



Universidad Veracruzana

Facultad de Ciencias Químicas

Región Xalapa

Maestría en Ingeniería Química

Diseño, control y optimización integrado de una columna de
destilación reactiva para la producción de biodiésel

Presenta:

I.Q. Verónica Vázquez Ricaño

Director:

Dr. Eliseo Hernández Martínez

Asesor:

Dr. Miguel Ángel Morales Cabrera

Julio de 2025

“Lis de Veracruz: Arte, Ciencia, Luz”



Agradecimientos

Quiero comenzar agradeciendo profundamente a las personas más importantes en mi vida: mi mamá, mi hermano y mi papá. Su apoyo incondicional, su amor constante y su presencia en cada paso de mi camino han sido la base sobre la cual se ha construido no solo esta tesis, sino también la persona que soy hoy. A mi mamá, por ser el pilar de fuerza, amor y sabiduría que me ha guiado incluso en los momentos más inciertos; y a mi hermano, por ser ese compañero que nunca duda en tenderme la mano cuando realmente más lo necesito. Este logro es tanto mío como de ustedes.

A Manuel, gracias por acompañarme con paciencia en esta etapa tan demandante. Gracias por soportar mis momentos de estrés, por ser mi refugio cuando la presión me rebasaba y por recordarme que incluso en medio del caos se puede encontrar calma. Tu presencia, tus palabras y tu apoyo emocional fueron clave para que pudiera continuar, incluso en los días más difíciles.

A Fabi, Luis, Ready y Max, mis amigos incondicionales, no puedo agradecerles lo suficiente por su compañía, su escucha y su capacidad para levantarme el ánimo cuando más lo necesitaba. Ustedes han sido mi red de apoyo emocional constante, mi escape cuando lo académico me saturaba y mi risa cuando más la necesitaba. Gracias por estar, por quedarse y por seguir creyendo en mí.

También extendiendo mi más sincero agradecimiento al Cuerpo Académico de la Maestría en Ingeniería Química (MIQ). Su compromiso, su orientación y su generosidad durante toda esta formación han sido fundamentales. Más allá del conocimiento impartido, agradezco profundamente el trato humano, la comprensión y las experiencias compartidas dentro y fuera del aula. Gracias por ayudarme a crecer profesionalmente, pero también por acompañarme con calidez y empatía en los desafíos cotidianos que surgen en este tipo de procesos.

A todos ustedes, gracias por ser parte de esta etapa, por sostenerme cuando dudé, y por celebrar conmigo cada pequeño avance. Esta tesis no habría sido posible sin el respaldo, el amor y la comprensión que me han brindado.

Resumen

La destilación reactiva es una operación unitaria intensificada que combina las etapas de reacción química y separación en una sola unidad, de modo que los reactivos se convierten en productos al mismo tiempo que estos se separan. Al eliminar simultáneamente los productos formados, se logra una mayor conversión sin requerir etapas de separación adicionales, lo que reduce el consumo energético, facilita el uso de espacio y materiales, mejora la selectividad y el rendimiento del proceso. Tradicionalmente, el diseño, optimización y control de la destilación reactiva se realizan de manera secuencial, sin embargo, dada la complejidad del proceso se pueden presentar limitaciones en la capacidad de adaptación y control del sistema. En este trabajo, se presenta un enfoque integral de diseño, control y optimización de una columna de destilación reactiva para la producción de biodiésel, con el fin de mejorar tanto el rendimiento de conversión como la eficiencia energética del proceso. La metodología propuesta aborda simultáneamente el diseño, control y optimización, mejorando los aspectos operativos y estructurales del proceso. Se desarrolló un modelo dinámico de la columna de destilación reactiva y la simulación dinámica se validó en Aspen Plus. Para la optimización se consideraron el número de etapas, la ubicación del plato de alimentación, la relación de reflujo, la relación de reflujo del rehervidor y la condición térmica de alimentación como variables de decisión. La función objetivo se planteó para maximizar la fracción molar de biodiésel en los fondos y minimizar el consumo energético del rehervidor. Adicionalmente, se implementó un sistema de control clásico tipo PI, cuya sintonización se realizó usando reglas IMC. Los principales resultados se obtuvieron que, con el enfoque integral la fracción molar de biodiésel mejora hasta en un 17 % respecto al esquema tradicional, energéticamente se reduce en un 15.9% el consumo de energía en el rehervidor. Finalmente, el desempeño del controlador se ve favorecido pasando de una respuesta de 110 min en el controlador no optimizado a 16 min en condiciones óptimas, lo que representa un incremento de la velocidad de respuesta en 6.9 veces. En conjunto, el estudio propone una estrategia innovadora y replicable para la intensificación de procesos en ingeniería química, especialmente en el contexto de biocombustibles sostenibles como el biodiésel.

Índice

Agradecimientos	1
Resumen	2
Índice	3
Índice de Figuras	5
Índice de Tablas	6
CAPITULO 1: Introducción	7
1.1 Antecedentes	8
1.2. Planteamiento del problema	11
1.3. Justificación.....	11
1.4. Hipótesis.....	12
1.5. Objetivos	12
General	12
Específicos	¡Error! Marcador no definido.13
CAPITULO 2: Marco teórico	14
2.1 Biodiésel.....	14
2.2 Procesos de producción	15
2.2.1 Clásico secuencial	15
2.2.2 Destilación reactiva	16
2.2.3 Tipos de reacción	166
2.3 Control y Optimización.....	177
2.3.1 Control del proceso	17
2.3.2 Optimización	18
2.3.3. Descripción del método tradicional.....	19
CAPITULO 3: Metodología	21
3.1. Columna de destilación reactiva	21
3.2. Modelo matemático.....	26
3.2.1. Balances de materia.....	274
3.2.2. Modelado cinético de la zona reactiva	275
3.2.3. Equilibrio líquido-vapor.....	275
3.3. Implementación de controlador tipo PI.....	28
3.3.1. Controlador PI y funciones de respuesta.....	276
3.3.2. Sintonizado del controlador.....	27
3.4. Optimización de la columna de destilación reactiva	28

CAPITULO 4: Resultados y discusiones	33
4.1. Simulación del modelo matemático	33
4.1.1 Validación de la columna de destilación reactiva	333
4.1.2 Parámetros de diseño de la columna de destilación reactiva.....	35
4.2. Optimización	37
4.2.1. Optimización multiobjetivo de la columna	37
4.2.2. Resultados de la optimización.....	37
4.3. Control.....	39
4.3.1. Implementación de controlador PI	39
4.3.2. Optimización de parámetros del controlador	40
4.4. Comparación del método tradicional con el método integral.....	42
4.4.1. Parámetros obtenidos del método Integral	442
4.4.2. Evaluación de energía obtenida y fracción de biodiésel de fondos.....	437
4.2.1. Evaluación de eficiencia en el controlador del método integral.....	44
CAPITULO 5: Conclusiones y Perspectivas	466
5.1. Conclusiones	46
5.2. Perpectivas	47
5.3. Referencias.....	48

Índice de Figuras

Figura 1. Reacción de transesterificación para la producción de biodiésel.....	17
Figura 2. Columna de destilación reactiva.....	22
Figura 3. Representación del estado dinámico de cada uno de los platos en la columna de destilación reactiva.....	23
Figura 4. Comparación entre los resultados obtenido con Aspen Plus y Matlab (o Aspen Plus, x Matlab).....	34
Figura 5. Simulación dinámica de la columna de destilación reactiva para la producción de biodiésel	36
Figura 6. Sistema de control antes de la optimización.....	40
Figura 7. Comparación del desempeño del controlador con y sin optimización.....	41
Figura 8. Desempeño del controlador a través del tiempo.....	42
Figura 9. Cálculo del error integral al cuadrado del método tradicional como integral.....	45

Índice de Tablas

Tabla 1. Parámetros cinéticos de la reacción de transesterificación.....	25
Tabla 2. Constantes de Antoine de las presiones de vapor de cada uno de los componentes	26
Tabla 3. Configuración inicial del diseño basado en la literatura.....	35
Tabla 4. Parámetros de diseño obtenidos después de la optimización	38
Tabla 5. Valores obtenidos del sintonizado.....	39
Tabla 6. Parámetros de diseño obtenidos a partir de la optimización y control integrado	43

CAPITULO 1

Introducción

El biodiésel es un combustible renovable y no tóxico que se obtiene principalmente mediante el proceso de transesterificación. Este combustible posee propiedades comparables a las del diésel convencional y se destaca que contribuye a reducir las emisiones de partículas, hidrocarburos y monóxido de carbono en motores diésel, por lo que ha mostrado un notable aumento en su demanda en los últimos años. La columna de destilación reactiva para la producción de biodiesel se presenta como una alternativa atractiva, ya que si se determinan las condiciones de operación adecuadas se pueden alcanzar rendimientos rentables, mejorar la productividad, la selectividad y la reducción de costos operativos, emisiones de CO_2 y residuos. A pesar de estas ventajas, el pleno potencial de la destilación reactiva aún no se ha explotado por completo, y persisten desafíos relacionados con el diseño, la operabilidad y el control de estos sistemas altamente complejos. (Santos y col., 2018).

La forma convencional para el diseño de columnas de destilación reactiva presenta ciertas limitaciones al incorporar sistemas de control, ya que no permite ajustar las variables de diseño con el propósito de alcanzar condiciones óptimas de operación. En este enfoque, se suele proponer un diseño inicial, seguido de una etapa de optimización para determinar las condiciones operativas ideales y, por último, se implementan los sistemas de control. Esta secuencia plantea desafíos en la etapa de diseño de la estructura de control, ya que la controlabilidad no se contempla durante la fase de diseño del proceso. Para resolver esta problemática, es común recurrir a un sobredimensionamiento posterior del proceso, lo que conlleva a un aumento en los costos (Braccia, 2019). Como respuesta a estas limitaciones, ha surgido un interés creciente en el desarrollo de nuevas metodologías que incorporen consideraciones de control desde las etapas iniciales del diseño de columnas de destilación

reactiva. Siguiendo esta línea de pensamiento, se propone abordar simultáneamente el diseño, la optimización y el control de columnas de destilación reactiva en el contexto de la producción de biodiésel. El objetivo primordial radica en lograr una eficiencia energética superior y rendimientos optimizados en comparación con los métodos convencionales correspondientes al control y diseño, destacando la necesidad de abordar simultáneamente ambos aspectos para lograr procesos no solo económicamente atractivos sino también operacionalmente factibles y flexibles.

La incorporación temprana del diseño y control en la planificación de procesos, como se evidencia en este estudio sobre destilación reactiva, se encuentra una importancia crucial en la industria química contemporánea. Esta práctica se justifica no solo por su capacidad para optimizar la eficiencia económica de las operaciones, sino también por su impacto en la sostenibilidad ambiental y la adaptabilidad a las crecientes demandas energéticas globales. Al considerar simultáneamente el diseño y el control, se pueden evitar conflictos posteriores entre objetivos, como el diseño excesivo frente a la operación no robusta, y se logra un equilibrio más efectivo entre la eficiencia económica y la operatividad. Esto facilita la identificación de soluciones óptimas que aborden la eficiencia económica, alineándose con los desafíos actuales de la industria química y su contribución a un futuro más sostenible.

1.1 Antecedentes

El biodiésel se genera a partir de una reacción de transesterificación, por lo que los estudios experimentales se han centrado en la determinación de los tipos de reactivos, su proporción y el tipo de catalizador. Por ejemplo, Darnoko y col. (2000) realizaron experimentos en lotes usando aceite de palma con un catalizador de hidróxido de potasio (KOH), observaron que la velocidad de la reacción de transesterificación aumenta con la temperatura hasta llegar a los 60°C, además determinaron que la concentración óptima de catalizador fue del 1% de KOH.

La producción de biodiésel ha evaluado en diferentes tipos de reactores y de operación, tales como en el reactor de tanque agitado donde los reactivos y el catalizador se alimentan de manera continua al sistema, lo que permite una producción de biodiésel constante (Noureddin y col., 1998), en reactores de lecho empacado donde el catalizador se

coloca en forma de gránulos en el lecho del reactor y los reactivos fluyen a través del lecho, lo que aumenta la superficie de contacto, mejorando la velocidad de reacción y la conversión del biodiésel (Maneti y col., 2011). En reactores de membrana con el propósito de superar los desafíos de transferencia de masa en la producción de biodiésel, se usa una membrana selectiva que permite la separación de los productos de reacción (Gumus y col., 2013).

Estos avances han sido de gran importancia, ya que han permitido determinar la combinación de reacción química y la separación en una sola etapa, la eliminación del producto con una inversión y costo de producción reducidos, obtención de una mayor conversión del reactivo y generación de biodiésel de mayor pureza. El diseño de columnas de destilación reactiva ha sido estudiado debido a la ventajas tecnológicas y económicas que ofrece al combinar la reacción y la separación en un solo proceso. Sin embargo, su diseño y optimización no es una tarea sencilla. Por ejemplo, Carrera y col. (2011) presentó un método robusto de diseño de destilación reactiva basado en cálculos de líneas de destilación y bandeja por bandeja, proporcionando el número de etapas teóricas (14 platos), la relación de reflujo (entre 2.97 y 3.30, dependiendo de la condición de de operación) de operación, la ubicación de la bandeja de alimentación (plato 7).

