



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN**

TESIS

**“USO DE SISTEMAS DE CONTROL EN UN REACTOR CONTINUO BIESTABLE
DE MEZCLA COMPLETA, UN ESTUDIO TEÓRICO”**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO**

**PRESENTA
ALFREDO MARTÍNEZ FLORES**

**DIRECTOR DE TESIS
DR. RICARDO PARAMONT HERNÁNDEZ GARCÍA**

CUAUTITLÁN IZCALLI, ESTADO DE MÉXICO 2013



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
UNIDAD DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR
DEPARTAMENTO DE EXÁMENES PROFESIONALES

U.N.A.M.
ASUNTO: VOTO APROBATORIO

DRA. SUEMI RODRÍGUEZ ROMO
DIRECTORA DE LA FES CUAUTITLAN
PRESENTE

ATN: L.A. ARACELI HERRERA HERNÁNDEZ
Jefa del Departamento de Exámenes
Profesionales de la FES Cuautitlán.

Con base en el Reglamento General de Exámenes, y la Dirección de la Facultad, nos permitimos a comunicar a usted que revisamos el: Trabajo de Tesis

Uso de Sistemas de Control en un Reactor Continuo Biestable de Mezcla Completa, un Estudio Teórico

Que presenta el pasante: Alfredo Martínez Flores
Con número de cuenta: 405018044 para obtener el Título de: ingeniero Químico

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el EXAMEN PROFESIONAL correspondiente, otorgamos nuestro VOTO APROBATORIO.

ATENTAMENTE
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPÍRITU"
Cuautitlán Izcalli, Méx. a 28 de mayo de 2013.

PROFESORES QUE INTEGRAN EL JURADO

	NOMBRE	FIRMA
PRESIDENTE	Dr. Ricardo Paramont Hernández García	
VOCAL	M. en C. Gilberto Atilano Amaya Ventura	
SECRETARIO	Dra. Abigail Martínez Estrada	
1er. SUPLENTE	M. en E. María Teresa Ylizaliturri Gómez-Palacio	
2do. SUPLENTE	IA. Dulce María Oliver Hernández	

NOTA: los sinodales suplentes están obligados a presentarse el día y hora del Examen Profesional (art. 127).

DEDICATORIA

Mi trabajo de grado lo dedico con todo mi amor y cariño.

A ti DIOS que me diste la oportunidad de vivir y de regalarme una familia maravillosa, además de permitir la realización de este proyecto.

Con mucho cariño principalmente a mis padres que me dieron la vida y han estado conmigo en todo momento. Gracias papa y mama por su apoyo, por estar conmigo incondicionalmente, los amo.

A mis hermanos, Alejandra, Patricia, Martha, Gregorio, Blanca, Belinda y Verónica quienes siempre me han apoyado en cuanto a desarrollo personal y profesional.

A mi cuñada Rosario y a mis cuñados Mario y Juan.

A mis sobrinos Lucia, Andrea Hazel, Daniela Alejandra, Axel, Andrés Axel y Mario Alejandro Dios los bendiga.

A todos mis amigos.

A todos mis Profesores,

A dos personas especiales que me ayudaron desde el inicio a lograr esta meta y que siguen apoyando y dando fuerza a todo universitario y tesistas, gracias Dr. Ricardo Paramont Hernández García y M. en C. Gilberto Atilano Amaya Ventura, nunca dejaran de ser un ejemplo, gracias por su apoyo incondicional.

A mi casa:

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
(POR MI RAZA HABLARA EL ESPÍRITU)

Finalmente quiero agradecer a todos quienes hicieron posible la terminación de este trabajo de grado.

ÍNDICE

	Página
Objetivos.....	5
Introducción.....	6
Capítulo 1. Sistema en Estado Estacionario.....	7
Capítulo 2. Sistema de Control para un Reactor Adiabático.....	13
Capítulo 3. Sistema de Control para un Reactor con Sistema de Enfriamiento	23
Conclusiones.....	33
Nomenclatura.....	34
Bibliografía.....	36

Objetivos

Objetivo general:

Proponer sistemas de control y las condiciones de operación para que un reactor continuo de mezcla completa (CSTR) opere dentro de un intervalo de temperaturas en el que es inestable a lazo abierto. La reacción considerada es la obtención del propilenglicol a partir de óxido de propileno y agua.

Objetivos particulares:

- 1.- Desarrollar el modelo matemático que describa el funcionamiento del CSTR a lazo abierto y en estado estacionario.
- 2.- Diseñar, construir, probar y depurar un programa de computadora que resuelva el modelo matemático del CSTR en estado estacionario.
- 3.- Desarrollar modelos matemáticos que describan la operación del CSTR en estado transitorio a lazo abierto.
- 4.- Diseñar, construir, probar y depurar un programa de computadora que resuelva las ecuaciones diferenciales del modelo matemático del CSTR en estado transitorio que den entre sus salidas los diagramas de espacio fase del sistema.
- 5.- Proponer sistemas de control para controlar la temperatura del reactor y modelarlos matemáticamente.
- 6.- Diseñar, construir, probar y depurar los programas de computadora que resuelvan las ecuaciones diferenciales e integrodiferenciales de los modelos de los sistemas con los sistemas de control.

Introducción

Los sistemas de control se usan básicamente para llevar a cabo tres tareas: 1) compensar las perturbaciones que entran a un sistema, 2) optimizar la operación de un proceso, haciendo que las referencias de los controladores tomen valores a lo largo del tiempo que hagan que el proceso siga o se acerque a una ruta óptima de operación, y 3) Para hacer estables regiones de operación que a lazo abierto no lo son [11]. Este último es el caso que se analizará en este trabajo de tesis.

En este trabajo se usa la reacción del óxido de propileno con agua para producir el propilenglicol para analizar su comportamiento en un reactor continuo de mezcla completa (CSTR). La reacción es catalizada con ácido sulfúrico y se lleva a cabo en fase líquida homogénea [7]. El propilenglicol es una sustancia muy usada como humectante en la industria alimenticia y farmacéutica. La reacción se hace de pseudoprimer orden al usar un gran exceso de agua. El óxido de propileno se disuelve antes en metanol y después esta solución se mezcla a su vez con agua [6]. Esto se hace con el objeto de que no se formen dos fases, ya que el óxido de propileno no es muy soluble en agua. La mezcla resultante se introduce en el CSTR para que allí se lleve a cabo la reacción, la cual es exotérmica.

A lazo abierto (esto es, sin sistema de control) y operando el reactor adiabáticamente, hay un intervalo de temperatura en el que el reactor no puede operar por constituir una región inestable. El avance de reacción (y por tanto la temperatura) de salida depende de la temperatura y concentración de la corriente de entrada al reactor y de las condiciones iniciales de concentración y temperatura en él.

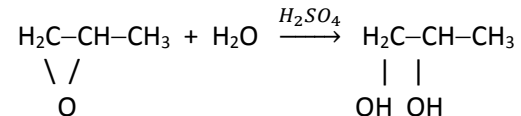
Se analizan dos casos:

- 1) un reactor CSTR operando en forma adiabática y se propondrá un sistema de control para controlar su temperatura,
- 2) un reactor CSTR operando con un sistema de enfriamiento para el control de su temperatura, y un control de nivel para controlar la conversión de la reacción

Para llevar a cabo el estudio se modeló matemáticamente ambos sistemas y se desarrollaron programas de computadora para resolver esos modelos. Usando estos programas se determinaron las condiciones de operación convenientes para llevar la reacción.

Capítulo 1. Sistema en Estado Estacionario.

La reacción que se estudia es la del óxido de propileno con agua para producir el propilén glicol:



La reacción es exotérmica y se lleva a cabo en fase líquida a presión atmosférica y a temperaturas muy cercanas a la ambiental [6]. Chan y Seider mencionan que se debe disolver el óxido de propileno en metanol para evitar que se formen dos fases en el momento de mezclarlo con el agua [5]. La reacción es irreversible y de segundo orden:

$$\frac{dC_D}{dt} = kC_O C_A \quad (1.1)$$

Si se usa agua en un exceso lo suficientemente grande se puede considerar que es de pseudoprimer orden:

$$\frac{dC_D}{dt} = kC_O \quad (1.2)$$

La reacción en un reactor de mezcla completa continuo.

Los primeros en llevar a cabo la experimentación en laboratorio en la región biestable de esta reacción en un reactor de mezcla completa continuo, CSTR por sus siglas en inglés, fueron Furusawa y cols. (1969), también muestran los modelos del sistema en estado estacionario y transitorio a lazo abierto. Fogler (2008) retoma el problema analizándolo también a lazo abierto. En este trabajo se usan las proporciones fijadas por él en el problema 8-8 de su libro para las sustancias que se alimentan al reactor [6].

Primero se obtendrán las ecuaciones de balance de materia y energía de la reacción en un CSTR para analizar su comportamiento en los estados estacionario y transitorio.

Balance de energía en estado estacionario.

Se puede plantear con base en el calor generado, Q_G , y el calor retirado, Q_R , del reactor. El calor generado se debe a la reacción, que, como ya se mencionó, es exotérmica:

$$Q_G = kC_oV(-\Delta H_r) \quad (1.3)$$

El calor retirado tiene dos términos, el del calor que se lleva la masa reaccionante que sale del reactor, que se manifiesta como aumento de entalpía de esa masa y el calor que se transfiere de la masa reaccionante al agua de enfriamiento a través de la pared que separa a ambos fluidos. Hay un tercer término que se incluirá aquí en la ecuación del calor retirado, pero con signo contrario para indicar que en realidad es un calor generado, el término del calor de dilución, $F\rho(-\Delta H_{dil})$:

$$Q_R = F\rho C_p(T_e - T) - UA(T - T_a) + F\rho(-\Delta H_{dil}) \quad (1.4)$$

En el estado estacionario:

$$Q_G = -Q_R \quad (1.5)$$

Cambiando el signo a la ec. (1.4):

$$-Q_R = F\rho C_p(T - T_e) + UA(T - T_a) - F\rho(-\Delta H_{dil}) \quad (1.4.b)$$

Para expresar Q_G y $-Q_R$ como fracciones, se dividen ambos entre el calor máximo que se puede generar, Q_{max} , éste es aquél que se generaría si todo el óxido de propileno que entrara reaccionara:

$$Q_{max} = FC_{o,e}(-\Delta H_r) \quad (1.6)$$

Se puede llamar a la fracción de calor generado, x_{Q_G} , *calor generado fraccional*, y a la de calor retirado, x_{Q_R} , *calor retirado fraccional*. Éstas son:

$$x_{Q_G} = \frac{k\tau}{1 + k\tau} \quad (1.7)$$

Donde:

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (1.7.b)$$

$$\tau = \frac{V}{F} \quad (1.7.c)$$

$$x_{QR} = \frac{\alpha\tau}{\Delta T_{ad}}(T - T_a) + \frac{T - T_e - \Delta T_{dil}}{\Delta T_{ad}} \quad (1.8)$$

Donde:

$$\alpha = \frac{UA}{\rho C_p V} \quad (1.8. b)$$

$$\Delta T_{ad} = \frac{C_{O,e}(-\Delta H_r)}{C_p \rho} \quad (1.8.c)$$

$$\Delta T_{dil} = \frac{(-\Delta H_{dil})}{C_p} \quad (1.8.d)$$

Haciendo el balance de materia se puede calcular la fracción de óxido de propileno que reacciona, x_O , o sea el avance de reacción:

$$x_{QG} = \frac{k\tau}{1 + k\tau} \quad (1.9)$$

Al observarse las ecuaciones (1.7) y (1.9) se puede apreciar que el calor generado fraccional es igual a avance de reacción:

$$x_O = x_{QG} \quad (1.10)$$

Con la ec. (1.5) se enuncia que en el *estado estacionario* $QG = -QR$, o bien: $QG + QR=0$. Como se ha definido arriba a las fracciones de calor generado y retirado, esto equivale a $x_{QG} = x_{QR}$, o bien

$$x_{QG} - x_{QR} = 0 \quad (1.11)$$

Al resolver la ecuación (1.11) se obtienen los valores de temperatura y las conversiones de reacción en CSTR en las que se alcanza el estado estacionario. La solución se puede hacer de manera gráfica. Se puede graficar x_{Q_G} y x_{Q_R} contra T , la temperatura de operación del CSTR, (al graficar al calor generado fraccional se estará graficando también el avance de reacción), aquéllas partes donde se intersecten ambas curvas, corresponderán a las temperaturas y avances de reacción en los que se alcanza el estado estacionario, es decir son las soluciones de la ecuación (1.11).

