



DESEMPEÑO DINÁMICO DE SECUENCIAS DE DESTILACIÓN REACTIVAS TÉRMICAMENTE ACOPLADAS EN DIFERENTES CONDICIONES DE OPERACIÓN

DYNAMIC BEHAVIOR OF THERMALLY COUPLED REACTIVE DISTILLATION SEQUENCES FOR DIFFERENT OPERATING CONDITIONS

R. Medina-Leaños¹, J.G. Segovia-Hernández^{2*} y M.G. Félix-Flores¹

¹ Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica de Ciencias Químicas. Programa de Ingeniería Química, Campus Universitario Siglo XXI, Edificio 6, Km 6 Carretera Zacatecas-Guadalajara s/n. Ejido La Escondida, Zacatecas, Zac., México 98160.

² Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Noria Alta s/n, Guanajuato, Gto., México 36050.

Recibido 28 de Julio 2010; Aceptado 2 de Febrero 2011

Resumen

Las secuencias de destilación reactivas térmicamente acopladas pueden proporcionar ahorros de energía significativos con respecto a la operación de secuencias de destilación reactivas convencionales. Las configuraciones de destilación térmicamente acopladas reactivas exhiben una estructura compleja, con corrientes de reciclo, que parece pueden afectar sus propiedades de control. Se ha sugerido como una potencial solución a este problema, llevar a cabo la operación de los arreglos reactivos complejos en condiciones de operación que no proporcionen el mínimo consumo de energía. La idea básica es que si uno cambia el punto de operación, las propiedades de control pueden cambiar también. En este trabajo se analiza el desempeño dinámico de dos secuencias de destilación reactivas térmicamente acopladas en diferentes condiciones de operación, incluyendo el del mínimo consumo de energía. El análisis de las propiedades de control se lleva a cabo mediante la aplicación de la técnica de la descomposición en valores singulares en todo el dominio de la frecuencia y analizando las respuestas dinámicas a lazo cerrado utilizando controladores PI. Los resultados muestran que las propiedades de control de las secuencias de destilación reactivas complejas pueden cambiar significativamente dependiendo del punto de operación seleccionado.

Palabras clave: ahorro de energía, acoplamiento térmico, destilación reactiva, propiedades de control.

Abstract

Thermally coupled reactive distillation sequences can provide significant energy savings with respect to the operation of sequences based on conventional reactive distillation columns. Thermally coupled reactive distillation configurations exhibit a complex structure, with recycle streams, that appear to affect their controllability properties. One potential solution to this problem has been suggested through the operation of complex reactive arrangements under conditions that do not provide minimum energy consumption. The basic idea is that if one changes the operation point, the control properties might change as well. In this work, we analyze the dynamic behavior of two thermally coupled reactive distillation sequences under different operating points, including the one with minimum energy consumption. The control analysis properties are analyzed with the application of the singular value decomposition technique in all frequency domain and closed-loop dynamic responses using standard PI controllers. The results show that the controllability properties of complex reactive distillation sequences may change significantly depending on the selected operation point.

Keywords: energy savings, thermal coupling, reactive distillation, control properties.

* Autor para la correspondencia. E-mail: gsegovia@quijote.ugto.mx
Tel: (52) 473 73 20006 ext 8142.

1 Introducción

La destilación es una operación unitaria ampliamente utilizada para separar mezclas de líquidos, cuyo funcionamiento se basa en el equilibrio líquido-vapor; esto considerando que en la fase gaseosa existe una alta concentración de componentes ligeros y en la fase líquida una alta concentración de componentes pesados. Su objetivo es la separación de una mezcla para obtener alguno de los compuestos de la mezcla con un grado de pureza determinado. A mediados del siglo pasado debido a las grandes cantidades de energía que consumían las industrias lo cual se veía ilustrado en los altos costos energéticos, comenzaron a proponerse sistemas de secuencias de destilación no convencionales con acoplamientos térmicos, entendiendo por acoplamiento a todos aquellos sistemas que presentan múltiples alimentaciones o salidas laterales, y/o intercambiadores de calor intermedios. Sin embargo, el estudio de estos arreglos comenzó hace apenas tres décadas, durante las cuales se ha realizado la mayoría de las investigaciones existentes sobre estos novedosos sistemas. La gran mayoría de estos estudios está referida principalmente a dos secuencias: Secuencia Térmicamente Acoplada Directa (STAD) y Secuencia Térmicamente Acoplada Indirecta (STAI) (Fig. 1). El ahorro energético en las secuencias de destilación con acoplamiento térmico ha sido explicado en términos del remezclado. Si se considera la secuencia de destilación convencional directa mostrada en términos del perfil de concentración del componente intermedio (B) en la primera columna de la secuencia directa, la concentración de (B) empieza a aumentar hasta un valor máximo en algún plato intermedio y después disminuye hasta alcanzar el fondo de la columna, mostrado en la Fig. 2, esto se conoce como remezclado y está asociado con la ineficiencia energética de la secuencia de destilación convencional directa, ya que para alcanzar nuevamente esta separación se deberá de adicionar más energía (Triantafyllou y Smith, 1992). Para el caso de las secuencias de destilación con acoplamiento térmico a columnas laterales, la corriente lateral que se extrae de la primera columna y se alimenta a la segunda, se extrae de la máxima concentración en el perfil del componente (B), con lo cual se elimina el efecto del remezclado sobre el consumo de energía (Banda-

Belmonte y Hernández-Castro, 2004). En las secuencias de destilación convencionales la carga térmica que debe retirarse del condensador es elevada, y la carga térmica que debe suministrarse al rehervidor es bastante grande; es por esto que en décadas recientes se han buscado maneras de hacer acoplamientos térmicos en secuencias de destilación, con el objetivo reducir las cargas térmicas. A pesar de que se ha predicho un ahorro de energía del orden del 30% en las secuencias de destilación con acoplamiento térmico en comparación con las secuencias de destilación convencionales, no ha sido sino hasta en los últimos años que se han comenzado a utilizar con mayor frecuencia en la industria (Kaibel, 2002). Hernández y Jiménez (1999), Jiménez y col. (2001), Segovia-Hernández y col., (2002), entre otros, han explorado las propiedades de control de las secuencias de destilación con acoplamiento térmico, llegándose a la conclusión de que las secuencias de destilación térmicamente integradas en verdad no eran más difíciles de controlar que los esquemas convencionales, más aún las propiedades dinámicas de las secuencias integradas podían ser mejores que las de los esquemas convencionales. En referencia con el control de los esquemas integrados de destilación se continúa en dos direcciones: estudiar las propiedades dinámicas de las secuencias acopladas (Segovia-Hernández y col., 2004; Segovia-Hernández y col., 2005a; Hernández y col., 2005) y mejorar las respuestas dinámicas bajo la acción de diferentes controladores (Segovia-Hernández y col., 2005b). Segovia-Hernández y col. (2007) han demostrado que las columnas acopladas con equipos laterales pueden presentar un mejor desempeño dinámico si se operan en regiones diferentes a los flujos de interconexión óptimos.

