

---

# ESTUDIO COMPARATIVO DEL DISEÑO DE REACTORES DE MEZCLA COMPLETA: ENFOQUE TRADICIONAL E INTEGRADO

---

Carlos E. Segura G, Jesús Ceballos e Irina León

## RESUMEN

En el presente trabajo se hace un estudio comparativo entre el diseño integrado de reactores mezcla completa y el diseño tradicional. Primero se establece el algoritmo para la solución de problemas de programación no lineal con ecuaciones algebraicas diferenciales (NLP-DAE), y luego se plantean todos los aspectos técnicos necesarios que describen el sistema, tales como criterios para el diseño de control, basados en la respuesta completa del sistema (error cuadrático integral) en conjunto con algunos aspectos de la respuesta (índice de disminución y sobremodulación). Para el diseño de procesos se utilizaron balances de materia y energía en estado transitorio,

en conjunto con restricciones en la máxima temperatura permitida en los reactores, mínimo grado de conversión posible y relación entre la altura y el diámetro de los equipos. Se desarrolla e implementa el algoritmo de cálculo y se valida la metodología propuesta para el diseño de reactores mezcla completa comparando la simulación dinámica del sistema diseñado con los enfoques, y sometidos a incrementos de 10, 20 y 30% en la temperatura de entrada. Se demuestra en todos los casos que el diseño integrado presenta mejor desempeño que el diseño tradicional, su respuesta es mejor con un tiempo de asentamiento más rápido y un sobreimpulso menor.

## COMPARATIVE STUDY OF CONTINUOUSLY STIRRED TANK REACTORS DESIGN: TRADITIONAL AND INTEGRATED APPROACHES

Carlos E. Segura G, Jesús Ceballos and Irina León

### SUMMARY

The study corresponds to a feasibility project, supported by a descriptive document. It sets the algorithm for solving nonlinear programming problems with mixed integer differential algebraic equations. It sets all aspects necessary to describe the system, such as criteria for the design control and mathematical modeling, in conjunction with logical constraints to develop the integrated design of continuous stirred tank reactors. First, the algorithm for solving nonlinear programming problems with differential algebraic equations (NLP-DAE) is established, and then all technical aspects necessary to describe the system, such as criteria for the design of control, based on the response full system (integral square error, integral criterion) are presented together with some aspects of the response (over-

shoot decrease index). For process design, material and energy balances were used in transient state, as well as in conjunction with restrictions on the maximum allowable temperature in the reactors, minimum possible degree of conversion and relationship between height and diameter of the equipment. The calculation algorithm is developed and implemented, and the proposed methodology is validated for the design of complete mix reactors, comparing the dynamic simulation of the system with and without control designed with the two approaches, and subjected to increments of 10, 20 and 30% in the entry temperature. It is shown that in all cases the integrated design has a better performance than the traditional design, with a faster setting time and less overshoot.

---

### Introducción

La necesidad de evaluar las características de operabilidad dinámica de los procesos durante las fases de diseño ha sido conocida desde hace tiempo, pero cuantitativamente las aproximaciones para dirigir este

tipo de problemas son bastante novedosas, siendo la interacción entre diseño y control uno de los temas más relevantes en el diseño de procesos reactivos. Cabe mencionar que en las últimas cinco décadas se ha venido realizando un esfuerzo significativo dirigido a los estudios

algorítmicos y teorías de aplicaciones que surgen del problema de diseño de procesos y control. Las primeras ideas de introducir el control en el diseño fueron planteadas por Nishida e Ichikawa (1974, 1975, 1976) quienes fueron de los primeros que estudiaron sistemáticamente

el problema de incluir consideraciones dinámicas y de control dentro del problema de síntesis de procesos que contienen incertidumbres en los parámetros. Morari (1983), Skogestad y Morari (1987a, 1987b), Morari y Zafiriou (1989), Skogestad (1991) y Skogestad y Wolff

---

### PALABRAS CLAVE / Diseño Integrado / Diseño Tradicional / Optimización / Reactor de Mezcla Completa /

Recibido: 22/11/2013. Modificado: 19/02/2014. Aceptado: 17/03/2014.

**Carlos Eduardo Segura García.** Ingeniero Químico y M.Sc. en Ingeniería de Control de Procesos, Universidad Nacional Experimental Politécnica Antonio José de Sucre, Venezuela. Asistente de Producción, Petroquímica

de Venezuela S.A. Dirección: Urbanización Valle Fresco, Calle 01, Casa 01. Municipio Independencia, Yaracuy, Venezuela. e-mail: seguracar@gmail.com  
**Jesús Ceballos.** Ingeniero Químico y M.Sc. en Ingeniería de Proce-

sos, Universidad de Carabobo (UC), Venezuela. Gerente de Planificación y Nuevos Desarrollos, Petroquímica de Venezuela S.A. e-mail: ceballos.jesus@gmail.com

**Irina León.** Ingeniera Química UC, Venezuela. M.Sc. en Refinación y Petróleo, Universidad Metropolitana, Venezuela. Profesora, UC, Venezuela. e-mail: ileon@uc.edu.ve

# ESTUDO COMPARATIVO DO DESENHO DE REATORES DE MISTURA COMPLETA: ENFOQUE TRADICIONAL E INTEGRADO

Carlos E. Segura G, Jesús Ceballos e Irina León

## Resumo

No presente trabalho se faz um estudo comparativo entre o desenho integrado de reatores de mistura completa e o desenho tradicional. Primeiro se estabelece o algoritmo para a solução de problemas de programação não linear com equações algébrico-diferenciais (NLP-DAE), e logo se sugerem todos os aspectos técnicos necessários que descrevem o sistema, tais como critérios para o desenho de controle, baseados na resposta completa do sistema (erro quadrático integral) em conjunto com alguns aspectos da resposta (índice de diminuição e sobre modulação). Para o desenho de processos se utilizaram balanços de matéria e energia em estado transitório, em conjunto

com restrições na máxima temperatura permitida nos reatores, mínimo grau de conversão possível e relação entre a altura e o diâmetro dos equipamentos. Desenvolve-se e implementa o algoritmo de cálculo e se valida a metodologia proposta para o desenho de reatores de mistura completa comparando a simulação dinâmica do sistema desenhado com os enfoques, e submetidos a incrementos de 10, 20 e 30% na temperatura de entrada. Demonstra-se em todos os casos que o desenho integrado apresenta melhor desempenho que o desenho tradicional, sua resposta é melhor com um tempo de assentamento mais rápido e um sobre impulso menor.

