

Capítulo 7

Reactor con control de temperatura

7.1 Enunciado

La Figura 7.1 muestra un reactor de tanque agitado que emplea un condensador para realizar el control de su temperatura. Junto con la alimentación al reactor se alimenta un solvente. Este solvente se evapora eliminando calor del reactor y posteriormente condensa en el condensador y retorna al reactor. El reactor mantiene el volumen constante. La temperatura se controla regulando el flujo de gas que pasa al condensador.

Datos del sistema: Caudal de alimentación 900 kg/h, masa en el reactor 1100 kg, concentración de la alimentación 0,5 kg/kg, temperatura de alimentación 330 K, calor de reacción -1400 kJ/kg, calor de vaporización 637 kJ/kg, calor específico 3,14 kJ/kg K, factor preexponencial $7,08 \times 10^{10}$ 1/h, energía de

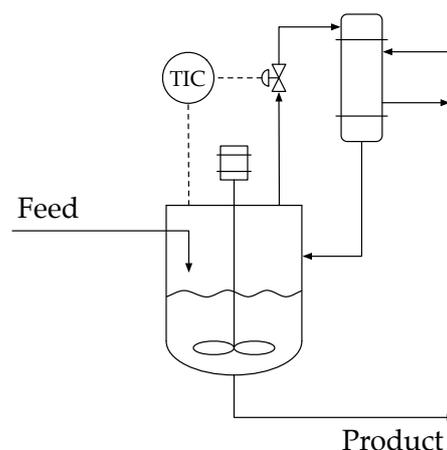


Figura 7.1: Reactor con control de temperatura.

activación 76200 J/mol, constante universal de los gases $R = 8,314$ J/mol K, temperatura (set point) del reactor 360 K, ganancia del controlador $K_p = 30$ kg/h K, tasa de vapor máxima 1000 kg/h, tasa de vapor base 330 kg/h, concentración inicial en el reactor 0,25 kg/kg, temperatura inicial en el reactor 330 K.

El control de temperatura da el caudal de vapor como:

$$\text{caudal base} + K_p \times \text{error}$$

siendo el error la diferencia entre la temperatura real y la deseada (set point).

Se pide:

1. Realizar un modelo del sistema que incluya las ecuaciones del mismo y las suposiciones realizadas.
2. Resolver el modelo seleccionando un método de integración apropiado.
3. Dibujar la curva de evolución de la temperatura en el reactor, de las concentraciones de producto y reactivo así como el caudal enviado al condensador..
4. Analizar el comportamiento del sistema frente a un salto en escalón en:
 - (a) El caudal de la corriente de alimentación.
 - (b) El punto de consigna del reactor.

7.2 Modelo matemático

Leyenda

F_{in} : Caudal de alimentación (entrada) al reactor (kg/h).

F_{out} : Caudal de salida del reactor (kg/h)

$F_{c,in}$: Caudal de entrada al condensador (kg/h).

$F_{c,out}$: Caudal de salida del condensador (kg/h).

$F_{c,in}^{max}$: Caudal máximo de entrada al condensador (kg/h).

$F_{c,in}^{base}$: Caudal base de entrada al condensador (kg/h).

C_{in}^R : Concentración de reactivo en la alimentación (kg/kg).

C_{in}^P : Concentración de producto en la alimentación (kg/kg).

- C_r^R : Concentración de reactivo en el reactor (kg/kg).
- C_r^P : Concentración de producto en el reactor (kg/kg).
- C_{out}^R : Concentración de reactivo en la corriente de salida (kg/kg).
- C_{out}^P : Concentración de producto en la corriente de salida (kg/kg).
- $C_{c,in}^R$: Concentración de reactivo en la entrada al condensador (kg/kg).
- $C_{c,in}^P$: Concentración de producto en la entrada al condensador (kg/kg).
- $C_{c,out}^R$: Concentración de reactivo a la salida del condensador (kg/kg).
- $C_{c,out}^P$: Concentración de producto a la salida del condensador (kg/kg).
- T_{in} : Temperatura de la alimentación al reactor (K).
- T_{out} : Temperatura de salida del reactor (K).
- $T_{c,in}$: Temperatura de la alimentación al condensador (K).
- $T_{c,out}$: Temperatura de la salida del condensador (K)
- T_r : Temperatura en el reactor (K).
- T_{sp} : Set point de temperatura (K).
- m_r : Masa en el reactor (kg).
- m_r^R : Masa de reactivo en el reactor (kg).
- m_r^P : Masa de producto en el reactor (kg).
- m_c : Masa en el condensador (kg).
- r : Velocidad de reacción (kg/h kg).
- k : Constante de velocidad de reacción (1/h).
- k_o : Factor preexponencial (1/h).
- E_a : Energía de activación (J/mol).
- q_R : Calor de reacción (J/kg).
- $\Delta\dot{H}_r$: Entalpía de reacción (J/h).
- q_{vap} : Calor de vaporización (J/kg).
- C_p : Calor específico (J/kg K).
- H_r : Entalpía del medio de reacción (J).

h_{in} : Entalpía de la corriente de alimentación (J/kg).

h_{out} : Entalpía de la corriente de salida (J/kg).

$h_{c,in}$: Entalpía de la alimentación al condensador (J/kg).

$h_{c,out}$: Entalpía de la salida del condensador (J/kg).

K_p : Ganancia del controlador.

Hipótesis asumidas

1. El reactor es un reactor de mezcla perfecta ideal (CSTR ideal) por lo que en el líquido en su interior no hay gradientes de ninguna de sus propiedades y, por tanto, las condiciones de las corrientes de salida son las mismas que las del fluido en el seno del mismo: $C_{out}^R = C_r^R$; $C_{out}^P = C_r^P$ y $T_r = T_{out}$.
2. En el reactor sólo se produce evaporación del solvente y no de los productos ni de los reactivos, por tanto, en las corrientes de entrada y salida del condensador sólo habrá presente solvente: $C_{c,in}^R = C_{c,out}^R = C_{c,in}^P = C_{c,out}^P = 0$
3. Las propiedades de las sustancias son todas independientes de la composición y, por tanto, invariantes en el tiempo. En particular, el calor específico C_p y la densidad del fluido en el reactor también son invariantes. Puesto que la densidad es constante y el volumen del reactor no varía, la masa acumulada en el reactor será constante: $m_r = cte$.
4. El condensador produce líquido saturado, esto es, no hay subenfriamiento en el mismo, tratándose de un proceso a temperatura constante, ya que se alimenta vapor saturado y se obtiene líquido saturado y, por tanto, el proceso transcurre a la temperatura del medio de reacción: $T_{c,in} = T_{c,out} = T_r$.
5. No hay acumulación en el condensador: $m_c = cte$.
6. Reacción con cinética de primer orden: $r = k [R]$.

Balances de materia

En el sistema se tomarán dos volúmenes de control, el reactor y el condensador. En el condensador sólo es necesario realizar un balance global

ya que, como se recoge en las hipótesis del modelo, sólo hay evaporación de solvente, por lo que

$$\frac{dm_c}{dt} = F_{c,in} - F_{c,out} \quad (7.1)$$

pero, como no hay acumulación

$$m_c = cte \implies \frac{dm_c}{dt} = 0 \quad (7.2)$$

por lo que

$$F_{c,in} - F_{c,out} = 0 \iff F_{c,in} = F_{c,out} \quad (7.3)$$

En el reactor se realizan los balances tanto de reactivo como de producto y global, de este modo:

$$\frac{dm_r^R}{dt} = C_{in}^R \cdot F_{in} - C_{out}^R \cdot F_{out} + C_{c,out}^R \cdot F_{c,out} - C_{c,in}^R \cdot F_{c,in} - r \cdot m_r \quad (7.4)$$

$$\frac{dm_r^P}{dt} = C_{in}^P \cdot F_{in} - C_{out}^P \cdot F_{out} + C_{c,out}^P \cdot F_{c,out} - C_{c,in}^P \cdot F_{c,in} + r \cdot m_r \quad (7.5)$$

$$\frac{dm_r}{dt} = F_{in} - F_{out} + F_{c,out} - F_{c,in} \quad (7.6)$$

Teniendo en cuenta la ecuación (7.3), asumiendo la hipótesis de que sólo se produce evaporación de solvente ($C_{c,in}^R = C_{c,out}^R = C_{c,in}^P = C_{c,out}^P = 0$) y el modelo de mezcla perfecta, las ecuaciones anteriores quedarían:

$$\frac{dm_r^R}{dt} = C_{in}^R \cdot F_{in} - C_{out}^R \cdot F_{out} - r \cdot m_r \quad (7.7)$$

$$\frac{dm_r^P}{dt} = C_{in}^P \cdot F_{in} - C_{out}^P \cdot F_{out} + r \cdot m_r \quad (7.8)$$

$$\frac{dm_r}{dt} = F_{in} - F_{out} \quad (7.9)$$

Por otro lado, la masa de reactivo y de producto en el reactor se puede relacionar con la masa en el reactor a través de las concentraciones de ambos, esto es,

$$m_r^R = m_r \cdot C_r^R = m_r \cdot C_{out}^R \implies \frac{dm_r^R}{dt} = \frac{d}{dt}(m_r \cdot C_{out}^R) = m_r \frac{dC_{out}^R}{dt} \quad (7.10)$$

$$m_r^P = m_r \cdot C_r^P = m_r \cdot C_{out}^P \implies \frac{dm_r^P}{dt} = \frac{d}{dt}(m_r \cdot C_{out}^P) = m_r \frac{dC_{out}^P}{dt} \quad (7.11)$$

por lo que las ecuaciones (7.7) y (7.8) quedarían

$$\frac{dC_{out}^R}{dt} = \frac{1}{m_r} (C_{in}^R \cdot F_{in} - C_{out}^R \cdot F_{out} - r \cdot m_r) \quad (7.12)$$

$$\frac{dC_{out}^P}{dt} = \frac{1}{m_r} (C_{in}^P \cdot F_{in} - C_{out}^P \cdot F_{out} + r \cdot m_r) \quad (7.13)$$

además, como la masa en el reactor es constante ($m_r = cte$), la ecuación (7.9) quedaría

$$\frac{dm_r}{dt} = 0 \implies F_{in} - F_{out} = 0 \quad (7.14)$$

Balace de energía

El balace de energía al reactor viene dado por

$$\frac{dH_r}{dt} = F_{in} \cdot h_{in} - F_{out} \cdot h_{out} + F_{c,out} \cdot h_{c,dot} - F_{c,in} \cdot h_{c,in} - \Delta\dot{H}_r \quad (7.15)$$

La entalpía en el medio de reacción H_r puede expresarse como

$$H_r = m_r \cdot C_p \cdot T_r \quad (7.16)$$

y, puesto que la masa en el medio de reacción m_r y el calor específico son constantes, se tiene que

$$\frac{dH_r}{dt} = \frac{d}{dt}(m_r \cdot C_p \cdot T_r) = m_r \cdot C_p \cdot \frac{dT_r}{dt} = m_r \cdot C_p \cdot \frac{dT_{out}}{dt} \quad (7.17)$$

Del mismo modo, las entalpías de la corriente de entrada y de la corriente de salida pueden expresarse como

$$h_{in} = C_p \cdot T_{in} \quad (7.18)$$

$$h_{out} = C_p \cdot T_{out} \quad (7.19)$$

Por otro lado, puesto que en el condensador sólo se produce el paso de vapor saturado a líquido saturado (sin subenfriamiento) se tiene que

$$h_{c,out} - h_{c,in} = -q_{vap} \quad (7.20)$$

además, puesto que $F_{c,in} = F_{c,out}$, se tiene que

$$F_{c,out} \cdot h_{c,out} - F_{c,in} \cdot h_{c,in} = F_{c,in} \cdot (h_{c,out} - h_{c,in}) = -F_{c,in} \cdot q_{vap} \quad (7.21)$$

Por último, la entalpía de reacción se puede relacionar con el calor de reacción y con la velocidad de reacción, de modo que

$$\Delta\dot{H}_r = q_r \cdot m_r \cdot r \quad (7.22)$$

Con todas estas consideraciones, el balance de energía al reactor dado por la ecuación (7.15) quedaría

$$\frac{dT_{out}}{dt} = \frac{1}{m_r \cdot C_p} (F_{in} \cdot C_p \cdot T_{in} - F_{out} \cdot C_p \cdot T_{out} - F_{c,in} \cdot q_{vap} - q_r \cdot m_r \cdot r) \quad (7.23)$$

En este caso no es necesario realizar un balance de energía al condensador ya que éste aparece implícitamente al considerar que el cambio de entalpía en el condensador es el calor de vaporización del solvente.