La generación de biodiésel en columnas de destilación reactiva es un proceso actual que se ha seguido estudiando, el cual ha tenido diferentes enfoques, He y col. (2006) reportaron un estudio exhaustivo de la preparación de biodiésel a partir de aceite de canola en un sistema de destilación reactiva de flujo continuo, optimizando variables del proceso como la relación molar de metanol de alimentación con los triglicéridos, el tiempo de reacción, la temperatura del rehervidor, la concentración del catalizador, el modo de circulación del metanol y la formulación del catalizador. Mientras que, Poddar y col. (2015) simula dos procesos de destilación reactiva, utilizando un catalizador alcalino y en el otro un catalizador heterogéneo, evaluando los costos de producción anuales y los indicadores económicos como el retorno de la inversión y el período de recuperación. Los resultados de la simulación mostraron que el proceso con catalizador heterogéneo es más ventajoso económicamente que el proceso con catalizador alcalino para la producción de biodiésel, debido a un retorno de inversión más alto, un período de recuperación más corto y un costo anual más bajo por unidad de biodiésel producido.

Sin embargo, con la finalidad que sea más eficiente la producción de biodiésel, se ha realizado la intensificación del proceso como un medio potencial para la mejorar la calidad del producto y satisfacer las crecientes demandas de producción sostenibles. Para llevar a cabo esta intensificación, se ha realizado la optimización de la columna de destilación reactiva para la producción de biodiésel a partir de algas, con el principal objetivo de reducir costos energéticos, tal es el caso de Mondal y col. (2021) donde realizaron la optimización de la columna de destilación reactiva por medio de objetivos múltiples, obteniendo una pureza del 91.55% en peso de biodiésel, y logrando un buen desempeño en términos de perspectiva energética, ambientales y económicas. A su vez, Ali y col. (2021) se enfoca en mejorar el proceso de producción de biodiésel de alta pureza a través de la destilación reactiva, al mismo tiempo que desarrolla estrategias de control eficaces para asegurar la calidad del producto final. El inicio del estudio se centra en la optimización de la Red de Intercambio de Calor (HEN) para un proceso de destilación reactiva de alta pureza, logrando una reducción del 34% en el consumo total de energía.

Aunque se han encontrado beneficios con la optimización de la columna de destilación, la integración del diseño y el control de los procesos ha tomado importancia en la generación de productos de valor agregado, y favorece permitiendo mejorar la eficiencia, flexibilidad, reduce los grados de libertad para el control y la existencia de múltiples estados estacionarios (Tian y col. 2020). Con este enfoque, Alzate y col. (2014) presentaron una metodología para el diseño y control simultáneo de un CSTR, obteniendo mejores indicadores en comparación al método tradicional. Por otro lado, Andersen y col. (2018) exploraron un enfoque integrado de control y diseño del proceso de la columna de destilación cíclica y Diangelakis y col. (2017) presentaron un esquema multiparamétrica que acopla un esquema de control óptimo y la determinación del plato de alimentación. Sin embargo, para la destilación reactiva este enfoque es muy escasos, debido a la complejidad del proceso. Entre los pocos trabajos reportados, Tian y col. (2020) presentaron un modelo dinámico detallado para un sistema de destilación reactiva desarrollando estrategias de control óptimas explícitas dependientes del diseño, asegurando la operabilidad del procesamiento intensificado bajo perturbaciones desde la fase inicial del diseño. Kjobsted y col. (2015) se enfocaron en el diseño y control integrado para la destilación reactiva basándose en métodos gráficos simples, siendo de esta forma menos sensible a las perturbaciones en la alimentación.

Recientemente Iftakher y col. (2021), se enfoca en la integración del diseño y control de procesos de destilación reactiva mediante la aplicación de la energía que genera la reacción. Se presenta una discusión amplia sobre las limitaciones de la controlabilidad de los sistemas de destilación reactiva y ofrecen información detallada sobre soluciones de diseño y control aplicables a sistemas de destilación reactiva con alimentación simple o doble, abarcando sistemas binarios y multicomponente.

1.2. Planteamiento del problema

El diseño y determinación de las condiciones óptimas de operación de la columna de destilación reactiva para la producción de biodiésel presenta desafíos complejos en integración del diseño, optimización y control. El enfoque tradicional, que aborda estos elementos de manera secuencial, resulta insuficiente debido a su incapacidad para integrar y gestionar eficazmente las interacciones dinámicas del proceso. Esto conduce a mayores costos operativos y un mayor gasto de energía. Además, limita la flexibilidad del sistema y la calidad del producto final al dificultar los ajustes necesarios para adaptarse a las condiciones de cambio en el sistema.

La ausencia de sinergia en este enfoque secuencial no permite manejar adecuadamente las interacciones dinámicas y en tiempo real entre los parámetros del proceso. Como resultado, se generaron diseños de control que comprometen el rendimiento y la eficiencia de la columna de destilación reactiva. Es en este contexto que surge la necesidad de un enfoque integral para el desarrollo de la columna de destilación reactiva, ya que, al permitir el diseño, control y optimización simultáneos, este enfoque integral busca anticipar y adaptar el comportamiento del sistema desde la fase de diseño. Una estrategia así tiene el potencial de mejorar el desempeño de la columna de destilación reactiva, maximizando la eficiencia energética y alcanzando niveles óptimos de conversión y calidad del producto.

1.3. Justificación

A nivel industria, el objetivo principal es producir productos que satisfagan al consumidor, maximizando beneficios económicos con costos mínimos. La integración del diseño y control desde el inicio de un proceso evita que ocurra un desempeño dinámico deficiente y comportamientos inesperados ante perturbaciones. Esta integración se ha logrado en

procesos como reactores de tanque agitado y columnas de destilación simple, su implementación en columnas de destilación reactiva es particularmente compleja debido a las interacciones físicas y químicas presentes, que dificultan una operación y control eficientes. En el caso de la columna de destilación reactiva para la producción de biodiésel, ejecutar el diseño en conjunto con el control y la optimización, sumando la evaluación dinámica desde el comienzo, busca alcanzar una mayor eficiencia en la producción de biodiésel. Esto implica no solo beneficios económicos significativos, sino también una reducción en los costos de operación.

Un enfoque simultáneo proporciona adaptabilidad y flexibilidad al proceso, permitiendo atenuar perturbaciones frente a cambios en las condiciones operativas, lo cual es crucial debido a la heterogeneidad de los aceites vegetales utilizados como recurso. Por lo tanto, integrar el diseño, control y optimización en paralelo dentro del proceso de destilación reactiva para el biodiésel posibilita la obtención de productos de mayor calidad, así como beneficios económicos, ambientales y de seguridad operativa. La columna de destilación reactiva mejora de manera notable la eficiencia y confiabilidad del proceso, pudiendo resultar en una producción de biodiésel más rentable y sostenible, fundamentando así la necesidad de resolver este problema dentro del marco industrial actual.

1.4. Hipótesis

La integración del diseño y control simultáneo mediante técnicas de optimización en una columna de destilación reactiva de biodiésel permitirá incrementar el rendimiento de producción de biodiésel reduciendo el gasto energético del rehervidor, comparado con el esquema clásico secuencial.

1.5. Objetivos

General

Diseñar y optimizar una columna de destilación reactiva, integrando la etapa de control durante la optimización, para encontrar las variables de diseño óptimas para incrementar la producción de biodiésel y reducir la energía del rehervidor.

Específicos

- Establecer el modelo dinámico de la columna de destilación reactiva para evaluar el efecto de las variables de diseño sobre rendimiento de la producción de biodiésel.
- Implementar un método de optimización dinámica para la integración del diseño y control del proceso.
- Implementar esquemas de control PI para el control del proceso en las condiciones óptimas de operación.
- Realizar el método integral en la columna de destilación reactiva
- Comparar la metodología propuesta con la metodología basada en métodos convencionales.

CAPITULO 2

Marco teórico

2.1 Biodiésel

El biodiésel es un biocombustible amigable con la naturaleza, biodegradable y sostenible, que genera una alternativa para reemplazar parcialmente los combustibles fósiles, debido a que no es necesario realizar modificaciones a los motores actuales para su uso; se obtiene de fuentes biológicas, o productos de la fermentación de microorganismos a través del proceso de transesterificación, su concepto se define como una mezcla de monoalquil-ésteres de ácidos grasos a partir de aceites y grasas de origen vegetal o animal (Hernández y col., 2009). Los biocombustibles como el biodiésel pueden ser producidos por aceites de tercera generación que provienen de organismos que pueden producir su propio alimento a partir de energía solar y CO_2 , se producen con biomasa diferente a la utilizada para los biocombustibles de primera y segunda generación y se puede cultivar en reactores fotoquímicos o en piletones al aire libre. Su obtención está basada en tecnologías emergentes que prometen una gran cantidad de combustible por unidad de área y menores costos de producción (Kafarov y col., 2009). La reacción de transesterificación se desarrolla en tres pasos. Primero, los triglicéridos (TG) reaccionan con metanol para generar diglicéridos (DG), que reaccionan con metanol para producir monoglicéridos (MG). Reacciona además con metanol para producir glicerol. Cada uno de estos pasos de reacción produce éster metílico (biodiésel).

El mercado mundial de biodiésel y que está proyectado para experimentar un crecimiento significativo en los próximos años, se estima que el tamaño de este mercado alcanzará los 34.66 mil millones de dólares en 2024 y crecerá a 50.22 mil millones de dólares para 2029, lo que representa una tasa compuesta anual del 7.70% en dicho período. Este

crecimiento está impulsado principalmente por una creciente demanda de combustibles que respeten el medio ambiente y que contribuyan a la reducción de las emisiones de gases de efecto invernadero (Mordor Intelligence, s.f.).

2.2 Procesos de producción

2.2.1 Clásico secuencial

La producción de biodiésel a partir de un sistema de reactor seguido por una columna de destilación es uno de los métodos más utilizados a nivel mundial, sobre todo en México. La reacción se lleva a cabo en un reactor, donde se controlan las condiciones de temperatura, agitación y tiempo de residencia para asegurar una alta conversión y la calidad del producto final. Posteriormente, el producto crudo que sale del reactor pasa a una columna de destilación, donde se purifica el biodiésel separando las impurezas, como el alcohol sin reaccionar, el catalizador y la glicerina, el principal subproducto del proceso.

La columna de destilación cumple un rol fundamental, ya que permite que el biodiésel cumpla con los estándares internacionales de calidad, como la norma ASTM D6751 en Estados Unidos y la EN 14214 en Europa, las cuales establecen los requisitos necesarios de pureza, viscosidad, estabilidad, y otros parámetros que debe cumplir el biodiésel para su uso en motores de combustión. La separación en dos etapas, es decir, reacción en el reactor y purificación en la columna, ofrece una mayor flexibilidad operativa y permite un control detallado sobre cada fase del proceso.

Sin embargo, una de las desventajas de realizar la producción en dos etapas es que implica mayor tiempo de procesamiento y, generalmente, un mayor consumo de catalizadores y reactivos, lo que incrementa los costos y afecta la viabilidad económica del proceso. Además, la destilación reactiva facilita una mayor integración entre las etapas de reacción y purificación, permitiendo un control continuo y más eficiente de la conversión de reactivos y la calidad del biodiésel. Por todas estas razones, la destilación reactiva se presenta como una alternativa superior en términos de eficiencia energética, reducción de costos, y sostenibilidad en la producción de biodiésel, destacándose frente al sistema tradicional de reactor y columna de destilación.

2.2.2 Destilación reactiva

La destilación reactiva, es una combinación de los procesos de reacción y destilación en una sola columna. Esta es una operación híbrida o combinada e implica el uso de un recipiente de reacción. Presenta ventajas para los sistemas de reacción en fase líquida cuando la reacción debe llevarse a cabo en gran exceso de uno o más de los reactivos, cuando la reacción se puede llevar hasta su completo agotamiento mediante la eliminación de uno o más de los productos a medida que se forma (Perry, 2018). El grupo de tecnologías industriales en las que ya se ha implementado o se ofrece para su comercialización la destilación reactiva se ha ampliado en los últimos 20 años. El proceso de acetato de metilo de Eastman Chemical, se considera ahora un ejemplo clásico de intensificación de procesos, en este caso, una síntesis de procesos basada en el análisis de tareas dio como resultado la sustitución de los reactores y unidades de separación tradicionales por una columna de destilación reactiva altamente integrada. En consecuencia, el número de equipos principales se ha reducido de 28 a 3.

