

Producción de bioproductos de alto valor agregado a partir de azúcares provenientes de biomasa

Production of bioproducts with high added value from sugars obtained from biomass

Juan Gabriel Segovia-Hernández^{1*}, Eduardo Sánchez-Ramírez¹, Carlos Rodrigo Cáceres Barrera¹, Martin Flores Juanto¹, Dariana Vianet Cisneros Rangel¹, Juan José Eduardo Domínguez Mendoza¹, José Armando Castro Navarro¹, Jorge Giovanni Avendaño Guerrero¹

¹ Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato, Noria Alta s/n, Guanajuato, Gto., 36050, México
gsegovia@ugto.mx

Resumen

El análisis dinámico de procesos químicos y bioquímicos es fundamental para asegurar su controlabilidad. En este estudio, se examinan dos esquemas de biorrefinerías dedicadas a la producción de productos de valor agregado. El primer caso aborda la purificación de etanol, mientras que el segundo se centra en la obtención de dos compuestos químicos prometedoros: ácido levulínico y gamma-valerolactona. Inicialmente, se emplea la descomposición en valores singulares (SVD) para ambos procesos, identificando así los escenarios con mejores y peores propiedades de control en un análisis de control a lazo abierto. A continuación, se realiza un análisis de control en lazo cerrado en estos escenarios seleccionados. Se emplea la simulación en Aspen Dynamics junto con un controlador proporcional-integral (PI), y se utiliza la integral absoluta del error (IAE) como indicador de desempeño. Los resultados del comportamiento dinámico en lazo cerrado confirman las expectativas previas basadas en la descomposición SVD. Los escenarios con las mejores propiedades de control son aquellos con una relación solvente/alimentación de 1.5:1 en el caso de estudio 1, y el escenario 5050 en el caso de estudio 2.

Palabras clave: número de condición; descomposición SVD; lazo cerrado.

1.Introducción

La creciente preocupación por el cambio climático y la necesidad de reducir la dependencia de los combustibles fósiles ha impulsado el interés en fuentes de energía renovable y sostenible. En este contexto, la biomasa se ha destacado como una opción prometedora debido a su potencial para contribuir significativamente a la mitigación de emisiones de gases de efecto invernadero y a la diversificación de la matriz energética global. La biomasa abarca una amplia gama de materiales biológicos que provienen de fuentes vegetales, animales y de origen microbiano, los cuales contienen energía química almacenada a través de la fotosíntesis. En esta investigación, nos centramos en el estudio de la biomasa de origen no fósil, que incluye recursos naturales renovables como madera y residuos forestales, desechos agrícolas, residuos de la industria alimentaria y aguas residuales. La disponibilidad masiva de estos recursos en diversas regiones del mundo hace que la biomasa sea una fuente de energía potencialmente abundante y económicamente viable para satisfacer las crecientes demandas energéticas (Arauzo et al., 2014; Valdez-Vasquez et al., 2010). Una de las formas más prometedoras de aprovechar la biomasa es a través del concepto de biorrefinerías. Una biorrefinería se define como una instalación que utiliza procesos integrados y sostenibles para convertir la biomasa en una variedad de productos de alto valor, incluyendo biocombustibles, productos químicos, materiales y energía. Estas biorrefinerías se asemejan a las refinerías de petróleo en su enfoque hacia la conversión y refinamiento de materia prima, sin embargo, ofrecen la ventaja adicional de ser respetuosas con el medio ambiente, ya que utilizan recursos renovables y reducen la huella de carbono (IEA, 2008).

El diseño y operación eficiente de biorrefinerías son aspectos cruciales para maximizar su viabilidad técnica y económica, así como su implementación industrial. Los procesos de conversión de biomasa en productos de valor agregado son altamente complejos debido a la naturaleza heterogénea de la biomasa lignocelulósica, que está compuesta por polímeros naturales, como la celulosa, la hemicelulosa y la lignina. La degradación y conversión efectiva de estos polímeros requieren procesos de pretratamiento y etapas de reacción

específicas, que pueden ser afectadas por diversas variables, como temperatura, presión, concentración de reactivos y enzimas, entre otras (De Bhowmick et al., 2018). En este contexto, el control de procesos juega un papel fundamental para garantizar la estabilidad, eficiencia y seguridad de las operaciones de la biorrefinería. El monitoreo y ajuste continuo de las variables de proceso críticas permiten mantener un funcionamiento óptimo y prevenir desviaciones no deseadas en las condiciones operativas, minimizando así la posibilidad de fallos y optimizando el rendimiento global (Smith & Corripio, 1991). El presente artículo tiene como objetivo llevar a cabo un estudio exhaustivo sobre las propiedades de control en dos esquemas distintos de biorrefinerías, focalizados en la obtención de bioetanol y ácido levulínico. Mediante el empleo de técnicas numéricas avanzadas, como la descomposición en valores singulares, se analizarán las dinámicas de ambos procesos y se realizará un análisis en lazo cerrado para evaluar la estabilidad y precisión del sistema de control. Los resultados obtenidos en este estudio permitirán mejorar la comprensión de los aspectos clave del control en biorrefinerías y proporcionarán conocimientos valiosos para la optimización y desarrollo futuro de procesos bioenergéticos más eficientes y sostenibles. En resumen, este trabajo contribuirá al avance en el campo de la utilización de biomasa como fuente de energía y productos de valor agregado, en línea con los objetivos globales de sostenibilidad y mitigación del cambio climático.

2. Marco teórico

Descomposición en valores singulares

En el ámbito del control de procesos, se realiza un minucioso estudio de los diversos factores externos que inciden en las propiedades de control del sistema. Las perturbaciones internas y externas del proceso son sometidas a un análisis de control, con el objetivo de comprender su influencia y efecto en el sistema. Para la implementación del control del sistema, se llevan a cabo dos tareas fundamentales: el diseño del sistema de control y su posterior implementación. Estas dos fases pueden ser abordadas de forma simultánea o de manera independiente, dependiendo de la complejidad y características específicas del proceso en cuestión. En el proceso de diseño del sistema de control, existen diversas metodologías para evaluar las propiedades de control de un sistema. En el presente estudio, se ha empleado la técnica numérica de descomposición en valores singulares (Singular Value Decomposition, SVD) en un enfoque de lazo abierto. Mediante esta metodología, es posible determinar el número de condición y el valor singular mínimo, parámetros fundamentales para evaluar las propiedades de control del sistema en estudio. La predicción de estas propiedades teóricas es acertada, lo cual ha sido corroborado a través de un riguroso análisis dinámico.