Ecuaciones auxiliares

Además de los balances anteriores, también debe considerarse la cinética de la reacción. Puesto que la reacción es de primer orden, la velocidad de reacción viene dada por:

$$r = k \cdot C_r^R \quad (7.24)$$

que, considerando el modelo de mezcla perfecta ($C_r^R = C_{out}^R$) quedaría

$$r = k \cdot C_{out}^R \quad (7.25)$$

en donde, la constante de velocidad depende de la temperatura a través de la ecuación de Arrhenius

$$k = k_o \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{R \cdot T_r}\right) \quad (7.26)$$

que, de nuevo, considerando el modelo de mezcla perfecta ($T_r = T_{out}$) quedaría

$$k = k_o \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{R \cdot T_{out}}\right) \quad (7.27)$$

Además, el sistema está dotado de un sistema de control cuya ley viene dada por

$$F_{c,in} = F_{c,in}^{base} + K_p \cdot (T_r - T_{sp}) \quad (7.28)$$

y, considerando el modelo de mezcla perfecta ($T_r = T_{out}$) quedaría

$$F_{c,in} = F_{c,in}^{base} + K_p \cdot (T_{out} - T_{sp}) \quad (7.29)$$

No obstante, no se puede introducir cualquier caudal al condensador. En primer lugar, no se puede introducir un caudal negativo, esto es, el mínimo valor que puede tomar $F_{c,in}$ es cero. Por otro lado, el diámetro de la tubería restringe también el caudal máximo $F_{c,in}^{max}$ por lo que

$$0 \leq F_{c,in} \leq F_{c,in}^{max} \quad (7.30)$$

Resumen de ecuaciones

El modelo sería el formado por las ecuaciones (7.3), (7.12), (7.13), (7.14), (7.23), (7.25), (7.27), (7.29) y (7.30), en donde las variables del sistema son las concentraciones y la temperatura del medio de reacción —que son iguales a las de la corriente de salida— y el caudal de vapor que se alimenta al condensador. A modo de resumen, el modelo es el formado por las siguientes ecuaciones:

1. Balance de materia global al condensador:

$$F_{c,in} - F_{c,out} = 0 \quad (7.31)$$

2. Balance de reactivo al reactor:

$$\frac{dC_{out}^R}{dt} = \frac{1}{m_r} (C_{in}^R \cdot F_{in} - C_{out}^R \cdot F_{out} - r \cdot m_r) \quad (7.32)$$

3. Balance de producto al reactor:

$$\frac{dC_{out}^P}{dt} = \frac{1}{m_r} (C_{in}^P \cdot F_{in} - C_{out}^P \cdot F_{out} + r \cdot m_r) \quad (7.33)$$

4. Balance de materia global al reactor:

$$F_{in} - F_{out} = 0 \quad (7.34)$$

5. Balance de energía:

$$\begin{aligned} \frac{dT_{out}}{dt} = \frac{1}{m_r \cdot C_p} (F_{in} \cdot C_p \cdot T_{in} - F_{out} \cdot C_p \cdot T_{out} - \\ - F_{c,in} \cdot q_{vap} - q_r \cdot m_r \cdot r) \end{aligned} \quad (7.35)$$

6. Cinética química (velocidad de reacción):

$$r = k \cdot C_{out}^R \quad (7.36)$$

7. Ecuación de Arrhenius:

$$k = k_o \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{R \cdot T_{out}}\right) \quad (7.37)$$

8. Ley de control:

$$F_{c,in} = F_{c,in}^{base} + K_p \cdot (T_{out} - T_{sp}) \quad (7.38)$$

9. Restricción de la ley de control:

$$0 \leq F_{c,in} \leq F_{c,in}^{max} \quad (7.39)$$

7.3 m-files

Modelo del cambiador

```
function d = reactor_TC(t,x)

CoutR = x(1); % Concentracion de reactivo a la salida (kg/kg)
CoutP = x(2); % Concentracion de producto a la salida (kg/kg)
Tout = x(3); % Temperatura a la salida (K)

global Fin mr Cin Tin qr qvap Cp k0 Ea R Tsp Kp Fcinmax Fcinbase;

% Ley de control
Fcin = Fcinbase + Kp*(x(3) - Tsp);
% Restriccion de la ley de control
if Fcin > Fcinmax % Por encima del maximo
    Fcin = Fcinmax;
end
if Fcin < 0 % Caudal negativo
    Fcin = 0;
end

% Ecuacion de Arrhenius
k = k0*exp(-Ea/(R*Tout));

% Velocidad de reaccion
r = k*CoutR;

%Balances de materia al reactor:
Fout = Fin;
d(1,1) = (1/mr)*(Fin*Cin - Fout*CoutR - r*mr);
d(2,1) = (1/mr)*(-Fout*CoutP + r*mr);
%Balance de materia al condensador:
Fcout = Fcin;
%Balance de energia al reactor:
d(3,1)=(1/(mr*Cp))*(Fin*Cp*Tin - Fout*Cp*Tout - Fcin*qvap - r*mr*qr);
```

Cuerpo principal del programa

```
clear all;
close all;
clc;

global Fin mr Cin Tin qr qvap Cp k0 Ea R Tsp Kp Fcinmax Fcinbase;

%Especificaciones del problema:
Fin = 900; % Caudal de entrada (kg/h)
mr = 1100; % Masa en el reactor (kg)
Cin = 0.5; % Concentracion en la alimentacion (kg/kg)
Tin = 330; % Temperatura de la alimentacion (K)
qr = -1400e3; % Calor de reaccion (J/kg)
```

Simulación dinámica

```
qvap = 637e3; % Calor de vaporizacion (J/kg)
Cp = 3.14e3; % Calor especifico (J/kg K)
k0 = 7.08e10; % Factor preexponencial (1/h)
Ea = 76200e3; % Energia de activacion (J/mol)
R = 8.314e3; % Constante de los gases (J/mol K)
Tsp = 360; % Set point de temperatura (K)
Kp = 30; % Constante del controlador (kg/h K)
Fcinmax = 1000; % Caudal maximo al condensador (kg/h)
Fcinbase = 330; % Caudal de base al condensador (kg/h)

% Parametros del sistema
COR = 0.25; % Concentracion inicial de reactivo en el reactor (kg/kg)
COP = 0; % Concentracion inicial de producto en el reactor (kg/kg)
T0 = 330; % Temperatura inicial del reactor (K)

time = [0 10]; % Intervalo de calculo en horas
x0 = [COR COP T0]; % Condiciones iniciales de integracion

[t x] = ode45(@reactor_TC,time,x0); % Metodo de integracion

% Calculo de Fcin para su representacion

T = x(:,3);

for i = 1:length(T)
    Fcin(i) = Fcinbase + Kp*(T(i) - Tsp);
    if Fcin(i) > Fcinmax
        Fcin(i) = Fcinmax;
    end
    if Fcin(i) < 0
        Fcin(i) = 0;
    end
end

figure
subplot(2,2,1),plot(t,x(:,3),'r','linewidth',2)
hold on
plot([t(1) t(length(t))],[Tsp Tsp],'r')
hold off
title('Temperatura en el reactor')
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Temperatura (K)')
subplot(2,2,2),plot(t,x(:,1),'g','linewidth',2)
title('Concentracion de reactivo')
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Concentracion (kg/kg)')
subplot(2,2,3),plot(t,x(:,2),'m','linewidth',2)
title('Concentracion de producto')
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Concentracion (kg/kg)')
subplot(2,2,4),plot(t,Fcin,'b','linewidth',2)
title('Caudal al condensador')
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Caudal (kg/h)')
```

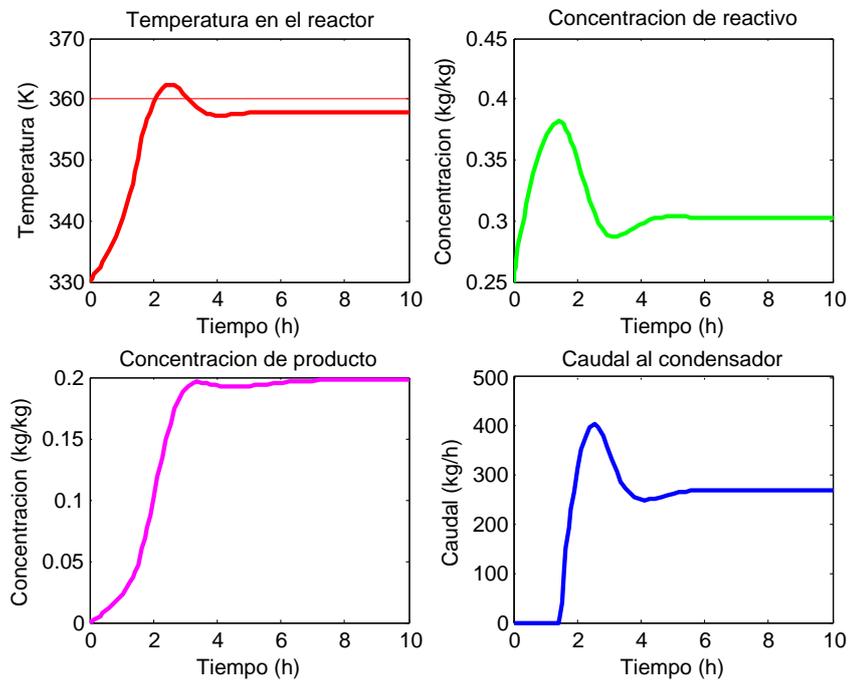


Figura 7.2: Evolución temporal de las variables del sistema.

7.4 Simulación

En la Figura 7.2 se ha representado la evolución temporal de la temperatura en el reactor (T_r), de las concentraciones de reactivo y producto (C_r^R y C_r^P) y del caudal alimentado al condensador ($F_{c,in}$). Adicionalmente, en la evolución de la temperatura del reactor se ha añadido el punto de consigna de la temperatura (T_{sp}). Es de resaltar la evolución de la temperatura que nunca llega a alcanzar el punto de consigna de temperatura ya que, al tratarse de un controlador de tipo proporcional, siempre tendrá error en régimen permanente.

En las figuras 7.3 y 7.4 se muestra la respuesta del sistema frente a un escalón en la corriente de alimentación al reactor (F_{in} pasa de 900 a 1100 kg/h) y en el punto de consigna (T_{sp} de 360 a 355°C), respectivamente. En el segundo caso, puesto que disminuye la temperatura en el reactor, también disminuye la velocidad de reacción, por lo que aumenta la concentración de reactivo y disminuye la de producto.

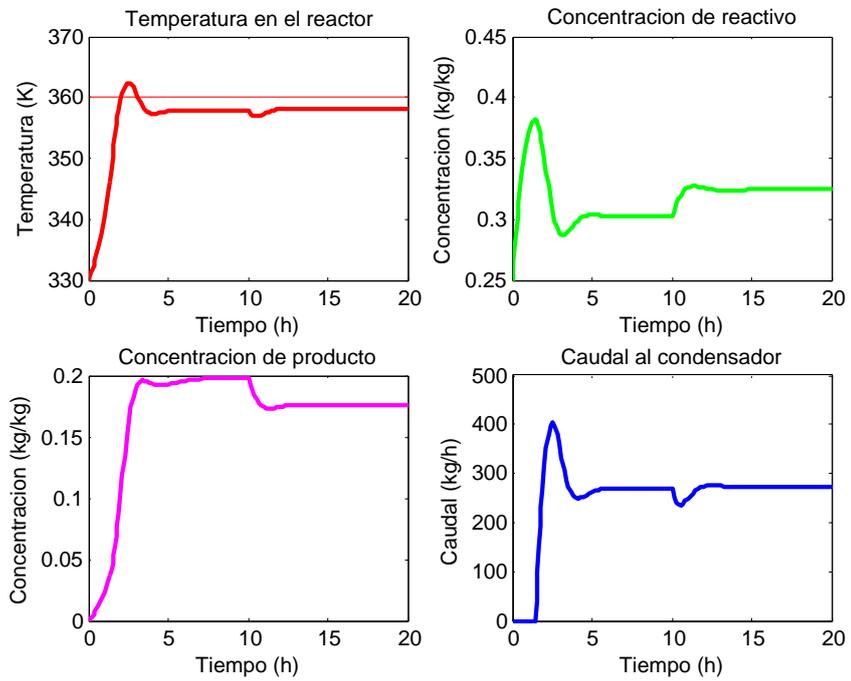


Figura 7.3: Salto escalón en el caudal de la corriente de alimentación.

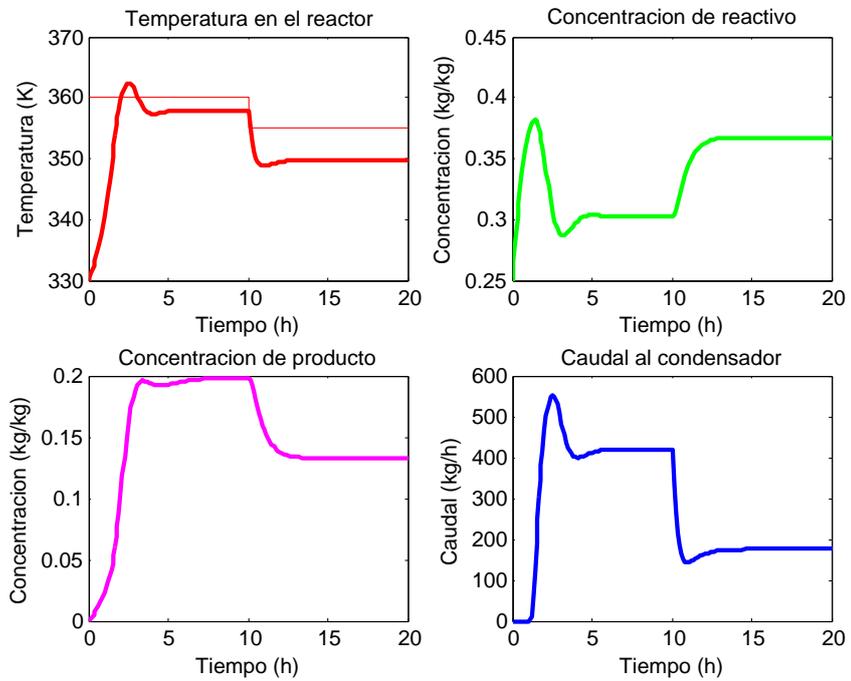


Figura 7.4: Salto escalón en el punto de consigna de la temperatura.

Capítulo 8

Reactor con control de nivel

8.1 Enunciado

En una planta de proceso se fabrica un determinado producto B a partir del reactivo A mediante la reacción:



Se trata de una reacción exotérmica cuya entalpía de reacción es de -6.500 cal/mol B que, además, sigue una cinética de primer orden con respecto al reactivo A. Esta reacción tiene una constante de velocidad de $0,125 \text{ min}^{-1}$ a una temperatura de 320 K , rigiéndose su valor a otras temperaturas mediante

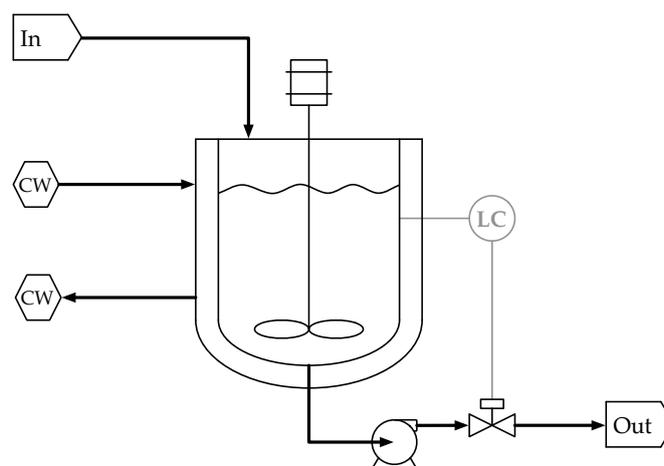


Figura 8.1: Reactor CSTR con camisa de refrigeración y control de nivel.

la ecuación de Arrhenius:

$$k = k_{ref} \cdot \exp \left[-\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_d} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right]$$

en donde la energía de activación es de 9.500 cal/mol. Tómesese como constante de los gases perfectos (R) el valor de 1,9872 cal/mol · K.

Dicha reacción tiene lugar en un reactor de tanque agitado (mostrado en la figura) que dispone de una camisa para la refrigeración ya que, a altas temperaturas, el producto B se descompone. La camisa de refrigeración, en cuyo interior se puede considerar mezcla perfecta, tiene un parámetro UA para el intercambio de calor de 75.000 cal/min · K y un volumen de 4.000 litros.

Como refrigerante se circulan 50 l/min de agua a una temperatura de 293 K. El agua tiene un calor específico de 1.000 cal/kg · K y una densidad de 1 kg/l. Ambas propiedades pueden considerarse independientes de la temperatura.