Shu y col., (2022) presentan los diferentes métodos de diseño y optimización de los procesos para la columna de destilación reactiva. Estos métodos de diseño y optimización se clasifican en tres categorías: a) gráficos, decisiones en información gráfica generada a partir de propiedades termodinámicas y de reacción química; b) basado en la optimización utilizando el diseño a detalle, determinando parámetros de cada columna; y c) evolutivo, son enfoques de diseño derivados de los procesos de destilación convencionales. Además del diseño, es importante la intensificación de procesos (IP), la cual es una estrategia efectiva para lograr una mayor eficiencia energética. La IP tiene como objetivo reducir las resistencias de transferencia de calor y masa mientras se superan las limitaciones termodinámicas a través del diseño y la operación integrados. En los últimos años, la IP ha atraído un interés considerable, como un medio potencial para la mejora de procesos, para satisfacer las crecientes demandas de producción sostenible (Segovia-Hernández y col., 2015).

2.2.3 Tipos de reacción

La transesterificación es una reacción orgánica en la cual se produce un intercambio o sustitución del grupo alquilo de un éster Baudino (2006). En esta se incluye las tres reacciones que se denomina alcoholólisis donde un éster interactúa con un alcohol para sustituir un grupo alquilo por el del alcohol, así también se encuentra la acidólisis en ella, un ácido

carboxílico reacciona con un éster para sustituir su grupo acilo por el del ácido y finalmente se encuentra la interesterificación donde existe un intercambio entre los grupos acilos y alquilo de dos ésteres diferentes. Por lo tanto, se puede definir a la transesterificación como la reacción mediante la cual, los triglicéridos (TG) presentes en los aceites vegetales y grasas animales se combina con un alcohol de bajo peso molecular (usualmente metanol) en presencia de un catalizador adecuado, para formar glicerina y una mezcla de ésteres grasos.

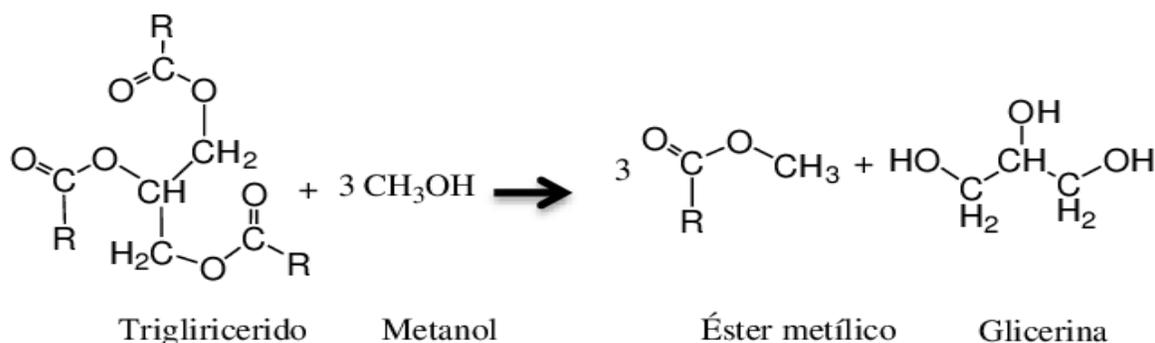


Figura 1. Reacción de transesterificación para la producción de biodiésel

2.3 Control y Optimización

2.3.1 Control del proceso

El controlador de algoritmo PID consiste en tres modos básicos: proporcional, integral y derivativo. Un control PID está basado en un modelo matemático riguroso de algún proceso lineal o lineal dentro de un rango y lee un valor de entrada o del sensor de entrada, aplica los algoritmos de control definidos y produce una salida específica como señal actuante o como entrada a un actuador (Lorandi y col., 2011) además, se utiliza ampliamente en el control de retroalimentación de procesos industriales.

En el controlador proporcional integral (PI), la acción integral elimina la desviación al mover la salida de forma proporcional a la desviación del punto de consigna (Perry, 2018). Aunque está disponible de manera exclusiva en controladores integrales, suele combinarse con la acción proporcional en un controlador PI. El número de variables manipuladas se denomina grados de libertad de control. Los grados de libertad de una columna de destilación

reactiva son esencialmente los mismos que los de una columna de destilación binaria convencional: tasa de destilado (D), tasa de fondos (B), relación de reflujo (R), energía del rehervidor (Q_r) y energía del condensador (Q_c). Tres de estas corrientes se deben utilizar para controlar el estado de la columna, dejando las otras dos corrientes para controlar el funcionamiento de la columna. En la estructura de control de dos temperaturas, los grados de libertad de control se asignan de la siguiente manera:

- Rendimiento determinado por ebullición con vapor
- Presión controlada por el servicio del condensador
- Nivel de base controlado por caudal de fondos
- Nivel del reflujo controlado por el caudal de destilado
- La relación de reflujo se mantiene midiendo el caudal de destilado y ajustando el caudal de reflujo.
- Temperatura en alguna bandeja de la columna controlada por una de las alimentaciones.

2.3.2 Optimización

El objetivo de la optimización es encontrar los valores de las variables en el proceso que produzcan el mejor valor del criterio de rendimiento. La optimización es una técnica destinada a obtener la mejor producción disponible para un sistema o proceso específico. Implica ajustar y perfeccionar variables dentro de ciertos límites para lograr los resultados más favorables. En diversas áreas, la optimización se centra en la modificación cuidadosa de factores con el objetivo de maximizar la eficiencia, minimizar costos u alcanzar otros objetivos específicos (Dutta y col., 2016). Esto nos lleva a realizar los siguientes pasos para un problema de optimización:

- **Variables de Decisión:** El primer componente crucial en la formulación de problemas de optimización implica la elección de variables independientes que caractericen de manera adecuada los posibles diseños y condiciones de funcionamiento del sistema. Estas variables, usualmente seleccionadas por su impacto significativo en la función objetivo.
- **Identificar y priorizar las variables de decisión clave.**

- **Función objetivo:** La función objetivo, también conocida como índice de rendimiento o criterio de elección, constituye el último componente esencial en un problema de optimización. Este elemento se utiliza para determinar los valores óptimos de las variables de decisión que resuelven el problema. La función objetivo guía la búsqueda de los mejores valores de las variables de decisión, ya sea minimizando o maximizando la función objetivo según el criterio seleccionado. Los criterios pueden ser de naturaleza económica, tecnológica o temporal, entre otros.
- **Restricciones:** Una vez determinadas las variables independientes, el siguiente paso implica establecer relaciones mediante ecuaciones o inecuaciones que describan las restricciones existentes entre estas variables. Estas restricciones surgen debido a limitaciones del sistema, leyes naturales o restricciones tecnológicas.

2.3.3. Descripción del método tradicional

El método tradicional para el diseño y operación de columnas de destilación reactiva suele involucrar una secuencia lineal de etapas: diseño, optimización y control. En este enfoque, el proceso comienza con el diseño estructural y operacional de la columna, donde se eligen configuraciones básicas como el número de platos, la ubicación del plato de alimentación, y las condiciones de operación iniciales basándose en parámetros estándar o literatura existente. Posteriormente, se optimizan estos parámetros una vez que la columna está en operación, ajustando los parámetros de diseño para mejorar el rendimiento del sistema. Finalmente, se implementa un sistema de control para mantener las condiciones optimizadas, adecuando continuamente las operaciones a fin de contrarrestar perturbaciones y garantizar la estabilidad del proceso.

Esta forma secuencial, tiene ciertas limitaciones. Al tratar el diseño, optimización y control como etapas separadas, puede haber una falta de integración que resulte ineficiente en el proceso, por ejemplo, las decisiones de diseño pueden no considerar completamente cómo influirán en las etapas posteriores, llevando a ajustes costosos y mayor tiempo de respuesta durante la optimización y control. Adicionalmente, la falta de sincronización entre las etapas puede limitar la flexibilidad operativa y la capacidad para adaptarse rápidamente a cambios en las condiciones del proceso o del mercado.

Por otro lado, el método integral propone abordar el diseño, optimización y control de manera simultánea, este enfoque reconoce que estos aspectos están relacionados y puede maximizar el rendimiento general del sistema cuando se consideran juntos desde el inicio. En un enfoque integral, las decisiones de diseño iniciales son informadas por consideraciones de control y optimización, permitiendo la selección de configuraciones que no sólo cumplan con las metas del diseño, sino que también faciliten una operación robusta y dinámica. La optimización y el control son dependientes uno del otro en este método, lo que significa que los parámetros de control y los objetivos de optimización se alinean para responder de manera continua y simultánea a las necesidades del proceso. Esto no solo aumenta la eficiencia energética y la eficiencia en la conversión de los reactivos en producto deseado, sino que también mejora la capacidad del sistema para manejar variaciones en las condiciones de entrada y demandas de salida.

CAPITULO 3

Metodología

En esta sección, se describen las herramientas para el diseño de la columna de destilación reactiva, así como el control y optimización de las condiciones de operación para maximizar la fracción mol de biodiésel en fondos. Se desarrolló un modelo matemático dinámico de la columna de destilación reactiva basado en balances de materia acoplados a la cinética de la reacción de transesterificación. Para cada plato se plantearon las ecuaciones diferenciales que describen cada zona de la columna, tomando en cuenta los flujos de líquido y vapor y la reacción química. Subsecuentemente, se llevó a cabo la implementación computacional del modelo en MATLAB, adecuando las funciones de balance para resolver el sistema de ecuaciones mediante la función *ode23tb*, basado en un método de Runge-Kutta de orden 2, 3. En la fase de optimización, se definieron variables de decisión continuas (relación de reflujo, relación de reflujo de rehervidor y condición térmica de alimentación) y discretas (número de etapas y posición del plato de alimentación). Se planteó una función objetivo multiobjetivo ponderada que maximiza la fracción molar de biodiésel en los fondos y minimiza el calor del rehervidor. Para las variables continuas se utilizó la función *fmincon* de MATLAB, mientras que las discretas mediante análisis de sensibilidad. Finalmente se diseñó e integró un controlador PI, donde se aplicaron reglas de sintonización de Skogestad para determinar las constantes proporcional e integral (K_p, K_i), y se calculó la Integral del Error al Cuadrado (ISE) para evaluar el desempeño dinámico.

3. 1. Columna de destilación reactiva

La columna de destilación reactiva físicamente consiste en un dispositivo cilíndrico vertical dividido en múltiples platos, numeradas de forma descendente desde la parte del domo hasta los fondos y está representada en la Figura 2:

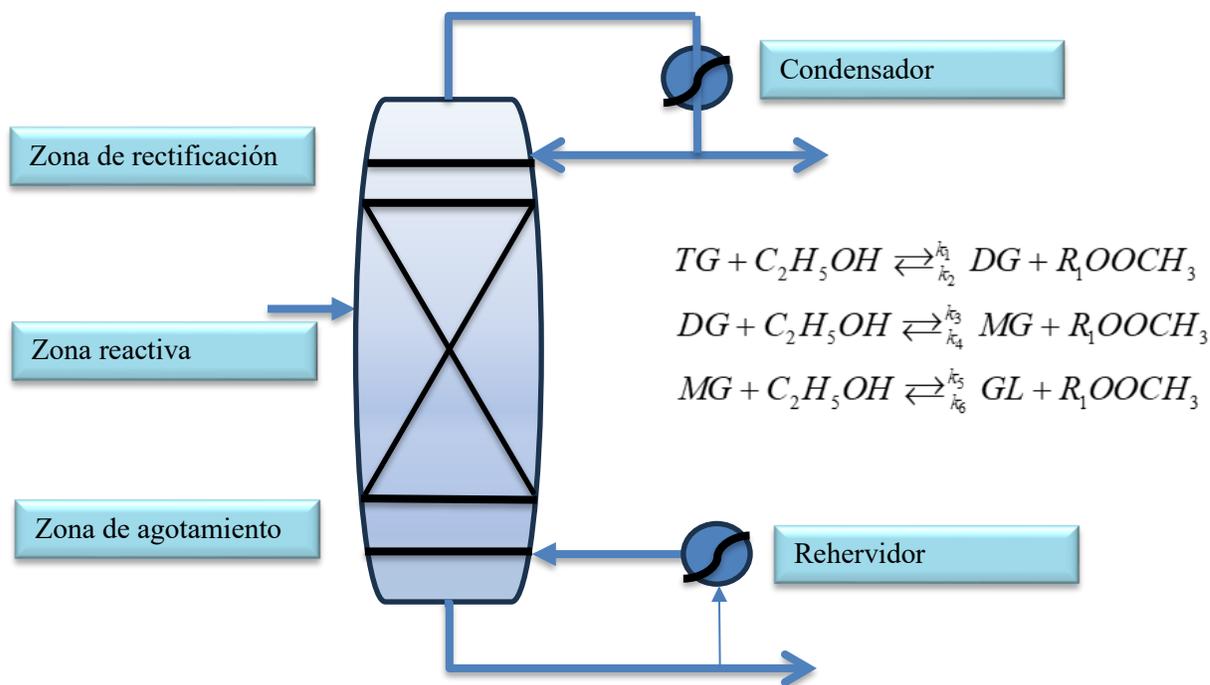


Figura 2. Columna de destilación reactiva

En el extremo superior se ubica el condensador, encargado de enfriar el vapor que asciende por la columna y condensarlo para devolver una parte del flujo líquido (reflujo) a la columna, mientras que otra parte se extrae como destilado. Debajo se encuentra la zona de rectificación, en la cual los componentes más volátiles ascienden, enriqueciendo la fase vapor gracias al contacto continuo con el líquido descendente. En las etapas centrales, se encuentra la zona reactiva, donde se introduce la alimentación y se promueve la reacción de transesterificación simultáneamente con la separación. A medida que los compuestos más pesados y los reactivos rezagados descienden, alcanzan la zona de agotamiento, donde los componentes menos volátiles se concentran antes de llegar al fondo. En estas tres zonas, cada una está compuestas por platos, que alcanzan un punto equilibrio entre fases. En la Figura 3 se representa la interacción de las fases, donde el líquido que llega desde el plato superior interactúa con el vapor ascendente del plato inferior, promoviendo la transferencia de componentes por medio del equilibrio líquido-vapor. Estos procesos dinámicos están influenciados por los flujos de entrada y salida, así como por las variaciones de temperatura y composición, y son importantes entenderlos para optimizar el desempeño de la columna de destilación reactiva.