El método de descomposición en valores singulares se inicia mediante la adaptación del modelo dinámico específico para cada sistema de interés. A continuación, se realizan cambios deliberados en las variables de entrada con el fin de registrar y evaluar su efecto sobre las variables de control, que generalmente corresponden a las composiciones de un producto de interés. Finalmente, a partir de los registros obtenidos, se procede a calcular la matriz de función de transferencia, la cual es sometida al proceso de descomposición en valores singulares. Esta técnica numérica ha demostrado ser eficaz para analizar las propiedades de control en sistemas complejos y dinámicos, proporcionando una valiosa herramienta para el diseño y optimización de estrategias de control en diversos procesos industriales. La información obtenida a través de este enfoque permite una mejor comprensión de la dinámica del sistema y facilita la toma de decisiones informadas para el diseño de sistemas de control más robustos y eficientes.

Obtención matriz de ganancias

La matriz de ganancias se construye a partir de las respuestas de las variables de control bajo alteraciones en variables de entrada. Esta matriz debe cumplir el requisito de ser una matriz cuadrada para poder descomponerla en sus valores singulares.

$$M_{Gain} = \begin{bmatrix} \frac{Dif_{(1,1)}}{0.5(Pert)} & \dots & \frac{Dif_{(n,1)}}{0.5(Pert)} & \vdots & \vdots & \frac{Dif_{(1,m)}}{0.5(Pert)} & \dots & \frac{Dif_{(n,m)}}{0.5(Pert)} \end{bmatrix} \quad (1)$$

Donde $Dif_{(n,m)}$ es la diferencia entre los valores de la variable de control antes de la perturbación y después de la perturbación. La magnitud de la perturbación debe estar dentro del rango de 0.25% al 5% de la variable de entrada.

Descomposición de valores singulares

La SVD es una herramienta útil en la teoría de sistemas lineales, puede determinar el rango y la condición de una matriz, permitiendo trazar geoméricamente los puntos fuertes y débiles de un conjunto de ecuaciones. Con su aplicación se provee una medida de las propiedades de control de un sistema en estado dinámico.

La matriz de ganancias a lazo abierto se somete a la descomposición de valores singulares:

$$[u, s, v] = svd(M_{Gain}) \quad (2)$$

Donde la matriz diagonal (s) contiene los valores singulares σ y dos matrices ortonormales (u y v). De la matriz S se extraen dos valores de interés, el valor singular máximo (σ_{max}) y el valor singular mínimo (σ_{min}). A partir de estos dos valores, se estima el número de condición (γ), siendo el cociente del valor singular máximo y el mínimo.

$$\lambda = \frac{\sigma_{max}}{\sigma_{min}} \quad (3)$$

Al ser aplicado a una matriz que describe las características de estado de un proceso multivariables, el método SVD provee a los valores singulares de interpretaciones físicas.

El número de condición (γ) cuantifica la sensibilidad del sistema con respecto a errores por modelación, perturbaciones y no linealidades. Por lo tanto, se tiene preferencias por los sistemas con los valores más pequeños, ya que se espera que estos sistemas sean los que presenten un mejor comportamiento en el estado dinámico.

El valor singular mínimo (σ_{min}) mide los problemas potenciales del sistema bajo control realimentado. Se desean procesos con grandes valores en σ_{min} para garantizar un control independiente de las variables.

El valor singular máximo (σ_{max}) está asociado con la ganancia máxima que un controlador proporcional puede tomar en un sistema de control retroalimentado sin desestabilizar el sistema. Por lo tanto, se prefieren valores pequeños de σ_{max} .

La relación entre σ_{min} y σ_{max} , se tiene en que las perturbaciones menores a σ_{min} , son asimiladas por el sistema sin ocurrir la saturación de las variables manipuladas. Las perturbaciones entre σ_{min} y σ_{max} pueden ocasionar la saturación, pero el sistema puede seguir siendo controlable. Por último, las perturbaciones con valor superior a σ_{max} no podrán ser asimiladas por el sistema.

Control en lazo cerrado y criterios integrales de control

El mundo de la automatización ha avanzado tanto que necesitamos que los procesos que diseñemos deben ajustarse por sí mismo lo más rápido posible ante cualquier perturbación que pueda provocar un error en la salida de éste. Para dicha tarea se emplean controladores, a estos sistemas se les llama de lazo cerrado. Existen distintos tipos de controladores aplicados en la industria cada uno con sus características y usos. Los más usados son los denominados "controladores clásicos", los cuales son:

- Proporcional (P)
- Proporcional + integral (PI)
- Proporcional + integral + derivativo (PID) Proporcional.

Controlador proporcional (P)

El primero de ellos trabaja reduciendo el error que se tiene, el error es la diferencia entre la variable que se controla y el valor deseado de ésta. La ganancia proporcional, el parámetro más importante del controlador, es la respuesta proporcional que da el controlador al error que se tenga, mientras mayor sea la ganancia también lo será la acción del controlador para reducir el error. El error que se tiene con estos controladores es de tipo estacionario, lo cual quiere decir que siempre habrá una diferencia mínima entre la variable manipulable y el valor deseado; cosa que no sería aceptable si se buscará una alta precisión (la solución normalmente usada es combinar los P con controladores integrales y derivativos) .

La acción de este controlador está dada por:

$$P = Kp * e \quad (4)$$

Controlador proporcional-integral (PI): En estos la ganancia deja de ser proporcional al error y lo es ahora a la integral acumulada del error a lo largo del tiempo. La integral del error se representa con:

$$IE = \int e dt \quad (5)$$

Estos controladores son especialmente útiles cuando se tiene perturbaciones constantes, arreglando así el error del estado estacionario, mientras se va acumulando la integral de error con el tiempo el controlador actúa para arreglarlo, llevándonos al valor deseado. Por otro lado, un lado negativo de estos es que se puede producir un efecto conocido como “integral windup” o “acumulación integral” que provocan que éste no puede emplear la función de control correctamente debido a las limitaciones físicas del sistema o restricciones operativas; para evadir estos problemas se emplean estrategias como la limitación de la integración o la elección correcta de los parámetros del controlador.

La acción de este controlador está dada por:

$$PI = Ki * \int e dt \quad (6)$$

Controlador Derivativo (D): Estos controladores se centran más en las variaciones del error para así anticiparse a las que se puedan dar en el futuro y así generar respuestas más suaves y estables (evitando oscilaciones extremas)

$$D = Kd * de / dt \quad (7)$$

Controlador proporcional-integral-derivativo (PID): Estos no son más que la combinación de los tres controladores anteriormente mencionados, su señal es la suma de las acciones de cada uno de ellos, para lograr un buen rendimiento de éste es necesario dar un correcto valor a los parámetros k_e , k_i y k_d .

