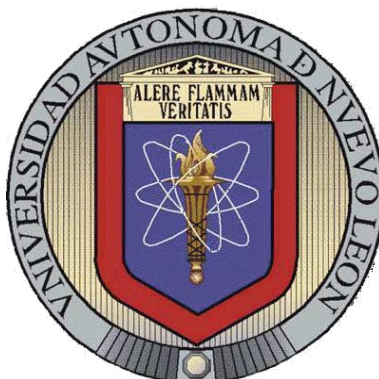


**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**



**DISEÑO Y CONTROL DE UN SISTEMA DE DESTILACIÓN
EXTRACTIVA CONSOLIDADA LATERAL PARA LA
DESHIDRATACIÓN DEL ETANOL**

**POR
EDUARDO DANIEL GARCÍA REYES**

**COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL
GRADO DE MAestrÍA EN CIENCIAS CON ORIENTACIÓN
EN PROCESOS SUSTENTABLES**

MAYO, 2020

**Diseño y control de un sistema de destilación
extractiva consalida lateral para la deshidratación
del etanol**

Aprobación de la Tesis

**Dr. Salvador Tututi Ávila
Director de Tesis**

**Dra. Ma. Elena Cantú Cárdenas
Subdirectora de Estudios de
Posgrado**

**Dr. Oscar Francisco Huerta
Guevara Comité Tutorial**

**Dr. Ricardo Gómez González
Comité Tutorial**

**Dr. José Ángel Loredó
Medrano Comité Tutorial**

DEDICATORIA

A mi madre y a mis hermanos

Por su apoyo en gran parte de mi vida y participación en el crecimiento de mi persona.

*A todas las personas vivas o muertas que influyeron
en mi persona para ser lo que soy hoy*

Una persona se construye a base de encuentros y experiencias a través de su vida.

AGRADECIMIENTOS

A mi asesor el Dr. Salvador Tututi Ávila

Agradezco la oportunidad que me ofreció, así como todo este tiempo que estuvo apoyándome para la realización de este proyecto.

Al Dr. Luis Ricárdez Sandoval y la Dra. Mina Rafiel

Por recibirme en la Universidad de Waterloo y apoyarme con sus conocimientos para completar y mejorar este proyecto de tesis.

A mis compañeros de departamento y amigos de universidad

por su compañerismo y apoyo.

A CONACYT por la beca otorgada

ya que sin su financiamiento este proyecto no se pudo haber realizado.

GRACIAS

TABLA DE CONTENIDO

Sección	Página
AGRADECIMIENTOS	IV
LISTA DE TABLAS	VII
LISTA DE FIGURAS	VIII
NOMENCLATURA	X
RESUMEN	X1
ABSTRACT	XII
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Biocombustibles.....	1
1.2 Deshidratación del etanol.....	2
1.3 Control de las columnas de destilación.....	5
1.4 Aportación científica.....	6
1.5 Objetivos de la tesis.....	6
1.5.1 Objetivo general.....	6
1.5.2 Objetivos específicos.....	6
1.6 Hipótesis.....	6
2. ANTECEDENTES	7
2.1 Sistema convencional de destilación extractiva.....	7
2.2 Sistemas mejorados de destilación.....	8
2.3 Solventes.....	9
2.4 Optimización.....	10
2.4.1 Algoritmos Genéticos.....	11
2.5 Sistemas de control.....	13
2.5.1 Análisis de sensibilidad.....	15
3. METODOLOGÍA	17
3.1 Diseño del sistema.....	17

3.2 Optimización del sistema.....	19
3.2.1 Función objetivo y restricciones del sistema.....	20
3.3 Control de sistema.....	21
3.3.1 Transición de un sistema en estado estable a dinámico.....	21
3.3.2 Análisis de sensibilidad.....	22
3.3.3 Sintonización de controladores.....	22
3.3.4 Simulación dinámica/Prueba de la estrategia de control.....	24
4. RESULTADOS Y DISCUSIONES.....	25
4.1 Diseños óptimos y resultados.....	25
4.2 Análisis de sensibilidad.....	28
4.2.1 Sistema convencional.....	28
4.2.2 Sistema CPD.....	30
4.2.3 Sistema alternativo.....	31
4.3 Esquemas de control propuestos.....	32
4.3.1 Sistema convencional.....	33
4.3.2 Sistema columna con pared divisoria.....	34
4.3.3 Sistema alternativo.....	36
4.4 Respuestas de las estrategias de control.....	38
5. CONCLUSIONES.....	51
LITERATURA CITADA.....	53
APÉNDICE.....	56
APÉNDICE.1 Criterio de pendiente.....	57
APÉNDICE.2 Método Back-Off.....	59
RESUMEN BIOGRÁFICO.....	68

LISTA DE TABLAS

	Tabla	PÁGINA
1	Datos estructurales y variables de diseño de las columnas y resultados más relevantes de los diseños óptimos de los tres sistemas estudiados.	27
2	Parámetros de los controladores de temperatura para el sistema convencional.	33
3	Parámetros de los controladores de temperatura para el sistema CPD.	35
4	Parámetros de los controladores de temperatura para el sistema alternativo.	37

LISTA DE FIGURAS

	Figura	PÁGINA
1.	Configuración convencional para el sistema de destilación extractiva	4
2.	Sistemas mejorados de destilación extractiva	4
3.	Perfil de composición en una columna de destilación del componente intermedio en una mezcla ternaria.	8
4.	Esquema general de un algoritmo genético	12
5.	Diagrama de bloques de un controlador PID con retroalimentación.	15
6.	Especificaciones del módulo Radfrac (a) y Heater (b)	18
7.	Uso de la herramienta Design Spec	18
8.	Ejemplo de prueba de sintonización	23
9.	Diagrama de proceso del sistema convencional para la deshidratación de etanol	25
10.	Diagrama de proceso del sistema CPD para la deshidratación de etanol	26
11.	Diagrama de proceso del sistema alternativo para la deshidratación de etanol	26
12.	Perfiles de ganancia de la columna C1 del sistema convencional	29
13.	Perfiles de ganancia de la columna C2 del sistema convencional	29
14.	Perfiles de ganancia de la columna principal C1 para el sistema CPD	30
15.	Perfiles de ganancia de la columna acoplada C2 para el sistema CPD	31
16.	Perfiles de ganancia de la columna C1 para el sistema alternativo	31
17.	Perfiles de ganancia de la columna C2 para el sistema alternativo	32
18.	Estrategia de control propuesta para el sistema convencional	34
19.	Estrategia de control propuesta para el sistema CPD	35
20.	Estrategia de control propuesta para el sistema alternativo	37
21.	Cambios observados en el flujo F1 en los tres sistemas ante las diferentes perturbaciones realizadas.	38
22.	Gráfica comparativa de la composición de etanol de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en el flujo de alimentación de +20%	39
23.	Gráfica comparativa de la composición de etanol de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en el flujo de alimentación de -20%	39
24.	Gráfica comparativa de la composición de etanol de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en la composición de alimentación de +0.04 etanol	40

25.	Gráfica comparativa de la composición de etanol de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en la composición de alimentación de -0.04 etanol	41
26.	Gráfica comparativa de la composición de agua de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en el flujo de alimentación de +20%	42
27.	Gráfica comparativa de la composición de agua de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en el flujo de alimentación de -20%	43
28.	Gráfica comparativa de la composición de agua de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en la composición de alimentación de +0.04 etanol	44
29.	Gráfica comparativa de la composición de agua de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en la composición de alimentación de -0.04 etanol	44
30.	Respuestas dinámicas ante un cambio de flujo en F1 en el sistema convencional	45
31.	Respuestas dinámicas ante un cambio de composición en F1 en el sistema convencional	46
32.	Respuestas dinámicas ante un cambio de flujo en F1 en el sistema CPD	47
33.	Respuestas dinámicas ante un cambio de composición en F1 en el sistema CPD	48
34.	Respuestas dinámicas ante un cambio de flujo en F1 en el sistema alternativo	49
35.	Respuestas dinámicas ante un cambio de composición en F1 en el sistema alternativo	50
36.	Perfiles de temperatura para el criterio de pendiente del sistema convencional	56
37.	Perfiles de temperatura para el criterio de pendiente del sistema CPD	57
38.	Perfiles de temperatura para el criterio de pendiente del sistema alternativo	58
39.	Objetivo del método “back-off”	60
40.	Algoritmo “back-off” para la integración de diseño y control	62
41.	Resultado de la función objetivo (CTA) del sistema convencional en cada iteración realizada	64
42.	Valor de las variables de decisión en cada iteración del algoritmo “back-off”	65
43.	Pureza del producto etanol en cada iteración del algoritmo “back-off”	66
43.	Pureza del subproducto agua en cada iteración del algoritmo “back-off”	66

NOMENCLATURA

DA	Destilación Azeotrópica
DE	Destilación Extractiva
CPD/DW	Columna de Pared
CCEPD	Divisoria
ED-DWC	Columna Extractiva de Pared Divisoria
CTA/TAC	Extractive Distillation Dividing Wall
CTI/TIC	Columna Costo total anual
CTO/TO	Costo total de
CLI	inversión Costo total
Q	de operación Líquido
R	lónico
R	Carga de
R	reboiler Razón
SP	de reflujo
PV	Set point/Valor deseado
R	Process variable/Variable del
C	proceso Controlador de relación
TC	Controlador de
LC	temperatura Controlador
PC	de nivel Controlador de
ESP	presión
	Ecuaciones en serie de potencia

RESUMEN

Este trabajo propone un esquema de control para un sistema de destilación extractiva con salida lateral (sistema alternativo) tomando como caso de estudio la deshidratación del bioetanol. Inicialmente se investigó el diseño óptimo para el sistema convencional de destilación extractiva, así como para una columna extractiva con pared divisoria (CEPD) y el sistema alternativo, minimizando el costo total anual (CTA). Después, para los tres sistemas se estudió el desempeño dinámico a través de esquemas de control de temperatura.

Respecto a los diseños óptimos en estado estable, el sistema alternativo redujo el CTA en un 11.75%, el cual fue ligeramente mayor que el del sistema de la CEPD el cual tuvo una reducción del 10.68% respecto al sistema convencional. En cuanto al desempeño dinámico, se obtuvieron resultados satisfactorios de control con los esquemas de control propuestos en los tres sistemas estudiados, el cual tuvo como objetivo controlar la temperatura de la etapa más sensible para la pureza de los productos en sus valores deseados. El sistema alternativo mostró de forma general menos diferencias de los valores nominales después de aplicar perturbaciones de flujo y composición en la alimentación respecto al sistema de CEPD, aunque al disminuir la composición de etanol en la alimentación este requiere más tiempo en estabilizarse. Se observó que el desempeño dinámico del sistema alternativo fue similar al del sistema convencional.

Los resultados obtenidos en este estudio demuestran que el sistema de destilación extractiva con salida lateral investigado es una alternativa viable para la deshidratación de etanol, ya que redujo los costos de operación y de inversión respecto al sistema convencional y además su desempeño dinámico fue equiparable al de los otros dos sistemas estudiados.

ABSTRACT

This work proposes a control system for an extractive distillation system with a side-stream (alternative system) for ethanol dehydration as a case study. Initially an optimized design for the conventional extractive distillation system, as well for the extractive distillation dividing wall column (ED-DWC) system and the alternative system investigated, minimizing the total annual cost (TAC). The steady-state designs were configured to develop dynamic simulations. Different temperature control configurations were proposed for the three distillation systems.

Results of optimized designs showed that the alternative system reduced the TAC about 11.75%, which is slightly higher than the ED-DWC system which reduced the TAC in 10.68% respect to the conventional system. As far as the dynamic behavior is concerned, the distillation systems demonstrated satisfactory controllability results with the proposed control structures, which objective was to control a suitable temperature stage to infer and maintain purity of the products within desired values. Dynamic responses of the alternative system showed in general less deviations from their nominal values in the face of the imposed disturbances in the feed flow and feed molar composition respect to the ED-DWC system, but lowering the ethanol composition in the feed the alternative system required more time to stabilize. Also, the dynamic results of the alternative system proved to be similar to the conventional system.

The dynamic results obtained in this work demonstrate that the extractive distillation system with a side-stream is a suitable option for ethanol dehydration, as it reduced the costs of operation and investment respect to the conventional system and its dynamic behavior was comparable to the conventional and DWC systems studied.

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Biocombustibles

La necesidad de independizarnos económicamente [1] y minimizar el impacto ambiental [2] de los combustibles fósiles ha impulsado el desarrollo de tecnologías y de productos alternativos como el de los biocombustibles, ya que sus emisiones provienen de fuentes renovables haciéndolas más amigables al medio ambiente, además las emisiones de monóxido de carbono son menores respecto a la de los combustibles fósiles. Además, los precios de los biocombustibles son más estables en comparación con los de la industria de petróleo. Uno de los combustibles alternativos más importantes es el **etanol** o **bioetanol**, denominado así por su uso como biocombustible. Su demanda se ha incrementado para ser usado principalmente como aditivo de combustible de automóvil, inclusive en algunos países su uso es obligatorio por ley como compromiso hacia el medio ambiente, solo en EEUU el consumo de este biocombustible en 2018 fue de 14.38 billones de galones [3]. La mezcla más común de combustible es la conocida como “**E10**” que consiste en un 10% peso etanol y el resto de gasolina [3], sin embargo, existen vehículos conocidos como “flex fuel” que pueden utilizar mezclas de hasta 85% peso etanol.

El etanol se puede obtener mediante la fermentación de diferentes productos agrícolas como lo es el maíz y caña de azúcar o por el aprovechamiento de desechos o subproductos orgánicos denominado “biomasa lignocelulósica”. El bioetanol obtenido de la fermentación, dependiendo de la materia prima utilizada, tiene una concentración aproximada de 5 a 12% en peso, el resto siendo en su mayoría agua; para deshidratar el bioetanol necesita pasar por un proceso de purificación, ya sea para uso industrial o como aditivo de gasolina; las normas internacionales exigen que, para ser usado como biocombustible, este debe tener una pureza mínima de etanol de 99.3% masa y una concentración de agua no mayor a 0.3% masa [4].

1.2 Deshidratación del etanol

El proceso de deshidratación de etanol se divide en dos etapas, la primera etapa consiste en preconcentrar la mezcla cerca del punto azeotrópico mediante un proceso de destilación, en esta etapa se separan los subproductos minoritarios de la sacarificación. En la segunda etapa se busca superar el azeótropo etanol-agua usando un proceso más sofisticado que pueda obtener un producto de etanol que cumpla con las normas para que pueda ser utilizado como combustible de motor.

Existen múltiples métodos de separación para poder superar el azeótropo etanol-agua, por mencionar algunos de los más relevantes en la industria se encuentran la **destilación extractiva (DE)**, la destilación azeotrópica (DA), la pervaporación con membranas y adsorción con tamices moleculares [5], siendo la DE y la DA los métodos más utilizados por su capacidad de producción y su escalabilidad; este trabajo se enfoca en la DE como método de separación. En la destilación extractiva se añade un tercer compuesto conocido como solvente el cual tiene una temperatura de ebullición superior al de la mezcla binaria original. El solvente evita la formación de azeótropos adicionales al de la mezcla original. En la primera columna de un sistema de destilación extractiva convencional, el componente más volátil de la mezcla se obtiene como destilado (etanol) y en la parte inferior los dos componentes menos volátiles, en la segunda columna se separa el segundo componente (agua) del solvente, este último sale en la parte inferior de la columna y después pasa a ser recirculado a la primera columna para ser reutilizado. El diagrama de flujo del sistema convencional de destilación extractiva se muestra en la Figura 1.

Una de las desventajas del proceso de destilación extractiva convencional es que utiliza grandes cantidades de energía debido a su baja eficiencia termodinámica, una de las causas principales de esta baja eficiencia termodinámica se debe al fenómeno llamado **remezclado**. Para contrarrestar este fenómeno, se han

investigado diferentes configuraciones de diseño que toman en cuenta acoplamiento térmico entre columnas usando corrientes de vapor y líquido, permitiendo que se incremente la eficiencia termodinámica.

Las **columnas de pared divisoria** (CPD), son los sistemas intensificados más estudiados en los últimos años debido a su gran potencial de ahorro en inversión de operación y de inversión inicial respecto a los sistemas convencionales, los cuales oscilan entre un 20 hasta 30% y un 15 hasta 20%, respectivamente [6]. En este tipo de configuración se acopla térmicamente con una interconexión de flujo de vapor que entra a la sección derecha de la pared y un flujo líquido que sale de la sección derecha a la sección inferior de la columna. El diagrama de flujo para el sistema de destilación extractiva con CPD se muestra en la Figura 2a.

Una configuración equivalente, pero menos estudiada, que se ha propuesto en la literatura para disminuir el remezclado, de manera similar a la de CPD, es el añadir una salida de flujo líquida intermedia que alimente la segunda columna, pero sin tener alguna interconexión de vapor [7]. El sistema alternativo con salida lateral se muestra en la Figura 2b.

Aun sabiendo estos beneficios, existen pocos casos de estudio publicados en la literatura que proponga diseños mejorados del proceso de deshidratación del etanol [8, 9, 10, 11].

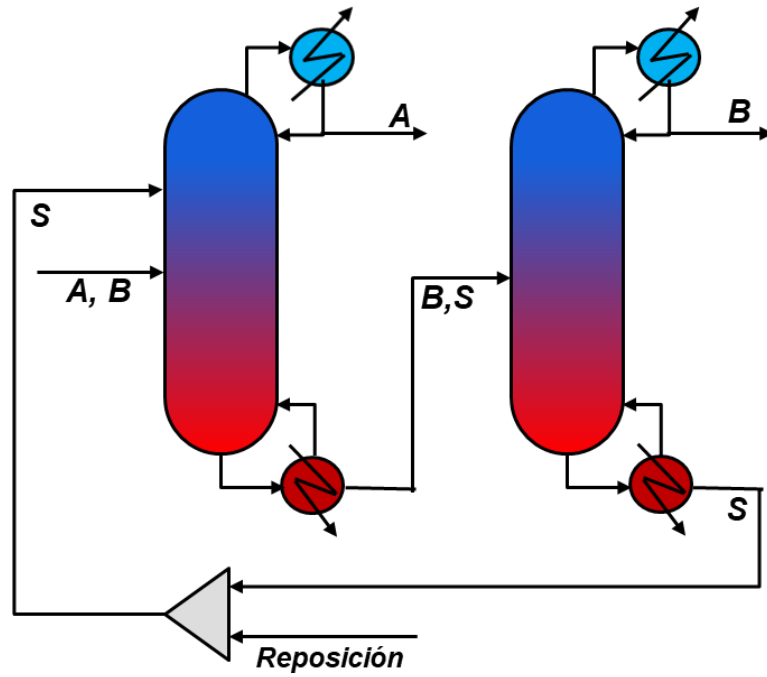


Figura 1. Configuración convencional para el sistema de destilación extractiva

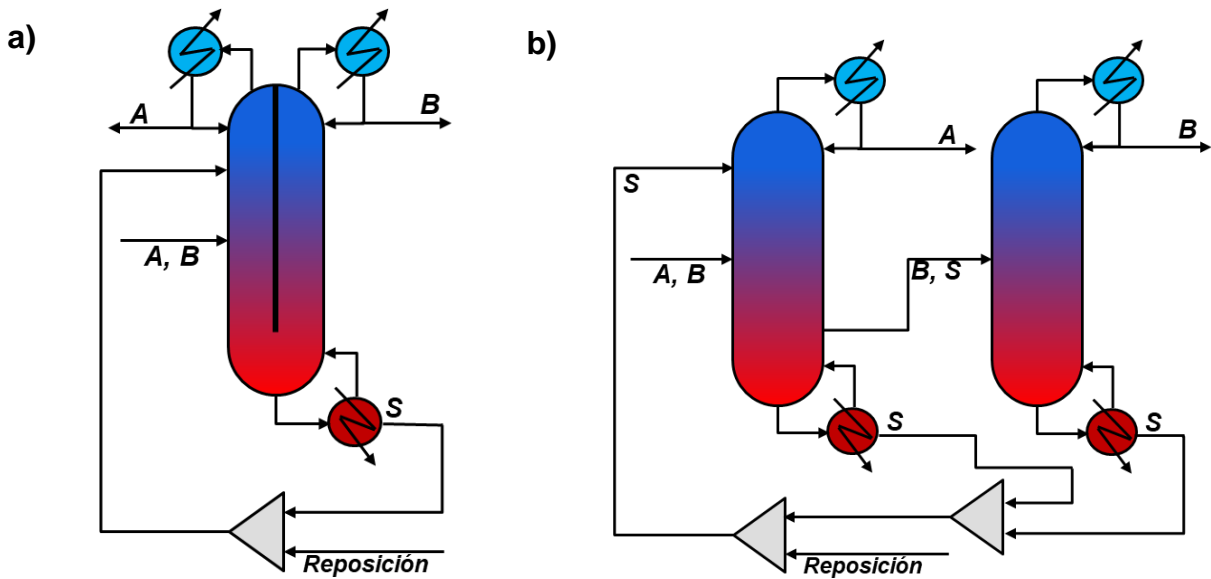


Figura 2. Sistemas mejorados de destilación extractiva: A) sistema de Columna de Pared Divisoria y B) sistema con salida lateral

1.3 Control en las columnas de destilación

El objetivo de cualquier sistema de control en un proceso industrial es el de mantener los productos lo más cercano posible a sus valores nominales frente a disturbios que puedan ocurrir en el proceso. Por lo tanto, es de suma importancia que todo proceso cuente con un sistema de control adecuado con la finalidad de asegurar la operabilidad del proceso a nivel industrial.

Los controladores convencionales más usados en las columnas de destilación son los controladores Proporcional-Integral (PI) basados en mediciones de temperatura, debido a su bajo costo y que requieren poco mantenimiento, haciéndolos más confiables para un proceso continuo. Además, se sabe que la composición de una mezcla depende en gran parte de su temperatura, permitiendo que los controladores basados en temperatura sean adecuados para inferir la composición de una mezcla. Las desventajas de utilizar controladores de composición es que estos son más costosos, tienen retrasos considerables en las mediciones y requieren un mantenimiento constante, haciendo que su uso sea indeseable en un limitado en un proceso continuo.

De acuerdo con Gerbaud et al. (2019) desde el año 2000 al 2016, se publicaron 1125 documentos relacionados con la destilación extractiva y sólo 107 de estos proponen una estrategia de control, pocos en comparativa al número total de estudios [6]. Específicamente para el proceso de deshidratación de etanol con destilación extractiva, existen pocos trabajos publicados que traten con el control del proceso [8, 10], en especial cuando se trate de diseños mejorados [10], esto se puede relacionar a la dificultad de encontrar una estrategia de control adecuada. Al modificar el diseño convencional se agregan o se reducen grados de libertad, lo cual dificulta encontrar un esquema de control apropiado al aumentar las posibilidades de apareamiento entre las variables controladas y manipuladas. Por lo tanto, es importante plantear una estrategia de control para procesos químicos mejorados para comprobar su operabilidad.

1.4 Aportación científica

Proponer un sistema de control para el proceso de destilación extractiva con salida lateral para la deshidratación del bioetanol que permita estabilizar el proceso, manteniendo la pureza de bioetanol para ser usado como biocombustible ante perturbaciones en la alimentación.

1.5 Objetivos de la tesis

1.5.1 Objetivo general

Diseñar, optimizar y controlar sistemas de destilación extractiva intensificados para el proceso de deshidratación del bioetanol, teniendo en cuenta el costo total anual (CTA), cumpliendo con normas internacionales para su uso como combustible.

1.5.2 Objetivos específicos

- Diseñar y simular los sistemas de destilación extractiva convencional, columna pared divisoria y alternativo con salida lateral.
- Optimizar los diseños mediante algoritmos de optimización estocástica teniendo en cuenta como función objetivo el CTA.
- Proponer sistemas de control utilizando controladores PID (proporcional, integral y derivativo) para estabilizar los sistemas de destilación propuestos.
- Llevar a cabo un análisis comparativo de resultados dinámicos obtenidos con las diferentes configuraciones propuestas.

1.6 Hipótesis

El sistema alternativo de destilación extractiva con salida lateral que utiliza etilenglicol como solvente disminuye el CTA con una pureza de etanol mayor a trabajos previos y puede ser controlado manteniendo la pureza de etanol en el sistema ante perturbaciones en la alimentación.

2. ANTECEDENTES

2.1 Sistema convencional de destilación extractiva

La deshidratación de etanol utilizando el sistema convencional de destilación extractiva se ha estudiado ampliamente, algunos estudios realizados recientemente han proporcionado información valiosa que puede ser la base para nuevas investigaciones, por mencionar algunos trabajos: Ravagni, et al. [12] realizaron un análisis comparativo de solventes entre etilenglicol y tetraetilenglicol, concluyendo que el primero reduce más el costo del proceso, Iván D. Gil, et al. [8], propusieron una estrategia de control para la DE del etanol utilizando glicerol como solvente, Z. Zhu et al. [13], estudiaron diferentes líquidos iónicos como intermediarios en la deshidratación de etanol con la finalidad de compararlos y encontrar cual minimiza el costo total anual (TAC). Es importante mencionar que estos trabajos no consideraron ciertos parámetros en la optimización de su diseño de destilación extractiva que pueden afectar considerablemente los resultados de la optimización.