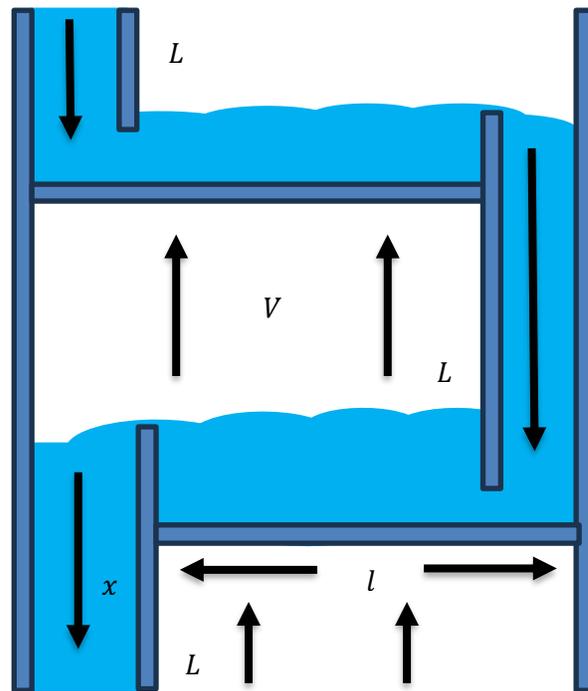


Figura 3. Representación del estado dinámico de cada uno de los platos en la columna de destilación reactiva

En la base de la columna yace el rehervidor, que suministra el calor indispensable para generar vapor ascendente. Este vapor alimenta las etapas superiores y mantiene la recirculación de fases, asegurando el equilibrio de temperatura y composición en todo el sistema.

3.2. Modelo matemático

Para realizar el modelado de la columna de destilación reactiva, se considera el planteamiento de los balances de materia, la descripción del equilibrio líquido-vapor que ocurre en cada etapa de la columna, así como el acoplamiento de la reacción de transesterificación en la zona reactiva. En la operación de la columna de destilación reactiva, se han considerado varias suposiciones que facilitan la modelación y el análisis del proceso, una de ellas es que no hay variaciones de flujo molar a lo largo de la columna, esta suposición simplifica los cálculos y el modelo matemático, ya que la reacción química no altera la cantidad total de moles del sistema. De esta manera, se permite enfocar el análisis en el equilibrio entre las fases líquida y vapor sin la necesidad de ajustar constantemente la masa total. Además, en todo momento las fases líquida y vapor se encuentran en equilibrio en cada plato de la columna, esto permite

utilizar relaciones de equilibrio, como las ecuaciones de Raoult o de Antoine, para calcular la concentración de los componentes en cada plato. Otra consideración importante es que los cambios de temperatura de la columna se pueden estimar a partir del equilibrio de fases, bajo la consideración de operación adiabática. Asimismo, se considera operación a presión constante a lo largo de la columna; se considera las reacciones en una sola dirección, esto implica que no se consideran efectos adicionales como inhibiciones o efectos de concentración complejos además que la reacción solo ocurre en la fase líquida.

3.1.1. Balances de materia

El balance de materia se plantea a partir de las leyes de conservación de materia. Para el caso de la columna de destilación se consideran los balances de la zona reactiva, zona de agotamiento y zona de rectificación, así como los equipos auxiliares como el condensador y el rehervidor. Los balances correspondientes son como siguen:

Condensador:

$$\frac{d(x_D M_D)}{dt} = V_2 y_2 - (D_1 + L_1) x_D \quad (1)$$

Zona de rectificación:

$$\frac{d(x_j M_j)}{dt} = V_{j+1} y_{j+1} - L_j x_j + L_{j-1} x_{j-1} - V_j y_j \quad (2)$$

Zona de alimentación:

$$\frac{d(x_{N_A} M_{N_A})}{dt} = V_{N_A+1} y_{N_A+1} - L_{N_A} x_{N_A} + L_{N_A-1} x_{N_A-1} + F_A x_{F_A} - V_{N_A} y_{N_A} \quad (3)$$

Zona de agotamiento:

$$\frac{d(x_j M_j)}{dt} = V_{j+1} y_{j+1} - L_j x_j + L_{j-1} x_{j-1} - V_j y_j \quad (4)$$

Rehervidor

$$\frac{d(x_B M_B)}{dt} = L_{N-1} x_{N-1} - V_N y_N - B x_B \quad (5)$$

donde D es el flujo de destilado, V es el flujo de vapor, L es el flujo líquido, B es el flujo de fondos, M es la masa de cada plato, F es el flujo de entrada, y es la fracción de vapor, x es la fracción líquido, N es el número de plato, N_A es el plato de alimentación.

3.2.2. Modelo cinético de la zona reactiva

El comportamiento de la reacción de transesterificación, basándose en los parámetros cinéticos encontrados por Simasatitkul y col., (2011), los valores de las constantes de velocidad y las energías de activación de la reacción se presentan en la Tabla 1, en la forma de la ecuación de Arrhenius que se muestra en la ecuación 6:

$$k_i = A_i \cdot \exp\left(\frac{E_{a_i}}{RT}\right) \quad (6)$$

Tabla 1. Parámetros cinéticos de la reacción de transesterificación

<i>Constante</i>	<i>A(m³kmol⁻¹h⁻¹)</i>	<i>E_a (KJ mol⁻¹)</i>
<i>k₁</i>	1.40 · 10 ¹¹	54.999
<i>k₂</i>	2.0808 · 10 ⁹	41.555
<i>k₃</i>	2.1262 · 10 ¹⁶	83.094
<i>k₄</i>	3.5597 · 10 ¹³	61.250
<i>k₅</i>	1.9206 · 10 ⁷	26.865
<i>k₆</i>	7.5600 · 10 ⁷	40.116

3.1.3. Equilibrio líquido-vapor

El modelo termodinámico que se utilizó fue un modelo ideal, basado en la ley de Raoult, que describe el comportamiento liquido-vapor en el equilibrio (Smith y col., 2007) y se aplica solo a presiones bajas a moderadas. La expresión matemática que nos describe el comportamiento del equilibrio liquido vapor, y que proporciona una expresión cuantitativa de la ley de Raoult es:

$$P = x_i P_i^* + x_j P_j^* \quad (7)$$

$$y_i = \frac{x_i P_i^*}{P} \quad (8)$$

donde x_i es una fracción mol de fase líquida, y_i es una fracción mol de la fase vapor, y P_i^* es la presión de vapor de las especies puras i a la temperatura del sistema. Este modelo

proporciona una descripción realista del comportamiento efectivo de un sistema. Esta ecuación puede extenderse para mezclas multicomponentes.

Las presiones de vapor, se utilizó una ecuación de Antoine extendida que está representada por la siguiente ecuación:

$$P^* = F \cdot \exp \left[A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln(T) + D \cdot T^E \right] \quad (9)$$

donde A , B , C , D , y E son las constantes de Antoine; T y P son temperatura absoluta y presión de vapor; estos parámetros utilizados para las presiones de vapor del ELV fueron tomados de Houge (2013) mostrados en la Tabla 2:

Tabla 2. Constantes de Antoine de las presiones de vapor de cada uno de los componentes

	Metanol	Triglicérido	Diglicérido	Monoglicérido	Glicerina	Biodiésel
A	59.837	505.21	18.155	145.25	169.21	107.53
B	-6282.9	-94126	-7165.4	-21154	-16893	-15604
C	-6.3787	-59.788	-0.84781	-16.874	-21.813	-12.214
D	$4.6175e^{-6}$	$5.8959e^{-19}$	$3.1834e^{-20}$	$1.7403e^{-18}$	$1.1407e^{-5}$	$1.800e^{-18}$
E	2	6	6	6	2	6
F	$-9.869e^{-3}$	$-9.869e^{-3}$	$-9.869e^{-3}$	$-9.869e^{-3}$	$-9.869e^{-3}$	$-9.869e^{-3}$

3.3. Implementación de controlador tipo PI

3.3.1. Controlador PI y funciones de respuesta

El uso de controladores PI en columnas de destilación reactiva ha sido ampliamente adoptado, debido a su simplicidad y efectividad para mantener variables clave como la pureza del producto y la conversión dentro de los rangos deseados. Estos controladores son especialmente adecuados para procesos con dinámicas lentas y múltiples interacciones, como es el caso de la destilación reactiva, donde mantener el equilibrio entre reacción y separación es importante. Además, su implementación resulta sencilla tanto en simulaciones como en

sistemas industriales en tiempo real. Por ejemplo, Roat y col., (1986) propusieron el uso de controladores PI para regular la temperatura en platos específicos, ajustando las corrientes de alimentación como variable manipulada, lo que permitió una regulación eficaz sin requerir esquemas de control avanzados. Asimismo, cuando se emplean métodos de sintonización como el de Tyreus-Luyben, los controladores PI logran un desempeño satisfactorio frente a perturbaciones y cambios en la carga del sistema, sin comprometer la estabilidad ni aumentar significativamente la complejidad del control (Sharman y col., 2010). Esto permitirá integrar el control directamente con el diseño y la optimización de la columna, enfocándose en la interacción entre los parámetros operativos y las restricciones del proceso para maximizar la eficiencia sin necesidad de un esquema de control excesivamente complejo. El controlador tipo PI está descrito por la ecuación 10

$$u(t) = u_{nom} + K_p e(t) + K_i \int_0^t e(t) dt \quad (10)$$

donde K_p es la variable proporcional, K_i es la variable integral.

3.2.2. Sintonizado del controlador

La eficiencia de un controlador depende tanto de su sintonización como de su diseño, la sintonización debe ser aplicada por el usuario para ajustar el controlador al proceso de la columna de destilación reactiva. En la implementación del controlador PI, se utilizó las reglas de sintonizado de Skogestad y col. (2013) donde:

- La función de transferencia de primer orden

$$g(s) = k \frac{e^{-\theta s}}{(\tau_i s + 1)} \quad (11)$$

- La ganancia del controlador

$$K_c = \frac{1}{k} \frac{\tau_i}{\tau_c + \theta} \quad (12)$$

- El tiempo integral

$$\tau_I = \min\{\tau_i, 4(\tau_c + \theta)\} \quad (13)$$

3.4. Optimización de la columna de destilación reactiva

En la columna de destilación reactiva, existen diferentes tipos de variables a optimizar, estas se pueden dividir en dos categorías: discretas y continuas. Entre las variables discretas se encuentran el número de platos y el plato de alimentación; el número de platos representa la cantidad total de etapas de equilibrio dentro de la columna, y está directamente relacionado con la eficiencia de separación y la conversión de los reactivos, un mayor número de platos puede mejorar la pureza del producto, pero también incrementa el costo. Por su parte, el plato de alimentación indica la posición en la que se introduce la corriente de alimentación dentro de la columna, lo cual afecta el equilibrio entre la reacción y la separación en las distintas zonas de la columna.

Las variables continuas que se tomaron en cuenta fueron la relación de reflujo, la relación de reflujo de fondos y la condición térmica de la alimentación; la relación de reflujo se define como la proporción entre el líquido que regresa desde el condensador a la columna y el producto extraído en el domo, su ajuste influye en la eficiencia de separación en la zona de rectificación. La relación de reflujo de fondos, en cambio, corresponde a la proporción entre el líquido que retorna desde el rehervidor y el producto que se retira por los fondos, afectando la calidad del producto final y el avance de la reacción en la parte inferior de la columna y finalmente la condición térmica de la alimentación se refiere al estado en el que se introduce la alimentación (líquido o vapor). Es importante tomar en cuenta estas variables de diseño ya que el objetivo principal es alcanzar un equilibrio adecuado entre la obtención de una mayor pureza del biodiésel y una menor carga térmica en el rehervidor.