(1992) han realizado contribuciones significantes en el análisis del control de procesos y en el estudio de la capacidad de adaptación dinámica de los sistemas. Estos autores han introducido y analizado magnitudes de control para la interacción de las variables y el rechazo de perturbaciones. También han investigado las características inherentes a un proceso que limitan su control y han propuesto un procedimiento de síntesis de reguladores que consideran como la estabilidad robusta en presencia de incertidumbres en los modelos y acciones en las perturbaciones. Sheffield (1992) proporcionó una perspectiva industrial sobre la necesidad de integrar el diseño y el control de sistemas. Tanto Morari (1992) como Narraway y Perkins (1991), han realizado una recopilación de algunos de los resultados importantes y esfuerzos previos, concernientes a la interacción entre el diseño y el control. Para el problema específico de diseño integrado de procesos del sistema descrito por Schweiger y Floudas (1997) fue resuelto mediante métodos de optimización local. Los algoritmos desarrollados y la simulación implementada arrojan resultados que ponen de manifiesto las ventajas del enfoque simultáneo de diseño sobre el enfoque secuencial. Surge así el enfoque sobre el cual se basa el presente trabajo, el 'diseño integrado', denominado así por Gu-

tiérrez y Prada en el año 2003, quienes establecen el enfoque en la tarea de diseño de procesos químicos de dos formas: el enfoque tradicional (secuencial) y el Integrado (simultáneo). En el primero, que ha sido llevado a cabo tradicionalmente de manera manual e intuitiva; una vez que se proponen diferentes esquemas de diagramas de flujo, los ingenieros se centran en elegir el esquema de la planta económicamente óptimo desde el punto de vista de ingeniería civil, pero sin tener en cuenta la secuencia e interconexión óptima entre las unidades que lo componen, y sin considerar las características de control en lazo abierto o en lazo cerrado que tendría la planta una vez diseñada. Esta estrategia implica evolucionar hacia la solución a través de sucesivos refinamientos de una solución inicial aproximada. Se propone una estrategia de diseño desarrollando en principio, soluciones muy simples para luego agregar capas sucesivas de detalles ver Figura 1a. Por otra parte también Gutié-

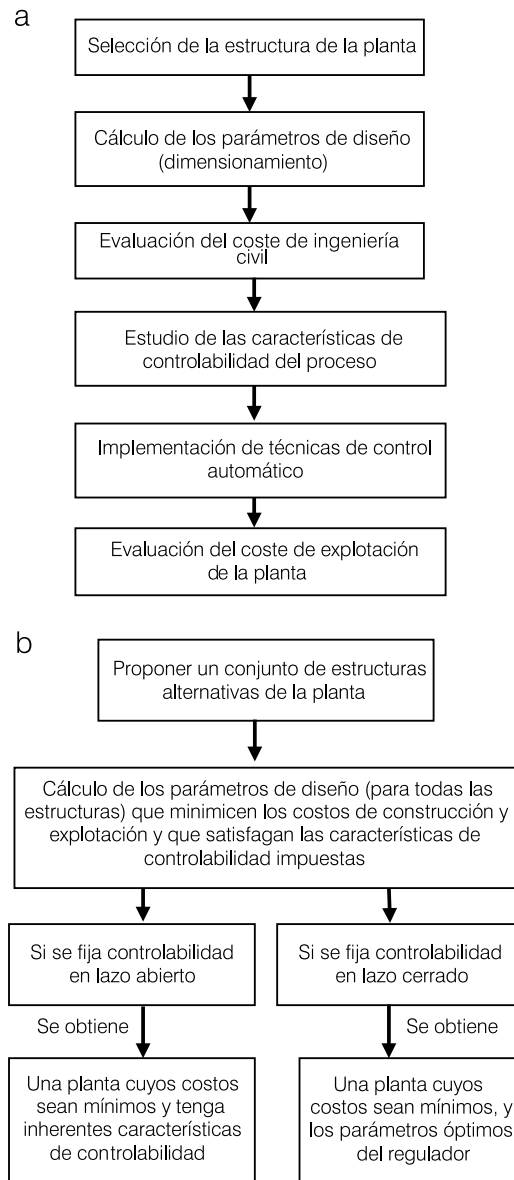


Figura 1. Diseño tradicional (a) y diseño integrado (b). Fuente: Gutiérrez y de Prada (2003).

rrer y Prada en el año 2003 establecen que el diseño integrado (enfoque simultáneo) es "la técnica de diseño de procesos mediante la cual se obtienen los parámetros físicos de la planta que minimicen el coste de operación y construcción, al mismo tiempo que cumplen con las características de control que se imponen al proceso". La interacción entre el diseño de procesos y el control de procesos surge porque el diseño de procesos químicos determina de un modo inherente su controlabilidad, que cualitativamente significa lo bien que un proceso es capaz de rechazar perturbaciones, cuán severamente interactúan las múltiples variables y cuán fácilmente el sistema se mueve de un punto de operación a otro (ver Figura 1b).

## Alcance y Descripción del Sistema

El sistema a considerar y que se describe a continuación está constituido por dos reactores mezcla completa conectados en serie

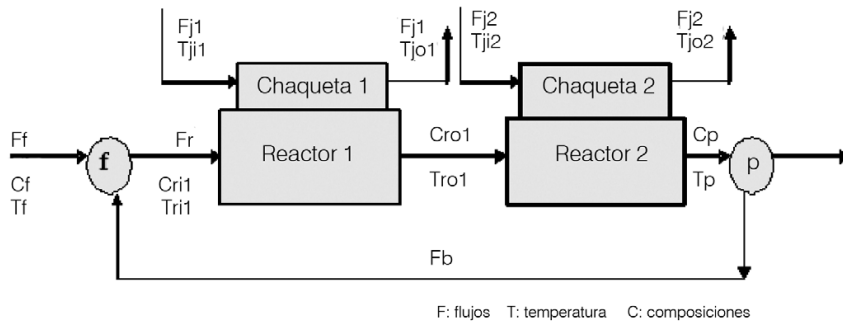


Figura 2. Esquema del sistema considerado.