Al reactor se alimenta una única corriente que tiene una concentración de 4 mol/l de A a una temperatura de 305 K y un caudal volumétrico de 1.000 l/min. Dicha corriente tiene una densidad de 1,1 kg/l y un calor específico de 1.200 cal/kg · K que, al igual que para el caso del agua, pueden considerarse independientes de la temperatura y de la composición. El reactor tiene forma cilíndrica con un radio de 2 m.

El reactor dispone de un control de nivel de tipo PI que se rige por la ecuación

$$F_{out} = F_{base} + K_c \cdot \left[e + \frac{1}{\tau_i} \int_0^t e(\tau) \cdot d\tau \right]$$

en donde F_{out} es el caudal de salida en l/min, $F_{base} = 750$ l/min es el caudal base de salida, $K_c = 2500$ L/min · m es la ganancia del controlador, $\tau_i = 50$ min es la constante de la acción integral y e es el error en el nivel que se obtiene como $e = h - h_{ref}$, siendo h_{ref} el punto de consigna del nivel.

La bomba que impulsa la corriente de salida puede entregar como máximo 1.500 l/min y como mínimo, para que no se dañe, debe circularse un caudal mínimo de 100 l/min.

Se desea simular el comportamiento de este reactor desde su puesta en marcha hasta que se alcanza el régimen estacionario. Inicialmente el refrigerante de la camisa y el contenido del reactor están en equilibrio térmico a una temperatura de 305 K. El nivel inicial en el reactor es de 2 m y no hay presente nada de A ni de B.

Nota: A la hora de plantear el sistema de ecuaciones diferenciales se recomienda la utilización de una variable intermedia I_e que representa

la integral del error de modo que

$$Ie = \int_0^t e(\tau) \cdot d\tau \iff \frac{dIe}{dt} = e(t)$$

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo dinámico del equipo indicando las suposiciones e hipótesis adoptadas, los volúmenes de control escogidos y el tipo de ecuaciones empleadas: conservación, constitutivas, etc.
2. Implementar en Matlab el modelo del equipo, sin tener en cuenta el balance de energía, suponiendo que la operación es de tipo isoterma a 300 K. Representar la evolución temporal de las concentraciones de A y B, así como de la altura de líquido en el depósito.
3. Implementar en Matlab el modelo completo del equipo. Representar la evolución de las temperaturas, tanto de la camisa como del reactor.
4. Analizar utilizando Matlab el comportamiento del sistema completo cuando se introduce una perturbación del +20% en el caudal de alimentación. Representar la evolución temporal del caudal de salida del reactor y de la altura de líquido en el reactor.

Nota: Ejercicio de examen, convocatoria de 23 de septiembre de 2010.

8.2 Modelo matemático

Leyenda

F_{in} : Caudal de entrada al reactor (l/min).

F_{out} : Caudal de salida del reactor (l/min).

F_{in}^{cw} : Caudal de entrada de agua de refrigeración (l/min).

F_{out}^{cw} : Caudal de salida de agua de refrigeración (l/min).

T_{in} : Temperatura de entrada al reactor (K).

T_d : Temperatura en el reactor (K).

T_{in}^{cw} : Temperatura de entrada a la camisa (K).

T_j : Temperatura en la camisa (K).

- C_{in}^A : Concentración de A en la alimentación (mol/l).
 C_{in}^B : Concentración de B en la alimentación (mol/l).
 C^A : Concentración de A en el reactor (mol/l).
 C^B : Concentración de B en el reactor (mol/l).
 ν^A : Coeficiente estequiométrico de A (adimensional).
 ν^B : Coeficiente estequiométrico de B (adimensional).
 V_d : Volumen de líquido en el reactor (l).
 V_j : Volumen de la camisa (l).
 h : Altura de líquido en el reactor (m).
 A_d : Sección del depósito (m²).
 r : Velocidad de reacción (mol/l · min).
 k_{ref} : Constante de velocidad de referencia (min⁻¹).
 k : Constante de velocidad de a otra temperatura (min⁻¹).
 T_{ref} : Temperatura de referencia de k_{ref} (K).
 E_a : Energía de activación (cal/mol).
 ΔH_r : Entalpía de reacción (cal/mol).
 R : Constante de los gases perfectos (cal/mol · K).
 N_A : Número de moles de A en el reactor (mol).
 N_B : Número de moles de B en el reactor (mol).
 H_d : Entalpía en el depósito (cal).
 H_j : Entalpía en la camisa (cal).
 ρ : Densidad de la corriente del reactor (kg/l).
 ρ^{cw} : Densidad del agua de refrigeración (kg/l).
 C_p : Calor específico de la corriente del reactor (cal/mol · K).
 C_p^{cw} : Calor específico del agua de refrigeración (cal/mol · K).
 Q : Calor intercambiado (cal/min).
 UA : Coeficiente de transmisión de calor (cal/min · K).

K_L : Ganancia del controlador de nivel (l/min · m).

τ_i : Constante integral del controlador (min).

e : Error en el nivel del reactor (m).

Ie : Integral del error de nivel (m · min).

F_{base} : Caudal base de salida del controlador (l/min).

h_{ref} : Referencia de altura del controlador (m).

F_{out}^{max} : Caudal de salida máximo (l/min).

F_{out}^{min} : Caudal de salida mínimo (l/min).

Hipótesis asumidas

1. Se supondrá que en el medio de reacción hay mezcla perfecta, por lo que no hay gradientes de ninguna propiedad física y, por tanto, las condiciones de la corriente de salida son las mismas que las del interior del reactor.
2. Se supondrá que en la camisa hay mezcla perfecta, por lo que la temperatura en cualquier punto de la camisa es la misma y la de la corriente de salida también.
3. No se considerarán propiedades de mezcla en el medio de reacción, por lo que serán independientes de la composición.
4. Se asumirán propiedades físicas —calores específicos y densidades— independientes de la temperatura.
5. Se tomarán como volúmenes de control el líquido acumulado en el reactor —con una entrada y una salida de materia— y la camisa de refrigeración —también con una entrada y una salida de materia— ambos relacionados mediante el calor que intercambian.

Balances de materia

Las corrientes de entrada y salida del reactor presentan tres componentes, el reactivo A, el producto B y el disolvente en el que se encuentran, por lo que se realizarán dos balances de materia por componentes —uno para A

y otro para B— y otro balance de tipo global. Los balances de materia por componentes quedarían

$$\frac{dN_A}{dt} = F_{in} \cdot C_{in}^A - F_{out} \cdot C^A + \nu^A \cdot r \cdot V_d \quad (8.1)$$

$$\frac{dN_B}{dt} = F_{in} \cdot C_{in}^B - F_{out} \cdot C^B + \nu^B \cdot r \cdot V_d \quad (8.2)$$

en donde los coeficientes estequiométricos son $\nu^A = -2$ y $\nu^B = 1$ (de acuerdo con la reacción del enunciado).

El balance de materia global, puesto que la densidad es independiente de la composición, se puede realizar en volumen quedando de la forma

$$\frac{dV_d}{dt} = F_{in} - F_{out} \quad (8.3)$$

No obstante, puesto que se trata de un reactor de forma cilíndrica y, por tanto, con sección constante se tiene que

$$\frac{dV_d}{dt} = \frac{d}{dt}(A_d \cdot h) = A_d \cdot \frac{dh}{dt} \quad (8.4)$$

por lo que

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{A_d}(F_{in} - F_{out}) \quad (8.5)$$

En este punto debe tenerse cuidado ya que los caudales están expresados en l/min y el área en m², por lo que se deberán aplicar los correspondientes coeficientes de conversión de unidades.

En la camisa se tiene un único componente, el agua de refrigeración, por lo que con un único balance es suficiente. Al igual que en el caso del reactor, puesto que la densidad es independiente de la temperatura, el balance se puede realizar en volumen, por lo que

$$\frac{dV_j}{dt} = F_{in}^{cw} - F_{out}^{cw} \quad (8.6)$$

pero como el volumen de la camisa es constante

$$V_j = cte \implies \frac{dV_j}{dt} = 0 \implies F_{in}^{cw} = F_{out}^{cw} \quad (8.7)$$

Balances de energía

Si se realiza un balance de energía al líquido en el reactor, considerando el calor como saliente del reactor y entrante a la camisa, se tiene

$$\frac{dH_d}{dt} = F_{in} \cdot h_{in} - F_{out} \cdot h_{out} - \Delta H_r \cdot r \cdot V_d - Q \quad (8.8)$$

que teniendo en cuenta las entalpías específicas de las corrientes de entrada y salida quedaría

$$\frac{dH_d}{dt} = F_{in} \cdot \rho \cdot C_p \cdot T_{in} - F_{out} \cdot \rho \cdot C_p \cdot T_d - \Delta H_r \cdot r \cdot V_d - Q \quad (8.9)$$

Del mismo modo, el balance de materia a la camisa, considerando el calor intercambiado como entrante a la camisa, quedaría

$$\frac{dH_j}{dt} = F_{in}^{cw} \cdot h_{in}^{cw} - F_{out}^{cw} \cdot h_{out}^{cw} + Q \quad (8.10)$$

que, con las entalpías específicas de la entrada y la salida, se puede reescribir como

$$\frac{dH_j}{dt} = F_{in}^{cw} \cdot \rho^{cw} \cdot C_p^{cw} \cdot T_{in}^{cw} - F_{out}^{cw} \cdot \rho^{cw} \cdot C_p^{cw} \cdot T_j + Q \quad (8.11)$$

Puesto que el volumen de la camisa es constante a lo largo del tiempo, al igual que la densidad y el calor específico se tiene que

$$V_j = cte \implies \frac{dH_j}{dt} = \frac{d}{dt}(V_j \cdot \rho^{cw} \cdot C_p^{cw} \cdot T_j) = V_j \cdot \rho^{cw} \cdot C_p^{cw} \cdot \frac{dT_j}{dt} \quad (8.12)$$

por lo que el balance de energía a la camisa queda

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{V_j \cdot \rho^{cw} \cdot C_p^{cw}} [F_{in}^{cw} \cdot \rho^{cw} \cdot C_p^{cw} \cdot T_{in}^{cw} - F_{out}^{cw} \cdot \rho^{cw} \cdot C_p^{cw} \cdot T_j + Q] \quad (8.13)$$

Ecuaciones auxiliares

- Las concentraciones en el medio de reacción vienen dadas por:

$$C^A = \frac{N_A}{V_d} \quad ; \quad C^B = \frac{N_B}{V_d} \quad (8.14)$$

- La temperatura en el medio de reacción se obtiene a partir de la entalpía:

$$T_d = \frac{H_d}{V_d \cdot \rho \cdot C_p} \quad (8.15)$$

- El volumen en el reactor viene dado por:

$$V_d = A_d \cdot h \quad (8.16)$$

en donde deben tenerse en cuenta las unidades, ya que tanto el área como la altura están en unidades de metros mientras que el volumen se expresa en litros.

- La velocidad de la reacción puesto que se trata de una cinética de primer orden con respecto al reactivo A quedaría

$$r = k \cdot C^A \quad (8.17)$$

siendo la constante de velocidad

$$k = k_{ref} \cdot \exp \left[-\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_d} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (8.18)$$

esta ecuación se obtiene de dividir la ecuación de Arrhenius a dos temperaturas diferentes, a T_d y a T_{ref} , de modo que se puede determinar la constante de velocidad k a una cierta temperatura T_d a partir de una constante conocida k_{ref} a otra temperatura T_{ref} también conocida.

- El calor intercambiado, que se supondrá como saliente del medio de reacción y entrante a la camisa, se expresa mediante

$$Q = UA \cdot (T_d - T_j) \quad (8.19)$$

- El caudal de salida viene impuesto por el controlador de nivel, cuya ley de control —dada en el enunciado y de tipo PI— es

$$F_{out} = F_{base} + K_c \cdot \left[e + \frac{1}{\tau_i} Ie \right] \quad (8.20)$$

en donde

$$e = h - h_{ref} \quad (8.21)$$

$$Ie = \int_0^t e(\tau) d\tau \quad \iff \quad \frac{dIe}{dt} = e \quad (8.22)$$

Sin embargo, debe tenerse en cuenta que la bomba de impulsión de la salida entrega un caudal máximo F_{out}^{max} y debe tener un caudal mínimo F_{out}^{min} por lo que el caudal de salida de la ley de control queda limitado de la forma

$$F_{out}^{min} \leq F_{out} \leq F_{out}^{max} \quad (8.23)$$

8.3 m-files

8.3.1 Sin considerar los balances de energía

Modelo del reactor

```
function d = reactor_LC1(t,x)
```

Simulación dinámica

```
global CAin Fin T kref Tref Ea nuA nuB Ad...
    Foutbias KL tau_i href Foutmax Foutmin rho R;

% Asignacion de variables x = [NA NB h Hd Tj]
NA = x(1); % Moles de A en el deposito en mol
NB = x(2); % Moles de B en el deposito en mol
h = x(3); % Altura de liquido en el deposito en m
Ie = x(4); % Integral del error

% Ecuaciones auxiliares y calculos previos
Vd = h*Ad*1000; % Volumen del deposito en L
CA = NA/Vd; % Concentracion de A en el deposito en mol/L
CB = NB/Vd; % Concentracion de B en el deposito en mol/L
k = kref*exp((-Ea/R)*(1/T - 1/Tref)); % Cte de velocidad en 1/min
r = k*CA; % Velocidad de reaccion en kmol/m3.min

% Control de nivel
e = h - href; % Error en el nivel en m
Fout = KL*(e + Ie/tau_i); % Caudal de salida en m3/min
% Restricciones de maximo y minimo a la ley de control
if Fout < Foutmin
    Fout = Foutmin;
end;
if Fout > Foutmax
    Fout = Foutmax;
end;

% Ecuaciones diferenciales

% dNA/dt: Balance de materia de A en el deposito
d(1,1) = Fin*CAin - Fout*CA + nuA*r*Vd;

% dNB/dt: Balance de materia de B en el deposito
d(2,1) = -Fout*CB + nuB*r*Vd;

% dVd/dt: Balance de materia global en el deposito
d(3,1) = (Fin - Fout)/(Ad*1000);

% dIe/dt: Integral del error de nivel
d(4,1) = e;
```

Cuerpo principal del programa

```
close all;
clear all;
clc;

global CAin Fin T kref Tref Ea nuA nuB Ad...
    Foutbias KL tau_i href Foutmax Foutmin rho R;

% PARAMETROS DEL SISTEMA
```

