

**RECURSOS MULTIMEDIA PARA LA ENSEÑANZA-APRENDIZAJE DEL
CONTROL DE REACTORES QUÍMICOS EMPLEANDO *ASPEN DYNAMICS***

**JORGE IBER LOZANO
SEBASTIÁN RAMOS DURÁN**

**UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
SANTIAGO DE CALI, COLOMBIA
2022**

**RECURSOS MULTIMEDIA PARA LA ENSEÑANZA-APRENDIZAJE DEL
CONTROL DE REACTORES QUÍMICOS EMPLEANDO *ASPEN DYNAMICS***

**JORGE IBER LOZANO
SEBASTIÁN RAMOS DURÁN**

**PROYECTO DE GRADO PRESENTADO PARA OPTAR POR EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO**

**DIRECTOR
NILSON MARRIAGA CABRALES, Ph.D.**

**UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
SANTIAGO DE CALI, COLOMBIA
2022**

DEDICATORIA

Me gustaría dedicar este trabajo a mi madre por todo su apoyo fraternal.

También al recuerdo de mi padre. Espero estes orgulloso.

Jorge Lozano

Dedico este trabajo a mi abuela María Elena, por su amor y apoyo en todo momento.

Sebastián Ramos

AGRADECIMIENTOS

Gracias Daniela, por el apoyo, la paciencia y la compañía.

Gracias Profesor Nilson, por su paciencia, dedicación y guía.

Jorge Lozano

Gracias Gabriela, por el apoyo y la compañía, aún en la distancia.

Sebastián Ramos

RESUMEN

La enseñanza-aprendizaje del control de procesos en Ingeniería Química se caracteriza por estudiar sistemas físicos (llenado/vaciado de tanques e intercambiadores de calor). Se dejan de lado los reactores químicos, equipos insignia en Ingeniería Química. En este trabajo de grado se diseñaron contenidos multimedia enfocados en la facilitar y promover el uso del software *Aspen Dynamics* en los procesos de enseñanza-aprendizaje de control de reactores químicos.

Como primer paso, se seleccionaron cuatro casos de estudio, que abarcaron reactores continuos y discontinuos. Para cada caso de estudio se escogió un modelo termodinámico apropiado (según condiciones de operación y sustancias involucradas); se validó la cinética química reportada en la literatura, verificando que los resultados de la simulación concordaran con los resultados experimentales; finalmente se escaló la cinética química a un reactor químico industrial en estado estacionario.

Luego, se exportó la simulación en estado estacionario a *Aspen Dynamics*. Se validaron diferentes reglas de sintonización y estrategias de control, se realizaron cambios en las condiciones de operación y se observó la respuesta del sistema en aspectos clave (seguridad, operabilidad y producción).

Finalizadas las simulaciones se elaboraron los video-tutoriales y los talleres. Los videos-tutoriales se enfocaron en facilitar el uso de *Aspen Dynamics*, mostrando la metodología de trabajo y el manejo de las herramientas de la aplicación. Por otra parte, los talleres se enfocaron en practicar utilizando los casos de estudios desarrollados en este trabajo, observar el comportamiento de los sistemas químicos y fomentar la discusión con relación a las variables respuesta.

Aspen Dynamics es una poderosa herramienta de simulación. Los modelos que utiliza son rigurosos. Esto permitió que los casos de estudio abordados en este trabajo fueran realistas en su diseño y operación, fomentando el análisis, el sentido crítico y la solución de problemas, lo que potencia las habilidades del estudiante de Ingeniería Química.

Palabras clave: control de procesos, reactores químicos, *Aspen Dynamics*.

Contenido

	Pág.
INTRODUCCIÓN	12
1. MARCO TEÓRICO	15
1.1 MARCO CONCEPTUAL	15
1.2 ANTECEDENTES	17
2. REACTOR DE ÉTER DI-N-AMÍLICO	19
2.1 Introducción	19
2.2 Metodología	19
2.3 Resultados	24
3. REACTOR DE ÓXIDO DE ETILENO	27
3.1 Introducción	27
3.2 Metodología	27
3.3 Resultados	32
4. REACTOR DE ACETATO DE METILO	35
4.1 Introducción	35
4.2 Metodología	36
4.3 Resultados	41
5. REACTOR DE PROPILENGLICOL	46
5.1 Introducción	46
5.2 Metodología	46
5.3 Resultados	48
6. CONCLUSIONES	52
REFERENCIAS	53

Lista de figuras

Tabla 1. Parámetros cinéticos.	21
Tabla 2. Lazos de control en la producción de OE.	30

Lista de figuras

Figura 1. Esquema del control realimentado. Fuente: (Chen et al., 2018).	16
Figura 2. Datos obtenidos con diferentes modelos termodinámicos. Fuente: elaboración propia.	20
Figura 3. Porcentaje de desviación de los resultados con parámetros originales y ajustados. Fuente: elaboración propia.	21
Figura 4. Sistema discontinuo para la producción de DNPE. Fuente: elaboración propia.	22
Figura 5. Sistema discontinuo para la producción de DNPE en Aspen Dynamics. Fuente: elaboración propia.	23
Figura 6. Ciclo de operación y tareas programadas del reactor de DNPE. Fuente: elaboración propia.	24
Figura 7. Parámetros controlados y manipulados durante el ciclo de operación en discontinuo del reactor de DNPE. Fuente: elaboración propia.	25
Figura 8. Parámetros controlados y manipulados durante el ciclo de operación en semi-discontinuo del reactor de DNPE. Fuente: elaboración propia.	26
Figura 9. Diagrama de flujo para la producción de OE. Fuente: elaboración propia.	28
Figura 10. Diagrama de inflamabilidad de la mezcla etileno-metano. Fuente: elaboración propia.	29
Figura 11. Esquemas de control en la producción de OE. Fuente: elaboración propia.	31
Figura 12. Resultados dinámicos al perturbar la temperatura del fluido de enfriamiento. La leyenda representa el caso de estudio. Fuente: elaboración propia.	33
Figura 13. Resultados dinámicos al perturbar la temperatura del flujo molar de recirculación. La leyenda representa el caso de estudio. Fuente: elaboración propia.	34
Figura 14. Desviación de la conversión del ácido acético en la validación. Fuente: elaboración propia.	37
Figura 15. Sistema discontinuo para la producción de acetato de metilo. Fuente: elaboración propia.	38
Figura 16. Ciclo de operación y tareas programadas del reactor de Acetato de Metilo. Fuente: elaboración propia.	39
Figura 17. Esquema de control PI para la producción de acetato de metilo. Fuente: elaboración propia.	40

Figura 18. Esquema de control en cascada PI-PI para la producción de acetato de metilo. Fuente: elaboración propia.	40
Figura 19. Temperatura del reactor y apertura de válvula del reactor de Acetato de Metilo. Fuente: elaboración propia.	42
Figura 20. Diagrama de proceso de la producción de PG. Fuente: elaboración propia.	47
Figura 21. Esquemas de control del reactor de PG. Fuente: elaboración propia.	48
Figura 22. Perturbación en la temperatura de entrada del agua. Fuente: elaboración propia.	49

NOMENCLATURA

A_{DPNE} y B_{DPNE} : Parámetros cinéticos agrupados para la reacción de DPNE

K_{DPNE} : Constante de equilibrio termodinámico para la reacción de DPNE

A_{DPNE}^{DF1} : Parámetro A del factor Driving Force para la reacción directa.

B_{DPNE}^{DF1} : Parámetro B del factor Driving Force para la reacción directa.

C_{DPNE}^{DF2} : Parámetro A del factor Driving Force para la reacción inversa.

D_{DPNE}^{DF2} : Parámetro B del factor Driving Force para la reacción inversa.

E_{DPNE}^{A1} : Parámetro A del primer término del factor de adsorción.

F_{DPNE}^{A1} : Parámetro B del primer término del factor de adsorción.

G_{DPNE}^{A2} : Parámetro A del segundo término del factor de adsorción.

H_{DPNE}^{A2} : Parámetro B del segundo término del factor de adsorción.

b_i : Parámetros cinéticos para la reacción de DPNE

k_{AM}^f : Factor pre-exponencial para la reacción de Acetato de Metilo directa.

k_{AM}^b : Factor pre-exponencial para la reacción de Acetato de Metilo inversa.

C_{AM}^A : Concentración molar del ácido acético en la reacción de Acetato de Metilo.

C_{AM}^B : Concentración molar del metanol en la reacción de Acetato de Metilo.

C_{AM}^C : Concentración molar del acetato de metilo en la reacción de Acetato de Metilo.

C_{AM}^D : Concentración molar del agua en la reacción de Acetato de Metilo.

k_{OE}^1 : Factor pre-exponencial para la oxidación total del Óxido de Etileno.

k_{OE}^2 : Factor pre-exponencial para la oxidación parcial del Óxido de Etileno.

K_{OE}^1 : Primer parámetro de adsorción para la reacción e Óxido de Etileno

K_{OE}^2 : Segundo parámetro de adsorción para la reacción e Óxido de Etileno

$P_{OE}^{O_2}$: Presión parcial del oxígeno en la reacción de Óxido de Etileno

$P_{OE}^{C_2H_4}$: Presión parcial del oxígeno en la reacción de Óxido de Etileno

$P_{OE}^{CO_2}$: Presión parcial del oxígeno en la reacción de Óxido de Etileno

INTRODUCCIÓN

Se hace referencia al control de procesos químicos industriales cuando se desea un comportamiento preestablecido en las condiciones de operación y existe alguna estrategia de control que permite alcanzar dicho comportamiento. Desde esta perspectiva, el control de procesos puede concebirse en todo tipo de situaciones, desde las actividades sociales desarrolladas bajo la supervisión de una entidad o institución hasta el desarrollo de procesos automatizados de manufactura.

Muchos procesos industriales requieren sistemas de control, no obstante, es muy común encontrar los sistemas de control en los reactores químicos. La importancia del control de un reactor se ve reflejada en la seguridad de las personas que lo operan, la integridad de los equipos, la calidad del producto y en la economía de la empresa que desarrolla el proceso (Luyben, 2007).

El continuo desarrollo tecnológico ha marcado una nueva etapa para la academia, cada día emerge software y hardware con accesos a bases de datos y destacadas capacidades para el desarrollo de procesos lógicos complejos. Para el campo de ingeniería química se ha desarrollado software especializado como las herramientas del paquete de simulación de *Aspentech*, con las que es posible simular procesos de escala industrial para su estudio y análisis en computadores personales no necesariamente robustos.

Las herramientas de simulación facilitan el estudio de algunos procesos dinámicos en un gran espectro de equipos industriales y con la oportunidad de apreciar los efectos de diferentes variaciones o perturbaciones; a diferencia de la construcción de equipos a escala piloto como columnas de destilación o reactores que requieren de grandes inversiones. No obstante, el acceso a cursos oficiales de capacitación en materia de estos programas es limitado y de alto costo.

Varios trabajos se han dedicado a estudiar el impacto de la implementación de programas de simulación como recurso complementario en los cursos de control de procesos, los autores de estos trabajos han manifestado resultados satisfactorios en el desempeño académico tanto de estudiantes como de profesores, destacan mejoría en la comprensión de algunos conceptos y gran adaptación a los programas por parte de los estudiantes; entre los programas de simulación

empleados se encuentran: *Simulink* (Lewin et al., 1996), *Matlab* (Li & Huang, 2017) y *Aspen Hysys* (Taimoor, 2016).

(Bequette, 2019) y (Serbezov & Rice, 2019) señalan un vacío en la educación en temas de control de procesos para estudiantes de ingeniería química, debido a falencias en el proceso de formación de los estudiantes que les impide relacionar la teoría de control con los equipos en la práctica, particularmente en los reactores químicos.

Para el caso de la Universidad del Valle, no se cuenta actualmente con un reactor químico a escala piloto que permita analizar de forma práctica los conceptos y las estrategias de control. Sin embargo, contar con un reactor químico a escala piloto no resolvería completamente la situación, debido que no se podría tener una respuesta rápida del sistema, ni la suficiente libertad para modificar los esquemas de control o evaluar condiciones de operación extremas (Taimoor, 2016).

Una alternativa a esta limitación consiste en realizar la práctica de forma virtual empleando un simulador, uno de los más utilizados en la enseñanza de control es MATLAB (Silverstein et al., 2016), aunque se requiere de habilidades avanzadas de programación al momento de simular reactores químicos en MATLAB u otros programas similares (Taimoor, 2016). Por otra parte, *Aspen Dynamics* está enfocado en procesos industriales, debido a que cuenta con acceso a bases de datos, modelos termodinámicos y propiedades fisicoquímicas de miles de sustancias.

En el presente estudio se simularon cuatro reactores (dos continuos y dos discontinuos) y sus esquemas de control en *Aspen Dynamics*. Además, se desarrollaron video-tutoriales y talleres escritos para facilitar y promover los procesos de enseñanza-aprendizaje en el uso de *Aspen Dynamics* en el control de reactores químicos.

Durante el estudio de sistemas continuos y discontinuos se afrontaron diversos tipos de dificultades, se observaron las oportunidades y obstáculos que un estudiante de Ingeniería Química puede afrontar al realizar una simulación dinámica en *Aspen Dynamics*. La mayoría de estos retos, con la orientación indicada, pueden ser adaptados en talleres o video-tutoriales para disminuir la curva de aprendizaje en el uso de la herramienta y estimular el pensamiento crítico desde el punto de vista de la ingeniería.

Las simulaciones de los cuatro reactores exhibieron respuestas satisfactorias por parte de los sistemas de control propuestos, tanto bajo las condiciones adversas de los sistemas seleccionados, como en los momentos que se perturbaron. Los comportamientos de las variables controladas y las manipuladas, permitieron construir debates en torno a los fenómenos fisicoquímicos presentes en cada sistema.

Como producto del presente trabajo, se desarrollaron herramientas didácticas que permitirán potenciar los conocimientos y el pensamiento crítico de los estudiantes de Ingeniería Química desde el campo de control de procesos. Además, el material desarrollado junto con las oportunidades exploradas en el control de reactores permitirá estrechar lazos entre los contenidos de otros cursos y ofrecer un contenido académico más integral desde la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad del Valle.

En el primer capítulo encontrará el marco conceptual y los antecedentes del estudio. Posteriormente se presenta cada caso de estudio propuesto por capítulo, en donde hallará una introducción al sistema, la metodología implementada para realizar la simulación y los resultados evidenciados. En el capítulo final encontrará las conclusiones del trabajo.

1. MARCO TEÓRICO

1.1 MARCO CONCEPTUAL

1.1.1 Control de procesos. En el campo de la Ingeniería Química se denomina *proceso* a la transformación de la materia prima en un producto con valor agregado. Para esto, el proceso debe cumplir ciertos requerimientos de seguridad, de calidad, ambientales, económicos, entre otros. Con el fin de lograr esos objetivos se debe contar con un esquema de control, pero antes de hablar de los esquemas de control son necesarias las siguientes definiciones básicas:

Variable controlada: es la variable del proceso que se controla, usualmente es la variable de salida del proceso.

Variable manipulada: es la variable del proceso que el actuador modifica con el fin de afectar la variable controlada.

Valor de referencia: también se le conoce como *set point*. Es el valor deseado de la variable controlada, puede ser constante o variar con el tiempo.

1.1.2 Estrategias de control. Existen múltiples esquemas de control de acuerdo con el proceso, por esa razón a continuación se mencionan las estrategias de control más comunes (Bollaín Sánchez, 2019).

- Control retroalimentado o *feedback*
- Control por adelanto o *feedforward*
- Control en cascada
- Control por relación
- Control selectivo
- Control predictivo
- Control con restricciones
- Compensación de tiempos muertos. *Smith predictor*

1.1.3 Ajuste de parámetros de control. En el contexto de control de procesos, se llama ajuste (*tuning*) al proceso de configuración de valores apropiados para los parámetros de control proporcional, integral y derivativo de un controlador, para obtener una respuesta satisfactoria (Joseph & O, 2017). Existen múltiples métodos de ajuste de sistemas de control, a continuación se mencionan los más comunes:

- Suponer y verificar
- Ziegler-Nichols
- Cohen-Coon
- Wang-Juang-Chan
- Chien-Hrone-Reswick

1.1.4 Elementos de un lazo de control. En la Figura 1 se muestra un lazo de control simplificado. Luego, se describen los elementos que lo componen.

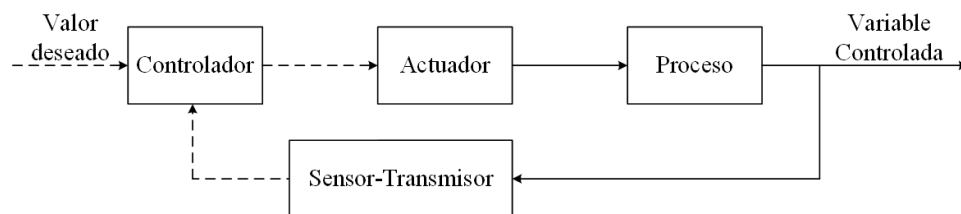


Figura 1. Esquema del control realimentado. Fuente: (Chen et al., 2018).