TABLA I  
VARIABLES DINÁMICAS

Notación	Unidades	Descripción
$C_{ri1}$	kgmol A/ m <sup>3</sup>	Concentración a la entrada del primer reactor
$T_{ri1}$	K	Temperatura a la entrada del primer reactor
$C_{ro1}$	kgmol A/ m <sup>3</sup>	Concentración a la salida del primer reactor
$T_{ro1}$	K	Temperatura a la salida del primer reactor
$C_p$	Kgmol A/ m <sup>3</sup>	Composición del producto final
$T_p$	K	Temperatura del producto final
$k_1$	h <sup>-1</sup>	Velocidad de reacción en el primer reactor
$k_2$	h <sup>-1</sup>	Velocidad de reacción en el segundo reactor
$I_{T_{r1}}$	K×h	Término integral del PI del primer reactor
$I_{T_p}$	K×h	Término integral del PI del segundo reactor
$\mu$	K <sup>2</sup> ×h	Objetivo de la controlabilidad (error cuadrático integral)

Fuente: Schweiger y Floudas (1997).

con camisas de enfriamiento, donde ocurre una reacción de primer orden irreversible y exotérmica (A→B). Para el sistema se supone que tanto el refrigerante en la camisa de enfriamiento como el fluido del proceso en el reactor están bien mezclados, y que la densidad y la capacidad calorífica de ambos no cambia significativamente con la temperatura; el nivel y el área de transferencia de calor en el tanque son constantes, el sistema se encuentra bien aislado y se desprecia la dinámica de transferencia de calor entre las paredes del tanque. Antes de perturbar el sistema, se supone que el mismo se encuentra operando en estado estacionario. La selección del sistema en cuanto al número de reactores

y su disposición tiene sus bases en lo establecido por Luyben (1993), quien encontró que el mejor sistema, según criterios económicos de diseño en estado estacionario y control, corresponde al caso de dos reactores conectados en serie (Figura 2).

El trabajo propuesto se limita a efectuar el diseño tradicional y el diseño integrado del sistema antes descrito y estudiado por Schweiger y Floudas (1997), usando como herramienta un método de optimización local determinística mediante la técnica del gradiente; se determinarán las dimensiones físicas de las unidades del proceso, condiciones de operación y los parámetros de entonación, así como también la relación

cuantitativa entre los objetivos económicos del estado estacionario y el objetivo de control de procesos, para luego poder establecer un estudio comparativo entre ambos enfoques ‘tradicional’ e ‘integrado’.

$$T_r(t) = \begin{cases} 333,3 \text{ K} & \rightarrow t < 0,5\text{h} \\ 333,33 \text{ K} + \Delta\text{perturbación} & \rightarrow t \geq 0,5\text{h} \end{cases} \quad (1)$$

Según Schweiger y Floudas (1997), para el problema de diseño integrado de un sistema como el planteado se presentan diferentes tipos de variables y restricciones. Las variables dinámicas son aquellas tales como composición y temperatura, las cuales varían en el tiempo. Las variables de control representan cantidades que pueden ser mani-

puladas en el tiempo para mantener controladas las variables a niveles especificados, y corresponden al flujo de refrigerante. Las variables controladas son un subconjunto de las variables dinámicas las cuales tienen un valor deseado o *set-point*, que se representa por la temperatura de los reactores (ver Tabla I). La perturbación está definida por un incremento tipo escalón en la temperatura de entrada de los reactantes. Para nuestro caso la función escalón está definida por

La definición de las variables dinámicas y de diseño con las unidades en el sistema internacional se muestra en las Tablas I y II. Para efectos del control de los reactores se usará un controlador para cada uno de ellos, del tipo proporcional-integral (PI). Las variables

TABLA II  
VARIABLES DE DISEÑO

Notación	Unidades	Descripción
$T_{ro1}^*$	K	<i>Set-point</i> temperatura a la salida del primer reactor
$T_p^*$	K	<i>Set-point</i> temperatura del producto final
$V_{r1}$	m <sup>3</sup>	Volumen del primer reactor
$V_{r2}$	m <sup>3</sup>	Volumen del segundo reactor
$A_1$	m <sup>2</sup>	Área de intercambio de calor del primer reactor
$A_2$	m <sup>2</sup>	Área de intercambio de calor del segundo reactor
$D_{r1}$	m	Diámetro del primer reactor
$D_{r2}$	m	Diámetro del segundo reactor
$H_{r1}$	m	Altura del primer reactor
$H_{r2}$	m	Altura del segundo reactor
$V_{j1}$	m <sup>3</sup>	Volumen de la camisa de enfriamiento del primer reactor
$V_{j2}$	m <sup>3</sup>	Volumen de la camisa de enfriamiento del segundo reactor
$F_r$	m <sup>3</sup> ·h <sup>-1</sup>	Flujo de reacción
$F_b$	m <sup>3</sup> ·h <sup>-1</sup>	Flujo de recirculación
$F_p$	m <sup>3</sup> ·h <sup>-1</sup>	Flujo del producto final
$F_{jn1}$	m <sup>3</sup> ·h <sup>-1</sup>	Flujo nominal de la camisa de enfriamiento del reactor 1
$F_{jn2}$	m <sup>3</sup> ·h <sup>-1</sup>	Flujo nominal de la camisa de enfriamiento del reactor 2
$k_{j1}$	m <sup>3</sup> ·h <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup>	Ganancia del PI del primer reactor
$k_{j2}$	m <sup>3</sup> ·h <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup>	Ganancia del PI del segundo reactor
$\tau_{j1}$	h	Tiempo de integración del PI del primer reactor
$\tau_{j2}$	h	Tiempo de integración del PI del segundo reactor

Fuente: Schweiger y Floudas (1997).