Una desventaja de los sistemas de destilación convencional en separaciones ternarias es que el componente intermedio, en su fase líquida, alcanza un punto máximo de composición cerca de la parte inferior de la columna, disminuyendo drásticamente después de este punto, como se muestra en la Figura 3. Esta disminución de composición se conoce como remezclado y es causa de una baja eficiencia termodinámica, debido a que se debe suministrar más energía en la segunda columna para lograr las purezas deseadas. Este problema se evita en las columnas con un acoplamiento térmico mediante interconexiones de vapor y/o líquido que, por lo general, se colocan en la etapa donde se alcanza el máximo de concentración del componente intermedio para suministrar la alimentación a la segunda columna.

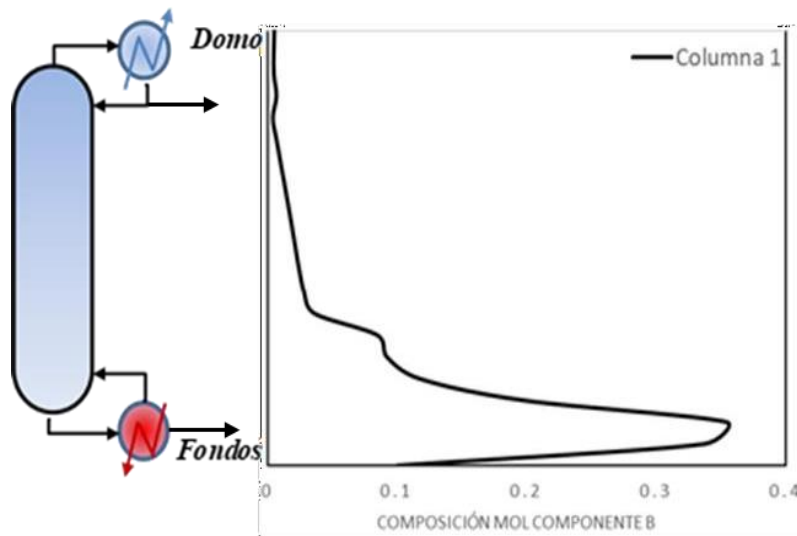


Figura 3. Perfil de composición en una columna de destilación del componente intermedio en una mezcla ternaria

2.2 Sistemas mejorados de destilación

Desde el año 1946 se patentó por primera vez una columna de destilación de pared divisoria para propósitos generales, pero hasta la década de los 90s se construyó por primera vez a nivel industrial, esto debido al poco conocimiento que se tenía sobre el control y la operación de estos sistemas y además se creía que los sistemas térmicamente acoplados eran difíciles de controlar. Por otro lado, en aquella época había menos concientización acerca de la sustentabilidad y los precios de los combustibles eran más económicos. Sin embargo, recientemente se ha estado implementando esta tecnología y ha habido un incremento constante en la construcción de CPD. Para el año 2010 se reportaron más de 100 columnas de pared divisoria instaladas alrededor del mundo, en su mayoría construidas por J. Montz GmbH y BASF y más de 90 aplicaciones conocidas registradas [\[14\]](#).

Una alternativa a las columnas con pared divisoria son las columnas con salida lateral líquida, teniendo el mismo objetivo de evitar el remezclado, acoplando térmicamente ambas columnas, pero sin alguna interconexión de vapor entre

secciones de las columnas, aunque no se reporta un número exacto de aplicaciones o de columnas actualmente en la industria como las CPD. Algunos trabajos reportados en la literatura de sistemas mejorados de destilación extractiva para la deshidratación de etanol: Kiss, A.A., et al. [9] hicieron una comparación de una destilación extractiva y azeotrópica con CPD, en el caso de la destilación extractiva utilizaron etilenglicol, Tututi-Avila, et al [10] propusieron una estrategia de control para el sistema de destilación extractiva con CPD, concluyendo que este requiere manipular la separación de vapor que ocurre cuando se dividen los flujos de vapor en la pared para un control adecuado de la composición; en otro trabajo de los mismos autores se hizo una comparación económica del sistema de destilación extractiva convencional con el sistema CPD y el de salida líquida lateral [11].

Los métodos de destilación convencionales están siendo reemplazados por sistemas mejorados, esto se debe principalmente a su potencial de ahorro energético reduciendo sus emisiones contaminantes a un costo de capital menor.

2.3 Solventes

Un factor importante para llevar a cabo la separación en una destilación extractiva es el agente acarreador o solvente. Como se mencionó anteriormente en la literatura se han reportado diferentes solventes que contribuyen a superar la concentración azeotrópica en la deshidratación del bioetanol, por ejemplo, se cuenta con hidrocarburos como el glicerol, el etilenglicol, el n-pentano, la gasolina, etc. Pero no se han estudiado en su totalidad todas las configuraciones de destilación posibles con dichos solventes e inclusive con otro tipo de acarreadores no mencionados. La cual hace que esta sea un área de investigación activa.

Recientemente ha incrementado el interés por investigar otro tipo de solventes como son los **líquidos iónicos (LI)** para probar su eficiencia al romper el azeótropo etanol-agua mediante destilación, estudios recientes [13,15] sugieren

que el uso de líquidos iónicos sean mejores candidatos que los solventes convencionales; aunque estos compuestos tienen un costo mayor comparado a uno de la familia de hidrocarburos, sin embargo, esto puede ser compensado al poder proporcionar ahorros energéticos, así como evitando la contaminación del destilado al ser no volátiles y al no ser tóxicos y/o corrosivos. Otros componentes que pueden ser utilizados como intermediarios, con beneficios similares al de los líquidos iónicos, son los **polímeros hiper-ramificados (PHR)**, pero su alto costo (mayor que los LI), baja y limitada disponibilidad, hacen que no sea un candidato por considerar para este sistema en el futuro cercano. Además de las desventajas económicas mencionadas que conlleva el usar estos tipos de solventes, se han realizado muy pocos estudios acerca de las interacciones y propiedades termodinámicas que tienen este tipo de intermediarios con la mezcla agua-etanol, en el caso de ambas alternativas (LI y PHR), reduciendo considerablemente los componentes que se pudieran utilizar así como las condiciones de operación en que puedan ser utilizados, el último caso de estudio para el proceso de deshidratación del etanol con PHR se reportó en 2004 [\[16\]](#).

2.4 Optimización

Se define como optimización a la selección de la mejor alternativa de un conjunto de opciones en un problema determinado, esto puede ir desde algo rutinario, como tomar la mejor ruta en una ciudad para llegar a un destino, hasta un problema industrial, como el encontrar la cantidad de reactivos necesaria para obtener la mayor cantidad de producto de interés en un proceso químico determinado.

La **función objetivo**, puede definirse como una forma de medir la efectividad o desempeño del sistema. Es decir, esta indica si una solución dada es buena en comparación con otras. Además, dependiendo del objetivo de la optimización esta puede ser maximizada, minimizada o que sea equivalente a un valor determinado. Esta función depende de **variables de decisión**, que son las

variables manipuladas para modificar los valores de la función objetivo, y también por **restricciones del sistema**, que delimitan las variables de decisión o la misma función objetivo [17].

Para resolver los problemas de optimización, en general se utilizan dos metodologías, los métodos deterministas y los estocásticos. Los métodos de optimización determinista están basados en cálculos matemáticos rigurosos requiriendo que el problema a optimizar sea descrito completamente mediante ecuaciones. La solución de estos problemas se basa en encontrar el vector gradiente que sea igualado a cero, además, la solución depende de la convexidad y restricciones de la ecuación, sin embargo, este tipo de métodos no son efectivos al tratar de resolver problemas discretos. En cambio, los métodos estocásticos están relacionados con la incertidumbre, siendo sus métodos de búsqueda aleatoria, probando diferentes soluciones con las variables de decisión evaluando la función objetivo hasta obtener la mejor solución, para mejorar los resultados de esta búsqueda se crean ciertos criterios o se puede iniciar la optimización alrededor de un punto con un resultado conocido, dando como resultado una búsqueda direccionada aleatoria [17].

Los métodos estocásticos son adecuados para sistemas en los que no se cuenta con un modelo matemático, por ejemplo, el simulador comercial Aspen Plus no permite trabajar con el modelo directamente, este tipo de simuladores se conoce como caja negra, por lo que complica el uso de métodos deterministas. En la literatura se ha reportado el uso de métodos estocásticos de optimización como *algoritmos genéticos* acoplados con el simulador Aspen Plus para optimizar columnas de destilación [18].

2.4.1 Algoritmos Genéticos

Uno de los primeros métodos estocásticos desarrollado es el conocido como algoritmo genético, este se basa en la selección natural de una especie para poder encontrar una solución óptima. Análogamente las variables de decisión se

podrían representar por el material genético de un individuo, siendo la solución el individuo en sí, teniendo en cuenta esto, el método empieza con una población de individuos donde estos son evaluados y se diferencian entre ellos, habrá individuos en la población más aptos que otros. Después, ocurre un proceso de selección donde los individuos más aptos tienen más probabilidad de reproducirse, cabe recalcar que los individuos menos aptos aún pueden reproducirse. En el proceso de reproducción, dos individuos son seleccionados y su información genética es combinada para dar origen a dos nuevos individuos, pocos individuos experimentarán mutaciones, lo cual modifica su información genética diferente a sus predecesores. Esto dará como resultado una nueva población que se espera tenga mejores características comparado con la población anterior, este proceso se repite hasta que la población total no muestre diferencias representativas [17].

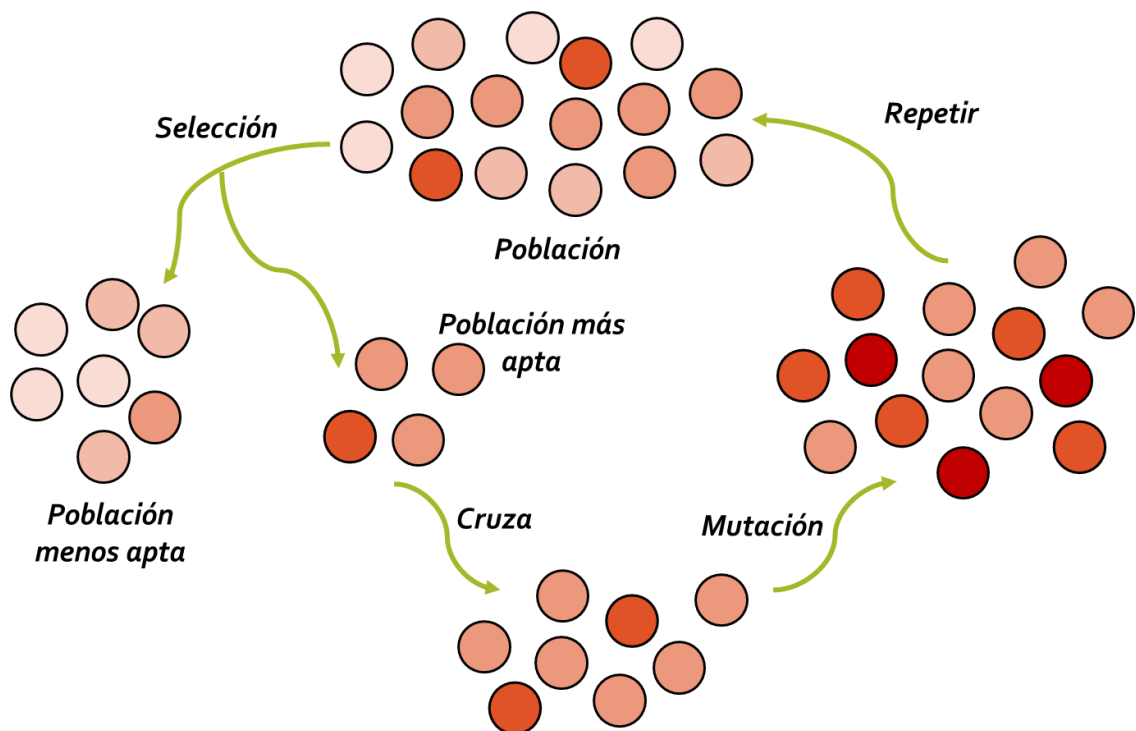


Figura 4. Ejemplo del funcionamiento de un algoritmo genético

2.5 Sistema de Control

El controlador proporcional, integral y derivativo (PID) es el tipo de controlador más utilizado en la industria. En un lazo de control, el controlador procesa continuamente un valor de error el cual es la diferencia del punto deseado (set point, SP) y el valor medido de la variable del proceso (process variable, PV), con este valor del error se recalcula la salida del controlador que será la variable manipulada la cual modificará las condiciones del proceso, lo cual en consecuencia modificará la variable controlada. La acción adecuada del controlador se verá reflejada al estabilizar la variable de proceso cerca del valor deseado. El controlador PID pondera las contribuciones de la parte proporcional (P), integral (I) y derivativa (D).

El término P corresponde a la función proporcional al valor actual del error, esto quiere decir si la diferencia es grande y positiva, este término proporcionalmente también lo será tomando en cuenta el factor de ganancia " K_c ".

El término I corresponde a la función integral y toma en cuenta los valores pasados del error y los integra, dando un efecto en el control dependiendo del error histórico del proceso.

El término D corresponde a la función derivativa, la cual estima la tendencia a futuro del error basado en el cambio actual. Este modo de control es también conocido como control anticipatorio, ya que trata de reducir el error que se puede tener a futuro en el proceso.

Dependiendo de la aplicación del controlador se puede optar por solo utilizar un controlador PI, teniendo el mismo propósito que un controlador PID solo omitiendo la funcionalidad del término D, ya que puede amplificar el ruido en el proceso haciéndolo indeseable en ciertos procesos, como destilación.

Otros factores a considerar en los sistemas de control son la sintonización y la acción del controlador. La sintonización, es el ajuste de valores a los parámetros

de control (K_c , I_{int} , I_{Der}) de los controladores a utilizar. Para los controladores de flujo (FC), presión (PC) y nivel (LC), Luyben [19] ha propuesto valores de los parámetros de control de estos controladores, ya que al ser sistemas ampliamente usados se conoce su comportamiento y se tiene mínima variación entre procesos. Sin embargo, para los controladores de temperatura (TC) este no es el caso y debe utilizarse algún método de sintonización para ajustar los parámetros de control. Uno de los métodos de sintonización más utilizados es el de Tyreus-Luyben, el cual es un método de sintonización a lazo cerrado. Este método es ideal para columnas de destilación ya que puede evitar respuestas agresivas que pueden ocasionar anomalías en los platos debido a limitaciones hidráulicas.

La acción del controlador se refiere a como el controlador modifica la variable controlada respecto a la variable medida, esto puede ser de manera directa o inversa. En un controlador directo a medida que la variable medida aumenta la variable controlada también debe aumentar para mantener la variable medida en su valor deseado. Por otra parte, en un controlador inverso a medida que la variable medida aumenta la variable controlada debe disminuir. Un ejemplo sencillo es cuando un flujo de alimentación que se desea mantener constante, si el flujo (PV) aumenta se requiere que la válvula (variable controlada) se cierre proporcionalmente respecto al aumento del flujo, por lo tanto, en este caso se requiere que la acción del controlador sea inversa al de la variable medida.

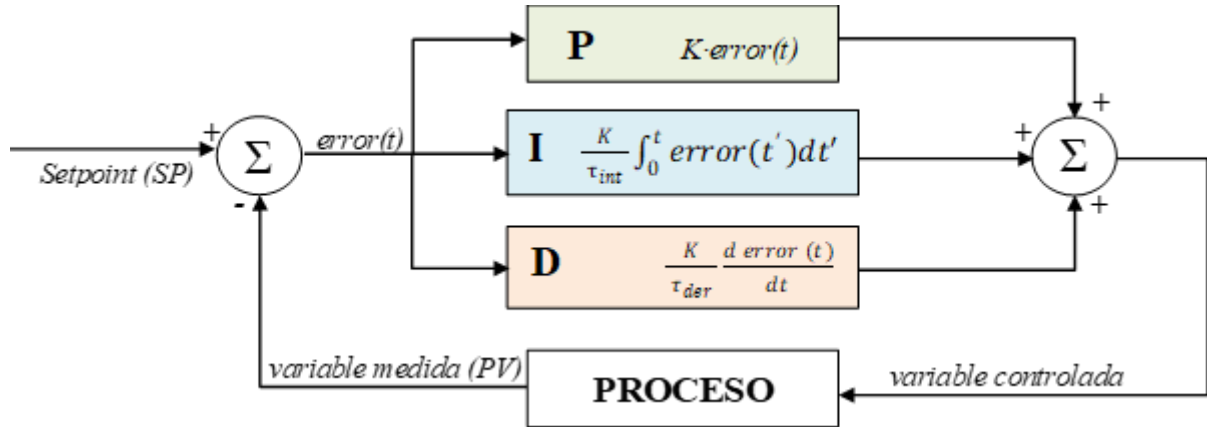


Figura 5. Diagrama de bloques de un controlador PID con retroalimentación.

2.5.1 Análisis de Sensibilidad

Para poder implementar un sistema de control de temperatura efectivo, primeramente, se tiene que determinar el plato adecuado de la columna para controlar la temperatura de dicho plato con el propósito de mantener los niveles de pureza adecuado. Para determinar el plato en donde se medirá la temperatura, se realiza un análisis de sensibilidad en la columna en estado estable. Existen diferentes métodos para la determinación del plato adecuado para las mediciones de temperatura [20]. A continuación, se explicará los métodos que se utilizaran en este trabajo.

Criterio de pendiente. En este criterio se selecciona el plato donde hay cambios grandes de temperatura de plato a plato. El perfil de temperatura de la columna se gráfica, en el gráfico se podrá observar pendientes pronunciadas de temperatura de plato a plato en la columna, esto nos indica en que platos hay cambios grandes de composición y por lo tanto estos son los más críticos a controlar.

Criterio de sensibilidad. El objetivo de este criterio es encontrar el plato en donde se presenta una ganancia grande de temperatura con un cambio en una variable manipulada de la columna. Primero, se obtiene el perfil de temperatura

de la columna con los valores nominales de las variables manipuladas. Después, se modifica ligeramente ($\pm 0.1\%$) una de las variables manipuladas cambiando el estado de operación del proceso, con esto se obtiene un nuevo perfil de temperatura de la columna. Normalizando el valor de temperatura y el valor de la variable manipulada, se divide el cambio de temperatura que ocurrió en el plato entre el cambio de la variable manipulada, lo cual da como resultado la ganancia que ocurrió en ese plato. Este cálculo se repite en todos los platos de la columna. El plato con la mayor ganancia es el seleccionado para ser controlado por ser el más sensible, ya que una ganancia grande indica que la temperatura en ese plato puede ser controlada efectivamente con la variable de decisión correspondiente, por el otro lado, una pequeña ganancia indica que una saturación puede ocurrir fácilmente y la región de operabilidad puede ser limitada. Este proceso se repite para otras variables que se puedan manipular en la columna.

Se debe tomar en cuenta que estos métodos de selección pueden generar resultados iguales, es decir que el plato para implementar el lazo de control sea el mismo. Sin embargo, es posible que exista una variación entre los platos utilizando solo estos métodos, en estos casos se puede apoyar en reglas heurísticas para decidir en cual plato implementar el lazo de control.

Algunas reglas heurísticas que se consideran para la selección de las etapas a controlar son las siguientes: las etapas de alimentación y de salida no son candidatos a considerar, ya que se espera en estas etapas cambios importantes de temperatura por la naturaleza del proceso y no por cambios de alguna variable, y la cercanía de la etapa sensible a la variable manipulada, esto se debe a que no es recomendable controlar la temperatura de una etapa en la etapa superior de la columna con la carga del reboiler (Q_R), esto debido a que el cambio realizado en la variable manipulada (Q_R) puede tardar en verse reflejado en la variable medida (temperatura en la etapa) por la distancia entre ellos [\[20\]](#).

3. METODOLOGÍA

3.1 Diseño del sistema

Los datos iniciales para el diseño de los diferentes sistemas a estudiar fueron obtenidos de los trabajos realizados por Tututi-Avila et al. [10, 11]. En estos trabajos se reportaron diseños óptimos para el sistema convencional, para el sistema de CPD y para el sistema alternativo, también se propusieron estrategias de control para el sistema convencional y para la CPD. Sin embargo, no se investigaron estrategias de control para el sistema alternativo con salida lateral que sean capaces de mantener las purezas en los valores deseados ante perturbaciones en la alimentación. Por lo tanto, este trabajo tiene como objetivo determinar la mejor estrategia de control para dicho sistema alternativo.

Los sistemas de destilación mencionados anteriormente se diseñaron y se simularon en el software Aspen Plus utilizando el método termodinámico NRTL, estos sistemas comparten las siguientes características: en la primera columna se alimenta un flujo (F_1) de 45.36 kmol por hora con una composición molar de 84% etanol, el resto siendo agua. Como restricciones del sistema se tiene que el flujo de destilado de la primera columna, que corresponde al producto etanol, tenga una pureza de 99.5%mol etanol y el producto de destilado de la segunda columna, que corresponde al subproducto agua, tenga una composición alrededor de 99.5%mol, a diferencia de los trabajos realizados por Tututi-Avila et al. [10, 11] que tiene como restricciones porcentajes masa, estas restricciones tienen la finalidad de evitar las pérdidas de etanol y que el destilado de etanol tenga la menor cantidad posible de agua. Las especificaciones de pureza que se mencionaron anteriormente se utilizaron para todos los sistemas, haciéndolos comparables. El flujo de solvente, en este caso etilenglicol, se modifica según los requerimientos del sistema.

Para simular la operación de una columna de destilación en Aspen Plus, se utilizó el módulo RadFrac (ver Figura 6a), en éste se especifican las variables

estructurales como, el número total de etapas en la columna, las etapas de alimentación, las etapas de salida de flujo (aparte del domo y el fondo de la columna) y las variables de decisión, como la razón de reflujo y el flujo de destilado. Para el intercambiador de calor utilizado en la corriente de reciclo de etilenglicol se utiliza el módulo de Heater. En este caso se especificó el cambio de temperatura de la entrada a la salida y la presión de salida (ver Figura 6b).

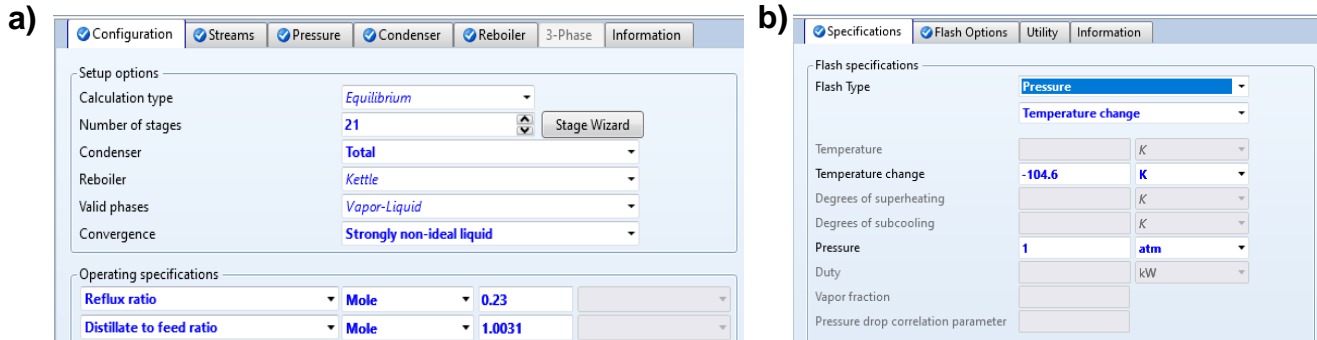


Figura 6. Especificaciones del módulo Radfrac (a) y Heater (b) como se muestra en el simulador AspenPlus.

Las restricciones del sistema, en este caso la pureza de etanol y del agua en las corrientes de producto de destilado, se definen con la herramienta Design Spec, como se muestra en la Figura 7.

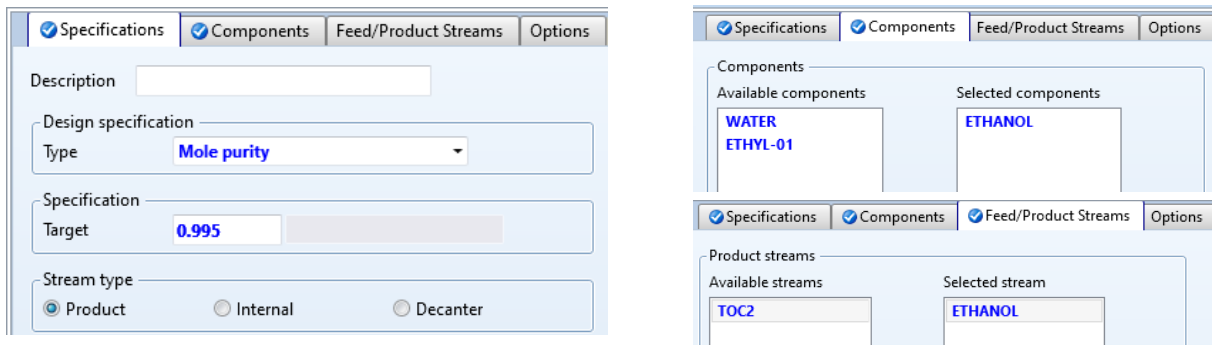


Figura 7. Uso de la herramienta Design Spec como se muestra en el simulador

3.2 Optimización del sistema

Para llevar a cabo la optimización de los sistemas de destilación se requiere vincular las simulaciones realizadas en Aspen Plus con MATLAB.