Sensor-Transmisor: es el equipo encargado de medir la variable controlada y de transmitir la señal al controlador.

Actuador: es el equipo que modifica la variable manipulada, también se le conoce como elemento final de control. El tipo más frecuente de actuadores son las válvulas. En este grupo también están las bombas, los compresores, las resistencias eléctricas, entre otros.

Controlador: es el equipo que recibe la señal del sensor-transmisor y determina la acción que se debe ejecutar.

1.1.5 Contenido multimedia. Contenido multimedia se refiere a la presentación de palabras (ya sean habladas o escritas) o imágenes (como ilustraciones, fotos, animaciones o videos) por parte de una persona u objeto (Mayer & Mayer E., 2005).

Video-tutorial: es una herramienta multimedia que se deriva de los tutoriales tradicionales, la diferencia radica en el contenido visual y auditivo que se emplea, su objetivo es exponer una guía paso a paso para realizar específicamente una tarea.

1.2 ANTECEDENTES

Aspen Dynamics es una herramienta de gran utilidad para los ingenieros químicos. Con esta herramienta se han desarrollado estudios sobre el análisis de seguridad y riesgos en procesos industriales (Berdouzi et al., 2016; Cui et al., 2019), la optimización de procesos (Brito et al., 2018; Narayana et al., 2020; Negrellos-Ortiz et al., 2018) y el diseño y control de equipos (Cui et al., 2018; Wanotayaroj et al., 2020).

(Luyben, 2012) simuló, en *Aspen Dynamics*, cinco casos de estudio donde intervienen reactores químicos de tanque agitado y flujo pistón. El objetivo del estudio fue evaluar el riesgo del proceso con base en el tiempo que le tomó a las variables controladas llegar a un punto crítico ante una perturbación o falla en el sistema. (Li et al., 2013) simuló, en *Aspen Dynamics*, la producción de metano a baja temperatura en un reactor de lecho empacado y comparó la simulación con la solución numérica del modelo que describe el proceso. Los resultados mostraron similitudes en ambas metodologías ante las mismas perturbaciones. Berdouzi y colaboradores (2016) emplearon una simulación dinámica, elaborada con *Aspen Dynamics*, para realizar un análisis de seguridad y riesgos en el proceso de oxidación de tiosulfato de sodio con peróxido de hidrógeno (una reacción irreversible, rápida y altamente exotérmica) en un reactor semi-discontinuo, para esto simularon diferentes escenarios de fallo en el sistema de refrigeración y a partir de los resultados plantearon acciones de prevención y protección.

Por otra parte, se han utilizado programas de simulación en la enseñanza de control de procesos desde finales de los años noventa, no obstante, los programas disponibles en ese momento como *Matlab* y *Simulink* sólo permitían diseñar y simular la acción de los controladores, presentando dificultades con el uso de datos en tiempo real, por lo que fue necesario desarrollar una aplicación que permitiera la lectura de datos por parte de *Simulink*. A pesar de lo novedoso de estos programas, los estudiantes y los docentes mostraron gran adaptación en poco tiempo y alcanzaron con éxito los objetivos propuestos para el curso (Lewin et al., 1996).

En la última década se ha reconocido en la academia la necesidad de mejorar los cursos de control de procesos, algunos autores han estudiado la posibilidad de ampliar o cambiar el contenido del curso (Lee & Chen, 2017), otros han considerado importante el componente práctico y han propuesto diferentes escenarios para cambiar la metodología de enseñanza (Uyanik et al., 2015). Entre las metodologías más destacadas se encuentra la implementación de herramientas de simulación para realizar la práctica en los cursos de control.

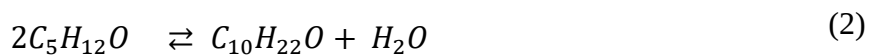
(Komulainen et al., 2012) estudiaron la implementación de programas de simulación en tres cursos de ingeniería química, entre ellos el curso de control de procesos. Se usó un modelo de dos tanques con diferentes estrategias de control donde tanto los parámetros del controlador como las características de las válvulas podían ser manipulados. El programa empleado fue D-SPIICE. Los autores analizaron los resultados y encontraron satisfactorio el aprendizaje de los estudiantes y el desarrollo de los profesores, al margen de las limitaciones del programa, puesto que no se pudo modificar el modelo de estudio.

(Taimoor, 2016) comparó dos herramientas de simulación (*Aspen Hysys* y *Simulink*) tras implementar cada una en diferentes semestres para el mismo curso de control. Se obtuvieron mejores resultados al utilizar *Aspen Hysys*, ya que permitió a los estudiantes formular y resolver preguntas relacionadas con las consecuencias de alterar parámetros, equipos y sustancias. *Aspen Hysys* destacó sobre *Simulink* porque permite hacer simulaciones más robustas (por los modelos matemáticos y termodinámicos) y enfocadas en ingeniería química, esto muestra la ventaja de usar un simulador especializado en procesos químicos.

2. REACTOR DE ÉTER DI-N-AMÍLICO

2.1 Introducción

La esterificación del 1-pentanol para producir éter di-n-amílico (ec. 2) es una reacción en fase líquida, limitada por el equilibrio y ligeramente exotérmica ($\Delta H_{rx} = -3.8 \text{ kJ mol}^{-1}$). La reacción ocurre en presencia de un catalizador heterogéneo; las moléculas de agua producidas por la reacción inhiben el catalizador, esto ha representado un desafío en el planteamiento de un modelo cinético fiel a la reacción (Bringué et al., 2007).



El éter di-n-amílico (DPNE por sus siglas en inglés) se ha reconocido recientemente debido a que es un candidato potencial para la mezcla de combustibles (*blending*), la búsqueda de alternativas energéticas propulsó las investigaciones de su producción en las últimas dos décadas. No obstante, los estudios para el diseño y operación industrial son pocos, además, se enfocan principalmente en operación continua, usando esquemas de operación de reactores tubulares con sistema de separación y recirculación o haciendo uso de columnas de destilación reactivas (Bildea et al., 2015; Javaid & Bildea, 2015).

Para el caso estudiado, se tuvo en cuenta la cinética reportada en (Bringué et al., 2011). Estos autores desarrollaron dos modelos cinéticos para la deshidratación del 1-Pentanol usando como catalizador una resina sulfónica de estireno-DVB Amberlyst 70, se consideró el efecto inhibitor del agua en el catalizador. Los datos cinéticos reportados sugieren el uso de un reactor por lotes, por lo que se planteó la operación en discontinuo y semi-discontinuo para este reactor. El modelo LHHW (Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson) se presenta en las ec. 1A-3A del apéndice A1 y los parámetros cinéticos se presentan en la tabla 1A.

2.2 Metodología

Se consideró el uso de varios modelos termodinámicos debido a que el proceso involucra compuestos polares, hay presencia de nitrógeno en estado gaseoso y el sistema opera a altas

presiones (20 bar). Entre los modelos considerados se encuentran: PSRK, PEN-ROB, PRMHV2, SR-POLAR y RKSMHV2. Inicialmente se realizó una simulación de validación en *Aspen Plus* con la cinética reportada por Bringué y colaboradores (2011) para cada uno de los modelos anteriormente mencionados, los resultados que mejor se ajustaron se presentan en la Figura 2. Ambos modelos termodinámicos tienen una conducta similar, subestiman el comportamiento cinético. En este sentido, ambas opciones son válidas, sin embargo, la falta de parámetros experimentales de interacción binaria favoreció la selección de un modelo predictivo, por lo que se utilizó PSRK.

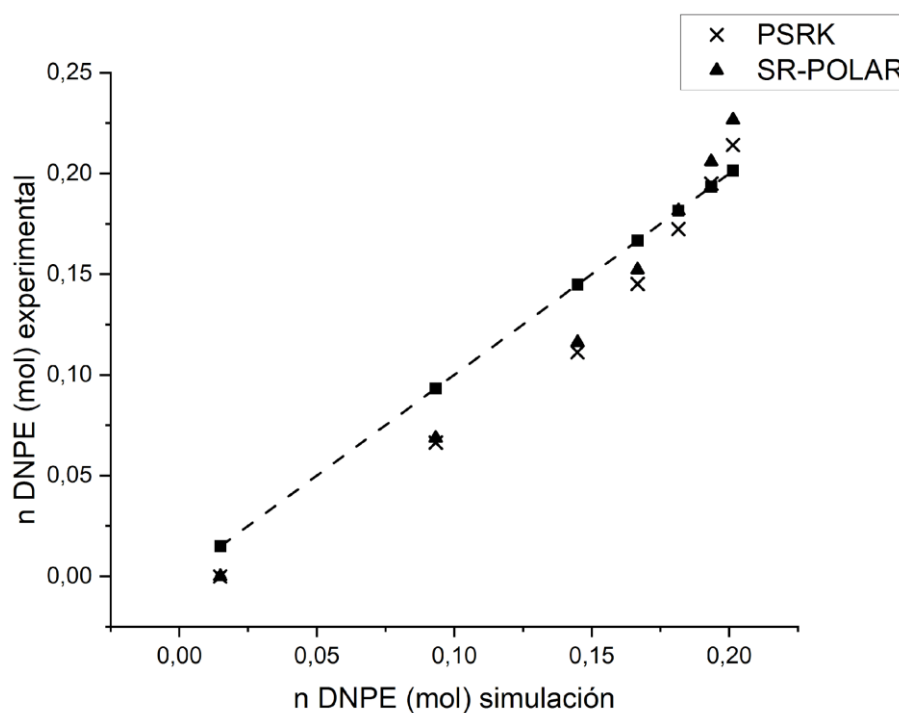


Figura 2. Datos obtenidos con diferentes modelos termodinámicos. Fuente: elaboración propia.

Se realizó un ajuste a la cinética a partir de la ecuación ajustada para ser compatible con el formato de *Aspen Plus*, el resultado del ajuste se reporta en la ecuación 4A del apéndice A2. En la Tabla 1 se muestran los parámetros ajustados para los factores de fuerza motriz (*Driving Force*) y adsorción (*Adsorption*). El ajuste realizado presentó porcentajes de desviación menores en los resultados con respecto a los valores originales (Figura 3). La suma residual de cuadrados

(SSR) fue 3×10^{-4} para los datos obtenidos con el ajuste, mientras que para los datos obtenidos con la cinética original fue 2.6×10^{-3} .

Tabla 1. Parámetros cinéticos.

Parámetro	Bringué	Ajuste
A_{DPNE}^{DF1} (kmol/kg-h)	27.8	28.7
B_{DPNE}^{DF1}	-14275	-14275
C_{DPNE}^{DF2} (kmol/kg-h)	25.7	25.7
D_{DPNE}^{DF2}	-15058.4	-15058.4
E_{DPNE}^{A1}	0	-0.2
F_{DPNE}^{A1}	0	0
G_{DPNE}^{A2}	6.8	6.8
H_{DPNE}^{A2}	-2952	-2547

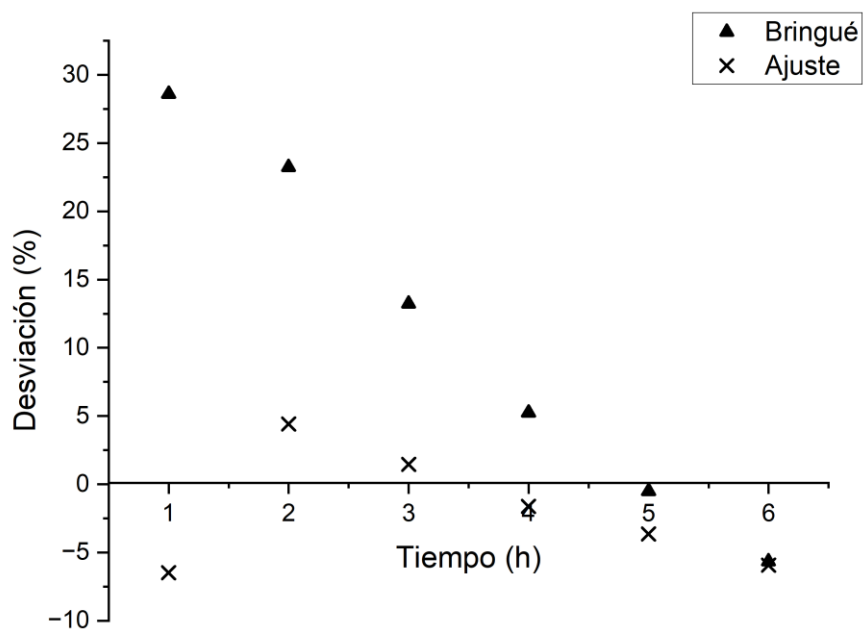


Figura 3. Porcentaje de desviación de los resultados con parámetros originales y ajustados.
Fuente: elaboración propia.

Debido a la incompatibilidad de *Aspen Dynamic* con el bloque RBatch, fue necesario construir un sistema discontinuo a partir de un bloque RCSTR. Al sistema se incorporaron válvulas para asistir en los ciclos de operación y para ejercer control de presión al reactor. Además, se implementó una recirculación con paso por un intercambiador de calor a la salida de producto del reactor, con el propósito de alcanzar temperatura de reacción y mantenerla con un lazo de control. El sistema discontinuo obtenido se presenta en la Figura 4, las especificaciones de diseño del reactor y el balance de materia del sistema se presentan en las tablas 2A y 3A del apéndice A3.

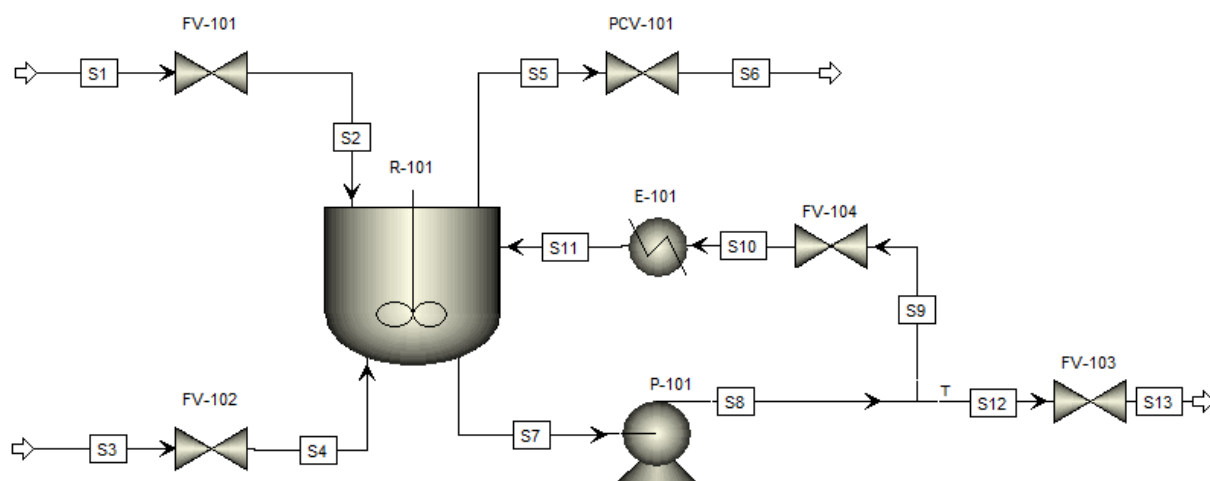


Figura 4. Sistema discontinuo para la producción de DNPE. Fuente: elaboración propia.

Las válvulas se implementaron con dos objetivos, asistir en los diferentes ciclos de operación del reactor y ejercer el control de presión. Las válvulas FV-101, FV-103 y FV-104 permiten manipular el alimento, la recirculación y la corriente de salida del sistema respectivamente. Mediante la válvula FV-102 se regula el suministro de nitrógeno al reactor, mientras que la válvula PCV-101 se implementó como válvula de control de presión. Las especificaciones de diseño de las válvulas se encuentran en la tabla 4A del apéndice A3.

Después de obtener resultados en la simulación estacionaria, se exportó el sistema a *Aspen Dynamics* mediante la opción gobernado por la presión (*Pressure-Driven*). Se configuraron los lazos de control de presión y de temperatura del reactor, empleando como actuadores la válvula PCV-101 y el intercambiador E-101 (Figura 5). La señal de salida del controlador de presión

PC indica el porcentaje de apertura de la válvula, mientras que en el caso del controlador de temperatura TC la señal indica la cantidad de calor suministrada por el intercambiador de calor.