En las industrias de procesos químicos, las reacciones químicas y la separación de los productos deseados se efectúan en forma secuencial, en la mayoría de los casos esto implica un alto costo para las industrias debido a las grandes cantidades de energía que son desperdiciadas, este problema puede ser mejorado de manera importante utilizando el proceso de destilación reactiva. La destilación reactiva es la ejecución simultánea de reacción y separación en un mismo equipo, el cual cuenta con zonas reactivas y no reactivas. Las principales ventajas de la implementación simultánea de reacción química y destilación

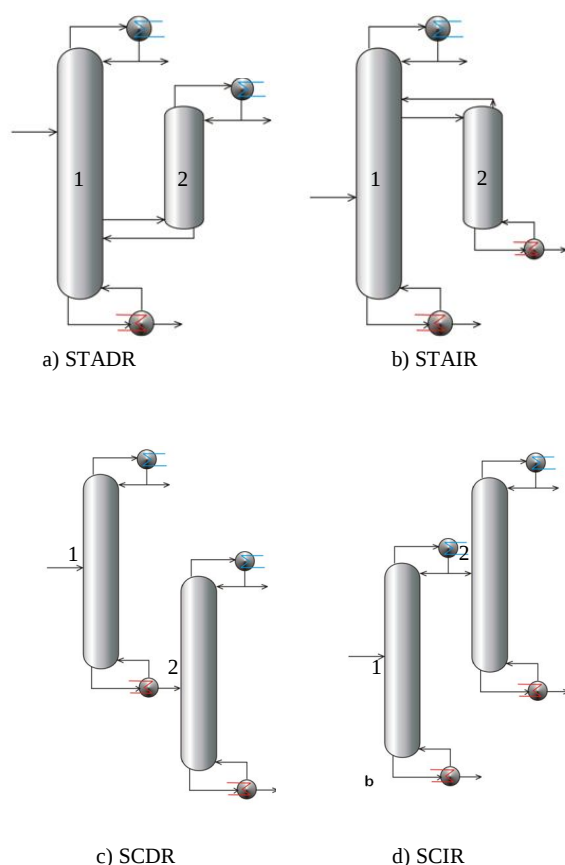


Fig. 1: Secuencias de Destilación Térmicamente Acopladas y Convencional Reactivas: a) Acoplada Directa; b) Acoplada Indirecta; c) Convencional Directa; d) Convencional Indirecta.

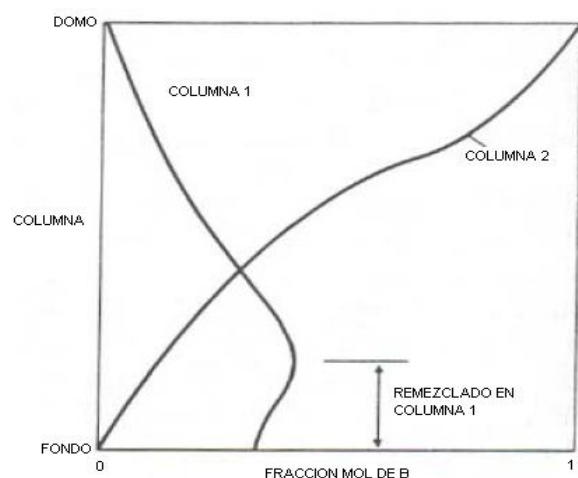


Fig. 2: Perfil de composiciones para una secuencia de destilación directa.

en una columna en contracorriente frente a la implementación secuencial convencional de estos dos procesos se pueden resumir como:

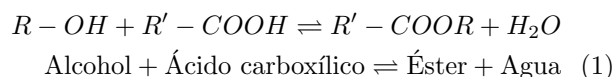
1. Uso de una reacción exotérmica para el proceso de destilación.
2. Obtención de más altos rendimientos para reacciones reversibles.
3. Simplificación del reactor para la separación de los efluentes del proceso.
4. Habilidad para sobrepasar los límites de la destilación.

La destilación reactiva se usa para reacciones en fase líquida y reversible. La integración de las reacciones químicas con la separación física en una sola unidad conduce normalmente a una reducción considerable en la inversión y en los costos de operación. El beneficio económico puede ser causado por la reducción de la materia prima utilizada, disminución de las corrientes de reciclo, y la integración de energía. En los últimos años, la destilación reactiva ha sido ampliamente investigada y empleada para reacciones de esterificación, hidrogenación, hidrodesulfuración y polimerización.

En el campo de la esterificación, la destilación reactiva tiene muchas aplicaciones industriales; por ejemplo, el conocido proceso Eastman Chemical Company para la síntesis de acetato de metilo (Steinigeweg y Gmehling, 2003). Este proceso combina secciones reactivas con secciones no reactivas en una sola columna híbrida, sustituyendo a un sistema complejo de 11 unidades del proceso convencional. Si bien es cierto que los primeros estudios acerca de la destilación reactiva se remontan a varias décadas anteriores, fue el exitoso y notorio caso de su aplicación industrial para producir acetato de metilo que dio la pauta para que el interés industrial y académico hacia este tipo de destilación este en constante crecimiento. Algunos otros ejemplos exitosos de la aplicación de la destilación reactiva son la producción de algunos éteres como el Metil Terbutil Eter (MTBE), el Etil Terbutil Eter (ETBE) entre otros, los cuales se producían en grandes cantidades ya que eran usados como aditivos en las gasolinas.

Steinigeweg y Gmehling (2003) analizaron la reacción de esterificación, haciendo reaccionar alcohol metílico y ácido láurico para producir biodiesel (laurato de metilo) y como subproducto

agua. La reacción de esterificación se presenta en la Ec. (1):



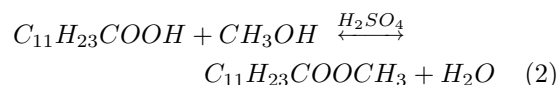
La esterificación es una reacción de sustitución nucleófila en la que el agente nucleofílico es el alcohol; de manera que la molécula de agua se origina por la unión del grupo hidróxido (-OH) del alcohol y el hidrógeno (H) del ácido. La extensión de la esterificación es mayor para un alcohol primario que para un alcohol secundario, y para éste mayor que un alcohol terciario. Como se trata de una reacción reversible, la concentración de éster se puede aumentar incrementando las concentraciones de ácido.

En el presente trabajo se realiza un estudio de las propiedades de control de columnas de destilación reactiva con acoplamiento térmico para la producción de laurato de metilo (el cual tiene propiedades adecuadas para ser usado como biodiesel), a partir de secuencias previamente optimizadas mediante la técnica de Algoritmos Genéticos (Miranda-Galindo y col., 2011), variando los flujos de interconexión correspondiente a cada configuración, para determinar las propiedades de control a lazo abierto y lazo cerrado en condiciones de operación diferentes a las óptimas (mínimo consumo de energía).