En este trabajo se desarrolló un programa para obtener tablas de valores de x_{Q_G} y x_{Q_R} correspondientes a valores de T dados. De esta manera se pueden obtener las gráficas de esas variables contra T . A continuación se analizará el resultado de diferentes corridas de ese programa.

Los datos de densidad y capacidad calorífica usados para los cálculos fueron los de la cuarta columna de la tabla 1.1. Estos datos son el promedio aritmético de los datos de entrada y salida. Los cálculos a la salida son suponiendo una conversión total del óxido de propileno. Los datos fijados se muestran en la tabla 1.2.

Tabla 1.1 Datos calculados: densidades y capacidades caloríficas en los flujos de entrada y salida y sus promedios

	Entrada	Salida	Promedio
Densidad, ρ (kg/m ³)	953.7961	975.4912	964.6437
Capacidad calorífica a presión constante, C_p (kcal/(kg °C))	0.9036	0.8884	0.8959

Tabla 1.2 Datos fijados

Variable	Valor
Flujo volumétrico*, F (m ³ /s)	3.2537×10^{-3}
Volumen de la mezcla reaccionante, V (m ³)	0.2
Temperatura de la corriente de entrada, T_e (K)	300
Concentración del óxido de propileno en la entrada, $C_{O,e}$ (kgmol/m ³)	2.0443

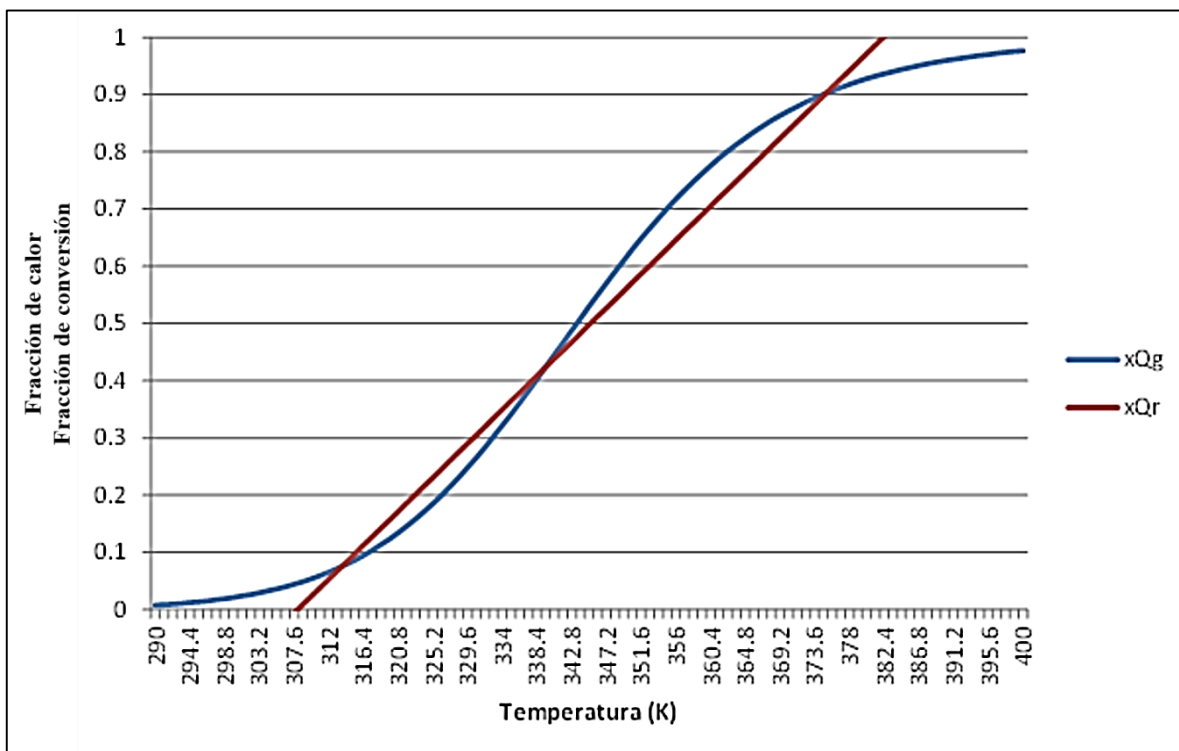
*El que se fijó fue el flujo volumétrico de la entrada: $F_e = 3.3033 \times 10^{-3}$ m³/s, el flujo mostrado en esta tabla es el promedio aritmético entre éste y el flujo de salida, que es menor porque la densidad aumenta. Se usó este flujo promedio para los cálculos.

En el agua se agrega el catalizador, el H₂SO₄, con una concentración de 0.05% en volumen.

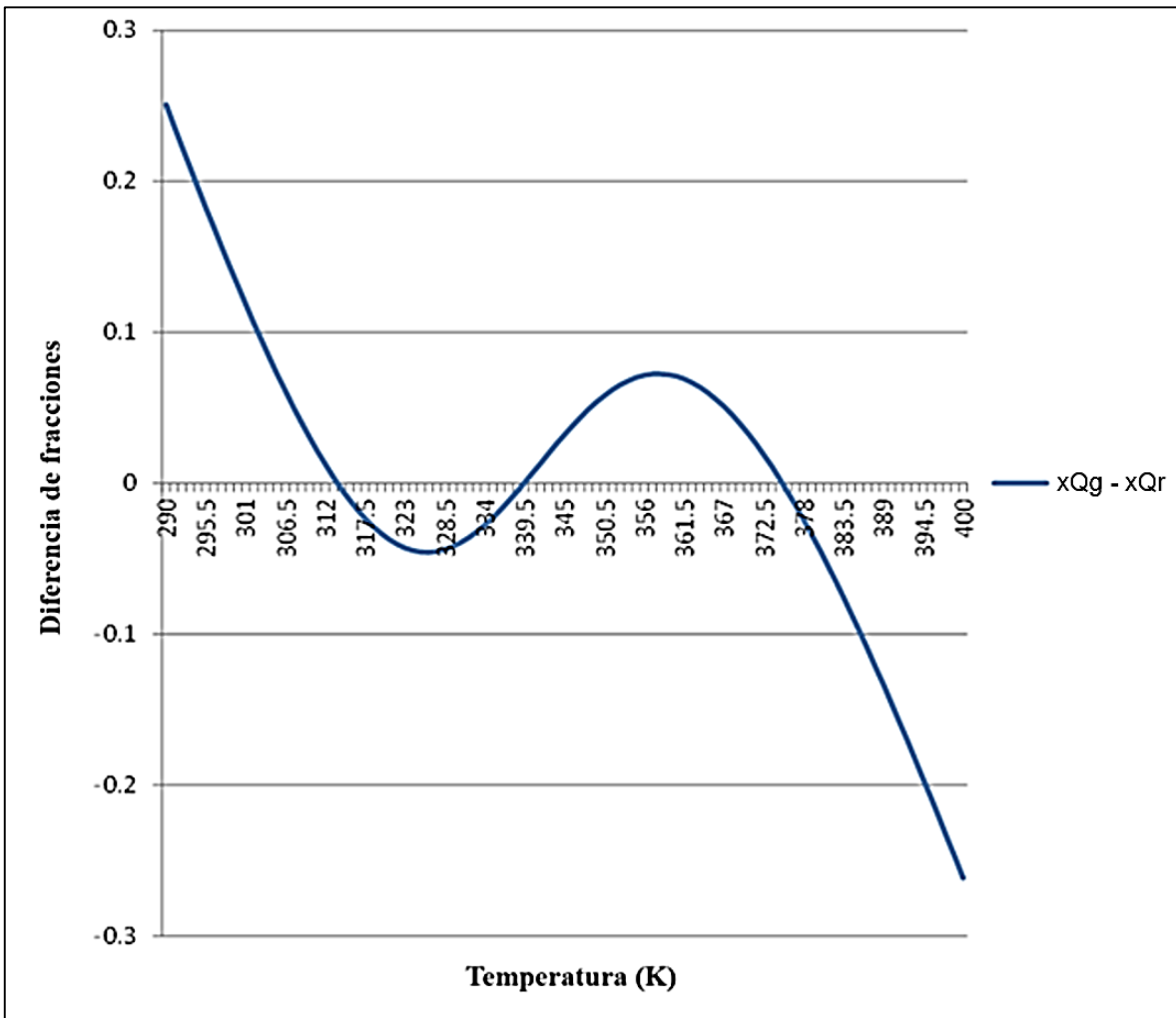
En la gráfica 1.1 se muestra el resultado de una corrida para $UA = 0.5$ kcal/(K s) y $T_a = 300$ K. Para apreciar mejor los puntos donde se intersectan las dos líneas, en la gráfica 1.2 se grafica la resta $x_{Q_G} - x_{Q_R}$ contra la temperatura. Se observan tres puntos de cruce, mismos en los que el sistema se puede encontrar en estado estacionario. Los dos de los extremos representan estados estacionarios estables, el del centro representa un estado estacionario inestable. Esto significa que el sistema sólo puede llegar al estado estacionario en uno de esos estados estables, dependiendo de las condiciones de temperatura y concentración en

donde se halle inicialmente. Analizando cada uno de estos estados estacionarios se observa lo siguiente:

- 1) El estado estacionario de la derecha se encuentra en una conversión de reacción de 0.9 y a una temperatura de 375 K (ver gráfica 1.2) aproximadamente. La conversión no es mala, pero es muy importante hacer notar que el óxido de propileno es un líquido volátil, la máxima temperatura a la que se operará el reactor no excederá los 343 K [5] para que no pase a fase de vapor, ya que la reacción se lleva a cabo en fase líquida. Esto significa que no se podrá alcanzar este estado estacionario, ya que antes de llegar a él habrá pasado el óxido de propileno a fase de vapor, provocando que prácticamente se detenga la reacción.



Gráfica 1.1 $UA = 0.5 \text{ kcal}/(\text{K s})$, $T_a = 300 \text{ K}$



Gráfica 1.2 $UA = 0.5 \text{ kcal}/(\text{K s})$, $T_a = 300 \text{ K}$

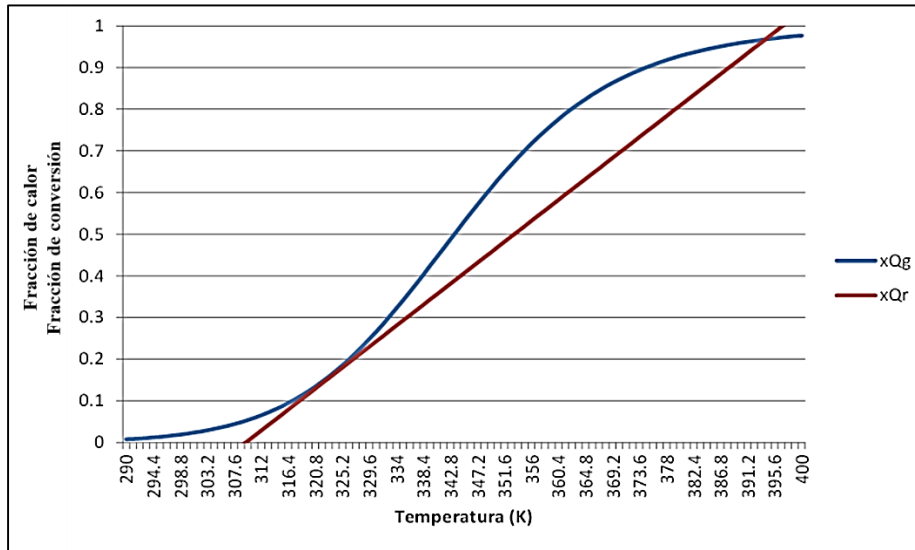
2) El estado estacionario de la izquierda se encuentra a una conversión de 0.075 y a una temperatura de 313.5 K (ver gráfica 1.2) aproximadamente. La temperatura está dentro del intervalo permitido, pero la conversión es muy baja, no llega ni al 8 %.