Una vez definidas las variables que tienen un mayor efecto en el proceso de la columna de destilación reactiva, la optimización se llevó a cabo en etapas, en primer lugar, se realizó la optimización de las variables de diseño, con el objetivo de identificar los parámetros de decisión que maximizan la producción de biodiésel y minimizan el consumo energético. Posteriormente, sobre las condiciones óptimas determinadas, se implementó un sistema de control que permitiera mantener el proceso en estado estacionario frente a perturbaciones. Se utilizó para la optimización el comando “*fmincon*” en Matlab para las

variables continuas y para las variables discretas se realizó simulaciones haciendo las variaciones entre estas, hasta obtener los valores correspondientes de la fracción de biodiésel en fondos de cada una de las combinaciones.

Finalmente, para realizar la optimización de manera integral se abordó mediante una estrategia dividida en dos etapas, la primera una multiobjetivo en la cual se tomó en cuenta la maximización de la fracción de fondos de biodiésel y la minimización del consumo de energía en el rehervidor. En la formulación de la función objetivo, se asignó un peso de ponderación del 75 % a la fracción molar de biodiésel en los fondos y un 25 % al calor suministrado al rehervidor, esta elección se basó en un análisis de sensibilidad realizado previamente, en el cual se probaron distintos valores del parámetro α , que representa el peso asignado a cada término en la función objetivo. Durante estas pruebas, se observó que el calor del rehervidor presentaba variaciones menores (alrededor del 5 %) al modificar su ponderación entre 25 % y 50 %, en contraste, la fracción molar de biodiésel mostró una mayor sensibilidad a los cambios de α , variando más del 10% conforme aumentaba o disminuía su peso en la función objetivo. Por esta razón, se decidió priorizar este parámetro en la optimización, ya que su comportamiento respondía más directamente a la asignación de peso, lo cual permitía una mayor capacidad de ajuste del sistema hacia el objetivo deseado. Por lo tanto, se plantea la función objetivo de la siguiente manera:

$$\min f(N, Na, q, R, Rb) = \alpha_1 \cdot Q(N, Na, Q, R, Rb) - \alpha_2 \cdot x_{BD}(N, Na, Q, R, Rb) \quad (14)$$

Sujeto a los balances de materia:

$$\frac{d(x_j M_j)}{dt} = V_{j+1} y_{j+1} - L_j x_j + L_{j-1} x_{j-1} - V_j y_j \quad (15)$$

$$\frac{d(x_{N_A} M_{N_A})}{dt} = V_{N_A+1} y_{N_A+1} - L_{N_A} x_{N_A} + L_{N_A-1} x_{N_A-1} + F_A x_{F_A} - V_{N_A} y_{N_A} \quad (16)$$

$$\frac{d(x_j M_j)}{dt} = V_{j+1} y_{j+1} - L_j x_j + L_{j-1} x_{j-1} - V_j y_j \quad (17)$$

$$\frac{d(x_B M_B)}{dt} = L_{N-1} x_{N-1} - V_N y_N - B x_B \quad (18)$$

donde Q_R es el calor del rehervidor, L_N el líquido que entra al rehervido y proviene del último plato de la columna de destilación, L_S el líquido de salida del rehervidor, V_R el vapor que regresa al rehervidor y finalmente H la entalpía correspondiente a cada una de las corrientes.

Con las siguientes restricciones:

$$4 < N < 20 \quad (19)$$

$$2 < Na < 18 \quad (20)$$

$$0.55 < x_{BD} < 0.75 \quad (21)$$

$$0.5 < q < 1 \quad (22)$$

$$1.5 < R < 3.5 \quad (23)$$

$$1 < Rb < 3 \quad (24)$$

Y la segunda consistió en diseñar una función objetivo que optimice las constantes de controlador PI (K_p y K_i). Con base en estos parámetros, se procedió a realizar la optimización del sistema a lazo cerrado, es decir, con el sistema de control activo. Esta secuencia permite que el controlador opere bajo las condiciones más favorables posibles, contribuyendo a una mejor evaluación al hallazgo de configuraciones más eficientes que las obtenidas mediante el enfoque tradicional.

Por lo tanto, se buscó la minimización del error acumulado del controlador optimizando las variables la parte proporcional (K_p) responde a la magnitud del error actual, mientras que la parte integral (K_i) corrige los errores acumulados a lo largo del tiempo. Esta combinación permite al controlador no solo reaccionar rápidamente a las perturbaciones, sino también eliminar errores residuales en el estado estacionario. Optimizar estos parámetros implica encontrar los valores ideales de K_p y K_i que permitan al sistema alcanzar el equilibrio de manera rápida y estable. representada en la función objetivo descrita en la ecuación 26

$$\min f(K_p, K_i) = \int_{t_i}^{t_f} \left(\sum (x_{BD} - x_{ref})^2 \right) dt \quad (25)$$

Sujeto a los balances de materia:

$$(26)$$

$$\frac{d(x_j M_j)}{dt} = V_{j+1} y_{j+1} - L_j x_j + L_{j-1} x_{j-1} - V_j y_j \quad (27)$$

$$\frac{d(x_{N_A} M_{N_A})}{dt} = V_{N_A+1} y_{N_A+1} - L_{N_A} x_{N_A} + L_{N_A-1} x_{N_A-1} + F_A x_{F_A} - V_{N_A} y_{N_A} \quad (28)$$

$$\frac{d(x_j M_j)}{dt} = V_{j+1} y_{j+1} - L_j x_j + L_{j-1} x_{j-1} - V_j y_j \quad (29)$$

$$\frac{d(x_B M_B)}{dt} = L_{N-1} x_{N-1} - V_N y_N - B x_B$$

Con las siguientes restricciones:

$$\frac{K_p}{2} < K_p < K_p \cdot 2 \quad (30)$$

$$\frac{K_i}{2} < K_i < K_i \cdot 2 \quad (31)$$

Finalmente, se plantea la comparación de tres aspectos: las concentraciones de biodiésel en los fondos, el consumo energético del rehervidor y el desempeño dinámico del sistema de control. Esta comparación permitirá evaluar si la incorporación simultánea del diseño, control y optimización, como se propone en el enfoque integral, ofrece ventajas significativas frente al método tradicional. Para ello, se seguirá una secuencia estructurada de análisis. En primer lugar, se aplicará el enfoque tradicional, en el cual el diseño de la columna se establece de forma independiente, seguido de una optimización basada en variables operativas, sin tener en cuenta las condiciones del sistema de control. Posteriormente, una vez definido este diseño, se implementa el sistema de control tipo PI, el cual será sintonizado de forma convencional mediante la optimización independiente de los parámetros K_p y K_i . Esta metodología reproduce el tratamiento secuencial clásico utilizado en la ingeniería de procesos. En la segunda etapa, se aplicará la metodología integral, la cual considera la optimización de diseño y operación de la columna de manera simultánea con la presencia activa del controlador. Para ello, primero se sintoniza el controlador a una referencia establecida, y posteriormente se optimiza el sistema completo bajo lazo cerrado, permitiendo que el diseño final esté condicionado por las mejores condiciones de operación con control. Esto permitirá cuantificar con precisión los beneficios de integrar el control desde la etapa de diseño, no solo en términos de eficiencia energética y pureza del producto,

sino también en la respuesta dinámica del sistema de control. Los resultados obtenidos servirán para validar si la estrategia integral representa una mejora frente a los métodos tradicionales y si su implementación resulta ventajosa para sistemas complejos como la columna de destilación reactiva para la producción de biodiésel.

CAPITULO 4

Resultados y discusiones.

4.1. Simulación del modelo dinámico

El diseño de una columna de destilación reactiva es una etapa primordial en la producción de biodiésel, el diseño adecuado influye directamente en las fases de control y optimización. Estas variables afectan la conversión de reactivos, así como la cantidad de energía necesaria para producir biodiésel. Un diseño adecuado, debe equilibrar estas variables para maximizar la fracción molar de biodiésel en fondos, mientras se minimiza la cantidad de energía necesaria en el producida en el rehervidor. El diseño de una columna de destilación reactiva requiere de un enfoque de análisis de sensibilidad y la optimización multiobjetivo que considere simultáneamente criterios de conversión, eficiencia energética, y viabilidad operativa. En este contexto, la ausencia de métodos de diseño cerrados no representa una limitante, sino una oportunidad para aplicar estrategias integradas que permitan configurar sistemas eficientes y adaptables a las necesidades del proceso.

4.1.1 Validación de la columna de destilación reactiva

En la Figura 3 se presenta una comparación entre los resultados obtenidos a partir de la simulación de una columna de destilación reactiva para la producción de biodiésel en Aspen Plus y aquellos derivados de un modelo matemático implementado en MATLAB. El cálculo del error porcentual de cada uno de los perfiles obtenidos, entre los resultados obtenidos en Aspen Plus y el modelo matemático implementado en MATLAB para los distintos compuestos involucrados en la reacción de transesterificación reflejan una alta precisión del modelo desarrollado. En particular, se observaron errores menores al 4% para los componentes que producen la reacción, como el metanol (2.95%) y el triglicérido (3.7%),

mientras que, para los compuestos producidos en la reacción los errores son del orden de magnitudes significativamente pequeñas de 10^{-5} hasta 10^{-9} .

La comparación se llevó a cabo considerando variables del proceso como perfiles de composición, temperatura y flujo másico a lo largo de la columna, así como parámetros globales de desempeño. La concordancia entre ambas herramientas numéricas permite no solo confirmar la validez del modelo propuesto, sino también proporcionar una base sólida para futuras etapas de optimización y control avanzado del sistema.

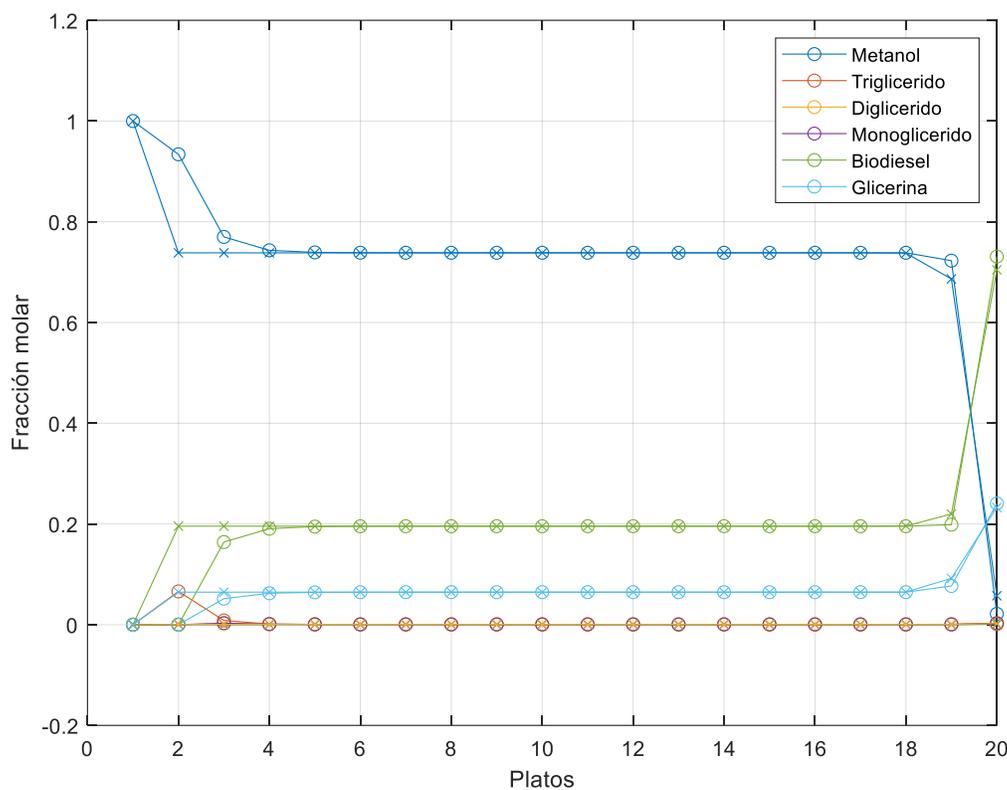


Figura 4. Comparación entre los resultados obtenidos con Aspen Plus y Matlab (o Aspen Plus, x Matlab)

Estos resultados indican que el modelo implementado en MATLAB reproduce de manera satisfactoria el comportamiento del sistema simulado en Aspen Plus. La cercanía entre los valores obtenidos en ambas plataformas corrobora no solo la formulación matemática y el modelo termodinámico adoptado, sino también la implementación numérica de los balances de materia. En consecuencia, el modelo en MATLAB puede considerarse una

herramienta confiable para tareas de análisis, optimización y diseño de control en procesos de producción de biodiésel mediante destilación reactiva.

4.1.2 Parámetros de diseño de la columna de destilación reactiva

Para determinar los rangos dentro de los cuales se optimizarán las variables, se llevó a cabo un análisis de sensibilidad para cada uno de los parámetros de diseño. Este análisis mostró que la relación de reflujo del rehervidor presenta mayor influencia en comparación con la relación de reflujo del condensador. Este es consistente con los estudios de Goncalves y col., (2020), quien menciona que R (relación de reflujo) incide pobremente sobre conversión de biodiésel en la columna de destilación, en comparación con otros parámetros, como la temperatura, por ejemplo.