Simulación dinámica

```
% Corriente de alimentacion
CAin = 4;          % Concentracion A alimentacion en mol/L
Fin = 1000;       % Corriente de entrada en L/min
Tin = 305;        % Temp. alimentacion en K

% Cinetica de la reaccion
kref = 0.125;     % Cte. velocidad a 320 K en 1/min
Tref = 320;       % Temp. Referencia de velocidad en K
Ea = 9500;        % Energia Activacion en cal/mol
nuA = -2;         % Coef. estequiometrico de A (adim)
nuB = 1;          % Coef. estequiometrico de B (adim)

% Dimensiones
Ad = 12;          % Area del deposito en m2

% Parametros del controlador
KL = 2500;        % Ganancia del controlador en L/min.m
tau_i = 50;       % Tiempo integral en min
href = 4;         % Altura de referencia en m
Foutbias = 750;   % Caudal base del controlador en L/min
Foutmax = 1500;   % Caudal maximo de la bomba en L/min
Foutmin = 100;    % Caudal minimo de la bomba en L/min

% Parametros fisicos
rho = 1.100;      % Densidad de la corriente en kg/L
R = 1.9872;       % Cte. Gases en cal/mol.K
T = 305;          % Temperatura de operacion en K

% INTEGRACION DEL MODELO

% Condiciones iniciales en el reactor
h0 = 3.9;         % Altura en el deposito en m
CA0 = 0;          % Concentracion de A en el deposito en mol/L
CB0 = 0;          % Concentracion de B en el deposito en mol/L

% Vector de condiciones iniciales x0 = [NA0 NB0 h0 Hd0 Tj0]
Vd0 = h0*Ad*1000; % Volumen deposito en L
NA0 = Vd0*CA0;    % Moles de A
NB0 = Vd0*CB0;    % Moles de B
Ie0 = 5;          % Integral del error inicial
x0 = [NA0 NB0 h0 Ie0];

% Integracion del sistema
tspan = [0 400]; % Tiempo de integracion en min
[t,x] = ode15s('reactor_LC1',tspan,x0);

% Calculo de las concentraciones
Vd = x(:,3)*Ad*1000; % Volumen en el deposito en L
C(:,1) = x(:,1)./Vd;
C(:,2) = x(:,2)./Vd;

% Calculo del caudal de salida
```

```

for i = 1:length(t)
    h = x(i,3);
    Ie = x(i,4);
    e = h - href; % Error en el nivel en m
    Fout(i) = KL*(e + Ie/tau_i); % Caudal de salida en m3/min
    % Restricciones de maximo y minimo a la ley de control
    if Fout(i) < Foutmin
        Fout(i) = Foutmin;
    end;
    if Fout(i) > Foutmax
        Fout(i) = Foutmax;
    end;
end

figure
subplot(2,2,1)
plot(t,x(:,3),'r','linewidth',2)
hold on
plot([t(1) t(length(t))],[href href],'r')
hold off
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Altura (m)')
title('Nivel en el reactor (h)')

subplot(2,2,2)
plot(t,C,'linewidth',2)
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Concentracion (mol/L)')
legend('C_A','C_B')
title('Concentraciones en el reactor')

subplot(2,2,3)
plot(t,Fout,'color',[1 0.5 0],'linewidth',2)
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Caudal (L/min)')
title('Caudal de salida (F_{out})')

subplot(2,2,4)
plot(tspan,[T T],'r','linewidth',2)
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Temperatura (K)')
title('Temperatura en el deposito')

```

8.3.2 Con balances de energía

Modelo del reactor

```

function d = reactor_LC2(t,x)

global CAin Fin Tin FinCW TinCW kref Tref Ea DH nuA nuB UA Vj Ad...
    KL tau_i href Foutmax Foutmin Cp CpCW rho rhoCW R;

```

Simulación dinámica

```
% Asignacion de variables x = [NA NB h Hd Tj]
NA = x(1); % Moles de A en el deposito en mol
NB = x(2); % Moles de B en el deposito en mol
h = x(3); % Altura de liquido en el deposito en m
Hd = x(4); % Entalpia en el deposito en cal
Tj = x(5); % Temperatura en la camisa en K
Ie = x(6); % Integral del error

% Ecuaciones auxiliares y calculos previos
Vd = h*Ad*1000; % Volumen del deposito en L
CA = NA/Vd; % Concentracion de A en el deposito en mol/L
CB = NB/Vd; % Concentracion de B en el deposito en mol/L
Td = Hd/(rho*Vd*Cp); % Temp en el deposito en K
k = kref*exp((-Ea/R)*(1/Td - 1/Tref)); % Cte de velocidad en 1/min
r = k*CA; % Velocidad de reaccion en kmol/m3.min
Q = UA*(Td-Tj); % Calor intercambiado en cal/min

% Control de nivel
e = h - href; % Error en el nivel en m
Fout = KL*(e + Ie/tau_i); % Caudal de salida en m3/min
% Restricciones de maximo y minimo a la ley de control
if Fout < Foutmin
    Fout = Foutmin;
end;
if Fout > Foutmax
    Fout = Foutmax;
end;

% Ecuaciones diferenciales

% dNA/dt: Balance de materia de A en el deposito
d(1,1) = Fin*CAin - Fout*CA + nuA*r*Vd;

% dNB/dt: Balance de materia de B en el deposito
d(2,1) = -Fout*CB + nuB*r*Vd;

% dVd/dt: Balance de materia global en el deposito
d(3,1) = (Fin - Fout)/(Ad*1000);

% dHd/dt: Balance de energia en el deposito
d(4,1) = Fin*rho*Cp*Tin - Fout*rho*Cp*Td - DH*r*Vd - Q;

% dTj/dt: Balance de energia en la camisa
d(5,1) = (FinCW*rhoCW*CpCW*(TinCW - Tj) + Q)/(rhoCW*CpCW*Vj);

% dIe/dt: Integral del error de nivel
d(6,1) = e;
```

Cuerpo principal del programa

```
close all;
clear all;
```

Simulación dinámica

```
clc;

global CAin Fin Tin FinCW TinCW kref Tref Ea DH nuA nuB UA Vj Ad...
    Foutbias KL tau_i href Foutmax Foutmin Cp Cpcw rho rhocw R;

% PARAMETROS DEL SISTEMA

% Corriente de alimentacion
CAin = 4;          % Concentracion A alimentacion en mol/L
Fin = 1000;       % Corriente de entrada en L/min
Tin = 305;        % Temp. alimentacion en K

% Agua de refrigeracion
FinCW = 50;       % Corriente de entrada en L/min
TinCW = 293;      % Temperatura de entrada en K

% Cinetica de la reaccion
kref = 0.125;     % Cte. velocidad a 320 K en 1/min
Tref = 320;       % Temp. Referencia de velocidad en K
Ea = 9500;        % Energia Activacion en cal/mol
DH = -6500;       % Entalpia de reaccion en cal/mol B
nuA = -2;         % Coef. estequiometrico de A (adim)
nuB = 1;          % Coef. estequiometrico de B (adim)

% Intercambio de calor
UA = 75000;       % Transmision de calor cal/min.K

% Dimensiones
Vj = 4000;        % Volumen de la camisa en L
Ad = 12;          % Area del deposito en m2

% Parametros del controlador
KL = 2500;        % Ganancia del controlador en L/min.m
tau_i = 50;       % Tiempo integral en min
href = 4;         % Altura de referencia en m
Foutbias = 750;  % Caudal base del controlador en L/min
Foutmax = 1500;  % Caudal maximo de la bomba en L/min
Foutmin = 100;   % Caudal minimo de la bomba en L/min

% Parametros fisicos
Cp = 1200;        % Calor especifico de la alimentacion en cal/kg.K
Cpcw = 1000;      % Calor especifico del CW en cal/kg.K
rho = 1.100;      % Densidad de la corriente en kg/L
rhocw = 1;        % Densidad del CW en kg/L
R = 1.9872;       % Cte. Gases en cal/mol.K

% INTEGRACION DEL MODELO

% Condiciones iniciales en el reactor
Td0 = 305;        % Temperatura del deposito en K
Tj0 = 305;        % Temperatura de la camisa en K
h0 = 3.9;         % Altura en el deposito en m
CA0 = 0;          % Concentracion de A en el deposito en mol/L
CB0 = 0;          % Concentracion de B en el deposito en mol/L
```

```

% Vector de condiciones iniciales x0 = [NA0 NB0 h0 Hd0 Tj0]
Vd0 = h0*Ad*1000;      % Volumen deposito en L
NA0 = Vd0*CA0;        % Moles de A
NB0 = Vd0*CB0;        % Moles de B
Hd0 = rho*Vd0*Cp*Td0; % Entalpia deposito en cal
Ie0 = 5;              % Integral del error inicial
x0 = [NA0 NB0 h0 Hd0 Tj0 Ie0];

% Integracion del sistema
tspan = [0 400]; % Tiempo de integracion en min
[t1,x1] = ode15s('reactor_LC2',tspan,x0);

t = t1;
x = x1;

% Calculo de las concentraciones
Vd = x(:,3)*Ad*1000; % Volumen en el deposito en L
C(:,1) = x(:,1)./Vd;
C(:,2) = x(:,2)./Vd;

% Calculo del caudal de salida

for i = 1:length(t)
    h = x(i,3);
    Ie = x(i,6);
    e = h - href; % Error en el nivel en m
    Fout(i) = KL*(e + Ie/tau_i); % Caudal de salida en m3/min
    % Restricciones de maximo y minimo a la ley de control
    if Fout(i) < Foutmin
        Fout(i) = Foutmin;
    end;
    if Fout(i) > Foutmax
        Fout(i) = Foutmax;
    end;
end

% Calculo de la temperatura en el deposito
Td = x(:,4)./(rho*Vd*Cp);

figure
subplot(2,2,1)
plot(t,x(:,3),'r','linewidth',2)
hold on
plot([t(1) t(length(t))],[href href],'r')
hold off
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Altura (m)')
title('Nivel en el reactor (h)')

subplot(2,2,2)
plot(t,C,'linewidth',2)
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Concentracion (mol/L)')

```

```
legend('C_A','C_B')
title('Concentraciones en el reactor')

subplot(2,2,3)
plot(t,Fout,'color',[1 0.5 0],'linewidth',2)
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Caudal (L/min)')
title('Caudal de salida (F_{out})')

subplot(2,2,4)
plot(t,Td,'r','linewidth',2)
hold on
plot(t,x(:,5),'b','linewidth',2)
hold off
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Temperatura (K)')
legend('T_d','T_j')
title('Temperaturas')
```

8.4 Simulación

En la Figura 8.2 se muestra la evolución temporal del nivel en el reactor, de las concentraciones, del caudal de salida y de la temperatura en el reactor. Como era de esperar, el controlador PI es capaz de alcanzar el punto de consigna en régimen permanente sin que haya error.

Si al sistema anterior se le añaden los balances de energía se obtiene la Figura 8.3, en la que sí que aparece la evolución temporal de las temperaturas tanto de la camisa como del medio de reacción. Nótese que el resto de variables apenas se ven afectadas, salvo que la concentración de B es ligeramente superior y la de A ligeramente inferior. Esto se debe a que, al estar el medio de reacción a una temperatura mayor, la velocidad de reacción aumenta y, por tanto, aumenta la concentración de producto y disminuye la de reactivo.

Al introducir un salto escalón en el caudal de alimentación al reactor se observa una perturbación momentánea en el nivel que regresa a su valor de consigna por la acción del controlador. De nuevo, en régimen permanente, no aparece error en el nivel. Las temperaturas y las concentraciones apenas se ven afectadas, pero el caudal de salida sí que refleja claramente el escalón en el caudal de entrada.

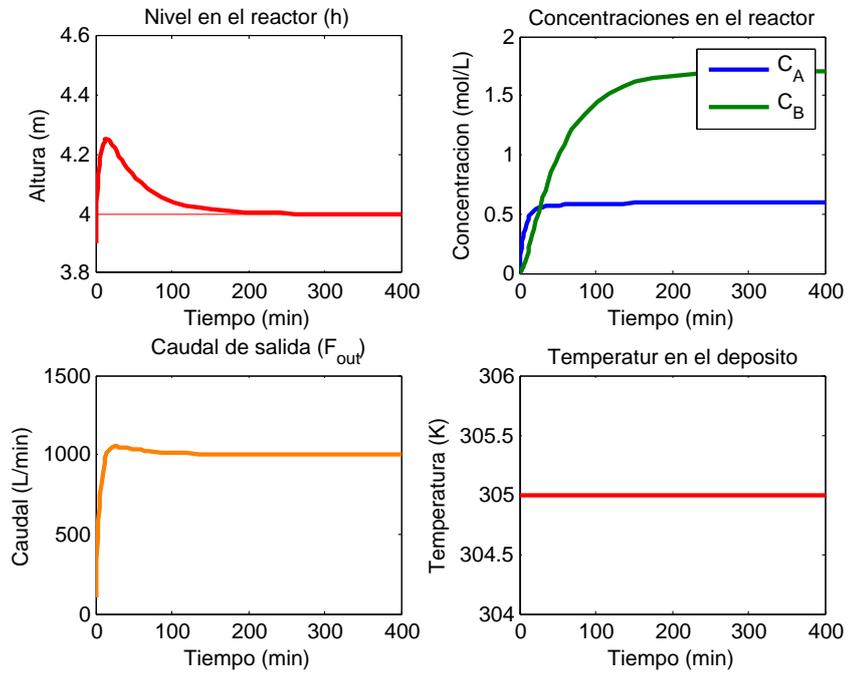


Figura 8.2: Evolución temporal sin balances de energía.

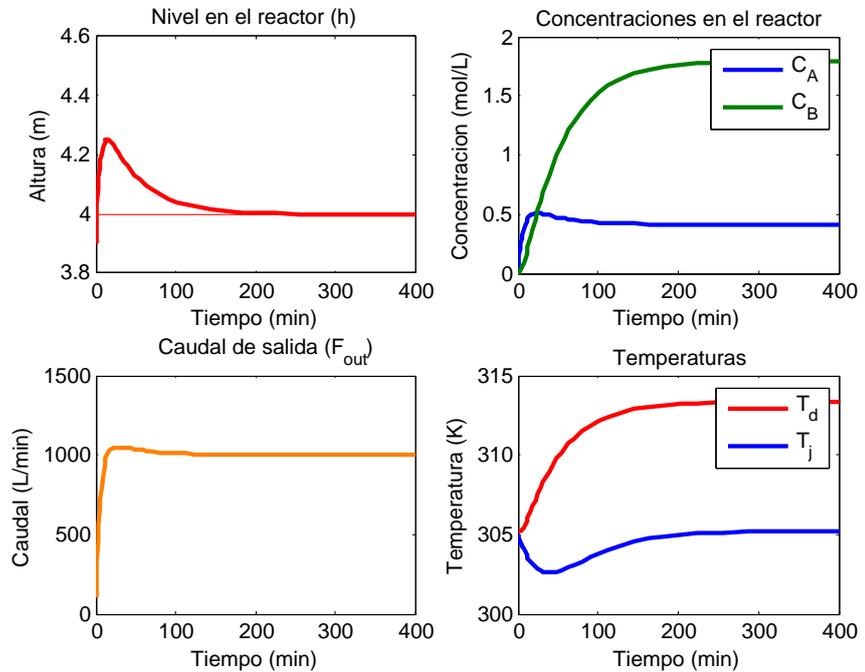


Figura 8.3: Evolución temporal con balances de energía.