2 Diseño y optimización de las columnas térmicamente acopladas reactivas

La producción de biodiesel se lleva a cabo en las secuencias de destilación reactivas con acoplamiento térmico con equipo lateral: STADR (Fig. 1a) y STAIR (Fig. 1b) mediante la reacción de esterificación entre el ácido láurico y el metanol, catalizada por ácido sulfúrico. El metanol se agrega en exceso para favorecer la reacción y ésta tiene como productos el agua y el biodiesel (laurato de metilo o dodecanoato de metilo). En el diseño y la optimización de los sistemas de destilación reactiva con acoplamiento térmico, la reacción de esterificación alcanzan su máxima conversión lográndose una pureza de fondos de al menos del 0.999 en fracción masa, para el biodiesel al menor consumo energético posible. La

Ec. (2) representa la reacción de esterificación y ésta puede ser favorecida si los productos son removidos conforma procede la reacción. Un problema adicional puede presentarse en este sistema reactivo, ya que se forman azeótropos homogéneos y heterogéneos (Kiss, 2010). Estos factores claves deben ser considerados, por lo que debe elegirse un modelo termodinámico apropiado para calcular el equilibrio líquido-vapor de los reactivos y los productos de la reacción de esterificación en las columnas reactivas con acoplamiento térmico. Para esta clase de sistemas, los modelos termodinámicos como NRTL, UNIFAC y UNIQUAC pueden ser usados para calcular dicho equilibrio. Para este caso de estudio en particular se utilizó el modelo NRTL.



Las tablas 1 y 2 muestran las condiciones de entrada de los reactivos a la columna térmicamente acoplada y los datos cinéticos de la reacción de esterificación (Steinigeweg y Gmehling, 2003), respectivamente.

Los casos de estudio analizados en este trabajo fueron tomados de Miranda-Galindo y col. (2011). En este trabajo se optimiza la STADR y la STAIR al valor mínimo de energía, utilizando la técnica de Algoritmos Genéticos Multiobjetivo. El programa de optimización se encuentra escrito en MatLab y se encuentra acoplado a Aspen One Aspen Plus de tal forma que las simulaciones son rigurosas. Los resultados de la optimización indican que la

Tabla 1. Condiciones de los reactivos a la entrada de la columna de destilación reactiva con acoplamiento térmico.

Reactivo	Flujo (lb-mol/h)	Presión (bar)	Condición térmica
Ácido láurico	100	1.5	Líquido saturado
Metanol	120	1.5	Vapor saturado

Tabla 2. Parámetros cinéticos de la reacción de esterificación.

Reacción	i	k_i^o (mol g ⁻¹ s ⁻¹)	$E_{A,i}$ (kJ mol ⁻¹)
Esterificación	1	3.1819×10^6	72.23
Hidrólisis	-1	3.5505×10^6	71.90

Tabla 3. Parámetros de Diseño de STADR y STAIR para el caso con mínimo consumo de energía.

Parámetros de diseño	STADR	STAIR
Número de etapas columna C1	16	22
Número de etapas columna C2	5	2
Etapas Reactivas Columna C1	15	19
Número Total de Etapas	21	24
Relación de Reflujo Columna C1	2.0568	19.4216
Relación de Reflujo Columna C2	18.2670	—
Etapas de Alimentación de Acido Láurico	3	10
Etapas de Alimentación de Metanol	15	21
Flujo de Alimentación de Acido Láurico (lbmol/hr)	100	100
Flujo de Alimentación de Metanol (lbmol/hr)	120	120
Carga Térmica (Btu/hr)	2,143,327.12	2,497,561.97
Agua recuperada (lbmol/hr)	99.9988	99.6056
Metanol recuperado (lbmol/hr)	18.267	18.6912
Biodiesel recuperado (lbmol/hr)	99.9976	99.9999
Etapas de flujo de interconexión FV1	12	15
Etapas de flujo de interconexión FL1	11	16
Flujo de líquido de interconexión FL1 (lbmol/hr)	86.2723	116.7707
Flujo de vapor de interconexión FV1 (lbmol/hr)	19.3794	19.2013
Presión de la Columna C1 (psi)	14.7	14.7
Presión de la Columna C2 (psi)	14.7	14.7
Diámetro de la columna C1 (ft)	2.7212	2.0869
Diámetro de la columna C2 (ft)	0.6716	0.6309
Fracción masa de Agua	0.9810	0.9870
Fracción masa de Metanol	0.9999	0.9883
Fracción masa de Biodiesel	0.999	0.9991
Eficiencia Termodinámica (%)	40.6	46.5
Emisiones CO ₂ (Ton/año)	1646.06	1867.88
Costo total anual (U\$/año)	691,528.49	782,240.01

STADR consume menos energía que la STAIR (aun así ambas secuencias consumen menos energía que su contraparte convencional). Por lo tanto, la STADR tiene un menor costo anual. Además, la STADR produce una menor cantidad de emisiones de CO₂ que la STAIR. Sin embargo, la STAIR tiene una eficiencia termodinámica mayor que la STADR. Los costos de operación, las emisiones de CO₂ y la eficiencia termodinámica se estiman tal y como se presenta en el trabajo de Bravo-Bravo y col. (2010). Por lo tanto para poder decidir cuál es la columna más apta para su implementación industrial un estudio de control debe de ser efectuado a ambos sistemas. La Tabla 3 muestra los parámetros de diseño de las STADR y la STAIR que obtuvo Miranda-Galindo y col. (2011) para los diseños con mínimo consumo de energía. En el algoritmo de optimización utilizado, en cada una de las etapas sin reacción de las columnas reactivas con

acoplamiento térmico se resuelven las ecuaciones MESH que son ecuaciones algebraicas no lineales. (M, balances de materia para cada componente; E, relaciones de equilibrio entre fases para cada componente; S, sumatorias de las fracciones molares y H, balances de energía). Las relaciones de equilibrio y el balance de energía son las que proporcionan la no linealidad a las ecuaciones MESH. En las etapas reactivas se resuelven las ecuaciones MESH que incluyen el término de reacción.

3 Descomposición en Valores Singulares (SVD)

La SVD presenta las bases para llevar a cabo una comparación de las propiedades teóricas de control entre dos o más sistemas. Considérese una matriz cualquiera G de $n \times m$. La descomposición en

valores singulares descompone la matriz en tres matrices de componentes, de la siguiente manera:

$$G = V\Sigma W^H \quad (3)$$

Donde V es una matriz ortonormal de $n \times n$ cuyas columnas se conocen como vectores singulares izquierdos, W es una matriz ortonormal de $m \times m$ cuyas columnas son conocidas como vectores singulares derechos, H indica que es una matriz Hermitiana y Σ es una matriz de $n \times m$ cuyos elementos son escalares y son llamados valores singulares, los cuales se encuentran organizados en orden descendente. En seguida se describen los parámetros obtenidos a partir del SVD; los cuales auxiliarán para analizar la controlabilidad que presentan las secuencias de destilación convencionales y con acoplamiento térmico. La magnitud del valor singular mínimo, σ^* , indica las dificultades potenciales que el sistema presentaría al implementar un esquema de control retroalimentado. Por otro lado, se define el número de condición (γ^*) como el cociente entre el valor singular máximo y el valor singular mínimo. El número de condición cuantifica la sensibilidad del sistema a inexactitudes en los parámetros del proceso y a errores de modelado. Por tanto, se deben identificar los sistemas con altos valores de σ^* y bajos números de condición, ya que se espera que dichos sistemas presenten el mejor comportamiento dinámico bajo un control retroalimentado (Klema y Laub, 1980; Papastathopoulou y Luyben, 1991; Gabor y Mizsey, 2008).