Por lo tanto, se decidió mantener la variación de la relación de reflujo solo dentro de los valores promedio indicados en la literatura, que van desde 1.5 (por encima del reflujo mínimo requerido en el sistema) hasta 3.5, mientras que la condición térmica de la alimentación se estableció que variaría entre 0.5 y 1.0. Esto se debe a que, si la alimentación entra como vapor sobrecalentado, requerirá más energía de la que se podría ahorrar mediante la minimización del rehervidor. En la Tabla 3 se muestran los parámetros usados para la simulación, se consideraron 12 etapas y la composición de alimentación, se estableció una relación de 6:1, es decir, seis partes de metanol por una de triglicéridos. Para la relación con la relación de reflujo, se eligió un valor promedio de 3 y la relación de reflujo de 1.5 permite una operación equilibrada, lo que la hace compatible con un amplio rango de configuraciones estructurales en la columna de destilación reactiva. En particular, esta relación de reflujo ha demostrado ser adecuada para explorar combinaciones del número de etapas entre 10 y 22 y ubicaciones del plato de alimentación entre 2 y 1, esto logra una recirculación suficiente de material hacia el rehervidor que favorece la conversión de los reactivos

Tabla 3. Configuración inicial del diseño basado en la literatura

Parámetros	Valor
Número de platos	12
Flujo de Alimentación	$7 \frac{mol}{s}$

Composición de alimentación	$x_{TG} = 1, x_{Me} = 6$
Relación de reflujo de fondos	1.5
Relación de Reflujo	3
Presión de la columna	1.013 bar
Calor del rehedidor	16781 cal/s

En la Figura 5 se observa la simulación numérica en estado dinámico de las fracciones molares en los fondos, donde al inicio del proceso, se observa un cambio pronunciado en la composición, es decir, la fracción molar de biodiésel aumenta rápidamente hasta alcanzar un valor pico cercano a 0.8, lo que indica una formación eficiente y veloz del producto deseado justo en los primeros minutos.

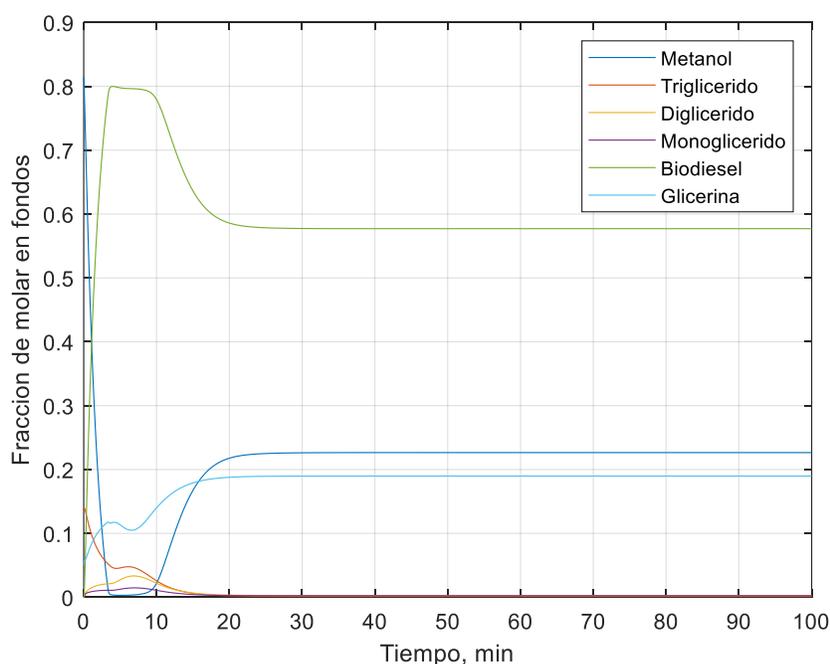


Figura 5. Simulación dinámica de la columna de destilación reactiva para la producción de biodiésel

Paralelamente, la fracción molar de triglicérido, que es el reactivo principal, disminuye de forma abrupta, lo que evidencia que la reacción de transesterificación ocurre de manera intensa en las etapas iniciales. Por su parte, el metanol, utilizado como reactivo, muestra una fuerte caída inicial en su fracción molar, pero una vez que se estabiliza el sistema, mantiene un valor constante, lo cual es característico en este tipo de procesos donde

parte del metanol permanece en el fondo. La fracción molar de glicerina aumenta paulatinamente en los primeros minutos y se estabiliza alrededor de 0.22, indicando una buena conversión de triglicéridos a biodiésel y glicerina. A partir de los 25 minutos, el sistema alcanza un régimen estacionario donde la composición de los fondos se mantiene constante: el biodiésel se estabiliza en el valor de 0.58, seguido de glicerina 0.22 y metanol 0.18, mientras que tanto los triglicéridos como los intermediarios mantienen fracciones molar cercanas a 0, lo que implica una conversión prácticamente total bajo las condiciones operativas simuladas.

Por lo tanto, la optimización se centrará, por ende, en dos aspectos clave: maximizar la fracción molar de biodiésel en los productos de fondos y garantizan que el equipo necesita una menor cantidad de energía en el rehervidor. Este enfoque integral permitirá mejorar no solo la eficiencia del proceso, sino también asegurar que la producción pueda ser la máxima alcanzada dentro de los límites de la naturaleza de la reacción.

4.2. Optimización

4.2.1. Optimización multiobjetivo de la columna

La optimización muestra que se requieren 10 etapas, es decir 2 menos que lo que se tenía en el primer diseño de la columna de destilación reactiva, además que la fracción mol de biodiésel obtenida fue de 0.6920, representando un aumento del 19.31% y manteniendo el plato de alimentación en el plato 2. Además, se encontró un patrón en que la diferencia entre el número de platos y el plato de alimentación tiene que ser 8 para encontrar la máxima conversión posible al combinar estas dos variables, ya que teniendo un menor número de platos la fracción molar de biodiésel en fondos va disminuyendo y si tenemos más platos esta fracción molar se mantiene constante.

4.2.2. Resultados de la optimización

Los resultados obtenidos antes y después de la optimización muestran cambios considerables en los parámetros operativos de la columna de destilación reactiva, los cuales responden al objetivo de maximizar la producción de biodiésel en la corriente de fondos y minimizar la energía requerida por el rehervidor, estos se muestran en la Tabla 4:

Tabla 4. Parámetros de diseño obtenidos después de la optimización

Parámetros de diseño	Sin optimizar	Optimizado
R	3	2.2405
Rb	1.5	1.6252
Q	1	0.7482
x_{BD}	0.58	0.6772
Q	16781	$4.0063 \cdot 10^4$

Inicialmente, se utilizó una relación de reflujo del rehervidor de 1.5 y una relación de reflujo superior de 3, con una condición térmica de alimentación igual a 1 (alimentación saturada líquida) y un requerimiento energético de 16,781 cal/s. Tras la optimización, la relación de reflujo del rehervidor aumentó a 1.6252 cal/s, mientras que la relación de reflujo superior disminuyó a 2.2405. A pesar del incremento en el calor suministrado al rehervidor (33,438 cal/s), estos ajustes condujeron a una mejora en la fracción molar de biodiésel en los fondos, dando como resultado un aumento de valor agregado al biodiésel. El aumento en la relación de reflujo del rehervidor implica una mayor recirculación de líquido desde el fondo hacia las etapas inferiores de la columna, lo que favorece el contacto entre los reactivos residuales y mejora la conversión hacia biodiésel, especialmente en presencia de especies intermedias como monoglicéridos y diglicéridos. Este fenómeno también puede incrementar la pureza del producto, al permitir un mejor arrastre de impurezas hacia la cabeza de la columna.

Por otro lado, la disminución en la relación de reflujo superior, de 3 a 1.6252, implica una menor cantidad de líquido retornado desde la parte superior de la columna hacia las etapas superiores. En el contexto de la destilación reactiva para la producción de biodiésel, esto genera un cambio en la distribución interna de fases que puede beneficiar la conversión química. Una menor relación de reflujo reduce la saturación líquida en la zona de rectificación, permitiendo un mayor ascenso de vapor sin arrastre excesivo de líquido. Esta condición puede facilitar la separación de subproductos más volátiles y reducir la dilución de reactivos en la fase líquida, lo que favorece el desplazamiento del equilibrio químico hacia

la formación de biodiésel en las etapas inferiores. La reducción en la condición térmica de alimentación (de 1 a 0.7485) indica que se ha ajustado el estado de entrada para que el sistema absorba parte del calor de la alimentación en forma de entalpía de vaporización, lo cual puede tener un efecto favorable en la integración energética global del proceso.

Estos cambios muestran que la estrategia óptima para maximizar biodiésel en los fondos implica un mayor enfoque energético en la zona de reacción y una reducción del reflujo superior que evita pérdidas innecesarias de energía, logrando así una operación más eficiente a pesar del aumento en el consumo de calor en el rehervidor.

4.3. Control

4.3.1. Implementación de controlador PI

Para el cálculo de la ganancia de respuesta se consideró únicamente los parámetros q , R y Rb , a las que se introdujeron cambios en escalón de 20%, los cuales se muestran en la Tabla 5. Se observa que el parámetro q es quien muestra una mayor ganancia con un tiempo de respuesta aceptable, por lo que se decide usar esta variable como variable de control.

Tabla 5. Valores obtenidos del sintonizado

Perturbación	Ganancia	Tiempo de respuesta
-20% R	-0.0899	0.7027
-20% Rb	0.1507	0.6463
-20% q	-0.2120	0.6973

En la Figura 6, se observa la respuesta dinámica del sistema controlado, implementando el controlador a los 70 min, notándose oscilaciones pronunciadas tanto en el biodiésel como en la glicerina. Esto indica que el sistema estaba ajustándose a las condiciones de operación, con el controlador intentando estabilizar las concentraciones para alcanzar los valores del *setpoint* indicados de 0.67 en la fracción de biodiésel de fondos. Las oscilaciones disminuyen gradualmente, mostrando cómo el controlador va mejorando la estabilidad del proceso. A partir de los 200 minutos aproximadamente, las fracciones molares de los componentes comienzan a estabilizarse, sin embargo, al dejar más tiempo trabajando el sistema de control y agregando perturbaciones a este, se observó que el controlador tardaba

alrededor de 50 minutos en llegar a la fracción de biodiésel deseada, por lo tanto, se buscó la optimización del controlador, para llegar a la referencia establecida en el menor tiempo posible.

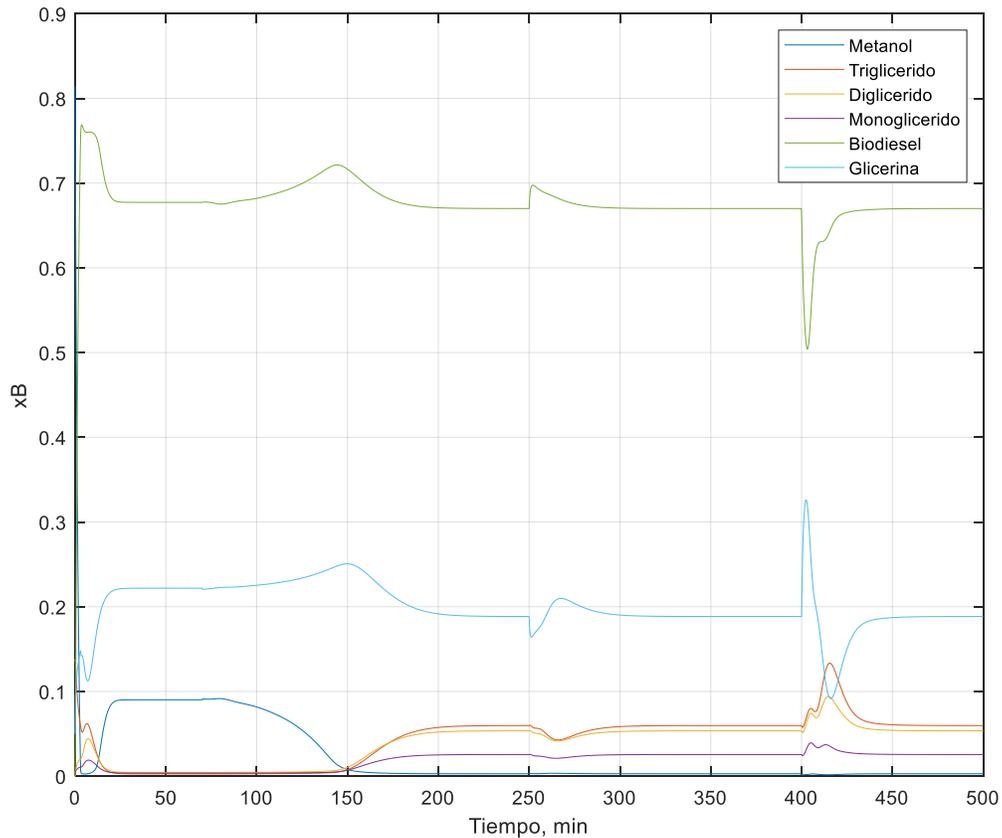


Figura 6. Sistema de control antes de la optimización

4.3.2. Optimización de parámetros del controlador

Una vez establecida la función objetivo se encontró que los parámetros óptimos para las variables K_p y K_i son -4.2759 y 2.7321 respectivamente. La Figura 7 representa un análisis de resultados ante perturbaciones, comparando el comportamiento del sistema de control optimizado (línea punteada) contra el sin optimizar (línea completa).