TABLA III  
PARÁMETROS QUE SE ASUMEN CONSTANTES  
EN EL PROBLEMA

Descripción	Parámetro	Valor
Calor de reacción	$\Delta H$	-1666,67 Kcal/Kg mol
Coefficiente de transferencia de calor	$U$	75,60 Kcal
Energía de activación	$E/R$	8375 K
Constante cinética de velocidad de reacción	$K_0$	40,8 hr <sup>-1</sup>
Densidad del líquido	$\rho$	800,92 Kg/m <sup>3</sup>
Capacidad calorífica del líquido	$C_p$	0,75 Kcal/(Kg.K)
Densidad del refrigerante	$\rho_j$	997,95 Kg/m <sup>3</sup>
Capacidad calorífica del refrigerante	$C_j$	1,0 Kcal/(Kg.K)
Flujo de alimentación	$F_r$	2,83 m <sup>3</sup> /hr
Composición de la alimentación	$C_r$	16,02 Kg mol A/ m <sup>3</sup>
Temperatura de la alimentación	$T_r$	333,33 K
Temperatura de entrada del refrigerante	$T_{ji}$	294,44° R
Costo del refrigerante	Cost	1,32x10 <sup>-4</sup> \$/ m <sup>3</sup>

Fuente: Schweiger y Floudas (1997).

asociadas a los mismos se muestran también en las Tablas I y II. Es necesario definir los parámetros que son constantes en el proceso, tales como densidades, capacidades caloríficas y costos unitarios de refrigerante. Los parámetros que se asumen constantes en el proceso seleccionado se presentan en la Tabla III:

El planteamiento matemático del proceso según balances de materia es

Minimizar

$$\text{cost}_{\text{total}} = 1916,9D_{r1}^{1,066}(H_{r1})^{0,802} + 1916,9D_{r2}^{1,066}(H_{r2})^{0,802} + 131,8(F_{j1} + F_{j2}) \quad (2)$$

$$F_r = F_r + F_b \quad (3)$$

$$F_r = F_p + F_b \quad (4)$$

$$F_r C_r + F_b C_p = F_r C_{r1} \quad (5)$$

$$T_r F_r + T_p F_b = T_{r1} F_r \quad (6)$$

$$V_{r1} \frac{dC_{r1}}{dt} = F_r C_{r1} - F_r C_{r1} - k_1 C_{r1} V_{r1} \quad (7)$$

$$V_{r2} \frac{dC_p}{dt} = F_r C_{r1} - F_r C_p - k_2 C_p V_{r2} \quad (8)$$

$$V_{r1} \frac{dT_{r1}}{dt} = F_r T_{r1} - F_r T_{r1} - \frac{U A_1}{\rho C_p} (T_{r1} - T_{j1}) - \frac{\Delta H}{\rho C_p} k_1 C_{r1} V_{r1} \quad (9)$$

$$V_{r2} \frac{dT_p}{dt} = F_r T_{r1} - F_r T_p - \frac{U A_2}{\rho C_p} (T_p - T_{j2})$$

$$V_{j1} \frac{dT_{j1}}{dt} = F_{j1} T_{j1} - F_{j1} T_{j1} - \frac{\Delta H}{\rho C_p} k_2 C_p V_{r2} + \frac{U A_1}{\rho_j C_{pj}} (T_{r1} - T_{j1}) \quad (10)$$

$$V_{j2} \frac{dT_{j2}}{dt} = F_{j2} T_{j2} - F_{j2} T_{j2} + \frac{U A_2}{\rho_j C_{pj}} (T_p - T_{j2}) \quad (11)$$

$$k_1 = k_0 e^{\frac{-E}{RT_{r1}}} \quad (13)$$

$$k_2 = k_0 e^{\frac{-E}{RT_p}} \quad (14)$$

$$C_p \leq 0,4 \quad (15)$$

$$\frac{D_{r1}}{H_{r1}} \geq 3 \quad (16)$$

La expresión para el volumen del reactor y el área de transferencia de calor es

$$V_{r1} = \frac{\pi}{4} D_{r1}^2 H_{r1} \quad (17)$$

$$V_{r2} = \frac{\pi}{4} D_{r2}^2 H_{r2} \quad (18)$$

$$A_1 = \pi D_{r1} H_{r1} \quad (19)$$

$$A_2 = \pi D_{r2} H_{r2} \quad (20)$$

La expresión para el volumen de la camisa de enfriamiento se representa a través de

$$V_{j1} = A_1 \frac{1}{3} \text{ft} \quad (21)$$

$$V_{j2} = A_2 \frac{1}{3} \text{ft} \quad (22)$$

La ecuación matemática que relaciona las variables controladas y manipuladas está dada por la estructura de un controlador clásico PI como se muestra a continuación:

$$\frac{dI_{T_{r1}}}{dt} = T_{r1} - T_{r1}^* = 0 \quad (23)$$

$$\frac{dI_{T_p}}{dt} = T_p - T_p^* = 0 \quad (24)$$

$$F_{j1} = F_{j1} + k_{j1} (T_{r1} - T_{r1}^*) + \frac{k_{j1}}{\tau_{j1}} I_{T_{r1}} \quad (25)$$

$$F_{j2} = F_{j2} + k_{j2} (T_p - T_p^*) + \frac{k_{j2}}{\tau_{j1}} I_{T_p} \quad (26)$$

Las siguientes expresiones se tomaron de Floudas (1997) con las restricciones para el proceso establecido. Primero la función objetivo se relaciona con los costos de diseño y utilidades a través de la expresión matemática

$$\text{cost}_{\text{cap}} = 1916,9D_{r1}^{1,066}(H_{r1})^{0,802} + 1916,9D_{r2}^{1,066}(H_{r2})^{0,802} \quad (27)$$

$$\text{cost}_{\text{util}} = 32,77(F_{j1} + F_{j2}) \quad (28)$$

$$\text{cost}_{\text{total}} = \text{cost}_{\text{cap}} + 4_{yr} \text{cost}_{\text{util}} \quad (29)$$

$$\text{cost}_{\text{total}} = 1916,9D_{r1}^{1,066}(H_{r1})^{0,802} + 1916,9D_{r2}^{1,066}(H_{r2})^{0,802} + 131,8(F_{j1} + F_{j2}) \quad (30)$$

La expresión matemática de la función objetivo que relaciona el diseño del con-

trol de proceso del sistema es

$$\frac{d\mu}{dt} = (T_{r1} - T_{r1}^*)^2 + (T_p - T_p^*)^2 \quad (31)$$

donde  $\mu$ : error cuadrático integral, que no es más que la integral de la diferencia entre la temperatura de salida en cada reactor y sus respectivos *set point* elevada al cuadrado.