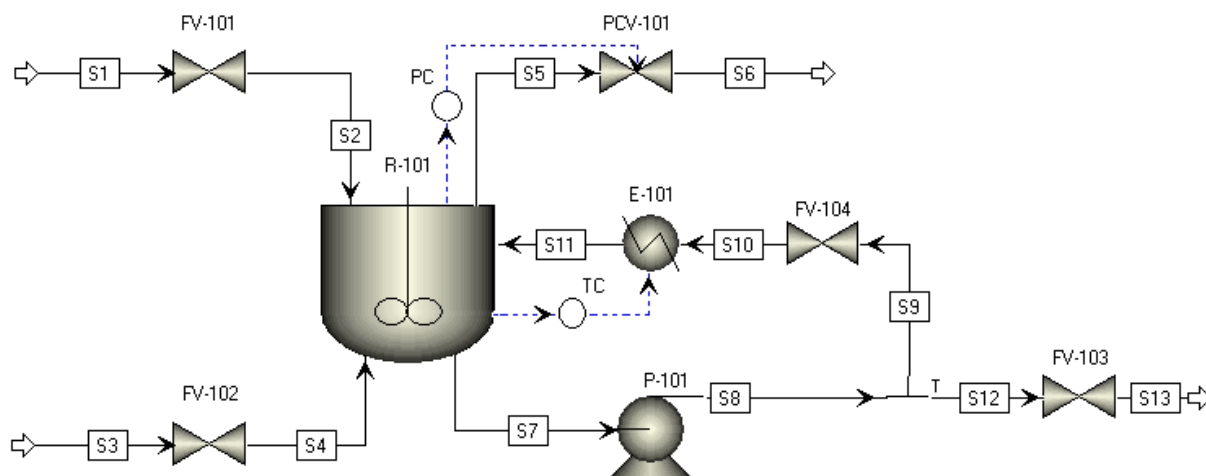


Figura 5. Sistema discontinuo para la producción de DNPE en *Aspen Dynamics*. Fuente: elaboración propia.

Al ejecutar la simulación dinámica, el sistema opera de manera continua con los parámetros calculados en *Aspen Plus*, por este motivo fue necesario hacer una transición hacia la operación discontinua. Se utilizó la herramienta tarea de *Aspen Dynamics*, para modificar parámetros del sistema en diferentes momentos de la simulación. Para cumplir con el esquema de operación discontinuo, se programaron seis tareas, mientras que para operar el reactor en semi-discontinuo fueron necesarias ocho. Los parámetros manipulados fueron el porcentaje de apertura de las válvulas y el valor de referencia del controlador de temperatura. La función de cada tarea dentro del ciclo de operación del reactor se puede observar en la Figura 6. Las tareas programadas pueden consultarse en el apéndice A4.

Por último, se ajustaron los parámetros de los controladores con ayuda de la herramienta sintonizar (tune) de *Aspen Dynamics*. La herramienta *tune* se usó durante la etapa de reacción del reactor, momento en el que el sistema tiene la mayor estabilidad. El controlador de temperatura se configuró inicialmente en manual con una salida (*output*) igual a cero, debido a que no se necesita suministro de calor al inicio, posteriormente se asigna el valor de referencia mediante las tareas programadas. Los parámetros usados en los controladores se encuentran en las tablas 5A-8A del apéndice A5.

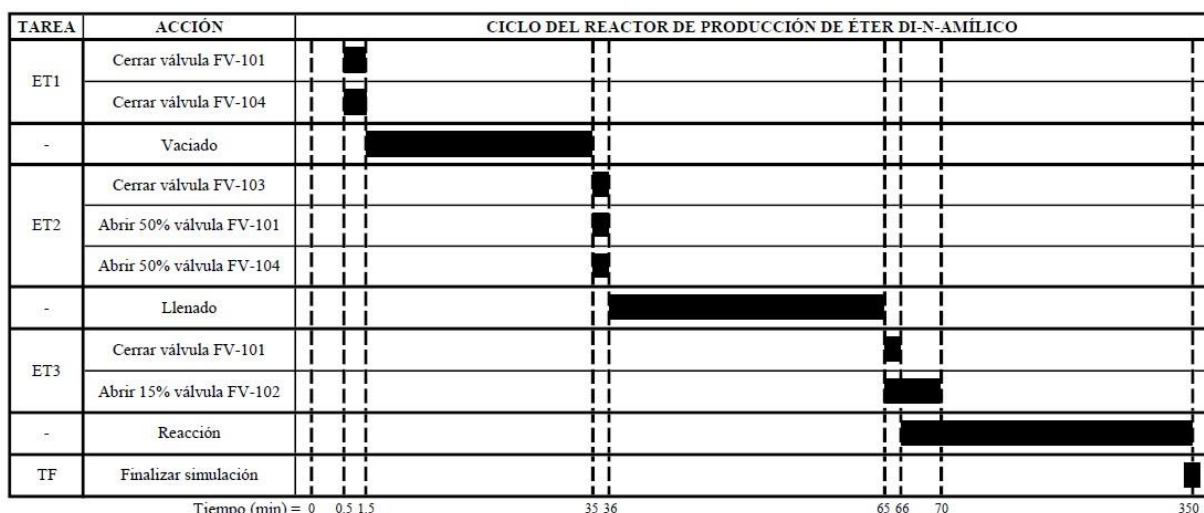


Figura 6. Ciclo de operación y tareas programadas del reactor de DNPE. Fuente: elaboración propia.

2.3 Resultados

La presión del reactor se ajusta al valor de referencia durante la operación (Figura 7A), la desviación máxima durante esta etapa fue de 3%. La presión disminuyó a 4 bar inicialmente debido a que se programó la descarga del reactor, y aumentó nuevamente a 20 bar al reanudar el alimento de nitrógeno en la etapa de carga. Se presentó una caída de presión de 2 bar justo al alcanzar los 20 bar del valor de referencia, debido a que en ese momento se retira el alimento de nitrógeno al reactor, no obstante, la presión se recupera gracias al ingreso de reactivo en el reactor.

La apertura de la válvula de alimento de nitrógeno al reactor alcanzó un valor máximo de 30.9% durante la etapa de operación (Figura 7B), su comportamiento fue oscilante al inicio debido al ciclo de operación programado, no obstante, una vez inició la etapa de reacción descendió levemente.

El perfil de temperatura del reactor se comporta de acuerdo con lo planeado (Figura 7C). En los primeros 125 minutos la temperatura y el valor de referencia son iguales, esto ocurre debido a que el controlador está configurado en manual con una salida fija en cero. En el min 126 el reactor está completamente cargado y el valor de referencia cambia a 190 °C, la temperatura alcanza y sobrepasa este valor, debido a que el reactor es adiabático. No obstante, este aumento

no supone un problema, puesto que la temperatura del reactor está por debajo de la temperatura máxima de operación del catalizador durante toda la operación.

El suministro de calor al reactor (Figura 7D) presenta un pico único en el min 126, debido al cambio súbito del valor de referencia, no obstante, el suministro desciende por regulación del controlador de temperatura del reactor.

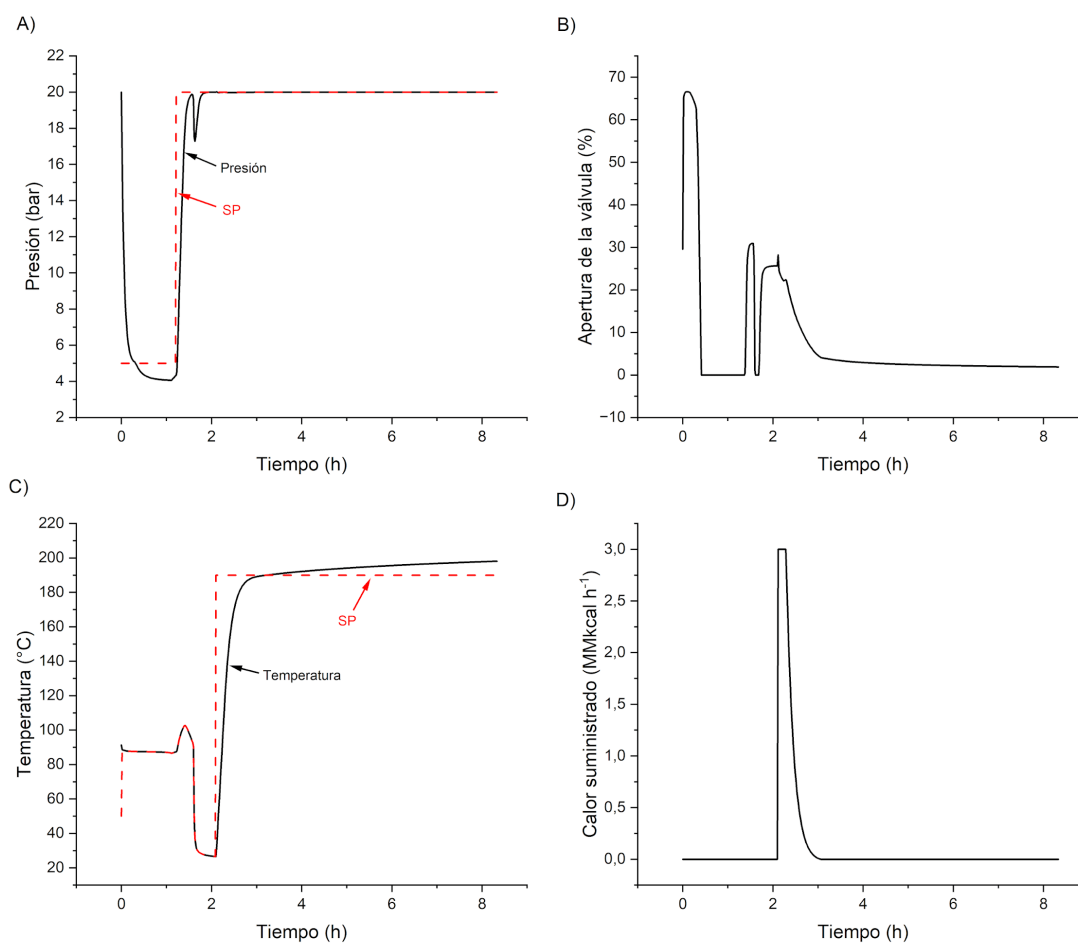


Figura 7. Parámetros controlados y manipulados durante el ciclo de operación en discontinuo del reactor de DNPE. Fuente: elaboración propia.

La temperatura presentó un comportamiento más estable en la operación semicontinua. (Figura 8C). Si bien la alimentación continua funciona como una perturbación al sistema, porque aumenta la presión y disminuye la temperatura, el sistema obtiene una estabilidad adicional debido a que el controlador de temperatura puede aportar más calor durante ese período para

aumentar la temperatura (Figura 8D). Además, el controlador alcanza la temperatura de operación más rápido que en la operación discontinua, aun cuando el parámetro de ganancia del controlador es menor. Esto debido a que al ser menor la carga inicial se facilita al controlador alcanzar la temperatura de reacción.

Cabe destacar que en el min 151, cuando inicia el suministro de energía al sistema, se obtiene un aumento de presión que no se presenta en el caso de estudio discontinuo (Figura 8A). Esto ocurre como consecuencia de que en el reactor hay menor cantidad de reactivo. La presión se afecta y el controlador de presión responde con una apertura pronunciada en la válvula de control (Figura 8B).

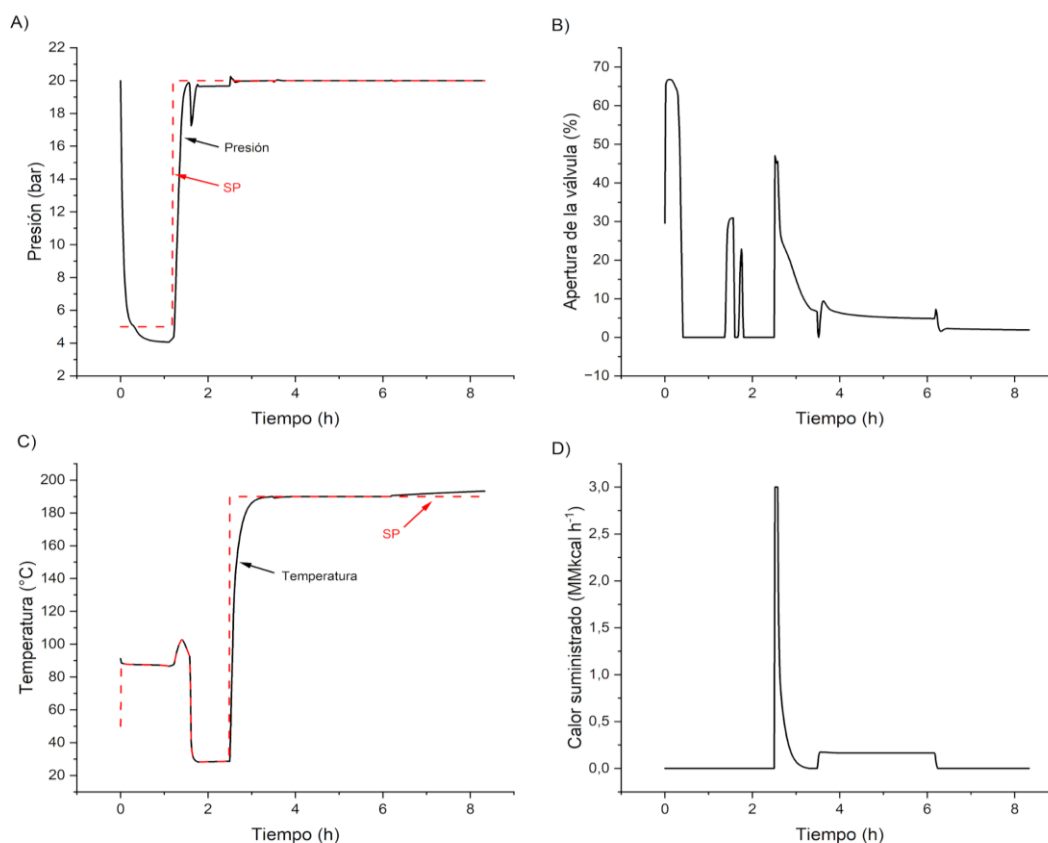


Figura 8. Parámetros controlados y manipulados durante el ciclo de operación en semi-discontinuo del reactor de DNPE. Fuente: elaboración propia.

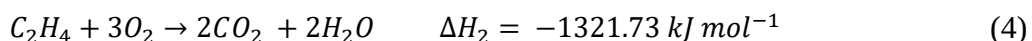
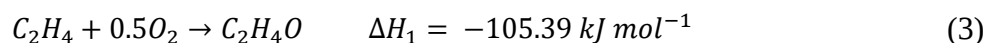
Para mayores detalles sobre la simulación del reactor de DNPE, hacer clic sobre el siguiente enlace: [Reactor de DNPE en Aspen Dynamics](#)

3. REACTOR DE ÓXIDO DE ETILENO

3.1 Introducción

El óxido de etileno (OE) es un intermediario químico utilizado en la producción de anticongelantes, detergentes, medicamentos, plásticos y otros insumos químicos. Este se produce por la oxidación parcial del etileno en presencia de oxígeno, la reacción ocurre en estado gaseoso, es promovida por un catalizador heterogéneo y es exotérmica.

En la producción industrial del OE se da la oxidación parcial (ec. 3) y total del etileno (ec. 4). En la reacción 1 el etileno reacciona con oxígeno para producir OE, en la reacción 2 los mismos reactivos producen agua y dióxido de carbono. La combustión total del etileno es una reacción indeseada, principalmente por la gran cantidad de energía que libera, alrededor de doce veces más calor que la combustión parcial.



3.2 Metodología

La producción de OE se puede dividir, a grandes rasgos, en la zona de reacción y separación (figura 15). Debido a las condiciones de operación propias de cada zona se utilizaron modelos termodinámicos diferentes. Se usó el modelo termodinámico PEN-ROB (ecuación de estado de Peng-Robinson) en la zona de reacción, ya que se opera con gases polares a altas presiones. En la zona de separación se utilizó el modelo NRTL-RK por las interacciones líquido-vapor en la columna de absorción. La cinética de las reacciones fue reportada por (Gan et al., 2001), es del tipo LHHW. Las expresiones cinéticas pueden consultarse en el apéndice A6, ec. 5A-10A.

Se modificó el primer término de las ecuaciones 7A y 8A con el fin de disminuir la desviación entre los valores simulados y los reportados en la cinética. La desviación en la fracción molar

de OE en los productos pasó del 18.8% al 2.1%. En consecuencia, la selectividad aumentó al 81.4% y la conversión al 10.3%, cumpliendo con los estándares industriales para este proceso (Rebsdatt & Mayer, 2001).

En la Figura 9 se presenta el diagrama de flujo para una planta de producción de 95 ton/día de OE. Se muestran las zonas de reacción y separación mencionadas anteriormente, también se tienen los equipos que las conforman. La simulación se enfocó en la zona de reacción, porque es el objeto de estudio del presente trabajo, además de que en esta zona es donde ocurren la mayoría de los accidentes (Yang et al., 2010).

La seguridad fue la principal restricción en el diseño del reactor. La mezcla oxígeno-etileno es inflamable a concentraciones de etileno superiores a 2.7% (mol/mol) (en aire a condiciones normales), por lo que se usó metano como gas diluyente para modificar el límite de inflamabilidad. Los resultados mostraron que la concentración de oxígeno debe ser menor a 8% para evitar mezclas combustibles en el alimento del reactor (Figura 10).