Esto significa que ninguno de los dos estados estacionarios que se muestran en la gráfica son adecuados para la producción de propilenglicol, el de la derecha porque no se puede alcanzar y el de la izquierda porque se encuentra a una conversión de reacción muy baja. Esto obliga a instalar algún sistema de control en el reactor para hacer que alcance el estado estacionario en algún punto con una conversión aceptable y una temperatura dentro del intervalo permitido para evitar que se evapore el óxido de propileno.

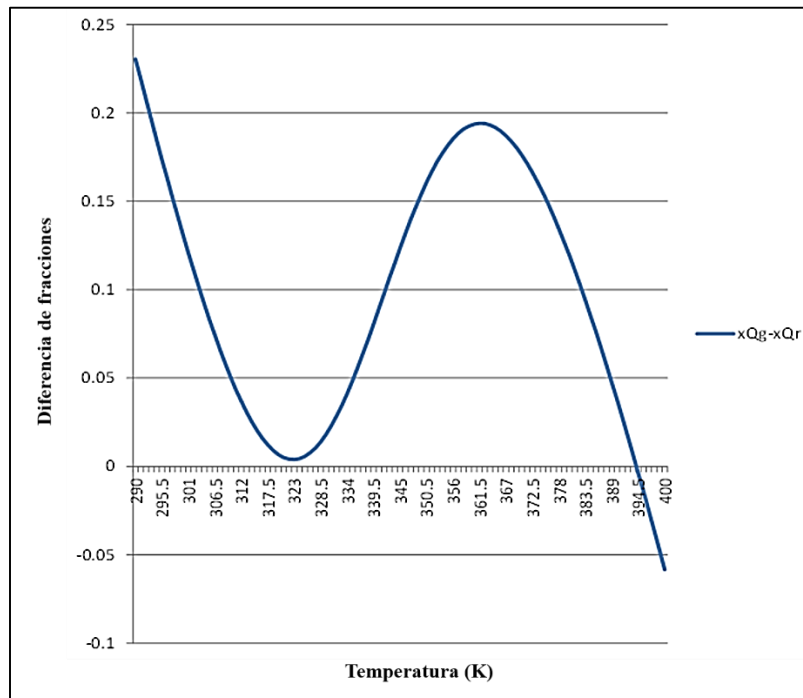
En los siguientes capítulos se propondrán dos sistemas de control para llevar a cabo esta tarea, uno de ellos para un reactor operando adiabáticamente, es decir sin un sistema de enfriamiento dentro del reactor, y otro para un reactor que sí opera con un sistema de enfriamiento.

Capítulo 2. Sistema de Control para un Reactor Adiabático.

Para ver qué estados se podrían alcanzar usando un reactor adiabático, se hará otra corrida del programa mencionado en el capítulo anterior. Todos los datos se dejarán igual, excepto el de UA , que se le asignará un valor de cero. El resultado de la corrida se muestra en las gráficas 2.1 y 2.2

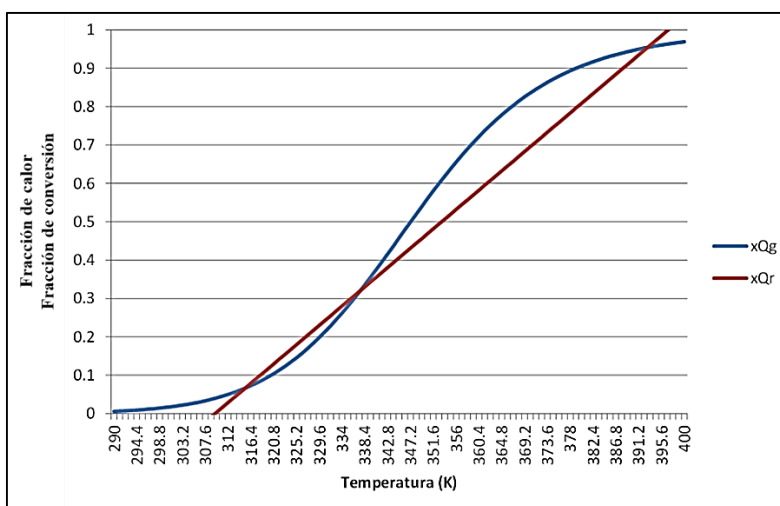


Gráfica 2.1 $UA = 0$ kcal/(K s), $T_a = 300$ K

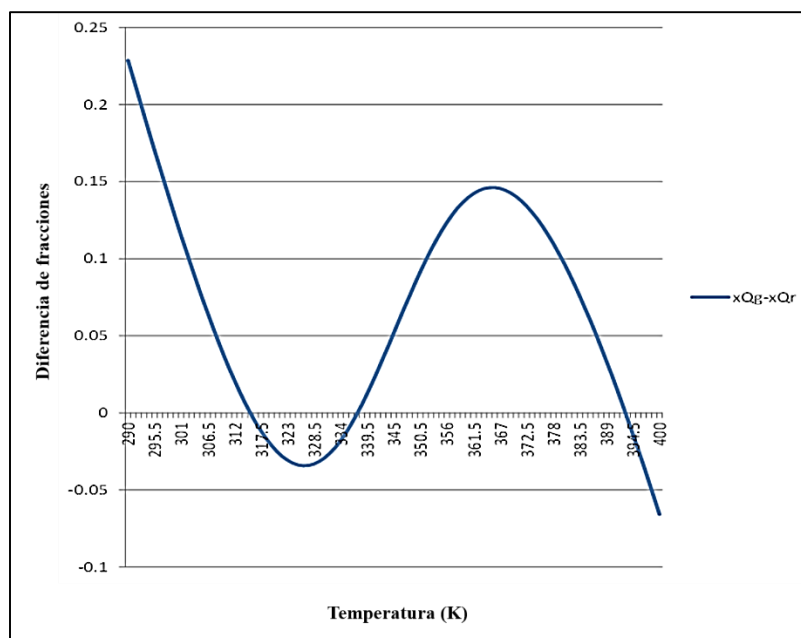


Gráfica 2.2 $UA = 0$ kcal/(K s), $T_a = 300$ K

Obsérvese que en este caso sólo se cruzan una vez (en la gráfica 2.1 parece que ambas líneas se rosan, pero es sólo el efecto del grosor de las líneas, como se puede apreciar con claridad en la gráfica 2.2), esto significa que el sistema puede estar en un solo estado estacionario. En este se alcanza una conversión de más de 0.95, pero a una temperatura de 394.5 K, muy por arriba de los 343 K que se fijaron como temperatura máxima. Cámbiese el volumen de la mezcla reaccionante dentro del reactor para hacer que este reactor adiabático pueda alcanzar el estado estacionario a una temperatura más baja. Sean todos los datos como los de la anterior corrida a excepción del volumen de la mezcla reaccionante, que se disminuirá de 0.2 a 0.15 m³. Los resultados de esta nueva corrida se muestran en las gráficas 2.3 y 2.4.



Gráfica 2.3 $UA = 0 \text{ kcal}/(\text{K s})$, $T_a = 300 \text{ K}$



Gráfica 2.4 $UA = 0 \text{ kcal}/(\text{K s})$, $T_a = 300 \text{ K}$

Como en el caso visto en el capítulo 1, el sistema muestra tres estados estacionarios, sólo los de los extremos son estables. El del extremo derecho queda descartado por su alta temperatura, analícese el del izquierdo. Su conversión es muy baja, de 0.063, su temperatura es de 314.5 K aproximadamente. Aunque la temperatura está dentro del intervalo, la conversión es muy baja. Es necesario proponer un sistema de control para poder trabajar con el reactor adiabático en un punto con una temperatura dentro del intervalo y con una mejor conversión.

Proponiendo un Sistema de Control para el Reactor Adiabático.

Hay que hacer que el reactor opere a una temperatura que se fije, temperatura de referencia, entre las dos de los estados estacionarios estables. Como el reactor no tiene un sistema de enfriamiento, se puede usar el agua que participa en la reacción como medio de enfriamiento introduciéndola fría cuando la temperatura de la mezcla reaccionante suba por arriba de la temperatura de referencia, de esta manera se le hará bajar para que regrese a esa temperatura. Y para evitar que el sistema caiga en el estado estacionario de baja conversión que está a baja temperatura, por debajo de la temperatura de referencia, se puede introducir esa misma agua que participa en la reacción pero a una temperatura mayor que haga que la temperatura de la mezcla reaccionante suba hacia la temperatura de referencia cuando esté por debajo de ella. De esta forma el controlador mantendrá el sistema en equilibrio entre las dos temperaturas de los estados estacionarios estables que se muestran en las figuras 2.1 y 2.2. El sistema de control propuesto junto con el reactor continuo de mezcla completa (CSTR), se muestra la figura 2.1.

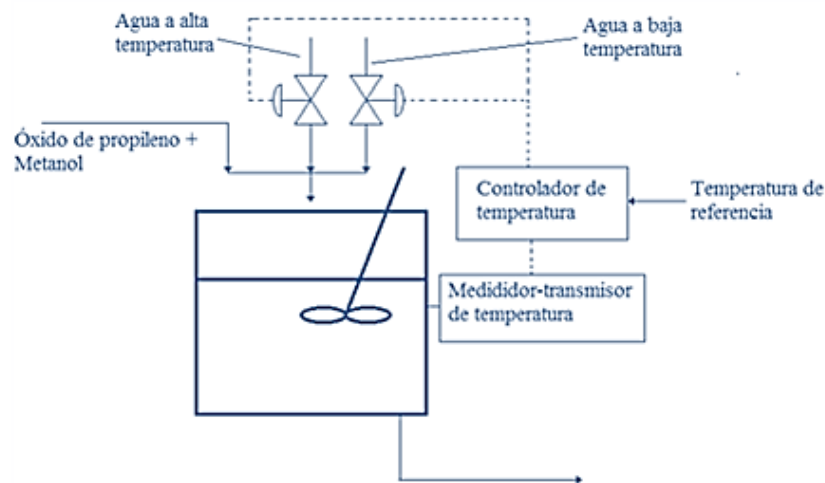


Figura 2.1 Sistema de control propuesto para el CSTR operando adiabáticamente. CSTR con un controlador que introduce el agua de reacción (con una baja concentración del catalizador H_2SO_4) a baja o a alta temperatura según se requiera para mantener la temperatura de la mezcla reaccionante lo más cercana a la temperatura de referencia que se pueda. El controlador abre una de las válvulas a la vez que cierra la otra.

En el sistema de control que se muestra, el controlador abre una de las válvulas a la vez que cierra la otra. El grado de apertura siempre es el mismo para ambas válvulas, así que se comporta como un controlador del tipo “encendido/apagado”. Debe ser así porque la

relación del agua de reacción/mezcla metanol-óxido de propileno se debe mantener constante.

Operación del Sistema en Estado Transitorio.