4 Simulación dinámica a lazo cerrado

Una vez obtenidos los diseños óptimos con mínimo consumo de energía en los sistemas reactivos, se llevó a cabo un análisis dinámico utilizando Aspen Dynamics. Las composiciones de los productos se toman como las variables de control y como variables manipulables se usaron los reflujo y las cargas térmicas suministradas a los ebullidores. En cada lazo de control se utilizaron controladores PI, los cuales se sintonizaron de acuerdo a una minimización del IAE (integral del error absoluto) para determinar los valores de las ganancias de los controladores (K_c) y las constantes de tiempo integral (τ_i). La Fig. 3 muestra un diagrama de

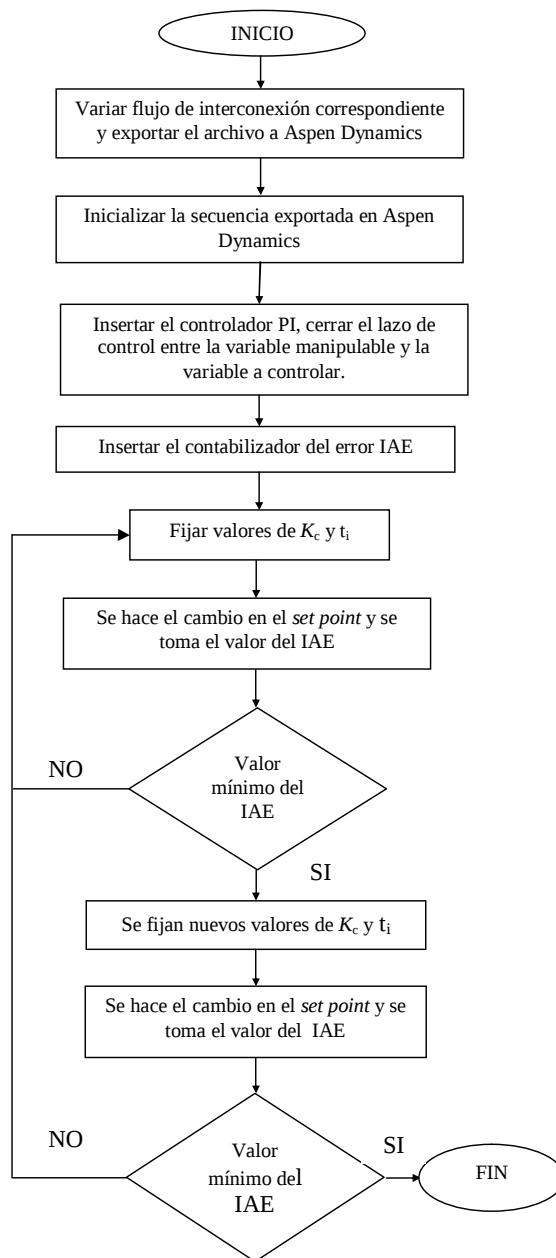


Fig. 3: Diagrama de flujo para estudio de control a lazo cerrado.

flujo del algoritmo utilizado para el estudio a lazo cerrado.

5 Análisis de resultados

En esta sección se mostraran los parámetros de sintonización óptimos para el caso de estudio con

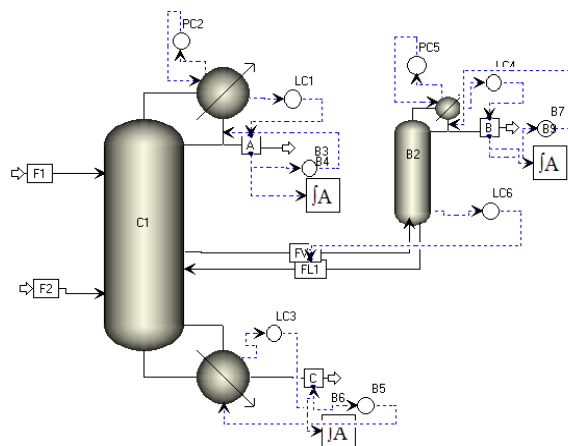


Fig. 4: Lazo de control para la STADR.

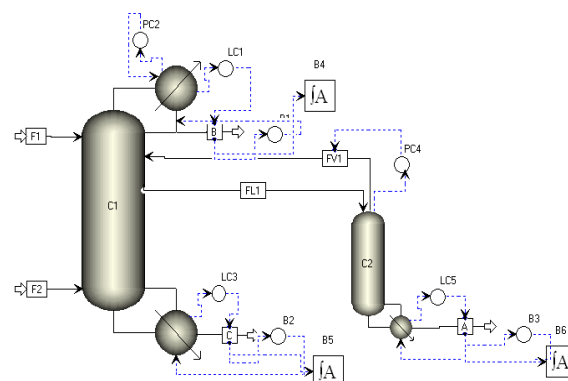


Fig. 5: Lazo de control a lazo cerrado para la STADR.

mínimo consumo de energía, y para la variación de los flujos de interconexión. Los cambios de *set point* realizados a cada variable manipulable, que son las purzas de las tres corrientes de salida, fueron del 0.05% de su valor nominal. Las figs. 4 y 5 muestran los lazos de control seleccionados para este trabajo.

5.1 Resultados STADR

En la Tabla 4 se muestran los valores de la ganancia del controlador, K_C , y de tiempo integral, τ_i , los cuales son los parámetros de sintonización del controlador PI que minimizaron el valor de IAE. Se observa que al operar la STADR en condiciones diferentes a las óptimas se pueden llegar a mejorar el desempeño dinámico de la secuencia cuando se compara con el diseño con el mínimo consumo de energía, esto debido a

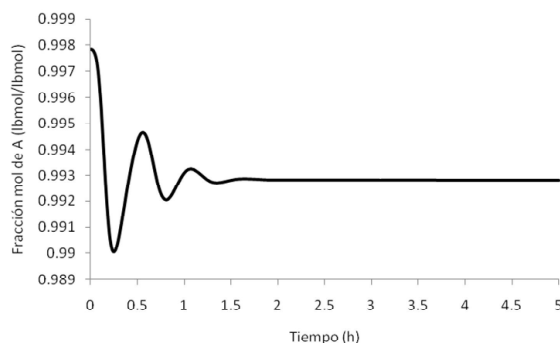


Fig. 6: Respuesta dinámica de la fracción mol de A para la STADR.

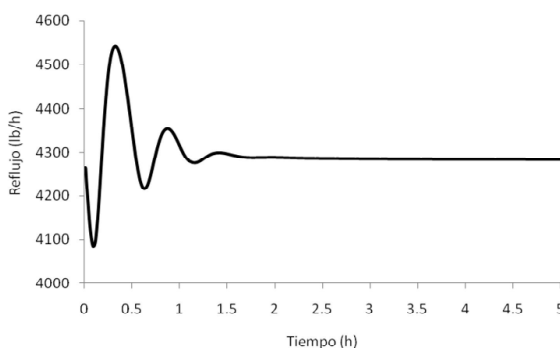


Fig. 7: Respuesta dinámica del reflujo en la Columna 1 para la STADR.

