



**Benemérita Universidad Autónoma de Puebla**  
**Vicerrectoría de Investigación y Estudios de Posgrado**  
**Facultad de Ingeniería Química**  
**Secretaría de Investigación y Estudios de Posgrado**



---

## **Maestría en Ingeniería Química**

### **TESIS DE GRADO**

**Título de Tesis:**  
**“SIMULACIÓN DINÁMICA Y CONTROL DE COLUMNAS DE DESTILACIÓN REACTIVA”**

**Presenta:**  
**I.Q. EDGAR HERNÁNDEZ HERNÁNDEZ.**

**Tesis presentada para obtener el título de:**

**MAESTRO EN INGENIERÍA QUÍMICA**

**Asesor de tesis:**  
**M.C. JORGE ORTEGA PÉREZ**

**Coasesor de tesis:**  
**M.C. CESAR LUNAR ORTEGA**

**Fecha de la tesis:**  
**Diciembre 2016**

## Tabla de contenido

ÍNDICE DE FIGURAS .....	5
ÍNDICE DE TABLAS .....	13
RESUMEN .....	15
PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA .....	17
JUSTIFICACIÓN .....	19
OBJETIVOS .....	20
Objetivo general:.....	20
Objetivos específicos:.....	20
HIPÓTESIS .....	21
INTRODUCCIÓN .....	22
CAPÍTULO 1 .....	23
ANTECEDENTES .....	23
1.1.- Sistemas de reacción/separación y destilación reactiva .....	23
1.2.- Sistemas de reacción/separación para la obtención de MTBE, TAME y EG .....	30
1.2.1.- Metil Tert Butil Éter (MTBE).....	30
1.2.2.- Tert Amil Metil Éter (TAME).....	31
1.2.3.- Etilenglicol (EG) .....	32
1.3.- Sistemas de destilación reactiva para la obtención de MTBE, TAME y EG .....	33
1.3.1.- Metil Tert Butil Éter (MTBE).....	33
1.3.2. - Tert Amil Metil Éter (TAME).....	34
1.3.3.- Etilenglicol (EG) .....	35
1.4.- Cinética de reacción, Química de reacción y Equilibrio Líquido-vapor para la producción de MTBE, TAME y EG.....	36
1.4.1.- Modelo cinético por Ley de Potencias en la síntesis de MTBE .....	37
1.4.2. - Modelo cinético por Ley de Potencias en la síntesis de TAME. ....	40

1.4.3. - Modelo cinético por Ley de Potencias en la síntesis de EG. ....	52
1.5.- Análisis de costos en Aspen (Process Economic Analyzer). ....	56
1.5.1.- Especificaciones para el Análisis Económico. ....	57
1.6.- Análisis combinatorio para control de procesos.....	58
1.7.- Técnicas de sintonización de controladores PID.....	62
1.7.1.- Sintonización de parámetros en Aspen Dynamics.....	71
1.7.2.- Técnica de sintonización “Ziegler-Nichols” o de las Oscilaciones sostenidas.....	72
1.7.3.- Técnica de sintonización de “Tyreus-Luyben” .....	73
1.8.- Marco Teórico .....	74
CAPÍTULO 2 .....	77
METODOLOGÍA.....	77
2.1.- Procesos de obtención de MTBE .....	78
2.1.1.- Proceso convencional con reacción y separación para MTBE. ....	78
2.1.2.- Destilación reactiva para MTBE .....	86
2.1.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio .....	93
2.2.- Procesos de obtención de TAME .....	100
2.2.1.- Proceso convencional de reacción y separación para TAME.....	101
2.2.2.- Destilación reactiva para TAME. ....	109
2.2.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio .....	118
2.3.- Procesos de obtención de EG. ....	124
2.3.1.- Proceso convencional de reacción y separación para EG.....	125
.3.2.- Destilación reactiva para EG .....	132
2.3.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio .....	138
CAPÍTULO 3 .....	144
RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	144
3.1. – Metil Tert Butil Éter (MTBE) .....	144

3.1.1.- Proceso convencional .....	144
3.1.2.- Destilación reactiva.....	153
3.1.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio .....	160
3.1.4.- Análisis de costos. ....	172
3.1.5.- Respuestas dinámicas .....	173
3.2. – Tert Amil Metil Éter (TAME) .....	204
3.2.1.- Proceso convencional .....	204
3.2.2.- Destilación reactiva.....	209
3.2.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio .....	216
3.2.4.- Análisis de costos .....	226
3.2.5.- Respuestas dinámicas .....	228
3.3. – Etilenglicol (EG) .....	256
3.3.1.- Proceso convencional .....	256
3.3.2.- Destilación reactiva.....	265
3.3.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio .....	271
3.3.4.- Análisis de costos .....	280
3.3.5.- Respuestas dinámicas .....	282
CONCLUSIONES .....	308
Referencias .....	311

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.- Curvas xy para distintas volatilidades. (Luyben, 2006) .....	26
Figura 2.- Columna de destilación reactiva ideal.....	26
Figura 3.- Esquema de un plato reactivo .....	27
Figura 4.- Proceso convencional de obtención de MTBE .....	30
Figura 5.- Proceso convencional de obtención de TAME .....	31
Figura 6.- Proceso convencional de obtención de Etilenglicol .....	32
Figura 7.- Esquema de columna de destilación reactiva para MTBE.....	33
Figura 8.- Esquema de columna de destilación reactiva para TAME.....	34
Figura 9.- Esquema de columna de destilación reactiva para Etilenglicol.....	35
Figura 10.- Análisis azeotrópico MeOH-N-Buteno (C4) .....	38
Figura 11.- Diagrama Txy azeótropo MeOH-N-Buteno (C4).....	39
Figura 12.- Análisis azeotrópico MeOH-MTBE.....	39
Figura 13.- Diagrama Txy azeótropo MeOH-MTBE .....	40
Figura 14.- Ventana "Ternary Maps" en Aspen Plus .....	42
Figura 15.- Diagrama Txy azeótropo iC5-MeOH .....	43
Figura 16.- Diagrama xy para iC5-MeOH .....	43
Figura 17.- Diagrama Txy azeótropo MeOH-TAME.....	44
Figura 18.- Diagrama ternario a 4 bar. ....	45
Figura 19.- "Conceptual design" en Aspen Plus.....	46
Figura 20.- Ruta en "Conceptual Design" pasos 1 y 2.....	47
Figura 21.- Ruta en "Conceptual Design" pasos 3 y 4.....	48
Figura 22.- Ruta en "Conceptual Design" paso 5 – Diagrama ternario .....	48
Figura 23.- Diagrama ternario - Diseño factible.....	49
Figura 24.- Diagrama ternario - Segundo diseño factible .....	50
Figura 25.- Diagrama ternario - Diseño factible con curvas residuales.....	51
Figura 26.- Diagrama de equilibrio Txy para Etilenglicol-Agua .....	54
Figura 27.- Diagrama de equilibrio xy para Etilenglicol-Agua .....	55
Figura 28.- Configuraciones alternativas de lazo de control .....	58
Figura 29.-Diagrama de un tanque de evaporación.....	59
Figura 30.- Tanque evaporador con lazos de control .....	62
Figura 31.- Esquema básico de un controlador PID a lazo cerrado. ....	64
Figura 32.- Aumento progresivo de la acción proporcional – Controlador P.....	65
Figura 33. Aumento progresivo de la acción derivativa – Controlador PD.....	67
Figura 34.- Aumento progresivo de la acción integral – Controlador PI.....	68

<i>Figura 35.- Curva de respuesta en forma de S.....</i>	<i>70</i>
<i>Figura 36.- Proceso convencional de obtención de MTBE .....</i>	<i>80</i>
<i>Figura 37.- Estructura de control - Destilación convencional -MTBE.....</i>	<i>83</i>
<i>Figura 38.- DFP - Proceso convencional de MTBE - Aspen IPE.....</i>	<i>85</i>
<i>Figura 39.- DFP - Destilación reactiva - MTBE .....</i>	<i>87</i>
<i>Figura 40.- Estructura de control destilación reactiva - MTBE .....</i>	<i>89</i>
<i>Figura 41.- DFP - Destilación reactiva de MTBE - Aspen IPE.....</i>	<i>92</i>
<i>Figura 42.- DFP - Destilación reactiva NEQ – MTBE. ....</i>	<i>94</i>
<i>Figura 43.- Estructura de control destilación reactiva NEQ - MTBE .....</i>	<i>96</i>
<i>Figura 44.- DFP - Destilación reactiva NEQ de MTBE - Aspen IPE.....</i>	<i>99</i>
<i>Figura 45.- Proceso convencional de obtención de TAME.....</i>	<i>102</i>
<i>Figura 46.- Estructura de control –Proceso convencional. ....</i>	<i>106</i>
<i>Figura 47.- DFP - Proceso convencional de TAME - Aspen IPE.....</i>	<i>109</i>
<i>Figura 48.- DFP - Destilación reactiva -TAME.....</i>	<i>111</i>
<i>Figura 49.- Estructura de control destilación reactiva - TAME .....</i>	<i>114</i>
<i>Figura 50.- DFP - Destilación reactiva de TAME - Aspen IPE.....</i>	<i>117</i>
<i>Figura 51.- DFP - Destilación reactiva NEQ - TAME .....</i>	<i>118</i>
<i>Figura 52.- Estructura de control destilación reactiva NEQ - MTBE .....</i>	<i>120</i>
<i>Figura 53.- DFP - Destilación reactiva NEQ de TAME - Aspen IPE.....</i>	<i>124</i>
<i>Figura 54.- Proceso convencional de obtención de Etilenglicol .....</i>	<i>126</i>
<i>Figura 55.- Estructura de control - Proceso convencional Etilenglicol.....</i>	<i>128</i>
<i>Figura 56.- DFP - Proceso convencional de Etilenglicol - Aspen IPE.....</i>	<i>131</i>
<i>Figura 57.- DFP - Destilación reactiva – Etilenglicol .....</i>	<i>132</i>
<i>Figura 58.- Estructura de control destilación reactiva - Etilenglicol .....</i>	<i>135</i>
<i>Figura 59.- DFP - Destilación reactiva para Etilenglicol - Aspen IPE .....</i>	<i>138</i>
<i>Figura 60.- DFP - Destilación reactiva NEQ - Etilenglicol.....</i>	<i>139</i>
<i>Figura 61.- Estructura de control destilación reactiva NEQ – Etilenglicol .....</i>	<i>141</i>
<i>Figura 62.- DFP - Destilación reactiva NEQ de Etilenglicol - Aspen IPE.....</i>	<i>143</i>
<i>Figura 63.- Perfil de temperatura en columna de destilación - MTBE convencional.....</i>	<i>145</i>
<i>Figura 64.- Perfiles de fracción molar en columna de destilación - MTBE convencional.....</i>	<i>146</i>
<i>Figura 65.- Relación de reflujo - Fracción molar de MTBE.....</i>	<i>148</i>
<i>Figura 66.- Velocidad de flujo molar en fondos - Fracción molar de MTBE.....</i>	<i>149</i>
<i>Figura 67.- Carga térmica en rehervidor - Fracción molar de MTBE .....</i>	<i>150</i>
<i>Figura 68.- Etapas de rectificación - Fracción molar MTBE .....</i>	<i>151</i>
<i>Figura 69.- Etapas de agotamiento - Fracción mol MTBE .....</i>	<i>152</i>

<i>Figura 70.- Perfil de temperatura en columna de destilación - MTBE destilación reactiva.....</i>	<i>153</i>
<i>Figura 71.- Perfil de composiciones en columna de destilación - MTBE destilación reactiva.....</i>	<i>154</i>
<i>Figura 72.- Relación de reflujo – Fracción molar de MTBE.....</i>	<i>155</i>
<i>Figura 73.- Velocidad de flujo molar en fondos - Fracción molar de MTBE.....</i>	<i>156</i>
<i>Figura 74.- Número de etapas reactivas - Fracción molar de MTBE.....</i>	<i>157</i>
<i>Figura 75.- Carga térmica en rehervidor - Fracción molar de MTBE.....</i>	<i>158</i>
<i>Figura 76.- Etapas de rectificación - Conversión de Isobuteno.....</i>	<i>159</i>
<i>Figura 77.- Etapas de agotamiento - Conversión de Isobuteno.....</i>	<i>160</i>
<i>Figura 78.- Perfil de temperatura en columna de destilación - MTBE destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>161</i>
<i>Figura 79.- Perfil de composiciones en la columna de destilación - MTBE destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>162</i>
<i>Figura 80.- Relación de reflujo - Fracción molar de MTBE.....</i>	<i>163</i>
<i>Figura 81.- Velocidad de flujo molar en fondos - Fracción molar de MTBE.....</i>	<i>164</i>
<i>Figura 82.- Número de etapas reactivas - Fracción molar de MTBE.....</i>	<i>165</i>
<i>Figura 83.- Carga térmica en rehervidor - Fracción molar de MTBE.....</i>	<i>166</i>
<i>Figura 84.- Etapas de rectificación - Conversión de Isobuteno.....</i>	<i>166</i>
<i>Figura 85.- Etapas de agotamiento - Conversión de Isobuteno.....</i>	<i>167</i>
<i>Figura 86.- Comparación de perfiles de temperatura - MTBE destilación reactiva EQ &amp; NEQ.....</i>	<i>168</i>
<i>Figura 87.- Comparación de perfiles de composición de MTBE - MTBE destilación reactiva EQ &amp; NEQ.....</i>	<i>169</i>
<i>Figura 88.- Comparación de perfiles de composición de N-Buteno - MTBE destilación reactiva EQ &amp; NEQ..</i>	<i>170</i>
<i>Figura 89.- Comparación de perfiles de composición de Metanol - MTBE destilación reactiva EQ &amp; NEQ....</i>	<i>171</i>
<i>Figura 90.- Comparación de perfiles de composición de Isobuteno - MTBE destilación reactiva EQ &amp; NEQ..</i>	<i>171</i>
<i>Figura 91.- Proyección a 15 años de vida útil de las plantas MTBE.....</i>	<i>173</i>
<i>Figura 92.- Fracción molar de MTBE con respecto al tiempo - MTBE convencional dinámico.....</i>	<i>175</i>
<i>Figura 93.- Perturbación ±20% en alimentación - MTBE convencional.....</i>	<i>176</i>
<i>Figura 94.- Respuesta ante la perturbación en la composición de MTBE - MTBE convencional.....</i>	<i>177</i>
<i>Figura 95.- Respuesta ante la perturbación en el destilado - MTBE convencional.....</i>	<i>178</i>
<i>Figura 96.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - MTBE convencional.....</i>	<i>179</i>
<i>Figura 97.- Respuesta ante perturbación en la Temperatura plato 12 - MTBE convencional.....</i>	<i>180</i>
<i>Figura 98.- Respuesta ante perturbación en Rehervidor - MTBE convencional.....</i>	<i>181</i>
<i>Figura 99.- Perturbación en ±5°K SetPoint en plato 12 columna destilación - MTBE convencional.....</i>	<i>183</i>
<i>Figura 100.- Fracción molar de MTBE ante perturbación servo - MTBE convencional.....</i>	<i>183</i>
<i>Figura 101.- Fracción molar de MTBE con respecto al tiempo - MTBE destilación reactiva dinámico.....</i>	<i>184</i>
<i>Figura 102.- Perturbación ±20% corriente C4 - MTBE destilación reactiva.....</i>	<i>185</i>
<i>Figura 103.- Respuesta ante perturbación en la corriente de destilado - MTBE destilación reactiva.....</i>	<i>186</i>
<i>Figura 104.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - MTBE destilación reactiva.....</i>	<i>187</i>

<i>Figura 105.- Respuesta ante la perturbación en la composición de MTBE - MTBE destilación reactiva .....</i>	<i>188</i>
<i>Figura 106.- Perturbación <math>\pm 20\%</math> en alimentación de MeOH - MTBE destilación reactiva.....</i>	<i>189</i>
<i>Figura 107.- Respuesta ante perturbación en la temperatura plato 13 - MTBE destilación reactiva .....</i>	<i>190</i>
<i>Figura 108.- Respuesta ante perturbación en rehervidor - MTBE destilación reactiva .....</i>	<i>190</i>
<i>Figura 109.- Respuesta ante perturbación composición de MeOH etapa 10 - MTBE destilación reactiva ....</i>	<i>191</i>
<i>Figura 110.- Perturbación en <math>\pm 5^\circ\text{K}</math> SetPoint en plato 13 columna destilación - MTBE destilación reactiva...</i>	<i>192</i>
<i>Figura 111.- Fracción molar de MTBE ante perturbación servo - MTBE destilación reactiva.....</i>	<i>192</i>
<i>Figura 112.- Fracción molar de MTBE con respecto al tiempo - MTBE destilación reactiva NEQ dinámico...</i>	<i>194</i>
<i>Figura 113.- Perturbación <math>\pm 20\%</math> corriente C4 - MTBE destilación reactiva NEQ .....</i>	<i>195</i>
<i>Figura 114.- Respuesta ante perturbación en la corriente de destilado - MTBE destilación reactiva NEQ....</i>	<i>196</i>
<i>Figura 115.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - MTBE destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>197</i>
<i>Figura 116.- Respuesta ante la perturbación en la composición de MTBE - MTBE destilación reactiva NEQ</i>	<i>198</i>
<i>Figura 117.- Perturbación <math>\pm 20\%</math> en alimentación de MeOH - MTBE destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>199</i>
<i>Figura 118.- Respuesta ante perturbación en la temperatura plato 22 - MTBE destilación reactiva NEQ ....</i>	<i>200</i>
<i>Figura 119.- Respuesta ante perturbación en rehervidor - MTBE destilación reactiva NEQ .....</i>	<i>201</i>
<i>Figura 120.- Respuesta ante perturbación, composición de MeOH etapa 10 - MTBE destilación reactiva NEQ .....</i>	<i>201</i>
<i>Figura 121.- Perturbación en <math>\pm 5^\circ\text{K}</math> SetPoint en plato 22 columna destilación - MTBE destilación reactiva NEQ. ....</i>	<i>202</i>
<i>Figura 122.- Fracción molar de MTBE ante perturbación servo - MTBE destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>203</i>
<i>Figura 123.- Perfil de temperatura en columna de destilación - TAME convencional.....</i>	<i>205</i>
<i>Figura 124.- Perfil de composiciones en columna de destilación - TAME convencional.....</i>	<i>205</i>
<i>Figura 125.- Relación de reflujo - Fracción molar de TAME.....</i>	<i>207</i>
<i>Figura 126.- Velocidad de flujo molar en destilado - Fracción molar de TAME.....</i>	<i>207</i>
<i>Figura 127.- Número de etapas en columna de destilación - Fracción molar TAME.....</i>	<i>208</i>
<i>Figura 128.- Posición de etapa de alimentación - Fracción molar TAME .....</i>	<i>209</i>
<i>Figura 129.- Perfil de temperatura en columna de destilación - TAME destilación reactiva.....</i>	<i>210</i>
<i>Figura 130.- Perfil de composiciones en columna de destilación - TAME destilación reactiva.....</i>	<i>211</i>
<i>Figura 131.- Relación de reflujo – Fracción molar de TAME.....</i>	<i>213</i>
<i>Figura 132.- Velocidad de flujo molar en fondos - Fracción molar de TAME.....</i>	<i>213</i>
<i>Figura 133.- Número de etapas reactivas - Fracción molar de TAME .....</i>	<i>214</i>
<i>Figura 134.- Etapas de rectificación - Fracción molar de TAME .....</i>	<i>215</i>
<i>Figura 135.- Etapas de agotamiento - Fracción molar de TAME.....</i>	<i>216</i>
<i>Figura 136.- Perfil de temperatura en columna de destilación - TAME destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>217</i>
<i>Figura 137.- Perfil de composiciones en la columna de destilación - TAME destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>217</i>

<i>Figura 138.- Relación de reflujo - Fracción molar de TAME.....</i>	<i>219</i>
<i>Figura 139.- Velocidad de flujo molar en fondos - Fracción molar de TAME.....</i>	<i>220</i>
<i>Figura 140.- Número de etapas reactivas - Fracción molar de TAME .....</i>	<i>220</i>
<i>Figura 141.- Etapas de rectificación - Fracción molar de TAME destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>221</i>
<i>Figura 142.- Etapas de agotamiento - Fracción molar de TAME destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>222</i>
<i>Figura 143.- Comparación de perfiles de temperatura - TAME destilación reactiva EQ &amp; NEQ.....</i>	<i>223</i>
<i>Figura 144.- Comparación de perfiles de composición de TAME - TAME destilación reactiva EQ &amp; NEQ.....</i>	<i>224</i>
<i>Figura 145.- Comparación de perfiles de composición de 2M1B - TAME destilación reactiva EQ &amp; NEQ.....</i>	<i>225</i>
<i>Figura 146.- Comparación de perfiles de composición de 2M2B - TAME destilación reactiva EQ &amp; NEQ.....</i>	<i>225</i>
<i>Figura 147.- Proyección a 15 años de vida útil de las plantas .....</i>	<i>227</i>
<i>Figura 148.- Fracción molar de TAME con respecto al tiempo - TAME convencional dinámico.....</i>	<i>229</i>
<i>Figura 149.- Perturbación <math>\pm 10\%</math> en alimentación - TAME convencional.....</i>	<i>230</i>
<i>Figura 150.- Respuesta ante la perturbación en el destilado - TAME convencional.....</i>	<i>231</i>
<i>Figura 151.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - TAME convencional.....</i>	<i>231</i>
<i>Figura 152.- Respuesta ante perturbación en la temperatura plato 14 - TAME convencional .....</i>	<i>232</i>
<i>Figura 153.- Respuesta ante perturbación en rehervidor - TAME convencional .....</i>	<i>233</i>
<i>Figura 154.- Respuesta ante la perturbación en la composición de TAME - TAME convencional.....</i>	<i>233</i>
<i>Figura 155.- Respuesta ante la perturbación en la temperatura del reactor 1- TAME convencional .....</i>	<i>234</i>
<i>Figura 156.- Respuesta ante la perturbación en la temperatura del reactor 2- TAME convencional .....</i>	<i>235</i>
<i>Figura 157.- Perturbación en <math>\pm 5^{\circ}\text{K}</math> SetPoint en plato 14 columna destilación – TAME convencional. ....</i>	<i>236</i>
<i>Figura 158.- Fracción molar de TAME ante perturbación servo –TAME convencional.....</i>	<i>236</i>
<i>Figura 159.- Fracción molar de TAME con respecto al tiempo - TAME destilación reactiva dinámico.....</i>	<i>237</i>
<i>Figura 160.- Perturbación <math>\pm 20\%</math> corriente FEED - TAME destilación reactiva .....</i>	<i>238</i>
<i>Figura 161.- Respuesta ante perturbación en la corriente de destilado - TAME destilación reactiva .....</i>	<i>239</i>
<i>Figura 162.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - TAME destilación reactiva.....</i>	<i>240</i>
<i>Figura 163.- Perturbación <math>\pm 20\%</math> en alimentación de MeOH - TAME destilación reactiva.....</i>	<i>240</i>
<i>Figura 164.- Respuesta ante perturbación en la presión del Pre-Reactor - TAME destilación reactiva.....</i>	<i>241</i>
<i>Figura 165.- Respuesta ante perturbación en la temperatura del Pre-Reactor - TAME destilación reactiva</i>	<i>242</i>
<i>Figura 166.- Respuesta ante perturbación en Condensador - TAME destilación reactiva.....</i>	<i>242</i>
<i>Figura 167.- Respuesta ante perturbación en rehervidor - TAME destilación reactiva .....</i>	<i>243</i>
<i>Figura 168.- Respuesta ante perturbación en la temperatura plato 31 - TAME destilación reactiva .....</i>	<i>244</i>
<i>Figura 169.- Respuesta ante perturbación en composición de TAME - TAME destilación reactiva .....</i>	<i>244</i>
<i>Figura 170.- Perturbación en <math>\pm 5^{\circ}\text{K}</math> SetPoint en plato 31 columna destilación – TAME destilación reactiva..</i>	<i>245</i>
<i>Figura 171.- Fracción molar de TAME ante perturbación servo –TAME destilación reactiva. ....</i>	<i>246</i>
<i>Figura 172.- Fracción molar de TAME con respecto al tiempo - TAME destilación reactiva NEQ dinámico... 247</i>	

Figura 173.- Perturbación $\pm 20\%$ corriente FEED - TAME destilación reactiva NEQ.....	248
Figura 174.- Respuesta ante perturbación en la corriente destilado - TAME destilación reactiva NEQ.....	248
Figura 175.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - TAME destilación reactiva NEQ.....	249
Figura 176.- Perturbación $\pm 20\%$ en alimentación de MeOH - TAME destilación reactiva NEQ.....	249
Figura 177.- Respuesta ante perturbación en la presión del Pre-Reactor - TAME destilación reactiva NEQ.	250
Figura 178.- Respuesta ante perturbación en la presión del Pre-Reactor - TAME destilación reactiva NEQ.	251
Figura 179.- Respuesta ante perturbación en condensador - TAME destilación reactiva NEQ.....	252
Figura 180.- Respuesta ante perturbación en rehervidor - TAME destilación reactiva NEQ.....	252
Figura 181.- Respuesta ante perturbación en la temperatura plato 37 - TAME destilación reactiva NEQ....	253
Figura 182.- Respuesta ante perturbación en composición de TAME - TAME destilación reactiva NEQ.....	254
Figura 183.- Perturbación en $\pm 5^\circ\text{K}$ SetPoint en plato 37 columna destilación – TAME destilación reactiva NEQ. .....	255
Figura 184.- Fracción molar de TAME ante perturbación servo –TAME destilación reactiva NEQ. ....	255
Figura 185.- Perfil de temperatura en columna de destilación - Etilenglicol convencional.....	257
Figura 186.- Perfil de composiciones en columna de destilación - Etilenglicol convencional.....	258
Figura 187.- Temperatura de reactor - Producción (Fracción molar) de Etilenglicol.....	261
Figura 188.- Presión en reactor - Fracción molar Etilenglicol – Etilenglicol convencional.....	262
Figura 189.- Flujo molar de agua en corriente “FW”- Fracción molar Etilenglicol – Etilenglicol convencional. .....	262
Figura 190.- Relación de reflujo - Fracción molar de Etilenglicol.....	263
Figura 191.- Velocidad de flujo molar en destilado - Fracción molar de Etilenglicol.....	263
Figura 192.- Etapas de rectificación - Fracción molar de Etilenglicol.....	264
Figura 193.- Etapas de agotamiento - Fracción molar de Etilenglicol.....	265
Figura 194.- Perfil de temperatura en columna de destilación – Etilenglicol destilación reactiva.....	266
Figura 195.- Perfil de composiciones en columna de destilación - Etilenglicol destilación reactiva.....	267
Figura 196.- Caída de Presión en columna reactiva - Fracción molar de etilenglicol. ....	269
Figura 197.- Número de etapas reactivas - Fracción molar de etilenglicol.....	269
Figura 198.- Carga térmica en rehervidor - Fracción molar de etilenglicol.....	270
Figura 199.- Perfil de temperatura en columna de destilación - Etilenglicol destilación reactiva NEQ.....	272
Figura 200.- Perfil de composiciones en la columna de destilación - Etilenglicol destilación reactiva NEQ...	273
Figura 201.- Número de etapas reactivas NEQ - Fracción molar de etilenglicol.....	274
Figura 202.- Carga térmica en rehervidor - Fracción molar de Etilenglicol.....	275
Figura 203.- Caída de presión - Fracción molar de Etilenglicol.....	276
Figura 204.- Etapas de agotamiento - Fracción molar de Etilenglicol.....	277
Figura 205.- Comparación de perfiles de temperatura - Etilenglicol destilación reactiva EQ & NEQ.....	278

<i>Figura 206.- Comparación de perfiles de composición de Etilenglicol - Etilenglicol destilación reactiva EQ &amp; NEQ.....</i>	<i>279</i>
<i>Figura 207.- Comparación de perfiles de composición de MTBE - Etilenglicol destilación reactiva EQ &amp; NEQ .....</i>	<i>280</i>
<i>Figura 208.- Proyección a 15 años de vida útil de las plantas .....</i>	<i>281</i>
<i>Figura 209.- Fracción molar de Etilenglicol con respecto al tiempo - Etilenglicol convencional dinámico .....</i>	<i>283</i>
<i>Figura 210.- Perturbación <math>\pm 10\%</math> en alimentación - Etilenglicol convencional.....</i>	<i>284</i>
<i>Figura 211.- Respuesta ante la perturbación en la temperatura de reactor - Etilenglicol convencional .....</i>	<i>284</i>
<i>Figura 212.- Respuesta ante perturbación en temperatura plato 38 -Etilenglicol convencional .....</i>	<i>285</i>
<i>Figura 213.- Respuesta ante perturbación en temperatura plato 18 - Etilenglicol convencional .....</i>	<i>286</i>
<i>Figura 214.- Respuesta ante perturbación en temperatura plato 19 - Etilenglicol convencional .....</i>	<i>286</i>
<i>Figura 215.- Respuesta ante perturbación en rehervidor DC3 - Etilenglicol convencional.....</i>	<i>287</i>
<i>Figura 216.- Respuesta ante perturbación en condensador DC3 - Etilenglicol convencional.....</i>	<i>288</i>
<i>Figura 217.- Respuesta ante la perturbación en la composición de Etilenglicol - Etilenglicol convencional ..</i>	<i>289</i>
<i>Figura 218.- Perturbación en <math>\pm 5^{\circ}\text{K}</math> SetPoint en plato 19 columna destilación – Etilenglicol convencional. ...</i>	<i>290</i>
<i>Figura 219.- Fracción molar de Etilenglicol ante perturbación servo – Etilenglicol convencional.....</i>	<i>290</i>
<i>Figura 220.- Fracción molar de Etilenglicol con respecto al tiempo - Etilenglicol destilación reactiva dinámico .....</i>	<i>292</i>
<i>Figura 221.- Perturbación en corriente FEO - Etilenglicol destilación reactiva.....</i>	<i>293</i>
<i>Figura 222.- Respuesta ante perturbación en la corriente de agua FW -Etilenglicol destilación reactiva .....</i>	<i>294</i>
<i>Figura 223.- Respuesta ante perturbación corriente de fondos – Etilenglicol destilación reactiva.....</i>	<i>295</i>
<i>Figura 224.- Respuesta ante perturbación en fracción molar de Etilenglicol - Etilenglicol destilación reactiva .....</i>	<i>296</i>
<i>Figura 225.-Respuesta ante perturbación temperatura Plato 10 – destilación reactiva.....</i>	<i>297</i>
<i>Figura 226.- Respuesta ante perturbación en la carga térmica de rehervidor – destilación reactiva.....</i>	<i>298</i>
<i>Figura 227.- Respuesta ante perturbación en condensador – destilación reactiva.....</i>	<i>298</i>
<i>Figura 228.- Perturbación en <math>\pm 5^{\circ}\text{K}</math> SetPoint en plato 10 columna destilación – Etilenglicol destilación reactiva. ....</i>	<i>299</i>
<i>Figura 229.- Fracción molar de Etilenglicol ante perturbación servo – Etilenglicol destilación reactiva.....</i>	<i>299</i>
<i>Figura 230.- Fracción molar de Etilenglicol con respecto al tiempo - Etilenglicol destilación reactiva NEQ dinámico .....</i>	<i>300</i>
<i>Figura 231.- Perturbación en corriente FEO - Etilenglicol destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>301</i>
<i>Figura 232.- Respuesta ante perturbación en corriente “FW” – Etilenglicol destilación reactiva NEQ.....</i>	<i>302</i>
<i>Figura 233.- Respuesta ante perturbación corriente fondos – Etilenglicol destilación reactiva (RBM).....</i>	<i>302</i>

*Figura 234.- Respuesta ante perturbación fracción molar de Etilenglicol – Etilenglicol destilación reactiva NEQ..... 303*

*Figura 235.- Respuesta ante perturbación temperatura etapa 17 – Etilenglicol destilación reactiva NEQ. .. 304*

*Figura 236.- Respuesta ante perturbación en rehervidor – Etilenglicol destilación reactiva NEQ. .... 304*

*Figura 237.- Respuesta ante perturbación en condensador – Etilenglicol destilación reactiva NEQ ..... 305*

*Figura 238.- Perturbación en  $\pm 5^{\circ}\text{K}$  SetPoint en plato 10 columna destilación – Etilenglicol destilación reactiva NEQ..... 306*

*Figura 239.- Fracción molar de Etilenglicol ante perturbación servo – Etilenglicol destilación reactiva NEQ.307*

## ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.- Parámetros cinéticos para producción de MTBE. _____	37
Tabla 2.- Parámetros cinéticos para producción de TAME _____	41
Tabla 3.- Parámetros cinéticos para producción de EG _____	53
Tabla 4.- Especificaciones para el análisis económico en Aspen IPE _____	57
Tabla 5.- Alternativas de configuración de lazos de control _____	61
Tabla 6.- Parámetros de controlador PID - Curva de reacción _____	70
Tabla 7. Reglas de sintonización PID - Ziegler-Nichols. _____	72
Tabla 8.- Reglas de sintonización PID - Tyreus-Luyben _____	73
Tabla 9.- Especificaciones del proceso convencional - MTBE _____	81
Tabla 10.- Controladores – Proceso convencional. _____	84
Tabla 11.- Especificaciones del proceso destilación reactiva - MTBE _____	88
Tabla 12.- Controladores – Destilación reactiva - MTBE _____	91
Tabla 13.- Especificaciones del proceso destilación reactiva NEQ - MTBE _____	95
Tabla 14.- Controladores - Destilación reactiva NEQ - MTBE _____	98
Tabla 15.- Especificaciones del proceso convencional - TAME _____	104
Tabla 16.- Controladores - Proceso convencional - TAME _____	108
Tabla 17.- Especificaciones del proceso destilación reactiva - TAME _____	112
Tabla 18.- Controladores - Destilación reactiva - TAME _____	116
Tabla 19.- Especificaciones del proceso destilación reactiva NEQ - TAME _____	119
Tabla 20.- Controladores - Destilación reactiva NEQ -TAME _____	123
Tabla 21.- Especificaciones del proceso convencional – Etilenglicol _____	127
Tabla 22.- Controladores - Proceso convencional Etilenglicol. _____	130
Tabla 23.- Especificaciones del proceso destilación reactiva - Etilenglicol _____	133
Tabla 24.- Controladores - Destilación reactiva - Etilenglicol _____	136
Tabla 25.- Especificaciones del proceso destilación reactiva NEQ - Etilenglicol _____	140
Tabla 26.- Controladores - Destilación reactiva NEQ - Etilenglicol _____	142
Tabla 27.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación – Convencional - MTBE _____	147
Tabla 28.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - MTBE Destilación reactiva _____	155
Tabla 29.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - MTBE Destilación reactiva NEQ _____	163
Tabla 30.- Comparación de costos de equipos y venta de producto - MTBE _____	172
Tabla 31.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación – Convencional - TAME _____	206
Tabla 32.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - TAME destilación reactiva _____	212
Tabla 33.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - TAME destilación reactiva NEQ _____	218

<i>Tabla 34.- Comparación de costos de equipos y venta de producto - TAME</i>	<i>226</i>
<i>Tabla 35.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación – Convencional - Etilenglicol</i>	<i>259</i>
<i>Tabla 36.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - Etilenglicol destilación reactiva</i>	<i>268</i>
<i>Tabla 37.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - Etilenglicol destilación reactiva NEQ</i>	<i>273</i>
<i>Tabla 38.- Comparación de costos de equipos y venta de producto - Etilenglicol</i>	<i>281</i>

## RESUMEN

La mayoría de las plantas de procesos químicos actuales contemplan dos secciones importantes dentro de sus instalaciones, reacción y separación, operaciones que comúnmente son llevadas a cabo de forma independiente y emplean equipos individuales. Sin embargo, con el avance tecnológico y el crecimiento mundial de consideraciones ambientales y económicas, la industria química ha tenido que realizar cambios considerables en busca de incrementar la eficiencia de sus procesos (intensificación), creando áreas de oportunidad para la investigación y el desarrollo de nuevas tecnologías. Es en este punto donde la destilación reactiva (DR), toma un papel muy importante en la intensificación de la industria química, ya que unifica las secciones de reacción y separación en un solo equipo de proceso.

Esta tesis muestra los resultados obtenidos de simulaciones llevadas a cabo en estado estacionario y estado dinámico para los procesos de obtención de Metil tert-butil éter (MTBE), Tert Amil Metil Éter (TAME) y Etilenglicol (EG), mediante la comparación de tres distintos escenarios de plantas de proceso: En primera instancia se estudian los procesos de obtención convencionales, que contemplan la zona de reacción y de separación en secciones diferentes de la planta. En segundo lugar, se considera la destilación reactiva con etapas de equilibrio (DR EQ), como un ejemplo de la intensificación de los procesos convencionales, por contemplar reacción y separación en un solo equipo de proceso. Y por último se presenta la destilación reactiva con etapas de no equilibrio (DR NEQ), que además de llevar a cabo la reacción y separación en un mismo equipo de proceso, considera el intercambio de calor y masa de las fases fluidas dentro de la columna de destilación.

Las herramientas computacionales desarrolladas por Aspen Tech: Aspen Plus, Aspen Dynamics y Aspen Icarus, son empleadas para el alcance de los objetivos planteados. Aspen Plus permite obtener condiciones de estado estacionario de

diagramas de flujo de procesos (DFP), Aspen Dynamics lleva a cabo la simulación en estado dinámico, donde además, es posible proponer estructuras de control sobre equipos y variables seleccionadas, haciendo posible observar el comportamiento de los lazos de control ante perturbaciones generadas, y por último, Aspen Icarus permite realizar las evaluaciones económicas de los distintos procesos de obtención de los productos principales MTBE, TAME y EG, para posteriormente analizar los resultados y redactar conclusiones a partir de los mismos.

## PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

El desarrollo de la industria química en el último siglo ha proveído a la civilización moderna de toda serie de productos con los cuales actualmente no podríamos concebir la vida diaria, dando como resultado, mejor calidad y expectativa de vida, mayor tiempo libre, rápida transportación a cualquier parte del mundo, comida más sana, mejor ropa, etc.

Los factores determinantes en este enorme desarrollo han sido sin duda la energía y materia prima barata. Durante el siglo XIX, el carbón fue la mayor fuente de energía, y en el XX, el petróleo y gas natural fueron las principales fuentes energéticas ya que el petróleo crudo ofrece enormes ventajas sobre el carbón en términos de su fácil producción y transporte desde sus yacimientos hasta los lugares de destino. Aunado a esto, hay que considerar las características inherentes propias del carbón y del gas natural, debido a que al quemar carbón, se producen más gases de efecto invernadero que con el gas natural, contribuyendo de manera más acelerada al calentamiento global.

Sólo un economista o climatólogo se atrevería a predecir qué es lo que viene por delante, sin embargo, es un hecho que la era de las energías económicas ha terminado. Esto se debe al rápido crecimiento en la demanda por parte de los países en desarrollo, incremento en los costos, y a la dificultad de encontrar y producir nuevos suministros. “Es evidente que nuestra sociedad moderna debe someterse a cambios drásticos y hasta dolorosos en el estilo de vida; cambios que reduzcan el consumo de energía de manera inmediata, con la finalidad de alcanzar un consumo energético sostenible” (Luyben, 2008, p.1).

El final de la era de energía barata ha tenido un mayor impacto en la industria química, ya que modificaciones significativas han tenido que realizarse a los procesos de producción de químicos para reducir el consumo energético. Debido a esto, nuevos e innovadores métodos de procesar han tenido que ser desarrollados y comercializados. Un excelente ejemplo de innovación y desarrollo es la destilación reactiva. Esto se debe a que comúnmente, en una planta química convencional hay secciones de reacción y separación, es decir, tienen sus propios procesos y equipos, los cuales con frecuencia están conectados por corrientes de recirculación de materia y de energía. En destilación reactiva, la reacción y separación ocurren en un mismo equipo, lo cual significa que hay reducciones significativas en energía y en compra de equipos, considerando que los sistemas deben tener la química y equilibrio líquido-vapor apropiado, procesos que a menudo tienen una mejor conversión y selectividad (Schrans, y De-Wolf, 1996).

## JUSTIFICACIÓN

Las consideraciones económicas y ambientales han forzado a la industria a enfocarse en tecnologías basadas en la intensificación de los procesos, de aquí que las columnas de destilación reactiva han sido objeto de estudio de diversos artículos, ya que posee un enorme potencial para la intensificación. Sin embargo, la destilación reactiva puede ser aplicada a un número limitado de sistemas debido a ciertas limitaciones, esto porque la reacción y separación ocurren simultáneamente en la misma columna, entonces las temperaturas que son favorables para ambas operaciones deben coincidir (Keymak, y Luyben, 2008).

Existen múltiples operaciones unitarias y corrientes de recirculación en la mayoría de las plantas químicas, y aunque investigación significativa ha sido realizada acerca del diseño y control de unidades de proceso individuales, como reactores químicos o columnas de destilación, el diseño y control de una planta química son todavía áreas en desarrollo (Keymak, y Luyben, 2008). En gran medida, el creciente interés en la destilación reactiva ha sido al gran progreso de las herramientas computacionales relacionadas con la simulación en estado estacionario, análisis dinámico y control de procesos. Ya que con estas se pueden evaluar cambios en las condiciones de operación de los equipos, así como medir el impacto de perturbaciones en los procesos durante la operación de uno o varios equipos, las cuales pueden ser propuestas a voluntad sin la necesidad de someter a los equipos reales a dichas perturbaciones, evitando así, gastos de capital y riesgos de seguridad en equipos, planta y recursos humanos (Cárdenas, Pérez, Hernández, y Cárdenas, 2012).

## OBJETIVOS

### Objetivo general:

Mediante el empleo de simulaciones en estado estacionario y dinámico desarrolladas con la tecnología de Aspen Tech, llevar a cabo los procesos de obtención de MTBE, TAME y EG, así como analizar y establecer sistemas de control que muestren la operatividad de los lazos de control sometidos a diversas perturbaciones y su capacidad para mantener la calidad del producto, comparando tres diferentes diagramas de flujo de proceso: convencional (reacción y separación), columnas de destilación reactiva y columnas de destilación reactiva con etapas de no equilibrio.

### Objetivos específicos:

- Reproducción de artículos disponibles en la literatura situados en el contexto de sistemas de producción, empleando destilación reactiva.
- Desarrollar simulaciones en estado estacionario de los procesos de obtención de MTBE, TAME y EG, de plantas convencionales y destilación reactiva (Etapas de equilibrio y Etapas de no equilibrio).
- Desarrollar simulaciones en estado dinámico de los procesos de producción de MTBE, TAME y EG, empleando tres diferentes diagramas de flujo de proceso para cada caso.
- Establecer lazos de control que permitan la continua operación de las plantas de proceso.
- Analizar el comportamiento dinámico de las plantas ante perturbaciones generadas en las corrientes de alimentación y SetPoint de los controladores de temperatura.
- Llevar a cabo el análisis económico comparativo de los distintos procesos de producción de cada uno de los productos.

## HIPÓTESIS

El empleo de herramientas computacionales para el análisis de distintos diagramas de flujo de procesos en estado estacionario y dinámico, para la obtención de un mismo producto principal, permite observar y comparar el comportamiento de las variables ante diferentes escenarios de esquemas de producción y condiciones de operación. Adicionalmente, la representación en ambientes dinámicos de los diagramas de flujo, demuestra la capacidad de respuesta de los lazos de control implementados al proceso ante perturbaciones generadas, haciendo uso de controladores Proporcional (P) y Proporcional-Integral (PI) (Lara, 2013).

## INTRODUCCIÓN

Hoy en día los simuladores de procesos son ampliamente utilizados para el diseño de nuevos procesos y para el análisis de los procesos existentes. La mayoría de los cursos de diseño de procesos en ingeniería química, contienen una cantidad significativa de simulación por computadora de diagramas de flujo, en donde se utilizan estas herramientas. El software de simulación de procesos comercial más ampliamente utilizado es el desarrollado por Aspen Tech, Aspen Plus, para simulación en estado estacionario y Aspen Dynamics para simulación en el ambiente dinámico, además de que Aspen Icarus nos permite obtener una muy buena estimación de la relación costo-beneficio que se genera a partir de la instalación y operación de la planta. Estas tres herramientas son utilizadas para el desarrollo de esta tesis, además de apoyarnos con el software OriginPro 8 para la representación gráfica de los resultados. Cabe mencionar que la notación estándar de Aspen es utilizada para la especificación de condiciones de operación de equipos, en tablas y diagramas, por ejemplo, las etapas en columnas de destilación son contadas a partir del tope de la columna, es decir, el condensador es la etapa 1 y el rehervidor es la última etapa (Luyben, 2004).

Una planta química posee cientos de equipos en su proceso, los cuales van desde los equipos principales (reactores, columnas de destilación, etc.) hasta equipos auxiliares (como válvulas). Es por esto que la simulación completa de una planta es muy difícil, por lo que es conveniente analizar sistemas más pequeños (partes de la planta) en función de lo que se desee estudiar u observar, algunas de las variables más importantes a analizar en la destilación reactiva y convencional son: número de platos reactivos, número de platos en la zona de enriquecimiento y rectificación, relación de reflujo y carga térmica en el rehervidor.

## CAPÍTULO 1

### ANTECEDENTES

#### 1.1.- Sistemas de reacción/separación y destilación reactiva

Uno de los más comunes, importantes y retadores tópicos de control que enfrentan los ingenieros químicos es el cómo diseñar sistemas y lazos de control necesarios para poner en marcha un proceso. Típicamente se presenta un diagrama de flujo de proceso complicado que contiene varias corrientes de recirculación y muchos equipos para las operaciones unitarias: columnas de destilación, todo tipo de reactores, intercambiadores de calor, centrifugas, secadores, cristalizadores, extractores líquido-líquido, bombas, compresores, etc. Dada la complejidad y variedad de equipos, debemos idear la instrumentación necesaria y estrategias para operar la planta de manera segura y alcanzar los objetivos de diseño (Luyben, y Luyben, 1999). En la práctica como en literatura, es común encontrar el empleo de sistemas reacción/separación en la mayoría de los procesos que involucran la producción de algún compuesto mediante reacción(es). La sección de reacción involucra principalmente los equipos necesarios para adecuar la corriente de alimentación del sistema a las condiciones óptimas de reacción, el recipiente de reacción (reactor) e intercambiadores de calor. Posteriormente, la zona de separación se conforma de los equipos encargados de purificar la corriente poseedora del producto deseado, comúnmente tanques flash, columnas de destilación, absorbedores, extractores, decantadores, etc. (Lara, 2013).

La tecnología de integrar las operaciones unitarias reacción y separación, ha tenido un avance significativo en años recientes. En destilación reactiva, los productos son hechos por reacción y destilación en el mismo equipo físico. Normalmente en estos

procesos se logra mejor conversión y selectividad, además de conseguir menores costos de capital y de operación que la tecnología correspondiente con secciones de reacción y separación de manera independiente (Schrans, y De-Wolf, 1996).

La intensificación de procesos es un área de creciente interés, que está definida como cualquier desarrollo en ingeniería química que conlleve a menores inventarios de materiales químicos y a una mayor eficiencia energética, es por esto que la destilación reactiva es un excelente ejemplo de la intensificación de procesos, ya que provee de una muy buena opción en el aspecto económico y ambiental, superando a los diagramas de flujo convencionales de múltiples unidades para algunos sistemas químicos (Luyben, Kristan, Michael, y Cory, 2004).

Una ventaja inherente de la destilación reactiva es la característica de producción y remoción simultánea de productos. Para reacciones químicas reversibles, la remoción de componentes producto impulsa la reacción hacia el lado de los productos mejorando la conversión debido al efecto del equilibrio químico. Aunque por otra parte, la destilación reactiva se ve limitada a sistemas en donde las volatilidades relativas entre los reactantes y los productos coincidan, de tal forma que los productos puedan ser fácilmente removidos de la región donde se está llevando a cabo la reacción, evitando pérdidas de reactantes (Luyben, 2008).

Para que la destilación reactiva sea viable, debemos ser capaces de remover los productos de los reactantes por medio de la destilación. Esto implica que los productos deben ser más ligeros y/o más pesados que los reactantes. Consideremos el sistema en donde la reacción química envuelve dos reactantes (A y B) generando dos productos (C y D), la reacción se lleva a cabo en fase líquida y además es reversible:



En términos de volatilidades relativas de los cuatro componentes, un caso ideal es cuando un producto es el más ligero y otro es el más pesado, con los reactantes siendo componentes con punto de ebullición intermedio.

$$\alpha_C > \alpha_A > \alpha_B > \alpha_D \quad (2)$$

La volatilidad relativa es una de las formas más útiles de representar la información del equilibrio líquido-vapor (ELV), la cual es la relación de los valores  $y/x$  (fracción molar de vapor por fracción molar de líquido), de dos componentes, mientras más grande la volatilidad relativa, más fácil será la separación de la mezcla (Luyben, 2006). La volatilidad relativa del componente ligero L, (“*Light*”) con respecto al componente pesado H, (“*Heavy*”) está definida por la siguiente ecuación:

$$\alpha_{LH} = (y_L/x_L)/(y_H/x_H) \quad (3)$$

Las volatilidades relativas pueden ser aplicadas a sistemas binarios, como a multicomponentes. En el caso binario, la volatilidad relativa ( $\alpha$ ) entre los componentes ligero y pesado puede ser utilizada para dar una relación simple entre la composición de la fase líquida ( $x$ , para la fracción mol del componente ligero en la fase líquida), y la composición de la fase vapor ( $y$ , es la fracción mol del componente ligero en fase vapor).

$$y = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x} \quad (4)$$

En la Figura 1 se muestran las curvas  $xy$  para distintas volatilidades relativas ( $\alpha = 1.3, \alpha = 2, \alpha = 5$ ), siendo la curva correspondiente a  $\alpha = 5$ , la que representa al

sistema más fácil de separar y, por otro lado, cuando  $\alpha = 1.3$ , la curva representa a un sistema que es difícil de separar.

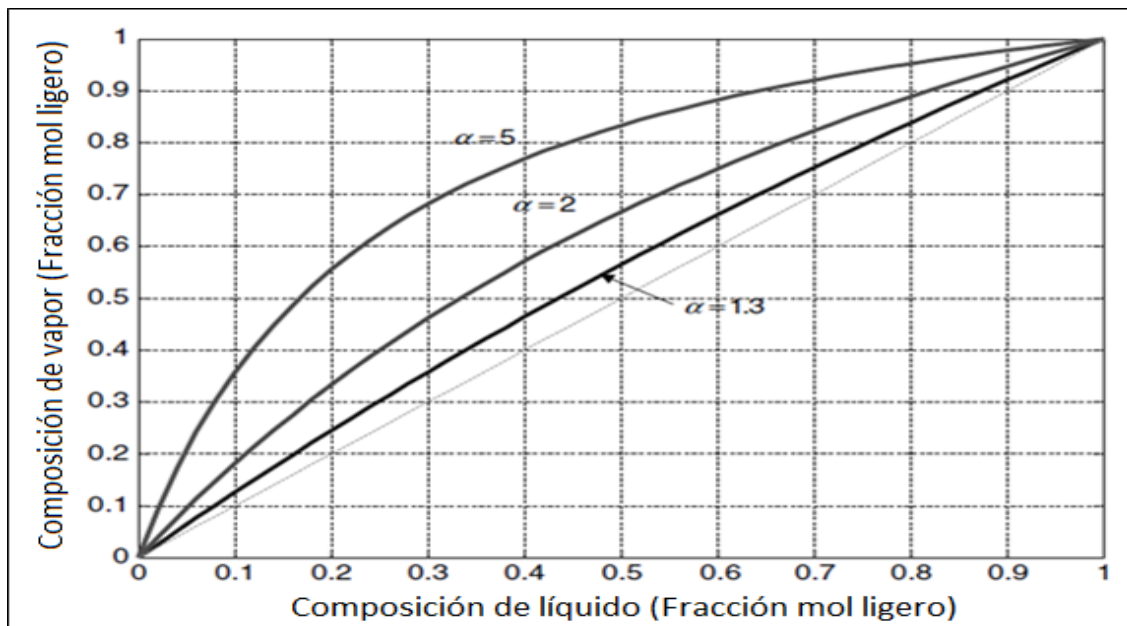


Figura 1.- Curvas xy para distintas volatilidades. (Luyben, 2006)

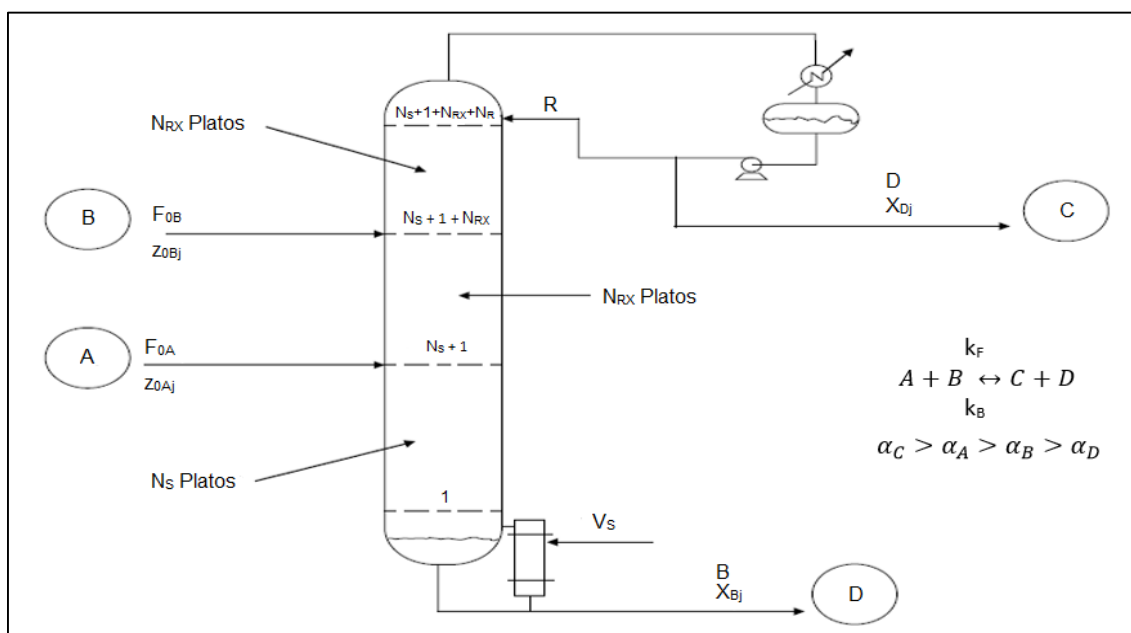


Figura 2.- Columna de destilación reactiva ideal.

La Figura 2 presenta el diagrama de flujo de una columna de destilación reactiva ideal. El reactante ligero "A" es alimentado por la sección baja de la columna, pero no directamente en la parte inferior. El reactante pesado "B" es alimentado por la parte superior de la columna, pero no en lo más alto. La parte media de la columna es la sección reactiva y contiene "N<sub>RX</sub>" platos reactivos. La sección de la columna por arriba de la alimentación fresca de B (sección de rectificación con N<sub>R</sub> platos), separa el producto ligero "C" de todos los componentes pesados, entonces se obtiene un destilado cuya composición es prácticamente "C" puro. La sección de la columna debajo de la alimentación fresca "A", (la sección de agotamiento con N<sub>s</sub> platos) separa el producto pesado D de todos los componentes ligeros, entonces, en el fondo se obtiene prácticamente D puro. El caudal de reflujo y la entrada de calor del rehervidor, pueden ser manipulados para mantener la pureza de esos productos.

La Figura 3 muestra un solo plato reactivo, donde la velocidad de reacción neta, de la reacción reversible, depende de las velocidades de reacción específicas hacia adelante y hacia atrás (k<sub>F</sub> y k<sub>B</sub>), además, de la retención de líquido (o cantidad de catalizador) en el plato.

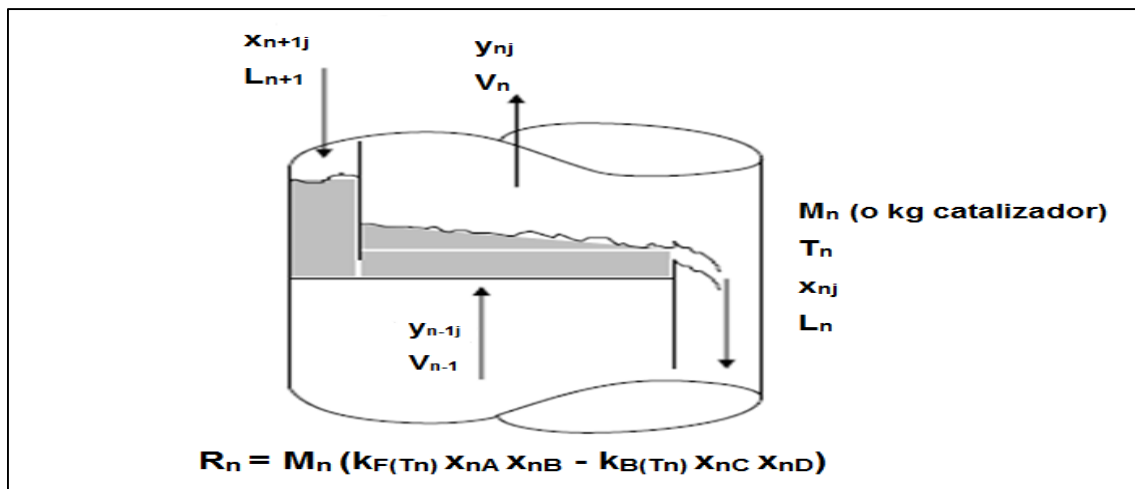


Figura 3.- Esquema de un plato reactivo

Uno de los parámetros de diseño más importantes para destilación reactiva es la presión de la columna; ya que los efectos de la presión son mucho más pronunciados en la destilación reactiva que en la destilación convencional. En la destilación convencional, la presión de la columna es seleccionada de tal forma que la separación se haga más fácil (volatilidades relativas altas), donde, en la mayoría de los sistemas corresponde a presiones bajas. Sin embargo, presiones bajas implican baja temperatura de reflujo y baja temperatura de refrigerante (Luyben, 2008).

La destilación reactiva resulta muy atractiva por la disminución en consumo de energía y en costo de equipos, pero no es una alternativa general ya que depende más bien de la naturaleza del sistema, ya que, cuando las transformaciones químicas son complejas y suceden en fase gas o a presiones muy altas, llevar a cabo la destilación y reacción en un mismo equipo puede no ser conveniente (Sánchez, Pérez, Ortiz, y Luna, 2006).

Los procesos de destilación reactiva pueden mostrar una variedad de fenómenos dinámicos; simulaciones en Aspen Dynamics han llevado al descubrimiento de múltiples estados estacionarios en columnas de destilación reactiva. A pesar de esto, la mayoría de la modelación y simulación de procesos de destilación reactiva reportada en la literatura abierta han sido del tipo estado estacionario, por lo que es necesario realizar simulaciones dinámicas rigurosas (*“Fully pressure driven”*), para investigar la relevancia de la multiplicidad de estados estacionarios y la sensibilidad de los procesos ante perturbaciones en las condiciones de operación, además, la simulación en estado dinámico de procesos de destilación reactiva permite el desarrollo de esquemas de control, procedimientos de arranque o paro, y permite una operación más robusta de la columna (Schrans, y De-Wolf, 1996).

Los beneficios de la destilación reactiva pueden ser resumidos de la siguiente manera:

- La simplificación o eliminación del sistema de separación puede llevarnos a ahorros significativos de capital.
- Mejora la conversión de los reactivos acercándose al 100%. Este incremento en la conversión proporciona beneficios al reducir costos de recirculación.
- Mejora la selectividad. Remover uno de los productos de la mezcla reaccionante o mantener una concentración baja de uno de los reactivos puede llevar a la reducción de producción de reacciones secundarias y, por lo tanto, mejora la selectividad de los productos deseados.
- Reducción significativa de los requerimientos de catalizador para el mismo grado de conversión.
- Evitar la formación de azeótropos. La destilación reactiva es particularmente ventajosa cuando la mezcla alimentada puede formar diversos azeótropos. Las condiciones de la destilación puede permitir que los azeótropos sean “mínimos” en un único recipiente.
- Reduce la formación de productos secundarios.
- Beneficios de integración de calor. Sí la reacción es exotérmica, el calor de la reacción puede ser empleada para proveer calor de vaporización y reducir la carga térmica en el rehedidor.

## 1.2.- Sistemas de reacción/separación para la obtención de MTBE, TAME y EG

### 1.2.1.- Metil Tert Butil Éter (MTBE)

Existen diversos métodos de obtención de MTBE que han sido desarrollados con el paso del tiempo, uno de ellos comprende un sistema de dos reactores, enfriadores y mezcladores. La alimentación fresca es alimentada a un mezclador donde el metanol e isobutileno líquidos son mezclados, para ingresar al primer reactor. Los reactores son operados cerca de condiciones adiabáticas y la reacción produce una cantidad significativa de calor, provocando un aumento en la temperatura a través de la cama catalítica. El efluente del reactor es enfriado antes de entrar al segundo reactor, donde el isobutileno restante sin convertir reacciona para formar MTBE, así el 96% del isobutileno contenido en la alimentación al reactor es convertido (Elkanzi, 1996). Como último paso, el producto del segundo reactor es alimentado a una columna de destilación, en donde se separa el producto principal MTBE de los demás componentes por la corriente de fondos (Kim, y Douglas, 2002). La Figura 4 muestra el diagrama de bloques del proceso convencional de obtención de MTBE.

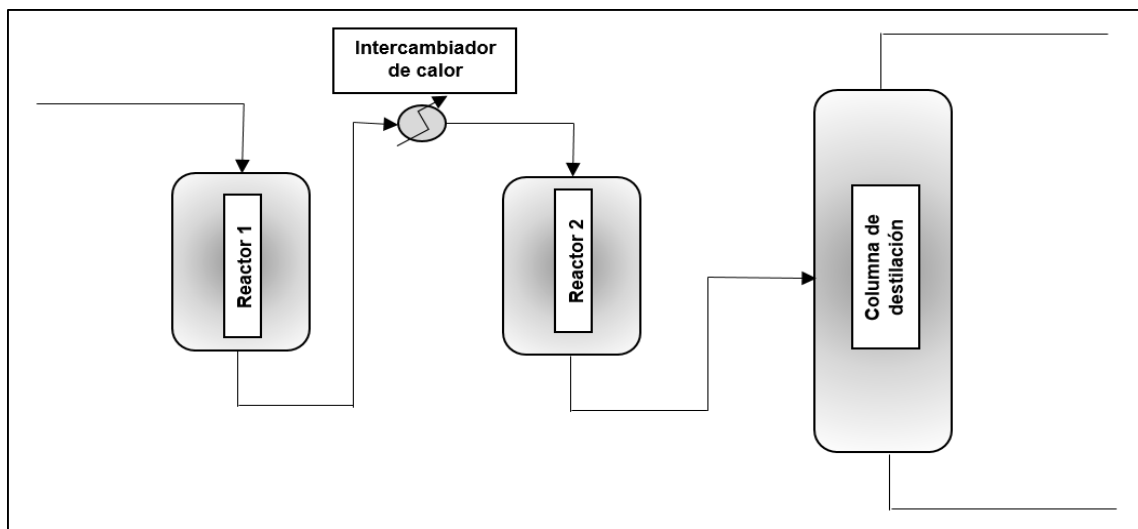


Figura 4.- Proceso convencional de obtención de MTBE.

### 1.2.2.- Tert Amil Metil Éter (TAME)

Este proceso consiste de dos reactores tubulares conectados en serie para permitir la conversión de Isoamileno. Un enfriador es empleado entre ambos reactores para disminuir la temperatura del efluente del primer reactor y permitir la conversión en el segundo reactor (Su, y Chang, 2000). Posteriormente en la zona de separación se consideran 3 columnas de destilación, donde, en la primera se obtiene el producto principal (TAME), en la segunda columna, se lleva a cabo la separación de la fase orgánica contenida en la alimentación de Isoamileno del metanol remanente de la primera columna empleando lavado con una corriente de agua. Por último, en la tercera columna se lleva a cabo la separación de metanol y agua, corrientes que pueden ser recirculadas al proceso o ser consideradas para venta. La Figura 5 muestra el diagrama de bloques empleado para la obtención de TAME.

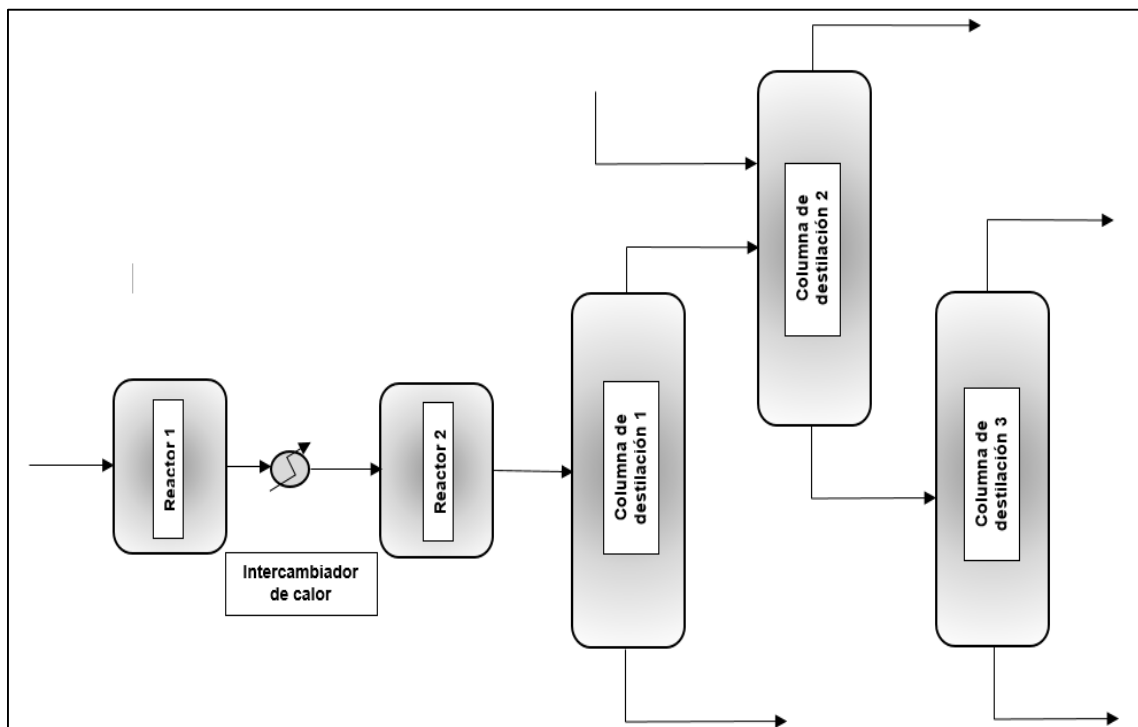


Figura 5.- Proceso convencional de obtención de TAME

### 1.2.3.- Etilenglicol (EG)

En la Figura 6 se muestra el diagrama de bloques correspondiente al proceso convencional de obtención de Etilenglicol, el cual consiste en su zona de reacción, de un reactor CSTR (Continuous stirred tank reactor, por sus siglas en inglés), en donde se lleva a cabo la reacción de hidrólisis de Óxido de Etileno con agua para formar Etilenglicol y Dietilenglicol. En la zona de separación se cuenta con un tren de columnas de destilación donde en primera instancia se recupera gran parte del agua que no reacciona y se recircula al reactor. En la segunda columna se obtiene como producto de fondo el Dietilenglicol y como producto superior, una mezcla binaria entre cantidades remanentes de agua y Etilenglicol. En la tercera columna se recupera el producto principal por la parte inferior de la columna (EG), con una corriente superior principalmente de agua.

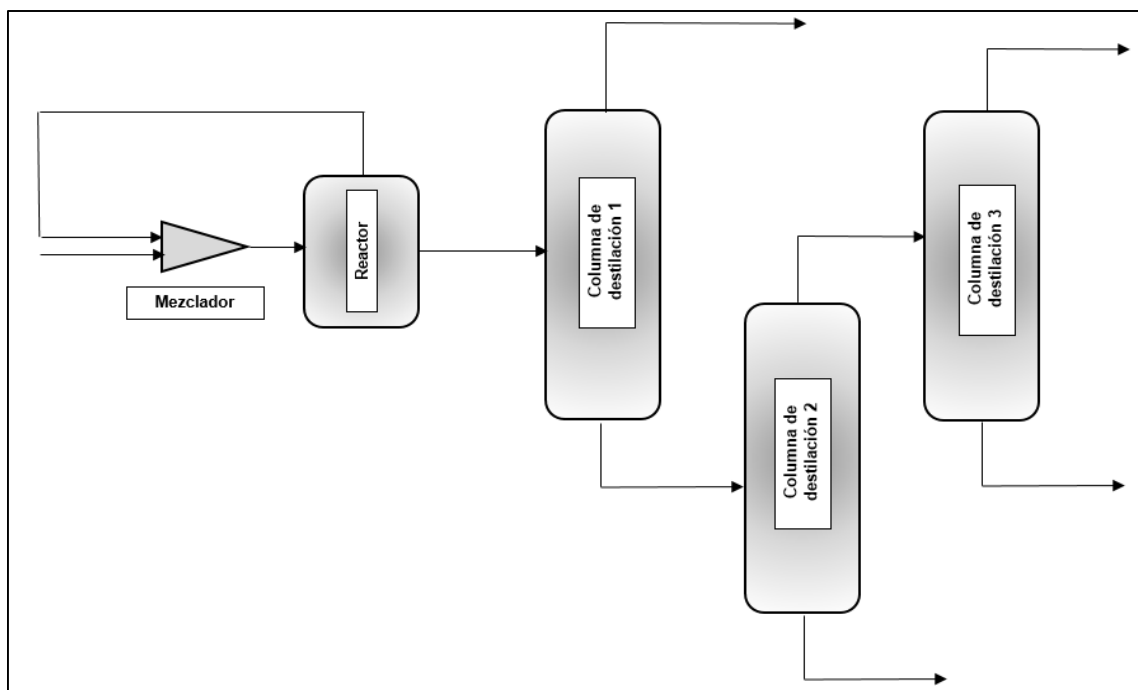


Figura 6.- Proceso convencional de obtención de Etilenglicol

### 1.3.- Sistemas de destilación reactiva para la obtención de MTBE, TAME y EG

#### 1.3.1.- Metil Tert Butil Éter (MTBE)

Actualmente la mayoría de las nuevas plantas comerciales de MTBE utilizan la tecnología de destilación reactiva en la cual, debido a que una columna reemplaza el proceso convencional mostrado en la Figura 6. La columna reactiva mostrada en la Figura 7 lleva a cabo la reacción exotérmica y simultáneamente realiza la separación, en este caso, la reacción entre metanol e isobutileno para formar MTBE es limitada por el equilibrio, y mantener la alimentación de reactivos metanol/isobutileno en una relación por debajo de 1.05 permite recuperar el producto MTBE como producto de fondo, con el producto superior siendo una mezcla formada por metanol e isobutileno. El empleo de la destilación reactiva permite una recuperación más económica de MTBE como producto principal, (Al-Harhi, 2008).

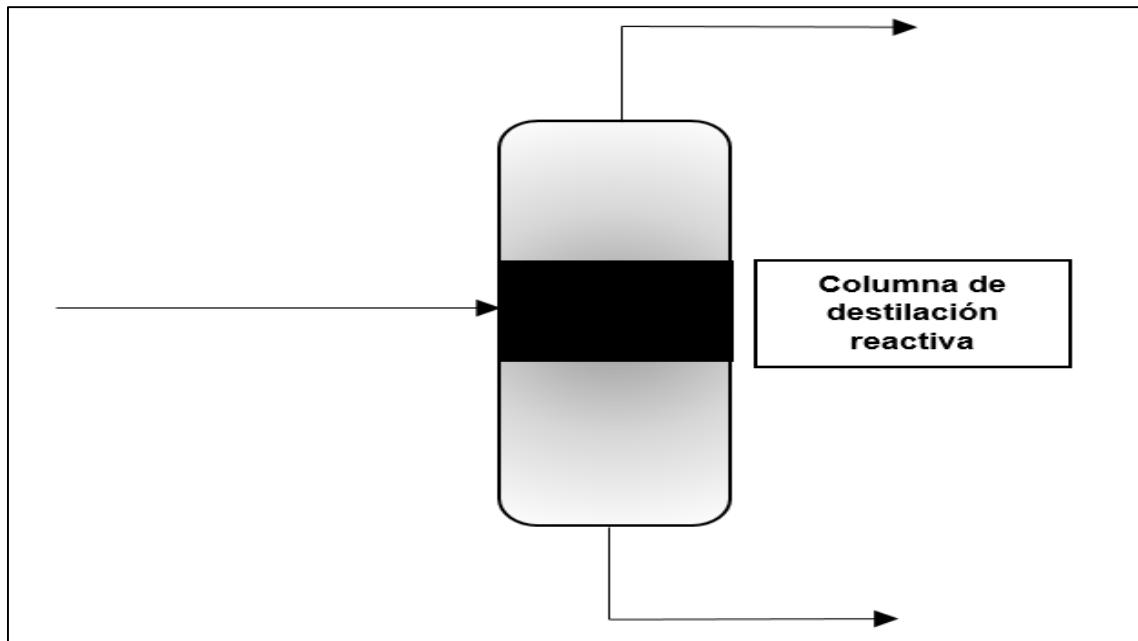


Figura 7.- Esquema de columna de destilación reactiva para MTBE

### 1.3.2. - Tert Amil Metil Éter (TAME)

En la Figura 8 se muestra el diagrama de bloques empleado para la simulación del sistema de destilación reactiva para la obtención de TAME, el cual, en base al diseño propuesto por Subawalla y Fair, (Subawalla, y Fair, 1999), consta de un pre-reactor y una columna de destilación reactiva. El pre-reactor es un reactor tubular enfriado conteniendo 9544 kg de catalizador. Toda la corriente de alimentación fresca "C5", es alimentada al pre-reactor junto con una porción del metanol total alimentado al sistema. Posteriormente el efluente del reactor es alimentado a una columna de destilación reactiva en la etapa 28, con etapas reactivas comprendidas entre el plato 7 y 23 con presencia de catalizador. La corriente de metanol es alimentada en el fondo de la zona reactiva en el plato número 23. Esta configuración básica permite obtener al producto principal TAME de alta pureza en la corriente de fondos, y a la fase orgánica presente en la corriente de Isoamileno que no interviene en la reacción en el destilado.

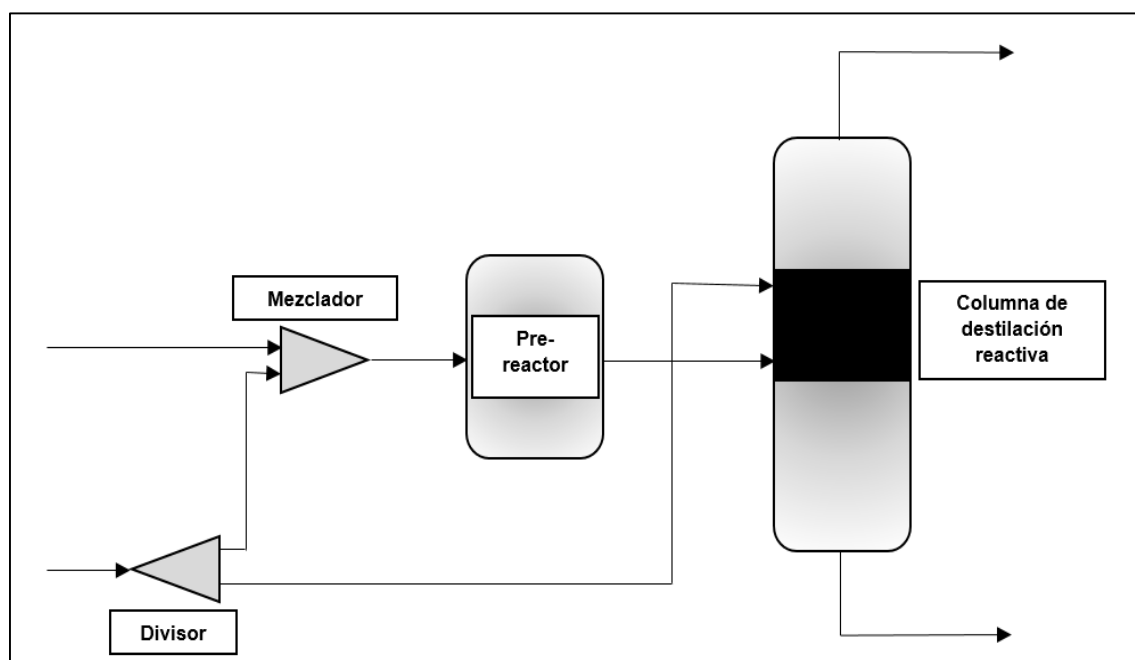


Figura 8.- Esquema de columna de destilación reactiva para TAME

### 1.3.3.- Etilenglicol (EG)

En la literatura (Luyben, 2002) y (Kumar, y Daoutidis, 1999), estudian el proceso de producción de etilenglicol mediante el uso de una columna de destilación reactiva, sin embargo, sus estudios emplean una gran e impráctica retención de líquido ( $1.5 \text{ m}^3$ ), que significa una caída de presión grande para el diámetro de la columna, además de emplear equilibrio líquido-vapor ideal y una presión de operación de 1 atmosfera (Kumar, y Daoutidis, 1999). (Al-Arfaj, y Luyben, 2002), en su trabajo incrementan la presión del sistema y emplean la relación de Wilson para describir el equilibrio líquido-vapor. Estos trabajos servirán como base para el desarrollo de las simulaciones. En la Figura 9 se muestra el diagrama de bloque empleado para la realización de esta simulación, el cual consta de una columna de destilación reactiva de 12 etapas, la cual en su totalidad consta de etapas reactivas (recordando que la nomenclatura estándar de Aspen es empleada).

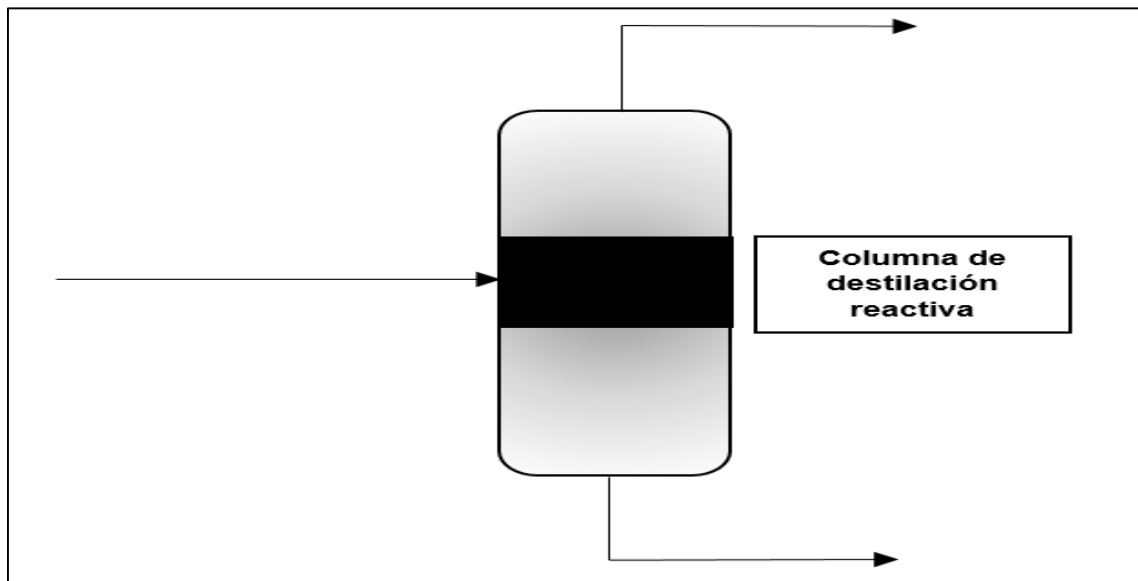


Figura 9.- Esquema de columna de destilación reactiva para Etilenglicol

#### 1.4.- Cinética de reacción, Química de reacción y Equilibrio Líquido-vapor para la producción de MTBE, TAME y EG.

La simulación de columnas de destilación reactivas empleando los modelos estándar de Aspen Plus presenta algunos inconvenientes significativos. Las reacciones pueden ser especificadas en modelos de equilibrio y en modelos cinéticos. En cuanto a los modelos cinéticos, las unidades para la concentración están limitadas a fracción molar, molaridad o presión parcial, por lo que modelos de actividad no están incluidos. Esto puede ser un problema porque las actividades se emplean con frecuencia para describir la información cinética.

Aunado a lo anterior, la expresión para la velocidad de reacción está limitada al empleo del modelo cinético por ley de potencias para las columnas de destilación reactiva, dejando fuera expresiones para la velocidad de reacción como Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW). En las simulaciones en estado estacionario, es posible emplear modelos de equilibrio químico, basados únicamente en la estequiometría de la reacción, sin embargo, para desarrollar estudios en el ambiente dinámico Aspen Dynamics, es necesario proporcionar la cinética de la reacción.

El modelo de ley de potencias empleado por Aspen Plus y Aspen Dynamics para las simulaciones es la siguiente, donde A es el factor pre-exponencial (Las unidades dependen de las bases empleadas para la concentración de la reacción) y,  $E_a$  es la energía de activación.

$$r = A e^{-\frac{E_a}{RT}} C \quad (5)$$

#### 1.4.1.- Modelo cinético por Ley de Potencias en la síntesis de MTBE

La configuración de la columna elegida para este trabajo ha sido estudiada previamente por Jacobs y Krishna (Jacobs, y Krishna, 1993). Los reactivos metanol e isobutileno reaccionan para formar MTBE, con n-buteno como tercer componente que interviene en la reacción actuando como inerte. Los modelos de estimación de propiedades termodinámicas UNIQUAC, UNIFAC y Redlich-Kwong pueden ser empleados para los cálculos de equilibrio de fases líquido y vapor. La reacción es en fase líquida y esta catalizada por resina de intercambio iónico (Amberlyst 15), el esquema de reacción es el siguiente:



Las cinéticas de reacción empleadas en este estudio para la reacción directa ( $r_1$ ) y reversible ( $r_2$ ) están especificadas en la Tabla 1, (Panda, y Kannan, 2014):

$$r_i = A_i e^{-\frac{E_{ai}}{RT}} C_i \quad (7)$$

$r_i$ (kmol/s/m <sup>3</sup> )	$A_i$ (kmol/s/m <sup>3</sup> )	$E_{ai}$ (Kj/kmol)	$C_i$
1	3.67e12	92440	$X_{ib}/X_{MeOH}$
2	2.67e17	134454	$X_{ib}/X_{MeOH}^2$

Tabla 1.- Parámetros cinéticos para producción de MTBE.

La reacción de producción de MTBE es exotérmica con una calor generado de 37.7 kJ/mol de isobutileno convertido. La reacción es además, altamente selectiva con isobutileno, es decir, que otros butenos no son convertidos. La microcinética para la síntesis en fase líquida de Metil tert-butil éter fue determinada en un reactor de tipo continuo tanque agitado en un rango de temperatura de 323-363 K a 2.1 MPa (Rehfinger, y Hoffmann, 1990).

Una vez que el isobuteno es consumido en la reacción, la mezcla resultante de n-buteno, metanol y MTBE tiene propiedades de equilibrio liquido-vapor que son no ideales con dos azeótropos binarios, por lo que es importante realizar el análisis azeotrópico. La presión de operación de la columna es 11 bares, por lo que el análisis se realiza a esta presión. El primer azeótropo resultante es 89.6% de n-buteno y 10.34% de metanol a 72.41 °C. El segundo es 42.25% de MTBE y 57.75% de metanol a 132.49 °C (Luyben, 2008). La herramienta de Aspen Plus, “*Aspen Split Analysis*” es de gran ayuda para llevar a cabo estos análisis.

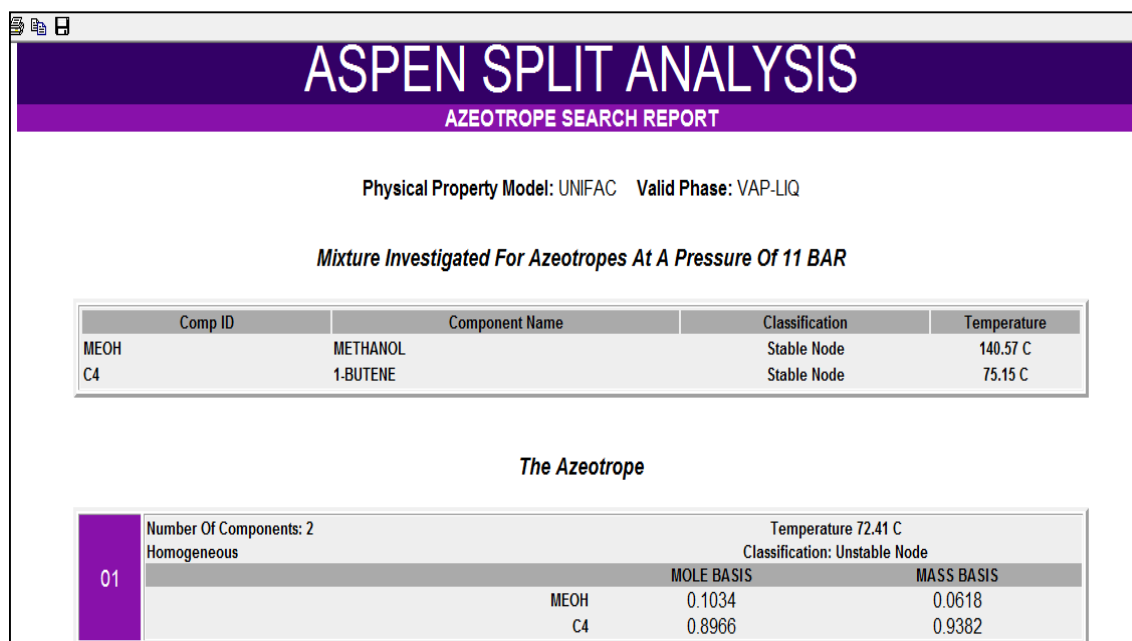


Figura 10.- Análisis azeotrópico MeOH-N-Buteno (C4)

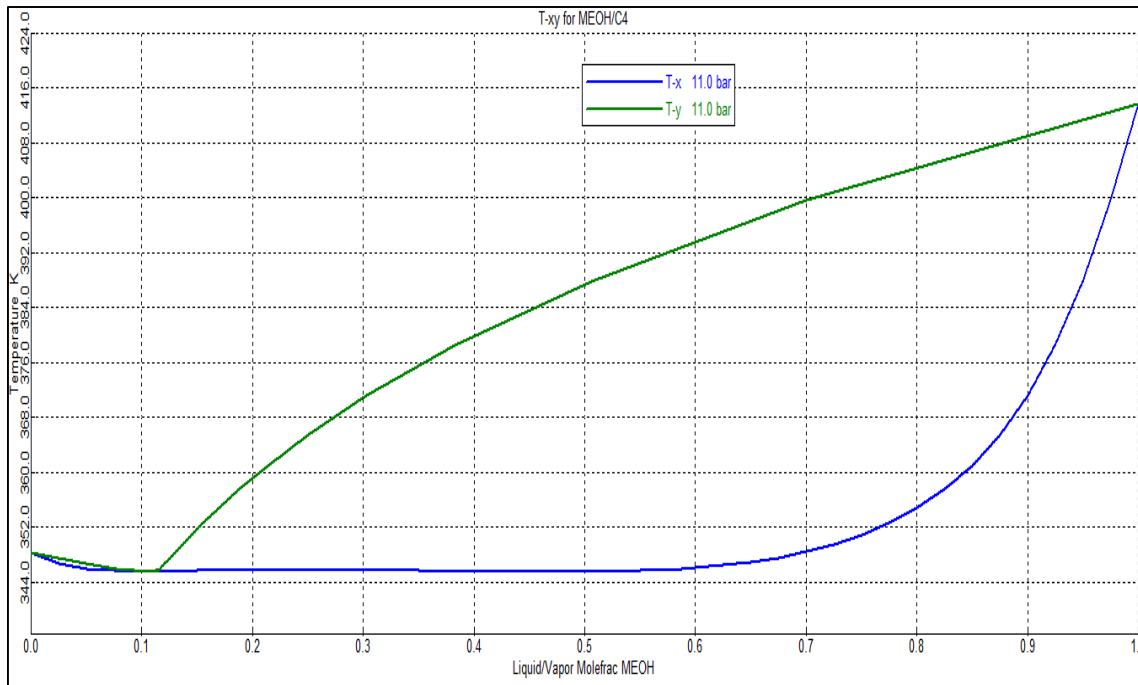


Figura 11.- Diagrama Txy azeótropo MeOH-N-Buteno (C4)

## ASPEN SPLIT ANALYSIS

### AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: UNIFAC Valid Phase: VAP-LIQ

**Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 11 BAR**

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
MEOH	METHANOL	Stable Node	140.57 C
MTBE	METHYL-TERT-BUTYL-ETHER	Stable Node	153.35 C

**The Azeotrope**

01	Number Of Components: 2		Temperature 132.49 C
	Homogeneous		Classification: Unstable Node
		MOLE BASIS	MASS BASIS
	MEOH	0.5775	0.3320
	MTBE	0.4225	0.6680

Figura 12.- Análisis azeotrópico MeOH-MTBE

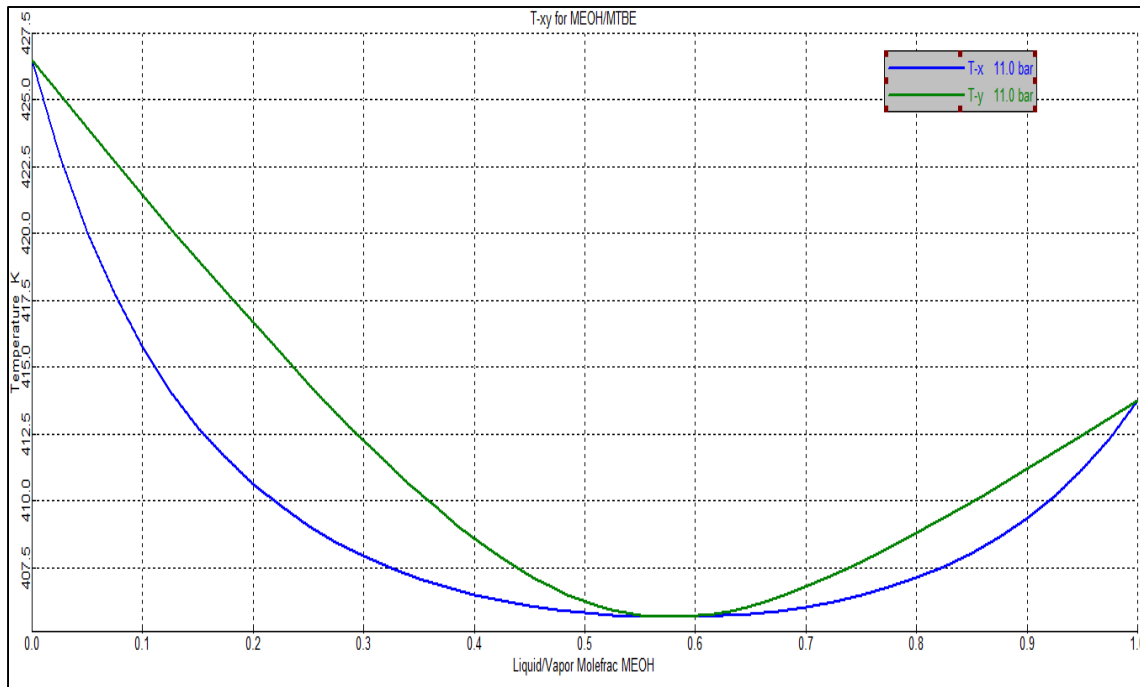
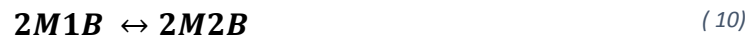


Figura 13.- Diagrama Txy azeótropo MeOH-MTBE

#### 1.4.2. - Modelo cinético por Ley de Potencias en la síntesis de TAME.

En el proceso de formación de TAME empleando los distintos escenarios para planas de proceso, se consideran tres reacciones principales, que a su vez también son inversas. Es producido mediante la reacción de metanol con Isoamilenos insaturados de 2-Metil-Butano o C5, (2-Metil-1-Buteno y 2-Metil-2-Buteno). Las unidades de concentración son fracciones molares y las reacciones en fase líquida reversibles consideradas son:



Las tres reacciones son de primer orden con respecto a sus reactivos y productos:

$$R1 = M_{cat}(k_{F1}x_{2M1B}x_{MeOH} - k_{B1}x_{TAME}) \quad (11)$$

$$R2 = M_{cat}(k_{F2}x_{2M2B}x_{MeOH} - k_{B2}x_{TAME}) \quad (12)$$

$$R3 = M_{cat}(k_{F3}x_{2M1B} - k_{B3}x_{2M2B}) \quad (13)$$

Los parámetros cinéticos para las tres reacciones reversibles en fase líquida son mostrados en la siguiente Tabla. William Luyben (Luyben, 2008), proporciona las velocidades de reacción en unidades de  $kmol/s/kg_{cat}$ , mismos que deben ser convertidos a unidades de  $kmol/s/m^3$  empleando la densidad aparente del catalizador de  $900 kg/m^3$ . Cada una de las etapas reactivas en la columna contiene  $1100 kg$  de catalizador, esto corresponde a  $1.22 m^3$  en cada plato.

Reacción	$A_F$ (kmol/s/m <sup>3</sup> )	$E_F$ (kJ/kmol)	$A_B$ (kmol/s/m <sup>3</sup> )	$E_B$ (kJ/kmol)
R1	1.1937e+11	76103.737	2.1182e+14	110540.899
R2	1.2346e+14	98230.2176	1.3873e+17	124993.965
R3	2.4468e+13	96522.6384	3.864e+13	104196.053

Tabla 2.- Parámetros cinéticos para producción de TAME

El equilibrio de fases de este sistema es complejo debido a la existencia de azeótropos. Los componentes inertes en la corriente de alimentación fresca de Isoamileno contienen isopentano (iC5), n-pentano, 1-penteno y 2-penteno. Esencialmente todos estos inertes dejan la columna por la parte superior de la columna de destilación reactiva, por lo que consideremos al sistema ternario iC5, MeOH y TAME para llevar a cabo en análisis de equilibrio de fases.

Como la columna de destilación reactiva opera a 4 bar, entonces el análisis azeotrópico se realiza a esta presión. Las temperaturas de ebullición bajo esta condición de presión son 347.76, 377.23 y 413.15 K respectivamente. En esta ocasión se emplea la herramienta de Aspen Plus, “*Tools – Conceptual Design y Ternary Maps Analysis*”. El modelo de estimación de propiedades UNIFAC es especificado.

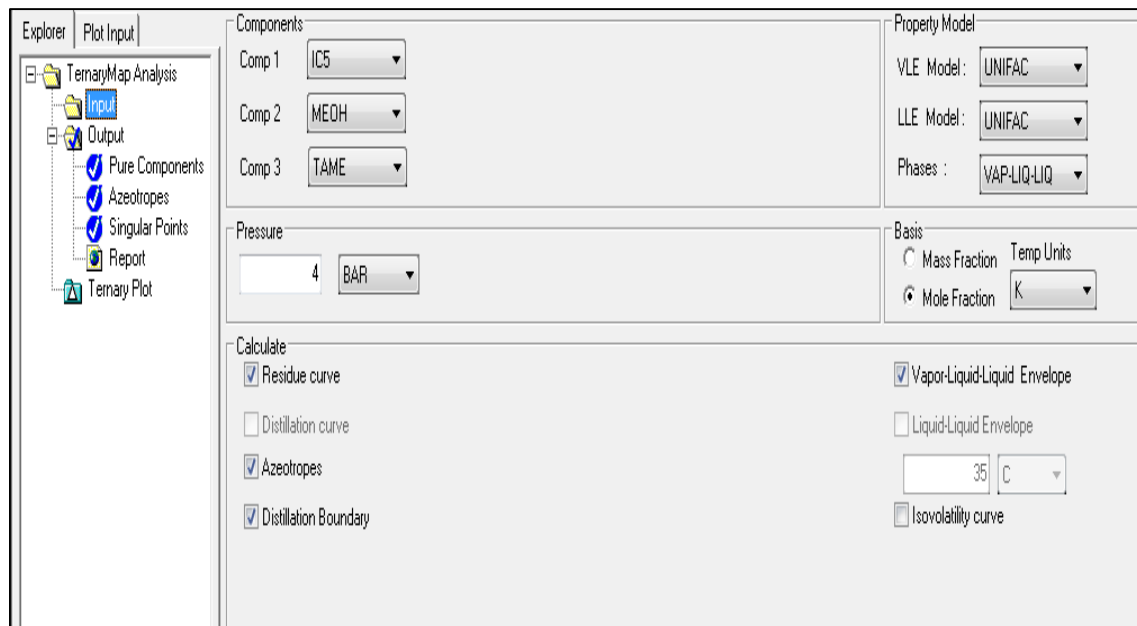


Figura 14.- Ventana “Ternary Maps” en Aspen Plus

Seleccionando la pestaña “*Azeotropes*” se listan las composiciones y temperaturas de las mezclas azeotrópicas para dos azeótropos binarios y heterogéneos a 4 bar de presión.

iC<sub>5</sub> / metanol: 339.25 K, 25.01% metanol

Metanol / TAME: 376 K, 84.43% metanol

El punto de ebullición del primer azeótropo (339.25 K) es menor que el punto de ebullición del componente ligero iC5 (348 K), esto significa que la parte alta de la columna tendrá una composición cercana a la composición azeotrópica.

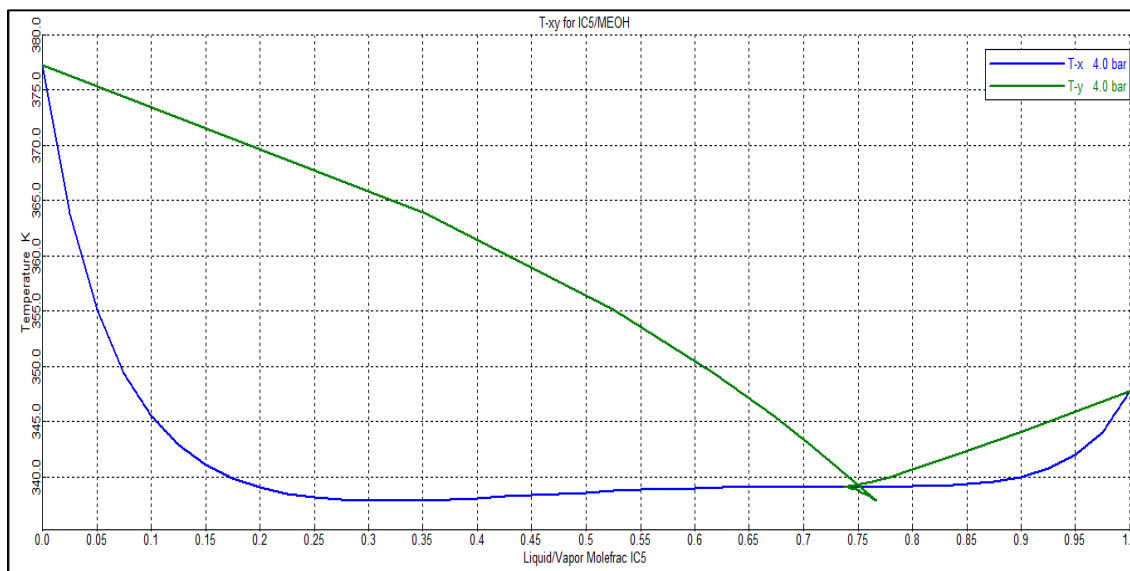


Figura 15.- Diagrama Txy azeótropo iC5-MeOH

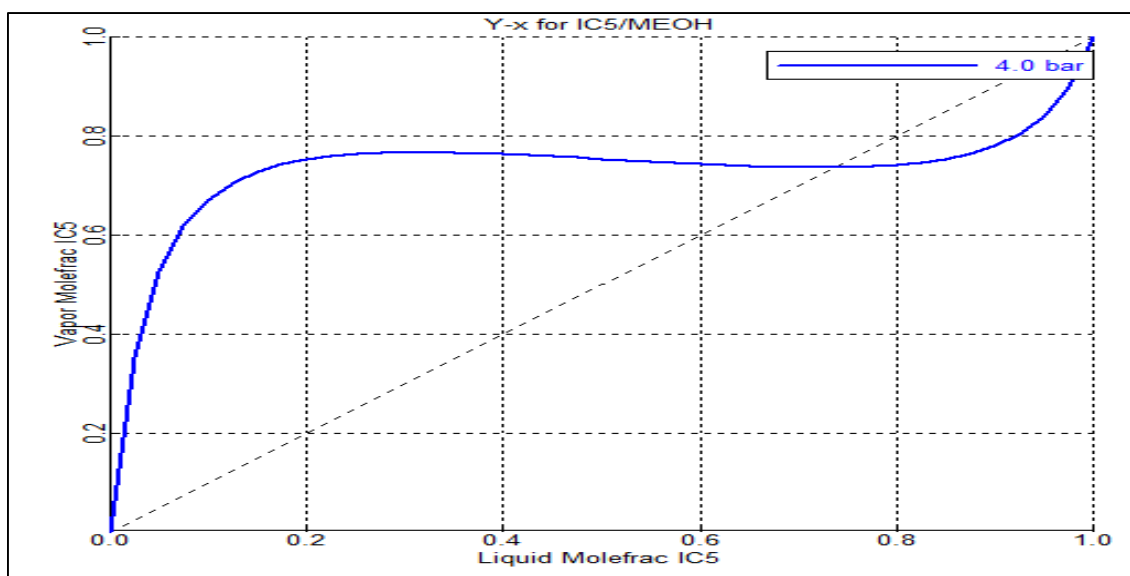


Figura 16.- Diagrama xy para iC5-MeOH

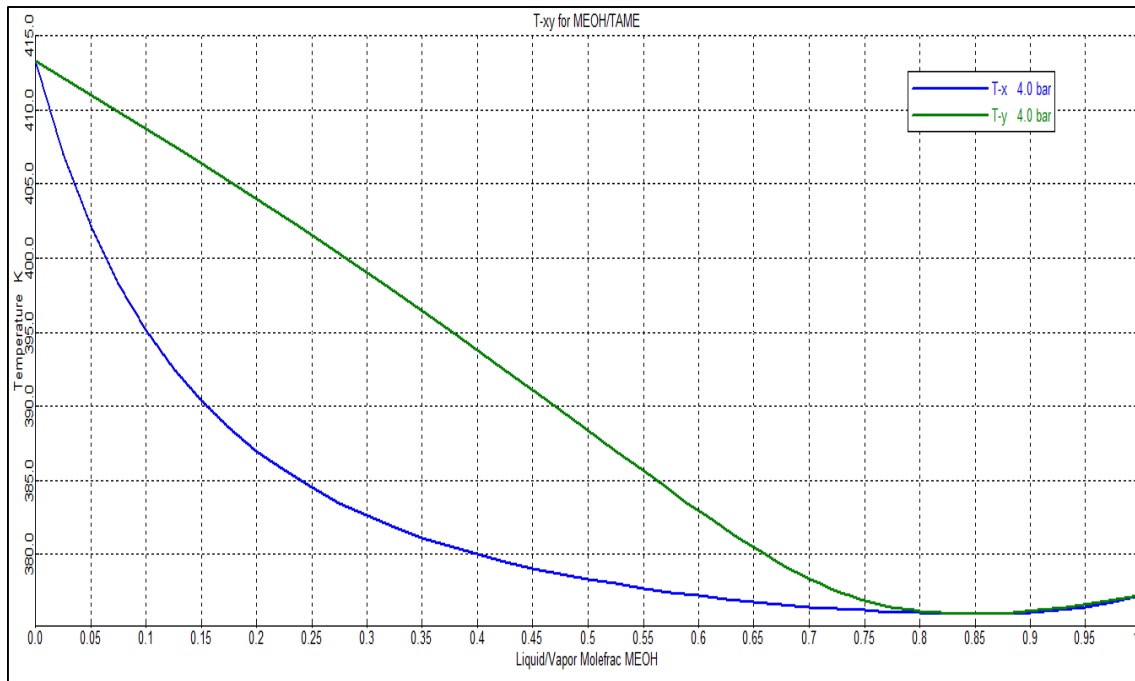


Figura 17.- Diagrama Txy azeótropo MeOH-TAME

Los diagramas ternarios son muy útiles al analizar sistemas de tres componentes y en el diseño de columnas de destilación, particularmente para sistemas con equilibrio vapor-liquido complejo. A continuación se ilustran algunas de las características empleando el sistema ternario iC5/MeOH/TAME a 4 bar. La siguiente figura muestra el diagrama ternario para este sistema indicando algunas de sus características. Dos azeótropos binarios producen un límite de destilación, además se muestran curvas residuales, las cuales indican que una columna de destilación operando en la región inferior tendrá como producto de fondo en su mayoría al producto principal TAME, y como producto destilado una mezcla iC5/MeOH cerca de la composición azeotrópica. Por otra parte, una columna de destilación que opere cerca de la región superior tendrá un producto de fondo que es en su mayoría metanol, y un producto destilado que estará cerca de la composición azeotrópica iC5/MeOH.