Es necesario describir la operación del sistema en estado transitorio para simular su funcionamiento con el controlador, y ver de esta manera si se comporta como se espera. Haciendo los balances de materia y de energía e incluyendo la ecuación del controlador se obtiene:

$$\frac{dC_O}{dt} = -\frac{1}{\tau}(C_O - C_{O,e}) - kC_O \quad (2.1)$$

$$\frac{dT}{dt} = \Delta T_{ad}k \frac{C_O}{C_{O,e}} - \frac{1}{\tau}(T - T_e - \Delta T_{dil}) \quad (2.2)$$

Donde

Ecuación del controlador:

$$T_e = \begin{cases} T_{e,baja} & \text{si } T > T_{ref} \\ T_e \text{ del instante anterior} & \text{si } T = T_{ref} \\ T_{e,alta} & \text{si } T < T_{ref} \end{cases} \quad (2.3)$$

Ecuación de Arrhenius:

$$k = k_0 e^{-E/RT} \quad (2.4)$$

Tiempo de residencia:

$$\tau = \frac{V}{F} \quad (2.5)$$

Experimentación, y Análisis de Resultados de la Simulación del Reactor Adiabático con el Sistema de Control.

En este trabajo se diseñó un programa para aplicar un método tipo Runge-Kutta de cuarto orden generalizado para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias ec. 2.1 y ec. 2.2. Las temperaturas del agua para la reacción, que sirve a su vez de reguladora de la temperatura, fueron:

$$T_{e,baja} = 296 \text{ K}, T_{e,alta} = 338.98 \text{ K}$$

La temperatura de referencia: $T_{ref} = 340 \text{ K}$

La fracción de conversión de la reacción, x_O , se puede calcular a partir de la concentración del óxido de propileno, C_O , mediante la ecuación:

$$x_O = 1 - \frac{C_O}{C_{O,e}} \quad (2.6)$$

Los datos usados para la primera corrida de este programa son como los reportados en las tablas 1.1 y 1.2 excepto el del volumen de la mezcla reaccionante, al que se le dio el siguiente valor: $V = 0.15 \text{ m}^3$. Las condiciones iniciales usadas fueron:

$$C_{O,inc} = 2.0443 \text{ kgmol/m}^3$$

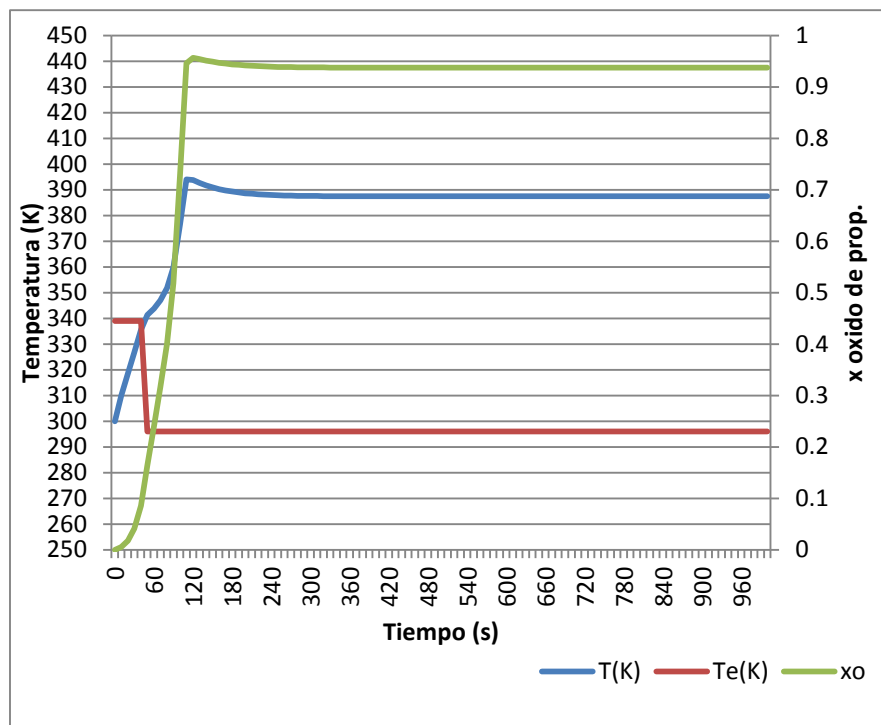
$$T_{inic} = 300 \text{ K}$$

Todos los datos para la corrida 1 arriba mencionados se concentran en la tabla 2.1

Tabla 2.1 Datos de entrada para la Corrida 1

Variable	Unidades	Valor fijado
F	(m^3/s)	3.2537×10^{-3}
ρ	(kg/m^3)	964.6437
C_p	($\text{kcal}/(\text{kg K})$)	0.8959
V	(m^3)	0.15
$C_{O,e}$	(kgmol/m^3)	2.0443
T_e	(K)	300
$T_{e, baja}$	(K)	296
$T_{e, alta}$	(K)	298.38
T_{ref}	(K)	340
$C_{O,inc}$	(kgmol/m^3)	2.0443
T_{inic}	(K)	300

En la gráfica 2.3 se muestran los resultados de la primera corrida:



Gráfica 2.3 Corrida 1. $\tau = 46.10 \text{ s}$, $T_{ref} = 340 \text{ K}$

En la tabla 2.2 se muestran los resultados alcanzados en el estado estacionario.

Tabla 2.2 Resultados de la Corrida 1
Valores alcanzados en el estado estacionario

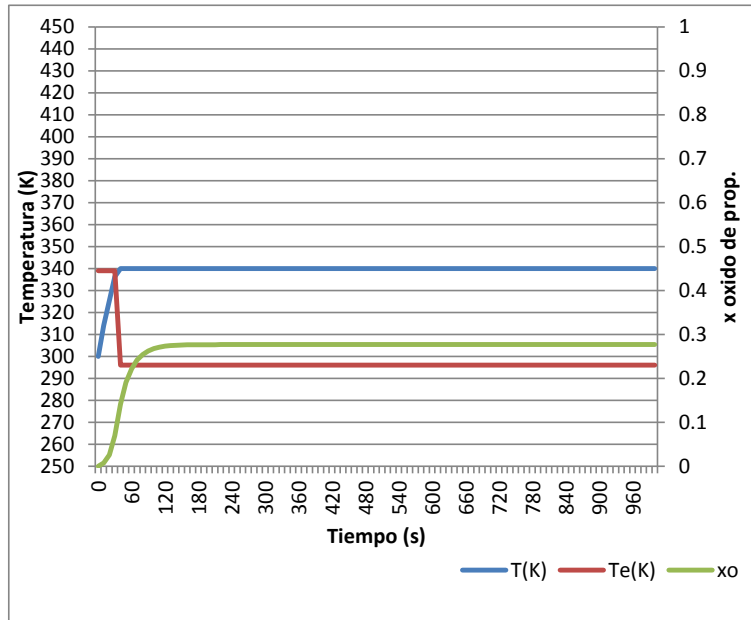
x_O	(-)	0.9378
T	(K)	387.52
T_a	(K)	296

Como se puede observar el sistema de control no pudo llevar al sistema de las condiciones iniciales a un estado estacionario en el que la temperatura fuera 340 K. La conversión terminó hasta 0.9378, la temperatura de la mezcla reaccionante se estabilizó hasta 387.52 K, muy por arriba de la máxima permitida de 343 K. Todo esto a pesar de que el agua de enfriamiento se mantuvo a su nivel bajo: T_e baja = 296 K.

Una solución para que el sistema de control pueda mantener la temperatura cerca de la temperatura de referencia es disminuir el tiempo de residencia; como el flujo de entrada se mantiene fijo, esto logra disminuyendo el volumen de la mezcla reaccionante dentro del reactor, bájese ese a 0.1 m^3 . En la gráfica 2.4 se muestran los resultados de la corrida con este nuevo valor en la tabla 2.3 se concentran los datos de entrada la segunda corrida, en la 2.4 se muestran los resultados de ésta.

Tabla 2.3 Datos de entrada para la Corrida 2
Son como los de la Corrida 1 a excepción de V

Variable	Unidades	Valor fijado
F	(m^3/s)	3.2537×10^{-3}
ρ	(kg/m^3)	964.6437
C_p	($\text{kcal}/(\text{kg K})$)	0.8959
V	(m^3)	0.10
$C_{O,e}$	(kgmol/m^3)	2.0443
T_e	(K)	300
$T_{e, \text{baja}}$	(K)	296
$T_{e, \text{alta}}$	(K)	298.38
T_{ref}	(K)	340
$C_{O, \text{inic}}$	(kgmol/m^3)	2.0443
T_{inic}	(K)	300



Gráfica 2.4 Corrida 2. $\tau = 30.74$ s, $T_{ref} = 340$ K

Tabla 2.4 Resultados de la Corrida 2

Valores alcanzados en el estado estacionario

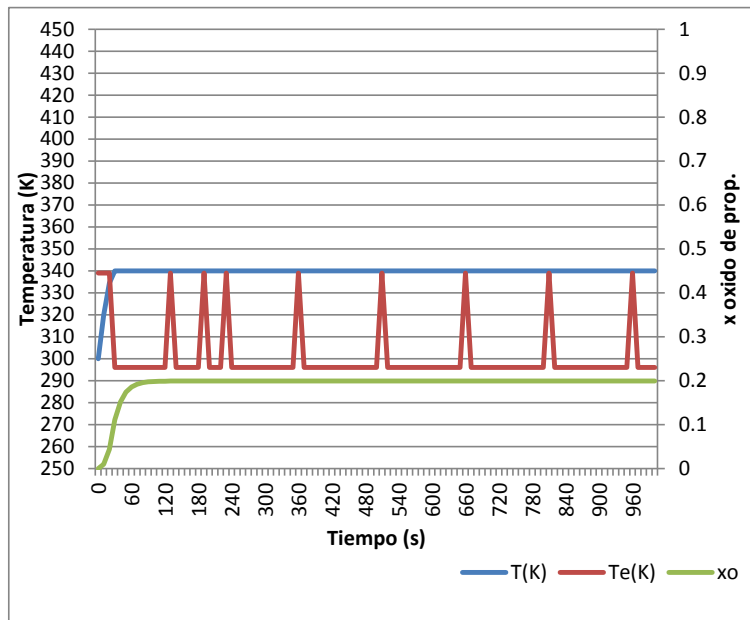
x_o	(-)	0.2768
T	(K)	340
T_a	(K)	296

Se puede observar que funcionó el disminuir el volumen de la mezcla reaccionante dentro del reactor; la temperatura se logró estabilizar en 340 K, que es la temperatura de referencia, la conversión a esa temperatura no es muy alta pero es mucho mejor que la alcanzada en el estado estacionario de baja temperatura en el sistema a lazo abierto (esto es, cuando no tenía el controlador). Sólo llama la atención la siguiente situación: el sistema está al límite; en la gráfica se puede observar que la temperatura del agua de enfriamiento se mantuvo en su nivel bajo. Es posible que esto no sea estrictamente así, puede ser que esporádicamente la temperatura se conmutó a su nivel alto, pero no se muestra en la gráfica porque no quedó reportado en los puntos de la tabla usada por un efecto de intervalo de impresión (no de cálculo) muy ancho. Como sea, el hecho de que no se conmute la temperatura, o se conmute poco, significa que una pequeña perturbación hacia arriba puede desestabilizar al sistema haciéndolo que tienda a ir al estado estacionario a lazo abierto a alta temperatura. La solución a esa posible contingencia es disminuir aún más el volumen de la mezcla reaccionante dentro del reactor para que disminuya el tiempo de residencia. Disminúyase a $V = 0.075$ m³. La gráfica de los resultados obtenidos con este nuevo valor del volumen de la mezcla reaccionante se muestran en la gráfica 2.5, en la tabla 2.5 se muestran los datos de entrada al programa y en la 2.6 los resultados en estado estacionario.