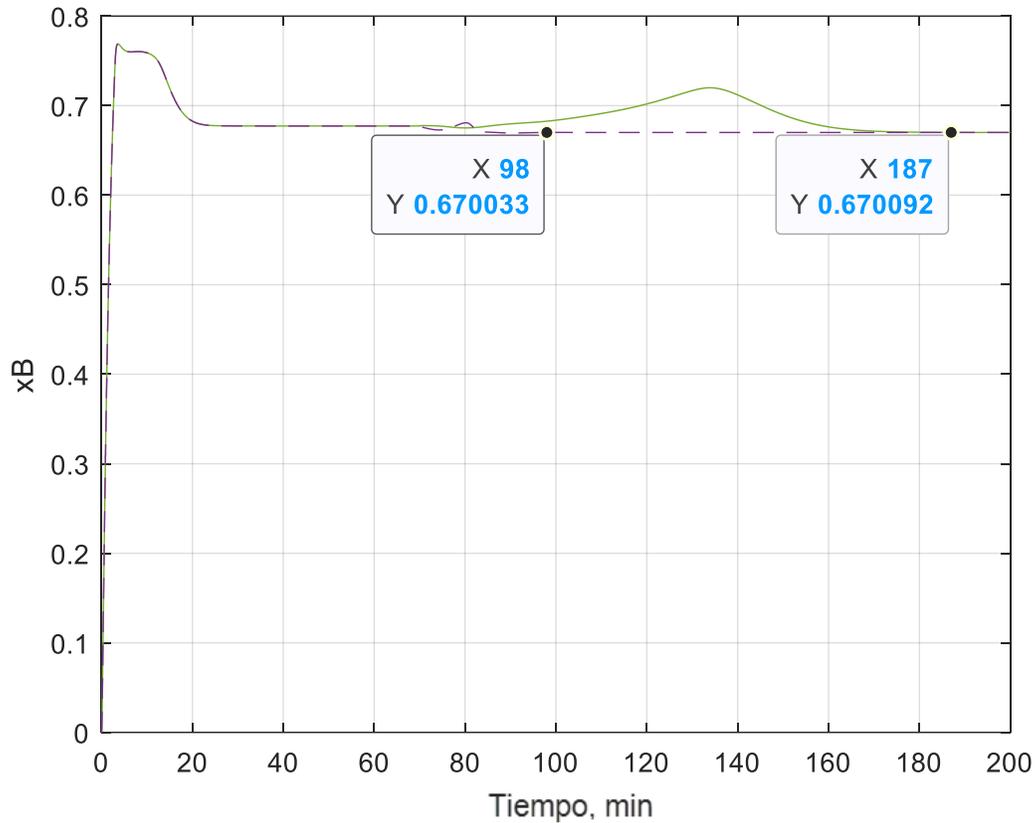


Figura 7. Comparación del desempeño del controlador con y sin optimización.

Inicialmente, el sistema de control es activado a los 70 min, el controlador optimizado tarda 28 minutos en alcanzar el *setpoint*, mientras que el sistema sin optimizar tarda 117 minutos en llegar a la referencia, es decir 4.17 veces más que el optimizado. Este resultado pone en evidencia la importancia de optimizar los parámetros la constante proporcional (K_p) e integral (K_i), ya que una correcta sintonización permite mejorar significativamente la velocidad de respuesta del sistema, reducir el error transitorio y asegurar un control más preciso y eficiente del proceso.

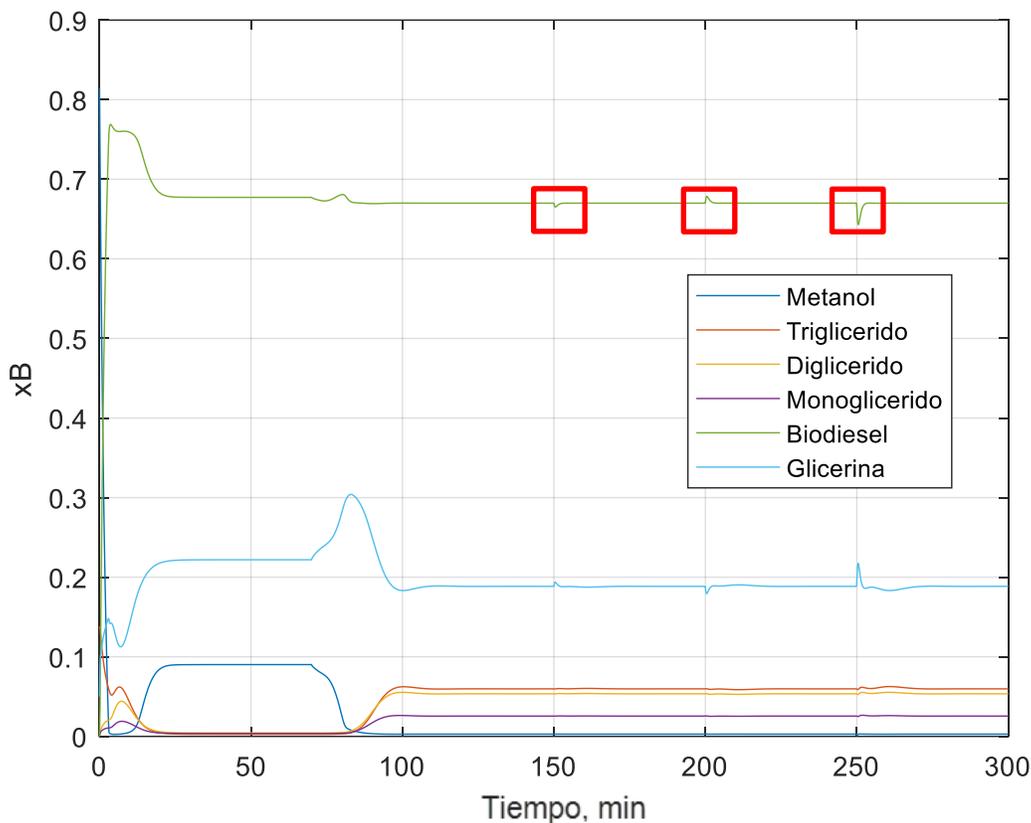


Figura 8. Desempeño del controlador a través del tiempo

A lo largo de la Figura 8, se confirma que el ajuste optimizado alcanza una estabilidad más rápida, con un menor error acumulado entre la referencia a la que manda el controlador y una concentración más precisa, destacando la eficacia de la optimización en mejorar la respuesta del sistema ante perturbaciones a lo largo del tiempo.

4.4. Comparación del método tradicional con el método integral

4.4.1. Parámetros obtenidos del método integral

Se encontraron variaciones en las diferentes variables de diseño, empezando con la relación de reflujo de 2.2405, esto nos indica un flujo moderado de líquido retornado desde el condensador, representando una mejor separación en la parte superior de la columna; una relación de reflujo promedio a lo encontrado en la literatura permite mantener la calidad del destilado sin generar sobrecargas en la columna. El requerimiento energético de 33,679 cal/s

en el rehervidor refleja el balance necesario para mantener el perfil de vaporización y las condiciones adecuadas de reacción en la columna.

Aunque esta cantidad representa un aumento respecto al estado inicial, el incremento está justificado por el mayor rendimiento del sistema en términos de conversión y selectividad. Finalmente, una condición térmica de alimentación de 0.7485 implica que la corriente de alimentación entra parcialmente subenfriada, lo cual permite absorber parte del calor del sistema, estabilizando la zona de reacción y mejorando la integración energética. Esta condición también ayuda a evitar perturbaciones térmicas bruscas que puedan afectar el equilibrio reacción-separación.

4.4.1.3 Evaluación de energía obtenida y fracción de biodiésel de fondos

La Tabla 6 presenta de forma resumida los resultados obtenidos para los parámetros de diseño bajo tres enfoques distintos: sin optimización, optimización tradicional y enfoque integral. Esta comparación permite analizar el efecto de incorporar gradualmente el diseño, la optimización y el control, así como de manera integral en una columna de destilación reactiva para la producción de biodiésel.

Tabla 6. Parámetros de diseño obtenidos a partir de la optimización y control integrado

Parámetros de diseño	Sin optimizar	Optimizado	Integral
R	3	2.2405	1.9378
Rb	1.5	1.6252	1.438
q	1	0.7482	0.7211
x_{BD}	0.58	0.6772	0.6789
$Q \left(\frac{cal}{s} \right)$	16781	$4.0063 \cdot 10^4$	$3.3679 \cdot 10^4$

A partir del caso base se buscó encontrar las condiciones óptimas de operación en la columna de destilación reactiva, con el objetivo principal de maximizar la fracción molar de biodiésel en los fondos, minimizando simultáneamente el requerimiento energético del rehervidor. Al aplicar el método integral, se observaron mejoras en comparación al método tradicional, la relación de reflujo disminuyó a 1.9378 (una reducción del 13.5%), lo que físicamente implica

que se necesita una menor cantidad de líquido recirculando desde la parte superior de la columna, reduciendo el trabajo del condensador y el consumo total de energía sin comprometer la pureza del producto. La relación de reflujo de fondos se redujo a 1.438 (una disminución del 11.5%), lo cual significa una menor recirculación de líquido en la parte baja de la columna, disminuyendo la carga térmica sobre el rehervidor. Por otro lado, la condición térmica de alimentación descendió a 0.7211 (una reducción del 3.6%), lo que representa una alimentación en estado subenfriado. Lo más destacable es que, a pesar de esta reducción en las condiciones operativas, la fracción molar de biodiésel en los fondos aumentó ligeramente a 0.6789, lo que representa un incremento del 0.25% en comparación con la versión optimizada. Además, el requerimiento energético en el rehervidor se redujo a $3.3679 \cdot 10^4$ cal/s, lo cual equivale a una disminución del 15.9%. Estos resultados permiten observar que el enfoque integral permite alcanzar un mejor equilibrio entre eficiencia energética y calidad del producto, comparándolo con el método secuencial tradicional.

4.4.3. Evaluación de eficiencia en el controlador del método integral

El método integral no solo tuvo como objetivo mejorar la fracción molar de biodiésel en los fondos y reducir el consumo energético de la columna de destilación reactiva, sino también incrementar la eficiencia del sistema de control asociado. Un controlador eficiente se caracteriza por responder más rápidamente ante cambios y por minimizar el error entre la variable controlada y su valor de referencia. Para evaluar cuantitativamente el desempeño de los controladores diseñados bajo ambos enfoques (tradicional e integral), se calculó la integral del error al cuadrado. Esta métrica permite medir de manera precisa la magnitud y duración del error, mostrando en mayor grado los errores a lo largo del tiempo prolongados. De esta forma, se obtiene una evaluación objetiva del comportamiento dinámico del sistema de control. Los resultados del cálculo de la integral del error al cuadrado se presentan en la Figura 9, donde se observa que el controlador optimizado mediante el enfoque integral (línea azul) logra un desempeño mejor que el método tradicional (línea roja): reduce tanto el tiempo de estabilización como el error acumulado durante la operación.