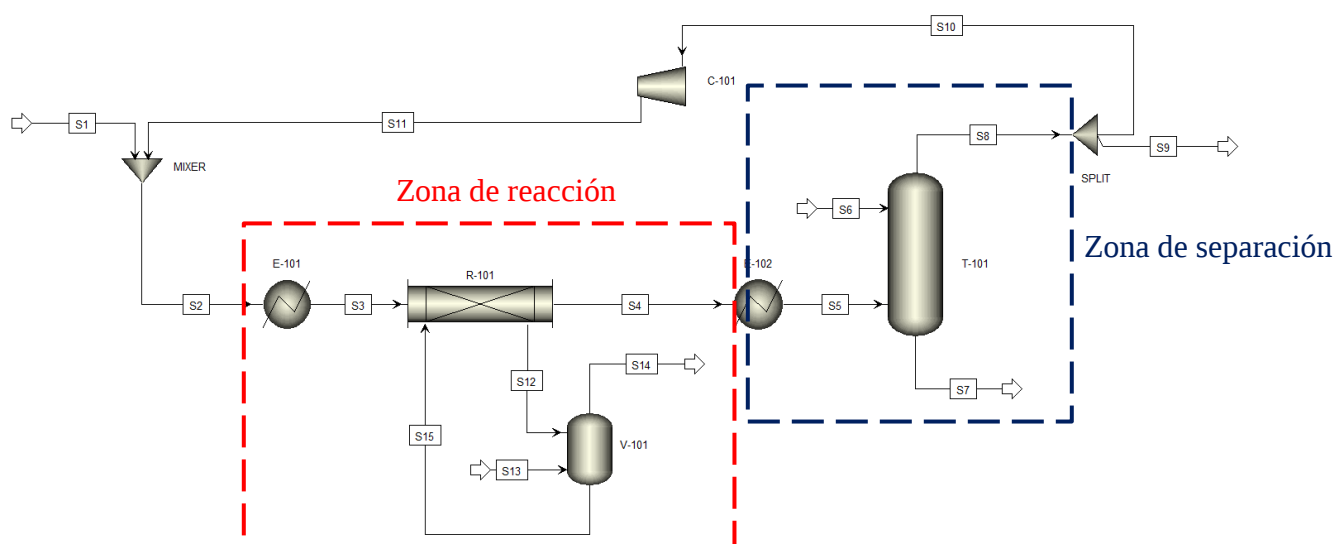


Figura 9. Diagrama de flujo para la producción de OE. Fuente: elaboración propia.

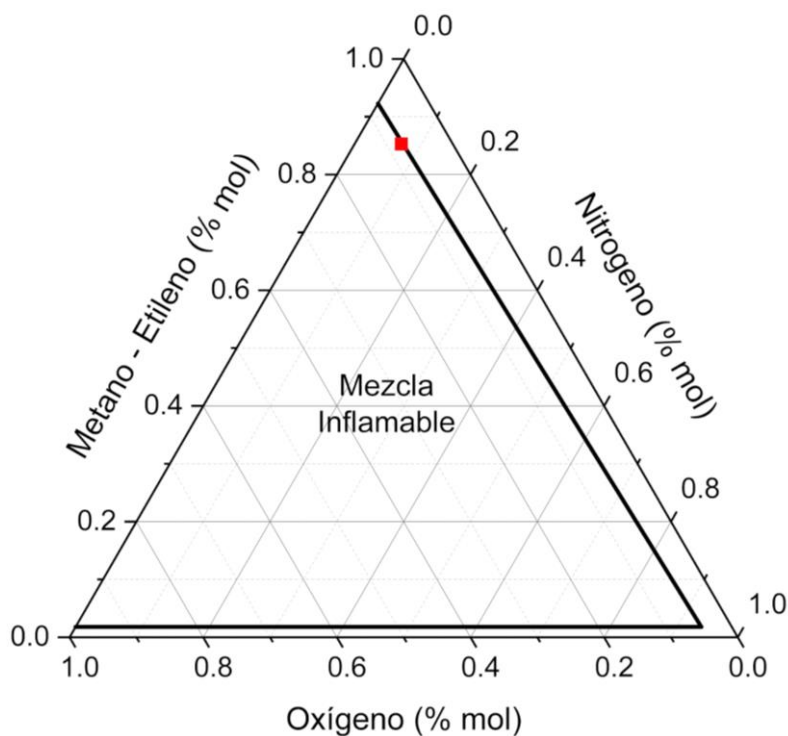


Figura 10. Diagrama de inflamabilidad de la mezcla etileno-metano. Fuente: elaboración propia.

En el reactor se tiene una alta selectividad (83.2%) y una baja conversión por paso (8.7%). Este comportamiento es característico de los procesos con reacciones múltiples (Rebsdatt & Mayer, 2001). En este tipo de situaciones se recirculan los reactivos que no reaccionaron con el fin de mejorar la conversión global del proceso. El flujo de reciclo se fijó para que la fracción molar de los componentes a la entrada del reactor cumplieran con las exigencias de la cinética (25.0% molar C_2H_4 , 7.7% mol O_2 y 6.7% mol CO_2).

Por otra parte, el reactor es a la vez un evaporador (generador de vapor), donde el calor liberado por la reacción se aprovecha en generar vapor. Es decir, que en la práctica R-101 y V-101 son un mismo equipo, pero por la complejidad de éste se simuló utilizando dos bloques. R-101 simula la reacción en el lado tubo y la evaporación del agua en el lado carcasa, mientras que V-101 simula las condiciones de alimento (presión y temperatura) del fluido de enfriamiento. Esto se hizo con la intención de disponer de variables manipulables para el control de proceso, ya que el bloque reactor en *Aspen Dynamics* no permite manipular las condiciones de alimento del fluido de enfriamiento.

Por último, a la columna de despojamiento se alimentan los productos de la reacción a baja temperatura (S5) y agua (S6), se obtiene una corriente rica en OE (S7) y una corriente gaseosa despojada en la cima (S8). Industrialmente la corriente S8 se debe someter a un despojamiento de CO₂, sin embargo, simular de forma rigurosa (debido a las exigencias de *Aspen Dynamics*) una columna de absorción de CO₂ está fuera del alcance del presente trabajo. En cambio, se estableció una fracción separación apropiada en la corriente S8 para purgar el exceso de CO₂.

El objetivo principal de control fue mantener la seguridad y la producción en torno al reactor. Para esto se implementaron las estrategias de control que se muestran en la Figura 11, es importante mencionar que solo se muestran los lazos de control que intervienen en el comportamiento del reactor. Además, en la Tabla 2 se resumen los lazos de control (la función, la variable manipulada y la variable respuesta).

Tabla 2. Lazos de control en la producción de OE.

Identificación	Función	Variable respuesta	Variable manipulada
CC	Controlar la composición molar de oxígeno en S2	Composición molar de oxígeno en S2	Flujo molar de oxígeno en S1
TC1	Controlar la temperatura en S3	Temperatura de la corriente S3	Coeficiente de conductividad
TC2	Controlar la temperatura en S4	Temperatura de la corriente S4	Flujo molar de la corriente S15
PC	Controlar la presión de V-101	Presión de V-101	Flujo molar de la corriente S14
LC	Controlar el nivel de V-101	Nivel de V-101	Flujo molar de la corriente S13

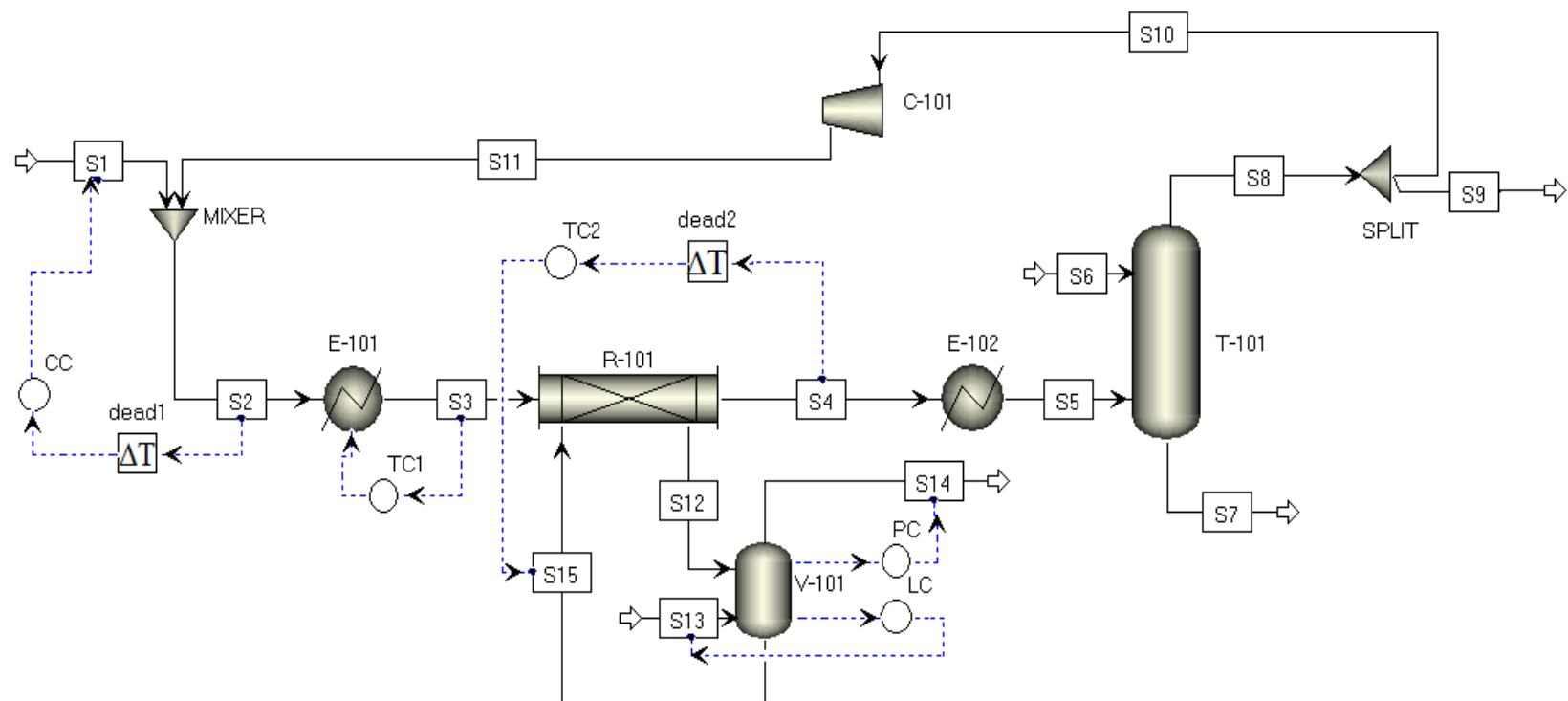


Figura 11. Esquemas de control en la producción de OE. Fuente: elaboración propia.

3.3 Resultados

Se estudió la estabilidad del sistema perturbando la temperatura del fluido de enfriamiento (temperatura en S15) y el flujo de la corriente de reciclo (S10). Como variables respuesta se tienen la temperatura en la salida del reactor y el flujo molar de OE en la salida del reactor. Además, se tuvo en cuenta la fracción molar de oxígeno en el alimento al reactor, debido a que fue una de las restricciones en el diseño del equipo.

Se perturbó la temperatura en +5 °C y -5 °C (Figura 12A), se obtuvo una respuesta inversa de tipo pulso en la fracción molar de oxígeno, es decir, el aumento en la temperatura favorece la disminución de la concentración de O₂ en S2 (Figura 12B). Esto se debe a que el aumento de la temperatura favorece el consumo de oxígeno en el reactor por lo que su concentración a la salida baja y es menor la cantidad que se recircula.

La perturbación no provoca el desbordamiento de la reacción (Figura 12C), ya que el cambio en la temperatura en la salida del reactor es de tipo escalón. Esto es un buen indicativo de la estabilidad del reactor, ya que se opera en una zona con capacidad de respuesta frente a incidentes en la operación normal.

Con relación a la producción, el flujo molar de OE a la salida del reactor tiene una respuesta directa de tipo impulso que llega a un nuevo estado estable (Figura 12D). Esto se debe al favorecimiento de la reacción por el aumento de la temperatura, similar a como se explicó para el caso de la concentración molar de oxígeno en S2.

Por otra parte, la perturbación en el flujo de recirculación (S10) fue de tipo rampa en +20% y -20% y se muestra en la Figura 13A. Se encontró que cambiar la relación de reciclo altera la composición molar a la entrada del reactor, en consecuencia, la temperatura a la salida del reactor y la producción de OE se ven perjudicadas.

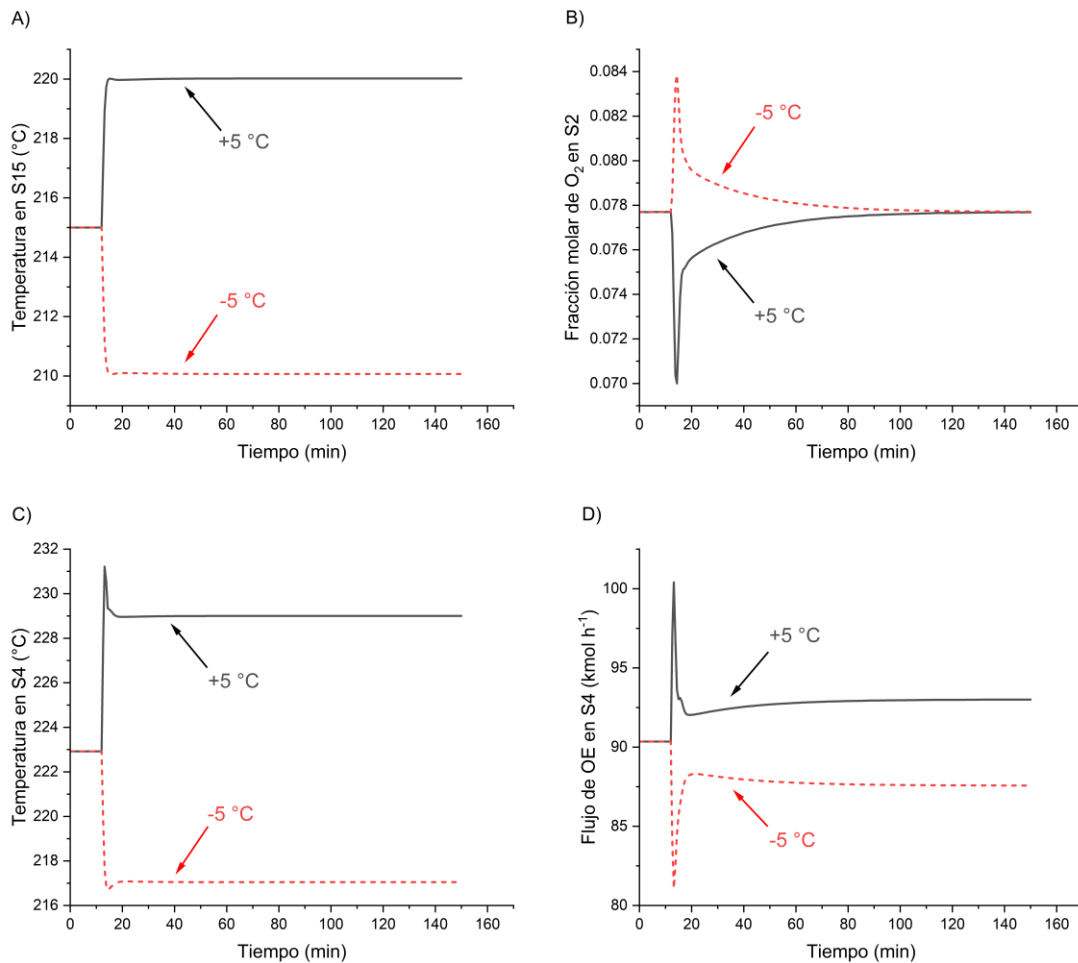


Figura 12. Resultados dinámicos al perturbar la temperatura del fluido de enfriamiento. La leyenda representa el caso de estudio. Fuente: elaboración propia.

En el primer caso, se aumentó la relación de reflujo en un 20%, por lo que hay mayor cantidad de reactivos en la corriente de alimento al reactor, aunque también se tiene mayor concentración de dióxido de carbono. El aumento en los reactivos favorece a la reacción química por lo que la temperatura aumenta (Figura 13C), sin embargo, el aumento del dióxido de carbono desfavorece la reacción deseada por lo que la producción de OE disminuye (Figura 13D).

En el segundo caso, al disminuir la relación de reflujo la disponibilidad de reactivos en el alimento baja. Este cambio modifica la composición molar del diseño del reactor por lo que se

tiene un aumento en la temperatura de reacción que favorece la reacción indeseada, en consecuencia, la producción de OE baja (Figura 13D).