Tabla 2.5 Datos de entrada para la Corrida 3

Son como los de la Corrida 2 a excepción de V

Variable	Unidades	Valor fijado
F	(m ³ /s)	3.2537×10^{-3}
ρ	(kg/m ³)	964.6437
C_p	(kcal/(kg K))	0.8959
V	(m ³)	0.075
$C_{O,e}$	(kgmol/m ³)	2.0443
T_e	(K)	300
$T_{e, baja}$	(K)	296
$T_{e, alta}$	(K)	298.38
T_{ref}	(K)	340
$C_{O,inic}$	(kgmol/m ³)	2.0443
T_{inic}	(K)	300



Gráfica 2.5 Corrida 3. $\tau = 19.98$ s, $T_{ref} = 340$ K

Tabla 2.6 Resultados de la Corrida 3

Valores alcanzados en el estado estacionario

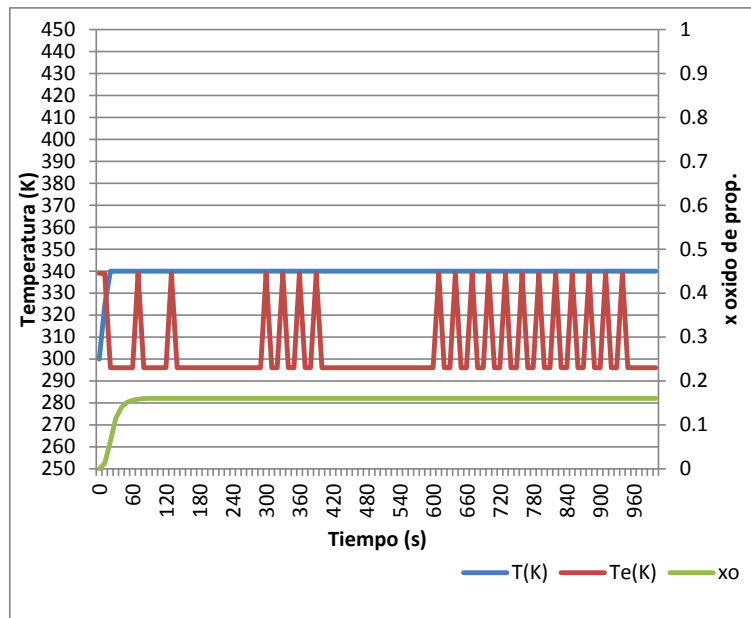
x_O	(-)	0.1992
T	(K)	340
T_a	(K)	Oscilando entre 296 y 338.98 K,

Obsérvese que el sistema de control logró estabilizar la temperatura de la mezcla reaccionante en la temperatura de referencia. La conversión es de 0.1992, bastante mayor que en el estado estacionario de baja temperatura del sistema a lazo abierto. La temperatura del agua de enfriamiento ya oscila entre la temperatura alta y la baja, pero con una clara tendencia a permanecer preferentemente en la baja, sin embargo este sistema respondería mejor a una perturbación hacia arriba. Para hacer que oscilara de una manera más equitativa entre las temperaturas alta y baja habría que bajar más aún el volumen de la mezcla reaccionante dentro del reactor, esto puede provocar que baje la conversión a niveles ya muy bajos. Pruébese con $V = 0.05$. Los resultados de la corrida 4, que tiene ese nuevo valor de V se muestra en la gráfica 2.6.

Tabla 2.7 Datos de entrada para la Corrida 4

Son como los de la Corrida 3 a excepción de V

Variable	Unidades	Valor fijado
F	(m ³ /s)	3.2537×10^{-3}
ρ	(kg/m ³)	964.6437
C_p	(kcal/(kg K))	0.8959
V	(m ³)	0.075
$C_{O,e}$	(kgmol/m ³)	2.0443
T_e	(K)	300
$T_{e, baja}$	(K)	296
$T_{e, alta}$	(K)	298.38
T_{ref}	(K)	340
$C_{O,inic}$	(kgmol/m ³)	2.0443
T_{inic}	(K)	300



Gráfica 2.6 Corrida 4. $\tau = 19.98$ s, $T_{ref} = 340$ K

Tabla 2.8 Resultados de la Corrida 4
Valores alcanzados en el estado estacionario

x_o	(-)	0.1606
T	(K)	340
T_a	(K)	Oscilando entre 296 y 338.98 K

Se puede observar que la temperatura del agua de enfriamiento conmuta más entre las temperaturas alta y baja. La conversión bajó con respecto a la corrida anterior, para estabilizarse en 0.1606, que sigue siendo mucho mejor que la obtenida en el estado estacionario de baja temperatura del sistema a lazo abierto. La temperatura de la mezcla reaccionante se logró estabilizar en la de referencia.

Capítulo 3. Sistema de Control para un Reactor con Sistema de Enfriamiento

Una de las desventajas del reactor operando adiabáticamente es que, como la reacción es exotérmica, la única forma de evitar que la temperatura aumente a tal grado que rebase el límite superior que se le ha impuesto, es evitar que la reacción alcance altas conversiones dentro del reactor; ya que a mayor conversión mayor cantidad de calor producido por reacción y mayor energía que pasa a la mezcla reaccionante lo que provoca mayor aumento de temperatura. Una solución a esto es que una gran proporción del calor producido por la reacción se retire con un sistema de enfriamiento, lo que permitirá que la reacción alcance mayores grados de conversión sin que aumente demasiado la temperatura. Además, para afinar el grado de conversión de la reacción, se puede controlar el volumen de la mezcla reaccionante dentro del reactor para aumentar o disminuir el tiempo de residencia, lo que provocará que la conversión baje y suba para mantenerse en las cercanías de una concentración de referencia fijada por el usuario. Este CSTR tendría entonces dos controladores, uno para controlar la temperatura, otro para controlar la concentración del reactivo limitante –el óxido de propileno– dentro del reactor. Para controlar mejor el sistema, se pueden usar controladores con las tres acciones: la acción proporcional, la integral y la derivativa. [10] y [12].

En la figura 3.1 se muestra un esquema del CSTR con el sistema de control propuesto.

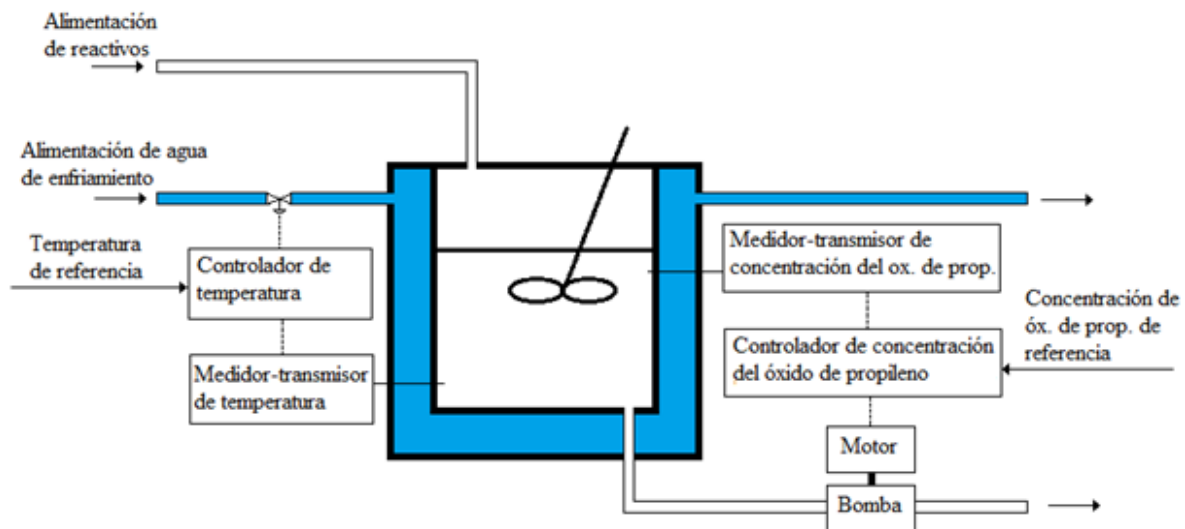


Figura 3.1 Reactor continuo de mezcla completa con sistema de enfriamiento por agua circulando en una chaqueta; el sistema de control consta de dos controladores, uno de temperatura y otro de concentración.

En este sistema, el agua de enfriamiento se encarga de retirar el calor producido por la reacción. El controlador que se encarga de controlar la temperatura usa como variable manipulable el flujo del agua de enfriamiento que entra a la chaqueta. El controlador que se encarga de manipular la concentración del reactivo limitante (y con eso la fracción del avance de reacción) usa como variable manipulable el volumen de la mezcla reaccionante

en el reactor, ya que como el flujo de alimentación al reactor es fijo, el manipular ese volumen es una forma de manipular el tiempo de residencia en el reactor y con él la fracción de conversión de la reacción en el reactor.

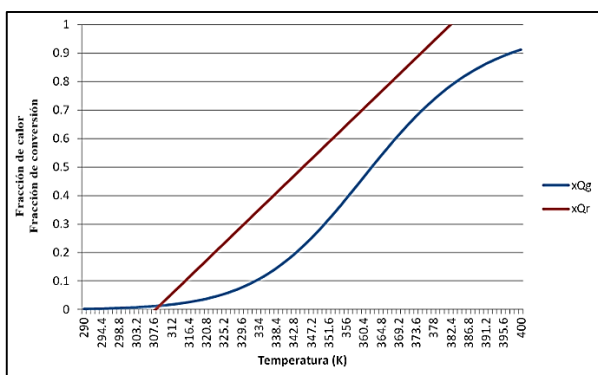
Buscando los Intervalos de Tiempo de Residencia y UA , convenientes para la Operación del Reactor.

Se usará ahora el programa mencionado en el capítulo 1 para observar las diferentes temperaturas y grados de conversión que es posible alcanzar en el estado estacionario, fijando diferentes tiempos de residencia y valores del producto UA (coeficiente global de transferencia de calor por el área de transferencia de calor) del sistema. De esta manera se determinará en que intervalos de esas variables (tiempo de residencia y producto UA) es necesario trabajar para evitar que la temperatura exceda el límite superior impuesto y se alcance una buena conversión de la reacción (del 90% o mayor).

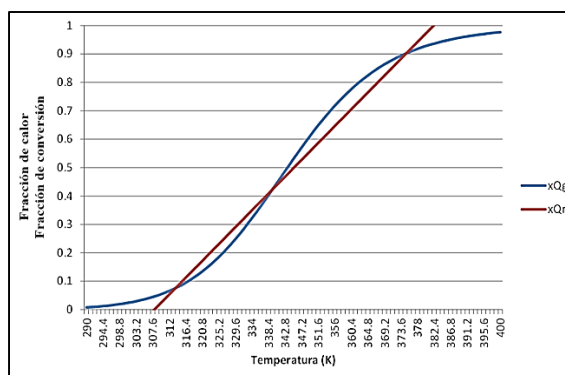
En las gráficas 3.1 a 3.9 se muestran los resultados de probar con diferentes tiempos de residencia y valores de UA , los valores usados para las demás variables se muestran en la tabla 3.1.

