*rhor*Cpr*(Tre - Tr) - Heat

```

```

END COMPONENT

```

**Modelo B. (Fichero: Paralelo.el)**

```

USE MATH

COMPONENT Paralelo_L_Abierto

DATA

    -- Constantes químicas y físicas reactivo y producto
    REAL rho = 20.657          "Densidad de la corriente
de alimentación, butano (kg/m3) "
    REAL rhor = 984.79       "Densidad de la corriente de
refrigerante, agua (kg/m3) "
    REAL Cp = 2.2867         "Capacidad calorífica de la
mezcla de reacción (kJ/kg K) "
    REAL Cpr = 4.1837        "Capacidad calorífica del
refrigerante (kJ/kg K) "
    -- Constantes de la reacción exotérmica
    REAL DH = -6900          "Calor de reacción de la reacción
(kJ/kmol) "
    REAL U = 2022            "Coeficiente global de
transmisión de calor (kJ/h m2 K) "
    REAL Ea=65700            "Energía de activación en
(kJ/kmol) "
    REAL R=8.314             "Constante de los gases"
    -- Constantes geométricas de los reactores.
    REAL A1=1                "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
    REAL Vr1=0.12            "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
    REAL V1 =0.25            "Volumen del reactor 1 (m3) "

    REAL A2=1                "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
    REAL Vr2=0.12            "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
    REAL V2 =0.25            "Volumen del reactor 2(m3) "
    -- Los diámetros de los reactores D1=D2=0.25 y las alturas
son de 1m. La separación entre camisa-reactor es de 0.1m.
    -- Cálculo del volumen del reactor
    -- V = PI*D*D*L /4
    -- calculo de la superficie
    -- A = PI*D*L
    -- Cálculo del volumen de la camisa
    -- Vr = PI*(D+2*dc)*(D+2*dc)*L/4 - PI*D*D*L/4

    -- Variables a la entrada
    REAL Te = 390            "Temperatura de entrada de la
alimentación (K) "
    REAL cA0 = 9.3           "Concentración del componente
A en la alimentación (kmol/m3) "
    REAL Tre = 300           "Temperatura del refrigerante a
la entrada del reactor (K) "

```

**DECLS**

REAL q1 "Flujo volumétrico de la  
alimentación 1(m3/h) "

REAL Fr1 "Flujo volumétrico del  
refrigerante (m3/h) "

REAL q2 "Flujo volumétrico de la  
alimentación 1(m3/h) "

REAL Fr2 "Flujo volumétrico del  
refrigerante (m3/h) "

REAL cA1 "Concentración del  
componente A en la mezcla de reacción (kmol/m3) "

REAL cB1 "Concentración del  
componente B en la mezcla de reacción (kmol/m3) "

REAL x1 "Conversion cB1/cA0"

REAL cA2 "Concentración del  
componente A en la mezcla de reacción (kmol/m3) "

REAL cB2 "Concentración del  
componente B en la mezcla de reacción (kmol/m3) "

REAL x2 "Conversion cB2/cA0"

REAL Tr1 "Temperatura media del  
refrigerante en el encamisado (K) "

REAL T1 "Temperatura (K) "

REAL Tr2 "Temperatura media del  
refrigerante en el encamisado (K) "

REAL T2 "Temperatura (K) "

REAL Heat1 "calor intercambiado (kJ/h) "

REAL k1 "velocidad de reaccion  
(1/h) "

REAL Heat2 "calor intercambiado (kJ/h) "

REAL k2 "velocidad de reaccion  
(1/h) "

**INIT**

T1 = 390

Tr1 = 300

cA1 = 9.3

T2 = 390

Tr2 = 300

cA2 = 9.3

**CONTINUOUS**

```
-- calculo de x1
x1 = cB1/cA0
-- calculo de cB1
cB1 = cA0 - cA1
-- Velocidad de reacción del componente A
k1 = 31.1 * exp((Ea/R)*((T1-360)/(T1*360)))

-- calculo de x2
x2 = cB2/cA0
-- calculo de cB2
cB2 = cA0 - cA2
-- Velocidad de reacción del componente A
k2 = 31.1 * exp((Ea/R)*((T2-360)/(T2*360)))

-- balance de masa de A REACTOR 1
V1*cA1' = q1*(cA0 - cA1) - V1*k1*cA1
-- balance de energía en el reactor
V1*rho*Cp*T1' = q1*rho*Cp*(Te - T1) - V1*k1*cA1*DH -
Heat1
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat1 = U*A1*(T1 - Tr1)
-- balance de energía en la camisa de refrigerante
Vr1*rhor*Cpr*Tr1' = Fr1*rhor*Cpr*(Tre - Tr1) + Heat1

-- balance de masa de A REACTOR 2
V2*cA2' = q2*(cA0 - cA2) - V2*k2*cA2
-- balance de energía en el reactor
V2*rho*Cp*T2' = q2*rho*Cp*(Te - T2) - V2*k2*cA2*DH -
Heat2
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat2 = U*A2*(T2 - Tr2)
-- balance de energía en la camisa de refrigerante
Vr2*rhor*Cpr*Tr2' = Fr2*rhor*Cpr*(Tre - Tr2) + Heat2

END COMPONENT
```

## Modelo C. (Fichero: Serie.el)

```

USE MATH

COMPONENT Serie_L_Abierto

DATA

    -- Constantes químicas y físicas reactivo y producto
    REAL rho = 20.657          "Densidad de la corriente
de alimentación, butano (kg/m3) "
    REAL rhor = 984.79       "Densidad de la corriente de
refrigerante, agua (kg/m3) "
    REAL Cp = 2.2867        "Capacidad calorífica de la
mezcla de reacción (kJ/kg K) "
    REAL Cpr = 4.1837       "Capacidad calorífica del
refrigerante (kJ/kg K) "
    -- Constantes de la reacción exotérmica
    REAL DH = -6900         "Calor de reacción de la reacción
(kJ/kmol) "
    REAL U = 2022           "Coeficiente global de
transmisión de calor (kJ/h m2 K) "
    REAL Ea=65700          "Energía de activación en
(kJ/kmol) "
    REAL R=8.314           "Constante de los gases"
    -- Constantes geométricas de los reactores.
    REAL A1=0.6            "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
    REAL Vr1=0.14          "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
    REAL V1 =0.30          "Volumen del reactor 1 (m3) "