MATLAB cuenta con una herramienta de optimización que contiene el método de búsqueda a través de algoritmos genéticos, el cual es necesario para poder optimizar el sistema. En este algoritmo se le da un intervalo de búsqueda para cada variable de decisión del sistema de destilación, estas variables tienen que ser especificadas como continuas o enteras, también se tiene que especificar las restricciones físicas y las heurísticas del sistema. Para el caso de estudio investigado, la etapa de alimentación no puede estar localizada en el domo o en los fondos de la columna y que la etapa de entrada del solvente se localiza en una etapa superior a la etapa de la alimentación, por lo que se tomó en cuenta esta restricción. Además, se utilizaron los valores por defecto del toolbox de MATLAB para la optimización con el algoritmo genético. Para los valores de los parámetros se utilizaron 200 individuos en la población, el número de generaciones se configuró como 100 multiplicado por el número de variables y la tolerancia de la función objetivo fue de 1×10^{-6} .

Las variables que se optimizarán en el algoritmo para el sistema convencional son las siguientes: el número total de etapas de ambas columnas, la etapa de alimentación, la etapa de alimentación del reciclado, la razón de reflujo y el flujo de destilado. En la segunda columna el número total de etapas, la etapa de alimentación, la razón de reflujo y el flujo de destilado. Para el intercambiador de calor en el reciclado sólo se optimiza la temperatura de operación. Para el sistema de CPD a diferencia del sistema convencional se optimiza la etapa de interconexión entre columnas en vez de la etapa de alimentación de la segunda columna, además sólo se optimiza la razón de reflujo en la segunda columna, ya que se elimina un grado de libertad al eliminar un reboiler del proceso. Para el sistema alternativo con salida lateral se optimizarán las mismas variables que en

el sistema convencional, pero de manera adicional se optimizará la etapa de salida lateral y el flujo de la misma corriente.

3.2.1 Función objetivo y restricciones del sistema

La función objetivo para el problema de optimización es el minimizar el CTA, que esta a su vez es función del costo total de inversión (CTI) y el costo total de operación (CTO), estas funciones de costo están representadas mediante las siguientes ecuaciones:

$$CTA = f(CTI + CTO) \quad (1)$$

$$CTI = \frac{Costo_{reboiler} + Costo_{condensador} + Costo_{columna}}{periodo\ de\ retorno} \quad (2)$$

$$CTO = Carga_{reboiler} \times Precio_{vapor} \quad (3)$$

$$x_i \geq x_i^{req.} \quad (3')$$

La ecuación (1) es función de las ecuaciones (2) y (3) que están sujetas a (3'), que representa la pureza de etanol y agua que tienen que ser mayor o igual a la pureza requerida. Los costos aproximados de los equipos en la Ecuación 2 son calculados con las siguientes ecuaciones heurísticas presentadas por Luyben [20]:

$$Costo_{reboiler/condensador} = 7296 * \text{área}^{0.65} \quad (4)$$

$$Costo_{columna} = 17640 * \text{diámetro}^{1.066} * \text{longitud}^{0.802} \quad (5)$$

Los valores de las variables como diámetro y longitud de la columna y área para los intercambiadores de calor se obtienen a partir del software Aspen Plus y estos dependen de manera implícita de las variables manipuladas mencionadas en la sección 3.2. Para el periodo de retorno se supone un valor de 10 años. En la Ecuación 3, se utiliza un costo aproximado de vapor de 8.22 USD/GJ.

3.3 Control del sistema

3.3.1 Transición de un sistema en estado estable a dinámico

Para proponer una estrategia de control se requiere importar la simulación realizada en Aspen Plus a Aspen Dynamics, llevando el sistema en estado estable a un estado dinámico. Para lograr la transición, se realizan modificaciones al sistema en estado estable añadiendo equipos auxiliares como válvulas y bombas y dimensionalizando el tambor del reflujo y la base de cada columna.

Las válvulas y bombas se añaden en las corrientes del sistema, ya que algunos controladores requieren manipular la apertura de las válvulas y es necesario que exista una caída de presión para que el proceso sea impulsado por presión (pressure driven) y sea lo más realista posible. Las bombas se ubican antes que las válvulas, teniendo en cuenta una presión de salida de 1.5 atmósferas, esto para asegurar que la caída de presión sea suficiente y el dimensionamiento de la válvula sea el adecuado.

Para dimensionalizar el tambor del reflujo y la base de cada columna, se utilizó una regla heurística para estos equipos, la cual dicta que estos deben de poder contener un volumen equivalente a 10 minutos de flujo de líquido que entra al contenedor. En el caso del tambor de reflujo, se toma en cuenta el flujo de líquido que sale de la primera etapa y para la base de la columna se considera el flujo de líquido de la penúltima etapa [20].

Para hacer este cálculo se requieren los flujos de los líquidos, los cuales se obtienen en los perfiles de flujo de cada columna como resultado de la simulación del proceso. Con esta información, el diámetro y la altura de los contenedores se calculan con las siguientes ecuaciones:

$$V = Q * t \quad (6)$$

$$D = \sqrt[3]{\frac{2 * V}{\pi}} \quad (7)$$

$$L = 2 * D \quad (8)$$

Donde Q es el flujo volumétrico del líquido, t es el tiempo de retención del contenedor (10 min), V, D y L es el volumen, diámetro y longitud del contenedor respectivamente. Una vez terminado

3.3.2 Análisis de sensibilidad

Los perfiles de temperatura se obtienen de los resultados del módulo RadFrac en el software Aspen Plus. La razón de reflujo y la carga del reboiler son las variables de decisión que se modifican en un 0.1% en las columnas de cada sistema para obtener los diferentes perfiles, con los perfiles obtenidos se pueden generar las gráficas para poder realizar el análisis de la selección de la etapa más sensible, tal como se explica en la sección 2.5.1.

3.3.3 Sintonización de controladores

Para la sintonización de los controladores de temperatura Aspen Dynamics calcula los parámetros de ganancia (K_c) y tiempo integral (τ_I) siguiendo la metodología de Tyreous-Luyben [\[19\]](#), que utiliza las siguientes ecuaciones:

$$K_c = \frac{K_U}{3.2} \quad (9)$$

$$\tau_I = 2.2 * P_U \quad (10)$$

Siendo K_U la ganancia última y P_U el periodo último. Además, se supone que los controladores operan con un tiempo muerto de un minuto. De acuerdo a la metodología de sintonización, se hacen cambios al setpoint del controlador de un 5% y con las oscilaciones que se obtienen de la variable del proceso debido a los

cambios escalón de la variable controlada (OP) se puede calcular P_u y K_u . P_u es el periodo de tiempo en minutos entre oscilaciones, mientras que K_u es la ganancia cuando el sistema empieza a oscilar, se calcula de la siguiente manera:

$$K_u = \frac{4h}{a * \pi} \quad (11)$$

Donde “a” es la diferencia entre el valor nominal de la variable del proceso (PV) y el punto máximo de la oscilación y “h” la altura del cambio escalón realizado en la variable controlada. En la Figura 8 se muestra un ejemplo gráfico para el cálculo de estos parámetros de sintonización.

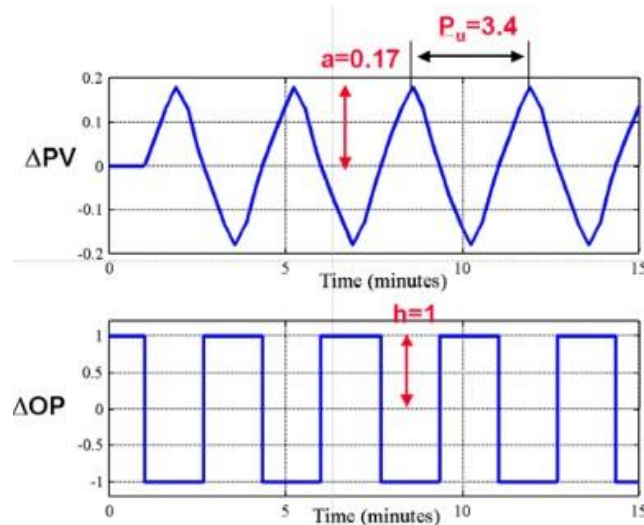


Figura 8. Ejemplo de prueba de sintonización

En cuanto los controladores de presión, de nivel y de flujo, Luyben [19] propuso valores heurísticos para configurar los parámetros de los controladores. Por lo tanto, para los controladores de presión el término de ganancia (K_c) se fijó con un valor de 20 y el tiempo integral (τ_i) se fijó con un valor de 12 min. En los controladores de nivel solo se utilizó un controlador proporcional con un $K_c = 2$. Los controladores de flujo se fijó un $K_c = 0.5$ y un $\tau_i = 0.3$ min.

Es importante mencionar que no se utilizará la parte derivativa de los controladores PID en ningún caso y para los controladores de nivel solo se

utilizará la parte proporcional, ya que se requiere un control con offset para los tanques de nivel.

3.3.4 Simulación dinámica/Prueba de la estrategia de control

Para verificar que la estrategia de control es adecuada, se harán perturbaciones en el flujo de alimentación del sistema, primero se cambiará el flujo total de la alimentación en un $\pm 20\%$ y finalmente se harán cambios en la composición de la alimentación en un $\pm 4\%$ composición molar de etanol. Estos cambios se realizarán después de 0.2 horas de simulación en estado estable y se monitoreará el comportamiento de las variables relevantes del sistema hasta un tiempo de 10 horas, esto con la finalidad de poder comparar los tiempos de estabilización de cada sistema.

4. RESULTADOS Y DISCUSIONES

4.1 Diseños óptimos y resultados

En esta sección se presentan los resultados de los diseños optimizados y los resultados de la metodología seguida para configurar los sistemas de control. Las Figuras 9, 10 y 11 muestran los diagramas de flujo del proceso optimizados del sistema convencional, de la CPD y del sistema con salida lateral, respectivamente. En estos diagramas se muestra el flujo molar de las corrientes de alimentación, de reciclo y de salida de destilado, así como su composición molar. Los componentes están ordenados por volatilidad relativa de mayor a menor valor, el primero siendo el etanol, el segundo agua y el tercero etilenglicol. También, se muestra la carga térmica requerida para todos los intercambiadores de calor usados en cada sistema.

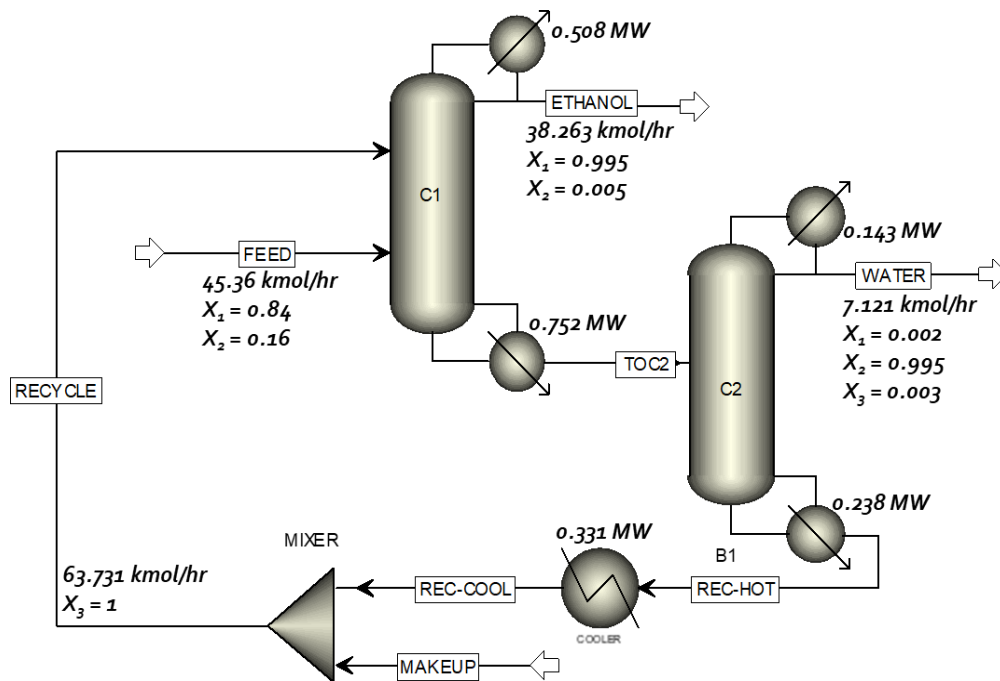


Figura 9. Diagrama de proceso del sistema convencional para la deshidratación del etanol.

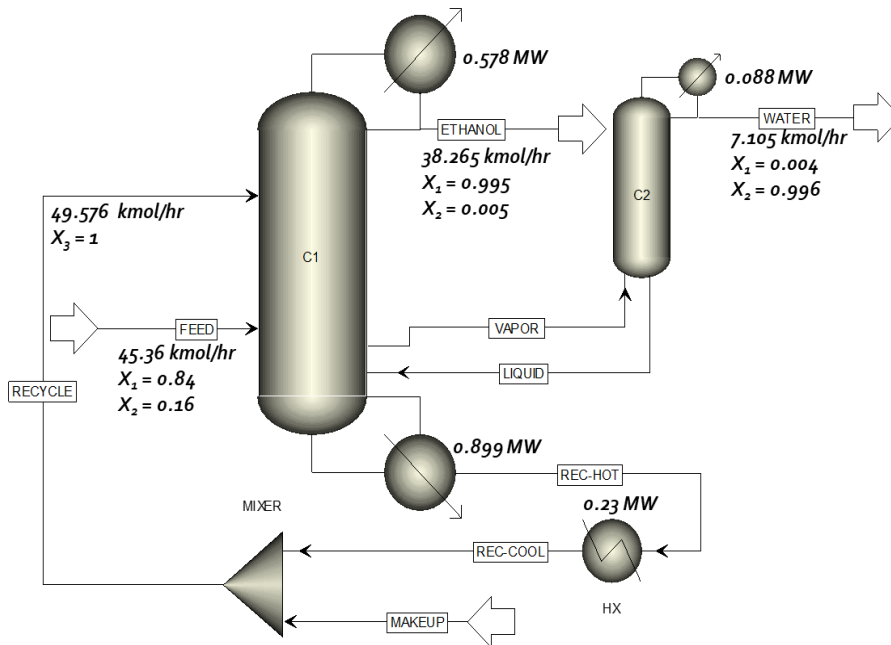


Figura 10. Diagrama de proceso del sistema CPD para la deshidratación del etanol.

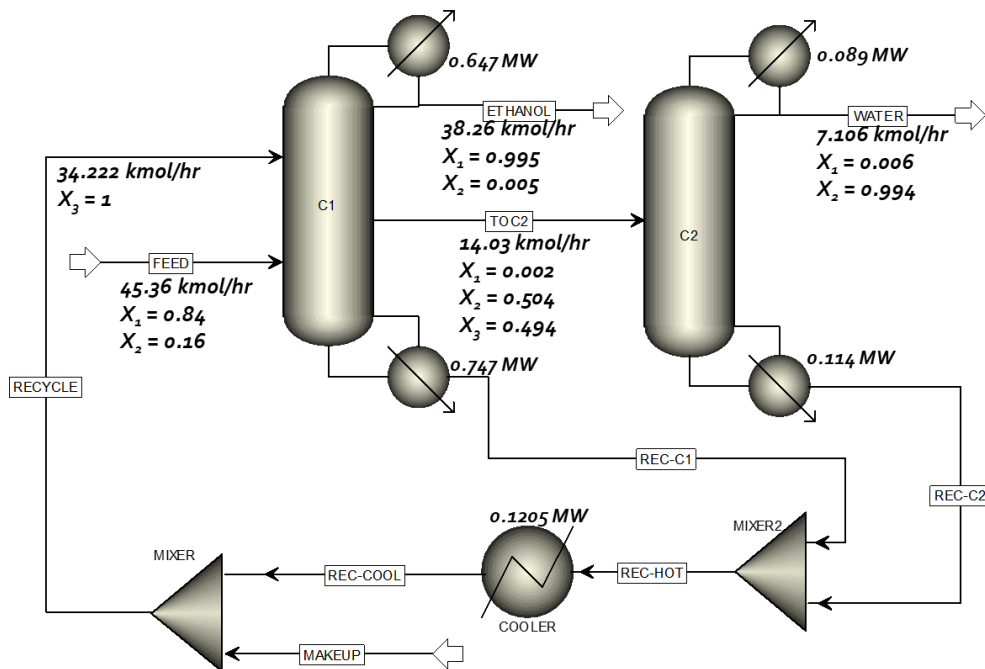


Figura 11. Diagrama de proceso del sistema alternativo para la deshidratación del etanol.

Al comparar los tres sistemas, se puede observar que, en cuanto a flujos molares de salida de destilado, así como su composición molar que corresponderían al producto etanol y subproducto agua estos son muy similares entre sí, sin embargo, el flujo molar de etilenglicol varía entre diseños, el diseño con pared divisoria disminuye en un 22.21% y el alternativo en un 46.3% en comparación con el convencional.

Tabla 1. Datos estructurales y variables de diseño de las columnas y resultados más relevantes de los diseños óptimos de los tres sistemas estudiados.

	<i>Convencional</i>		<i>Pared Divisoria</i>		<i>Alternativo</i>	
	C1	C2	C1	C2	C1	C2
Número de Etapas	27	16	27	22	25	17
Etapa de Alimentación	20	6	15	22	15	9
Etapa de Reciclo	6	-	4	-	4	-
Razón de Reflujo	0.2187	0.825	0.387	0.1225	0.5535	0.1051
Flujo de Reciclo (kmol/hr)	63.731	-	49.576	-	34.222	-
Flujo de Destilado (kmol/hr)	38.263	7.121	38.265	7.105	38.26	7.106
Diámetro (m)	0.58	0.41	0.73		0.66	0.28
Pureza Destilado (%mol)	99.5%	99.5%	99.5%	99.6%	99.5%	99.4%
Q_R total del sistema (MW)	0.9905		0.8986		0.8609	
Q_C total del sistema (MW)	0.9873		0.8959		0.8582	
Costo Total Anual (USD/año)	337,000		301,000		297,400	
Porcentaje de Ahorro	-		10.68%		11.75%	

La Tabla 1, reporta los resultados de los tres diseños investigados en este trabajo, se puede observar que, en cuanto a purezas del etanol (destilado C1), todos los sistemas lograron alcanzar el valor de 99.5%mol. En cuanto al subproducto agua (destilado C2) el sistema CPD logró una pureza mayor mientras que el alternativo la menor, sin embargo, se considera que esto no afecta el objetivo principal del proceso, el obtener la pureza del etanol dentro del valor requerido.

Los sistemas de CPD y alternativo disminuyeron considerablemente la carga energética total en los reboilers, en un 9.28% y 13.08% respecto al sistema convencional, esta reducción se debe principalmente a la disminución del remezclado. En cuanto al costo total anual se observa que el diseño de CPD

disminuye el CTA en un 10.68%, mientras que el diseño alternativo con salida lateral de la primera columna logra un ahorro del 11.75%, respecto al convencional. La diferencia siendo de 1% entre el sistema CPD y el alternativo, esto puede parecer mínimo, pero significa miles de dólares en ahorros.

Estos resultados confirman que el sistema alternativo, aunque utiliza dos columnas en el proceso como el sistema convencional, puede lograr un ahorro mayor en el costo total anual (CTA) del proceso logrando cargas térmicas menores que el sistema CPD. Además, tener múltiples opciones de diferentes sistemas permite al diseñador decidir si es más conveniente seleccionar entre el sistema alternativo como una renovación de la planta o enfocarse en la construcción de una columna de pared divisoria.

4.2 Análisis de sensibilidad

En esta sección se presentan los resultados aplicando la metodología de criterio de sensibilidad, ya que fue esta en la que se basó gran parte para decidir donde instalar los controladores de temperatura. Las figuras que se obtuvieron con esta metodología presentan la ganancia en cada etapa correspondiente. La ganancia, como se mencionó anteriormente, es el valor normalizado del cambio de temperatura que se obtuvo con el cambio realizado en la variable de decisión, esta variable puede ser la razón de reflujo (RR) o la carga del reboiler (Q_R).

Los resultados obtenidos utilizando el criterio de pendiente se presentan en el Apéndice 1, dando resultados similares al criterio de sensibilidad.

4.2.1 Sistema convencional

La Figura 12 muestra que en la primera columna del sistema convencional las etapas 24 y 25 son las más sensibles a los cambios realizados en ambas variables manipuladas, la razón de reflujo y la carga del reboiler. En este caso, se optó por controlar la etapa 24 manipulando la carga del reboiler debido a su proximidad a

la etapa, sin tener la necesidad de manipular la razón de reflujo en esta columna.

La Figura 13, la cual corresponde a la segunda columna, muestra cambios significativos cambiando ambas variables alrededor de la etapa 3 y 11. En este caso se decidió controlar la temperatura de la etapa 3 con la razón de reflujo, siendo esta etapa la cual tuvo una mayor sensibilidad al cambio de esta variable, dejando como única opción controlar la etapa 11 con la carga de reboiler.

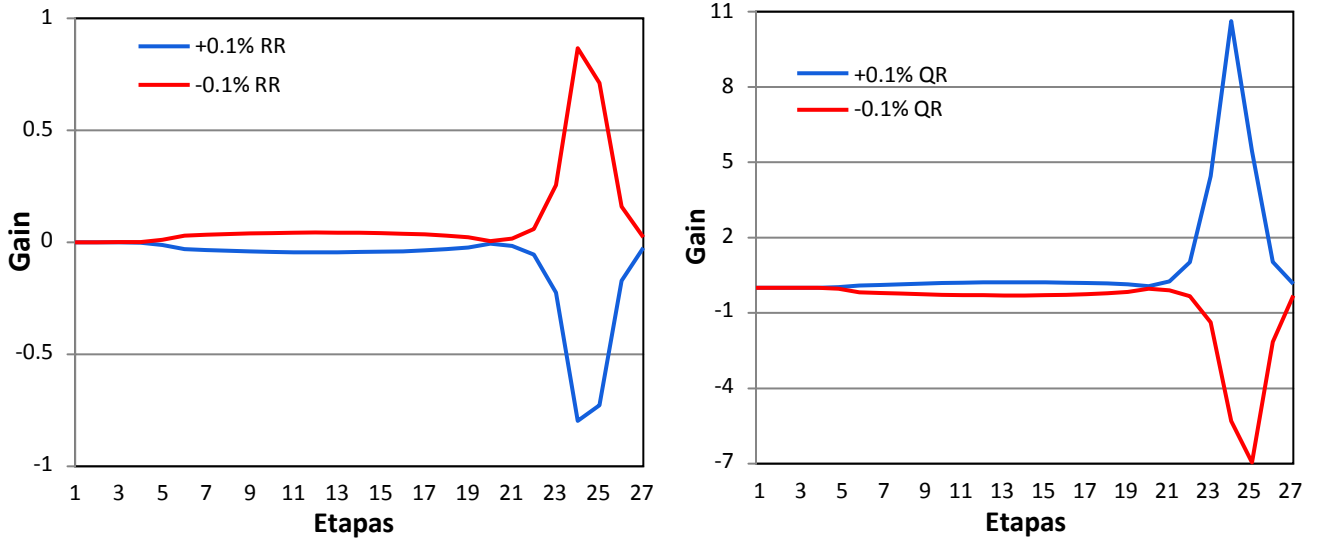


Figura 12. Perfiles de ganancia de la columna C1 del sistema convencional

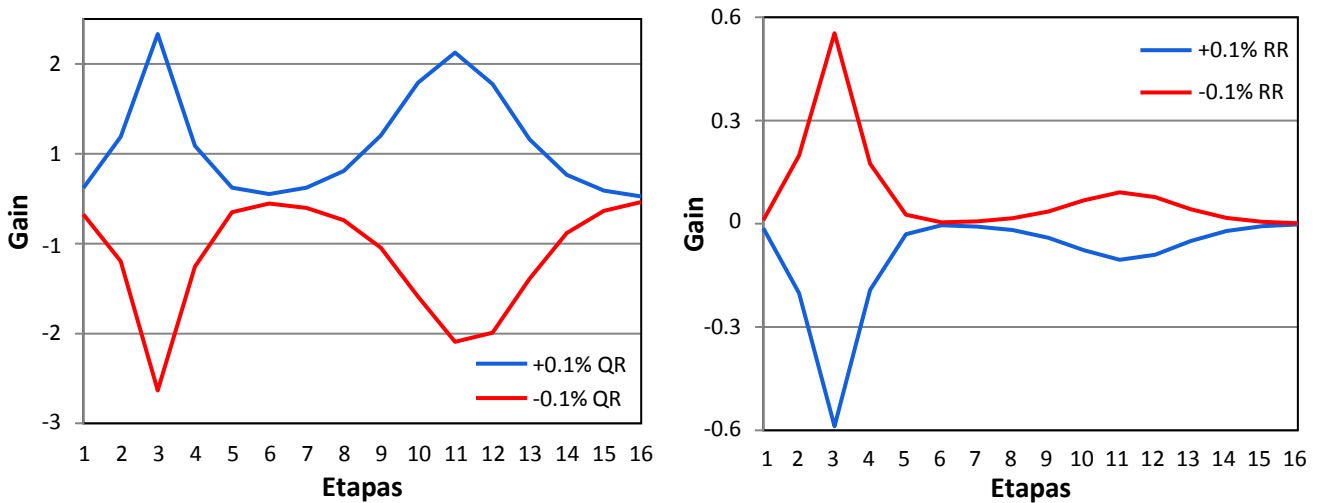


Figura 13. Perfiles de ganancia de la columna C2 para el sistema convencional

4.2.2 Sistema CPD

Las gráficas en la Figura 14 corresponden a la sección C1 en la columna con pared divisoria, que incluye la parte inferior de la columna principal y la sección izquierda de la pared divisoria en la columna. En estas gráficas se observa una ganancia significativa alrededor de la etapa 19 y 24 al manipular ambas variables, controlando la etapa 19 manipulando la separación de vapor (véase sección 4.3.2) y la etapa 24 manipulando la carga del reboiler.