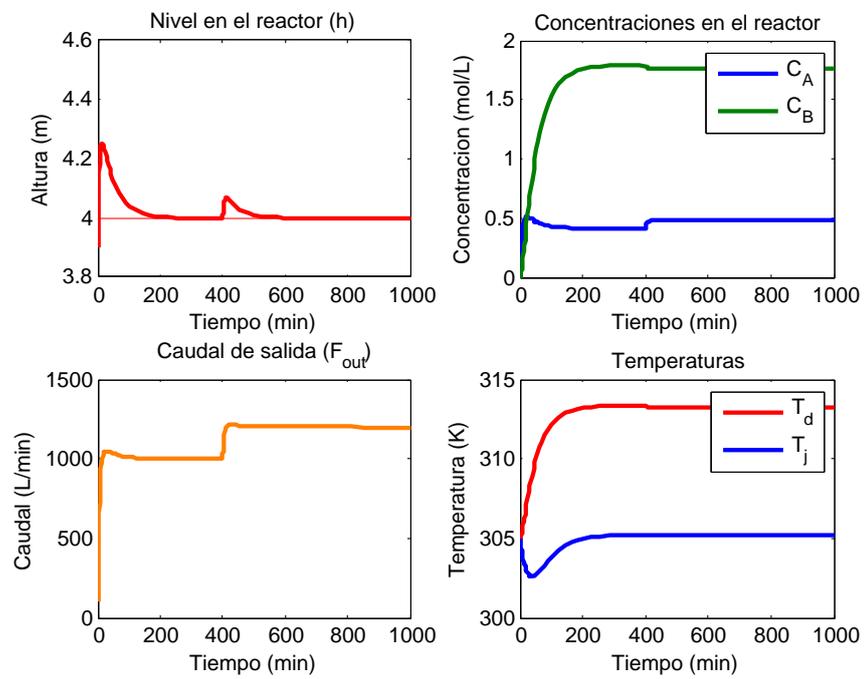


Figura 8.4: Salto escalón en el caudal de entrada.

Capítulo 9

Reactor semibatch

9.1 Enunciado

Se dispone de un reactor semicontinuo (Figura 9.1), el cual está cargado con un reactivo y al cual se alimenta el otro reactivo en continuo. Tras un periodo de reacción se produce la descarga. En este reactor tiene lugar la reacción principal: $K + LA \rightarrow LE$, con una constante de reacción k_1 . En el mismo reactor se produce una segunda reacción, no deseada, con la formación de un oligómero de K. La reacción es la siguiente: $K + K \rightarrow BP$, con una constante de reacción k_2 .

El reactor está inicialmente cargado con el reactivo LA y se alimenta el reactivo K. Ésta alimentación se corta cuando el volumen del reactor ha llegado a su máximo (reactor lleno). El tiempo de reacción termina cuando la concentración de K es $0,01 \text{ kmol/m}^3$, momento en el que se produce la descarga.

Para tener una buena conversión la reacción debe iniciarse a una temperatura de 90°C , para alcanzar esta temperatura se emplea vapor saturado a 110°C que circula por una camisa que rodea al reactor. Una vez alcanzada

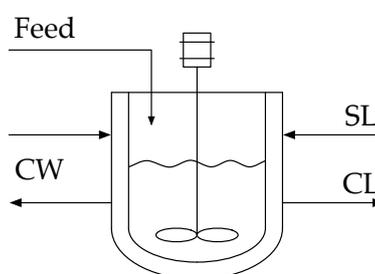


Figura 9.1: Reactor semibatch.

la temperatura inicial de reacción se comienza a alimentar el reactivo K. Dado que la reacción es exotérmica, una que vez que empieza, se corta la alimentación de vapor y se enfría con agua de refrigeración para mantener una temperatura cercana a 75°C. En el momento en que se corta la alimentación de reactivo (reactor lleno) también se corta la alimentación de refrigeración para no bajar la temperatura de reacción. Tal y como se ha indicado anteriormente, el reactor se descarga cuando la concentración del reactivo K alcanza 0,01 kmol/m³.

La cinética de la primera reacción es de segundo orden global y de primer orden respecto a cada reactivo (K y LA). La cinética de la segunda reacción es de segundo orden respecto del reactivo K. Las constantes de reacción son independientes de la temperatura.

Datos adicionales:

- Concentración de K en la alimentación: 10 kmol/m³
- Volumen total (máximo) del reactor: 10 m³
- Constante de la reacción principal: $k_1 = 1 \text{ m}^3/\text{kmol h}$
- Constante de la segunda reacción: $k_2 = 0,1 \text{ m}^3/\text{kmol h}$
- Caudal de alimentación de reactivo K: 2,5 m³/h
- Coeficiente global de transmisión de calor vapor/líquido: $U_h = 40 \text{ kcal/h m}^2 \text{ C}$
- Coeficiente global de transmisión de calor agua/líquido cuando circula el agua:
 $U_w = 60 \text{ kcal/h m}^2 \text{ C}$
- Coeficiente global de transmisión de calor agua/líquido cuando NO circula el agua:
 $U'_w = 5 \text{ kcal/h m}^2 \text{ C}$
- Entalpía de vaporización: 540 kcal/kg
- Temperatura del vapor: 110°C
- Temperatura del agua de refrigeración: 25°C
- Caudal de agua de refrigeración: 2000 kg/h
- Área de la camisa: 30 m²
- Temperatura del reactivo K: 90°C
- Calor de reacción de la primera reacción: -1000 kcal/kmol

- Calor de reacción de la segunda reacción: -700 kcal/kmol
- Densidad de todos los líquidos: 1 kg/l
- Calor específico de todos los líquidos: 1 kcal/kg C
- Volumen inicial en el reactor: 1 m^3
- Concentración inicial de LA en el reactor: 100 kmol/m^3
- Temperatura inicial en el reactor: 20°C
- Temperatura inicial de la camisa calentando: 110°C
- Temperatura inicial de la camisa enfriando: 25°C

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo dinámico del equipo indicando las suposiciones adoptadas, los volúmenes de control escogidos y el tipo de ecuaciones empleadas (conservación, constitutivas, etc.). El modelo debe incluir desde el periodo de calentamiento hasta la descarga del producto.
2. Implementar en Matlab el modelo del equipo sin tener en cuenta el balance de energía y sin incluir la descarga del reactor. Representar la evolución del volumen y las concentraciones de los cuatro componentes.
3. Implementar en Matlab el modelo completo del equipo, sin incluir la descarga del reactor. Representar la evolución del volumen y las concentraciones de los cuatro componentes, así como de las temperaturas del reactor y la camisa.

9.2 Modelo matemático

Leyenda

En la reacción están implicados cuatro especies: K, LA, LE y BP. Para simplificar la notación, se utilizará el superíndice i en aquellas variables relativas a las diferentes especies.

F_{in} : Caudal de entrada (m^3/h)

N_r^i : Número de moles de la especie i -ésima en el reactor (kmol).

- C_{in}^i : Concentración de la especie i -ésima en la alimentación (kmol/m³)
- ν_1^i : Coeficiente estequiométrico de la especie i -ésima en la primera reacción (reacción deseada).
- ν_2^i : Coeficiente estequiométrico de la especie i -ésima en la segunda reacción (reacción no deseada).
- r_1 : Velocidad de la primera reacción (kmol/m³ h).
- r_2 : Velocidad de la segunda reacción (kmol/m³ h).
- k_1 : Constante de velocidad de la primera reacción (m³/kmol h).
- k_2 : Constante de velocidad de la segunda reacción (m³/kmol h).
- V_r : Volumen de líquido en el reactor (m³).
- V_j : Volumen de la camisa del reactor (m³).
- M_r : Masa acumulada en el reactor (kg).
- M_j : Masa acumulada en la camisa (kg).
- H_r : Entalpía del líquido en el reactor (kcal).
- H_j : Entalpía del líquido en la camisa (kcal).
- h_{in} : Entalpía de la corriente de entrada (kcal/h).
- $h_{w,in}$: Entalpía del agua de refrigeración entrante (kcal/h).
- $h_{w,out}$: Entalpía del agua de refrigeración saliente (kcal/h).
- $\Delta \dot{H}_{r,1}$: Entalpía de la primera reacción (kcal/h).
- $\Delta \dot{H}_{r,2}$: Entalpía de la segunda reacción (kcal/h).
- $\Delta h_{r,1}$: Calor de reacción de la primera reacción (kcal/kmol).
- $\Delta h_{r,2}$: Calor de reacción de la segunda reacción (kcal/kmol).
- \dot{Q} : Tasa de intercambio de calor entre la camisa y el medio de reacción (kcal/h).
- U_h : Coeficiente global de transmisión de calor vapor/líquido (kcal/h m² C).
- U_w : Coeficiente global de transmisión de calor agua/líquido cuando circula el agua (kcal/h m² C).

U'_w : Coeficiente global de transmisión de calor agua/líquido cuando NO circula el agua ($\text{kcal/h m}^2 \text{C}$).

A_j : Área de intercambio camisa-reactor (m^2).

ρ : Densidad de todos los líquidos (kg/l).

C_p : Calor específico de todos los líquidos (kcal/kg C).

T_r : Temperatura del líquido en el reactor (C).

T_{in} : Temperatura de la alimentación (C).

T_j : Temperatura de la camisa (C).

$T_{w,in}$: Temperatura del agua de refrigeración entrante (C).

$T_{w,out}$: Temperatura del agua de refrigeración saliente (C).

T_h : Temperatura del vapor (C).

$F_{w,in}$: Caudal de entrada de agua de refrigeración (kg/h).

$F_{w,out}$: Caudal de salida de agua de refrigeración (kg/h).

Hipótesis asumidas

1. El reactor es un reactor de mezcla perfecta ideal por lo que en el líquido en su interior no hay gradientes de ninguna de sus propiedades.
2. Las propiedades del líquido —calor específico y densidad— se consideran independientes de la composición.
3. Se desprecia el calor necesario para el calentamiento-refrigeración de la pared entre el reactor y la camisa, considerándose despreciable su inercia térmica.
4. Se considera que no hay acumulación de materia en la camisa del reactor, por lo que el caudal másico de entrada —de vapor o de agua de refrigeración— debe ser igual al caudal másico de salida.
5. Se considera que la temperatura de la camisa cuando se calienta es la del vapor: $T_j = T_h$
6. Se considera que la temperatura de la camisa cuando se circula agua de refrigeración por ella es la media entre la temperatura de entrada y la de salida del agua de refrigeración: $T_j = \frac{1}{2}(T_{w,in} + T_{w,out})$

Especie	ν_1	ν_2
K	-1	-1
LA	-1	0
LE	1	0
BP	0	1/2

Tabla 9.1: Coeficientes estequiométricos.

Balances de materia

Tomando como volumen de control el volumen del reactor, el balance de masa a dicho volumen vendría dado por

$$\frac{dM_r}{dt} = F_{in} \cdot \rho \quad (9.1)$$

no obstante, puesto que la densidad es constante porque no depende de la composición

$$\frac{dM_r}{dt} = \frac{d}{dt}(\rho \cdot V_r) = \rho \cdot \frac{dV_r}{dt} \quad (9.2)$$

por lo que la expresión del balance de materia global al reactor sería

$$\frac{dV_r}{dt} = F_{in} \quad (9.3)$$

Si se realiza un balance de moles por componentes se tiene

$$\frac{dN_r^i}{dt} = F_{in} \cdot C_{in}^i + \nu_1^i \cdot r_1 \cdot V_r + \nu_2^i \cdot r_2 \cdot V_r \quad (9.4)$$

en donde los coeficientes estequiométricos ν_1^i y ν_2^i son los recogidos en la Tabla 9.1, que son los correspondientes al ajuste de las reacciones (??) y (??).

Además, la concentración C_{in}^i es nula para todas las especies salvo para el reactivo K, por lo que, el balance para cada una de las especies por separado quedaría

$$\frac{dN_r^K}{dt} = F_{in} \cdot C_{in}^K - r_1 \cdot V_r - r_2 \cdot V_r \quad (9.5)$$

$$\frac{dN_r^{LA}}{dt} = - r_1 \cdot V_r \quad (9.6)$$

$$\frac{dN_r^{LE}}{dt} = + r_1 \cdot V_r \quad (9.7)$$

$$\frac{dN_r^{BP}}{dt} = \frac{1}{2} \cdot r_2 \cdot V_r \quad (9.8)$$

Dada la hipótesis asumida en lo relativo a la acumulación de fluido en la camisa del reactor, no resulta necesario realizar el balance de materia a la camisa, de hecho, dicho balance aparece implícitamente en la hipótesis.

Balances de energía

Realizando un balance de energía al reactor se tiene

$$\frac{dH_r}{dt} = F_{in} \cdot \rho \cdot h_{in} - \Delta\dot{H}_{r,1} - \Delta\dot{H}_{r,2} + Q \quad (9.9)$$

en donde, las entalpías de reacción vienen dadas por

$$\Delta\dot{H}_{r,1} = r_1 \cdot V_r \cdot \Delta h_{r,1} \quad (9.10)$$

$$\Delta\dot{H}_{r,2} = r_2 \cdot V_r \cdot \Delta h_{r,2} \quad (9.11)$$

y la entalpía de la corriente de alimentación

$$h_{in} = C_p \cdot T_{in} \quad (9.12)$$

Para determinar el calor intercambiado entre la camisa y el reactor Q , deben tenerse en cuenta las tres situaciones que se van a analizar. No obstante, se adoptará la ley general de transmisión de calor

$$Q = U \cdot A_c \cdot (T_j - T_r) \quad (9.13)$$

en la que, en cada caso, habrá que definir el valor del coeficiente global de transmisión de calor U y el de la temperatura de la camisa T_j , ya que el del área de la camisa A_c es el mismo para las tres situaciones.

1. Calentamiento.

Durante el calentamiento se circula por la camisa vapor a una temperatura de 110°C (T_h). Dicho vapor condensa en las paredes de la camisa, por lo que la transferencia de calor se produce a la temperatura a la que condensa en el vapor. De este modo, el calor intercambiado vendría dado por

$$Q = U_h \cdot A_c \cdot (T_h - T_r) \quad (9.14)$$

2. Llenado y enfriamiento.

Cuando se circula agua por la camisa para refrigerar el reactor, se toma como temperatura de transferencia la media entre la entrada y la salida, por lo que el calor intercambiado es

$$Q = U_w \cdot A_c \cdot (T_j - T_r) \quad (9.15)$$

calculándose T_j como

$$T_j = \frac{T_{w,in} + T_{w,out}}{2} \quad (9.16)$$

3. Finalización.

En la parte final del proceso no se circula agua por la camisa, pero sí queda retenido parte de líquido en la misma, por lo que es necesario determinar el intercambio de calor entre el medio de reacción y el agua retenida, por tanto

$$Q = U'_w \cdot A_c \cdot (T_j - T_r) \quad (9.17)$$

en donde la temperatura de la camisa evolucionará en el tiempo de acuerdo con el intercambio de calor.