    REAL A2=0.4            "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
    REAL Vr2=0.09          "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
    REAL V2 =0.20          "Volumen del reactor 2(m3) "
    -- Los diámetros de los reactores D1=D2=0.25 y las alturas
son de 1m. La separación entre camisa-reactor es de 0.1m.
    -- Cálculo del volumen del reactor
    -- V = PI*D*D*L /4
    -- calculo de la superficie
    -- A = PI*D*L
    -- Cálculo del volumen de la camisa
    -- Vr = PI*(D+2*dc)*(D+2*dc)*L/4 - PI*D*D*L/4

    -- Variables a la entrada
    REAL Te = 390          "Temperatura de entrada de la
alimentación (K) "
    REAL ca0 = 9.3         "Concentración del componente
A en la alimentación (kmol/m3) "
    REAL Tre = 300         "Temperatura del refrigerante a
la entrada del reactor(K) "

```

**DECLS**

```

REAL q          "Caudal alimentación primer reactor
(m3/h) "
REAL Fr         "Flujo refrigerante inicial (m3/h) "

--REAL q1      "Flujo volumétrico de la
alimentación al segundo reactor(m3/h) "
--REAL Fr1     "Flujo volumétrico del
refrigerante (m3/h) "

-- REAL q2     "Flujo volumétrico de
salida sel segundo reactor (m3/h) "
--REAL Fr2     "Flujo volumétrico del
refrigerante a la salida del 2° reactor (m3/h) "

REAL cA1       "Concentración de A a la
salida del reactor 1(kmol/m3) "
REAL cB1       "Concentración de B a la
salida del reactor 1(kmol/m3) "
REAL x1        "Conversión alcanzada primer
reactor cB1/cA0"

REAL cA2       "Concentración de A en la
corriente final (kmol/m3) "
REAL cB2       "Concentración de B en la
corriente final (kmol/m3) "
REAL x2        "Conversion cB2/cA0"

REAL Tr1       "Temperatura refrigerante a la
salida del reactor 1 (K) "
REAL T1        "Temperatura en el primer
reactor (K) "

REAL Tr2       "Temperatura refrigerante a la
salida del reactor 2 (K) "
REAL T2        "Temperatura en el segundo
reactor (K) "

REAL Heat1     "calor intercambiado 1er
Reactor(kJ/h) "
REAL k1        "velocidad de reacción 1er
reactor(1/h) "

REAL Heat2     "calor intercambiado 2° reactor
(kJ/h) "
REAL k2        "velocidad de reacción 2°
reactor (1/h) "

```

```

INIT

    T1 = 325
    Tr1 = 305
    cA1 = 5

    T2 = 315
    Tr2 = 307
    cA2 = 1.395

CONTINUOUS

    -- calculo de x1
    x1 = cB1/cA0
    -- calculo de cB1
    cB1 = cA0 - cA1
    -- Velocidad de reacción del componente A
    k1 = 3.03 * exp((DH/R)*((T1-333)/(T1*333)))

    -- calculo de x2
    x2 = cB2/cA0
    -- calculo de cB2
    cB2 = cB1 + (cA1 - cA2)
    -- Velocidad de reacción del componente A
    k2 = 3.03 * exp((DH/R)*((T2-333)/(T2*333)))

    -- balance de masa de A REACTOR 1
    V1*cA1' = q*(cA0 - cA1) - V1*k1*cA1
    -- balance de energía en el reactor
    V1*rho*Cp*T1' = q*rho*Cp*(Te - T1) - V1*k1*cA1*DH +
Heat1
    -- calculo del calor intercambiado Heat
    Heat1 = U*A1*(Tr1-T1)
    -- balance de energía en la camisa de refrigerante
    Vr1*rhor*Cpr*Tr1' = Fr*rhor*Cpr*(Tre - Tr1) - Heat1

    -- balance de masa de A REACTOR 2
    V2*cA2' = q*(cA1 - cA2) - V2*k2*cA2
    -- balance de energía en el reactor
    V2*rho*Cp*T2' = q*rho*Cp*(T1 - T2) - V2*k2*cA2*DH +
Heat2
    -- calculo del calor intercambiado Heat
    Heat2 = U*A2*(Tr2-T2)
    -- balance de energía en la camisa de refrigerante
    Vr2*rhor*Cpr*Tr2' = Fr*rhor*Cpr*(Tr1 - Tr2) - Heat2

END COMPONENT

```

## 2.-CÓDIGOS EN LAZO CERRADO

### 2.1.- Códigos de lazos cerrados PI simples:

#### DISEÑO A: (Fichero: PID.el)

```

USE MATH

COMPONENT PID

DATA

    -- Constantes químicas y físicas reactivo y producto
    REAL rho = 20.657          "Densidad de la corriente
de alimentación, butano (kg/m3)"
    REAL rhor = 984.79       "Densidad de la corriente de
refrigerante, agua (kg/m3)"
    REAL Cp = 2.2867         "Capacidad calorífica de la
mezcla de reacción (kJ/kg K)"
    REAL Cpr = 4.1837        "Capacidad calorífica del
refrigerante (kJ/kg K)"
    -- Constantes de la reacción exotérmica
    REAL DH = -6900          "Calor de reacción de la reacción
(kJ/kmol)"
    REAL U = 2022            "Coeficiente global de
transmisión de calor (kJ/h m2 K)"
    REAL Ea=65700           "Energía de activación en
(kJ/kmol)"
    REAL R=8.314             "Constante de los gases"
    -- Constantes geométricas del reactor.
    REAL A=2                 "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2)"
    REAL Vr=0.23            "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3)"
    REAL V =0.5              "Volumen del reactor (m3)"
    -- El diámetro del reactor= 0.64 m y la altura es de 1m.
    La separación entre camisa-reactor es de 0.1m.
    -- Cálculo del volumen del reactor
    -- V = PI*D*D*L /4
    -- calculo de la superficie
    -- A = PI*D*L
    -- Cálculo del volumen de la camisa
    -- Vr = PI*(D+2*dc)*(D+2*dc)*L/4 - PI*D*D*L/4