La Figura 15 corresponde a la sección C2, que incluye la parte derecha de la pared, en esta se muestran los resultados de las ganancias al cambiar la razón de reflujo, siendo esta la única variable a manipular en esta sección de la CPD debido a que este sistema no requiere un segundo reboiler, eliminando efectivamente un grado de libertad en el sistema. En esta columna se observó una mayor ganancia alrededor de la etapa 21, siendo esta la etapa a controlar.

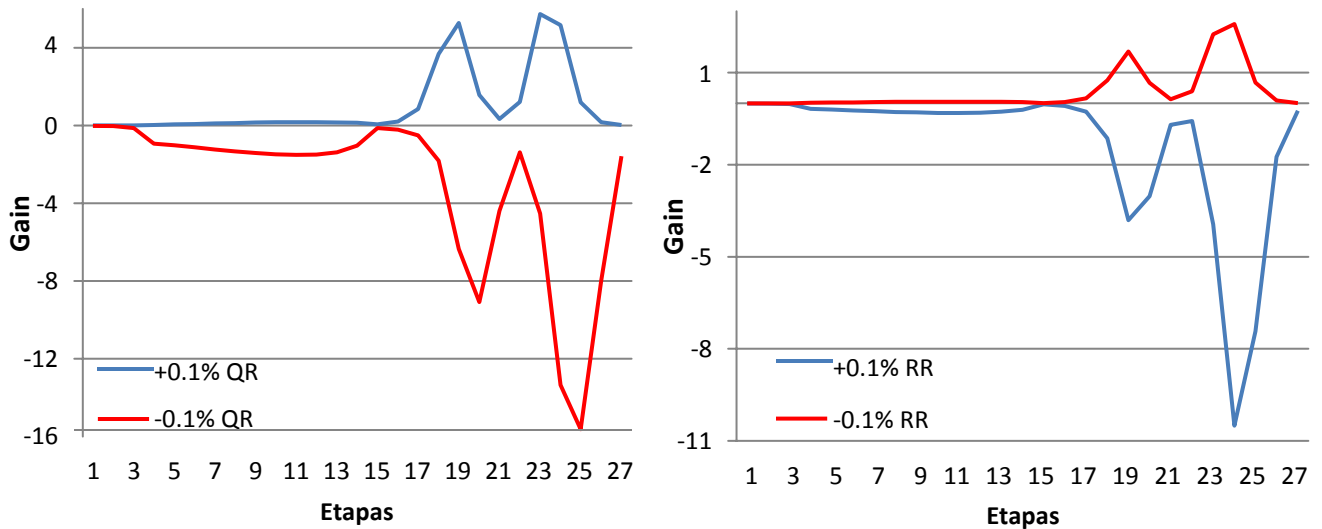


Figura 14. Perfiles de ganancia de la sección C1 para el sistema CPD

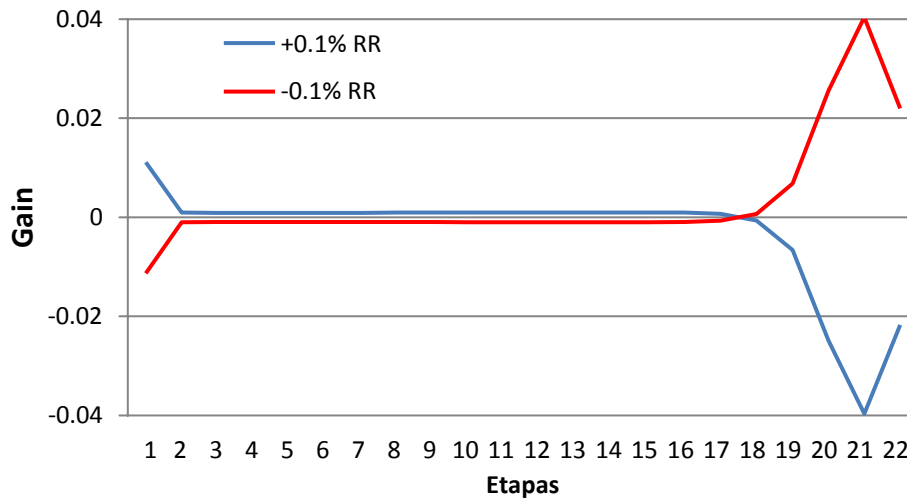


Figura 15. Perfil de ganancia de la sección C2 para el sistema CPD

4.2.3 Sistema alternativo

En la Figura 16, que corresponde a la primera columna, se observa una ganancia significativa alrededor de la etapa 19 y una pequeña ganancia que abarca entre la etapa 3 y la 14, se decidió en controlar la etapa 12 con la razón de reflujo (véase sección 4.3.3) y la etapa 19 con la carga de reboiler.

La Figura 17 corresponde a la segunda columna en el proceso, esta muestra que cambiando la carga de reboiler la etapa 6 y 12 son las más sensibles a este cambio, en este caso se seleccionó la etapa 12 a ser controlada con la carga de reboiler por su proximidad. En cambio, manipulando la razón de reflujo solo se observa una ganancia alrededor de la etapa 4, siendo esta etapa la seleccionada para ser controlada con esta variable.

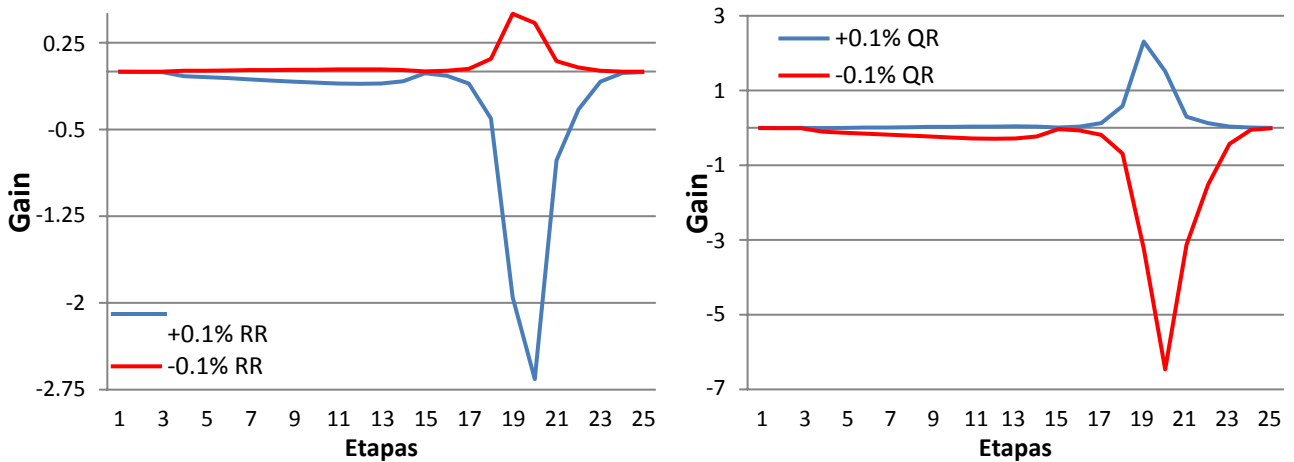


Figura 16. Perfiles de ganancia de la columna C1 para el sistema alternativo

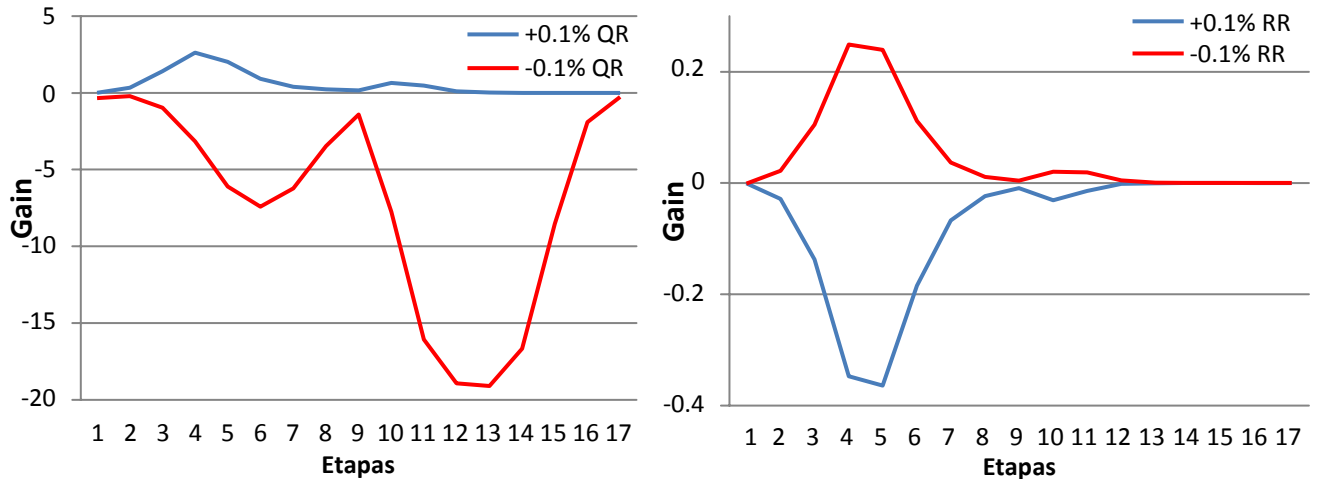


Figura 17. Perfiles de ganancia de la columna C2 para el sistema alternativo

4.3 Esquemas de control propuestas

Antes de configurar los lazos de control de temperatura en las etapas seleccionadas por el análisis de sensibilidad, primero se configuran los controladores de nivel, los controladores de presión y los controladores de flujo que se utilizarán en cada sistema, esto de acuerdo con la metodología que se describe en la sección 3.3.3.

Es importante mencionar algunas similitudes que comparten los esquemas de control entre los sistemas estudiados presentados en este trabajo:

- La presión de cada columna se controla manipulando el calor que retira el condensador localizado en la parte superior de la columna.
- El nivel de líquido del tambor de reflujo se controla manipulando la apertura de la válvula de la corriente de destilado manteniéndolo en un 50% de su capacidad.
- El flujo de alimentación se controla mediante una válvula en la corriente de alimentación.
- La temperatura en la corriente de reciclo, que corresponde al flujo de solvente, se controla manipulando el calor que retira el condensador localizado en esta misma corriente.

4.3.1 Sistema convencional

En la primera columna se instala un controlador de temperatura (TC) en la etapa 24, esto con base a los resultados del análisis de sensibilidad, manipulando la relación Q_R/F_1 en la primera columna. Al controlar el lazo de control prealimentado Q_R/F_1 , a diferencia de controlar la carga del reboiler directamente, ayuda a disminuir la desviación transitoria que pueda ocurrir con la pureza del flujo de los fondos al estabilizar el proceso. La relación de reflujo (RR_1) se mantiene fija con un controlador de relación el cual a su vez envía la señal a un controlador de flujo que manipula la corriente de reflujo. Finalmente, el nivel de líquido en la base de la columna se controla con la salida de flujo de los fondos.

En la segunda columna se instalan dos TC, uno en la etapa 11, manipulando directamente la carga Q_{R2} , y en la etapa 3, manipulando la razón de reflujo (RR_2), a diferencia de la primera columna que es fija. El nivel de líquido de la base de la columna se controla con el flujo de reposición de solvente. La apertura del flujo de los fondos de esta columna se manipula para controlar el flujo de solvente, que este a su vez depende de un controlador proporcional al flujo de alimentación.

La Tabla 2 provee los parámetros de sintonización obtenidos de los controladores de temperatura.

Tabla 2. Parámetros de los controladores de temperatura para el sistema convencional.

Controlador	TC-24-C1	TC-3-C2	TC-11-C2	TC-Reciclo
Variable controlada (°C)	$T_{24} = 101.1716$	$T_3 = 130.6381$	$T_{11} = 181.6261$	$T_{REC} = 93.7596$
Variable manipulada	Q_R/F_1	RR_2	Q_{R2} [MW]	$Q_{condensador}$ [MW]
Rango de salida del controlador	0 – 0.1193	0 – 1.65	0 - 0.4768	-0.0663 – 0
Acción del controlador	Inverso	Directo	Inverso	Inverso
Ganancia K_c	0.8364	3.8404	1.1296	0.3256
Tiempo integral τ (min)	9.24	9.24	11.88	3.96

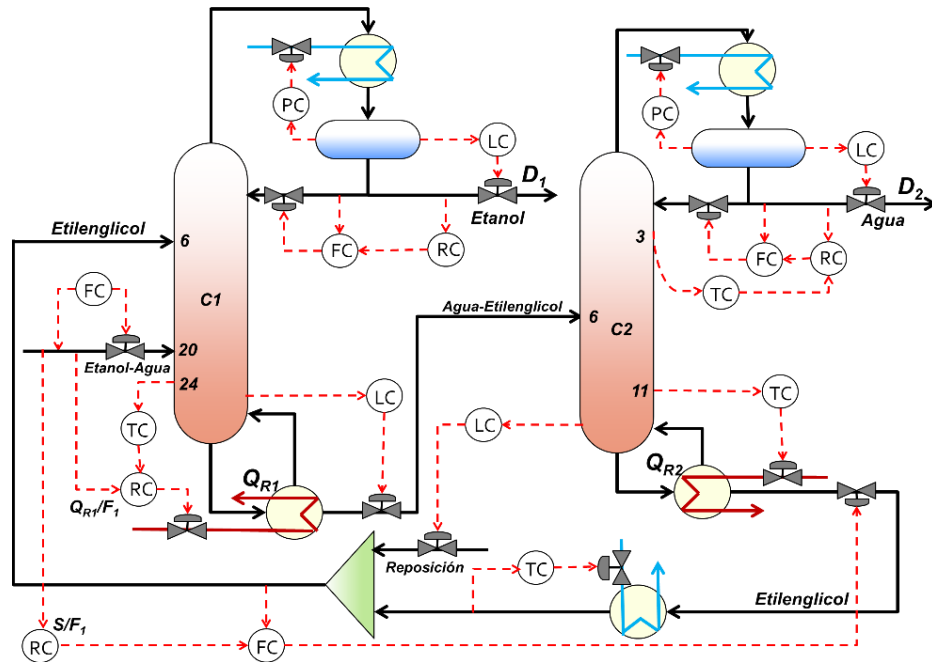


Figura 18. Estrategia de control propuesta para el sistema convencional.

4.3.2 Sistema columna con pared divisoria

Las columnas de pared divisoria por lo general mantienen una relación de flujo de vapor fija (vapor split por su nombre en inglés) al momento de separar el flujo de vapor de la columna principal a las dos secciones de la pared. Sin embargo, Tututi-Avila et al. [10] demostraron que este sistema no es capaz de poder mantener los valores de pureza deseados ante perturbaciones en la alimentación cuando se mantenía fijo el flujo de vapor. Por lo tanto, propuso manipular la relación de flujo de vapor, obteniendo resultados satisfactorios. En base a esto, en la sección C1 del sistema se utiliza un TC en la etapa 19 para controlar la separación de vapor que ocurre entre las dos secciones que se separan por la pared, con la relación V_R/Q_R y en la parte inferior se utiliza un TC en la etapa 25 manipulando la relación Q_R/F_1 , manteniendo una razón de reflujo fija en esta sección. El nivel de líquido de la base de esta sección de la columna se controla manipulando el flujo de reposición de solvente. Finalmente, el flujo de los fondos de la columna es manipulada con una relación de flujo proporcional al flujo de alimentación, de igual manera que el sistema convencional.

En la sección C2 de la columna (rectificador lateral) se utilizó un TC en la etapa 21 manipulando la razón de reflujo (RR_2) y en esta misma sección se controla el nivel de líquido que se tendría en la última etapa de esta sección con un LC manipulando la apertura de la válvula. La Tabla 3 muestra los parámetros de sintonización de los controladores clave para el sistema de pared divisoria.

Tabla 3. Parámetros de los controladores de temperatura para el sistema CPD.

Controlador	TC-19-C1	TC-25-C1	TC-21-C2	TC-Reciclo
Variable controlada (°C)	$T_{19} = 102.1083$	$T_{25} = 191.9685$	$T_{21} = 114.2674$	$T_{REC} = 109.17$
Variable manipulada	V_R/Q_R	Q_R/F_1	RR_2	$Q_{condensador}[MW]$
Rango de salida del controlador	0 – 4.6455	0 – 0.1426	0 - 0.2449	-0.4597 – 0
Acción del controlador	Directo	Inverso	Directo	Inverso
Ganancia K	3.1959	1.2777	16.4	0.4259
Tiempo integral τ (min)	19.8	9.24	17.16	3.96

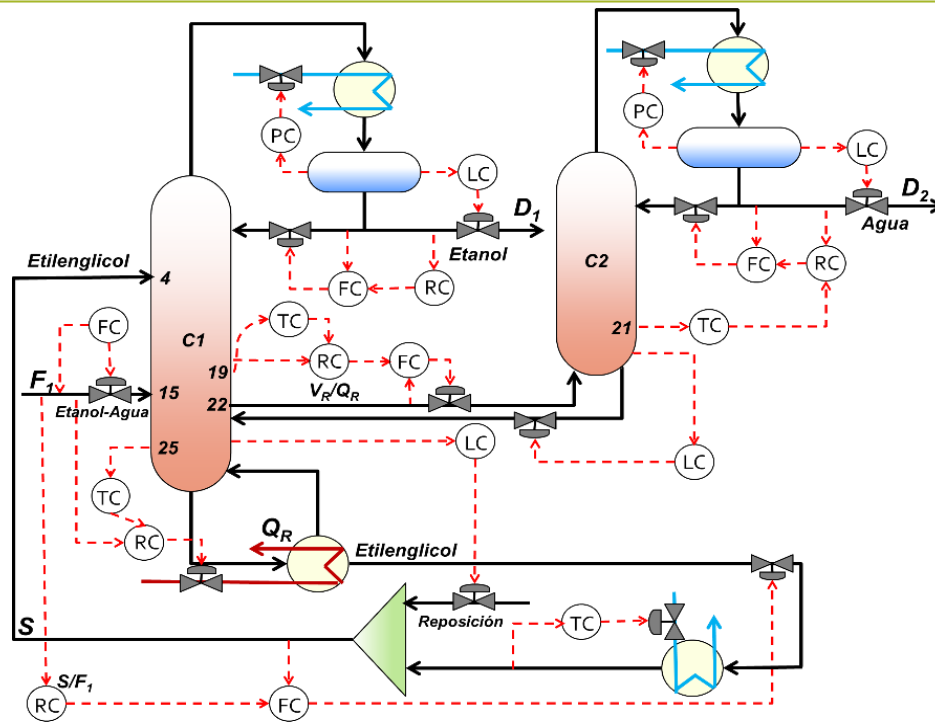


Figura 19. Estrategia de control propuesta para el sistema CPD.

4.3.3 Sistema alternativo

Es importante mencionar que de acuerdo a la literatura una gran cantidad de columnas de destilación se configuran con un solo controlador de temperatura y su desempeño es eficiente. Por lo que, en la primera columna del sistema alternativo se instaló inicialmente solo un TC en la etapa 19 controlando la relación Q_{R1}/F_1 tal como se hizo en el sistema convencional, sin embargo, este controlador por sí solo no logró controlar la columna. Entonces, se optó por manipular la razón de reflujo con un TC, aunque los resultados del análisis de sensibilidad no lo hayan sugerido en primera instancia. Para escoger la etapa con la cual aparear la razón de reflujo (RR_1), se sabe por regla heurística que tiene que ser una etapa en la parte superior de la columna lo más cercano al domo y de acuerdo al análisis de sensibilidad se tiene una pequeña área de ganancia entre la etapa 3 a la 14 como se puede observar en la Figura 16, siendo la etapa 12 la que tiene un valor mayor de ganancia, por lo tanto se decidió por controlar la etapa 12 con la razón de reflujo. Para controlar el flujo lateral de la columna C1, se manipula la apertura de la válvula con un controlador de relación que dependerá del flujo de líquido que llega a esta etapa y el flujo de líquido que regresa a la columna en el flujo de destilado.

En la segunda columna se instaló un lazo de control de temperatura la etapa 4 manipulando la razón del reflujo, mientras que la carga del reboiler fue manipulada con un TC en la etapa 12 usando la relación Q_{R2}/F_2 . El nivel del líquido de la base de ambas columnas y el flujo de los fondos de la columna C2 tiene las mismas características que el esquema de control del sistema convencional. La Tabla 4 muestra los parámetros de sintonización de los controladores clave para el sistema alternativo.

En este sistema de control, se requirió un controlador de temperatura adicional para poder estabilizar de manera satisfactoria el sistema, aunque esto en primera instancia pareciera ser una desventaja ante los otros dos sistemas, sin embargo, el agregar un controlador adicional no afecta el desempeño de los demás

controladores, más bien contribuye a la eficacia global del sistema de control. Además, los controladores de temperatura. son baratos y requieren un bajo costo de mantenimiento.

Tabla 4. Parámetros de los controladores de temperatura para el sistema alternativo.

Controlador	TC-12-C1	TC-19-C1	TC-4-C2	TC-12-C2	TC-Reciclo
Variable controlada (°C)	$T_{12} = 96.7048$	$T_{19} = 94.2582$	$T_4 = 107.1807$	$T_{12} = 195.9416$	$T_{REC} = 131.74$
Variable manipulada	RR_1	Q_{R1}/F_1	RR_2	Q_{R2}/F_2	$Q_{condensador}$ [MW]
Rango de salida del controlador	0 – 1.107	0 – 0.1186	0 - 0.2102	0 - 0.0583	-0.2433 – 0
Acción del controlador	Directo	Inverso	Directo	Inverso	Inverso
Ganancia K_c	2.2938	0.8	156.6682	3.4488	0.6962
Tiempo integral τ (min)	22.44	11.88	10.56	7.92	3.96

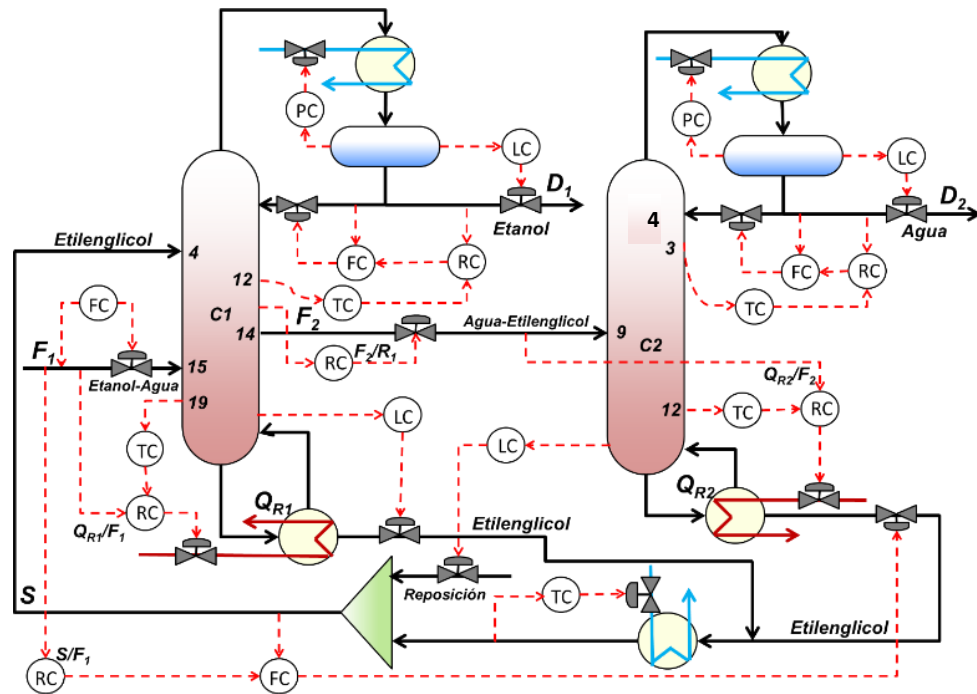


Figura 20. Estrategia de control propuesta para el sistema alternativo.