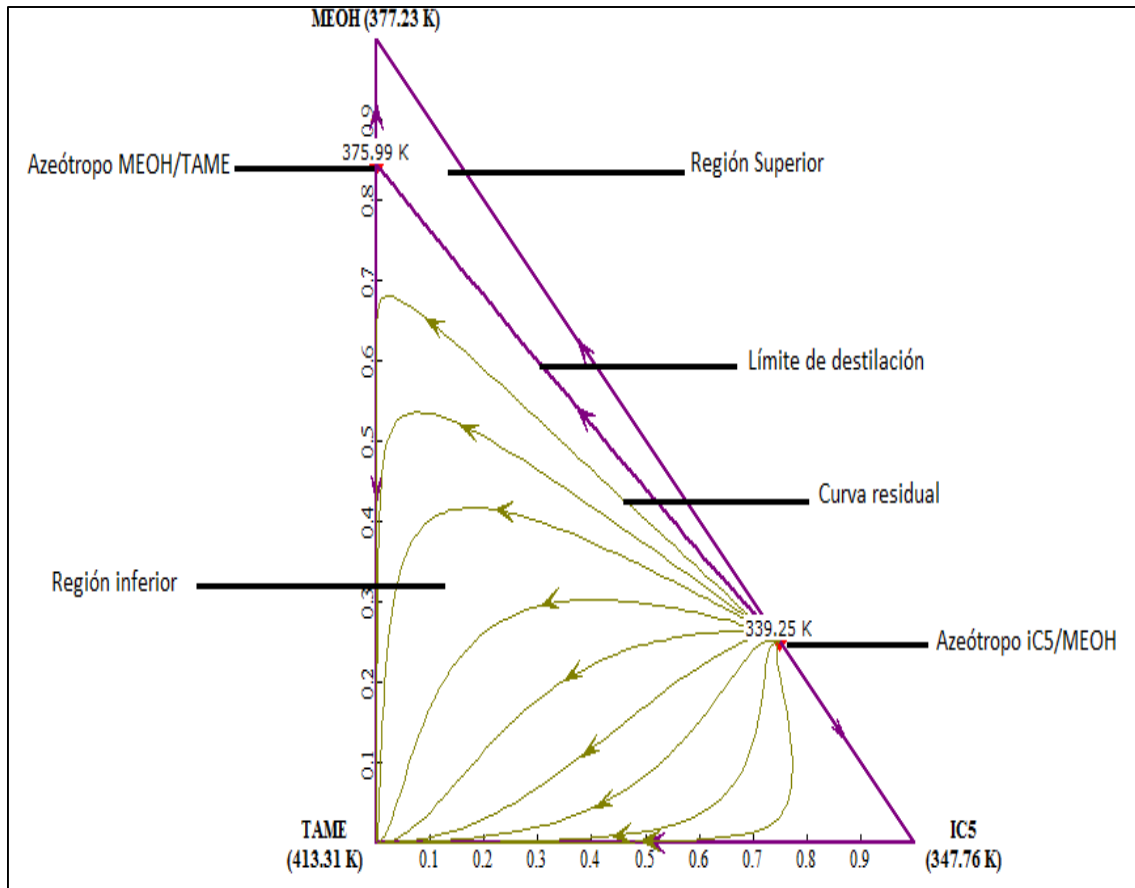


Figura 18.- Diagrama ternario a 4 bar.

En esta ocasión para generar diagramas ternarios y emplearlos en el diseño de columnas de destilación, se hace uso de la herramienta de Aspen Plus, “*Conceptual Design*”. Éste ultimo de no estar activo directamente en Aspen Plus, se debe acceder a la siguiente ruta: “*Library-References y activar la casilla Conceptual Design*” para activarlo. Posteriormente, en las pestañas correspondientes a la librería de equipos de proceso, se debe seleccionar “*Conceptual design*” y arrastrar el elemento al área de trabajo en el diagrama de flujo de proceso de Aspen Plus.

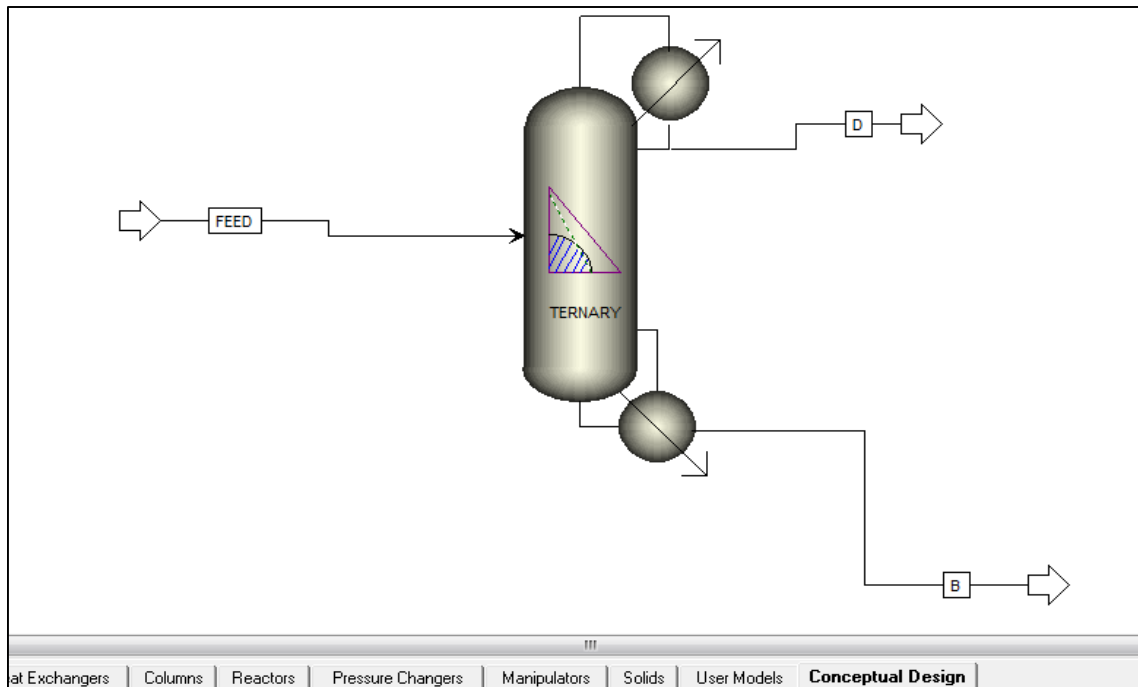


Figura 19.- "Conceptual design" en Aspen Plus

En este equipo, corrientes de alimentación y producto deben ser añadidas de la misma forma que en cualquier unidad de proceso. Las condiciones de la alimentación son especificadas de la siguiente forma en este ejemplo ilustrativo: 40% mol iC5, 30% mol MeOH y 30% mol TAME a 5 bar y 320 K. En cuanto al bloque, se deben especificar los componentes, presión y el método de estimación de propiedades y una relación de reflujo de 5. En cuanto a la especificación del producto de fondos, se considera que obtenemos TAME prácticamente puro en el fondo de la columna, por lo que se especifica una composición de fondo de 0.1% mol de iC5 y 0.1% mol de MeOH. De manera similar especificar una cantidad muy pequeña de TAME en el destilado (0.1% mol). Estos valores son preliminares, que pueden o no ser alcanzados. Para finalizar presionamos el botón "Calculate", si los balances globales por componente no son factibles con las composiciones deseadas y la composición de la alimentación, un mensaje de error será mostrado, de lo contrario el diagrama ternario aparecerá en pantalla.

Las siguientes figuras muestran la ruta a seguir para llevar a cabo los pasos anteriormente descritos.

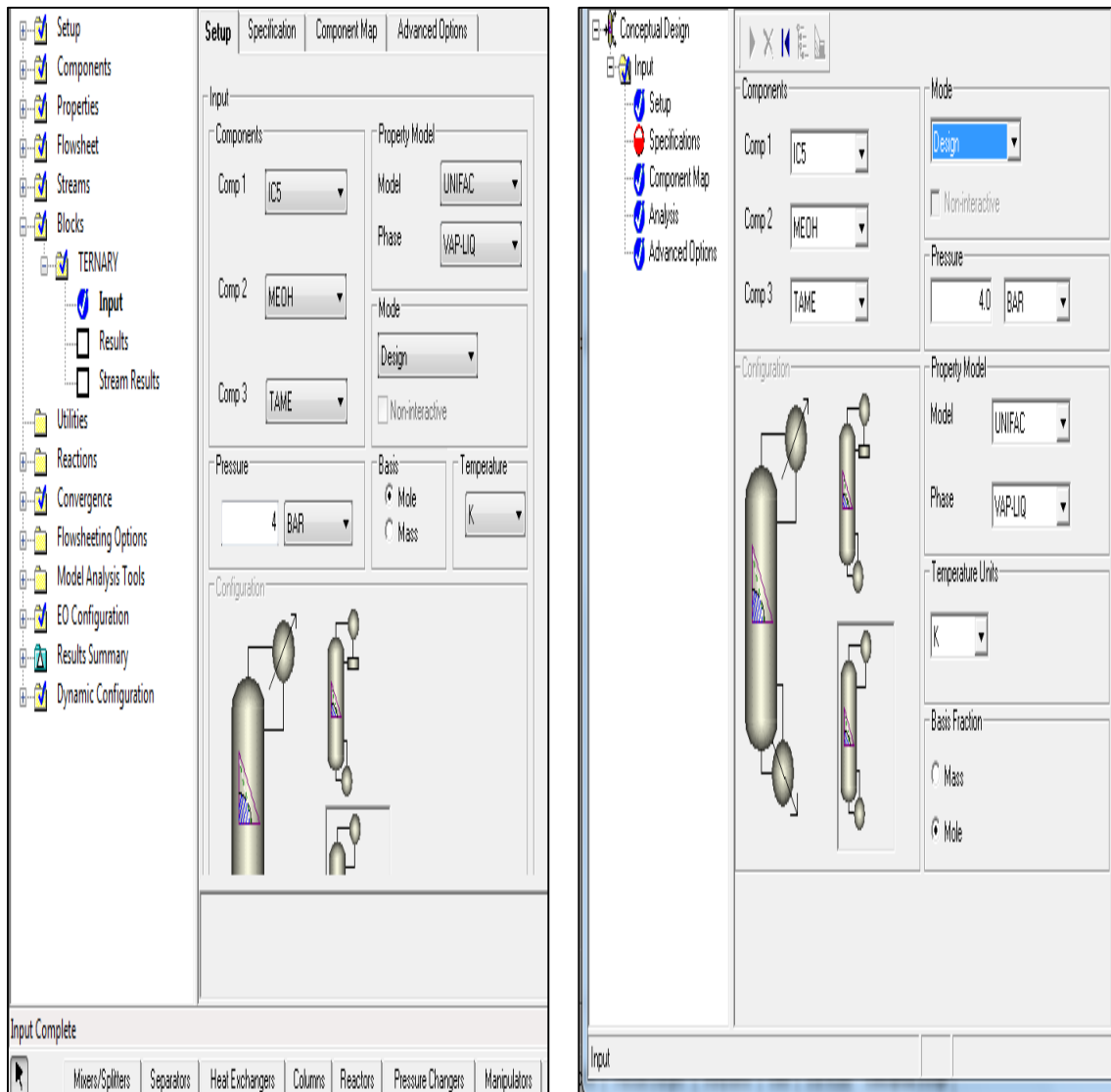


Figura 20.- Ruta en "Conceptual Design" pasos 1 y 2

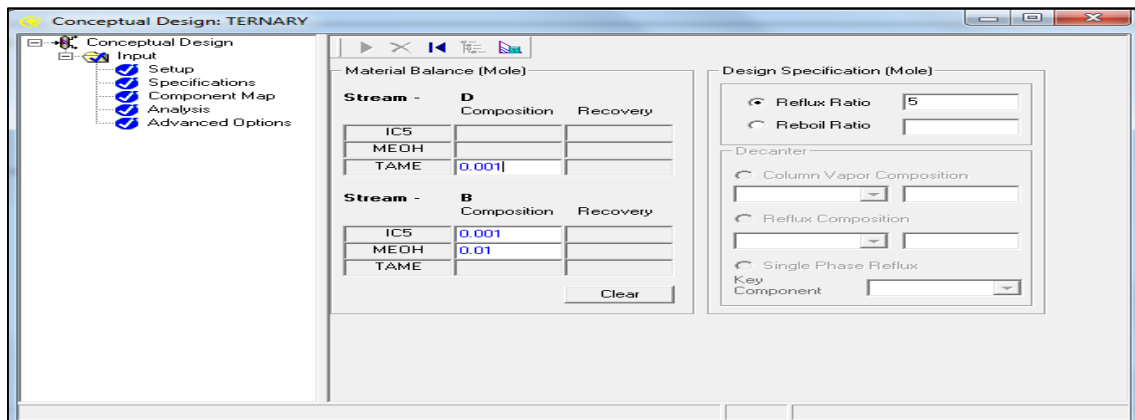
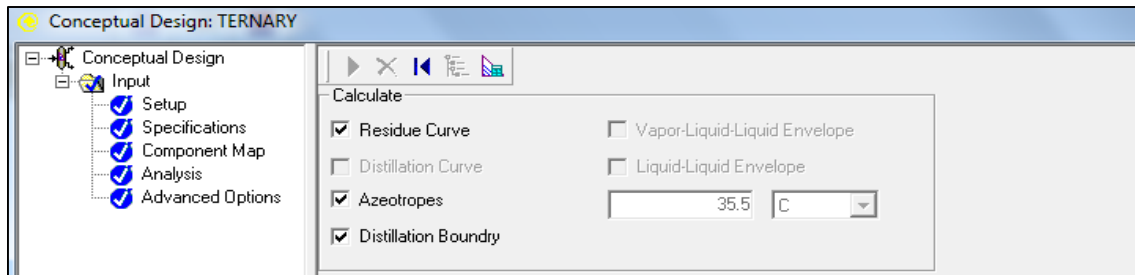


Figura 21.- Ruta en "Conceptual Design" pasos 3 y 4

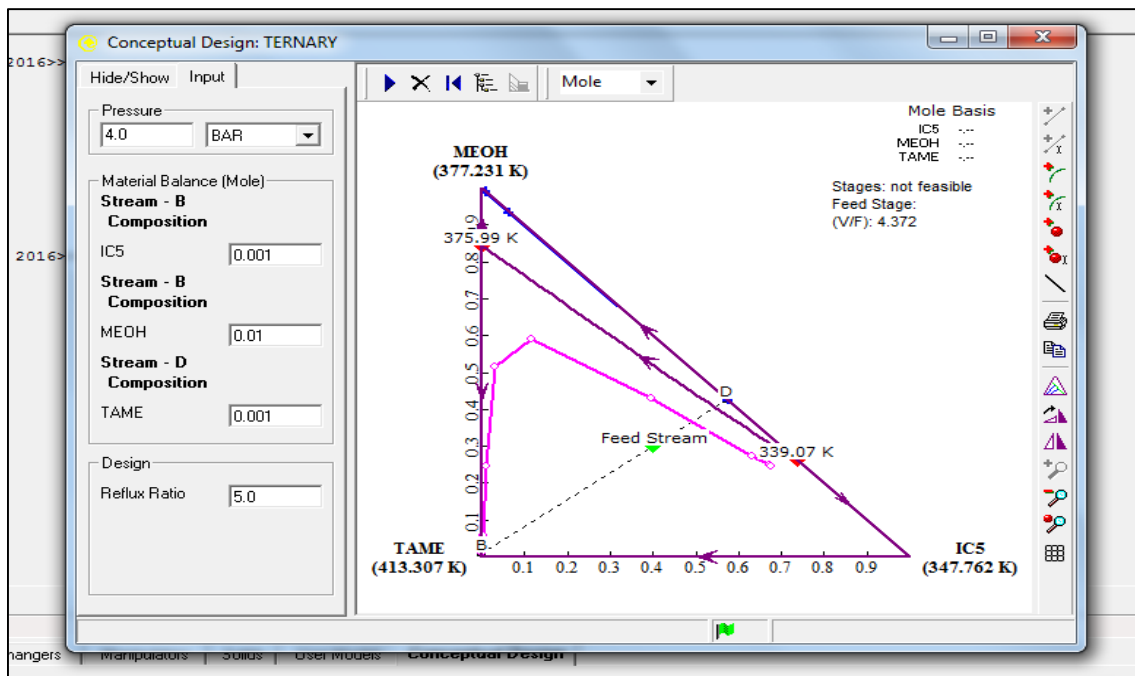


Figura 22.- Ruta en "Conceptual Design" paso 5 – Diagrama ternario

En la Figura 22 se observa que los balances nos son satisfechos, el diagrama ternario muestra que los puntos correspondientes a la alimentación y a los fondos están en la región inferior, pero el destilado en la región superior. Es por esto que bajo las consideraciones establecidas, la separación no es factible.

La composición del destilado debe estar especificada de tal forma que este en la región inferior, donde la alimentación y los fondos están ubicados. Si incrementamos la composición en el destilado para el componente TAME y la composición de los fondos es cambiada a 5% de metanol, encontramos que el punto de destilado está en la región inferior y muy cercana al límite de destilación. Con una relación de reflujo de 5, el número de etapas requeridas es de 6. Como ahora los balances son satisfechos, se obtiene un diseño factible:

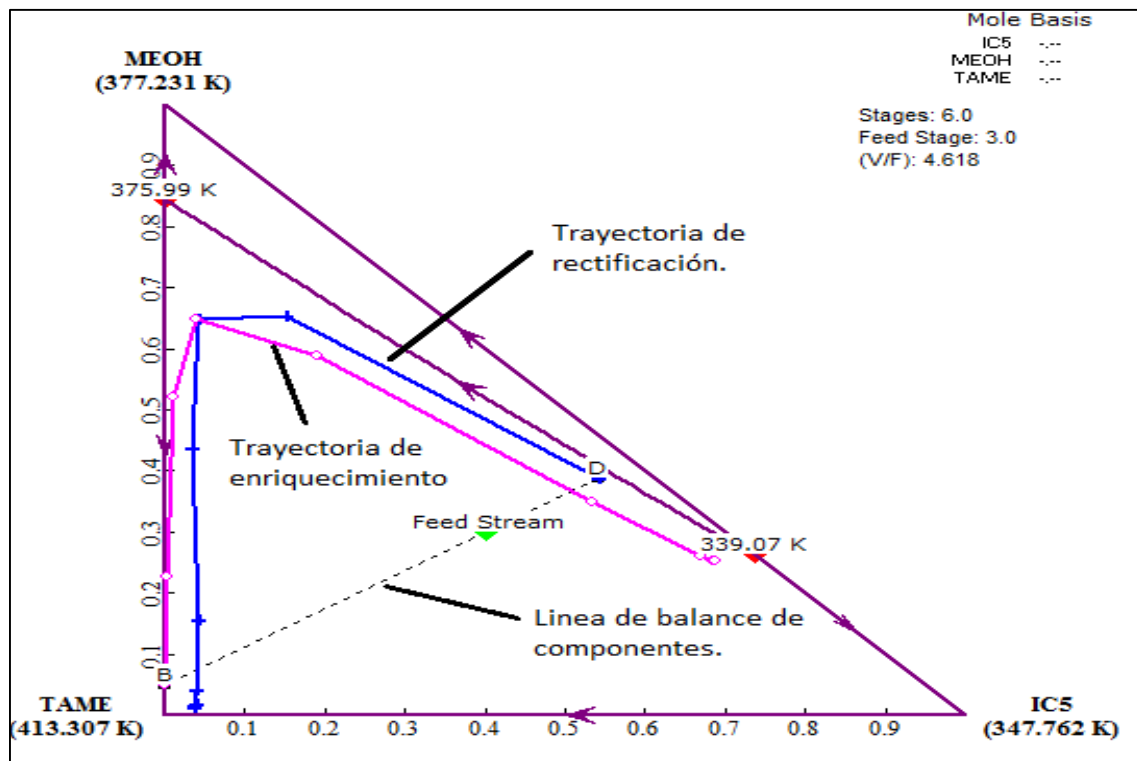


Figura 23.- Diagrama ternario - Diseño factible

El programa internamente desarrolla cálculos plato a plato empezando por cada extremo de la columna de destilación haciendo uso de la relación de reflujo especificada. Una trayectoria de composiciones en fase líquida de plato a plato se mueve hacia la zona de enriquecimiento, y la otra se mueve hacia la zona de rectificación, de tal forma que si las dos trayectorias se interceptan, el diseño es factible (Figura 23). Sin embargo, a partir del diagrama ternario se observa que un destilado que contenga muy poco componente TAME no puede ser obtenido con las especificaciones de alimentación. Por tanto, si modificamos la composición de metanol en la alimentación a una que contenga menor cantidad, el punto de alimentación se mueve hacia abajo en el diagrama, lo cual también mueve el punto de destilado hacia abajo.

La composición de la alimentación es cambiada de 30% a 20% de metanol, con un cambio proporcional en la composición de iC5. La composición en el destilado es especificada a ser 2.2% mol de TAME y en los fondos 0.1% iC5 y 1% mol de metanol. Un nuevo diseño factible es obtenido, el cual requiere 14.3 etapas.

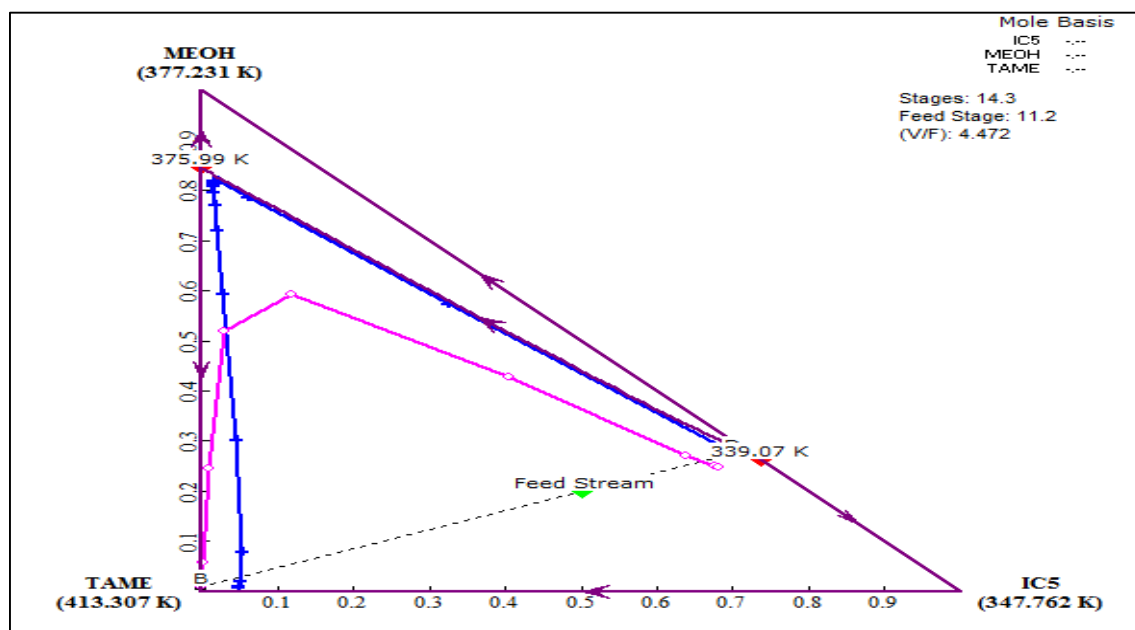


Figura 24.- Diagrama ternario - Segundo diseño factible

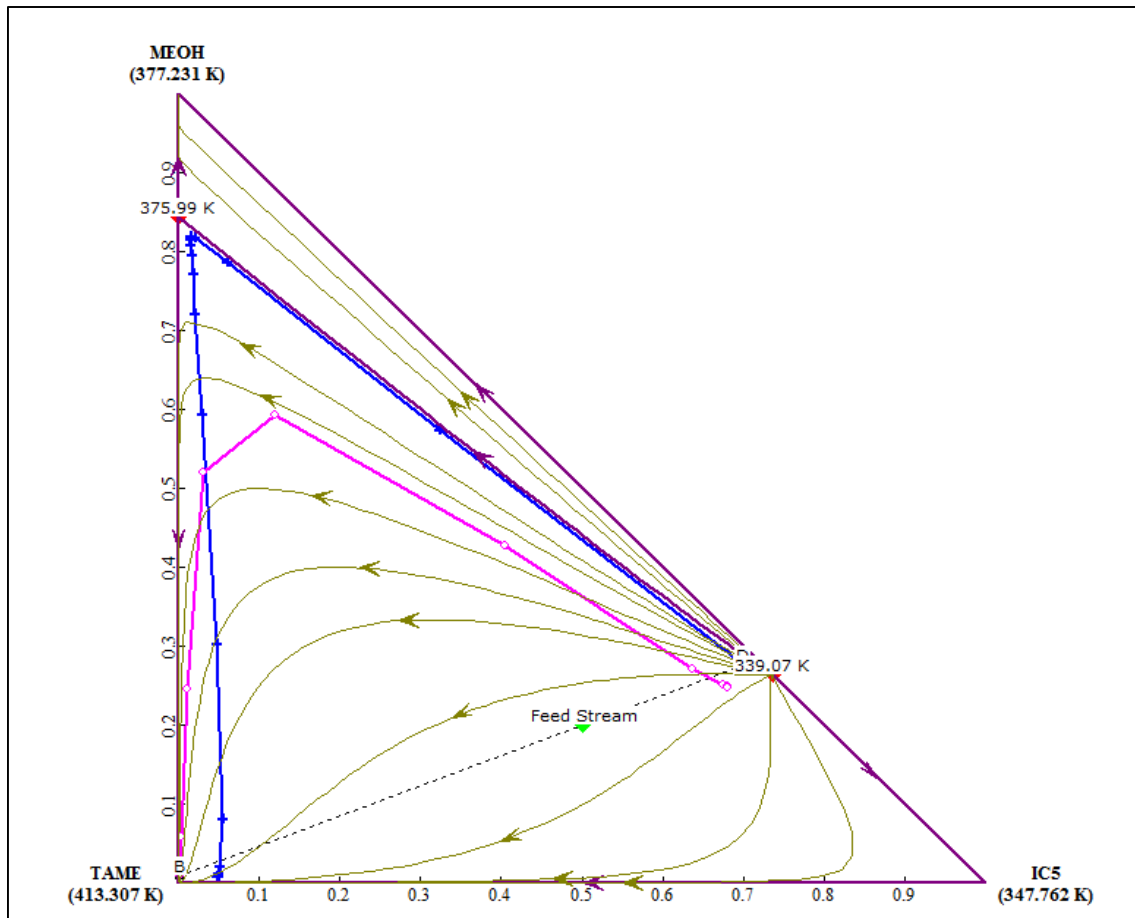


Figura 25.- Diagrama ternario - Diseño factible con curvas residuales

Es necesario tomar en cuenta que el análisis anterior es aplicable a una columna de destilación no reactiva, que es simplemente empleada para separar una mezcla ternaria. Sin embargo, se puede inferir que añadir un exceso de metanol en la columna reactiva puede resultar en la pérdida de TAME en la parte superior. Es por esto que la columna reactiva es operada en una forma “pseudo-ordenada”. En otras palabras, suficiente metanol debe ser alimentado para la reacción más el requerido por el azeótropo iC5/MeOH.

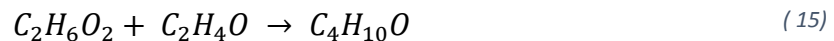
#### 1.4.3. - Modelo cinético por Ley de Potencias en la síntesis de EG.

El proceso de producción de etilenglicol está basada en dos reacciones químicas principales, las cuales serán empleadas para la simulación de los tres distintos escenarios de plantas de proceso. El óxido de etileno es térmicamente hidrolizado a Etilenglicol sin la presencia de algún catalizador.

La primera es la reacción deseada de óxido de etileno con agua para formar etilenglicol.



La segunda reacción es la reacción indeseada de etilenglicol con óxido de etileno para formar di-etilenglicol.



Las reacciones involucradas en el proceso son ambas en fase líquida, irreversibles y exotérmicas. La información respecto a la cinética de cada reacción es tomada de (Ciric, y Gu, 1994). En la cinética de reacción  $x_{EO}$ ,  $x_W$  y  $x_{EG}$  son la fracción molar de óxido de etileno, agua y etilenglicol respectivamente. La temperatura está en Kelvin y la energía de activación en cal/g-mol.

$$r_i = A_i e^{-\left(\frac{E_{a_i}}{RT}\right)} x_i x_j \quad (16)$$

$r_i$ (gmol/cm <sup>3</sup> /s)	$A_i$ (gmol/cm <sup>3</sup> /s)	$Ea_i$ (cal/gmol)
1	3.15e9	18972
2	6.3e9	18972

Tabla 3.- Parámetros cinéticos para producción de EG

En la literatura disponible para la obtención de etilenglicol mediante el proceso con zona de reacción y zona de separación (convencional), (Rangaiah, y Vinay, 2012) en su trabajo consideran únicamente la primera reacción. Se toma como base para la simulación en Aspen Plus el esquema para planta de etilenglicol de (Rangaiah, y Vinay, 2012), sin embargo, algunas modificaciones adicionales son realizadas, esto debido a que en su trabajo consideran una impráctica y costosa presión de vacío durante la mayoría del proceso. Además, de que para poder obtener resultados comparables entre los tres escenarios diferentes, es necesario establecer condiciones de operación similares.

Aspen Plus es capaz de realizar diagramas de equilibrio líquido-vapor empleando una gran cantidad de paquetes termodinámicos, gracias al banco de datos tan amplio que este posee y a que es uno de los más completos entre los simuladores de procesos utilizados actualmente. La Figura 26 muestra el diagrama  $Txy$  y la Figura 27 el diagrama  $xy$  para los componentes *Etilenglicol* y *agua* a 15 atmósferas de presión (presión de operación de la columna para proceso convencional, destilación reactiva y destilación reactiva con etapas de no equilibrio).

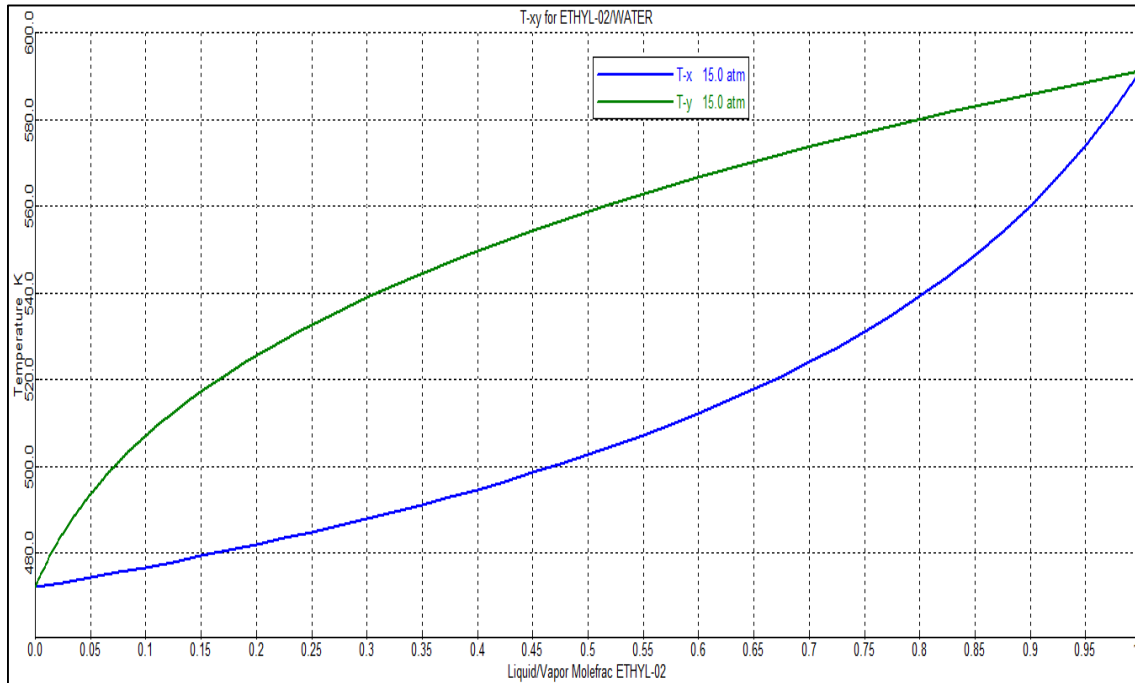


Figura 26.- Diagrama de equilibrio Txy para Etilenglicol-Agua

En el diagrama Txy de la Figura 26, se pueden observar las curvas representativas de líquido y vapor en fracción molar en el eje de las abscisas, y en la ordenada a la temperatura. La curva inferior es la línea de líquido saturado, que indica la fracción molar de Etileno en fase líquida x. La curva superior es la línea de vapor saturado, que indica la fracción molar de Etileno en fase vapor y. Trazando una línea horizontal en algún valor para la temperatura y leyendo la intersección de este trazo con las dos curvas se obtiene la composición de las dos fases (Luyben, 2006).

El diagrama xy de la Figura 27 para el sistema Etilenglicol/Agua muestra que la separación de estos dos componentes es relativamente sencilla, las líneas están lejos una de otra, esto se debe a que ambos compuestos poseen puntos de ebullición bastante diferentes, lo cual es un criterio fundamental para determinar la viabilidad de la destilación.

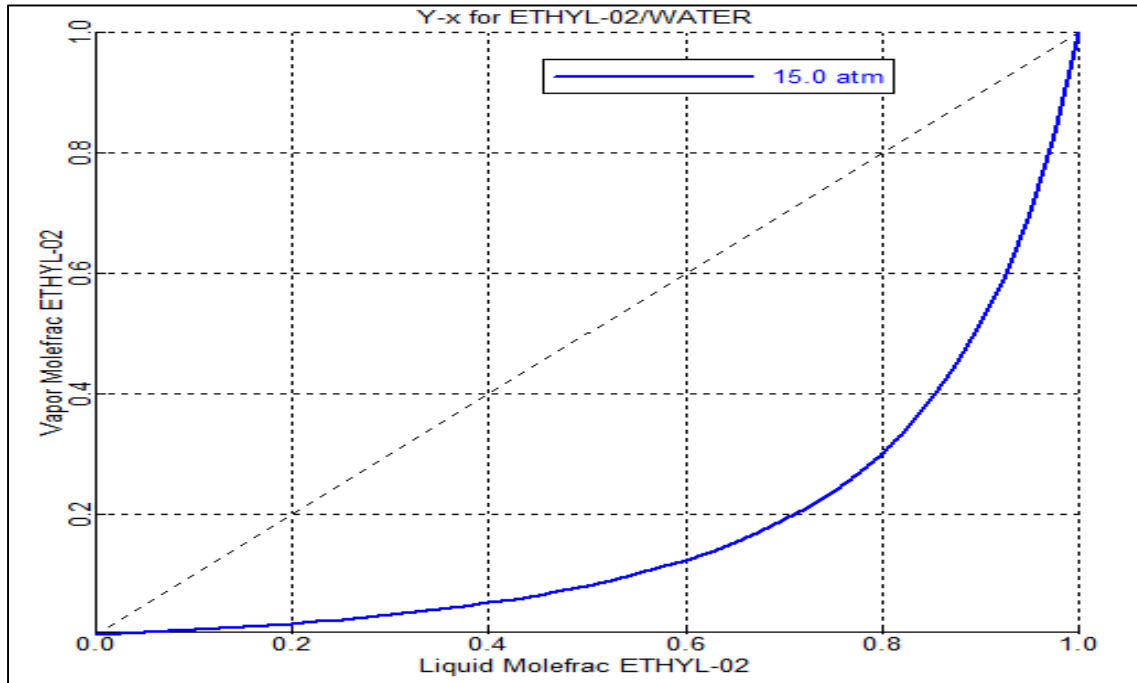


Figura 27.- Diagrama de equilibrio xy para Etilenglicol-Agua

Ambos diagramas son generados a presión constante, ya que la presión a lo largo de una columna de destilación es relativamente constante en la mayoría de las columnas (Luyben, 2006).

### 1.5.- Análisis de costos en Aspen (Process Economic Analyzer).

La operación industrial tiene como principal objetivo la obtención de ganancias económicas, lo cual es posible gracias a la transformación de materia, generando productos de alto valor a partir de materias primas que, por el contrario, tienen un valor bajo. Debido a este objetivo, la evaluación económica de los procesos se convierte en uno de los elementos más importantes al momento de diseñar una nueva planta, por lo que, una evaluación económica preliminar permite determinar si el proceso que se está evaluando es rentable y atractivo comparado con otras alternativas (Esquivel, 2007).

Hoy en día existen herramientas computacionales que permiten y facilitan llevar a cabo estimaciones económicas y que disminuyen de manera considerable el tiempo que se debe invertir para hacer las evaluaciones, dando resultados con exactitudes que llegan a  $\pm 10\%$  el valor real. Aspen Icarus Process Evaluator (IPE - Process Economic Analyzer), ChemCad, CostPlus, Economix y BioPro/SuperPro Designer, son algunas de estas herramientas computacionales. Aspen IPE es una de las más poderosas porque cuenta con la base de datos más completa, además, tiene la posibilidad de usar los reportes de simuladores de procesos como Aspen Plus, Hysys, ChemCad, Pro II y Design II para evaluar las simulaciones.

Debido a lo anterior, muchas empresas de prestigio como Dow Chemical, Petro-Canada, Bayer, DuPont, Chevron y Shell, pequeñas y medianas empresas de consultoría hacen uso de Aspen IPE (Esquivel, 2007). Es por esto que Aspen IPE será empleado para los análisis económicos de las tres diferentes plantas para cada producto principal, MTBE, TAME y EG, además, una tabla comparativa se presenta para observar que proceso es más económicamente viable: Convencional o destilación reactiva con etapas de equilibrio y no equilibrio (EQ y NEQ).

Aspen IPE necesita que se indique información adicional a la proporcionada por los reportes de simulación de Aspen Plus, más enfocados al ámbito económico del proceso, como lo son: costo de materias primas, agua de enfriamiento, salarios, vida económica del proceso, etc. A continuación se indican todos los datos necesarios para poder llevar a cabo la evaluación económica de los procesos.

#### 1.5.1.- Especificaciones para el Análisis Económico.

<b>Tasa de rendimiento</b>	<b>15%</b>
<b>Fecha de inicio</b>	Julio 2016
<b>Salario del supervisor</b>	23 dólares/h
<b>Salario de operador</b>	17 dólares/h
<b>Contingencia del proceso</b>	30%
<b>Tipo de proceso</b>	Probado, típico y de control digital
<b>Proyecto</b>	A ras de pasto
<b>Tipo de suelo</b>	Arcilla blanda
<b>Productividad</b>	50%
<b>Vida económica de la planta</b>	15 años
<b>Método de depreciación</b>	Línea recta
<b>Periodos para análisis</b>	16
<b>Valor de rescate de la planta</b>	20% del capital de inversión
<b>Capital de trabajo</b>	25%
<b>Gastos generales de la planta</b>	50%
<b>Gastos generales y administrativos</b>	8%
<b>Impuestos</b>	40%
<b>Actualización de precios</b>	7% (excepto para el capital del proyecto, que es cero)
<b>Tipo de planta</b>	Procesamiento químico
<b>Tipo de operación</b>	Continua (24 horas/día)
<b>Duración del periodo de arranque</b>	20 semanas
<b>Fluidos de proceso</b>	Líquidos y gases
<b>Materias primas</b>	Dependiente de cada proceso (MTBE, TAME y EG)
<b>Agua de enfriamiento</b>	0.00012 dólares/lb
<b>Vapor (400 psi)</b>	0.00025 dólares/lb
<b>Energía eléctrica</b>	0.08 dólares/kWh

Tabla 4.- Especificaciones para el análisis económico en Aspen IPE

## 1.6.- Análisis combinatorio para control de procesos.

Después de la identificación de las variables controladas y manipuladas, es necesario determinar la configuración de control (especificar la variable manipulada que controlara a otra), es decir, determinar la configuración de los lazos de control. Para un sistema con  $N$  variables controladas y con  $N$  variables manipuladas, existen  $N!$  configuraciones diferentes de lazos de control (Stephanopoulos, 1984).

La siguiente figura muestra las dos posibles configuraciones para lazos de control de un proceso con dos variables manipuladas y con dos variables de salida controladas. Conforme el número  $N$  incrementa, el número de configuraciones diferentes aumenta rápidamente:

*Para  $N = 3$  existen  $3! = 6$  configuraciones distintas*

*Para  $N = 4$  existen  $4! = 24$  configuraciones distintas*

*Para  $N = 5$  existen  $5! = 120$  configuraciones distintas*

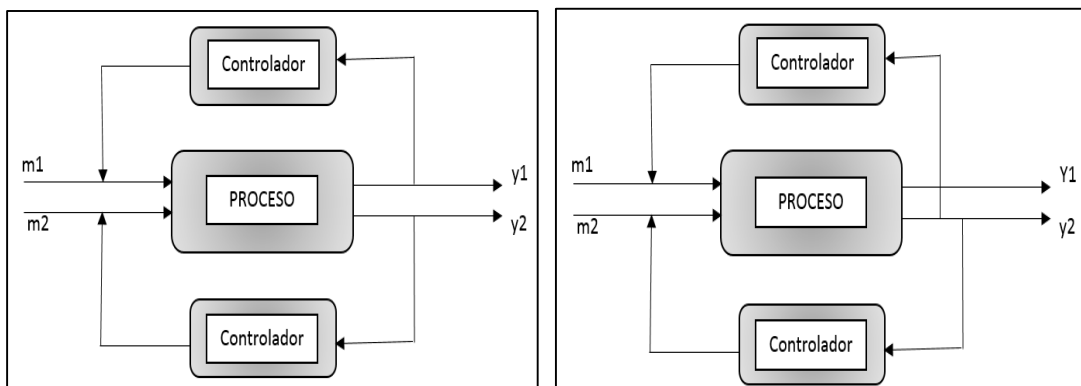


Figura 28.- Configuraciones alternativas de lazo de control

La selección de la “mejor” configuración entre todas las posibles combinaciones es un problema bastante difícil. Distintos criterios pueden ser empleados para seleccionar los “mejores” acoplamientos para las variables controladas y manipuladas, algunas son:

- Escoger la variable manipulada que tenga un efecto directo y rápido sobre la variable controlada.
- Escoger los acoplamientos de tal forma que exista poco tiempo muerto entre cada variable manipulada y controlada.
- Seleccionar los acoplamientos de tal forma que la interacción de los lazos de control sea mínima.

Como un ejemplo que muestre la elección de la configuración de los lazos de control, consideremos un tanque de evaporación mostrado en la siguiente figura. La alimentación está compuesta de N componentes con fracciones molares  $z_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ .

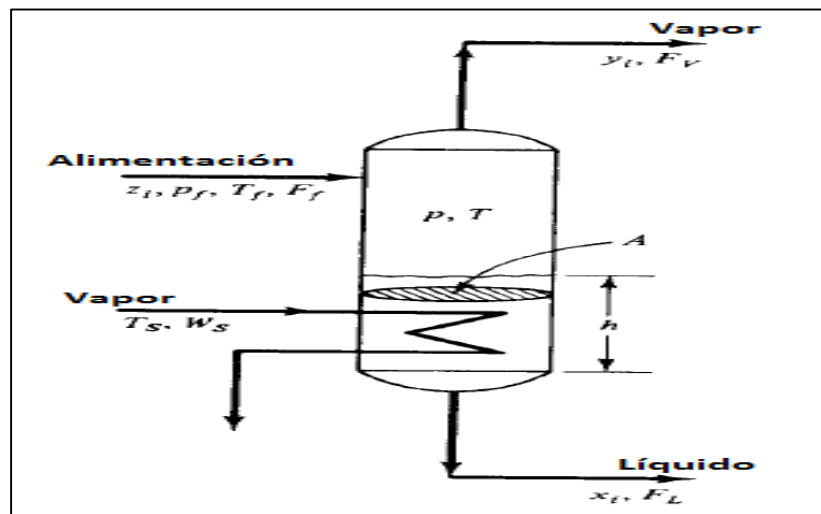


Figura 29.-Diagrama de un tanque de evaporación

Conforme la alimentación líquida es evaporada de una presión alta ( $p_i$ ) a una presión baja (presión del tanque), se produce vapor y alcanza el equilibrio con el líquido remanente. Fluye vapor a través de un serpentín que provee el calor necesario para mantener la temperatura deseada dentro del tanque a pesar de cualquier variación en las condiciones de operación, ya que los requerimientos para alcanzar la separación deseada dictan que la temperatura y presión deben permanecer constantes. Por otra parte, para una producción constante, la velocidad de flujo de la alimentación líquida debe mantenerse en su valor deseado. Finalmente, el nivel de líquido debe mantenerse dentro de ciertos límites. Por lo anterior, la temperatura ( $T$ ), presión ( $p$ ), flujo alimentado ( $F_f$ ) y nivel ( $h$ ), son las variables controladas. Claramente para la selección de las variables a manipular, podemos determinar que son; el flujo alimentado ( $F_f$ ), flujo de vapor ( $F_v$ ), flujo de líquido ( $FL$ ) y el vapor alimentado ( $Ws$ ).

Una vez que se han identificado las variables, es necesario determinar cómo éstas variables están interconectadas para formar lazos de control. Un desarrollo factorial con 4 variables controladas, generan 24 ( $= 4!$ ) configuraciones posibles de lazos de control entre las variables manipuladas y controladas. La siguiente tabla muestra las posibles configuraciones para el ejemplo del tanque evaporador.

<b>Número de configuración</b>	<b>Control de <math>F_f</math> por:</b>	<b>Control de <math>p</math> por:</b>	<b>Control de <math>T</math> por:</b>	<b>Control del <math>h</math> por:</b>
<b>1</b>	$F_f$	$FL$	$Ws$	$F_v$
<b>2</b>	$F_f$	$FL$	$F_v$	$Ws$
<b>3</b>	$F_f$	$F_v$	$Ws$	$FL$
<b>4</b>	$F_f$	$F_v$	$FL$	$Ws$
<b>5</b>	$F_f$	$Ws$	$FL$	$F_v$
<b>6</b>	$F_f$	$Ws$	$F_v$	$FL$
<b>7</b>	$FL$	$F_f$	$Ws$	$F_v$
<b>8</b>	$FL$	$F_f$	$F_v$	$Ws$
<b>9</b>	$FL$	$F_v$	$Ws$	$F_f$
<b>10</b>	$FL$	$F_v$	$F_f$	$Ws$
<b>11</b>	$FL$	$Ws$	$F_f$	$F_v$
<b>12</b>	$FL$	$Ws$	$F_v$	$F_f$

<b>13</b>	<i>Fv</i>	<i>Ff</i>	<i>FL</i>	<i>Ws</i>
<b>14</b>	<i>Fv</i>	<i>Ff</i>	<i>Ws</i>	<i>FL</i>
<b>15</b>	<i>Fv</i>	<i>Ws</i>	<i>Ff</i>	<i>FL</i>
<b>16</b>	<i>Fv</i>	<i>Ws</i>	<i>FL</i>	<i>Ff</i>
<b>17</b>	<i>Fv</i>	<i>FL</i>	<i>Ff</i>	<i>Ws</i>
<b>18</b>	<i>Fv</i>	<i>FL</i>	<i>Ws</i>	<i>Ff</i>
<b>19</b>	<i>Ws</i>	<i>Ff</i>	<i>FL</i>	<i>Fv</i>
<b>20</b>	<i>Ws</i>	<i>Ff</i>	<i>Fv</i>	<i>FL</i>
<b>21</b>	<i>Ws</i>	<i>FL</i>	<i>Ff</i>	<i>Fv</i>
<b>22</b>	<i>Ws</i>	<i>FL</i>	<i>Fv</i>	<i>Ff</i>
<b>23</b>	<i>Ws</i>	<i>Fv</i>	<i>Ff</i>	<i>FL</i>
<b>24</b>	<i>Ws</i>	<i>Fv</i>	<i>FL</i>	<i>Ff</i>

Tabla 5.- Alternativas de configuración de lazos de control

La elección de la “mejor” configuración entre las 24 posibles, puede ser encontrada empleando los siguientes argumentos:

- Los efectos de *Ff*, *Fv*, y *FL*, en la temperatura (*T*) son indirectos y algo lentos, mientras que el flujo de vapor (*Ws*), es directo y rápido. De esto que, de las 24 configuraciones posibles de la Tabla 5, sólo los números 1, 3, 7, 9, 14, y 18, prometen un control de temperatura eficiente.
- Los efectos de *Ws* y *FL* sobre la presión (*p*) son también indirectos y lentos. Por esto, *Ff* y *Fv* son mejores variables manipuladas para controlar la presión, y tomando en cuenta las configuraciones anteriores, sólo las 3, 7, 9 y 14, son configuraciones válidas.
- De éstas configuraciones resultantes, sólo la configuración 3 parece ser la mejor, porque emplea a *FL*, para alcanzar un control rápido del nivel en el tanque, además de que la alimentación (*Ff*) se manipula directamente y utiliza a *Fv* para una regulación rápida y directa de la presión (*p*). La instalación es esta configuración de lazos de control se muestra en la siguiente figura:

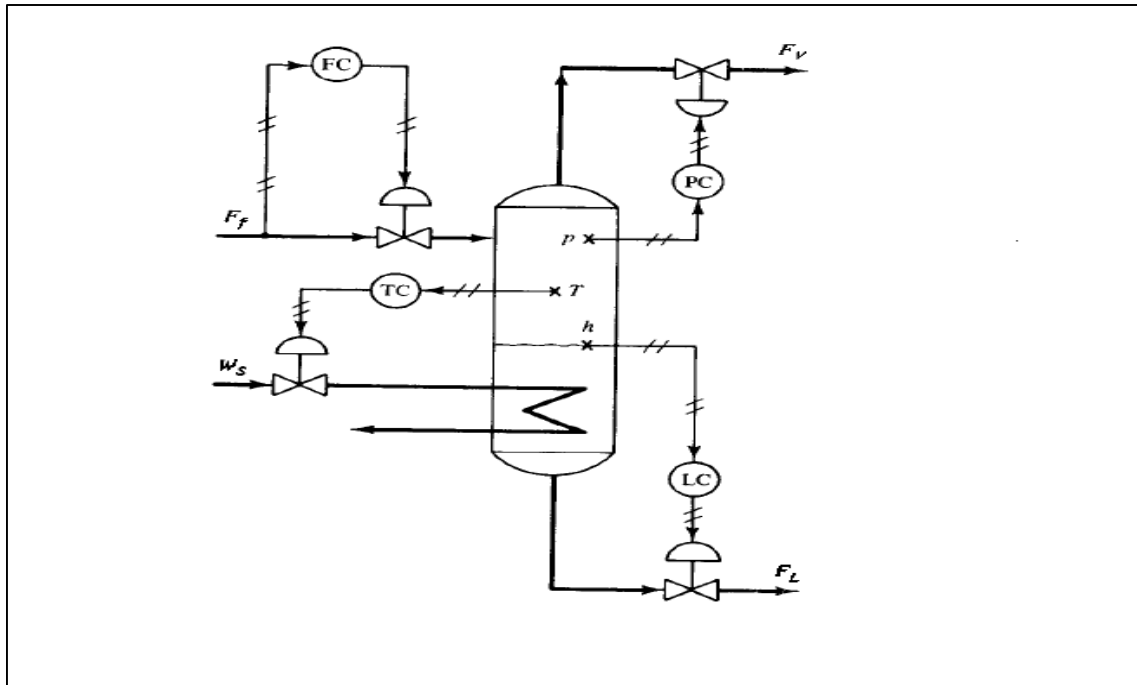


Figura 30.- Tanque evaporador con lazos de control

### 1.7.- Técnicas de sintonización de controladores PID.

Sintonizar un sistema de control realimentado significa establecer los parámetros en el controlador para lograr implementar un control robusto en el proceso. La palabra “robusto”, es usualmente definida como la estabilidad de las variables de proceso ante perturbaciones que pudieran presentarse. El objetivo de los controladores es la de proporcionar una rápida respuesta ante los cambios de SetPoint, en función del tiempo, de las variables de proceso, manteniendo la calidad de los productos principales (Villajulca, 2011).

La primera etapa de todo procedimiento de sintonización consiste en obtener la información estática y dinámica del lazo. Existen diversos métodos para ajustar los parámetros de controladores PID, pero todos se pueden clasificar dentro de dos tipos:

- Métodos en Lazo cerrado: La información de las características del lazo se obtienen a partir de una prueba que usualmente emplea un controlador con acción proporcional pura.
- Métodos a Lazo abierto: Las características estáticas y dinámicas de la planta se obtienen de un ensayo que es generalmente la respuesta a un cambio escalón (Curva de respuesta).

El control automático tiene sus bases principalmente en el concepto de la realimentación, la cual, se puede entender como un operador, que en función de la salida deseada de la planta, y la salida real medida, proporciona la acción de control a aplicar sobre el sistema. Si bien existen muchos tipos de control basados en el concepto de la realimentación, el control PID (Proporcional, Integral, Derivativo), es el de mayor presencia en la industria de procesos. Éste tipo de control consiste en obtener la acción de control como la suma de tres términos: término proporcional, término integral y término derivativo (Álamo, s.f.).

$$u(t) = \underbrace{K_p}_{\mathbf{P}} e(t) + \underbrace{\frac{K_p}{T_i}}_{\mathbf{I}} \int_0^t e(t) dt + \underbrace{K_p T_d}_{\mathbf{D}} \frac{de(t)}{dt} \quad (17)$$

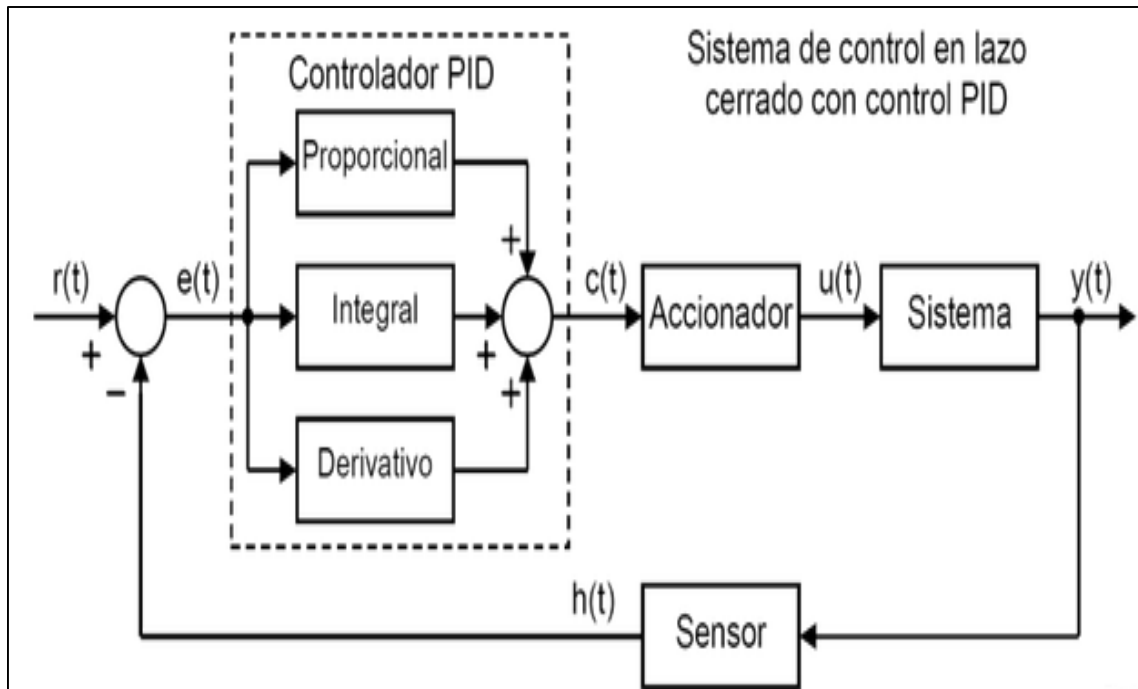


Figura 31.- Esquema básico de un controlador PID a lazo cerrado.

La señal  $r(t)$  se denomina de referencia, e indica el estado que se desea conseguir en la salida del sistema  $y(t)$ . En la Figura 31, se muestra que la entrada al controlador PID es la señal de error  $e(t)$ . La señal de error le muestra al controlador la diferencia que existe entre el estado de referencia y el estado real del sistema medido por el sensor  $h(t)$ . Si la señal de error es grande, significa que el estado del sistema se encuentra lejos del estado de referencia deseado. Si por el contrario el error es pequeño, significa que el sistema está cerca (o a alcanzado) del estado deseado.

Acción de control proporcional.- Esta acción de control es proporcional a la señal de error  $e(t)$ , multiplicando la señal de error por una constante  $K_p$ . La acción de control proporcional intenta minimizar el error del sistema, es decir, cuando el error es grande, la acción de control es grande y tiende a minimizar el error. Es evidente que por ser una acción proporcional al error, si reducimos el valor de la acción proporcional repercutirá negativamente al sistema, ya que se reduce la velocidad

de respuesta y aumentará su error de forma permanente. Por otra parte, aumentar el valor de la acción proporcional  $K_p$ , aumenta la respuesta del sistema, disminuye el error de forma permanente y aumenta la inestabilidad del sistema. Ésta última característica es indeseada y se debe intentar minimizar. Existe un punto en el que se consigue la rapidez suficiente y reducción del error, sin que el sistema sea demasiado inestable. La siguiente figura muestra la respuesta de un sistema de control, variando el valor de la acción proporcional en forma ascendente (Pardo, 2016).

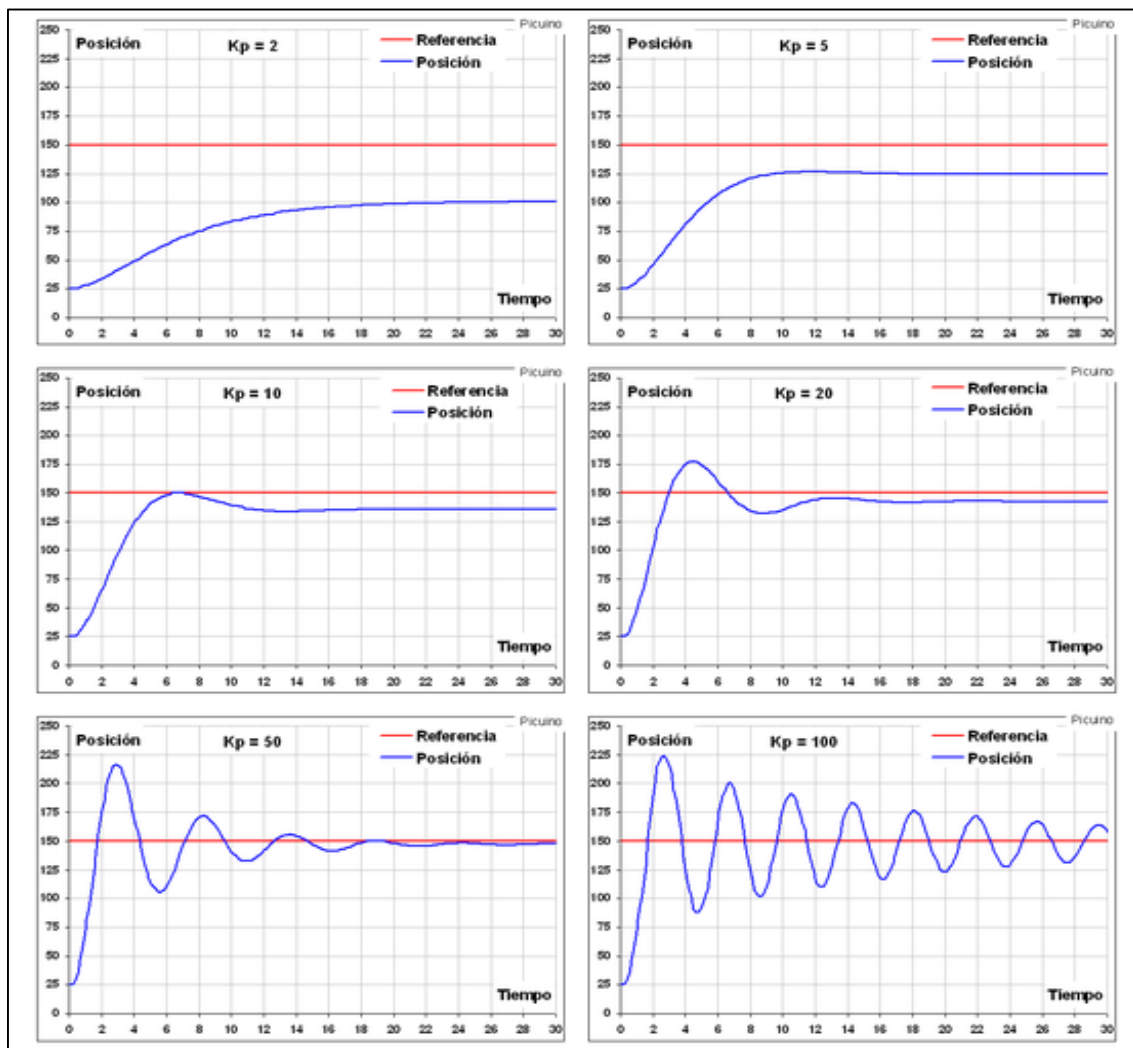


Figura 32.- Aumento progresivo de la acción proporcional – Controlador P.

A partir de la Figura 32, se observa que con una ganancia proporcional  $K_p=20$  el sistema es rápido, tardando aproximadamente 12 segundos en establecer su posición permanente, disminuyendo el error. Aumentar el valor de la ganancia consigue disminuir todavía más el error, pero la velocidad de respuesta no aumenta porque el sistema se vuelve inestable. Si se desea mejorar esta respuesta hay que incorporar otro tipo de control, en este punto es cuando el control derivativo puede ayudar a mejorar la respuesta del sistema.

Acción de control Derivativa.- Esta acción de control es proporcional a la derivada de la señal de error  $e(t)$ , esta derivada es otra forma de llamar a la velocidad del error. En la Figura 32 se observa que cuando se incrementa progresivamente el valor de la ganancia proporcional, existe un sobrepulso cada vez mayor (la señal de posición supera el valor de referencia). Esto es debido a que cuando el sistema se mueve a una velocidad alta tratando de alcanzar el valor de referencia, el sistema pasará de largo debido a la inercia, provocando un sobrepulso y oscilaciones en torno al valor de referencia.

Para conseguir evitar el problema del sobrepulso, el controlador debe reconocer la velocidad a la que el sistema se acerca a la referencia para poder frenar con anticipación a medida que se acerca a la referencia deseada y evitar que se sobrepase. El incrementar la constante de control derivativa  $K_d$ , aumenta la estabilidad del sistema controlado, disminuye un poco la velocidad del sistema y mantiene igual el error, además, uno de los efectos negativos que presenta el incrementar la señal derivativa es que amplifica las señales que varían rápidamente, como lo es el ruido, mismo que se ve amplificado en el accionamiento de la planta.

En la siguiente figura se muestra el efecto sobre la posición al aumentar progresivamente la acción de control derivativa.

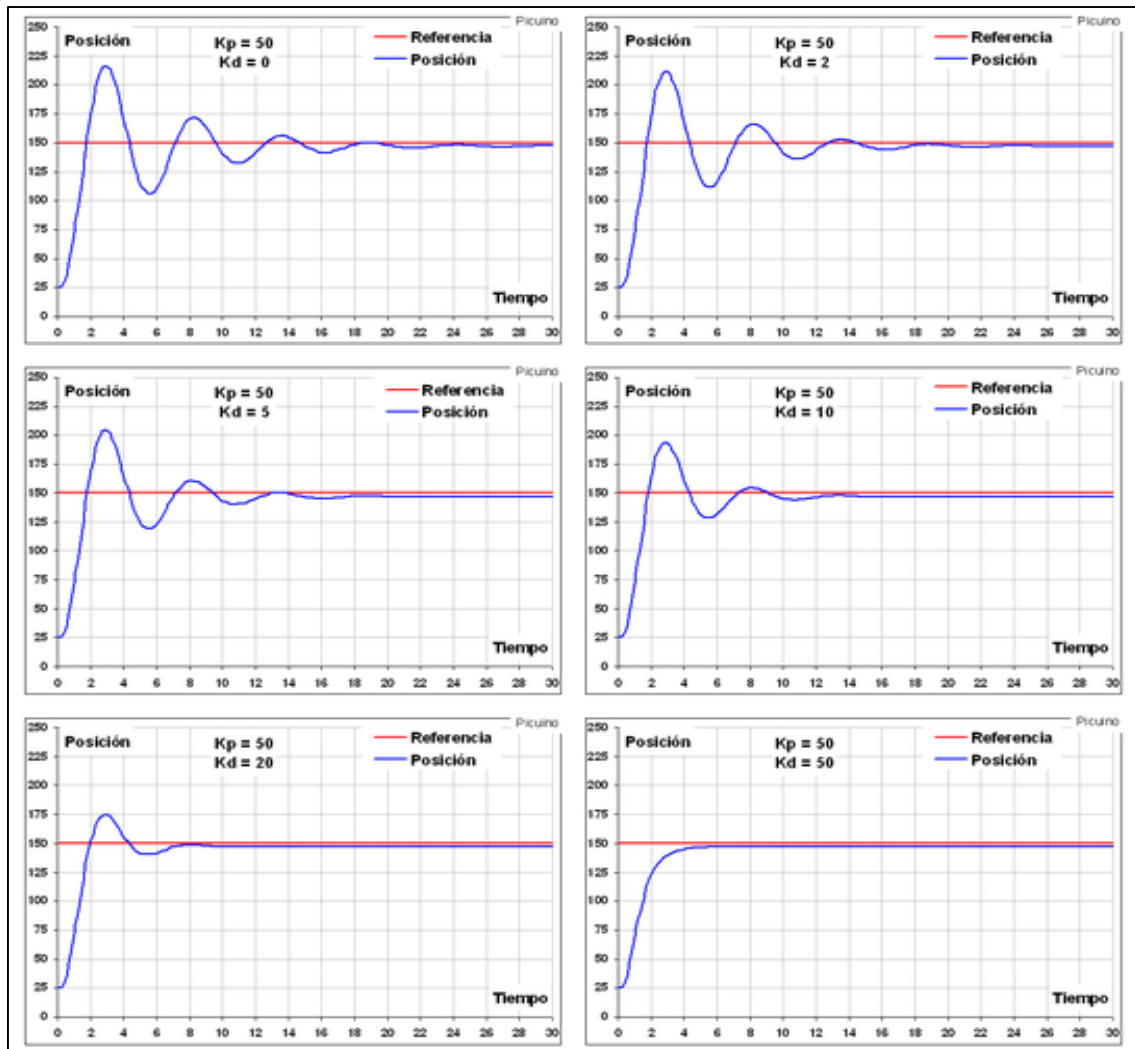


Figura 33. Aumento progresivo de la acción derivativa – Controlador PD.

Para poder reducir el ruido generado por el incremento de la señal derivativa, se debe implementar un filtro antes de aplicar el término derivativo. Este filtro reduce la capacidad de la acción derivativa, por lo que es deseable reducir el ruido por otros medios antes de recurrir a un filtro, además de que necesario disminuir aún más el error, en este punto es cuando la tercera acción del controlador PID se emplea, la acción integral.

Acción de control Integral.- Esta acción de control calcula la integral de la señal de error  $e(t)$ , la cual puede verse como la suma o acumulación de la señal de error. A medida que el tiempo aumenta, pequeños errores se van sumando para hacer que la acción integral sea cada vez mayor, consiguiendo disminuir el error. Aumentar la acción integral  $K_i$  disminuye el error del sistema, aumenta la velocidad, pero la mayor desventaja es que añade inercia al sistema, aumentando la inestabilidad.

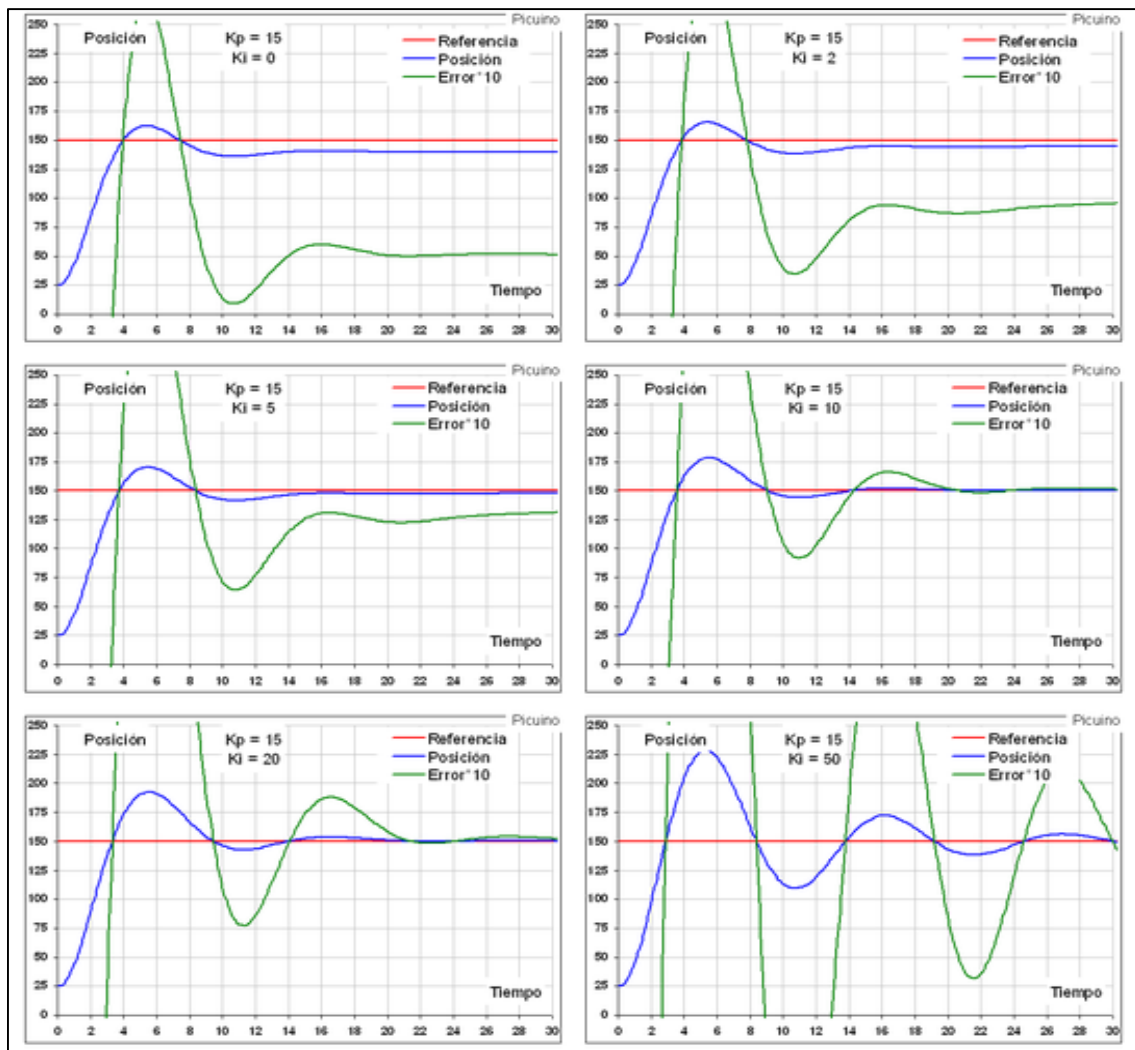


Figura 34.- Aumento progresivo de la acción integral – Controlador PI.

En la figura anterior se añade una señal de error ampliada, de color verde, para apreciar mejor la disminución del error a medida que se incrementa la acción integral. Es visible además, que la inestabilidad del sistema aumenta con la acción integral  $K_i$ , por lo que es deseable combinar el control integral con el control derivativo, disminuyendo las oscilaciones del sistema (Pardo, 2016).

En cuanto al método de Curva de reacción, la respuesta de la planta al aplicar un escalón unitario debe tener el aspecto de una curva en forma de S, ya que si se presenta el caso en que la curva no tenga esta forma, entonces no será posible aplicar el método.

La respuesta al escalón se obtiene de forma experimental y a partir de esto, el modelo puede ser aproximado a una función de transferencia, en la cual los parámetros  $K$ ,  $T$  y  $L$  corresponden a la ganancia, constante de tiempo y retardo del proceso, éstos parámetros son identificados a partir de la respuesta en forma de S, (Departamento de Control, 2006).

$$Gp(s) = \frac{K \exp^{-Ls}}{Ts + 1} \quad (18)$$

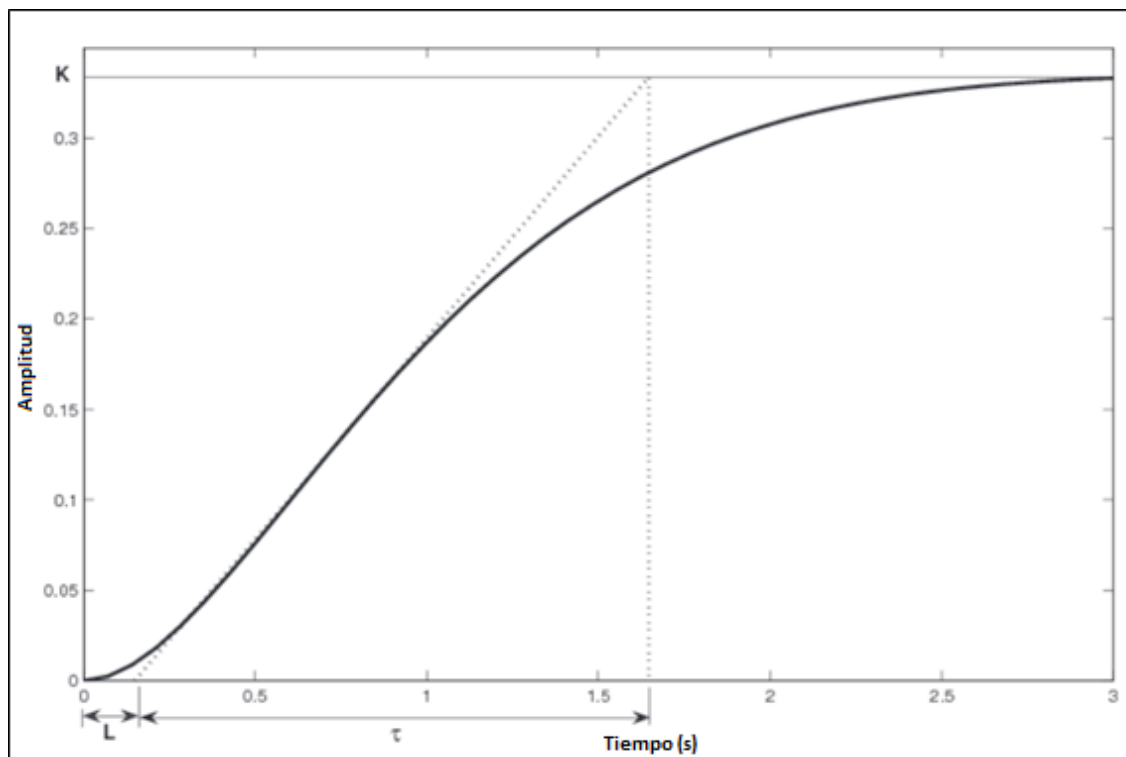


Figura 35.- Curva de respuesta en forma de S.

Una vez que se han identificado los parámetros K, T y L, se pueden fijar los parámetros del controlador empleando la siguiente Tabla:

Tipo de Controlador	$K_p$	$T_i$	$T_d$
<b>P</b>	$\frac{T}{L}$	$\infty$	0
<b>PI</b>	$0.9\frac{T}{L}$	$\frac{L}{0.3}$	0
<b>PID</b>	$1.2L$	$2L$	$0.5L$

Tabla 6.- Parámetros de controlador PID - Curva de reacción

### 1.7.1.- Sintonización de parámetros en Aspen Dynamics

El programa Aspen Dynamics cuenta con muchas herramientas que son útiles cuando se desean seleccionar diferentes estrategias de control e implementarlas para comprobar la eficiencia de las mismas. Algunas de las herramientas que sobresalen son las siguientes (Navas, s.f.):

- Creación de gráficos y tablas con datos de cualquiera de las variables propias de cada bloque (equipo de proceso), y de las corrientes de entrada y salida de los equipos en función del tiempo de simulación. Estas características permiten la obtención de información necesaria para conocer el comportamiento dinámico de la planta, con o sin lazos de control.
- Permite realizar pruebas (test) para conocer los parámetros de los controladores, ganancia, tiempo integral y derivativo. Para esto, es necesario ingresar al controlador PID y seleccionar la pestaña "Tuning", e indicar si el control es en lazo abierto o cerrado.
- Facilita la sintonización de los controladores (P, PI o PID) por cualquiera de las reglas disponibles en lazo abierto (IMC, Ziegler-Nichols, Cohen-Coon, IAE, etc.). En lazo cerrado los controladores (PI) se pueden sintonizar por las reglas Tyreus-Luyben o Ziegler-Nichols, en este caso es necesario permitir que el programa realice al menos diez oscilaciones (ciclos) antes de poder finalizar el test.

En el control de columnas de destilación reactiva y convencional se emplean sistemas de control a lazo cerrado y empleando cualquiera de las dos técnicas; Tyreus-Luyben o "Ziegler-Nichols" para el cálculo de los parámetros de los

controladores PID. Es importante señalar que para evitar cálculos incorrectos en los parámetros de los controladores debido a registros anteriores por simulaciones realizadas, cada lazo de control debe sintonizarse de manera individual con una copia del archivo original de Aspen Dynamics.

#### 1.7.2.- Técnica de sintonización “Ziegler-Nichols” o de las Oscilaciones sostenidas.

El método consiste en obtener la respuesta de la señal medida ante una perturbación (cambio en el SetPoint), con controlador proporcional. Se observa la respuesta y si es amortiguada, se incrementa la ganancia hasta lograr oscilaciones sostenidas (oscilación con amplitud constante). La ganancia del controlador se denomina “Ganancia Última (Kpu)” y el periodo de la oscilación se llama “Periodo Último (Tu)”, (Cesca, Saba, Ingaramo, y Melquiades, 2016).

La siguiente tabla muestra los valores recomendados de sintonización:

<b>CONTROLADOR</b>	<b>Kp</b>	<b>Ti</b>	<b>Td</b>
<b>P</b>	$K_{pu}/2$	$\infty$	0
<b>PI</b>	$K_{pu}/2.2$	$T_u/1.2$	0
<b>PID</b>	$K_{pu}/1.7$	$T_u/2$	$T_u/8$

*Tabla 7. Reglas de sintonización PID - Ziegler-Nichols.*

De forma manual, para determinar el valor de los parámetros del controlador PID, es necesario seguir una serie de pasos, listados a continuación (Tech, 2016):

- Paso 1.- Determinar el signo de la ganancia del proceso.
- Paso 2.- Implementar un control proporcional e introducir un nuevo SetPoint.
- Paso 3.- Incrementar la ganancia proporcional hasta alcanzar oscilaciones sostenidas.
- Paso 4.- Obtener la ganancia última y periodo último,  $K_u$  y  $P_u$ .
- Paso 5.- Evaluar los parámetros de control mediante Ziegler-Nichols.

### 1.7.3.- Técnica de sintonización de “Tyreus-Luyben”

Al igual que el método anterior de Ziegler-Nichols, la técnica de Tyreus-Luyben evalúa los parámetros del controlador a partir de la Ganancia Última y Periodo Último. Esta técnica propone ajustes más flexibles que el de Ziegler-Nichols. Los valores recomendados para la sintonización se muestran en la siguiente tabla (Cesca, Saba, Ingaramo, y Melquiades, 2016):

CONTROLADOR	$K_p$	$T_i$	$T_d$
<b>PI</b>	$K_{pu}/3.2$	$T_u/0.45$	0
<b>PID</b>	$K_{pu}/2.2$	$T_u/0.45$	$T_u/6.3$

Tabla 8.- Reglas de sintonización PID - Tyreus-Luyben

De forma manual, los parámetros de los controladores se determinan de la siguiente manera (Tech, 2016):

- Pasos 1 a 4.- De la misma forma que el método de Ziegler-Nichols.
- Paso 5.- Evaluar los parámetros de control como describe Tyreus-Luyben.

## 1.8.- Marco Teórico

Desde el punto de vista de una organización de ingeniería y en función de los años de experiencia con grandes proyectos de diseño y personal de planta, grandes inversiones de capital deben ser realizadas que vayan encaminadas hacia crear nuevas, o a modernizar instalaciones. Es en la etapa de diseño de proyectos que la mayoría de las oportunidades surgen y existe flexibilidad para influenciar el control del proceso. Probablemente el más importante desarrollo en el diseño de sistemas de control de procesos desde 1950 ha sido la evolución de una cantidad sustancial de teoría y matemática, además de un gran catálogo de sistemas de estudio (Buckley, Luyben, y Shunta, 1985).

En cuanto a las estructuras de control y análisis del desempeño ante perturbaciones en el SetPoint, William L. Luyben (Luyben, 2008), propone una estructura de control que es capaz de observar el efecto que presenta el realizar perturbaciones en la corriente de alimentación a la columna de destilación reactiva mediante lazos de control sobre la temperatura en uno de los platos, relación de reflujo, presión, composición en una etapa y nivel en tanques de condensador y fondos.

En el trabajo realizado por Panda y Kannan (Panda, y Kannan, 2014), considera el estudio de simulaciones dinámicas de MTBE. Pruebas en el flujo de metanol y carga térmica en rehervidor son ejecutadas analizando la pureza de MTBE en la corriente de fondos. La destilación reactiva de MTBE a través de modelos de equilibrio y no equilibrio son comparados en el modo dinámico. Perturbaciones en alimentación y flujo en los fondos son generados en la columna y se encontró que el modelo no lineal es más sensible comparado con el modelo de equilibrio.

(Al-Harhi, 2008), realiza una revisión exhaustiva en la literatura como investigación previa en el área de tecnologías producción de MTBE, para posteriormente desarrollar un modelo matemático que simule la producción en un una columna de destilación reactiva. Ese modelo lo utiliza para estudiar el impacto de factores operacionales y diferentes parámetros de diseño realizando diversos casos de optimización.

(Kim, y Douglas, 2002), considera el estudio de cuatro diferentes diagramas de flujo de proceso en la determinación de la mejor estructura para la obtención de MTBE. Primeramente considera el proceso con un reactor convencional de una sola etapa seguido de una columna de destilación. El segundo esquema considera dos reactores convencionales seguidos por una columna de destilación. Como tercer diagrama de flujo toma en cuenta una columna de destilación reactiva combinando reacción y separación en una unidad de proceso. Por último, una combinación de un reactor convencional, seguido de una columna de destilación reactiva.

(Sneesby, 1988), diseña una planta piloto de destilación reactiva para la síntesis de ETBE a partir de etanol y una corriente de hidrocarburos disponible proveniente de una refinería local. El diseño de la planta piloto se basó en estudios realizados mediante simulación, rangos significativos de pureza de producto industrial y considerando la conversión de isobuteno. En cuanto al análisis de las variables en estado estacionario desarrolladas, diferentes escenarios fueron llevados a cabo para observar y determinar las condiciones óptimas de operación de la columna de destilación. Finalmente un sistema completo de control automático fue diseñado e instalado en la planta piloto para permitir el control preciso de las variables manipuladas.

Es evidente que los sistemas de control son un aspecto indispensable en la operación de un equipo individual y de una planta o proceso completo. Adicionalmente, existen predisposiciones en el diseño de procesos que tienen implicaciones sobre el sistema de control, las cuales muestran efectos muy pronunciados y en ocasiones no deseados sobre la dinámica del proceso, dificultando la operación correcta de la planta (Lara, 2013).

Los retos en el diseño de destilación reactiva son numerosos y emocionantes. El camino hacia la intensificación de procesos y operaciones de planta más sostenibles pueden llevar a estructuras geométricas complejas, por ejemplo, los empaques, pared dividida e intercambio de calor distribuido. Dichas estructuras requieren de nuevos modelos de comportamiento y estructuras, las cuales nos llevarán a maneras más reales de representar los fenómenos de transferencia de materia y energía. Es por esto que el software computacional se convierte en una gran herramienta que nos ayudará en este camino (Almeida, 2005).

El diseño y control de tres alternativas de proceso para la obtención de MTBE, TAME Y EG son estudiadas (Kumar, y Daoutidis, 1999), (Su, y Chang, 2000). Los tres procesos son capaces de generar un producto de alta pureza mediante el uso de las herramientas computacionales proporcionadas por Aspen Tech. Y se reproduce la estructura de control propuesta por Luyben (Luyben, 2008), para el manejo de perturbaciones generadas en la alimentación de los procesos.

## CAPÍTULO 2

### METODOLOGÍA

Basados en los trabajos realizados por (Luyben, 2002), (Rangaiah, y Vinay, 2012), (Kumar, y Daoutidis, 1999), (Luyben, 2008) y (Su, y Chang, 2000) disponibles en la literatura, son desarrolladas simulaciones en estado estacionario y dinámico de los distintos procesos de obtención de MTBE, TAME y EG, mediante los ambientes de simulación de procesos Aspen Plus V7.3 y Aspen Dynamics V7.3, además, es llevado a cabo el análisis de costos y la comparación correspondiente de cada uno de los procesos para cada producto (Convencional, destilación reactiva y destilación reactiva con etapas de no equilibrio) empleando Aspen Icarus (Aspen Process Economic Analyzer V7.3.1 – 1st QTR 2010). Todas las simulaciones en estado estacionario y dinámico son realizados en un computador HP Pavilion g4 empleando como herramienta de apoyo para gráficos, el software OriginPro 8.

Para llevar a cabo pruebas rigurosas en estado dinámico, es necesario añadir los equipos necesarios para realizar caídas de presión a lo largo del proceso, los cuales, también serán empleadas para el control de flujos de materia (*“Fully Pressure Driven”*). Existe otra forma de simular procesos en estado dinámico, donde la fuerza impulsora es el flujo de materia (*“Flow Driven”*), para este caso los equipos que generan las caídas de presión no son necesarios (Jana, 2009). En todas las simulaciones desarrolladas en este documento, el estado dinámico será simulado mediante el método riguroso impulsado por presión.

## 2.1.- Procesos de obtención de MTBE

En esta sección se muestra el uso de las herramientas proporcionadas por Aspen Tech en la simulación de la síntesis de Metil tert-butil éter (MTBE). El MTBE es de interés actual como un potenciador de octanaje para gasolinas reformuladas, y se está convirtiendo cada vez más en una manera importante de medir la contaminación del aire (Simulation Sciences, 1995). Tres esquemas de simulación de procesos de obtención de MTBE son presentadas a continuación haciendo uso del simulador Aspen Plus, los cuales incluyen en primera instancia, el proceso convencional con dos reactores, seguidos por una columna de destilación. Posteriormente como segundo proceso, se considera el empleo de una columna de destilación reactiva para la obtención de MTBE y cómo tercer proceso se considera la simulación empleando una columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio.

Es importante considerar como la principal especificación de ambos procesos, que la pureza de MTBE debe ser mayor al 98%. Además, una vez que se ha alcanzado la especificación tal especificación en la corriente de producto, se establecen lazos de control en el simulador Aspen Dynamics con la finalidad de observar el comportamiento de los tres procesos ante perturbaciones realizadas en la alimentación de las columnas de destilación.

### 2.1.1.- Proceso convencional con reacción y separación para MTBE.

La simulación fue realizada utilizando la paquetería disponible en Aspen Plus, el modelo de reactor riguroso de flujo tapón RPLUG fue utilizado para simular los reactores químicos, ya que las operaciones adiabáticas e isotérmicas pueden ser especificadas en este modelo.

Los modelos DSTWU y RADFRAC son utilizados para simular columnas de destilación y destilación reactiva. DSTWU es un modelo de columna por métodos cortos que emplean los métodos Fenske-Gilliland-Underwood, que puede calcular el número de etapas y la relación de reflujo necesarios para alcanzar la especificación de recuperación de producto.

Los resultados arrojados por el modelo DSTWU proporciona un buen punto de partida para el modelo riguroso RADFRAC, el cual es un modelo para la simulación rigurosa plato a plato de todos los tipos de operaciones de separación líquido-vapor y también destilación reactiva. El modelo RADFRAC está basado en etapas de equilibrio ideales (puede especificarse también el no equilibrio) y puede manejar reacciones químicas en los platos empleando ambos, equilibrio químico o cinética química (Kim, y Douglas, 2002).

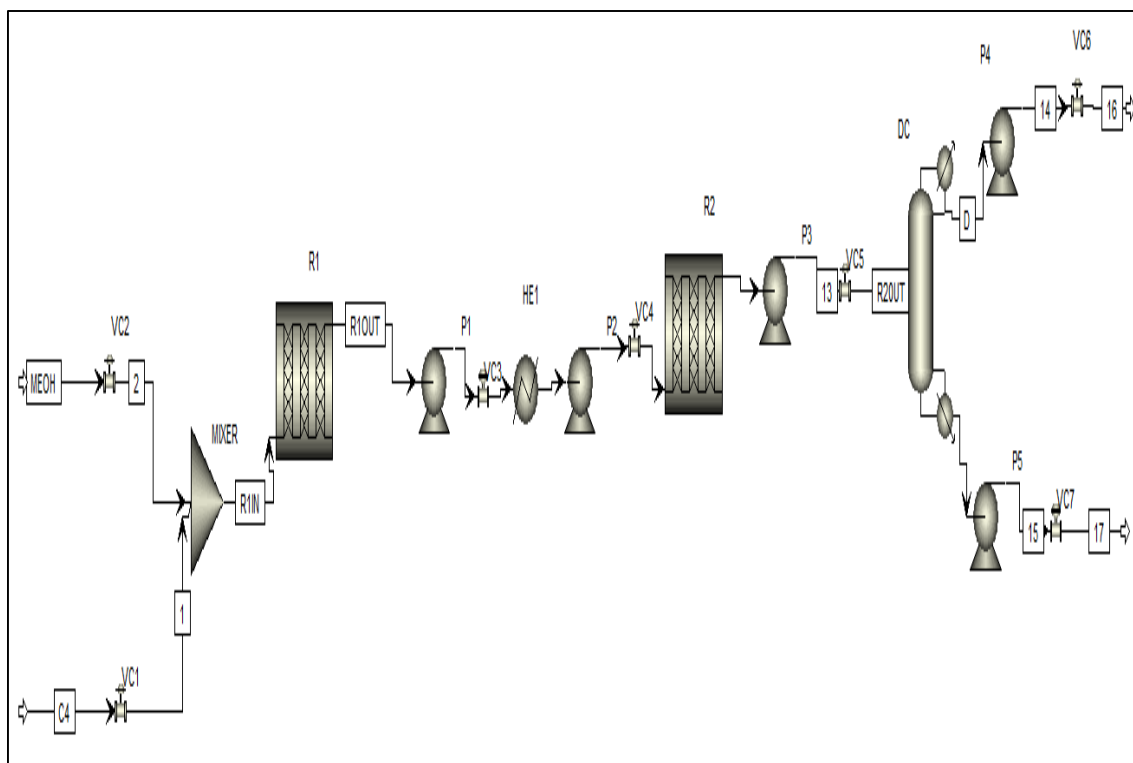


Figura 36.- Proceso convencional de obtención de MTBE

En cuanto al proceso convencional, se observa en la Figura 36 que considera dos reactores químicos, un intercambiador de calor y una columna de destilación. En la siguiente tabla se muestran las especificaciones de los equipos y corrientes para llevar a cabo la simulación en estado estacionario, en cuanto a ambos reactores, se considera que están empacados con catalizador Amberlyst 15 (Densidad de partícula 1.7 y Porosidad de la cama 0.1).

#### 2.1.1.1.- Equipos

Parámetro	Valor	Unidades
<b>R1 - Isotérmico</b>		
Caída de Presión	0.5	Atm
Longitud	14.37	M
Diámetro	7.18	M

<b>R2 - Adiabático</b>		
Caída de Presión	0.5	atm
Longitud	14.78	m
Diámetro	7.39	m
<b>Columna de destilación</b>		
Número total de etapas	28	-
Etapas de alimentación	11	-
Presión	11	atm
Flujo de fondos	510	Kmol/h
Condensador	Total	-
Relación de reflujo	0.48	-
<b>Intercambiador de Calor</b>		
Temperatura	290	K
Caída de Presión	0.5	atm
<b>Corrientes</b>		
<b>MeOH</b>		
Temperatura	320	K
Presión	15	atm
Flujo total	768	Kmol/h
Fracción mol Metanol	1	-
<b>C4</b>		
Temperatura	350	K
Presión	15	atm
Flujo total	1976	Kmol/h
Fracción mol de N-Buteno (N-Bute)	0.64	-
Fracción mol de Isobutileno (IB)	0.36	-

Tabla 9.- Especificaciones del proceso convencional - MTBE

#### 2.1.1.2.- Estructura y lazos de control

Los modelos de reactor RPLUG isotérmicos y adiabáticos no pueden ser simulados en estado dinámico con Aspen Dynamics, por esto, la estructura de control para el

proceso convencional se basa en el estudio de la columna de destilación. Antes de ser exportada al ambiente dinámico, es necesario especificar los datos correspondientes al diámetro y longitud de los tanques condensador de reflujo (*“Reflux drum”*) y tanque de fondos (*“Sump”*), diámetro de la columna en la pestaña *“Hydraulics”* de Aspen Plus, caídas de presión en equipos, y además, la presión de las corrientes debe ser la misma que la presión del plato en que se alimenta.

La estructura de control seleccionada se basa en la propuesta por Luyben (Luyben, 2008) y (Luyben, 2006), los cuales han sido aplicados de manera exitosa en el control de columnas de destilación convencional y reactiva.

- En la corriente de alimentación, el flujo es controlado.
- La temperatura de la etapa 12 es controlada, mediante la manipulación de la carga térmica en el rehervidor.
- El nivel en el tanque de fondos y de reflujo es controlado mediante la manipulación de sus respectivos flujos.
- La presión es controlada manipulando el calor removido en el condensador.

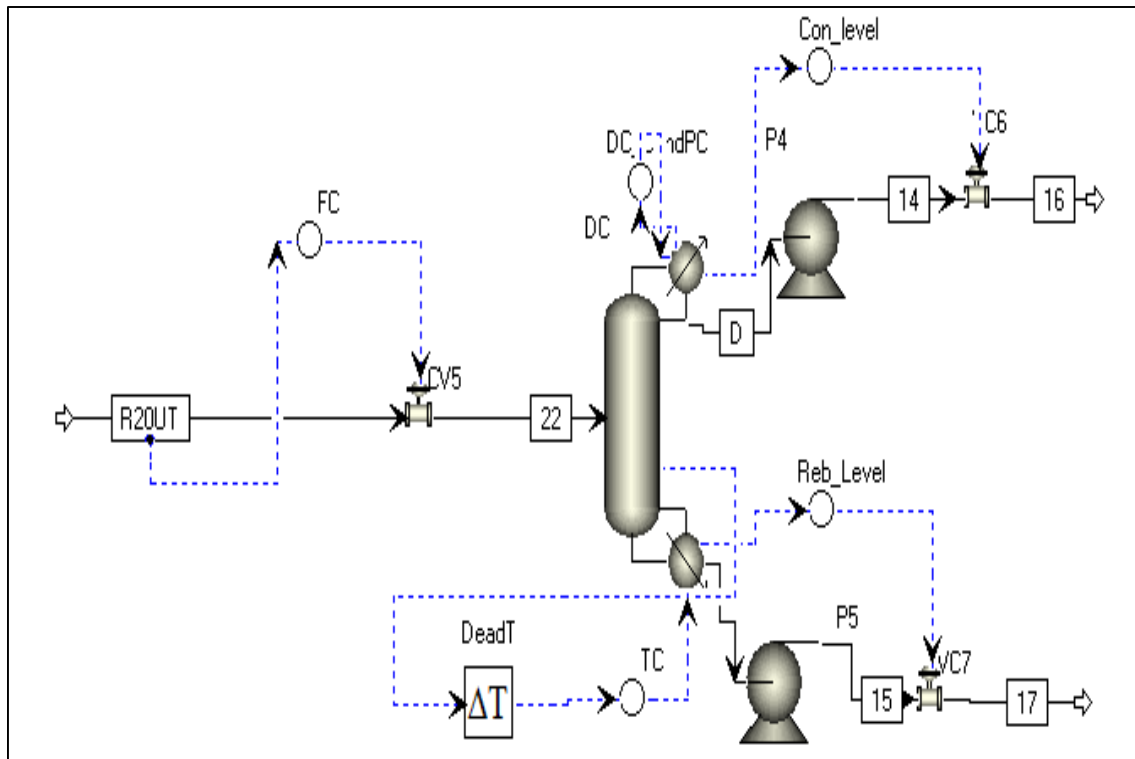


Figura 37.- Estructura de control - Destilación convencional -MTBE

En la Figura 37 se muestra la estructura de control para la columna de destilación en el proceso convencional empleando el ambiente gráfico de Aspen Dynamics. En la siguiente tabla se muestran las especificaciones para cada uno de los controladores involucrados en el proceso, donde, los parámetros del controlador de temperatura fueron obtenidos mediante una prueba de realimentación a lazo cerrado empleando la técnica de “Ziegler-Nichols”. Los controladores de nivel son únicamente proporcionales con ganancia de 10 (Flores, 2014).

A continuación se muestran los valores obtenidos de los parámetros después de las pruebas de sintonización.

CONTROLADOR - TIPO	PARÁMETRO	VALOR	UNIDADES
FC – (PI)	SetPoint	2095.42	Kmol/h

	Señal de salida	50	%
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	5	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TC etapa 12 (PI)</b>	SetPoint	396.7	K
	Señal de salida	2.137E7	W
	Ganancia	4.616	
	Tiempo Integral	5	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en rehervidor	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>Reb_Level – (P)</b>	SetPoint	4.18	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	10	
	Tiempo Integral	9999	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>Con_Level – (P)</b>	SetPoint	3.74	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	10	
	Tiempo Integral	9999	Min
	Tiempo derivativo	0	Min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>DC_CondPC – (PI)</b>	SetPoint	11	bar
	Señal de salida	- 1.292E7	W
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	12	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en condensador	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>DeadT</b>	Tiempo muerto	1	min

Tabla 10.- Controladores – Proceso convencional.

### 2.1.1.3.- Costos – Proceso Convencional.

El software Aspen IPE (Process Economic Analyzer), tiene la capacidad de emplear los reportes generados por Aspen Plus. En este punto es importante remarcar que para obtener detalles más precisos acerca de los costos de equipos, éstos deberán estar debidamente dimensionados para su exportación al ambiente dinámico.

En base a los resultados obtenidos por la simulación en estado estacionario del proceso convencional para la producción de MTBE, la estimación de costos se realiza con las especificaciones de la Tabla 4, considerando los siguientes precios (en dólares americanos) de materia prima (C4; Isobutileno y N-Buteno) y producto principal (MTBE):

$$C4 = 0.07416 \text{ \$/lb}$$

$$\text{MeOH} = 0.0448 \text{ \$/lb}$$

$$\text{MTBE} = 0.8036 \text{ \$/lb}$$

Una vez cargada la información del simulador Aspen Plus en Aspen IPE, se obtiene el siguiente DFP:

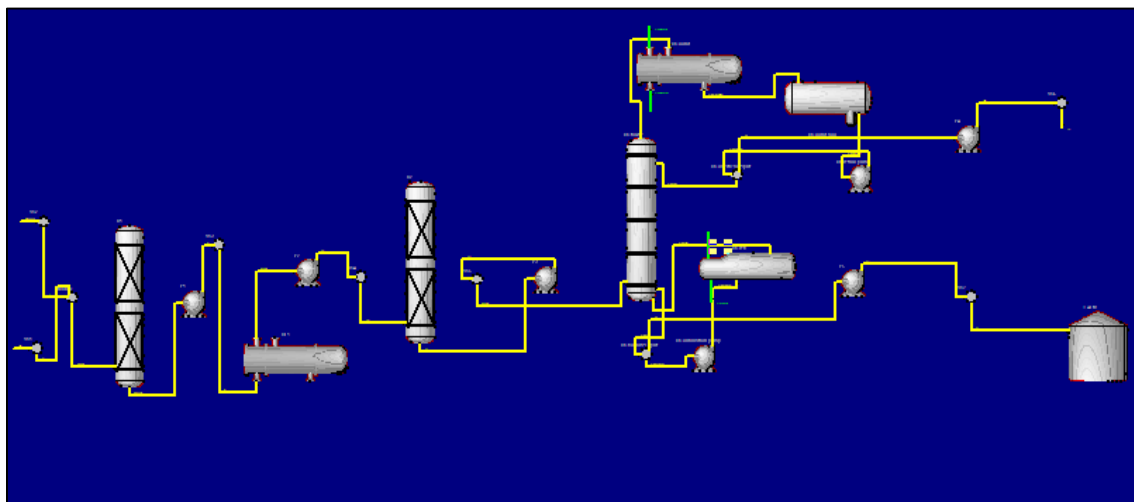


Figura 38.- DFP - Proceso convencional de MTBE - Aspen IPE

La única unidad adicional que es necesario agregar en cada proceso, es el correspondiente al tanque de almacenamiento de producto principal. Las corrientes secundarias no requieren tal unidad, porque se considera que pueden ser dirigidas a partes posteriores de la planta, por ejemplo, unidades de tratamiento de aguas residuales.

En el Capítulo 3 se analizan y comparan los resultados obtenidos en Aspen IPE, de los tres procesos de obtención de MTE (Convencional, destilación reactiva y destilación reactiva con etapas de no equilibrio).

#### 2.1.2.- Destilación reactiva para MTBE

El proceso de obtención de MTBE mediante destilación reactiva fue patentado décadas atrás, y el proceso ha sido empleado ampliamente en la industria petrolera, este proceso es probablemente el de mayor aplicación en términos de destilación reactiva debido al número de columnas instaladas alrededor del mundo y su capacidad de producción (Luyben, 2008).

El componente pesado es MTBE, el cual abandona la columna reactiva en la parte de fondos, y el componente ligero N-Buteno, abandona la columna por la parte superior, ya que actúa como inerte y no interviene en la reacción.

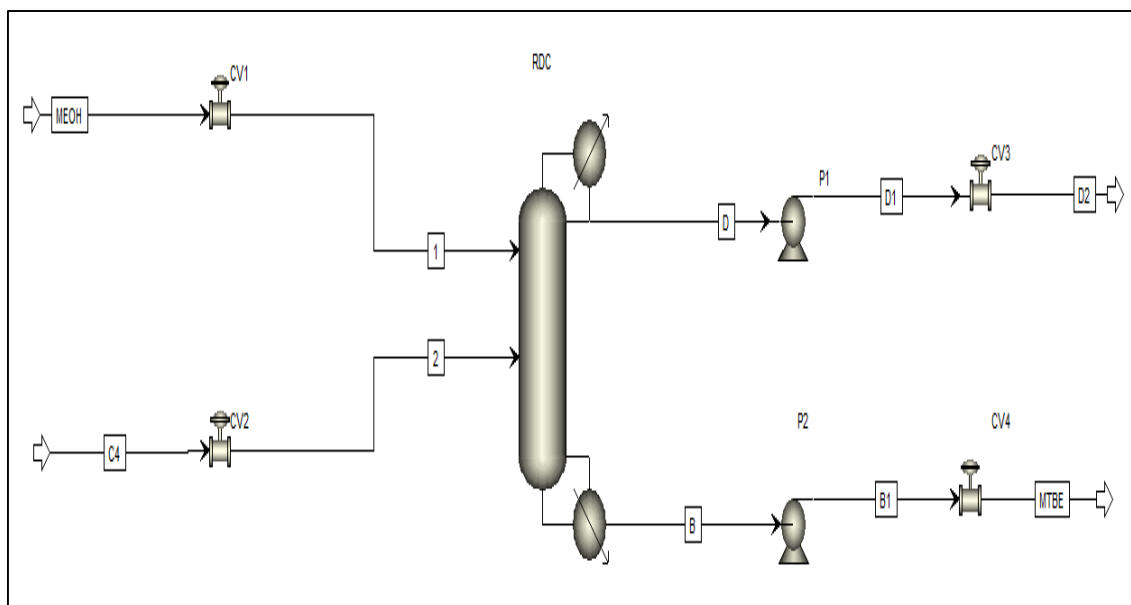


Figura 39.- DFP - Destilación reactiva - MTBE

En la Figura 39 se muestra el DFP en el ambiente de Aspen Plus, es evidente que es un proceso más simple en cuanto a estructura, en comparación con el DFP correspondiente al proceso convencional de la Figura 36. Se nota una disminución en cuanto al número de equipos necesarios, lo cual en concepto, disminuirá los costos de adquisición de equipos. A continuación se muestra en la Tabla 11 las especificaciones de los equipos y corrientes necesarias para llevar a cabo la simulación en estado estacionario con Aspen Plus.

#### 2.1.2.1.- Equipos

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Columna de destilación reactiva.</b>		
Número total de etapas	17	-
Etapas reactivas	4 – 10	-
Presión	11	bar
Relación de reflujo	7	-

Etapa de alimentación	10	
<b>Corrientes</b>		
<b>Corriente de Metanol (MeOH)</b>		
Flujo de alimentación	768	kmol/h
Metanol (fracción molar)	1	-
Temperatura	320	K
Presión	15	bar
Etapa de alimentación	10	-
<b>Corriente de Butenos</b>		
Flujo de alimentación	1976	kmol/h
Isobutileno (fracción molar)	0.36	-
1-Buteno (fracción molar)	0.64	-
Presión	15	bar

Tabla 11.- Especificaciones del proceso destilación reactiva - MTBE

#### 2.1.2.2.- Estructura y lazos de control.

La destilación reactiva, por su característica principal de llevar a cabo la reacción y separación en un mismo recipiente físico, presenta una mayor complejidad en los sistemas de control en comparación con el proceso convencional.

A continuación se listan las características de los lazos de control para la obtención de MTBE por destilación reactiva:

- En la corriente C4 el flujo es controlado.
- La corriente de alimentación MeOH está relacionada con la corriente C4, empleando la relación puesta por el controlador de composición que monitorea el metanol en la etapa 10 dentro de la columna. Es importante señalar que el controlador de flujo de metanol se encuentra en cascada con SetPoint remoto proveniente de la señal de salida del multiplicador "ratiomc4". Las dos entradas al multiplicador son del flujo de la alimentación

C4 y la señal de salida del controlador de composición CC. En el estado estacionario esta relación es  $768/1976 = 0.389$ , por lo que la señal de salida del controlador de composición tiene este valor.

- La temperatura de la etapa 13 es controlada mediante la manipulación de la carga térmica en el rehervidor.
- El nivel en el tanque de fondos y de reflujo es controlado mediante la manipulación de los flujos en las corrientes de fondo y destilado.
- La relación de reflujo es controlado mediante la medición de velocidad de flujo másico en el destilado, enviando la señal a través de un multiplicador RR (con una segunda entrada, la cual es el valor deseado de la relación de reflujo 7) y estableciendo la velocidad de flujo másico de reflujo.
- La presión es controlada manipulando el calor removido en el condensador.