Como se puede apreciar, el planteamiento matemático es multiobjetivo: un objetivo es la minimización los costos totales y el otro es la minimización del error cuadrático integral. Para resolver el problema multiobjetivo se convierte uno de los objetivos en restricción ( $\text{obj}_j \leq \epsilon$ ). En nuestro caso el error cuadrático integral pasa a formar parte de las restricciones no lineales del problema, lo que implica resolver el problema multiobjetivo de control óptimo entero mixto (MIOCP) a diferentes valores de  $\epsilon$  que van desde el óptimo controlable hasta el óptimo económico. En este punto el problema multiobjetivo se convierte en un problema de programación no lineal con ecuaciones algebraicas diferenciales NLP-DAE. La restricción del control del sistema sería entonces

$$\mu \leq \epsilon \quad (32)$$

De esta manera se determina un conjunto de soluciones que indican la interacción entre el diseño y el control del proceso.

Para mejorar las respuestas dinámicas del sistema se tienen que tomar en cuenta ciertos criterios de diseño de ajuste de controladores que relacionen la sobremodulación, que no es más que el grado al que la respuesta inicial sobrepasa el valor final, y el índice de disminución, que es un criterio muy común para el control de procesos, con frecuencia especificado como  $\frac{1}{4}$ . Para lograr esto se tiene que agregar al sistema una restricción no lineal que relacione la res-

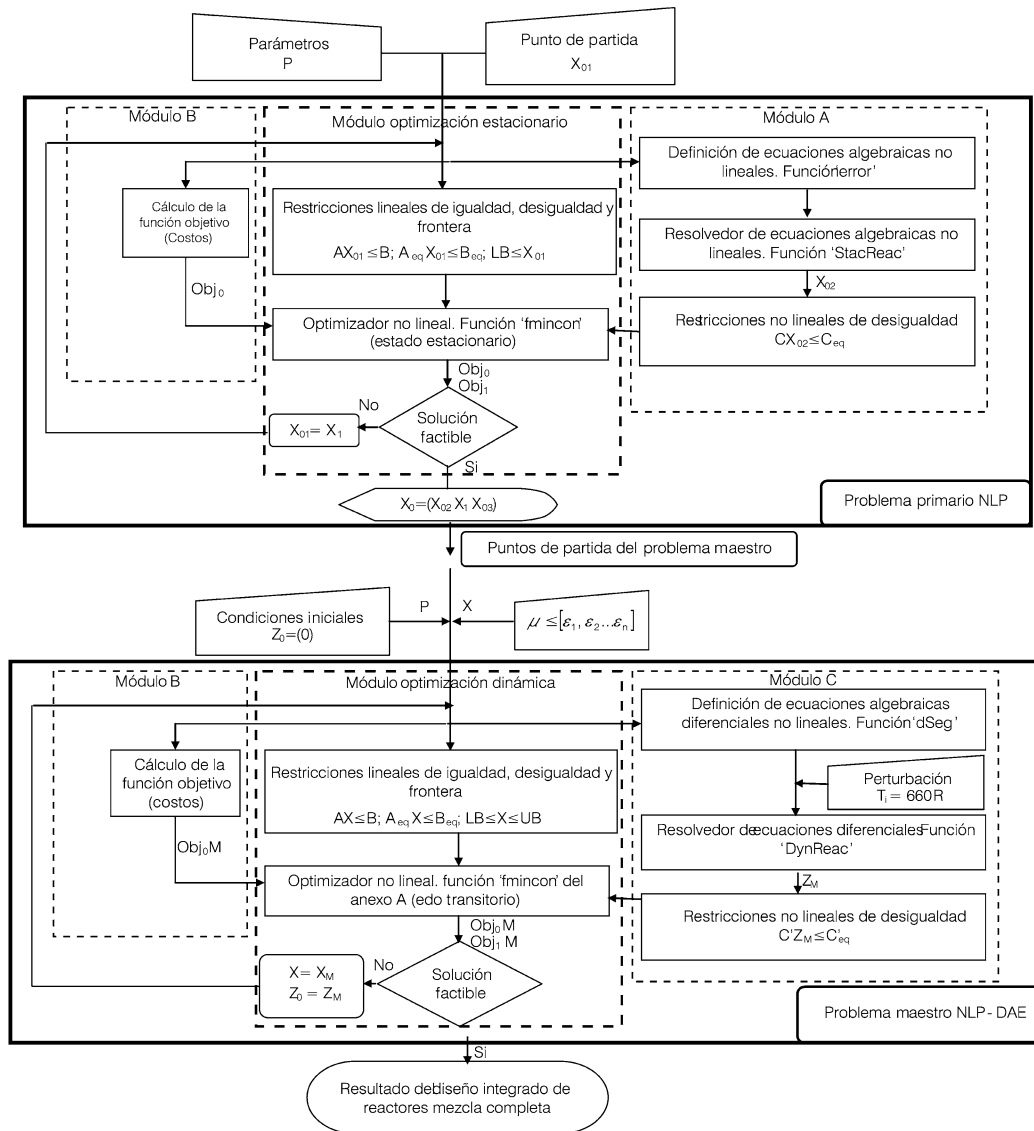


Figura 3. Algoritmo para resolver problemas NLP-DAE.

puesta de las temperaturas para ambos reactores con respecto a los valores máximos, mínimos y nominales que estas variables puedan tomar para una perturbación dada. La ecuación que representa esta restricción no lineal es

$$\alpha(T_{ro1max} - T_{ro1}^*) \leq (T_{ro1}^* - T_{ro1min}) \quad (33)$$

$$\alpha(T_{ro2max} - T_{ro2}^*) \leq (T_{ro2}^* - T_{ro2min})$$

Donde  $\alpha$  representa el índice o razón de disminución de la cresta inicial (máxima) con respecto a la cresta mínima de cada respuesta. Para llevar a cabo el diseño integrado del sistema propuesto fue necesario agregar ciertas restricciones, algunas lógicas