4.4 Respuestas de las estrategias de control

En los tres sistemas estudiados se realizaron cambios escalón simulando una perturbación en el flujo de la alimentación F_1 , se hicieron cambios de $\pm 20\%$ del flujo molar y cambios en la composición de etanol de ± 0.04 de su valor nominal. La Figura 21 en la gráfica de la izquierda muestra los cambios escalón al cambiar el flujo molar de alimentación en un $\pm 20\%$ de su valor nominal y la gráfica de la derecha muestra el efecto de cambiar la composición de etanol en el flujo de alimentación, en esta se observa un pequeño pico debido al cambio de flujo másico en la corriente, ya que se mantiene el flujo molar pero el flujo másico cambia, el flujo vuelve a su valor inicial gracias al controlador de flujo (FC) que manipula la entrada de la válvula.

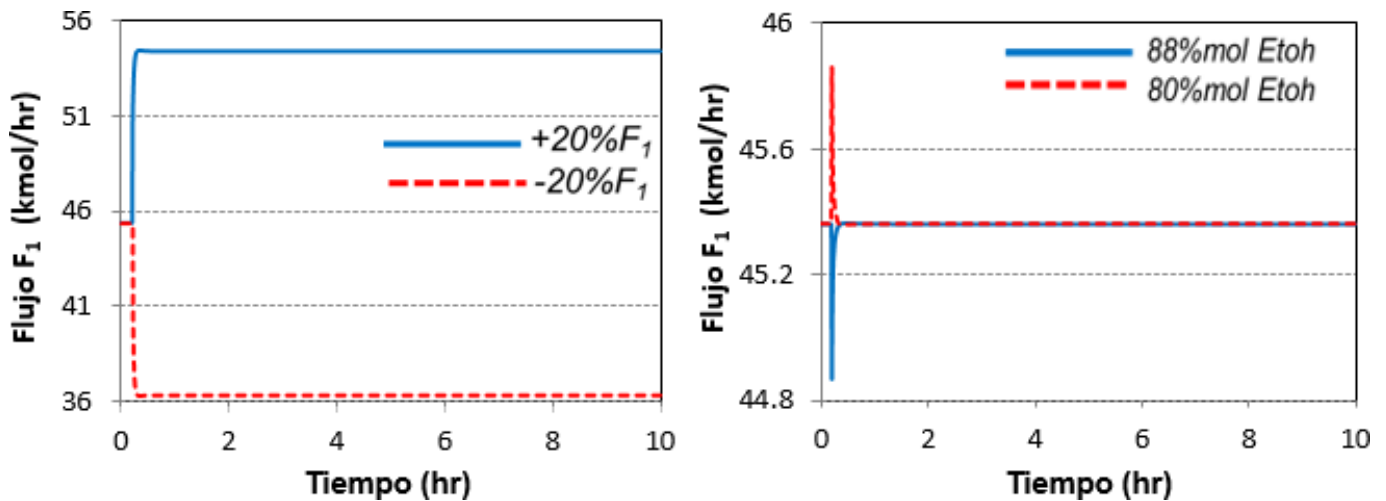


Figura 21. Respuestas dinámicas en el flujo F_1 en los tres sistemas ante las diferentes perturbaciones realizadas.

Las Figuras 22 y 23 compara el desempeño dinámico de los tres sistemas al cambiar el flujo molar de alimentación. En ambos casos todos los sistemas regresan a un valor cercano a su valor nominal una vez estabilizado, teniendo un tiempo de respuesta de aproximadamente 2 horas, después de aplicar la perturbación. Además, se observa que el sistema convencional muestra una mayor desviación transitoria de su valor nominal, en comparación al sistema CPD

y alternativo, siendo menor al 1% en ambos casos. En cambio, el sistema alternativo demostró una desviación transitoria menor a los demás sistemas, siendo cerca de 0.1%.

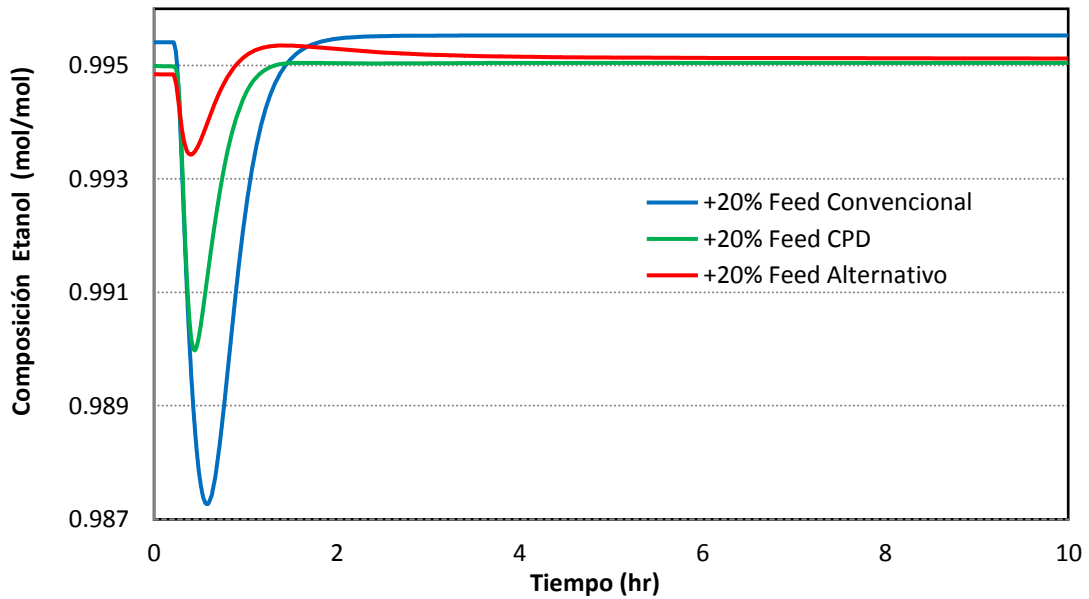


Figura 22. Gráfica comparativa de la composición de etanol en la corriente D₁ de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en el flujo de alimentación de +20%.

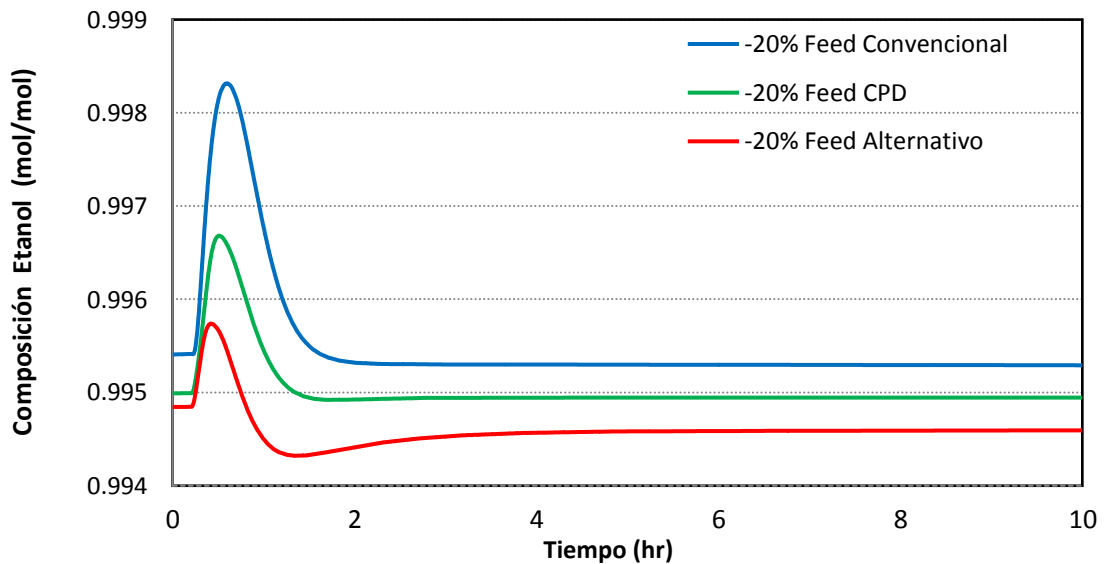


Figura 23. Gráfica comparativa de la composición de etanol en la corriente D₁ de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en el flujo de alimentación de -20%.

En la Figura 24 se observa que al cambiar la composición de etanol en el flujo de alimentación a 88%, se observan diferencias positivas en la composición de etanol en la corriente D_1 de su valor nominal de 5×10^{-4} y 1.3×10^{-3} en el sistema convencional y CPD, respectivamente. En cambio, el sistema alternativo regresa a su valor nominal.

En la Figura 25, al cambiar la composición a 80% etanol en la alimentación se observan diferencias negativas en la composición de etanol en la corriente D_1 , siendo el sistema CPD el que tiene la mayor diferencia con un valor de 1.6×10^{-3} de su valor nominal, mientras que los sistemas convencional y alternativo tienen una diferencia de 1×10^{-3} y 5×10^{-4} , respectivamente. Sin embargo, el sistema alternativo le toma aproximadamente 5 horas en estabilizarse por completo después de aplicar la perturbación al sistema, a diferencia de los otros dos sistemas que se estabilizan en un tiempo de 2 horas aproximadamente.

En cuanto a las desviaciones transitorias, ninguno de los sistemas supero una desviación del 0.2% de su valor nominal cambiando la composición de la alimentación.

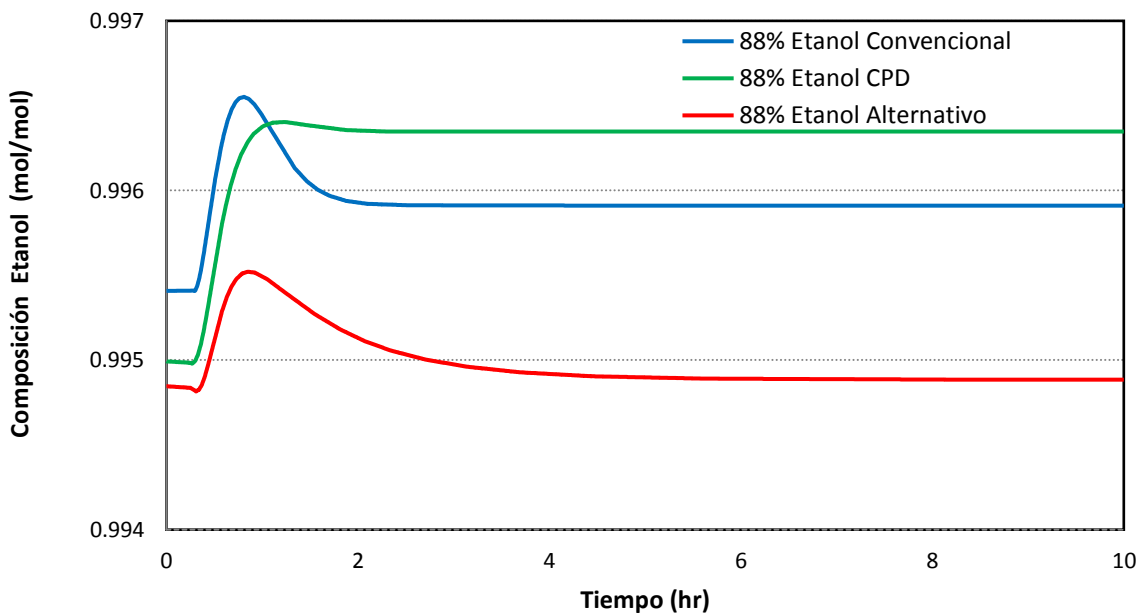


Figura 24. Gráfica comparativa de la composición de etanol en la corriente D_1 de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en la composición de alimentación de +0.04 etanol.

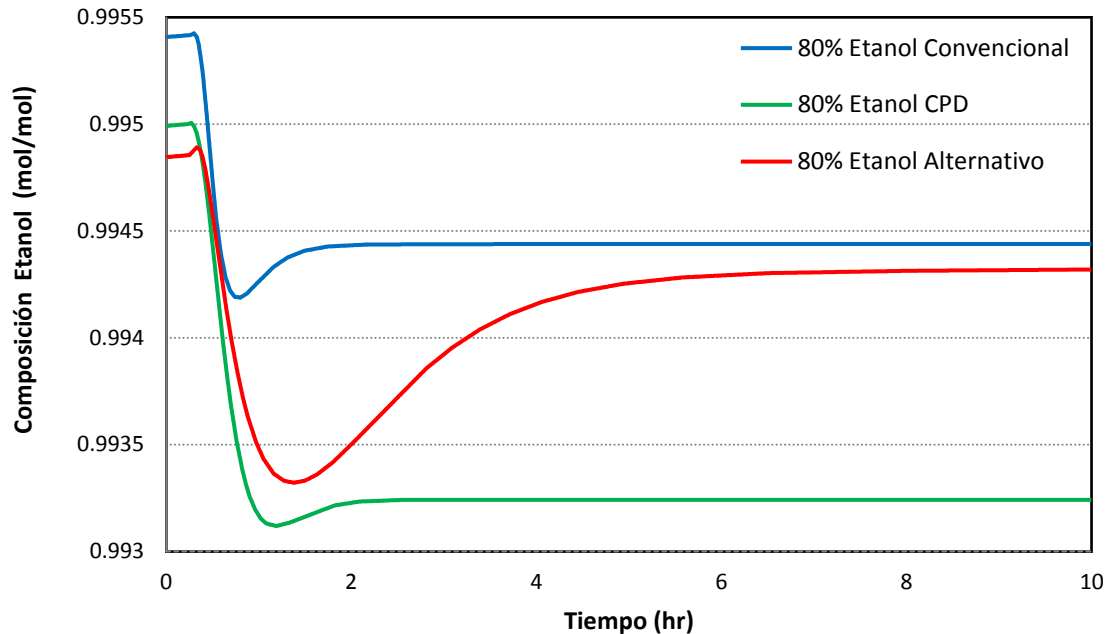


Figura 25. Desempeño dinámico de la composición de etanol en la corriente D_1 de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en la composición de alimentación de -0.04 etanol.

En los tres sistemas estudiados al aplicar las perturbaciones en la alimentación, la composición de etanol una vez estabilizado el sistema, esta nunca alcanza un valor menor a 99 % mol en ningún caso. El sistema de CPD obtuvo el valor más bajo de pureza cuando se disminuyó la composición de etanol a 80 % en la alimentación, la cual llegó a un valor cercano de 99.3 % mol, sin embargo, a pesar de este resultado la composición en el destilado para el etanol sigue cumpliendo con las normas internacionales para su uso como biocombustible.

Las Figuras 26 y 27 muestran los resultados dinámicos de la pureza del agua al cambiar el flujo molar en la alimentación, en estas figuras se observa que el sistema alternativo es el que tiene un punto mayor de desviación transitoria comparado a los tres sistemas, siendo de 0.13% al aumentar el flujo de alimentación 20 % y de 0.33% al disminuir el flujo de alimentación 20 % de su valor inicial, el sistema alternativo también presenta la mayor diferencia de su punto nominal al final una vez estabilizado, esta diferencia siendo de 5×10^{-4} aproximadamente en ambos casos. Por otro lado, el sistema convencional y el

sistema CPD tuvieron una desviación transitoria menor en comparación al sistema alternativo, contrastando los resultados obtenidos en las Figuras 22 y 23, donde el sistema alternativo en el flujo de etanol fue el que obtuvo una menor desviación transitoria. También el sistema convencional y el sistema CPD regresaron a un valor de pureza muy similar al inicial una vez estabilizado.

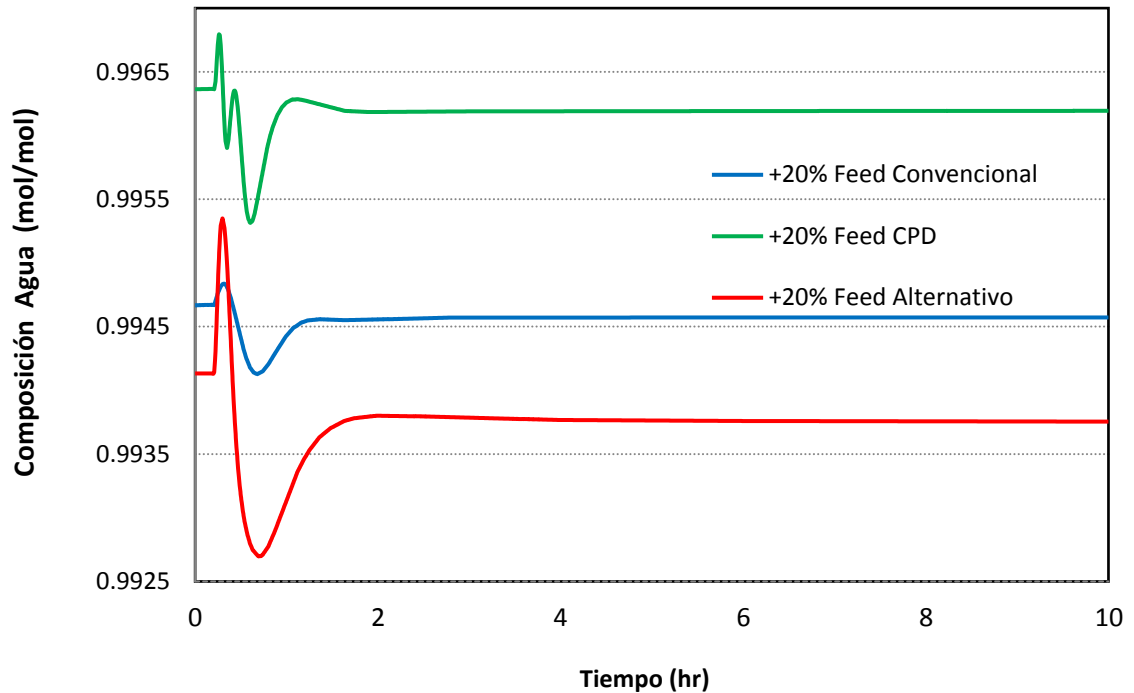


Figura 26. Gráfica comparativa de la composición de agua en la corriente D₂ de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en el flujo de alimentación de +20%.

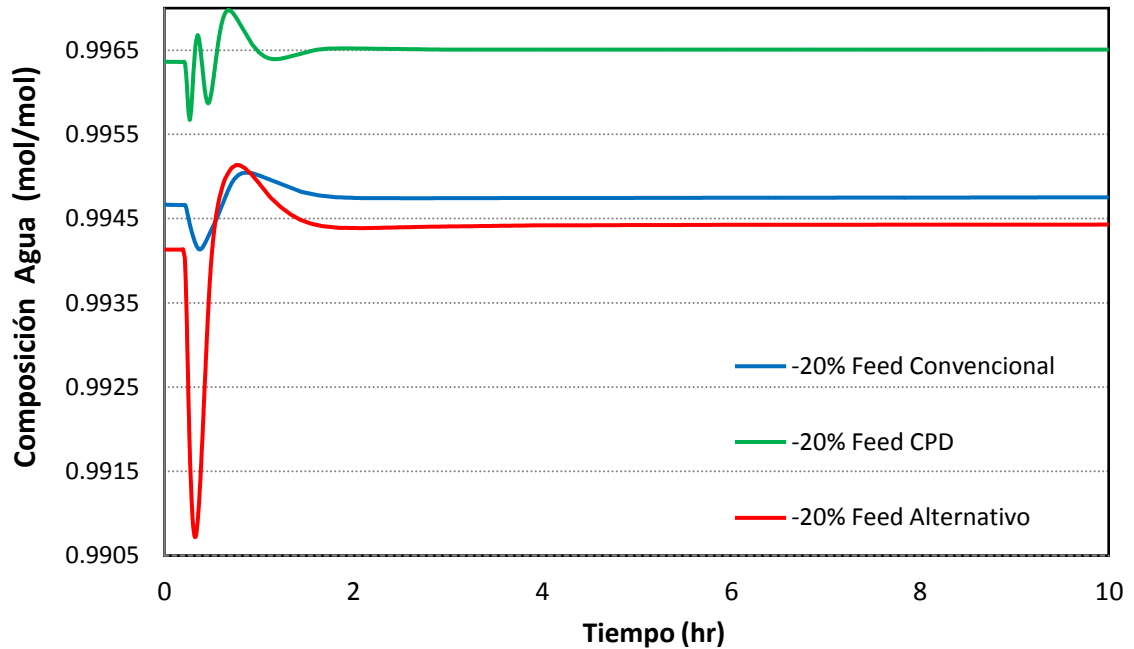


Figura 27. Gráfica comparativa de la composición de agua en la corriente D₂ de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en el flujo de alimentación de -20%.

La Figura 28 muestra que, al aumentar la composición de etanol en la alimentación, el sistema CPD presenta una desviación transitoria de 0.33 % de su valor inicial, mientras que los sistemas convencional y alternativo presentan desviaciones cercanas a 0.1 %. Una vez estabilizado el proceso, el sistema CPD y alternativo regresaron a un valor cercano al inicial, mientras que el sistema convencional aumento su composición en un 5×10^{-4} su composición.

En la Figura 29 se observa que, al disminuir la composición de etanol en la alimentación, el sistema convencional, CPD y alternativo presentan una desviación transitoria de 0.05 %, 0.16 % y 0.10 %, respectivamente. Una vez estabilizados, los sistemas CPD y alternativo regresan a un valor cercano al inicial, mientras que, el sistema convencional tiene una diferencia de 7×10^{-4} .

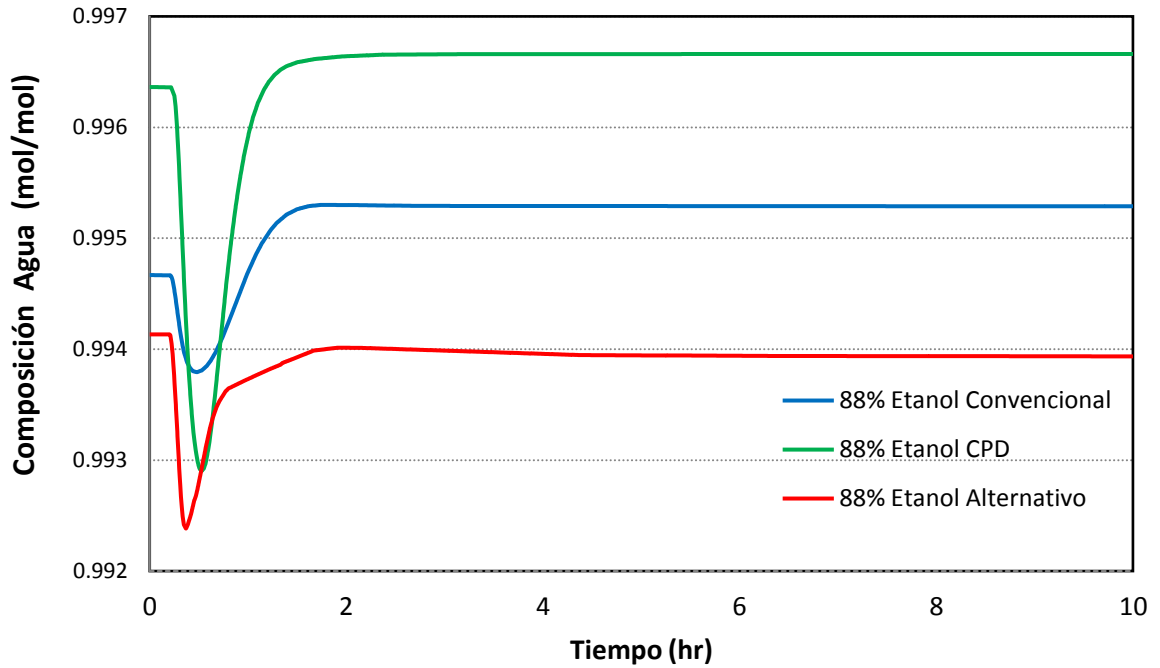


Figura 28. Gráfica comparativa de la composición de agua en la corriente D₂ de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en la composición de alimentación de +0.04 etanol.