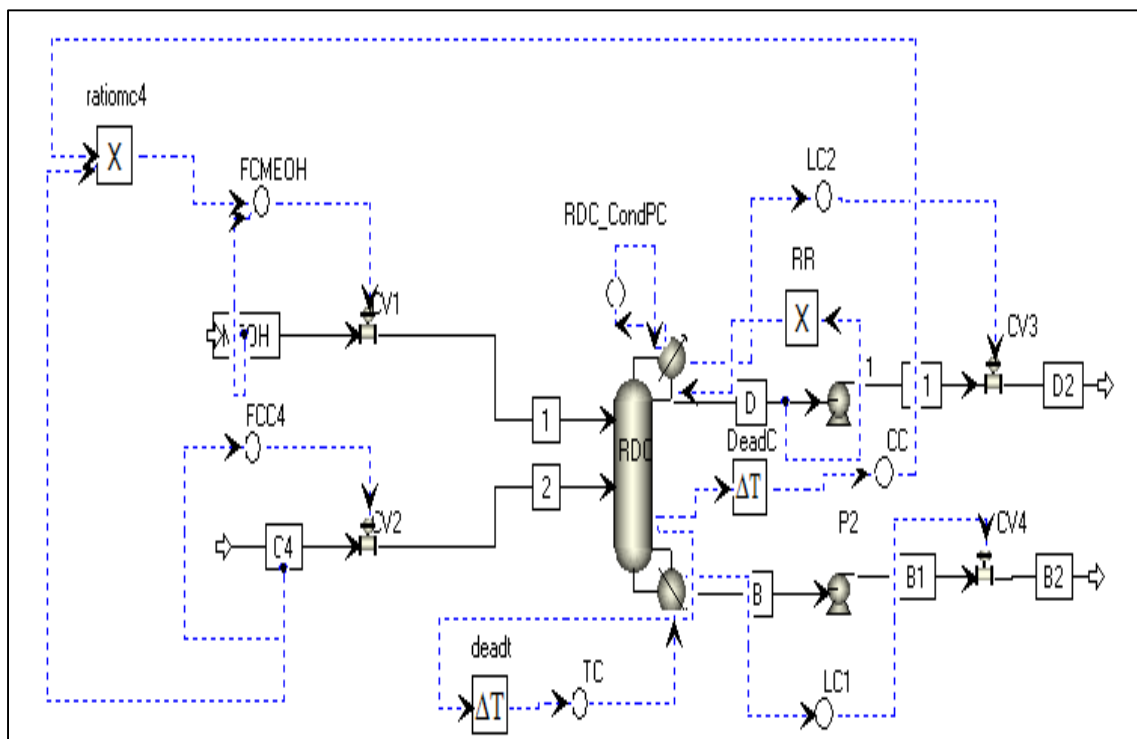


Figura 40.- Estructura de control destilación reactiva - MTBE

En la Figura 40 se muestran los lazos de control establecidos en el ambiente de simulación dinámica de Aspen Dynamics, es posible observar que la complejidad de los lazos aumenta en comparación con la columna de destilación convencional. Los parámetros de los controladores PID correspondientes al lazo de control de temperatura (TC) y control de composición (CC), se establecieron mediante una prueba de rele realimentado a lazo cerrado empleando la técnica Tyreus-Luyben. El control de las alimentaciones emplea un control PI (Proporcional-Integral) y los lazos de nivel emplean un control puramente proporcional (Luyben, 2008).

En cuanto al lazo de control de presión, se utilizan los parámetros arrojados por default de Aspen Dynamics, ya que se ha demostrado que estos valores PI, se desempeñan de una manera correcta (Flores, 2014).

En la siguiente tabla se muestran los parámetros de los controladores empleados:

<b>CONTROLADOR – TIPO</b>	<b>PARÁMETRO</b>	<b>VALOR</b>	<b>UNIDADES</b>
<b>FCC4 – PI</b>	SetPoint	1976	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	5	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>FCMEOH – PI</b>	SetPoint	766	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	5	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TC etapa 13 – PI</b>	SetPoint	405	K
	Señal de salida	53306368.3	W
	Ganancia	0.52898	
	Tiempo Integral	25.08	min
	Tiempo derivativo	0	min

	Variable manipulada	Carga térmica en rehervidor	cal/s
<b>CC – PI</b>	Tipo de acción	Inversa	
	SetPoint	0.105	Kmol/kmol
	Señal de salida	0.388	
	Ganancia	1	
	Tiempo Integral	20	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Relación de alimentaciones	
<b>LC1 – P</b>	Tipo de acción	Inversa	
	SetPoint	5.61	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	9999	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
<b>LC2 – P</b>	Tipo de acción	Directa	
	SetPoint	5.667	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	9999	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
<b>RDC_CondPC – PI</b>	Tipo de acción	Directa	
	SetPoint	11	bar
	Señal de salida	-56355236.1	W
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	12	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en condensador	cal/s
<b>ratiomc4</b>	Tipo de acción	Inversa	
	Señal de entrada 1	1976	Kmol/h
	Señal de entrada 2	0.388	
<b>RR</b>	Señal de salida	766.68	Kmol/h
	Señal de entrada 1	78293.3	Kg/h
	Señal de entrada 2	7	
<b>Deadt, Deadc</b>	Señal de salida	548053.0	Kg/h
	Tiempo muerto	2, 3	min

Tabla 12.- Controladores – Destilación reactiva - MTBE

### 2.1.2.3.- Costos – Destilación reactiva.

En base a los resultados obtenidos por la simulación en estado estacionario del proceso mediante destilación reactiva para la producción de MTBE, de manera similar que en el proceso convencional, la estimación de costos se realiza con las especificaciones de la Tabla 4, considerando los mismos precios de materia prima y producto principal.

Una vez cargada la información del simulador Aspen Plus en Aspen IPE, se obtiene el siguiente DFP:

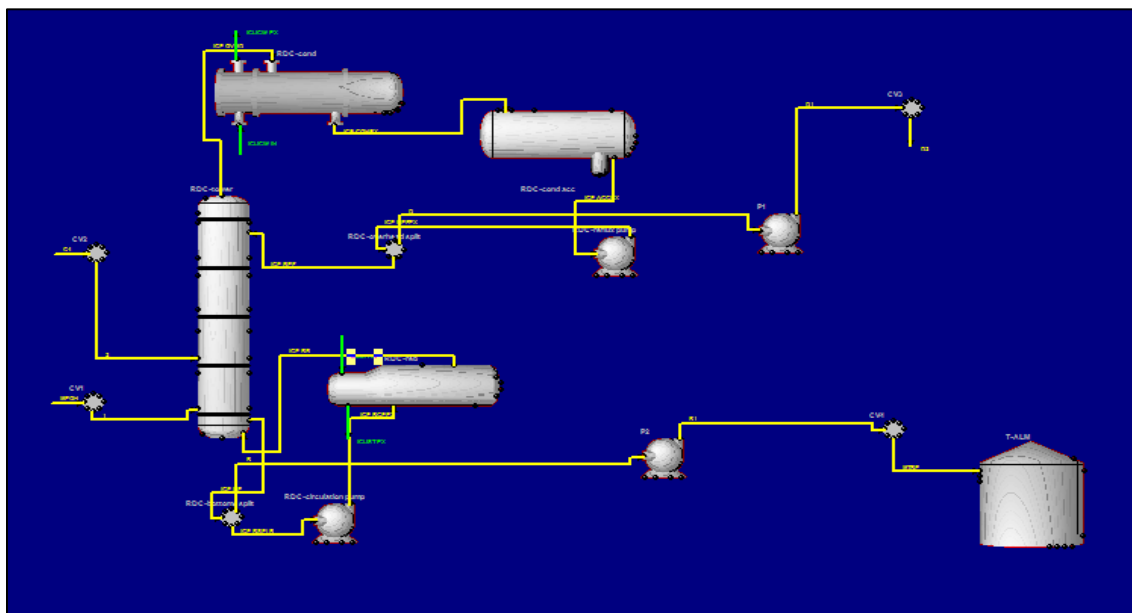


Figura 41.- DFP - Destilación reactiva de MTBE - Aspen IPE

De igual manera, en cada estimación de costos en Aspen IPE es necesario agregar el correspondiente tanque de almacenamiento de producto principal. Es importante realizar este análisis económicos para que en Capítulo 3 se comparen los resultados obtenidos en Aspen IPE.

### 2.1.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio

En destilación reactiva con etapas de no equilibrio, la transferencia de masa se lleva a cabo a través de la interfase vapor-líquido, sin embargo una gran limitante, es que el programa Aspen Dynamics en su versión V7.3 no soporta el modelo RADFRAC en tipo RATE BASED (Etapas de no equilibrio). Por lo que eficiencias de Murphree o de platos deben ser incorporadas a la simulación, para que el modelo de no equilibrio alcance un modelo equivalente al de equilibrio con RADFRAC (Panda, y Kannan, 2014).

Para llevar el modelo equivalente en RADFRAC, hay que incorporar las eficiencias (de los platos), obtenidas en la simulación en RATE BASED. En Aspen Plus ir a la pestaña “Rate-based report” y activar en “Efficiency Options” la casilla “Include tray efficiencies”. Una vez que la simulación converge, en la pestaña “Efficiencies and HETP” pueden observarse los resultados obtenidos para cada uno de los platos (recordar que en Aspen Plus, los platos comienzas desde la etapa 2 hasta la penúltima). Estos resultados se pueden incorporar en la pestaña “Efficiencies” – “Vapor-Liquid” y cambiar RATE BASED a EQUILIBRIUM para obtener el modelo equivalente.

Otro aspecto fundamental en etapas de no equilibrio, es que la misma pureza de MTBE no es alcanzable bajo la misma configuración que en equilibrio, por lo que es necesario añadir etapas extras en la zona de agotamiento y así alcanzar una mayor pureza de MTBE.

En la siguiente figura se muestra el DFP correspondiente a la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio. Es posible observar que en cuanto a equipos, es el mismo DFP que la columna con etapas de equilibrio, con la diferencia en la cantidad de platos.

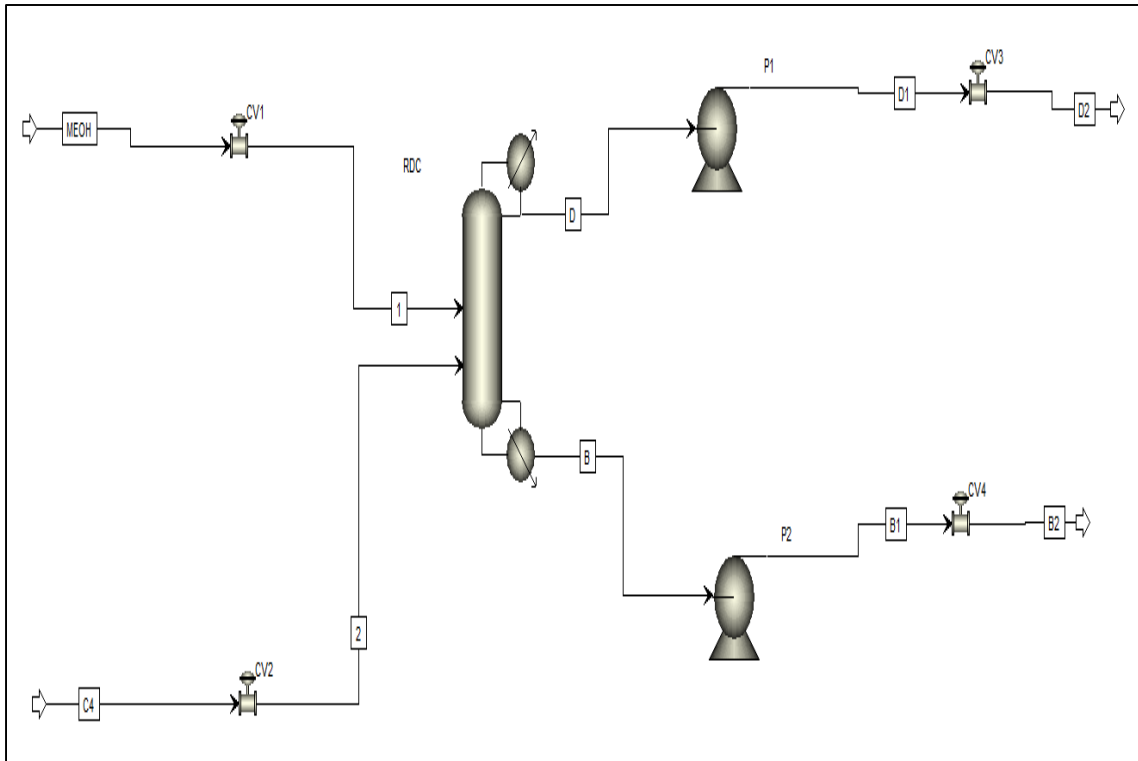


Figura 42.- DFP - Destilación reactiva NEQ – MTBE.

En la tabla siguiente se muestran las condiciones de operación para llevar a cabo la simulación de la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio en estado estacionario con Aspen Plus.

#### 2.1.3.1.- Equipos.

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Columna de destilación reactiva.</b>		
Número total de etapas	24	-
Etapas reactivas	4 – 11	-
Presión	11	bar
Relación de reflujo	7	-

Etapas de alimentación	10, 11	
<b>Corrientes</b>		
<b>Corriente de Metanol (MEOH)</b>		
Flujo de alimentación	768	kmol/h
Metanol (fracción molar)	1	-
Temperatura	320	K
Presión	16	bar
Etapas de alimentación	10	-
<b>Corriente de Butenos (C4)</b>		
Flujo de alimentación	1976	kmol/h
Isobutileno (fracción molar)	0.36	-
1-Buteno (fracción molar)	0.64	-
Presión	15	bar
Etapas de alimentación	11	-

Tabla 13.- Especificaciones del proceso destilación reactiva NEQ - MTBE

#### 2.1.3.2.- Estructura y lazos de control

Los lazos de control empleado en la simulación de la columna de destilación reactiva para producción de MTBE con etapas de no equilibrio, son los mismos que los empleados en la destilación reactiva con etapas de equilibrio. Las diferencias en ambos casos son; la temperatura en el plato 22 será controlada y la composición en fracción molar de metanol en fase líquida en la etapa 9. Además, los valores de los parámetros de los controladores PID serán diferentes en ambos lazos. A continuación se muestra el DFP de éste proceso en el ambiente de Aspen Dynamics.

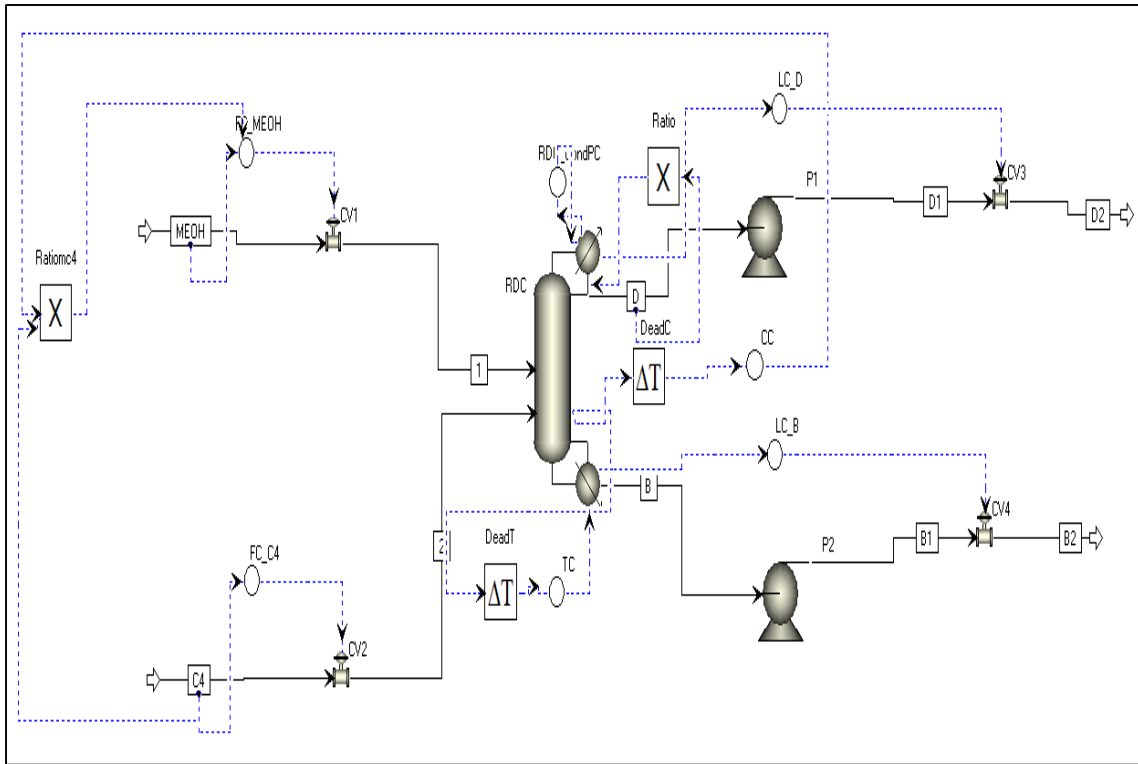


Figura 43.- Estructura de control destilación reactiva NEQ - MTBE

De manera análoga a la destilación reactiva con etapas de equilibrio, los parámetros de los controladores PID correspondientes al lazo de control de temperatura (TC) y control de composición (CC), se establecieron mediante una prueba de rele realimentado a lazo cerrado empleando la técnica Tyreus-Luyben.

En la siguiente tabla se muestran los parámetros de los controladores empleados en la columna reactiva con etapas de no equilibrio:

CONTROLADOR - TIPO	PARÁMETRO	VALOR	UNIDADES
FC_C4 - PI	SetPoint	1976	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	5	min

	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>FC_MEOH – PI</b>	SetPoint	768	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	5	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TC etapa 22 – PI</b>	SetPoint	413.55	K
	Señal de salida	11769037.65	cal/s
	Ganancia	1.3	
	Tiempo Integral	20.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en rehervidor	cal/s
	Tipo de acción	Inversa	
<b>CC – PI</b>	SetPoint	0.0416	Kmol/kmol
	Señal de salida	0.389	
	Ganancia	1.3	
	Tiempo Integral	19.4	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Relación de alimentaciones	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>LC_D – P</b>	SetPoint	5.667	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	9999	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>LC_B – P</b>	SetPoint	5.61	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	9999	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	

<b>RDC_CondPC - PI</b>	SetPoint	11	bar
	Señal de salida	-56355236.1	W
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	12	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en condensador	cal/s
	Tipo de acción	Inversa	
<b>Ratiomc4</b>	Señal de entrada 1	1976	Kmol/h
	Señal de entrada 2	0.389	
	Señal de salida	768	Kmol/h
<b>Ratio</b>	Señal de entrada 1	74158.2	Kg/h
	Señal de entrada 2	7	
	Señal de salida	519108	Kg/h
<b>Deadt, Deadc</b>	Tiempo muerto	2, 3	min

Tabla 14.- Controladores - Destilación reactiva NEQ - MTBE

#### 2.1.3.3.- Costos – Destilación reactiva – No equilibrio.

Empleando la información contenida en la Tabla 4 y el reporte generado por Aspen Plus en la simulación en estado estacionario de la columna reactiva con etapas de no equilibrio y bajo la misma consideración de costos de materia prima y producto principal. Se lleva a cabo el análisis de costos, con Aspen IPE obteniéndose el DFP correspondiente a la Figura 44. Es importante señalar que debido a la similitud entre los procesos de destilación reactiva, los diagramas de flujo de procesos serán muy similares.

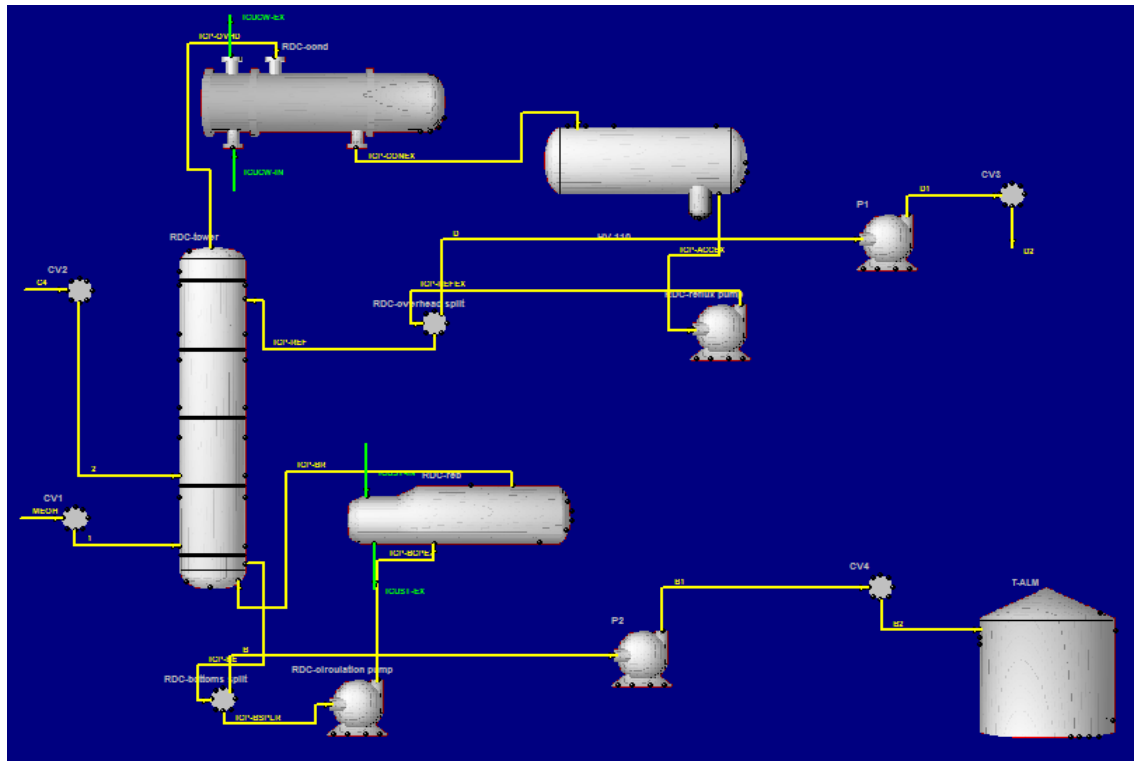


Figura 44.- DFP - Destilación reactiva NEQ de MTBE - Aspen IPE

Los resultados obtenidos mediante el empleo del software Aspen IPE (Process Economic Analyser) para la estimación de costos de las tres diferentes plantas de obtención de MTBE serán mostrados y comparados en el Capítulo 3.

## 2.2.- Procesos de obtención de TAME

En esta sección se muestra el empleo de Aspen Plus, Aspen Dynamics y Aspen IPE, para la simulación en estado estacionario, dinámico y análisis de costos de tres formas distintas de obtención de TAME (Tert Amil Metil Éter). En primer lugar se muestra el proceso convencional de obtención de TAME, el cual considera el uso de dos reactores químicos seguidos por tres columnas de destilación. En segundo lugar se muestra el proceso de obtención de TAME, mediante el uso de una columna de destilación reactiva que incorpora un pre-reactor a la entrada, el cual ayuda a la producción de TAME en mayor cantidad. Y por último se muestra el mismo esquema de columna de destilación, pero empleando el modelo de columna reactiva con etapas de no equilibrio.

En estos esquemas de plantas de proceso, la columna reactiva alcanza una calidad de producto del 95% en pureza, a pesar del incremento en el número de etapas en la zona de agotamiento. La causa de esto es la misma naturaleza de la columna, al considerarse con etapas de no equilibrio, los intercambios de calor y masas entre las fases líquido-vapor, afectan la calidad del producto. Por su parte el proceso convencional y columna reactiva con etapas de equilibrio obtienen una calidad de producto del 99% ya que son modelos más idealizados.

Una vez establecidos los alcances de pureza en los tres distintos procesos, se establecen los lazos de control en Aspen Dynamics, con la finalidad de observar la respuesta de los controladores ante perturbaciones generadas en la alimentación de los procesos y su capacidad de mantener la calidad del producto TAME.

### 2.2.1.- Proceso convencional de reacción y separación para TAME.

Con el propósito de poder comparar los tres distintos procesos de obtención de Tert Amil Metil Éter, es necesario desarrollar una simulación que contemple zonas de reacción y separación en equipos individuales. Por lo anterior, se genera el proceso convencional de producción de TAME en base a la información proporcionada por William Luyben, (Luyben, 2008), realizando modificaciones pertinentes para poder desarrollar el esquema de planta convencional, mismo en el que se emplean dos reactores químicos que son enfriados constantemente a la temperatura del refrigerante (357 K), esto debido a que las reacciones (en fase líquida) involucradas son exotérmicas. El coeficiente de transferencia de calor entre el refrigerante y la corriente de proceso es de  $568 \text{ W/m}^2\text{K}$ . El modelo RPLUG es empleado en ambos casos con las mismas especificaciones y un intercambiador de calor entre reactores que disminuya la temperatura del efluente del primer reactor.

En cuanto a la sección de separación de la plana, se consideran 3 columnas de destilación, que en primera instancia separa el producto principal (TAME) de los demás reactivos. Posteriormente se separan los reactivos agua y metanol de los componentes orgánicos presentes en la alimentación (FEED) y por último se separa el metanol y agua, mismos que pudieran ser recirculados al proceso.

En la siguiente imagen se muestra el diagrama de flujo de proceso empleado para la simulación en estado estacionario del proceso convencional para producción de TAME en el ambiente gráfico de Aspen Plus.

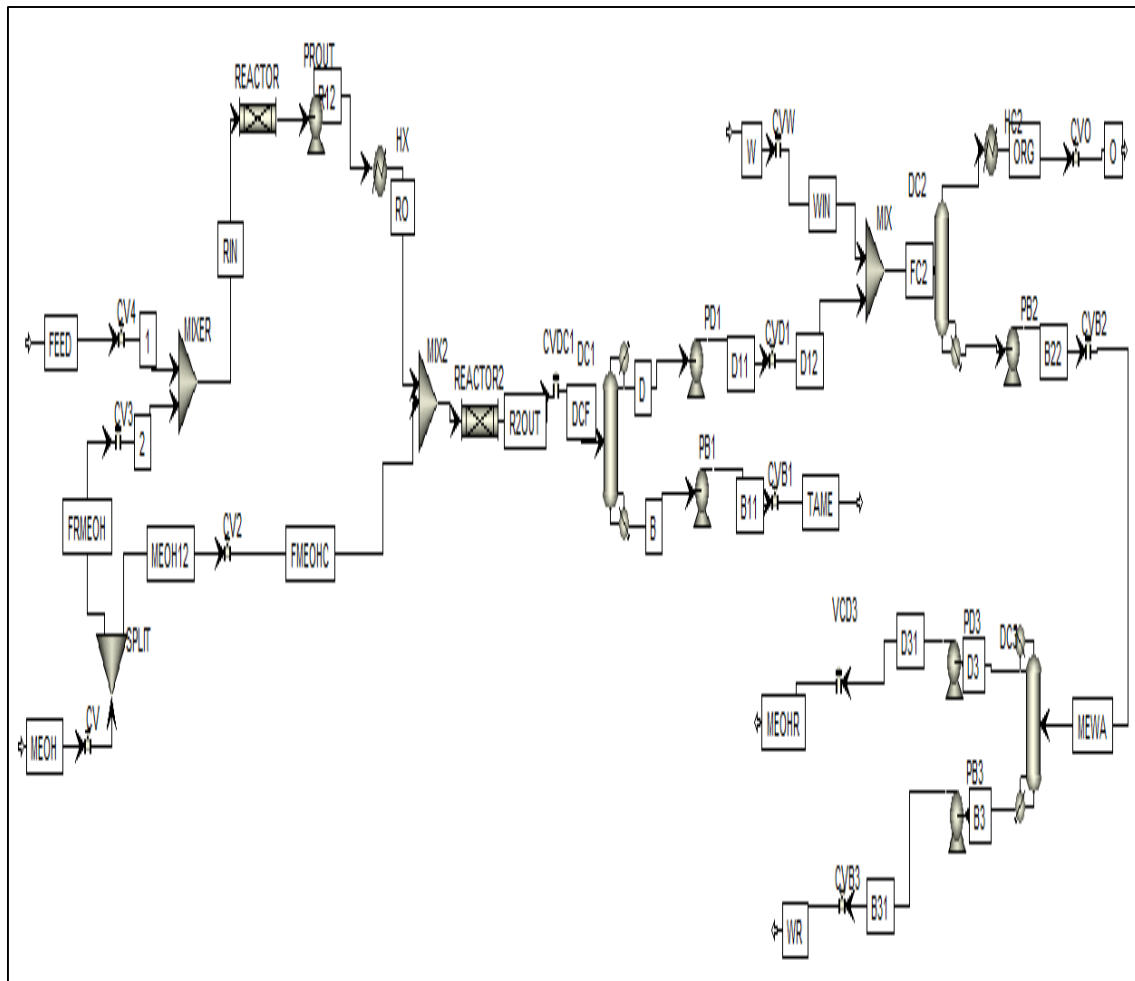


Figura 45.- Proceso convencional de obtención de TAME

En la Figura 45 se muestra la complejidad del proceso convencional de obtención de TAME, debido a la presencia de cantidad de equipos. En la siguiente tabla se muestran las condiciones de operación de los equipos y corrientes de materia, para llevar a cabo la simulación en estado estacionario. La carga catalítica en los reactores es de 9544 Kg, con porosidad de cama de 0.5 (Luyben, 2008).

2.2.1.1.- Equipos

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Reactor - Multitubular</b>		
Caída de Presión	1	atm
Número de tubos	1080	
Longitud de tubo	5	m
Diámetro	0.05	m
<b>R2 - Multitubular</b>		
Caída de Presión	1	atm
Longitud	5	m
Diámetro	0.05	m
<b>Intercambiador de Calor 1</b>		
Temperatura	336	K
Presión	7	atm
<b>Columna de destilación 1</b>		
Número total de etapas	26	-
Etapas de alimentación	13	-
Presión	4	atm
Flujo en destilado	1288.425	Kmol/h
Condensador	Total	-
Relación de reflujo	0.34	-
<b>Columna de destilación 2</b>		
Número total de etapas	12	-
Etapas de alimentación	1	-
Presión	2.5	atm
Flujo en destilado	1320	Kmol/h
Condensador	Ninguno	-
<b>Intercambiador de Calor 2</b>		
Fracción de vapor	0	-
Presión	2	atm
<b>Columna de destilación 3</b>		
Número total de etapas	24	-
Etapas de alimentación	17	-
Presión	5	atm
Flujo en destilado	87.11	Kmol/h
Condensador	Total	-

Relación de reflujo	7.31484	-
<b>Corrientes</b>		
<b>MEOH</b>		
Temperatura	334.7	K
Presión	13	atm
Flujo total	548	Kmol/h
Fracción mol Metanol	1	-
<b>FEED</b>		
Temperatura	343	K
Presión	10	atm
Flujo total	1040.1	Kmol/h
IC5	501	Kmol/h
1-PENT	38.1	Kmol/h
2M1B	85.6	Kmol/h
NC5	88.4	Kmol/h
2-PENT	162	Kmol/h
2M2B	165	Kmol/h
<b>W</b>		
Temperatura	322	K
Presión	6	atm
Flujo total	1055	Kmol/h
Fracción mol Agua	1	-

Tabla 15.- Especificaciones del proceso convencional - TAME

#### 2.2.1.2.- Estructura y lazos de control.

Antes de llevar a cabo la simulación en estado estacionario y establecer los lazos de control del proceso, es necesario dimensionar los equipos y especificar las caídas de presión a lo largo de la planta que permitan que el flujo de materia se dé por presión (*“Fully pressure Driven”*).

- En todas las alimentaciones, el flujo es controlado.
- La temperatura del efluente de los reactores es controlada.
- La temperatura del plato 14 es controlada, mediante la carga térmica en el rehervidor.
- El nivel en el tanque de fondos y condensado es controlado mediante la manipulación de sus respectivos flujos.
- La presión es controlada manipulando el calor removido en el condensador.

Es importante señalar que la parte principal del proceso es el que considera la zona de reacción y la columna de destilación que separa al producto principal (TAME), de los demás reactivos. En la Figura 46, se muestra el DFP empleado en la simulación dinámica en el ambiente de Aspen Dynamics.

Debido a la existencia de múltiples lazos de control a lo largo del proceso, es recomendable que cada vez que se modifique o se establezca un lazo de control nuevo, se realice una “Inicialización” y se simule el proceso por un periodo corto de tiempo, con la finalidad de observar que todo funcione correctamente (Luyben, 2004).

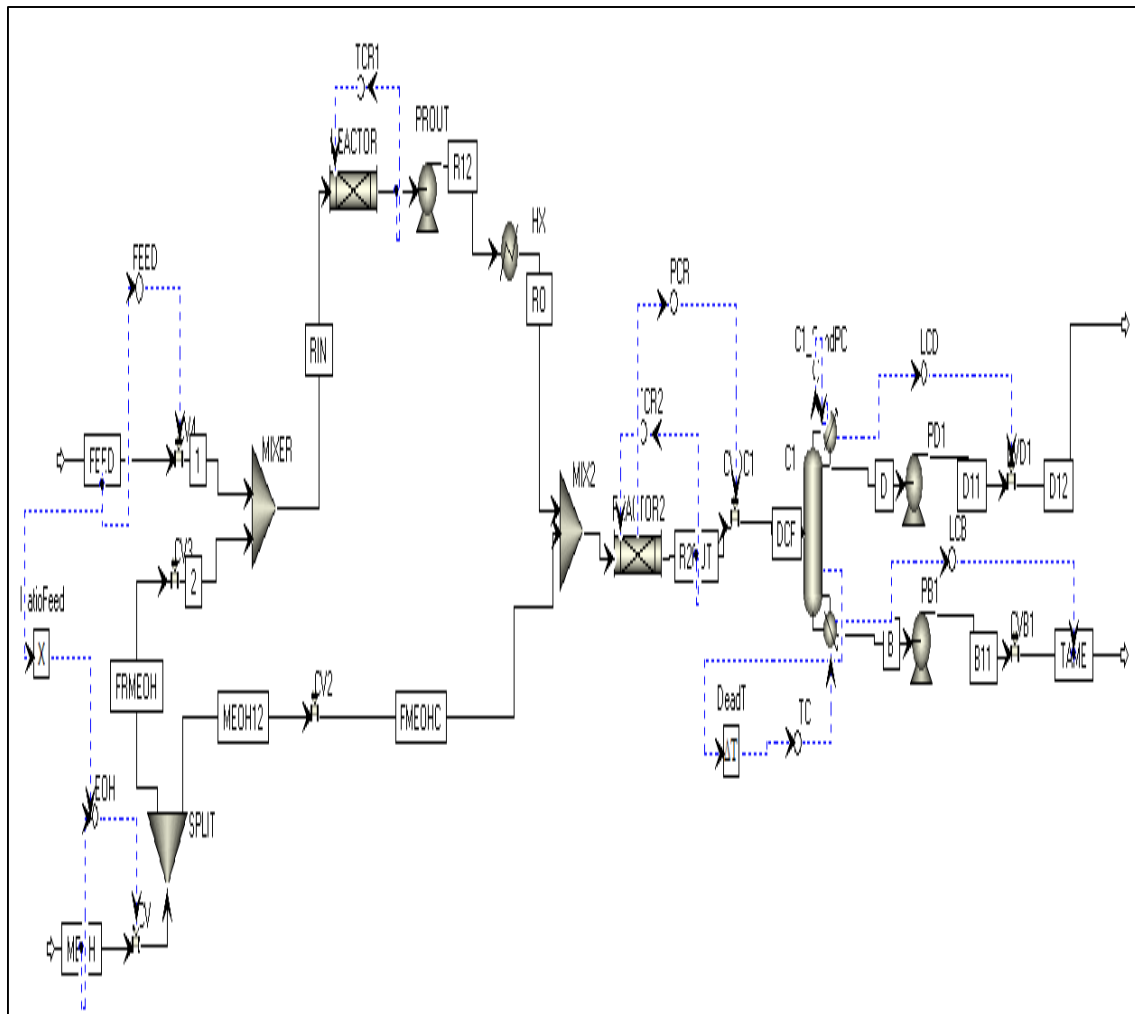


Figura 46.- Estructura de control –Proceso convencional.

En la siguiente tabla se muestran los parámetros de los controladores involucrados en el proceso convencional de obtención de TAME, en donde, los parámetros del lazo de control correspondiente al control de la temperatura de un plato de la columna se obtuvieron mediante una prueba de relé realimentado, empleado la técnica a lazo cerrado “Ziegler-Nichols”. En cuanto a los parámetros de los controladores de flujo y nivel del proceso se establecieron conforme a lo sugerido por William Luyben (Luyben, 2002).

CONTROLADOR - TIPO	PARÁMETRO	VALOR	UNIDADES
<b>FEED – (PI)</b>	SetPoint	1040.1	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>MEOH – (PI)</b>	SetPoint	548	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TCR1</b>	SetPoint	357.5	K
	Señal de salida	357	K
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	5	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Temperatura de agua de enfriamiento	K
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TCR2</b>	SetPoint	357.5	K
	Señal de salida	357	K
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	5	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Temperatura de agua de enfriamiento	K
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TC etapa 14 (PI)</b>	SetPoint	369.26	K
	Señal de salida	2859544.1	cal/s
	Ganancia	2.2	
	Tiempo Integral	9.24	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en rehedidor	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>LCB – (P)</b>	SetPoint	2.7	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	min

	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>LCD – (P)</b>	SetPoint	2.625	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	Min
	Tiempo derivativo	0	Min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>DC_CondPC – (PI)</b>	SetPoint	4	bar
	Señal de salida	-2957629	cal/s
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	12	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en condensador	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>DeadT</b>	Tiempo muerto	1	min

Tabla 16.- Controladores - Proceso convencional - TAME

### 2.2.1.3.- Costos – Proceso convencional

Empleando los resultados obtenidos por el simulador Aspen Plus en estado estacionario para producción de TAME, la estimación de costos emplea la información inscrita en la Tabla 4, considerando los siguientes costos (en dólares americanos) de materia prima (FEED y MEOH) y producto principal (TAME).

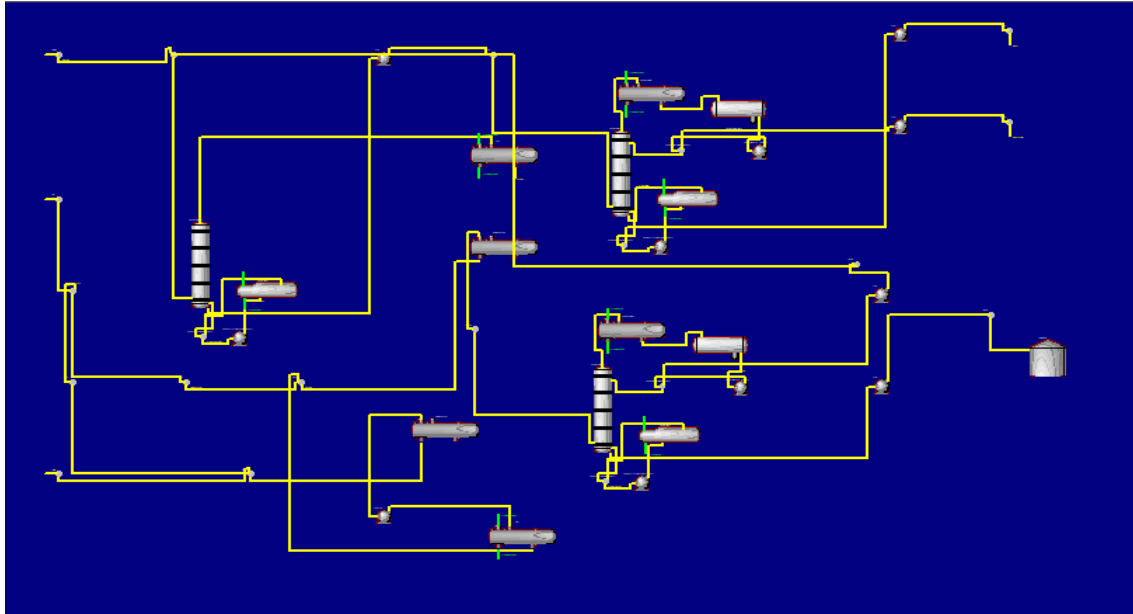
$$\text{FEED} = 0.4536 \text{ \$/lb}$$

$$\text{MeOH} = 0.0448 \text{ \$/lb}$$

$$\text{Agua} = 0.00012 \text{ \$/lb}$$

$$\text{TAME} = 0.8165 \text{ \$/lb}$$

Una vez que se ha ingresado correctamente la información necesaria para la estimación de costos, el diagrama de flujo obtenido en Aspen IPE es mostrado en la siguiente figura.



*Figura 47.- DFP - Proceso convencional de TAME - Aspen IPE*

En el capítulo 3 se muestran los resultados obtenidos por Aspen IPE acerca del análisis económico para las plantas de producción de TAME, convencional, destilación reactiva y destilación reactiva con etapas de no equilibrio.

#### 2.2.2.- Destilación reactiva para TAME.

En sus estudios (Subawalla, y Fair, 1999) y (Luyben, 2008), presentan el diseño de una planta de proceso de producción de TAME empleando destilación reactiva. Este diseño considera un pre-reactor y una columna de destilación reactiva. El diseño del pre-reactor es el mismo que en el proceso convencional.

El efluente del pre-reactor es alimentado a una columna de destilación reactiva de 35 etapas, que considera etapas reactivas desde la etapa 7 hasta la 23.

Conceptualmente la columna de destilación reactiva por si solo es capaz de llevar a cabo la reacción y la separación en un solo equipo, y de hecho lo hace. El empleo de un pre-reactor es con el objetivo de ayudar a mejorar la conversión de reactivos en productos. Típicamente la conversión de un sistema que considera dos reactores tiene un rango de conversión del 90 al 95% y cuando se emplea la conjunción de un pre-reactor con una columna de destilación reactiva, se alcanza entre 88-92% de conversión en el reactor, acercándose al 100% en conjunto con la columna reactiva (Subawalla, y Fair, 1999).

En la siguiente figura se muestra el esquema de la planta de producción de TAME empleando destilación reactiva, y posteriormente se enlistan las condiciones de operación necesarias para llevar a cabo la simulación en estado estacionario en Aspen Plus. Las etapas reactivas en la columna contienen 1100 kg de catalizador cada una, correspondiente a 1.22 m<sup>3</sup> en cada plato en una columna con 5.5 m de diámetro.

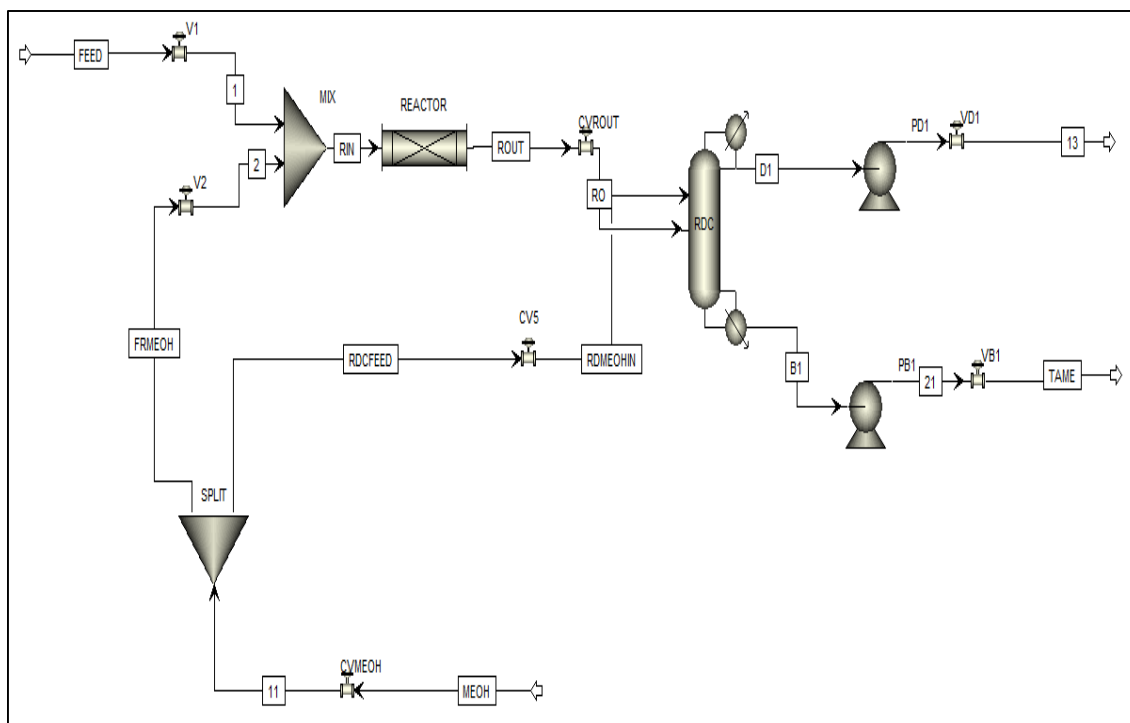


Figura 48.- DFP - Destilación reactiva -TAME

El proceso considera dos alimentaciones frescas, una de metanol y la otra es una mezcla de componentes que contienen Isoamilenos reactivos con otras parafinas de pentano, naftenos y olefinas (C5). Debido a que la corriente de Isoamilenos con C5 proviene de una refinería petrolera que separa hidrocarburos ligeros, y a que los puntos de ebullición de los componentes C5 con muy similares, no es económico separar Isoamilenos reactivos de los demás compuestos. Por lo que la alimentación al proceso considera 24% de Isoamilenos y el restante los otros compuestos C5, los cuales son inertes en la reacción de producción de TAME (Luyben, 2008). La corriente de metanol fresca es separada entre el reactor (313 kmol/h) y a la columna reactiva.

2.2.2.1.- Equipos.

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Reactor - Multitubular</b>		
Caída de Presión	1	Atm
Número de tubos	1080	
Longitud de tubo	5	M
Diámetro	0.05	M
<b>Columna de RDC.</b>		
Número total de etapas	35	-
Etapas reactivas	7-23	-
Presión	4	Bar
Relación de reflujo	4	-
Etapas de alimentación	23, 28	
<b>Corrientes</b>		
<b>Corriente de Metanol (MEOH)</b>		
Flujo de alimentación	548	kmol/h
Metanol (fracción molar)	1	-
Temperatura	334.687	K
Presión	14	Bar
<b>Corriente de Isoamilenos (FEED)</b>		
Flujo de alimentación	1040.1	kmol/h
IC5	501	Kmol/h
NC5	88.4	Kmol/h
1-PENTE	38.1	Kmol/h
2-PENTE	162	Kmol/h
2M1B	85.6	Kmol/h
2M2B	165	Kmol/h

Tabla 17.- Especificaciones del proceso destilación reactiva - TAME

#### 2.2.2.2.- Estructura y lazos de control

La estructura de control para el pre-reactor y la columna de destilación reactiva son mostradas en la Figura 49.

- La alimentación (FEED) que contiene Isoamilenos y químicos inertes (C5) es controlada mediante control de flujo.
- La alimentación de metanol al pre-reactor está relacionada con la alimentación fresca de metanol  $548/1040.1 = 0.526872$ .
- La temperatura del efluente del reactor está controlada mediante el uso de agua de enfriamiento.
- La temperatura del plato 31 está controlada mediante la manipulación de la carga térmica en el rehervidor.
- La composición de metanol en la etapa 23 es controlada mediante la manipulación de la corriente de metanol entrante a la columna.
- El control de nivel del tanque de condensados y la base de la columna son controlados mediante la manipulación del flujo de destilado y fondo respectivamente.
- La presión del reactor es controlada mediante la manipulación de la apertura de la válvula de salida.

En la siguiente figura se muestran los lazos de control establecidos en el ambiente gráfico de Aspen Dynamics.

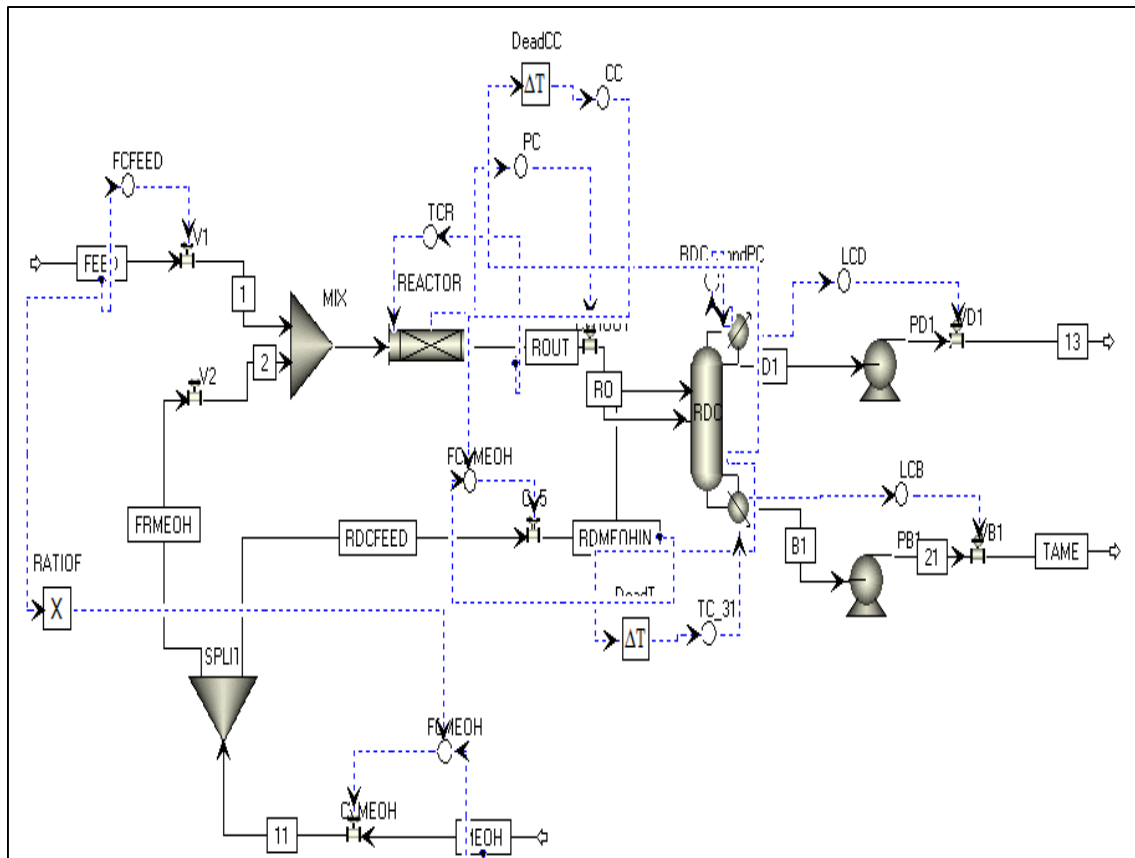


Figura 49.- Estructura de control destilación reactiva - TAME

Los lazos correspondientes al control de temperatura en el plato 31 y composición de metanol en el plato 23, son sintonizados de manera individual a lazo cerrado empleando la técnica de Tyreus-Luyben. A continuación se muestra la tabla con la información correspondiente a todos los controladores involucrados en el proceso de obtención de TAME empleando destilación reactiva.

Es necesario tomar en cuenta que Aspen Dynamics, en ocasiones y por default, establece rangos de operación entre las variables manipuladas y controladas, por lo que es necesario tomar extrema precaución cuando se establecen los parámetros de los controladores, ya que de no hacerlo, el control del proceso será limitado a un rango muy pequeño en las perturbaciones o será ineficaz.

<b>CONTROLADOR – TIPO</b>	<b>PARÁMETRO</b>	<b>VALOR</b>	<b>UNIDADES</b>
<b>FCFEED – PI</b>	SetPoint	1040.1	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
<b>FCMEOH – PI</b>	Tipo de acción	Inversa	
	SetPoint	548	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
<b>FC_MEOH – PI</b>	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
	SetPoint	235	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
<b>TC etapa 31 – PI</b>	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
	SetPoint	386.18	K
	Señal de salida	6485186.14	cal/s
	Ganancia	1.7	
<b>CC – PI</b>	Tiempo Integral	13.2	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en rehedidor	cal/s
	Tipo de acción	Inversa	
	SetPoint	0.139	Kmol/kmol
	Señal de salida	235	Kmol/h
<b>CC – PI</b>	Ganancia	0.401	
	Tiempo Integral	27.72	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Relación de alimentaciones	
<b>CC – PI</b>	Tipo de acción	Inversa	

<b>LCD – P</b>	SetPoint	3.456	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	9999	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>LCB – P</b>	SetPoint	4.026	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	9999	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>RDC_CondPC – PI</b>	SetPoint	4	bar
	Señal de salida	-6659690.4	cal/s
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	12	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en condensador	cal/s
	Tipo de acción	Inversa	
<b>RATIOF</b>	Señal de entrada 1	1040.1	Kmol/h
	Señal de entrada 2	0.526872	
	Señal de salida	766.68	Kmol/h
<b>TCR</b>	SetPoint	357	K
	Señal de salida	357	K
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	5	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Temperatura de agua de enfriamiento	K
	Tipo de acción	Inversa	
<b>DeadT, DeadCC</b>	Tiempo muerto	1, 3	min

Tabla 18.- Controladores - Destilación reactiva - TAME

### 2.2.2.3.- Costos – Destilación reactiva

Una vez que la simulación en estado estacionario ha sido obtenida de manera satisfactoria y los equipos han sido dimensionados de manera correcta para exportar a Aspen Dynamics, es tiempo de realizar la estimación económica del proceso. En base a la información contenida en la Tabla 4, y considerando los mismos costos para el proceso convencional de obtención de TAME obtenemos el siguiente diagrama de flujo de proceso. Los resultados obtenidos de estimación de costos son comparados en el Capítulo 3.

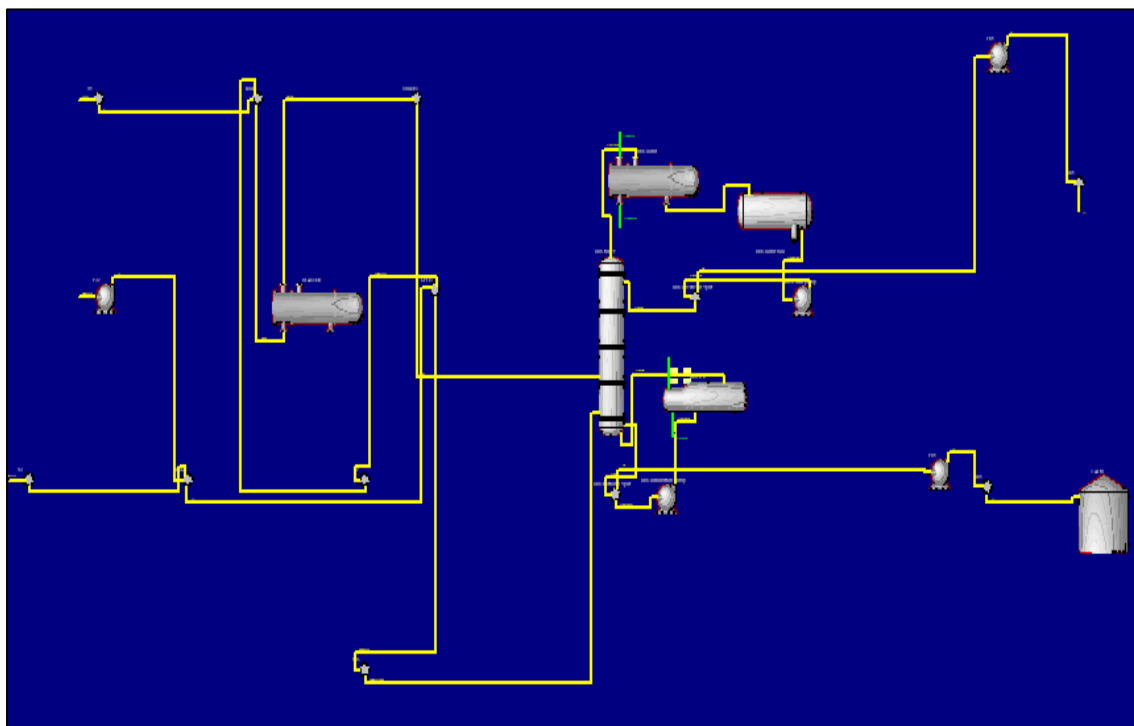


Figura 50.- DFP - Destilación reactiva de TAME - Aspen IPE

### 2.2.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio

En esta sección se plantean las condiciones de operación del proceso de obtención de TAME empleando el sistema de destilación reactiva con etapas de no equilibrio. El DFP es similar al empleado en la simulación con etapas de equilibrio, con la diferencia en el número de platos, mismos que se incrementan bajo la necesidad de aumentar la pureza del producto principal.

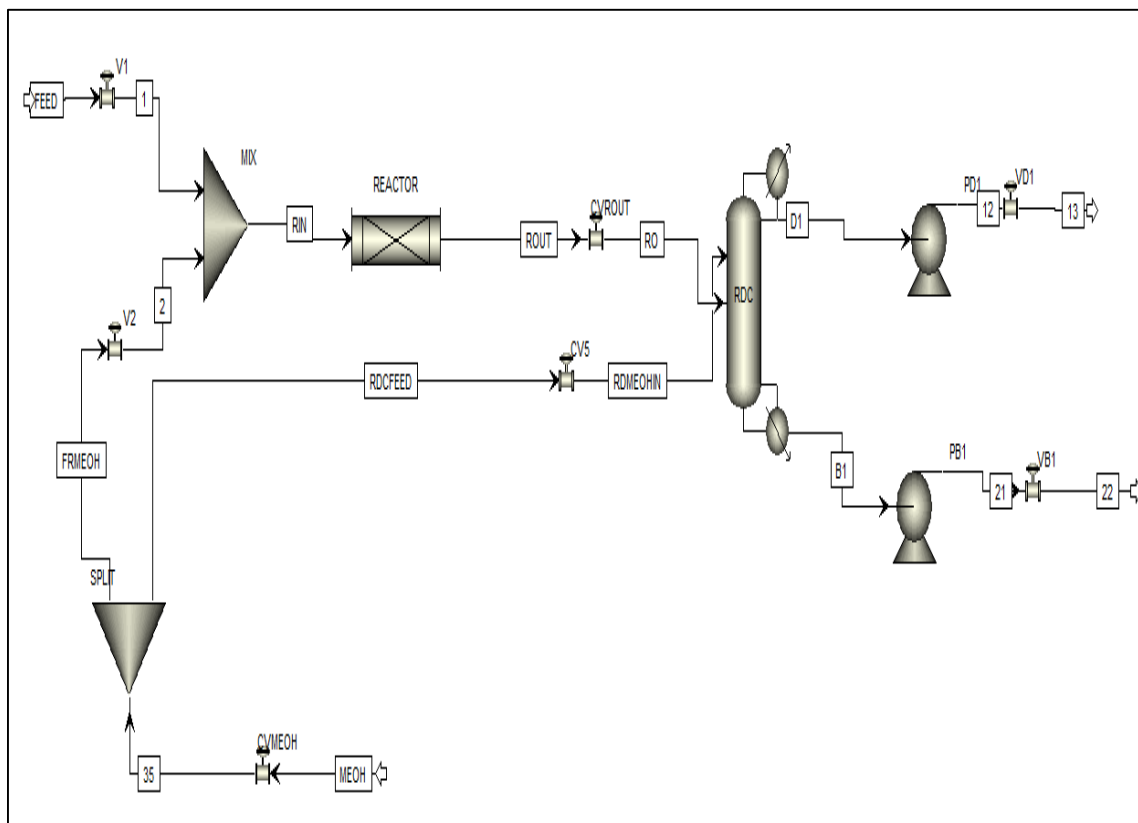


Figura 51.- DFP - Destilación reactiva NEQ - TAME

En la siguiente tabla se muestran las condiciones de operación en los equipos para llevar a cabo la simulación del proceso de destilación reactiva con etapas de no equilibrio.

2.2.3.1.- Equipos

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Reactor - Multitubular</b>		
Caída de Presión	1	atm
Número de tubos	1080	
Longitud de tubo	5	m
Diámetro	0.05	m
<b>Columna de RDC.</b>		
Número total de etapas	40	-
Etapas reactivas	7-23	-
Presión	4	bar
Relación de reflujo	4	-
Etapas de alimentación	23, 28	
<b>Corrientes</b>		
<b>Corriente de Metanol (MEOH)</b>		
Flujo de alimentación	548	kmol/h
Metanol (fracción molar)	1	-
Temperatura	334.687	K
Presión	14	bar
<b>Corriente de Isoamilenos (FEED)</b>		
Flujo de alimentación	1040.1	kmol/h
IC5	501	Kmol/h
NC5	88.4	Kmol/h
1-PENTE	38.1	Kmol(h
2-PENTE	162	Kmol/h
2M1B	85.6	Kmol/h
2M2B	165	Kmol/h

Tabla 19.- Especificaciones del proceso destilación reactiva NEQ - TAME

2.2.3.2.- Estructura y lazos de control

En cuanto a los lazos de control correspondientes al proceso de obtención de TAME con columna reactiva y etapas de no equilibrio, se emplea la misma estructura que utiliza la columna con etapas de equilibrio, considerando el reflujo y realizando únicamente los siguientes cambios:

- La temperatura del plato 37 es controlada mediante la manipulación de la carga térmica en el rehervidor.
- La composición de metanol en la etapa 16 es controlada mediante la manipulación de la corriente de metanol entrante a la columna.

En la siguiente figura se muestra el esquema de control instalado, empleando el ambiente gráfico de Aspen Dynamics.

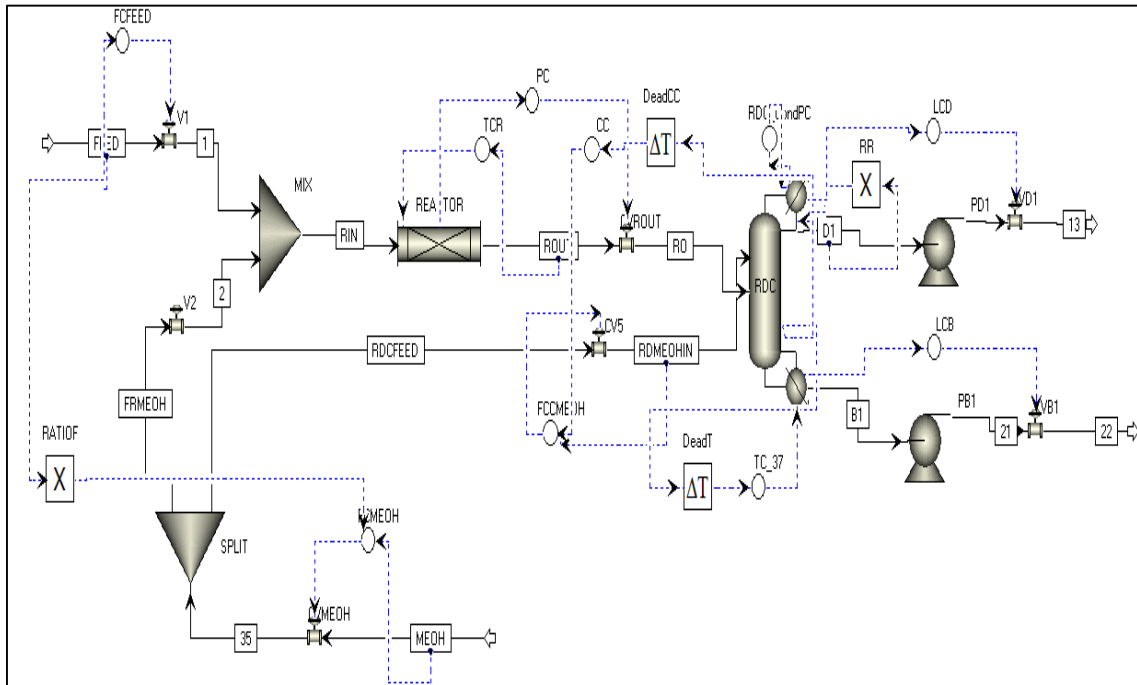


Figura 52.- Estructura de control destilación reactiva NEQ - MTBE

Los lazos correspondientes al control de la temperatura en el plato 37 y composición son sintonizados de manera individual con una prueba de relé realimentado a lazo cerrado empleando la técnica de Tyreus-Luyben en ambos casos.

<b>CONTROLADOR – TIPO</b>	<b>PARÁMETRO</b>	<b>VALOR</b>	<b>UNIDADES</b>
<b>FCFEED – PI</b>	SetPoint	1040.1	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>FCMEOH – PI</b>	SetPoint	548	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>FCMEOH – PI</b>	SetPoint	235	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TC etapa 37 – PI</b>	SetPoint	395	K
	Señal de salida	9277910.45	cal/s
	Ganancia	1.72	
	Tiempo Integral	8.316	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en rehervidor	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>CC – PI</b>	SetPoint	0.199	Kmol/kmol
	Señal de salida	235	Kmol/h

	Ganancia	0.85313	
	Tiempo Integral	45.8	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Relación de alimentaciones	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>LCD – P</b>	SetPoint	3.456	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>LCB – P</b>	SetPoint	4.026	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>RDC_CondPC – PI</b>	SetPoint	4	bar
	Señal de salida	-6659690.4	cal/s
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	12	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en condensador	cal/s
	Tipo de acción	Inversa	
<b>RATIOF</b>	Señal de entrada 1	1040.1	Kmol/h
	Señal de entrada 2	0.526872	
	Señal de salida	766.68	Kmol/h
<b>RR</b>	Señal de entrada 1	68118.6	Kg/h
	Señal de entrada 2	4	
	Señal de salida	272475	Kg/h
<b>TCR</b>	SetPoint	357	K
	Señal de salida	357	K
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	5	min
	Tiempo derivativo	0	min

	Variable manipulada	Temperatura de agua de enfriamiento	K
	Tipo de acción	Inversa	
<b>DeadT, DeadCC</b>	Tiempo muerto	1, 3	min

Tabla 20.- Controladores - Destilación reactiva NEQ -TAME

La tabla anterior muestra la información correspondiente a los controladores empleados en el proceso que emplea destilación reactiva con etapas de no equilibrio.

#### 2.2.3.3.- Costos – Destilación reactiva – No equilibrio

La estimación de costos del proceso de obtención de TAME empleando el esquema de destilación reactiva con etapas de no equilibrio, considerando que los costos de materias primas y producto de venta se mantienen al mismo valor que en el proceso convencional y destilación reactiva. A continuación se muestra el diagrama de flujo de proceso obtenido a partir de ingresar la información necesaria en el software Aspen IPE, tomando en cuenta la información contenida en la Tabla 4.

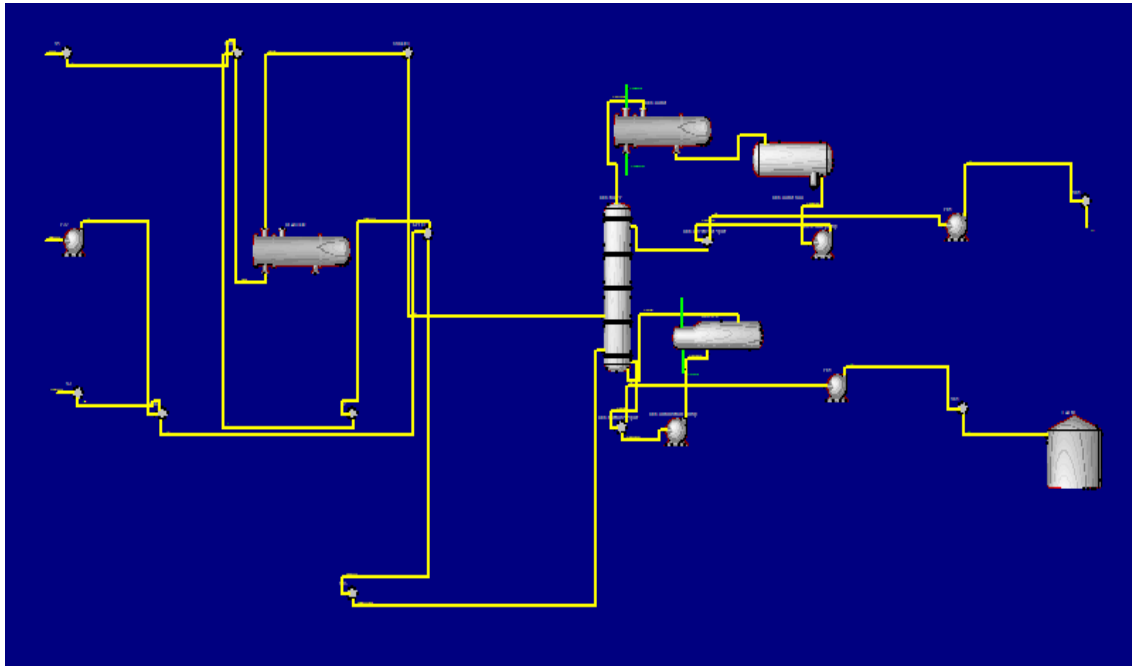


Figura 53.- DFP - Destilación reactiva NEQ de TAME - Aspen IPE

En el Capítulo 3 se muestran los resultados obtenidos en el análisis económico hecho de los tres procesos de obtención de Tert Amil Metil Éter.

### 2.3.- Procesos de obtención de EG.

El Etilenglicol es un compuesto químico muy empleado en el mundo, sus usos van desde anticongelante en sistemas de refrigeración, hasta como disolvente en industrias de pintura y plásticos. El etilenglicol es ampliamente producido mediante un método, el cual consiste en la hidrolisis de Óxido de etileno. Este último es obtenido por la oxidación directa de etileno con aire y oxígeno en la presencia de catalizador de plata.

El propósito de este estudio es el de comparar la producción, costos y complejidad de tres procesos de obtención de Etilenglicol en estado estacionario y dinámico empleando los ambientes de simulación Aspen Plus y Aspen Dynamics, así como, establecer lazos de control en los procesos y observar la respuesta que presenta la estructura de control ante perturbaciones realizadas en la corriente de alimentación de óxido de etileno. Los tres procesos a comparar son: La obtención de etilenglicol mediante un proceso con zona de reacción y zona separación en equipos individuales (proceso convencional), destilación reactiva con etapas de equilibrio (DR EQ) y destilación reactiva con etapas de no equilibrio (DR NEQ).

#### 2.3.1.- Proceso convencional de reacción y separación para EG.

La simulación en estado estacionario empleando el simulador Aspen Plus considera en primera instancia el uso de un reactor CSTR, donde se llevan a cabo las reacciones en fase líquida involucradas en la producción de Etilenglicol. En la zona de separación de la planta se consideran tres columnas de destilación. En la primera columna se lleva a cabo la separación de agua (corriente de destilado) de los demás compuestos, posteriormente en la segunda columna se obtiene por la corriente de fondos, el producto secundario de la reacción Dietilenglicol, y por último, en la tercera columna se obtiene en la corriente de fondos al producto principal etilenglicol.

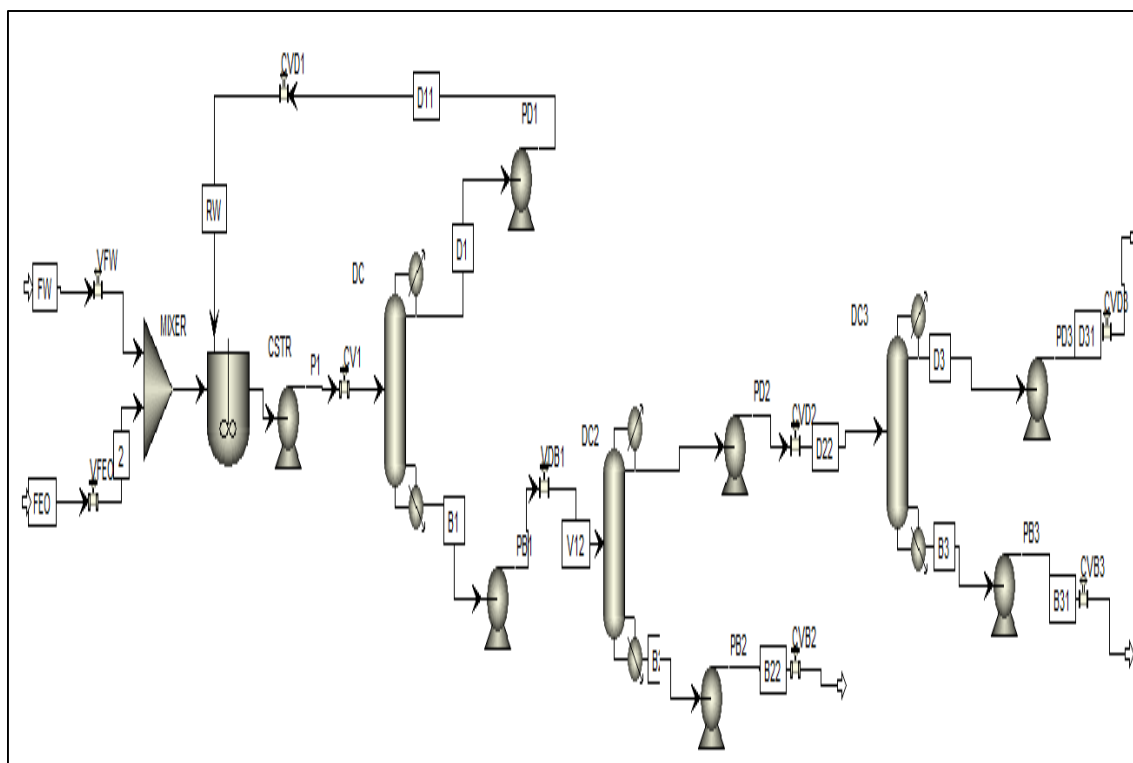


Figura 54.- Proceso convencional de obtención de Etilenglicol

2.3.1.1.- Equipos.

Parámetro	Valor	Unidades
<b>CSTR</b>		
Presión	15	atm
Temperatura	340	K
Volumen	2	m <sup>3</sup>
<b>Columna de destilación 1</b>		
Número total de etapas	40	
Presión		
Flujo de destilado	10.657	Kmol/h
Relación de reflujo	1	
Etapas de alimentación	21	
<b>Columna de destilación 2</b>		
Número total de etapas	37	
Presión	1	atm
Flujo de destilado	15.66	Kmol/h

Relación de reflujo	0.4255	
Etapa de alimentación	18	
<b>Columna de destilación 3</b>		
Número total de etapas	40	
Presión	1	atm
Flujo de destilado	9.4	Kmol/h
Relación de reflujo	0.077	
Etapa de alimentación	17	
<b>Corrientes</b>		
<b>FEO</b>		
Temperatura	313	K
Presión	18	atm
Flujo total	27.53	Kmol/h
Fracción mol Óxido de etileno	1	
<b>FW</b>		
Temperatura	313	K
Presión	18	atm
Flujo total	26.3	Kmol/h
Fracción mol Agua	1	

Tabla 21.- Especificaciones del proceso convencional – Etilenglicol

### 2.3.1.2.- Estructura y lazos de control.

Una vez que la simulación en estado estacionario converge correctamente en el ambiente de Aspen Plus y los equipos han sido dimensionados, es posible exportar la simulación al ambiente dinámico de Aspen bajo la opción “Fully Pressure Driven”. En la siguiente figura se muestran los lazos de control correspondientes a la planta completa de producción de Etilenglicol, bajo las siguientes consideraciones:

- La temperatura del reactor CSTR es controlada mediante la remoción de calor.

- La temperatura del plato 38, 18 y 19 en la primera, segunda y tercera columna respectivamente, es controlada mediante la manipulación de la carga térmica del rehervidor.

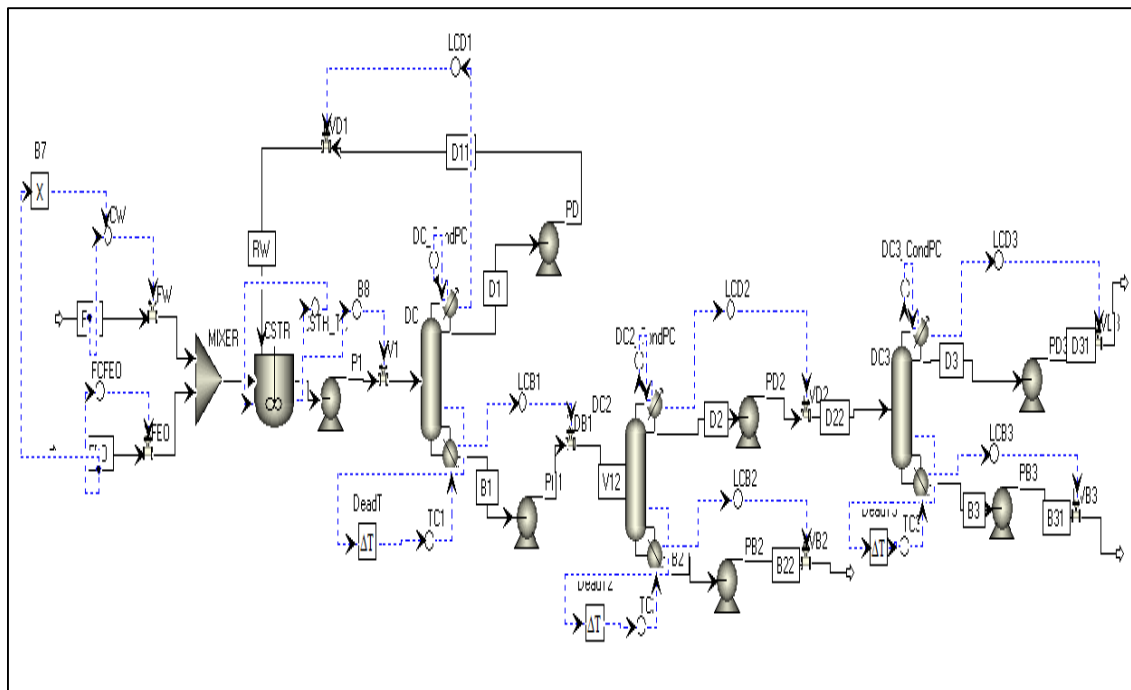


Figura 55.- Estructura de control - Proceso convencional Etilenglicol.

Los lazos de control de nivel, flujos de alimentación y presión de la columna son establecidos según (Luyben, 2002). El valor de los parámetros de los controladores es mostrado en la siguiente tabla:

CONTROLADOR - TIPO	PARÁMETRO	VALOR	UNIDADES
<b>FCW – (PI)</b>	SetPoint	26.3	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
<b>FCFO – (PI)</b>	Tipo de acción	Inversa	
	SetPoint	30.283	Kmol/h

	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>CSTR_TC – (PI)</b>	SetPoint	340	K
	Señal de salida	-183958.88	cal/s
	Ganancia	10.1634	
	Tiempo Integral	2.64	Min
	Tiempo derivativo	0	Min
	Variable manipulada	Calor removido	cal/s
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TC1 et. 38 - (PI)</b>	SetPoint	486.6	K
	Señal de salida	124195.1	cal/s
	Ganancia	1	
	Tiempo Integral	20	Min
	Tiempo derivativo	0	Min
	Variable manipulada	Carga térmica en rehervidor	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TC2 et. 18 - (PI)</b>	SetPoint	502.3	K
	Señal de salida	100837.97	cal/s
	Ganancia	8.2482	
	Tiempo Integral	14.52	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en rehervidor	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TC3 et. 19 - (PI)</b>	SetPoint	446.817	K
	Señal de salida	54939.47	cal/s
	Ganancia	0.6037	
	Tiempo Integral	22.44	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en rehervidor	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>LCB1 – (P)</b>	SetPoint	0.875	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	

	Tipo de acción	Directa	
<b>LCD1 – (P)</b>	SetPoint	0.4625	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	Min
	Tiempo derivativo	0	Min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>LCB2 – (P)</b>	SetPoint	0.90625	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	Min
	Tiempo derivativo	0	Min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>LCD2 – (P)</b>	SetPoint	0.55	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	Min
	Tiempo derivativo	0	Min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>LCB3 – (P)</b>	SetPoint	0.5	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	Min
	Tiempo derivativo	0	Min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>LCD3 – (P)</b>	SetPoint	0.345	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	Min
	Tiempo derivativo	0	Min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>DeadT1, 2, 3</b>	Tiempo muerto	1	min

Tabla 22.- Controladores - Proceso convencional Etilenglicol.

### 2.3.1.3.- Costos – Proceso convencional

En base al reporte de resultados generado por Aspen Plus, se lleva cabo la estimación económica del proceso en Aspen IPE (Process Economic Analyzer), con base a la información de la Tabla 4 y bajo la siguiente consideración de costos para materia prima y producto principal. Los resultados obtenidos en la estimación de costos se muestran en el Capítulo 3.

Óxido de etileno = 0.25 \$/lb

Agua = 0.000454 \$/lb

Etilenglicol = 0.71 \$/lb

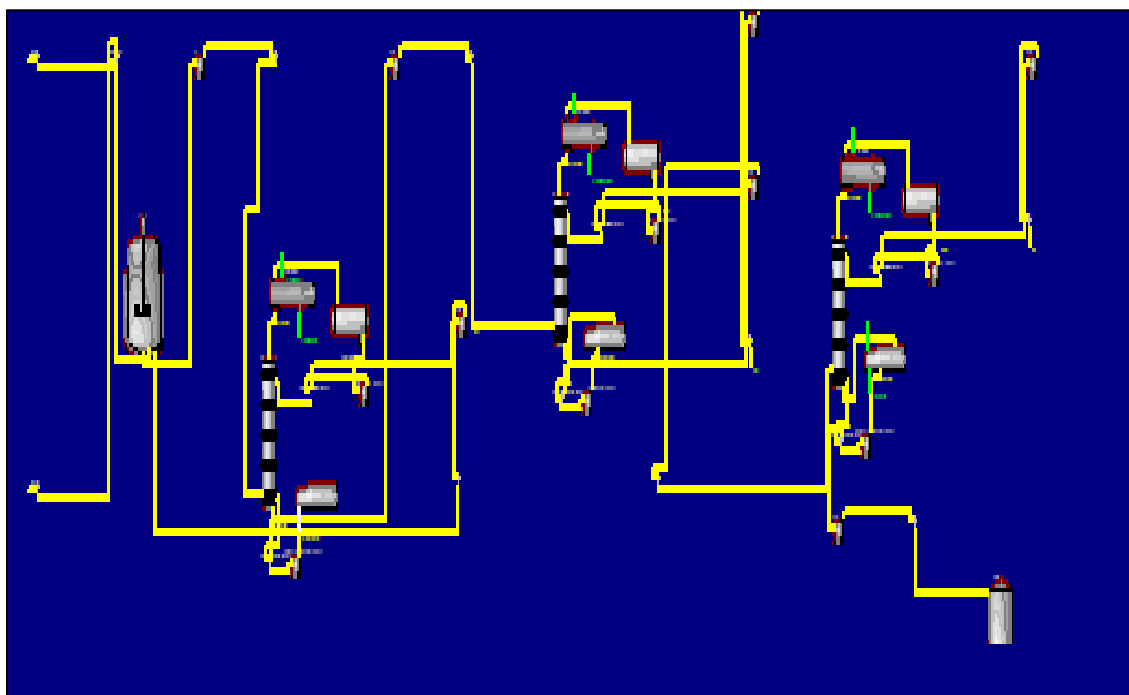


Figura 56.- DFP - Proceso convencional de Etilenglicol - Aspen IPE

### .3.2.- Destilación reactiva para EG

En la Figura 57 se muestra el DFP empleado en la obtención de Etilenglicol mediante el uso de una columna de destilación reactiva, modelo riguroso “RadFrac” en nomenclatura de Aspen Plus, y a continuación se muestran los parámetros de operación, así como las corrientes de alimentación. En este proceso, la concentración de óxido de etileno a lo largo de la columna es muy pequeña y su conversión es prácticamente del 100%. Es por esto que el control de flujo de la alimentación fresca será sobre la corriente de óxido de etileno, logrando así, control sobre la velocidad de producción. La columna no cuenta con corriente de destilado, por lo que la parte superior de la columna y el tanque de reflujo están llenos esencialmente con agua pura, condensando todo el vapor y regresándolo a la columna. En Aspen Plus estas condiciones se satisfacen especificando una cantidad muy pequeña de flujo en la corriente de destilado.

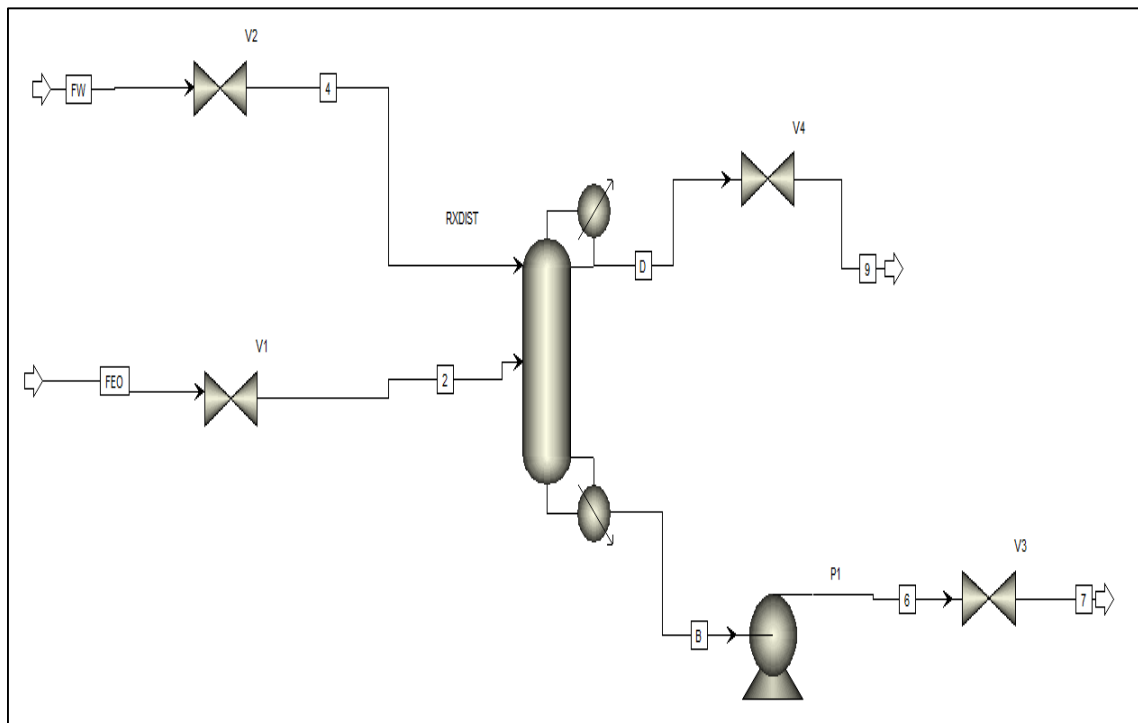


Figura 57.- DFP - Destilación reactiva – Etilenglicol

### 2.3.2.1.- Equipos

Parámetro	Valor	Unidades
Número total de etapas	12	-
Etapas reactivas	2-11	-
Presión	15	atm
Carga térmica en rehervidor	6900	kW
Retención de líquido	0.1	m <sup>3</sup>
<b>Corrientes</b>		
<b>FEO (Etapa Alim. 6)</b>		
Temperatura	313	K
Presión	18	Atm
Flujo total	27.53	Kmol/h
Fracción mol Óxido de Etileno	1	-
<b>FW (Etapa Alim. 2)</b>		
Temperatura	313	K
Presión	18	atm
Flujo total	26.3	Kmol/h
Fracción mol Agua	1	-

Tabla 23.- Especificaciones del proceso destilación reactiva - Etilenglicol

### 2.3.2.2.- Estructura y lazos de control

El objetivo de los lazos de control en la comuna de destilación reactiva es el de mantener la pureza de etilenglicol dentro del rango deseado del 90%, sin embargo, para lograr esto, comúnmente se trata de controlar directamente la pureza del producto, lo que requiere del empleo de un costoso y no fidedigno analizador de composición, es por esto que en su lugar se propone que el uso de mediciones simples de temperatura es preferible, ya que pueden ser empleadas para inferir la composición (Al-Arfaj, y Luyben, 2002).

El esquema de control para la columna reactiva sigue la siguiente estructura:

- La alimentación fresca de óxido de etileno tiene control de flujo.
- Flujo de destilado también es controlado, debido a la pequeña cantidad de flujo que se establece en la especificación de la columna (0.01 kmol/h).
- La presión en la columna es controlada mediante el calor removido en el condensador.
- El nivel en el tanque de reflujo es controlado mediante la velocidad de flujo de agua fresca que es alimentada en el tope de la columna.
- El nivel de la base de la columna es controlado mediante el flujo en la corriente de fondos.
- La temperatura en la etapa 10 es controlada manipulando la carga térmica en el rehervidor, este lazo de control tiene un retraso en la señal y un tiempo muerto, 0.5 y 4 minutos respectivamente.

A continuación se muestra en la Figura 58 el esquema de control utilizado en Aspen Dynamics, y en la Tabla 24, las especificaciones para cada uno de los controladores involucrados en el proceso empleando la destilación reactiva. En cuanto al lazo de control de la temperatura del plato 10, los parámetros fueron establecidos mediante una prueba de relé realimentado, empleando la técnica de “Tyreus-Luyben”.

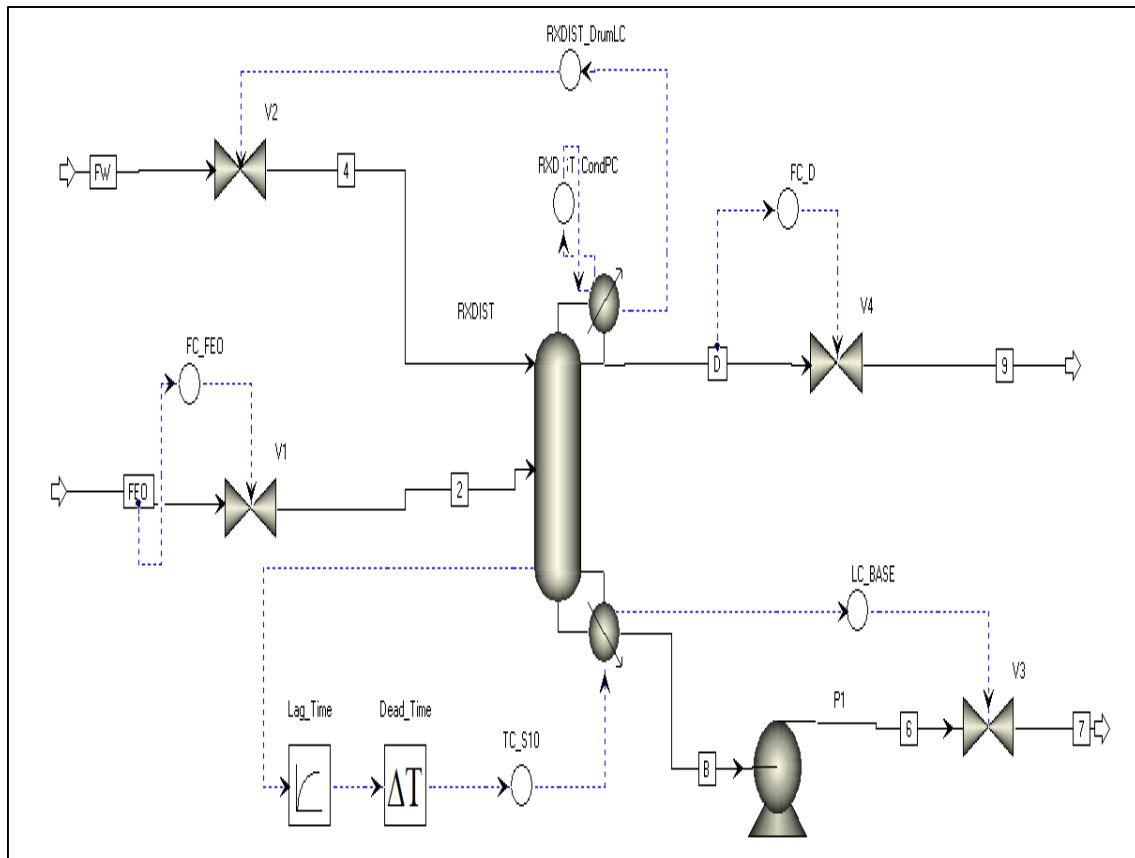


Figura 58.- Estructura de control destilación reactiva - Etilenglicol

CONTROLADOR-TIPO	PARÁMETRO	VALOR	UNIDADES
<b>FC_FEO - (PI)</b>	SetPoint	27.53	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>FC_D - (PI)</b>	SetPoint	0.01	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min

	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>LC_BASE - (P)</b>	SetPoint	1.7	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>RXDIST_DrumLC - (P)</b>	SetPoint	1.3625	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>RXDIST_CondPC - (P)</b>	SetPoint	15	atm
	Señal de salida	-1723923.84	cal/s
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	12	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en condensador	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TC_S10 (PI)</b>	SetPoint	493.19	K
	Señal de salida	1648045.43	cal/s
	Ganancia	0.71116	
	Tiempo Integral	40.1279	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en rehedidor	cal/s
	Tipo de acción	Inversa	

Tabla 24.- Controladores - Destilación reactiva - Etilenglicol

### 2.3.2.3.- Costos – Destilación reactiva

En los tres escenarios de sistemas de producción es importante el conocer un valor aproximado para los costos que tendrá el construir y operar la planta. Estos costos deciden si se llevará a cabo el proyecto, ya que, aunque se cuente con un proceso innovador y cuente con altas purzas en sus productos, sino es redituable económicamente, este proceso puede que nunca se lleve a cabo.

En el proceso de destilación reactiva, se estiman únicamente los costos de un equipo principal, en contraste con el proceso convencional. En éste último se estiman cuatro equipos principales. El resultado de la comparación de costos de los procesos: convencional, destilación reactiva y destilación reactiva con etapas de no equilibrio, es uno de los parámetros principales de decisión para la elección entre procesos y puede decidir cuál será llevado a cabo en la vida real.

En base a los resultados obtenidos en Aspen Plus en estado estacionario, a la información contenida en la Tabla 4 y a los costos de materia prima considerados en la estimación de costos para el proceso convencional de producción de etilenglicol, se realiza el análisis económico de la columna reactiva en el software Aspen IPE (Process Economic Analyzer), obteniendo el siguiente DFP.

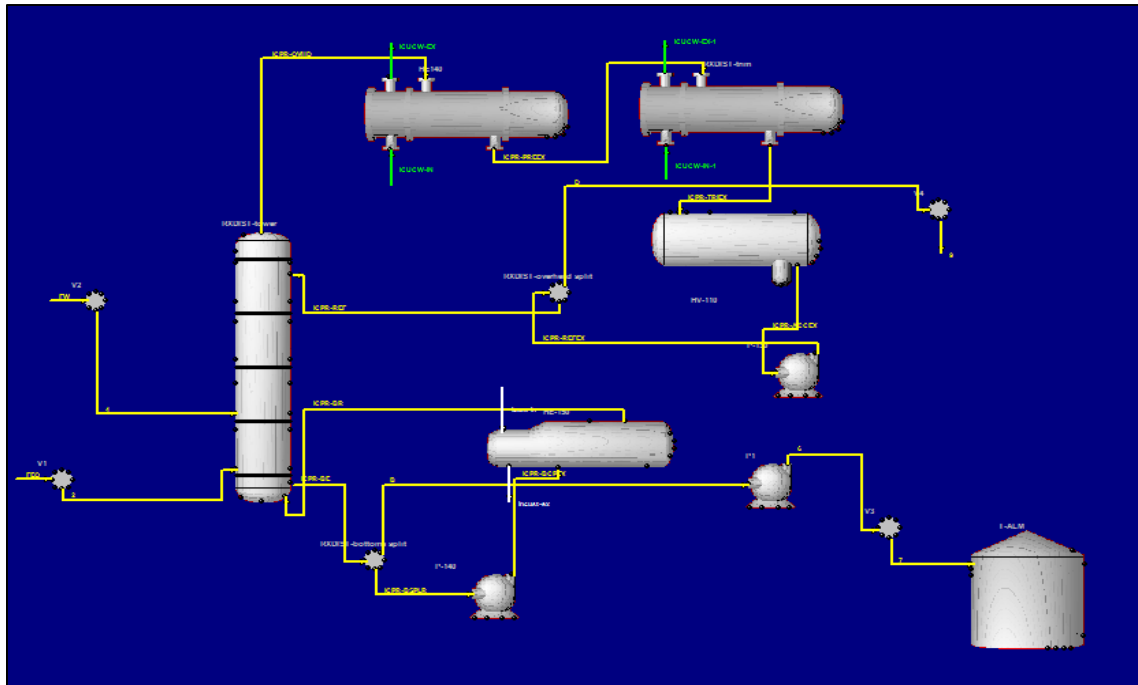


Figura 59.- DFP - Destilación reactiva para Etilenglicol - Aspen IPE

En la Figura 59 se muestra el DFP obtenido en Aspe IPE, cuyos resultados se presentan y comparan en el Capítulo 3.

### 2.3.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio

Aspen Plus cuenta con dos modelos matemáticos para simular columnas de destilación reactiva: modelo con etapas de equilibrio (EQM, equilibrium model) y el modelo basado en flujos o de no equilibrio (RBM, rate based model). La diferencia entre ambos es que en EQM, el vapor y líquido se asume estar en equilibrio termodinámico en cada una de las etapas. En RBM, se toma en cuenta la transferencia de masa a través de la interfase de vapor y líquido, por lo tanto, la mayor parte de las fases fluidas no están en equilibrio (Panda, y Kannan, 2014).

Un factor muy importante a considerar, es que Aspen Dynamics no es compatible para llevar a cabo la simulación de la columna reactiva con etapas de no equilibrio. En este caso, para comparar los resultados obtenidos mediante destilación reactiva y destilación reactiva con etapas de no equilibrio, se deben incorporar las eficiencias de los platos o eficiencias de componentes de Murphree a la simulación. En estos escenarios, es necesario remplazar la simulación con etapas de no equilibrio, por su equivalente en etapas de equilibrio. Este cambio se logra incorporando las eficiencias individuales de los platos obtenidas en la simulación de no equilibrio al modelo de equilibrio.

En el desarrollo de la simulación de esta columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio, se toman como base los parámetros de la simulación de la columna de destilación reactiva de la sección anterior con etapas de equilibrio. Es necesario realizar algunos cambios en la simulación, de tal forma que se alcance una pureza de producto alrededor del 90% en la columna reactiva con etapas de no equilibrio.

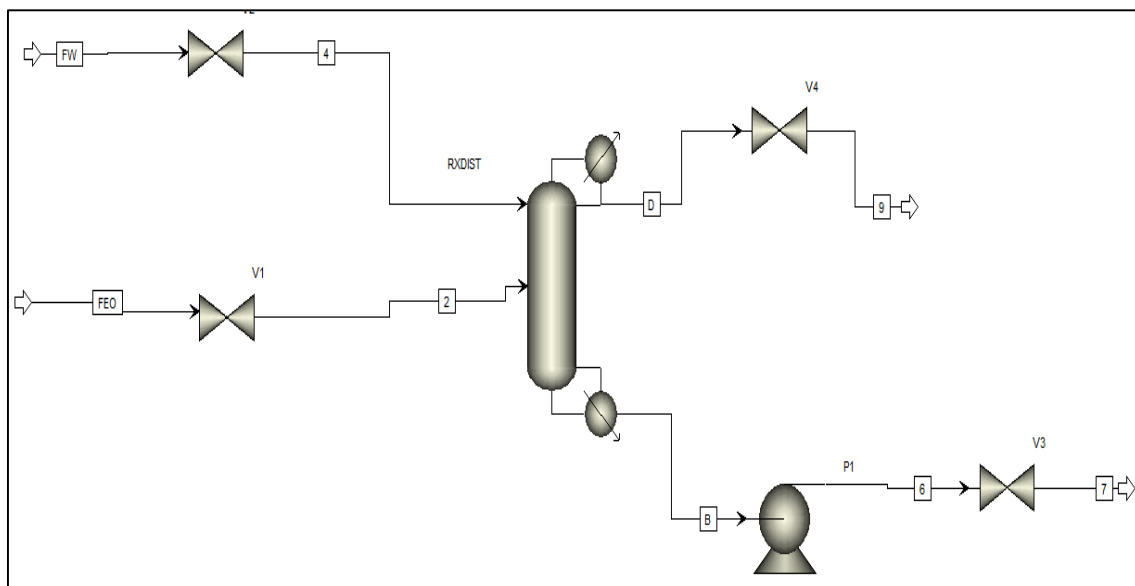


Figura 60.- DFP - Destilación reactiva NEQ - Etilenglicol

### 2.3.3.1.- Equipos

Parámetro	Valor	Unidades
Número total de etapas	19	-
Etapas reactivas	2-11	-
Presión	15	atm
Carga térmica en rehervidor	6900	kW
Retención de líquido	0.1	m <sup>3</sup>
<b>Corrientes</b>		
<b>FEO (Etapa Alim. 6)</b>		
Temperatura	313	K
Presión	18	Atm
Flujo total	27.53	Kmol/h
Fracción mol Óxido de Etileno	1	-
<b>FW (Etapa Alim. 2)</b>		
Temperatura	313	K
Presión	18	atm
Flujo total	26.3	Kmol/h
Fracción mol Agua	1	-

Tabla 25.- Especificaciones del proceso destilación reactiva NEQ - Etilenglicol

### 2.3.3.2.- Estructura y lazos de control

En cuanto al esquema y lazos de control para la columna de destilación con etapas de no equilibrio, son similares a los empleados para la columna de destilación reactiva, con la diferencia de que en este caso, la temperatura del plato 17 es controlada. Es importante recalcar que el objetivo del sistema de control, es el mantener la pureza del producto lo más cerca posible de la especificación del 90%.

A continuación en la Tabla 26, se muestran los parámetros empleados para los controladores de la simulación en estado dinámico. El lazo de control de temperatura ha sido sintonizado mediante la prueba de relé retroalimentado con la técnica de Tyreus-Luyben a lazo cerrado.

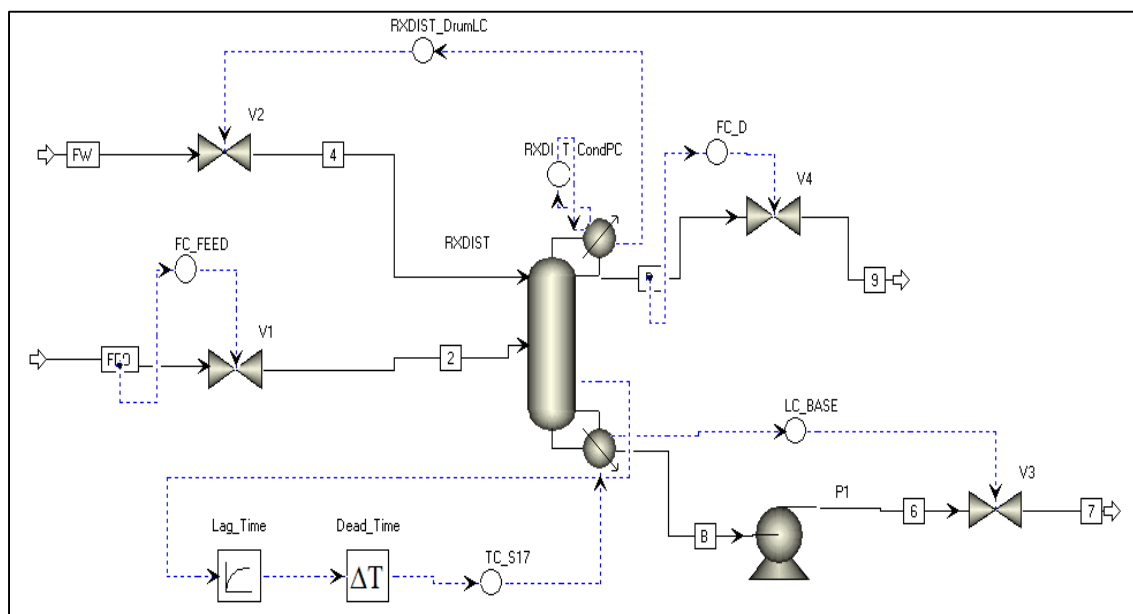


Figura 61.- Estructura de control destilación reactiva NEQ – Etilenglicol

CONTROLADOR-TIPO	PARÁMETRO	VALOR	UNIDADES
<b>FC_FEO - (PI)</b>	SetPoint	27.53	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>FC_D - (PI)</b>	SetPoint	0.00311	Kmol/h
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	0.5	
	Tiempo Integral	0.3	min

	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>LC_BASE - (P)</b>	SetPoint	1.7	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Directa	
<b>RXDIST_DrumLC - (P)</b>	SetPoint	1.3625	m
	Señal de salida	50	%
	Ganancia	2	
	Tiempo Integral	60000	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Apertura de válvula	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>RXDIST_CondPC - (P)</b>	SetPoint	15	atm
	Señal de salida	-1713105.1206	cal/s
	Ganancia	20	
	Tiempo Integral	12	min
	Tiempo derivativo	0	min
	Variable manipulada	Carga térmica en condensador	
	Tipo de acción	Inversa	
<b>TC_S17 (PI)</b>	SetPoint	518.8966	K
	Señal de salida	1648045.43	cal/s
	Ganancia	0.830617	
	Tiempo Integral	38.016	Min
	Tiempo derivativo	0	Min
	Variable manipulada	Carga térmica en rehedidor	cal/s
	Tipo de acción	Inversa	

Tabla 26.- Controladores - Destilación reactiva NEQ - Etilenglicol

### 2.3.3.3.- Costos – Destilación reactiva – No equilibrio

En cada uno de los sistemas simulados en este estudio, los costos de operación son fundamentales para la toma de decisiones. La destilación reactiva con etapas de no equilibrio, en comparación con la destilación reactiva con etapas de equilibrio, se acerca más a la realidad por el hecho de contemplar la transferencia de masa entre las fases fluidas y el estado de no equilibrio. A pesar de que ambas columnas son equipos simulados empleando métodos rigurosos, el avance tecnológico y el aumento en el interés de aproximarse cada vez más a la realidad, coloca a la columna con etapas de no equilibrio sobre la columna de equilibrio como mejor opción para el desarrollo de simulaciones rigurosas.

Por lo anterior, el costo de operación de esta columna es muy importante, así como el comparar los costos con respecto a su homóloga con etapas de equilibrio y el proceso convencional, mismos resultados que se presentan en el Capítulo 3. En la siguiente figura se muestra el DFP obtenido en Aspen IPE.