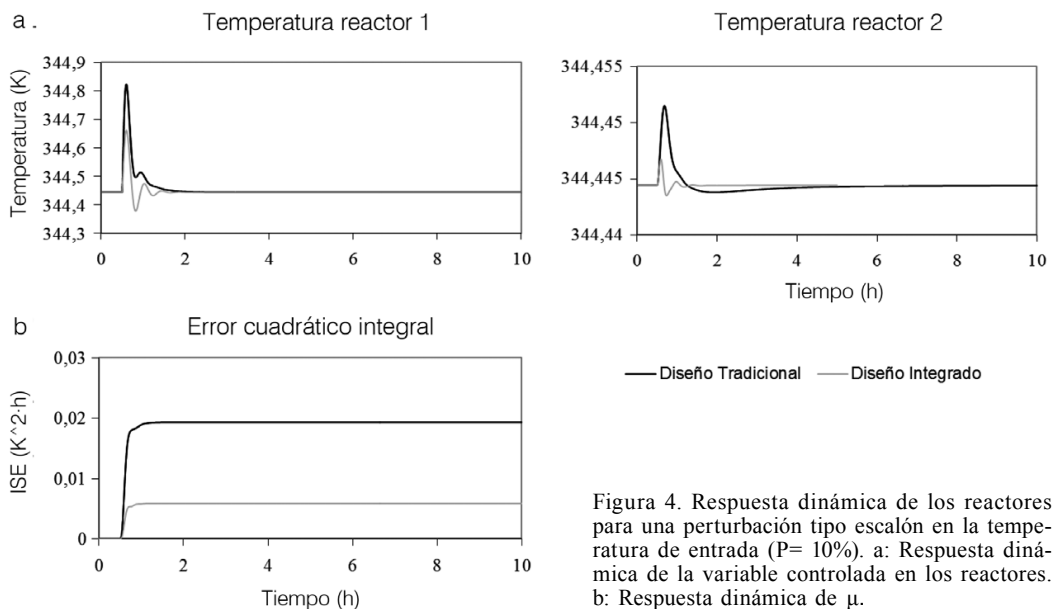


Figura 4. Respuesta dinámica de los reactores para una perturbación tipo escalón en la temperatura de entrada ( $P=10\%$ ). a: Respuesta dinámica de la variable controlada en los reactores. b: Respuesta dinámica de  $\mu$ .

como la no existencia de flujos o dimensiones negativas, relación entre la altura y el diámetro (ver Eq. 15) de los reactores, y otras son para cumplir ciertas condiciones de proceso dentro del diseño integrado, entre las que están la relación entre el flujo nominal y el flujo dinámico máximo del refrigerante (variable manipulada) para que el diseño se enmarque dentro de la norma PDVSA N° K-332 Control Valve, la cual establece que el diseño final de una válvula de control debe estar sujeto a la apertura a la cual tiene que trabajar para un determinado flujo nominal en la variable manipulada (17-90%).

$$F_{jn1} \geq 0,3F_{j1max} \quad (34)$$

$$F_{jn2} \geq 0,3F_{j2max}$$

Esta restricción representa intrínsecamente la relación existente entre los costos de utilidades y el diseño del proceso.

## Resultados

Para la validación de la metodología propuesta para el diseño de procesos (diseño integrado, Figura 1b y 3), se aplicará el diseño secuencial (tradicional, Figura 1a) al sistema de estudio y se compararán las respuestas dinámi-

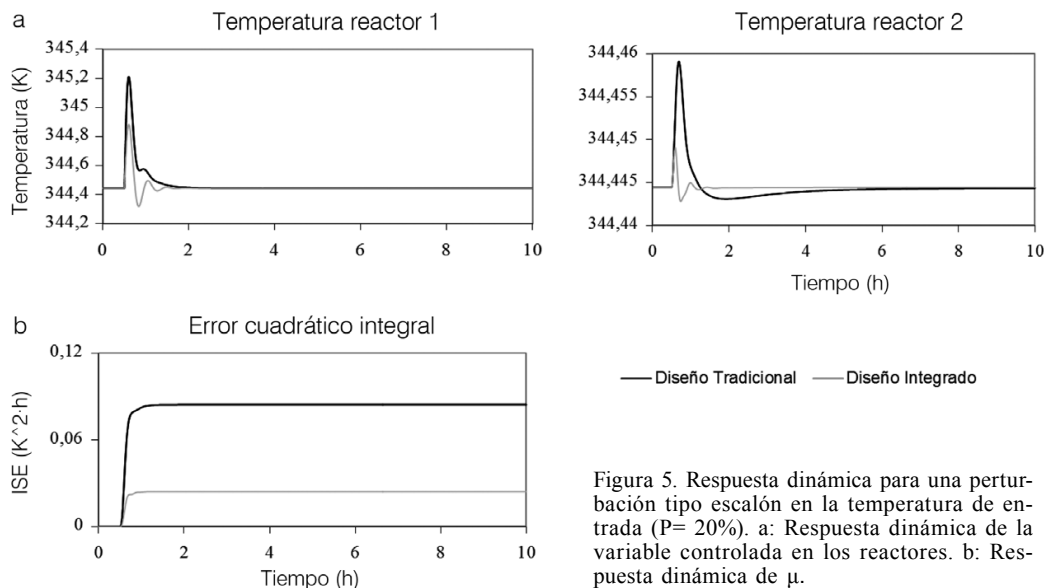


Figura 5. Respuesta dinámica para una perturbación tipo escalón en la temperatura de entrada ( $P= 20\%$ ). a: Respuesta dinámica de la variable controlada en los reactores. b: Respuesta dinámica de  $\mu$ .