    -- Variables a la entrada
    REAL Te = 390            "Temperatura de entrada de la
alimentación (K)"
    REAL cA0 = 9.3           "Concentración del componente
A en la alimentación (kmol/m3)"
    REAL Tre = 300           "Temperatura del refrigerante a
la entrada del reactor(K)"
    -- Parámetros controladores:
    REAL KTreg = -5

```

```

REAL TTinteg = 0.8
REAL Kcbreg = -0.2
REAL Tcbinteg = 0.5

DECLS

      REAL q                                "Flujo volumétrico
de la alimentación (m3/h)"
      REAL Fr                                "Flujo volumétrico del
refrigerante (m3/h)"

      REAL cA                                "Concentración del
componente A en la mezcla de reacción (kmol/m3)"
      REAL cB                                "Concentración del
componente B en la mezcla de reacción (kmol/m3)"
      REAL x                                "Conversion cB/cA0"

      REAL Tr                                "Temperatura media del
refrigerante en el encamisado (K)"
      REAL T                                "Temperatura (K)"

      REAL Heat                                "calor intercambiado (kJ/h)"
      REAL k                                "velocidad de reaccion
(1/h)"

      --Controladores PI
      REAL upT, uiT, upCb, uiCb

      --Referencias
      REAL Tref, Cbref

INIT

      T = 390
      Tr = 300
      cA = 9.3

CONTINUOUS

      -- calculo de x
      x = cB/cA0
      -- calculo de cB
      cB = cA0 - cA
      -- Velocidad de reacción del componente A
      k = 3.03 * exp((DH/R) * ((T-333)/(T*333)))

      -- balance de masa de A

```

```

V*cA' = q*(cA0 - cA) - V*k*cA
-- balance de energia en el reactor
V*rho*Cp*T' = q*rho*Cp*(Te - T) - V*k*cA*DH + Heat
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat = U*A*(Tr-T)
-- balance de energia en la camisa de refrigerante
Vr*rhor*Cpr*Tr' = Fr*rhor*Cpr*(Tre - Tr) - Heat

--Controladores:
-- Controlador PI TEMPERATURA
upT = KTreg*(Tref-T)
uiT' = KTreg*(Tref-T)/TTinteg

Fr = min(max(0, upT + uiT),100)

-- Controlador PI Cb
upCb = Kcbreg*(Cbref-cB)
uiCb' = Kcbreg*(Cbref-cB)/Tcbinteg

q = min(max(0, upCb + uiCb),1.2)

```

END COMPONENT

## DISEÑO B: (Fichero: Paralelo\_PID.el)

**USE MATH**

COMPONENT Paralelo\_PID

**DATA**

```

-- Constantes químicas y físicas reactivo y producto
REAL rho = 20.657 "Densidad de la corriente
de alimentación, butano (kg/m3)"
REAL rhor = 984.79 "Densidad de la corriente de
refrigerante, agua (kg/m3)"
REAL Cp = 2.2867 "Capacidad calorífica de la
mezcla de reacción (kJ/kg K)"
REAL Cpr = 4.1837 "Capacidad calorífica del
refrigerante (kJ/kg K)"
-- Constantes de la reacción exotérmica
REAL DH = -6900 "Calor de reacción de la reacción
(kJ/kmol)"
REAL U = 2022 "Coeficiente global de
transmisión de calor (kJ/h m2 K)"
REAL Ea=65700 "Energía de activación en
(kJ/kmol)"
REAL R=8.314 "Constante de los gases"
-- Constantes geométricas de los reactores.
REAL A1=1 "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2)"

```

```

REAL Vr1=0.12          "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
REAL V1 =0.25          "Volumen del reactor 1 (m3) "

REAL A2=1              "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
REAL Vr2=0.12          "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
REAL V2 =0.25          "Volumen del reactor 2(m3) "
-- Los diametros de los reactores D1=D2=0.25 y las alturas
son de 1m. La separación entre camisa-reactor es de 0.1m.
-- Cálculo del volumen del reactor
-- V = PI*D*D*L /4
-- calculo de la superficie
-- A = PI*D*L
-- Cálculo del volumen de la camisa
-- Vr = PI*(D+2*dc)*(D+2*dc)*L/4 - PI*D*D*L/4

-- Variables a la entrada
REAL Te = 390          "Temperatura de entrada de la
alimentación (K) "
REAL cA0 = 9.3         "Concentración del componente
A en la alimentación (kmol/m3) "
REAL Tre = 300         "Temperatura del refrigerante a
la entrada del reactor(K) "

-- Parámetros controladores:
REAL KTreg1 = -1
REAL TTinteg1 = 6
REAL Kcbreg1 = -0.4
REAL Tcbinteg1 = 2

REAL KTreg2 = -1
REAL TTinteg2 = 6
REAL Kcbreg2 = -0.4
REAL Tcbinteg2 = 2

DECLS

REAL q1                "Flujo volumétrico de la
alimentación 1(m3/h) "
REAL Fr1               "Flujo volumétrico del
refrigerante (m3/h) "

REAL q2                "Flujo volumétrico de la
alimentación 1(m3/h) "
REAL Fr2               "Flujo volumétrico del
refrigerante (m3/h) "

REAL cA1               "Concentración del
componente A en la mezcla de reacción (kmol/m3) "
REAL cB1               "Concentración del
componente B en la mezcla de reacción (kmol/m3) "

```

```

REAL x1          "Conversion cB1/cA0"

REAL cA2          "Concentración del
componente A en la mezcla de reacción (kmol/m3)"
REAL cB2          "Concentración del
componente B en la mezcla de reacción (kmol/m3)"
REAL x2          "Conversion cB2/cA0"

REAL Tr1          "Temperatura media del
refrigerante en el encamisado (K)"
REAL T1          "Temperatura (K)"

REAL Tr2          "Temperatura media del
refrigerante en el encamisado (K)"
REAL T2          "Temperatura (K)"