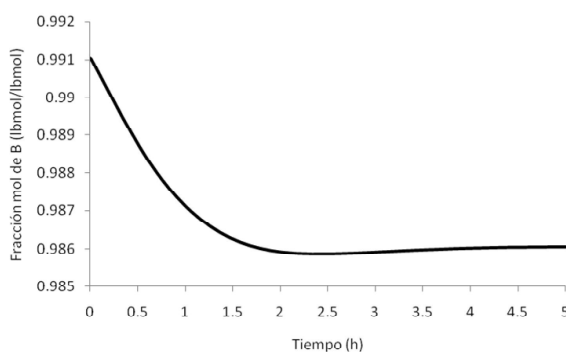


Fig. 8: Respuesta dinámica de la fracción mol de B para la STADR.

la disminución del IAE para los lazos de control; inclusive para el componente C el IAE es menor en algunas secuencias con respecto a la secuencia convencional. Por lo tanto, la STADR es conveniente operarla con flujos de interconexión diferentes a los óptimos ya que se mejoraría la dinámica al operar la columna a lazo cerrado. Una opción sería operar la columna a un flujo de vapor

Tabla 4. Valores de IAE para la STADR.

	Salida	K_C	τ_i (min)	IAE	Carga Térmica (Btu/h)
STADR	A	9	0.5	0.0011519	4078014.369
	Secuencia	B	500	0.00281177	
	Convencional	C	500	1.774×10^{-5}	
	FV = 19.3754	A	12	0.0010059	2143327.12
	lb-mol/hr	B	120	0.0019277	
	(Óptimo)	C	500	1.719×10^{-5}	
	A	12	9	0.0011060333	3043691.22
	FV = 19.39	B	130	0.00241039	
	lb-mol/hr	C	430	1.789285×10^{-5}	
	A	14	9	0.00110546	3035266.51
	FV = 19.38	B	120	0.003415349	
	lb-mol/hr	C	430	1.54562×10^{-5}	
	A	12	9	0.001103207	3026884.43
	FV = 19.37	B	130	0.002763723	
	lb-mol/hr	C	430	1.3026589×10^{-5}	
	A	12	9	0.00110166	3018547.79
	FV = 19.36	B	125	0.002783525	
	lb-mol/hr	C	500	1.792101×10^{-5}	
	A	12	9	0.00110005497	3010252.35
	FV = 19.35	B	125	0.0030853169	
	lb-mol/hr	C	425	1.307878×10^{-5}	
	A	12	9	0.00109850	3001995.90
	FV = 19.34	B	120	0.00332411	
	lb-mol/hr	C	440	1.2605×10^{-5}	

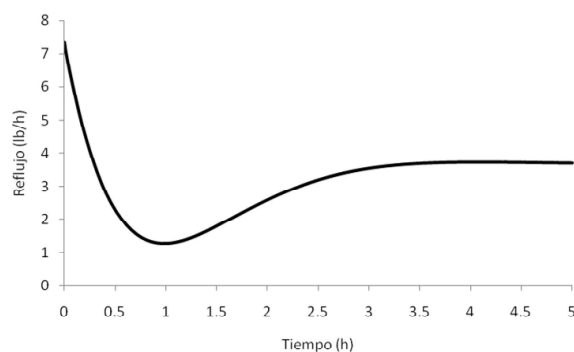


Fig. 9: Respuesta dinámica del reflujo de la Columna 2 para la STADR.

(FV) de 19.37 lb-mol/hr, que es donde se observan los menores valores de IAE cuando se comparan con el diseño óptimo. Sin embargo en este valor el consumo de energía se incrementa en un 40%, aun si la carga térmica sigue siendo menor a la del sistema reactivo convencional. Las figs. 6 a la 11 muestran las respuestas dinámicas a lazo cerrado para la STADR en condiciones diferentes a las óptimas (FV de 19.37 lb-mol/hr) tanto para

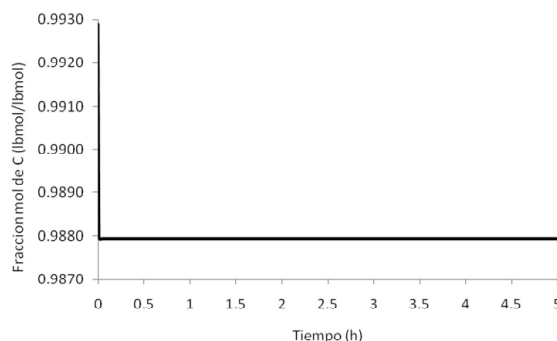


Fig. 10: Respuesta dinámica de la fracción mol de C para la STADR.

la variable manipulable como para las variables de control. Como se observa, las respuestas de los tres componentes metanol, agua y biodiesel (A,B,C, respectivamente) se estabilizan en tiempos cortos y con pocas desviaciones, lo cual es consistente con los bajos valores del IAE para cada uno de los lazos.

A continuación se presentarán y analizarán los resultados obtenidos a partir de la descomposición en valores singulares. Para determinar el valor singular mínimo así como el número de condición

Tabla 5. Funciones de Transferencia para la STADR y la STAIR en el flujo de interconexión óptimo.

	R_1	R_2	Q
x_A	$\frac{-2.0935}{1+0.215s} + \frac{0.7404}{1+0.54s}$	$\frac{0.0032}{2.125^2+2(2.125s)+1}$	$\frac{0.565}{0.5812^2+2(0.5812s)+1}$
x_B	$\frac{0.9308}{1+0.365s} - \frac{1.2504}{0.272^2+2(0.272s)+1}$	$\frac{0.004}{1.3^2s^2+2(1.3s)+1}$	$\frac{-0.6948}{1+0.054s}$
x_C	$\frac{0.208}{1+0.365s} - \frac{1.2504}{1.04s^2+2(1.04s)+1}$	$\frac{-0.1156}{1+0.95761s}$	$\frac{-0.6444}{1.0426^2s^2+2(1.0426s)+1}$
	R	Q_1	Q_2
x_A	$\frac{-0.292}{1+0.39s} + \frac{2.25}{1+2.25s}$	$\frac{0.0052}{1+2.42226s}$	$\frac{-0.0016}{1+0.8229s} + \frac{0.004}{13.69^2s^2+2(13.69s)+1}$
x_B	$\frac{0.1128}{1+0.37s} - \frac{-0.014}{9.77^2+2(9.77s)+1}$	$\frac{0.052}{1+0.37s}$	$\frac{-0.0008}{1+4.556s}$
x_C		$\frac{0.0048}{1+11.473s}$	$\frac{-0.0004}{1+4.5s}$

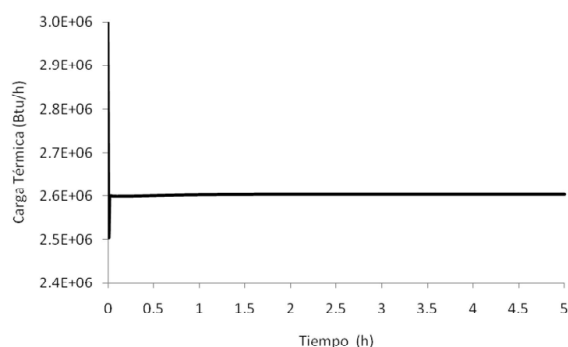


Fig. 11: Respuesta dinámica de la carga térmica de la Columna 1 para la STADR.

fue necesario obtener el modelo que rige a dicha columna; es decir su función de transferencia. A continuación se muestra en la Tabla 5 la función de transferencia para la secuencia compleja con el flujo de interconexión óptimo. Como se puede observar la función de transferencia presenta funciones de primer orden hasta funciones en competencia con distintos órdenes.