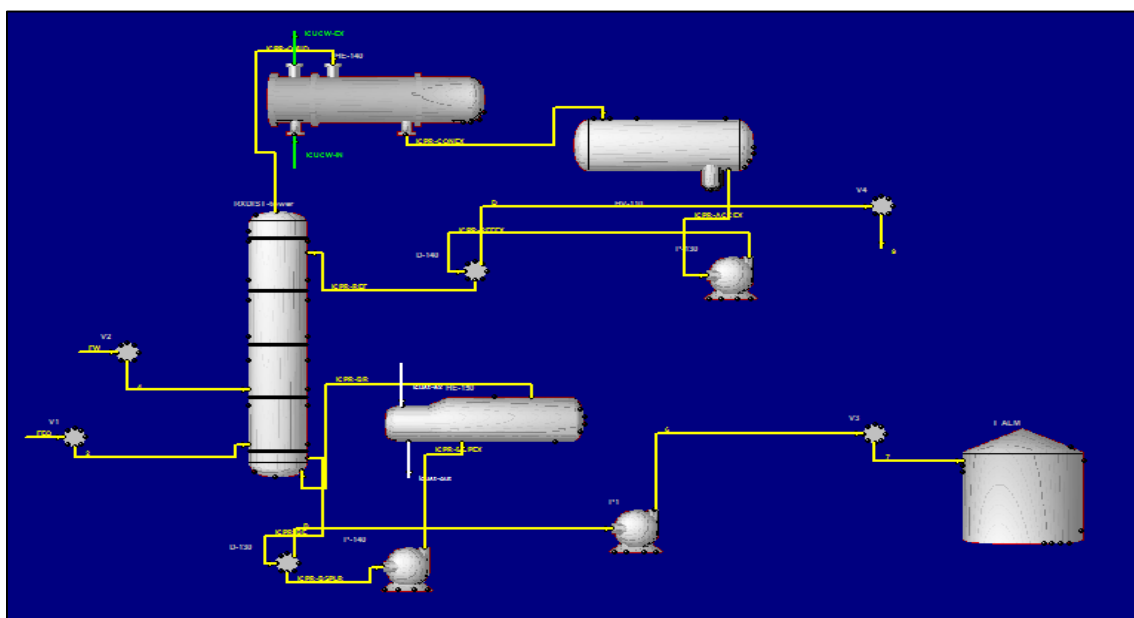


Figura 62.- DFP - Destilación reactiva NEQ de Etilenglicol - Aspen IPE

## CAPÍTULO 3

### RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos a partir de las simulaciones realizadas en estado estacionario y dinámico de los sistemas de producción de Metil Tert Butil Éter (MTBE), Tert Amil Metil Éter (TAME) y Etilenglicol (EG), mediante la comparación de tres distintos procesos: convencional con reacción y separación en zonas distintas de la planta, destilación reactiva y destilación reactiva con etapas de no equilibrio. En este capítulo además, se muestran resultados de los cálculos realizados para el análisis económico.

#### 3.1. – Metil Tert Butil Éter (MTBE)

##### 3.1.1.- Proceso convencional

En primera instancia se analiza el proceso convencional de obtención de MTBE en estado estacionario, a la vez que se analizan los efectos que se tienen al modificar los parámetros de diseño sobre la calidad del producto principal. Aspen Plus posee una opción llamada “Model Analysis Tools - Sensitivity” en donde es posible llevar a cabo análisis de variación de parámetros de diseño de manera rápida, aunque en ocasiones esta herramienta suele no ser suficiente para obtener los resultados esperados, en ocasiones es necesario llevar a cabo un proceso largo de simulación paso a paso con la finalidad de obtener la mayor cantidad de información posible.

### 3.1.1.1.- Simulación en estado estacionario

En base al esquema de simulación y condiciones de operación establecidos en la sección 2.1.1, se muestran los resultados obtenidos en el software Aspen Plus para la planta de producción de MTBE en el proceso convencional.

Los perfiles de temperatura y composición a lo largo de la columna de destilación son los gráficos más importantes a observar, debido a que en base a estos resultados se toman decisiones acerca de los lazos de control, en otras palabras, se observa en que plato de la columna la temperatura debe ser monitoreada. En cuanto al perfil de composición, se puede decidir en qué plato (o platos), se debe instalar un analizador de composición de ser necesario (control de composición). A continuación se muestran los perfiles obtenidos en la simulación en estado estacionario a lo largo de la columna de destilación.

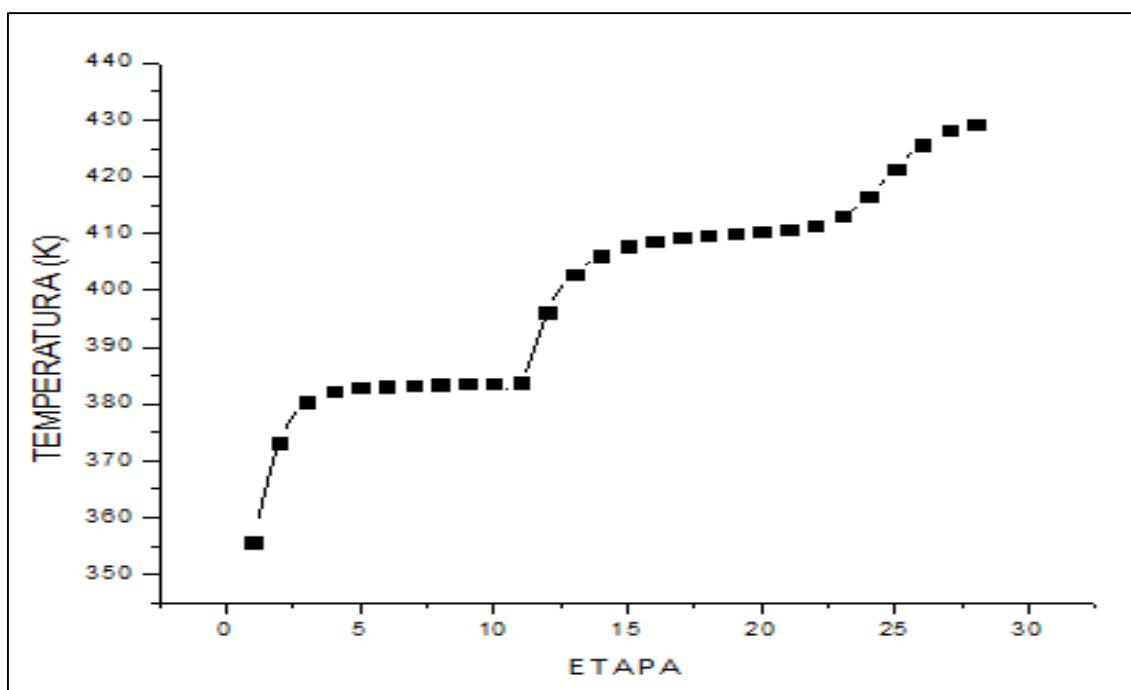


Figura 63.- Perfil de temperatura en columna de destilación - MTBE convencional

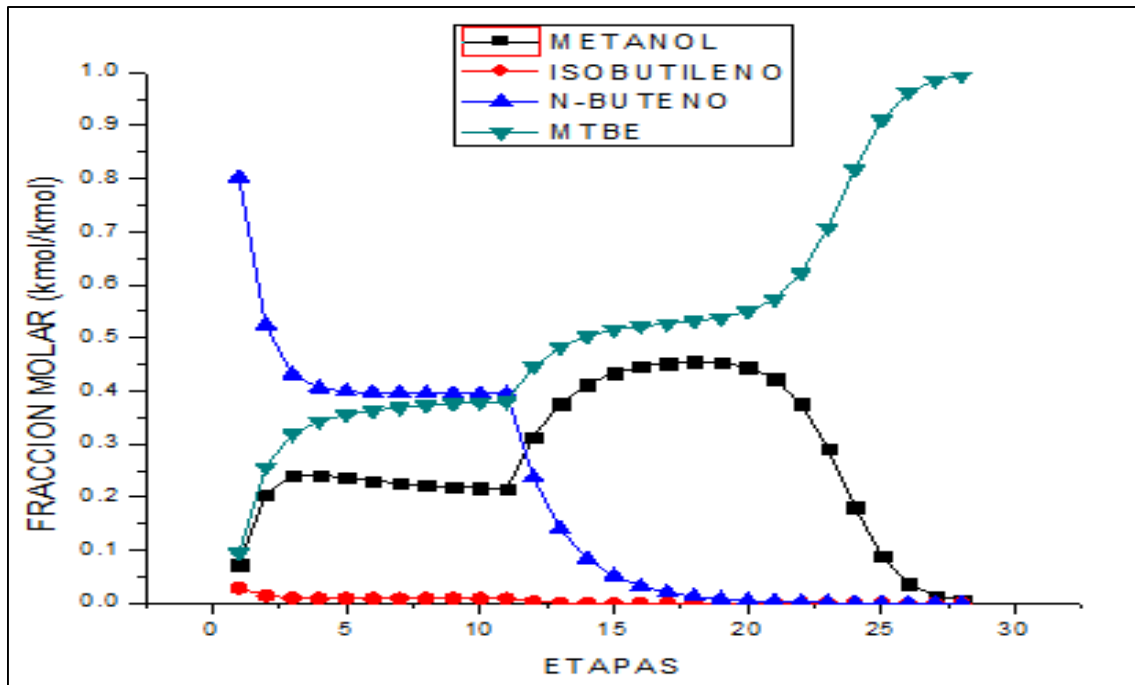


Figura 64.- Perfiles de fracción molar en columna de destilación - MTBE convencional

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	356.34	K
Carga térmica	-12972101	W
Presión	11	atm
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	430	K
Carga térmica	21370422	W
Presión	11.68	atm
Flujo	510	Kmol/h
Diámetro de columna	5.1	m
<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	6	M
Diámetro	3	M

<b>Tanque de fondos</b>		
Largo	5.8	m
Diámetro	5.1	m

*Tabla 27.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación – Convencional - MTBE*

#### 3.1.1.1.1.- Efecto de los parámetros de diseño

Una de las utilidades prácticas más importantes que han hecho que el empleo de simuladores de procesos obtenga cada vez más una mayor importancia en el diseño conceptual de plantas de proceso, es el de poder observar las consecuencias o efectos sobre variables seleccionadas que tiene el trabajar bajo distintas condiciones de operación, sin tener que someter un equipo físico o personal humano a realizar dichos cambios.

En cuanto a la columna de destilación convencional, las variables a monitorear que presentan efecto sobre la calidad de producto MTBE son las siguientes: Relación de reflujo, velocidad de fondos, carga térmica en el rehervidor, etapas de rectificación y etapas de agotamiento, los cuales se muestran a continuación.

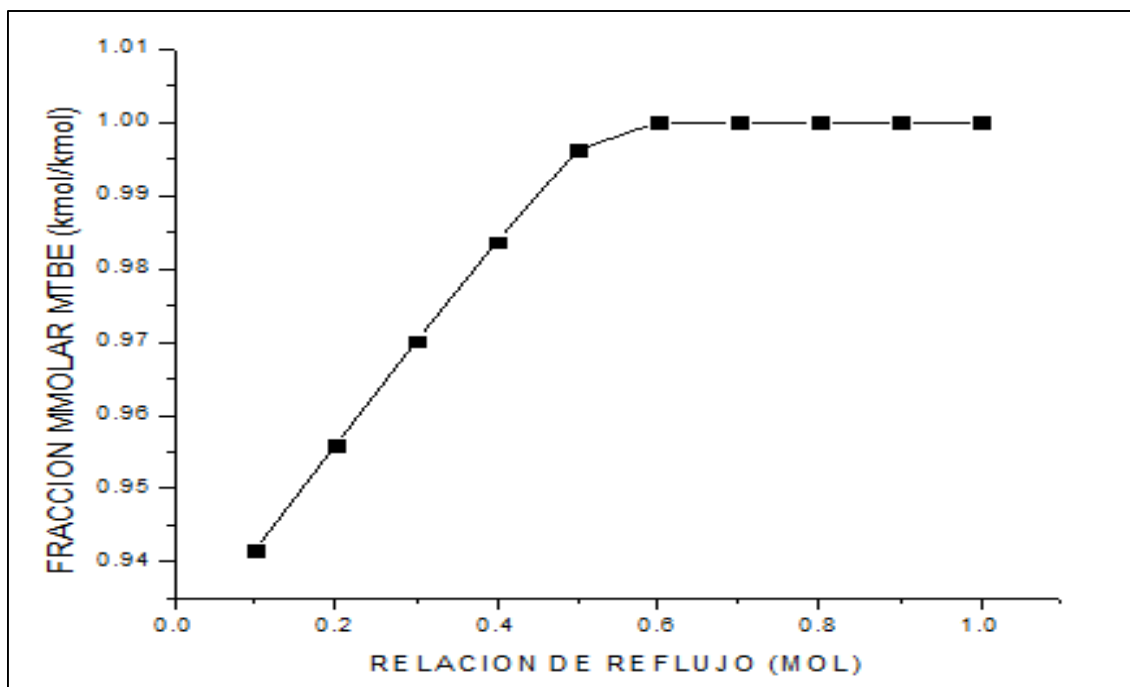


Figura 65.- Relación de reflujo - Fracción molar de MTBE.

Es posible observar en la Figura 65 como la fracción molar de MTBE en la corriente de fondos aumenta conforme se incrementa la relación de reflujo de la columna, alcanzando el objetivo de una pureza del 99% cuando la relación de reflujo se encuentra en un valor aproximado al 0.5. A partir de este punto a pesar de que la relación de reflujo aumenta, la pureza de MTBE permanece constante, por lo que no es conveniente seguir incrementando la relación de reflujo, ya que de hacerlo, el diámetro de la columna incrementará aumentando el costo de la misma. Otro parámetro importante es el de velocidad de flujo molar en la corriente de fondos de la columna, donde se observa un comportamiento distinto a la relación de reflujo, ya que conforme incrementa la velocidad de flujo, la fracción molar de MTBE disminuye.

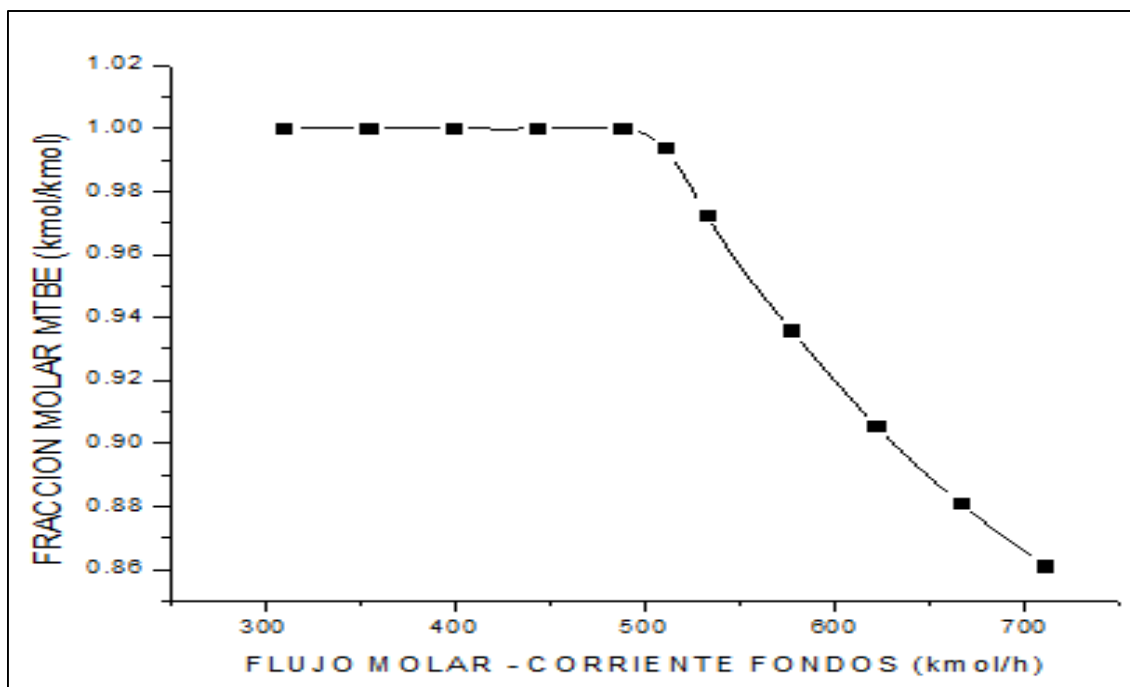


Figura 66.- Velocidad de flujo molar en fondos - Fracción molar de MTBE

Es posible observar en la Figura 66 que la pureza de MTBE a partir de un valor de flujo en fondos de 510 kmol/h aproximadamente, disminuye considerablemente. Por lo que, a partir de este punto no es recomendable seguir incrementando la velocidad de flujo en la corriente de fondos y, por otra parte, disminuir la velocidad significa una disminución en la producción de MTBE afectando el flujo de efectivo por concepto de venta.

Uno de los parámetros más importantes en destilación convencional y reactiva, es la carga térmica alimentada al rehervidor, debido a que es uno de los aspectos del proceso que conlleva mayor gasto de capital para la operación, es por esto que realizar el análisis de sensibilidad sobre esta variable es indispensable para permitir minimizar los gastos de operación sin afectar la calidad del producto.

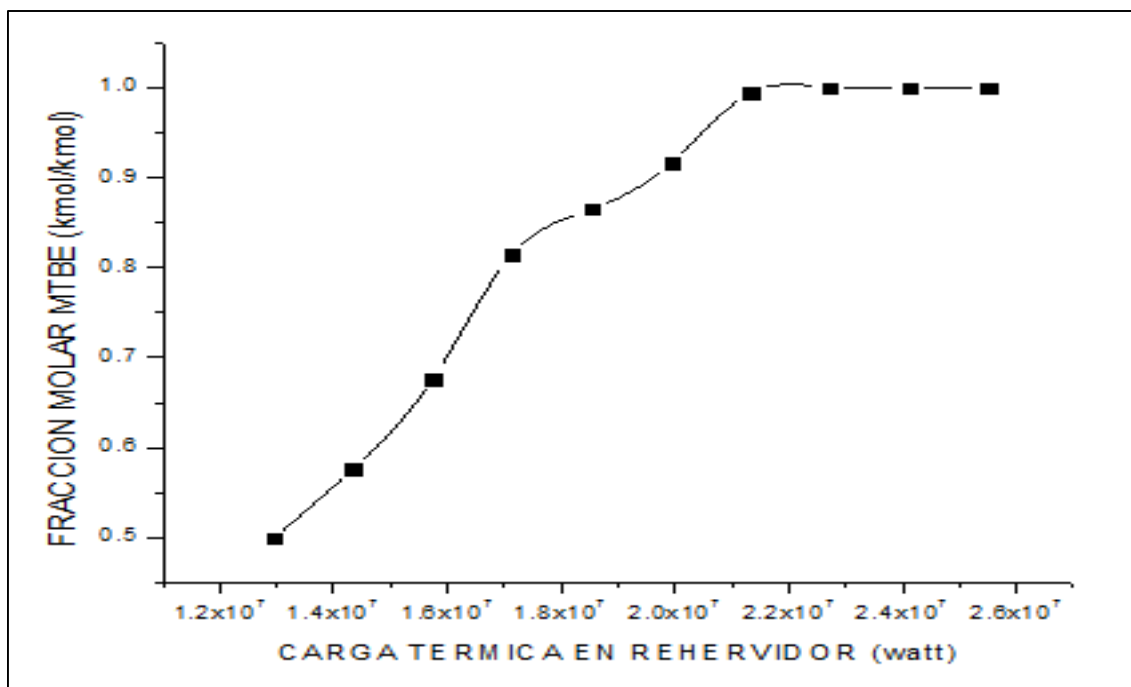


Figura 67.- Carga térmica en rehervidor - Fracción molar de MTBE

En la Figura 67 se observa el comportamiento de la fracción molar de MTBE conforme aumenta la carga térmica en el rehervidor, es posible observar como la fracción molar aumenta hasta un punto en donde permanece prácticamente estable. Es en este punto cuando la carga térmica es la mejor opción que minimiza gastos de operación manteniendo la pureza deseada del producto principal.

En cuanto a la cantidad de etapas en la zona de rectificación se obtiene un comportamiento ascendente con el aumento del número de etapas, visualmente se observa un cambio muy pronunciado, sin embargo, esto se debe a la escala del eje ordenado, ya que un aumento de 9 etapas de rectificación representa un incremento en la pureza de MTBE menor al 1%. En la Figura 68 se muestra esta respuesta

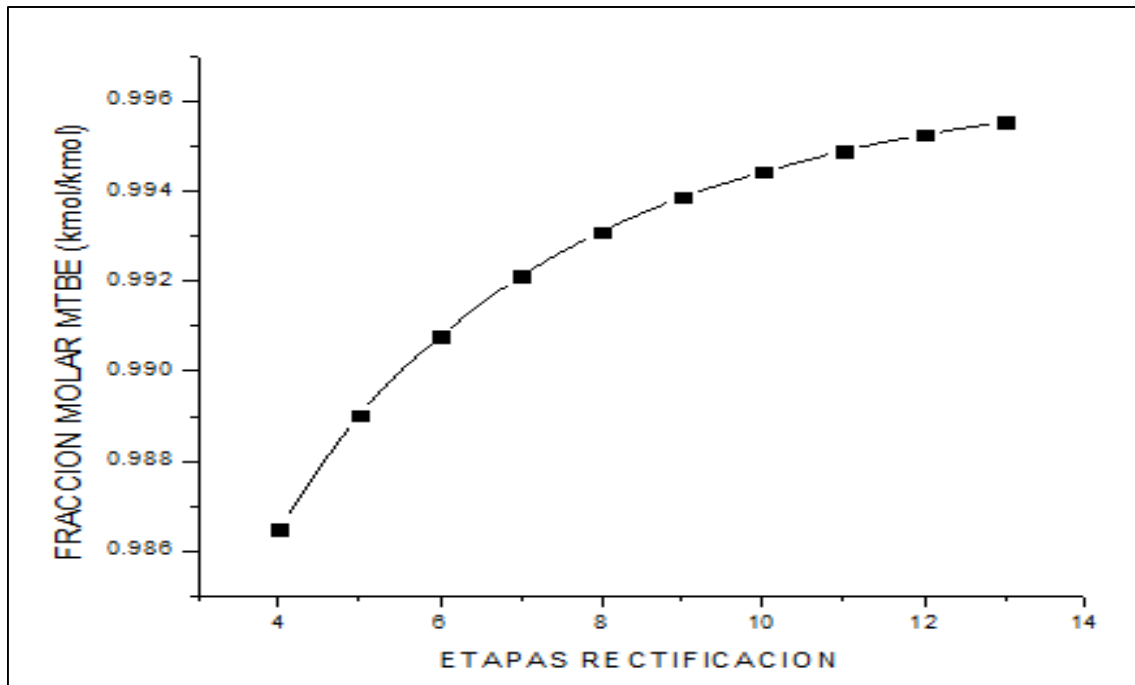


Figura 68.- Etapas de rectificación - Fracción molar MTBE

Con respecto al número de etapas de agotamiento se presenta un comportamiento que permanece estable en primera instancia con el aumento del número de etapas, pero que después de un punto se observa que el comportamiento es oscilatorio. En cuanto a este parámetro, se puede determinar que el número de etapas de agotamiento correcto debe estar dentro del intervalo en donde la fracción molar de MTBE permanezca estable.

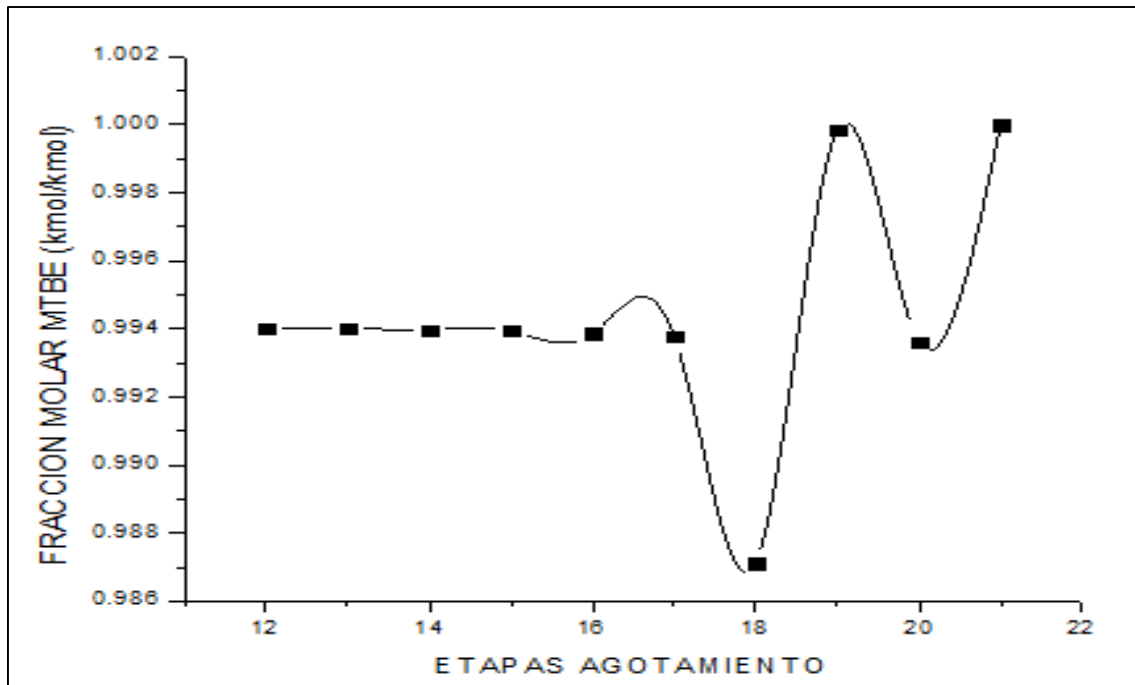


Figura 69.- Etapas de agotamiento - Fracción mol MTBE

El poder observar distintos escenarios de condiciones de operación de plantas de proceso permite tener un panorama amplio acerca del comportamiento de las variables y de la pureza del producto principal. Lo cual es de bastante utilidad en el diseño de plantas y toma de decisiones.

### 3.1.2.- Destilación reactiva

En esta sección se presentan los resultados obtenidos en la simulación en estado estacionario de la columna de destilación reactiva para la producción de MTBE bajo las condiciones de operación propuestas en la sección 2.1.2, además se observan los resultados obtenidos en el proceso de variación de parámetros y el efecto que tienen sobre la calidad del producto principal MTBE.

#### 3.1.2.1.- Simulación en estado estacionario

En base a la información contenida en la sección 2.1.2.1 los perfiles de temperatura y composición, como resultado de la simulación se muestran en las siguientes figuras. Además se muestran los resultados correspondientes a la columna reactiva en la Tabla 28.

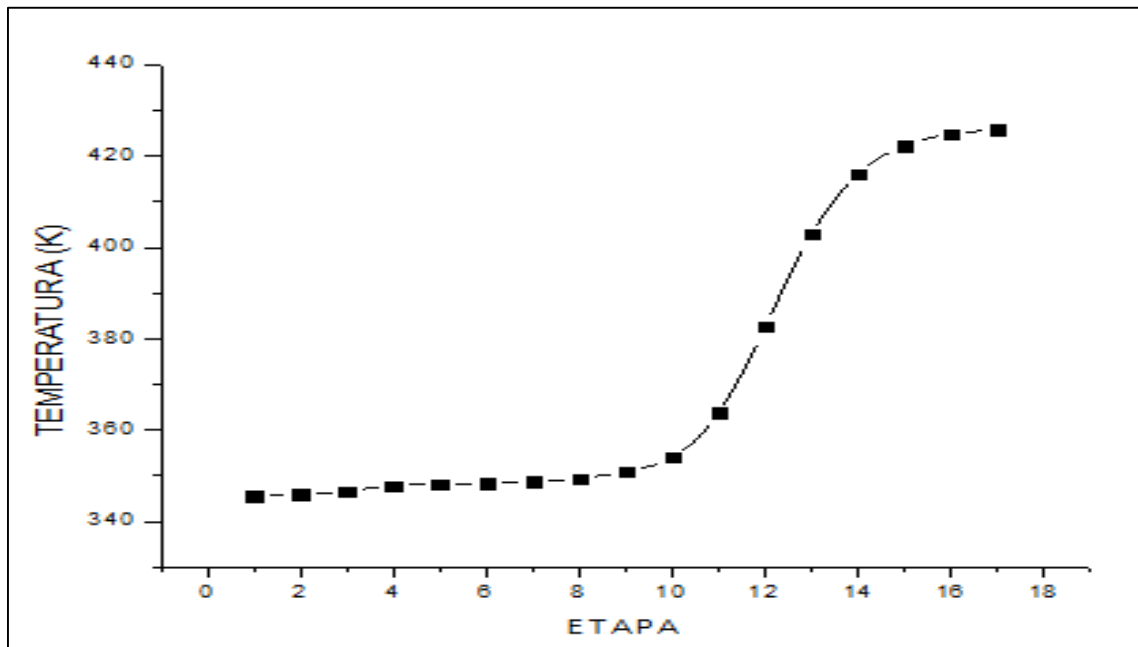


Figura 70.- Perfil de temperatura en columna de destilación - MTBE destilación reactiva

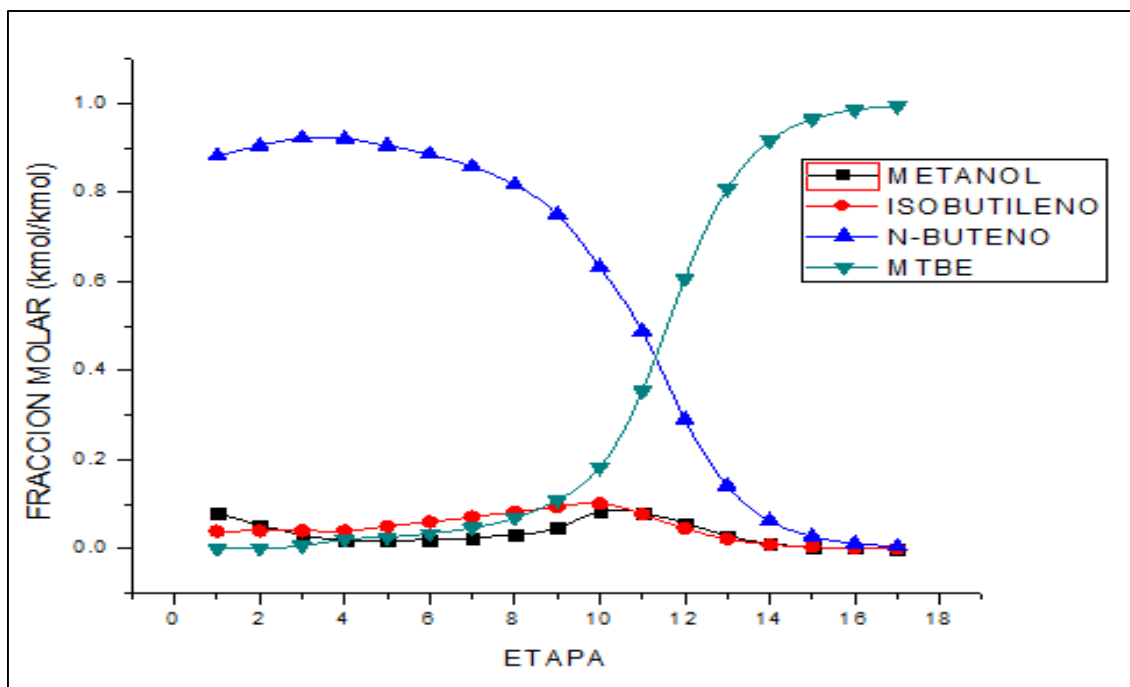


Figura 71.- Perfil de composiciones en columna de destilación - MTBE destilación reactiva

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	345.60	K
Carga térmica	-56097057	W
Presión	11	Bar
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	429.12	K
Carga térmica	53011148.4	W
Presión	11.69	Bar
Flujo	657.86	Kmol/h
Diámetro de columna	9.6	m
Empaque	Mellapak Sulzer St. 250Y	
<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	9.067	m
Diámetro	4.534	m

Tanque de fondos		
Largo	6.447	m
Diámetro	9.553	m

Tabla 28.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - MTBE destilación reactiva

### 3.1.2.1.1.- Efecto de los parámetros de diseño

A continuación se presentan los resultados obtenidos de monitorear la composición de MTBE en función de la relación de reflujo, velocidad de flujo de fondos, número de etapas reactivas, carga térmica en el rehervidor, etapas de rectificación y etapas de agotamiento (Sneesby, 1998), los cuales son los parámetros a monitorear en la columna de destilación reactiva.

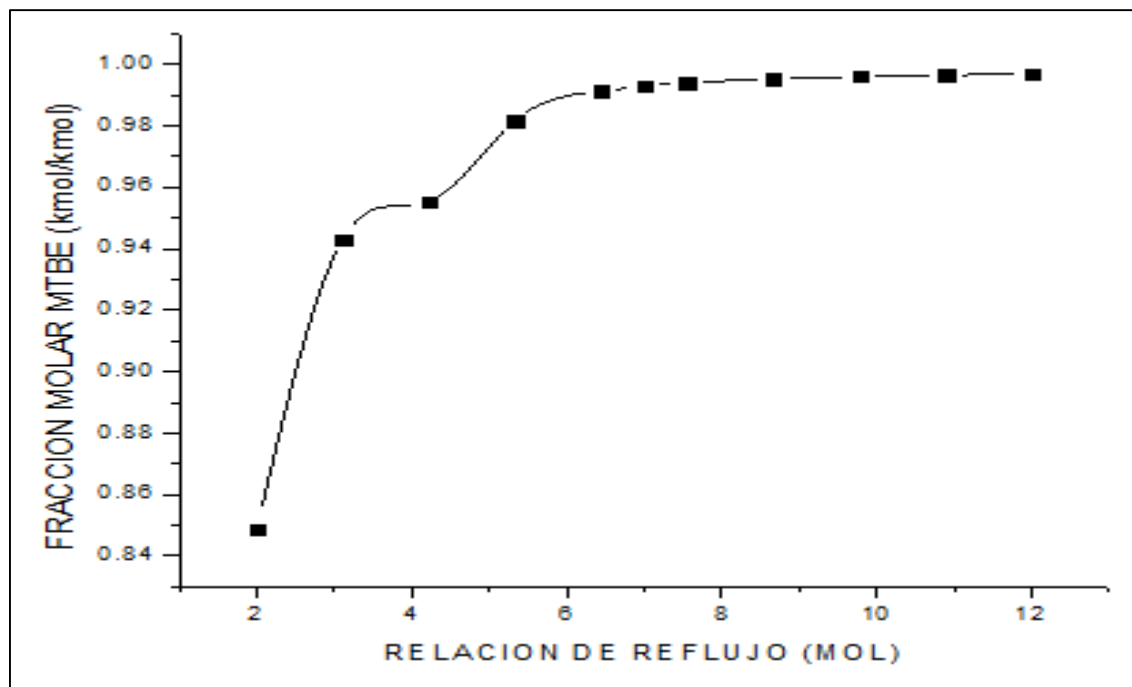


Figura 72.- Relación de reflujo – Fracción molar de MTBE

Se puede observar en la Figura 72 que la pureza de MTBE aumenta considerablemente rápido conforme se incrementa la relación de reflujo, pero llega un punto en el que la composición del producto principal permanece prácticamente constante (RR = 7), es en este punto en el que la relación de reflujo es óptima para los propósitos de la columna, es decir, conseguir el 99% de pureza de MTBE y ya no es necesario aumentar la relación de reflujo porque no representa un cambio significativo.

Por otra parte, la columna reactiva muestra un gran cambio cuando se monitorea la velocidad de flujo molar en la corriente de fondos, Figura 73, comenzando desde valores muy pequeños de pureza de MTBE, para después alcanzar valores estables y prácticamente iguales de composición cuando la velocidad está por arriba de los 660 kmol/h.

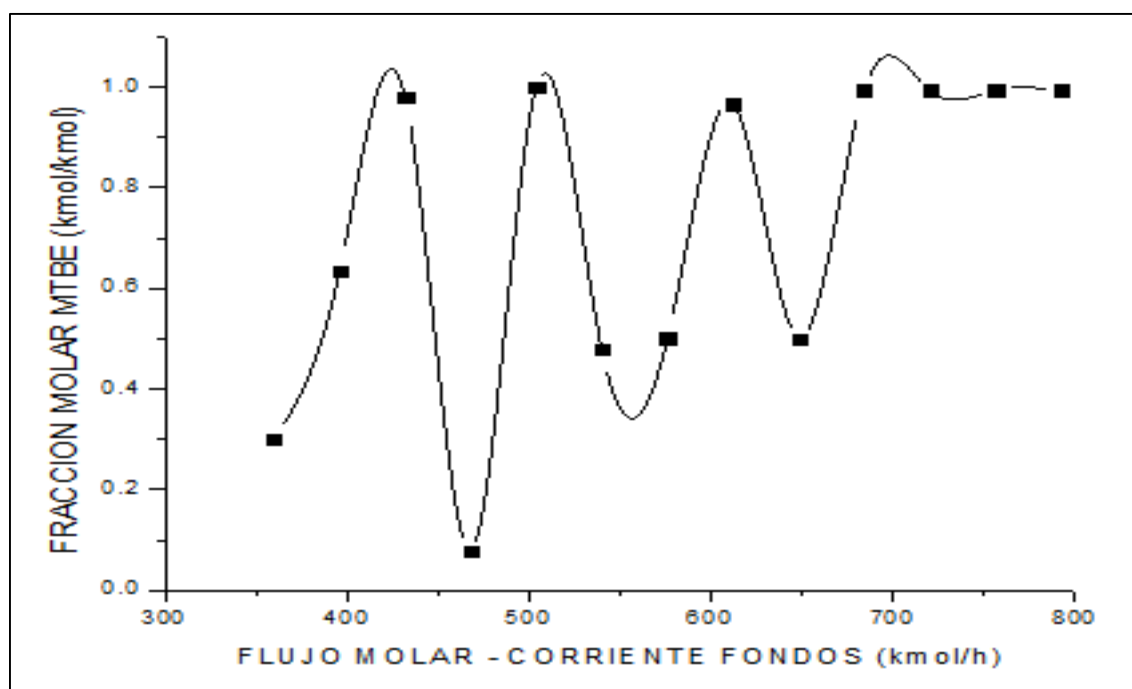


Figura 73.- Velocidad de flujo molar en fondos - Fracción molar de MTBE

Uno de los parámetros más importantes a observar, es el número de etapas reactivas, ya que en esta sección de la columna se está generando el producto principal MTBE, por lo que de éste depende la cantidad de MTBE y está ampliamente ligado a la pureza que se obtiene en la corriente de fondos de la columna. Considerar pocas etapas reactivas puede llevar a poca producción de MTBE, por lo que la pureza no será la deseada y, por otra parte, si se consideran demasiadas etapas reactivas, puede promover a la generación de reacciones secundarias o reacciones inversas. Por lo que el número de etapas reactivas debe ser considerado como uno de los más importantes dentro del análisis de variación de parámetros.

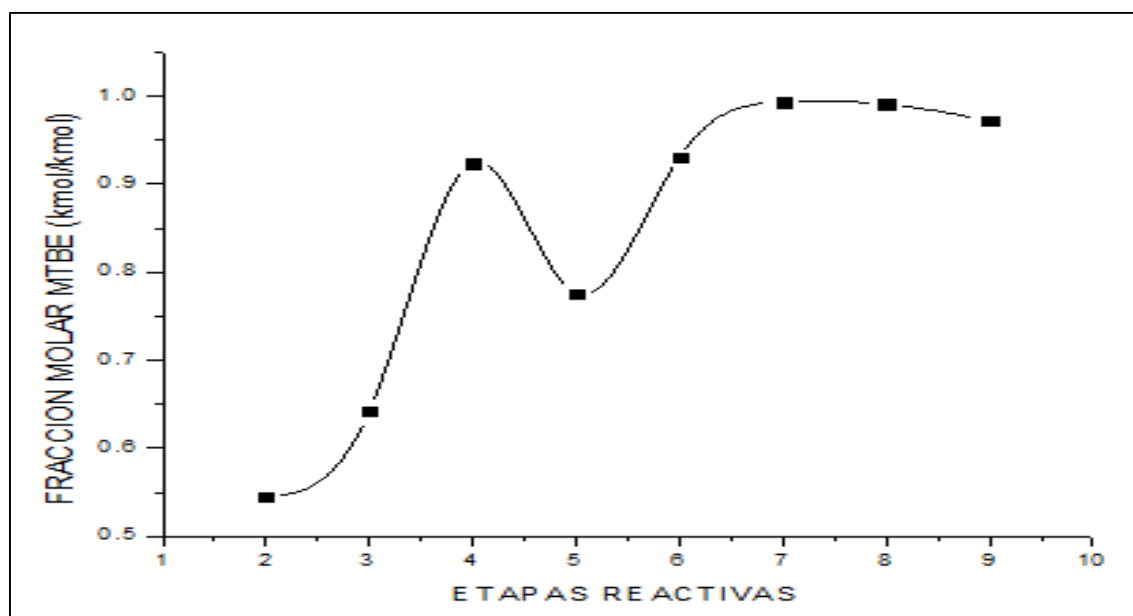


Figura 74.- Número de etapas reactivas - Fracción molar de MTBE

En cuanto a los cambios realizados al número de etapas reactivas se puede observar que el comportamiento de la pureza del producto MTBE en la corriente de fondos asciende conforme el número de etapas aumenta, mostrando una máxima pureza cuando el número de etapas reactivas es de 7.

Por lo anterior, una cantidad pequeña de etapas reactivas conlleva menor pureza de MTBE, sin embargo, el mismo comportamiento descendente se presenta como consecuencia cuando se consideran demasiadas etapas reactivas, por lo que es necesario ser muy cuidadoso cuando se establece éste parámetro en el diseño de una planta de proceso.

A continuación se muestran los resultados obtenidos como efecto de realizar variaciones en la carga térmica alimentada al rehervidor de la columna de destilación reactiva. Estos efectos son mostradas en la Figura 75, donde puede observarse un ascenso en la composición de MTBE en la corriente de fondos conforme aumentamos la carga térmica, sin embargo, la fracción molar disminuye después de cierto punto, esto puede ser debido a que comienza a evaporarse el producto principal como consecuencia del aumento en la carga térmica.

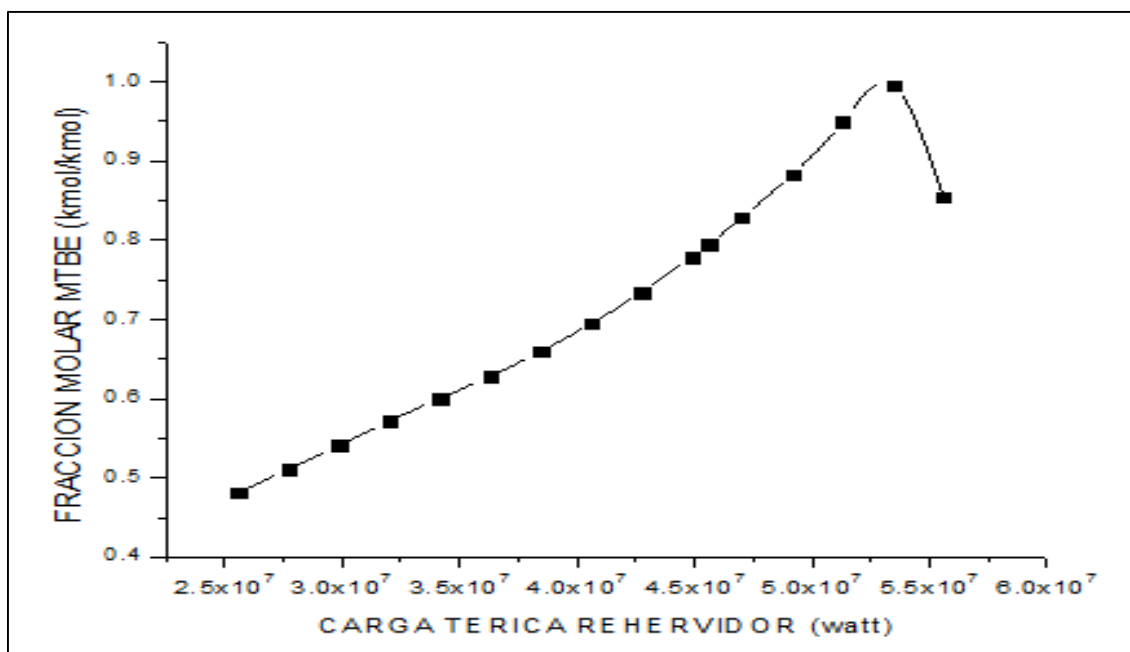


Figura 75.- Carga térmica en rehervidor - Fracción molar de MTBE

En la siguiente figura se muestra la respuesta que presenta el sistema cuando se incrementa el número de etapas de rectificación sobre la conversión de isobuteno. Es posible observar que únicamente cuando las etapas de rectificación son igual a 6, la columna muestra un descenso en la composición de MTBE por debajo del 98%, manteniendo prácticamente constante la conversión para los demás puntos.

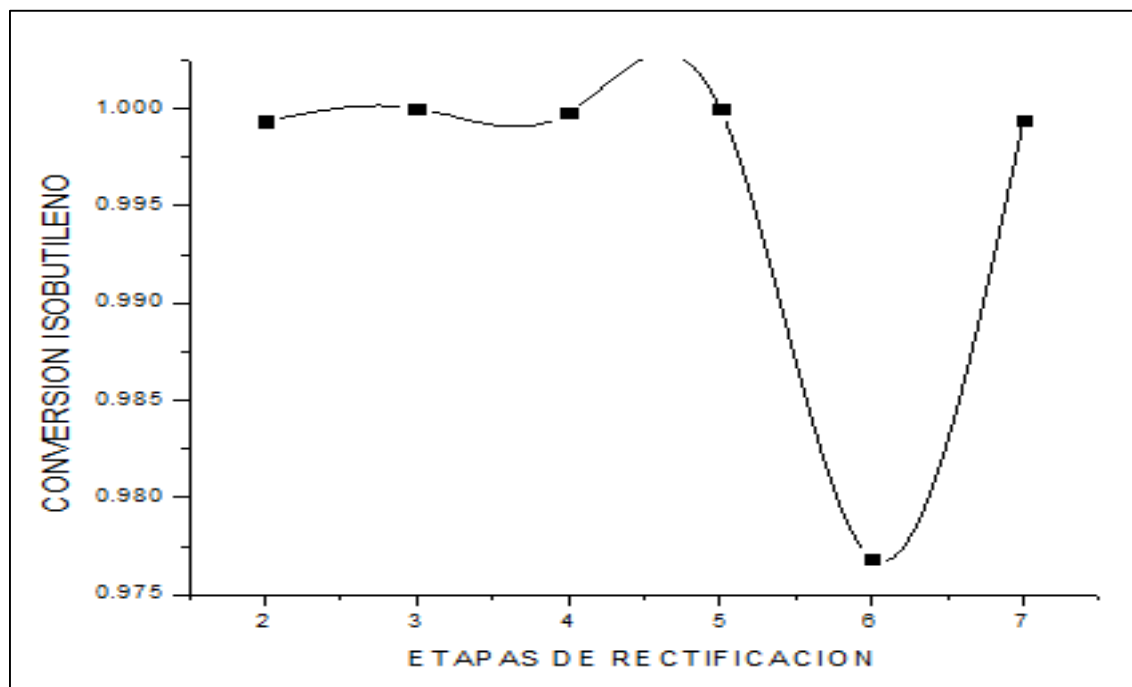


Figura 76.- Etapas de rectificación - Conversión de Isobuteno

Otro análisis a llevar a cabo es el que permita observar el efecto que tiene el cambiar el número de etapas en la sección de agotamiento de la columna reactiva sobre la conversión de isobuteno, Figura 77. Se observa que la conversión aumenta progresivamente hasta que al añadir 12 etapas de agotamiento la conversión comienza a disminuir, aunque no de manera considerable (menor al 0.4%), para posteriormente volver a establecerse de una forma prácticamente constante.

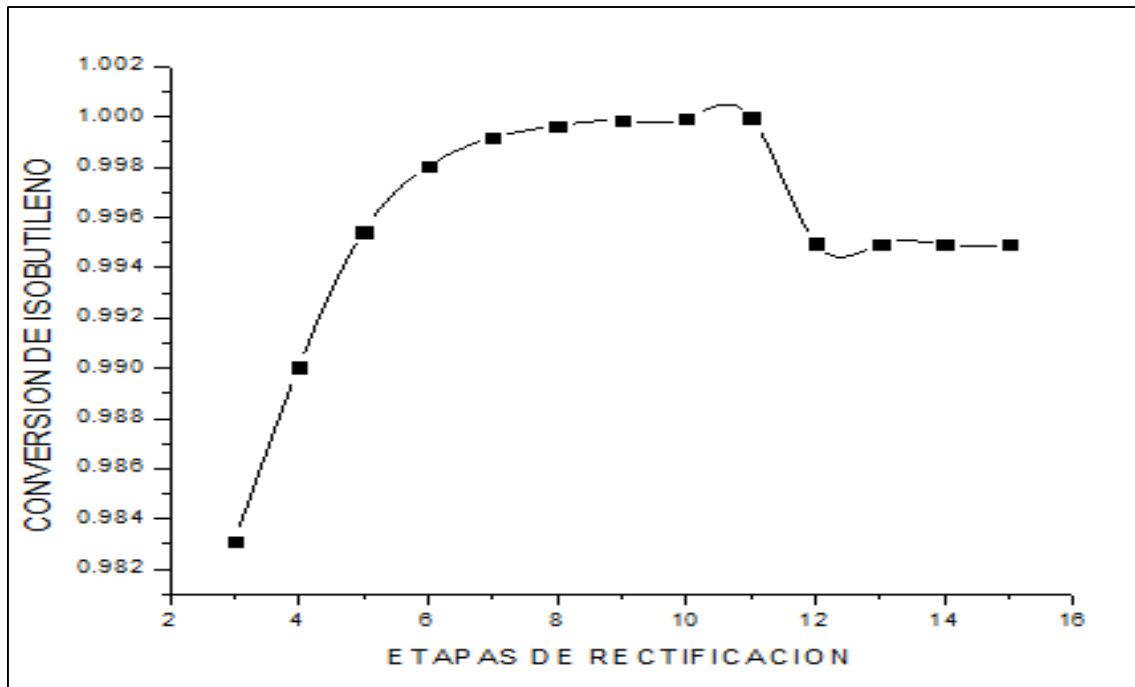


Figura 77.- Etapas de agotamiento - Conversión de Isobuteno

### 3.1.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio

Los resultados obtenidos en la simulación en estado estacionario, así como los efectos de la variación de los parámetros de diseño en la composición de MTBE en la corriente de fondos de la columna reactiva con etapas de no equilibrio son mostrados en esta sección en base a la información proporcionada en la sección 2.1.3.

### 3.1.3.1.- Simulación en estado estacionario

En la Figura 78 y 79 se muestra los perfiles de temperatura y composición obtenidos como resultado de la simulación de la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio. Los resultados correspondientes a los parámetros de la columna son presentados en la Tabla 29.

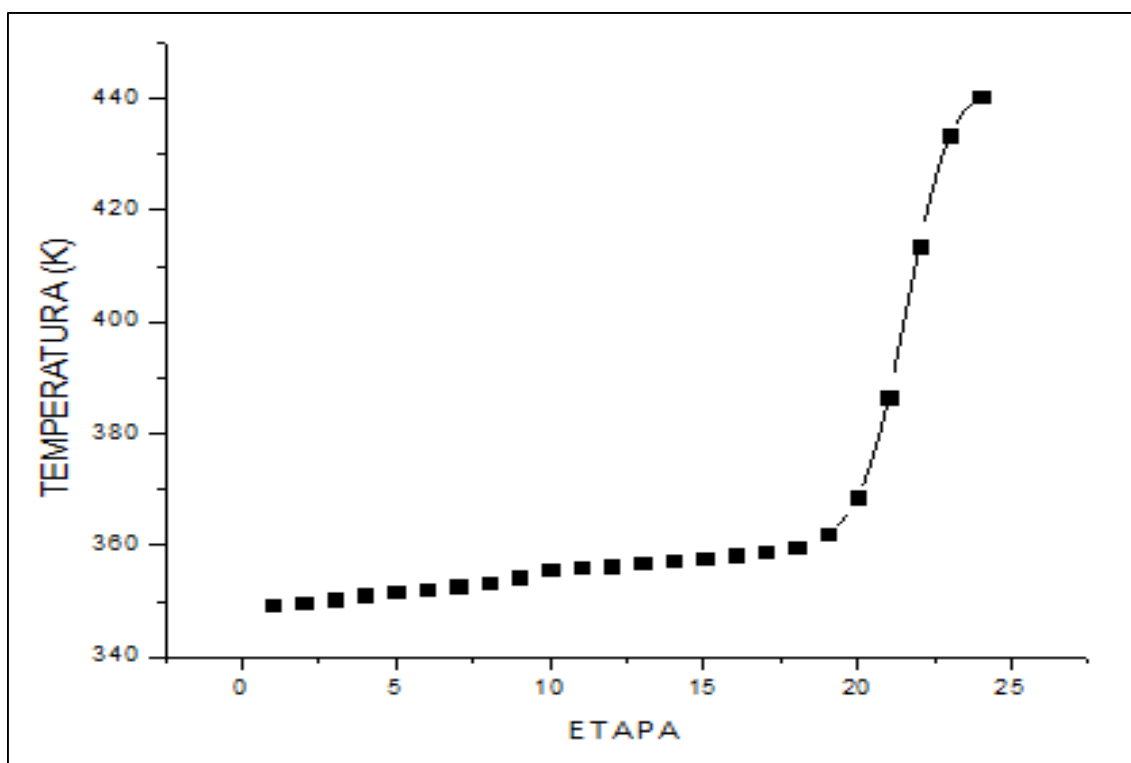


Figura 78.- Perfil de temperatura en columna de destilación - MTBE destilación reactiva NEQ

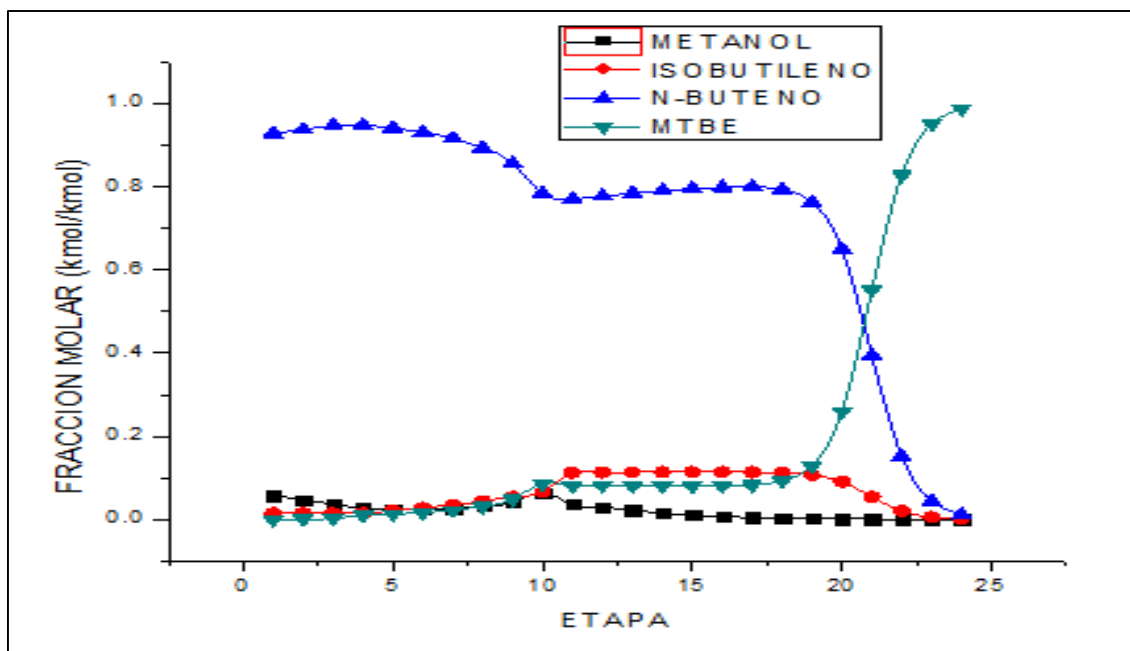


Figura 79.- Perfil de composiciones en la columna de destilación - MTBE destilación reactiva NEQ

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	349.52	K
Carga térmica	-51570613	W
Presión	11	bar
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	440.4	K
Carga térmica	49274345.4	W
Presión	12.52	Bar
Flujo	698.8	Kmol/h
Diámetro de columna	10.94	m
Empaque	Mellapak Sulzer St. 250Y	
<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	9.067	m
Diámetro	4.534	m

Tanque de fondos		
Largo	6.447	m
Diámetro	9.553	m

Tabla 29.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - MTBE destilación reactiva NEQ

### 3.1.3.1.1.- Efecto de los parámetros de diseño

El efecto de la variación de parámetros de diseño es uno de los aspectos principales del porque la simulación de procesos químicos cada vez más a tomado mayor importancia en el plan curricular de ingeniería química (Luyben, 2004). A continuación se muestran los resultados generados sobre la calidad de MTBE en función de la relación de reflujo, velocidad de flujo de fondos, número de etapas reactivas, carga térmica en el rehervidor, etapas de rectificación y etapas de agotamiento.

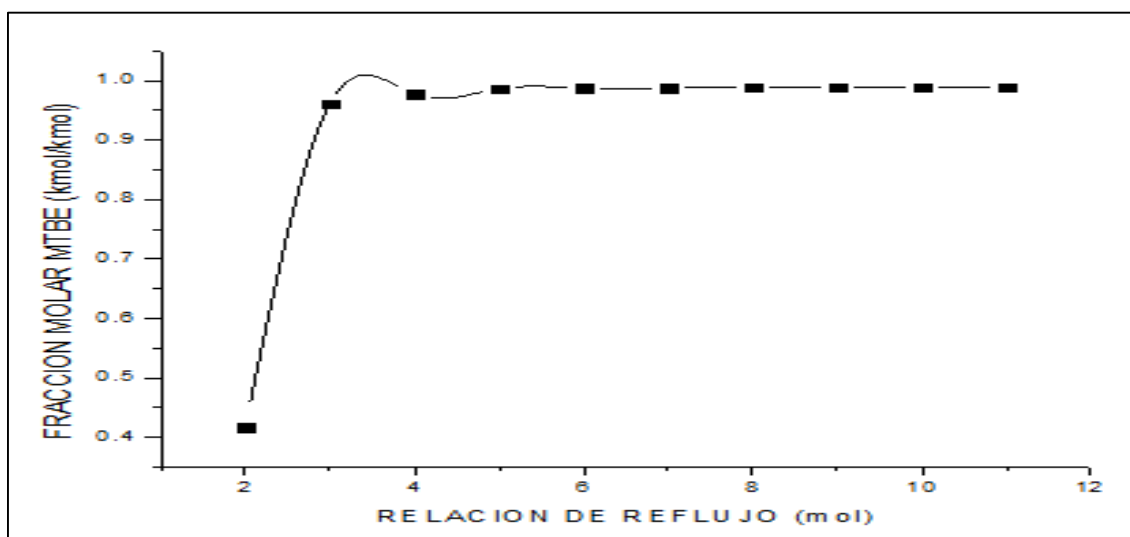


Figura 80.- Relación de reflujo - Fracción molar de MTBE

Es posible observar en la Figura 80 que la fracción molar de MTBE en la corriente de fondos aumenta directamente con la relación de reflujo, permaneciendo prácticamente constante a partir de una relación de reflujo de 5, en la cual la pureza del producto principal es superior al 98%.

A continuación se muestra el efecto que tiene el aumento del flujo molar en la corriente de fondos sobre la pureza de MTBE.

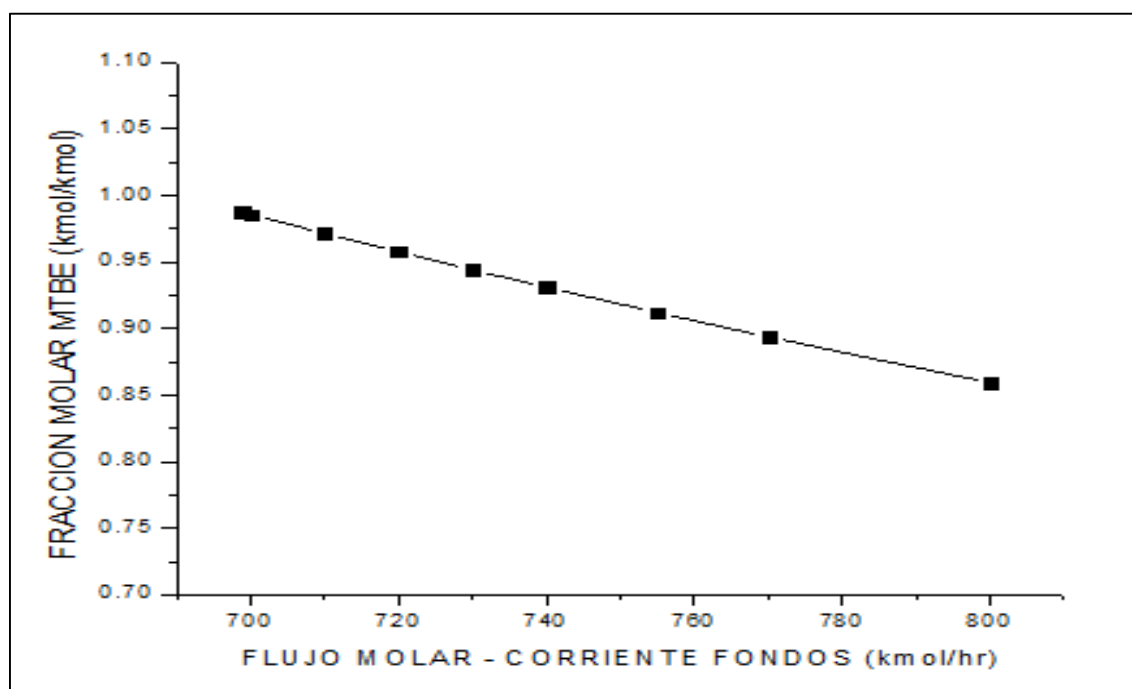


Figura 81.- Velocidad de flujo molar en fondos - Fracción molar de MTBE

Es evidente que el aumento del flujo en la corriente de fondos afecta considerablemente la calidad del producto principal, por lo que, a pesar de que el incremento en el flujo de fondos conceptualmente aumenta el flujo de efectivo por concepto de ventas, disminuye la pureza del producto lo cual no es deseado.

En cuanto a los cambios realizados al número de etapas reactivas se observa que el comportamiento de la pureza del producto MTBE en la corriente de fondos en primera instancia desciende, pero conforme el número de etapas aumenta se alcanza una mayor pureza, permaneciendo prácticamente constante a partir de 7 etapas reactivas, algo similar a lo ocurrido con destilación reactiva-etapas de equilibrio.

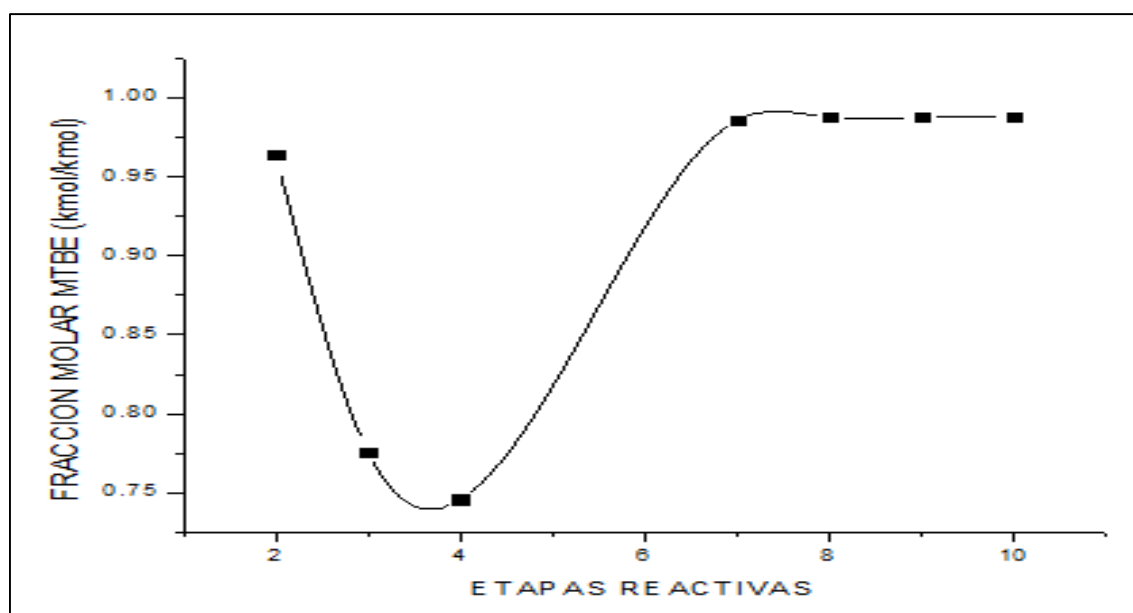


Figura 82.- Número de etapas reactivas - Fracción molar de MTBE

El siguiente parámetro a observar es la carga térmica adicionada al rehervidor de la columna reactiva. La Figura 83 muestra este efecto, en la cual puede observarse que la pureza de MTBE aumenta hasta cierto punto, algo que también sucede en el sistema homólogo con etapas de equilibrio, punto en el que la composición de MTBE comienza a disminuir.

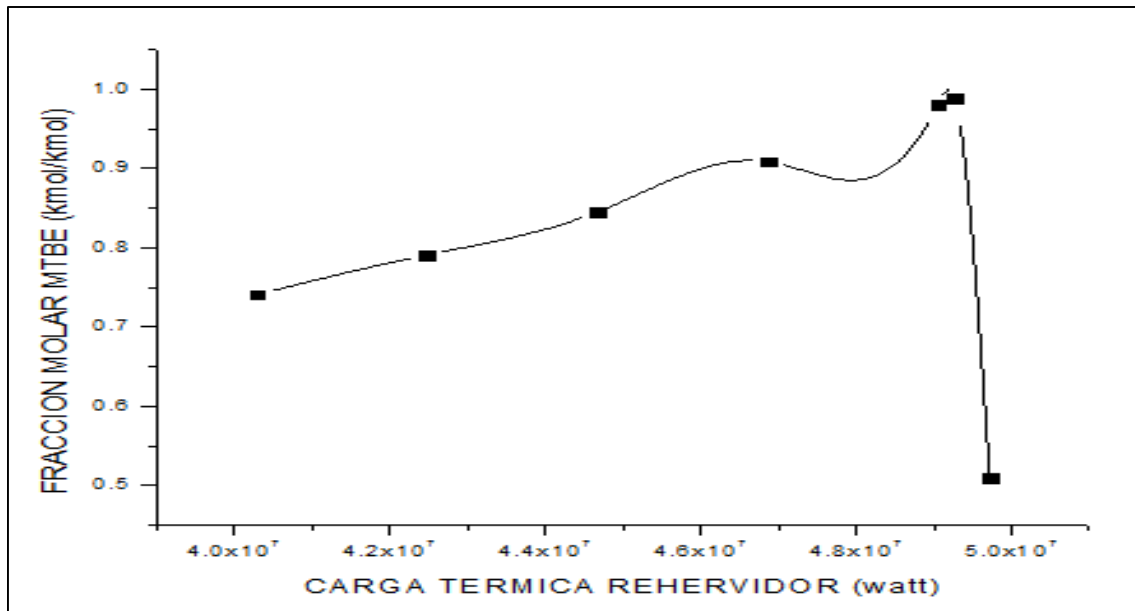


Figura 83.- Carga térmica en rehervidor - Fracción molar de MTBE

Otro de los parámetros a monitorear es el que presenta el sistema sobre la conversión de Isobuteno cuando el número de etapas de rectificación incrementa, esta respuesta se muestra en la Figura 84.

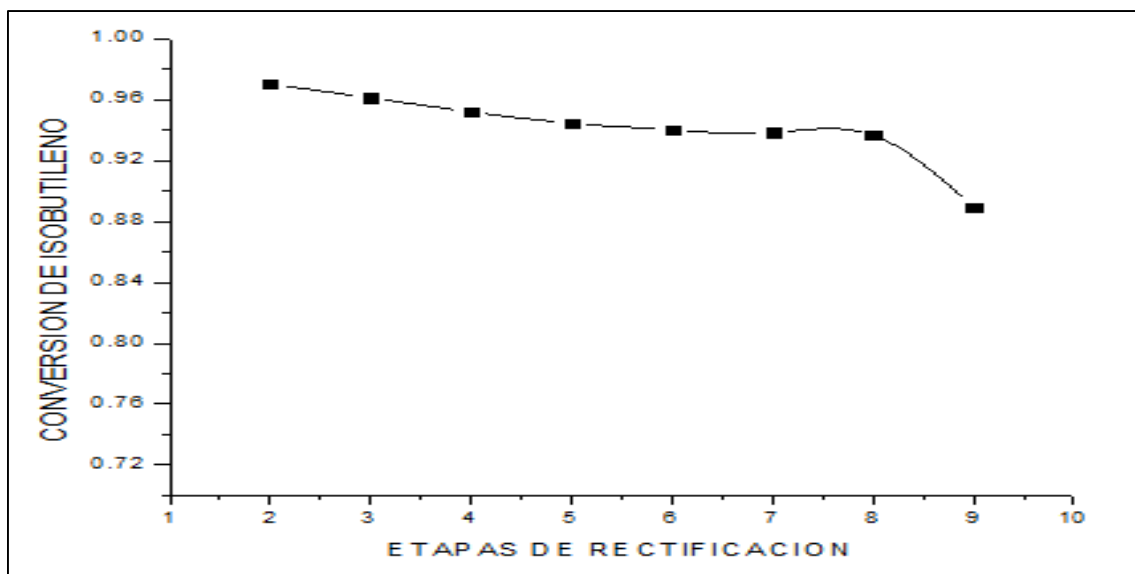


Figura 84.- Etapas de rectificación - Conversión de Isobuteno

En la Figura 84 se observa que la conversión disminuye conforme se incrementa el número de etapas de rectificación, esto se debe a que las corrientes de alimentación ya no se encuentran directamente sobre la zona de reacción y que por el contrario, se alejan cada vez más.

De manera similar, es necesario observar el efecto que tendrá en la conversión de Isobuteno aumentar de manera progresiva el número de etapas de agotamiento. Esta respuesta puede observarse en la Figura 85, se puede afirmar en base a esta respuesta, que la conversión aumenta conforme las etapas incrementan. Hay que recordar que en la columna reactiva con etapas de no equilibrio, las eficiencias de los platos se toman en cuenta y no son del 100% como en el modelo de equilibrio, por esta razón es necesario el incremento en el número de etapas para alcanzar la mayor conversión posible y como consecuencia mejorar el producto MTBE.

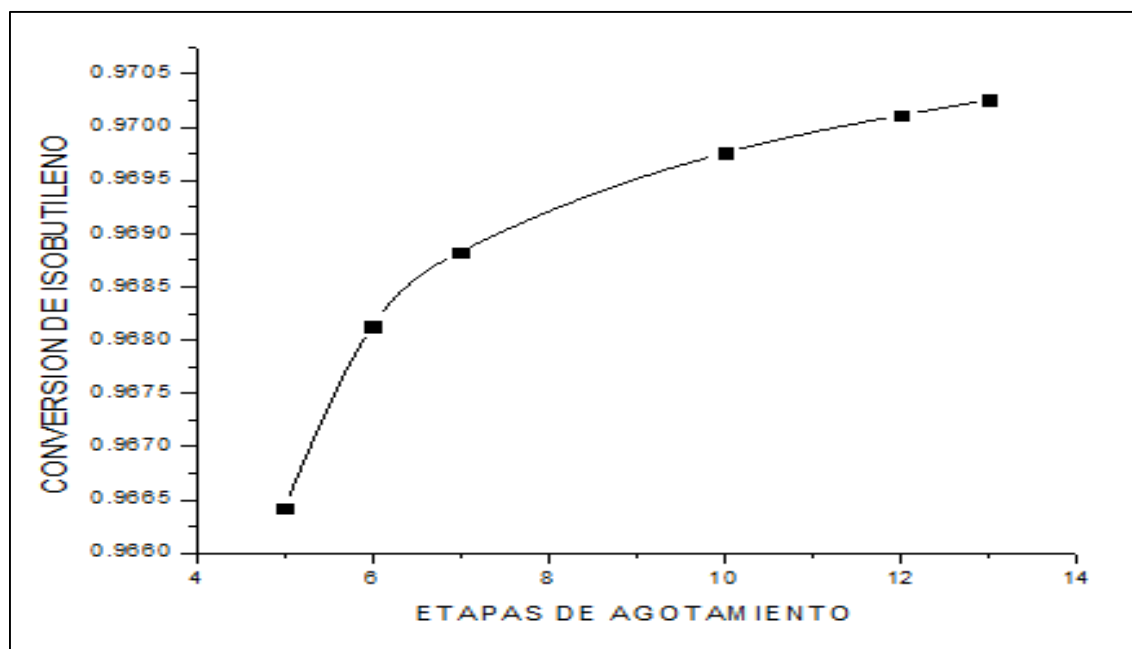


Figura 85.- Etapas de agotamiento - Conversión de Isobuteno

Aspen Plus, como una herramienta que permite el análisis de distintos escenarios de plantas de proceso, nos otorga también la posibilidad de comparación de perfiles entre sistemas similares, tal como lo son, destilación reactiva con etapas de equilibrio y etapas de no equilibrio. A continuación se muestran la comparación de algunos perfiles entre ambos procesos de destilación reactiva, considerando que son realizados antes de incrementar el número de etapas de no equilibrio (procedimiento que se hace para alcanzar la misma pureza de MTBE que con etapas de equilibrio).

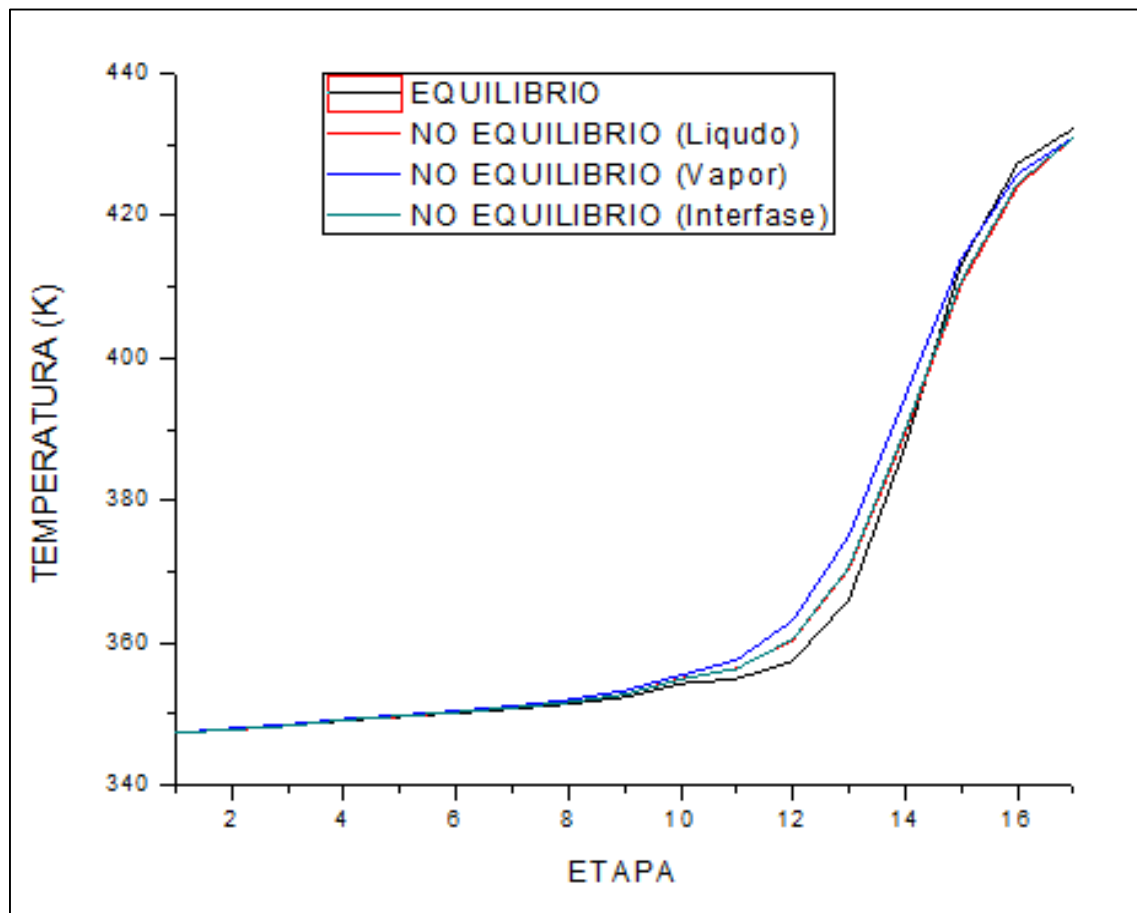


Figura 86.- Comparación de perfiles de temperatura - MTBE destilación reactiva EQ & NEQ

Las diferencias de temperatura entre los dos modelos para el condensador y rehervidor no son significativas. Las diferencias entre las temperaturas se encuentran más en la zona de agotamiento que en la zona de rectificación, donde es evidente un incremento de temperatura más rápido debido a la presencia del componente pesado MTBE, además, se muestra mayor temperatura en la zona de agotamiento en el modelo de no equilibrio en comparación con el modelo de equilibrio.

La reacción de MTBE es de naturaleza exotérmica, por lo que temperaturas bajas en la zona de reacción favorece la reacción directa y lleva a una mayor conversión de isobuteno, a partir de la Figura 86 se observa que el modelo de no equilibrio tiene mayor temperatura en la zona de reacción que el modelo de equilibrio, por esto que la fracción molar de MTBE en el fondo de la columna es menor. Si la temperatura en la zona de reacción aumenta, comienza la descomposición de MTBE, lo que significa menor calidad de producto.

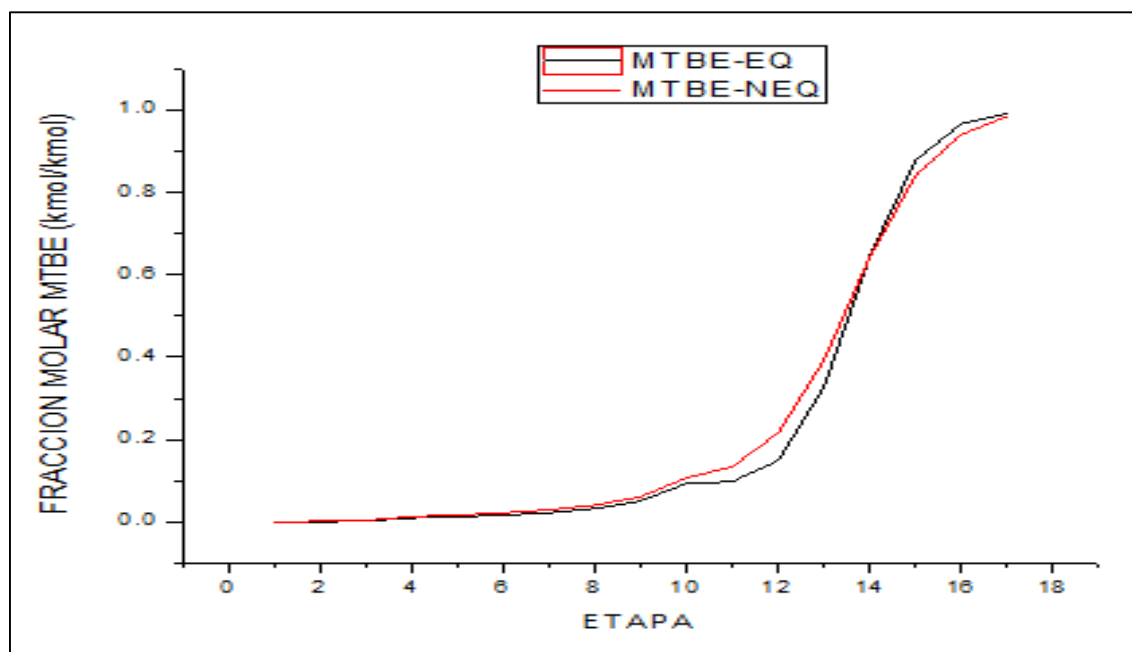


Figura 87.- Comparación de perfiles de composición de MTBE - MTBE destilación reactiva EQ & NEQ

En la Figura 87 se observa la comparación entre los perfiles de composición para MTBE en destilación reactiva de equilibrio y no equilibrio, y debido a que la temperatura en la zona de reacción es ligeramente mayor en etapas de no equilibrio, la composición será un poco menor en la corriente de fondos de la columna.

En la siguiente figura se muestra el perfil de composición para los demás componentes involucrados en la reacción de producción de MTBE, Metanol, Isobuteno y N-buteno. En cuanto a comportamiento, ambos sistemas son similares con ligeras diferencias en el valor numérico. Se observa que en el destilado el componente mayoritario es N-Buteno, debido a su naturaleza inerte en la reacción. Y los reactivos metanol e isobuteno disminuyen su composición conforme se acercan al fondo de la columna y al tope, mostrando una mayor concentración en la zona de reacción de las columnas reactivas.

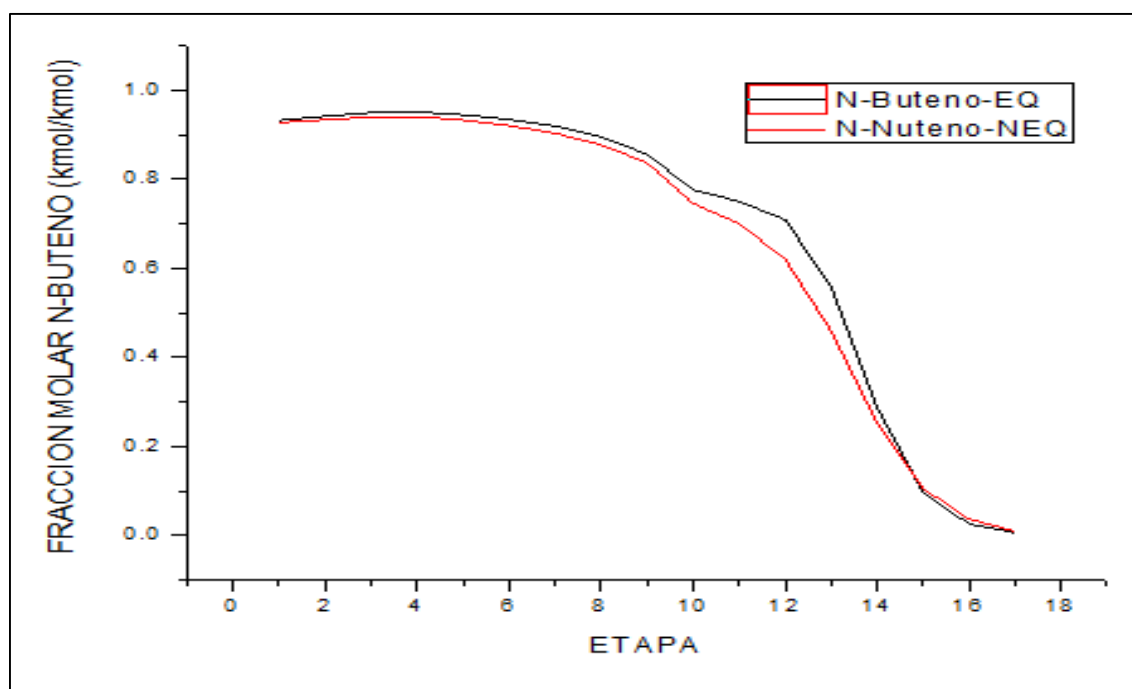


Figura 88.- Comparación de perfiles de composición de N-Buteno - MTBE destilación reactiva EQ & NEQ

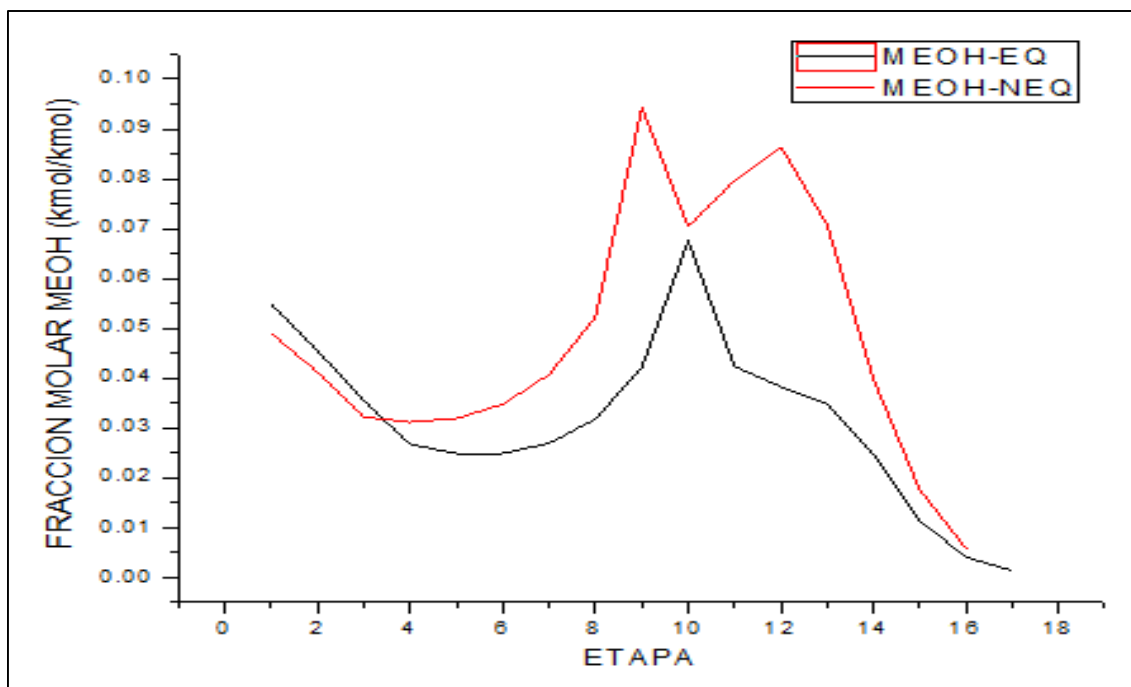


Figura 89.- Comparación de perfiles de composición de Metanol - MTBE destilación reactiva EQ & NEQ

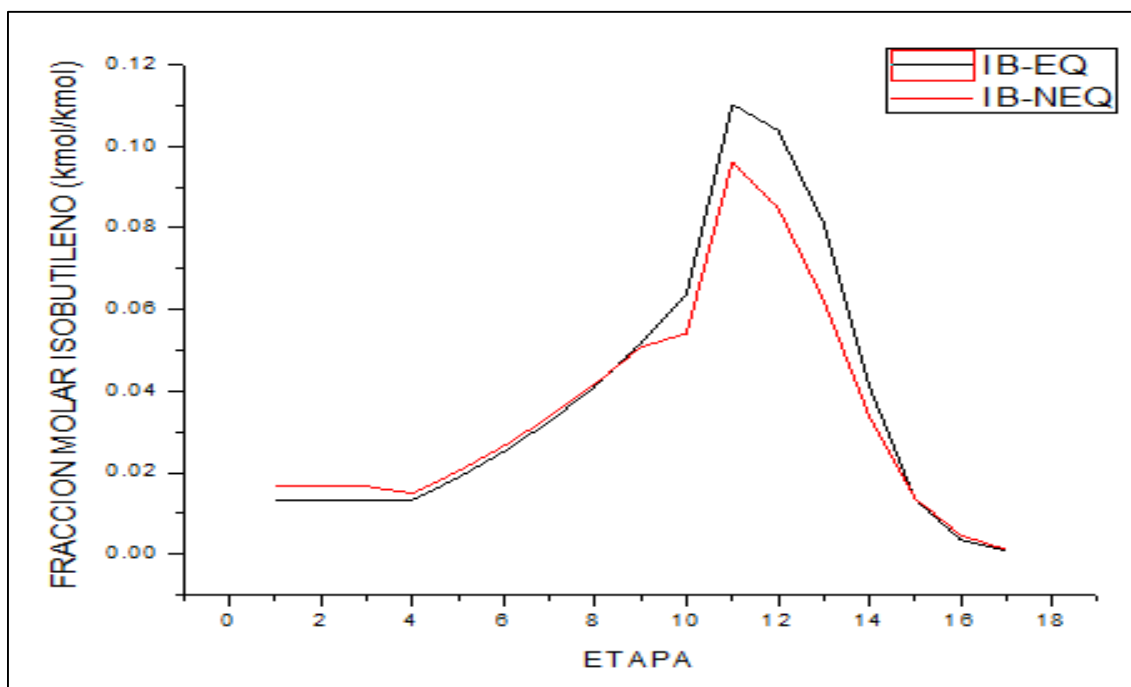


Figura 90.- Comparación de perfiles de composición de Isobuteno - MTBE destilación reactiva EQ & NEQ

### 3.1.4.- Análisis de costos.

Aspen IPE (Icarus Process Evaluator – Process Economic Analyzer), es una herramienta que permite hacer la evaluación económica de procesos porque estima los costos de capital y de operación. Una característica destacable del programa es que la estimación del costo de los equipos no se hace en base a curvas de factor costo-capacidad, y la estimación de los costos de instalación, instrumentación, tubería, etc, no se calcula sólo como un porcentaje del costo de los equipos, sino que se siguen modelos de instalación rigurosos basados en el diseño de cada equipo (Esquivel, 2007).

En la siguiente tabla se muestran los resultados obtenidos en la simulación de los tres procesos de obtención de MTBE mediante el proceso convencional de reacción y separación, destilación reactiva con etapas de equilibrio y destilación reactiva con etapas de no equilibrio. Los costos se presentan en Dólares americanos.

	<b>CONVENCIONAL</b>	<b>D. REACTIVA</b>	<b>D. REACTIV NEQ</b>
<b>Costo de capital total del proyecto (\$)</b>	31,996,721.60	19,675,040.30	28,303,076.70
<b>Ventas Totales de producto (\$/año)</b>	628,269,762.75	678,721,272.68	715,762,035.82

*Tabla 30.- Comparación de costos de equipos y venta de producto - MTBE*

Es evidente a partir de la información de la Tabla 30 que el proceso más redituable, a pesar de los costos de adquisición de equipos, es el que emplea la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio. Una proyección a lo largo de los 15 años de vida útil de la planta apoya la postura, lo cual es mostrada a continuación.

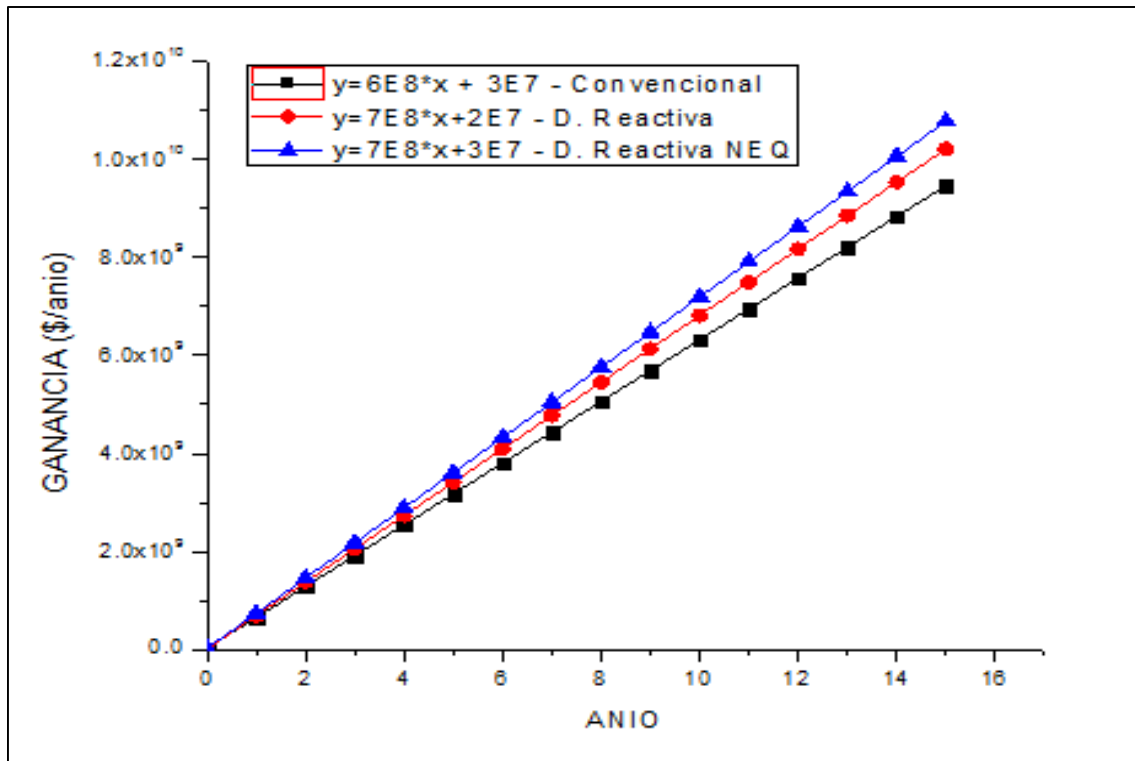


Figura 91.- Proyección a 15 años de vida útil de las plantas MTBE

### 3.1.5.- Respuestas dinámicas

Es importante recordar que las bombas y válvulas de control han sido instaladas en la simulación en estado estacionario. Éstos equipos no son necesarios para la simulación bajo la consideración “Flow-Driven” de Aspen Dynamics, ya que bajo esta consideración, las corrientes de proceso pueden fluir de un equipo a baja presión hacia otro de alta presión (pueden fluir cuesta arriba), lo que no es posible en la realidad, y las simulaciones dinámicas deben reflejar la realidad lo mejor posible (Luyben, 2008).

La especificación rigurosa de Aspen Dynamics “Pressure driven” requiere de que se provean caídas de presión suficientes a través de los equipos y válvulas para el control dinámico (50% de apertura en válvulas). Si las caídas de presión son pequeñas en las válvulas de control, el sistema tendrá disponible un rango menor de capacidad de manejo de perturbaciones, provocando saturación en las válvulas (100% de apertura). Este es un aspecto muy importante porque las perturbaciones generadas al sistema de control comúnmente son del 10, 15 o 20% en las corrientes de alimentación a los procesos.

#### *3.1.5.1.- Simulación en estado dinámico – Proceso convencional*

Ahora, es tiempo de observar el comportamiento de nuestro sistema de control ante perturbaciones realizadas en la corriente de alimentación, en un intervalo de  $\pm 20\%$  del flujo de alimentación. Algunas de las variables a monitorear son; velocidad de flujo en el destilado y fondos, fracción molar de MTBE en la corriente de fondos, temperatura en el plato 12 y carga térmica en el rehedidor. Las perturbaciones serán generadas en el tiempo igual a 2 horas.

El primer paso a realizar para poder someter al sistema de control ante perturbaciones en la alimentación, es observar si el sistema de control instalado en los procesos es capaz de mantener la calidad del producto principal bajo las condiciones de diseño en estado estacionario. En la siguiente sección se muestran las respuestas dinámicas del proceso sobre las variables monitoreadas y se realizan observaciones a partir de las mismas.

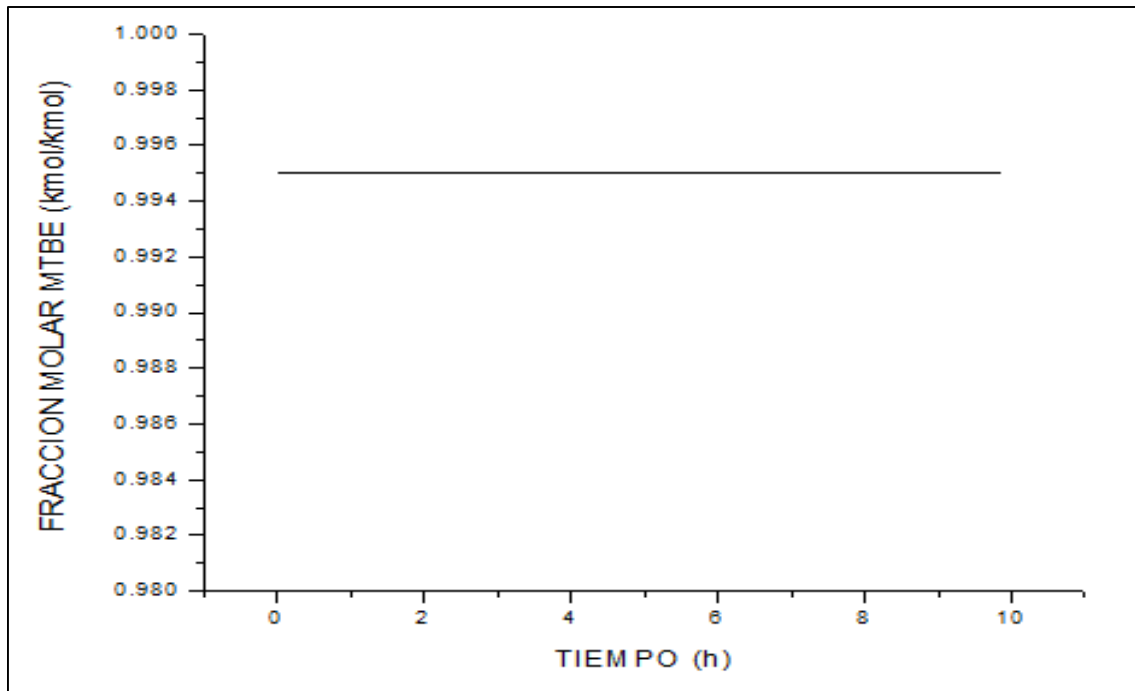


Figura 92.- Fracción molar de MTBE con respecto al tiempo - MTBE convencional dinámico

En la Figura 92 se observa que el sistema de control es capaz de mantener la pureza de MTBE por arriba de 99% a través del tiempo sin la presencia de alguna perturbación en las corrientes de alimentación. Ahora es posible someter al sistema de control a perturbaciones y así poder observar su comportamiento y capacidad de mantener la calidad de MTBE.

### 3.1.5.1.1.- Pruebas de control y perturbaciones al proceso

La perturbación generada al sistema se lleva a cabo en la corriente de alimentación, en un valor de  $\pm 20\%$  del valor correspondiente en estado estacionario.

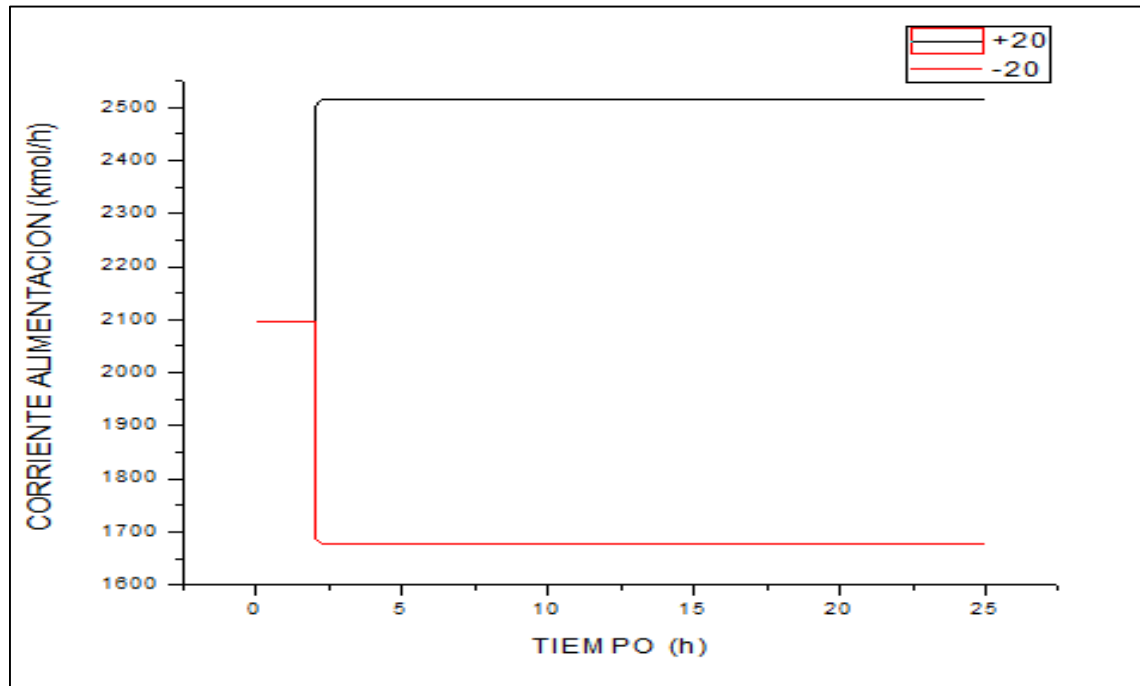


Figura 93.- Perturbación  $\pm 20\%$  en alimentación - MTBE convencional

La perturbación generada se presenta a las 2 horas de tiempo de simulación, a continuación se muestran los efectos que tiene realizar este cambio en la alimentación sobre las variables monitoreadas y en la composición de MBTE en la corriente fondo.

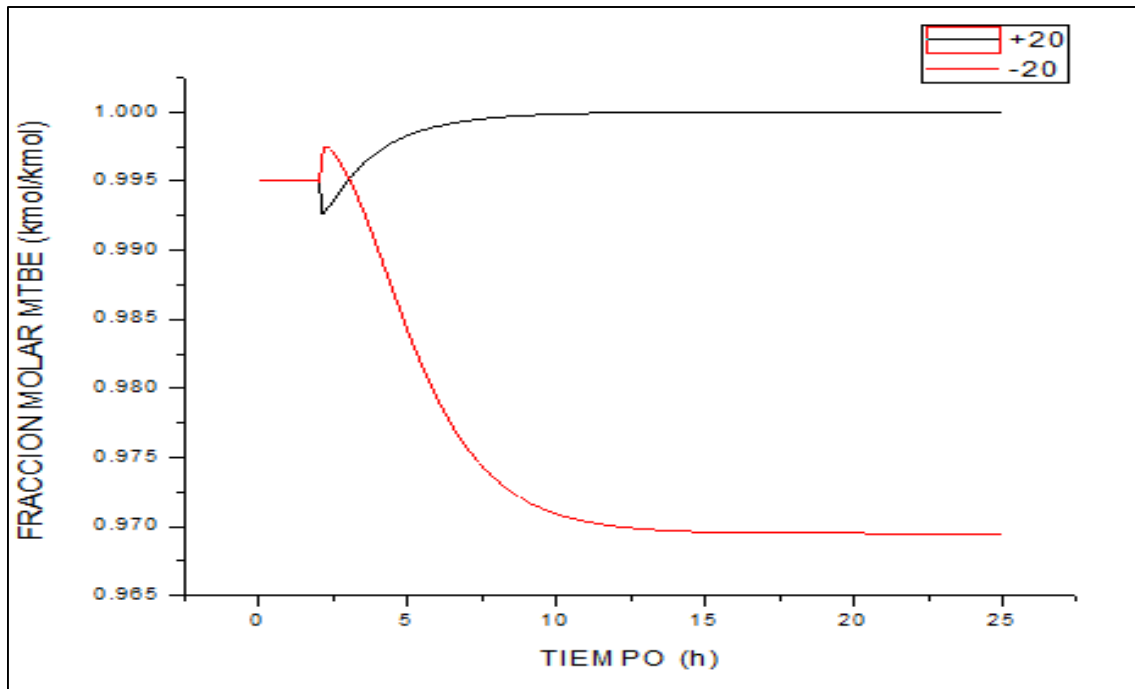


Figura 94.- Respuesta ante la perturbación en la composición de MTBE - MTBE convencional

La respuesta del sistema de control en la pureza de MTBE ante las perturbaciones generadas en la alimentación se muestra en la Figura 94. El sistema de control logra devolver un nuevo estado estacionario en la calidad de MTBE de la corriente de fondo de la columna, en primera instancia en el valor deseado por encima del 99% cuando la perturbación incrementa la alimentación a la columna, sin embargo, la fracción molar de MTBE disminuye hasta 97% cuando la perturbación disminuye la alimentación, demostrando que el sistema de control no es muy efectivo cuando la perturbación toma lugar en este sentido.

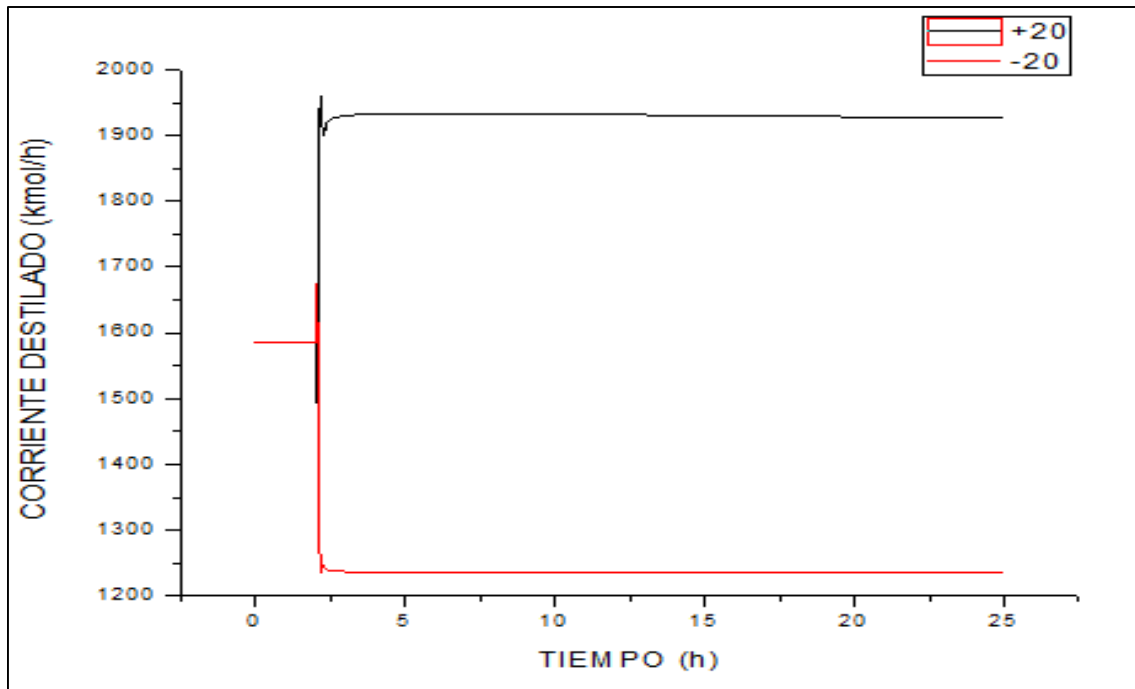


Figura 95.- Respuesta ante la perturbación en el destilado - MTBE convencional

La corriente de destilado de la columna presenta cambios proporcionales con respecto a las perturbaciones en la alimentación, es decir, como se puede observar en la Figura 95, cuando la perturbación incrementa el flujo de entrada a la columna, la cantidad de flujo destilado incrementa también. Un efecto contrario se presenta cuando la alimentación a la columna disminuye, puesto que el flujo destilado también disminuye. Estos cambios son evidentes, ya que si existe mayor o menor cantidad alimentada a la columna, habrá cambios similares en las corrientes producto. Este puede no ser el caso cuando se lleven a cabo reacciones dentro de la columna, ya que se genera y consume materia conforme se lleva a cabo la reacción, estos efectos se presentan en la siguiente sección.