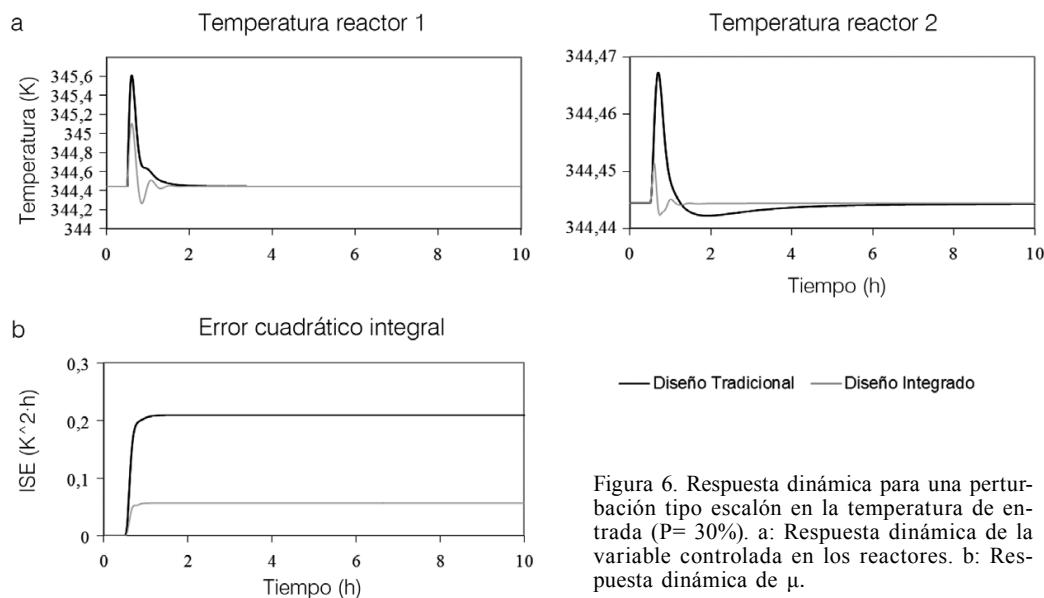


Figura 6. Respuesta dinámica para una perturbación tipo escalón en la temperatura de entrada ( $P= 30\%$ ). a: Respuesta dinámica de la variable controlada en los reactores. b: Respuesta dinámica de  $\mu$ .

cas con control a diferentes perturbaciones.

En la validación se usará para el diseño integrado el caso donde  $\varepsilon= 0,019$  y  $\alpha= 0,3$ . Los comportamientos se analizarán más adelante en conjunto con los resultados de las simulaciones obtenidas con el método simultáneo y tradicional a diferentes perturbaciones (10, 20, 30%) de incremento en la temperatura inicial pero con control (Figuras 4, 5 y 6).

A manera de comparación, en la Tabla IV se presenta un

resumen de los resultados generados para el valor de  $\varepsilon= 0,019$  y  $\alpha= 0,3$  con los diseños integrado y tradicional. Si se analiza la altura y los diámetros obtenidos en ambos diseños se corrobora que el volumen de reacción (sumatoria de los volúmenes de ambos reactores) en el caso de diseño integrado es superior al diseño tradicional ( $31,63 > 26,88m^3$ ), lo cual se debe a que el diseño integrado basa su algoritmo en la consecución de un proceso flexible, lo que para nuestro

caso se traduce en unidades de mayor tamaño que puedan soportar las perturbaciones a las cuales son sometidas durante su diseño y aun así mostrar un comportamiento deseado.

Al estudiar las simulaciones del sistema a diferentes perturbaciones sin la acción del controlador, se aprecia como el sistema que fue diseñado con el método simultáneo presenta mejor desempeño que el diseñado con el método tradicional, ya que su respuesta final (estado esta-

cionario) se ubicó por debajo en relación al diseño secuencial. Todo esto se traduce en un costo mayor en el cual incurriría el sistema al momento de controlar cualquier tipo de perturbación, si este se diseñara con el método tradicional, ya que el índice de penalización asociado a la desviación de la respuesta perturbada con respecto al *set point* ( $\leq 344,44K$ ) será menor en el diseño integrado. Cuando el sistema es perturbado a diferentes incrementos en la temperatura de alimentación y luego simulado con la acción del controlador PI, se observa como el diseño integrado presenta mejor desempeño que el tradicional, su respuesta es mejor con un tiempo de asentamiento más rápido y un sobreimpulso menor en todos los casos, lo que se traduce en un menor costo de operación al momento de controlar las perturbaciones en la temperatura de alimentación a la cual pudiera estar expuesta el sistema, tal y como se explicó antes.

Al estudiar la Tabla IV se aprecia como los costos para ambas técnicas de diseño son diferentes. Para el caso del diseño integrado los costos son mayores (US\$185087,3) si se comparan con los obtenidos en el diseño tradicional (US\$174788). Si se quiere diseñar un proceso que sea flexible hay que tomar en cuenta los aspectos de control de procesos desde las primeras fases del proyecto; esto significa que el diseño obtenido de manera integrada sea capaz de manejar ciertas perturbaciones a las cuales es sometida y aun así mostrar un comportamiento deseado en su dinámica, lo que en el presente caso se traduce en equipos de mayor tamaño y mayor costo.

Al comparar los resultados de diámetro y altura de los reactores en la Tabla IV se aprecia que en todos los casos tanto para el diseño integrado como el tradicional siempre alcanzan el valor de 3, lo que desde el punto de vista de optimización quiere

TABLA IV  
COMPARACIÓN ENTRE DISEÑO INTEGRADO Y DISEÑO TRADICIONAL

	Diseño integrado	Diseño tradicional
Optimización en estado dinámico		
Costo capital (US\$)	179850,74	169511,66
Costo utilidad (US\$)	5236,52	5276,98
Costo total (US\$)	185087,26	174788,65
Parámetros óptimos de diseño		
Hr1 (m)	1,52	1,24
Hr2 (m)	0,98	1,24
Fb (m <sup>3</sup> /h)	0	0
Dr1 (m)	4,57	3,72
Dr2 (m)	2,95	3,71
Fjn1 (m <sup>3</sup> /h)	1,03	0,94
Fjn2 (m <sup>3</sup> /h)	0,10	0,20
Parámetros óptimos de control		
kj1 (m <sup>3</sup> /h.K)	7,17	4,83
kj2 (m <sup>3</sup> /h.K)	6,36	1,31
Tauj1 (h)	0,15	0,34
Tauj2 (h)	4,99	4,92
Resultados estado estacionario		
Fr (m <sup>3</sup> /h)	2,83	2,83
Cr1l (Kgmol/m <sup>3</sup> )	16,02	16,02
Tr1l (K)	333,33	333,33
Cr0l (kgmol/m <sup>3</sup> )	1,47	2,53
Trol (K)	344,44	344,44
Tjol (K)	342,42	342,33
Cp (Kgmol/m <sup>3</sup> )	0,40	0,40
Tp (K)	344,44	344,44
Tjo2 (K)	344,07	344,07
Resultados estado dinámico		
Cr0l (Kgmol/m <sup>3</sup> )	1,47	2,53
Trol (K)	344,44	344,44
Tjol (K)	341,11	339,65
Cp (Kgmol/m <sup>3</sup> )	0,40	0,40
Tp (K)	344,44	344,44
Tjo2 (K)	344,07	343,97
ltro1 (K.h)	0,0264	0,09337
ltro2 (K.h)	0,00004376	0,0005746
mu (K <sup>2</sup> .h)	0,0058642	0,001932

decir que la restricción de desigualdad numero 15 del modelo matemático es activa, es decir que al evaluar la desigualdad en el lado derecho con los valores óptimos el resultado fue siempre el mismo (3) o sea, una holgura igual a cero. Al resolver el planteamiento matemático sin la restricción numero 15 los resultados fueron reactores de diámetro muy pequeños y de gran altura ya que el algoritmo de optimización para no ver penalizada en mayor magnitud la función objetivo (Eq. 2) siempre buscó resultados donde el diámetro tendiera a 0 y la altura a valores

muy elevados. Esta relación  $D_{ri} \cong 3H_{ri}$  la encontramos en reactores mezcla completa de ácido fosfórico de tecnología Dorr Oliver.