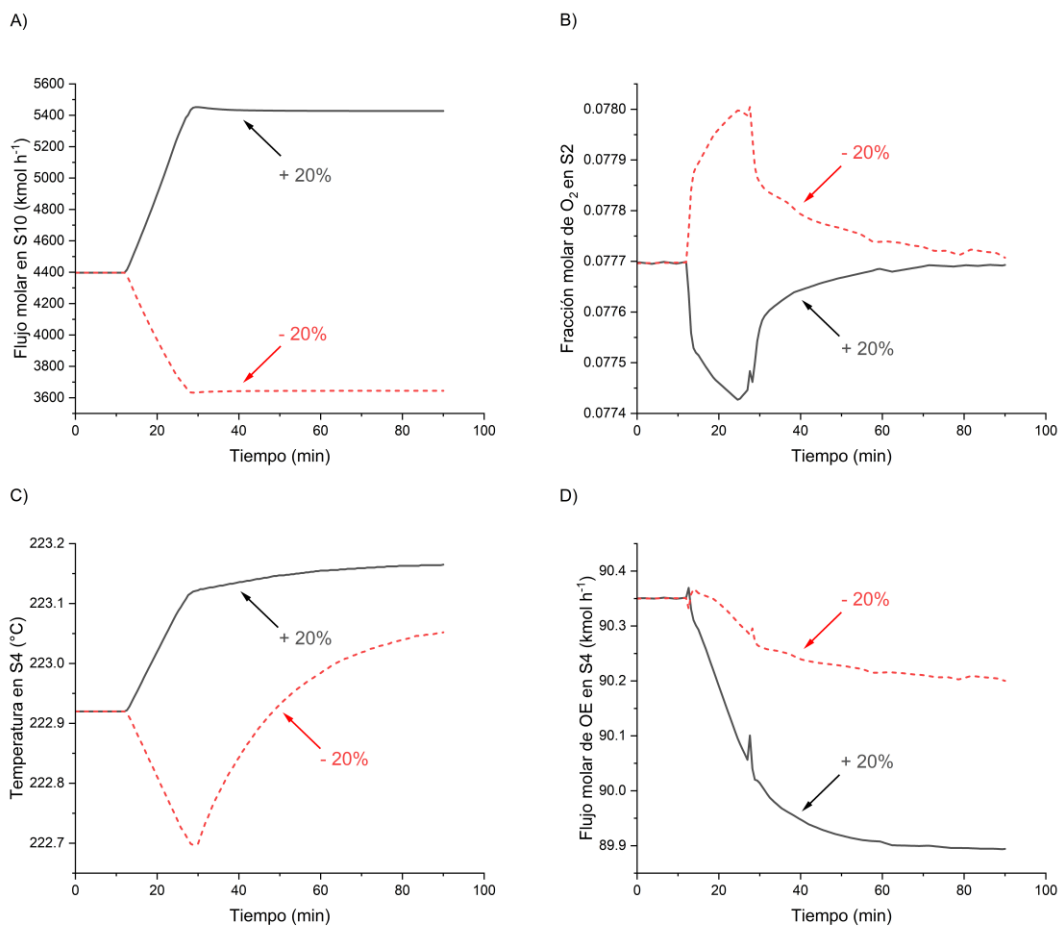


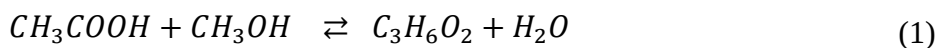
Figura 13. Resultados dinámicos al perturbar la temperatura del flujo molar de recirculación. La leyenda representa el caso de estudio. Fuente: elaboración propia.

Para mayores detalles sobre la simulación del reactor de DNPE, hacer clic sobre el siguiente enlace: [Reactor de óxido de etileno en Aspen Dynamics](#)

4. REACTOR DE ACETATO DE METILO

4.1 Introducción

El acetato de metilo se usa en la manufactura de varios productos, entre los más representativos se encuentra la producción de pinturas, solventes, tintas, saborizantes, entre otros. El acetato de metilo se produce mediante la esterificación en fase líquida del ácido acético y el metanol (ec. 1) a temperaturas inferiores a 50 °C. La reacción es reversible y altamente exotérmica, además, debido a su lenta velocidad de reacción, se hace uso de catalizadores (Mallaiah & Reddy, 2015).



Los estudios acerca de esta reacción se enfocan en la cinética de la reacción y la optimización de la operación. Los autores que estudian la cinética evalúan factores como el efecto inhibitor del agua o la influencia del tipo de catalizador (Ganesh et al., 2011). De este último Mallaiah y colaboradores (2015) destacan la preferencia de catalizadores heterogéneos sobre los homogéneos, debido a que facilitan la separación del producto, mejora la selectividad y eliminan el entorno corrosivo. Por otro lado, (LIU et al., 2006) reportaron que la mayor densidad de puntos activos presentes en la solución de catalizadores homogéneos favorece la reacción frente a los catalizadores heterogéneos.

El acetato de metilo es de los ésteres más volátiles, tiene un punto de ebullición menor al del metanol, lo que facilita su separación. Esta condición ha impulsado estudios sobre la optimización para sistemas continuos o discontinuos. (Mallaiah & Venkat Reddy, 2016) estudiaron el uso de columnas de destilación reactivas en sistemas continuos. Por otra parte, (Ganesh et al., 2014) investigaron la intensificación del sistema para los sistemas discontinuos.

Para el trabajo actual se decidió estudiar la operación en discontinuo, con el propósito de analizar un sistema altamente exotérmico. (Mekala & Goli, 2015) reportaron un modelo cinético de

segundo orden obtenido a partir de datos experimentales con ácido sulfúrico como catalizador. Los datos cinéticos se encuentran reportados en las ecuaciones 11A-13A del anexo A7.

El control de este tipo de reactores es de gran importancia debido a que por su naturaleza dinámica se pueden generar fallos que provoquen daños de lotes o de equipos de alto costo (Aumi & Mhaskar, 2012). Además, es común encontrar reactivos o productos muy sensibles al calor, lo que dificulta el control mediante los métodos comunes como el control PID (Bouhenchir et al., 2006). Mediante buenas estrategias de control también se puede lograr optimizar el tiempo de reacción, resultando en mayor productividad (Huzmezan et al., 2002).

4.2 Metodología

Se usó UNIQUAC como modelo termodinámico, debido a que el sistema está en fase líquida, con temperaturas menores a 60 °C y con presiones inferiores a 4 bar. Mekala y colaboradores (2015) reportaron los parámetros de interacción del modelo UNIQUAC que usaron para simular el proceso y ajustar el modelo cinético de su trabajo experimental. Dichos parámetros fueron empleados en el presente estudio.

Se simuló el esquema experimental reportado por Mekala y colaboradores (2015) para validar el artículo. Las condiciones del sistema se reportan en la tabla 9A del apéndice A8. En la Figura 14 se presenta el porcentaje de desviación de la conversión en el tiempo simulada con respecto a la reportada en el artículo, si bien el modelo cinético subestima la conversión, el margen de desviación está dentro de lo aceptable (menor a 10%). La suma de las desviaciones cuadráticas (SSR) de los datos simulados fue de 9.6×10^{-3} .

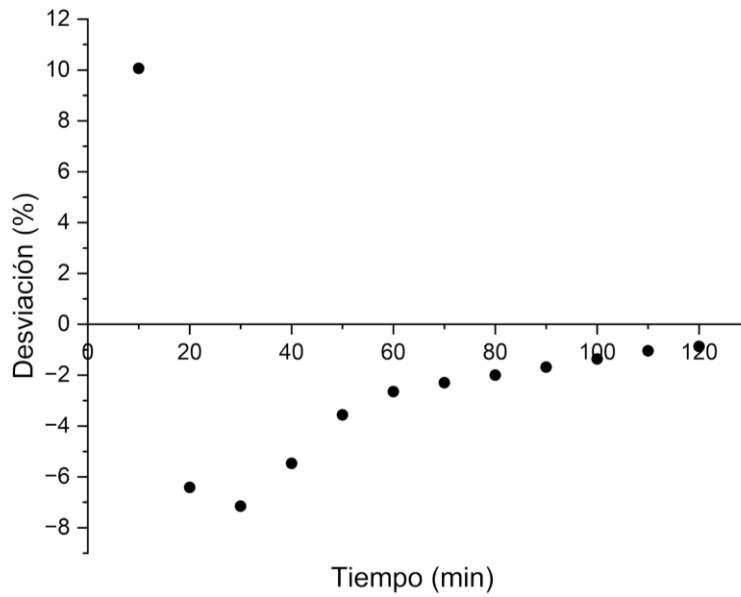


Figura 14. Desviación de la conversión del ácido acético en la validación. Fuente: elaboración propia.

Se simuló un sistema discontinuo haciendo uso de un reactor modelo CSTR como en el caso del reactor de DNPE. Se instalaron válvulas para realizar la transición entre etapas, además, se implementó una bomba para asistir en el vaciado y la recirculación del sistema. Se implementó además un intercambiador de calor (HeatX) con el objetivo de realizar control sobre la temperatura al manipular la cantidad de agua de enfriamiento. El esquema de operación resultante se muestra en la Figura 15, las especificaciones del reactor y del intercambiador se encuentran en las tablas 10A y 11A del apéndice A9 respectivamente.

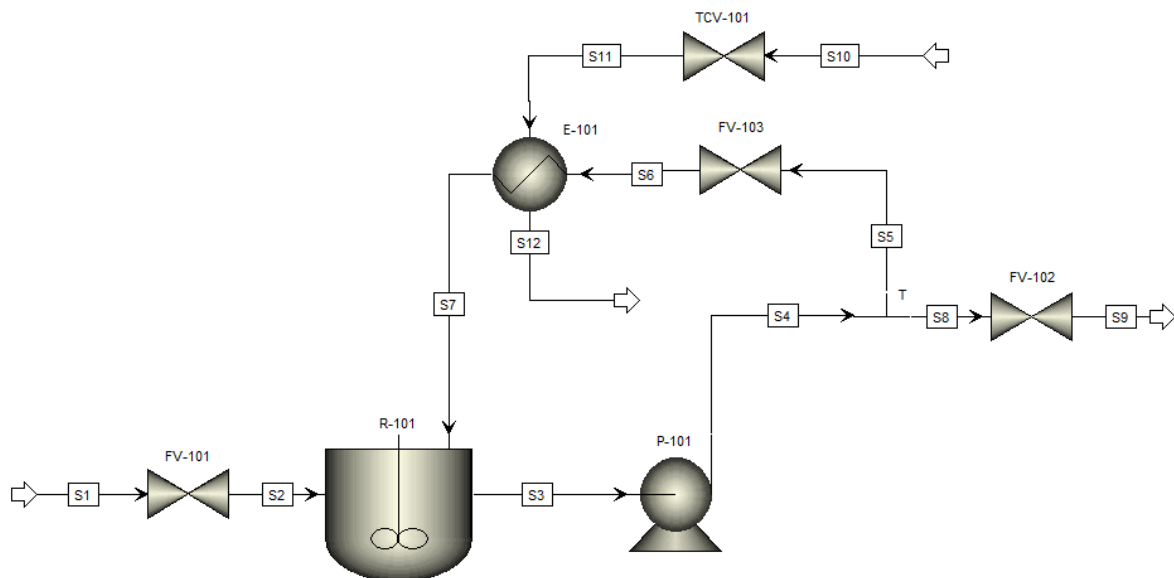


Figura 15. Sistema discontinuo para la producción de acetato de metilo. Fuente: elaboración propia.

Las válvulas del sistema tienen como propósito permitir el cambio de etapas del sistema o realizar control durante la operación. Las válvulas FV-101 y FV-102 permiten vaciar o llenar el reactor, mientras que la FV-103 asiste en estas tareas y a su vez evita errores de convergencia en el intercambiador E-101. Con la válvula TCV-101 se puede manipular el flujo de agua de enfriamiento que entra al intercambiador y en consecuencia permite controlar la temperatura del reactor. Las especificaciones de las válvulas se encuentran en la tabla 12A del apéndice A9.

La bomba P-101 se implementó para asistir la recirculación y descarga del reactor. En *Aspen Plus* se puede incluir la curva de cabeza-caudal para dar más precisión a los resultados. Sin embargo, no se incluyó este tipo de configuraciones debido a que están por fuera del alcance del trabajo y suponen mayor complejidad en las simulaciones dinámicas.

Se ajustó la composición del alimento al sistema por dos motivos: Se aumentó la relación estequiométrica del suministro de ácido acético en un 10%, debido a que representa un riesgo menor en comparación al metanol. Con el fin de amortiguar el calor liberado por la reacción se alimentó agua en un 50.55% molar. La composición del alimento se muestra en la tabla 13A del apéndice A9.

En *Aspen Dynamics* se programaron 7 tareas (*tasks*) para simular las diferentes etapas del sistema y la operación. Se asignaron las condiciones de apertura o cierre parcial de las válvulas

según el requerimiento para simular el llenado y el vaciado del reactor, así como su operación. Además, se implementaron tareas con que modificaran la magnitud de los parámetros cinéticos, con el fin de simular el instante en el que se agrega o se retira el catalizador, facilitando la operación de esta reacción exotérmica. La función de cada tarea dentro del ciclo de operación del reactor se puede observar en la Figura 16. Las tareas empleadas se presentan en el apéndice A10.

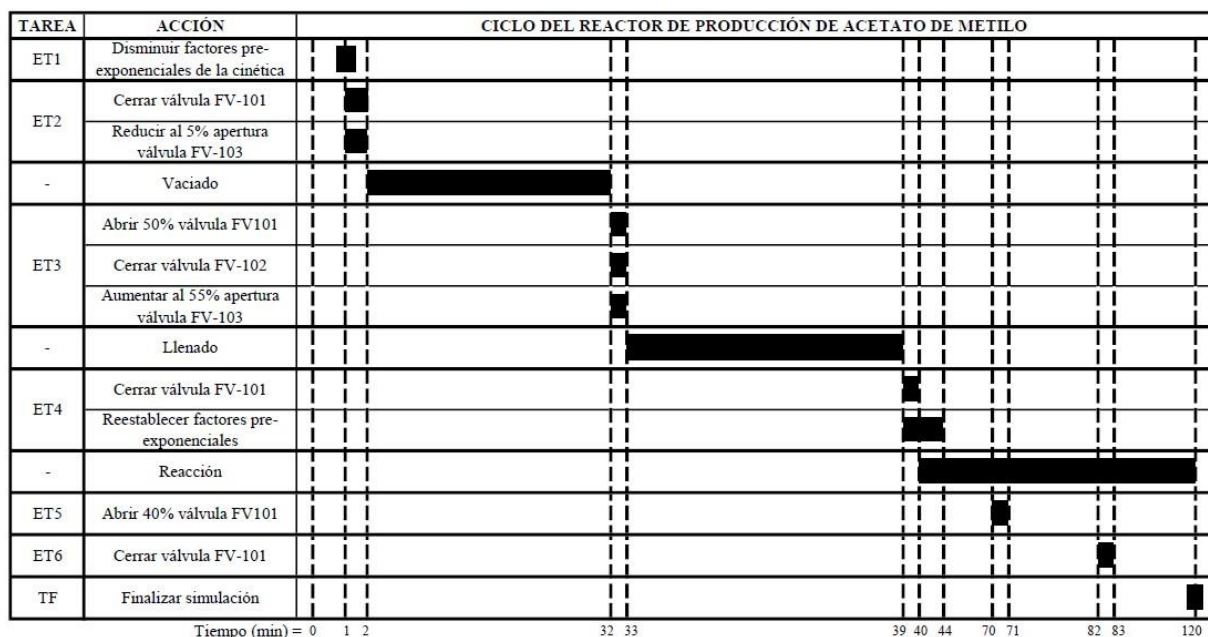


Figura 16. Ciclo de operación y tareas programadas del reactor de Acetato de Metilo. Fuente: elaboración propia.

Se consideraron dos esquemas de control diferentes para este caso. El primer esquema se constituye de un lazo de control PI con actuador en la válvula de control TCV-101 (Figura 17). Por otro lado, se construyó un esquema de control en cascada dónde el lazo maestro controla la temperatura del reactor y el lazo esclavo la temperatura de la recirculación al reactor (Figura 18).

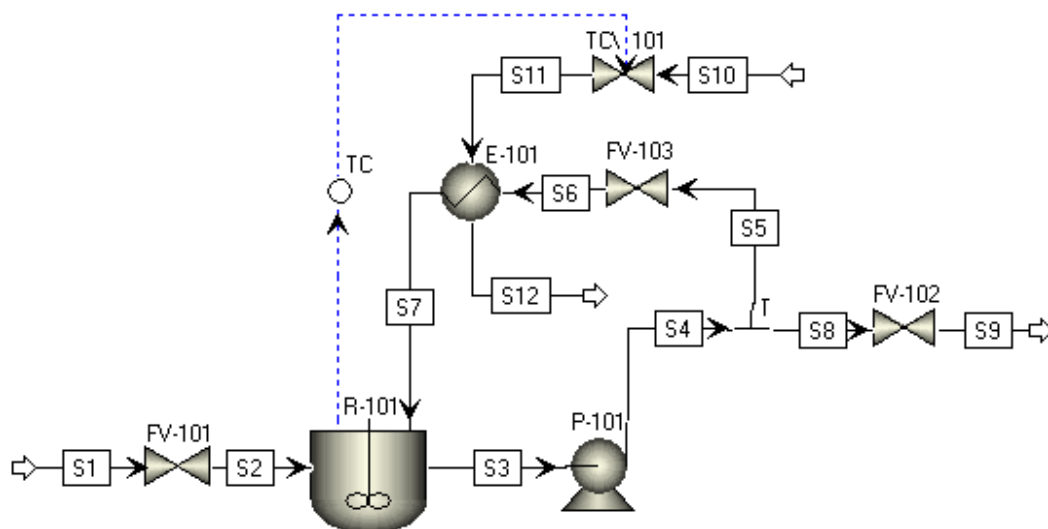


Figura 17. Esquema de control PI para la producción de acetato de metilo. Fuente: elaboración propia.

