



TABLA DE CONTENIDO

CAPÍTULO 1	1
INTRODUCCIÓN	2
JUSTIFICACIÓN	6
HIPÓTESIS	8
OBJETIVOS	8
OBJETIVO GENERAL.....	8
OBJETIVOS PARTICULARES	8
CAPÍTULO 2	9
FURFURAL.....	10
PROPIEDADES Y CARACTERÍSTICAS.....	10
INDICADORES QUÍMICOS DEL FURFURAL	11
USO EN LA INDUSTRIA QUÍMICA.....	12
FURFURAL COMO SOLVENTE	12
FURFURAL EN LA INDUSTRIA DE LA REFINACIÓN DE PRODUCTOS.....	12
FUFURAL COMO PRECURSOR DE RESINAS Y POLIMEROS.....	13
FURFURAL COMO NEMATOCIDA EN LA AGRICULTURA.....	13
PRODUCCIÓN DE FURFURAL	13
ANTECEDENTES HISTÓRICOS DE LA PRODUCCIÓN DE FURFURAL.....	13
PROCESO QUAKER OATS PARA LA PRODUCCIÓN DE FURFURAL.....	14
ESQUEMAS DE REACCIÓN PROPUESTOS PARA LA PRODUCCIÓN DE FURFURAL	15
PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN PARA EL CASO DE PRODUCCIÓN DE FURFURAL.....	21
CAPÍTULO 3	24
IMPORTANCIA DE LOS INDICADORES DE UN PROCESO QUÍMICO	25
OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO	27
OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA	27
OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICOS POR MÉTODOS EVOLUTIVOS (EVOLUCIÓN DIFERENCIAL) .	29
OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA POR MÉTODOS DE MEMORIZACIÓN (LISTA TABÚ)	31



OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA POR EVOLUCIÓN DIFERENCIAL CON LISTA TABÚ (DETL)	32
PROPIEDADES DE CONTROL	35
ESPACIO DE ESTADOS	35
FUNCIONES DE TRANSFERENCIA	37
CONTROLABILIDAD	39
MATRIZ DE GANANCIAS RELATIVAS (RGA)	39
DESCOMPOSICIÓN EN VALORES SINGULARES (SVD)	40
MÉTODO DE GUTHRIE	42
METODOLOGÍA PARA EL CÁLCULO DE COSTOS DE EQUIPO	42
ECO-INDICADOR 99 (EI99)	44
CAPÍTULO 4	46
DISEÑO DEL REACTOR PARA LA PRODUCCIÓN DE FURFURAL	47
MODELO CINÉTICO DE REACCIÓN PARA LA PRODUCCIÓN DE FURFURAL	47
ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS CINÉTICOS PARA EL MODELO REPORTADO	48
ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS CINÉTICOS PARA EL MODELO SIMPLIFICADO	49
MODELADO DEL REACTOR EN MATLAB	51
DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA DE REACCIÓN	51
APLICACIÓN DE LAS ECUACIONES DE BALANCE DE MATERIA GENERALIZADO	52
DEFINICIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN DEL SISTEMA DE REACCIÓN	55
IMPLEMENTACIÓN DE LAS PROPIEDADES DE CONTROL	56
LINEALIZACIÓN DEL MODELO PROPUESTO	56
DETERMINACIÓN DE ESPACIO DE ESTADOS	56
DETERMINACIÓN DE FUNCIONES DE TRANSFERENCIA	58
COMPARACIÓN DEL MODELO LINEAL RESPECTO A AL MODELO NO LINEAL	59
IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO LINEAL EN SIMULINK	60
IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO NO LINEAL EN SIMULINK	61
SUMA DE CUADRADOS DEL ERROR (SSE)	62
DETERMINACIÓN DE LA CONTROLABILIDAD DEL SISTEMA	63
DETERMINACIÓN DEL RGA DEL SISTEMA	64
DETERMINACIÓN DEL SVD DEL SISTEMA	65



IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE GUTHRIE	65
IMPLEMENTACIÓN DEL ECO-INDICADOR 99 (EI99)	66
OPTIMIZACIÓN DINÁMICA MULTIOBJETIVO: IMPLEMENTACIÓN DE DELT.	67
PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO	67
VARIABLES DE DECISIÓN Y LÍMITES DE OPERACIÓN PARA LA OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO	69
ESTRATEGIA DE OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO.....	69
CAPÍTULO 5	72
INTRODUCCIÓN.....	73
RESULTADOS DEL DISEÑO DEL REACTOR PARA LA PRODUCCIÓN DE FURFURAL.....	73
RESULTADOS DE LA OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO	78
ANÁLISIS DE NÚMERO DE CONDICIÓN VS TAC.....	79
ANÁLISIS DE TAC VS EI99.....	80
ANÁLISIS DE NÚMERO DE CONDICIÓN VS EI99	82
PORCENTAJE DE RENDIMIENTO DEL FURFURAL.....	83
COMPARACIÓN DEL DISEÑO ÓPTIMO SELECCIONADO RESPECTO A DISEÑOS EN LOS EXTREMOS DEL PARETO	85
ANÁLISIS DE LAZO DE CONTROL PARA EL DISEÑO ÓPTIMO	87
RESUMEN DE RESULTADOS.....	90
CAPÍTULO 6	92
CONCLUSIONES	93
TRABAJOS A FUTURO Y RECOMENDACIONES.....	95
APÉNDICES	96
APÉNDICE 1	97
ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS CINÉTICOS PARA EL MODELO REPORTADO.....	97
APÉNDICE 2	100
MATERIA PRIMA DISPONIBLE EN MÉXICO PARA LA PRODUCCIÓN DE FURFURAL.....	100
PALMA DATILERA	101
APÉNDICE 3	102
CÓDIGO DE ECUACIONES CINÉTICAS EN MATLAB	102
APÉNDICE 4	103



COMPARACIÓN DEL MODELO LINEAL RESPECTO AL MODELO NO LINEAL	103
APÉNDICE 5	105
INDICADORES DE CONTROL	105
CONTROLABILIDAD.....	105
SVD (NÚMERO DE CONDICIÓN)	105
RGA.....	106
APÉNDICE 6	109
FICHA TÉCNICA DEL COMPUTADOR DELL POWEREDGE T420	109



RESUMEN

Actualmente, es bien sabido que los recursos de origen fósil son consumidos a gran velocidad, así mismo la contaminación extrema, la escases de agua y los cambios climáticos han generado un creciente problema ambiental a nivel global. Para resolver este problema, surge la necesidad de optimizar los procesos existentes, así como diseñar nuevos procesos, con el objetivo de lograr procesos: más limpios, más seguros y sustentables. Sin embargo, esto trae nuevos retos de optimización por resolver, de modo que la optimización simultánea de parámetros de diseño y control ha sido de gran necesidad. Generalmente, en los problemas de optimización, se resuelven ambos objetivos secuencialmente, por lo que no se garantiza que las condiciones de diseño “óptimas” (costos y parámetros de operación en estado estacionario) sigan siendo las mejores al evaluar el rendimiento dinámico del proceso. Por lo tanto, puede haber conflicto entre el diseño del proceso y la controlabilidad del proceso. Con la necesidad de obtener un modelo óptimo que involucre el diseño y el control, se ha propuesto que estos dos objetivos deben ser optimizados de manera simultánea para determinar un diseño final óptimo, esto debido a que las especificaciones de diseño tienen un efecto considerable en el comportamiento dinámico del proceso (Rijnsdorp JE, Bekkers P., 1992). En esta dirección, se han propuesto algoritmos de optimización para sistemas dinámicos, dando iniciativa a la Optimización Dinámica Mixto Entera (MIDO por sus siglas en inglés) para la optimización simultánea de diseño y control. En la literatura, se ha resuelto la optimización simultánea de los parámetros de diseño y control mediante métodos deterministas con modelos dinámicos simplificados. Hasta el momento, no hay informes publicados en la literatura donde la optimización simultánea de control de diseño considere el modelo extensivo del sistema.

En este trabajo se presenta la optimización simultánea de los parámetros de diseño y control, utilizando un método híbrido estocástico, Evolución Diferencial con Lista Tabú (DELTA). Como caso de estudio, se ha propuesto la zona de reacción en el proceso de producción de furfural a partir de biomasa. Como función objetivo, el Costo Total Anual (TAC por sus siglas en inglés), el eco-indicador 99 (EI99) y el número de condición se utilizan como criterios económicos, ambientales y de control, respectivamente. A partir de la optimización multiobjetivo, los resultados muestran la influencia directa que tienen los parámetros de diseño sobre las propiedades de control, los cuales resultan con un comportamiento antagonista, es decir, al aumentar el TAC y el EI99 se tienen mejores propiedades de control. Como consecuencia, es posible ver que para tener las mejores propiedades de control hay un aumento en el TAC y en el EI99. Esta metodología permite obtener un diseño de sistema que abarque las mejores condiciones económicas, ambientales y de control, sin la necesidad de evaluar cada aspecto secuencialmente. En función de los resultados, las condiciones operativas encontradas permiten tener una producción de furfural aceptable al reducir los costos y el impacto ambiental, en un sistema con buenas propiedades de control en estado dinámico.