### Conclusiones

Al realizar el diseño integrado de reactores mezcla completa se tiene que establecer una relación entre el flujo dinámico y nominal del refrigerante, con el fin de evitar que la válvula de control del flujo nominal del refrigerante trabaje a un porcentaje de apertura muy bajo.

Al estudiar el sistema diseñado de forma integrada que-

da claro que establecer un diseño utilizando como criterios de control solo aquellos basados en la respuesta completa, tal como lo es el error cuadrático integral, no es suficiente para obtener una respuesta satisfactoria. Por esa razón es necesario utilizar también criterios de diseño para el ajuste de controladores basados en ciertos puntos de la respuesta del sistema, tales como la sobremodulación y el índice de disminución.

Los criterios para el diseño de control afectan los objetivos económicos del proyecto, quedando en evidencia la necesidad de estudiar desde las primeras fases de diseño del control de proceso.

El diseño integrado presenta mejor desempeño que el diseño tradicional cuando se comparan las respuestas del sistema con y sin control ante diferentes incrementos en la temperatura de entrada.

El diseño integrado presenta un costo total de inversión de US\$185087, cifra que es mayor en la obtenida con el diseño secuencial (US\$174789). Esto es debido a que al tomar en cuenta el diseño del control en paralelo con el diseño de procesos se deben añadir nuevas restricciones al modelo matemático que condicionan la solución del problema, todo esto con el fin de obtener una mejor respuesta (mejor control del sistema) ante futuras perturbaciones. Ello se traduce durante la operación de la planta en un menor gasto energético al momento de controlar cualquier tipo de perturbación en el sistema, ya que el índice de penalización asociado a la desviación de la respuesta perturbada con respecto al *set point* ( $\leq 344,44K$ ) será mayor en el diseño tradicional.

Los costos de operación del sistema diseñado con el método tradicional siempre serán mayores que los de diseño integrado, lo que se puede determinar cualitativamente al estudiar el compor-

tamiento dinámico de ambos diseños.

El diseño integrado muestra mayor flexibilidad que el diseño tradicional, debido a que el diseño integrado toma en cuenta simultáneamente los objetivos de control y diseño de procesos.

### REFERENCIAS

- Brengel DD, Sieder WD (1992) Coordinated design and control optimization of nonlinear processes. *Comp. Chem. Eng.* 16: 861-886.
- Elliot TR, Luyben WL (1995) Capacity-based approach for the quantitative assessment of process controllability during the conceptual design stage. *Ind. Eng. Chem. Res.* 34: 3907-3915.
- Figueroa JL, Bahri PA, Bandoni JA, Romagnoli JA (1996) Economic impact of disturbances and uncertain parameters in chemical processes-a dynamic back-off analysis. *Comp. Chem. Eng.* 20: 453-461.
- Gutiérrez G, De Prada C (2003) *Diseño Integrado y Síntesis de Procesos Químicos*. Universidad de Valladolid. España. pp. 1-6.
- Mohideen MJ, Perkins JD, Psitkopoulos EN (1996) Optimal design of dynamic systems under uncertainty. *AIChE J.* 42: 2251-2272.
- Morari M (1983) Design of resilient processing plants III. A general framework for the assessment of dynamic resilience. *Ind. Chem. Eng. Sci.* 38: 1881-1891.
- Morari M (1992) Effect of design on the controllability of chemical plants. In Perkins JD (Ed). *Preprints IFAC Workshop Interactions Between Process Design and Process Control*. Pergamon Press. Oxford, RU. pp. 3-16.
- Morari M, Zafiriou E (1989) *Robust Process Control*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ EEUU. 488 pp.
- Naraway L, Perkins J, Barton G (1991) Interaction Between Process Design and Process Control: Economic analysis of Process Dynamics. *Process Control. I.* 243-250.
- Nishida N, Ichikawa A, Tazoki E (1974) Synthesis of Optimal Process Systems with Uncertainty. *Ind. Eng. Chem. Process.* 13: 209-214.
- Nishida N, Ichikawa A (1975) Synthesis of Optimal Dynamic Process Systems by a Gradient Method. *Ind. Eng. Chem. Process.* 13: 236-242.

- Nishida N, Liu Y, Ichikawa A (1976) Studies in Chemical Process Design and Synthesis II. Optimal Synthesis of Dynamic Process Systems with Uncertainty. *AIChE J.* 22: 539-549.
- Quintana F (2003) *Síntesis de Procesos, (Optimización del diseño de Plantas Químicas)*. Universidad Politécnica de Madrid. España. 184 pp.
- Sheffield R (1992) Integrate process and control system design. *Ind. Chem. Eng. Prog.* 88: 30-35.
- Schweiger C, Floudas C (1997) Interaction of Design and Control. Optimization with Dynamic Models. En Hager WW, Pardalos PM (Eds) *Optimal Control Theory, Algorithms and Applications*. Kluwer Princeton, EEUU. pp. 1-2
- Skogestad S (1991) Consistency of steady-state models using insight about extensive variables. *Ind. Eng. Chem. Res.* 30: 654-661.
- Skogestad S, Morari M (1987a) Control Configurations Selection for Distillation Columns. *AIChEJ.* 33: 1620-1635.
- Skogestad S, Morari M (1987b) Design of Resilient Processing Plants-IX. Effect of Model Uncertainty on Dynamic Resilience *Chem. Eng. Sci.* 42: 1765-1780.
- Skogestad S, Wolff E (1992) Controllability Measures for Disturbance Rejection. Preprints IFAC-workshop on interactions between design and control. Edited by Perkins S, Pergamom Press. London. 127-132.
- Walsh S, Perkins JD (1996) Operability and Control and Process Synthesis and Design. *Adv. Chem. Eng.* 23: 301-402.