Los parámetros de los controladores se ajustaron mediante el método de sintonía de Ziegler-Nichols haciendo uso de la herramienta *tune* del simulador. Para el caso del control en cascada, se sintonizó primero los parámetros del controlador secundario y posteriormente los del primario. No obstante, se ajustaron los parámetros debido a que se obtuvo una ganancia alta (91%) que provocaba fallos del sistema. Para ambos esquemas se usó la herramienta tras alcanzar la estabilidad del sistema con un aumento en la salida del 20%.

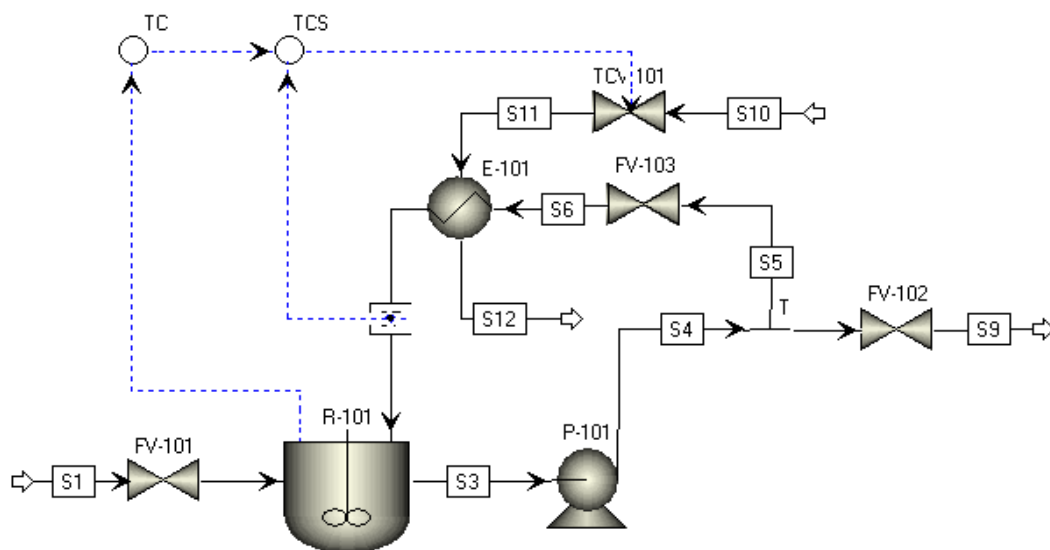


Figura 18. Esquema de control en cascada PI-PI para la producción de acetato de metilo. Fuente: elaboración propia.

Se simuló una perturbación al sistema que permitieran observar el comportamiento de los esquemas de control. Se programó una tarea para incrementar la temperatura de entrada del agua de enfriamiento de 25 a 35°C durante 20 minutos. Este caso simula una situación que puede ocurrir por fallos o ineficiencias en el sistema de recirculación del agua de enfriamiento.

4.3 Resultados

La temperatura del reactor estuvo dentro del intervalo permitido (cercano a 50 °C) (Figura 19A) al usar ambos esquemas de control, además, la apertura de válvula indicada por los controladores no supera el 50% de la capacidad (Figura 19B). Se observa que el control en cascada presentó un perfil más estable y con menor desviación respecto al valor de referencia, también se observó una respuesta con menor desviación del valor de referencia por parte del controlador cuando se presenta una perturbación sobre el sistema, reforzando el concepto de la velocidad de respuesta como una de sus ventajas en consecuencia del control ejercido por el lazo interno.

El sistema respondió apropiadamente ante un aumento de 10 °C en la temperatura del agua de enfriamiento suministrada (Figura 19C). Al igual que en el caso anterior, la temperatura del reactor se mantuvo dentro de los intervalos de temperatura aceptados desde el punto de vista operativo. La apertura de la válvula supera el 50% de su capacidad a causa de la perturbación (Figura 19D), sin embargo, se mantiene dentro de un intervalo adecuado. Ambos controladores cumplen satisfactoriamente con su propósito, destacando el desempeño del controlador en cascada, que responde más rápido ante perturbaciones.

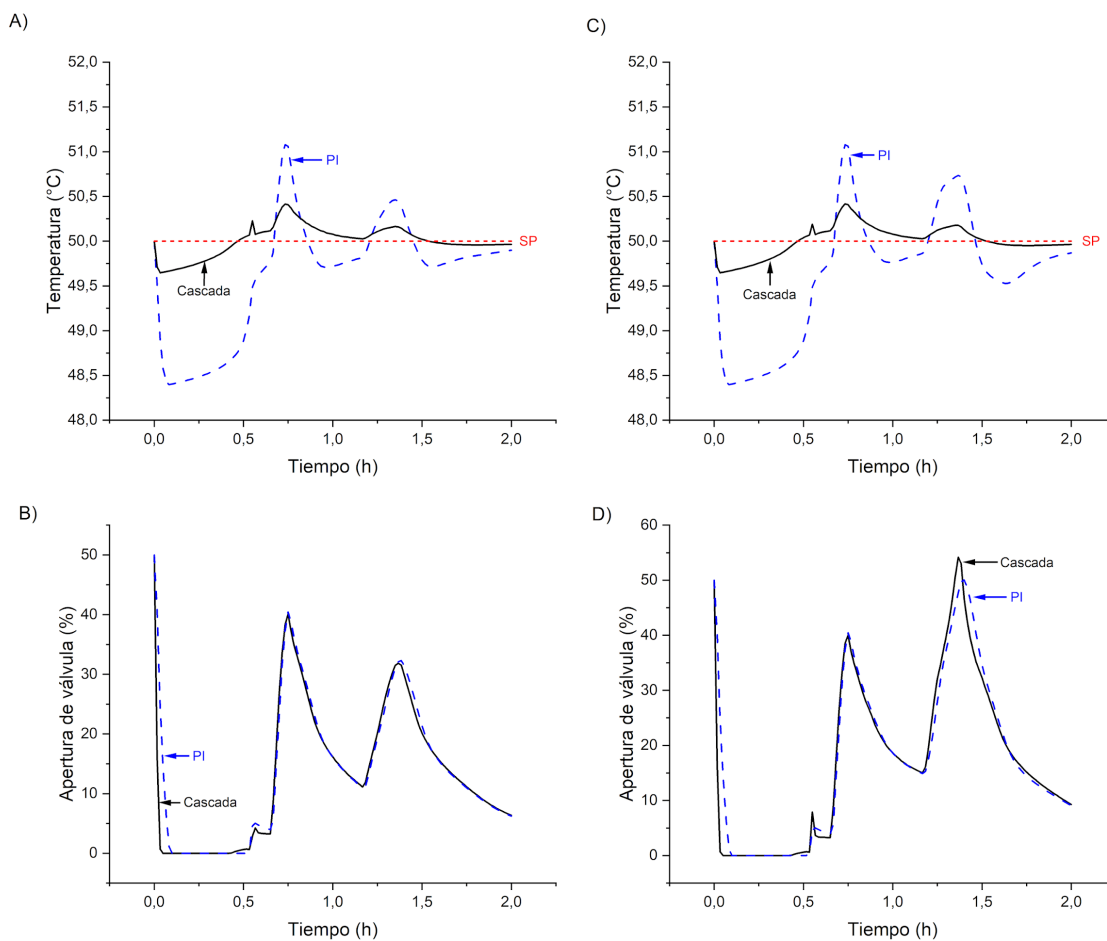


Figura 19. Temperatura del reactor y apertura de válvula del reactor de Acetato de Metilo.
Fuente: elaboración propia.

Para mayores detalles sobre la simulación del reactor de acetato de metilo, hacer clic sobre el siguiente enlace: [Reactor de acetato de metilo en Aspen Dynamics](#). A partir de los resultados obtenidos y la metodología empleada se desarrolló el taller que se presenta a continuación.

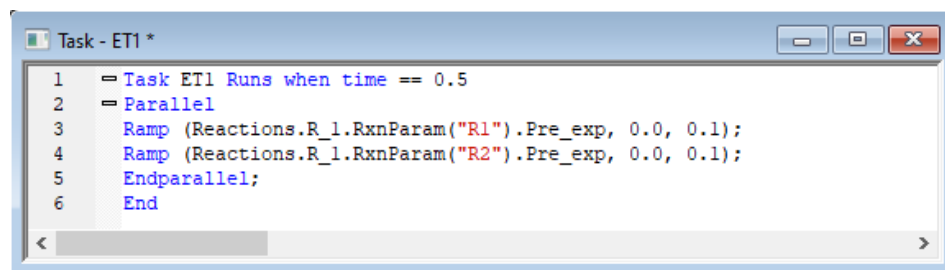
Taller 2. Aspen Dynamics

El alcance de este taller es el siguiente:

- Instruir en el uso y edición de tareas (*tasks*).
- Instruir en la sintonización de los parámetros de un controlador.
- Identificar errores de integración y su solución al configurar esquemas de control
- Enseñar la configuración y funcionamiento de los sistemas de control en cascada.

Se recomienda guardar la simulación tras realizar los pasos señalados con el símbolo “*”. En caso de requerir la simulación desde cero, eliminar la carpeta y descargarla nuevamente.

- 1) Abrir la simulación “Taller2.dynf”.
- 2) Desde la sección *flowsheet* en la ventana explorador hacer clic en el botón “Pantalla1”
- 3) Correr la simulación y observar el perfil de temperatura.
- 4) Reiniciar la simulación.
- 5) Desde la sección *flowsheet* en la ventana explorador, hacer clic derecho en las tareas ET2 a ET6 e identificar el propósito de cada una teniendo en cuenta el ciclo de operación de un reactor discontinuo.
- 6) Insertar la tarea ET1, hacer clic derecho y compilar. Activar la tarea haciendo doble clic desde la sección *flowsheet*. *



- 7) Ejecutar la simulación y observar nuevamente el perfil de temperatura.

¿A qué se debe el cambio en los perfiles de temperatura?

- 8) Reiniciar la simulación.

- 9) Desde la sección “flowsheet” en la ventana explorador, hacer clic derecho en la tarea ET2 y escoger la opción editar. Reducir la apertura objetivo de la válvula FV-103 de cinco a cero.
- 10) Correr la simulación y observar.

¿Qué sucedió? Explique desde la Ingeniería Química lo ocurrido.

- 11) Reiniciar la simulación y ajustar nuevamente la apertura de la válvula FV-103 en la tarea ET2. *
- 12) Desactivar las tareas ET5 y ET6. Realizar el ajuste de parámetros del controlador con el método de Ziegler-Nichols para controlador PI y PID. (Se recomienda usar un cambio tipo escalón del 20% tras alcanzar la estabilidad del sistema. Aprox. Min 262)
- 13) Comparar los perfiles de temperatura obtenidos con ambas configuraciones.

¿Qué observa? ¿Por qué se presenta esta situación?

- 14) Reiniciar la simulación y aumente la ganancia del controlador PI a 22%.

¿Qué sucede? Explique la diferencia de comportamiento.

- 15) Reiniciar la simulación y eliminar el lazo de control.
- 16) Configurar el esquema de control de la Figura 18. *

Para la salida del controlador TC, escoger la opción “salida del controlador” y como entrada al controlador TCS escoger “valor de referencia remoto”. La variable de proceso de entrada al controlador TCS es la temperatura de la corriente S7.

- 17) Verificar que las tareas ET5 y ET6 están desactivadas. Sintonizar el controlador TCS con el método de Ziegler-Nichols, pero esta vez solo para un controlador PI. *
- 18) Ejecutar la simulación y verificar el comportamiento de la temperatura.
- 19) Reiniciar la simulación y configurar el controlador TCS en modo cascada. Para esto es necesario dar clic en la tercera opción del panel del controlador.
- 20) Ajustar la acción del controlador TC a inversa (*Reverse*). ¿Por qué es necesario realizar este ajuste? (Para contestar esta pregunta puede ser de ayuda correr la simulación con el controlador en acción directa). *

- 21) Realizar el ajuste del controlador TC con el método de Ziegler-Nichols, para un controlador PI. En caso de que la temperatura no se estabilice en la prueba, reiniciar la simulación, hacer el procedimiento nuevamente y finalizar la prueba pasados pocos minutos (la ganancia calculada no debe ser superior a 80%). *
- 22) Activar las tareas ET5 y ET6. Correr la simulación y verificar el comportamiento de la temperatura.
- 23) Ejecutar la simulación nuevamente y perturbar la temperatura de la corriente S10 (35°C después del min 45). Verificar la respuesta del controlador y la temperatura del reactor ante la perturbación.

5. REACTOR DE PROPILENGLICOL

5.1 Introducción

El propilenglicol (PG) es una sustancia química no tóxica utilizada ampliamente en la industria. La producción anual de PG supera los 2.18 millones de toneladas y se espera que la demanda aumente en los próximos años (Nanda et al., 2016). Entre los usos del PG se encuentran la fabricación de anticongelantes, alimentos, detergentes, fármacos y resinas.

La elaboración de PG se da por la hidrólisis del óxido de propileno, esta reacción ocurre de forma espontánea en condiciones normales cuando se usa ácido sulfúrico como catalizador. La reacción entre el óxido de propileno y el agua da lugar a la formación del PG (ec. 5). Esta reacción es exotérmica y bajo ciertas condiciones presenta múltiples estados estacionarios, por lo que su operación es potencialmente un riesgo.



5.2 Metodología

Se utilizó el modelo de coeficientes de actividad NRTL para representar las interacciones binarias de los diferentes compuestos en la simulación. La elección del modelo termodinámico se basó en las condiciones de operación (presión menor a 10 bar y fase de reacción líquida), el buen nivel de ajuste de las interacciones binarias de los compuestos (Zhang et al., 2019) y su amplio uso en la literatura (Jiménez et al., 2020).

La cinética de la reacción es del tipo ley de potencia (ec. 6) y fue reportada por (Fogler, 2016). Es importante mencionar que la reacción es de pseudo primer orden respecto a la concentración de propilenglicol, ya que se opera con exceso de agua. Además, se alimenta metanol (que no interviene en la reacción química) con el fin de mejorar la solubilidad del óxido de propileno en agua.

$$r_{PG} = 1.14 \times 10^{12} \left(e^{\frac{-32700}{RT}} \right) \quad (6)$$

Con, r en $\text{lb-mol ft}^{-1} \text{h}^{-1}$ y R en $\text{Btu } ^\circ\text{R}^{-1} \text{lb-mol}^{-1}$.

Se modificó el termino pre exponencial y la energía de activación con el fin de disminuir la desviación entre los resultados reportados por (Fogler, 2016) y la simulación en estado estable. De este ajuste se obtuvo una desviación del -0.8% en la conversión y de -3.6% en la temperatura del reactor.

Al reactor se alimenta una mezcla equimolar de óxido de propileno-metanol (S1) y agua en exceso (S3), ambas corrientes a 24 °C (Figura 20). Los reactivos se adicionan de forma independiente con el fin de implementar un esquema de control sobre la válvula CV-102. Con relación al reactor, este es adiabático opera a 5 bar, 70 °C y la conversión es de 86%.

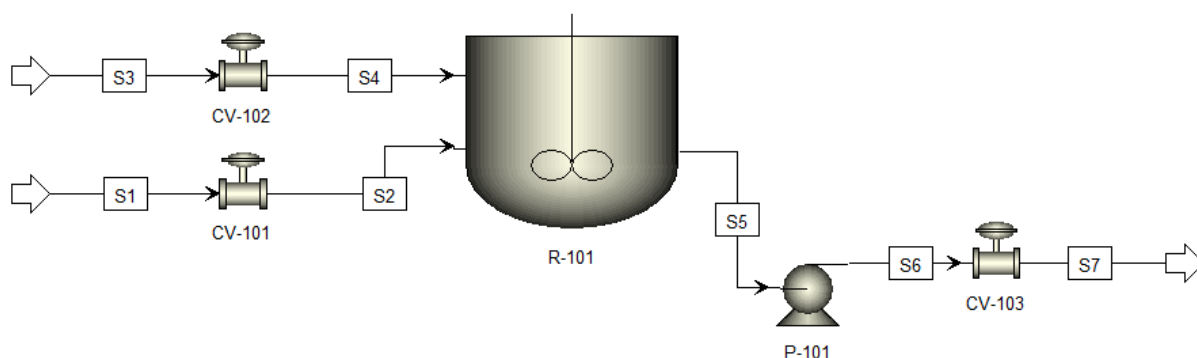


Figura 20. Diagrama de proceso de la producción de PG. Fuente: elaboración propia.

Los esquemas de control empleados se muestran en la Figura 21. Se tiene un control de temperatura, éste mantiene la temperatura del reactor manipulando la apertura de la válvula CV-102 que está asociada a la corriente de agua. Además, se tiene un controlador de nivel que mantiene el nivel manipulando la apertura de la válvula CV-103 ligada a la corriente de salida del reactor.