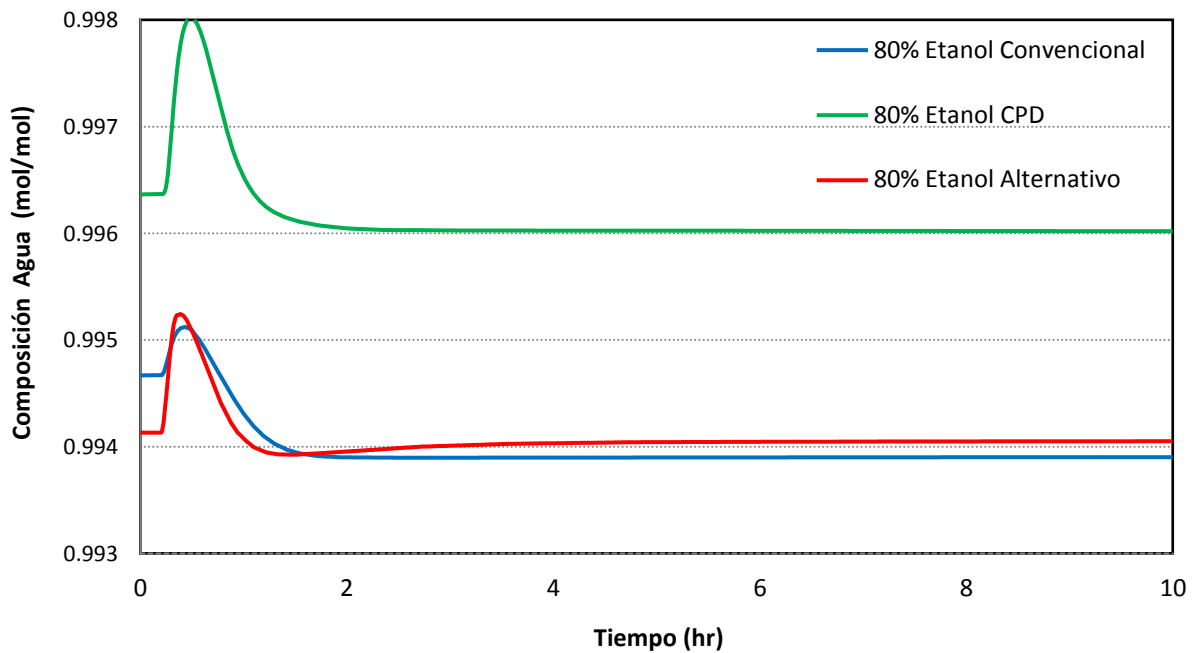


Figura 29. Gráfica comparativa de la composición de agua en la corriente D₂ de los tres sistemas estudiados, ante un cambio en la composición de alimentación de -0.04 etanol.

Las Figuras 30 a la 35 muestran las respuestas dinámicas correspondientes a las corrientes más relevantes de los tres sistemas, cómo flujo de solvente (S), el flujo de destilado de etanol (D_1) y el del agua (D_2), así como los controladores de temperatura instalados en las columnas de cada sistema respecto a la perturbación realizada al sistema.

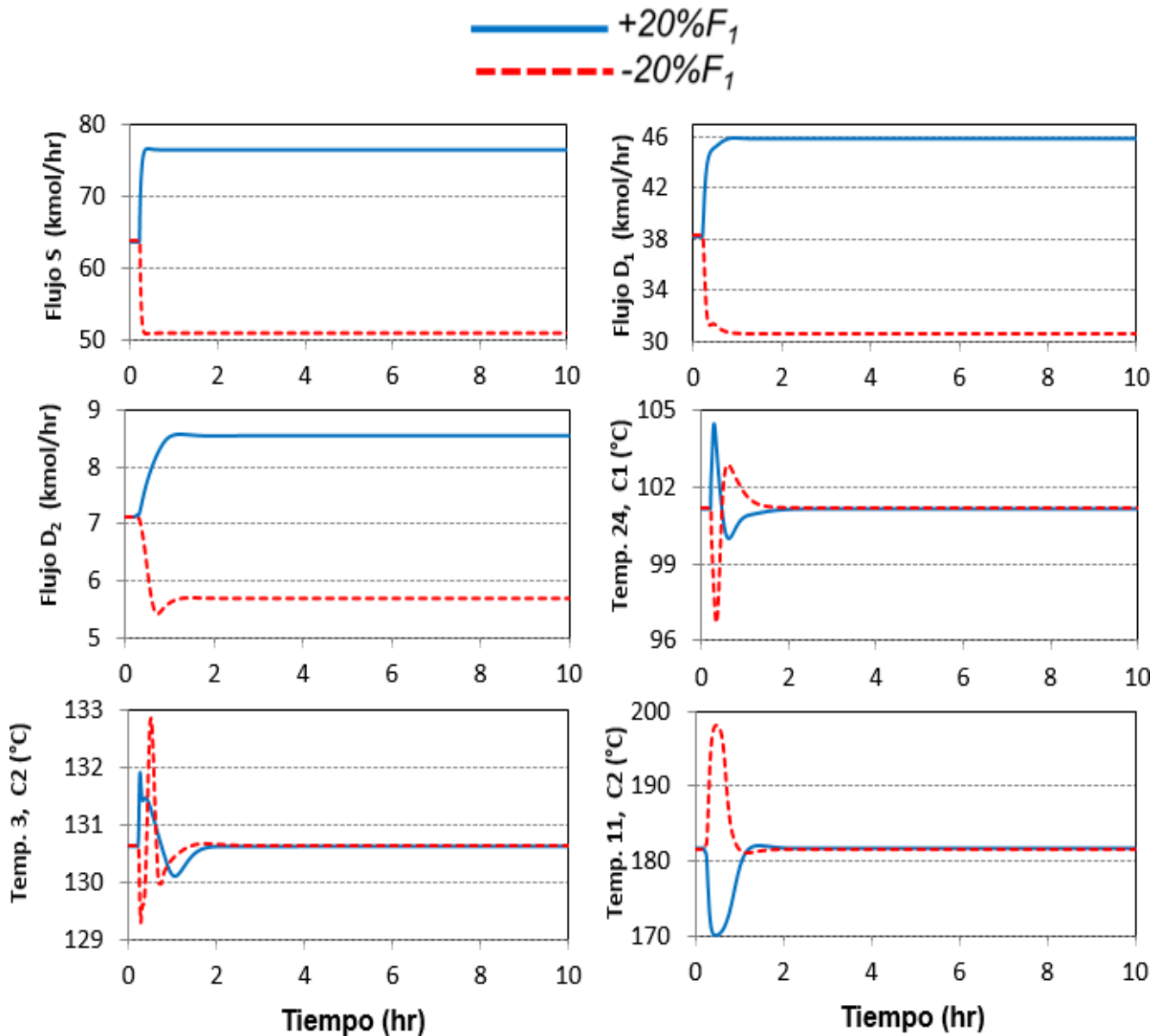


Figura 30. Respuestas dinámicas ante un cambio de flujo en F_1 en el sistema

Las respuestas correspondientes al flujo del solvente (S) de las Figuras 30 a la 35 muestran cómo cambia proporcionalmente el flujo del solvente respecto al flujo de alimentación, esto debido al controlador de relación (RC) que relaciona ambas corrientes, comportándose de la misma manera en los tres sistemas estudiados al realizar una perturbación en el flujo total de alimentación. Al realizar perturbaciones en la composición del flujo de alimentación solo se observa un pico regresando rápidamente a su valor nominal, por las observaciones realizadas en la Figura 21.

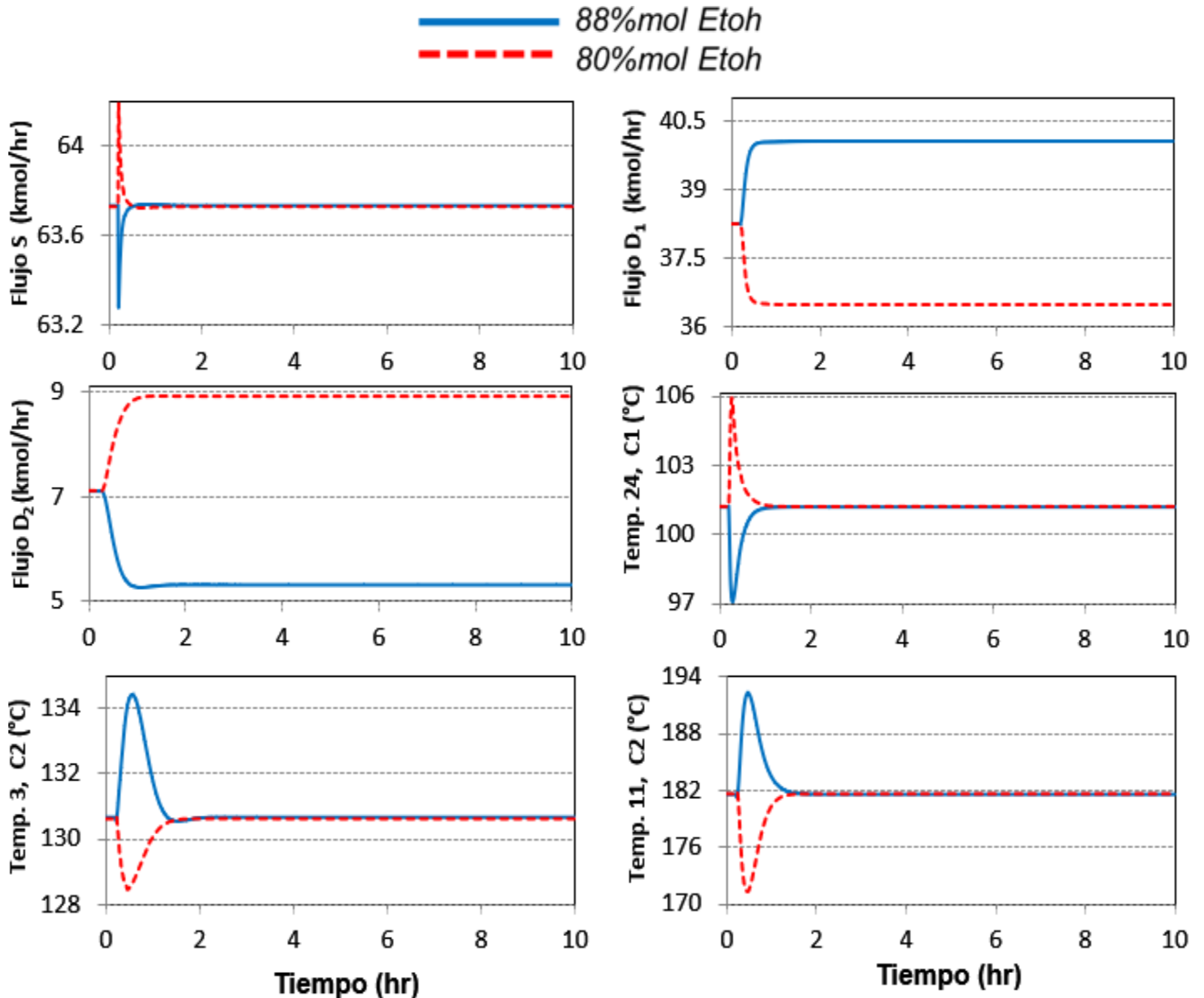


Figura 31. Respuestas dinámicas ante un cambio de composición en F_1 en el sistema convencional.

Analizando las Figuras 30 a la 35, en los resultados dinámicos correspondientes a las corrientes de los destilados D_1 y D_2 se observa un cambio tipo escalón proporcional al cambio realizado en el flujo total de la alimentación, ya que, al incrementar la entrada al sistema, las salidas también tienen que incrementar. Mientras que, al cambiar la composición de alimentación se observa que, al aumentar la composición de etanol en la alimentación, aumenta el flujo D_1 que corresponde al flujo de salida del etanol y disminuye el flujo D_2 que corresponde al flujo de salida del agua y viceversa al disminuir la composición de etanol.

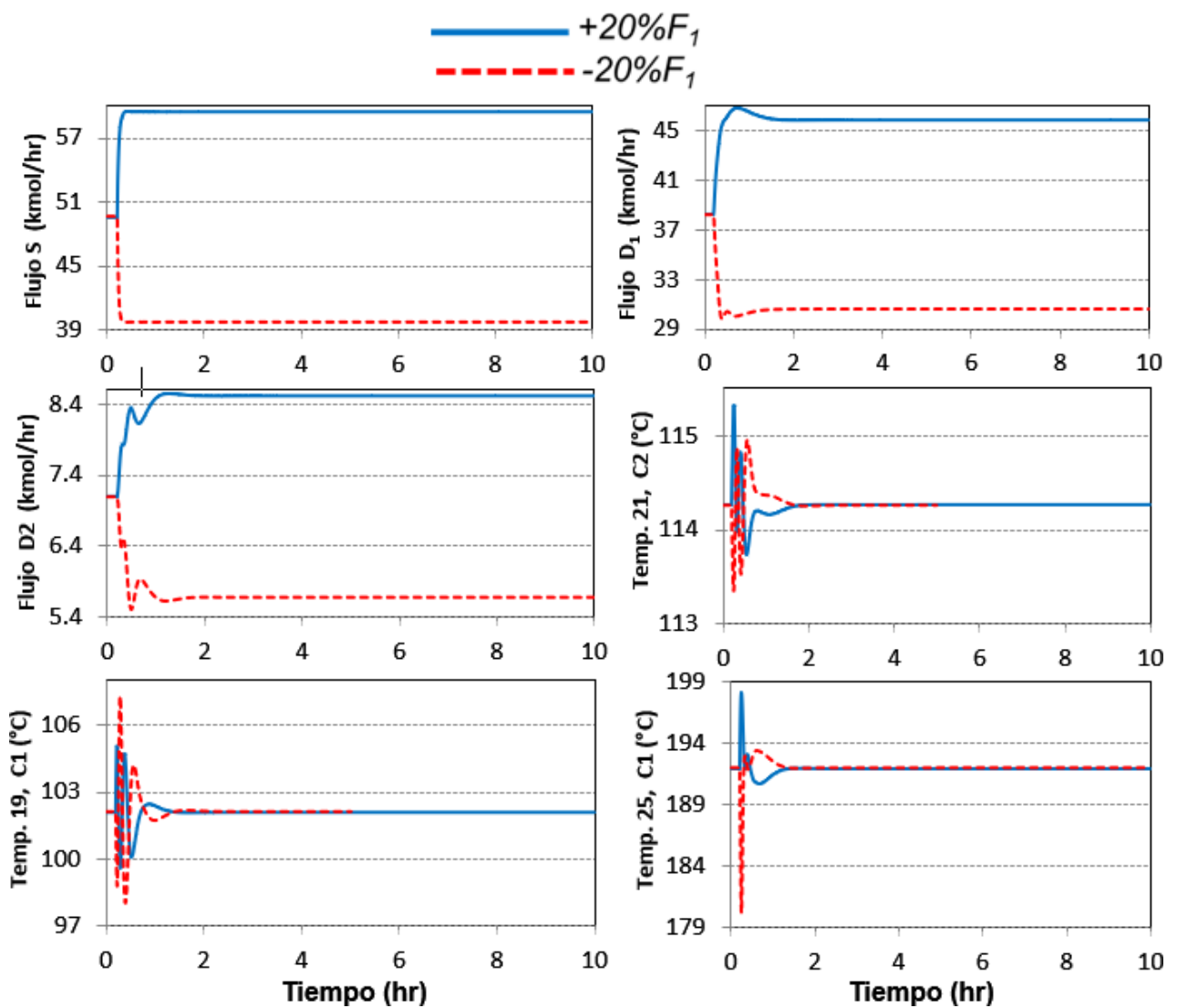


Figura 32. Respuestas dinámicas ante un cambio de flujo en F_1 en el sistema CPD.

Las respuestas correspondientes a los diferentes controladores de temperatura muestran como mitigan los disturbios ocasionados por las perturbaciones de manera rápida en general, en la mayoría de los casos requieren un poco menos de 2 horas para regresar a su valor inicial, este tiempo es igual a lo que tarda el sistema en estabilizar la composición de los destilados.

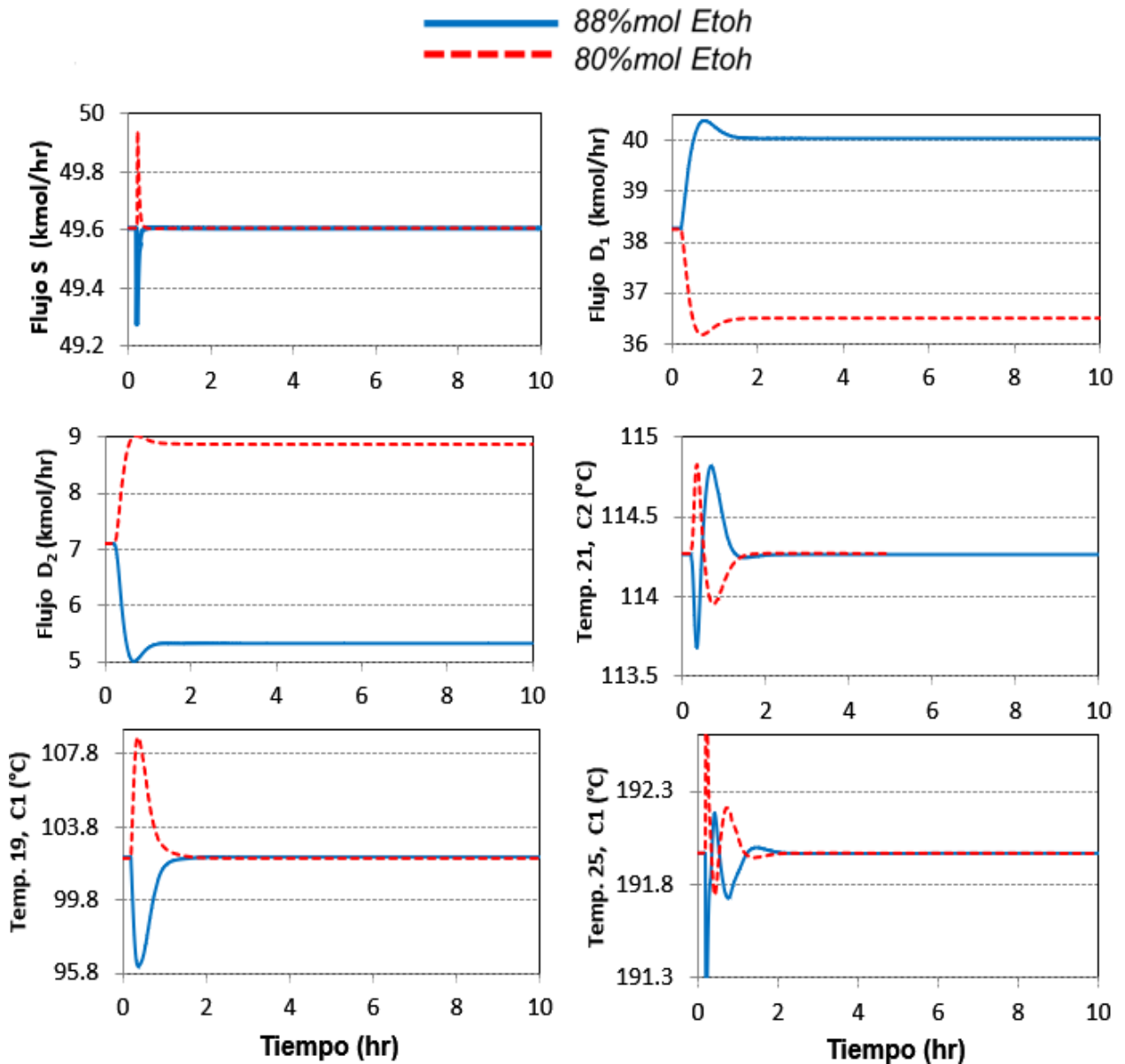


Figura 33. Respuestas dinámicas ante un cambio de composición en F₁ en el sistema

Las respuestas dinámicas del esquema de control del sistema alternativo mostradas en las Figuras 34 y 35, muestran que los controladores de temperatura operan adecuadamente, permitiendo que la respuesta regrese a su valor nominal después de aplicar los cambios de flujo y composición en la alimentación. También, se observa en estas dos figuras como las gráficas correspondientes a la temperatura de la etapa 12 como el TC ayuda a estabilizar el sistema, siendo esta etapa la que en un principio no se sugería en nuestro análisis de sensibilidad, como se comentó en la sección 4.3.3.

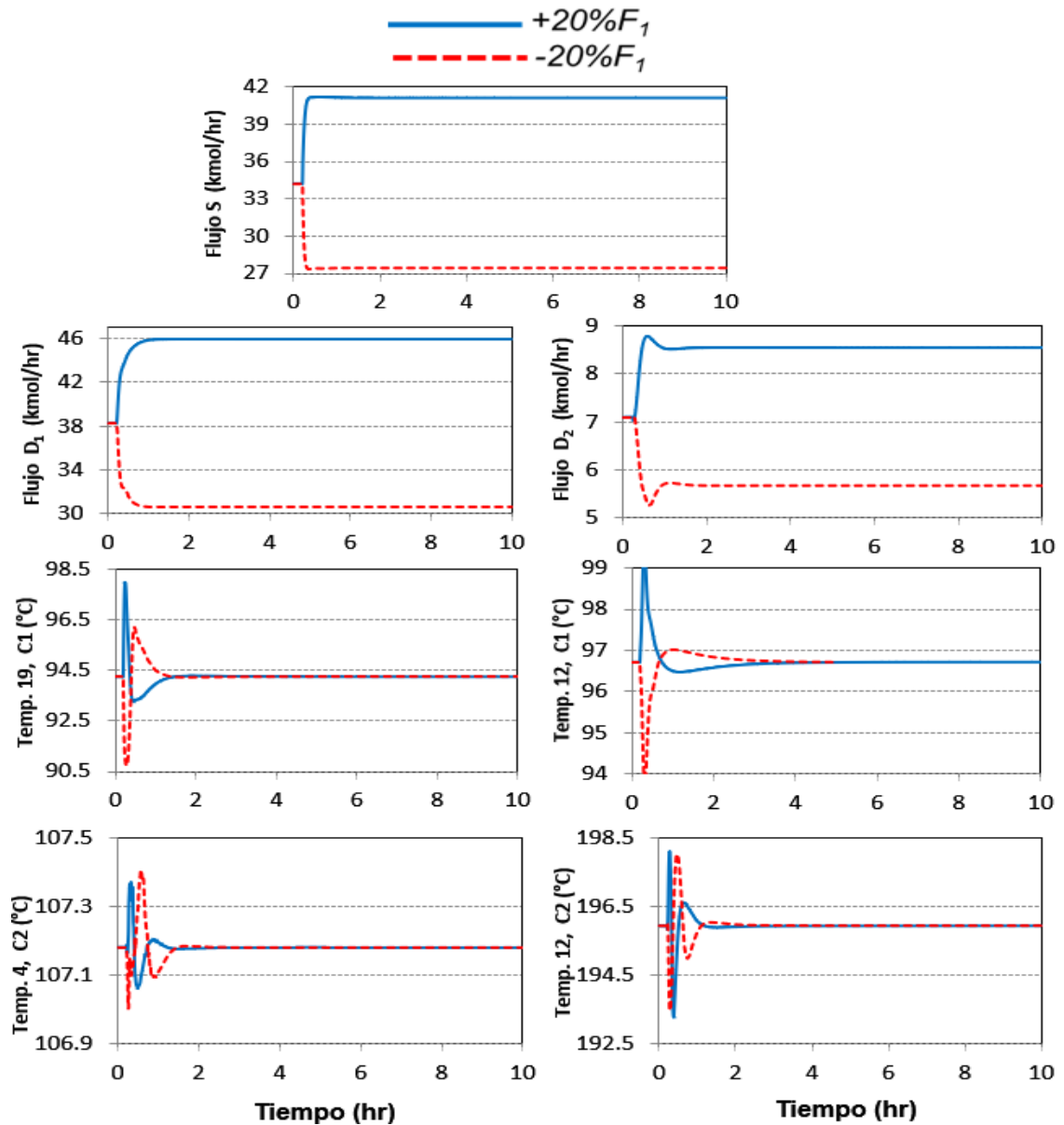


Figura 34. Respuestas dinámicas ante un cambio de flujo en F_1 en el sistema alternativo.

La Figura 35 muestra los resultados cuando se cambió la composición de etanol en la alimentación y se observa que los TC de la etapa 12 y 19 de la columna C1 tienen una estabilización más suave y lenta, requiriendo cerca de 5 horas para regresar a su valor inicial.