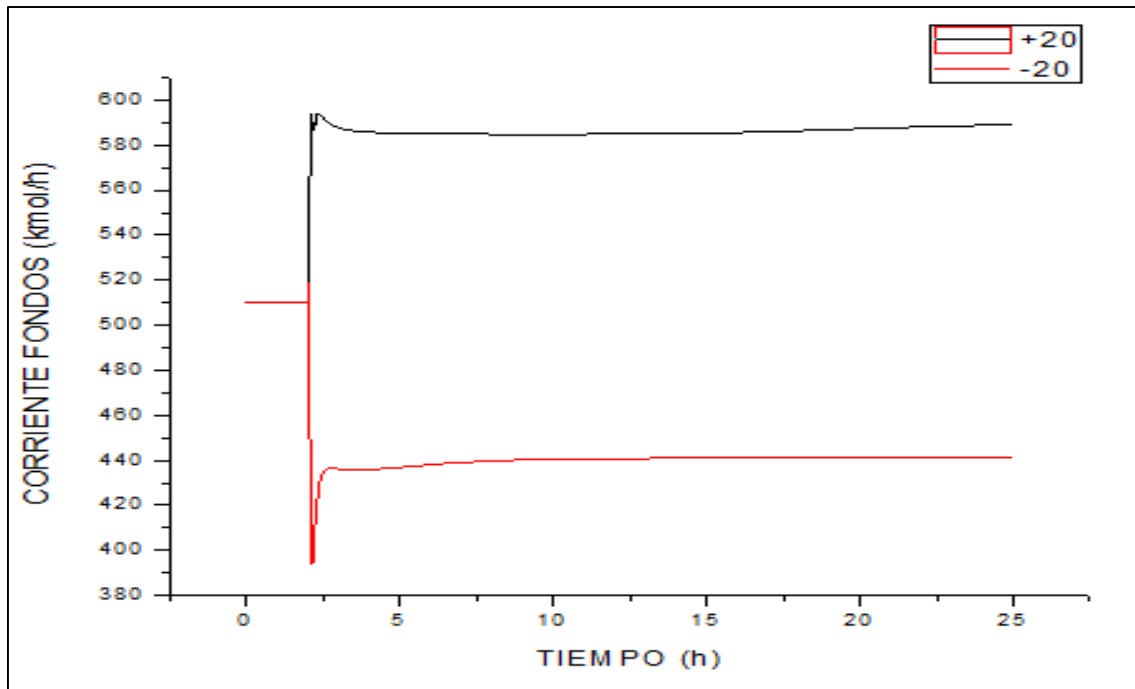


Figura 96.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - MTBE convencional

De manera similar a la corriente de destilado, la corriente de fondos presenta cambios proporcionales a la alimentación de la columna, es decir, si la alimentación incrementa entonces el flujo de fondos incrementa, y viceversa.

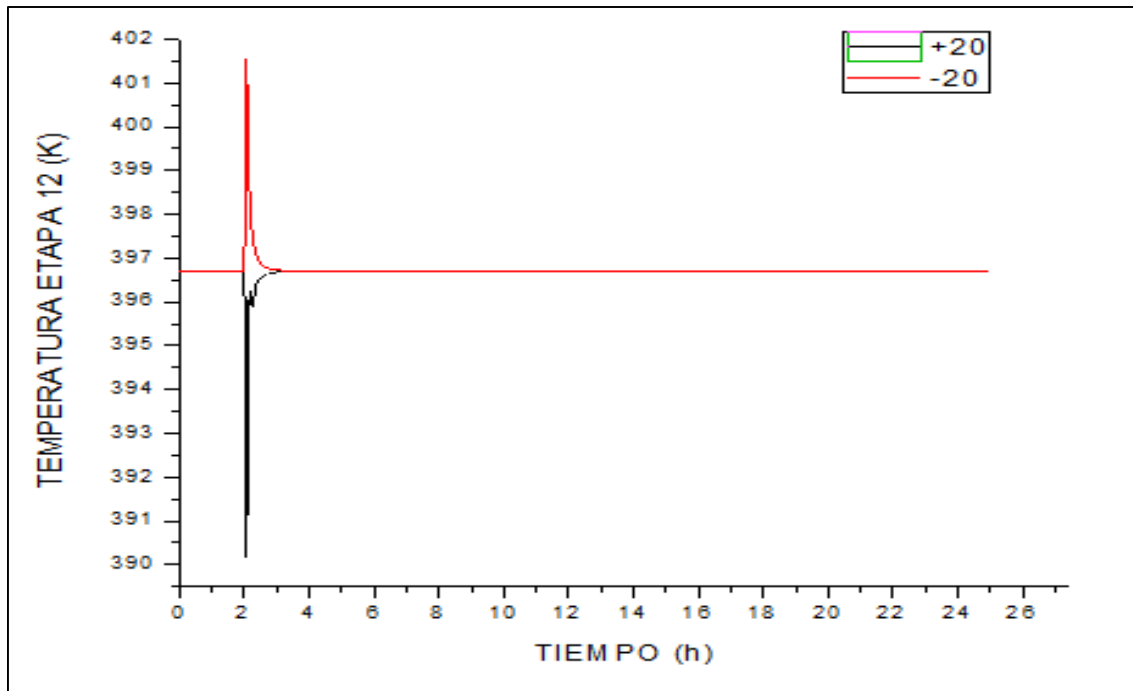


Figura 97.- Respuesta ante perturbación en la Temperatura plato 12 - MTBE convencional

En la Figura 97 se muestra la respuesta de la temperatura del plato número 12 ante la perturbación generada. Es posible observar que la temperatura aumenta cuando la alimentación disminuye, esto se debe a que la carga térmica en el rehervidor al momento de la perturbación está colocada para trabajar con mayor cantidad de material, sin embargo la respuesta del controlador logra modificar la carga térmica, devolviendo el valor de la temperatura en el plato 12 al valor de SetPoint en un tiempo aproximado de 1 hora. Una respuesta similar se obtiene cuando la alimentación a la columna aumenta, la temperatura del plato 12 disminuye por la presencia de material extra, un cambio que el controlador logra contrarrestar de manera efectiva, nuevamente en un tiempo aproximado de 1 hora.

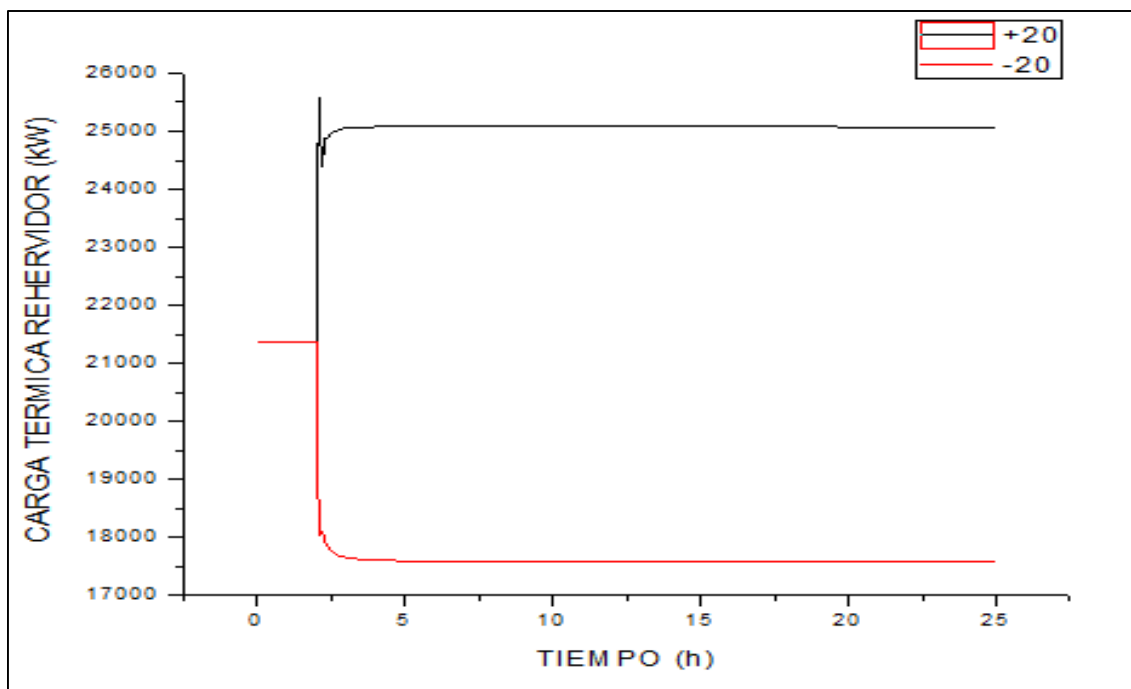


Figura 98.- Respuesta ante perturbación en Rehedor - MTBE convencional

La Figura 98 muestra la respuesta correspondiente a los cambios generados por la perturbación en la alimentación de la columna sobre la carga térmica del rehedor, es evidente que si la temperatura del plato 12 disminuye o aumenta, el sistema de control debe modificar la carga térmica para contrarrestar estos cambios.

En cada una de las figuras mostradas es posible observar el efecto que tiene la perturbación generada en la corriente de alimentación de la columna de destilación y se puede concluir que el sistema de control es efectivo y tiene la capacidad de devolver un nuevo estado estacionario en las distintas variables, incluso la fracción molar de MTBE, a pesar de someterlo a perturbaciones tan grandes como el 20% de flujo en la alimentación de la columna de destilación.

Las respuestas dinámicas mostradas en esta sección hacen referencia a uno de dos tipos de problema de control, llamado “Problema regulador”, en el cual se lleva a cabo una perturbación en el proceso, y el sistema de control modifica los valores de las variables manipuladas de tal manera que afecte el valor de la variable controlada y devuelva un nuevo estado estacionario. El segundo problema de control es el llamado “Problema servomecanismo” o “problema servo”, en donde, la señal de SetPoint es cambiada, y las variables manipuladas se ajustan de manera apropiada para alcanzar las nuevas condiciones de operación (Stephanopoulos, 1984).

A continuación se presentan las respuestas dinámicas del proceso, al ser sometido a una perturbación del tipo “servo”, en el SetPoint de la temperatura del plato 12 de la columna de destilación y el efecto que presenta en la fracción molar de MTBE. El cambio en el SetPoint de la temperatura será el correspondiente a  $\pm 5^{\circ}\text{K}$  en el SetPoint del controlador del plato 12 de la columna de destilación. Este cambio en el SetPoint de la temperatura se lleva a cabo de la misma manera en todos los procesos mostrados más adelante, debido a que la temperatura de los platos de las distintas columnas de destilación es uno de los parámetros más sensibles, y se tienen que controlar mediante el ajuste de la carga térmica alimentada en el rehervidor, por lo que si se consideran cambios bruscos de temperatura, puede provocar saturación en la señal de salida del controlador de temperatura.

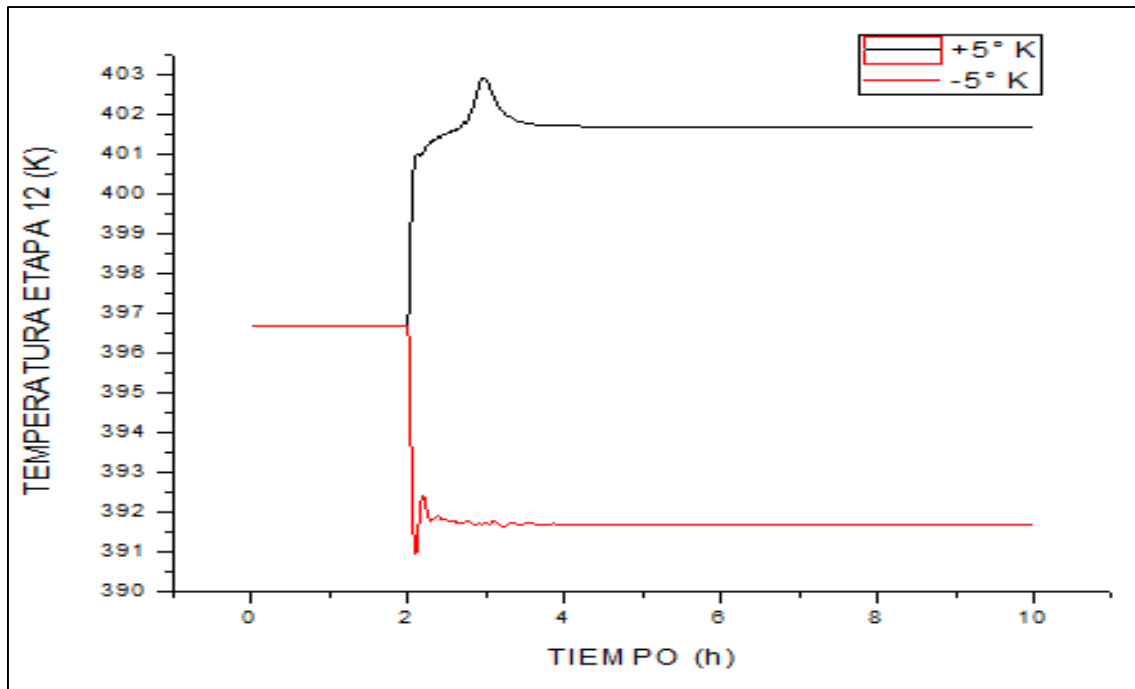


Figura 99.- Perturbación en  $\pm 5^\circ\text{K}$  SetPoint en plato 12 columna destilación - MTBE convencional

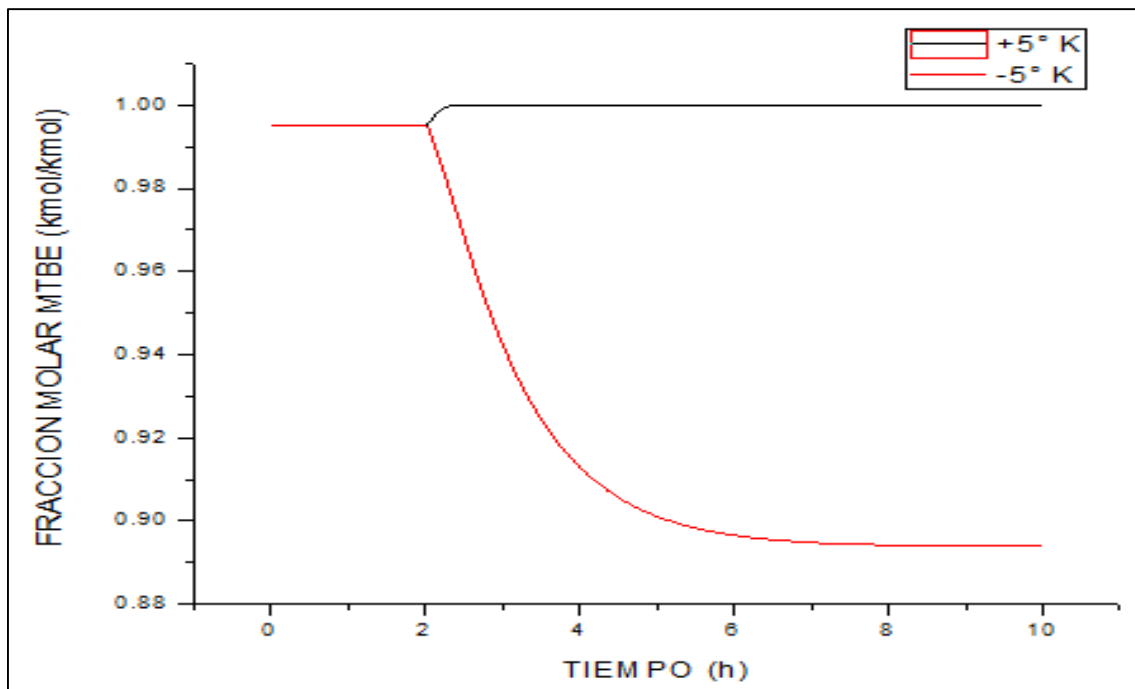


Figura 100.- Fracción molar de MTBE ante perturbación servo - MTBE convencional.

La Figura 99 muestra el cambio en el SetPoint del controlador de temperatura del plato 12 de la columna de destilación, y la Figura 100, la respuesta que éste cambio provoca en la fracción molar de MTBE, donde es posible observar que la disminución de la temperatura en el plato, produce una disminución drástica de la pureza de MBTE, aproximadamente 10%, debido a que la cantidad de metanol en la corriente de fondos de la columna incrementa.

### 3.1.5.2.- Simulación en estado dinámico – Destilación reactiva

En esta sección se analiza el comportamiento dinámico de la columna de destilación reactiva ante perturbaciones generadas en la corriente de alimentación “C4” (Isoamilenos reactivos). En primera instancia se debe corroborar que el sistema de control es capaz de mantener la calidad de MTBE en la corriente de fondos sin la presencia de perturbación alguna en la columna.

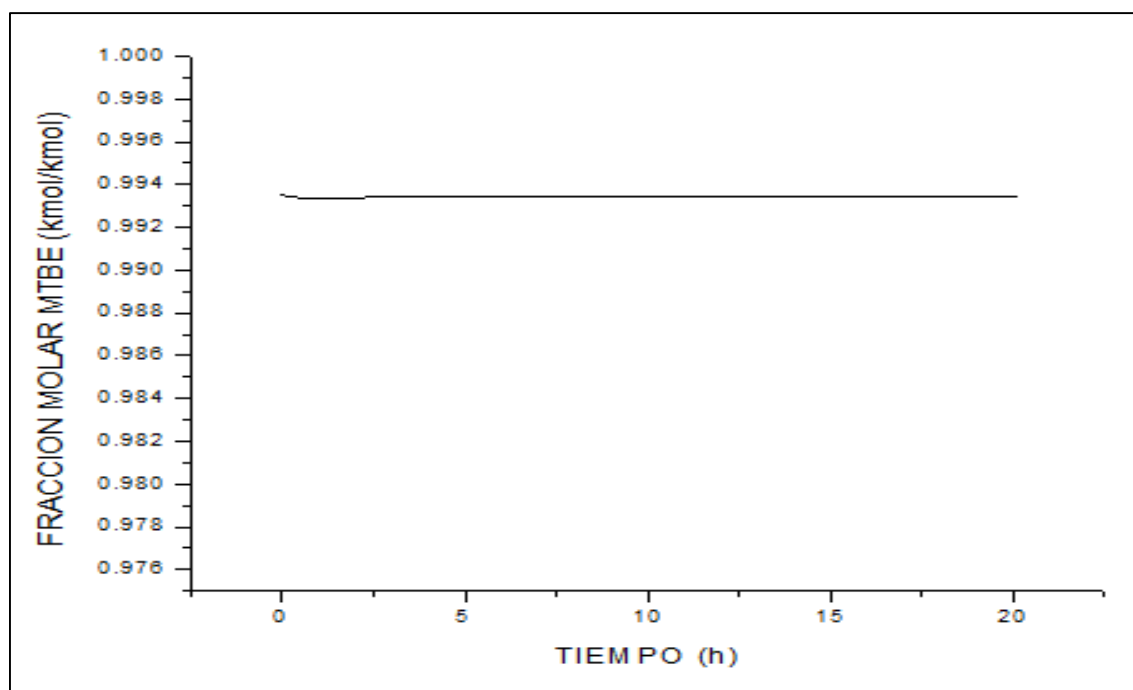


Figura 101.- Fracción molar de MTBE con respecto al tiempo - MTBE destilación reactiva dinámico

El sistema de control logra mantener la fracción molar de MTBE por encima de la especificación, por lo que a continuación se somete al sistema de control a perturbaciones en la alimentación y se observa la respuesta dinámica de los controladores y capacidad de mantener la pureza de MTBE en la corriente de fondos de la columna reactiva con etapas de equilibrio.

### 3.1.5.2.1.- Pruebas de control y perturbaciones al proceso

La perturbación a la que el sistema de control es sometido es del  $\pm 20\%$  el valor del flujo de alimentación en la corriente "C4" en estado estacionario.

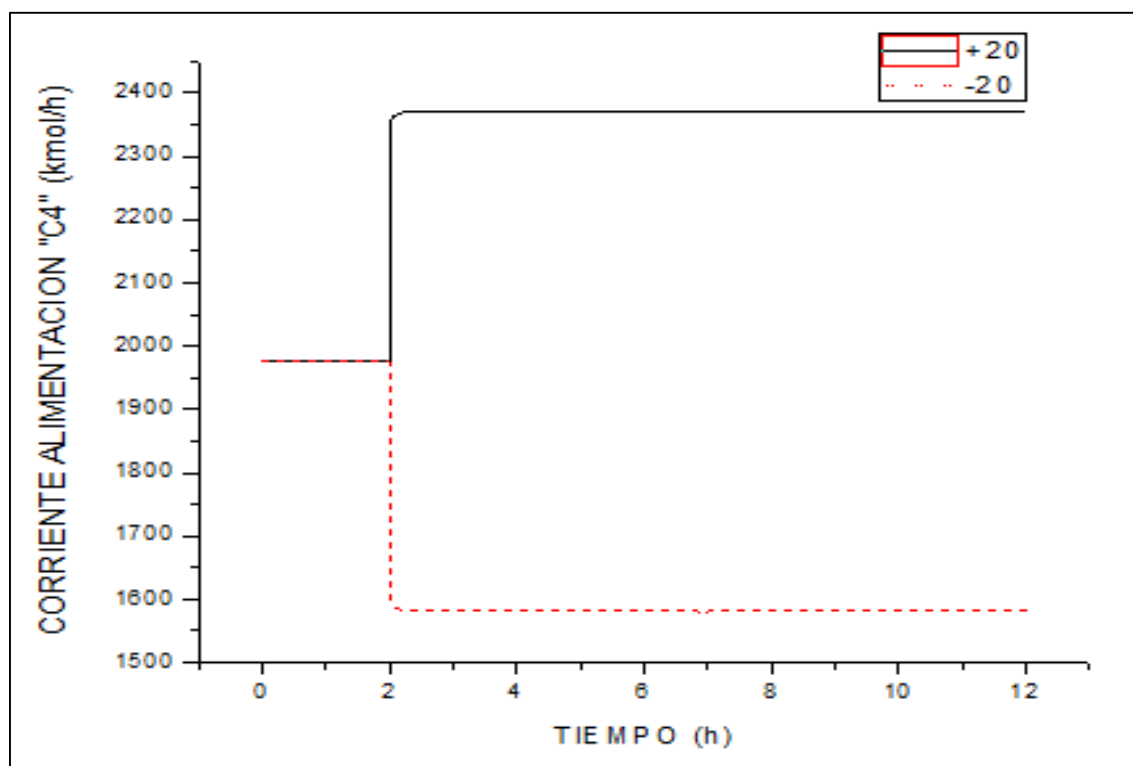


Figura 102.- Perturbación  $\pm 20\%$  corriente C4 - MTBE destilación reactiva

La perturbación se genera a las 2 horas del tiempo de simulación, cambio correspondiente al proceso convencional. A continuación, se observan las respuestas de los controladores y corrientes ante la perturbación. Las variables a monitorear son la velocidad de flujo en las corrientes de destilado y fondos, composición de MTBE, temperatura en la etapa número 13, carga térmica en el rehervidor, fracción molar de metanol en la etapa 10 y alimentación de metanol.

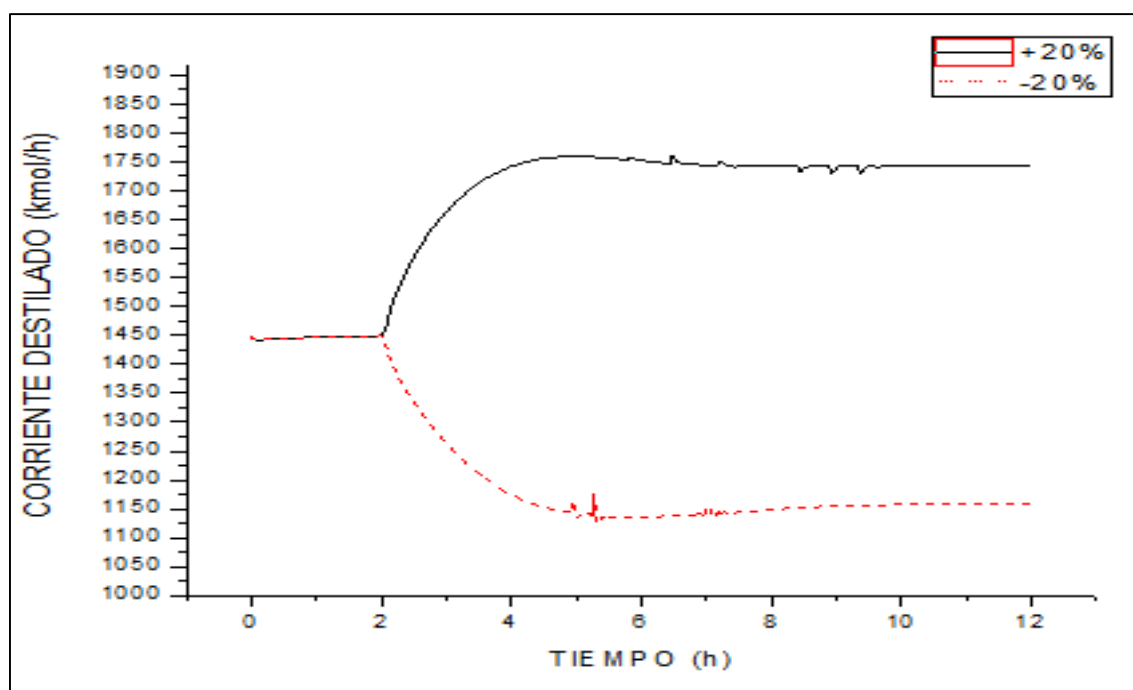


Figura 103.- Respuesta ante perturbación en la corriente de destilado - MTBE destilación reactiva

Es posible observar en la Figura 103, que la perturbación en la corriente de alimentación “C4” genera cambios proporcionales en la corriente de destilado. Debido a que la cantidad de flujo entrante a la columna incrementa, el flujo de destilado también aumenta, llegando a un estado estable después de un tiempo de 3 horas aproximadamente. De la misma forma, cuando la cantidad de flujo entrante a la columna disminuye, la corriente de destilado también disminuye alcanzando un estado estable después de 3 horas transcurridas aproximadamente.

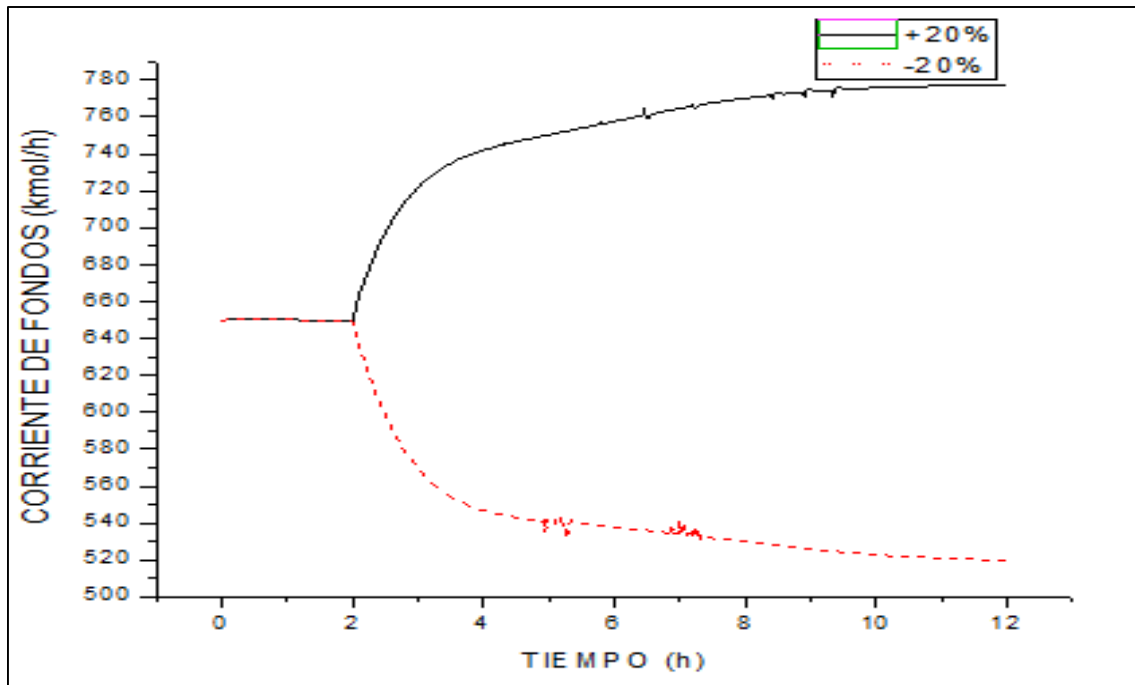


Figura 104.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - MTBE destilación reactiva

La respuesta obtenida en la Figura 104 muestra de manera similar a la Figura 103, cambios proporcionales a la perturbación generada. Si el flujo alimentado a la columna incrementa, entonces el flujo en la corriente de fondos incrementa y si el flujo disminuye, el flujo de la corriente de fondos también disminuye. En cuanto a esta respuesta, el valor de flujo de ambas corrientes se establece después de un tiempo de 4 horas.

La siguiente respuesta ante la perturbación es la más importante, porque muestra la capacidad del sistema de control completo en la columna reactiva de mantener la pureza de MTBE por encima de la especificación. En la Figura 105 se observa como la composición de MTBE en la corriente de fondos varía con respecto al tiempo ante la perturbación generada.

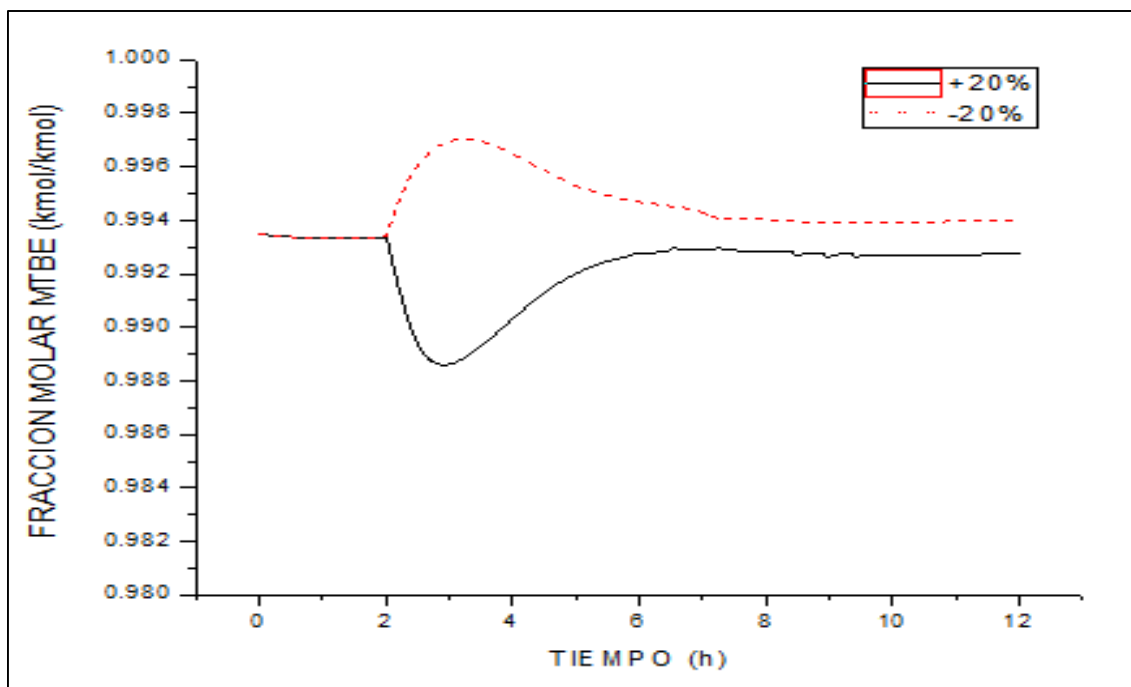


Figura 105.- Respuesta ante la perturbación en la composición de MTBE - MTBE destilación reactiva

La respuesta del sistema de control es bastante efectiva, ya que es capaz de mantener la composición de MTBE por encima de la especificación del 98% volviendo a un estado estable en un tiempo aproximado de 3 horas. Es posible observar que cuando la perturbación disminuye el flujo de alimentación a la columna, la composición de MTBE aumenta en un 0.3%, el cual no es un cambio significativo. Por otra parte, si la perturbación aumenta la cantidad de flujo alimentado a la columna entonces la pureza de MTBE disminuye hasta en un 0.5%, pero sin caer fuera de la especificación inicial.

Los cambios en la composición de MTBE debidos a la perturbación en la alimentación a la columna reactiva, se deben a que la reacción directa se ve favorecida en presencia de un exceso de metanol, es por esto que cuando la corriente C4 disminuye, la cantidad de metanol es mayor por un corto periodo de tiempo, aumentando la producción de MTBE y por consecuencia su pureza. Caso contrario cuando la cantidad de flujo en la corriente C4 aumenta.

La composición de MTBE alcanza un nuevo valor estable después de cierto tiempo debido a que ambas alimentaciones esta relacionadas por un lazo de control en cascada, logrando que ambas alimentaciones se establezcan en la relación proporcional del estado estacionario.

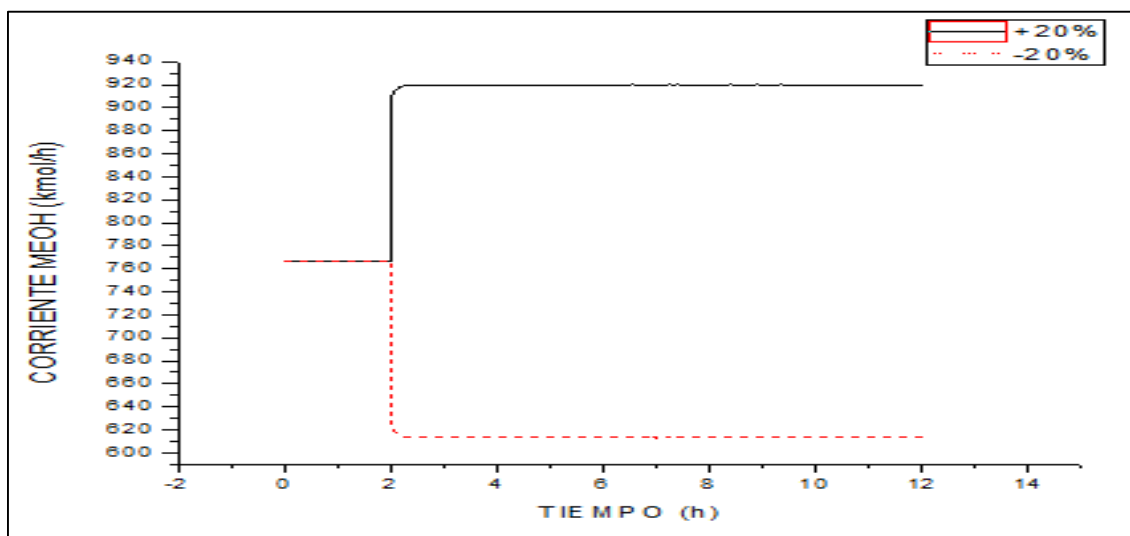


Figura 106.- Perturbación  $\pm 20\%$  en alimentación de MeOH - MTBE destilación reactiva

El cambio escalón mostrado en la Figura 106 es debido a la relación establecida por el lazo de control en las alimentaciones frescas de la columna reactiva, es por esto que cuando la alimentación de la corriente C4 cambia, también la corriente de metanol cambia.

Otra variable a controlar importante es la temperatura del plato número 13, esta variable es importante ya que si la temperatura dentro de la columna incrementa o disminuye continuamente, el producto principal MTBE comenzará a descomponerse o en caso contrario, no se llevará a cabo la reacción de formación.

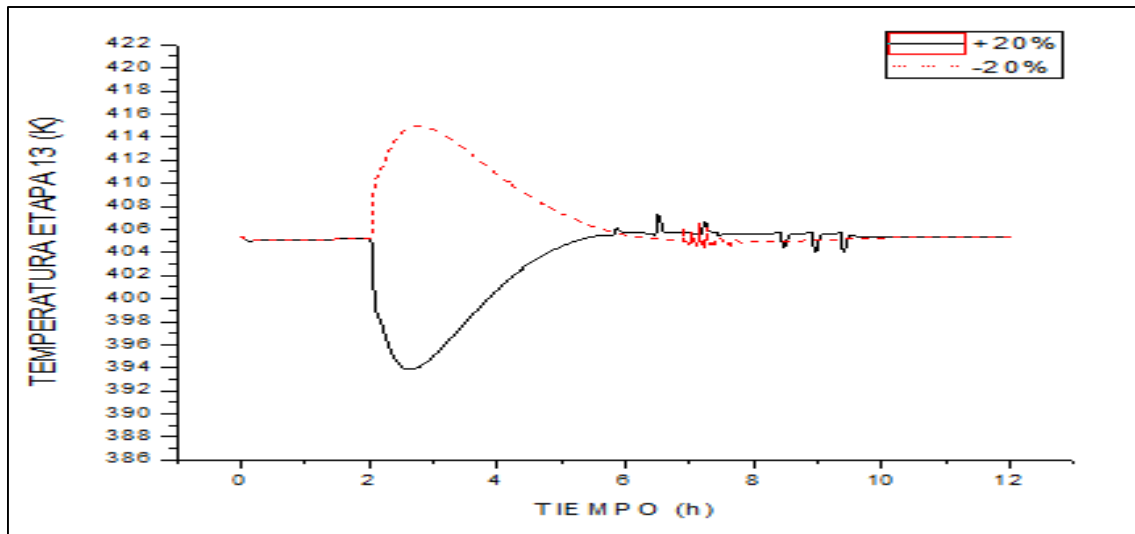


Figura 107.- Respuesta ante perturbación en la temperatura plato 13 - MTBE destilación reactiva

La temperatura ante la perturbación cambia drásticamente hasta en 10°K en ambas direcciones, volviendo al valor del SetPoint en un tiempo aproximado de 2 horas gracias a que el sistema de control de temperatura actúa correctamente manipulando la carga térmica del rehervidor, acción que se muestra a continuación.

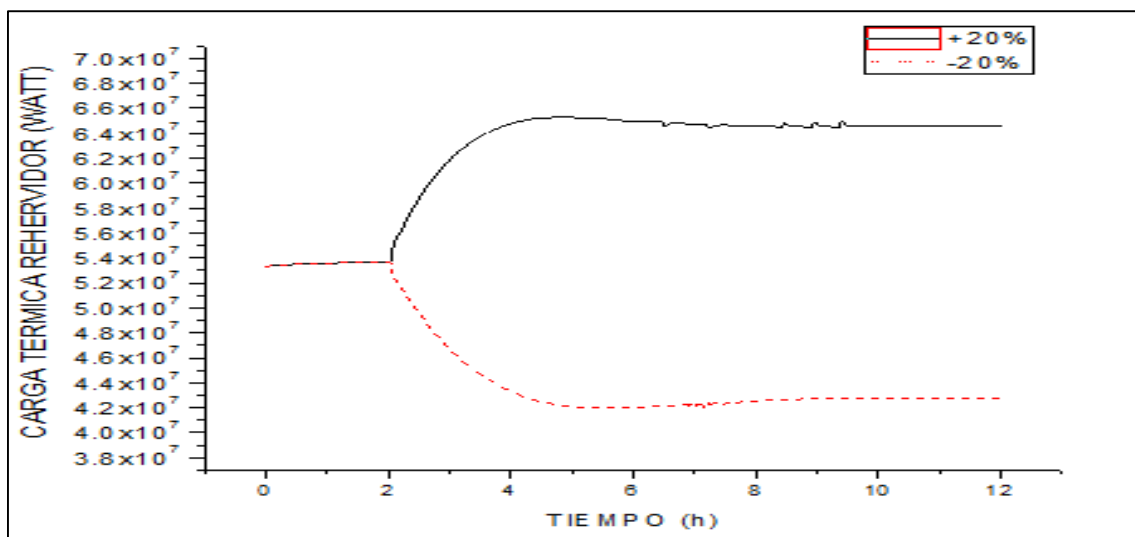


Figura 108.- Respuesta ante perturbación en rehervidor - MTBE destilación reactiva

Por último, la respuesta ante la perturbación sobre la composición de Metanol en la etapa 10 se muestra a continuación.

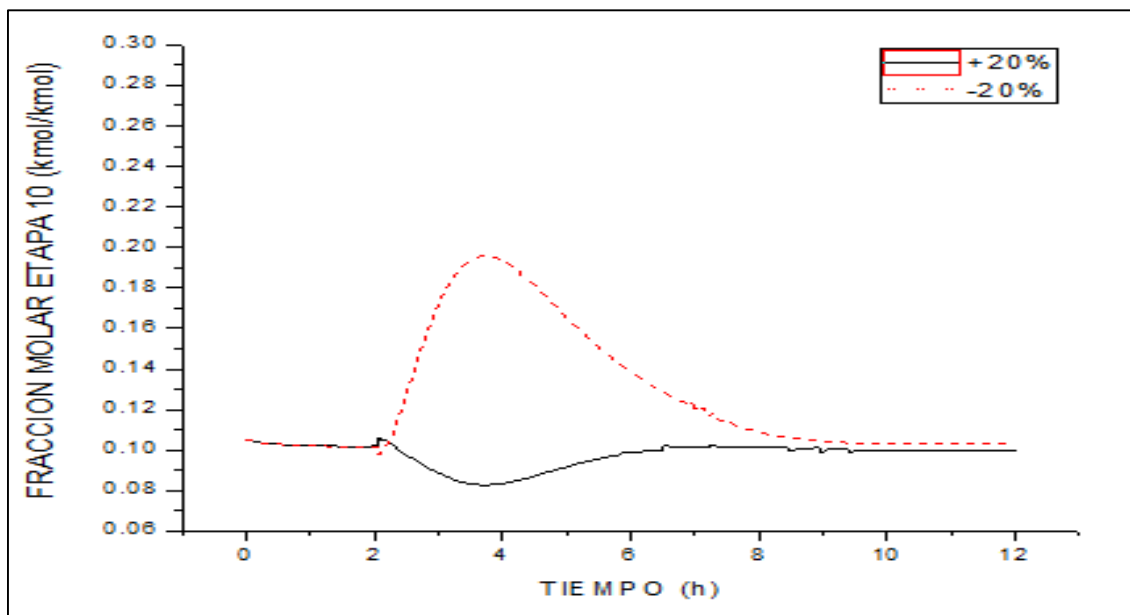


Figura 109.- Respuesta ante perturbación composición de MeOH etapa 10 - MTBE destilación reactiva

Es evidente que hay un cambio más pronunciado cuando la perturbación disminuye la cantidad de flujo alimentado en la corriente “C4” a la columna reactiva en comparación a la disminución de flujo alimentado. Esta respuesta se debe nuevamente a la naturaleza de la reacción, porque cuando se disminuye la cantidad de isobuteno reactivo, la cantidad de metanol aumenta hasta que el sistema de control logra establecer la relación entre alimentaciones nuevamente.

En base a las respuestas mostradas en esta sección, es posible afirmar que el sistema de control logra manejar bastante bien las perturbaciones en la alimentación de la columna reactiva, ya que ha logrado mantener la calidad del producto principal MTBE por encima de la especificación del estado estacionario.

A continuación se muestra la respuesta del sistema de control ante la perturbación tipo servo, en el SetPoint de la temperatura del plato número 13 de la columna de destilación reactiva, y el efecto que dicho cambio provoca en la fracción molar de MTBE.

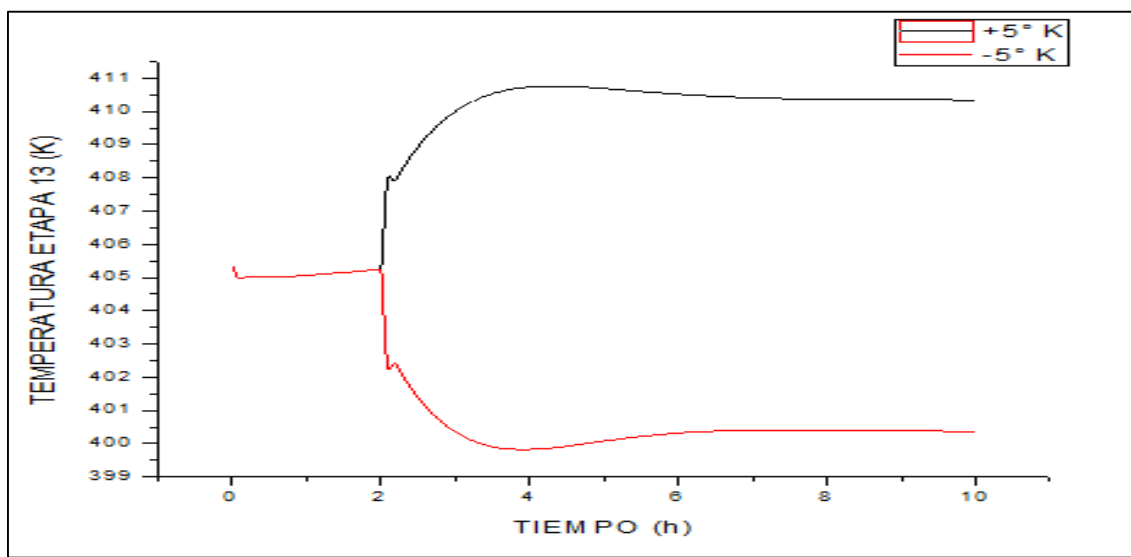


Figura 110.- Perturbación en  $\pm 5^\circ\text{K}$  SetPoint en plato 13 columna destilación - MTBE destilación reactiva

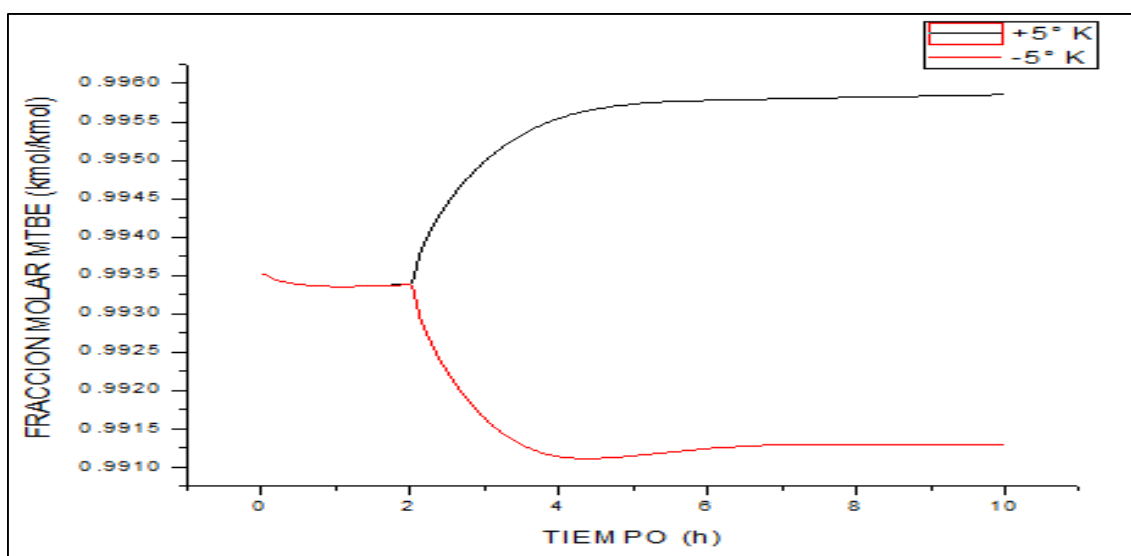


Figura 111.- Fracción molar de MTBE ante perturbación servo - MTBE destilación reactiva.

La Figura 110 muestra gráficamente el cambio en el SetPoint de la temperatura del plato 13 de la columna reactiva, y la Figura 111, la respuesta en la fracción molar de MTBE, cuya modificación es la correspondiente al 0.5%, cantidad prácticamente despreciable ante la modificación en la temperatura, mostrando además, que la columna reactiva y el sistema de control, responden de mejor manera ante la perturbación tipo servo, en comparación al proceso convencional de obtención de MTBE.

#### *3.1.5.3.- Simulación en estado dinámico – Destilación reactiva – No equilibrio*

El modelo “RadFrac” de Aspen Plus para columnas de destilación reactiva con etapas de no equilibrio, es un modelo de simulación muy riguroso que logra acercarse cada vez más a los resultados obtenidos experimentalmente. En esta sección se observa el comportamiento dinámico de la columna ante las perturbaciones generadas en la corriente de alimentación fresca C4. De manera similar a los otros dos esquemas de plantas de procesos para la obtención de MTBE, la primera acción que se debe llevar a cabo es verificar que los lazos de control logran mantener la calidad de MTBE en la corriente de fondos sin la presencia de alguna perturbación. Este resultado se muestra en la siguiente figura.

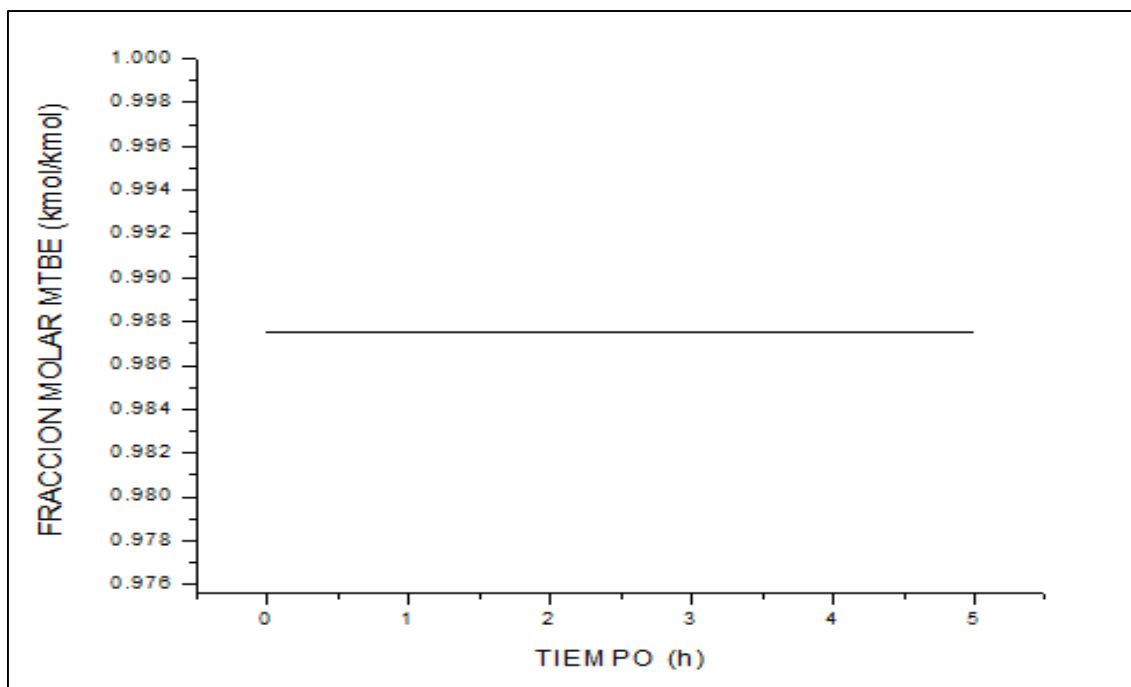


Figura 112.- Fracción molar de MTBE con respecto al tiempo - MTBE destilación reactiva NEQ dinámico

La composición de MTBE logra mantenerse por arriba del 98% con los lazos de control sin la presencia de perturbación alguna. A continuación se somete al sistema de control establecido en la columna reactiva con etapas de no equilibrio a perturbaciones en la alimentación en  $\pm 20\%$  el valor del flujo de alimentación en la corriente "C4".

### 3.1.5.3.1.- Pruebas de control y perturbaciones al proceso

La presencia de perturbaciones en los procesos químicos es muy común, por lo que es necesario estudiar los efectos que presentan estos cambios sobre la calidad de nuestro producto principal y la capacidad que tienen los lazos de control instalados en el proceso de mantener la pureza de MTBE por encima de la especificación del estado estacionario.

Las variables a monitorear son la velocidad de flujo en las corrientes de destilado y fondos, composición de MTBE, temperatura en la etapa número 22, carga térmica en el rehervidor, fracción molar de metanol en la etapa 9, alimentación de metanol, carga térmica removida en el condensador y relación de reflujo.

En primera instancia, en la siguiente figura se muestra el cambio generado por la perturbación en la corriente de alimentación C4 en un tiempo de simulación de 2 horas.

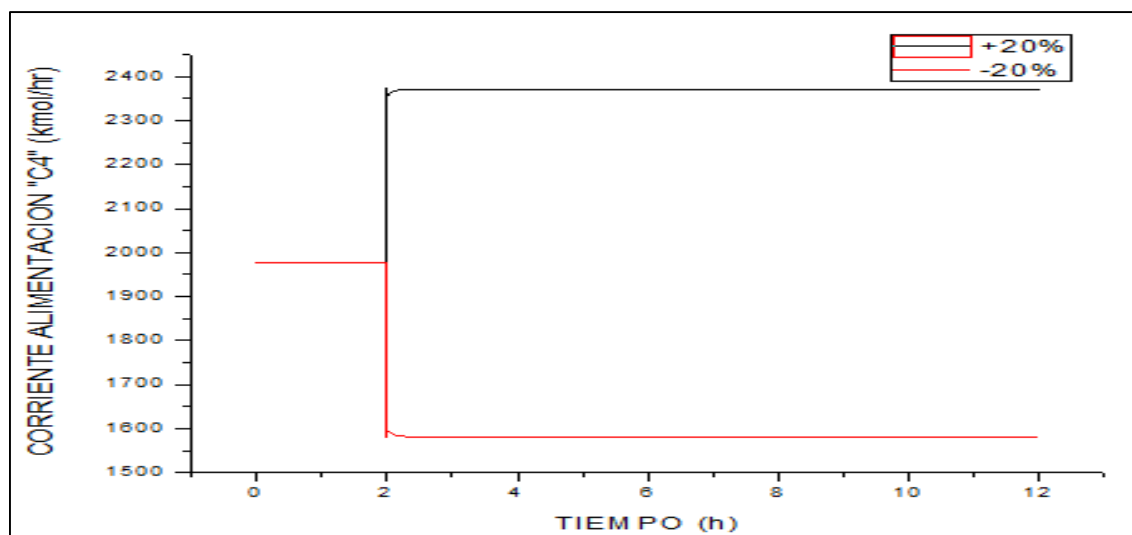


Figura 113.- Perturbación  $\pm 20\%$  corriente C4 - MTBE destilación reactiva NEQ

En primer lugar se observa el efecto que tiene la perturbación realizada en la alimentación sobre las corrientes de destilado y fondos de la columna. En la siguiente figura se muestran las modificaciones realizadas por el sistema de control sobre la corriente de destilado. La corriente alcanza un valor estable en un tiempo transcurrido de 2 horas aproximadamente, realizando cambios proporcionales a la perturbación, es decir, si la alimentación aumenta, la corriente de destilado también aumenta.

De manera similar cuando la alimentación disminuye, la corriente de destilado también disminuye. Esta respuesta muestra mejor desempeño que la columna reactiva con etapas de equilibrio, ya que la anterior alcanza una estabilidad en el flujo después de un tiempo de 3 horas.

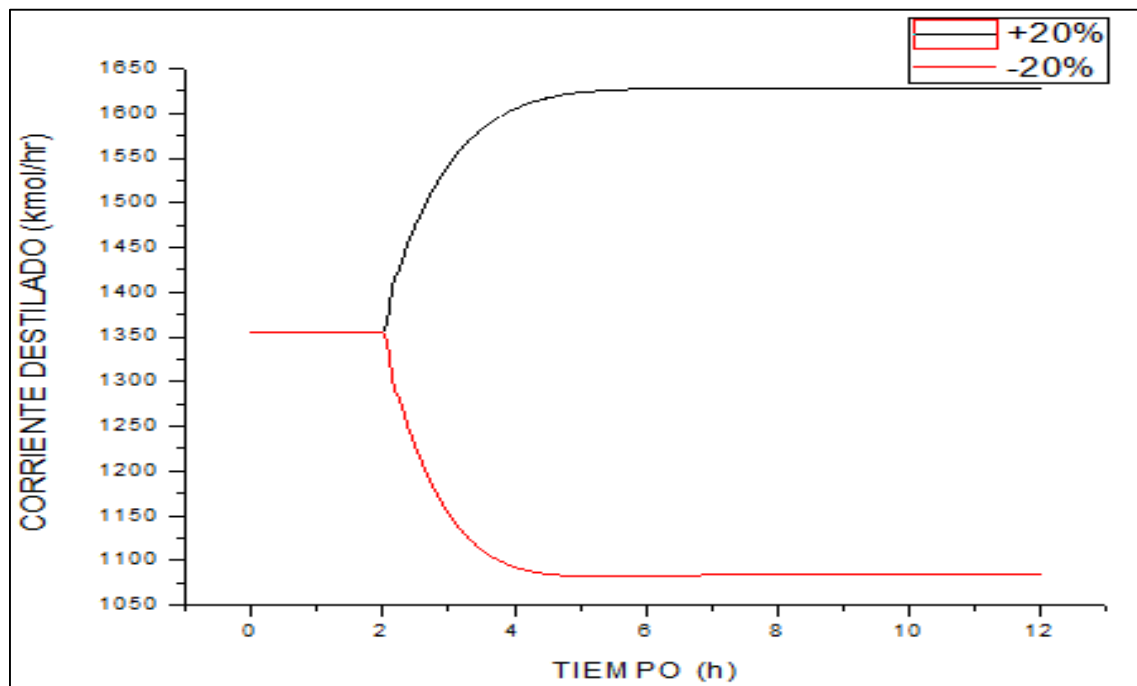


Figura 114.- Respuesta ante perturbación en la corriente de destilado - MTBE destilación reactiva NEQ

En la Figura 115 se muestra la respuesta obtenida en la corriente de fondos de la columna reactiva NEQ, como es de esperar, si la corriente de alimentación aumenta o disminuye, la corriente de fondos presenta un comportamiento proporcional como respuesta, estableciendo un nuevo estado estacionario en aproximadamente 2.5 horas.

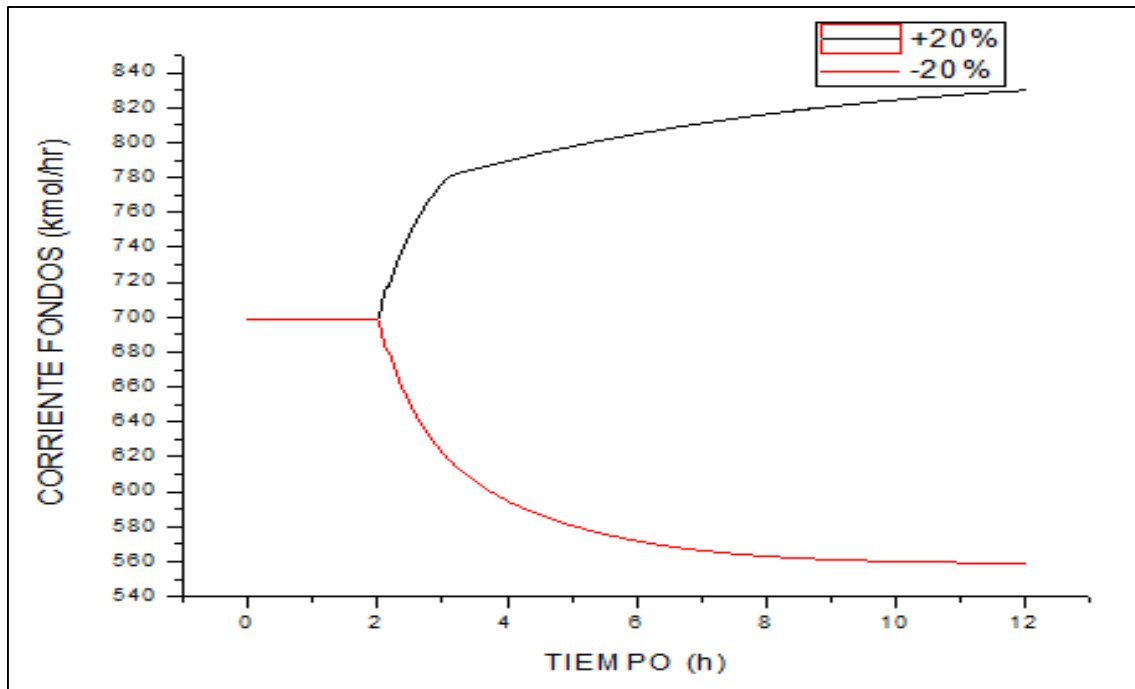


Figura 115.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - MTBE destilación reactiva NEQ

A continuación se muestra la respuesta obtenida en la pureza de MTBE ante la perturbación realizada en la alimentación. Este parámetro es el más importante a monitorear, ya que si la pureza de MTBE se coloca por debajo de la especificación del 98%, entonces el sistema de control establecido no es eficiente, y como consecuencia, el sistema de control para la columna reactiva con etapas de equilibrio también puede ser puesto en duda, ya que se han establecido los lazos de control de manera similar en ambas columnas.

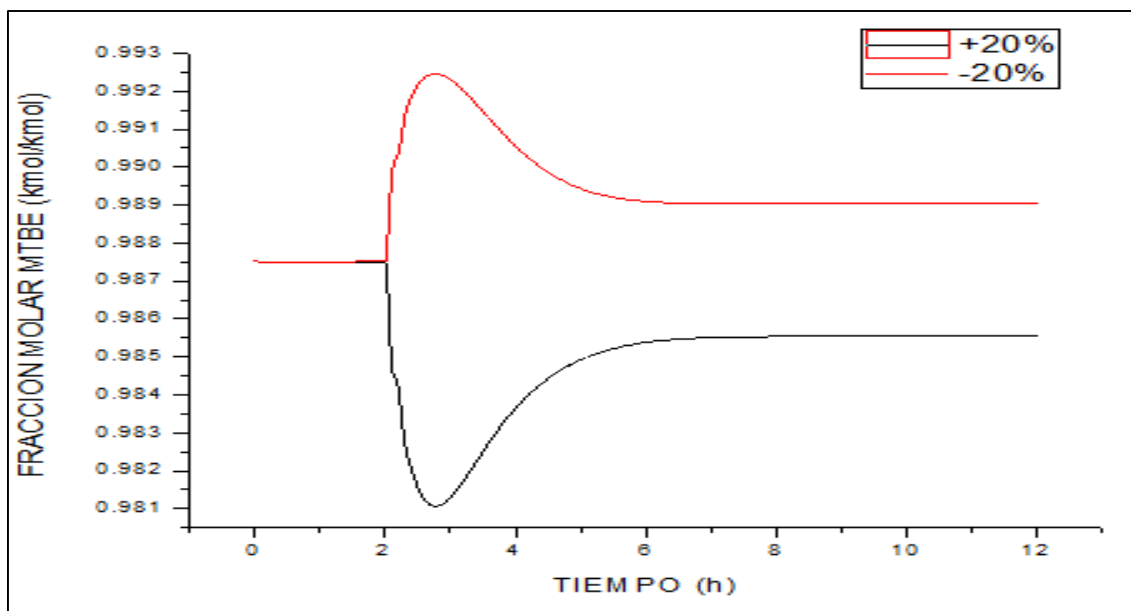


Figura 116.- Respuesta ante la perturbación en la composición de MTBE - MTBE destilación reactiva NEQ

La Figura 116 muestra que la composición de MTBE se mantiene por encima de la especificación deseada, además estableciendo la pureza en un tiempo menor a las 3 horas. En primera instancia, cuando la perturbación en la alimentación incrementa en 20% el flujo entrante, la pureza de MTBE disminuye hasta en un 0.6%, sin salir del 98% especificado para MTBE, lo cual es algo remarcable ya que significa que el sistema de control establecido en la columna reactiva con etapas de no equilibrio es bastante eficiente.

De manera similar, cuando la perturbación disminuye el flujo alimentado, la pureza de MTBE aumenta hasta en 0.5%, debido a que se genera un exceso de metanol por un periodo corto de tiempo promoviendo la reacción directa. Es importante recordar que mientras más compleja sea la simulación de la columna de destilación, más parecidas son las respuestas obtenidas en la realidad y en experimentación, es por esto que la columna reactiva con etapas de no equilibrio se asemeja de una mejor manera a la realidad que su homóloga con etapas de equilibrio.

La relación establecida entre alimentaciones por un lazo de control, modifica la corriente de metanol, logrando reestablecer la relación estequiométrica de los reactivos planteada para la simulación en estado estacionario.

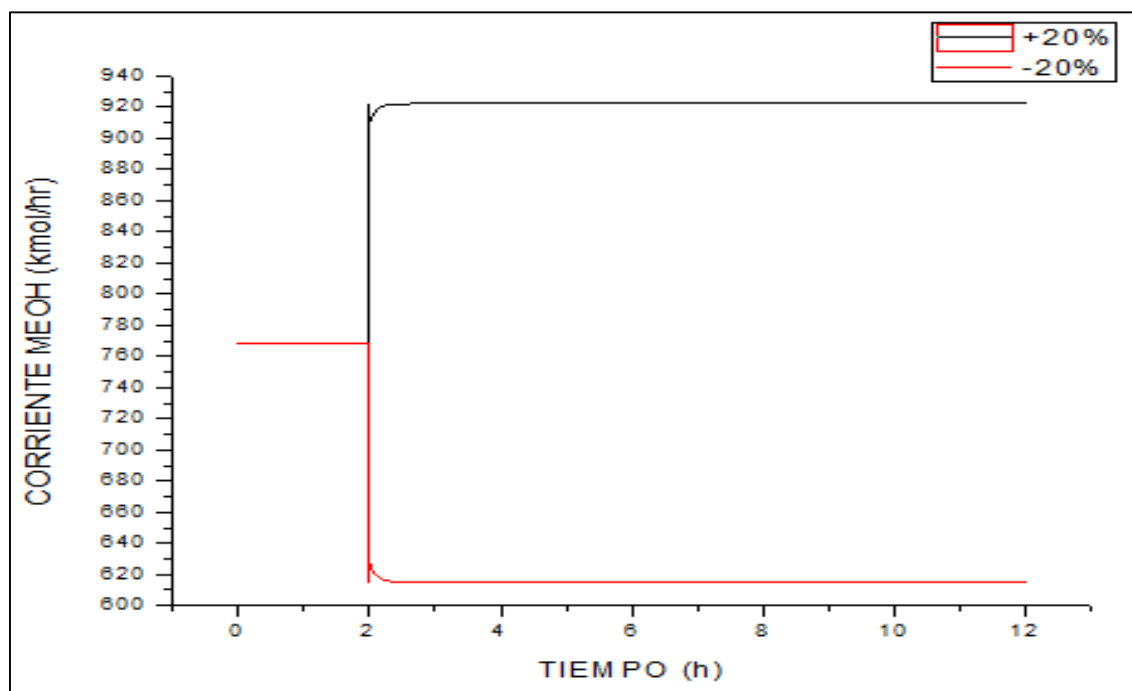


Figura 117.- Perturbación  $\pm 20\%$  en alimentación de MeOH - MTBE destilación reactiva NEQ

Otra variable importante a monitorear es la temperatura en el plato 22 de la columna reactiva, es importante que la temperatura se reestablezca porque de no hacerlo los reactivos y productos comienzan a descomponerse o a no reaccionar, es por esto que prácticamente en todas las columnas de destilación se establece un lazo de control de temperatura, la cual es controlada mediante la manipulación de la carga térmica en el rehervidor de la columna de destilación.

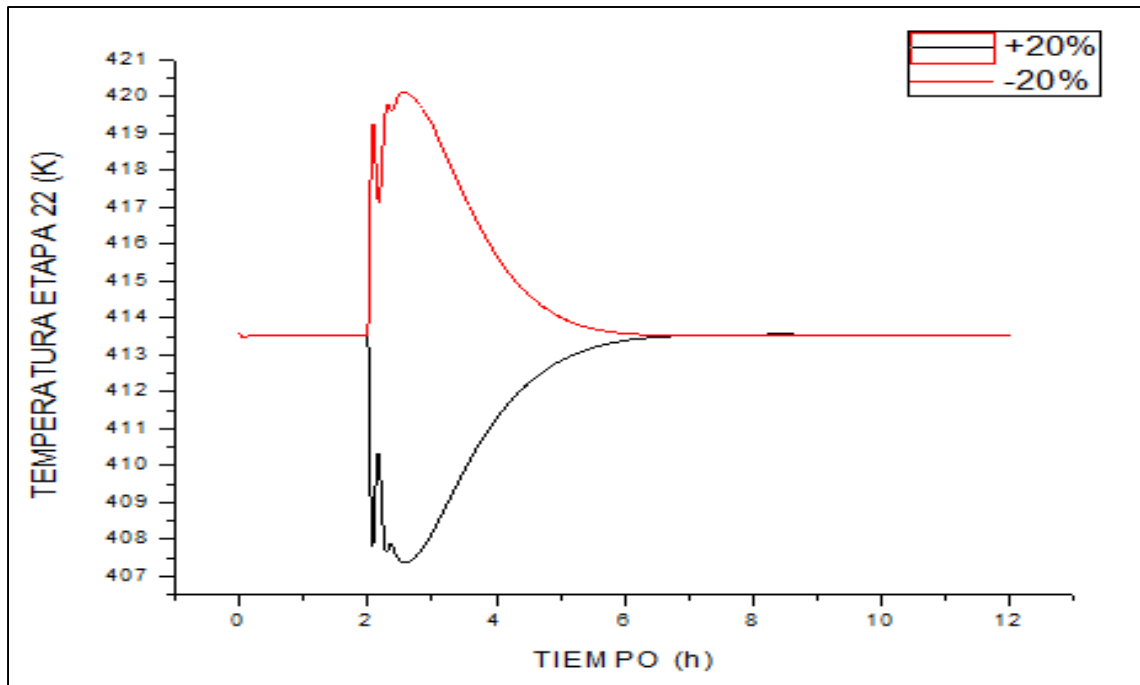


Figura 118.- Respuesta ante perturbación en la temperatura plato 22 - MTBE destilación reactiva NEQ

La temperatura en el plato cambia ante la perturbación generada en la alimentación en un máximo de 6 grados Kelvin, volviendo al valor de SetPoint en un tiempo aproximado de 2 horas gracias a que el lazo de control muestra un buen desempeño ante la perturbación modificando la carga térmica del rehedidor. Este lazo es uno de los más importantes en cualquier columna de destilación, por lo que es necesario tomar precauciones y mucha atención cuando se sintoniza el lazo de control. A continuación se muestra la respuesta correspondiente a la carga térmica en el rehedidor.

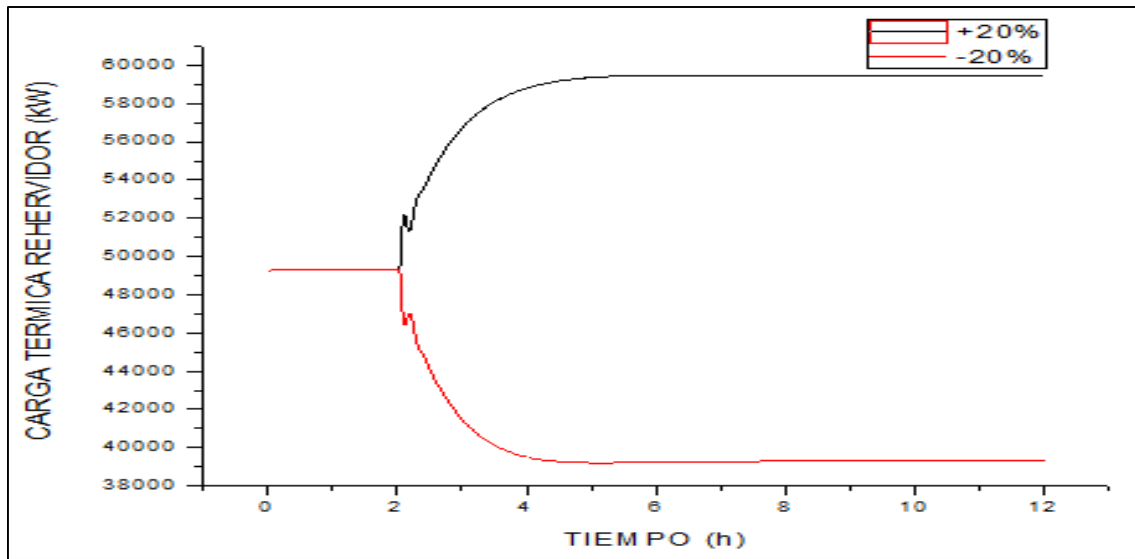


Figura 119.- Respuesta ante perturbación en rehervidor - MTBE destilación reactiva NEQ

Es posible observar en la Figura 119, que la carga térmica se modifica proporcionalmente con respecto a la perturbación, ya que incrementa o disminuye la alimentación a la columna reactiva, por lo que es necesario trabajar con mayor o menor cantidad de materia según sea el caso, estableciéndose rápidamente en tiempo de 2 horas.

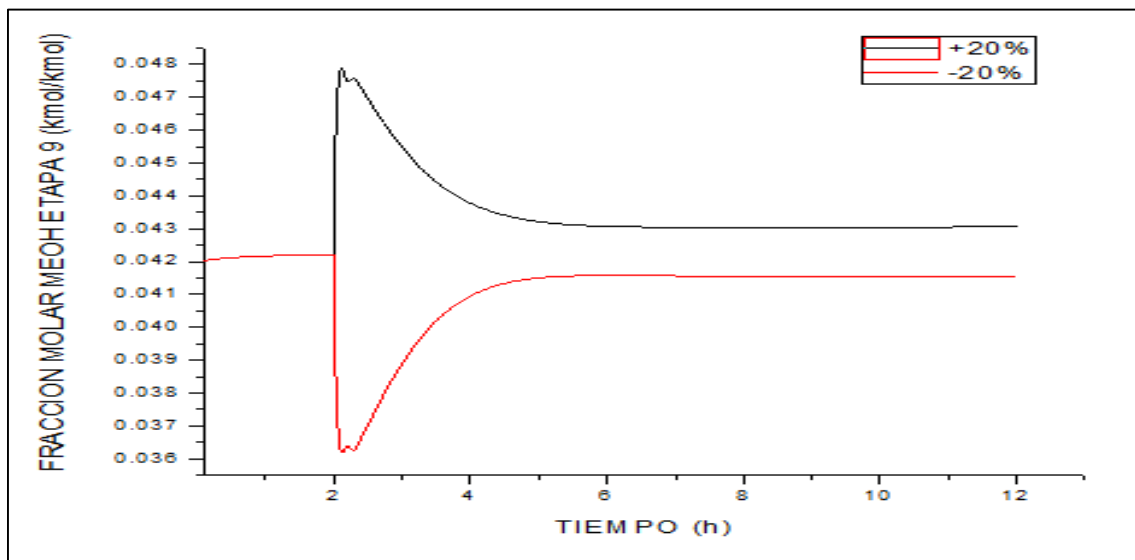


Figura 120.- Respuesta ante perturbación, composición de MeOH etapa 10 - MTBE destilación reactiva NEQ

Por último, en la Figura 120 se observa la reacción que tiene el controlador de composición de la fracción molar de metanol en fase líquida en la etapa 9 ante la perturbación, se obtienen respuestas bastante favorables, ya que la fracción de metanol después de la perturbación cambia de 0.042 a 0.043 cuando la perturbación incrementa en 20% en 2 horas aproximadamente, una diferencia de 0.001. De manera similar cuando la perturbación disminuye en 20% la cantidad alimentada a la columna se observa un cambio de 0.042 a 0.041 en la fracción molar de metanol después de 2 horas.

A continuación se presentan los gráficos correspondientes a la perturbación tipo servo en el controlador de temperatura del plato número 22 de la columna reactiva con etapas de no equilibrio, y la respuesta que este cambio produce en la fracción molar de MTBE.

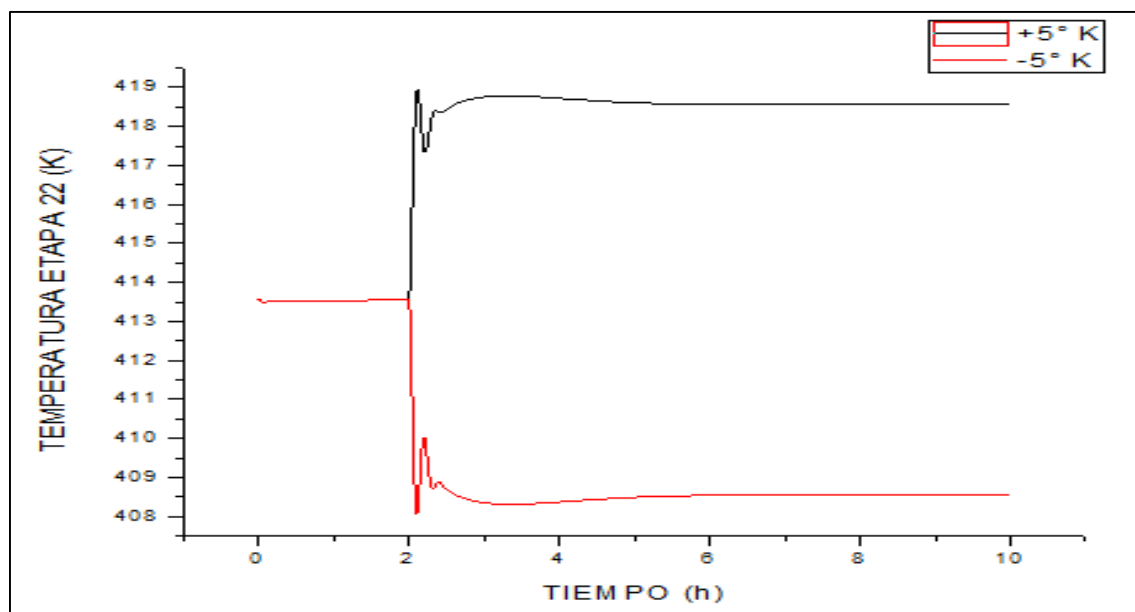


Figura 121.- Perturbación en  $\pm 5^\circ\text{K}$  SetPoint en plato 22 columna destilación - MTBE destilación reactiva NEQ.

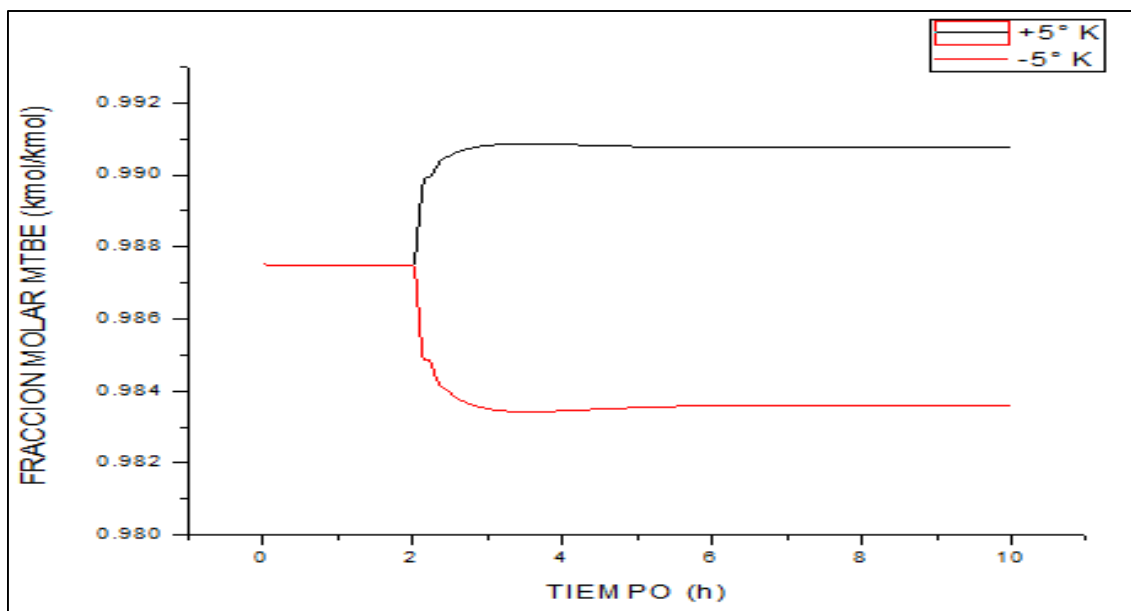


Figura 122.- Fracción molar de MTBE ante perturbación servo - MTBE destilación reactiva NEQ.

Es posible observar que la fracción molar de MTBE ante la perturbación tipo servo en la temperatura del plato número 22, es del 0.75%, respuesta ligeramente mayor al proceso que considera etapas de equilibrio (0.5%), pero que son cambios prácticamente despreciables y que mantienen la calidad del producto principal dentro de los rangos establecidos como satisfactorios.

En esta sección se observaron las respuestas ante las perturbaciones generadas en la alimentación de la columna de algunos de los parámetros más importantes en la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio. Es posible afirmar que el sistema de control es bastante eficiente, ya que puede controlar perturbaciones grandes en el proceso, manteniendo la pureza de MTBE dentro del rango especificado, con la excepción en la perturbación tipo servo para el proceso convencional, ya que la calidad de MTBE disminuye hasta el 90%.

### 3.2. – Tert Amil Metil Éter (TAME)

A continuación se muestran los resultados obtenidos en las simulaciones del proceso de obtención de TAME mediante los tres procesos distintos, proceso convencional, destilación reactiva y destilación con etapas de no equilibrio.

#### 3.2.1.- Proceso convencional

En primer lugar se presentan algunos resultados obtenidos en la simulación en estado estacionario del proceso de obtención de TAME convencional, además, los efectos que tiene la variación de parámetros sobre la calidad del producto principal. Es importante recordar que Aspen Plus posee la herramienta “Model Analysis Tools” en donde es posible realizar casos de variación de parámetros (análisis de sensibilidad) de una manera prácticamente inmediata, sin embargo, en ocasiones también es necesario llevar a cabo simulaciones paso a paso con los cambios en los parámetros de diseño para poder observar la respuesta de las plantas.

##### 3.2.1.1.- Simulación en estado estacionario

En base al diagrama de flujo de proceso y a las condiciones de operación en estado estacionario de la planta de producción convencional de TAME, se presentan a continuación los resultados obtenidos para la sección 2.2.1 en Aspen Plus. Las primeras gráficas mostradas son las correspondientes al perfil de temperatura y de composición en la columna de destilación convencional que separa el producto principal de los demás reactivos, con estos perfiles es posible elegir en que plato será instalado el control de temperatura (Etapa 14). Por otra parte, se muestra que la pureza de TAME alcanza el 93% en la corriente de fondos.

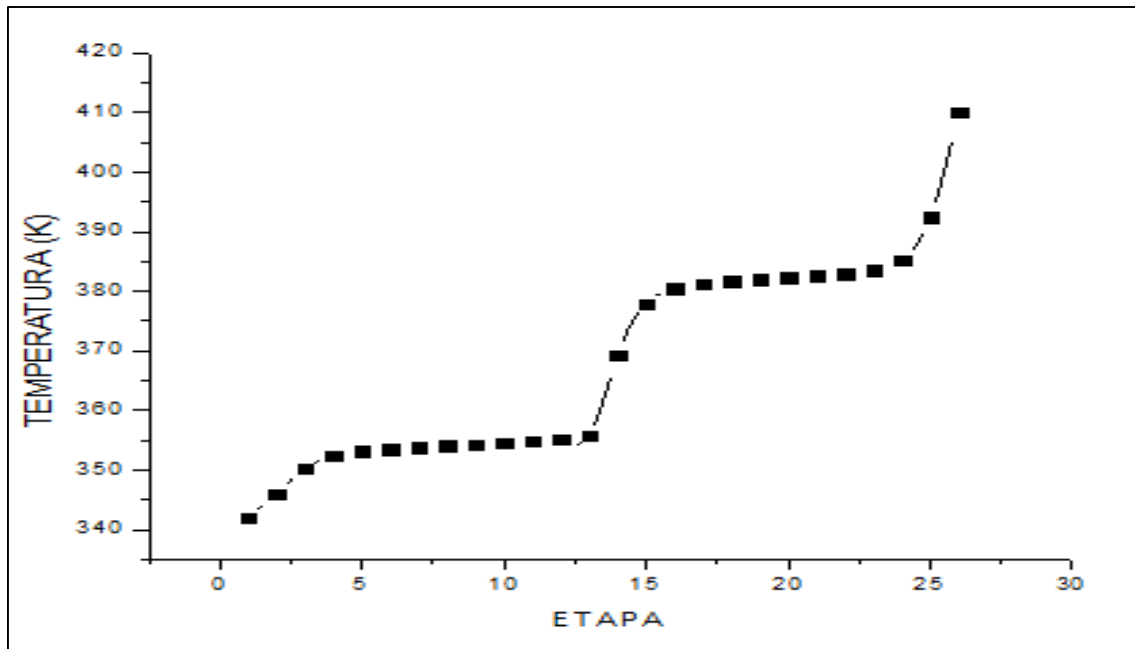


Figura 123.- Perfil de temperatura en columna de destilación - TAME convencional

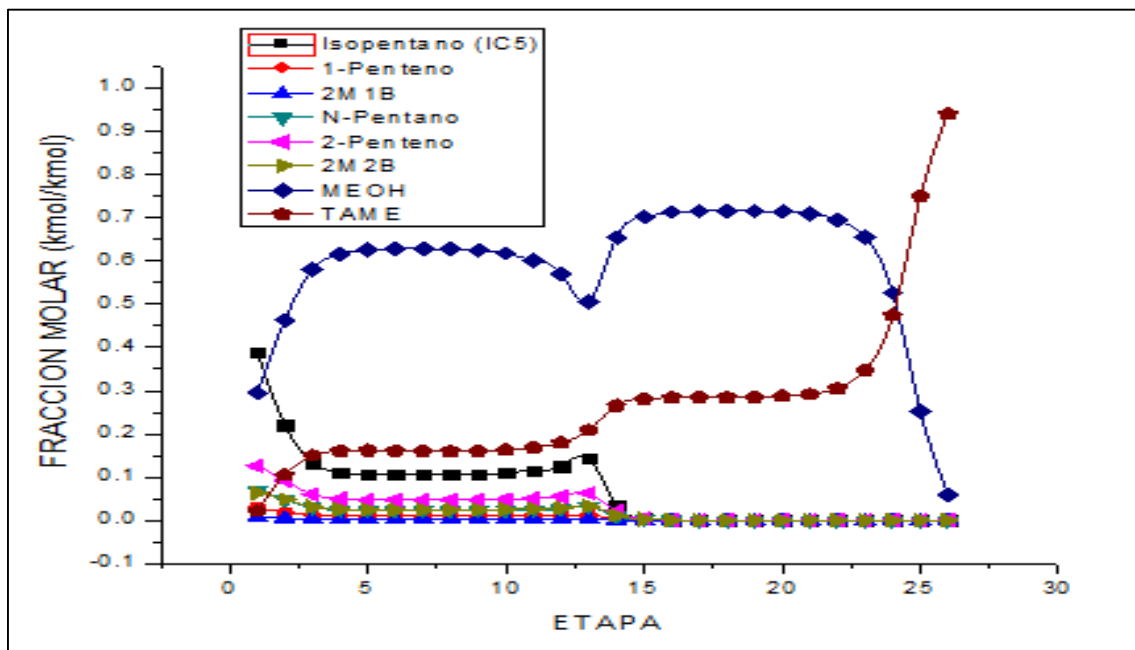


Figura 124.- Perfil de composiciones en columna de destilación - TAME convencional

A continuación se muestra algunos resultados adicionales obtenidos en la simulación en estado estacionario sobre la columna de destilación.

<b>Parámetro</b>	<b>Valor</b>	<b>Unidades</b>
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	342	K
Carga térmica	-12382934	W
Presión	4	bar
Flujo	1288.42	Kmol/h
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	410.11	K
Carga térmica	11972275.9	W
Presión	5	bar
Diámetro de columna	2.6	m
<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	4.2	m
Diámetro	2.1	m
<b>Tanque de fondos</b>		
Largo	4.32	m
Diámetro	2.16	m

*Tabla 31.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación – Convencional - TAME*

#### 3.2.1.1.1.- Efecto de los parámetros de diseño

En esta sección se presentan los resultados obtenidos en el análisis de sensibilidad realizado al proceso convencional de obtención de TAME mostrando que este proceso en particular es muy sensible ante la variación de parámetros. Los parámetros a modificar son la relación de reflujo, flujo en la corriente de destilado, número de etapas y etapa de alimentación.

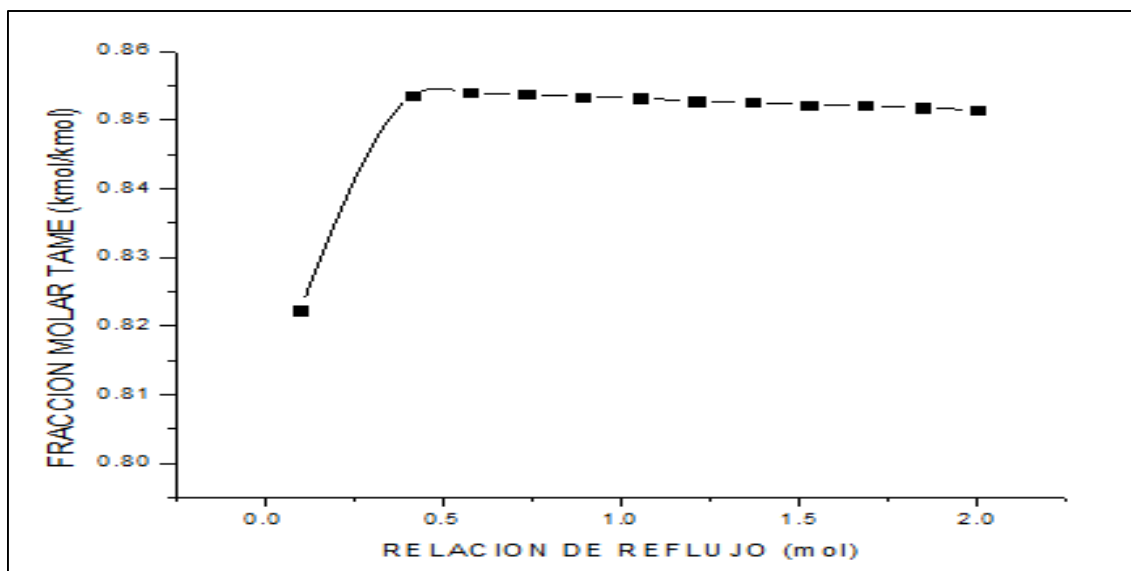


Figura 125.- Relación de reflujo - Fracción molar de TAME

Se puede observar que un pequeño incremento en la relación de reflujo tiene un gran impacto en la fracción molar de TAME y que conforme se incrementa este valor, la pureza de TAME se mantiene en valores prácticamente constantes aunque disminuyendo en poca proporción.

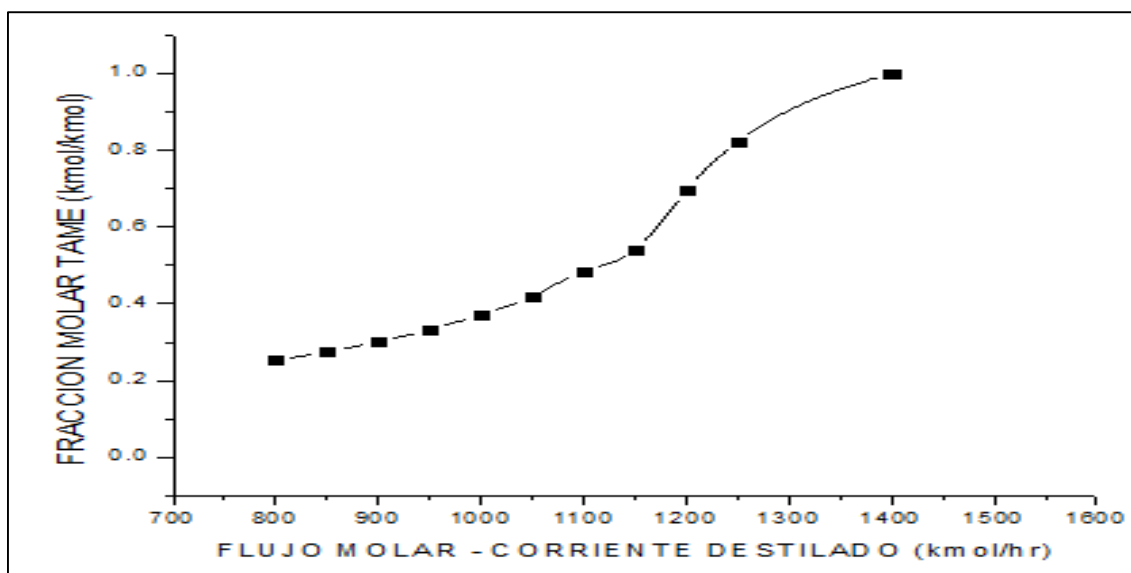


Figura 126.- Velocidad de flujo molar en destilado - Fracción molar de TAME

En la Figura 126 muestra como cuando se incrementa la velocidad de flujo en la corriente de destilado, la pureza de TAME incrementa considerablemente, ya que es posible alcanzar alta pureza, incluso por encima del 90%.

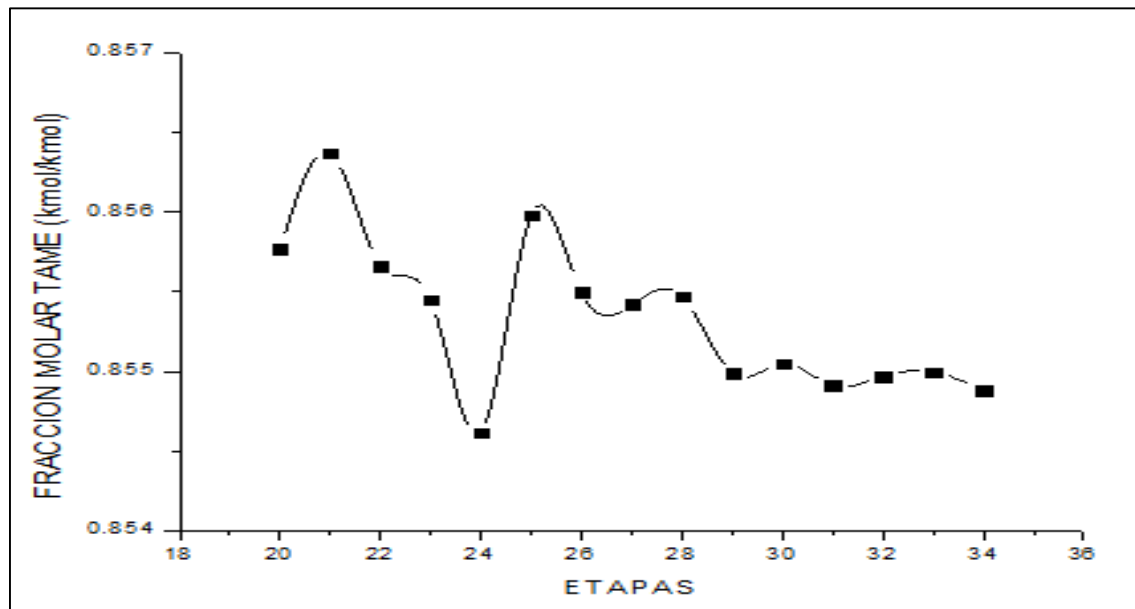


Figura 127.- Número de etapas en columna de destilación - Fracción molar TAME

En cuanto al número de etapas en la columna de destilación, se observa en la Figura 127 que la cantidad en la corriente de fondos de TAME es muy variable y en general descendente conforme la cantidad de etapas se incrementa, esto puede deberse a que la carga térmica especificada en el rehedidor ya no es capaz de mantener la calidad del producto en una columna que se hace cada vez más alta. A continuación se muestra en la Figura 128, el efecto que presenta la variación de la posición de la alimentación a la columna de destilación, donde se puede observar que conforme la posición baja a lo largo de la columna (nomenclatura de Aspen), la fracción molar de TAME disminuye poco a poco.

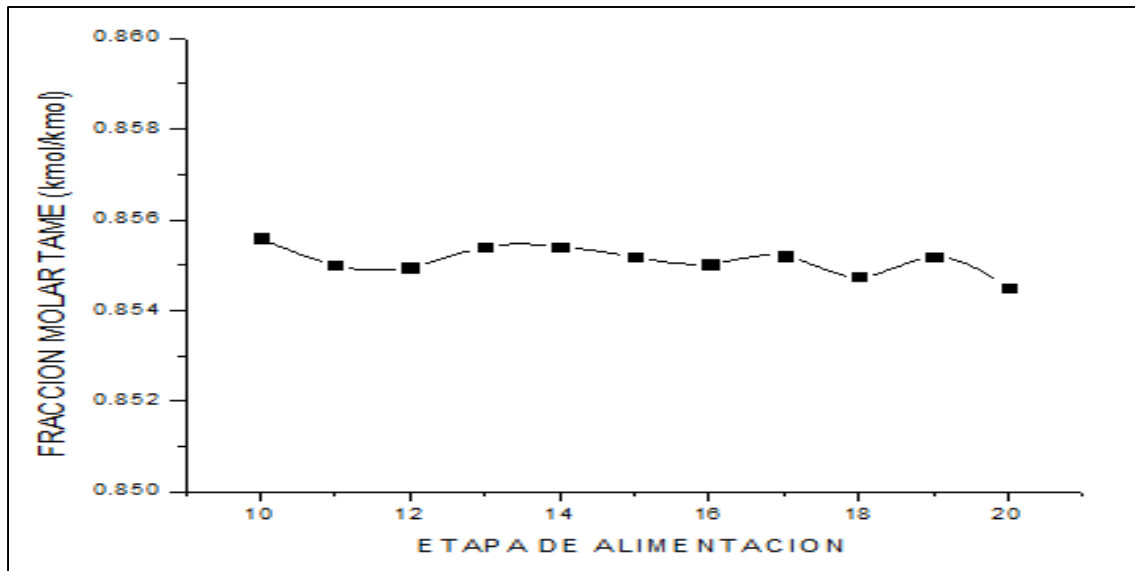


Figura 128.- Posición de etapa de alimentación - Fracción molar TAME

El comportamiento de los procesos ante distintos escenarios en los parámetros de diseño es una de las ventajas que tienen los simuladores. La planta convencional para la obtención de TAME es muy inestable en la modificación de sus parámetros, esto es un gran problema porque dificulta la instalación de controladores para la simulación dinámica, y limita el rango en las perturbaciones que puede manejar el sistema de control.

### 3.2.2.- Destilación reactiva

A continuación se presentan los resultados obtenidos en la simulación en estado estacionario de la columna reactiva para la producción de TAME considerando las condiciones de operación propuestas en la sección 2.2.2, y posteriormente se observan los efectos que tiene la variación de parámetros sobre la pureza del producto principal.

### 3.2.2.1.- Simulación en estado estacionario

Las condiciones de operación del proceso con destilación reactiva propuestas en la sección 2.2.2.1, que hace uso de un pre-reactor y una columna tiene como producto principal TAME con una calidad mayor al 99%. A continuación se muestran los perfiles de temperatura y composición obtenidos, los cuales son útiles para la elección del plato en el cual será controlada la temperatura y la composición.

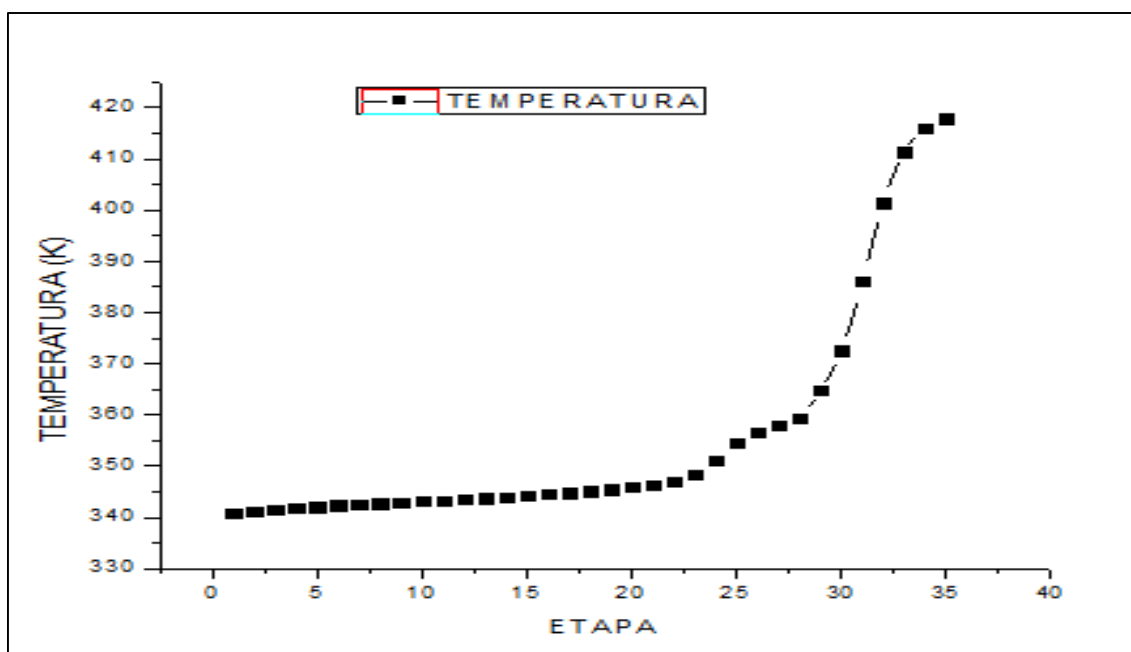


Figura 129.- Perfil de temperatura en columna de destilación - TAME destilación reactiva

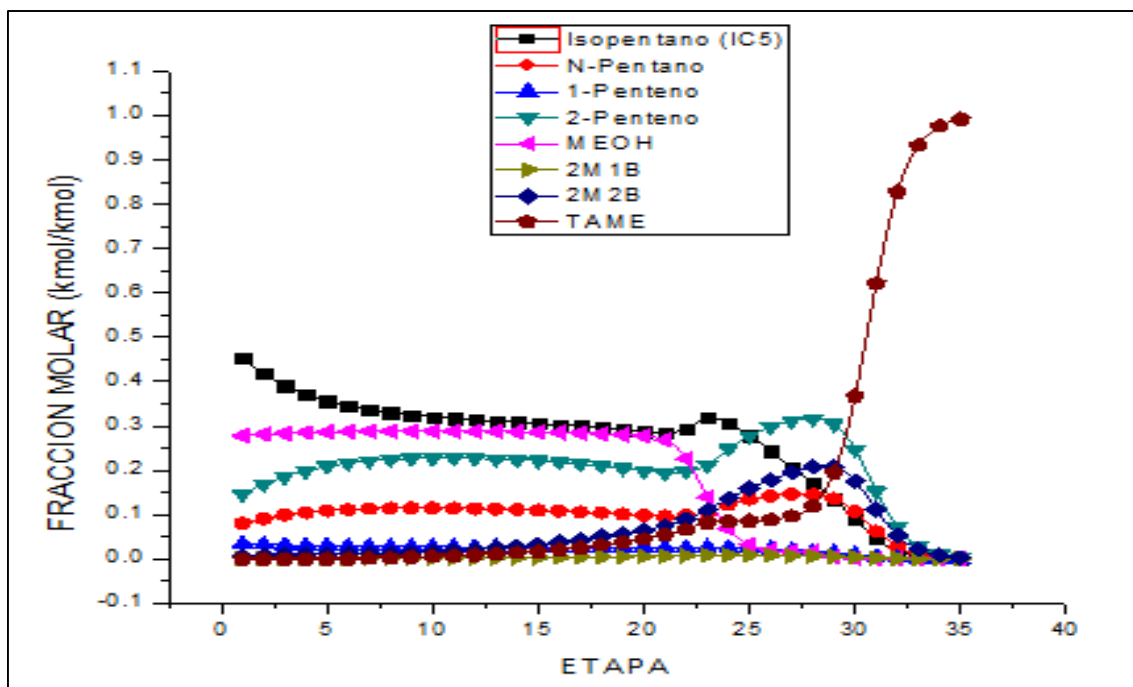


Figura 130.- Perfil de composiciones en columna de destilación - TAME destilación reactiva

En la siguiente tabla se muestran algunos resultados obtenidos a partir de la simulación en estado estacionario sobre la columna de destilación reactiva.

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	341	K
Carga térmica	-27882644	W
Presión	4	bar
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	418	K
Carga térmica	27152033.6	W
Presión	4.5	Bar
Flujo	234.34	Kmol/h
Diámetro de columna	5.4	m

<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	5.53	m
Diámetro	2.76	m
<b>Tanque de fondos</b>		
Largo	6.44	m
Diámetro	3.22	m

*Tabla 32.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - TAME destilación reactiva*

#### 3.2.2.1.1.- Efecto de los parámetros de diseño

Los parámetros a monitorear en la columna reactiva y los efectos que presentan sobre la composición de TAME en la corriente de fondo son: relación de reflujo, velocidad de flujo de fondos, número de etapas reactivas, etapas de rectificación y etapas de agotamiento.

El primer parámetro a monitorear es como la relación de reflujo afecta la composición de TAME en la corriente de fondos, la Figura 131 muestra esta respuesta observándose que conforme se incrementa la relación de reflujo la fracción molar de TAME incrementa permaneciendo prácticamente estable y por encima del 99%. Incrementar el reflujo promueve la separación y recicla los reactivos que no reaccionaron a la zona reactiva, promoviendo la conversión, disminuyendo la concentración de reactivos y disminuyendo la temperatura dentro de la columna.