Las figs. 12 y 13 muestran una comparación del valor singular mínimo y del número de condición para el caso del diseño convencional reactivo y del sistema acoplado reactivo en el flujo de interconexión óptimo (mínimo consumo de energía) y en el flujo de interconexión de 19.37 lb-mol/hr. Como se observa en la Fig. 12, el valor singular mínimo para las tres secuencias tienen un comportamiento muy similar a bajas frecuencias por lo que no es fácil establecer cuál es la mejor opción. Sin embargo, cuando se analiza la Fig. 13, donde se muestra γ^* , claramente se ve que

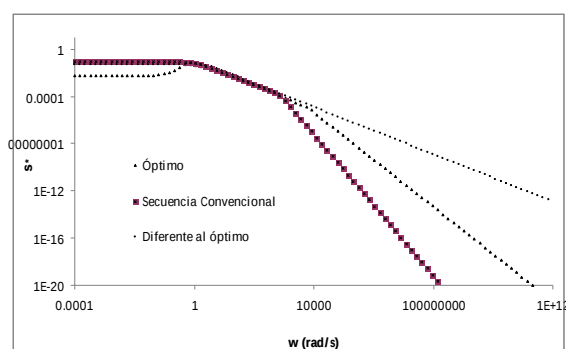


Fig. 12: Comparación del Valor Singular Mínimo para el caso de STADR.

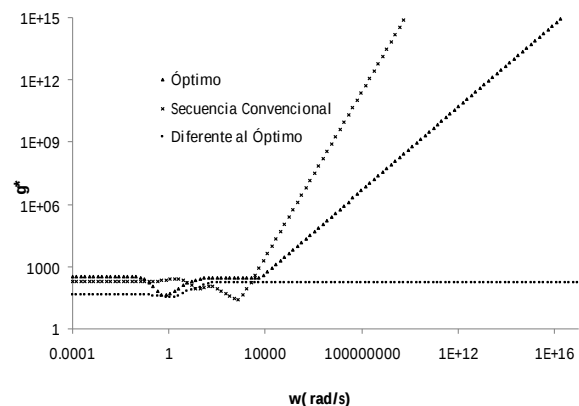


Fig. 13: Comparación del Número de Condición para el caso de STADR.

la secuencia que presenta el menor número de condición, en la mayor parte del dominio de la frecuencia, es la configuración con un flujo de interconexión fuera del óptimo. Por lo tanto se espera que dicha secuencia tenga un desempeño dinámico mejor que la secuencia acoplada reactiva

óptima y la secuencia reactiva convencional. Así pues los resultados obtenidos mediante el estudio a lazo abierto son consistentes con los obtenidos en el estudio con los controladores PI: la secuencia acoplada reactiva presenta un mejor desempeño dinámico fuera de los valores óptimos de consumo de energía. Este resultado se puede interpretar en el sentido de que operar en valores de flujo de interconexión no óptimos (con mayor consumo de energía en el reboiler) da un mayor margen de operación. Es bien conocido, en columnas térmicamente acopladas, la dependencia que existe entre el flujo de interconexión y la carga térmica (una función de tipo parabólica cóncava hacia abajo). En algunos casos se ha establecido que la forma de la función flujo de interconexión y carga térmica se puede utilizar como criterio introductorio para tener una idea previa de cómo puede ser el control del esquema a estudiar (Márquez-Muñoz y col., 2005; Segovia-Hernández y col., 2007). Una heurística puede ser establecida: conforme la forma de la función flujo de interconexión y carga térmica sea más aguda (región de mínimo consumo de energía), el esquema presentará peores propiedades de control debido a que el sistema tendrá un mínimo margen de operación. Mientras que si se encuentra en una zona donde la forma de la función flujo de interconexión y carga térmica es menos aguda (región donde no se presentan los mínimos consumos de energía) el margen de operación será más amplio y por lo tanto presentará mejores propiedades de control.

5.2 Resultados STAIR

La Tabla 6 muestra los valores de K_C y τ_i , que minimizaron al IAE, para cada uno de los lazos de control de las STAIR en diferentes valores del flujo de interconexión. Los resultados indican que al operar la STAIR en condiciones diferentes al flujo de interconexión óptimo se pueden lograr mejores propiedades dinámicas de la secuencia cuando se compara con la configuración con el mínimo consumo de energía, esto debido a que se logra la disminución del IAE para los lazos de control. Como se observa de la Tabla 6 para algunos componentes el valor de IAE es menor en algunas secuencias con respecto a la secuencia convencional. Estos resultados indican que la STAIR es mejor operarla con flujos de interconexión diferentes a los óptimos ya que se

mejoraría la controlabilidad de la columna a lazo cerrado. Un flujo de líquido (FL) de 126 lb-mol/hr, que es donde se observan los menores valores de IAE cuando se comparan con el diseño óptimo, sería una alternativa de operación para la STAIR. En este valor de flujo de interconexión la carga térmica también se incrementa en un 40%. No obstante, el consumo de energía sigue siendo menor al del sistema reactivo convencional. De la Fig. 14 a la Fig. 19 se presentan las respuestas para la STAIR que se opera en el valor de FL=126 lb-mol/hr (flujo donde se obtuvieron los mejores valores de IAE). Las respuestas de cada uno de los tres componentes, de acuerdo a las gráficas obtenidas, se estabilizan en tiempos cortos, en algunos casos menos de una hora, y no presente severas desviaciones del valor de *set point* antes de lograr su estabilización. Estos resultados son consistentes con los valores del IAE obtenidos para cada uno de los lazos.

Para llevar a cabo el análisis de la descomposición en valores singulares, se generaron las matrices de función de transferencia para cada

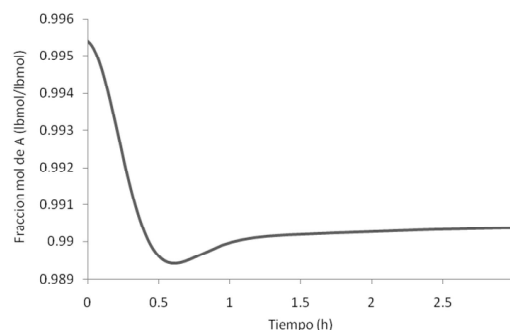


Fig. 14: Respuesta dinámica de la fracción mol de A para la STAIR.

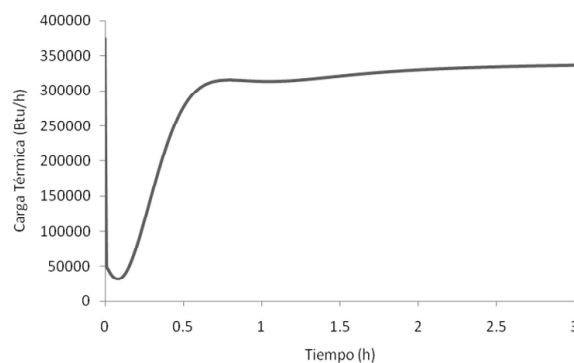


Fig. 15: Respuesta dinámica de la carga térmica en la Columna 2 para la STAIR.