Indicador IAE : Una vez establecido el controlador a utilizar se debe escoger un indicador de desempeño, el cual en este caso será el IAE (integral del error absoluto) la expresión matemática que representa a este indicador es:

$$IAE = \int |\mathcal{E}(t)| dt_{\infty 0} \quad (8)$$

Este y los demás indicadores pueden reducir al sintonizar los parámetros del controlador, siendo esto lo que queremos, ya que mientras más bajo sea el IAE más controlable será el proceso.

3. Metodología

En este apartado se describe el procedimiento empleado para el análisis de control de varios diseños de proceso de una biorrefinería. Los pasos generales que se siguieron se presentan de forma breve en el siguiente apartado.

Caso estudio 1. Producción de bioetanol

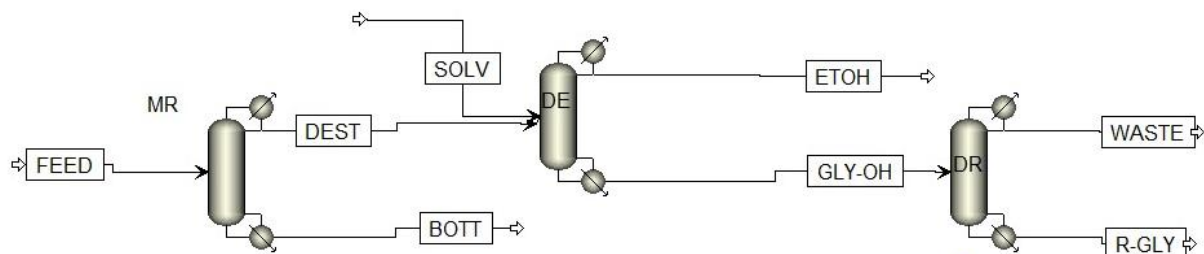


Figura.1 Diagrama general para el proceso de purificación de etanol.

En la Figura 1 se presenta el esquema del proceso de purificación de etanol, el cual involucra el uso de tres columnas. En la primera columna, se introduce una mezcla de etanol-agua, y a través del fondo de esta columna se separa la mayor cantidad de agua posible. La segunda columna es empleada para llevar a cabo

una destilación extractiva, con el fin de incrementar la pureza del etanol, el cual es obtenido en el domo de esta columna. La tercera columna se utiliza para recuperar el solvente empleado en la destilación extractiva. El estudio se enfoca en analizar tres diseños distintos, donde la variable que varía es la relación entre la corriente de solvente alimentado a la segunda columna y la corriente de etanol, es decir, la relación entre las corrientes SOLV y DEST que se muestra en la Figura 1. Las relaciones consideradas son: 1.5, 2 y 2.5. Estos diferentes diseños son objeto de investigación para determinar cómo afectan la eficiencia y el rendimiento del proceso de purificación de etanol. Se busca identificar la relación óptima entre el solvente y el etanol para maximizar la pureza del producto final y lograr una operación más eficiente en términos de consumo de recursos y costos. En consecuencia, este estudio contribuirá a mejorar la comprensión del proceso de purificación de etanol y permitirá identificar estrategias de diseño y operación que conduzcan a una producción más eficiente y sostenible de etanol con alta pureza. Los resultados obtenidos serán fundamentales para el desarrollo de sistemas de purificación de etanol más eficaces en la industria, contribuyendo así a la expansión de la utilización de biocombustibles y a la disminución de la dependencia de combustibles fósiles.

Caso estudio 2. Producción de ácido levulínico y gamma-valerolactona (GVL)

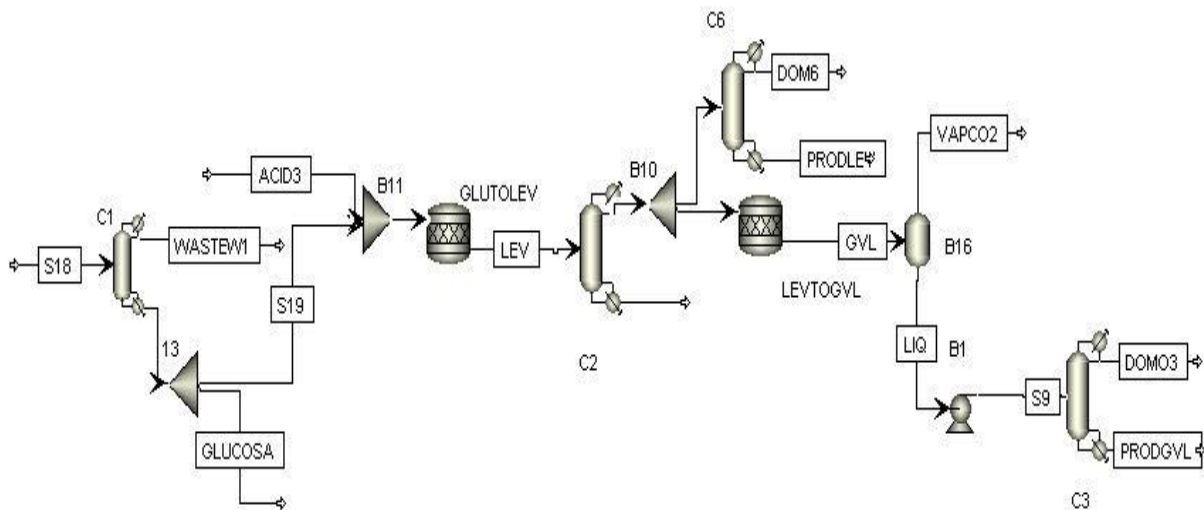


Figura 2. Diagrama general para el proceso de obtención de ácido levulínico y gamma-valerolactona (GVL).

La Figura 2 muestra el esquema general del proceso para la producción de ácido levulínico y gamma-valerolactona. En la columna 1, se obtiene glucosa como el compuesto mayoritario en los fondos. Esta corriente se divide en dos partes iguales. La corriente S19 resultante se dirige al reactor GLUTOLEV, donde la glucosa se transforma en ácido levulínico y ácido fórmico. La columna 2 se utiliza para eliminar el ácido sulfúrico del proceso. Luego, en el splitter B10, la corriente se divide en dos fracciones. Una de estas corrientes se envía a la columna C6 para la purificación del ácido levulínico, mientras que la segunda corriente se dirige a un reactor donde el ácido levulínico se convierte en gamma-valerolactona. Este compuesto posteriormente se purifica en la columna C3. Los casos de estudio se diferencian en la forma en que se dividen las corrientes en el divisor B10. Se han considerado tres escenarios: 5050, donde la corriente del domo de la columna C2 se divide equitativamente en un 50% para cada proceso; 2575, con una división de 25% a la columna C6 y 75% al reactor; y 7525, con una división inversa de 75% a la columna C6 y 25% al reactor. Las simulaciones utilizadas para el análisis de control provienen de un proceso de optimización realizado en un trabajo previo aún no publicado. En ese estudio, se evaluaron tres funciones objetivo: el costo anual total (TAC) como indicador económico, el eco-indicador 99 (ECO-99) como indicador ambiental, y el consumo total de energía del proceso. Por cada caso (5050, 2575 y 7525), se llevaron a cabo tres simulaciones, correspondientes a los valores mínimos (min), óptimos (opt) y máximos (max) del eco-indicador. En total, se realizaron nueve simulaciones para cada caso, lo que proporcionó un análisis exhaustivo de diferentes escenarios y criterios de optimización en el proceso de obtención de ácido levulínico y gamma-valerolactona.