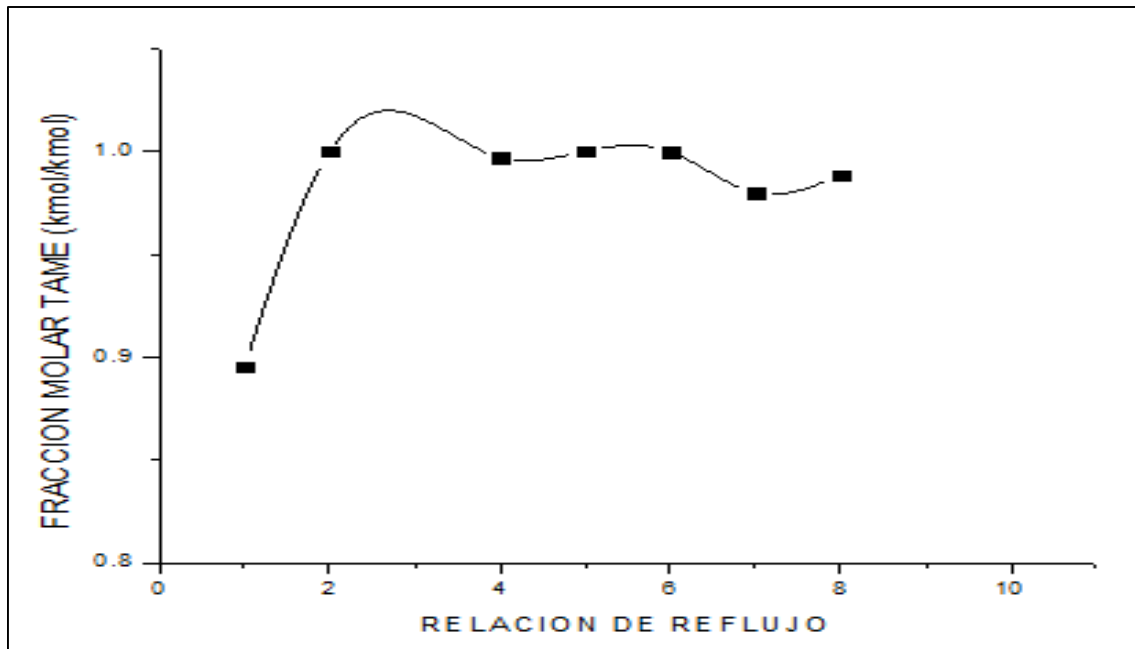


Figura 131.- Relación de reflujo – Fracción molar de TAME

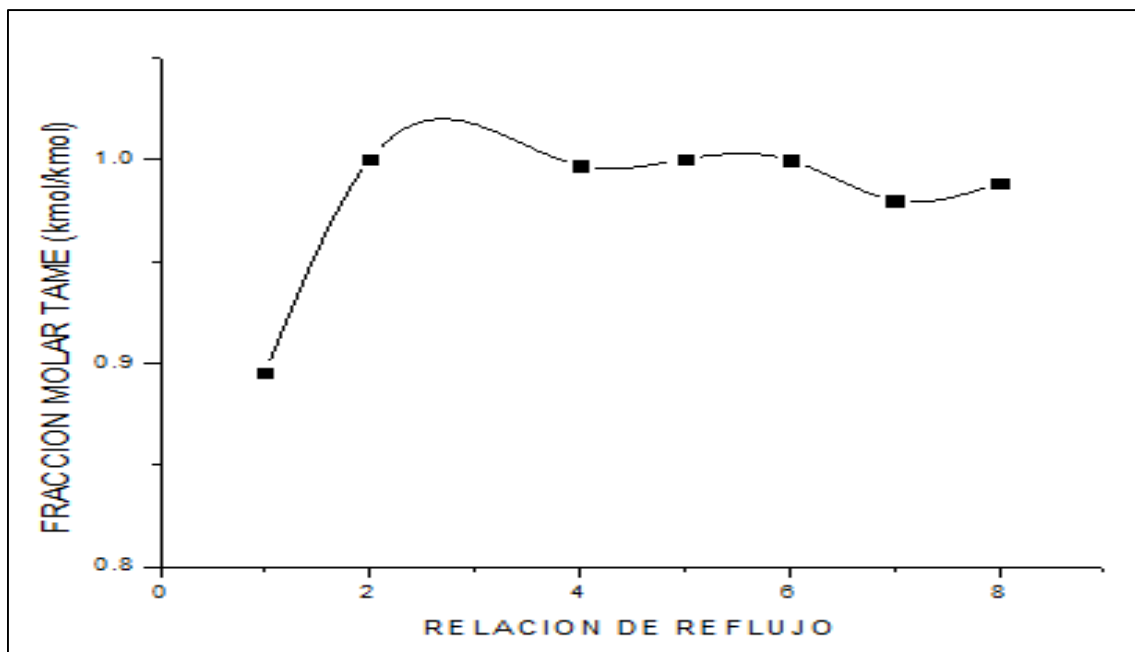


Figura 132.- Velocidad de flujo molar en fondos - Fracción molar de TAME

Uno de los parámetros especificados directamente en la columna de destilación reactiva es la velocidad de flujo molar en la corriente de fondos, por lo que observar el comportamiento de este parámetro es importante. En la Figura 132 se muestra la respuesta obtenida en la columna sobre la fracción molar de TAME cuando incrementa el flujo molar en el fondo de la columna, es posible observar que por debajo de los 250 kmol/h, la pureza de TAME permanece por arriba del 99%, por lo que para obtener la mayor cantidad de producto para concepto de venta, es necesario acercarse lo más posible a este valor sin afectar la fracción molar de TAME.

En la Figura 133 se muestra la respuesta en la fracción molar de TAME ante la modificación del número de etapas reactivas en la columna, es posible observar el incremento en la cantidad de etapas reactivas en la zona media de la columna de destilación, sin embargo, la fracción molar de TAME permanece constante alrededor del 99.7% a partir de 18 hasta 28 etapas reactivas, por lo que el incrementar la cantidad de etapas reactivas no modifica la calidad del producto principal.

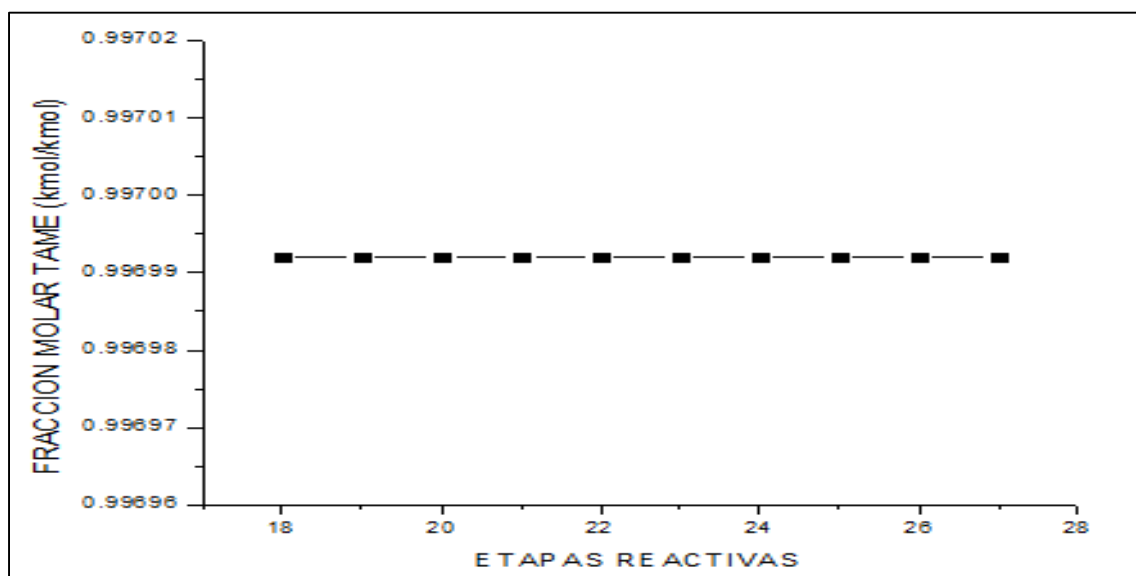


Figura 133.- Número de etapas reactivas - Fracción molar de TAME

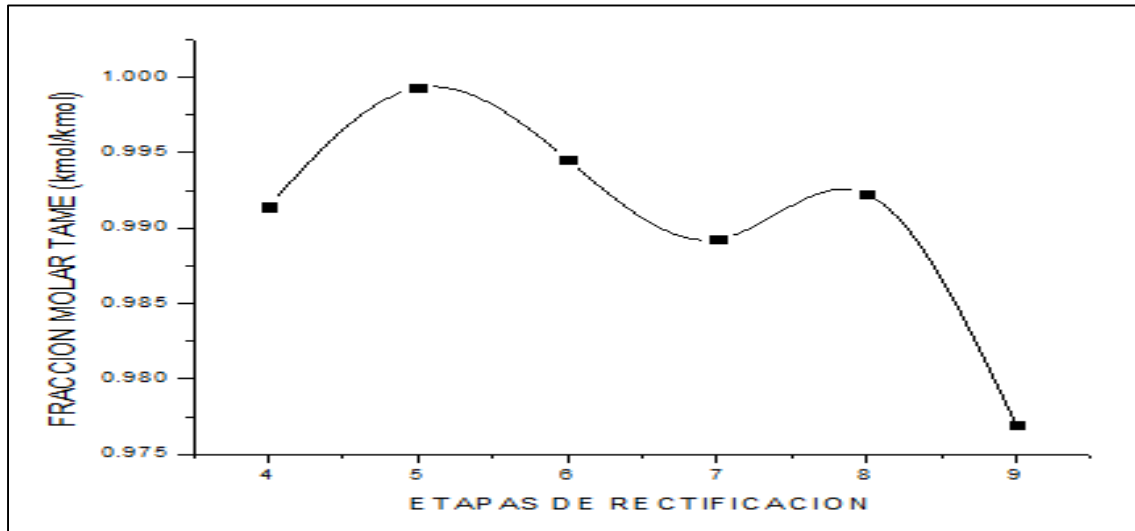


Figura 134.- Etapas de rectificación - Fracción molar de TAME

La Figura 134 muestra la respuesta que presenta el aumentar la cantidad de etapas de rectificación en la columna de destilación, manteniendo la cantidad de etapas reactivas y de agotamiento constantes. Puede observarse que la fracción molar de TAME disminuye conforme se incrementa el número de etapas de rectificación, esto se debe a que la carga térmica en el rehervidor también permanece constante, y debido a que la columna se hace cada vez más alta, la energía necesaria para llevar a cabo la separación en la parte alta de la columna no es suficiente. Es necesario modificar la carga térmica en el rehervidor para lograr mantener la pureza de TAME por encima de 99%.

Por otra parte, el incrementar el número de etapas de agotamiento no presenta un cambio significativo sobre la fracción molar de TAME en la corriente de fondos, debido a que la sección de agotamiento se encuentra más cerca del rehervidor y por ende no se perciben cambios significativos, la Figura 135 presenta esta respuesta.

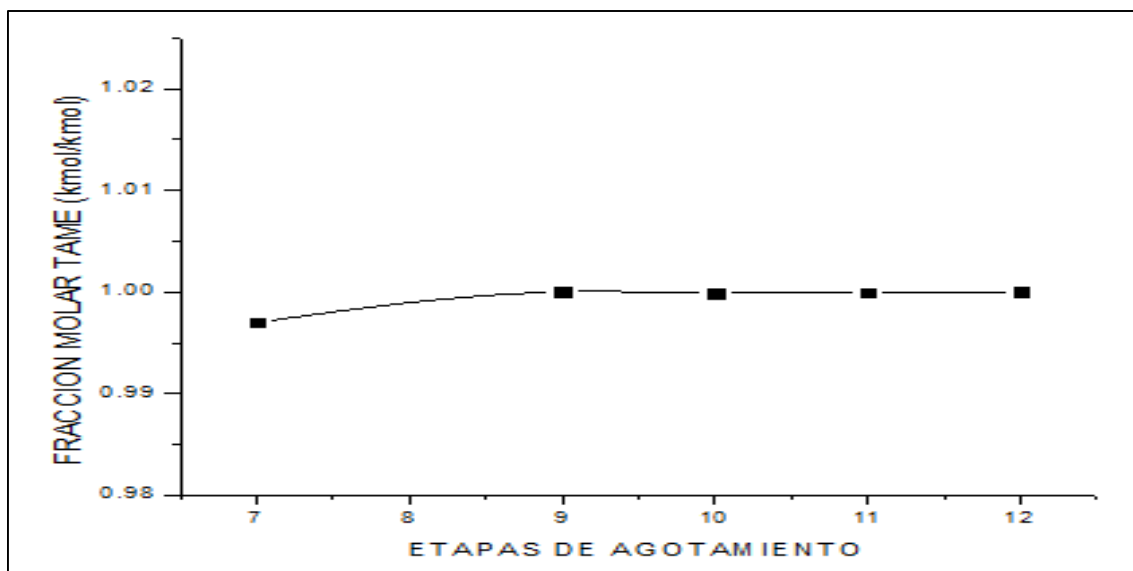


Figura 135.- Etapas de agotamiento - Fracción molar de TAME

### 3.2.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio

Con base a las condiciones de operación establecidas en la sección 2.2.3 y 2.2.3.1 se muestran los resultados obtenidos en la simulación en estado estacionario del proceso de obtención de TAME mediante destilación reactiva con etapas de no equilibrio. Posteriormente se presenta el análisis de variación de parámetros y el efecto que estos tienen en la fracción molar de TAME en la corriente de fondos.

#### 3.2.3.1.- Simulación en estado estacionario

A continuación en la Figura 136 y 137 se muestran los perfiles de temperatura y composición en la columna reactiva con etapas de no equilibrio y en la Tabla 333, los resultados correspondientes al condensador, rehervidor y dimensiones de los tanques.

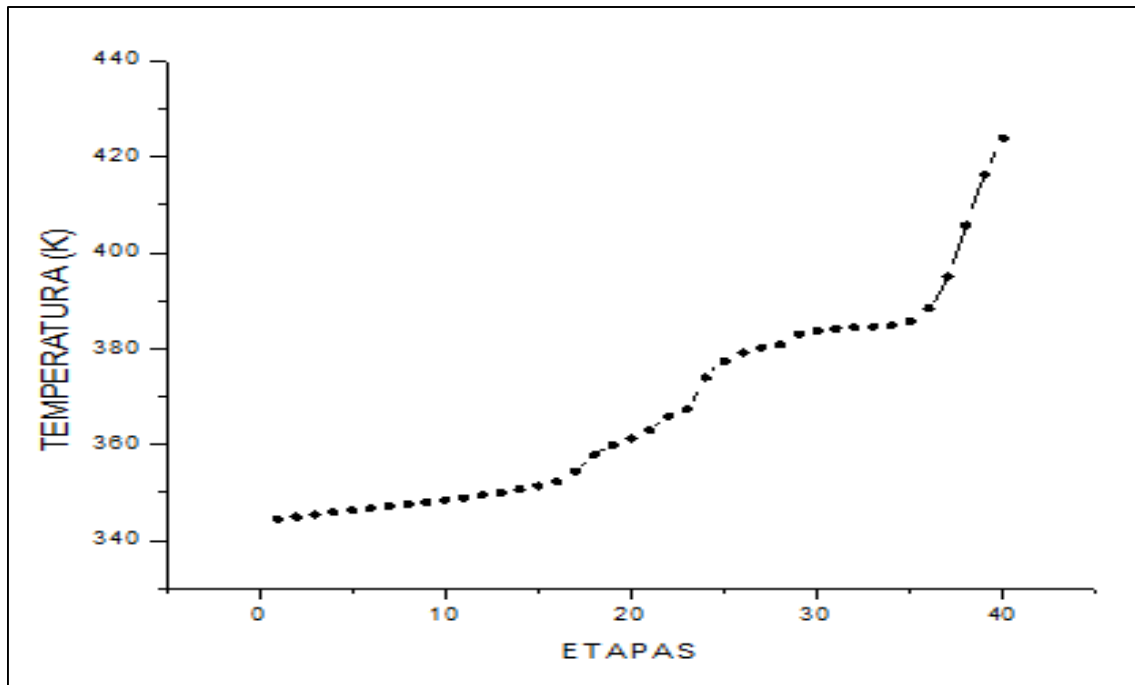


Figura 136.- Perfil de temperatura en columna de destilación - TAME destilación reactiva NEQ

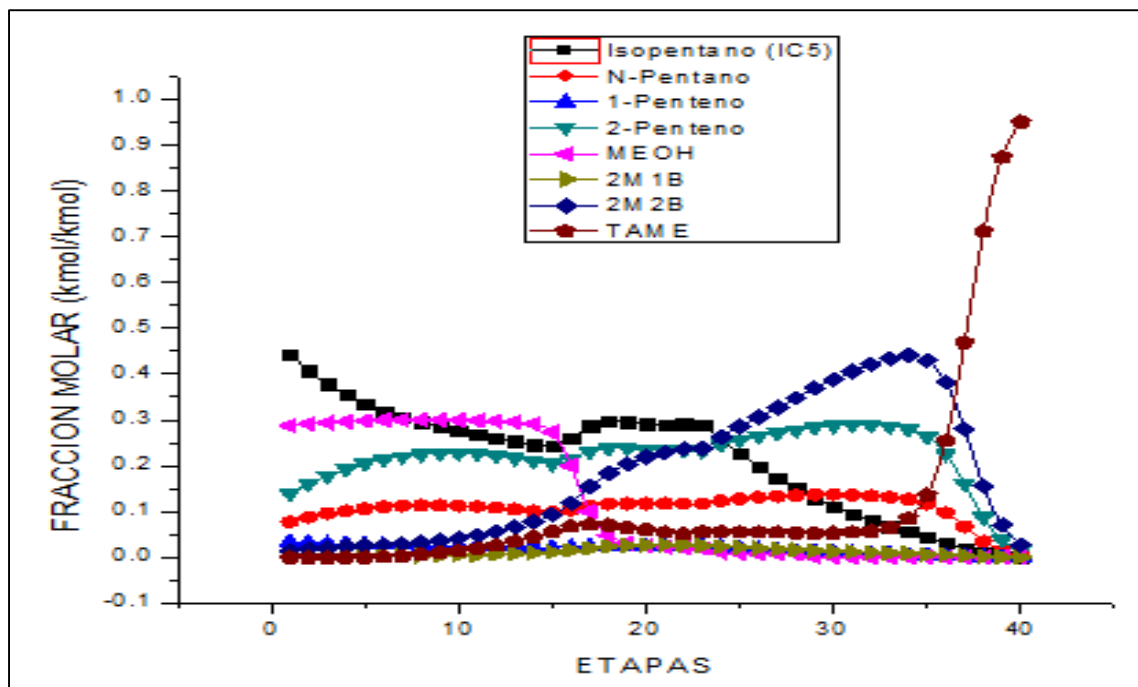


Figura 137.- Perfil de composiciones en la columna de destilación - TAME destilación reactiva NEQ

<b>Parámetro</b>	<b>Valor</b>	<b>Unidades</b>
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	344.4	K
Carga térmica	-39149235	W
Presión	4	Bar
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	423.82	K
Carga térmica	38844550	W
Presión	5	Bar
Flujo	234.34	Kmol/h
Diámetro de columna	6.8	M
<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	5.53	m
Diámetro	2.76	m
<b>Tanque de fondos</b>		
Largo	6.45	m
Diámetro	3.22	m

*Tabla 33.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - TAME destilación reactiva NEQ*

### 3.2.3.1.1.- Efecto de los parámetros de diseño

A continuación se muestran las respuestas obtenidas al modificar los parámetros de diseño sobre la fracción molar de TAME, los parámetros a monitorear son la relación de reflujo, velocidad de flujo molar en la corriente de fondos, número de etapas reactivas, etapas de rectificación y de agotamiento.

El primer parámetro a observar es la relación de reflujo, es posible observar en la Figura 138 que la fracción molar de TAME incrementa conforme la relación de reflujo aumenta, pero no en una cantidad significativa, ya que sólo se incrementa en 0.2% la pureza de TAME al incrementar en 100% la relación de reflujo en comparación con la establecida en la simulación en estado estacionario.

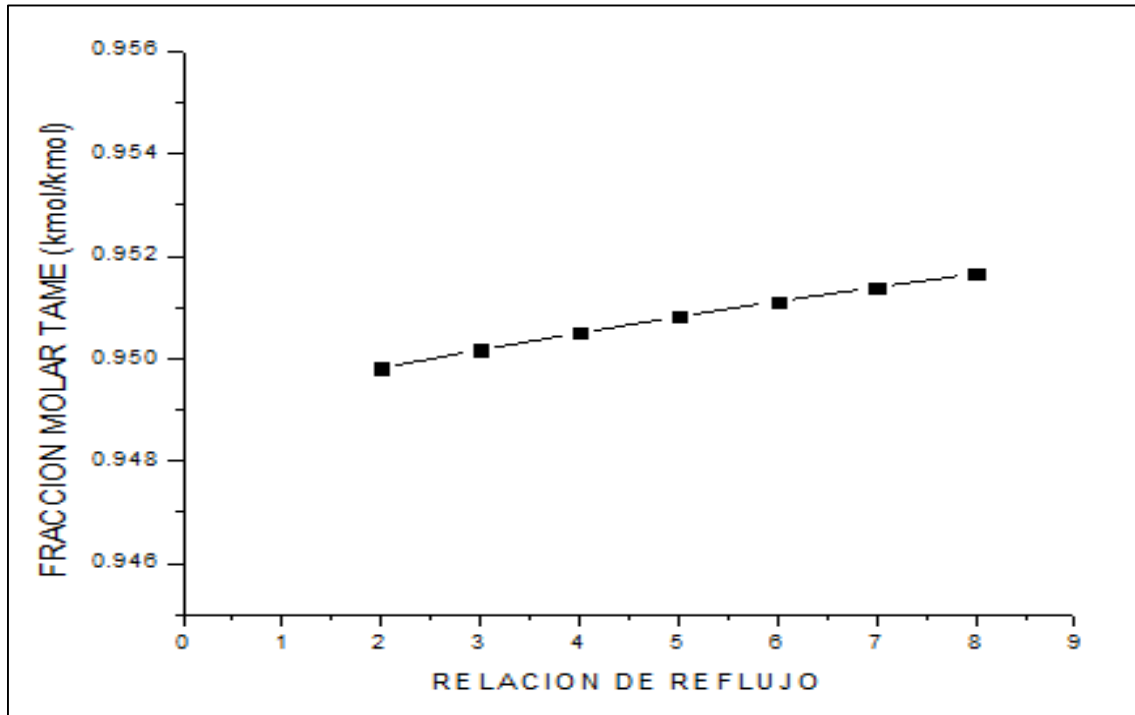


Figura 138.- Relación de reflujo - Fracción molar de TAME

El siguiente parámetro a observar es la velocidad de flujo molar en la corriente de fondos. La fracción molar de TAME muestra ser bastante sensible ante este parámetro ya que presenta una respuesta oscilatoria, aunque, la pureza no disminuye más allá del 90% para ninguno de los casos.

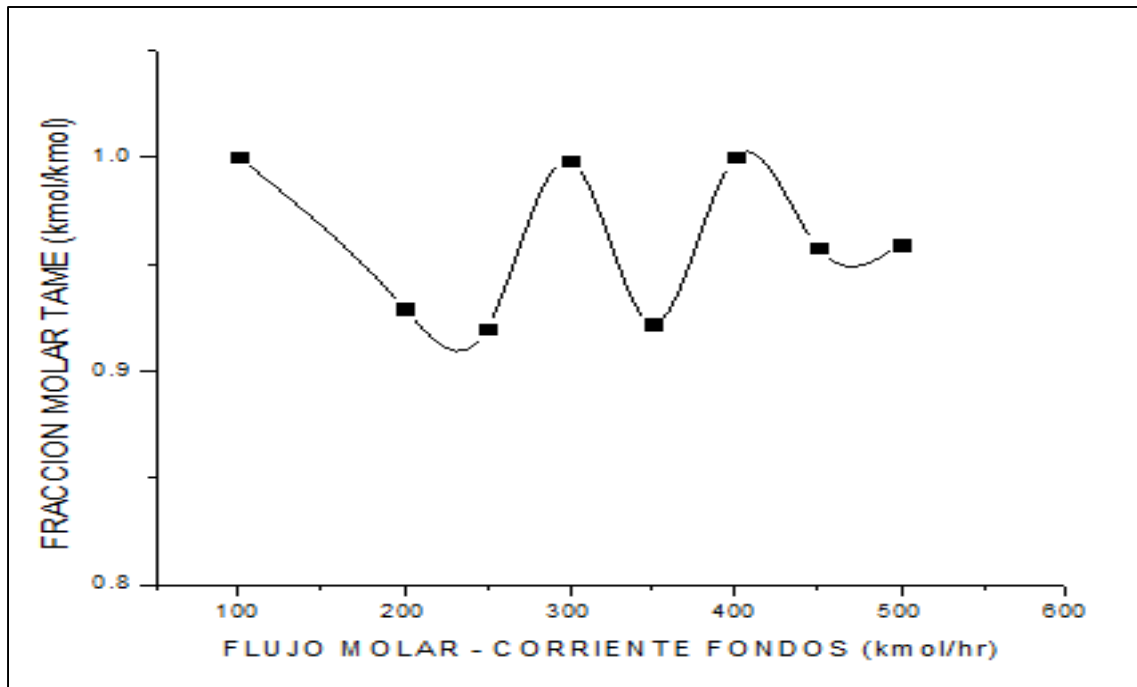


Figura 139.- Velocidad de flujo molar en fondos - Fracción molar de TAME

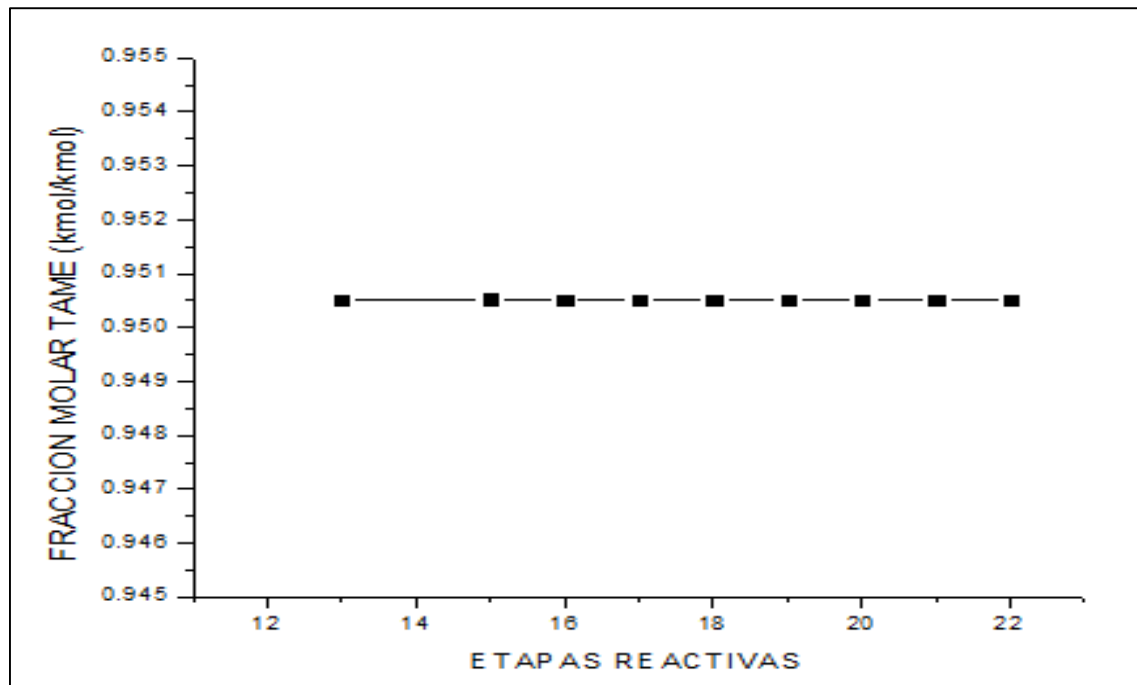


Figura 140.- Número de etapas reactivas - Fracción molar de TAME

En la Figura 140, se muestra la respuesta que tiene el incremento del número de etapas reactivas sobre la fracción molar de TAME, la cual es prácticamente nula, ya que la pureza de TAME se mantiene cerca del 95% y no cambia al disminuir o incrementar las etapas reactivas. Por otra parte, la respuesta ante el número de etapas de rectificación es un poco distinta, ya que la composición de TAME en la corriente de fondos incrementa un poco, alrededor del 0.2% cuando se añaden 7 etapas de rectificación a la columna reactiva, lo cual no es significativo o benéfico, ya que la columna se hace muy alta, aumentando el costo de la misma considerablemente.

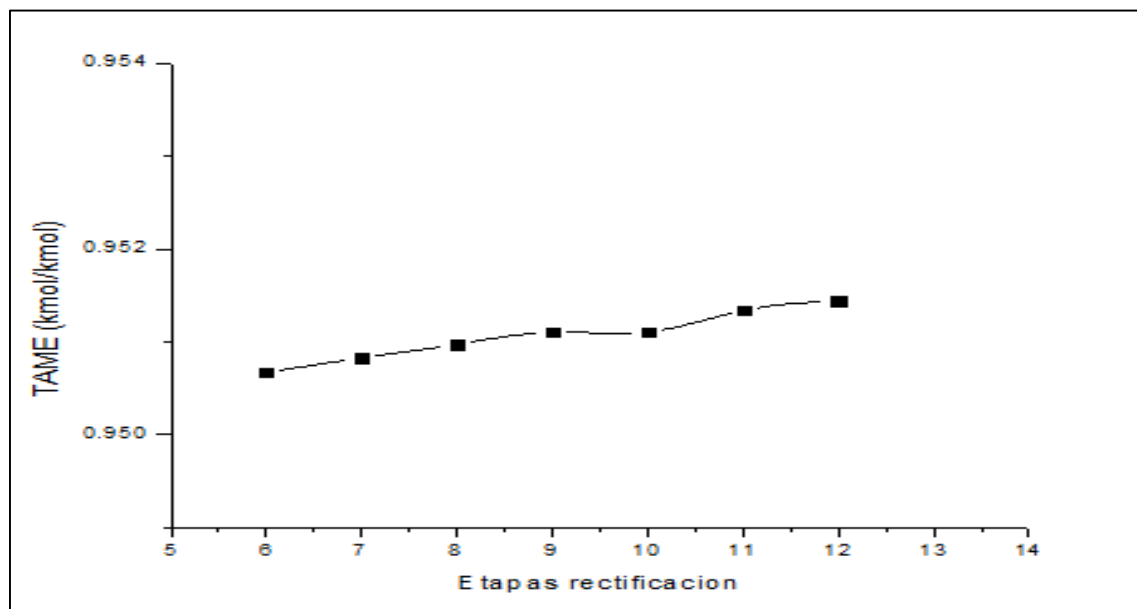


Figura 141.- Etapas de rectificación - Fracción molar de TAME destilación reactiva NEQ

Por último, en la Figura 142 se muestra la respuesta en la fracción molar de TAME ante el incremento del número de etapas de agotamiento, es importante recordar que este procedimiento es común cuando se intenta alcanzar la misma calidad de producto en columnas reactivas y columnas reactivas con etapas de no equilibrio.

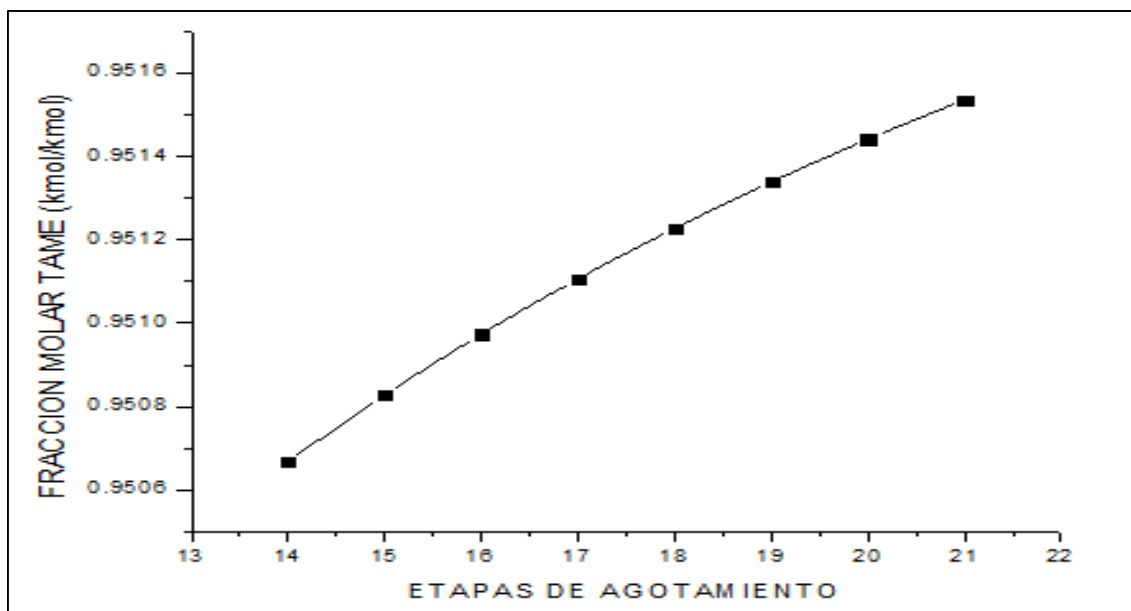


Figura 142.- Etapas de agotamiento - Fracción molar de TAME destilación reactiva NEQ

Como era de esperarse, el incremento de etapas de agotamiento aumenta la fracción molar de TAME, en la Figura 142 se observa esta respuesta, donde puede determinarse que por cada etapa adicional se aumenta en 0.02% la fracción molar de TAME.

Es posible realizar una comparativa entre ambas columnas de destilación, con etapas de equilibrio y no equilibrio, Aspen Plus nos permite llevar a cabo estas comparativas de una manera rápida. A continuación se muestran los perfiles obtenidos en las columnas considerando la temperatura, fracción molar de TAME, Isoamilenos reactivos (2M1B Y 2M2B) y 2-Metil Butano (IC5).

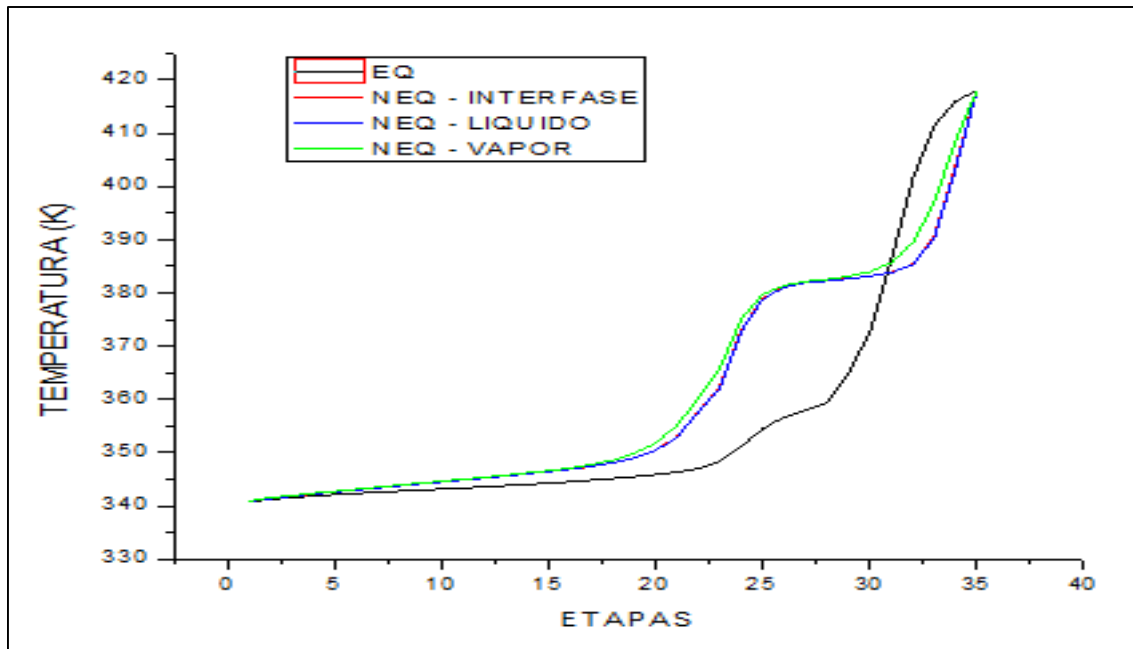


Figura 143.- Comparación de perfiles de temperatura - TAME destilación reactiva EQ & NEQ

La Figura 143 muestra que las diferencias entre la temperatura del condensador y rehervidor no son significativas, sin embargo, existe gran diferencia en la zona media de la columna correspondiente a la zona de reacción y de agotamiento en comparativa entre la columna reactiva con etapas de equilibrio y de no equilibrio.

Debido a la naturaleza de la reacción, el mantener bajas en la zona de reacción de la columna promueve la formación de TAME. La Figura 143 muestra que la temperatura es mayor para el modelo con etapas de no equilibrio, por eso que la pureza de TAME en la corriente de fondos sea un poco menor que en el modelo de equilibrio. La Figura 144 muestra el perfil de composición de TAME a lo largo de ambas columnas, donde se observa que la pureza de TAME es ligeramente menor en el modelo de no equilibrio.

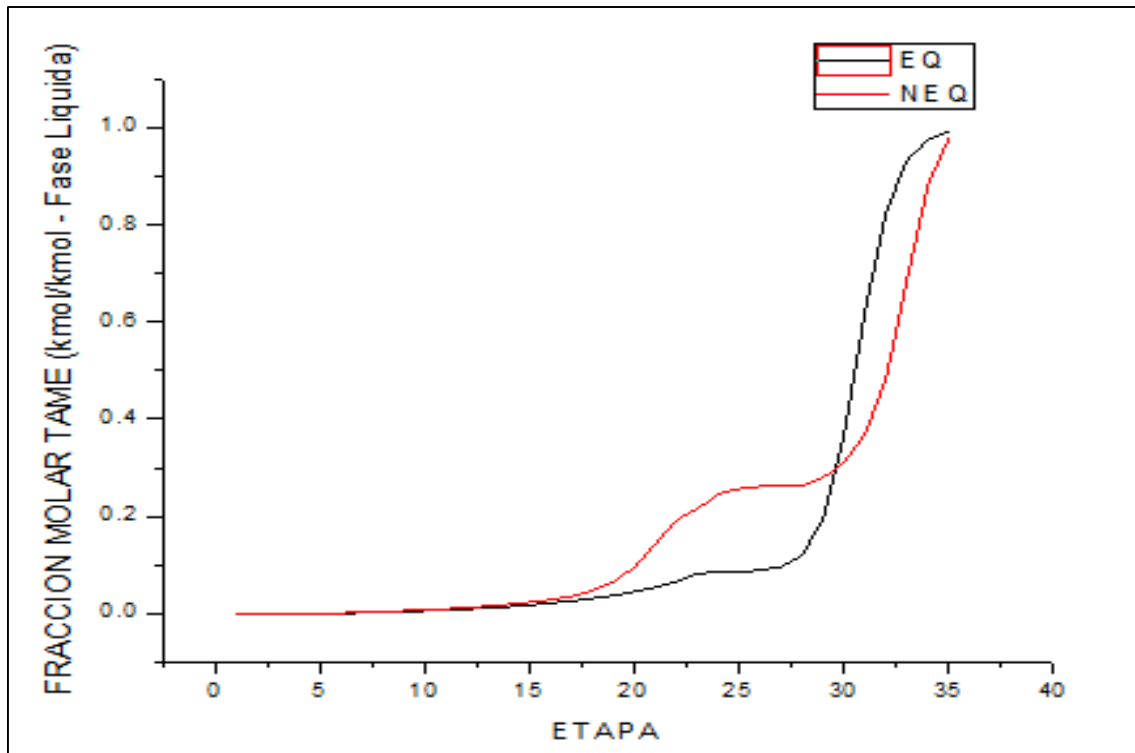


Figura 144.- Comparación de perfiles de composición de TAME - TAME destilación reactiva EQ & NEQ

Las siguientes figuras muestran los perfiles a lo largo de las columnas reactivas para los reactivos involucrados en la reacción de formación de TAME, 2M1B y 2M2B. Es posible observar que ambos perfiles son similares, pero con diferencias en magnitud para ambos casos, principalmente para el 2M2B. La composición de ambos reactivos disminuye conforme más cerca estén del fondo de la columna mostrando su valor más alto cerca de la zona de reacción.

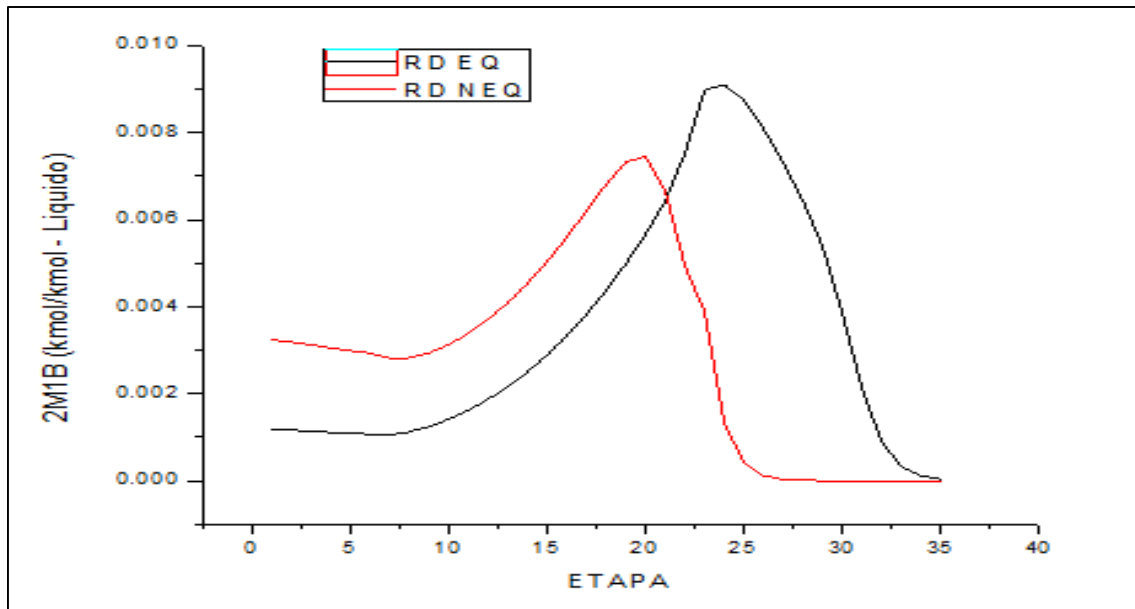


Figura 145.- Comparación de perfiles de composición de 2M1B - TAME destilación reactiva EQ & NEQ

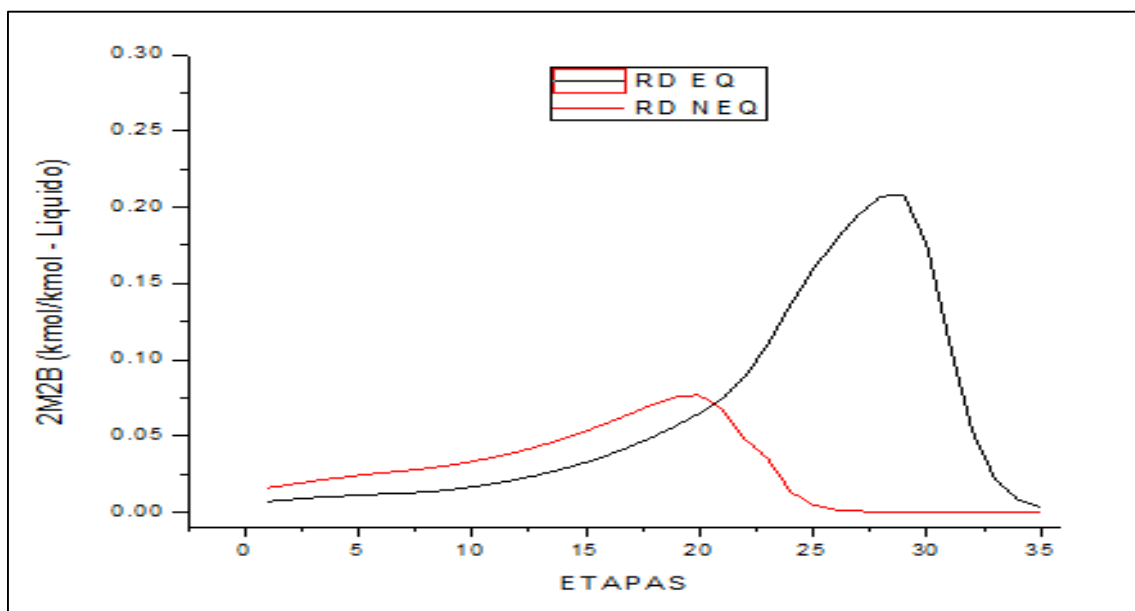


Figura 146.- Comparación de perfiles de composición de 2M2B - TAME destilación reactiva EQ & NEQ

### 3.2.4.- Análisis de costos

Aspen Process Economic Analyzer es el software empleado para llevar a cabo la estimación económica de los tres procesos de producción de TAME. La siguiente tabla muestra los resultados obtenidos en dólares americanos para las principales variables económicas que son factor de toma de decisiones.

	<b>CONVENCIONAL</b>	<b>D. REACTIVA</b>	<b>D. REACTIV NEQ</b>
<b>Costo de capital total del proyecto (\$)</b>	23,481,144.20	17,379,456.80	23,061,070.40
<b>Ventas Totales de producto (\$/año)</b>	91,855,137.71	356,932,749.65	339,500,096.44

*Tabla 34.- Comparación de costos de equipos y venta de producto - TAME*

A partir de la información obtenida en la Tabla 34, se observa en primera instancia que el proceso convencional de obtención de TAME y destilación reactiva con etapas de no equilibrio son similares en cuanto a costo de capital, sin embargo, en venta total de producto existe una enorme diferencia, por lo que a futuro el proceso de no equilibrio es mejor entre ambos. En cuanto a los procesos de destilación reactiva, puede decirse que entre ambos es mejor el proceso con etapas de equilibrio, sin embargo, debido a que las etapas de no equilibrio se asemejan más a los resultados experimentales, y a que los resultados entre ambos no son tan diferentes, la destilación reactiva con etapas de no equilibrio es una opción viable de obtención de TAME.

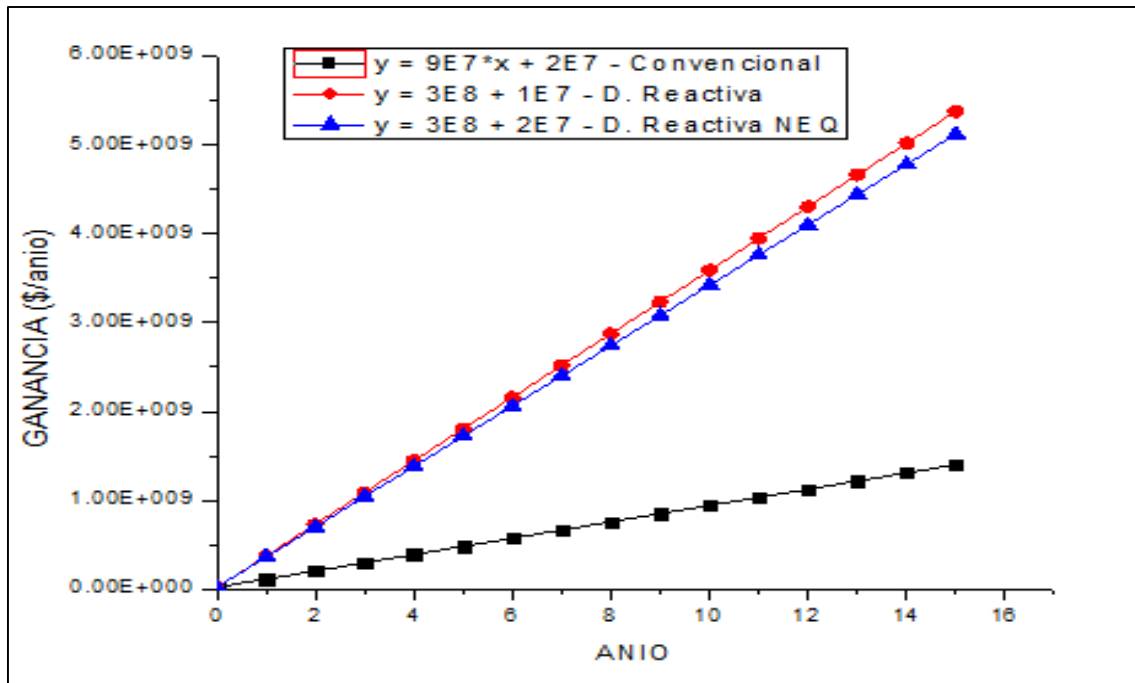


Figura 147.- Proyección a 15 años de vida útil de las plantas

La Figura 147 muestra una proyección de las ganancias estimadas a lo largo de los 15 años de vida útil de las plantas de proceso, es evidente que el proceso convencional es el menos redituable de los tres, y que por otra parte, los procesos de destilación reactiva son muy similares, siendo la destilación reactiva con etapas de equilibrio el que presenta mejores resultados.

### 3.2.5.- Respuestas dinámicas

En esta sección se presentan las respuestas dinámicas de los procesos en el ambiente de simulación de Aspen Dynamics bajo la especificación “Pressure driven”. Otro aspecto importante para todas las simulaciones en estado dinámico, es que los equipos deben estar correctamente dimensionados y las caídas de presión en equipos, válvulas y bombas deben estar especificadas de tal forma que el flujo de materia sea debido al efecto de la presión.

#### *3.2.5.1.- Simulación en estado dinámico – Proceso convencional*

En la sección 32.1.1.1, se observó que el proceso convencional de obtención de TAME es bastante sensible ante cambios en sus condiciones de operación, esto limita el intervalo en el que las perturbaciones pueden ser controladas, por lo que a diferencia de los dos procesos de destilación reactiva, la perturbación realizada en la alimentación es del  $\pm 10\%$  la cantidad alimentada en la corriente “FEED”.

El primer paso es observar si el sistema de control establecido es capaz de mantener la calidad de TAME sin la presencia de perturbación alguna, y sólo bajo las condiciones de operación establecidas en la simulación en estado estacionario. La Figura 148 muestra que el sistema de control logra mantener la pureza de TAME conforme el tiempo transcurre a pesar de tener una ligera caída al comienzo del tiempo de simulación.

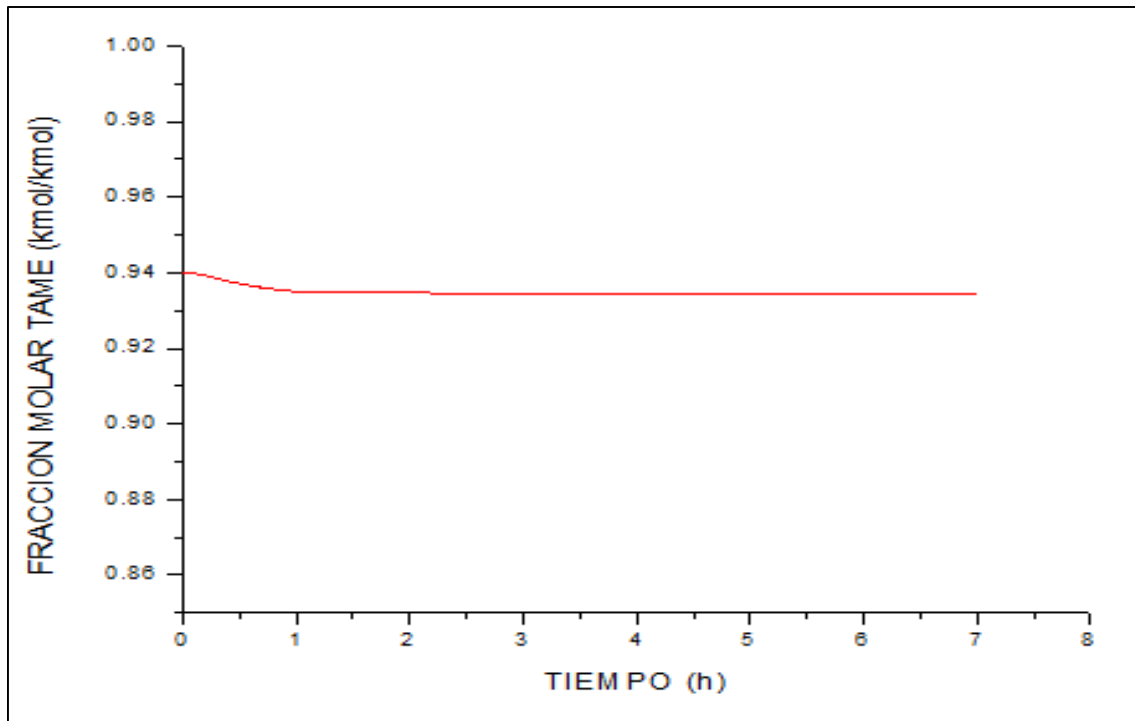


Figura 148.- Fracción molar de TAME con respecto al tiempo - TAME convencional dinámico

Ahora es posible someter al sistema de control a la perturbación generada en la corriente de alimentación. Algunas variables a monitorear son: flujo de la corriente de destilado, flujo de la corriente de fondo, temperatura del plato 14, carga térmica en el rehedidor, composición de TAME en la corriente de fondos y temperatura en ambos reactores.

### 3.2.5.1.1.- Pruebas de control y perturbaciones al proceso

La siguiente figura muestra la perturbación generada al proceso en la corriente de alimentación en  $\pm 10\%$  el valor del flujo a las 2.5 horas.

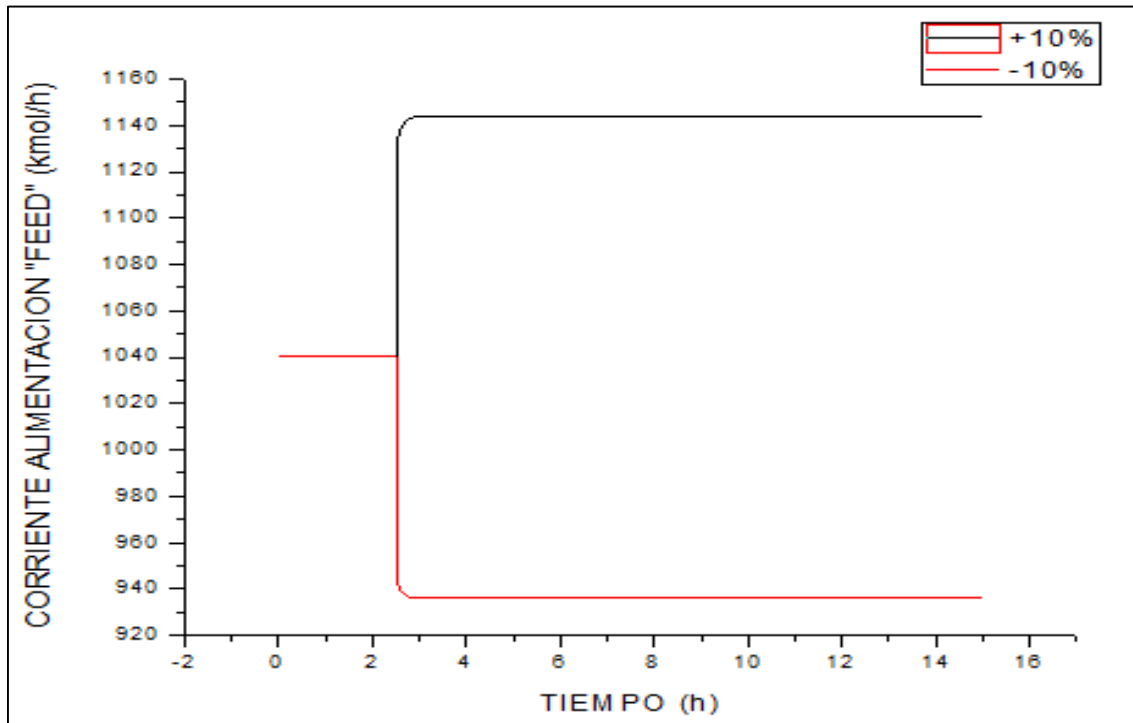


Figura 149.- Perturbación  $\pm 10\%$  en alimentación - TAME convencional

A continuación se muestran las respuestas obtenidas en las variables monitoreadas debidas a la perturbación. Las primeras variables monitoreadas son las corrientes de flujo de destilado y de fondo en la columna de destilación. La Figura 150 y 151 muestran que los flujos modifican su magnitud conforme se lleva a cabo la perturbación, mostrando cierta inestabilidad en la corriente de fondos cuando la perturbación disminuye la cantidad de flujo alimentado al proceso.

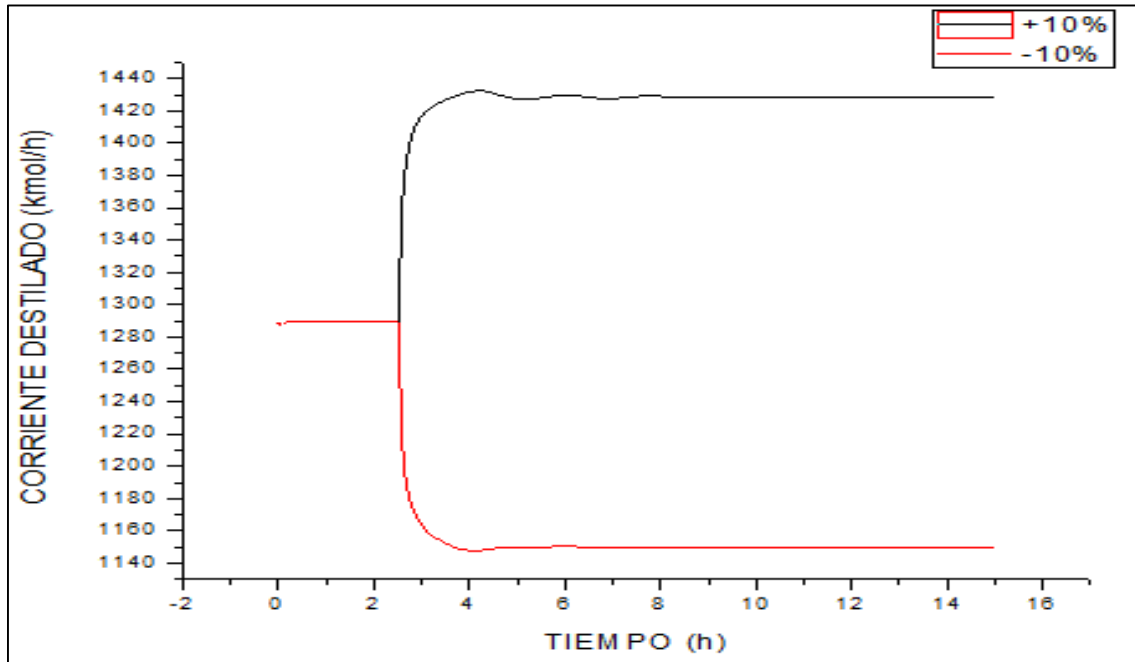


Figura 150.- Respuesta ante la perturbación en el destilado - TAME convencional

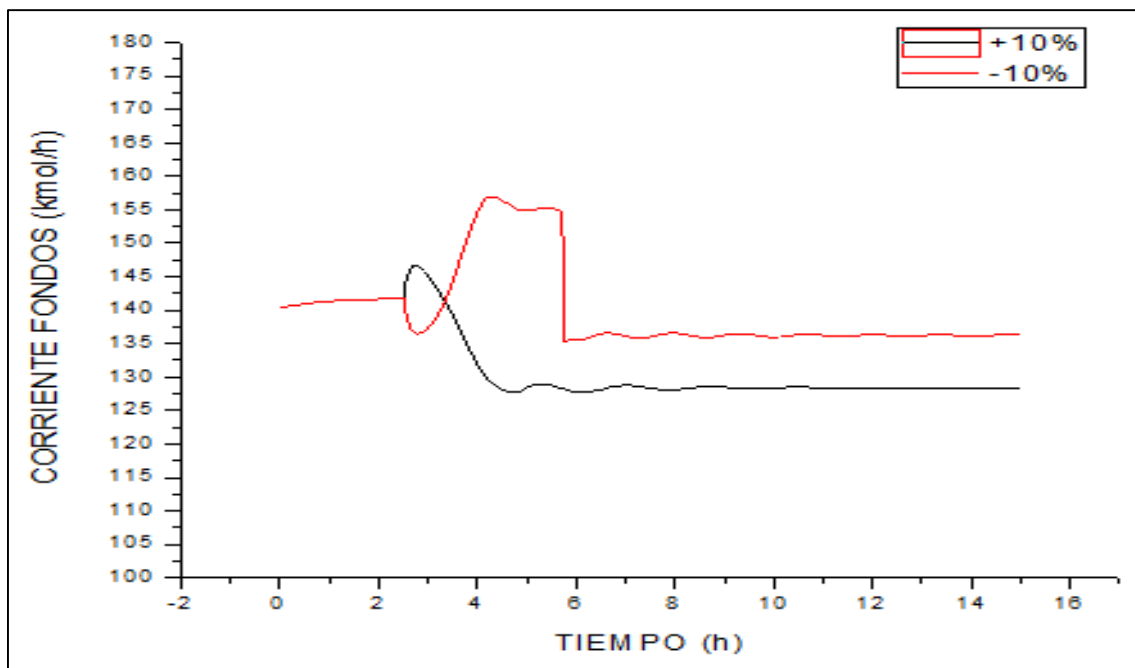


Figura 151.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - TAME convencional

La siguiente variable a monitorear es la temperatura en el plato 14 de la columna de destilación, la Figura 152 muestra esta respuesta, se puede observar que la temperatura no se aleja demasiado del valor que tiene en el estado estacionario, y que sólo se presenta una diferencia de  $\pm 3^{\circ}\text{K}$ . El sistema de control logra devolver el valor de SetPoint en la temperatura cuando la perturbación aumenta o disminuye la cantidad de flujo alimentado al proceso en un tiempo aproximado de 1.5 horas.

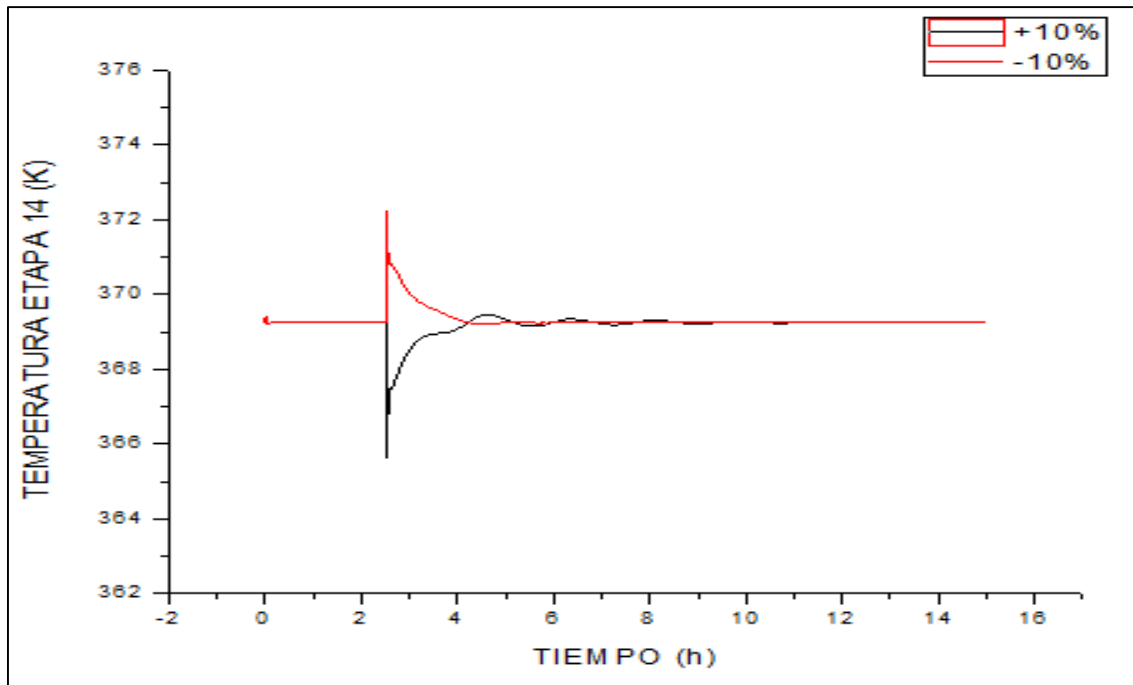


Figura 152.- Respuesta ante perturbación en la temperatura plato 14 - TAME convencional

Una variable directamente relacionada con la temperatura de la columna es la carga térmica alimentada al rehvador, la siguiente figura muestra la respuesta obtenida ante la perturbación en la alimentación.

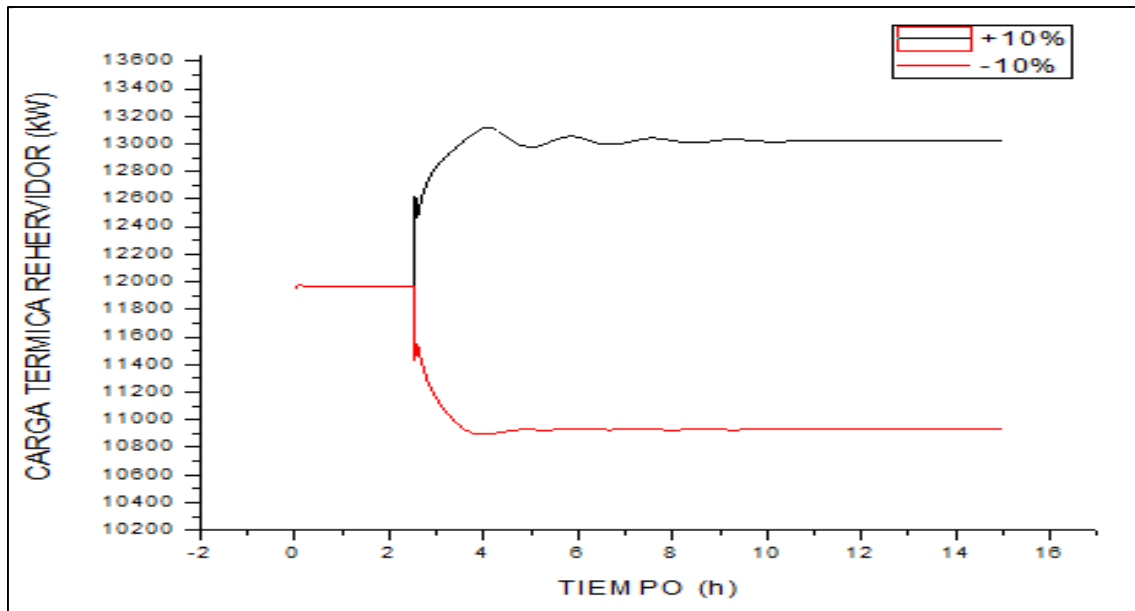


Figura 153.- Respuesta ante perturbación en rehervidor - TAME convencional

De nueva cuenta se observa que el sistema de control logra estabilizar la carga térmica en el rehervidor cuando la perturbación modifica el flujo alimentado al proceso.

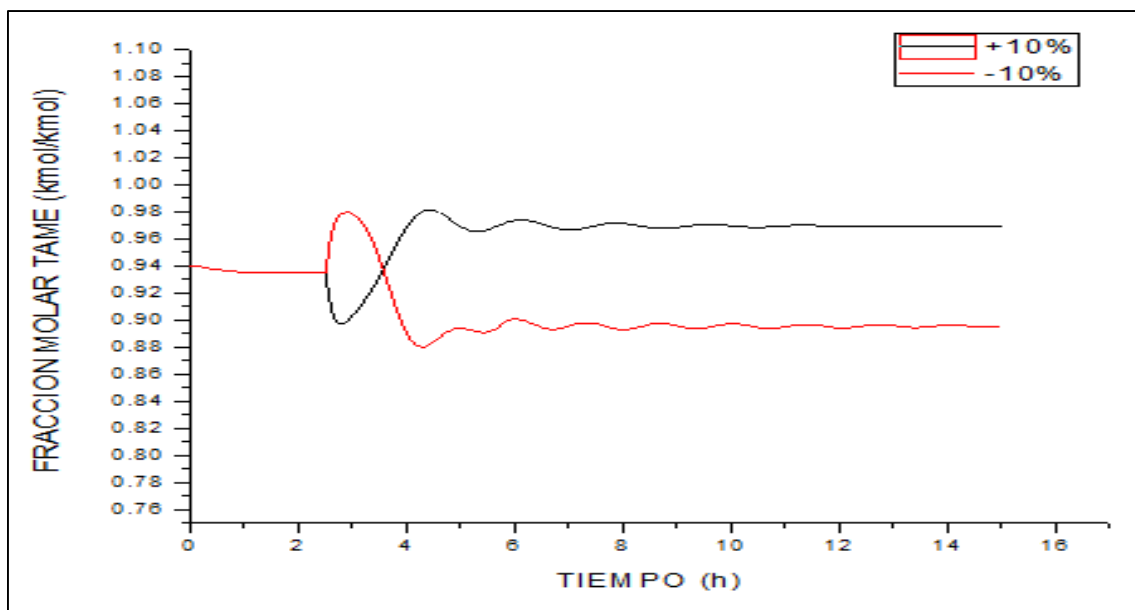


Figura 154.- Respuesta ante la perturbación en la composición de TAME - TAME convencional

Como es de esperarse, cuando la perturbación modifica el flujo alimentado al proceso, y a que el sistema de control estabiliza las respuestas en las variables monitoreadas, la composición de TAME en la corriente de fondos logra estabilizarse debidamente, y después de 2 horas alcanza un nuevo estado estacionario. La Figura 154 muestra esta respuesta.

Las últimas respuestas son las correspondientes a la temperatura de ambos reactores. La Figura 155 muestra la respuesta obtenida ante la perturbación en el primer reactor, donde, aparentemente existe una perturbación bastante pronunciada, sin embargo, se debe a la escala del eje ordenado. Posteriormente a las 2.5 horas cuando se realiza la perturbación en la alimentación, la temperatura dentro del reactor tiene una pequeña respuesta que es controlada correctamente por el lazo de control.

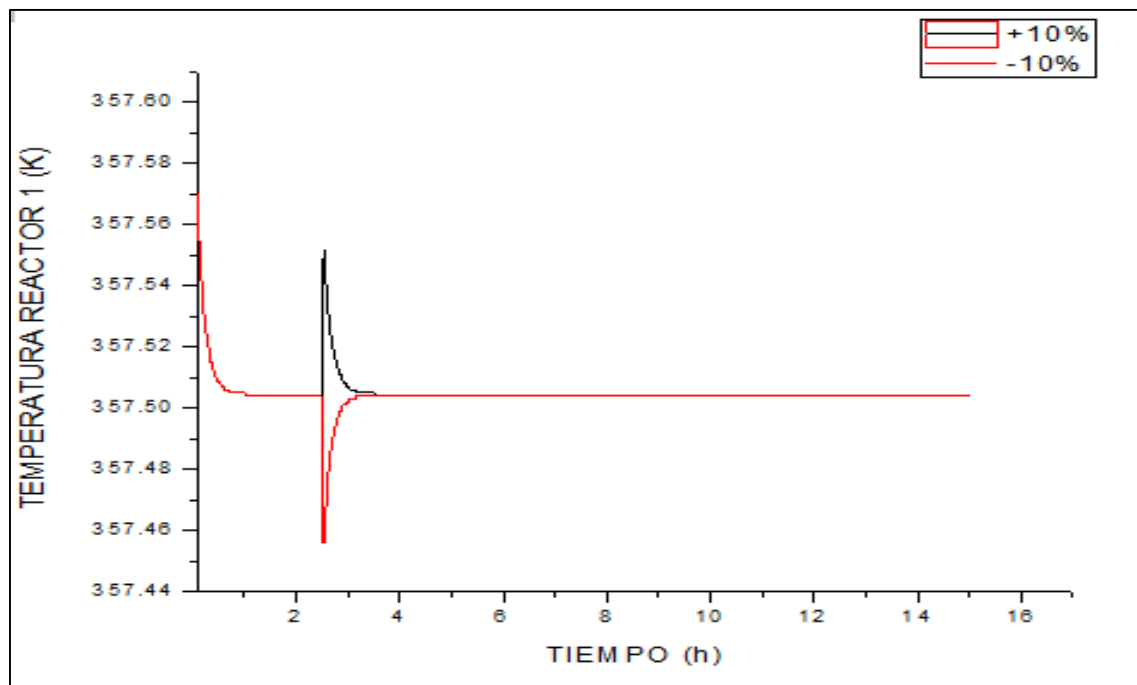


Figura 155.- Respuesta ante la perturbación en la temperatura del reactor 1- TAME convencional

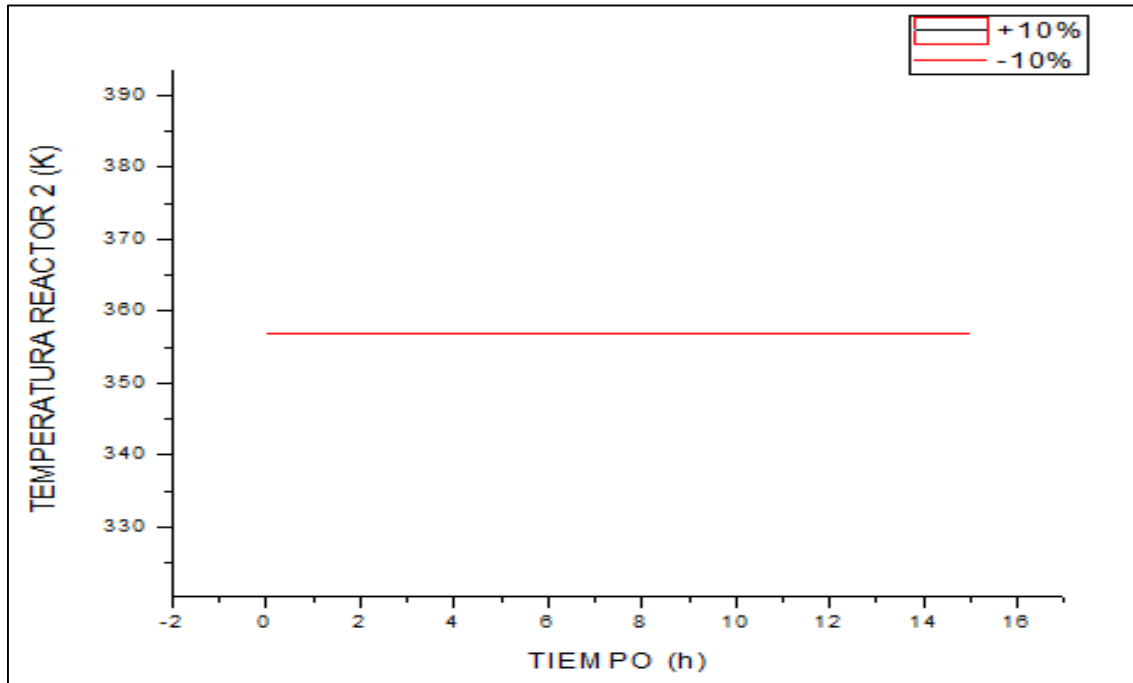


Figura 156.- Respuesta ante la perturbación en la temperatura del reactor 2- TAME convencional

La Figura 156 muestra que la perturbación en el proceso no presenta efecto alguno sobre la temperatura del reactor 2. Esto se debe a la existencia de un intercambiador de calor entre ambos reactores, lo cual disminuye la temperatura del efluente del reactor 1, estabilizando la temperatura del reactor 2.

En cada una de las figuras mostradas en esta sección se observa que cuando la perturbación incrementa la cantidad de flujo alimentado al proceso, el sistema de control logra devolver al proceso a un nuevo estado estacionario, sin embargo, la fracción molar de TAME disminuye hasta aproximadamente 90%. Este comportamiento es algo que se podía esperar después de que en los análisis de sensibilidad el proceso convencional mostrara comportamientos sensibles ante la variación de los parámetros.

A continuación, y de manera análoga a los procesos de obtención de MTBE, se presenta la respuesta del sistema de control ante una perturbación tipo servo, en el SetPoint del controlador de temperatura del plato número 14, y se observa la respuesta en la fracción molar de TAME.

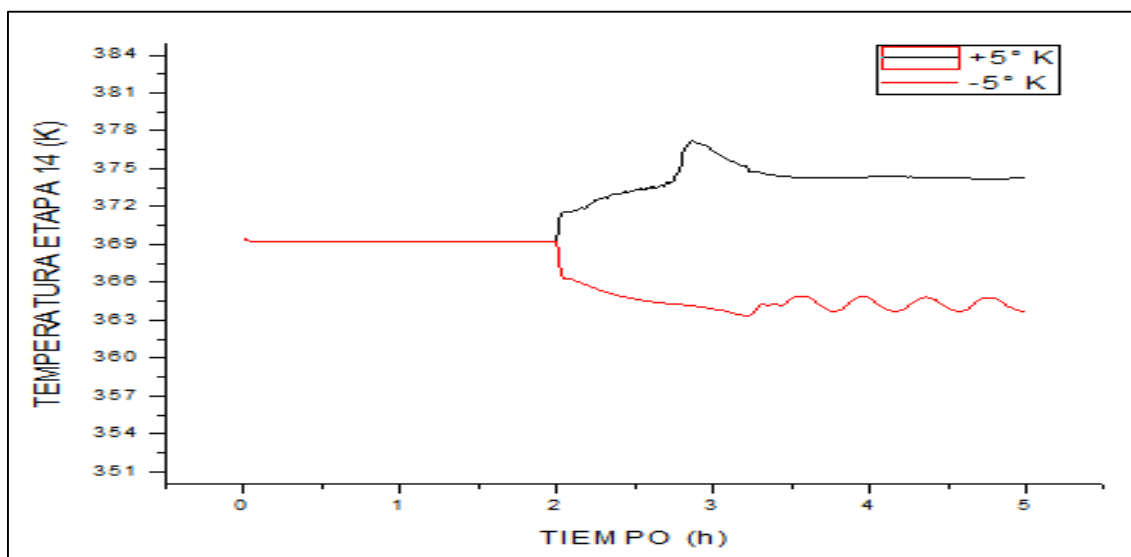


Figura 157.- Perturbación en  $\pm 5^\circ\text{K}$  SetPoint en plato 14 columna destilación – TAME convencional.

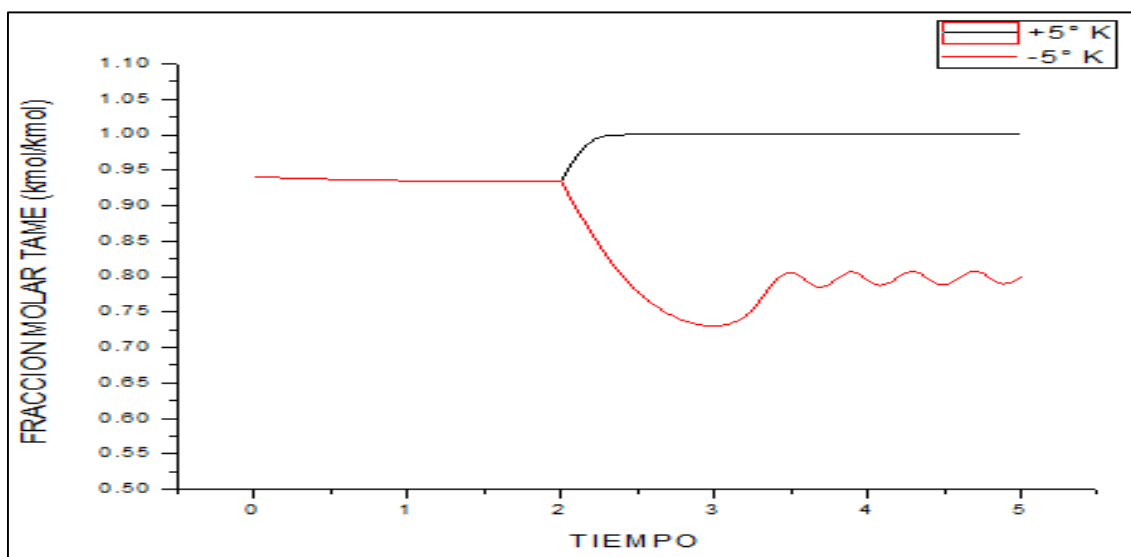


Figura 158.- Fracción molar de TAME ante perturbación servo –TAME convencional.

La Figura 158, muestra la respuesta ante la perturbación servo de la temperatura del plato 14, mostrando que el sistema de control no logra devolver un nuevo estado estacionario cuando la perturbación disminuye la temperatura en 5°K, y que incluso la fracción molar de TAME disminuye al 80%, aproximadamente.

### 3.2.5.2.- Simulación en estado dinámico – Destilación reactiva

A continuación en esta sección se muestran las respuestas dinámicas obtenidas en el proceso de obtención de TAME mediante el empleo de columnas de destilación reactiva con etapas de equilibrio. En primera instancia es necesario corroborar que el sistema de control logra mantener la pureza de TAME en la corriente de fondos en ausencia de perturbación en el proceso.

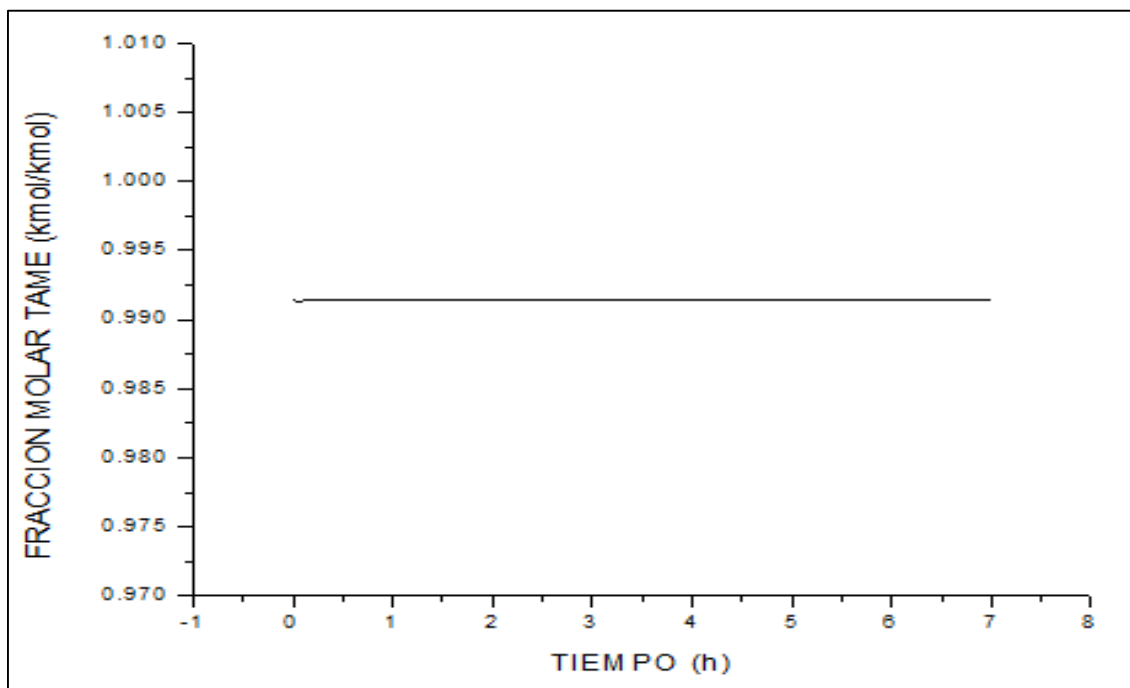


Figura 159.- Fracción molar de TAME con respecto al tiempo - TAME destilación reactiva dinámico

La Figura 159 muestra que el sistema de control logra mantener la calidad de TAME en la corriente de fondos de la columna reactiva sin la presencia de perturbaciones dentro del proceso, por lo que ahora es posible someter a la columna reactiva a la perturbación en la alimentación y así observar cómo reacciona el sistema de control al tratar de mantener la calidad del producto principal TAME.

### 3.2.5.2.1.- Pruebas de control y perturbaciones al proceso

La perturbación generada al proceso de destilación reactiva es en la corriente de alimentación "FEED", y es correspondiente al  $\pm 20\%$  del valor correspondiente en la simulación en estado estacionario.

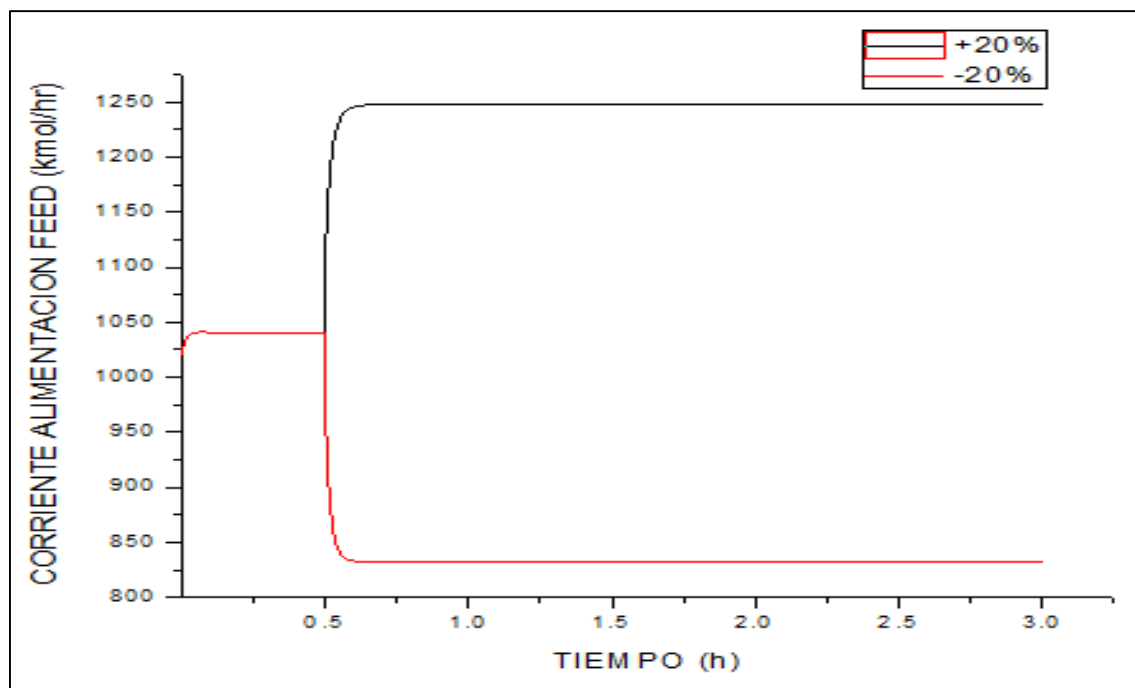


Figura 160.- Perturbación  $\pm 20\%$  corriente FEED - TAME destilación reactiva

La perturbación al proceso es generada a las 0.5 horas de tiempo de simulación. Las variables a observar son: corrientes de destilado y fondos de la columna de destilación reactiva, corriente de metanol alimentado al proceso, presión en el pre-reactor, temperatura del pre-reactor, carga térmica en condensador y rehervidor, relación de reflujo, temperatura en el plato 31 de la columna reactiva y fracción molar de TAME en la corriente de fondo de la columna.

La primera respuesta mostrada es la presentada en la corriente de destilado. Es posible observar que la corriente aumenta y disminuye según corresponda en la perturbación, debido a las diferentes cantidades de materia alimentadas al proceso. Un comportamiento similar se puede encontrar como respuesta en la corriente de fondos de la columna reactiva.

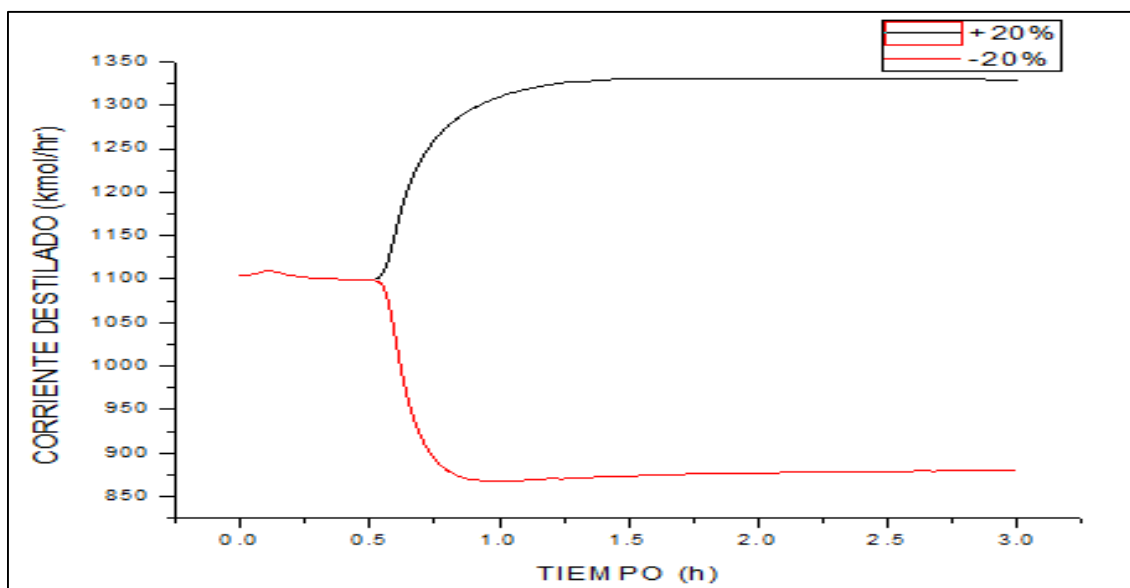


Figura 161.- Respuesta ante perturbación en la corriente de destilado - TAME destilación reactiva

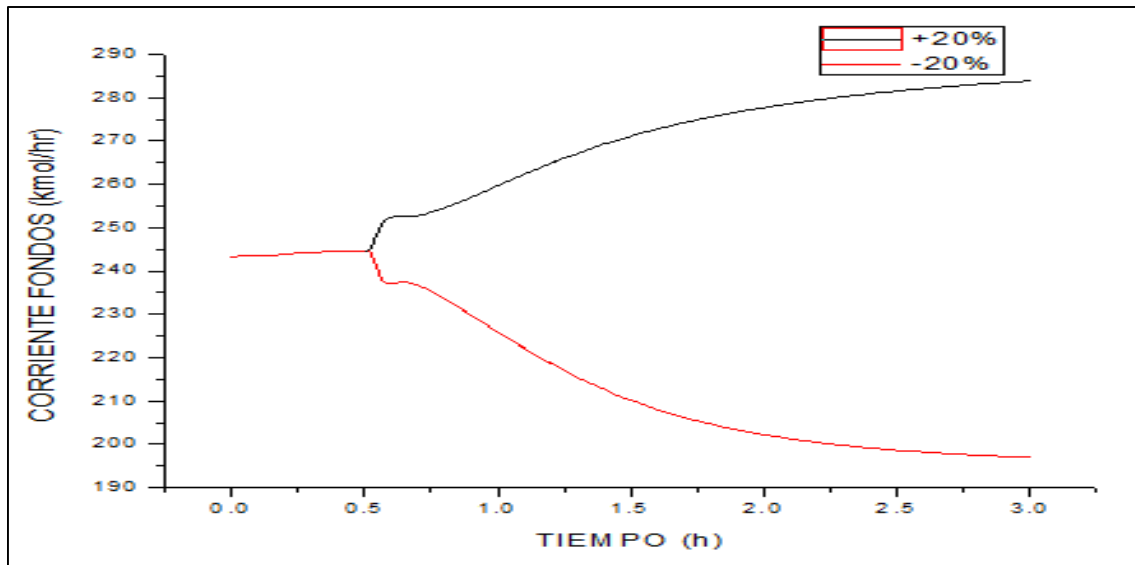


Figura 162.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - TAME destilación reactiva

La presencia de un lazo que relacione ambas corrientes en la proporción establecida en estado estacionario, permite que los cambios realizados por la perturbación en la corriente de alimentación “FEED” modifique la corriente “MEOH”. La Figura 163 muestra la respuesta en esta corriente.

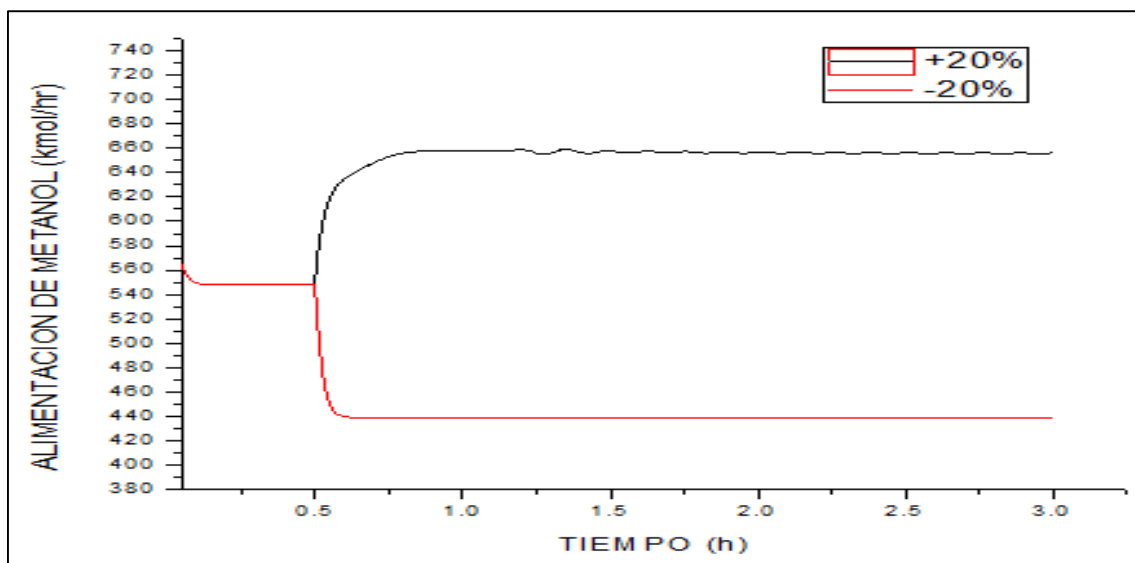


Figura 163.- Perturbación ±20% en alimentación de MeOH - TAME destilación reactiva

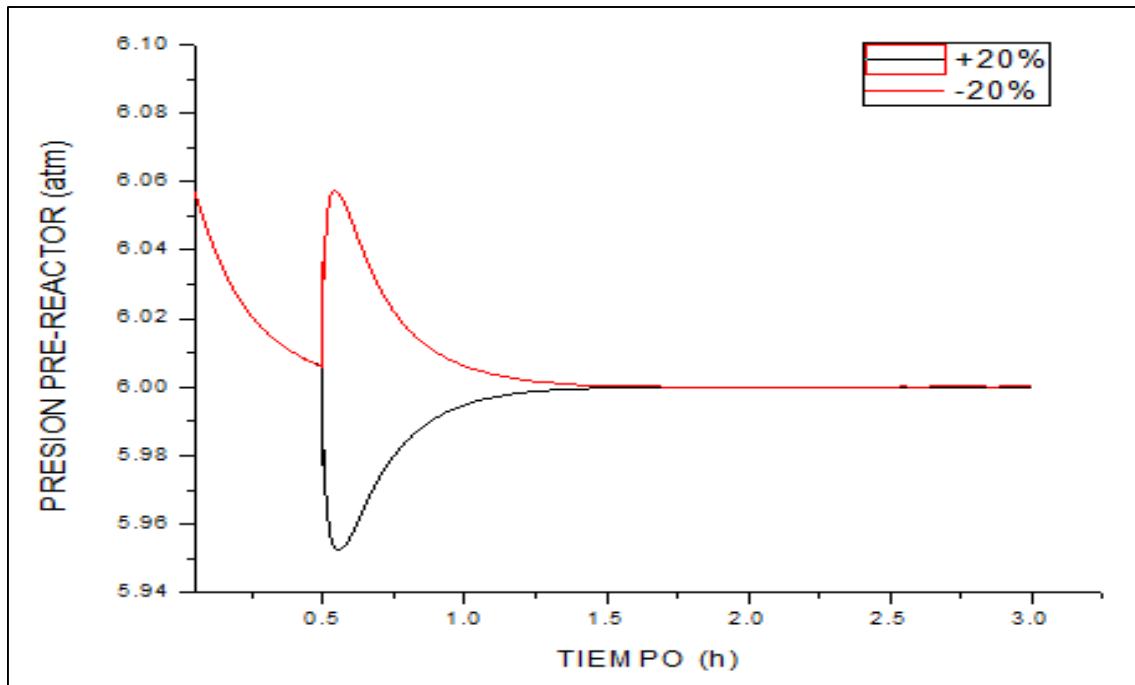


Figura 164.- Respuesta ante perturbación en la presión del Pre-Reactor - TAME destilación reactiva

La presión en el Pre-Reactor presenta una ligera variación en su comportamiento cuando la perturbación es realizada en el proceso, sin embargo, los lazos de control logran estabilizar la presión en un tiempo aproximado de 30 minutos. De manera similar, la temperatura dentro del Pre-Reactor presenta un ligero cambio en su SetPoint, siendo incluso menor a 1°K ante la perturbación, y estableciendo la temperatura en un tiempo aproximado de 30 minutos. La Figura 165 muestra la respuesta en esta variable.

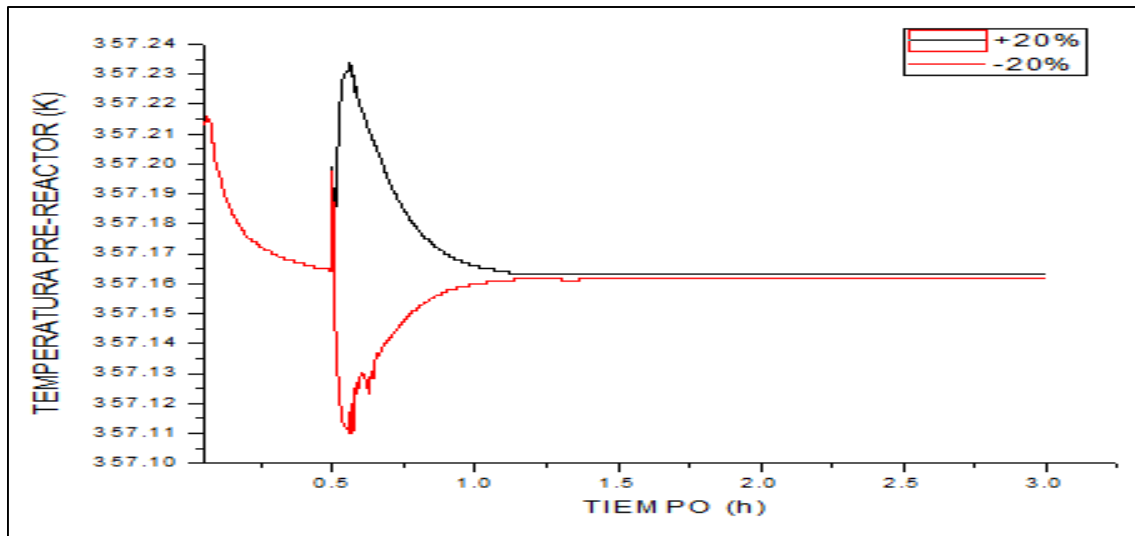


Figura 165.- Respuesta ante perturbación en la temperatura del Pre-Reacto - TAME destilación reactiva

A continuación se muestran las respuestas obtenidas en el condensador y rehervidor de la columna de destilación, se puede esperar que conforme la perturbación incremente o disminuya la cantidad de materia alimentada a la columna de destilación reactiva, las respuestas de los controladores en ambos tanques sea similar. Las Figuras 166 y 167 muestran dichas respuestas.

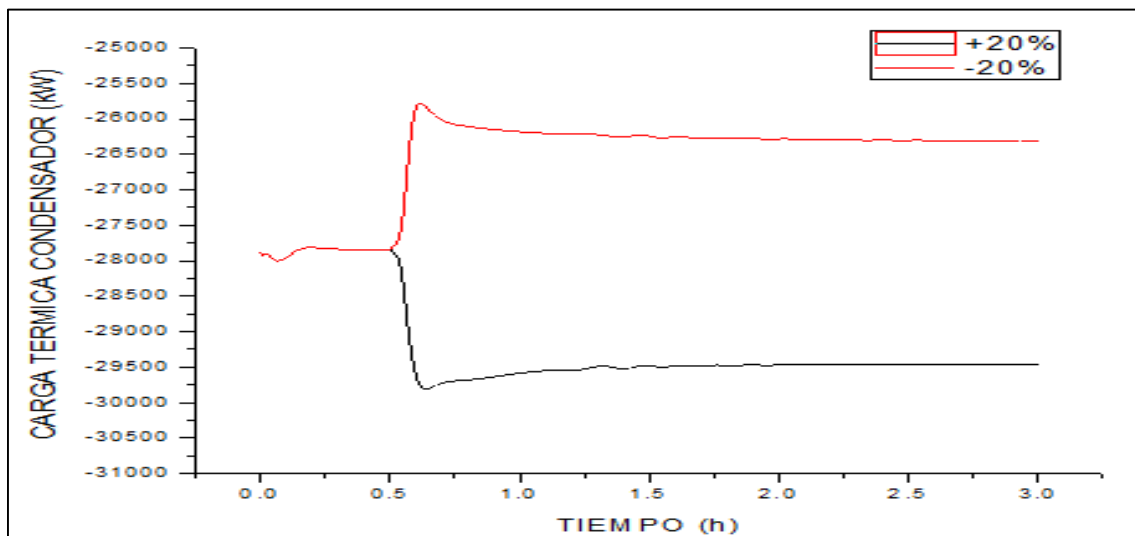


Figura 166.- Respuesta ante perturbación en Condensador - TAME destilación reactiva

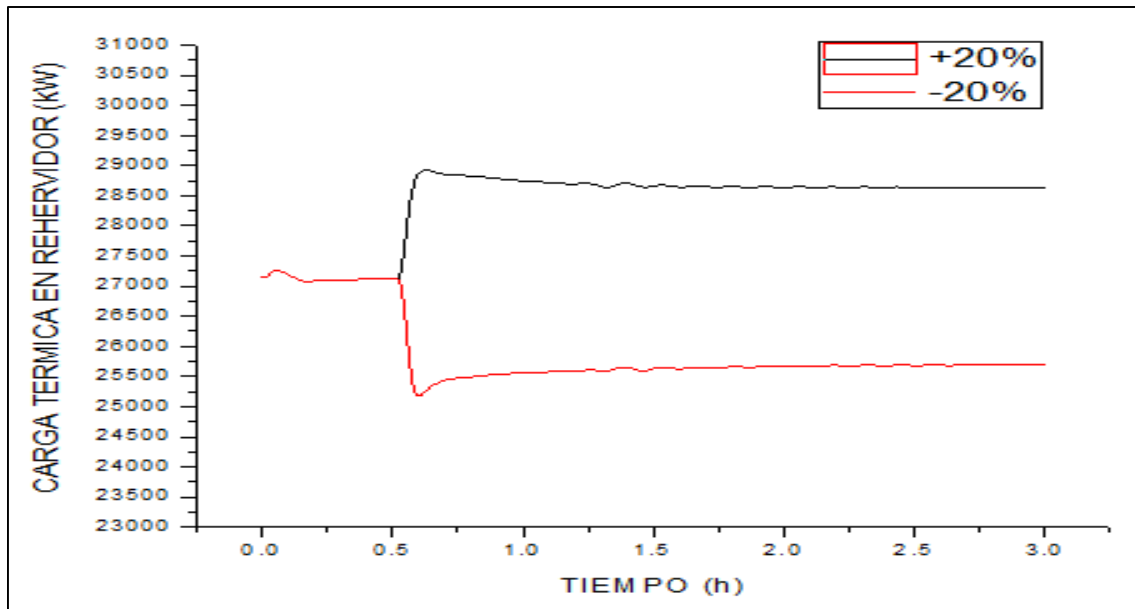


Figura 167.- Respuesta ante perturbación en rehervidor - TAME destilación reactiva

Como se puede observar en las respuestas del condensador y rehervidor, cuando la perturbación incrementa la cantidad de materia alimentada al proceso, la función del condensador es la retirar mayor cantidad de energía, y el rehervidor debe incrementar la cantidad de energía alimentada para llevar a cabo la separación.

Una variable directamente relacionada con la carga térmica alimentada en el rehervidor es la temperatura del plato 31 de la columna de destilación reactiva. La Figura 168 muestra que el lazo de control logra estabilizar la temperatura nuevamente al valor de SetPoint en un tiempo aproximado de 1 hora.

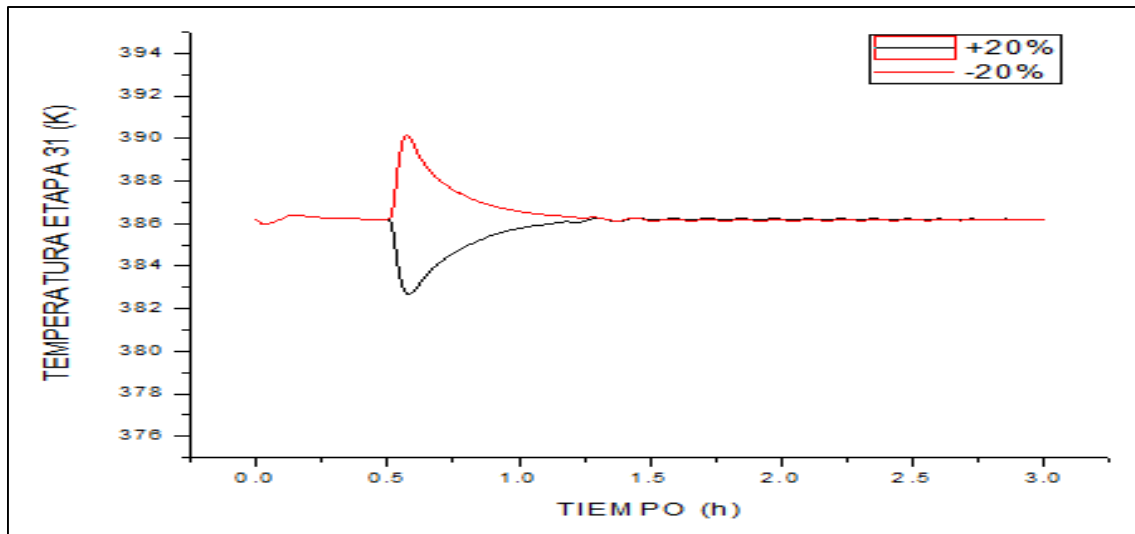


Figura 168.- Respuesta ante perturbación en la temperatura plato 31 - TAME destilación reactiva

La última respuesta mostrada en esta sección es la correspondiente a la fracción molar de TAME, siendo esta última la más importante porque muestra si el sistema de control está bien establecido y es capaz de manejar perturbaciones tan grandes como lo es el  $\pm 20\%$  el valor de la corriente de flujo establecido en la simulación en estado estacionario.