REAL Heat1        "calor intercambiado (kJ/h)"
REAL k1          "velocidad de reaccion
(1/h)"

REAL Heat2        "calor intercambiado (kJ/h)"
REAL k2          "velocidad de reaccion
(1/h)"

--Controladores PI
REAL upT1, uiT1, upCb1, uiCb1, upT2, uiT2, upCb2,
uiCb2

--Referencias
REAL Tref, Cbref
INIT

T1 = 310
Tr1 = 300
cA1 = 9.3

T2 = 310
Tr2 = 300
cA2 = 9.3

CONTINUOUS

-- calculo de x1
x1 = cB1/cA0
-- calculo de cB1
cB1 = cA0 - cA1
-- Velocidad de reacción del componente A
k1 = 3.03* exp((DH/R)*((T1-333)/(T1*333)))

-- calculo de x2
x2 = cB2/cA0
-- calculo de cB2

```

```

cB2 = cA0 - cA2
-- Velocidad de reacción del componente A
k2 = 3.03 * exp((DH/R)*((T2-333)/(T2*333)))

-- balance de masa de A REACTOR 1
V1*cA1' = q1*(cA0 - cA1) - V1*k1*cA1
-- balance de energía en el reactor
V1*rho*Cp*T1' = q1*rho*Cp*(Te - T1) - V1*k1*cA1*DH +
Heat1
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat1 = U*A1*(Tr1-T1)
-- balance de energía en la camisa de refrigerante
Vr1*rhor*Cpr*Tr1' = Fr1*rhor*Cpr*(Tre - Tr1) - Heat1

-- balance de masa de A REACTOR 2
V2*cA2' = q2*(cA0 - cA2) - V2*k2*cA2
-- balance de energía en el reactor
V2*rho*Cp*T2' = q2*rho*Cp*(Te - T2) - V2*k2*cA2*DH +
Heat2
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat2 = U*A2*(Tr2-T2)
-- balance de energía en la camisa de refrigerante
Vr2*rhor*Cpr*Tr2' = Fr2*rhor*Cpr*(Tre - Tr2) - Heat2

--Controladores:
--      REACTOR 1
--      Controlador PI TEMPERATURA
upT1 = KTreg1*(Tref-T1)
uiT1' = KTreg1*(Tref-T1)/TTinteg1

Fr1 = min(max(0, upT1 + uiT1),10)

--      Controlador PI Cb
upCb1 = Kcbreg1*(Cbref-cB1)
uiCb1' = Kcbreg1*(Cbref-cB1)/Tcbinteg1
q1 = min(max(0, upCb1 + uiCb1),1.2)

--      REACTOR 2
--      Controlador PI TEMPERATURA
upT2 = KTreg2*(Tref-T2)
uiT2' = KTreg2*(Tref-T2)/TTinteg2

Fr2 = min(max(0, upT2 + uiT2),10)

--      Controlador PI Cb
upCb2 = Kcbreg2*(Cbref-cB2)
uiCb2' = Kcbreg2*(Cbref-cB2)/Tcbinteg2

q2 = min(max(0, upCb2 + uiCb2),1.2)

END COMPONENT

```

**DISEÑO C: (Fichero: Serie\_Pi.el)**

```

USE MATH

COMPONENT Serie_PID

DATA

    -- Constantes químicas y físicas reactivo y producto
    REAL rho = 20.657          "Densidad de la corriente
de alimentación, butano (kg/m3)"
    REAL rhor = 984.79       "Densidad de la corriente de
refrigerante, agua (kg/m3)"
    REAL Cp = 2.2867        "Capacidad calorífica de la
mezcla de reacción (kJ/kg K)"
    REAL Cpr = 4.1837       "Capacidad calorífica del
refrigerante (kJ/kg K)"
    -- Constantes de la reacción exotérmica
    REAL DH = -6900         "Calor de reacción de la reacción
(kJ/kmol)"
    REAL U = 2022           "Coeficiente global de
transmisión de calor (kJ/h m2 K)"
    REAL Ea=65700          "Energía de activación en
(kJ/kmol)"
    REAL R=8.314           "Constante de los gases"
    -- Constantes geométricas de los reactores.
    REAL A1=0.6             "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2)"
    REAL Vr1=0.14          "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3)"
    REAL V1 =0.30          "Volumen del reactor 1 (m3)"

    REAL A2=0.4            "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2)"
    REAL Vr2=0.09          "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3)"
    REAL V2 =0.20          "Volumen del reactor 2(m3)"
    -- Los diámetros de los reactores D1=D2=0.25 y las alturas
son de 1m. La separación entre camisa-reactor es de 0.1m.
    -- Cálculo del volumen del reactor
    -- V = PI*D*D*L /4
    -- calculo de la superficie
    -- A = PI*D*L
    -- Cálculo del volumen de la camisa
    -- Vr = PI*(D+2*dc)*(D+2*dc)*L/4 - PI*D*D*L/4

    -- Variables a la entrada
    REAL Te = 390           "Temperatura de entrada de la
alimentación (K)"
    REAL cA0 = 9.3          "Concentración del componente
A en la alimentación (kmol/m3)"
    REAL Tre = 300         "Temperatura del refrigerante a
la entrada del reactor(K)"

```

```

-- Parámetros controladores:
REAL KTreg1 = -2
REAL TTinteg1 = 6
REAL Kcbreg1 = -6
REAL Tcbinteg1 = 1

REAL KTreg2 = -5
REAL TTinteg2 = 8
REAL Kcbreg2 = -11
REAL Tcbinteg2 = 1

DECLS

REAL Fr0          "Flujo refrigerante que entra al primer
reactor (m3/h) "
REAL Fr1          "Flujo volumétrico del
refrigerante que entra al segundo reactor (m3/h) "

REAL q0          "Flujo alimentación (m3/h) "
REAL q1          "Flujo volumétrico de la
alimentación al segundo reactor(m3/h) "

REAL cA1          "Concentración de A a la
salida del reactor 1 (kmol/m3) "
REAL cB1          "Concentración de B a la
salida del reactor 1 (kmol/m3) "
REAL x1          "Conversion alcanzada primer
reactor cB1/cA0"