Tabla 3.1 Datos calculados y fijados usados para las corridas de las gráficas 3.1 a 3.9

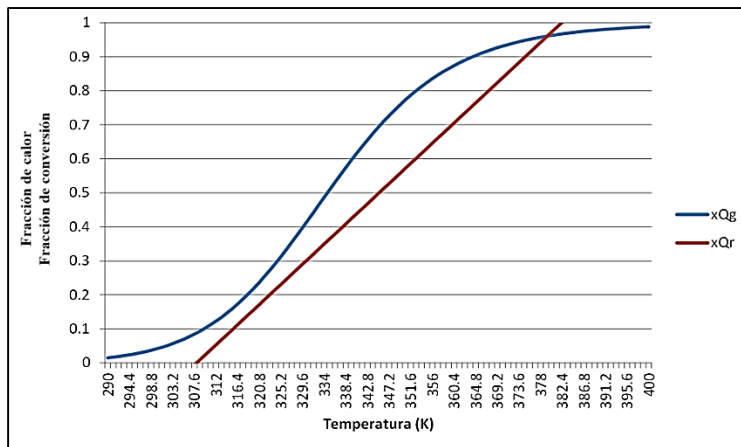
Variable	Unidades	Valor calculado/fijado
ρ	(kg/m ³)	964.6437
C_p	(kcal/(kg K))	0.8959
$C_{O,e}$	(kgmol/m ³)	2.0443
T_e	(K)	300



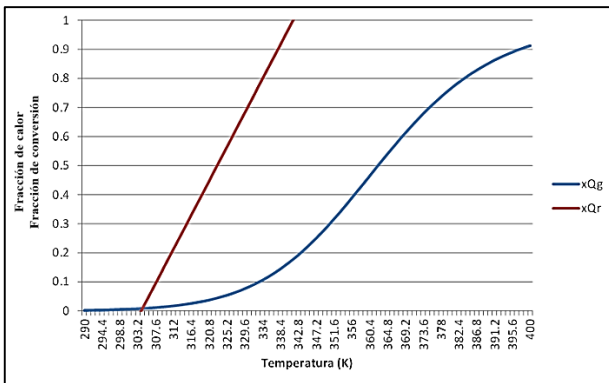
Gráfica 3.1 $\tau = 15.37$ s, $UA = 0.5$ kcal/(K s)



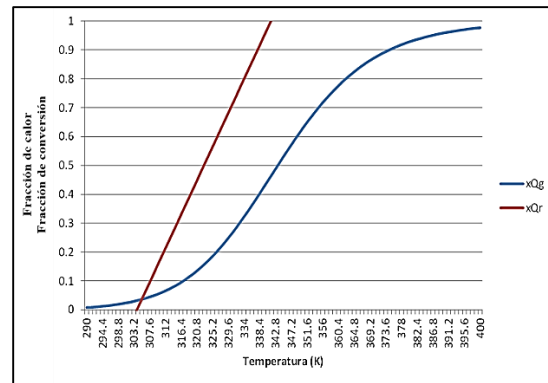
Gráfica 3.2 $\tau = 61.47$ s, $UA = 0.5$ kcal/(K s)



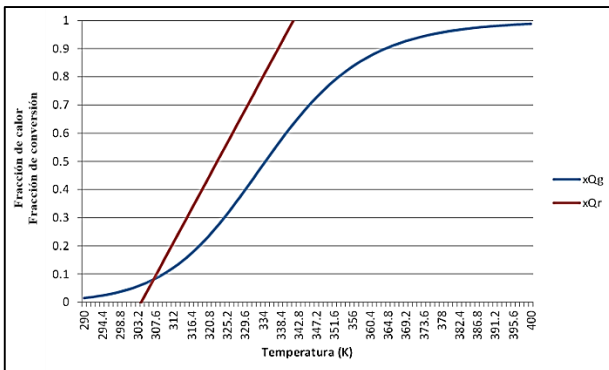
Gráfica 3.3 $\tau = 122.94$ s, $UA = 0.5$ kcal/(K s)



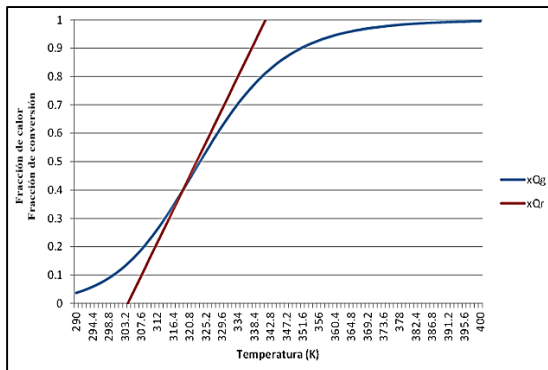
Gráfica 3.4 $\tau = 15.37$ s, $UA = 3.75$ kcal/(K s)



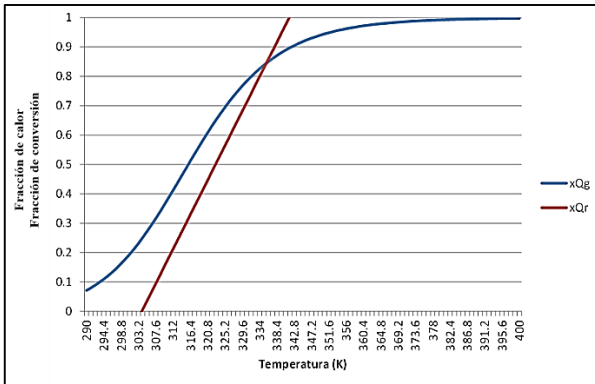
Gráfica 3.5 $\tau = 61.47$ s, $UA = 3.75$ kcal/(K s)



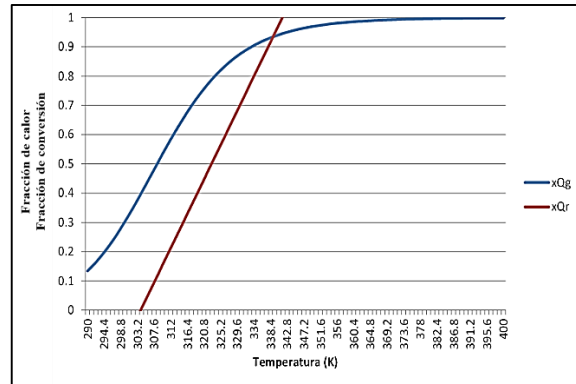
Gráfica 3.6 $\tau = 122.94$ s, $UA = 3.75$ kcal/(K s)



Gráfica 3.7 $\tau = 307.35$ s, $UA = 3.75$ kcal/(K s)



Gráfica 3.8 $\tau = 614.70$ s, $UA = 3.75$ kcal/(K s)



Gráfica 3.9 $\tau = 1229.39$ s, $UA = 3.75$ kcal/(K s)

Análisis de los Resultados de la Búsqueda de los Intervalos de Operación.

En las gráficas 3.1 a 3.3 se muestran los resultados de tres corridas en las que se ha usado un valor de UA de 0.5 kcal/(K s). Obsérvese que la línea recta, que representa el calor fraccional retirado, tiene una pendiente tal que hace que cruce la línea en forma de “S” (sigmoide), que representa el calor fraccional generado, en puntos en los que la conversión es muy alta pero la temperatura excede la máxima fijada, o la conversión es demasiado baja (por debajo del 10%) y la temperatura sí está dentro del intervalo permitido. El único punto donde corta a la sigmoide en el que la conversión es media (de 43% aproximadamente) y la temperatura está en el intervalo permitido, es el punto del estado estacionario de en medio de la gráfica 3.2, pero es un punto inestable.

Una forma de hacer que el reactor opere a altas conversiones y temperaturas bajas es aumentando la pendiente de la recta que representa el calor retirado fraccional. Un factor que afecta en gran medida la pendiente de esa recta es el producto UA , aumentándolo la pendiente sube. En las gráficas 3.4 a 3.9 se muestran los estados estacionarios que se pueden alcanzar para un producto UA de 3.75 y tiempos de residencia que van en aumento. En las gráficas se puede observar que para ese valor del producto UA y para tiempos de residencia altos se pueden alcanzar conversiones de más del 90% a temperaturas dentro del intervalo permitido.

Comentarios sobre los Costos de este Sistema que Alcanza Altas Conversiones.

En el punto anterior se ha visto que para que el sistema tenga altos valores de conversión a temperaturas por debajo del valor máximo fijado, se debe tener altos valores del producto UA y del tiempo de residencia. En cuanto al producto UA aquí cabe la siguiente observación: cuando se opera con equipos de transferencia de calor, se procura operar de tal manera que se obtenga el mejor coeficiente global de transferencia de calor posible (el más alto posible); para ello se procura que los flujos estén en un régimen turbulento plenamente desarrollado, es decir, se opera el equipo de manera tal que los números de Reynolds sean tales que se opere por arriba de la región de transición entre el régimen laminar y el régimen turbulento. El operar con números de Reynolds mayores a esos ya no aumentará en una proporción considerable los coeficientes de transferencia de calor. Por

ello, para aumentar la transferencia de calor la única alternativa que queda es aumentar el área de transferencia de calor. Esto implica un mayor costo de inversión en el sistema de enfriamiento ya sea aumentando el número de tubos y/o usando áreas extendidas, tales como aletas. Por otro lado, para un flujo constante, el aumentar el tiempo de residencia implica aumentar el volumen de la mezcla reaccionante en el reactor, lo cual a su vez implica aumentar el tamaño del reactor y con esto el costo de inversión.

En resumen. El obtener una mejor conversión implica un aumento del costo de inversión por dos factores: el del sistema de enfriamiento y el del tamaño del reactor. Por supuesto, el costo de operación se verá también incrementado por el aumento del uso del agua de enfriamiento.

El Modelo del CSTR con los Dos Controladores PID.

Haciendo los balances de materia y energía en estado transitorio e incluyendo las ecuaciones de los dos controladores, cada uno con las acciones proporcional, integral y derivativa, se obtienen las ecuaciones que se muestran abajo. El subíndice “1” de los parámetros de las acciones de control (K_c , τ_i , τ_D), se refiere al controlador de temperatura, el subíndice “2” en esos parámetros se refiere al controlador de concentración del óxido de propileno.

$$\frac{dC_O}{dt} = \frac{1}{1 - K_{c,2}\tau_{D,2}C_O/V} \left[\frac{F}{V} C_{O,e} - F_{sesgo} \frac{C_O}{V} - K_{c,2} \frac{C_O}{V} (C_{O,ref} - C_O) - \frac{K_{c,2}}{\tau_{I,2}} \frac{C_O}{V} \int_0^t (C_{O,ref} - C_O) dt - kC_O \right] \quad (3.1)$$

Donde:

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{V\rho C_p} [F_e \rho_e C_{p,e} T_e - F\rho C_p T + kC_O V(-\Delta H_r) - UA(T - T_a) + F_e \rho_e (-\Delta H_{dil})] \quad (3.2)$$

Donde:

$$F = F_{sesgo} + K_{c,2} \left[(C_{O,ref} - C_O) + \frac{1}{\tau_{I,2}} \int_0^t (C_{O,ref} - C_O) dt + \tau_{D,2} \frac{d}{dt} (C_{O,ref} - C_O) \right]$$

$$\frac{dT_a}{dt} = \frac{\dot{m}_a}{m_{a,sis}} (T_{a,e} - T_a) + \frac{UA}{m_{a,sis} C_{p,a}} (T - T_a) \quad (3.3)$$

Donde:

$$\dot{m}_a = \dot{m}_{a,sesgo} - K_{c,1} \left[(T_{ref} - T) + \frac{1}{\tau_{I,1}} \int_0^T (T_{ref} - T) dt + \tau_{D,1} \frac{d}{dt} (T_{ref} - T) \right]$$

$$\frac{dV}{dt} = F_e - F \quad (3.4)$$

Escribiendo las anteriores ecuaciones con notación funcional:

$$\frac{dC_o}{dt} = f_1 \left(T, C_o, V, \int_0^t (C_{o,ref} - C_o) dt \right) \quad (3.1b)$$

$$\frac{dT}{dt} = f_2 \left(T, C_o, T_a, V, \int_0^t (C_{o,ref} - C_o) dt, \frac{dC_o}{dt} \right) \quad (3.2b)$$

$$\frac{dT_a}{dt} = f_3 \left(T, T_a, \int_0^t (T_{ref} - T) dt, \frac{dT}{dt} \right) \quad (3.3b)$$

$$\frac{dV}{dt} = f_4 \left(C_o, \int_0^t (C_{o,ref} - C_o) dt, \frac{dC_o}{dt} \right) \quad (3.4b)$$

Se puede observar que se trata de un sistema de cuatro ecuaciones integro-diferenciales. Para resolverlas se usó un método que combina un método tipo Runge-Kutta de cuarto orden con el método de integración de los trapecios generalizado [9].