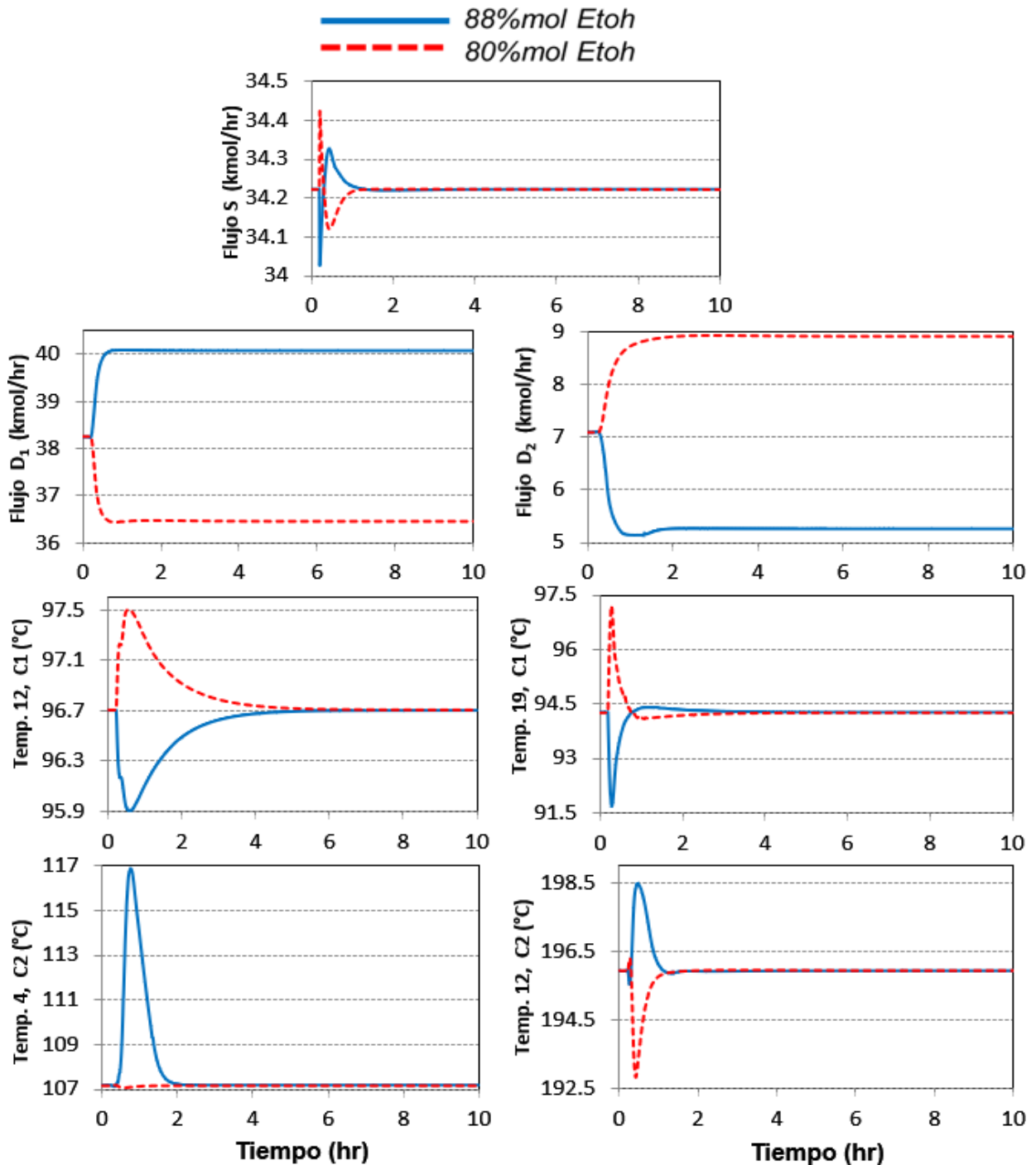


Figura 35. Respuestas dinámicas ante un cambio de composición en F_1 en el sistema alternativo.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se propuso un esquema de control que fue capaz de mantener la pureza del producto bioetanol dentro de las especificaciones internacionales para ser utilizado como combustible. El esquema de control propuesto se implementó en una columna de destilación extractiva con salida lateral (sistema alternativo) el cual es un sistema de destilación energéticamente eficiente. Para demostrar la efectividad de esquema de control, el trabajo se dividió en dos etapas.

En la primera etapa se investigaron, se simularon y se optimizaron los tres sistemas de destilación estudiados, los cuales fueron la columna con salida lateral, la columna extractiva de pared divisoria (CPD) y el sistema convencional. En la segunda etapa se desarrollaron esquemas de control capaces de rechazar disturbios comunes en la alimentación usando sistemas de control de temperatura los cuales son los más utilizados en las industrias.

Para determinar los diseños óptimos se desarrollaron códigos de programación que permitieron la vinculación del software Aspen Plus con MATLAB. Para la optimización se tomó en cuenta la minimización del costo total anual (CTA). Se hizo uso del toolbox de algoritmos genéticos para determinar los diseños óptimos teniendo como restricciones los requerimientos de pureza de etanol, así como restricciones físicas o estructurales y heurísticas del sistema. Los resultados mostraron que, los sistemas CPD y el alternativo disminuyeron el costo total anual en un 10.68% y en un 11.75%, respecto al sistema convencional. Además, aunque el sistema alternativo tuvo costos de capital mayores respecto al sistema de pared divisoria, este sistema es más eficiente en términos energéticos.

Respecto al análisis dinámico, las simulaciones en estado estable se exportaron al simulador Aspen Dynamics en donde se configuraron los esquemas de control propuestos utilizando controladores de temperatura para los tres sistemas estudiados. Los resultados dinámicos, después de la sintonización de los

controladores, muestran como los tres sistemas de destilación se estabilizaron en tiempos relativamente cortos y con desviaciones de transición mínimas después de aplicar perturbaciones en la alimentación de flujo y composición. La literatura consultada considera una buena controlabilidad cuando el proceso presenta una desviación transitoria menor o igual al 5% y una diferencia entre el valor inicial al final menor o igual al 1%. En nuestro caso se cumplieron ambos criterios, obteniendo de manera general desviaciones de transición menores al 1% y la mayor diferencia de valor inicial al final fue de 0.2% en el sistema CPD como lo muestra la Figura 25. Esto a su vez confirma que las etapas controladas con los controladores de temperatura en cada columna fueron las adecuadas.

Los sistemas de destilación estudiados tienen buenas propiedades de control ya que es posible mantener las purzas de los productos cerca de sus valores nominales cuando se imponen perturbaciones en la alimentación. El sistema alternativo y el sistema con columna de pared divisoria mostraron un desempeño dinámico similar al sistema convencional. Aunque, el sistema alternativo requirió de cinco horas aproximadamente para estabilizarse cuando se redujo la composición de etanol en la alimentación, el producto de destilado cumplió con las especificaciones de pureza en todo momento.

Es importante notar que la principal contribución de este trabajo es que se generó un esquema de control que, al ser comparado en términos dinámicos, las respuestas del sistema con salida lateral contra los resultados del sistema convencional y con los del sistema con pared divisoria, estos fueron satisfactorios al estabilizar el sistema en tiempos cortos y cumplir con los requerimientos de pureza, lo cual es un indicativo de que el sistema alternativo además de tener el mejor desempeño económico de los tres sistemas de destilación estudiados, el sistema alternativo puede ser efectivamente controlado con un esquema de control apropiado. Por lo tanto, el sistema de destilación con salida lateral es un serio candidato para considerar para el proceso industrial de deshidratación de etanol.

REFERENCIAS

1. *BP Statistical Review of World Energy 2016*
<<https://web.archive.org/web/20180908140537/https://www.bp.com/content/dam/bp/pdf/energy-economics/statistical-review-2016/bp-statistical-review-of-world-energy-2016-full-report.pdf>>
2. “*El clima en peligro. Una guía fácil del 4to informe del IPCC*”
<<https://www.asturias.es/medioambiente/articulos/ficheros/Emisiones%20Mundiales%20de%20Gases%20de%20efecto%20invernadero.pdf>>
3. **U.S. Energy Information Administration** “*How much ethanol is in gasoline, and how does it affect fuel economy?*”
<https://www.eia.gov/tools/faqs/faq.php?id=27&t=10>
4. *Especificaciones para etanol como combustible – ANP 36/2005, prEN 15376/2007, ASTM D 4806 – 07a* http://pdf.blucher.com.br.s3-sa-east-1.amazonaws.com/openaccess/sugarcane-bioethanol/SUGARCANEETHANOL_67.pdf
5. **Frolkova, A. K., & Raeva, V. M. (2010)**. Bioethanol dehydration: State of the art. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*.
<https://doi.org/10.1134/S0040579510040342>
6. **Gerbaud, V., Rodriguez-Donis, I., Hegely, L., Lang, P., Denes, F., & You, X. Q. (2019)**. Review of extractive distillation. Process design, operation, optimization and control. *Chemical Engineering Research and Design*.
<https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.09.020>
7. **Agrawal, R. (2000)**. Thermally coupled distillation with reduced number of intercolumn vapor transfers. *AIChE Journal*.
<https://doi.org/10.1002/aic.690461112>
8. **Gil, I. D., Gómez, J. M., & Rodríguez, G. (2012)**. Control of an extractive distillation process to dehydrate ethanol using glycerol as entrainer. *Computers and Chemical Engineering*, 39, 129–142.
<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2012.01.006>

9. **Suszwalak, D. J. P. C., & Kiss, A. A.** (2012). Enhanced bioethanol dehydration in extractive dividing-wall columns. *Computer Aided Chemical Engineering*, 30, 667–671. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-59519-5.50134-9>
10. **Tututi-Avila, S., Jiménez-Gutiérrez, A., & Hahn, J.** (2014). Control analysis of an extractive dividing-wall column used for ethanol dehydration. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 82, 88–100. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2014.05.005>
11. **Tututi-Avila, S., Medina-Herrera, N., Hahn, J., & Jiménez-Gutiérrez, A.** (2017). Design of an energy-efficient side-stream extractive distillation system. *Computers and Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2016.12.001>
12. **Ravagnani, M. A. S. S., Reis, M. H. M., Filho, R. M., & Wolf-Maciel, M. R.** (2010). Anhydrous ethanol production by extractive distillation: A solvent case study. *Process Safety and Environmental Protection*. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2009.11.005>
13. **Zhu, Z., Ri, Y., Li, M., Jia, H., Wang, Y., & Wang, Y.** (2016). Extractive distillation for ethanol dehydration using imidazolium-based ionic liquids as solvents. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 109, 190–198. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2016.09.009>
14. **Dejanović, I., Matijašević, L., & Olujić, Ž.** (2010). Dividing wall column-A breakthrough towards sustainable distilling. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2010.04.001>
15. **Tsanas, C., Tzani, A., Papadopoulos, A., Detsi, A., & Voutsas, E.** (2014). Ionic liquids as entrainers for the separation of the ethanol/water system. *Fluid Phase Equilibria*, 379, 148–156. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2014.07.022>
16. **Seiler, M., Jork, C., Kavarnou, A., Arlt, W., & Hirsch, R.** (2004). Separation of azeotropic mixtures using hyperbranched polymers or ionic liquids. *AIChE Journal*, 50(10), 2439–2454. <https://doi.org/10.1002/aic.10249>

17. **Edgar, Himmelblau and Lasdon (2001).** *Optimization of Chemical Processes.*
18. **Gutiérrez-Antonio, C., & Briones-Ramírez, A. (2009).** *Pareto front of ideal Petlyuk sequences using a multiobjective genetic algorithm with constraints.* *Computers & Chemical Engineering*, 33(2), 454–464. <https://doi:10.1016/j.compchemeng.2008.11.004>
19. **Luyben, W. (2002).** *Plantwide dynamic simulators in chemical processing and control.*
20. **L. Luyben, Willian. (2013).** *Distillation design and control using aspen simulation.*
21. **Benyahia, K., Benyounes, H., & Shen, W. (2014).** Energy evaluation of ethanol dehydration with glycol mixture as entrainer. *Chemical Engineering and Technology*, 37(6), 987–994. <https://doi.org/10.1002/ceat.201300872>
22. **Rafiei-Shishavan, M., Mehta, S., & Ricardez-Sandoval, L. A. (2017).** Simultaneous design and control under uncertainty: A back-off approach using power series expansions. *Computers and Chemical Engineering.* <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2016.12.015>
23. **Rafiei, M., & Ricardez-Sandoval, L. A. (2018).** *Stochastic Back-Off Approach for Integration of Design and Control Under Uncertainty.* *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 57(12), 4351–4365. <https://doi:10.1021/acs.iecr.7b03935>

APENDICES

APENDICE.1 Criterio de pendiente

Los gráficos obtenidos requeridos para el análisis de sensibilidad de cada método presentado en la metodología se presentan a continuación:

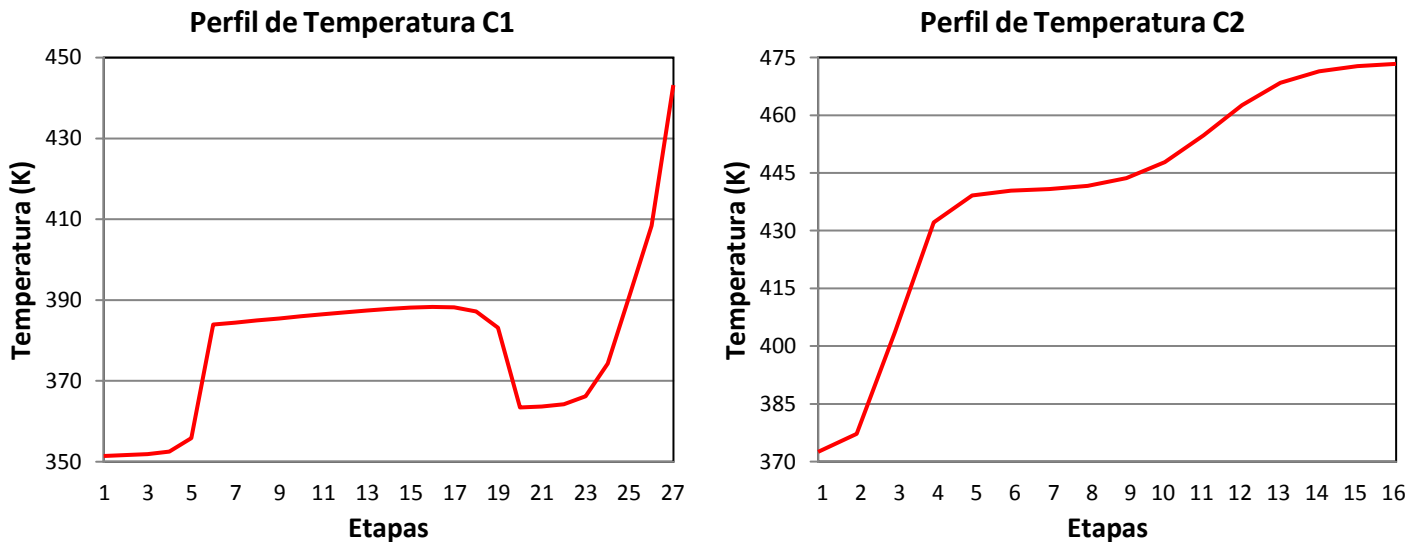


Figura 36. Perfiles de temperatura para el criterio de pendiente del sistema convencional

En la Figura 36, en el perfil de temperatura que corresponde a la columna C1, se observan cambios de temperatura considerables en la etapa 5 a la 6, así como en la etapa 19 a la 20 y en la etapa 24 a la 25, pero recordemos que las etapas 6 y 20 son etapas de alimentación, siendo este cambio de temperatura súbito debido a una corriente de flujo de entrada, descartando la posibilidad de utilizar un controlador de temperatura en estas etapas, el candidato restante siendo la etapa 24 siendo esta la etapa a controlar la temperatura. La columna C2 tiene una entrada de alimentación en la etapa 6, pero este no tiene un efecto en el perfil de temperatura a diferencia al de la columna C1, entre la etapa 2 y 4 hay cambios de temperatura altos y en las etapas 10 a la 12 hay otro cambio de temperatura notorio, aunque no sea tan elevado como el primero.

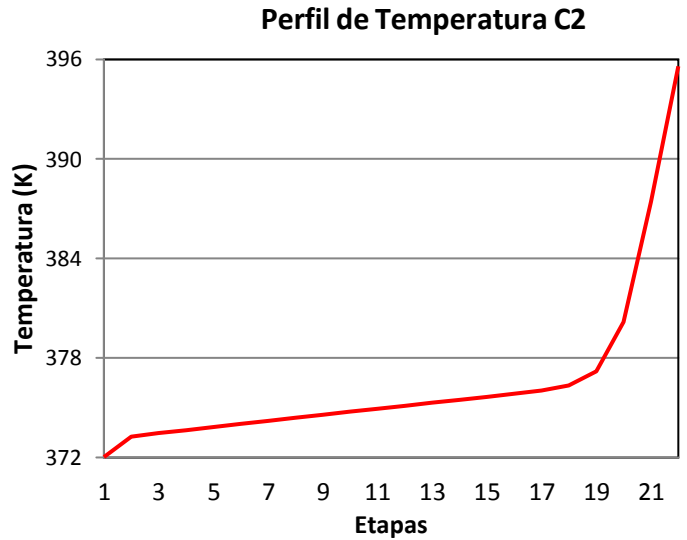
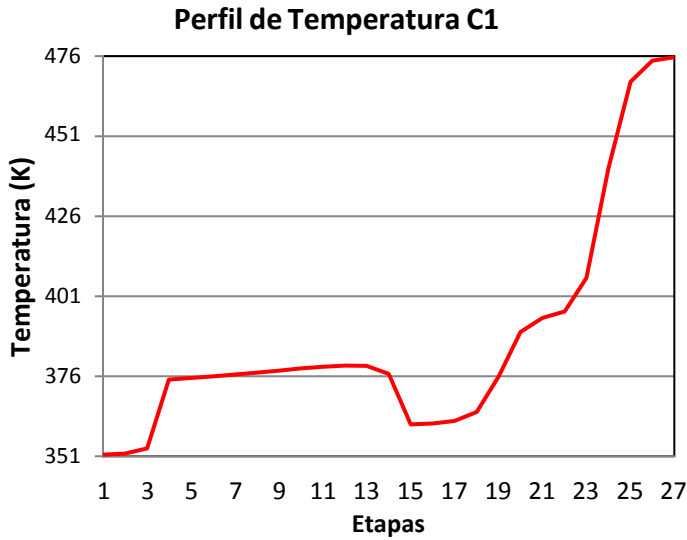


Figura 37. Perfiles de temperatura para el criterio de pendiente del sistema CPD

Para el sistema CPD, la sección C1 tiene entradas de alimentación en las etapas 4 y 15 y para la sección C2 su único flujo de alimentación es el vapor que entra desde la etapa 22. Tomando esto en cuenta en la Figura 37, en el perfil de temperatura que corresponde a la sección C1, se observan cambios de temperatura considerables entre la etapa 18 a la 20 y en la etapa 24 a la 25 siendo el cambio más considerable. Mientras que en la sección C2, la pendiente más pronunciada se observa en la etapa 20 a la 21.

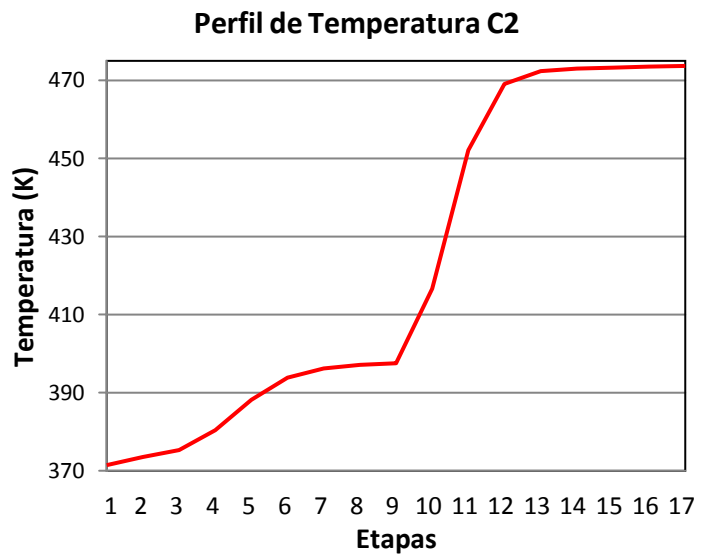
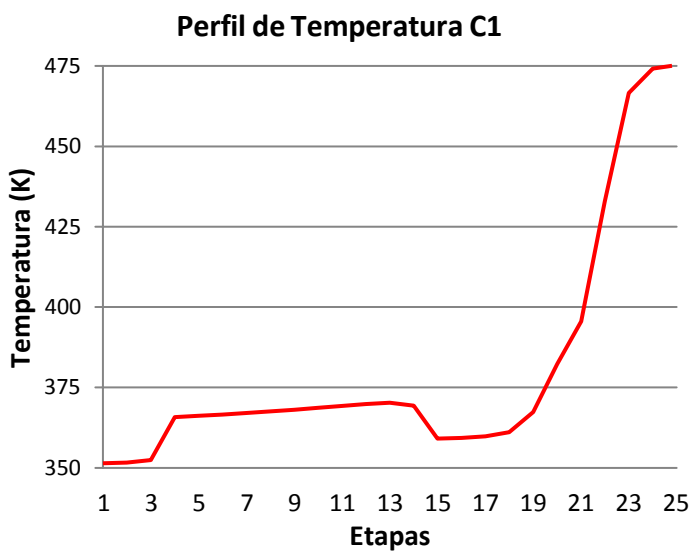


Figura 38. Perfiles de temperatura para el criterio de pendiente del sistema alternativo

En el sistema alternativo, como se ve en la Figura 38, la columna C1 tiene entradas de alimentación en las etapas 4 y 15 y en la columna C2 su etapa de alimentación es en la etapa 9. En la Figura 38, en el perfil de temperatura de la columna C1, cambios de temperatura significativos se encuentra entre la etapa 19 terminando en la etapa 23. En la sección C2, entre las etapas 4 y 6 hay cambios de temperatura notorios, pero el cambio más pronunciado es en la etapa 11 a la 13.

En base a los resultados y observaciones realizados con el criterio de pendiente, si bien, puede proporcionar un criterio rápido y general para un análisis de sensibilidad, este debería ser utilizado como un método de apoyo, ya que no es tan visual y efectivo de localizar como el criterio de sensibilidad.

APÉNDICE II

Optimización del sistema bajo incertidumbre con el método “back-off” usando ecuaciones en serie de potencia.

Los procesos químicos por lo general se diseñan con una filosofía secuencial, esto quiere decir, que primero se diseña el sistema con una optimización en estado estable, una vez especificado, el diseño se fija y se prueba bajo diferentes escenarios para probar la controlabilidad del proceso. Esta filosofía en algunos casos puede ser inadecuada al tratar el diseño del proceso y la controlabilidad del proceso de manera independiente. Por lo tanto, se propone un método de optimización que pueda integrar ambas cualidades del proceso, diseño y controlabilidad [22, 23].

En este trabajo se utilizará el método “back-off”, que quiere decir “retroceso” en español. El objetivo de este método es, partiendo del punto óptimo en estado estable (Figura 36a) y con base en una lógica probabilística del proceso, obtener un nuevo punto óptimo que considere la incertidumbre posible que pueda ocurrir en el sistema, logrando que el punto óptimo en estado estable “retroceda” encontrando otro punto óptimo en el cual todos los diferentes escenarios posibles sean factibles (Figura 36b).

Para lograr esto se utilizarán ecuaciones matemáticas basadas en las series de potencias que puedan predecir la no-linealidad del proceso. Esta ecuación se representa alrededor de un punto nominal (x_0) usando la siguiente aproximación:

$$f(x) = f(x_0) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j!} f^{(j)}(x_0) (x - x_0)^j \quad (12)$$

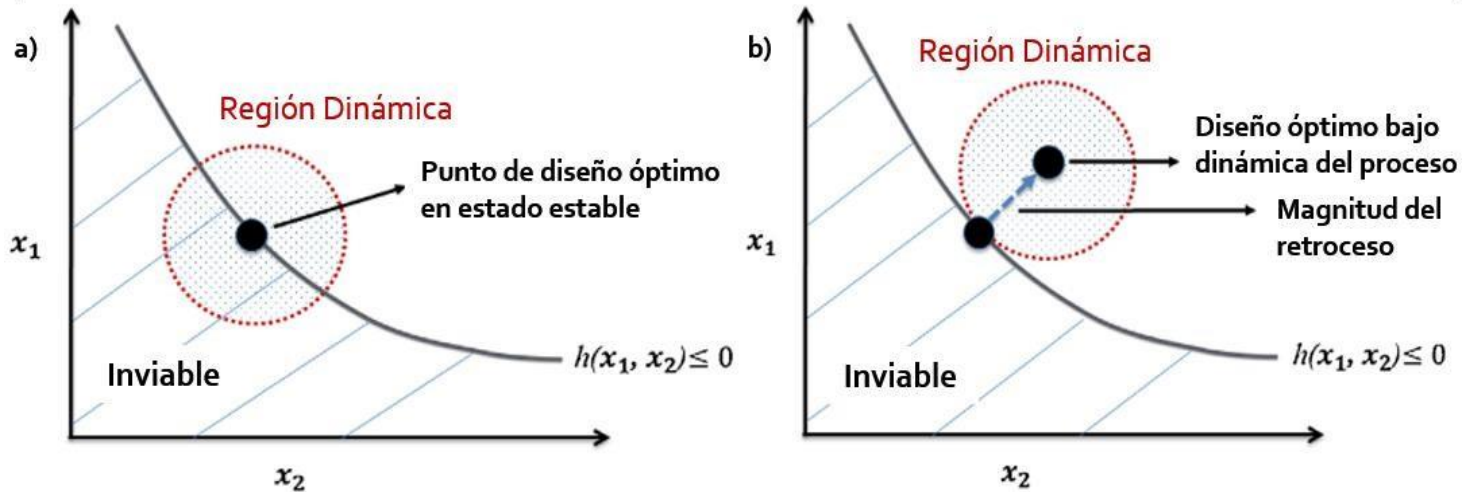


Figura 39. Objetivo del método back-off, a) Diseño en estado óptimo dinámicamente inviable,

Donde $\nabla^j f(x)$ es el gradiente del orden j de $f(x)$. La función $f(x)$ representa la función objetivo o las restricciones del proceso que está dado por x , x representa las diferentes variables de decisión que se consideran en el proceso. Los términos usados en las ecuaciones en serie de potencia (ESP) dependen de la no-linealidad del proceso y la exactitud requerida, pero en general hasta el término de 2do orden predice satisfactoriamente la mayoría de las aplicaciones ingenieriles.