REAL cA2          "Concentración de A en la
corriente final (kmol/m3) "
REAL cB2          "Concentración de B en la
corriente final (kmol/m3) "
REAL x2          "Conversion cB2/cA0"

REAL Tr1          "Temperatura refrigerante a la
salida del reactor 1 (K) "
REAL T1          "Temperatura en el primer
reactor (K) "

REAL Tr2          "Temperatura refrigerante a la
salida del reactor 2 (K) "
REAL T2          "Temperatura en el segundo
reactor (K) "

REAL Heat1        "calor intercambiado 1er
Reactor(kJ/h) "
REAL k1          "velocidad de reacción 1er
reactor(1/h) "

REAL Heat2        "calor intercambiado 2° reactor
(kJ/h) "

```

```

REAL k2                                "velocidad de reacción 2°
reactor (1/h)"

--Controladores PI
REAL upT1, uiT1, upCb1, uiCb1, upT2, uiT2, upCb2,
uiCb2

--Referencias
REAL Tref1, Cbref1, Tref2, Cbref2
INIT

T1 = 390
Tr1 = 300
cA1 = 3.255

T2 = 330
Tr2 = 300
cA2 = 1.395

CONTINUOUS

-- calculo de x1
x1 = cB1/cA0
-- calculo de cB1
cB1 = cA0 - cA1
-- Velocidad de reacción del componente A
k1 = 3.03 * exp((DH/R)*((T1-333)/(T1*333)))

-- calculo de x2
x2 = cB2/cA0
-- calculo de cB2
cB2 = cB1 + (cA1 - cA2)
-- Velocidad de reacción del componente A
k2 = 3.03 * exp((DH/R)*((T2-333)/(T2*333)))

-- balance de masa de A REACTOR 1
V1*cA1' = q0*(cA0 - cA1) - V1*k1*cA1
-- balance de energia en el reactor
V1*rho*Cp*T1' = q0*rho*Cp*(Te - T1) - V1*k1*cA1*DH +
Heat1
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat1 = U*A1*(Tr1-T1)
-- balance de energía en la camisa de refrigerante
Vr1*rhor*Cpr*Tr1' = Fr0*rhor*Cpr*(Tre - Tr1) - Heat1

-- balance de masa de A REACTOR 2
V2*cA2' = q1*(cA1 - cA2) - V2*k2*cA2
-- balance de energia en el reactor
V2*rho*Cp*T2' = q1*rho*Cp*(T1 - T2) - V2*k2*cA2*DH +
Heat2
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat2 = U*A2*(Tr2-T2)

```

```

-- balance de energía en la camisa de refrigerante
Vr2*rhor*Cpr*Tr2' = Fr1*rhor*Cpr*(Tr1 - Tr2) - Heat2

--Controladores:
--    REACTOR 1
--    Controlador PI TEMPERATURA
upT1 = KTreg1*(Tref1-T1)
uiT1' = KTreg1*(Tref1-T1)/TTinteg1

Fr0 = min(max(0, upT1 + uiT1),10)

--    Controlador PI Cb
upCb1 = Kcbreg1*(Cbref1-cB1)
uiCb1' = Kcbreg1*(Cbref1-cB1)/Tcbinteg1
q0 = min(max(0, upCb1 + uiCb1),10)

--    REACTOR 2
--    Controlador PI TEMPERATURA
upT2 = KTreg2*(Tref2-T2)
uiT2' = KTreg2*(Tref2-T2)/TTinteg2

Fr1 = min(max(0, upT2 + uiT2),10)

--    Controlador PI Cb
upCb2 = Kcbreg2*(Cbref2-cB2)
uiCb2' = Kcbreg2*(Cbref2-cB2)/Tcbinteg2

q1 = min(max(0, upCb2 + uiCb2),10)

END COMPONENT

```

## 2.2.-Códigos en lazo cerrado estructura cascada.

### DISEÑO A: (Fichero: CASCADA.el)

```

USE MATH

COMPONENT CASCADA

DATA

-- Constantes químicas y físicas reactivo y producto
REAL rho = 20.657 "Densidad de la corriente
de alimentación, butano (kg/m3)"
REAL rhor = 984.79 "Densidad de la corriente de
refrigerante, agua (kg/m3)"
REAL Cp = 2.2867 "Capacidad calorífica de la
mezcla de reacción (kJ/kg K)"
REAL Cpr = 4.1837 "Capacidad calorífica del
refrigerante (kJ/kg K)"
-- Constantes de la reacción exotérmica

```

```

    REAL DH = -6900          "Calor de reacción de la reacción
(kJ/kmol) "
    REAL U = 2022           "Coeficiente global de
transmisión de calor (kJ/h m2 K) "
    REAL Ea=65700          "Energía de activación en
(kJ/kmol) "
    REAL R=8.314           "Constante de los gases"
-- Constantes geométricas del reactor.
    REAL A=2               "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
    REAL Vr=0.23           "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
    REAL V =0.5            "Volumen del reactor (m3) "
-- El diámetro del reactor= 0.64 m y la altura es de 1m.
La separación entre camisa-reactor es de 0.1m.
-- Cálculo del volumen del reactor
-- V = PI*D*D*L /4
-- calculo de la superficie
-- A = PI*D*L
-- Cálculo del volumen de la camisa
-- Vr = PI*(D+2*dc)*(D+2*dc)*L/4 - PI*D*D*L/4

-- Variables a la entrada
    REAL Te = 390          "Temperatura de entrada de la
alimentación (K) "
    REAL ca0 = 9.3         "Concentración del componente
A en la alimentación (kmol/m3) "
    REAL Tre = 300        "Temperatura del refrigerante a
la entrada del reactor(K) "
    REAL q=0.32           "Flujo volumétrico de la
alimentación (m3/h) "

-- Parámetros controladores:
    REAL KTreg = -1
    REAL TTinteg = 5
    REAL Kcbreg = -2
    REAL Tcbinteg = 0.05

DECLS

    REAL Fr                "Flujo volumétrico del
refrigerante (m3/h) "