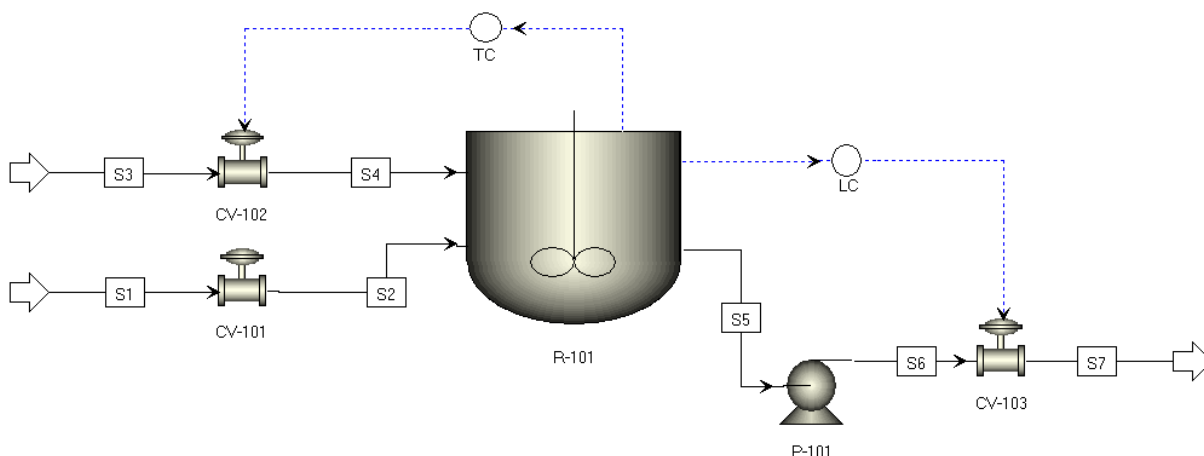


Figura 21. Esquemas de control del reactor de PG. Fuente: elaboración propia.

5.3 Resultados

Se perturbó la temperatura de entrada de la corriente de agua (Figura 22). Se observó la influencia de este parámetro en la respuesta de la temperatura del reactor y en la producción de PG.

La perturbación en la temperatura de entrada fue de $+10\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$. Como se esperaba la temperatura del reactor responde de manera directa a la perturbación, debido a que el aumento de la temperatura favorece la cinética de las reacciones químicas. Además, la acción del controlador fue satisfactoria, ya que el sistema regresa al valor de referencia a los 20 minutos de perturbar.

Por otra parte, la producción de PG tiene un comportamiento que contradice lo esperado, ya que el aumentar la temperatura provocó una disminución en la producción de PG. Esto se debe a que al aumentar la temperatura la válvula también aumenta la apertura de la válvula CV-102, en consecuencia, el flujo de agua aumenta y la concentración de óxido de propileno baja, al bajar la concentración de óxido de propileno baja la producción de PG.

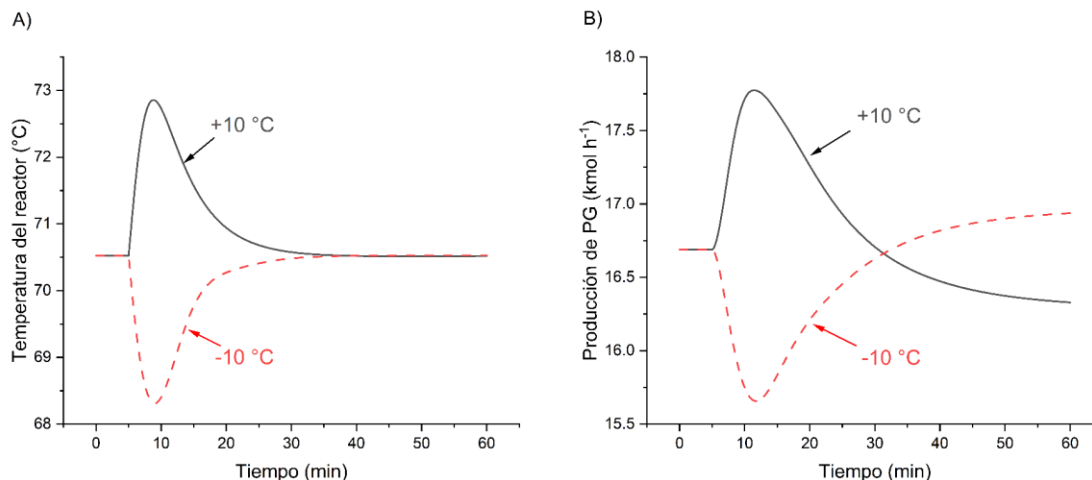


Figura 22. Perturbación en la temperatura de entrada del agua. Fuente: elaboración propia.

A partir de los resultados obtenidos y la metodología empleada se desarrolló el taller que se presenta a continuación.

Taller 1. Aspen Dynamics.

El alcance de este taller es el siguiente:

- Familiarizar con la interfaz de *Aspen Dynamics*.
- Instruir en el uso de herramientas como equipos, señales, asistentes de búsqueda y figuras.
- Enseñar la instalación de controladores y su sintonización.
- Exhibir y poner en práctica los métodos de perturbación.

Se usará como caso base, un reactor de producción de propilenglicol. Se recomienda guardar la simulación tras realizar los pasos señalados con el símbolo “*”).

- 1) Exportar la simulación a *Aspen Dynamics* mediante la opción “*Pressure Driven*” y guardarla en una carpeta.
- 2) Ajustar el tamaño de las ventanas a comodidad.
- 3) Instalar dos controladores en el sistema (instrumento PIDIncr en la barra inferior). Cambiar el nombre de los controladores con clic derecho a TC y LC.

- 4) Cambiar la opción “MaterialStream” a “ControlSignal” en la barra inferior. Conectar los controladores como se indica en la Figura 21.

Tomar la señal de temperatura del reactor e ingresarla al controlador TC como variable de proceso. Colocar una señal de salida del controlador e ingresarla a la válvula CV-102. Realizar el mismo proceso con el nivel para el controlador LC y la válvula CV-103.

- 5) Crear una gráfica de temperatura. Desde la opción “*New form*” en la barra superior en la opción de gráfico. Con clic derecho sostenido arrastrar la variable deseada al eje de las ordenas del gráfico, por lo que es necesario encontrar la variable temperatura del reactor. Podemos buscar una variable desde la ventana de exploración, la herramienta “*Variable find*” en la barra superior o directamente haciendo clic derecho en el equipo de interés y luego en la opción “*All variables*”.
- 6) Realizar el mismo proceso para crear una gráfica de nivel de reactor, buscando la variable con un método diferente.
- 7) Desde la pestaña de herramientas, hacer clic en la opción “*capture screen layout*” para crear una pantalla que podremos usar para mostrar nuevamente el contenido actual en pantalla cuando se necesite. *
- 8) Cambiar el control de tiempo del simulador en la opción “*Run options*”. Se introduce una comunicación de 0.1 y se cambian todas las unidades de tiempo a minutos.

¿En qué afecta cambiar las unidades de tiempo de la simulación? ¿En qué cree que afecta cambiar la comunicación del simulador?

- 9) Hacer doble clic sobre los controladores para desplegar el panel de configuración. Abrir las últimas tres opciones (configuración, gráfica y sintonización) para familiarizarse con la interfaz del controlador. En la ventana emergente de configuración, hacer clic en el botón inicializar.
- 10) Sintonizar el controlador de temperatura mediante el método de Ziegler-Nichols. Hacer clic en la opción de sintonización. Correr la simulación y esperar a que la variable del controlador a sintonizar se estabilice. Cuando la variable se encuentra estable, hacer clic en la opción “*Start test*” y esperar a que la variable se estabilice para hacer clic en “*Finish test*”.

En la pestaña parámetros de ajuste seleccionamos el controlador PI y el método de Ziegler-Nichols. Calcular los nuevos parámetros, reiniciar la simulación y actualizar el controlador con los parámetros calculados.

11) Realizar el mismo proceso del punto anterior, con una amplitud diferente en el porcentaje de cambio en la salida tipo escalón.

12) Realizar el mismo proceso del punto 10, calcular los parámetros con el método de Cohen-Coon.

13) Realizar el proceso de sintonización para el controlador de nivel LC.

Reporte que diferencias evidenció en las variables controladas durante el proceso de sintonización y en los parámetros calculados.

14) Reiniciar la simulación. *

15) Perturbar el sistema. Hay dos opciones de perturbación: alterar una variable manipulable o cambiar el punto de referencia de un controlador. Hacer clic en la corriente S3 y variar la temperatura de alimento.

¿Cómo se vieron afectadas las variables controladas por la perturbación? Explique ese comportamiento desde el punto de vista de Ingeniería Química.

¿Cómo se puede mejorar la respuesta del sistema?

6. CONCLUSIONES

Se realizó la simulación de cuatro reactores químicos continuos y discontinuos y sus respectivos esquemas de control empleando *Aspen Plus* y *Aspen Dynamics*. Estos resultados permitieron la estructuración de material multimedia como video tutoriales y talleres didácticos orientados a la promoción del uso de *Aspen Dynamics* en los procesos de enseñanza-aprendizaje del control de reactores químicos.

En este trabajo se simularon casos de estudio realistas. Los reactores químicos simulados fomentan el análisis, el sentido crítico y la solución de problemas cuando las condiciones de operación se desvían de su valor normal. Se resalta que las simulaciones dinámicas de reactores discontinuos son diferentes a los casos de estudio tradicionales a los que se enfrenta un estudiante de pregrado de Ingeniería Química, debido a que se debe simular un estado dinámico que en la mayoría de los casos no llega a un valor estable en el tiempo.

Es importante resaltar que el desarrollo de este trabajo comprende una propuesta educativa didáctica que fomenta el uso de una herramienta especializada en procesos químicos. Esto puede usarse para complementar los contenidos programáticos de la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad del Valle en los procesos de enseñanza-aprendizaje en el control de reactores químicos, potenciando las habilidades del estudiante en áreas como el arranque y la parada de plantas químicas, análisis de seguridad, control de equipos y control de plantas químicas.

Si bien la elaboración de los recursos multimedia promueve y facilita el uso de *Aspen Dynamics*, futuros complementos para este trabajo podrían abarcar la implementación de la herramienta por medio del diseño de contenidos programáticos para el curso de Control de Procesos Químicos de la Universidad del Valle.

REFERENCIAS

- Aumi, S., & Mhaskar, P. (2012). Integrating data-based modeling and nonlinear control tools for batch process control. *AIChE Journal*, 58(7), 2105–2119. <https://doi.org/10.1002/aic.12720>
- Bequette, B. W. (2019). Process control practice and education: Past, present and future. In *Computers and Chemical Engineering* (Vol. 128, pp. 538–556). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.06.011>
- Berdouzi, F., Olivier-Maget, N., & Gabas, N. (2016). *Using Dynamic Simulation for Risk Assessment: Application to an Exothermic Reaction* (pp. 1563–1568). <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63428-3.50265-4>
- Bildea, C. S., Gyorgy, R., Sánchez-Ramírez, E., Quiroz-Ramírez, J. J., Segovia-Hernandez, J. G., & Kiss, A. A. (2015). Optimal design and plantwide control of novel processes for di-n-pentyl ether production. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 90(6), 992–1001. <https://doi.org/10.1002/jctb.4683>
- Bollaín Sánchez, M. (2019). *Ingeniería de Instrumentación de Plantas de Proceso*.
- Bouhenchir, H., Cabassud, M., & le Lann, M. v. (2006). Predictive functional control for the temperature control of a chemical batch reactor. *Computers and Chemical Engineering*, 30(6–7), 1141–1154. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2006.02.014>
- Bringué, R., Ramírez, E., Fité, C., Iborra, M., & Tejero, J. (2011). Kinetics of 1-pentanol etherification without water removal. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 50(13), 7911–7919. <https://doi.org/10.1021/ie1025776>
- Bringué, R., Tejero, J., Iborra, M., Izquierdo, J. F., Fité, C., & Cunill, F. (2007). Water effect on the kinetics of 1-pentanol dehydration to di-n-pentyl ether (DNPE) on amberlyst 70. *Topics in Catalysis*, 45(1–4), 181–186. <https://doi.org/10.1007/s11244-007-0262-3>
- Brito, K. D., Vasconcelos, S. F., Neto, G. F. F., Damasceno, A. S., Figueirêdo, M. F., Ramos, W. B., & Brito, R. P. (2018). Semi-batch industrial process of nitriles production: Dynamic simulation and validation. *Computers and Chemical Engineering*, 119, 38–45. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.08.013>

- Chen, X., Al, R., Behera, C. R., & Sin, G. (2018). Process Synthesis, Design, and Control of Wastewater Treatment Plants. In *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409547-2.14345-8>
- Cui, Z., Tian, W., Qin, H., Wang, X., & Zhao, W. (2018). Optimal design and control of Eastman organic wastewater treatment process. *Journal of Cleaner Production*, 198, 333–350. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.07.026>
- Cui, Z., Tian, W., Wang, X., Fan, C., Guo, Q., & Xu, H. (2019). Safety integrity level analysis of fluid catalytic cracking fractionating system based on dynamic simulation. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 104, 16–26. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2019.08.008>
- Fogler, H. S. (2016). *Elements of Chemical Reaction Engineering*.
- Gan, L., Wang, H., Zhu, B., & Xu, M. (2001). Global kinetics and deactivation of silver catalyst for ethylene oxide synthesis. *JOURNAL OF CHEMICAL INDUSTRY AND ENGINEERING-CHINA*, 969–973.
- Ganesh, B., Rani, K. Y., Satyavathi, B., & Patnaik, K. S. K. R. (2014). Experimental analysis in different batch operating units for process intensification: methyl acetate production case study. *International Journal of Industrial Chemistry*, 5(3–4), 85–93. <https://doi.org/10.1007/s40090-014-0023-7>
- Ganesh, B., Rani, K. Y., Satyavathi, B., & Venkateswarlu, C. (2011). Development of kinetic models for acid-catalyzed methyl acetate formation reaction: Effect of catalyst concentration and water inhibition. *International Journal of Chemical Kinetics*, 43(5), 263–277. <https://doi.org/10.1002/kin.20555>
- Huzmezan, M., Gough, B., & Kovac, S. (2002). *Advanced Control of Batch Reactor Temperature*. <https://doi.org/https://doi.org/10.1109/ACC.1994.751785>
- Javaid, A., & Bildea, C. S. (2015). Design and control of di n-pentyl ether process. *Periodica Polytechnica Chemical Engineering*, 59(2), 159–167. <https://doi.org/10.3311/PPch.7651>

- Jiménez, R. X., Young, A. F., & Fernandes, H. L. S. (2020). Propylene glycol from glycerol: Process evaluation and break-even price determination. *Renewable Energy*, 158, 181–191. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.05.126>
- Joseph, E., & O, O. O. (2017). Cohen-coon PID Tuning Method; A Better Option to Ziegler Nichols-PID Tuning Method. *International Journal of Recent Engineering Research and Development (IJRERD) Www.Ijrerd.Com ||*, 02(11), 141–145. www.ijrerd.com
- Komulainen, T. M., Enemark-Rasmussen, R., Sin, G., Fletcher, J. P., & Cameron, D. (2012). Experiences on dynamic simulation software in chemical engineering education. *Education for Chemical Engineers*, 7(4), e153–e162. <https://doi.org/10.1016/j.ece.2012.07.003>
- Lee, J.-Y., & Chen, C.-L. (2017). A proposal for charting the undergraduate process control course for the 21st century. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 73, 154–165. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2016.10.044>
- Lewin, D. R., Rockman, J., & Lavie, R. (1996). Teaching Advanced Process Control to Undergraduates. In *Computers chem. Engng* (Vol. 20).
- Li, X., & Huang, Z. (Jacky). (2017). An inverted classroom approach to educate MATLAB in chemical process control. *Education for Chemical Engineers*, 19, 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.ece.2016.08.001>
- Li, X., Yang, B., & Zhang, Y. (2013). Dynamics and control study on the low temperature methanation reactor with mass and heat recycle. *Journal of Process Control*, 23(10), 1360–1370. <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2013.09.003>
- LIU, Y., LOTERO, E., & GOODWINJR, J. (2006). A comparison of the esterification of acetic acid with methanol using heterogeneous versus homogeneous acid catalysis. *Journal of Catalysis*, 242(2), 278–286. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2006.05.026>
- Luyben, W. L. (2007). *Chemical reactor design and control* (John Wiley & Sons, Ed.).
- Luyben, W. L. (2012). Use of dynamic simulation for reactor safety analysis. *Computers & Chemical Engineering*, 40, 97–109. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2012.02.013>