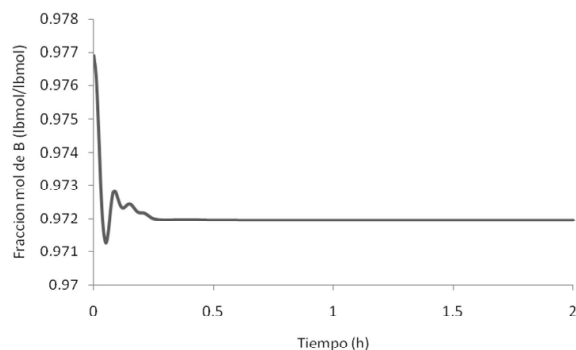


Fig. 16: Respuesta dinámica de la fracción mol de B para la STAIR.

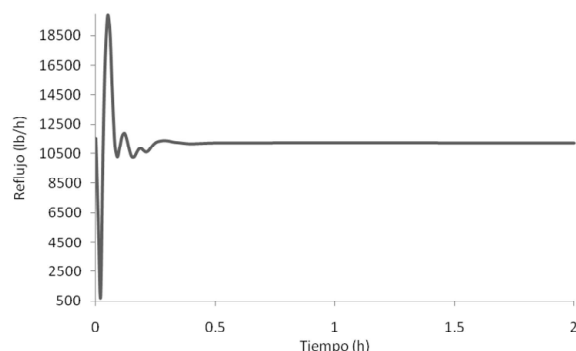


Fig. 17: Respuesta dinámica del reflujo en la Columna 1 para la STAIR.

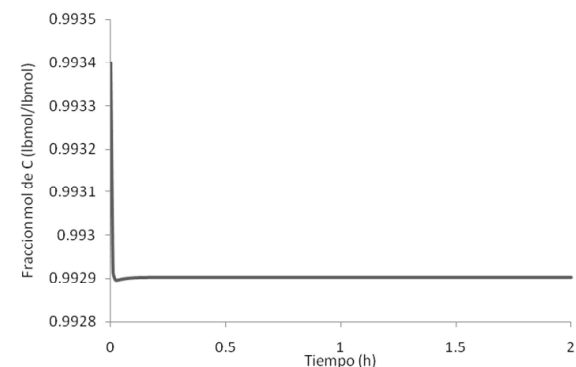


Fig. 18: Respuesta dinámica de la fracción mol de C para la STAIR.

uno de los casos de estudio analizados, en forma similar como fue para el caso de la STADR. Las figs. 20 y 21 muestra una comparación entre la Secuencia Convencional, la STAIR en condiciones óptimas y STAIR en condiciones diferentes a las óptimas, esto con el propósito de resaltar como las propiedades de control se mejoran en al operar en valores fuera del óptimo. Las respuestas muestran

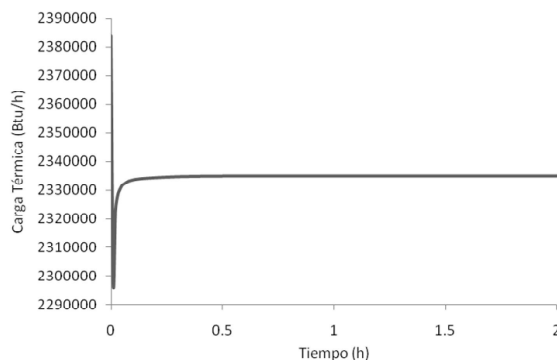


Fig. 19: Respuesta dinámica de la carga térmica en la Columna 2 para la STAIR.

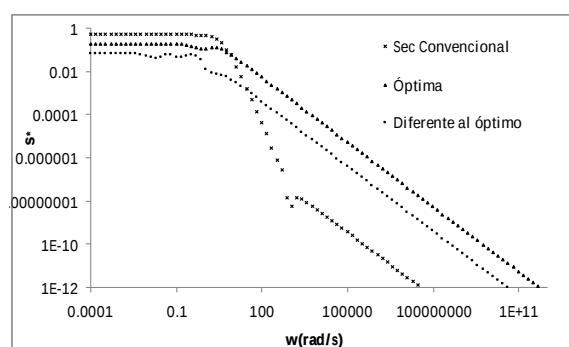


Fig. 20: Comparación del Valor Singular Mínimo para el caso de STAIR.

que la secuencia convencional indirecta es la que presenta el mejor comportamiento dinámico, para el caso del valor singular mínimo, mientras que la STAIR operando en condiciones diferentes a las óptimas ($FV=126$ lb-mol/hr) presenta el mejor desempeño dinámico para el caso del número de condición, los cual es consistente con los resultados obtenidos en el estudio a lazo cerrado. No obstante en lo general, los resultados indican que la mejor opción es operar la secuencia convencional indirecta reactiva.

Estos resultados parecen indicar dos tendencias importantes para el caso de estudio analizado: 1) cuando se desea operar el caso reactivo en secuencias de tipo directo, la mejor opción es trabajar una columna térmicamente acoplada reactiva en condiciones de operación fuera del óptimo; 2) cuando se desea operar el caso reactivo en secuencias de tipo indirecto, las tendencias parecen indicar la mejor opción es llevar a cabo la reacción en una secuencia de tipo convencional.

Tabla 6. Valores de IAE para la STAIR.

	Secuencia	Salida	K_C	τ (min)	IAE	Carga Térmica (Btu/h)
STAIR	Convencional	A	500	10	3.4585111×10^{-4}	4078019.409
		B	151	71	5.3720107×10^{-4}	
		C	450	0.5	$2.24527723 \times 10^{-5}$	
	Óptimo FV = 116.770762 lb-mol/hr	A	210	33	$3.36199794 \times 10^{-4}$	2084224.35
		B	500	0.5	$6.39506939 \times 10^{-5}$	
		C	500	0.5	2.0633682×10^{-5}	
	FV = 109 lb-mol/hr	A	140	25	0.003897819	2575905.1
		B	500	5	1.7734×10^{-4}	
		C	500	0.5	1.959237×10^{-5}	
	FV = 112 lb-mol/hr	A	155	20	0.002641267	2517136.89
		B	500	5	$1.88290810 \times 10^{-4}$	
		C	500	0.5	1.9334088×10^{-5}	
	FV = 115 lb-mol/hr	A	170	20	2.1121×10^{-3}	2459458.94
		B	500	5	1.81135×10^{-4}	
		C	500	0.5	1.99858×10^{-5}	
	FV = 116 lb-mol/hr	A	170	20	0.001983162	2440436.41
		B	500	5	1.8093×10^{-4}	
		C	500	0.5	1.9071×10^{-5}	
	FV = 119 lb-mol/hr	A	170	25	1.792214×10^{-4}	2383857.48
		B	500	0.5	2.02412×10^{-5}	
		C	500	0.5	2.00042×10^{-5}	
	FV = 121 lb-mol/hr	A	180	20	0.001574588	2346463.68
		B	500	5	1.9497618×10^{-4}	
		C	500	0.5	2.0370601×10^{-5}	
	FV = 124 lb-mol/hr	A	160	20	0.001534129	2290638.21
		B	500	5	2.1943221×10^{-4}	
		C	500	0.5	2.0547965×10^{-5}	
	FV = 126 lb-mol/hr	A	180	20	1.320483×10^{-4}	2252631.44
		B	500	5	2.2518757×10^{-5}	
		C	500	0.5	2.0581233×10^{-5}	

Estos resultados parecen indicar que la presencia de un agotador lateral, en el sistema térmicamente acoplado indirecto reactivo, no favorece las propiedades de control del sistema. Para este caso en particular, la presencia del flujo de vapor como variable manipulable, en el agotador lateral, presenta ciertas desventajas para fines de controlabilidad en comparación a la relación de reflujo como variable manipulable en el rectificador lateral de la STADR. Es decir, la topología del sistema influye importantemente en el desempeño dinámico del equipo. Es importante resaltar que estos resultados son función de la composición en la alimentación, como se ha observado para otros estudios sobre el desempeño dinámico de columnas térmicamente acopladas (Segovia-Hernández y col., 2004).