Metodología general

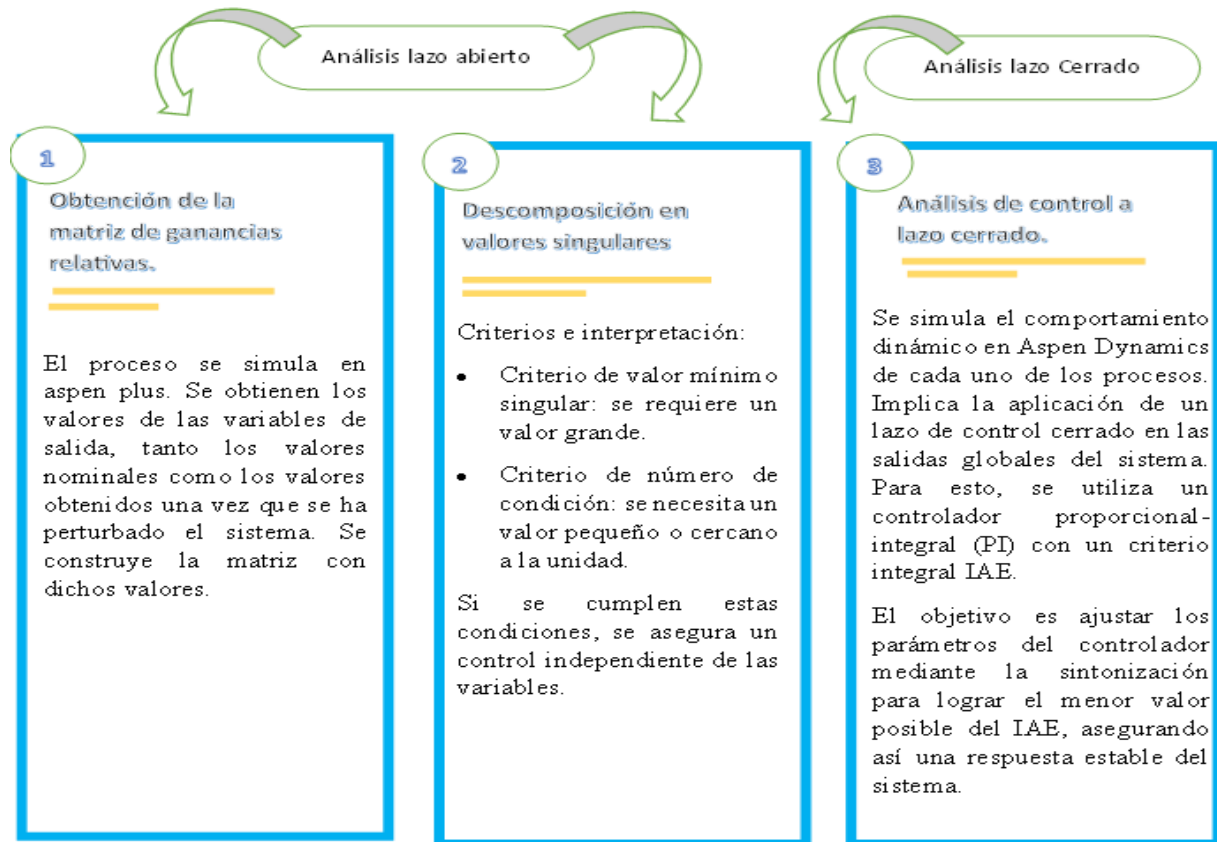


Figura 3. Metodología del trabajo

Análisis de lazo abierto

El análisis de lazo abierto, desde la obtención de la matriz de ganancias relativas hasta la descomposición de valores singulares, se realizó en los tres diseños del caso de estudio 1 y los nueve diseños del caso de estudio 2. Esto con el objetivo de determinar y comparar el diseño del proceso más estable y el menos estable.

Obtención de la matriz de ganancias relativa (MGR).

La matriz de ganancia relativa (MGR) es un enfoque que normaliza las ganancias fijas y evalúa la interacción entre las variables controladas sin depender de las unidades utilizadas. Más adelante se utiliza la matriz MGR para la descomposición de valores singulares (SVD).

A continuación, se describen numéricamente los pasos que se utilizaron para la obtención de la matriz MGR.

1. Se identificaron las variables de salida globales que pudiesen presentar una mayor perturbación al perturbar las variables de entrada. Se definieron 4 variables de salida en el caso de estudio 1. Se definieron 6 variables de salida relacionadas con las columnas: C1, C2, C3, C5 en el caso de estudio 2.
2. Se determinaron los valores nominales de las variables de salida. En este caso de análisis, las variables de salida corresponden a las composiciones de los componentes más enriquecidos en las corrientes de salida. Se obtuvieron seis valores nominales.
3. Se perturbaron las variables de entrada al -1%. El porcentaje de perturbación se definió en base a los valores nominales previamente obtenidos. La perturbación se realizó para cada una de las variables de entrada, y para cada perturbación se registraron los valores obtenidos en las variables de salida.

4. Se construyó la matriz de ganancias relativas. Los elementos de la matriz de ganancias relativas presentan las diferencias entre los valores de las variables de salida nominales y los valores obtenidos una vez que se ha realizado la perturbación correspondiente. Dichos elementos se encuentran normalizados. Se obtuvo una matriz de $n \times n$.

Descomposición en valores singulares.

La matriz de ganancias relativas (MGR) se factoriza en tres matrices, tal como lo describe el método de descomposición en valores singulares. El proceso de descomposición en valores singulares se realizó en Matlab. Matlab cuenta con una función que permite realizar el proceso de descomposición en valores singulares de forma directa (función SVD).

La matriz de ganancias relativas previamente obtenida se ingresó en código Matlab y se resolvió. Se obtuvieron tres matrices, siendo una de ellas la matriz de valores singulares. Por otro lado, se determinaron el valor singular mínimo, el valor singular máximo y el número de condición; que como vimos, se define como la razón entre el valor singular máximo y el valor singular mínimo.

En base a los valores del número de condición, se determinó el diseño más estable y el diseño menos estable.

Análisis de lazo cerrado.