- Mallaiah, M., & Reddy, G. V. (2015). Kinetic study of esterification of acetic acid with methanol over Indion 190 acidic solid catalyst. *Kinetics and Catalysis*, 56(4), 419–427. <https://doi.org/10.1134/S0023158415040126>
- Mallaiah, M., & Venkat Reddy, G. (2016). Simulation of continuous packed bed reactive distillation column for the esterification process using activity based kinetic model. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 50(4), 404–413. <https://doi.org/10.1134/S0040579516040412>
- Mayer, R., & Mayer E., R. (2005). *The Cambridge handbook of multimedia learning*. Cambridge university press.
- Mekala, M., & Goli, V. R. (2015). Kinetics of esterification of methanol and acetic acid with mineral homogeneous acid catalyst. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 23(1), 100–105. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2013.08.002>
- Nanda, M. R., Yuan, Z., Qin, W., & Xu, C. (Charles). (2016). Recent advancements in catalytic conversion of glycerol into propylene glycol: A review. *Catalysis Reviews - Science and Engineering*, 58(3), 309–336. <https://doi.org/10.1080/01614940.2016.1166005>
- Narayana, M. S., Arthanareeswaran, G., & Sankar Rao, C. (2020). Dynamic performance comparison of two configurations of middle vessel batch distillation column for the separation of ethanol/propanol/butanol mixture. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 15(5). <https://doi.org/10.1002/apj.2421>
- Negrellos-Ortiz, I., Flores-Tlacuahuac, A., & Gutiérrez-Limón, M. A. (2018). Dynamic optimization of a cryogenic air separation unit using a derivative-free optimization approach. *Computers & Chemical Engineering*, 109, 1–8. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2017.10.020>
- Rebbsdat, S., & Mayer, D. (2001). Ethylene Oxide. In *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. https://doi.org/10.1002/14356007.a10_117

- Serbezov, A., & Rice, R. (2019). Imparting Industrially Relevant Process Control Skills in Chemical Engineering Students with LOOP-PRO TRAINER. *IFAC-PapersOnLine*, 52(9), 33–35. <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2019.08.118>
- Silverstein, D., Vigeant, M., & Staehle, M. (2016). How We Teach Process Control: 2015 Survey Results. *2016 ASEE Annual Conference & Exposition Proceedings*. <https://doi.org/10.18260/p.25495>
- Taimoor, A. A. (2016). Virtualization of the process control laboratory using ASPEN HYSYS. *Computer Applications in Engineering Education*, 24(6), 887–898. <https://doi.org/10.1002/cae.21758>
- Uyanik, C., Ozkan, M., & Parlaktuna, O. (2015). Design of an experimental platform for process control systems. *2015 9th International Conference on Electrical and Electronics Engineering (ELECO)*, 812–816. <https://doi.org/10.1109/ELECO.2015.7394459>
- Wanotayaroj, T., Chalermssinsuwan, B., & Piumsomboon, P. (2020). Dynamic simulation and control system for chemical looping combustion. *Energy Reports*, 6, 32–39. <https://doi.org/10.1016/j.egyr.2019.11.038>
- Yang, X., Xu, Q., Li, K., & Sagar, C. D. (2010). Dynamic Simulation and Optimization for the Start-up Operation of An Ethylene Oxide Plant. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(9), 4360–4371. <https://doi.org/10.1021/ie9019038>
- Zhang, Z., Wang, C., Guang, C., & Wang, C. (2019). Separation of propylene oxide-methanol-water mixture via enhanced extractive distillation: Design and control. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 144. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2019.107651>

APÉNDICE

A1. Cinética de esterificación del 1-Pentanol.

$$r_{DPNE} = \frac{A_{DPNE} \cdot (a_p^2 - \frac{a_W a_D}{K})}{(a_p + B_{DPNE} \cdot a_W)^2} \quad (1A)$$

Dónde:

$$A_{DPNE}, B_{DPNE} = \exp \exp(b_i) \exp \left[-b_{i+1} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (2A)$$

$$K_{DNPE} = \exp \left(\frac{783.42}{T} + 2.18 \right) \quad (3A)$$

Para calcular A_{DNPE} se usan los parámetros b_1 y b_2 . Para calcular B_{DNPE} se usan los parámetros b_3 y b_4 .

Tabla 1A. Parámetros cinéticos.

Parámetro	Valor
b_1	2.160
b_2	14275
b_3	0.007
b_4	2952
Ea	118.7

A2. Cinética de la reacción de DNPE ajustada para ser compatible a Aspen Plus.

$$r_{DPNE} = \frac{\exp \left(A_{DPNE}^{DF1} + \frac{B_{DPNE}^{DF1}}{T} \right) \cdot a_p^2 - \exp \left(C_{DPNE}^{DF1} + \frac{D_{DPNE}^{DF1}}{T} \right) a_W a_D}{\left[\exp \left(E_{DPNE}^{A1} + \frac{F_{DPNE}^{A1}}{T} \right) \cdot a_p + \exp \left(G_{DPNE}^{A2} + \frac{H_{DPNE}^{A2}}{T} \right) \cdot a_W \right]^2} \quad (4A)$$

A3. Parámetros de la simulación del reactor de DNPE en estado estacionario.

Tabla 2A. Balance de materia del sistema en estado estacionario.

Flujo	DNPE (kg/h)	1- Pentanol (kg/h)	Agua (kg/h)	Nitrógeno (kg/h)
S1	17400	0	0	0
S3	0	0	0	500
S6	4.9×10^{-3}	29.1	1.1×10^{-2}	430.7
S13	4.4	17365.9	430.7	69.3

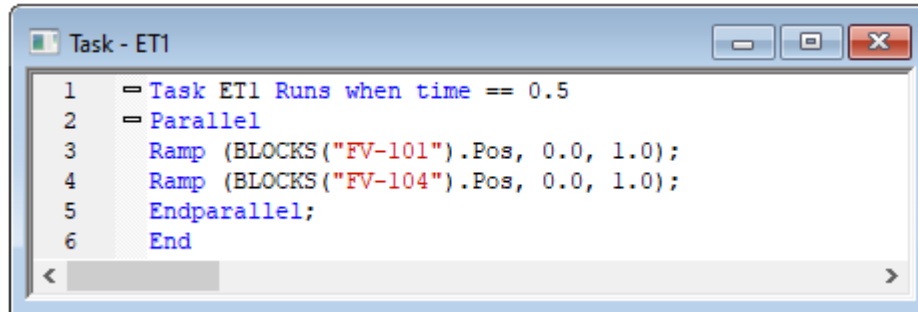
Tabla 3A. Especificaciones del reactor.

Parámetro	Valor
Volumen (m ³)	20
Altura (m)	6
Carga de catalizador (kg)	124.3
Densidad de partícula (kg/m ³)	400

Tabla 4A. Especificaciones de diseño de las válvulas.

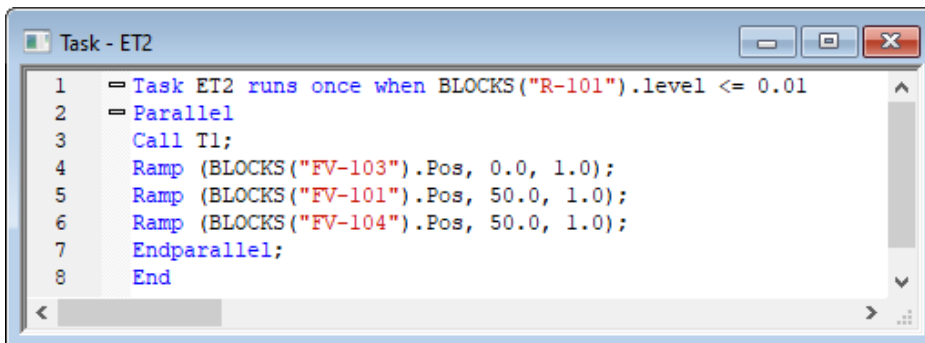
Válvula	Tipo	Caída de presión (bar)	Tamaño (pulgadas)	Cv
FV-101	Globo	1	3	23.7
FV-102	Globo	1	1.5	3.8
FV-103	Globo	16	3	6.1
FV-104	Globo	1	3	16.4
PCV-101	Globo	15	1.5	1.5

A4. Tareas para la operación discontinua del reactor DNPE en Aspen Dynamics.



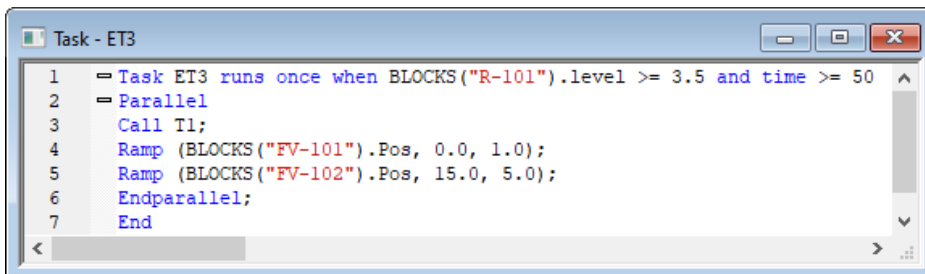
Task - ET1

```
1  = Task ET1 Runs when time == 0.5
2  = Parallel
3      Ramp (BLOCKS("FV-101").Pos, 0.0, 1.0);
4      Ramp (BLOCKS("FV-104").Pos, 0.0, 1.0);
5  Endparallel;
6  End
```



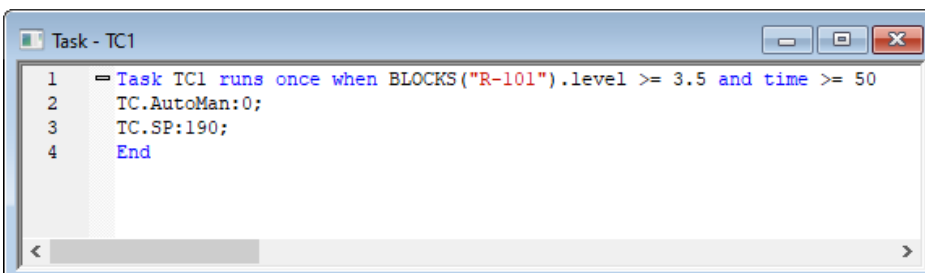
Task - ET2

```
1  = Task ET2 runs once when BLOCKS("R-101").level <= 0.01
2  = Parallel
3      Call T1;
4      Ramp (BLOCKS("FV-103").Pos, 0.0, 1.0);
5      Ramp (BLOCKS("FV-101").Pos, 50.0, 1.0);
6      Ramp (BLOCKS("FV-104").Pos, 50.0, 1.0);
7  Endparallel;
8  End
```



Task - ET3

```
1  = Task ET3 runs once when BLOCKS("R-101").level >= 3.5 and time >= 50
2  = Parallel
3      Call T1;
4      Ramp (BLOCKS("FV-101").Pos, 0.0, 1.0);
5      Ramp (BLOCKS("FV-102").Pos, 15.0, 5.0);
6  Endparallel;
7  End
```



Task - TC1

```
1  = Task TC1 runs once when BLOCKS("R-101").level >= 3.5 and time >= 50
2      TC.AutoMan:0;
3      TC.SP:190;
4  End
```

A5. Parámetros de los controladores para el reactor de DNPE.

Tabla 5A. Parámetros del controlador de presión PC del reactor discontinuo.

Parámetro	Valor
Ganancia	31.2
Tiempo integral	3.4
Tiempo derivativo	0.0
Acción del controlador	Directa

Tabla 6A. Parámetros del controlador de temperatura TC del reactor discontinuo.

Parámetro	Valor
Ganancia	68.7
Tiempo integral	10.0
Tiempo derivativo	0.0
Acción del controlador	Inversa

Tabla 7A. Parámetros del controlador de presión PC del reactor semi-discontinuo.

Parámetro	Valor
Ganancia	31.2
Tiempo integral	3.4
Tiempo derivativo	0.0
Acción del controlador	Directa

Tabla 8A. Parámetros del controlador de temperatura TC del reactor semi-discontinuo.

Parámetro	Valor
Ganancia	14.5
Tiempo integral	10.0
Tiempo derivativo	0.0
Acción del controlador	Inversa

A6. Cinética de reacción Óxido de Etileno.

$$r_{OE}^1 = \frac{k_{OE}^1 P_{OE}^{O_2} P_{OE}^{C_2H_4}}{1 + K_{OE}^1 P_{OE}^{O_2} + K_{OE}^2 \sqrt{P_{OE}^{O_2} P_{OE}^{CO_2}}} \quad (5A)$$

$$r_{OE}^2 = \frac{k_{OE}^2 \sqrt{P_{OE}^{O_2} P_{OE}^{C_2H_4}}}{1 + K_{OE}^1 P_{OE}^{O_2} + K_{OE}^2 \sqrt{P_{OE}^{O_2} P_{OE}^{CO_2}}} \quad (6A)$$

Donde,

$$k_{OE}^1 = \exp\left(7.98 - \frac{43.59 \times 10^3}{R T}\right) \quad (7A)$$

$$k_{OE}^2 = \exp\left(14.80 - \frac{77.76 \times 10^3}{R T}\right) \quad (8A)$$

$$K_{OE}^1 = \exp\left(\frac{18.32 \times 10^3}{R T} - 2.83\right) \quad (9A)$$

$$K_{OE}^2 = \exp\left(\frac{34.66 \times 10^3}{R T} - 1.01\right) \quad (10A)$$

A7. Cinética de esterificación del ácido acético y metanol.

$$r_{AM} = k_{AM}^f C_{AM}^A C_{AM}^B - k_{AM}^b C_{AM}^C C_{AM}^D \quad (11A)$$

Dónde:

$$k_{AM}^f = \frac{e^{\left(18.2 - \frac{7544}{T}\right)}}{60} \quad (12A)$$

$$k_{AM}^b = \frac{e^{\left(16.57 - \frac{7538}{T}\right)}}{60} \quad (13A)$$

A8. Condiciones del sistema en la validación de la esterificación del ácido acético.

Tabla 9A. Condiciones de la validación de la esterificación de ácido acético.

Parámetro	Valor
Metanol (g)	32
Ácido acético (g)	60
Ácido sulfúrico (mol/L)	0.1288
Temperatura (°C)	50
Presión (bar)	1

A9. Parámetros de la simulación en estado estacionario para la producción de Acetato de Metilo.

Tabla 10A. Especificaciones del reactor del sistema de producción de acetato de metilo.

Parámetro	Valor
Volumen (m ³)	6
Altura (m)	4.2
Temperatura (°C)	50
Presión (bar)	1

Tabla 11A. Especificaciones del intercambiador del sistema de producción de acetato de metilo.

Parámetro	Valor
Área (m ²)	100
Temperatura mínima de aprox. (°C)	10
Presión de salida lado frío (bar)	1
Presión de salida lado caliente (bar)	1
Fluido caliente	Tubo
Dirección del fluido de enfriamiento	Contracorriente

Tabla 12A. Especificaciones de diseño de las válvulas del sistema de producción de acetato de metilo.

Válvula	Tipo	Caída de presión (bar)	Tamaño (pulgadas)	Cv
FV-101	Globo	1	3	11.8
FV-102	Globo	3	2	6.8
FV-103	Globo	1	4	46.9
TCV-101	Globo	1	3	23.2

Tabla 13A. Composición molar flujo de alimento del sistema de producción de acetato de metilo.

Componente	(kmol/h)
Ácido acético	77
Metanol	70
Agua	151.65
Ácido sulfúrico	1.35

A10. Tareas para la operación semi-discontinua del reactor de Acetato de Metilo en Aspen Dynamics.

```

Task - ET1 *
1  = Task ET1 Runs when time == 0.5
2  = Parallel
3  Ramp (Reactions.R_1.RxnParam("R1").Pre_exp, 0.0, 0.1);
4  Ramp (Reactions.R_1.RxnParam("R2").Pre_exp, 0.0, 0.1);
5  Endparallel;
6  End

```

```

Task - ET2
1  = Task ET2 Runs when time == 1.0
2  = Parallel
3  Ramp (BLOCKS("FV-101").Pos, 0.0, 1.0);
4  Ramp (BLOCKS("FV-103").Pos, 5.0, 1.0);
5  Endparallel;
6  END
7

```

```

Task - ET3
1  = Task ET3 Runs once when BLOCKS("R-101").level <= 0.01
2  = Parallel
3  Ramp (BLOCKS("FV-101").Pos, 50.0, 1.0);
4  Ramp (BLOCKS("FV-102").Pos, 0.0, 1.0);
5  Ramp (BLOCKS("FV-103").Pos, 55.0, 1.0);
6  Endparallel;
7  End

```

```
Task - ET4
1  = Task ET4 Runs once when BLOCKS("R-101").level >= 1.1 and time >= 30
2  = Parallel
3    Ramp (BLOCKS("FV-101").Pos, 0.0, 1.0);
4    //Call T1;
5    Ramp (Reactions.R_1.RxnParam("R1").Pre_exp, 0.0000971, 5.0);
6    Ramp (Reactions.R_1.RxnParam("R2").Pre_exp, 0.0000194, 5.0);
7  Endparallel;
8  End
```

```
Task - ET5
1  = Task ET5 Runs once when time == 70
2  = Parallel
3    Ramp (BLOCKS("FV-101").Pos, 40.0, 1.0);
4    //Call T1;
5  Endparallel;
6  End
```

```
Task - ET6
1  = Task ET6 Runs once when BLOCKS("R-101").level >= 2.1 and time >= 70
2    Ramp (BLOCKS("FV-101").Pos, 0.0, 1.0);
3  End
```

```
Task - TF
1  = Task TF Runs once when time == 120
2    Pause;
3  End
```