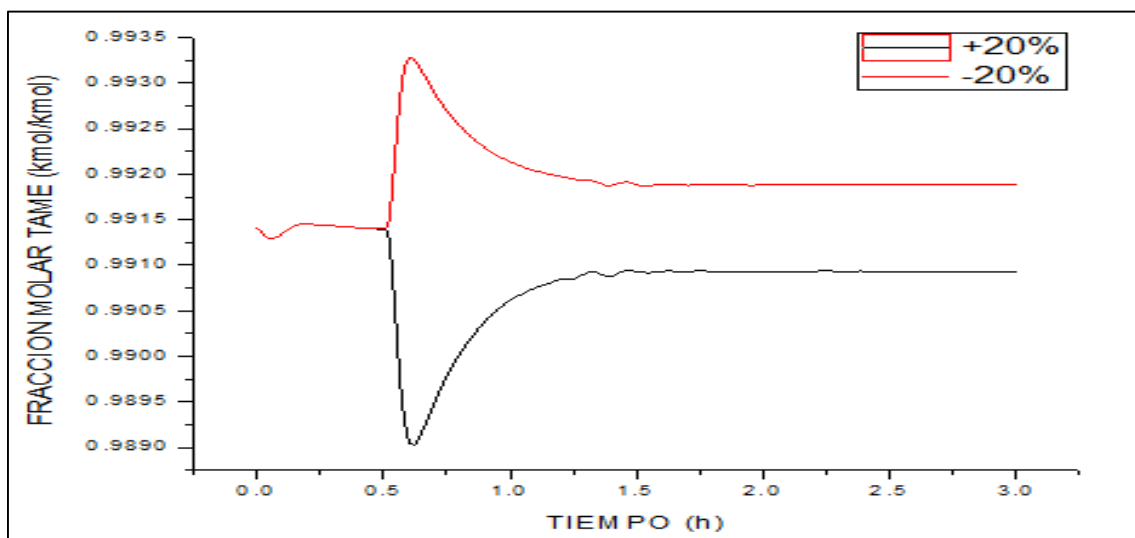


Figura 169.- Respuesta ante perturbación en composición de TAME - TAME destilación reactiva

La Figura 169, muestra que el sistema de control logra mantener satisfactoriamente la calidad del producto principal y que posterior a la perturbación, logra establecer un nuevo estado estacionario para la fracción molar de TAME en un tiempo aproximado 1.5 horas, sin que la perturbación disminuya la pureza de TAME por debajo del 98%.

A continuación se muestra la respuesta del sistema de control ante la perturbación tipo servo en el SetPoint del controlador de temperatura del plato número 31, y el efecto que esta perturbación presenta sobre la fracción molar de TAME en la corriente de fondos de la columna reactiva.

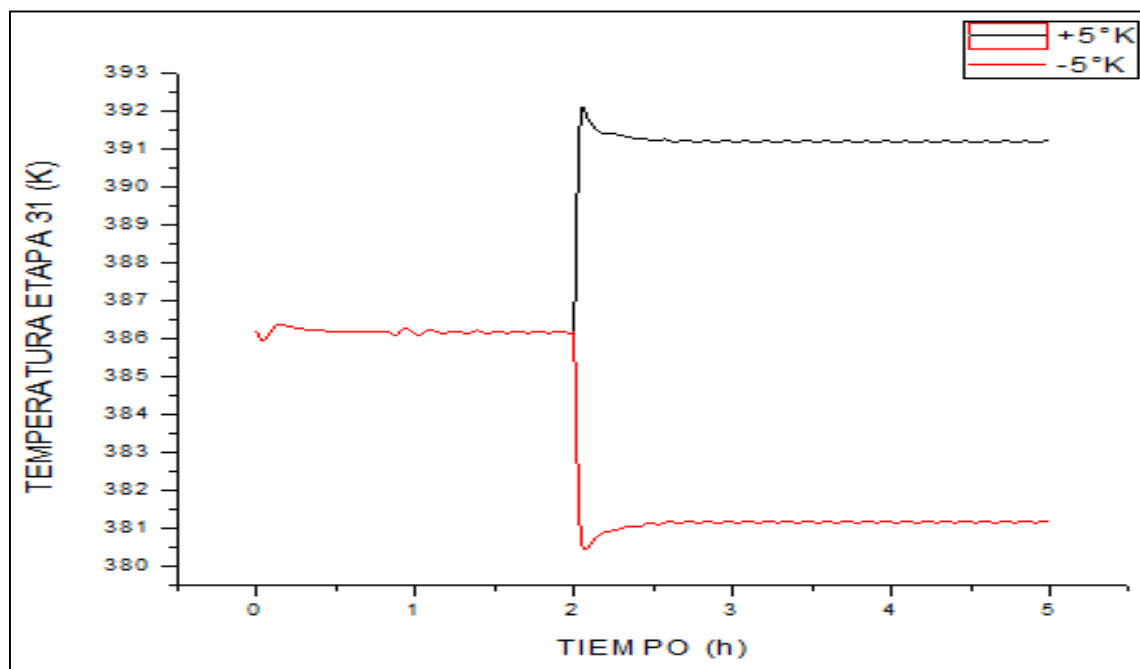


Figura 170.- Perturbación en  $\pm 5^{\circ}\text{K}$  SetPoint en plato 31 columna destilación – TAME destilación reactiva.

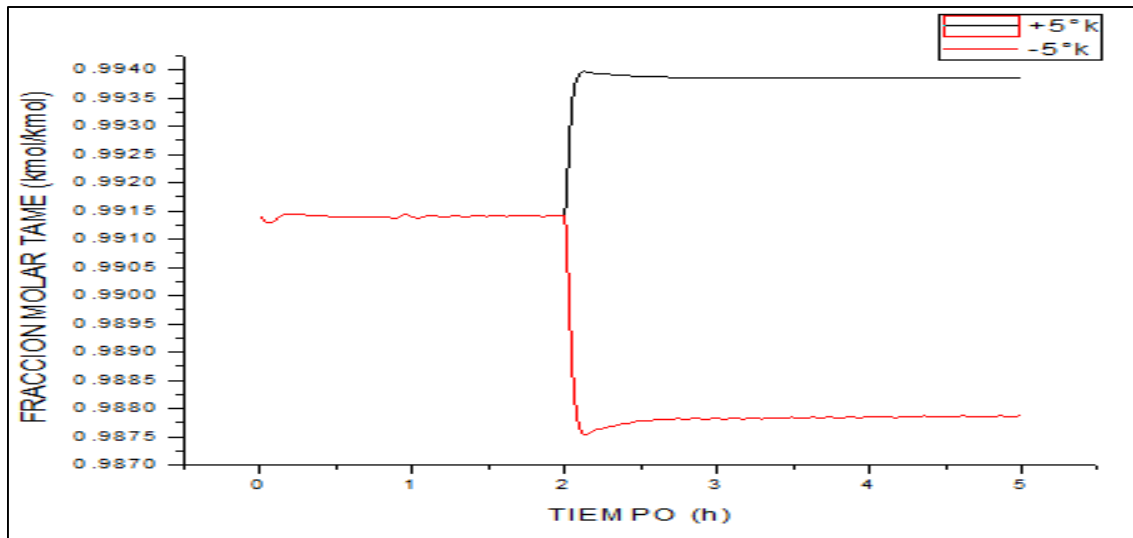


Figura 171.- Fracción molar de TAME ante perturbación servo –TAME destilación reactiva.

La Figura 171 muestra el efecto de la perturbación servo en la fracción molar de TAME, puede observarse que el sistema de control logra devolver al proceso a un nuevo estado estacionario, afectando la calidad de TAME hasta en un 0.6% para ambos sentidos, pero, sin salir del rango de especificación del 98%.

### 3.2.5.3.- Simulación en estado dinámico – Destilación reactiva Etapas de No equilibrio

En esta sección se presenta la simulación en estado dinámico de la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio, y las respuestas de los lazos de control ante perturbaciones generadas en la corriente de alimentación al proceso.

En primera instancia es necesario verificar que el sistema de control planteado es capaz de mantener la calidad de TAME en la corriente de fondos sin que exista perturbación alguna dentro del proceso para posteriormente someter a los lazos de control a la perturbación y observar su capacidad de mantener la fracción molar de TAME cerca del valor establecido en la simulación en estado estacionario.

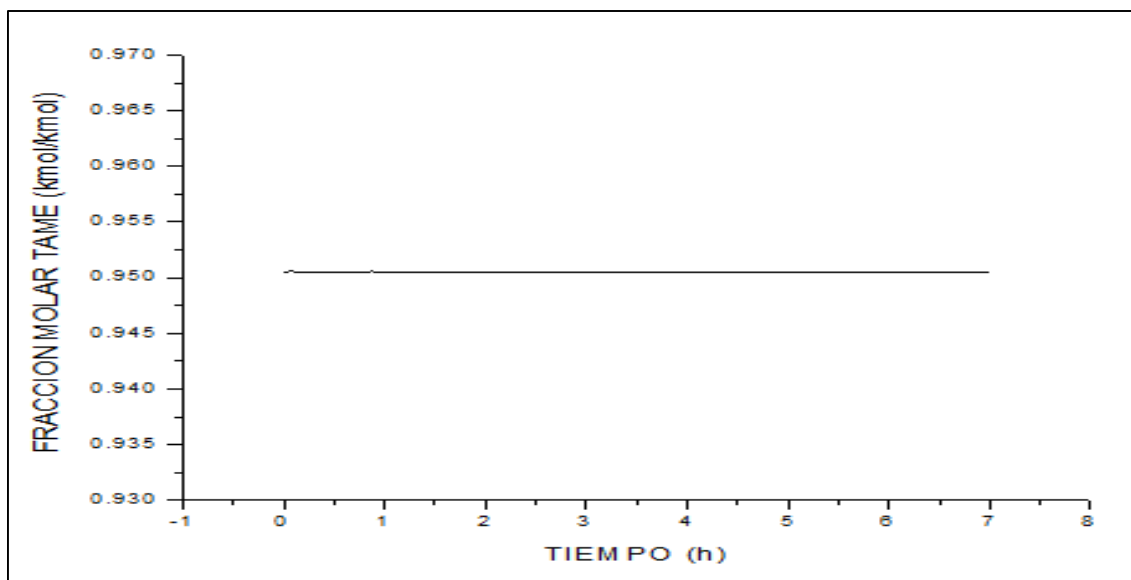


Figura 172.- Fracción molar de TAME con respecto al tiempo - TAME destilación reactiva NEQ dinámico

### 3.2.5.3.1.- Pruebas de control y perturbaciones al proceso

A continuación se presentan las respuestas dinámicas que se presentan en las variables monitoreadas de la columna reactiva ante la perturbación correspondiente a  $\pm 20\%$  el valor de la cantidad de flujo alimentada al proceso en la corriente "FEED". Las variables a monitorear son: corrientes de flujo en destilado y fondo de la columna, alimentación de metanol, presión y temperatura del pre-reactor, carga térmica en condensador y rehervidor, temperatura en el plato 37 y fracción molar de TAME en la corriente de fondos de la columna de destilación.

La siguiente figura muestra la perturbación realizada al proceso, llevándose a cabo a los 30 minutos de tiempo de simulación dinámica.

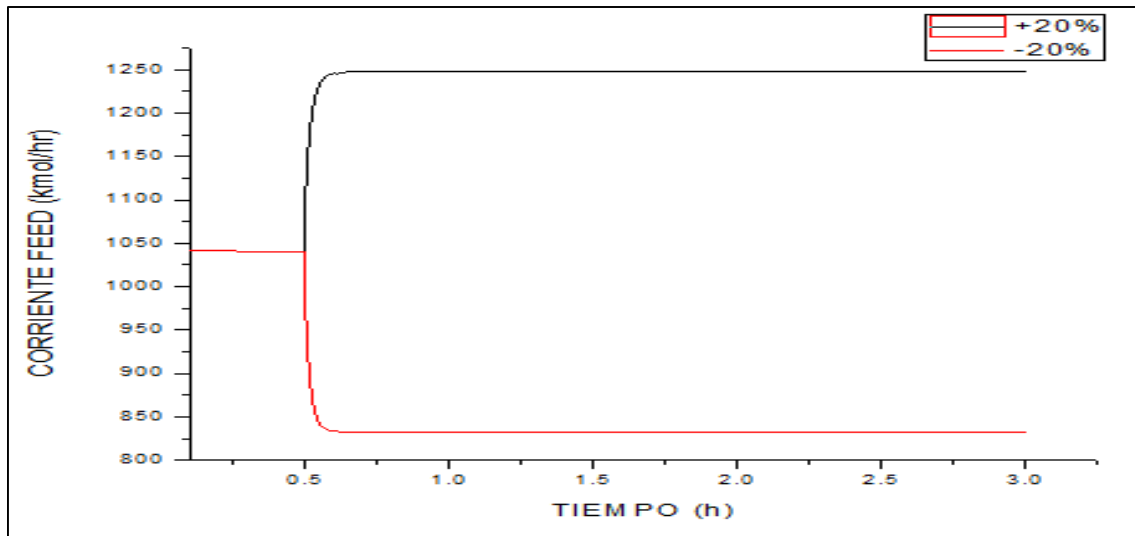


Figura 173.- Perturbación  $\pm 20\%$  corriente FEED - TAME destilación reactiva NEQ

Las primeras respuestas mostradas ante la perturbación en el proceso son las correspondientes a las corrientes de destilado y fondos de la columna reactiva. Las Figuras 174 y 175 muestran que los flujos molares en ambas corrientes modifican su magnitud conforme la perturbación incrementa o disminuye la cantidad de material alimentado a la columna.

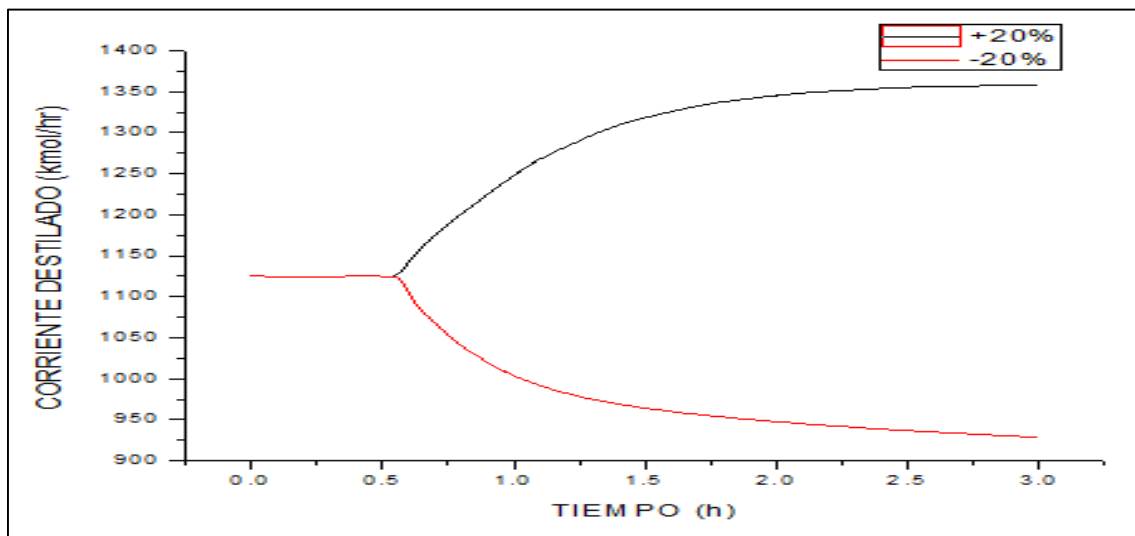


Figura 174.- Respuesta ante perturbación en la corriente destilado - TAME destilación reactiva NEQ

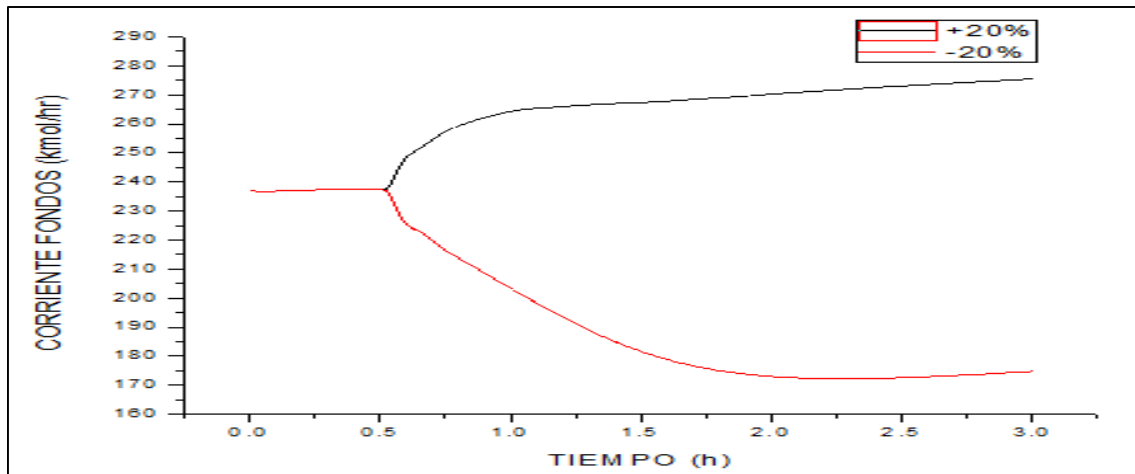


Figura 175.- Respuesta ante perturbación en la corriente de fondos - TAME destilación reactiva NEQ

El lazo de control en cascada que relaciona las corrientes de alimentación “FEED” y “MEOH” permite que la perturbación modifique la cantidad alimentada de metanol alcanzando la relación establecida en el estado estacionario. Sin embargo, la Figura 176 muestra que el controlador no establece rápida y efectivamente la señal de flujo de la corriente “MEOH” cuando la perturbación incrementa la cantidad de metanol, lo cual podría tener repercusiones en la fracción molar de TAME, aunque, las siguientes figuras muestran lo contrario.

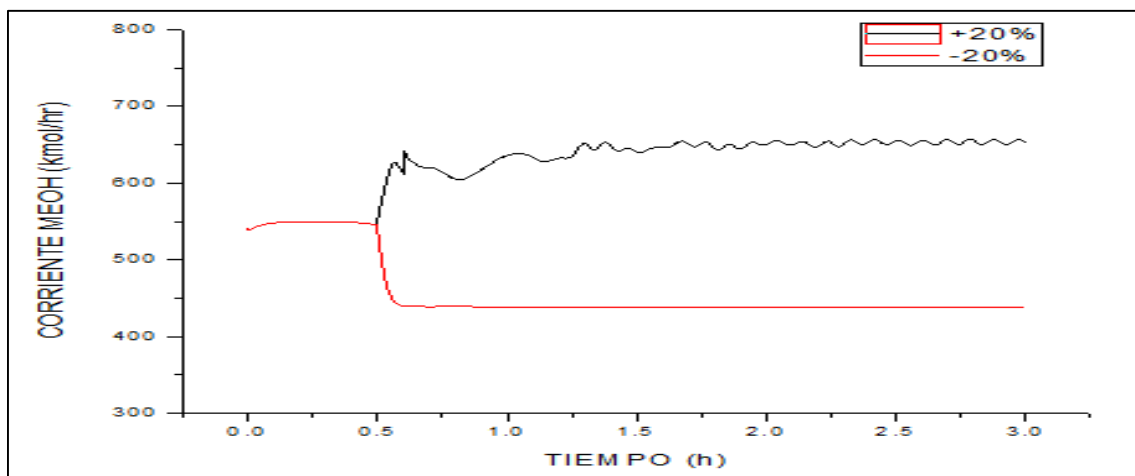


Figura 176.- Perturbación  $\pm 20\%$  en alimentación de MeOH - TAME destilación reactiva NEQ

La siguiente respuesta ante la perturbación es la correspondiente a la temperatura del pre-reactor. La Figura 177 muestra que la perturbación realizada provoca una ligera desviación del valor de SetPoint cercana a  $\pm 0.2^\circ\text{K}$ , algo relativamente no significativo. El sistema de control logra reestablecer correctamente la temperatura de SetPoint en un tiempo aproximado de 30 minutos.

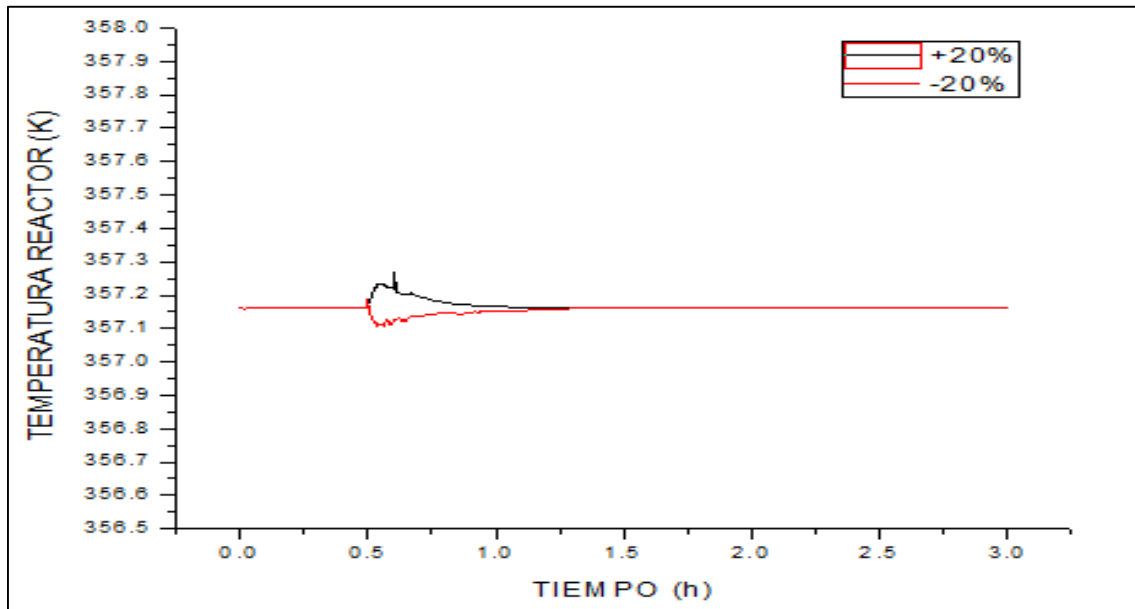


Figura 177.- Respuesta ante perturbación en la presión del Pre-Reactor - TAME destilación reactiva NEQ

En cuanto a la presión del pre-reactor, la Figura 178 muestra como la perturbación llevada a cabo a las 0.5 horas modifica la presión en un intervalo de  $\pm 0.05$  atm logrando establecer la presión especificada en el estado estacionario en un tiempo aproximado de 30 minutos, de manera similar que la temperatura.

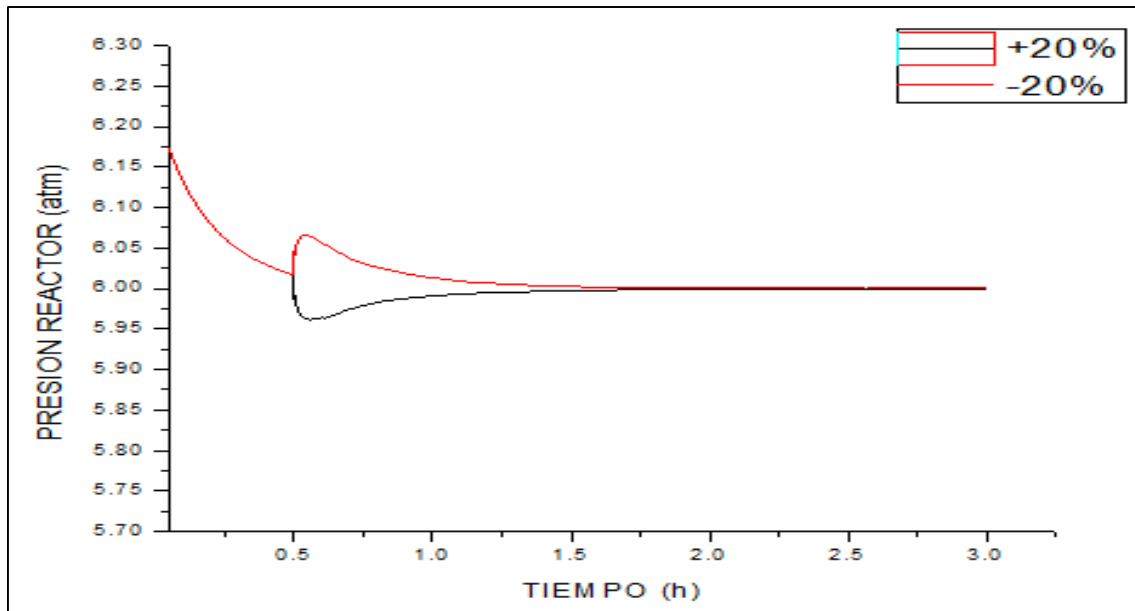


Figura 178.- Respuesta ante perturbación en la presión del Pre-Reactor - TAME destilación reactiva NEQ

A continuación se presentan las respuestas obtenidas ante la perturbación por el condensador y rehervidor de la columna de destilación reactiva, es de esperar que conforme la cantidad alimentada a la columna debida a la perturbación incremente o disminuya, la carga térmica retirada en el condensador y alimentada en el rehervidor presenten comportamientos similares. La Figura 179 muestra la respuesta obtenida en el condensador, donde se observa que los lazos de control logran estabilizar la carga térmica retirada en un tiempo aproximado de 2.5 horas, a diferencia de la columna reactiva con etapas de equilibrio, donde la carga térmica en el condensador y rehervidor se estabilizan en un tiempo de 30 minutos.

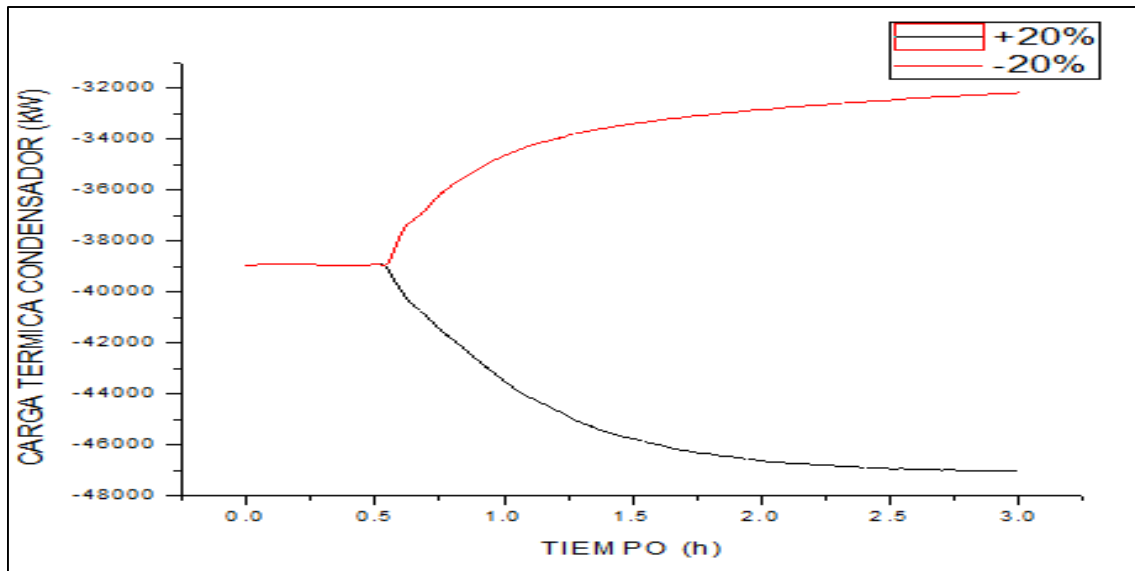


Figura 179.- Respuesta ante perturbación en condensador - TAME destilación reactiva NEQ

La carga térmica en el rehervidor logra estabilizarse gracias a los lazos de control, en un tiempo aproximado de 2 horas, algo muy similar a la respuesta obtenida en el condensador. La Figura 180 muestra esta respuesta.

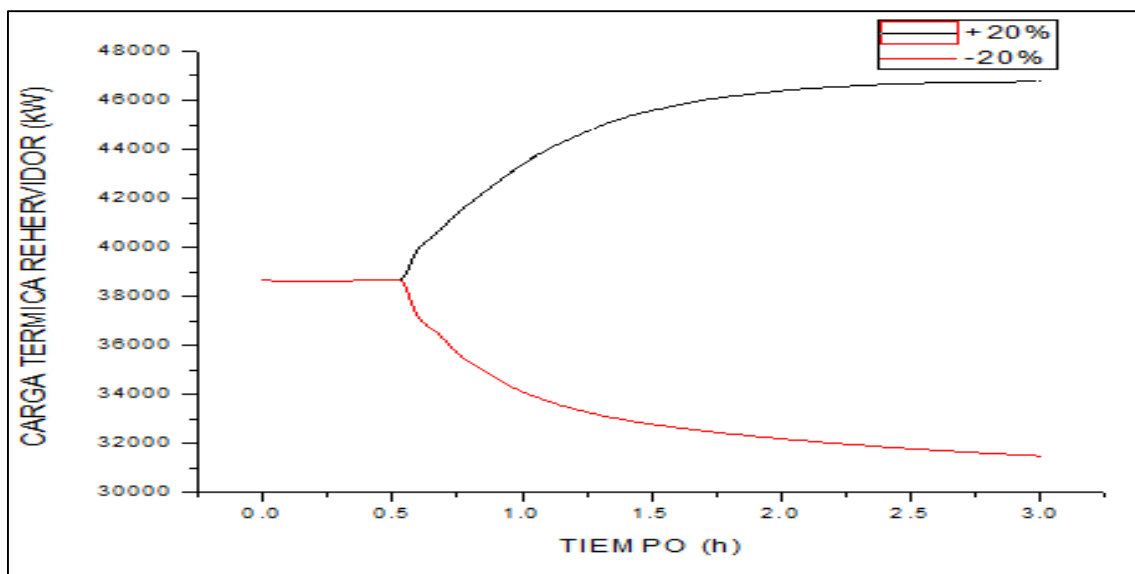


Figura 180.- Respuesta ante perturbación en rehervidor - TAME destilación reactiva NEQ

La temperatura es monitoreada en el plato número 37 de la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio. Esta variable está directamente relacionada con la respuesta en la carga térmica de rehervidor, ya que de no estar bien establecido el sistema de control provocará que la temperatura de la columna incremente o disminuya sin control, generando que el producto principal TAME comience a descomponerse, o en caso contrario, que no se lleve a cabo la reacción. La Figura 181 muestra que el sistema de control logra reestablecer la temperatura del plato 37 en un tiempo aproximado de 2 horas, mostrando que el lazo de control puede manejar perturbaciones grandes dentro de la columna de destilación.

Por último, la fracción molar de TAME en la corriente de fondos de la columna de destilación reactiva muestra que los lazos de control establecidos logran mantener la pureza de TAME en un valor superior al 93% en el caso más bajo, y del 96% en el superior.

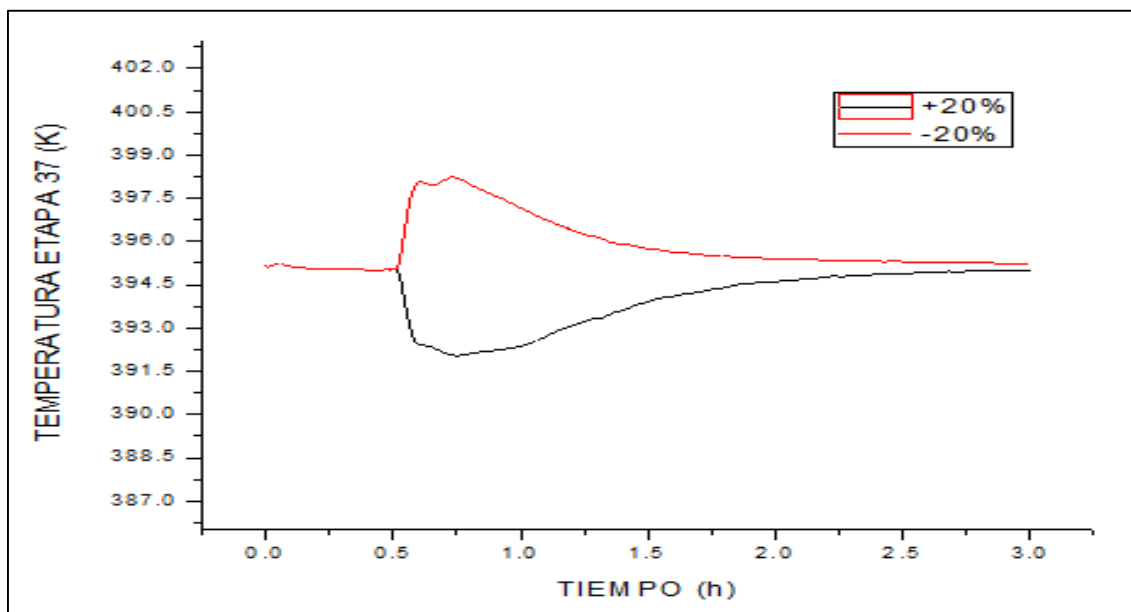


Figura 181.- Respuesta ante perturbación en la temperatura plato 37 - TAME destilación reactiva NEQ

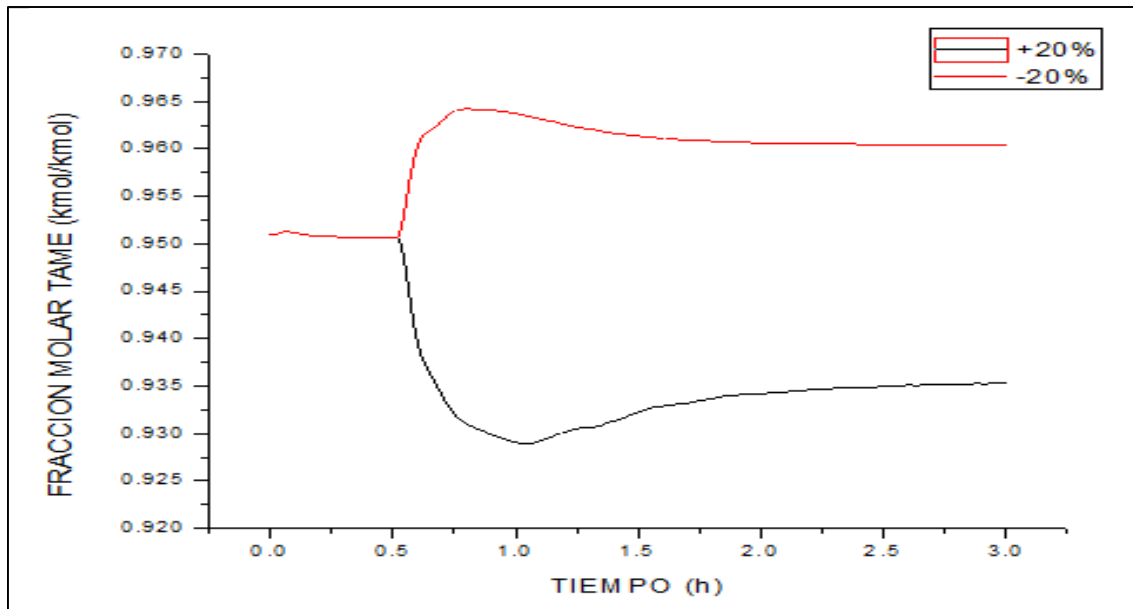


Figura 182.- Respuesta ante perturbación en composición de TAME - TAME destilación reactiva NEQ

Es posible afirmar que el sistema de control establecido en el proceso que emplea destilación reactiva con etapas de no equilibrio, logra controlar efectivamente las perturbaciones generadas en la alimentación de la columna, proceso que se asemeja de mejor manera a los resultados obtenidos experimentalmente por considerar que en las etapas se lleva a cabo también la transferencia de masa entre las fases fluidas.

A continuación se muestra la respuesta del sistema de control ante la perturbación tipo servo, en la temperatura del plato número 37 y el efecto que produce sobre la fracción molar de TAME en la corriente de fondo de la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio.

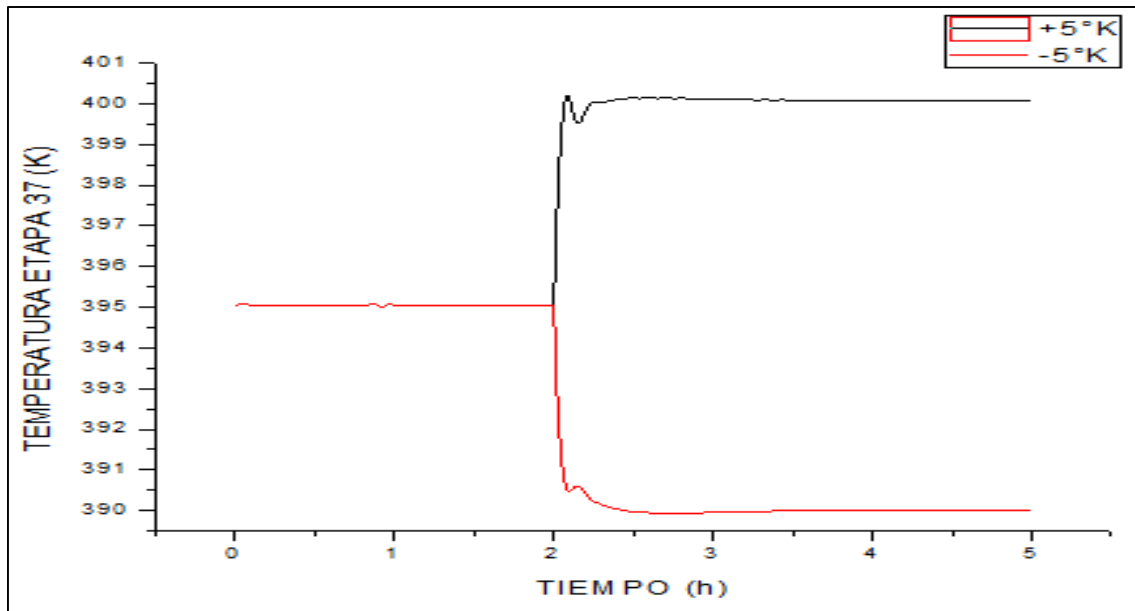


Figura 183.- Perturbación en  $\pm 5^{\circ}\text{K}$  SetPoint en plato 37 columna destilación – TAME destilación reactiva NEQ.

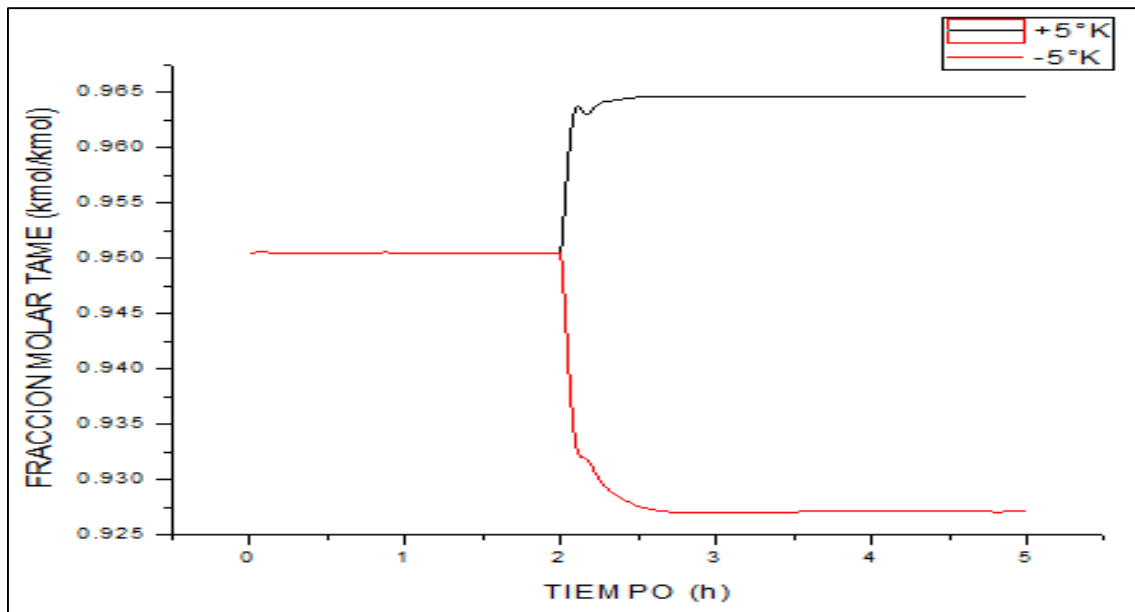


Figura 184.- Fracción molar de TAME ante perturbación servo – TAME destilación reactiva NEQ.

La Figura 184 muestra la respuesta ante la perturbación servo en la fracción molar de TAME, misma que produce una variación aproximada del 0.3%, alcanzando un nuevo estado estacionario gracias a la acción del sistema de control en un tiempo aproximado de una hora.

### 3.3. – Etilenglicol (EG)

#### 3.3.1.- Proceso convencional

A continuación se presentan los resultados obtenidos en la simulación en estado estacionario del proceso convencional para la producción de Etilenglicol, mismos que serán de utilidad para marcar las pautas de salida en cuanto a los controladores empleados en la simulación dinámica con Aspen Dynamics y la capacidad de los lazos de control para mantener la calidad del producto principal. Posteriormente se presentan los resultados obtenidos en cuanto a las modificaciones en los parámetros de diseño y el efecto que éstos tienen sobre la fracción molar de Etilenglicol.

##### *3.3.1.1.- Simulación en estado estacionario*

Los resultados obtenidos por Aspen Plus en estado estacionario del proceso convencional de producción de Etilenglicol son obtenidos en base a las condiciones de operación establecidas en la sección 2.3.1. Los primeros resultados mostrados son los correspondientes a los perfiles de temperatura y composición a lo largo de columna “DC3” (obtención de Etilenglicol), ya que en base a estas gráficas se puede decidir en qué platos de la columna de destilación serán establecidos los lazos de control correspondientes.

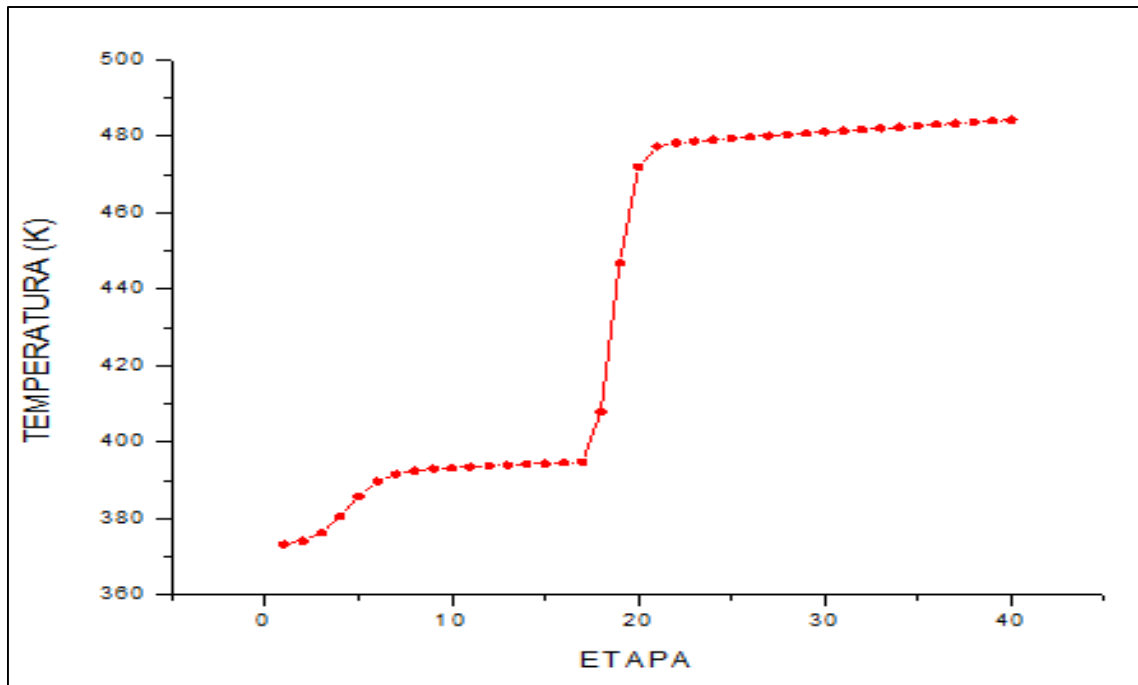


Figura 185.- Perfil de temperatura en columna de destilación - Etilenglicol convencional

La Figura 185 muestra el perfil de temperatura a lo largo de la columna de destilación “DC3”, donde se observa que por debajo de la etapa de alimentación se produce un aumento de temperatura bastante amplio debido a la diferencia de temperatura entre la corriente de alimentación y la temperatura del rehervidor.

El perfil de composiciones en la columna de destilación muestra que la separación entre agua y etilenglicol se realiza de manera eficiente, logrando alcanzar purezas de Etilenglicol mayores al 99%. Por otra parte, la cantidad de producto secundario Dietilenglicol, es prácticamente nula, por lo que esta columna de destilación se limita a la separación de una mezcla binaria.

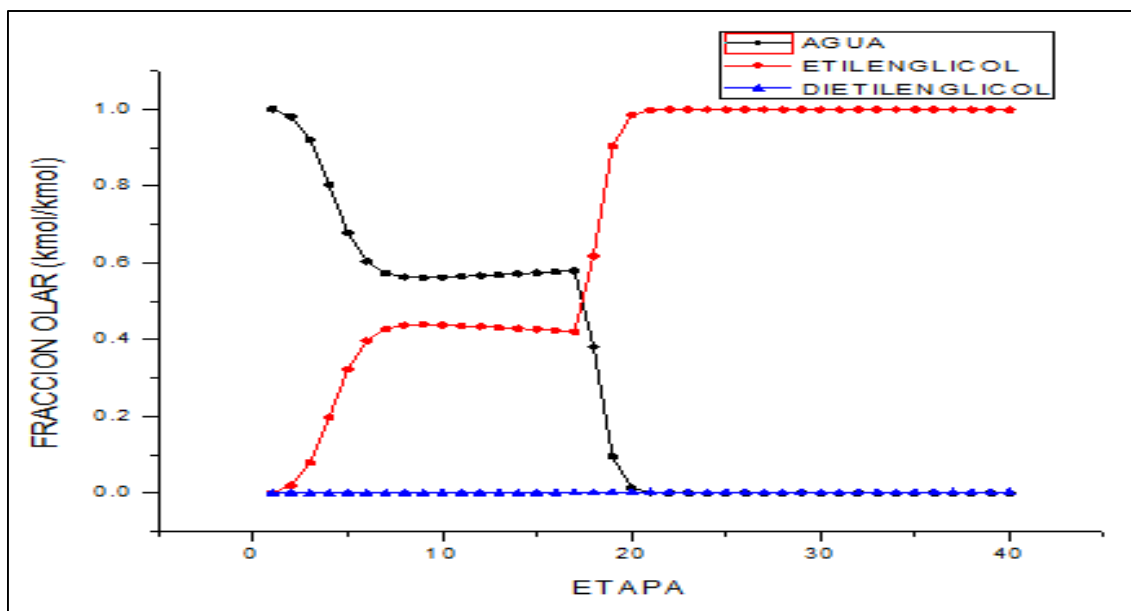


Figura 186.- Perfil de composiciones en columna de destilación - Etilenglicol convencional

La siguiente Tabla muestra los resultados obtenidos en el reactor y tres columnas de destilación empleadas en el proceso convencional de obtención de Etilenglicol.

Parámetro	Valor	Unidades
<b>REACTOR CSTR</b>		
Longitud	2.1677	m
Tiempo de residencia	1.104	h
<b>COLUMNA "DC"</b>		
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	464.2	K
Carga térmica	-211048.1	W
Presión	15	atm
Flujo	10.65	Kmol/h
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	523.8	K
Carga térmica	519977.5	W
Presión	15.5	atm
Diámetro de columna	0.24	m
<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	0.74	m

Diámetro	0.37	m
<b>Tanque de fondos</b>		
Largo	1.4	m
Diámetro	0.7	m
<b>COLUMNA “DC2”</b>		
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	388	K
Carga térmica	-321350.2	W
Presión	1	atm
Flujo	15.66	kmol/h
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	557.17	K
Carga térmica	261551	W
Presión	2.5	atm
Diámetro de columna	0.34	m
<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	0.88	m
Diámetro	0.44	m
<b>Tanque de fondos</b>		
Largo	1.45	m
Diámetro	0.725	m
<b>COLUMNA “DC3”</b>		
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	373.17	K
Carga térmica	-114887.17	W
Presión	1	atm
Flujo	9.4	kmol/h
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	484.36	K
Carga térmica	143998.74	W
Presión	1.5	atm
Diámetro de columna	0.34	m
<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	0.552	m
Diámetro	0.276	m
<b>Tanque de fondos</b>		
Largo	1	m
Diámetro	0.5	m

Tabla 35.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación – Convencional - Etilenglicol

### 3.3.1.1.1.- Efecto de los parámetros de diseño

El proceso convencional de obtención de Etilenglicol hace empleo de un reactor CSTR y tres columnas de destilación, por lo que es un proceso complejo y es importante para la toma de decisiones el observar su comportamiento ante diferentes escenarios de condiciones de operación. Aspen Plus nos otorga esa facilidad permitiendo llevar a cabo los análisis de sensibilidad necesarios con la finalidad de obtener la mayor cantidad de información posible.

En esta sección observamos el comportamiento del reactor CSTR ante distintas condiciones de operación de temperatura y presión, además, en la columna de destilación “DC3”, responsable de realizar la separación de agua y etilenglicol, es sometida a cambios en la relación de reflujo, flujo de la corriente de destilado, número de etapas de rectificación y de agotamiento.

En primera instancia se observa el comportamiento del reactor CSTR a distintas condiciones de operación de temperatura, ya que es una variable directamente relacionada con la producción de Etilenglicol debido a las energías de activación son idénticas en ambas reacciones, por lo que es posible esperar que el modificar la temperatura del reactor para promover la formación de Etilenglicol, no sea muy efectivo.

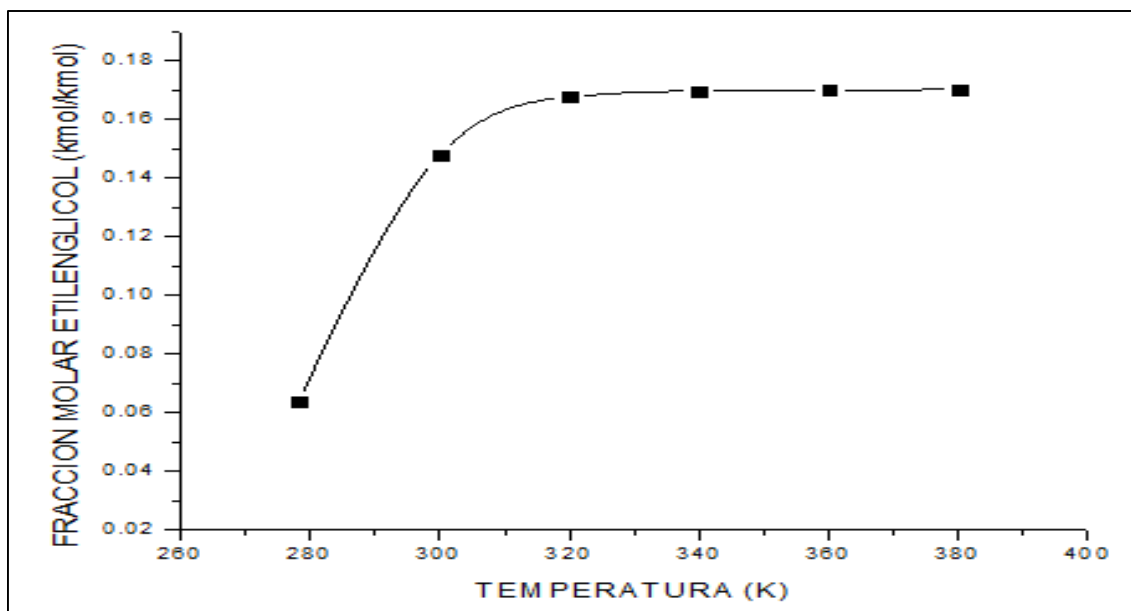


Figura 187.- Temperatura de reactor - Producción (Fracción molar) de Etilenglicol

La Figura 187 muestra que la producción de Etilenglicol (Fracción molar) en función de la temperatura, donde se observa que la temperatura tienen un rango de acción para promover la formación de producto principal, y que una vez alcanzados los 320°K aproximadamente, el aumento de temperatura no presenta efecto alguno en promover la formación de etilenglicol.

Otro parámetro de operación del reactor importante es la presión, sin embargo, debido a la reacción, la única variable que afecta directamente la formación de etilenglicol es la concentración de Óxido de Etileno, por lo que presión no presenta efecto alguno sobre la producción del producto principal.

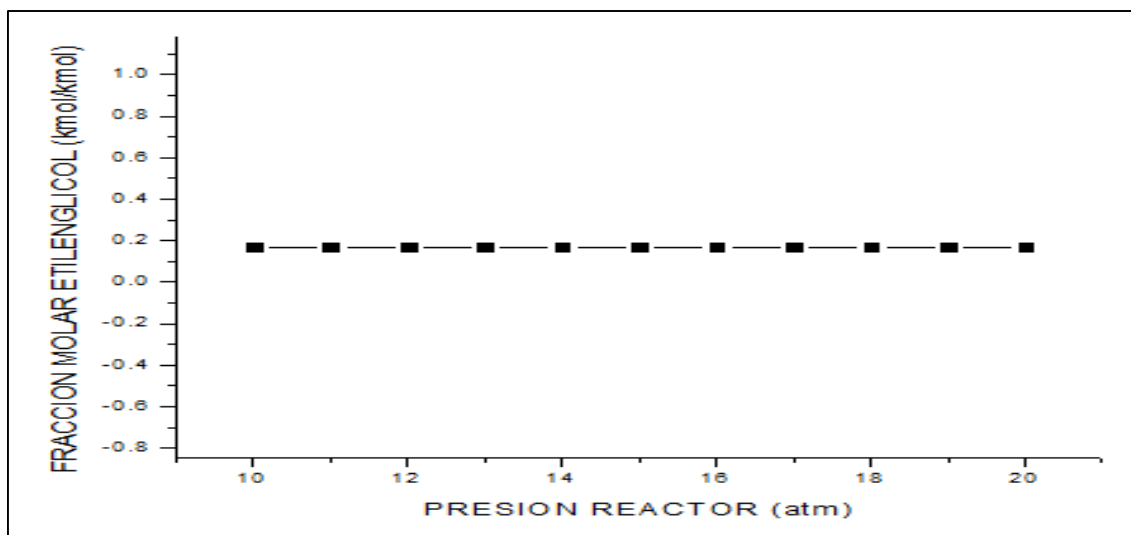


Figura 188.- Presión en reactor - Fracción molar Etilenglicol – Etilenglicol convencional.

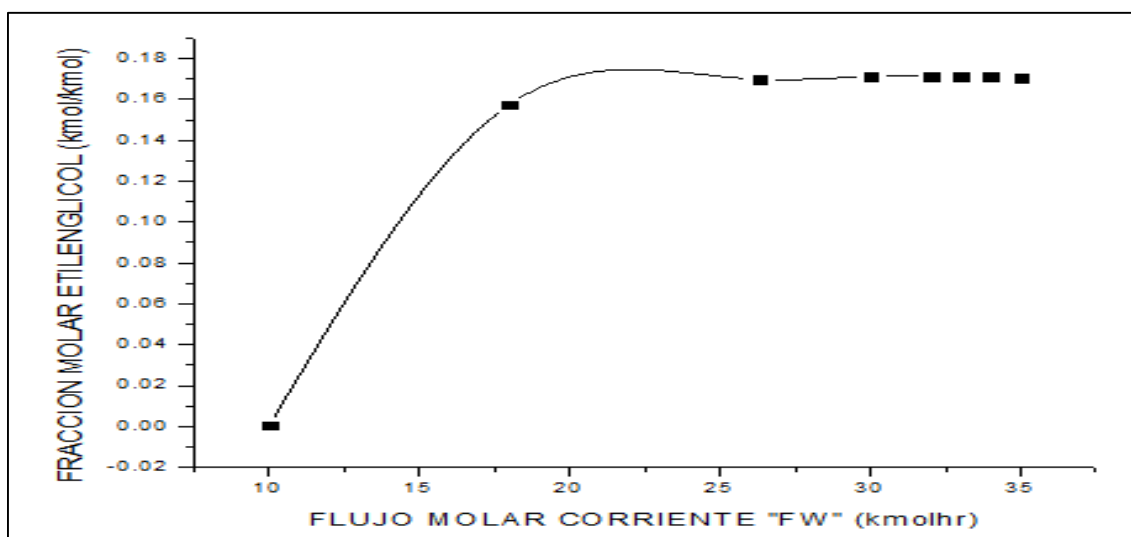


Figura 189.- Flujo molar de agua en corriente "FW"- Fracción molar Etilenglicol – Etilenglicol convencional.

Es evidente en la Figura 189 que la producción de etilenglicol se ve favorecida en la presencia de exceso de agua, sin embargo, llega un punto en el que la producción de etilenglicol no se promueve y llega a un valor prácticamente constante.

A continuación se muestran los resultados obtenidos en los análisis realizados en la columna de destilación DC3, comenzando por la relación de reflujo. Es de esperar que al incrementar la relación de reflujo la fracción molar de etilenglicol también aumente debido a la presencia de exceso de agua. Esto se comprueba de forma gráfica en la Figura 190, sin embargo, el incremento en la fracción molar de etilenglicol es muy pequeña y numéricamente despreciable, debido a que este incremento es menor a 0.001 de fracción mol.

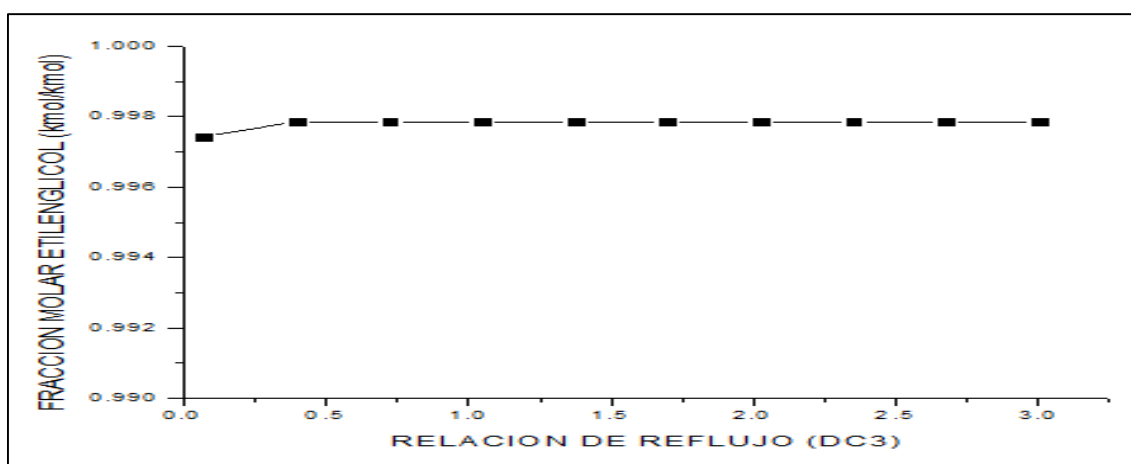


Figura 190.- Relación de reflujo - Fracción molar de Etilenglicol

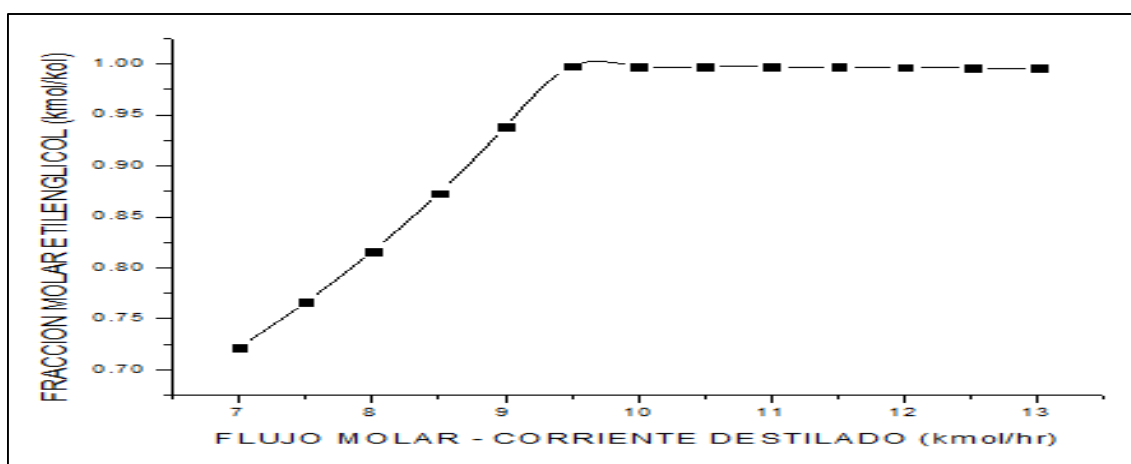


Figura 191.- Velocidad de flujo molar en destilado - Fracción molar de Etilenglicol

La Figura 191 muestra que conforme se aumenta la velocidad de flujo molar en la corriente de destilado, se incrementa la fracción molar de etilenglicol de manera bastante pronunciada, debido a que en esta columna se está llevando a cabo la separación de agua y etilenglicol, por lo que mientras menos agua exista dentro de la columna, la separación será mejor.

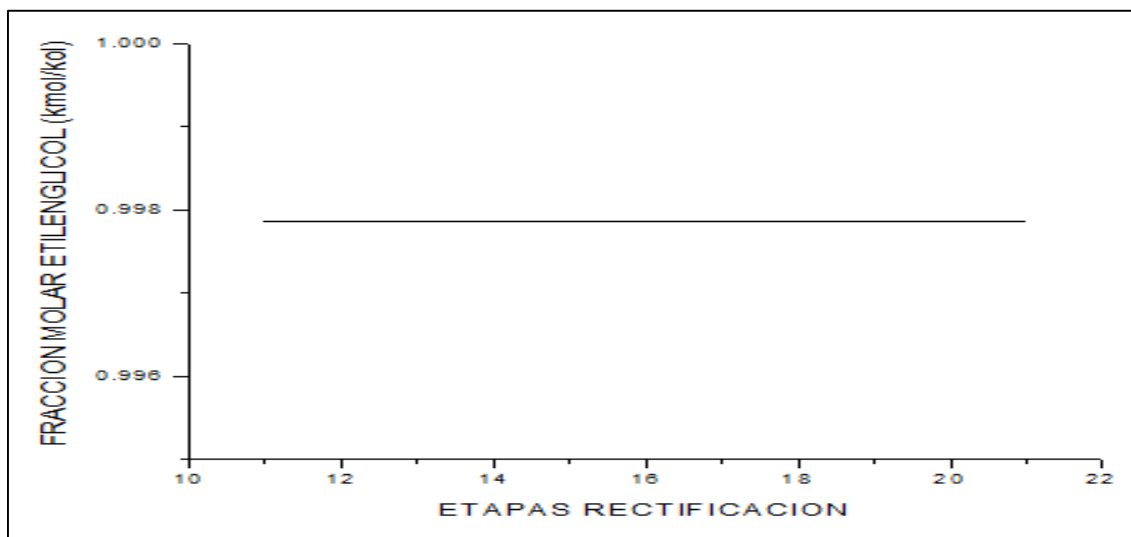


Figura 192.- Etapas de rectificación - Fracción molar de Etilenglicol

El número de etapas de rectificación no presenta efecto alguno en la fracción molar de etilenglicol de la corriente de fondos de la columna de destilación DC3, debido a la simplicidad de la mezcla dentro de la columna, prácticamente una mezcla binaria Agua-Etilenglicol.

Por último observemos la respuesta de la columna en la fracción molar de etilenglicol cuando se incrementa el número de etapas de agotamiento. De manera similar a las etapas de rectificación, las etapas de agotamiento no tienen efecto significativo sobre la fracción molar de etilenglicol, la cual se mantiene por arriba del 99%.

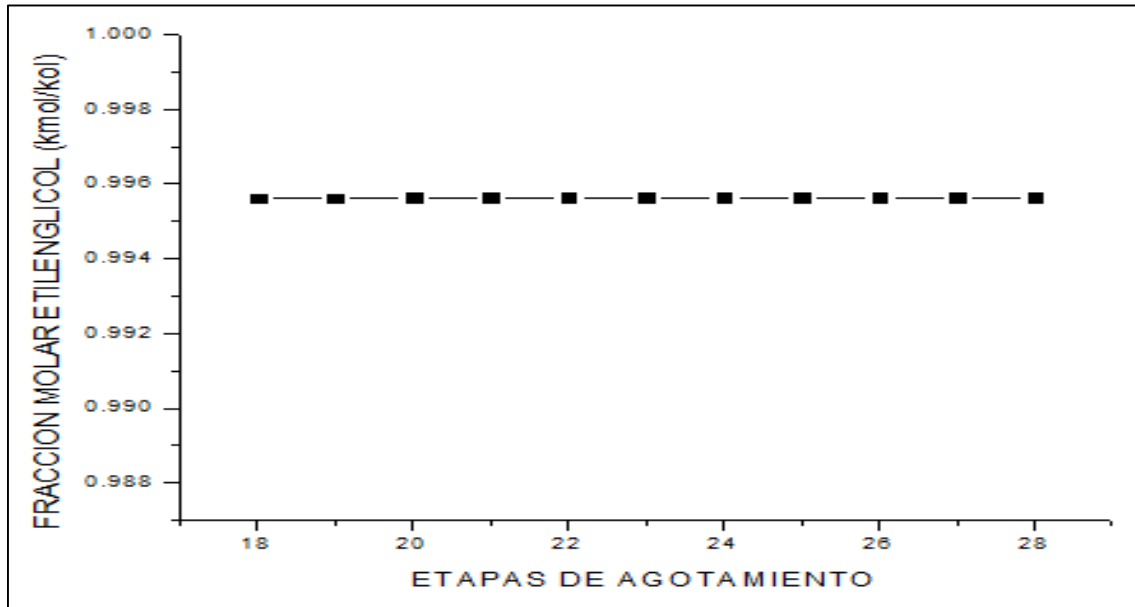


Figura 193.- Etapas de agotamiento - Fracción molar de Etilenglicol

### 3.3.2.- Destilación reactiva

A continuación en esta sección, se muestran los resultados obtenidos en estado estacionario del segundo proceso de obtención de etilenglicol, el cual hace uso de una columna de destilación reactiva con etapas de equilibrio, con lo que se simplifica de manera significativa el proceso en comparación con el convencional. Posteriormente se muestran los resultados obtenidos tras analizar los efectos que tienen sobre la fracción molar de etilenglicol, el realizar cambios en las condiciones de operación de la columna de destilación reactiva.

### 3.3.2.1.- Simulación en estado estacionario

Los resultados mostrados a continuación son obtenidos en base a las condiciones de operación propuestas en la sección 2.3.2. Las primeras gráficas de esta sección a mostrar, son las correspondientes a los perfiles de temperatura y composición, además de que en la siguiente tabla se muestran los resultados correspondientes a la columna reactiva.

La Figura 194 muestra el perfil de temperatura para la columna reactiva, a partir de este se decide que la temperatura en el plato 10 se controla manipulando la carga térmica en el rehervidor, y en la Figura 195 se muestran los perfiles de composición en fase líquida (base mol), de los componentes dentro del sistema.

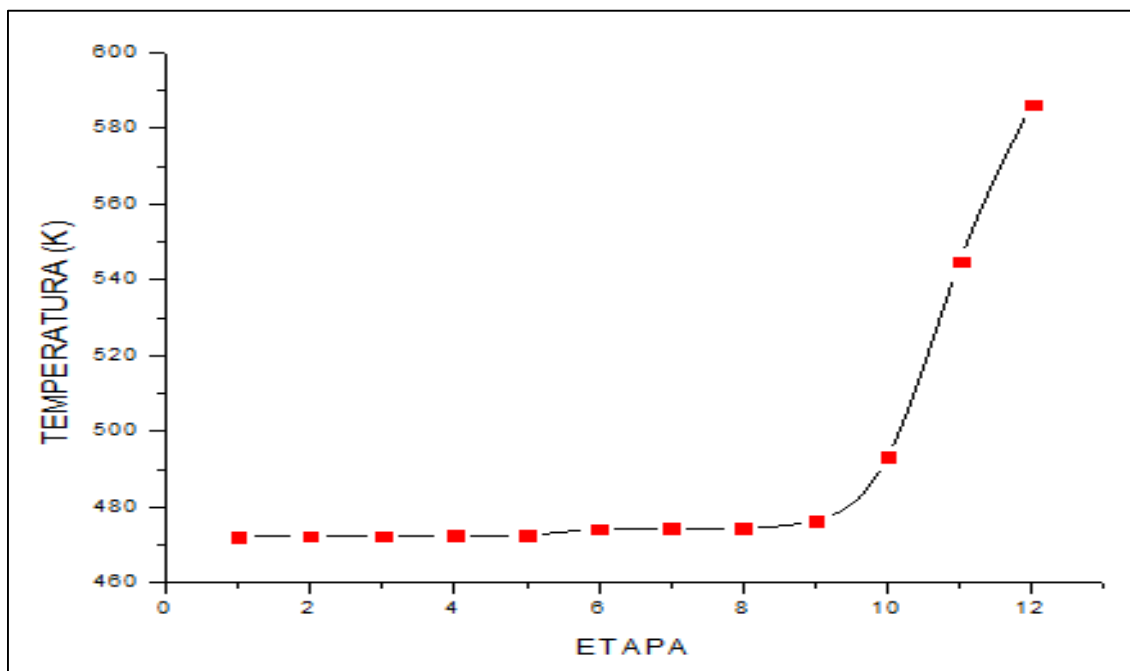


Figura 194.- Perfil de temperatura en columna de destilación – Etilenglicol destilación reactiva

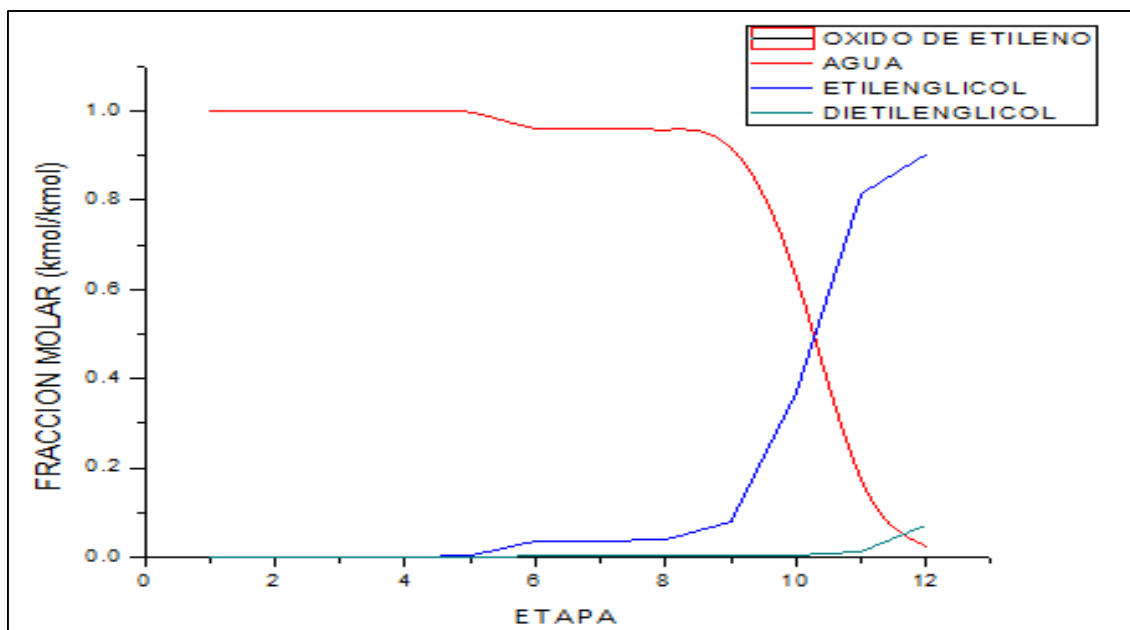


Figura 195.- Perfil de composiciones en columna de destilación - Etilenglicol destilación reactiva

Se observa que la composición de etilenglicol (EG) aumenta rápidamente conforme la mezcla se acerca al rehervidor, esto se debe a la evaporación de agua líquida que no reacciona en la hidrogenación de óxido de etileno de la reacción principal.

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	472.16	K
Carga térmica	-7217685.8	W
Presión	15	atm
Flujo	657.86	kmol/h
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	586.26	K
Carga térmica	6900000	W
Presión	15.2	atm
Diámetro de columna	1.06	m

<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	2.18	m
Diámetro	1.09	m
<b>Tanque de fondos</b>		
Largo	2.72	m
Diámetro	1.36	m

*Tabla 36.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - Etilenglicol destilación reactiva*

#### 3.3.2.1.1.- Efecto de los parámetros de diseño

A continuación se muestran los resultados obtenidos y los efectos que presentan sobre la fracción molar de etilenglicol los análisis realizados sobre el número de etapas reactivas, carga térmica en el rehervidor y caída de presión a lo largo de la columna. No se realizan cambios en la velocidad de flujo molar en la corriente de destilado porque conceptualmente la columna de destilación no cuenta con esta corriente, como se indicó en la sección 2.3.2.

La Figura 196, muestra la respuesta de la columna ante el aumento en la caída de presión. Se observa que no existen cambios en la pureza de etilenglicol conforme la caída de presión aumenta, esto se debe, a que la reacción no presenta dependencia con la presión, de manera similar al reactor CSTR del proceso convencional, a presiones bajas y moderadas.

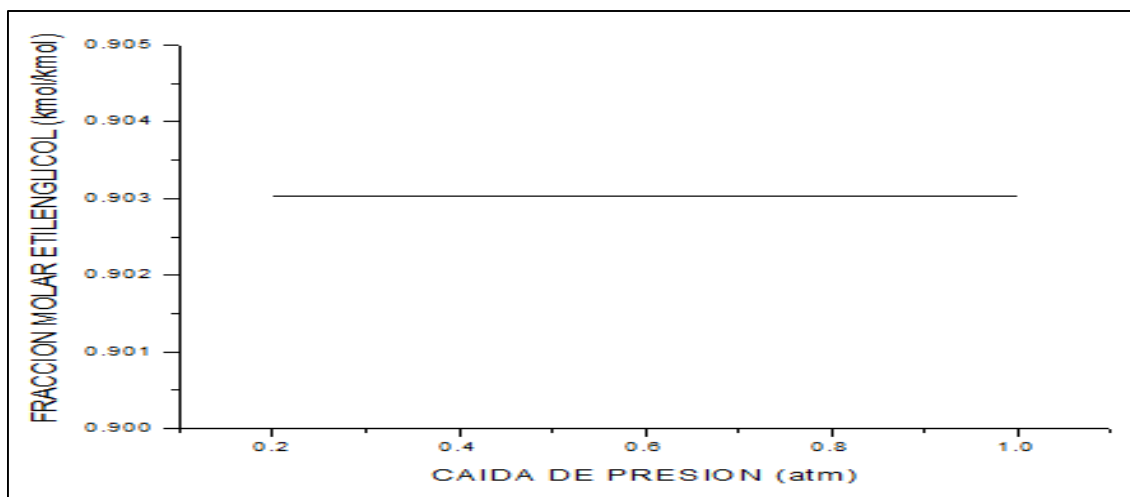


Figura 196.- Caída de Presión en columna reactiva - Fracción molar de etilenglicol.

El número de etapas reactivas es uno de los parámetros más importantes a estudiar. En la Figura 197 es posible observar el efecto que presenta el modificar el número de etapas reactivas sobre la composición de etilenglicol en la corriente de fondo de la columna. Se muestra que al incrementar el número de etapas reactivas se incrementa la pureza de etilenglicol en los fondos, alcanzado la especificación del 90% de pureza.

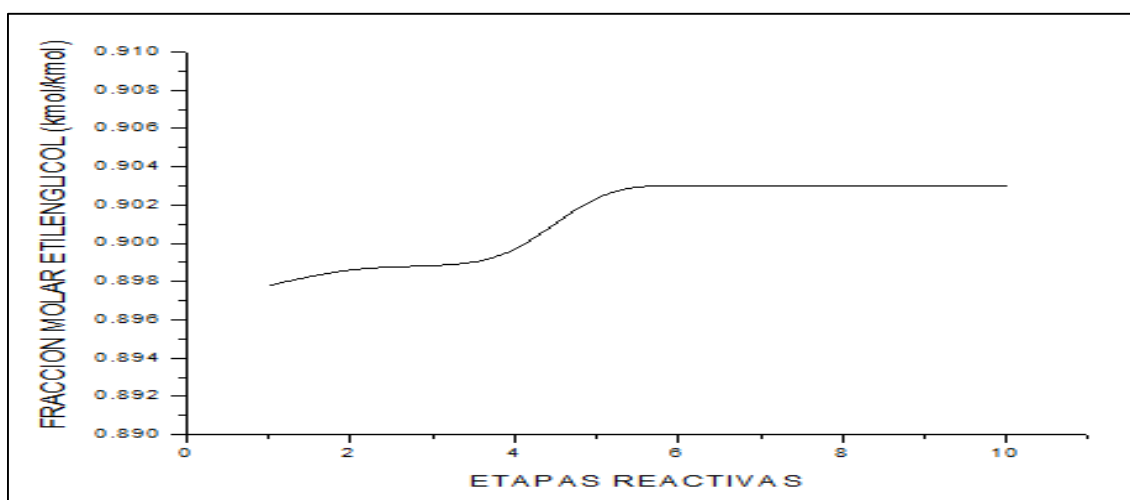


Figura 197.- Número de etapas reactivas - Fracción molar de etilenglicol

En la Figura 197, también es posible observar que a partir de la etapa número 5, el proceso alcanza un estado estacionario y que no tiene efecto alguno el seguir incrementado el número de etapas reactivas, porque no aumenta la pureza de etilenglicol. Es por esto, que el número de etapas reactivas puede ser disminuido, y así conseguir que los costos de instalación de la columna disminuyan, sin afectar la calidad en la pureza del producto.

Otro parámetros importante en el diseño de la columna de destilación reactiva, es la carga térmica alimentada al rehervidor. Este parámetro puede contribuir al aumento en la calidad del producto principal etilenglicol, debido a que si aumentamos la carga térmica en el rehervidor, promovemos la evaporación de agua en el fondo de la columna, incrementando la pureza de nuestro producto.

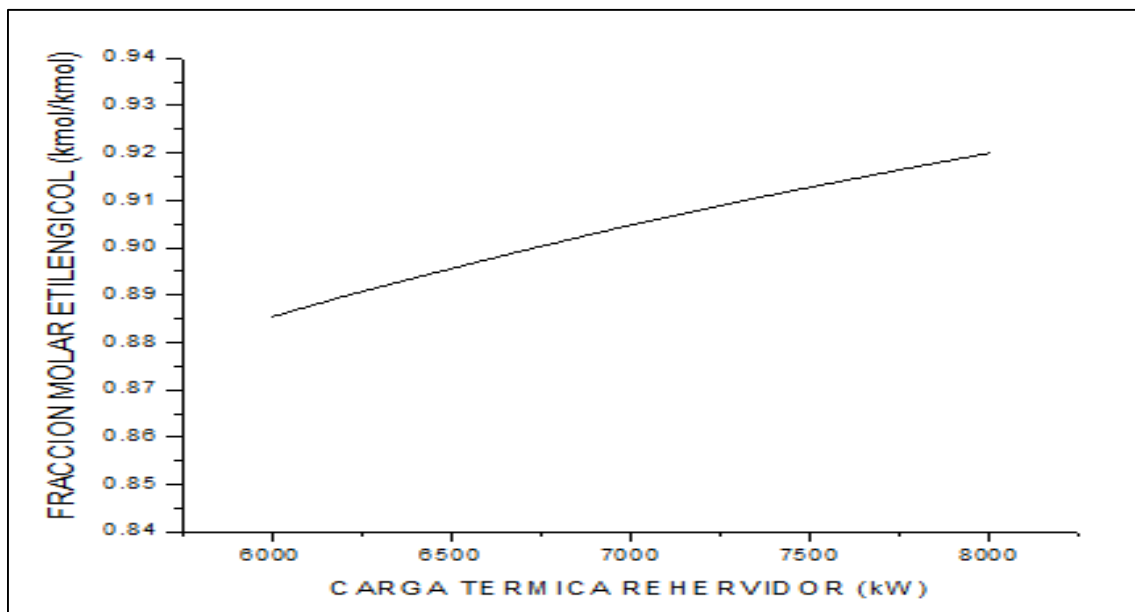


Figura 198.- Carga térmica en rehervidor - Fracción molar de etilenglicol

En la Figura 198 se presenta la gráfica de respuesta ante la variación en la carga térmica del rehedidor y el efecto que tiene en la pureza de etilenglicol. Como era esperado, incrementa la pureza de nuestro producto principal, sin embargo, el aumentar la carga térmica en el rehedidor, conlleva al incremento de vapor alimentado en el fondo para lograr esa meta, lo cual significa incrementos bruscos en los costos de operación de la columna. La relación de incrementos que se presenta no es lineal, pero puede observarse que a partir de 8 MW, incrementar en 1% la pureza de etilenglicol requiere un incremento en la carga térmica de 1 MW aproximadamente.

### 3.3.3.- Destilación reactiva – Etapas de no equilibrio

El tercer proceso analizado es la producción de etilenglicol, mediante el uso de columnas de destilación reactiva con etapas de no equilibrio. Los resultados de la simulación en estado estacionario correspondientes a la columna de destilación reactiva, y los efectos de variación de parámetros de diseño sobre la fracción molar de Etilenglicol, son en base a las condiciones de operación planteados en la sección 2.3.3.

#### 3.3.3.1.- Simulación en estado estacionario

Las siguientes figuras muestran los perfiles correspondientes a la temperatura y composición de los elementos involucrados en el sistema a lo largo de la columna de destilación. La Figura 199 muestra el perfil de temperatura.

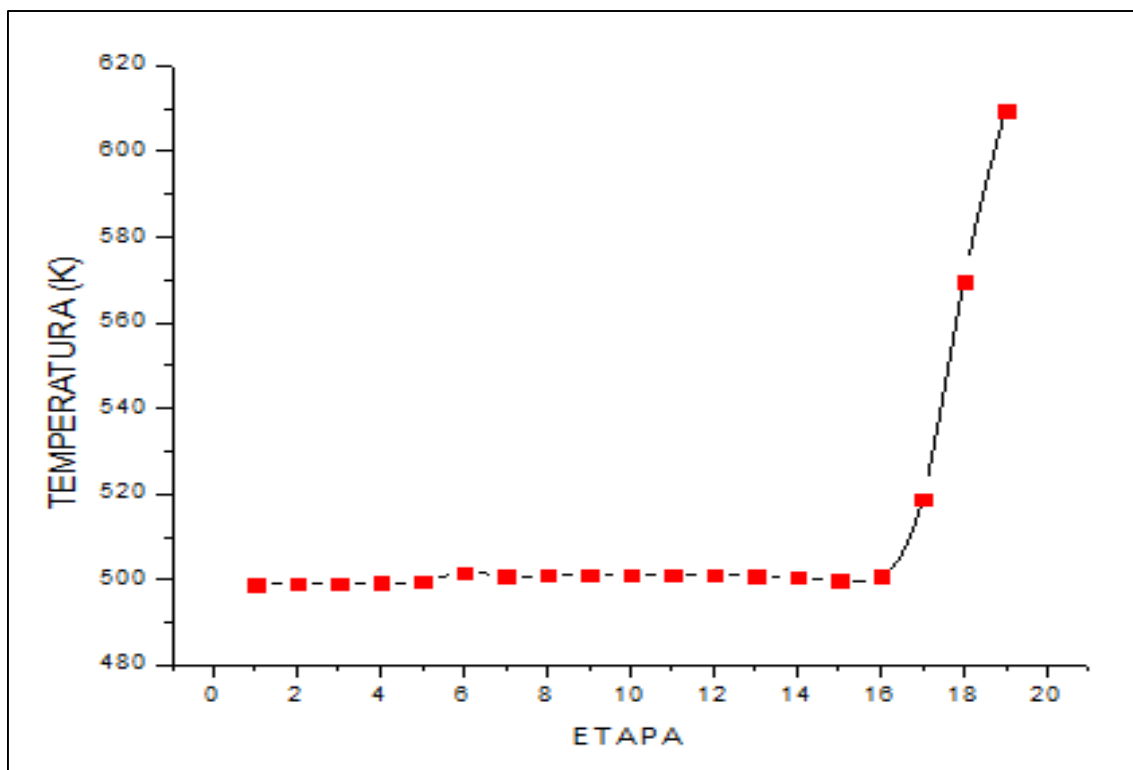


Figura 199.- Perfil de temperatura en columna de destilación - Etilenglicol destilación reactiva NEQ

A continuación la Figura 200 muestra el perfil de composición a lo largo de la columna reactiva, mostrando que la fracción molar de etilenglicol alcanza el 90%, a diferencia de su análoga con etapas de equilibrio. Posteriormente se muestran los resultados obtenidos de algunos parámetros propios de la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio en la Tabla 37.

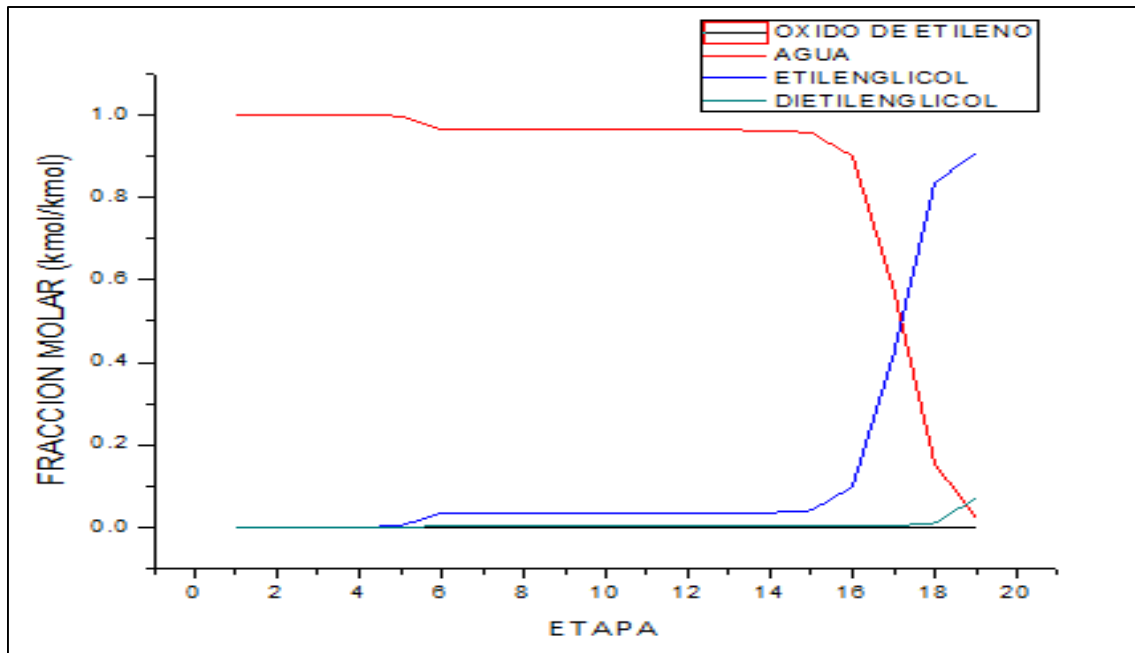


Figura 200.- Perfil de composiciones en la columna de destilación - Etilenglicol destilación reactiva NEQ

Parámetro	Valor	Unidades
<b>Condensador.</b>		
Temperatura	498.8	K
Carga térmica	-7172390.2	W
Presión	15	bar
<b>Rehervidor</b>		
Temperatura	609.5	K
Carga térmica	6900000	W
Presión	15.5	Bar
Diámetro de columna	1.4	m
<b>Tanque acumulador condensados</b>		
Largo	2.18	M
Diámetro	1.09	M
<b>Tanque de fondos</b>		
Largo	2.72	M
Diámetro	1.36	M

Tabla 37.- Resultados - Estado estacionario columna de destilación - Etilenglicol destilación reactiva NEQ

### 3.3.3.1.1.- Efecto de los parámetros de diseño

En esta sección se llevan a cabo los análisis de desempeño correspondientes, y se observa el efecto que presenta el cambio de algunos parámetros de operación de la columna reactiva con etapas de no equilibrio sobre la pureza de nuestro producto principal, etilenglicol. Los parámetros a monitorear son similares a aquellos estudiados en la columna reactiva con etapas de equilibrio; Número de etapas reactivas, carga térmica en el rehervidor, caída de presión a lo largo de la columna, y el número de etapas de agotamiento.

En la Figura 201, es posible observar la respuesta que tiene el modificar el número de etapas reactivas en la columna de destilación NEQ. El aumento de etapas reactivas aumenta la cantidad de etilenglicol en cantidades aproximadas al 0.45%, una cantidad prácticamente despreciable.

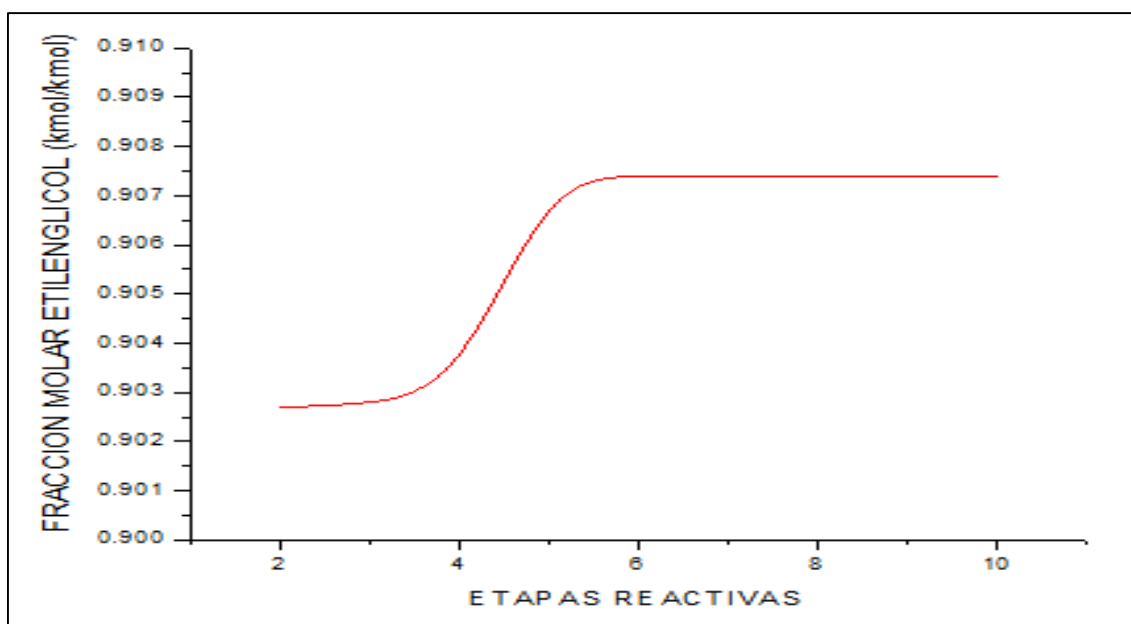


Figura 201.- Número de etapas reactivas NEQ - Fracción molar de etilenglicol

Es posible observar que a partir de 5 etapas reactivas, el proceso entra en un estado estable, en donde, a pesar de aumentar la cantidad de etapas reactivas, la pureza de etilenglicol ya no se ve modificada. Este efecto nos permite afirmar que es posible reducir el tamaño de la columna sin afectar la calidad de nuestro producto principal. Esta reducción, disminuye también el costo de adquisición de la columna reactiva.

El análisis correspondiente a la carga térmica en el rehervidor se muestra en la Figura 202. En esta gráfica de respuesta se observa como la fracción molar de etilenglicol en la corriente de fondos aumenta en función de la carga térmica. Esta respuesta es similar a la obtenida en la columna de destilación reactiva, ya que al incrementar la cantidad de energía añadida al rehervidor, es posible evaporar más cantidad de agua en las etapas de la sección de agotamiento. Este fenómeno permite aumentar la pureza de etilenglicol en una razón aproximada de 1% por MW añadido.

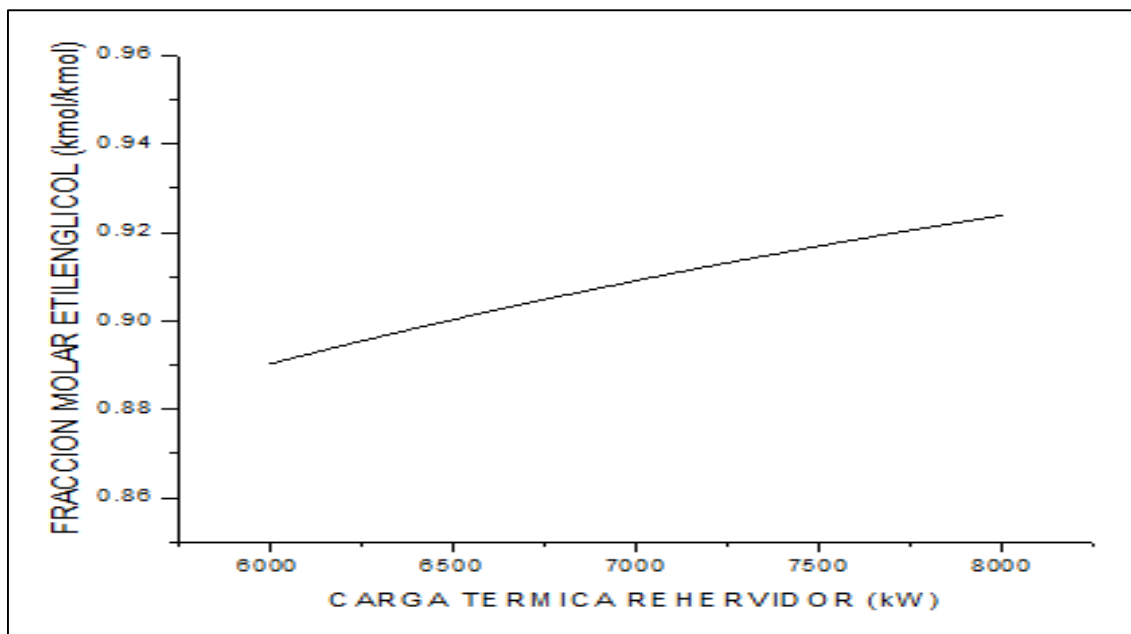


Figura 202.- Carga térmica en rehervidor - Fracción molar de Etilenglicol

En secciones anteriores observamos que la presión no tiene efecto alguno sobre la composición de etilenglicol en los fondos. Es interesante observar cómo afecta este parámetro en la columna de destilación, donde ahora se consideran etapas de no equilibrio. En la Figura 203 se muestra la gráfica de respuesta ante este parámetro.

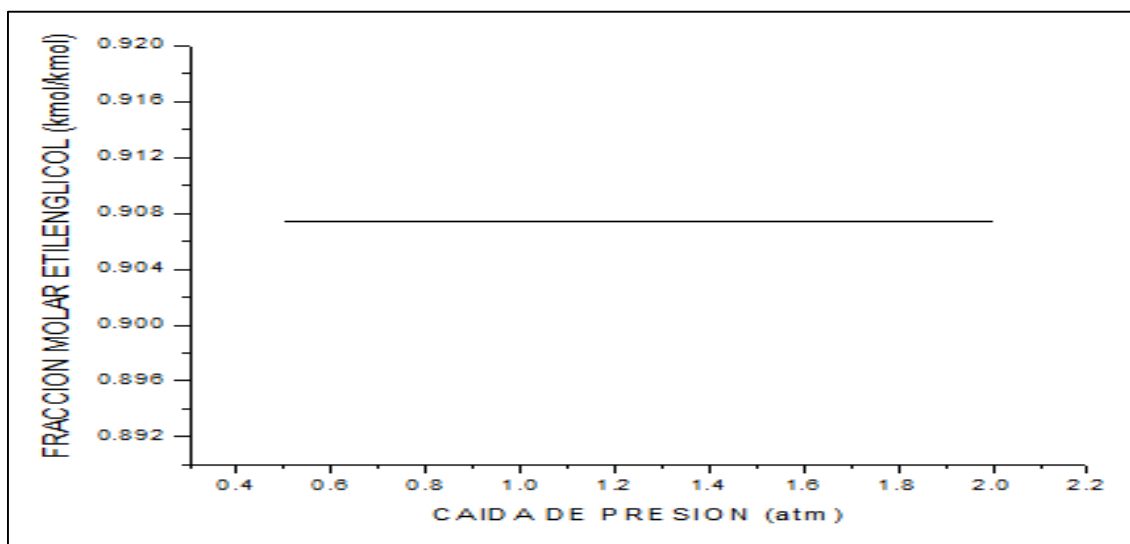


Figura 203.- Caída de presión - Fracción molar de Etilenglicol

En la Figura 203 se observa que a pesar de que este modelo de columna es más riguroso, la variación de la presión como parámetro de diseño, no presenta efecto alguno en la pureza de nuestro producto principal, resultado similar a los obtenidos en los dos procesos de producción anteriores.

En la Figura 204 se presenta un análisis de sensibilidad, que no se considera en la columna de destilación reactiva con etapas de equilibrio, debido a que en su diseño, la columna cuenta con etapas reactivas completamente. Este diseño implica la inexistencia de etapas de rectificación y de agotamiento convencionales en una columna de destilación.

La columna reactiva con etapas de no equilibrio, cuenta con zonas de reacción y de agotamiento (es necesario considerar etapas de agotamiento en este modelo para poder alcanzar una pureza de producto similar al modelo de equilibrio). Es asumido que la columna no cuenta con etapas de rectificación, debido a que las etapas de la parte superior están llenas en su gran mayoría con agua pura, por lo que el considerar etapas de rectificación para separar esta mezcla no tendría sentido, e incrementaría los costos de la columna de destilación.

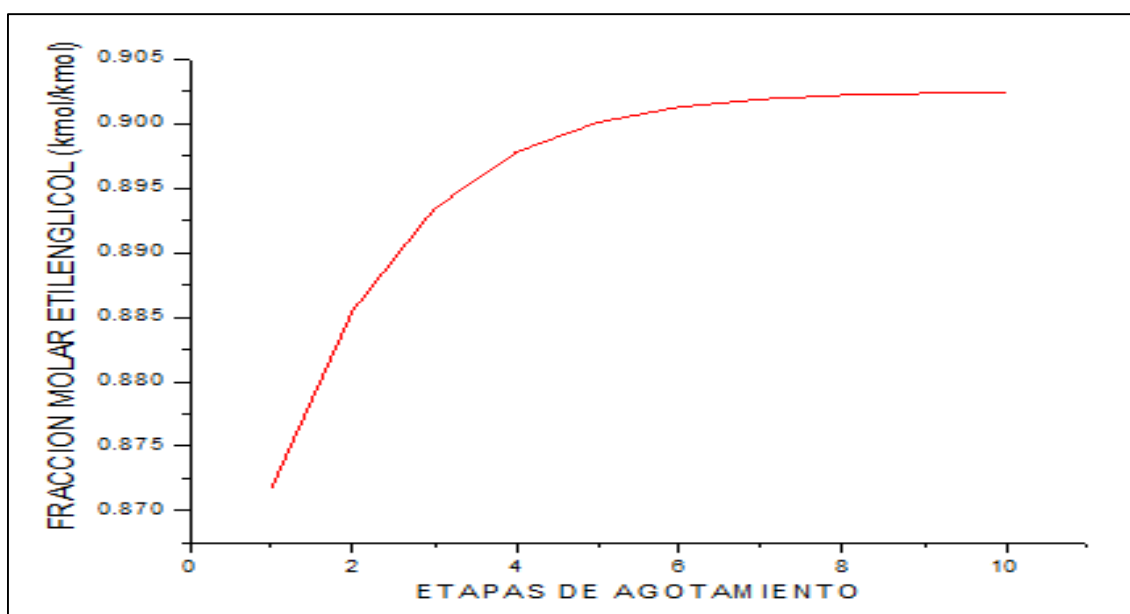


Figura 204.- Etapas de agotamiento - Fracción molar de Etilenglicol

En la Figura 204 se observa que la inclusión de etapas de agotamiento a la columna reactiva NEQ, promueve el aumento en la pureza de etilenglicol. Las etapas son añadidas hasta que la pureza de etilenglicol alcance la especificación de 90%, similar al resultado obtenido en el modelo de equilibrio de la columna reactiva anterior. Por otra parte, se puede observar que a partir de 6 etapas de agotamiento, la pureza de etilenglicol deja de aumentar en cantidades significativas.

A continuación se muestran las comparativas en cuanto a perfiles de temperatura y composición, entre el empleo de etapas de equilibrio y no equilibrio. Es importante señalar que la columna con etapas de no equilibrio considera el mismo número de etapas que en equilibrio.

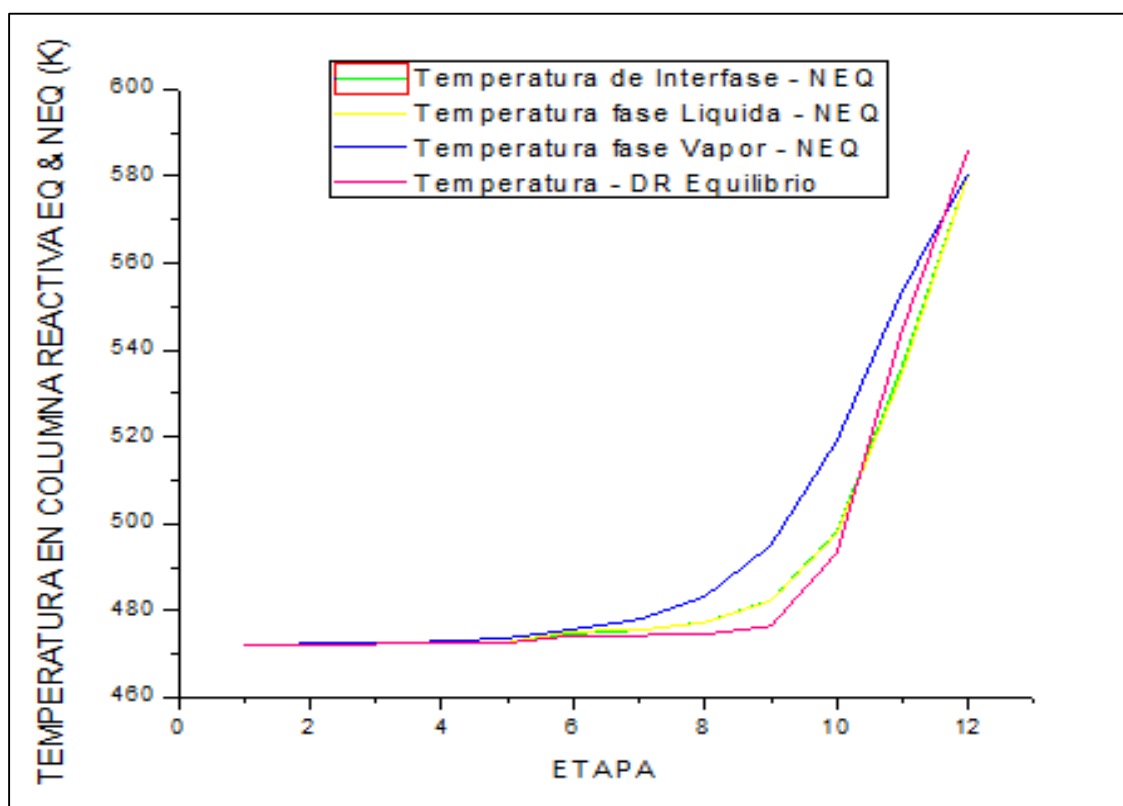


Figura 205.- Comparación de perfiles de temperatura - Etilenglicol destilación reactiva EQ & NEQ

Las diferencias de temperatura entre el modelo de equilibrio y no equilibrio no son significativas para el condensador y rehervidor. La diferencia principal se encuentra en la zona media-baja de la columna, y debido a que la temperatura es ligeramente mayor en la columna reactiva con etapas de no equilibrio, la formación de etilenglicol es menor que en el modelo de equilibrio.

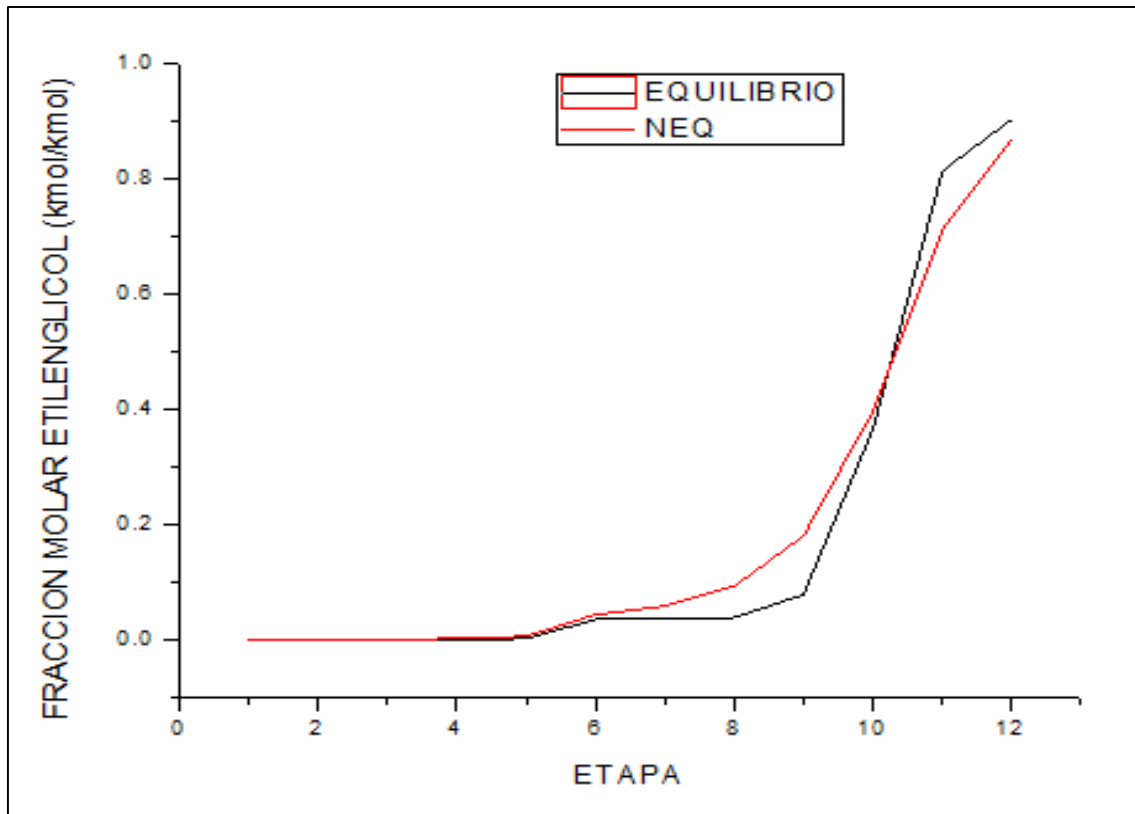


Figura 206.- Comparación de perfiles de composición de Etilenglicol - Etilenglicol destilación reactiva EQ & NEQ

La Figura 206 muestra cómo afecta la diferencia en la zona media baja de la columna disminuye la fracción molar de etilenglicol en el modelo de no equilibrio en un 4% en comparación con el modelo de equilibrio.