Una vez que se determinó el diseño menos perturbable y el diseño más perturbable, se procedió a realizar un análisis a lazo cerrado sobre estos dos diseños. Para facilitar la simulación en aspen dinámico, cada uno de los diseños se dividió, y se simularon por separado las secuencias; que contienen las variables de salida de interés.

Los diseños de las columnas simulados en aspen plus, fueron exportados a aspen Dynamics, donde fueron analizados a lazo cerrado.

Para el análisis de estos diseños se utilizó un controlador de tipo PI y un indicador de desempeño de tipo IAE para determinar los parámetros óptimos del controlador para conocer su estabilidad ante un punto de ajuste. Para el punto de ajuste se realizó un cambio de set point en la pureza del compuesto de mayor composición. El cambio fue del -1%.

A continuación, se describe el procedimiento utilizado:

Primero. - Se comenzó con la elaboración del lazo de control cerrado.

Segundo. - Se configuró el valor del setpoint. Se configuró con el valor de la composición de la componente analizada, perturbada al 1%.

Tercero. -Se asignó un valor de k_c (ganancia) y un valor de t (tiempo integral).

Cuarto. – Se registró el valor de IAE que se obtuvo una vez que la variable de composición se estabilizó.

Para este análisis se probaron valores de k_c en un rango de 1-250 y valores de t en un rango de 1-150. En base a los valores obtenidos se obtuvo el par de valores óptimo para cada uno de los diseños, siendo este el valor mínimo global de IAE. Una vez que se determinaron los valores óptimos de control, se presentaron los resultados y se comparó el diseño de proceso más estable y el diseño de proceso menos estable.

A continuación, se muestra un diagrama de flujo que describe de una mejor manera el procedimiento descrito previamente.

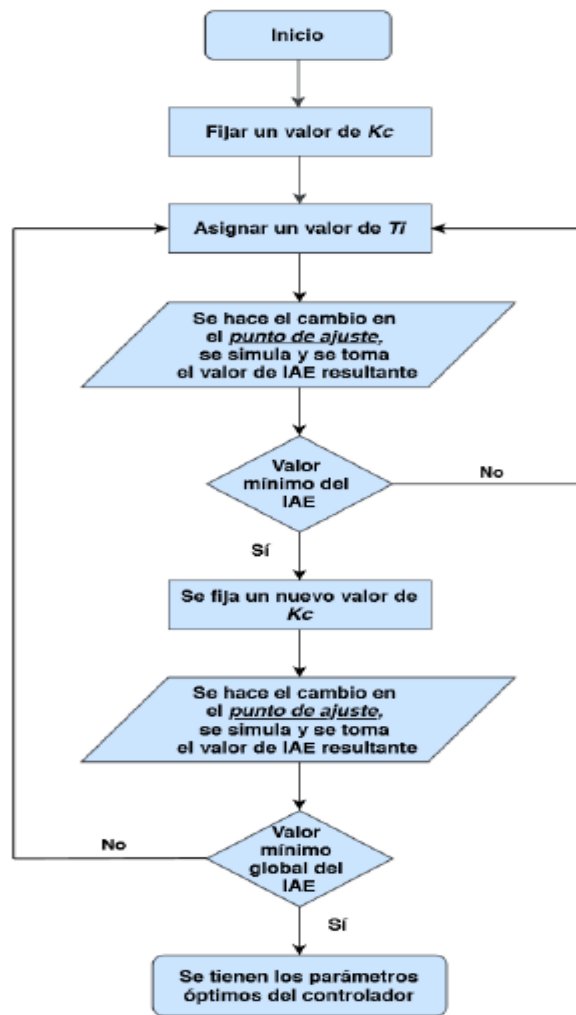


Figura 4. Diagrama de flujo para la sintonización de los parámetros óptimos del controlador PI bajo el criterio de minimización del IAE. Tomada de (Flores Cordero, E., 2023).

4. Resultados

En esta sección se muestran los resultados del análisis en lazo abierto y lazo cerrado de los diferentes casos de estudio objeto de este trabajo.

Resultados caso de estudio 1

Tabla 1. Valores de número de condición, valor singular máximo y valor singular mínimo para los 3 diseños evaluados del caso de estudio 1

Escenario	1.5	2	2.5
Número de Condición	1.25E+04	2.60E+05	5.54E+05
Valor singular mínimo	2.90E-06	1.19E-05	5.62E-09
Valor singular máximo	0.0363	3.0995	0.0031

Tabla 2. Cargas térmicas por columna y total para los escenarios del caso de estudio 1

Columna	Carga térmica (cal/s)		
	1.5	2	2.5
MR	6563602.22	6296333.49	6296333.34
DE	673234.211	761696.338	741626.375
DR	366841.062	377252.568	413085.513
Total	7603677.49	7435282.4	7451045.23

Los resultados de la Tabla 1 revelan que la relación de 1.5 exhibe las mejores propiedades de control debido a que posee el menor número de condición, mientras que la relación de 2.5 muestra las peores propiedades de control. Al examinar los valores de las cargas térmicas en la Tabla 2, se evidencia que el caso de mejor controlabilidad corresponde al que presenta una mayor carga térmica. Por consiguiente, podemos afirmar que, al menos en términos de control, la relación de 1.5 es la más favorable. La simulación 2 se encuentra en una posición intermedia, ya que su controlabilidad se sitúa entre los extremos de mejor y peor, y su carga térmica es la más reducida. Esta conclusión se corrobora al analizar las Figuras 5 a 8, donde se muestra el comportamiento dinámico del proceso. Se observa que, en el escenario con una relación de reflujo de 1.5, ante la presencia de una perturbación, el sistema alcanza un nuevo estado estable en un tiempo más breve. En cambio, para el caso de la relación de reflujo de 2, el proceso muestra una mayor oscilación y requiere más tiempo para alcanzar la estabilización.

Resultados comportamiento dinámico caso estudio 1

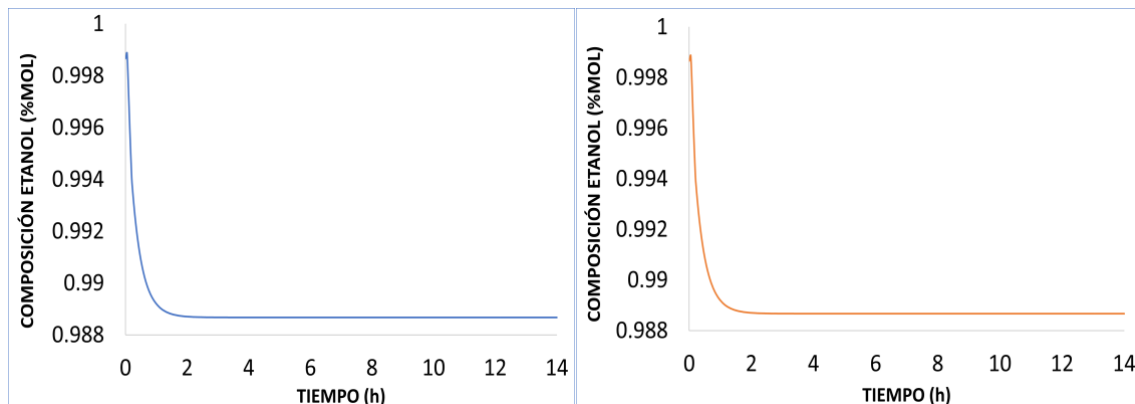


Figura 5. Comportamiento dinámico de la variable de control composición de etanol en el domo de la columna MR bajo una perturbación del -1%