Por último, se debe realizar un balance de energía a la camisa del reactor. Durante el proceso de calentamiento, no es necesario ya que la temperatura de intercambio permanece constante e igual a la de condensación del vapor. En cambio, cuando circula agua o cuando está retenida en la camisa, el balance quedaría

$$\frac{dH_j}{dt} = F_{w,in} \cdot h_{w,in} - F_{w,out} \cdot h_{w,out} - Q \quad (9.18)$$

Las entalpías del agua entrante y saliente pueden expresarse como

$$h_{w,in} = C_p \cdot T_{w,in} \quad (9.19)$$

$$h_{w,out} = C_p \cdot T_{w,out} \quad (9.20)$$

además, las corrientes de entrada y de salida de agua son iguales, como se expresó en las hipótesis del modelo: $F_{w,in} = F_{w,out}$. Por otro lado, la entalpía de la camisa sería

$$H_j = V_j \cdot \rho \cdot C_p \cdot T_j \quad (9.21)$$

en donde el volumen de la camisa, la densidad y el calor específico no se modifican, por lo que

$$\frac{dH_j}{dt} = \frac{d}{dt}(V_j \cdot \rho \cdot C_p \cdot T_j) = V_j \cdot \rho \cdot C_p \cdot \frac{dT_j}{dt} \quad (9.22)$$

De este modo, el balance de energía quedaría de la forma

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{\rho \cdot V_j \cdot C_p} \cdot [F_{w,in} \cdot C_p \cdot (T_{w,in} - T_{w,out}) - Q] \quad (9.23)$$

Ecuaciones auxiliares

En las tres situaciones anteriormente expuestas —calentamiento, llenado y finalización— hay parámetros del sistema que varían. A parte de los ya expuestos relativos al intercambio de calor, se modifican los caudales de alimentación al sistema, así como de entrada de agua en la camisa:

1. Calentamiento: $F_{in} = 0$ y $F_{w,in} = 0$, circulándose por la camisa vapor.
2. Llenado y refrigeración: $F_{in} \neq 0$ y $F_{w,in} \neq 0$.
3. Finalización: $F_{in} = 0$ y $F_{w,in} = 0$, quedando agua retenida.

Adicionalmente se debe considerar la cinética de ambas reacciones, que de acuerdo con su estequiometría sería:

$$r_1 = k_1 \cdot C_r^K \cdot C_r^{LA} \quad (9.24)$$

$$r_2 = k_2 \cdot (C_r^k)^2 \quad (9.25)$$

9.3 m-files

9.3.1 Simulación *sin* balances de energía

Modelo del reactor

```
function d = semibatch1(t,x)

% Variables del proceso
Vr = x(1); % Volumen en el reactor (m3)
NK = x(2); % Moles de K en el reactor (kmol)
NLA = x(3); % Moles de LA en el reactor (kmol)
NLE = x(4); % Moles de LE en el reactor (kmol)
NBP = x(5); % Moles de BP en el reactor (kmol)

% Parametros del sistema
CKin = 10; % Concentracion inicial de K (kmol/m3)
k1 = 1; % Constante de velocidad primera reaccion (m3/kmol h)
k2 = 0.1; % Constante de velocidad segunda reaccion (m3/kmol h)
Vmax = 10; % Volumen del reactor (m3)
rho = 1000; % Densidad (kg/m3)
nu1 = [-1 -1 1 0]; % Coef. estequiometricos primera reaccion
nu2 = [-1 0 0 0.5]; % Coef. estequiometricos segunda reaccion
Cin = [10 0 0 0]; % Concentracion alimentacion (kmol/m3)

% Variables intermedias
CK = NK/Vr; % Concentracion de K (kmol/m3)
CLA = NLA/Vr; % Concentracion de LA (kmol/m3)
```

Simulación dinámica

```
r1 = k1*CK*CLA;      % Velocidad de la reaccion 1 (kmol/m3 h)
r2 = k2*CK^2;       % Velocidad de la reaccion 2 (kmol/m3 h)
Tr = 75;            % Temperatura en el reactor (oC)

if (Vr <= Vmax)
    % LLENADO Y REFRIGERACION
    Fin = 2.5; % Caudal de entrada al reactor (m3/h)
else
    Fin = 0;
end

% Balance de materia global dV/dt
d(1,1) = Fin;
% Balances de materia por componentes dNi/dt
for i = 1:4
    d(i+1,1) = Fin*Cin(i) + nul(i)*r1*Vr + nu2(i)*r2*Vr;
end
```

Cuerpo principal del programa

```
close all;
clear all;
clc;

global cooling

rho = 1000;          % Densidad (kg/m3)
Vr0 = 1;             % Volumen inicial reactor (m3)
N0 = [0 100 0 0];   % Moles iniciales reactor (kcal)

x0 = [Vr0 N0];      % Valores iniciales de integracion
time = [0 10];      % Tiempo de integracion

cooling = 0;
[t,x] = ode45(@semibatch1,time,x0);

for i = 1:length(t)
    Cr(i,:) = x(i,2:5)/x(i,1); % Concentraciones (kmol/m3)
end

figure;
subplot(2,2,1),plot(t,Cr(:,1),'b','linewidth',2)
    title('Concentracion de K')
    xlabel('Tiempo (h)')
    ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')
subplot(2,2,2),plot(t,Cr(:,2),'b','linewidth',2)
    title('Concentracion de LA')
    xlabel('Tiempo (h)')
    ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')
subplot(2,2,3),plot(t,Cr(:,3),'b','linewidth',2)
    title('Concentracion de LE')
    xlabel('Tiempo (h)')
```

```

        ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')
subplot(2,2,4),plot(t,Cr(:,4),'b','linewidth',2)
        title('Concentracion de BP')
        xlabel('Tiempo (h)')
        ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')

figure;
plot(t,x(:,1),'b','linewidth',2)
        title('Volumen reactor')
        xlabel('Tiempo (h)')
        ylabel('Volumen (m^3)')

```

9.3.2 Simulación *con* balances de energía

Modelo del reactor

```

function d = semibatch2(t,x)

global cooling

% Variables del proceso
Vr = x(1); % Volumen en el reactor (m3)
NK = x(2); % Moles de K en el reactor (kmol)
NLA = x(3); % Moles de LA en el reactor (kmol)
NLE = x(4); % Moles de LE en el reactor (kmol)
NBP = x(5); % Moles de BP en el reactor (kmol)
Hr = x(6); % Entalpia del medio de reaccion (kcal)
Tj = x(7); % Temperatura del agua en la ultima fase (C)

% Parametros del sistema
CKin = 10; % Concentracion inicial de K (kmol/m3)
k1 = 1; % Constante de velocidad primera reaccion (m3/kmol h)
k2 = 0.1; % Constante de velocidad segunda reaccion (m3/kmol h)
Vmax = 10; % Volumen del reactor (m3)
Uh = 40; % Coef. trans. Q vapor (kcal/h m2 C)
Uw = 60; % Coef. trans. Q agua circulando (kcal/h m2 C)
Uw2 = 5; % Coef. trans. Q agua estatica (kcal/h m2 C)
A = 30; % Area de la camisa (m2);
Hvap = 540; % Calor de vaporizacion (kcal/kg)
Tvap = 110; % Temperatura del vapor (C)
Vj = 2; % Volumen de la camisa (m3)
Twin = 25; % Temperatura del agua de entrada (C)
Fwin = 2000; % Caudal de agua de refrigeracion (kg/h)
Tin = 90; % Temperatura de la corriente de entrada (C)
hr1 = -1000; % Entalpia primera reaccion (kcal/kmol)
hr2 = -700; % Entalpia segunda reaccion (kcal/kmol)
rho = 1000; % Densidad (kg/m3)
Cp = 1; % Calor especifico (kcal/kg C)
nu1 = [-1 -1 1 0]; % Coef. estequiometricos primera reaccion
nu2 = [-1 0 0 0.5]; % Coef. estequiometricos segunda reaccion
Cin = [10 0 0 0]; % Concentracion alimentacion (kmol/m3)

```

Simulación dinámica

```
% Variables intermedias
CK = NK/Vr;           % Concentracion de K (kmol/m3)
CLA = NLA/Vr;        % Concentracion de LA (kmol/m3)
r1 = k1*CK*CLA;      % Velocidad de la reaccion 1 (kmol/m3 h)
r2 = k2*CK^2;        % Velocidad de la reaccion 2 (kmol/m3 h)
Tr = Hr/(rho*Vr*Cp); % Temperatura en el reactor
Twout = 2*Tj - Twin; % Temperatura del agua de salida
Fw = 0;
Fin = 0;

% Definicion de las situaciones
if (cooling == 0)
    % CALENTAMIENTO DEL REACTOR
    Q = Uh*A*(Tvap - Tr);
    % Momento en que comienza la refrigeracion
    if (Tr > 90)
        cooling = 1;
    end
else
    if (Vr < Vmax)
        % LLENADO Y REFRIGERACION
        Fin = 2.5; % Caudal de entrada al reactor (m3/h)
        Fw = Fwin;
        Q = Uw*A*(Tj - Tr);
    else
        Q = Uw2*A*(Tj - Tr);
    end
end

% Balance de materia global dV/dt
d(1,1) = Fin;
% Balances de materia por componentes dNi/dt
for i = 1:4
    d(i+1,1) = Fin*Cin(i) + nu1(i)*r1*Vr + nu2(i)*r2*Vr;
end

% Balance de energia al reactor dHr/dt
d(6,1) = Fin*Cp*Tin*rho - r1*Vr*hr1 - r2*Vr*hr2 + Q;
% Balance de energia a la camisa dTj/dt
d(7,1) = cooling*(1/(rho*Vj*Cp))*(Fw*Cp*(Twin - Twout) - Q);
```

Cuerpo principal del programa

```
close all;
clear all;
clc;

global cooling

Tr0 = 20;           % Temperatura inicial reactor (C)
rho = 1000;        % Densidad (kg/m3)
Cp = 1;            % Calor especifico (kcal/kg C)
Vr0 = 1;           % Volumen inicial reactor (m3)
```

Simulación dinámica

```
Hr0 = Vr0*rho*Cp*Tr0; % Entalpia inicial reactor (kcal)
N0 = [0 100 0 0]; % Moles iniciales reactor (kcal)
Tj0 = 25; % Temperatura inicial camisa (C)

x0 = [Vr0 N0 Hr0 Tj0]; % Valores iniciales de integracion
time = [0 10]; % Tiempo de integracion

cooling = 0;
[t,x] = ode23s(@semibatch2,time,x0);

for i = 1:length(t)
    Tr(i) = x(i,6)/(x(i,1)*rho*Cp); % Temperatura reactor (C)
    Cr(i,:) = x(i,2:5)/x(i,1); % Concentraciones (kmol/m3)
end

figure;
subplot(2,2,1),plot(t,Cr(:,1),'b','linewidth',2)
title('Concentracion de K')
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')
subplot(2,2,2),plot(t,Cr(:,2),'b','linewidth',2)
title('Concentracion de LA')
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')
subplot(2,2,3),plot(t,Cr(:,3),'b','linewidth',2)
title('Concentracion de LE')
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')
subplot(2,2,4),plot(t,Cr(:,4),'b','linewidth',2)
title('Concentracion de BP')
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')

figure
plot(t,Tr,'r','linewidth',2)
hold on
plot(t,x(:,7),'b','linewidth',2)
hold off
title('Temperaturas')
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Temperatura (^oC)')
legend('T_{reactor}','T_{camisa}')

figure
plot(t,x(:,1),'b','linewidth',2)
title('Volumen reactor')
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Volumen (m^3)')
```

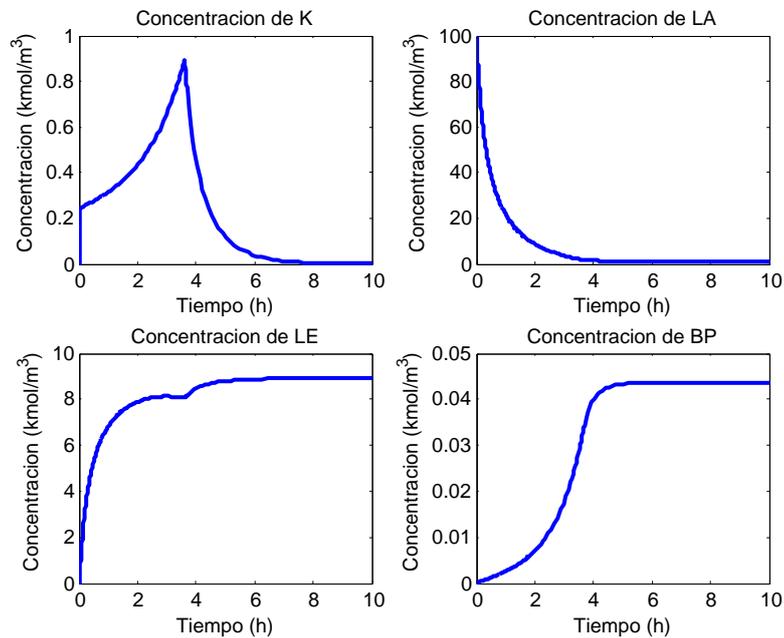


Figura 9.2: Evolución de las concentraciones (sin balances de energía).

9.4 Simulación

9.4.1 Simulación *sin* balances de energía

En la Figura 9.2 se muestran las concentraciones de los reactivos y productos involucrados en la reacción. Por otro lado, en la Figura 9.3 se muestra la evolución del volumen en el reactor que, como puede apreciarse, es una evolución lineal hasta alcanzar el volumen máximo del mismo (10 m^3). Se observa cómo se produce un cambio en la evolución de las concentraciones cuando el reactor alcanza su volumen final, ya que en dicho momento deja de llenarse y comienza la reacción.

9.4.2 Simulación *con* balances de energía

Cuando se añaden los balances de energía, la evolución de las concentraciones (Figura 9.4 y del volumen 9.6) es muy parecido al caso anterior. La única diferencia reside en el tiempo muerto inicial correspondiente a la primera etapa de funcionamiento del equipo. En la Figura 9.5 se muestra la evolución de la temperatura del reactor y de la camisa cuando se circula agua en su interior. Se observan claramente las diferentes etapas de funcionamiento del mismo.