Experimentación, y Análisis de Resultados de la Simulación del Reactor con Sistema de Enfriamiento con Control de Temperatura y Concentración.

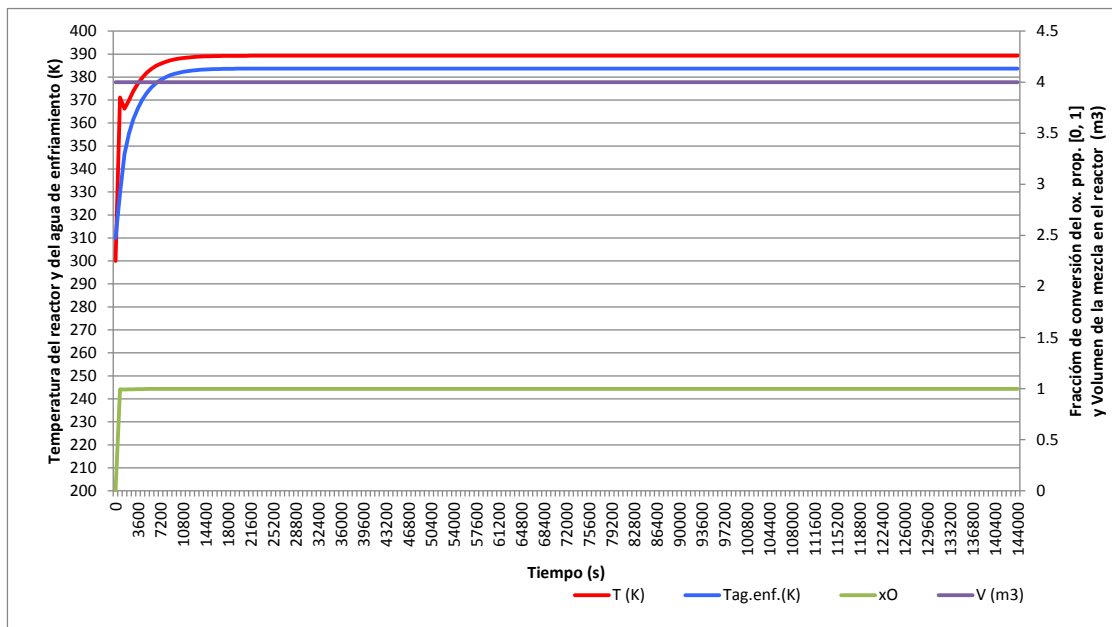
Se diseñó y desarrolló un programa que resuelve las ecuaciones integro-diferenciales 3.10 a 3.13. con el método reportado Hernández [9]. Los valores de las variables se muestran en la tabla 3.2. Como son controladores PID hay seis parámetros que afinar dos para la acción proporcional, $K_{c,1}$ y $K_{c,2}$, dos para la acción Integral, $\tau_{i,1}$ y $\tau_{i,2}$ y dos para la acción derivativa $\tau_{D,1}$ y $\tau_{D,2}$.

Tabla 3.2 Datos calculados y fijados usados para las corridas de las gráficas 3.10 a 3.13

Variable	Unidades	Valor calculado/fijado
ρ	(kg/m ³)	964.6437
C_p	(kcal/(kg K))	0.8959
$C_{o,e}$	(kgmol/m ³)	2.0443
T_e	(K)	300
$T_{a,e}$	(K)	300
Condiciones iniciales		
$C_{o,inic}$	(kgmol/m ³)	2.0443
$T,inic$	(K)	300
$T_a, inic$	(K)	310
$V,inic$	(m ³)	4
Datos de los controladores		
$\dot{m}_{a,sesgo}$	(kg/s)	0.25
T_{ref}	(K)	340
$C_{o,ref}$	(kgmol/m ³)	0.15
F_{sesgo}	(m ³ /s)	0.003254

Sea usado aquí la traducción *sesgo* para el término *bias* del inglés

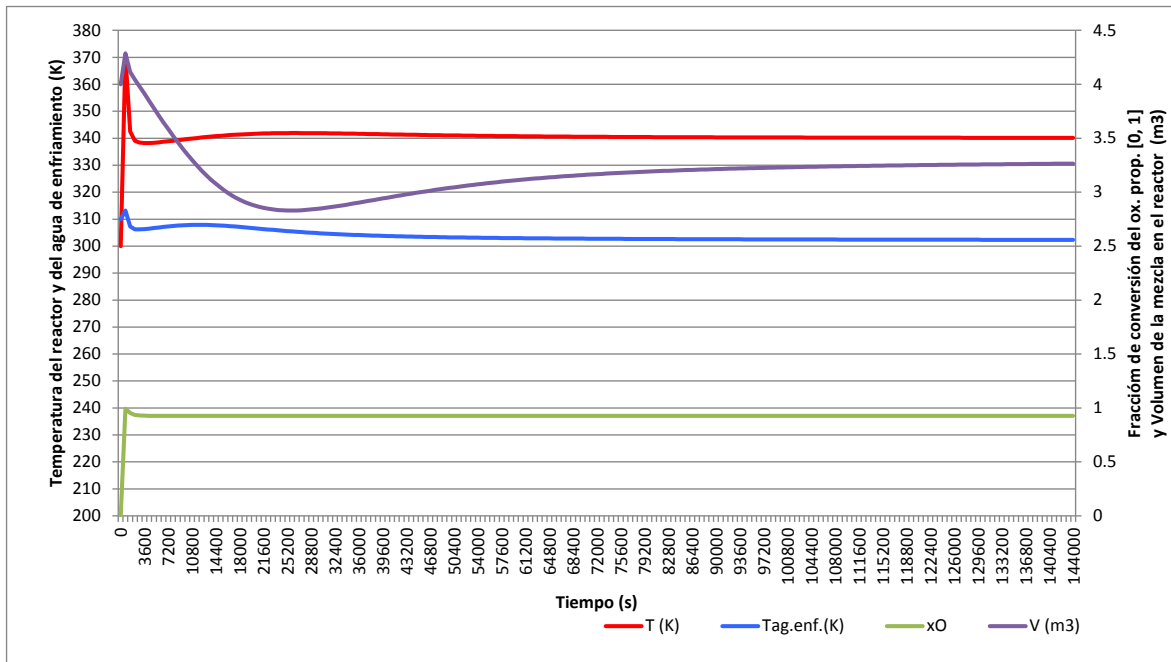
En las gráficas 3.1 a 3.4 se muestra el comportamiento en el tiempo de la temperatura de la mezcla reaccionante, T , del agua de enfriamiento, T_a , del volumen de la mezcla reaccionante, V , y de la fracción de conversión de la reacción, x_O , para diferentes valores de los parámetros de los dos controladores. En las gráficas no se reporta la concentración del óxido de propileno sino la fracción de conversión; para la concentración del óxido de propileno de referencia, $C_{O,ref} = 0.15 \text{ kgmol/m}^3$, corresponde una fracción de conversión de $x_{O,ref} = 1 - \frac{C_{O,ref}}{C_{O,e}} = 1 - 0.15/2.0443 = 0.9266$.



Gráfica 3.10 Comportamiento de T , T_a , V y x_O a lo largo de 40 horas para $K_{C,1} = 0$, $1/\tau_{i,1} = 0$, $\tau_{D,1} = 0$, $K_{C,2} = 0$, $1/\tau_{i,2} = 0$, $\tau_{D,2} = 0$, o sea que se trata de un sistema a lazo abierto.

Tabla 3.3 Valores de las variables controladas, manipuladas y la temperatura del agua de enfriamiento al final de las 40 horas de la corrida de la gráfica 3.10

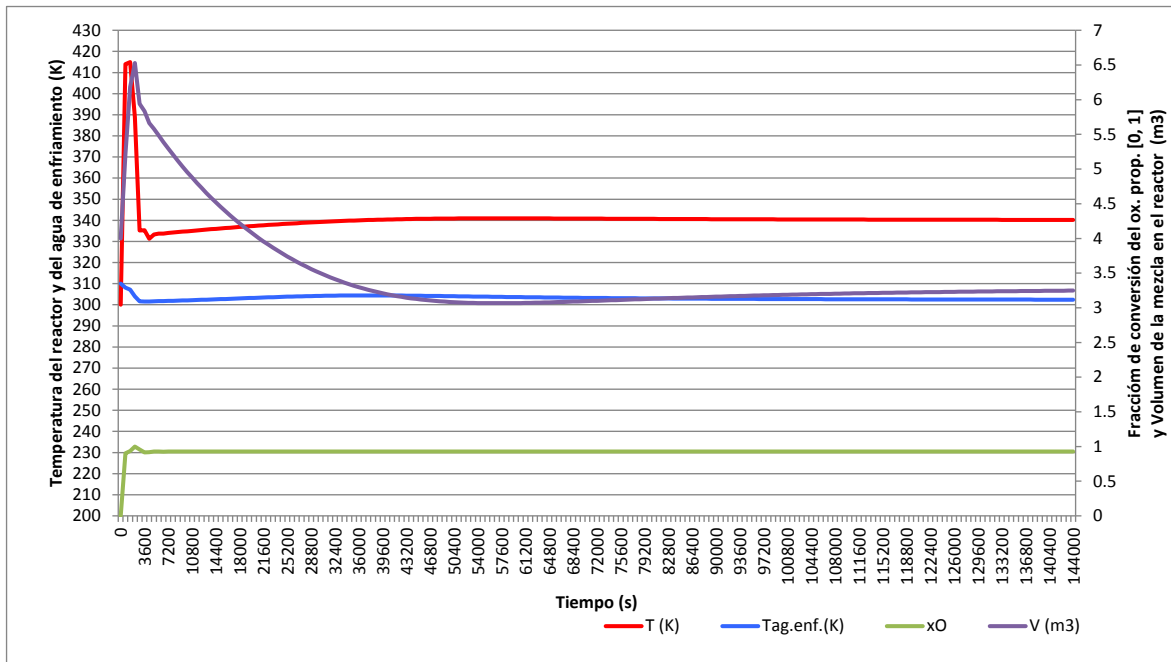
Variable	Unidades	Valor al final del intervalo de tiempo
T	(K)	389.3016
x_O	(-)	0.9978
\dot{m}_a	(kg/m ³)	0.25
V	(m ³)	4
T_a	(K)	383.7202



Gráfica 3.11 Comportamiento de T , T_a , V y x_O a lo largo de 40 horas
para $K_{C,1} = 0.2$, $1/\tau_{i,1} = 0.0025$, $\tau_{D,1} = 100$, $K_{C,2} = 0.005$, $1/\tau_{i,2} = 0.001$, $\tau_{D,2} = 10$

Tabla 3.4 Valores de las variables controladas, manipuladas y la temperatura del agua de enfriamiento al final de las 40 horas de la corrida de la gráfica 3.11