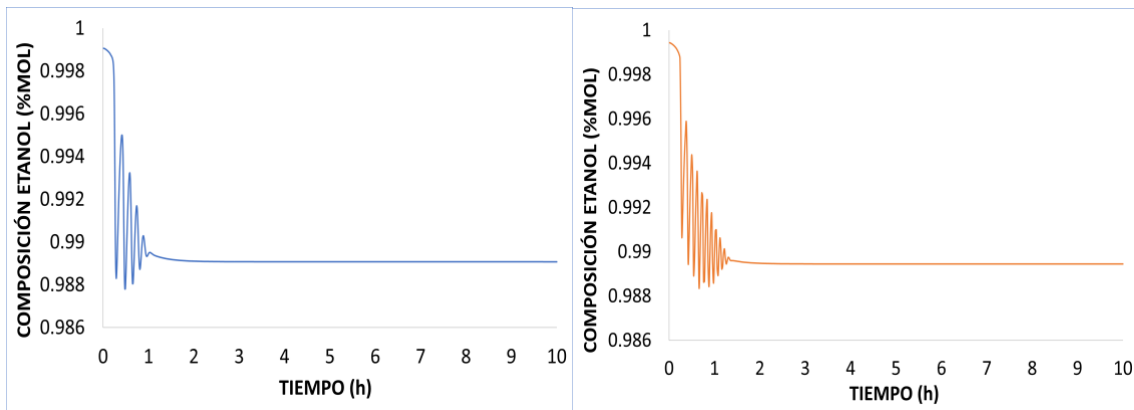


Figura 6. Comportamiento dinámico de la variable de control composición de etanol en el domo de la columna DE bajo una perturbación del -1%

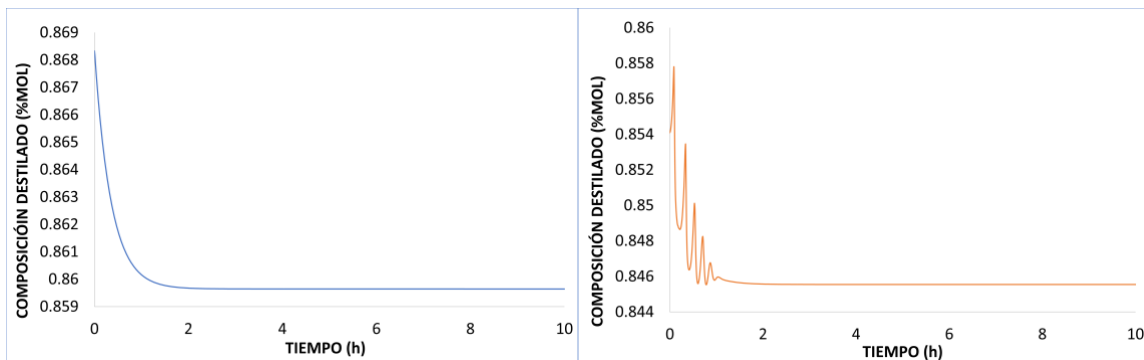


Figura 7. Comportamiento dinámico de la variable de control composición en el domo de la columna DR bajo una perturbación del -1%

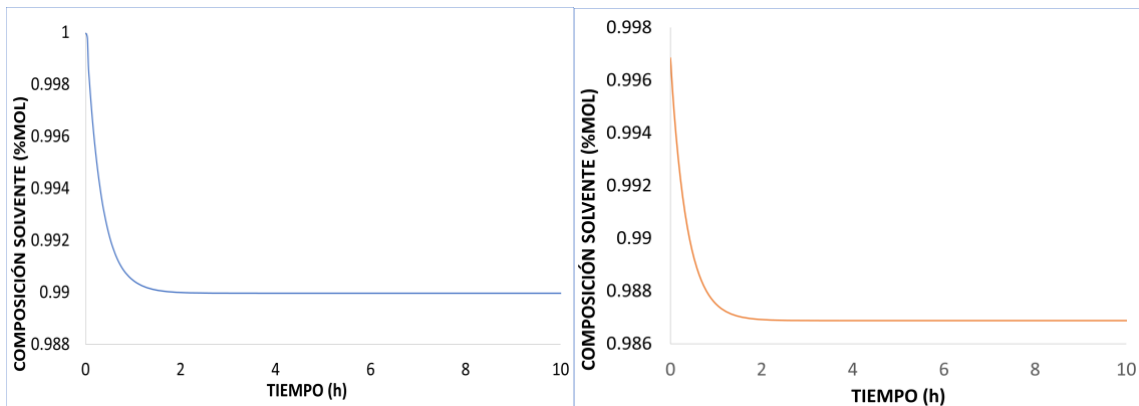


Figura 8. Comportamiento dinámico de la variable de control composición en los fondos de la columna DR bajo una perturbación del -1%

Resultados caso de estudio 2

En la Tabla 3 se muestran los valores del número de condición y valores singulares obtenidos de la descomposición en valores singulares de los 9 diseños del caso de estudio 2.

Tabla 3. Valores de número de condición, valor singular máximo y valor singular mínimo para los 9 diseños evaluados del caso de estudio 2.