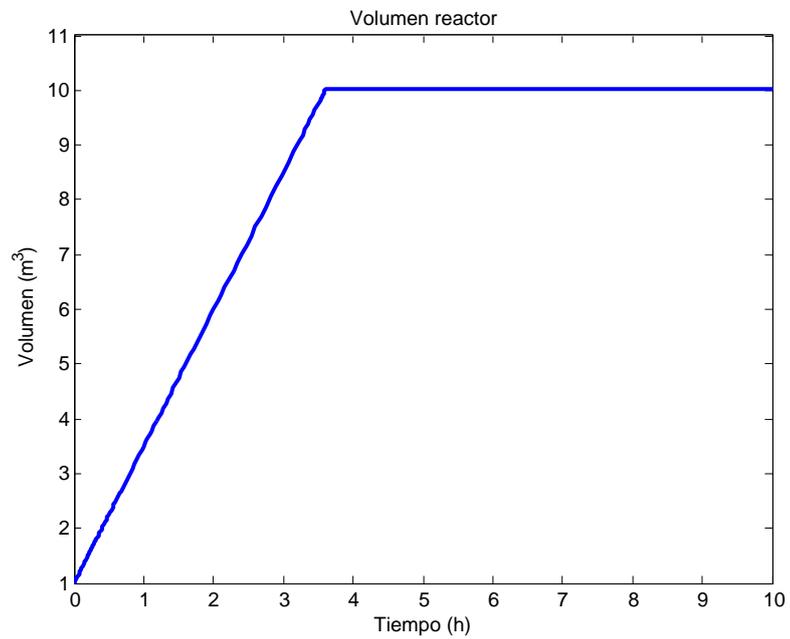


Figura 9.3: Volumen en el reactor (sin balances de energía).

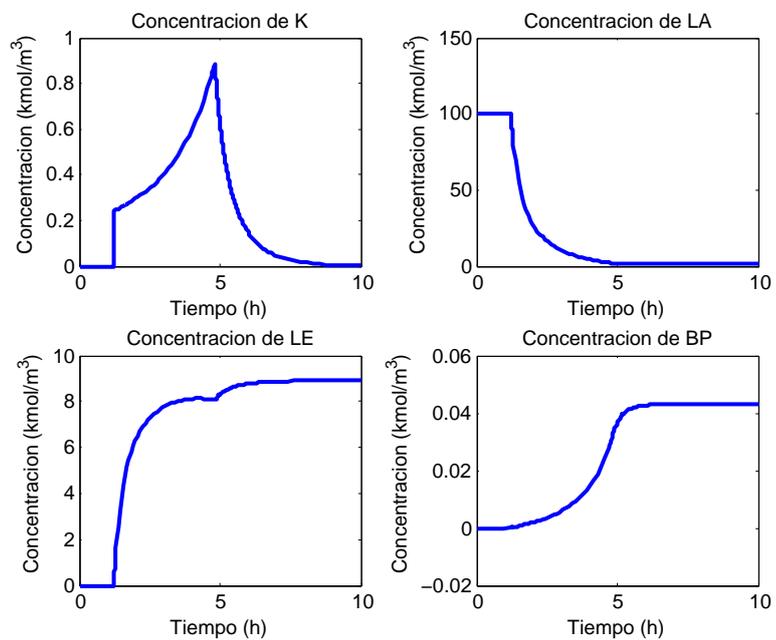


Figura 9.4: Evolución de las concentraciones (con balances de energía).

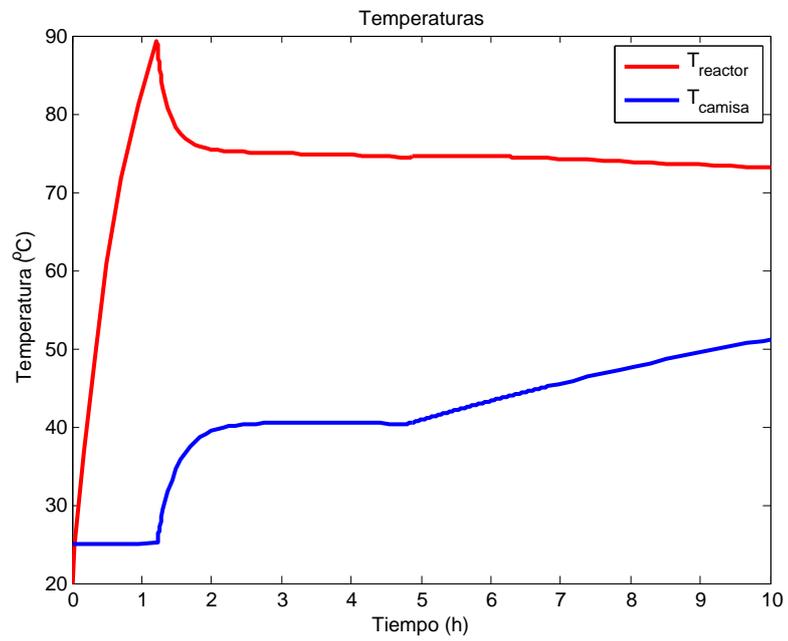


Figura 9.5: Temperaturas del reactor y de la camisa.

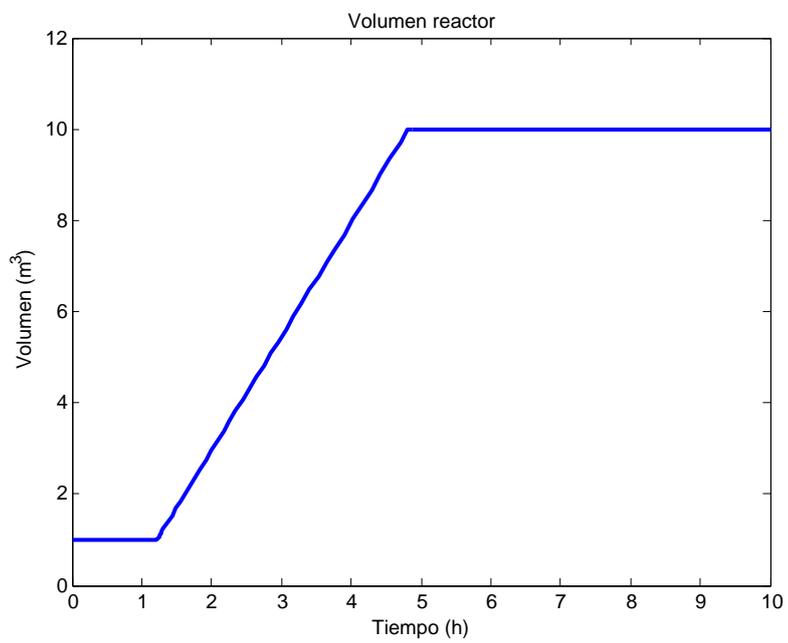


Figura 9.6: Volumen en el reactor (con balances de energía).

Capítulo 10

Proceso químico

10.1 Enunciado

Se debe realizar la simulación dinámica del proceso que se describe a continuación para la cual se debe emplear la herramienta MATLAB. El proceso esquematizado en la Figura 10.1 consiste en una reacción en un tanque de mezcla completa, la reacción es isoterma y necesita de un catalizador por lo que los reactivos se pueden mezclar antes de entrar al reactor en las proporciones adecuadas. El proceso consta de un tanque de

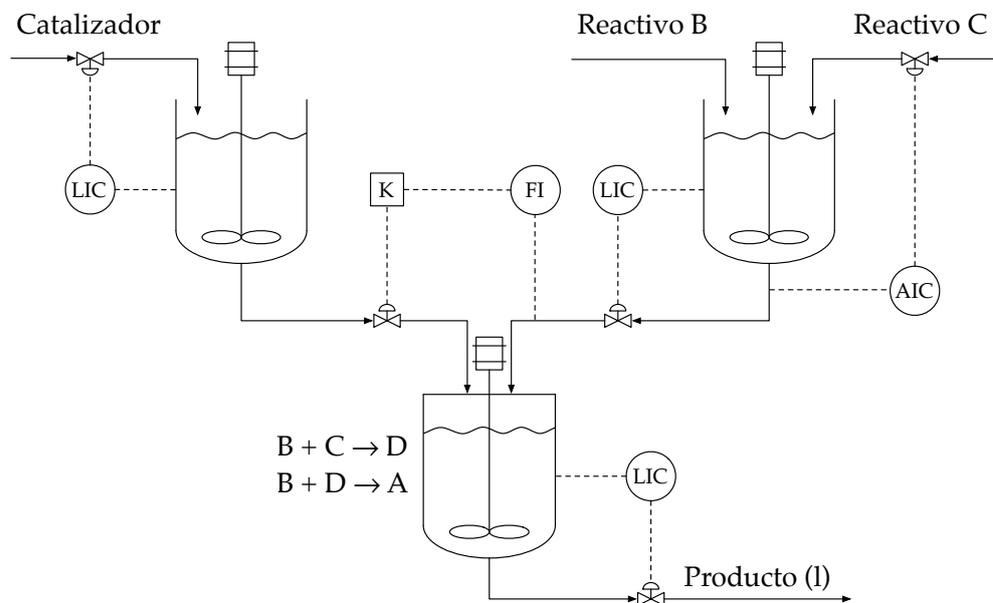


Figura 10.1: Proceso químico.

alimentación del catalizador, de un tanque mezclador de reactivos y del reactor propiamente dicho. Sus características se describen a continuación.

Tanque de alimentación del catalizador

El caudal de alimentación se emplea para controlar el nivel del recipiente. El controlador empleado es Proporcional-Integral (tipo PI), por lo que

$$F_{in} = \text{Bias} + K_c \cdot e + \frac{K_c}{\tau_I} \cdot \int e \quad (10.1)$$

siendo $e = SP - h$ el error, dado como la diferencia entre la altura (nivel) requerida (set point) y la del líquido real; SP el set point o punto de consigna en el cual se desea mantener la variable controlada (en este caso el nivel); K_c la ganancia del controlador (parte proporcional) y τ_I la constante de tiempo integral.

Los datos disponibles son:

- Área del tanque: 4 m²
- Ganancia: $K_c = 3$
- Constante integral: $\tau_I = 2$
- Set point: $SP = 0,7$ m
- Bias: 4 m³/min

El caudal de salida del tanque está en proporción al caudal de salida del tanque de mezclado, siendo su caudal la mitad del de salida del mezclador.

Nota: Para aplicar la ecuación del controlador considérese en lugar de la variable error e una variable adicional $x = \int e$. De este modo la ecuación algebraica se convierte en diferencial y la integral desaparece.

Tanque mezclador de reactivos

Este equipo tiene dos controladores, uno de nivel, para lo que emplea la corriente de salida, el modelo es similar al expuesto anteriormente:

$$F_{out} = \text{Bias} - K_c \cdot e - \frac{K_c}{\tau_I} \int e \quad (10.2)$$

Los datos del controlador son:

- Ganancia: $K_c = 3$
- Constante integral: $\tau_I = 2$
- Set point: $SP = 4$ m
- Bias: $10 \text{ m}^3/\text{min}$

El segundo controlador mide la composición a la salida del tanque y ajusta el caudal de entrada de la corriente de reactivo C para obtener la mezcla adecuada. Los datos del controlador son:

- Ganancia: $K_c = 2$
- Constante integral: $\tau_I = 1$
- Set point: $SP = 40\%$ fracción molar de C
- Bias: 0

El resto de los datos de la unidad son:

- Caudal de entrada de B: $5 \text{ m}^3/\text{min}$
- Concentración de B en dicha corriente: $300 \text{ kmol}/\text{m}^3$
- Concentración de C en su corriente de alimentación: $240 \text{ kmol}/\text{m}^3$
- Área del mezclador: 3 m^2

Reactor

En el reactor tienen lugar dos reacciones:



Ambas reacciones son de segundo orden global —de orden parcial uno con respecto a cada uno de los reactivos— siguiendo sus constantes de velocidad la ecuación de Arrhenius. Sus constantes preexponenciales son $75 \times 10^6 \text{ m}^3/\text{kmol} \cdot \text{min}$ y $85 \times 10^5 \text{ m}^3/\text{kmol} \cdot \text{min}$, respectivamente y sus energías de activación $28240 \text{ kJ}/\text{mol}$ y $45605 \text{ kJ}/\text{mol}$, también respectivamente. Se trata de un reactor isoterma que opera a 568 K .

El caudal de salida del reactor se utiliza para controlar el nivel en el reactor, siendo un controlador similar a los anteriores:

$$F_{out} = \text{Bias} - K_c \cdot e - \frac{K_c}{\tau_I} \int e \quad (10.4)$$

en donde se tiene como punto de consigna el volumen del medio de reacción, esto es, $e = SP - V_r$. Los datos del controlador son:

- Ganancia: $K_c = 3$
- Constante integral: $\tau_I = 2$
- Set point: $SP = 2,1 \text{ m}^3$
- Bias: $2 \text{ m}^3/\text{min}$

La densidad de todas las corrientes se considerará constante y de valor $450 \text{ kmol}/\text{m}^3$.

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo del proceso realizando las suposiciones que se crean apropiadas.
2. Resolver el modelo empleando MATLAB (el tiempo de integración puede ser de 0 a 20 min).
3. Representar los resultados de las variables más representativas (variables controladas, manipuladas...)
4. Ver cómo responde el modelo ante perturbaciones:
 - (a) Salto en la concentración de reactivo B.
 - (b) Salto en la concentración de reactivo C.
 - (c) Salto en el caudal de la corriente de reactivo B.

10.2 Modelo matemático

Leyenda

$F_{in,cat}$: Caudal de entrada al depósito de catalizador (m^3/min).

$F_{out,cat}$: Caudal de salida del depósito de catalizador (m^3/min).

$F_{in,B}$: Caudal de entrada de B al mezclador (m^3/min).

$F_{in,C}$: Caudal de entrada de C al mezclador (m^3/min).

$F_{out,mix}$: Caudal de salida del mezclador (m^3/min).

$F_{out,r}$: Caudal de salida del reactor (m^3/min).

V_{cat} : Volumen en el depósito de catalizador (m^3).

V_{mix} : Volumen en el mezclador de reactivos (m^3).