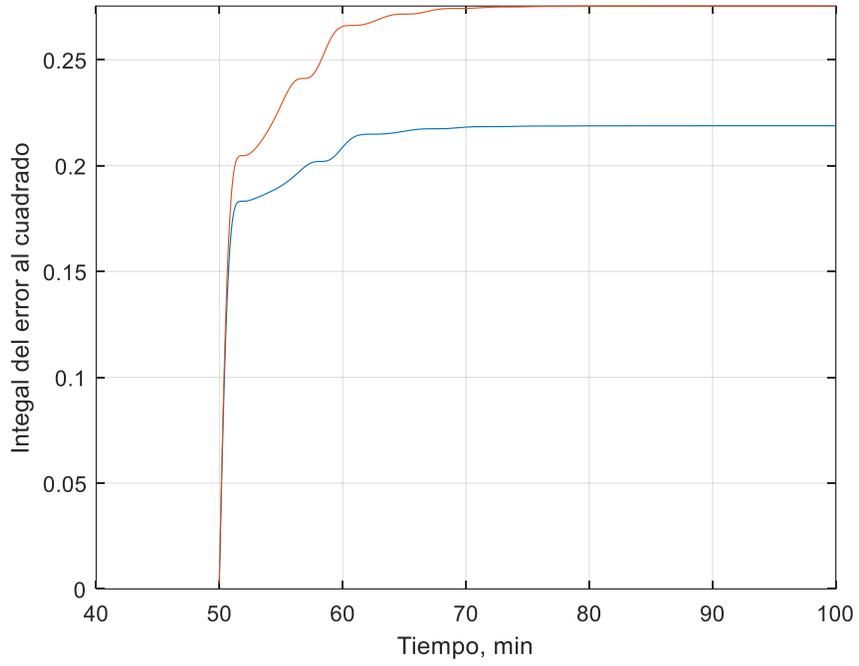


Figura 9. Cálculo del error integral al cuadrado del método tradicional como integral

Capítulo 5

Conclusiones y Perspectivas

5.1. Conclusiones

Los resultados obtenidos demuestran que la integración simultánea de diseño, optimización y control en una columna de destilación reactiva para la producción de biodiésel constituye una mejor estrategia de optimización comparado al método tradicional. Primero, la validación del modelo dinámico implementado en MATLAB frente a las simulaciones realizadas en Aspen Plus reveló que los errores porcentuales en las fracciones molares de componentes clave fueron inferiores al 4 % para metanol y triglicéridos, y del orden de 10^5 a 10^{-9} para diglicéridos, monoglicéridos, biodiésel y glicerina, lo cual respalda la precisión y fiabilidad del modelo. Con esta base, la optimización estructural y operativa permitió ajustar variables de diseño como el número de platos, la posición del plato de alimentación, la relación de reflujo total, la relación de reflujo de fondos y la condición térmica de alimentación, conduciendo a un diseño inicial adecuado. Posteriormente, la optimización integral enfocada en maximizar la fracción molar de biodiésel en los fondos y minimizar el calor suministrado al rehervidor se obtuvieron resultados favorables: la fracción molar de biodiésel alcanzó 0.6789 con el enfoque integral, frente a 0.6772 con la optimización tradicional y 0.58 sin optimizar, lo que representa una mejora del 17.1 % respecto al estado base. Al mismo tiempo, la relación de reflujo total se redujo en un 25.4 % (de 3.0 a 1.9378), la relación de reflujo de fondos disminuyó un 4.1 % (de 1.5 a 1.4380) y la condición térmica de alimentación se ajustó en un 27.9 % (de 1.0 a 0.7211), estos ajustes permitieron optimizar la separación y la conversión química sin requerir flujos de recirculación y energéticamente se reduce en un 15.9% el consumo de energía en el rehervidor.

El análisis comparativo reveló que el enfoque integral logra un uso más racional del vapor de trabajo y favorece un mejor aprovechamiento del potencial térmico de la alimentación, compensando plenamente el mayor aporte energético en la base de la columna. En este sentido, la optimización integral consigue un balance óptimo entre calidad del biodiésel y consumo energético. En el ámbito del control, la implementación de un controlador PI optimizado mediante la minimización de la Integral del Error al Cuadrado (ISE) permitió una mejora en el desempeño dinámico. El tiempo de respuesta para alcanzar el *setpoint* de 0.67 pasó de 110 min en el controlador no optimizado a 16 min en el optimizado, es decir, una velocidad de respuesta 6.9 veces superior. Asimismo, la integral del error cuadrático acumulado se redujo significativamente, evidenciando mayor estabilidad frente a perturbaciones de entrada. Estos resultados resaltan la relevancia de ajustar K_p y K_i antes de abordar la optimización estructural y de operación de la columna.

La comparación entre los enfoques tradicional e integral demuestra que incorporar el controlador desde la etapa inicial de optimización y diseño no solo mejora los indicadores técnicos, sino que también mejora la respuesta del sistema de control. El método integral evita sobredimensionamientos posteriores, disminuye la sensibilidad a variaciones de carga y promueve respuestas más rápidas y estables.

5.2 Perspectivas

Como perspectivas de investigación futura, la incorporación de técnicas avanzadas de control predictivo (MPC) y adaptativo podría optimizar aún más el rendimiento, anticipando perturbaciones y reduciendo el consumo energético. A su vez integrar criterios eco-económicos y de ciclo de vida (LCA) en las funciones objetivo, evaluando no solo la energía y la conversión, sino también las emisiones de CO₂ y los costos operativos a lo largo del ciclo de vida de la planta.

5.3. Referencias

- Alzate, A., Gómez, L., & Alvarez, H. (2015). *Simultaneous Process and Control Design using Set Theory. Prospectiva*, 13(1), 12-23.
- Andersen, B. B., Nielsen, R. F., Udugama, I. A., Papadakis, E., Gernaey, K. V., Huusom, J. K., & Abildskov, J. (2018). *Integrated process design and control of cyclic distillation columns*. IFAC-PapersOnLine, 51(18), 542-547.
- Baudino, F. D. T. (2006). *Reacciones en contexto: la transesterificación en la producción de biodiesel a partir de aceite de fritura usado*. Anales de Química de la RSEQ, (3), 43-49.
- Biodiésel Tamaño del Mercado*. (s/f). Mordorintelligence.com. Recuperado el 10 de junio de 2023, de <https://www.mordorintelligence.com/es/industry-reports/biodiesel-market>
- Braccia, L. (2018). *Integración entre diseño y control de procesos industriales* [Tesis Doctoral]. Universidad Nacional de Rosario.
- Carrera-Rodríguez, M., Segovia-Hernández, J. G., & Bonilla-Petriciolet, A. (2011). *Short-cut method for the design of reactive distillation columns*. *Industrial & engineering chemistry research*, 50(18), 10730-10743.
- Carrera-Rodríguez, M., Segovia-Hernández, J. G., Hernández-Escoto, H., Hernández, S., & Bonilla-Petriciolet, A. (2014). *A note on an extended short-cut method for the design of multicomponent reactive distillation columns*. *Chemical engineering research and design*, 92(1), 1-12.
- Comisión Nacional para el Uso Eficiente de la Energía. (s/f). *Biodiésel -Movilidad y transporte*. gob.mx. Recuperado el 28 de junio de 2025, de <https://www.gob.mx/conuee/acciones-y-programas/biodiesel-movilidad-y-transporte?state=published.control>, 13(4), 291-309.
- Darnoko, D., & Cheryan, M. (2000). *Kinetics of Palm Oil Transesterification in a Batch Reactor*. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 77(12).
- Diangelakis, N. A., Burnak, B., Katz, J., & Pistikopoulos, E. N. (2017). *Process design and control optimization: A simultaneous approach by multi-parametric programming*. *AIChE Journal*, 63(11), 4827-4846.
- Dutta S. *Optimization in Chemical Engineering*. Cambridge: Cambridge University Press; 2016.
- Gonçalves, P. C., Monteiro, L. P. C., & de Sousa Santos, L. (2020). *Multi-objective optimization of a biodiesel production process using process simulation*. *Journal of Cleaner Production*, 270, 122322.
- Gumus R.H., Wauton I., I.E.O., Efeonah, (2013). *Simulation Model for Biodiesel Production using Non-isothermal (CSTR) Mode: Membrane Reactor*
- He B.B., Singh A.P. and Thompson J.C., (2006) *A novel continuous-flow reactor using reactive distillation for biodiesel production*. *Trans ASABE* 49:107–112 .
- Hernandez, P. N. B., Santamaría, J. R. A., & Rios, L. A. (2009). *Biodiésel: Producción, calidad y caracterización*. Universidad de Antioquia.
- Himmelblau, D. M. (1997). *Principios básicos y cálculos en ingeniería química*. Pearson Educación.
- Houge, E. Ø. (2013). *Reactive Distillation of Biodiesel: Modelling and Optimal Operation* (Master's thesis, NTNU).
- Intelligence, M. (s/f). *Biodiesel market - analysis, growth & Share* [Data set].
- Kafarov, V., González, A. D., & Guzmán Monsalve, A. (2009). *Desarrollo de métodos de extracción de aceite en la cadena de producción de biodiesel a partir de microalgas*.
- Lam M.K., Lee K.T., Mohamed A.R., (2010). *Homogeneous, heterogeneous and enzymatic catalysis for transesterification of high free fatty acid oil (waste cooking oil) to biodiesel: A Review*. *Biotechnology Advances*, 28:500-518.
- Liu, X., & Qian, J. X. (2000). *Modeling, control, and optimization of ideal internal thermally coupled distillation columns*. *Chemical Engineering & Technology: Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology*, 23(3), 235-241.
- Lorandi, M.A.P., Saba, M.G.H., de Guevara Durán, M.E.L., & Silva, M.J.H. (2011). *Controladores PID y controladores difusos*. *Revista de ingeniería industrial*, 5(1).

- Manenti, F., Cieri, S., & Restelli, M. (2011). *Considerations on the steady-state modeling of methanol synthesis fixed-bed reactor*. *Chemical Engineering Science*, 66(2), 152-162. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.09.036>
- Mansouri, S. S., Sales-Cruz, M., Huusom, J. K., Woodley, J. M., & Gani, R. (2015). *Integrated process design and control of reactive distillation processes*. *IFAC-PapersOnLine*, 48(8), 1120-1125.
- Marchetti J.M., Miguel V.U., Errazu A.F., (2007), *Possible methods for biodiesel production*. *Renewable and sustainable energy reviews*, 11:1300-1311.
- Medina, M.A.P.L., Saba, M.G.H., de Guevara Durán, M.E.L., & Silva, M.J.H. (2011). *Controladores PID y controladores difusos*. *Revista de ingeniería industrial*, 5(1).
- Mondal, B., Parhi, S. S., Rangaiah, G. P., & Jana, A. K. (2021). *Nano-catalytic heterogeneous reactive distillation for algal biodiesel production: Multi-objective optimization and heat integration*. *Energy Conversion and Management*, 241, 114298.
- Mondal, B., Rangaiah, G. P., & Jana, A. K. (2022). *Optimizing algal biodiesel production from a novel reactive distillation-based unit: Reducing CO2 emission and cost*. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 176, 108948.
- Noureddini, H., Harkey, D., & Medikonduru, V. (1998). *A Continuous Process for the Conversion of Vegetable Oils into Methyl Esters of Fatty Acids*. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 75(12).
- Perry. (2018). *Manual del Ingeniero Químico*. Novena edición. Mc.Graw-Hills. Tomo II
- Poddar, T., Jagannath, A., & Almansoori, A. (2015). *Biodiesel production using reactive distillation: a comparative simulation study*. *Energy Procedia*, 75, 17-22.
- Regalado-Méndez, A., Romero, R., Natividad, R., & Skogestad, S. (2015). *Performance of CSTR, Reactive Flash, and Reactive Distillation for Biodiesel Production*.
- Roat, S. D., Downs, J. J., Vogel, E. F. and Doss, J. E., "The integration of rigorous dynamic modeling and control system synthesis for distillation columns: An industrial approach", *Chemical Process Control-CPC III*, 1986.
- Santos T., Gomes J.F., Puna J., *Liquid-liquid equilibrium for ternary system containing biodiesel, methanol and water*, *J. Environ. Chem. Eng.* 6 (2018) 984–990.
- Seferlis, P., & Georgiadis, M. C. (Eds.). (2004). *The integration of process design and control*. Elsevier.
- Segovia-Hernández, J. G., Hernández, S., & Petriciolet, A. B. (2015). *Reactive distillation: A review of optimal design using deterministic and stochastic techniques*. *Chemical Engineering and Processing*, 97, 134-143. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2015.09.004>
- Semwal S., Arora A.K., Badoni R.P., Tuli D.K., (2011). *Biodiesel production using heterogeneous catalysts*. *Bioresource Technology*, 102:2151-2161.
- Sharifzadeh, M. (2013). *Integration of process design and control: A review*. *Chemical Engineering Research and Design*, 91(12), 2515-2549.
- Sharma Y.C., Singh B., Upadgyay, S.N., (2008). *Advancements in development and characterization of biodiesel: A review*. *Fuel*, 87:2355-2373.
- Sharma, N., & Singh, K. (2010). *Control of reactive distillation column: a review*. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 8(1).
- Shu, C., Li, X., Li, H., & Gao, X. (2022). *Design and optimization of reactive distillation: a review*. *Frontiers of Chemical Science and Engineering*, 16(6), 799-818.
- Simasatitkul, L., et al., (2011). *Reactive distillation for biodiesel production from soybean oil*. *Korean Journal of Chemical Engineering*. 28(3): p. 649-655.
- Singh R.N., Sharma S., *Development of suitable photobioreactor for algae production – A review*, *Renew. Sustain. Energy Rev.* 16 (2012) 2347–2353.
- Skogestad, S. (2003). *Simple analytic rules for model reduction and PID controller tuning*. *Journal of process*
- Smith, J., Van Ness, H.C., & Abbott, M.M. (2007). *INTRODUCCION A LA TERMODINAMICA EN INGENIERIA QUIMICA* (1a. ed.). GUADALAJARA: MCGRAW-HILL INTERAMERICANA.
- Tian, Y., Pappas, I., Burnak, B., Katz, J., & Pistikopoulos, E.N. (2021). *Simultaneous design & control of a reactive distillation system – A parametric optimization & control approach*. *Chemical Engineering Science*, 230, 116232.
- Van Gerpen J., (2005). *Biodiesel processing and production*. *Fuel processing technology*, 86:1097-1107

“Lis de Veracruz: Arte, Ciencia, Luz”

www.uv.mx