Por último en la Figura 207 se muestra el perfil de composición de Dietilenglicol a lo largo de la columna de destilación reactiva comparando el modelo de equilibrio y de no equilibrio.

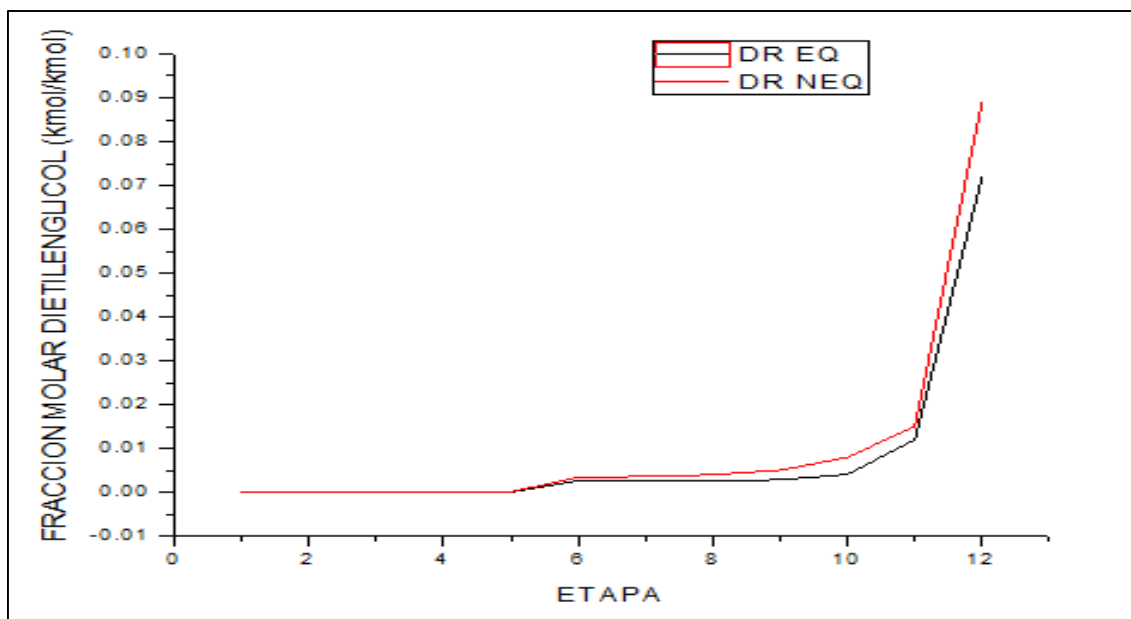


Figura 207.- Comparación de perfiles de composición de MTBE - Etilenglicol destilación reactiva EQ & NEQ

Se puede observar que la cantidad de Dietilenglicol es mayor en el modelo de no equilibrio, corroborando que la formación de producto principal Etilenglicol es menor en el modelo riguroso y es necesario incrementar la cantidad de etapas en la columna para poder alcanzar la especificación del 90%.

#### 3.3.4.- Análisis de costos

Uno de los parámetros más importantes en la toma de decisiones, es el costo que tendrá el llevar a cabo el proyecto. Empleando un análisis de costos realizado en Aspen IPE (Icarus Process Evaluator – Process Economic Analyzer), se comparan los costos para los tres distintos procesos propuestos para la obtención de Etilenglicol. En la Tabla 38, se muestran los resultados para el Costo de capital total del proyecto y Ventas totales de producto, de cada proceso bajo las condiciones de diseño correspondiente. Para todos los casos, los costos se encuentran en dólares americanos.

	CONVENCIONAL	D. REACTIVA	D. REACTIV NEQ
<b>Costo de capital total del proyecto (\$)</b>	14,579,312.50	7,624,358.90	8,345,890.60
<b>Ventas Totales de producto (\$/año)</b>	4,613,917.06	21,117,598.78	19,233,106.50

Tabla 38.- Comparación de costos de equipos y venta de producto - Etilenglicol

A partir de la comparativa presentada en la Tabla 38, el proceso de destilación reactiva con etapas de equilibrio resulta ser la opción más viable, sin embargo, la columna reactiva con etapas de no equilibrio por su mejor aproximación a la realidad y a que los resultados económicos son similares en ambos modelos, es posible afirmar este es el modelo más efectivo. Una proyección a 15 años de vida útil de la planta representa de manera gráfica los resultados de la Tabla 38.

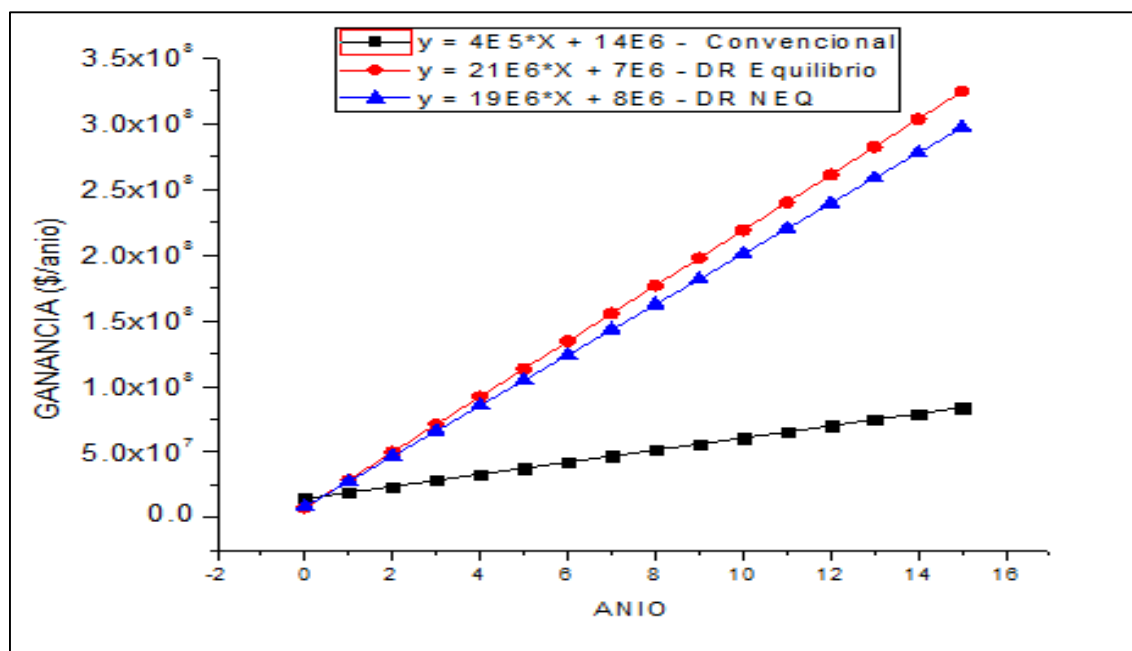


Figura 208.- Proyección a 15 años de vida útil de las plantas

### 3.3.5.- Respuestas dinámicas

El simulador en estado dinámico Aspen Dynamics es ahora empleado para realizar los estudios de control de los tres diferentes procesos. La simulación dinámica de los tres procesos se llevan a cabo especificando el tipo “*Pressure Driven Simulation*”. Es importante recordar que para la simulación en estado dinámico, algunos parámetros adicionales en cada equipo deben ser especificados. Los cuales hacen referencia a las dimensiones de los equipos principales.

El objetivo principal de los lazos de control es de mantener la pureza de etilenglicol en la corriente de producto ante cambios escalón en la alimentación de óxido de etileno. El primer escenario expuesto, es el sistema de producción de etilenglicol, mediante el uso del sistema convencional con reacción y separación en zonas distintas de la planta.

#### 3.3.5.1.- Simulación en estado dinámico – Proceso convencional

La simulación dinámica del proceso convencional se somete a una perturbación correspondiente a  $\pm 10\%$  el valor de la corriente de alimentación de Óxido de etileno. Las variables a monitorear son: Temperatura del reactor CSTR, temperatura del plato 38 en columna de destilación “DC”, temperatura del plato 18 en columna de destilación “DC2”, temperatura del plato 19 en columna de destilación “DC3”, carga térmica en rehervidor “DC3”, carga térmica removida en condensador “DC3” y fracción molar de etilenglicol.

En primera instancia es necesario corroborar que el sistema de control establecido es capaz de mantener la calidad de etilenglicol sin la presencia de perturbaciones en el proceso, la Figura 209 muestra esta gráfica.

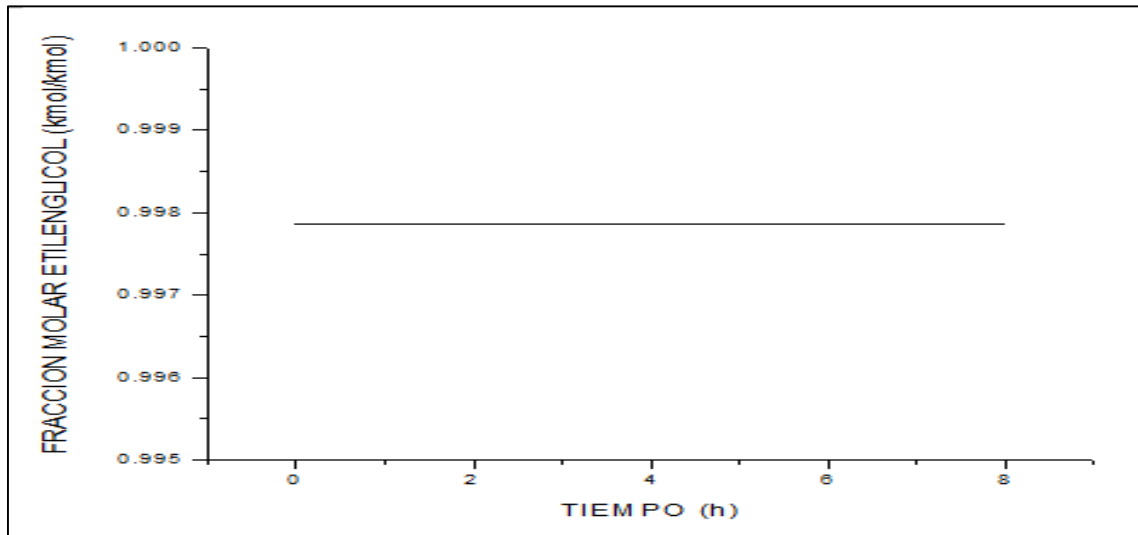


Figura 209.- Fracción molar de Etilenglicol con respecto al tiempo - Etilenglicol convencional dinámico

Es posible observar que el sistema de control logra mantener la fracción molar de etilenglicol por encima del 99% en ausencia de perturbación alguna en el sistema, por lo que ahora es posible someter al proceso a perturbaciones en la corriente de alimentación de óxido de etileno.

#### 3.3.5.1.1.- Pruebas de control y perturbaciones al proceso

La siguiente figura muestra el cambio escalón producido en la corriente de óxido de etileno en  $\pm 10\%$  el valor establecido en la simulación en estado estacionario.

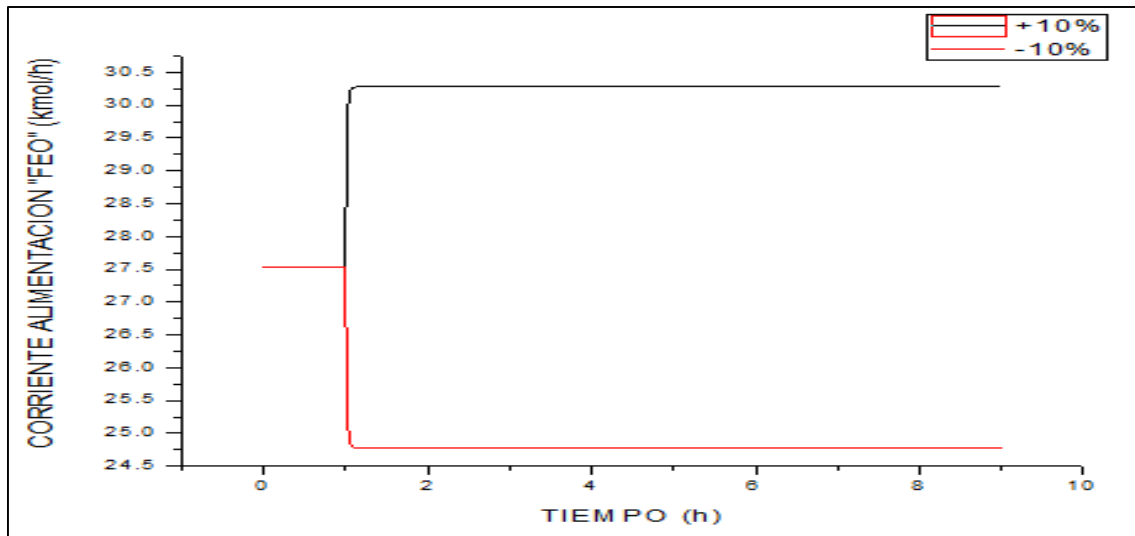


Figura 210.- Perturbación  $\pm 10\%$  en alimentación - Etilenglicol convencional

La perturbación generada en la corriente de óxido de etileno es llevada a cabo transcurrida una hora de tiempo de simulación. Las siguientes figuras muestran las respuestas obtenidas en las variables monitoreas y los efectos sobre ellas debidas a la perturbación.

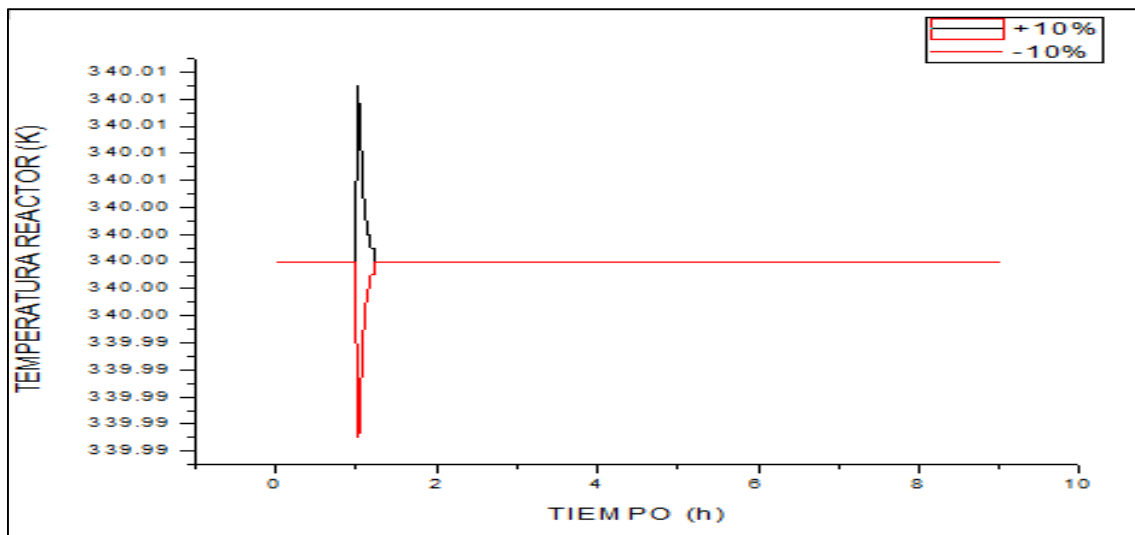


Figura 211.- Respuesta ante la perturbación en la temperatura de reactor - Etilenglicol convencional

La respuesta ante la perturbación en la temperatura del reactor es muy pequeña, prácticamente imperceptible, 0.16%, un valor no significativo. Por otra parte, el sistema de control muestra una respuesta efectiva ante la perturbación, devolviendo la temperatura de SetPoint en un tiempo aproximado de 10 minutos.

La siguiente respuesta es la obtenida en el plato 38 de la primera columna de destilación empleada en el proceso. La Figura 212 muestra que el sistema de control poco a poco estabiliza la temperatura del plato, sin embargo, requiere de bastante tiempo para lograrlo y no logra devolver el valor de SetPoint.

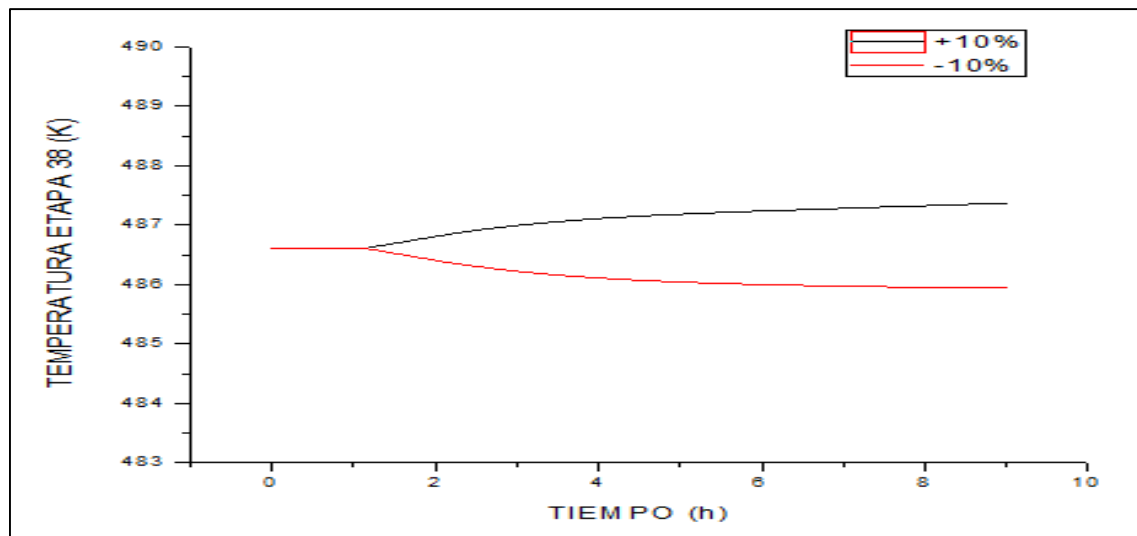


Figura 212.- Respuesta ante perturbación en temperatura plato 38 -Etilenglicol convencional

La temperatura del plato 18 muestra que, de forma similar, el sistema de control es inestable ante la perturbación, pero logra acercarse de mejor manera al valor de SetPoint que en la columna de destilación anterior. Esta respuesta se muestra en la Figura 213.

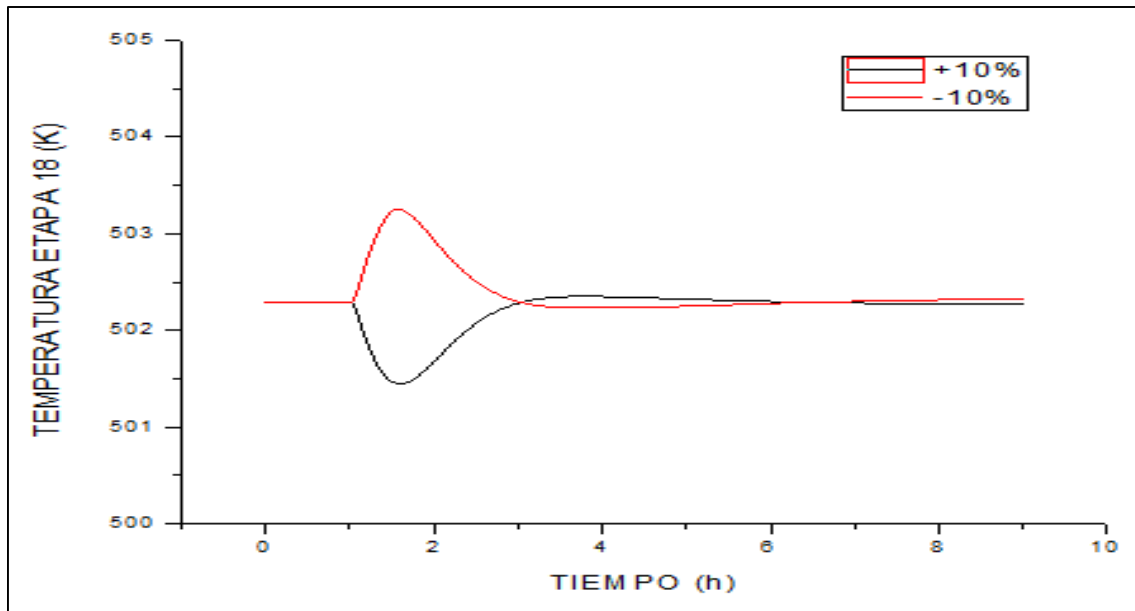


Figura 213.- Respuesta ante perturbación en temperatura plato 18 - Etilenglicol convencional

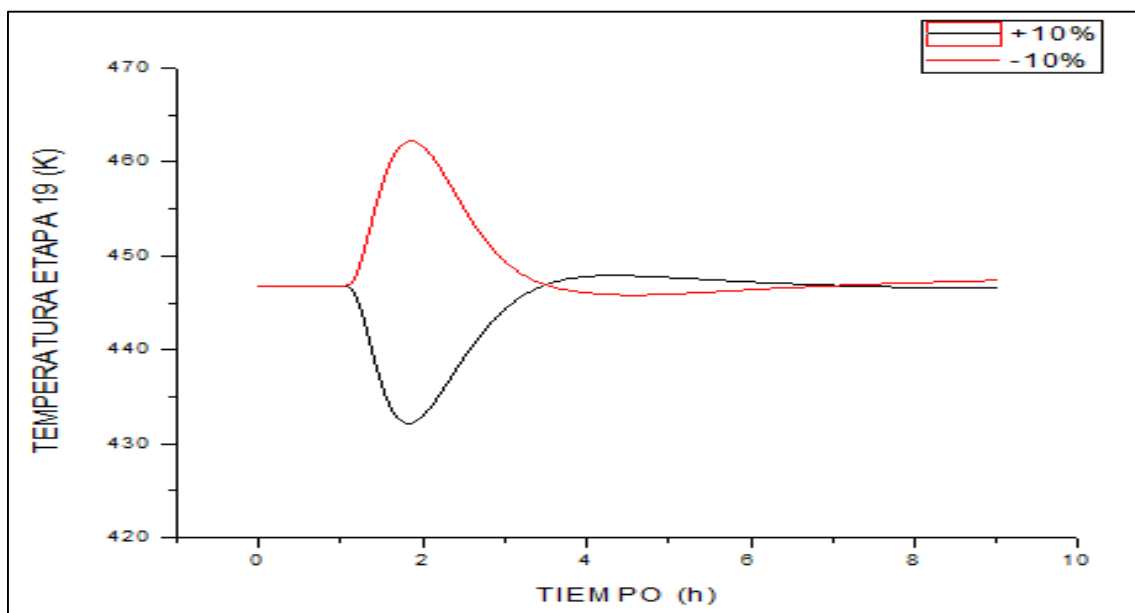


Figura 214.- Respuesta ante perturbación en temperatura plato 19 - Etilenglicol convencional

La Figura 214 muestra la respuesta ante la perturbación en la temperatura del plato 19 de la columna de destilación “DC3”, encargada de llevar a cabo la separación de etilenglicol y agua. Muestra una mejor respuesta que las dos columnas anteriores,

acercándose al valor de SetPoint, sin embargo, aún el sistema de producción convencional de etilenglicol es bastante inestable ante la perturbación en la corriente de alimentación, debida a la complejidad del proceso.

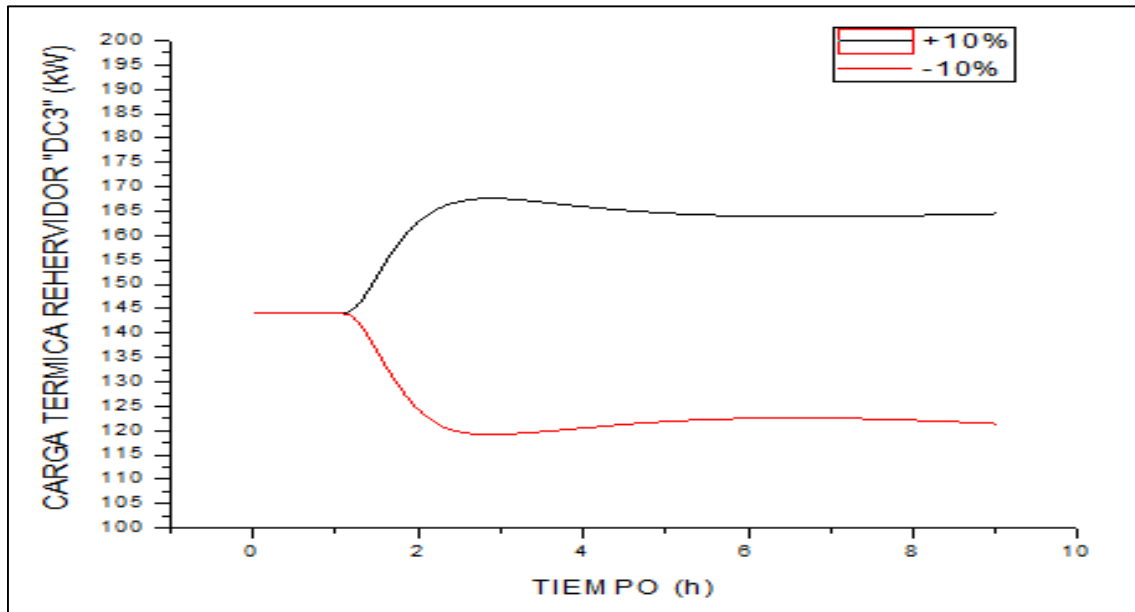


Figura 215.- Respuesta ante perturbación en rehervidor DC3 - Etilenglicol convencional

La respuesta en el rehervidor de la columna de destilación DC3, muestra que cuando la perturbación incrementa la cantidad de óxido de etileno entrante al proceso, la carga térmica en el rehervidor disminuye, esto se debe a que cuando la concentración de óxido de etileno aumenta, se promueve la formación de Dietilenglicol, disminuyendo la cantidad de materia entrante a la columna DC3, por lo que la carga térmica disminuye. De manera contraria, cuando la concentración de óxido de etileno disminuye, el exceso de agua en el sistema promueve la formación de Etilenglicol, aumentando la cantidad de materia entrante a la columna de destilación.

A continuación se muestra la respuesta en el condensador de la columna de destilación DC3 en la Figura 216.

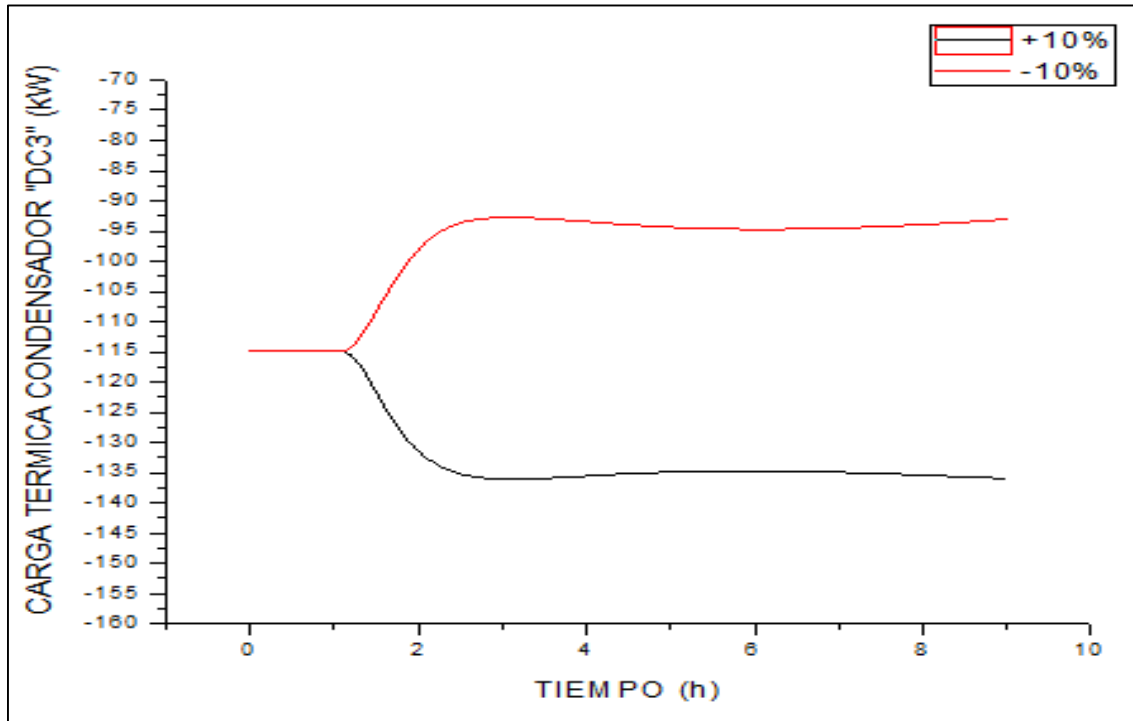


Figura 216.- Respuesta ante perturbación en condensador DC3 - Etilenglicol convencional

La respuesta en el condensador es la de disminuir la carga térmica removida cuando la perturbación incrementa la concentración de óxido de etileno, debido a la disminución de materia entrante a la columna de destilación. Y de forma contraria cuando la cantidad de materia entrante a la columna incrementa, es necesario remover mayor cantidad de energía en el condensador.

Por último, la Figura 217 muestra la respuesta más importante dentro del proceso, ya que demuestra si el sistema de control establecido a lo largo del proceso logra mantener la calidad de etilenglicol ante las perturbaciones generadas en el proceso.

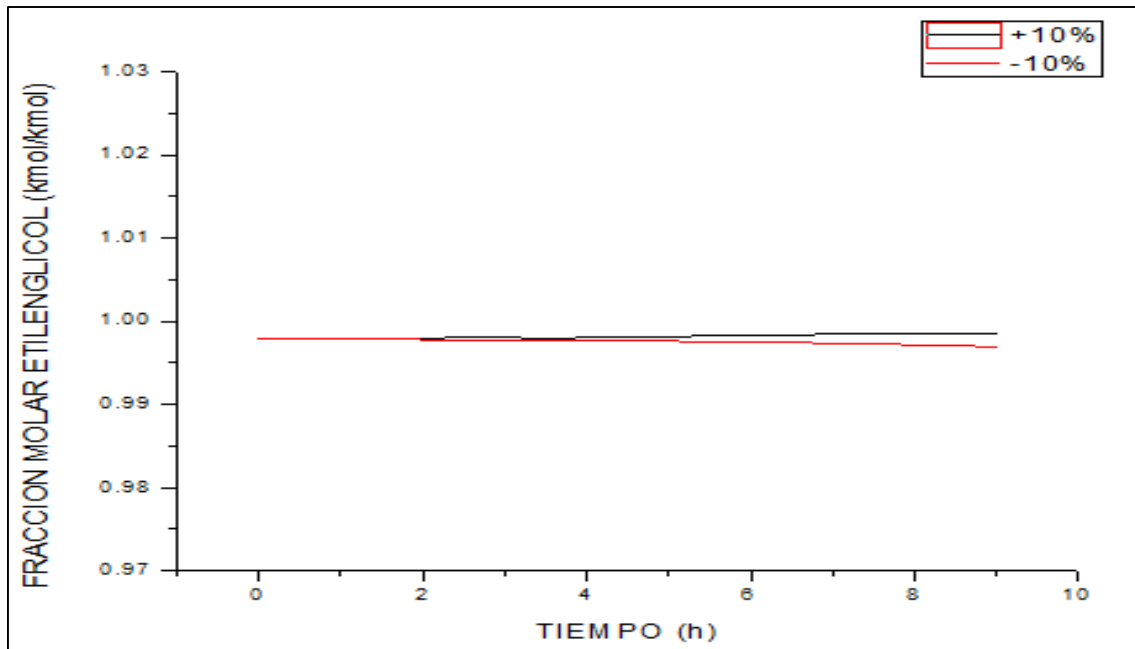


Figura 217.- Respuesta ante la perturbación en la composición de Etilenglicol - Etilenglicol convencional

Es posible observar que el sistema de control no tiene mayor problema cuando la perturbación modifica la cantidad de óxido de etileno alimentado al proceso, debido a que la reacción de formación de etilenglicol es más sensible si se modifica la cantidad de agua alimentada al proceso.

Por último, se muestran las respuestas del sistema de control ante la perturbación tipo servo en el SetPoint del controlador de temperatura del plato 19 de la columna de destilación, y el efecto que esta perturbación genera en la fracción molar de etilenglicol en la corriente de fondos.

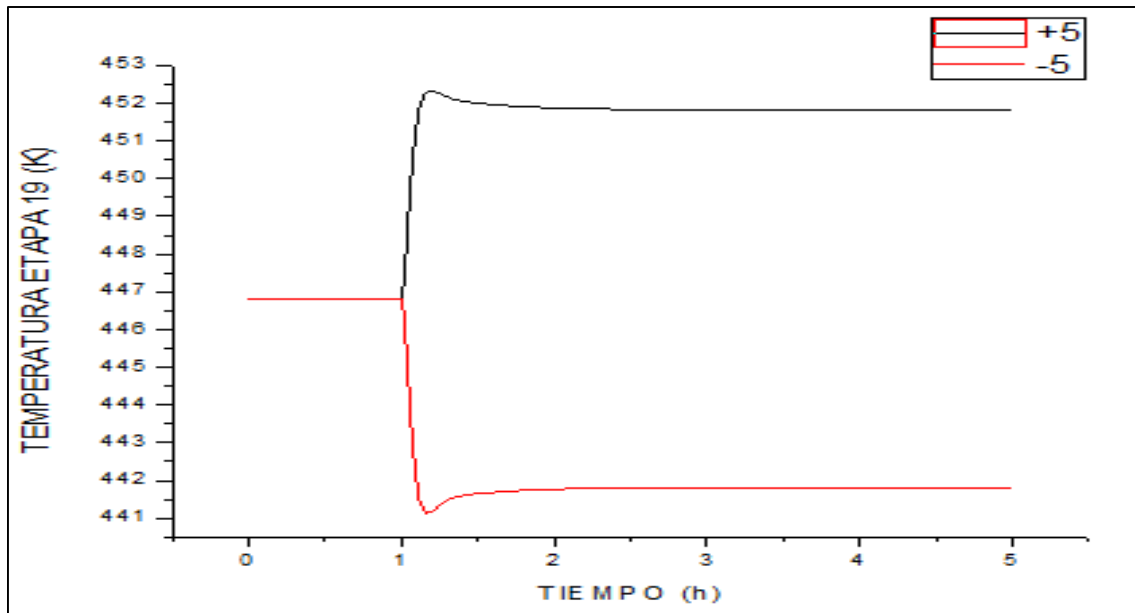


Figura 218.- Perturbación en  $\pm 5^{\circ}\text{K}$  SetPoint en plato 19 columna destilación – Etilenglicol convencional.

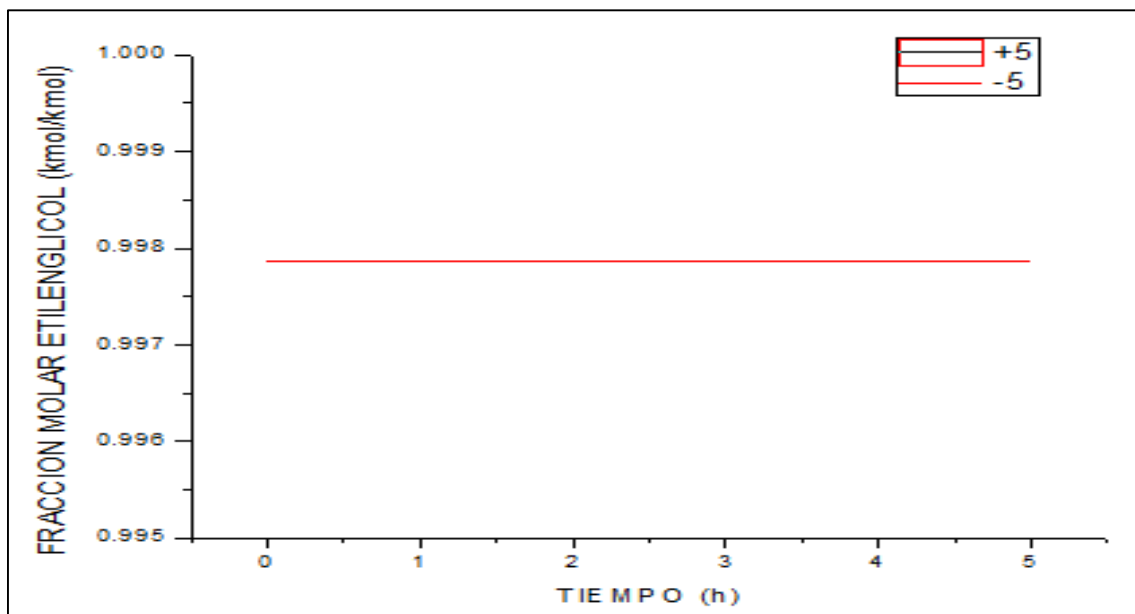


Figura 219.- Fracción molar de Etilenglicol ante perturbación servo – Etilenglicol convencional.

La Figura 219, muestra la respuesta ante la perturbación servo en la fracción molar de Etilenglicol, se puede observar en el gráfico que ambas respuestas están sobrepuestas una con otra, por lo que la fracción molar de etilenglicol no se ve afectada ante la perturbación tipo servo, esto se debe a que los productos entrantes a la columna de destilación 3 del proceso convencional, son únicamente agua y etilenglicol, por lo que un cambio en el SetPoint del controlador de temperatura ( $446.817^{\circ}\text{K}$ ) de  $\pm 5^{\circ}\text{K}$ , permanece por arriba de la temperatura de ebullición del agua, incluso cuando la perturbación disminuye la temperatura del plato, por lo cual no se producen cambios en la fracción molar de etilenglicol.

### *3.3.5.2.- Simulación en estado dinámico – Destilación reactiva*

En esta sección contemplamos la respuesta dinámica del proceso de obtención de etilenglicol mediante el empleo de la columna de destilación reactiva con etapas de equilibrio, ante perturbaciones mayores a las propuestas en las secciones anteriores. El cambio escalón en esta ocasión es de  $27.53 \text{ kmol/h}$  a  $15$  y  $35 \text{ kmol/h}$  respectivamente en un tiempo de  $0.5$  horas.

En primera instancia es necesario verificar si el sistema de control logra mantener la fracción molar de etilenglicol estable, sin la presencia de perturbaciones en el proceso.

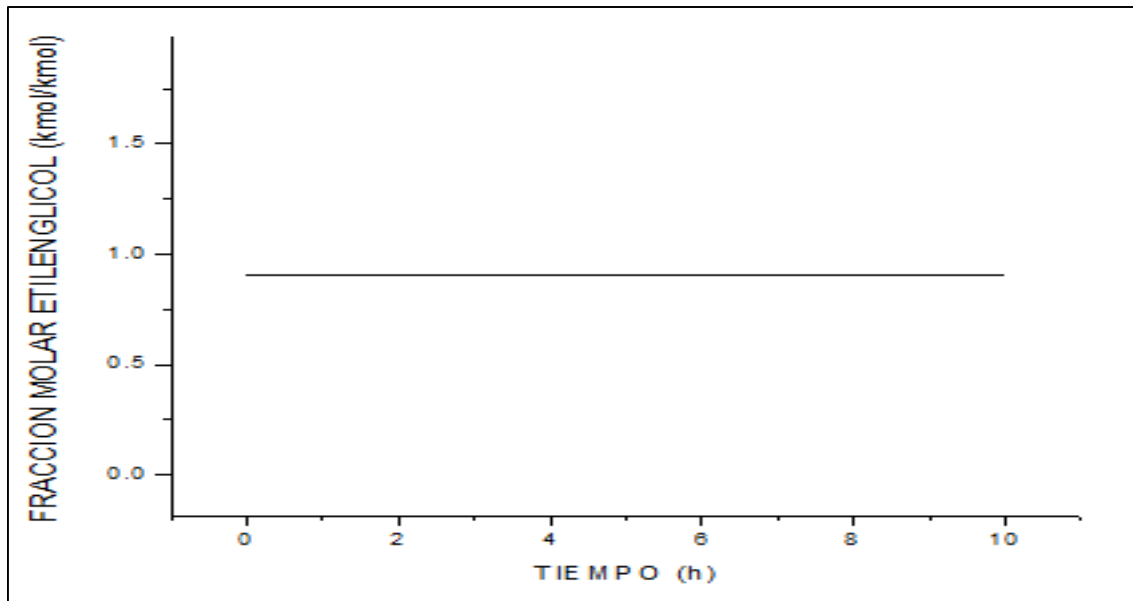


Figura 220.- Fracción molar de Etilenglicol con respecto al tiempo - Etilenglicol destilación reactiva dinámico

La Figura 220 muestra que el sistema de control logra mantener la pureza de etilenglicol en ausencia de perturbaciones en el proceso, por lo que ahora es posible someter al sistema de control a perturbaciones en la corriente de alimentación FEO.

#### 3.3.5.2.1.- Pruebas de control y perturbaciones al proceso

La primera respuesta dinámica observada es la mostrada en la Figura 221, correspondiente al cambio escalón en la corriente de alimentación fresca de óxido de etileno. Las variables a monitorear en la columna reactiva son: Corriente de alimentación de agua FW, corriente de fondos, fracción molar de etilenglicol, temperatura del plato número 10, carga térmica en rehervidor y condensador.

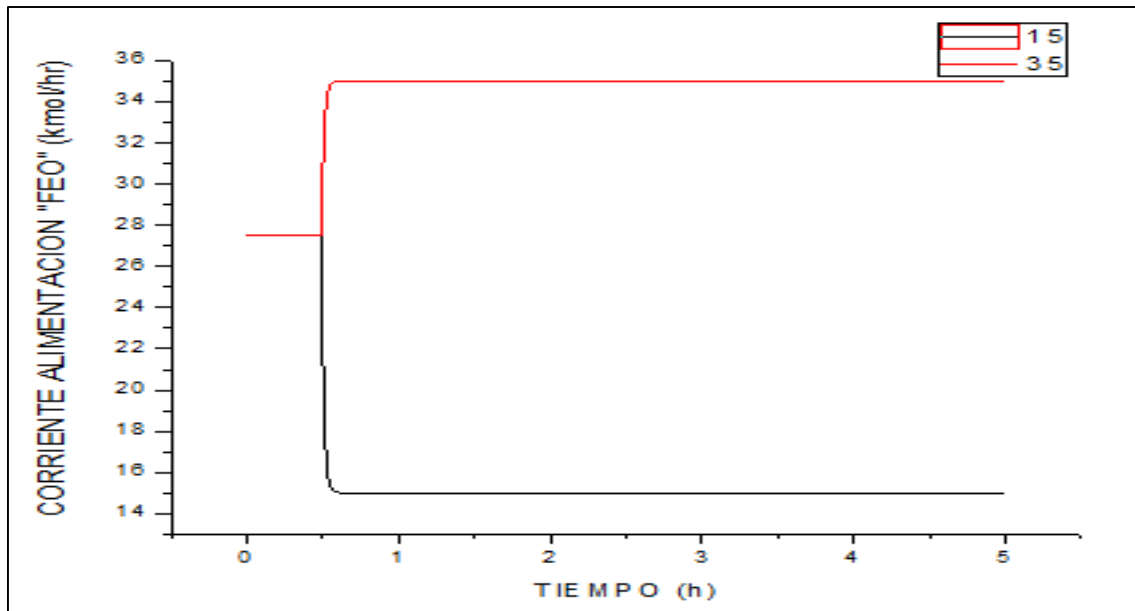


Figura 221.- Perturbación en corriente FEO - Etilenglicol destilación reactiva

En cuanto a la respuesta dinámica en la alimentación fresca de agua, el lazo de control no emplea una medición directa de flujo en la corriente de agua. Este lazo ajusta la alimentación de agua, mediante la medición del nivel en el tanque de condensados. Esto se debe a que la parte superior de la columna está llena en su mayoría por agua pura, por lo que, el nivel en el tanque de condensados provee una buena medición de la cantidad de agua dentro de la columna. La Figura 222 muestra la respuesta en este lazo de control.

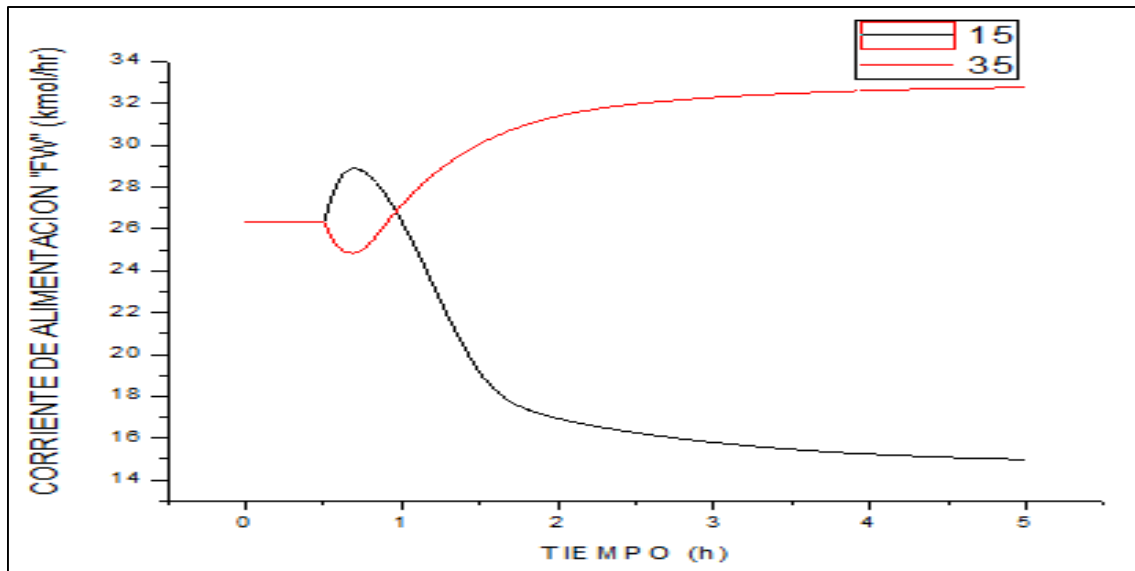


Figura 222.- Respuesta ante perturbación en la corriente de agua FW -Etilenglicol destilación reactiva

En la Figura 222 se observa como la perturbación en la corriente de óxido de etileno afecta a la corriente de agua fresca. La estequiometría de reacción requiere que las cantidades de ambos reactivos estén bien proporcionados. Esto se traduce en que cualquier aumento en la corriente de óxido de etileno debe provocar un aumento en la corriente fresca de agua debido a los lazos de control y viceversa.

En la siguiente figura se muestra la respuesta ante la perturbación en la corriente de fondo (Figura 223). Puede esperarse que el aumentar o disminuir la alimentación a la columna, ocurra un cambio similar en la corriente de fondo, debido a que en la especificación de la columna, no hay corriente de destilado.

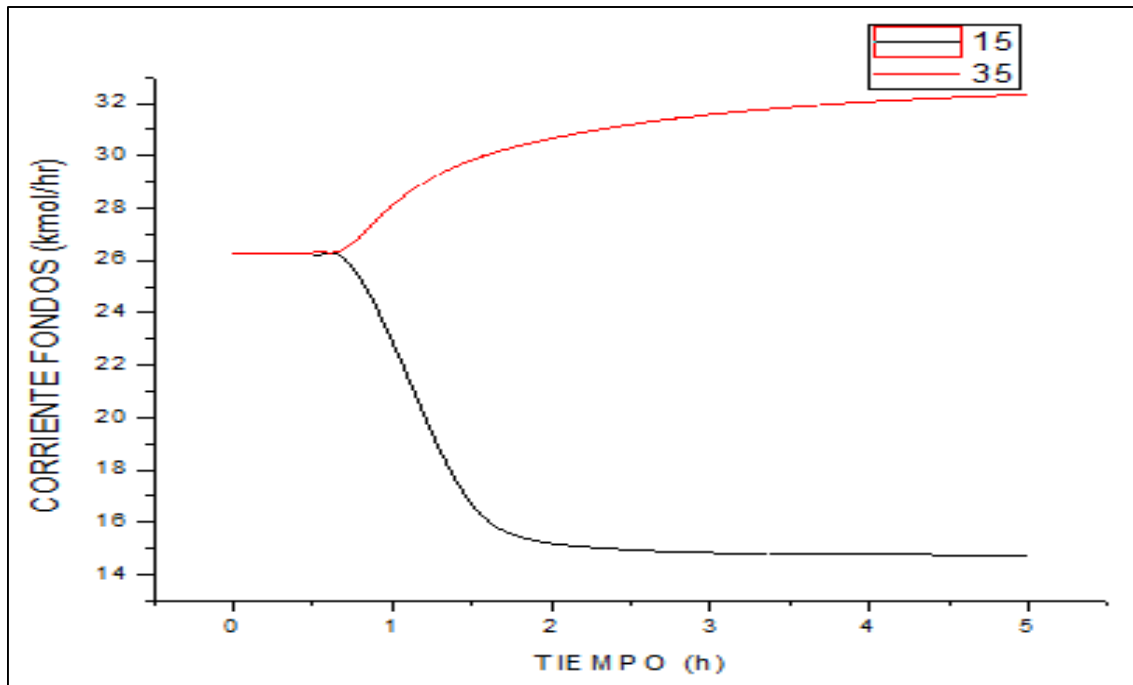


Figura 223.- Respuesta ante perturbación corriente de fondos – Etilenglicol destilación reactiva.

El efecto contrario se presenta en la composición de etilenglicol de la corriente de fondo. La Figura 224 muestra la respuesta dinámica ante la perturbación en la fracción molar de etilenglicol. El aumento en la alimentación de óxido de etileno provoca que la pureza de etilenglicol disminuya, debido a que aumenta la velocidad de producción, disminuyendo el tiempo que la mezcla permanece dentro de la columna, además de que la reacción principal se ve favorecida en concentraciones de óxido de etileno bajas en presencia de exceso de agua. Esta disminución de pureza es aproximadamente del 1% con respecto a la especificación de 90% requerida de producto principal. Esto indica que la implementación de un lazo de control indirecto para la composición es preferible, en comparación con la complejidad de un lazo de control directo de la composición dentro de la columna.

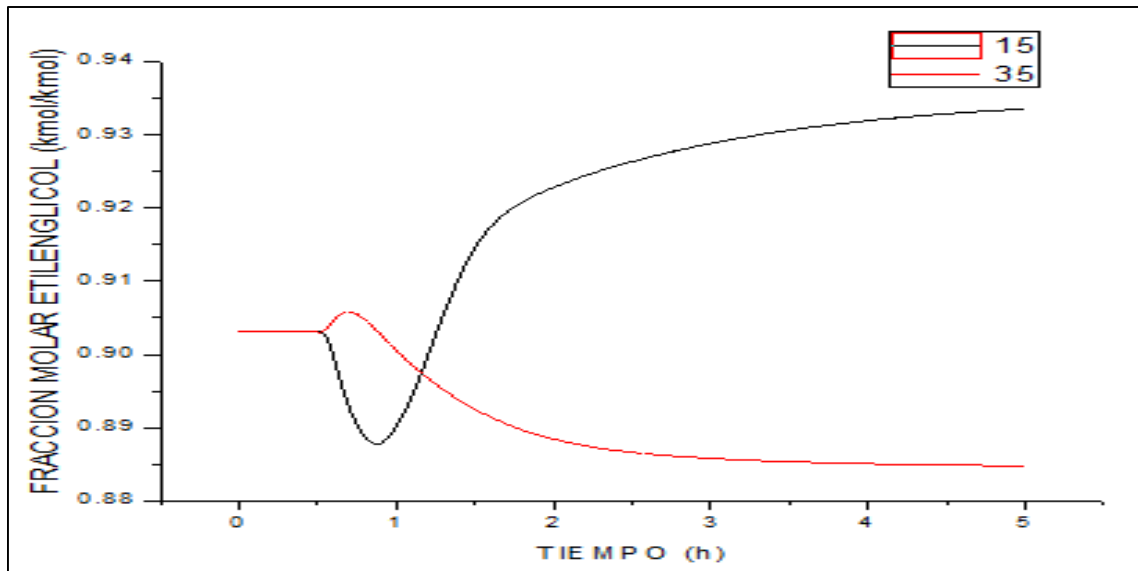


Figura 224.- Respuesta ante perturbación en fracción molar de Etilenglicol - Etilenglicol destilación reactiva

Es posible observar también que la composición de etilenglicol en el fondo de la columna aumenta conforme la alimentación disminuye. Esto debido a la naturaleza de la reacción, viéndose favorecida en concentraciones bajas de óxido de etileno. Este aumento es hasta del 3% de pureza de etilenglicol en un tiempo aproximando de 2.5 horas, posteriormente los cambios son prácticamente despreciables.

Ahora, se presentan las respuestas ante las perturbaciones de las variables energéticas. En la Figura 225, se muestra la respuesta en el plato número 10 de la columna reactiva. El objetivo de este lazo de control, es el que la temperatura vuelva al valor de SetPoint, ya que si disminuye la temperatura, mayor cantidad de agua saldrá por el fondo de la columna, afectando la calidad de etilenglicol.

Se observa en la gráfica de la temperatura, que el sistema de control puede devolver la temperatura al valor de SetPoint deseado en un tiempo aproximado de 2.5 horas.

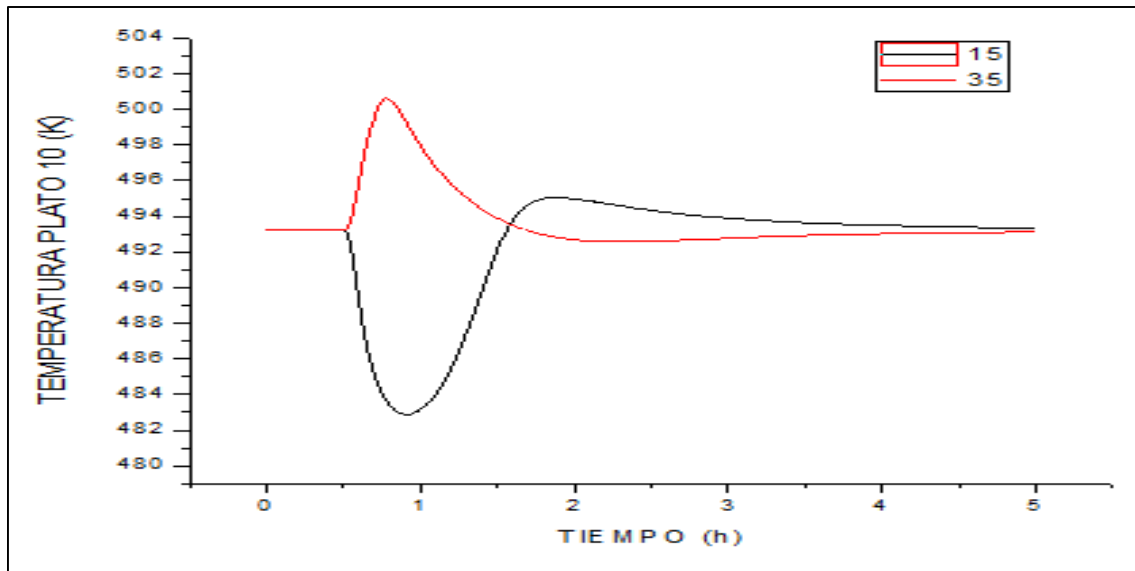


Figura 225.-Respuesta ante perturbación temperatura Plato 10 – destilación reactiva.

Dos variables directamente relacionada con la temperatura son la carga térmica en el rehervidor y condensador, ya que los cambios en la temperatura influyen directamente en la cantidad de energía de debe ser añadida al rehervidor y posteriormente, la cantidad de energía removida en el condensador. La Figura 226 y 227 muestran estas gráficas de respuesta. En primera instancia se pueden observar los cambios que se llevan a cabo en el rehervidor ante la perturbación en la alimentación de óxido de etileno. En este lazo de control se observa una respuesta más rápida de parte de los controladores, llevando al proceso a un estado estacionario en un tiempo menor a 2 horas. De manera similar en la Figura 227 se presenta la gráfica de control correspondiente a la carga térmica removida en el condensador. Esta variable regresa al valor de SetPoint deseado en un tiempo aproximado de 2 horas ante los cambios en la alimentación de óxido de etileno.

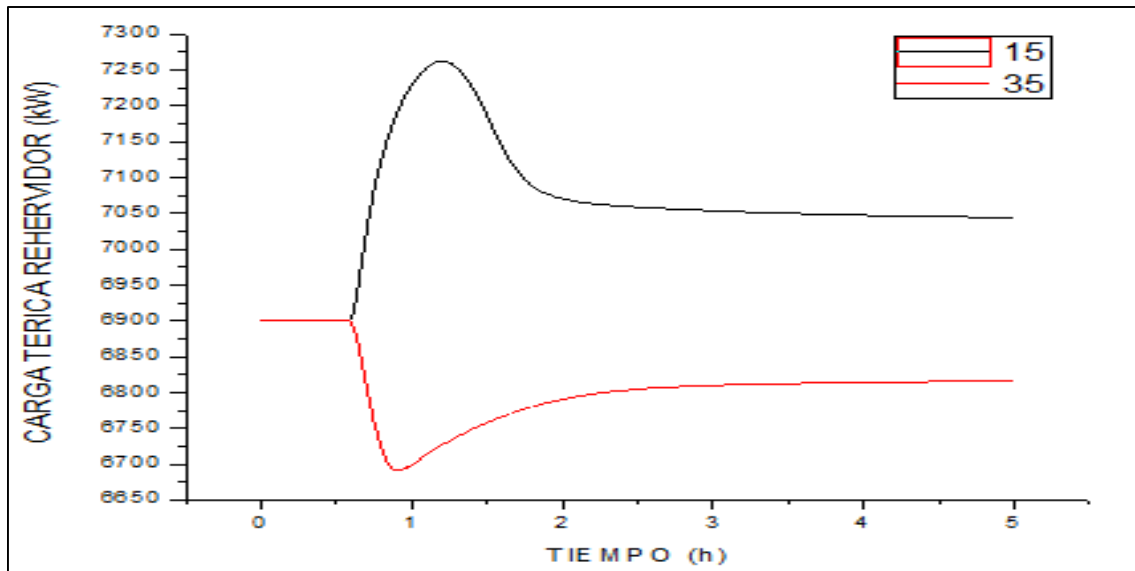


Figura 226.- Respuesta ante perturbación en la carga térmica de rehervidor – destilación reactiva.

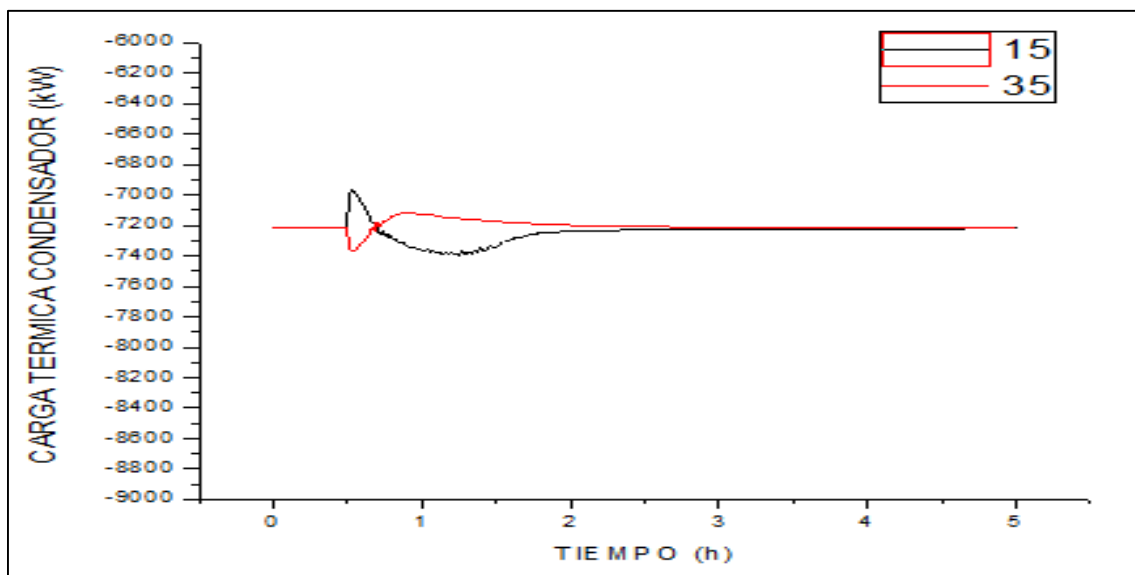


Figura 227.- Respuesta ante perturbación en condensador – destilación reactiva.

Las gráficas anteriores muestran que el sistema de control es efectivo en el manejo de perturbaciones grandes en la corriente de alimentación de óxido de etileno, logrando mantener la fracción molar de etilenglicol alrededor del 90%.

A continuación se muestran las respuestas del sistema de control ante la perturbación de tipo servo en el SetPoint de la temperatura del plato número 10 de la columna reactiva, y el efecto que produce sobre la fracción molar de Etilenglicol.

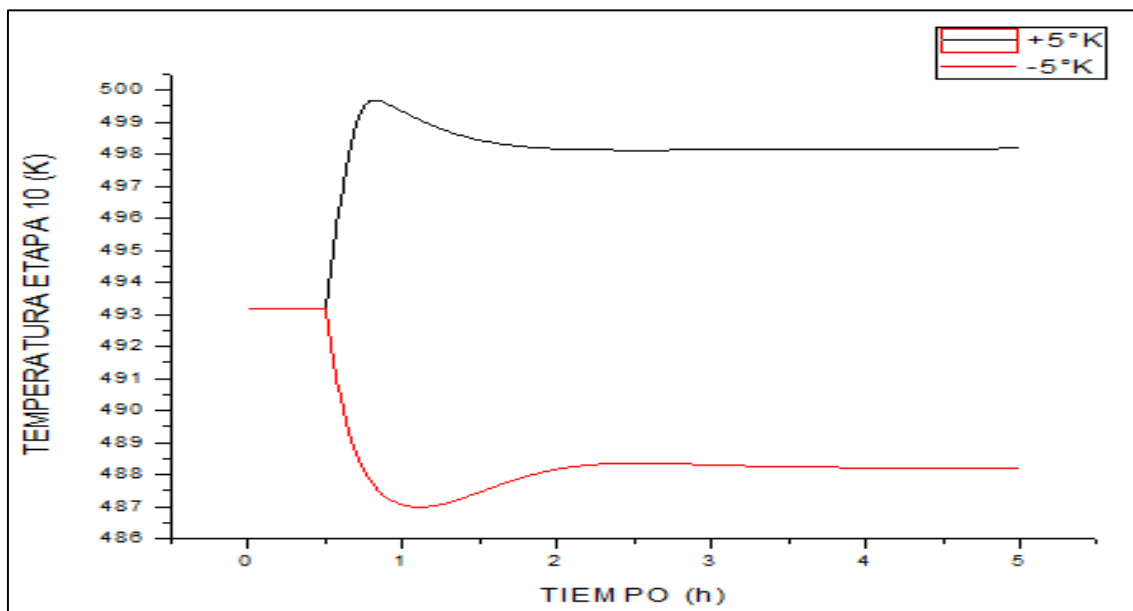


Figura 228.- Perturbación en  $\pm 5^\circ\text{K}$  SetPoint en plato 10 columna destilación – Etilenglicol destilación reactiva.

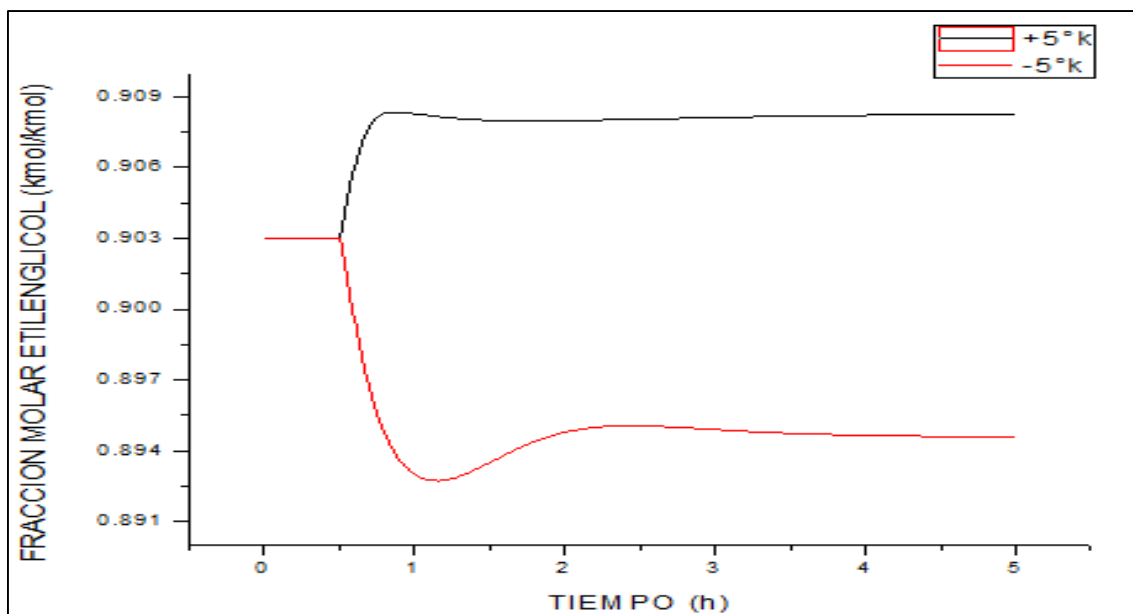


Figura 229.- Fracción molar de Etilenglicol ante perturbación servo – Etilenglicol destilación reactiva.

La Figura 229 muestra la respuesta ante la perturbación servo en la fracción molar de Etilenglicol, es posible observar que se produce un cambio en la magnitud de la fracción molar hasta del 0.15% cuando el sistema de control alcanza un nuevo estado estacionario, y manteniendo por arriba del 89% la pureza de etilenglicol.

### 3.3.5.3.- Simulación en estado dinámico – Destilación reactiva – No equilibrio

El último proceso al que se evalúa el desempeño dinámico, es el correspondiente a la simulación de la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio. Los lazos de control tienen la misma estructura que para la sección anterior con etapas de equilibrio y de la misma forma, la perturbación propuesta para analizar la respuesta de los controladores, es el cambio escalón de 27.53 kmol/h a 15 y 35 kmol/h respectivamente en un tiempo de 0.5 horas.

En primer lugar observemos si el sistema de control establecido en la columna reactiva es capaz de mantener la calidad de etilenglicol en ausencia de perturbación alguna en el proceso.

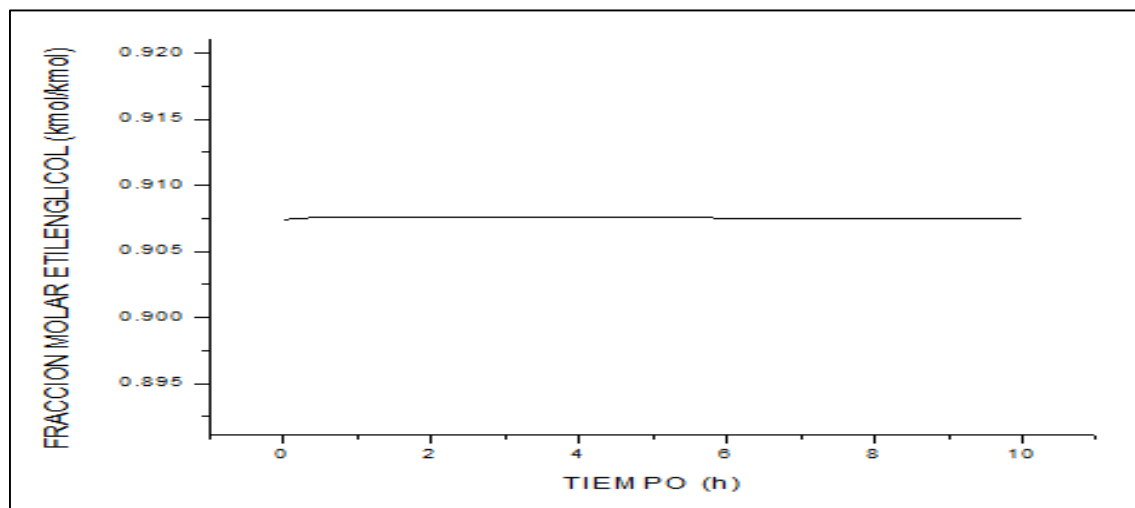


Figura 230.- Fracción molar de Etilenglicol con respecto al tiempo - Etilenglicol destilación reactiva NEQ dinámico

La fracción molar de etilenglicol logra mantenerse en 90% con el sistema de control establecido en ausencia de perturbación, por lo que ahora es posible someter al proceso a la perturbación en la alimentación para observar así las respuestas de los lazos de control, variables controladas y monitoreadas.

### 3.3.5.3.1.- Pruebas de control y perturbaciones al proceso

La gráfica de respuesta ante la perturbación escalón en la alimentación es igual a la mostrada en la Figura 231.

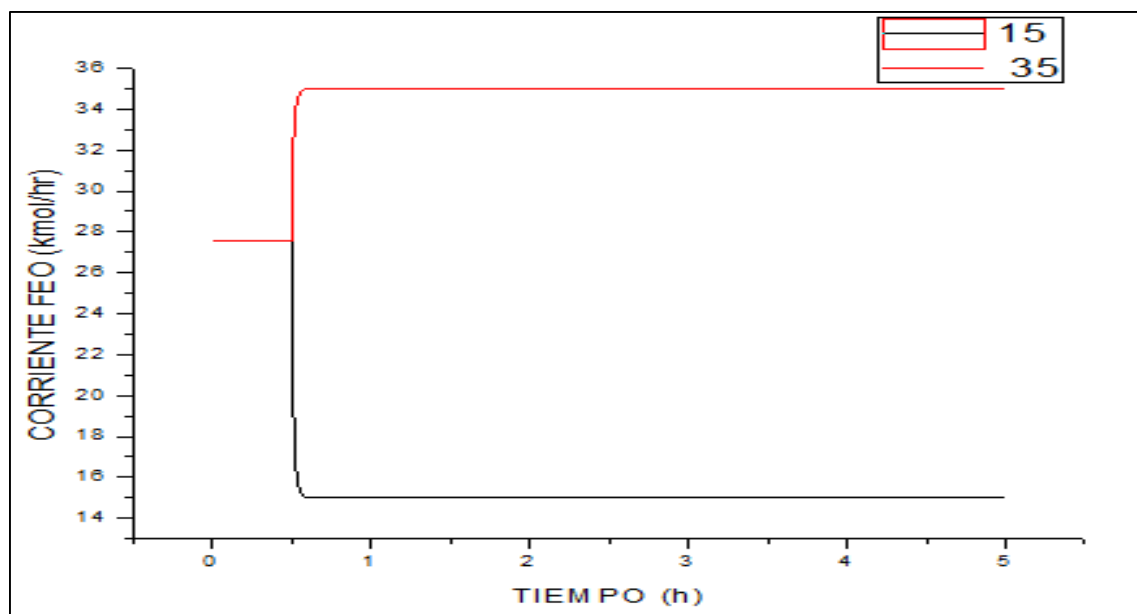


Figura 231.- Perturbación en corriente FEO - Etilenglicol destilación reactiva NEQ

El cambio escalón en la alimentación fresca de óxido de etileno, modifica la cantidad de agua fresca como se muestra en la Figura 232, debido al lazo de control de nivel en el tanque de condensados de la columna reactiva.

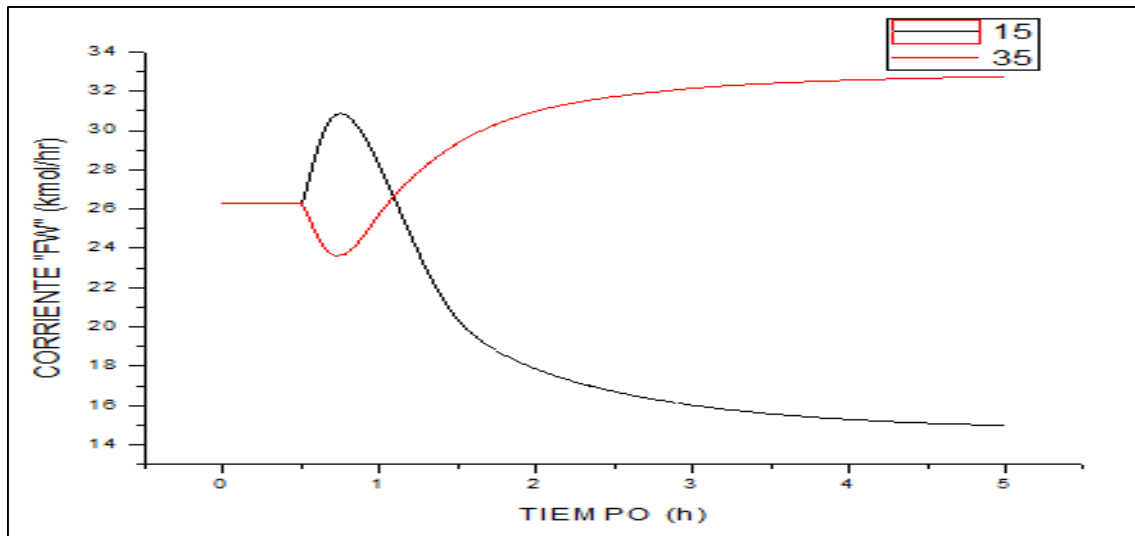


Figura 232.- Respuesta ante perturbación en corriente "FW" – Etilenglicol destilación reactiva NEQ

De forma similar a la respuesta mostrada en la corriente de fondos en la columna con etapas de equilibrio, cuando se aumenta o disminuye la alimentación a la columna reactiva, se presenta una respuesta correspondiente al cambio. En otras palabras, si el flujo de alimentación aumenta, la corriente de fondos aumenta, y viceversa. Esta respuesta se muestra en la Figura 233.

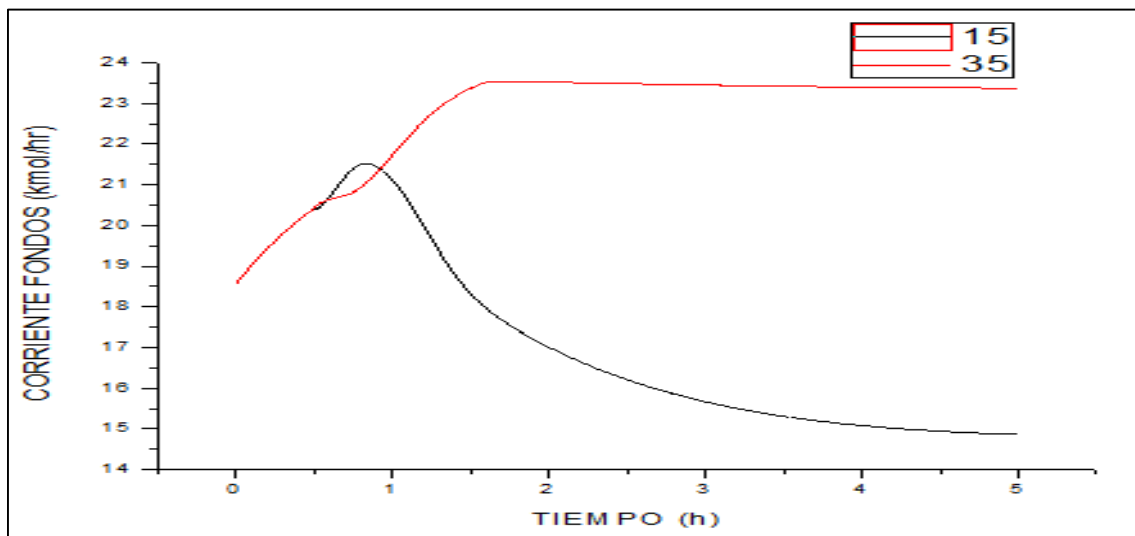


Figura 233.- Respuesta ante perturbación corriente fondos – Etilenglicol destilación reactiva (RBM).

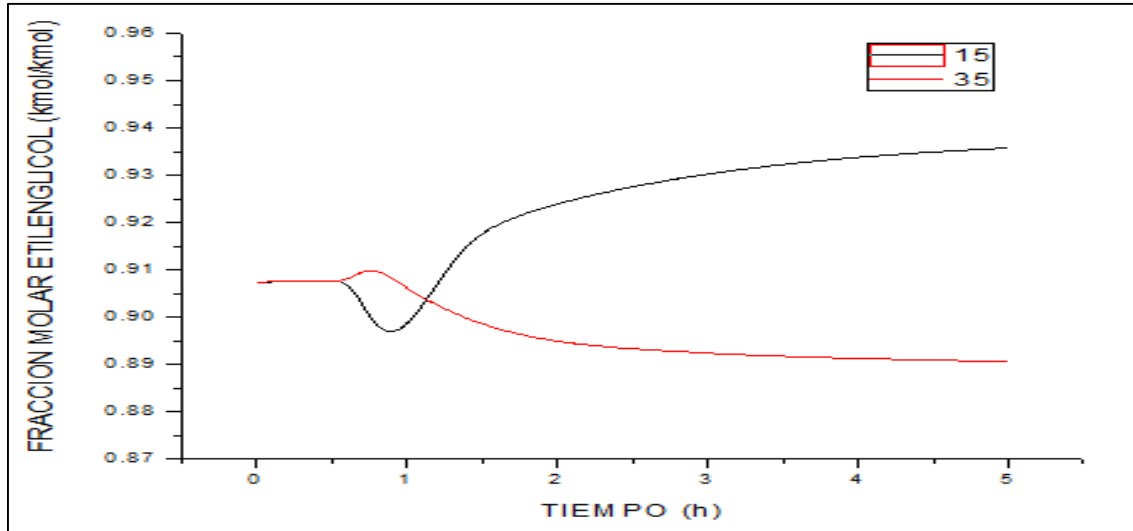


Figura 234.- Respuesta ante perturbación fracción molar de Etilenglicol – Etilenglicol destilación reactiva NEQ.

El perfil de respuesta de la Figura 234 muestra que existe una diferencia sutil en el control de la pureza de etilenglicol (menor al 1%), cuando la perturbación en la alimentación a la columna aumenta. En sentido contrario, la pureza de nuestro producto aumenta cuando la perturbación disminuye la alimentación fresca de óxido de etileno, debido a la naturaleza de la reacción. Esta respuesta es la más importante debido a que se ve relacionada directamente con la calidad del producto principal etilenglicol, de ser necesario, es posible establecer un lazo de control extra de composición con la finalidad de que la fracción mol de etilenglicol no baje del 90%, sin embargo, es notable que un lazo de control de composición indirecto logra mantener la pureza del producto de manera prácticamente igual al control directo (1% de diferencia).

A continuación se analizan las respuestas del proceso ante las perturbaciones en las variables energéticas. A diferencia de la columna reactiva con etapas de equilibrio, en el modelo de no equilibrio la temperatura en el plato 17 es controlada, correspondiente a un plato en la sección de agotamiento.

La Figura 235 muestra este gráfico de respuesta, donde se puede observar que el perfil de comportamiento es similar a su análogo del sistema con etapas de equilibrio, sin embargo, las magnitudes de temperatura difieren hasta en 30°K, logrando que el lazo de control devuelva el valor deseado de SetPoint en un tiempo aproximado de 1 hora.

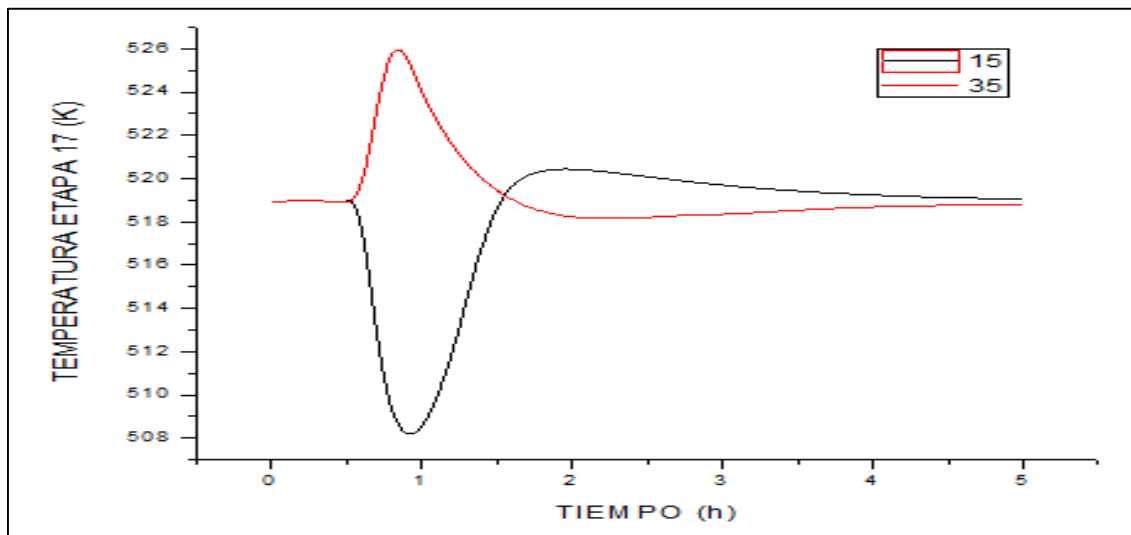


Figura 235.- Respuesta ante perturbación temperatura etapa 17 – Etilenglicol destilación reactiva NEQ.

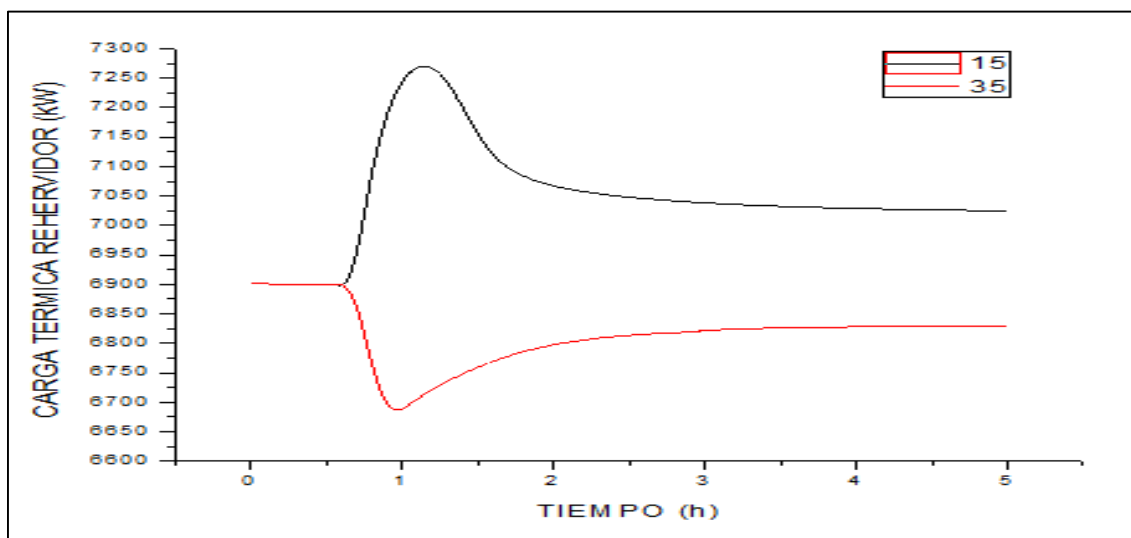


Figura 236.- Respuesta ante perturbación en rehervidor – Etilenglicol destilación reactiva NEQ.

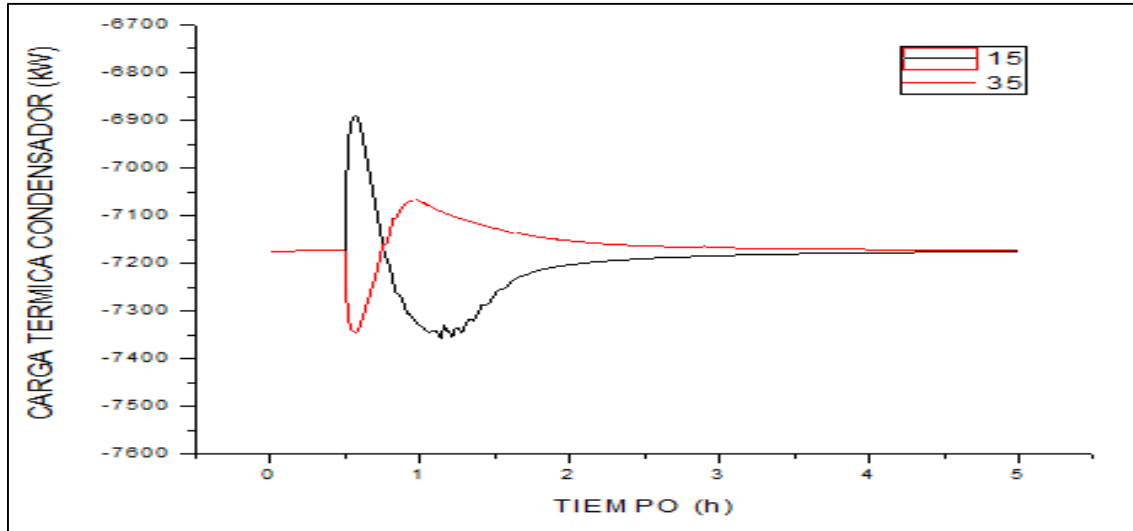


Figura 237.- Respuesta ante perturbación en condensador – Etilenglicol destilación reactiva NEQ

En las Figuras 236 y 237 se muestran las respuestas ante la perturbación, en la carga térmica que deber ser añadida en el rehervidor y la carga térmica que deber ser removida del condensador. En cuanto a la respuesta en el rehervidor, es de esperar que la carga térmica aumente en primera instancia, debido que por un corto periodo de tiempo, la cantidad de agua en la columna es mayor, por lo que se necesita evaporar mayor volumen de agua. Caso contrario en el aumento de la alimentación de óxido de etileno, ya que existe menor cantidad de agua (relación estequiométrica) por un periodo de tiempo corto, entonces el sistema de control disminuye la carga térmica alimentada en el rehervidor. Ambas respuestas en el rehervidor se realizan con la finalidad de mantener las cantidades de reactivos en cantidades proporcionales para llevar a cabo la reacción en la columna.

La respuesta obtenida en el condensador, se observa en la Figura 237. Es importante recordar que en el diseño de la columna de destilación no hay corriente de destilado, por lo que todo el vapor existente en el tope de la columna se condensa y es devuelto a la columna.

La respuesta en la carga térmica del condensador regresa al valor de SetPoint, esto es esperado, debido a que el nivel del tanque de condensados disminuye/aumenta por cortos periodos de tiempo debido a los cambios escalón en la alimentación de la columna, pero los lazos de control logran devolver el valor de SetPoint en el nivel del tanque, y por consiguiente el valor de la carga térmica removida en el condensador al valor de diseño.

A continuación se muestra la respuesta del sistema de control ante la perturbación tipo servo en el SetPoint del controlador de temperatura del plato número 17, y el efecto que esta perturbación produce en la fracción molar de etilenglicol de la corriente de fondos de la columna de destilación reactiva con etapas de no equilibrio.

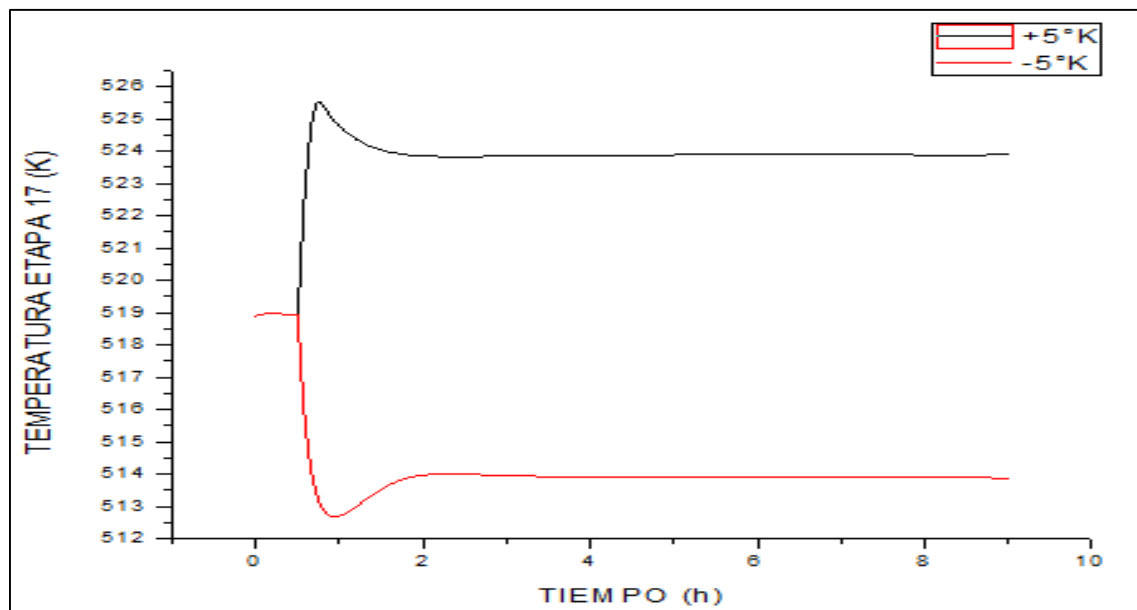


Figura 238.- Perturbación en  $\pm 5^{\circ}\text{K}$  SetPoint en plato 10 columna destilación – Etilenglicol destilación reactiva NEQ.

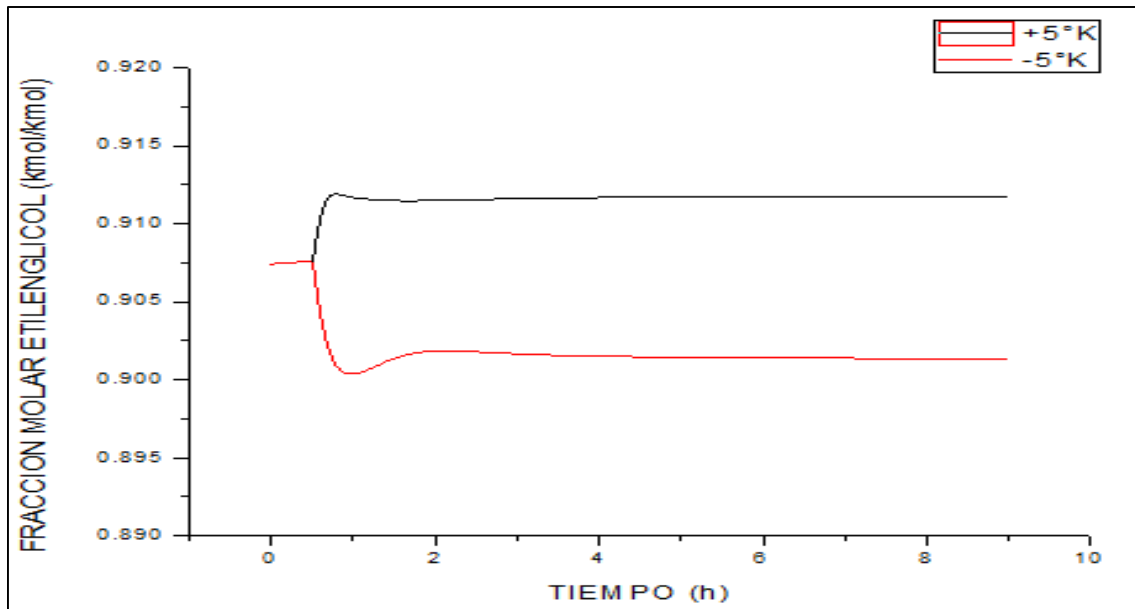


Figura 239.- Fracción molar de Etilenglicol ante perturbación servo – Etilenglicol destilación reactiva NEQ.

En la Figura 239 se muestra la respuesta ante la perturbación servo en la fracción molar de etilenglicol. El sistema de control logra devolver un nuevo estado estacionario en un tiempo aproximado de 1 hora, modificando la magnitud de la fracción mol en 0.13% cuando la perturbación es realizada en ambas direcciones, y manteniendo la calidad de etilenglicol por encima del 90%.

## CONCLUSIONES

Este estudio analiza tres diferentes procesos de obtención de Metil Tert Butil Éter (MTBE), Tert Amil Metil Éter (TAME) y Etilenglicol (EG), demostrando que el empleo de columnas de destilación reactiva es una gran e importante opción para llevar a cabo la intensificación de los procesos convencionales. Además, se propusieron estructuras de control PI que mantienen la pureza de nuestro producto principal dentro de los valores especificados, mediante el balance de las cantidades estequiometrias de los reactivos (Control de flujos) y adaptación de las señales de salida de las variables manipuladas de los distintos controladores.

Estas estructuras de control pueden ser aplicables a otros sistemas de producción, si se realizan modificaciones menores, propias de los requerimientos de cada proceso. Para aquellos sistemas que presenten estequiometria, equilibrio líquido-vapor, diseño y cinética de reacción similares al MTBE, TAME y EG, las estructuras de control pueden ser aplicables tal y como se plantean en este estudio.

La simulación dinámica de procesos químicos empleando las nuevas herramientas computacionales, se ha convertido cada vez más en una necesidad en el diseño y operación de procesos, ya que es posible observar la respuesta ante distintos escenarios de los tres objetivos principales del diseño de una planta de producción; seguridad, estabilidad y economía.

Las simulaciones estacionarias y dinámicas de columnas de destilación reactiva han sido llevadas a cabo bajo los modelos de equilibrio y no equilibrio, mostrando que en comparativa, los perfiles de temperatura para ambos modelos tienen la misma tendencia pero con temperaturas ligeramente mayores en el modelo de no equilibrio. De manera similar, los perfiles de algunos de los componentes involucrados en los sistemas son comparados, mostrando que efectivamente,

existen diferencias significativas que modifican la calidad de nuestros productos principales. Otro aspecto importante, es que las columnas de destilación reactiva logran mantener la calidad de los productos principales dentro de los rangos especificados ante la perturbación tipo servo de la temperatura de un plato, lo cual es algo remarcable en comparativa con los procesos convencionales.

Los esquemas de control establecidos a lo largo de los procesos que emplean destilación reactiva, han demostrado ser muy eficientes en controlar perturbaciones grandes, que van desde el 10 hasta el 50% en las corrientes de alimentación, devolviendo un nuevo estado estacionario en las columnas en tiempos aproximados de 2 horas. Sin embargo, en cuanto a los procesos convencionales de obtención de productos, es necesario llevar a cabo un análisis más profundo, a fin de mejorar las respuestas de los controladores y ampliar la capacidad de control ante perturbaciones en las corrientes de alimentación. Además de que los procesos convencionales no logran mantener la calidad de los productos principales dentro de los rangos especificados ante la perturbación tipo servo de la temperatura de un plato de las columnas de destilación.

El análisis que se presenta en la variación de parámetros es un proceso muy importante porque permite la optimización de los procesos, por lo que Aspen Plus se convierte en una herramienta bastante útil y eficiente al analizar el comportamiento de los procesos ante diferentes condiciones de operación.

En cuanto a las estimaciones económicas de los procesos, se puede constatar que Aspen Icarus (Process Economic Analyzer), es un software bastante útil debido a su capacidad de llevar a cabo evaluaciones económicas muy acertadas en tiempos cortos, ya que para lograr la misma exactitud de Aspen Icarus es necesario contar con ingeniería de detalle, un proceso que puede llevar meses. El tener la capacidad de llevar a cabo evaluaciones económicas en tiempos cortos, permite la

comparación de diferentes esquemas de diagramas de flujo de procesos, en etapas tempranas del diseño, pudiendo descartar algunas opciones sin tener que invertir demasiado tiempo en ellas.

Por último, las herramientas proporcionada por Aspen Tech: Aspen Plus, Aspen Dynamics y Aspen Icarus, han demostrado tener un potencial importante para su aplicación en el ámbito industrial como educativo, ya que permiten su uso en algunos cursos de la carrera de Ingeniería Química, además, diversas universidades emplean simuladores de procesos para el diseño y estudio de esquemas de producción. Por lo anterior, Aspen Tech puede aplicarse para evaluar diseños de plantas de proceso en estado estacionario como dinámico, incluyendo los efectos económicos que se presentan al modificar los esquemas en los diagramas de flujo de proceso.

## Referencias

- A., R., & Hoffmann, U. (1990). Kinetics of methyl tertiary butyl ether liquid phase synthesis catalyzed by ion exchange resin-I. intrinsic rate expression in liquid phase activities. *Chemical Engineering Sciences*, 1605-1616.
- Álamo Cantarero, T. (s.f.). *Diseño del Controlador PID*. Sevilla España: Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática.
- Al-Arfaj, M. A., & Luyben, W. (2002). Control of Ethylene Glycol Reactive Distillation Column. *AIChE Journal*, 905-908.
- Al-Harhi, F. S. (2008). *Modeling and Simulation of a Reactive Distillation Unit for Production of MTBE*. Kingdom of Saudi Arabia: King Saud University.
- Almeida-Rivera, C. P. (2005). *Designing Reactive Distillation Processes With Improved Efficiency*. Quito Ecuador: Escuela Politécnica Nacional, Ecuador.
- Babu, A., & Babasaheb, L. (2014). Dynamics of Ethyl Benzene Synthesis Using Aspen Dynamics. *International Journal of Scientific Engineering and Technology*, 946-950.
- Branan, C. (2002). *Rules of thumb for chemical engineers*. Massachussets: GPP.
- Buckley, P. S., Luyben, W., & Shunta, J. (1985). *Design of Distillation Column Control Systems*. North Carolina: Instrument Society of America.
- Cárdenas Guerra, J., Pérez Cisneroz, E., Hernández Castro, S., & Cárdenas Rivera, J. C. (2012). Metodología Global Para el Diseño de Procesos de Destilación Reactiva. *Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química AMIDIQ*, 2835-2842.
- Cesca, M. R., Saba, R. A., Ingaramo, A. P., & Melquíades Vera van Gel-deren, E. (2016). *Control de Procesos - Carrera de Ingeniería Química*. Obtenido de Control de Procesos - Carrera de Ingeniería Química: [http://www.herrera.unt.edu.ar/controldeprocesos/tema\\_4/Tp4a.pdf](http://www.herrera.unt.edu.ar/controldeprocesos/tema_4/Tp4a.pdf)
- Ciric, A., & Gu, D. (1994). Synthesis of NonEquilibrium Reactive Distillation Process by MINLP optimization. *Alche J.*, 1479.

- Cortez Sanches, M. E., Hernández Flores, J. C., Millan Bolaños, F., & Rios Velazquez, J. (2011). *Producción de Anhídrido Ftálico*. Ciudad de México: UPN.
- Departamento de control, División de Ingeniería Eléctrica. (2006). *Reglas de sintonía de controladores PID*. Ciudad de México: Facultad de Ingeniería UNAM.
- Douglas, J. M. (1988). *Conceptual Design of Chemical of Chemical Processes*. New York: McGraw-Hill.
- Elkanzi E, M. (1996). Optimization of MTBE synthesis in a fixed-bed reactor system. *Chemical engineering and processing*, 131-139.
- Esquivel Elizondo, J. (2007). *Evaluación Económica Preliminar de Plantas Químicas Usando Aspen Icarus Process Evaluator 2004.2*. Puebla, México: UDLAP.
- Flores Tlacuahuac, A. (Dirección). (2014). *Ethyl Benzene Full Plant Simulaion* [Película].
- Inc., S. S. (1995). *PRO/II Casebook Methyl Tertiary Butyl Ether (MTBE) Plant*. SIMSCI, Simulation Sciences.
- Jacobs, R., & Krishna, R. (1993). Multiple Solutions in Reactive Distillation for Methyl tert-Butyl Ether Synthesis. *American Chemical Society*, 1706-1709.
- Jana, A. K. (2009). *Process Simulation and Control Using ASPEN*. New Delhi: PHI Learning Private Limited.
- Jana, A. K. (2012). *Process Simulation And Control Using Aspen*. New Delhi: PHI Learning Private Limited.
- Kaymak, D. B., & Luyben, W. (2008). Quantitative Comparison of dynamic controllability between a reactive distillation column and a conventional multi-unit process. *Computers & chemical engineering*, 1456-1470.
- Kim, S., & Douglas, P. (2002). Optimisation of Methyl Tert-Butyl-Ether (MTBE) Synthesis Processes using Aspen Plus. *Chem. Eng Mineral Process*, 89-103.
- Kumar, A., & Daoutidis, P. (1999). Modeling, Analysis and Control of Ethylene Glycol Reactive Distillation Column. *AIChE*, 45, 51.

- Kumar, A., & Daoutidis, P. (1999). Modelling, Analysis and Control of Ethylene Glycol Reactive Distillation Column. *AIChE J.*, 45, 51.
- L. Luyben, W. (2002). *Plantwide Dynamic Simulators in Chemical Processing and Control*.
- Lara, R. O. (2013). *Simulación y control de un sistema reactor separador*. Puebla, Puebla: Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.
- Lidderdale, T. C. (2001). *MTBE Production Economics*.
- Luyben L., W. (2006). *Distillation design and control using Aspen Simulation*. New Jersey: Jon Wiley & Sons.
- Luyben, W. L. (2002). *Plantwide Dynamic Simulators in Chemical Processing and Control*.
- Luyben, W. L. (2004). Use of dynamic simulation to converge complex process flowsheets. *Chemical Engineering Education*, 142-149.
- Luyben, W. L. (2004). Use of dynamic simulation to converge complex process flowsheets. *Chemical Engineering Education*, 142-149.
- Luyben, W. L. (2006). *Distillation Design and Control Using Aspen Simulation*. New Jersey: John Wiley & Sons.
- Luyben, W. L. (2006). *Distillation Design And Control Using Aspen Simulation*. Bethlehem, Pennsylvania: John Wiley & Sons, Inc.
- Luyben, W. L. (2008). *Reactive Distillation Design and Control*. New Jersey: Wiley & Sons.
- Luyben, W. L. (2010). *Design and control of distillation systems for separating azeotropes*. New Jersey: John Wiley.
- Luyben, W. L., Kristan, M., Michael, R., & Cory, S. (2004). Design and Control of conventional and Reactive Distillation Processes for the Production of Butyl Acetate. *American Chemical Society*, 8014-8025.
- Luyben, W. L., Tyréus, B., & Michael L. Luyben. (1999). *Plantwide Process Control*. New York: McGraw-Hill.
- M. Strump, W., Ares, N., & C. Hurford, A. (2004). A taxonomy of generative activity design supported by next generation classroom networks. *Psychology of mathematics Education*, 837-846.

- Navas Herrera, S. J. (s.f.). *Control de columnas de destilación*.
- Panda, D., & kannan, A. (2014). Equilibrium and Rate Based simulation of MTBE Reactive Distillation Column. *International Journal of Chemical, Molecular, Nuclear, Materials and Metallurgical Engineering.*, 1046-1052.
- Panda, D., & Kannan, A. (2014). Equilibrium and Rate Based Simulation of MTBE Reactive Distillation Column. *International Scholarly and Scientific Research & Innovation*, 1046-1052.
- Pardo, C. (2 de 04 de 2016). *Programación con Arduino*. Obtenido de Programación con Arduino: <http://www.picuinio.com/es/arduprog/control-pid.html>
- Perry, R. H., & Chilton, C. (1973). *Chemical engineers handbook*. Auckand: McGraw-Hill.
- Peter, M. S., & Timmerhaus, K. (1968). *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. New York: McGraw-Hill.
- Rangaiah, G. P., & Vinay Kariwala. (2012). *PLantwide Control Recent Developments and Applications*. United Kingdom: WILEY.
- Sánchez-Daza, O., Pérez-Cisneros, E., Ortíz-Muñoz, E., & Luna-Ortega, C. (2006). Design of kinetically controlled reactive distillation processes case: Pentene Methathesis. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 129-135.
- Schrans, S., & De-Wolf, S. (1996). Dynamic Simulation of Reactive Distillation; an MTBE Case study. *Elsevier Science Ltd.*, 1619-1624.
- Seader, J. D., & Lewin, D. R. (2011). *Separation Process Principles*. United States: Wiley.
- Sneesby, M. G. (1998). *Simulation and control of reactive distillation*. Curtin, Australia: University of Technology Curtin.
- Stephanopoulos, G. (s.f.). *Chemical Process Control - An Introduction to Theory and Practice*. New Jersey: Prentice Hall.
- Subawalla, H., & Fair, J. (1999). Design Guidelines for Solid-Catalyzed Reactive Distillation Systems. *American Chemical Society*.
- Sudibyo, M. N., & Aziz, N. (2011). Simulation Studies of Methyl Tert-Butyl Ether Production in Reactive Distillation. *Computing and Engineering*, 369-374.

- Taylor, R., & Krishna, R. (2000). Modelling reactive distillation. *Chemical Engineering Science*, 5183-5229.
- Tech, M. (2016). Standard PID Tuning Methods. Michigan, Michigan, United States.
- Turton, R., Baile, R., Whiting, W., Shaeiwitz, J., & Bhattacharyya, D. (2012). *Analysis, synthesis and design of chemical processes*. . United States: Prentice Hall.
- Ullman, F. (1993). *Ullman's encyclopedia of industrial chemistry*. Germany: Weinheim.
- Villajulca, J. C. (11 de Mayo de 2011). *Instrumentación y control*. Obtenido de Instrumentación y control: <http://www.instrumentacionycontrol.net/cursos-libres/automatizacion/curso-sintonizacion-controladores/item/376-introducci%C3%B3n-a-la-sintonizaci%C3%B3n-de-controladores-conociendo-a-los-procesos-primero.html>
- W.-B, S., & J.-R., C. (2000). Modeling and Simulation of Tubular Reactor in the tert-Amyl Methyl Ether Synthesis Process. *American Chemical Society*, 4140-4147.
- Walas, S. M. (1990). *Chemical Process Equipment: Selection and design*. United States: Butterworth-Heinmann.
- Young H., J., & Tae-hee, L. (2003). Dynamic simulation for reactive distillation with ETBE synthesis. *Separation and Puerification Technology*, 301-317.