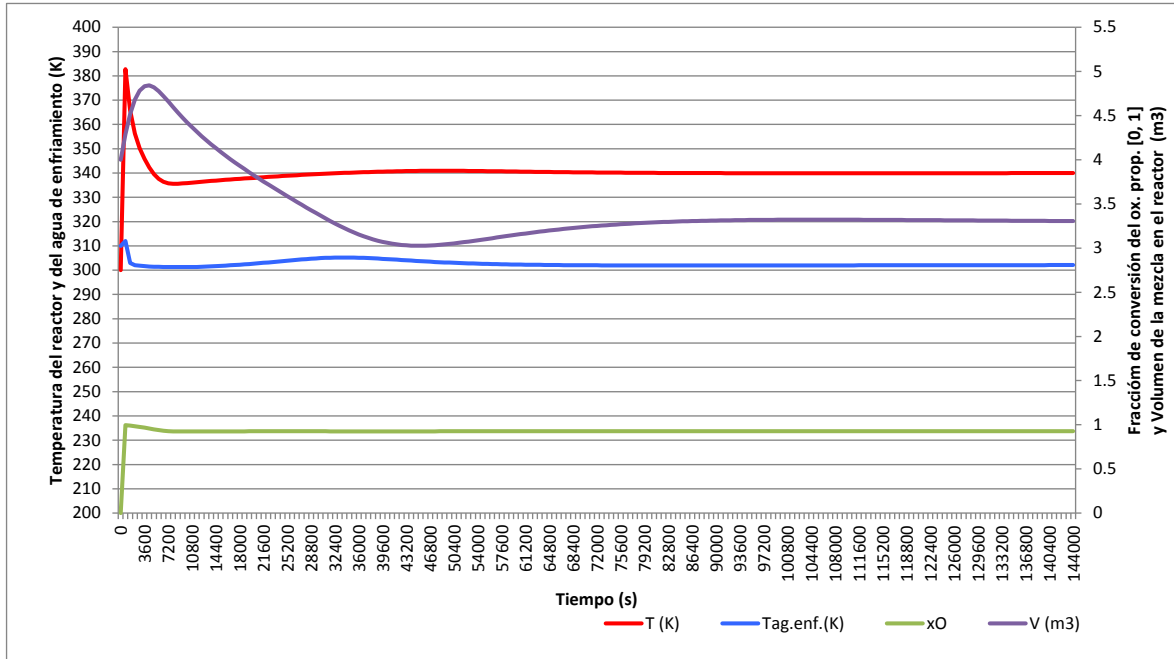
Variable	Unidades	Valor al final del intervalo de tiempo
T	(K)	340.1368
x_O	(-)	0.9266
\dot{m}_a	(kg/m ³)	61.1891
V	(m ³)	3.2648
T_a	(K)	302.3179



Gráfica 3.12 Comportamiento de T , T_a , V y x_O a lo largo de 40 horas para $K_{C,1} = 0.2$, $1/\tau_{I,1} = 0.0025$, $\tau_{D,1} = 100$, $K_{C,2} = 0.007$, $1/\tau_{I,2} = 0.002$, $\tau_{D,2} = 1$

Tabla 3.5 Valores de las variables controladas, manipuladas y la temperatura del agua de enfriamiento al final de las 40 horas de la corrida de la gráfica 3.12

Variable	Unidades	Valor al final del intervalo de tiempo
T	(K)	340.2040
x_O	(-)	0.9266
\dot{m}_a	(kg/m ³)	58.84
V	(m ³)	3.2477
T_a	(K)	302.4089



Gráfica 3.13 Comportamiento de T , T_a , V y x_O a lo largo de 40 horas
para $K_{C,1} = 0.1$, $1/\tau_{i,1} = 0.02$, $\tau_{D,1} = 100$, $K_{C,2} = 0.0001$, $1/\tau_{i,2} = 0.01$, $\tau_{D,2} = 1$

Tabla 3.6 Valores de las variables controladas, manipuladas y la temperatura del agua de enfriamiento al final de las 40 horas de la corrida de la gráfica 3.13

Variable	Unidades	Valor al final del intervalo de tiempo
T	(K)	339.9740
x_O	(-)	0.9266
\dot{m}_a	(kg/m ³)	67.4879
V	(m ³)	3.3063
T_a	(K)	302.10

La gráfica 3.10 muestra un sistema a lazo abierto, es decir sin controladores. Se puede apreciar como las variables controladas, CO y T, están lejos de sus valores de referencia. En la gráfica 3.11 ya se asignan valores diferentes de cero a los parámetros de los controladores. Se puede apreciar que los valores de las cuatro variables graficadas tienden al estado estacionario al final del periodo de tiempo de 40 h (144,000 s). La fracción de conversión y la temperatura de la mezcla reaccionante prácticamente llegan a sus valores de referencia. En las siguientes dos gráficas se muestran otros dos casos en los que las variables también se estabilizan, con las variables controladas en o muy cerca de los valores de referencia.

Conclusiones

Se ha propuesto en este trabajo dos sistemas de control: uno para hacer que un CSTR adiabático opere en una región inestable a lazo abierto, otro para que un CSTR con sistema de enfriamiento por agua opere a la temperatura y con la conversión de reacción que se fijan. En ambos casos las respectivas simulaciones demostraron que los sistemas de control se desempeñan adecuadamente.

Se desarrolló un modelo matemático que describe los calores generados y retirados en el CSTR en estado estacionario. Se desarrolló y depuró un programa para resolver ese modelo.

Se propusieron sistemas de control para que CSTRs operando de manera adiabática y con sistemas de enfriamiento por agua, operaran dentro de los intervalos de temperatura y de concentración fijados.

Se desarrollaron modelos que describen el comportamiento del sistema a lazo cerrado para el caso de un CSTR adiabático y otro enfriado por agua. Asimismo se desarrollaron programas que resuelven ambos modelos. Los programas incluyen la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales y ecuaciones integrodiferenciales.

Los sistemas de control propuestos funcionan en las simulaciones que se realizaron, de manera correcta, ya que logran que el sistema termine estabilizándose en los valores que se fijaron como referencia.

Nomenclatura

C_A	Concentración del agua en el reactor, kg-mol/m ³
C_D	Concentración del propanodiol en el reactor, kg-mol/m ³
C_O	Concentración del óxido de propileno en el reactor y en su salida, kg-mol/m ³
$C_{O,e}$	Concentración del óxido de propileno en la entrada al reactor, kg-mol/m ³
$C_{O,ref}$	Concentración del óxido de propileno en el reactor de referencia para el controlador, kg-mol/m ³
C_p	Capacidad calorífica a presión constante promedio, kcal/(kg-mol °C)
$C_{p,a}$	Capacidad calorífica a presión constante promedio del agua de enfriamiento, kcal/(kg-mol °C)
$C_{p,e}$	Capacidad calorífica a presión constante promedio en la entrada del reactor, kcal/(kg-mol °C)
E	Energía de activación de la reacción, kcal/mol
F	Flujo volumétrico promedio, m ³ /s
F_e	Flujo volumétrico en la entrada del reactor, m ³ /s
$F_{O,e}$	Flujo del óxido de propileno en la entrada del reactor, m ³ /s
F_{sesgo}	Flujo volumétrico de entrada al reactor en el estado estacionario para el que se visualizó el controlador, m ³ /s
k	Constante cinética de la reacción, s ⁻¹
k_0	Factor pre-exponencial de la ecuación de Arrhenius, s ⁻¹
$K_{c,i}$	Coefficiente de la acción proporcional del controlador i , <i>unidades de la variable controlada/unidades de la variable medida</i>
\dot{m}_a	Flujo másico del agua de enfriamiento, kg/s
$\dot{m}_{a,sesgo}$	Flujo másico del agua de enfriamiento en el estado estacionario para el que se visualizó el controlador, kg/s
$m_{a,sis}$	Masa del agua de enfriamiento en la chaqueta del reactor, kg
R	Constante del gas ideal, kcal/(mol K)
t	Tiempo, s
T	Temperatura en el reactor y en su salida, K
T_a	Temperatura del agua de enfriamiento, K
$T_{a,e}$	Temperatura del agua de enfriamiento en la entrada, K
T_e	Temperatura en la entrada del reactor, K
T_{ref}	Temperatura de referencia en el reactor para el controlador, K
UA	Producto del coeficiente global de transferencia de calor por el área de transferencia de calor, kcal/(°C s)
V	Volumen de la mezcla reaccionante en el reactor, m ³
x_O	Fracción del óxido de propileno que reacciona, (-)
x_{Q_G}	Fracción de calor generado, (-)
x_{Q_R}	Fracción de calor retirado, (-)
ΔH_{dil}	Entalpía de dilución, kcal/kg de mezcla
ΔH_r	Entalpía de reacción, kcal/kg-mol
ΔT_{ad}	Incremento de temperatura para la reacción adiabática, K
ΔT_{dil}	Incremento de temperatura debido al calor de dilución, K
ρ	Densidad promedio de las mezclas reaccionantes, kg/m ³

ρ_e	Densidad de la corriente de entrada al reactor, kg/m ³
τ	Tiempo de residencia, s
$\tau_{I,i}$	Inverso del coeficiente de la acción integral del controlador i , <i>unidades de la variable medida</i> \times <i>t/unidades de la variable controlada</i>
$\tau_{D,i}$	Coeficiente de la acción derivativa del controlador i , <i>unidades de la variable controlada/unidades de la variable medida</i>

Bibliografía.

- [1] Babushok, V., Noto, T., Burgess, D.R., Hamins, A., and Tsang, W.: Inhibitor Influence on the Bistability of a CSTR. *Combustion and Flame* 108, 61-70 (1997)
- [2] Ball, R., Gray, B.F.: Thermal Instability and Runaway criteria: the dangers of disregarding dynamics. *Process Safety and Environmental Protection*, preprint (Feb. 2012)
- [3] Bequette, B. Wayne.: *Process Control. Modeling, Design, and Simulation*. Prentice Hall, Upper Saddle River (2003)
- [4] Borckmans, P. and S. Métens: An excursion in theoretical non linear chemistry: from oscillators to Turing Patterns. In Borckmans, P., De Kepper, P. Khokhlov and Métens, S. (eds.) *Chemomechanical instabilities in responsive materials*. NATO Science for Peace and Security Series – A: Chemistry and Biology, pp. 69-70. Springer, Dordrecht (2009)
- [5] Chan, A & Seider, W. D. (2004). Batch Manufacture of Propylen Glycol. Department of Chemical and Biomolecular Engineering, University of Pennsylvania. [En línea]. Obtenido en enero de 2013 de la dirección:
http://www.seas.upenn.edu/~dlewin/CACHE_Workshop/Batch%20Manufacture%20of%20Propylene%20Glycol.pdf
- [5] Erickson, K.T., Hedrick, J.L.: *Plantwide Process Control*, John Wiley & Sons, New York, (1999)
- [6] Fogler, H. S.: *Elementos de la Ingeniería de las Reacciones Químicas*. Pearson Educación, México D.F. (2008)
- [7] Furusawa, T., Nishimura, H., Miyauchi, T.: Experimental Study of Bistable Continuous Stirred-Tank Reactor. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, vol. 2, 1, 95-100, (1969)
- [8] Ganapathisubramanian, N., Showalter, K.: Washout Effects in Pumped Tank Reactors. *J. Am. Chem. Soc.* 106, 816-817 (1984)
- [9] Hernández-García, R.P., “Resolviendo un sistema de ecuaciones íntegro-diferenciales para la simulación de un CSTR con controladores PID en Memorias del 5° Congreso sobre la enseñanza y aplicación de las matemáticas”, Oaxaca, A. y M.C. Valderrama eds., FES Cuautitlán UNAM, 2013.
- [10] Luyben, W.L.: *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*, 2nd ed., McGraw-Hill, Singapore, (1990)
- [11] Roffel, B., Betlem, B.: *Process Dynamics and Control. Modeling for Control and Prediction*, John Wiley & Sons, Chippingham, (2006)
- [12] Stephanopoulos, G.: *Chemical Process Control. An Introduction to Theory and Practice*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, (1984)

[13] Subhrangsu, S.M.: Chaotic Variation of Dissolved Oxygen Concentration During an Antibiotic Fermentation. Canadian Journal on Chemical Engineering & Technology. Vol. 2, 1, 60-73 (2011)