    REAL cA                "Concentración del
componente A en la mezcla de reacción (kmol/m3) "
    REAL cB                "Concentración del
componente B en la mezcla de reacción (kmol/m3) "
    REAL x                 "Conversion cB/ca0"

    REAL Tr                "Temperatura media del
refrigerante en el encamisado (K) "
    REAL T                 "Temperatura (K) "
    REAL Heat              "calor intercambiado (kJ/h) "

```

```

    REAL k                                "velocidad de reaccion
(1/h) "

    --Controladores PI
    REAL upT, uiT, upCb, uiCb

    --Referencias
    REAL Tref, Cbref

INIT

    T = 390
    Tr = 300
    cA = 1.40

CONTINUOUS

    -- calculo de x
    x = cB/cA0
    -- calculo de cB
    cB = cA0 - cA
    -- Velocidad de reacción del componente A
    k = 3.03 * exp((DH/R)*((T-333)/(T*333)))

    -- balance de masa de A
    V*cA' = q*(cA0 - cA) - V*k*cA
    -- balance de energia en el reactor
    V*rho*Cp*T' = q*rho*Cp*(Te - T) - V*k*cA*DH + Heat
    -- calculo del calor intercambiado Heat
    Heat = U*A*(Tr-T)
    -- balance de energía en la camisa de refrigerante
    Vr*rhor*Cpr*Tr' = Fr*rhor*Cpr*(Tre - Tr) - Heat

    --CASCADA

    -- Controlador PI TEMPERATURA
    -- Controlador PI Cb
    upCb = Kcbreg*(Cbref-cB)
    uiCb' = Kcbreg*(Cbref-cB)/Tcbinteg

    Tref= min(max(40, upCb + uiCb),600)

    upT = KTreg*(Tref-T)
    uiT' = KTreg*(Tref-T)/TTinteg

    Fr= min(max(0, upT + uiT),2)

END COMPONENT

```

## DISEÑO B: (Fichero: Paralelo\_CASCADA.el)

```

USE MATH

COMPONENT Paralelo_CASCADA

DATA

    -- Constantes químicas y físicas reactivo y producto
    REAL rho = 20.657          "Densidad de la corriente
de alimentación, butano (kg/m3) "
    REAL rhor = 984.79       "Densidad de la corriente de
refrigerante, agua (kg/m3) "
    REAL Cp = 2.2867         "Capacidad calorífica de la
mezcla de reacción (kJ/kg K) "
    REAL Cpr = 4.1837        "Capacidad calorífica del
refrigerante (kJ/kg K) "
    -- Constantes de la reacción exotérmica
    REAL DH = -6900          "Calor de reacción de la reacción
(kJ/kmol) "
    REAL U = 2022            "Coeficiente global de
transmisión de calor (kJ/h m2 K) "
    REAL Ea=65700            "Energía de activación en
(kJ/kmol) "
    REAL R=8.314             "Constante de los gases"
    -- Constantes geométricas de los reactores.
    REAL A1=1                "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
    REAL Vr1=0.12            "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
    REAL V1 =0.25            "Volumen del reactor 1 (m3) "

    REAL A2=1                "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
    REAL Vr2=0.12            "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
    REAL V2 =0.25            "Volumen del reactor 2(m3) "
    -- Los diametros de los reactores D1=D2=0.25 y las alturas
son de 1m. La separación entre camisa-reactor es de 0.1m.
    -- Cálculo del volumen del reactor
    -- V = PI*D*D*L /4
    -- calculo de la superficie
    -- A = PI*D*L
    -- Cálculo del volumen de la camisa
    -- Vr = PI*(D+2*dc)*(D+2*dc)*L/4 - PI*D*D*L/4

    -- Variables a la entrada
    REAL Te = 390            "Temperatura de entrada de la
alimentación (K) "
    REAL cA0 = 9.3           "Concentración del componente
A en la alimentación (kmol/m3) "
    REAL Tre = 300           "Temperatura del refrigerante a
la entrada del reactor(K) "

```

```

-- Parámetros controladores:
REAL KTreg1 = -1
REAL TTinteg1 = 5
REAL Kcbreg1 = -0.4
REAL Tcbinteg1 = 2

REAL KTreg2 = -1
REAL TTinteg2 = 5
REAL Kcbreg2 = -0.4
REAL Tcbinteg2 = 2

DECLS

REAL q1 "Flujo volumétrico de la
alimentación 1(m3/h) "
REAL Fr1 "Flujo volumétrico del
refrigerante (m3/h) "

REAL q2 "Flujo volumétrico de la
alimentación 1(m3/h) "
REAL Fr2 "Flujo volumétrico del
refrigerante (m3/h) "

REAL cA1 "Concentración del
componente A en la mezcla de reacción (kmol/m3) "
REAL cB1 "Concentración del
componente B en la mezcla de reacción (kmol/m3) "
REAL x1 "Conversion cB1/cA0"

REAL cA2 "Concentración del
componente A en la mezcla de reacción (kmol/m3) "
REAL cB2 "Concentración del
componente B en la mezcla de reacción (kmol/m3) "
REAL x2 "Conversion cB2/cA0"

REAL Tr1 "Temperatura media del
refrigerante en el encamisado (K) "
REAL T1 "Temperatura (K) "

REAL Tr2 "Temperatura media del
refrigerante en el encamisado (K) "
REAL T2 "Temperatura (K) "

REAL Heat1 "calor intercambiado (kJ/h) "
REAL k1 "velocidad de reaccion
(1/h) "

REAL Heat2 "calor intercambiado (kJ/h) "
REAL k2 "velocidad de reaccion
(1/h) "

--Controladores PI

```

```

REAL upT1, uiT1, upCb1, uiCb1, upT2, uiT2, upCb2,
uiCb2

--Referencias
REAL Tref1, Cbref1, Tref2, Cbref2

INIT

T1 = 310
Tr1 = 300
cA1 = 9.3

T2 = 310
Tr2 = 300
cA2 = 9.3

CONTINUOUS

-- calculo de x1
x1 = cB1/cA0
-- calculo de cB1
cB1 = cA0 - cA1
-- Velocidad de reacción del componente A
k1 = 3.03* exp((DH/R)*((T1-333)/(T1*333)))