Comparando los resultados obtenidos entre

la STADR en condiciones de operación fuera del óptimo y la secuencia convencional indirecta reactiva, la mejor alternativa es la STADR, pues es quien presenta las mejores propiedades de control. Este resultado es importante ya que permite establecer que para la producción de laurato de metilo (compuesto con posibles usos como biodiesel) es factible encontrar un diseño donde pueda existir un compromiso entre ahorro de energía y buen desempeño dinámico, que de acuerdo a los resultados obtenidos es la STADR operada en valores de FV fuera del óptimo.

Conclusiones

En el presente estudio se llevó a cabo un estudio a lazo abierto, mediante la descomposición en valores singulares, y un estudio a lazo cerrado,

mediantes simulaciones dinámicas rigurosas, para analizar las propiedades de control de la STADR y de la STAIR en diferentes condiciones de operación, para la producción de laurato de metilo. Mediante un procedimiento de optimización, utilizando algoritmos genéticos, se encontró el diseño que minimiza el consumo de energía. En condiciones de operación fuera del valor óptimo del flujo de interconexión, las columnas reactivas acopladas presentaron mejores propiedades de control que en el valor óptimo (mínimo consumo de energía). En el caso de flujos de interconexión no óptimos, el consumo de energía es mayor que en la configuración en condiciones óptimas. No obstante, el consumo de energía en condiciones no óptimas sigue siendo inferior que el consumo de energía en los sistemas convencionales reactivos. Los resultados obtenidos mediante la descomposición en valores singulares son similares a los obtenidos cuando se llevaron a cabo simulaciones dinámicas rigurosas. Los resultados parecen indicar dos tendencias: cuando se desea en secuencias de tipo directo, la mejor opción es trabajar una columna térmicamente acoplada reactiva en condiciones de no óptimas; cuando se desea operar el caso reactivo en secuencias de tipo indirecto, la mejor opción es llevar a cabo la reacción en una secuencia de tipo convencional. Comparando los resultados obtenidos entre la STADR en condiciones no óptimas y la secuencia convencional indirecta reactiva, la mejor alternativa es la STADR, pues es quien presenta el mejor desempeño dinámico. Este resultado es importante ya que permite establecer que para la producción de laurato de metilo es factible encontrar un diseño donde pueda existir un compromiso entre ahorro de energía y buenas propiedades de control.

Agradecimientos

Los autores muestran un agradecimiento a la Universidad de Guanajuato, Universidad Autónoma de Zacatecas y CONACyT por el apoyo brindado para la realización de este trabajo.

Referencias

Banda-Belmonte L.D., Hernández-Castro S. (2004). Diseño y control de secuencias de

destilación térmicamente acopladas. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 3, 13-21.

Bravo-Bravo, C., Segovia - Hernández, J.G., Gutiérrez - Antonio, C., Duran, A.L., Bonilla-Petriciolet, A., Briones - Ramírez, A. (2010). Extractive dividing wall column: Design and optimization. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 49, 3672-3688.

Gabor, M., Mizsey, P. (2008). A methodology to determine controllability indices in the frequency domain. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 47, 4807- 4816.

Hernández, S., Jiménez, A. (1999). Design of energy-efficient Petlyuk systems. *Computers & Chemical Engineering* 23, 1005- 1010.

Hernández, S., Gudiño - Mares I.R., Cárdenas, J.C., Segovia - Hernández, J.G., Rico - Ramírez, V. (2005). A short note on control structures for thermally coupled distillation sequences for four-component mixtures. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 44, 5857-5863.

Jiménez, A., Hernández, S., Montoy, F. A., Zavala-García, M. (2001). Analysis of control properties of conventional and nonconventional distillation sequences. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 40, 3757.

Kaibel, G., Schoenmakers, H. (2002). Process synthesis and design in industrial practice. *Proceedings of ESCAPE-12 (Computer Aided Process Engineering, 10)*, Eds. J. Grievink and J.V. Schijndel, Elsevier, Amsterdam, 9.

Klema, V.C., Laub, A.J. (1980). The singular value decomposition: Its computation and some applications. *IEEE Transactions on Automatic Control* 25, 164-176.

Kiss, A.A. (2010). Heat-integrated process for biodiesel by reactive absorption. *Computer Aided Chemical Engineering* 28, 1111-1116.

Márquez - Muñoz, J.A., Segovia - Hernández, J.G., Hernández, S. (2005). Propiedades de control de esquemas de destilación

- alternativos a las secuencias térmicamente acopladas con columnas laterales para la separación de mezclas ternarias. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 4, 231-240.
- Miranda - Galindo, E.Y., Segovia - Hernández, J.G., Hernández, S., Gutiérrez - Antonio, C., Briones - Ramírez, A. (2011). Reactive thermally coupled distillation sequences: Pareto front. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 50, 926-938.
- Papastathopoulou, H. S., Luyben, W.L. (1991). Control of binary sidestream distillation column. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 30, 705-713.
- Segovia-Hernández, J.G.; Hernández, S., Jiménez, A. (2002). Control behavior of thermally coupled distillation sequences. *Chemical Engineering Research and Design* 80, 783-789.
- Segovia-Hernández, J.G., Hernández, S., Rico-Ramírez V., Jiménez, A. (2004). A comparison of the feedback control behavior between thermally coupled and conventional distillation schemes. *Computers & Chemical Engineering* 28, 811-819.
- Segovia - Hernández, J.G., Hernández, S., Jiménez, A. (2005a). Analysis of dynamic properties of alternative sequences to the Petlyuk column. *Computers & Chemical Engineering* 29, 1389-1399.
- Segovia - Hernández, J.G., Hernández, S., Jiménez, A., Femat, R. (2005b). Dynamic behavior and control of the Petlyuk scheme via a proportional-integral controller with disturbance estimation. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* 19, 243-253.
- Segovia-Hernández J.G., Hernández-Vargas E.A., Márquez-Muñoz J.A. (2007). Control properties of thermally coupled distillation sequences for different operating conditions. *Computers & Chemical Engineering* 31, 867-874.
- Steinigeweg S., Gmehling J. (2003). Esterification of a fatty acid by reactive distillation. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 42, 3612-3619.
- Triantafyllou, C., Smith, R. (1992). The design and optimization of fully thermally coupled distillation columns. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 70, 118-132.