Escenario 5050	5050 min	5050 opt	5050 max
Número de Condición	7.29E+14	7.76E+06	1.76E+04
Valor singular mínimo	9.58E-15	6.69E-07	3.70E-04
Valor singular máximo	6.9877	5.1676	6.5105
Escenario 2575	2575 min	2575 opt	2575 max
Número de Condición	5.85E+09	4.16E+15	1.58E+11
Valor singular mínimo	1.20E-09	1.68E-19	9.09E-10
Valor singular máximo	7.0204	7.01E-04	144.25
Escenario 7525	7525 min	7525 opt	7525 max
Número de Condición	1.07E+04	2.64E+03	3.19E+12
Valor singular mínimo	6.51E-04	5.48E-04	2.84E-12
Valor singular máximo	6.9683	1.45	9.0547

El criterio utilizado para seleccionar el diseño con las mejores propiedades de control se basa en el menor número de condición y el mayor valor singular máximo, como ya se mencionó previamente. De acuerdo a los valores presentados en la Tabla 3, estas condiciones se cumplen en el escenario 5050 máximo (5050 max). Sin embargo, para el análisis en lazo cerrado realizado posteriormente, se optó por evaluar el caso 5050 óptimo, aun cuando esto implica un leve sacrificio en la controlabilidad del proceso en beneficio de trabajar con el diseño que ofrece los mejores indicadores económicos y ambientales. El proceso con el peor desempeño dinámico es el escenario 2575 óptimo (2575 óptimo), como se puede observar. Este proceso exhibe el mayor número de condición entre todos los escenarios evaluados y el menor de los valores singulares máximos. Estas consideraciones son relevantes para el análisis y selección del diseño más adecuado, ya que se busca un equilibrio entre las propiedades de control, el desempeño económico y ambiental del proceso. En última instancia, esta investigación permitirá identificar y comprender los aspectos clave relacionados con la controlabilidad del proceso de obtención de ácido levulínico y gamma-valerolactona, contribuyendo así al desarrollo de sistemas de producción más eficientes y sostenibles.

Tabla 4. Valores de las funciones objetivo para el caso 5050 opt y caso 2575

Función objetivo	Escenario 1 (5050 opt)	Escenario 2 (2575 opt)
TAC (dólares/año)	3.250 E+07	3.157 E+07
Eco-indicador 99 (puntos/año)	8.105E+06	7.71E+06
Requerimiento de energía (MJ/año)	1.901E+09	1.756E+09

De acuerdo con los datos presentados en la Tabla 4, el diseño óptimo del escenario 5050, a pesar de tener el mayor valor entre las tres funciones objetivo consideradas, muestra una mayor estabilidad frente a posibles perturbaciones. Este aspecto reviste gran importancia en el diseño de un proceso. Asimismo, es relevante resaltar los resultados de la Tabla 3, donde se evidencia que tanto en los escenarios 5050 como en 2575, el

proceso óptimo, además de lograr el mejor compromiso entre las funciones objetivo, presenta las mejores propiedades de control. Esta característica adquiere importancia dado que la controlabilidad del sistema puede ser utilizada como un indicador de sostenibilidad, en conjunto con los indicadores económicos y ambientales empleados.

Tabla 5. Valores óptimos de ganancia y tiempo integral con los cuales se obtiene el mínimo IAE

Escenario	Kc %%	Ti (min)	IAE
Columna 1 5050 Domo	250	17	0.003499
Columna 2 5050 Fondo	246	26	0.003492
Columna 3 5050 Fondo	250	7.2	0.034992
Columna 6 5050 Fondo	250	80	0.022453
Columna 1 2575 Domo	250	9	0.02374
Columna 2 2575 Fondo	250	38	0.005448
Columna 3 2575 Fondo	1	40	0.251559
Columna 6 2575 Fondo	N.D	N.D	N.D

*N.D :No determinado

Conforme a la teoría, el proceso con las mejores propiedades de controlabilidad se reflejará en un valor mínimo de IAE. Al analizar los resultados del IAE en la tabla mencionada, se puede observar que, al comparar los valores de IAE de las columnas correspondientes al diseño 5050, estos son más bajos que los correspondientes al diseño 2575, lo cual confirma que efectivamente el diseño 5050 presenta mejores propiedades de controlabilidad. Los valores de ganancia obtenidos de la sintonización también muestran valores grandes cercanos al límite superior definido. Además, en la Tabla 5, se puede notar que para la columna 6 del diseño 2575, el valor de IAE no pudo converger, y por ende, no fue posible obtener ningún valor al intentar sintonizar los parámetros del controlador. Esto pone de manifiesto las bajas propiedades de controlabilidad de dicho diseño. Estas conclusiones son respaldadas por las Figuras 9 a 12, que ilustran el comportamiento dinámico del caso de estudio 2. En el escenario 5050, que previamente se había identificado como el de mejor controlabilidad, ante una perturbación, el sistema alcanza un nuevo estado estable en un tiempo más corto. Por el contrario, en el escenario 2575, el proceso exhibe más oscilaciones y requiere considerablemente más tiempo para estabilizarse. En particular, en el caso de la columna 6 del escenario 2575, la figura 12 muestra que no fue posible lograr la sintonización del controlador. Estos resultados demuestran la relevancia de la controlabilidad en el diseño de procesos, destacando la importancia de seleccionar diseños con propiedades de control más favorables para garantizar un funcionamiento estable y eficiente en la obtención de ácido levulínico y gamma-valerolactona.

Resultados comportamiento dinámico caso estudio 2

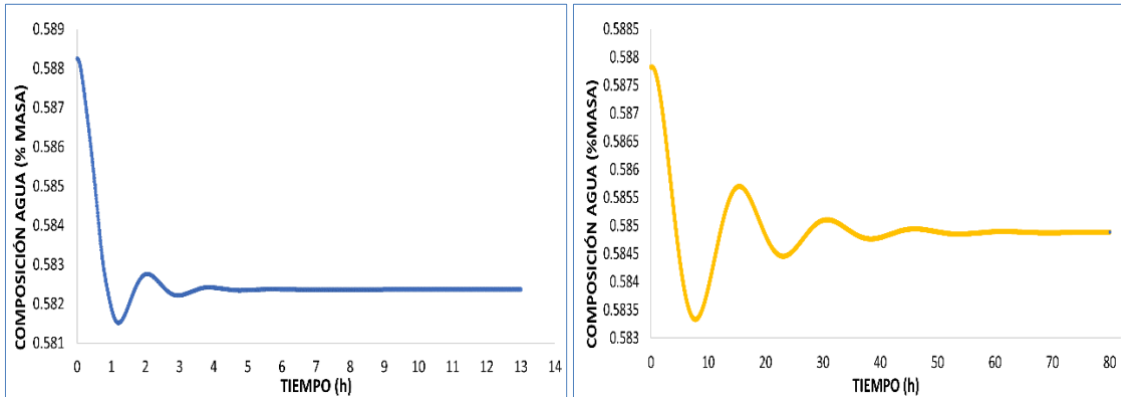


Figura 9. Comportamiento dinámico de la variable de control composición de agua en el domo de la columna 1 bajo una perturbación del -1%