-- calculo de x2
x2 = cB2/cA0
-- calculo de cB2
cB2 = cA0 - cA2
-- Velocidad de reacción del componente A
k2 = 3.03 * exp((DH/R)*((T2-333)/(T2*333)))

-- balance de masa de A REACTOR 1
V1*cA1' = q1*(cA0 - cA1) - V1*k1*cA1
-- balance de energía en el reactor
V1*rho*Cp*T1' = q1*rho*Cp*(Te - T1) - V1*k1*cA1*DH +
Heat1
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat1 = U*A1*(Tr1-T1)
-- balance de energía en la camisa de refrigerante
Vr1*rhor*Cpr*Tr1' = Fr1*rhor*Cpr*(Tre - Tr1) - Heat1

-- balance de masa de A REACTOR 2
V2*cA2' = q2*(cA0 - cA2) - V2*k2*cA2
-- balance de energía en el reactor
V2*rho*Cp*T2' = q2*rho*Cp*(Te - T2) - V2*k2*cA2*DH +
Heat2
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat2 = U*A2*(Tr2-T2)
-- balance de energía en la camisa de refrigerante
Vr2*rhor*Cpr*Tr2' = Fr2*rhor*Cpr*(Tre - Tr2) - Heat2

```

```

--Controladores:
  -- REACTOR 1
    -- Controlador PI Cb
    upCb1 = Kcbreg1*(Cbref1-cB1)
    uiCb1' = Kcbreg1*(Cbref1-cB1)/Tcbinteg1

    Tref1 = min(max(0, upCb1 + uiCb1),400)
    -- Controlador PI TEMPERATURA
    upT1 = KTreg1*(Tref1-T1)
    uiT1' = KTreg1*(Tref1-T1)/TTinteg1

    Fr1 = min(max(0, upT1 + uiT1),10)

  -- REACTOR 2
    -- Controlador PI Cb
    upCb2 = Kcbreg2*(Cbref2-cB2)
    uiCb2' = Kcbreg2*(Cbref2-cB2)/Tcbinteg2

    Tref2 = min(max(0, upCb2 + uiCb2),400)

    -- Controlador PI TEMPERATURA
    upT2 = KTreg2*(Tref2-T2)
    uiT2' = KTreg2*(Tref2-T2)/TTinteg2

    Fr2 = min(max(0, upT2 + uiT2),10)

END COMPONENT

```

### DISEÑO C: (Fichero: Serie\_CASCADA.el)

#### USE MATH

COMPONENT Serie\_CASCADA

#### DATA

```

-- Constantes químicas y físicas reactivo y producto
REAL rho = 20.657 "Densidad de la corriente
de alimentación, butano (kg/m3)"
REAL rhor = 984.79 "Densidad de la corriente de
refrigerante, agua (kg/m3)"
REAL Cp = 2.2867 "Capacidad calorífica de la
mezcla de reacción (kJ/kg K)"
REAL Cpr = 4.1837 "Capacidad calorífica del
refrigerante (kJ/kg K)"
-- Constantes de la reacción exotérmica
REAL DH = -6900 "Calor de reacción de la reacción
(kJ/kmol)"
REAL U = 2022 "Coeficiente global de
transmisión de calor (kJ/h m2 K)"

```

```

    REAL Ea=65700          "Energía de activación en
(kJ/kmol) "
    REAL R=8.314          "Constante de los gases"
    -- Constantes geométricas de los reactores.
    REAL A1=0.6           "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
    REAL Vr1=0.14         "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
    REAL V1 =0.30         "Volumen del reactor 1 (m3) "

    REAL A2=0.4           "Superficie de transmisión de
calor del encamisado (m2) "
    REAL Vr2=0.09         "Volumen de la camisa de
refrigeracion (m3) "
    REAL V2 =0.20         "Volumen del reactor 2(m3) "
    -- Los diametros de los reactores D1=D2=0.25 y las alturas
son de 1m. La separación entre camisa-reactor es de 0.1m.
    -- Cálculo del volumen del reactor
    -- V = PI*D*D*L /4
    -- calculo de la superficie
    -- A = PI*D*L
    -- Cálculo del volumen de la camisa
    -- Vr = PI*(D+2*dc)*(D+2*dc)*L/4 - PI*D*D*L/4

    -- Variables a la entrada
    REAL Te = 390          "Temperatura de entrada de la
alimentación (K) "
    REAL cA0 = 9.3         "Concentración del componente
A en la alimentación (kmol/m3) "
    REAL Tre = 300         "Temperatura del refrigerante a
la entrada del reactor(K) "
    REAL q=0.52           "Flujo alimentación (m3/h) "

    -- Parámetros controladores:
    REAL KTreg1 = -100
    REAL TTinteg1 = 1
    REAL Kcbreg1 = -100
    REAL Tcbinteg1 =1

    REAL KTreg2 = -100
    REAL TTinteg2 = 1
    REAL Kcbreg2 = -100
    REAL Tcbinteg2 = 1

DECLS

    REAL Fr0              "Flujo refrigerante que entra al primer
reactor (m3/h) "
    REAL Fr1              "Flujo volumétrico del
refrigerante que entra al segundo reactor (m3/h) "

    REAL cA1              "Concentración de A a la
salida del reactor 1(kmol/m3) "

```

```

REAL cB1 "Concentración de B a la
salida del reactor 1(kmol/m3) "
REAL x1 "Conversión alcanzada primer
reactor cB1/cA0"

REAL cA2 "Concentración de A en la
corriente final (kmol/m3) "
REAL cB2 "Concentración de B en la
corriente final (kmol/m3) "
REAL x2 "Conversion cB2/cA0"

REAL Tr1 "Temperatura refrigerante a la
salida del reactor 1 (K) "
REAL T1 "Temperatura en el primer
reactor (K) "

REAL Tr2 "Temperatura refrigerante a la
salida del reactor 2 (K) "
REAL T2 "Temperatura en el segundo
reactor (K) "

REAL Heat1 "calor intercambiado 1er
Reactor(kJ/h) "
REAL k1 "velocidad de reacción 1er
reactor(1/h) "