Los gradientes de las funciones a optimizar se pueden obtener de manera numérica, para lograr esto se calculan los valores de las funciones con los puntos negativos y positivos del punto nominal de cada variable de diseño. Una vez teniendo estos dos puntos se formulan las ecuaciones para los gradientes de primer y segundo orden:

$$Z_j^1 = \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x_{nom}, \zeta_j} = \frac{f_{x_j^+} - f_{x_j^-}}{2\Delta x} \quad (13)$$

$$Z_j^2 = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x_{nom}, \zeta_j} = \frac{f_{x_j^+} - 2f_{x_{nom}} + f_{x_j^-}}{\Delta x^2} \quad (14)$$

Donde Δx representa la diferencia entre el punto positivo y negativo de la variable de diseño con la que se evalúa la función y ζ_j representa un escenario del área dinámica del proceso que puede ocurrir en el proceso en el cual se está evaluando la función.

Una vez teniendo las ESP para las restricciones del proceso y la función objetivo para los diferentes escenarios a considerar en el proceso, se procede a resolver el problema de optimización que se define de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \text{función objetivo:} \quad & \min \sum_{j=1}^j w_j \theta_{ESP}(x, \zeta_j) + \sum_{j=1}^J \sum_{s=1}^S M \lambda_{s,j} & (15) \\
 \text{sujeto a:} \quad & h_{ESP_s}(x, \zeta_j) + \lambda_{s,j} \geq cte \\
 & x_{nom}(1 - \delta) \leq x \leq x_{nom}(1 + \delta) \\
 & \sum_{j=1}^J w_j = 1 \quad \lambda_{s,j} \geq 0
 \end{aligned}$$

Donde, θ_{ESP} y h_{ESP} representan la función de expansión en serie de potencias de la función objetivo y las restricciones del sistema respectivamente, w_j es la probabilidad que ocurra el escenario evaluado, este valor con base en el conocimiento del proceso, $\lambda_{s,j}$ representa la diferencia entre el valor deseado y el valor actual de la restricción del sistema y la constante representa el valor deseado de la restricción, M es un valor de penalización que debe ser más grande que el valor esperado de la función objetivo, esto ayuda al algoritmo a priorizar la disminución del valor de lambda $\lambda_{s,j}$ en cada iteración haciendo que tienda a cero, ya que si este es valor es mayor a cero significa que alguna restricción en el sistema se está violando y finalmente δ representa el parámetro de afinación que determina los límites inferiores y superiores de las variables a optimizar. Este proceso se repite iterativamente hasta que el criterio de tolerancia se cumple. En la Figura 37 se muestra el procedimiento del algoritmo de la metodología “back-off” con ecuaciones en serie de potencia propuesta.

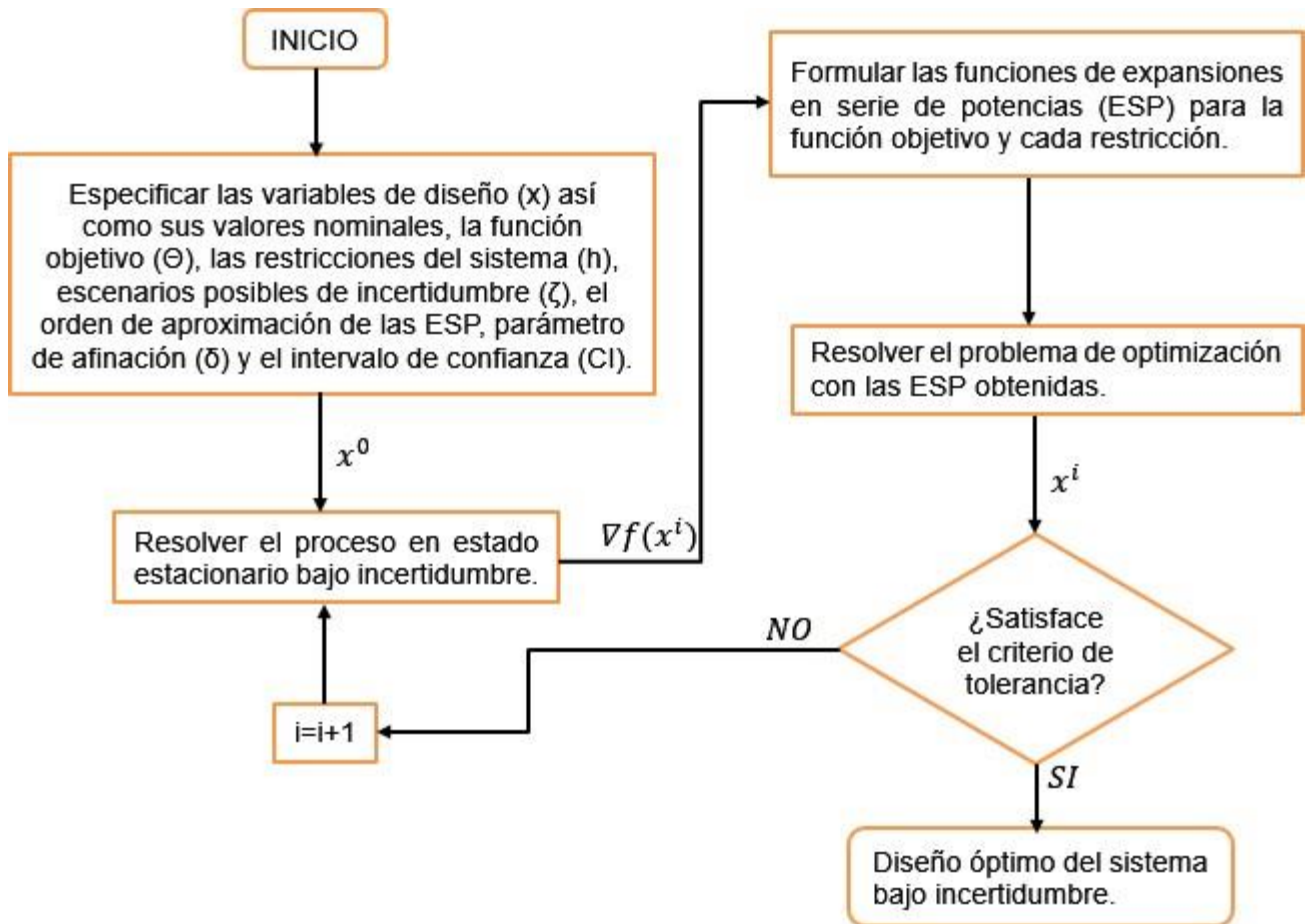


Figura 40. Algoritmo del método “back-off” para la integración de diseño y control

Metodología

Algunos trabajos realizados con esta metodología han sido reportados por Rafiei, M., et al. [22, 23], casos como un tanque isotérmico de almacenamiento y una planta de tratamiento de agua han sido estudiados. Sin embargo, no se han reportado casos para su uso para diseñar columnas de destilación con el simulador Aspen Plus.

En este trabajo se utilizó el algoritmo “back-off” con ESP para el sistema de destilación extractiva convencional. Para el sistema convencional se tomaron en cuenta solo variables continuas como variables de diseño, específicamente se

seleccionó la razón de reflujo de ambas columnas, así como la razón de destilado por flujo de alimentación en la primera columna y la temperatura de salida del intercambiador de calor en la corriente de reciclo, estas siendo las variables de mayor impacto para nuestro sistema de destilación al afectar directamente la pureza de nuestro producto de interés, así como los costos de operación. Inicialmente se partió de los valores óptimos que se obtuvieron utilizando el algoritmo genético para estas variables como se muestra en la Tabla 1 en la Sección 4.1.

Para los puntos negativos y positivos de las variables de decisión para el sistema convencional se consideró una diferencia $\pm 0.1\%$ de su valor nominal, por ejemplo, si x vale 100 su valor positivo será 100.1 y su valor negativo 99.9. El parámetro de afinación (δ) que define el área de búsqueda será de $\pm 5\%$ del valor de la variable.

Para los escenarios posibles de incertidumbre se consideraron 3 casos en la composición del flujo de alimentación, estos siendo de 80%, 84% y 88% de etanol el resto siendo agua, también 5 casos modificando el flujo total de alimentación estos fueron de 35, 40, 45, 50 y 55 kmol/h, con estos escenarios de incertidumbre se hicieron combinaciones de cada composición con cada cambio de flujo total en la alimentación, siendo un total de 15 escenarios de incertidumbre.

Como función objetivo del problema a optimizar se utilizaron las ecuaciones y consideraciones que se vieron en la Sección 3.2.1 y en cuanto a las restricciones del sistema se consideran las purezas de las corrientes de etanol y de agua, estas teniendo que ser mayor o igual a 99.5%.

Con los resultados de la función objetivo y restricciones del sistema utilizando los puntos positivos y negativos de las variables en los diferentes escenarios propuestos se formularán las ecuaciones en serie de potencia (ESP) de segundo orden para encontrar un nuevo diseño óptimo.

Resultados

Los resultados del algoritmo se muestran a continuación. La Figura 38 muestra como en cada iteración el sistema convencional se va alejando de su punto óptimo inicial, ya que este no satisface las restricciones del sistema en todos los escenarios propuestos, esto hasta llegar a un nuevo punto óptimo que cumple nuestras restricciones en todos los escenarios. Obteniendo una magnitud de retroceso aproximadamente al 9% de su valor original.

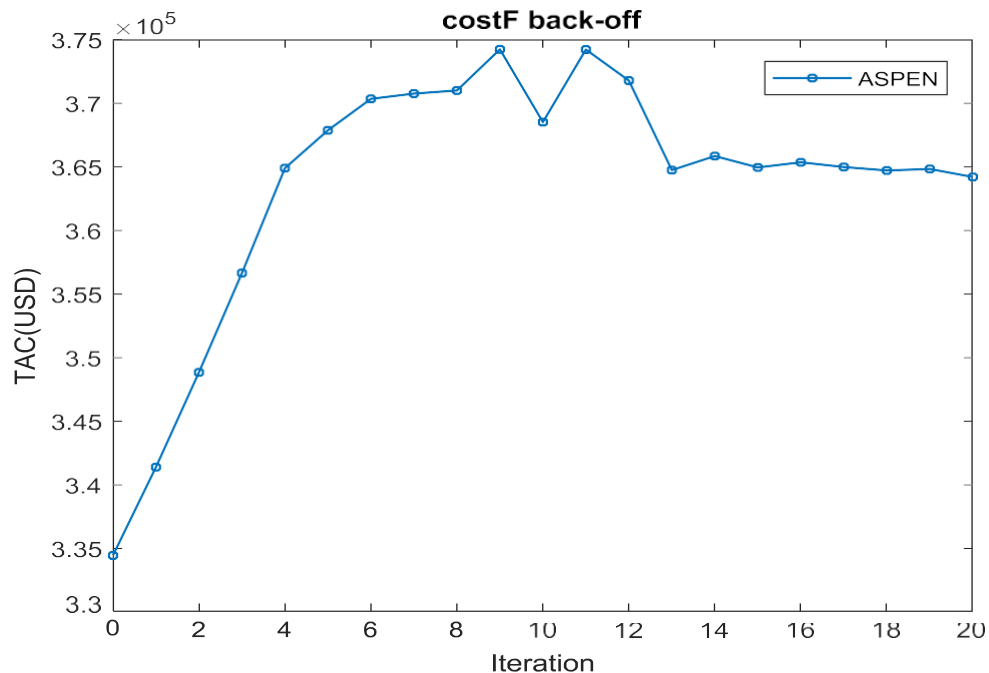


Figura 41. Resultado de la función objetivo (CTA) del sistema convencional en cada iteración realizada

La Figura 39 muestra el comportamiento de las variables de decisión que se manipularon para poder optimizar el sistema con este algoritmo, en la gráfica de la izquierda muestra la razón de reflujo y la razón de destilado por flujo de alimentación, ambas variables de la columna 1 y la gráfica de la derecha muestra la razón de reflujo de la columna 2 y el cambio de temperatura necesario en el intercambiador de calor en la corriente de reciclo.

Los valores finales para las variables de decisión fueron los siguientes, para la razón de reflujo de la columna 1 fue de 0.2724, para la razón de destilado por flujo de alimentación fue de 1.0034, para la razón de reflujo de la columna 2 fue de 1.3886 y el cambio de temperatura necesario en el intercambiador de temperatura del reciclo fue de -110.9855.

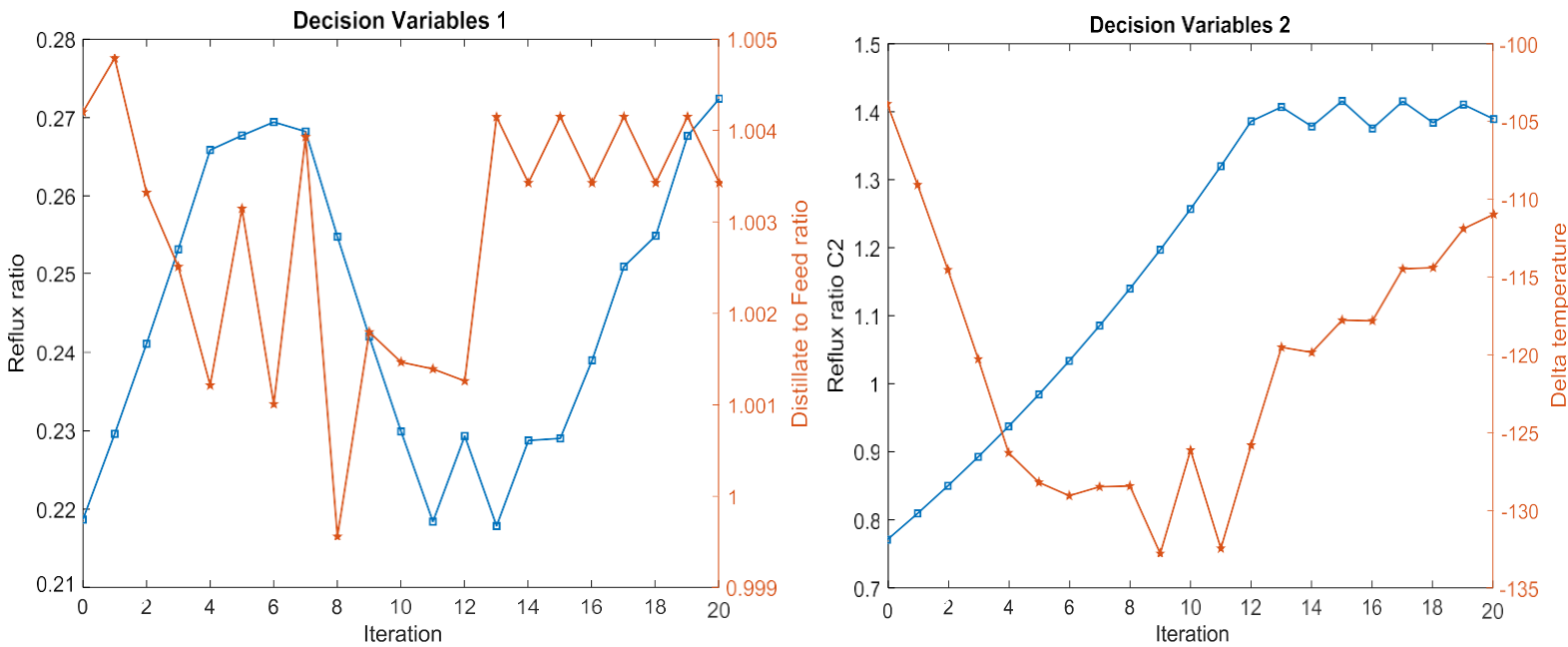


Figura 42. Valor de las variables de decisión en cada iteración del algoritmo “back-off”.

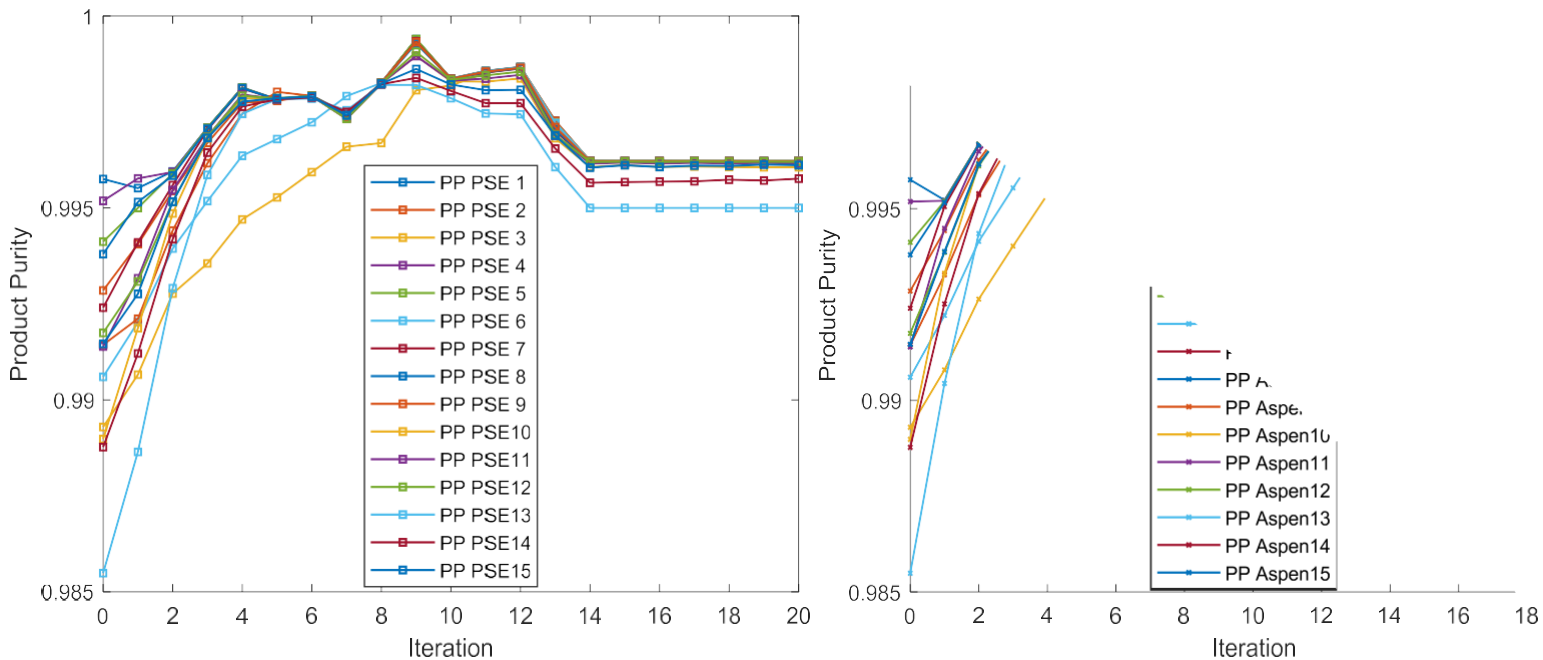


Figura 43. Pureza del producto etanol en cada iteración del algoritmo “back-off”. a) valor predicho por las ESP, b) valor obtenido con el simulador Aspen Plus.

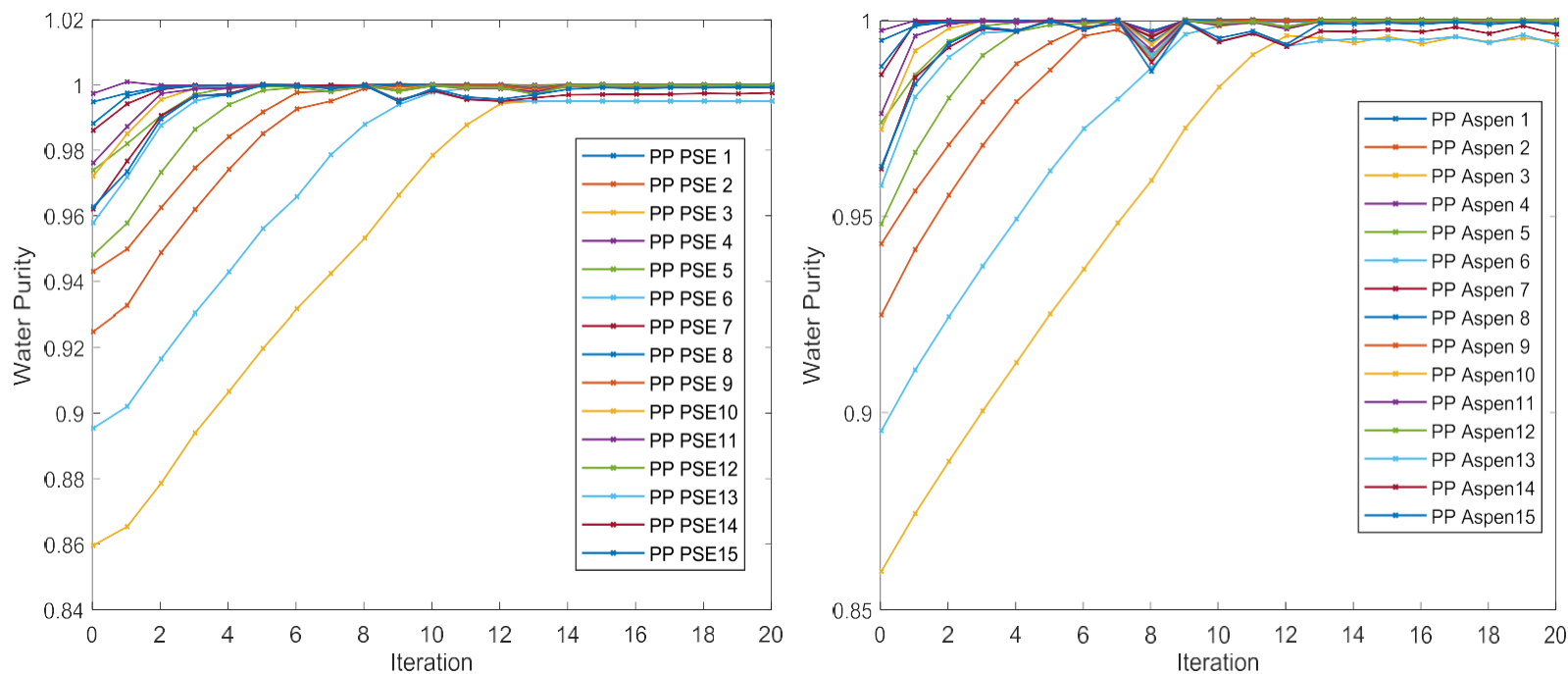


Figura 44. Pureza del subproducto agua en cada iteración del algoritmo “back-off”. a) valor predicho por las ESP, b) valor obtenido con el simulador Aspen Plus.

En las Figuras 40 y 41 muestra los valores de pureza predichos por las ESP (Figura 40a y 41a) y los valores de pureza obtenidos con el software Aspen (Figura 40b y 41b), se puede observar como las ESP predicen satisfactoriamente el valor de las purezas de los productos con base en los resultados anteriores. También se observa en estas mismas figuras como los valores de pureza van incrementando a la par como retrocede la función objetivo (CTA) de su punto óptimo original, cumpliendo con las restricciones del sistema planteados en todos los escenarios posibles.

Trabajo a Futuro

Por cuestión de tiempo, en este trabajo no se pudo completar en su totalidad la implementación de la metodología “back-off” en el sistema convencional, por lo tanto, se sugiere desarrollar los siguientes puntos:

- La posibilidad de introducir variables enteras como variables a optimizar en el algoritmo, en este caso número de etapas en la columna, así como las etapas de alimentación.
- Comparación de los esquemas de control, así como sus resultados dinámicos.
- Implementación de la metodología para los dos casos restantes, sistema CEPD y alternativo.

RESUMEN BIOGRÁFICO

Eduardo Daniel García Reyes

**Candidato para el Grado de
Maestría en Ciencias con Orientación en Procesos Sustentables**

Tesis: Diseño y control de un sistema de destilación extractiva con salida lateral para la deshidratación del etanol

Campo de Estudio: Ciencias Químicas

Datos Personales:

Nacido en San Nicolás de los Garza, Nuevo León, 29 de octubre 1993, hijo de Martha Elva Reyes Ruvalcaba y Manuel Cristóbal García Muñoz Soltero

Educación:

- Licenciatura: Ingeniero Químico 2010-2015 Universidad Autónoma de Nuevo León

Experiencia Profesional:

Laboratorista de calidad en Alpha Assembly Solutions, Apodaca, Nuevo León, México.