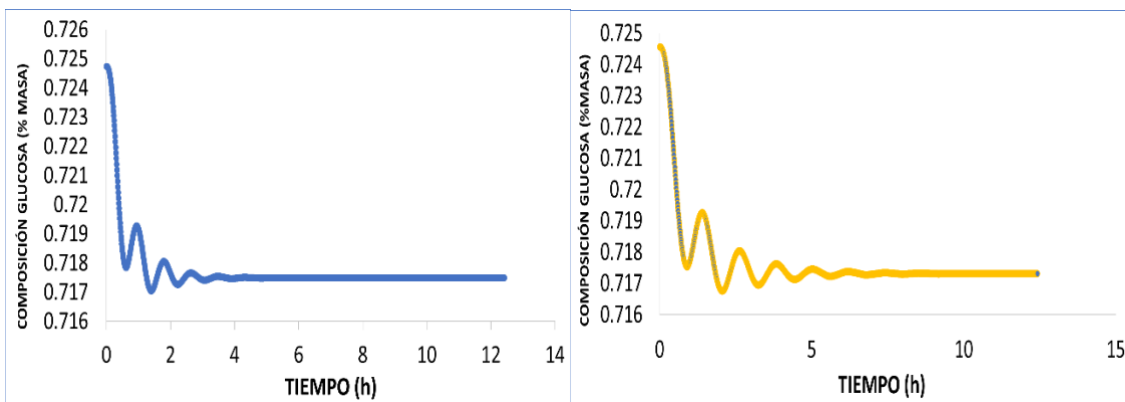


Figura 10. Comportamiento dinámico de la variable de control composición de glucosa en los fondos de la columna 2 bajo una perturbación del -1%

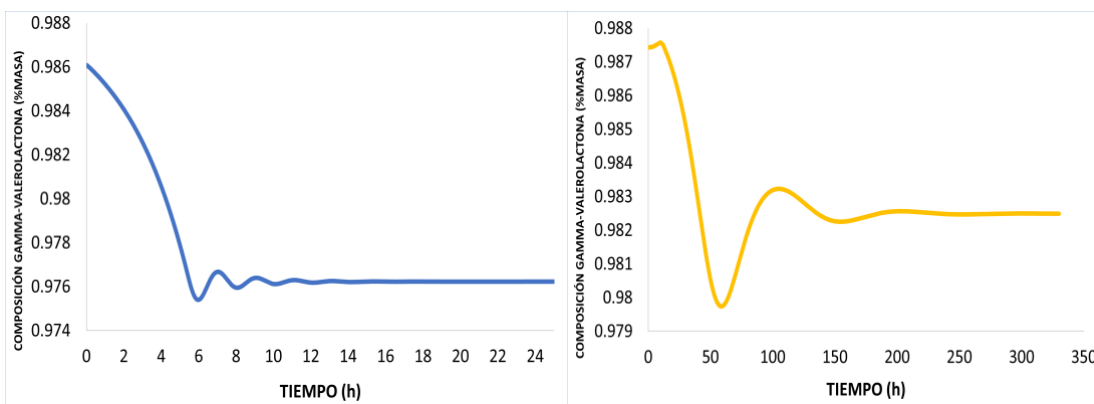


Figura 11. Comportamiento dinámico de la variable de control composición de Gamma-valerolactona en los fondos de la columna 3 bajo una perturbación del -1%

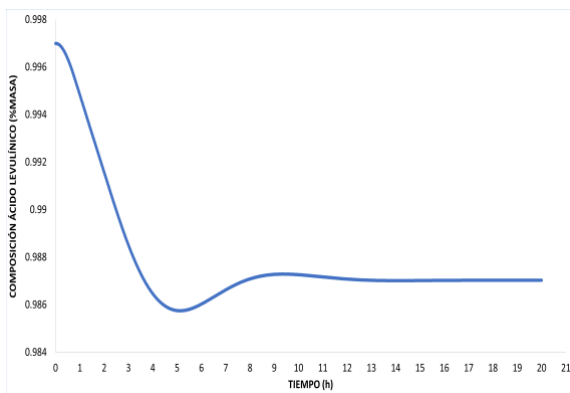


Figura 12. Comportamiento dinámico de la variable de control composición de ácido levulínico en los fondos de la columna 6 bajo una perturbación del -1%

Conclusiones

En conclusión, los resultados obtenidos en los dos casos de estudio ofrecen una visión completa y detallada sobre las propiedades de control y la operatividad del proceso de obtención de ácido levulínico y gamma-valerolactona. En el caso de estudio 1, se destaca la relación solvente/alimentación de 1.5 como la mejor opción desde el punto de vista de control, aunque se debe considerar su mayor requerimiento de carga térmica. Por otro lado, el escenario 2575 del caso de estudio 2 presenta un desempeño deficiente en términos de controlabilidad y operatividad, mostrando la necesidad de mejorar su diseño. Los mejores diseños identificados en el caso de estudio 2, el escenario 7525 óptimo y el diseño 5050 con el máximo eco-indicador, demuestran que es posible lograr un equilibrio entre las propiedades de control, la sostenibilidad económica y ambiental, y la producción equilibrada de los compuestos de interés. Sin embargo, se reconoce que algunos diseños pueden requerir estrategias de control más avanzadas para mejorar su estabilidad y eficiencia. En general, esta investigación proporciona información valiosa para la toma de decisiones en el diseño y operación del proceso de obtención de ácido levulínico y gamma-valerolactona, destacando la importancia de considerar tanto las propiedades de control como los aspectos económicos y ambientales. Los resultados apuntan hacia la necesidad de optimizar los diseños para obtener procesos más estables, eficientes y sostenibles, contribuyendo así al desarrollo de tecnologías más avanzadas y respetuosas con el medio ambiente en la producción de estos compuestos químicos de alto valor.

Bibliografía

- Alvarez, L. A., & Espinosa, J. (2012). Methodology based on SVD for control structure design. *Latin American applied research*, 42(3), 0-0.
- Arauzo, J., Bimbela, F., Abrego, J., Sanchez, J. L., & Gonzalo, A. (2014). Introduction to biomass valorisation technologies. *BOLETIN DEL GRUPO ESPANOL DEL CARBON*, (33), 2-6.
- Creus, A. (2011). *Instrumentación industrial*. México: Alfaomega Grupo Editor.
- De Bhowmick, G., Sarmah, A. K., & Sen, R. (2018). Lignocellulosic biorefinery as a model for sustainable development of biofuels and value added products. *Bioresource technology*, 247, 1144-1154.
- Flores Cordero, E (2023). *Control de procesos intensificados*.
- IEA.(2008). IEA bioenergy Task 42 on biorefineries: co-production of fuels, chemicals, power and materials from biomass. In: Minutes of the third Task meeting, Copenhagen, Denmark, 25–26 March 2007 <http://www.biorefinery.nl/ieabioenergy-task42/>
- Valdez-Vazquez, I., Acevedo-Benítez, J. A., & Hernández-Santiago, C. (2010). Distribution and potential of bioenergy resources from agricultural activities in Mexico. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 14(7), 2147-2153.

Vega, P., De Rocco, R. L., Revollar, S., & Francisco, M. (2014). Integrated design and control of chemical processes—Part I: Revision and classification. *Computers & chemical engineering*, 71, 602-617.