REAL Heat2 "calor intercambiado 2° reactor
(kJ/h) "
REAL k2 "velocidad de reacción 2°
reactor (1/h) "

--Controladores PI
REAL upT1, uiT1, upCb1, uiCb1, upT2, uiT2, upCb2,
uiCb2

--Referencias
REAL Tref1, Cbref1, Tref2, Cbref2
INIT

T1 = 390
Tr1 = 300
cA1 = 3.255

T2 = 330
Tr2 = 300
cA2 = 1.395

CONTINUOUS

-- calculo de x1
x1 = cB1/cA0
-- calculo de cB1

```

```

cB1 = cA0 - cA1
-- Velocidad de reacción del componente A
k1 = 3.03 * exp((DH/R)*((T1-333)/(T1*333)))

-- calculo de x2
x2 = cB2/cA0
-- calculo de cB2
cB2 = cB1 + (cA1 - cA2)
-- Velocidad de reacción del componente A
k2 = 3.03 * exp((DH/R)*((T2-333)/(T2*333)))

-- balance de masa de A REACTOR 1
V1*cA1' = q*(cA0 - cA1) - V1*k1*cA1
-- balance de energia en el reactor
V1*rho*Cp*T1' = q*rho*Cp*(Te - T1) - V1*k1*cA1*DH +
Heat1
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat1 = U*A1*(Tr1-T1)
-- balance de energía en la camisa de refrigerante
Vr1*rhor*Cpr*Tr1' = Fr0*rhor*Cpr*(Tre - Tr1) - Heat1

-- balance de masa de A REACTOR 2
V2*cA2' = q*(cA1 - cA2) - V2*k2*cA2
-- balance de energia en el reactor
V2*rho*Cp*T2' = q*rho*Cp*(T1 - T2) - V2*k2*cA2*DH +
Heat2
-- calculo del calor intercambiado Heat
Heat2 = U*A2*(Tr2-T2)
-- balance de energía en la camisa de refrigerante
Vr2*rhor*Cpr*Tr2' = Fr1*rhor*Cpr*(Tr1 - Tr2) - Heat2

--Controladores:
-- REACTOR 1
-- Controlador PI Cb
upCb1 = Kcbreg1*(Cbref1-cB1)
uiCb1' = Kcbreg1*(Cbref1-cB1)/Tcbinteg1

Tref1 = min(max(310, upCb1 + uiCb1),400)

-- Controlador PI TEMPERATURA
upT1 = KTreg1*(Tref1-T1)
uiT1' = KTreg1*(Tref1-T1)/TTinteg1

Fr0 = min(max(0, upT1 + uiT1),10)

-- REACTOR 2
-- Controlador PI Cb
upCb2 = Kcbreg2*(Cbref2-cB2)
uiCb2' = Kcbreg2*(Cbref2-cB2)/Tcbinteg2

Tref2 = min(max(310, upCb2 + uiCb2),400)

```

```
--      Controlador PI TEMPERATURA
upT2   = KTreg2*(Tref2-T2)
uiT2'  = KTreg2*(Tref2-T2)/TTinteg2

Fr1    = min(max(0, upT2 + uiT2),10)
```

```
END COMPONENT
```

## ANEXO II: Simbología utilizada.

SÍMBOLO	UNIDADES	SIGNIFICADO
<b>Constantes químicas y físicas</b>		
$\rho_A$	kg/m <sup>3</sup>	Densidad alimentación (butano)
$\rho_r$	kg/m <sup>3</sup>	Densidad refrigerante (agua)
$Cp_A$	kJ/kg·K	Capacidad calorífica alimentación
$Cp_r$	kJ/kg·K	Capacidad calorífica refrigerante
dH	kJ/kmol	Calor de reacción
U	kJ/h·m <sup>2</sup> ·K	Coefficiente global de transmisión de calor
Ea	kJ/mol	Energía de activación
R	kJ/kmol·K	Constante de los gases
<b>Constantes geométricas</b>		
A	m <sup>2</sup>	Área intercambio de calor
V	m <sup>3</sup>	Volumen reactor
Vr	m <sup>3</sup>	Volumen camisa reactor
<b>Variables del proceso</b>		
Te	K	Temperatura entrada alimentación
T	K	Temperatura interior del reactor
Tre	K	Temperatura del refrigerante a la entrada a la camisa
Tr	K	Temperatura refrigerante a la salida de la camisa
Ca0	kmol/m <sup>3</sup>	Concentración reactivo a la entrada al reactor
Ca	kmol/m <sup>3</sup>	Concentración reactivo a la salida del reactor
Cb	kmol/m <sup>3</sup>	Concentración producto a la salida del reactor
Fr	m <sup>3</sup> /h	Flujo de refrigerante
q	m <sup>3</sup> /h	Flujo de alimentación
x	--	Conversión final alcanzada
k	h <sup>-1</sup>	Velocidad de reacción componente A
<b>Otras</b>		
TFG	---	Trabajo de Fin de Grado
PI	---	Control proporcional-integral
RGA	---	Matriz de ganancias relativas

## ANEXO III: TABLA COMPARATIVA

	DISEÑO A				DISEÑO B				DISEÑO C			
	PID		CASCADA		PID		CASCADA		PID		CASCADA	
	ts(seg)	Si (%)	ts(seg)	Si (%)	ts(seg)	Si (%)	ts(seg)	Si (%)	ts(seg)	Si (%)	ts(seg)	Si (%)
Consigna	5	0	15	0	10	0	10	0.01	2	0	16	0.01
Perturbación	0	0	15	0	10	0.1	0	0	2	0.01	0	0
Precio material	13,953.00 €				21,706.00 €				21,646.00 €			
Coste diario	104.36 €				104.36 €				192.50 €			
Beneficio diario	118.40 €				118.40 €				156.30 €			
Beneficio anual	28,416.00 €				28,416.00 €				37,512.00 €			
Amortización	6 meses				9 meses				7 meses			

TABLA: 4.8.1.- Comparativa control-económico

\*En este modelo se da fase no mínima, además de que necesita mayor tiempo de establecimiento inicial.

\*\*si→Sobreimpuls