- V_r : Volumen en el reactor (m^3).
- h_{cat} : Altura de líquido en el depósito de catalizador (m).
- h_{mix} : Altura de líquido en el mezclador de reactivos (m).
- A_{cat} : Área del depósito de catalizador (m^2).
- A_{mix} : Área del mezclador de reactivos (m^2).
- N_{mix}^B : Número de moles de B en el mezclador de reactivos (kmol).
- N_{mix}^C : Número de moles de C en el mezclador de reactivos (kmol).
- N_r^B : Número de moles de B en el reactor (kmol).
- N_r^C : Número de moles de C en el reactor (kmol).
- N_r^A : Número de moles de A en el reactor (kmol).
- N_r^D : Número de moles de D en el reactor (kmol).
- $C_{in,B}^B$: Concentración de B en la corriente B ($kmol/m^3$).
- $C_{in,C}^C$: Concentración de C en la corriente C ($kmol/m^3$).
- C_{mix}^B : Concentración de B en el mezclador ($kmol/m^3$).
- C_{mix}^C : Concentración de C en el mezclador ($kmol/m^3$).
- C_r^B : Concentración de B en el reactor ($kmol/m^3$).
- C_r^C : Concentración de C en el reactor ($kmol/m^3$).
- ρ : Densidad molar ($kmol/m^3$)
- r_1 : Velocidad de la primera reacción ($kmol/m^3 \cdot min$).
- r_2 : Velocidad de la segunda reacción ($kmol/m^3 \cdot min$).
- k_1 : Constante de velocidad de la primera reacción ($m^3/kmol \cdot min$).
- k_2 : Constante de velocidad de la segunda reacción ($m^3/kmol \cdot min$).
- $k_{1,0}$: Constante preexponencial de la primera reacción ($m^3/kmol \cdot min$).
- $k_{2,0}$: Constante preexponencial de la segunda reacción ($m^3/kmol \cdot min$).
- $E_{a,1}$: Energía de activación de la primera reacción (kJ/mol).
- $E_{a,2}$: Energía de activación de la segunda reacción (kJ/mol).
- T_r : Temperatura del reactor (K).

- R : Constante de los gases ideales (kJ/mol · K).
- K : Relación de caudales de alimentación al reactor.
- $Bias_{cat}^h$: Bias del controlador de nivel del depósito de catalizador (m³/min).
- $K_{c,cat}^h$: Constante proporcional del controlador de nivel del depósito de catalizador.
- $\tau_{i,cat}^h$: Tiempo integral del controlador de nivel del depósito de catalizador.
- e_{cat}^h : Error de nivel en el depósito de catalizador (m).
- Ie_{cat}^h : Integral del error de nivel en el depósito de catalizador.
- SP_{cat}^h : Set point de altura del nivel del depósito de catalizador (m).
- $Bias_{mix}^C$: Bias del controlador de composición de la salida del mezclador de reactivos (m³/min).
- $K_{c,mix}^C$: Constante proporcional del controlador de composición de la salida del mezclador de reactivos.
- $\tau_{i,mix}^C$: Tiempo integral del controlador de composición de la salida del mezclador de reactivos.
- e_{mix}^C : Error de composición de la salida del mezclador de reactivos.
- Ie_{mix}^C : Integral del error de composición de la salida del mezclador de reactivos.
- SP_{mix}^C : Set point de composición de la salida del mezclador de reactivos.
- $Bias_{mix}^h$: Bias del controlador de nivel del mezclador (m³/min).
- $K_{c,mix}^h$: Constante proporcional del controlador de nivel del mezclador.
- $\tau_{i,mix}^h$: Tiempo integral del controlador de nivel del mezclador.
- e_{mix}^h : Error de nivel en el mezclador (m).
- Ie_{mix}^h : Integral del error de nivel en el mezclador.
- SP_{mix}^h : Set point de altura del nivel del mezclador (m).
- $Bias_r^V$: Bias del controlador de volumen del reactor (m³/min).
- $K_{c,r}^V$: Constante proporcional del controlador de volumen del reactor.

$\tau_{i,r}^V$: Tiempo integral del controlador de volumen del reactor.

e_r^V : Error de volumen del reactor (m^3).

Ie_r^V : Integral del error de volumen del reactor.

SP_r^V : Set point de volumen del reactor (m^3).

Hipótesis asumidas

1. Se asumirá mezcla perfecta en el mezclador de reactivos, por tanto, no habrá gradientes de ninguna de las propiedades en el seno del mismo. Así, la composición de la corriente de salida es la misma que la del volumen del mezclador de reactivos.
2. Se asumirá mezcla perfecta en el reactor, por tanto, no habrá gradientes de ninguna de las propiedades en el seno del mismo. De este modo, la composición de la corriente de salida es la misma que la del volumen del reactor.
3. La densidad molar se considerará independiente de la composición, por lo que será constante a lo largo del tiempo.
4. No se considerarán retardos en el sistema, esto es, las modificaciones en las corrientes tiene efecto instantáneo.

Balances de materia

- *Depósito de catalizador.*

Puesto que la densidad molar es constante a lo largo del tiempo, el balance de materia global se puede realizar en volumen. De este modo:

$$\frac{dV_{cat}}{dt} = F_{in,cat} - F_{out,cat} \quad (10.5)$$

en donde el volumen en el catalizador viene dado por

$$V_{cat} = A_{cat} \cdot h_{cat} \quad \implies \quad \frac{dV_{cat}}{dt} = \frac{d}{dt}(A_{cat} \cdot h_{cat}) = A_{cat} \frac{dh_{cat}}{dt} \quad (10.6)$$

por lo que el balance de materia quedaría

$$\frac{dh_{cat}}{dt} = \frac{1}{A_{cat}}(F_{in,cat} - F_{out,cat}) \quad (10.7)$$

- *Mezclador de reactivos.*

Si se realiza el balance de materia global al mezclador de reactivos se tiene que

$$\frac{dV_{mix}}{dt} = F_{in,B} + F_{in,C} - F_{out,mix} \quad (10.8)$$

pero como la sección del depósito es constante ($V_{mix} = A_{mix} \cdot h_{mix}$), se puede reescribir como

$$\frac{dh_{mix}}{dt} = \frac{1}{A_{mix}}(F_{in,B} + F_{in,C} - F_{out,mix}) \quad (10.9)$$

Del mismo modo, se puede realizar un balance de materia por componentes de la forma

$$\frac{dN_{mix}^B}{dt} = F_{in,B} \cdot C_{in,B}^B - F_{out,mix} \cdot C_{mix}^B \quad (10.10)$$

$$\frac{dN_{mix}^C}{dt} = F_{in,C} \cdot C_{in,C}^C - F_{out,mix} \cdot C_{mix}^C \quad (10.11)$$

- *Reactor.*

El balance de materia global al reactor viene dado por

$$\frac{dV_r}{dt} = F_{out,cat} + F_{out,mix} - F_{out,r} - \frac{r_1 \cdot V_r + r_2 \cdot V_r}{\rho} \quad (10.12)$$

y, puesto que no se tienen datos de la sección del reactor, se dejará la ecuación en función del volumen acumulado en el reactor.

De forma análoga, el balance de materia por componentes quedaría

$$\frac{dN_r^B}{dt} = F_{out,mix} \cdot C_{mix}^B - F_{out,r} \cdot C_r^B - r_1 \cdot V_r - r_2 \cdot V_r \quad (10.13)$$

$$\frac{dN_r^C}{dt} = F_{out,mix} \cdot C_{mix}^C - F_{out,r} \cdot C_r^C - r_1 \cdot V_r \quad (10.14)$$

$$\frac{dN_r^A}{dt} = r_2 \cdot V_r - F_{out,r} \cdot C_r^A \quad (10.15)$$

$$\frac{dN_r^D}{dt} = r_1 \cdot V_r - r_2 \cdot V_r - F_{out,r} \cdot C_r^D \quad (10.16)$$

Ecuaciones de control

- *Alimentación proporcional al reactor.*

Las corrientes de salida del depósito de catalizador y del mezclador de reactivos se alimentan de forma proporcional al reactor, por lo que

$$F_{out,cat} = K \cdot F_{out,mix} \quad (10.17)$$

siendo K el “ratio” o relación entre ambas corrientes.

- *Control de nivel en el depósito de catalizador.*

La ley de control es la correspondiente a un regulador PI de la forma

$$F_{in,cat} = Bias_{cat}^h + K_{c,cat}^h \cdot e_{cat}^h + \frac{K_{c,cat}^h}{\tau_{i,cat}^h} I e_{cat}^h \quad (10.18)$$

en donde el error viene dado por

$$e_{cat}^h = SP_{cat}^h - h_{cat} \quad (10.19)$$

y la integral del error se relaciona con el error como

$$\frac{dI e_{cat}^h}{dt} = e_{cat}^h \quad (10.20)$$

- *Control de composición de la salida del mezclador de reactivos.*

La ley de control del regulador PI viene dada por

$$F_{in,C} = Bias_{mix}^C + K_{c,mix}^C \cdot e_{mix}^C + \frac{K_{c,mix}^C}{\tau_{i,mix}^C} I e_{mix}^C \quad (10.21)$$

en donde el error viene dado por

$$e_{mix}^C = SP_{mix}^C - C_{mix}^C \quad (10.22)$$

y la integral del error se relaciona con el error como

$$\frac{dI e_{mix}^C}{dt} = e_{mix}^C \quad (10.23)$$

Debe tenerse en cuenta que la especificación de esta composición viene dada en fracción molar (m), mientras que las concentraciones (C) que se manejan vienen dadas en kmol/m^3 si se quiere relacionar ambas en la corriente de salida del mezclador de reactivos se tiene

$$m \cdot (C_{out,mix}^B + C_{out,mix}^C) = C_{out,mix}^C \quad (10.24)$$

de donde, despejando el valor de la concentración de C se tiene

$$C_{out,mix}^C = \frac{m \cdot C_{out,mix}^B}{1 - m} \quad (10.25)$$

por tanto, el set point de este controlador viene dado por

$$SP_{mix}^C = \frac{m \cdot C_{out,mix}^B}{1 - m} \quad (10.26)$$

siendo m la fracción molar de C especificada como punto de consigna.

- *Control de nivel del mezclador de reactivos.*

La ley de control del regulador PI viene dada por

$$F_{out,mix} = Bias_{mix}^h + K_{c,mix}^h \cdot e_{mix}^h + \frac{K_{c,mix}^h}{\tau_{i,mix}^h} I e_{mix}^h \quad (10.27)$$

en donde el error viene dado por

$$e_{mix}^h = SP_{mix}^h - h_{mix} \quad (10.28)$$

y la integral del error se relaciona con el error como

$$\frac{dI e_{mix}^h}{dt} = e_{mix}^h \quad (10.29)$$

- *Control del volumen en el reactor.*

La ley de control del regulador PI viene dada por

$$F_{out,r} = Bias_r^V + K_{c,r}^V \cdot e_r^V + \frac{K_{c,r}^V}{\tau_{i,r}^V} I e_r^V \quad (10.30)$$

en donde el error viene dado por

$$e_r^V = SP_r^V - C_r^V \quad (10.31)$$

y la integral del error se relaciona con el error como

$$\frac{dI e_r^V}{dt} = e_r^V \quad (10.32)$$

Ecuaciones auxiliares

- *Velocidades de reacción.*

Ambas reacciones transcurren exclusivamente en el reactor y también ambas son de orden parcial uno con respecto a cada uno de los reactivos y, por tanto, de orden global dos. De este modo se tiene:

$$r_1 = k_1 \cdot C_r^B \cdot C_r^C \quad (10.33)$$

$$r_2 = k_2 \cdot C_r^B \cdot C_r^D \quad (10.34)$$

en donde las constante de velocidad siguen la ecuación de Arrhenius en su dependencia con la temperatura, por lo que

$$k_1 = k_{1,0} \cdot \exp\left(\frac{-E_{a,1}}{R \cdot T_r}\right) \quad (10.35)$$

$$k_2 = k_{2,0} \cdot \exp\left(\frac{-E_{a,2}}{R \cdot T_r}\right) \quad (10.36)$$

- *Concentraciones.*

Las concentraciones en el mezclador de reactivos y en el reactor están relacionadas tanto con los moles acumulados como con el volumen, de este modo se tiene que

$$C_{mix}^j = \frac{N_{mix}^j}{V_{mix}} \quad j = B, C \quad (10.37)$$

$$C_r^j = \frac{N_r^j}{V_r} \quad j = B, C, A, D \quad (10.38)$$

en donde el volumen en el mezclador de reactivos se puede relacionar con la altura del líquido de la forma

$$V_{mix} = A_{mix} \cdot h_{mix} \quad (10.39)$$

- *Restricciones a los controladores.*

Es importante acotar el rango de funcionamiento de los controladores. Puesto que se está actuando sobre caudales en el sistema, no se pueden concebir caudales negativos, esto es, como mínimo un caudal determinado puede ser nulo, lo que se correspondería con una válvula de control completamente cerrada. Por tanto, habría que restringir las acciones de control ya que

$$F_{in,cat} \geq 0 \quad (10.40)$$

$$F_{in,C} \geq 0 \quad (10.41)$$

$$F_{out,mix} \geq 0 \quad (10.42)$$

$$F_{out,r} \geq 0 \quad (10.43)$$

Estas ecuaciones se traducen en las siguientes restricciones a las leyes de control

$$\text{if } F_{in,cat} < 0 \quad \text{then } F_{in,cat} = 0 \quad (10.44)$$

$$\text{if } F_{in,C} < 0 \quad \text{then } F_{in,C} = 0 \quad (10.45)$$

$$\text{if } F_{out,mix} < 0 \quad \text{then } F_{out,mix} = 0 \quad (10.46)$$

$$\text{if } F_{out,r} < 0 \quad \text{then } F_{out,r} = 0 \quad (10.47)$$

10.3 m-files

Modelo del proceso

```
function d = proceso(t,x)
```

Simulación dinámica

```
global Acat Amix FinB CinB CinC rho ...
      k10 k20 Ea1 Ea2 R Tr K ...
      Biashcat Kchcat tihcat SPHcat ...
      BiasCmix KcCmix tiCmix m ...
      Biashmix Kchmix tihmix SPHmix ...
      BiasVr KcVr tiVr SPVr ti1 ti2 ti3

% ASIGNACION DE VARIABLES
hcat = x(1); % Altura catalizador en m
Iehcat = x(2); % Integral error nivel catalizador
hmix = x(3); % Altura mezclador en m
NBmix = x(4); % Moles de B mezclador en kmol/m3
NCmix = x(5); % Moles de C mezclador en kmol/m3
Iehmix = x(6); % Integral error nivel mezclador
IeCmix = x(7); % Integral error composicion mezclador
Vr = x(8); % Volumen reactor en m3
NBr = x(9); % Moles de B reactor en kmol/m3
NCR = x(10); % Moles de C reactor en kmol/m3
NAr = x(11); % Moles de A reactor en kmol/m3
NDR = x(12); % Moles de D reactor en kmol/m3
IeVr = x(13); % Integral error volumen reactor

% ECUACIONES AUXILIARES Y PREVIAS

Vmix = hmix*Amix; % Volumen mezclador
CCmix = NCmix/Vmix; % Concentracion C mezclador
CBmix = NBmix/Vmix; % Concentracion B mezclador

CAr = NAr/Vr; % Concentracion A reactor
CBr = NBr/Vr; % Concentracion B reactor
CCr = NCR/Vr; % Concentracion C reactor
CDr = NDR/Vr; % Concentracion D reactor

SPCmix = CBmix*m/(1-m); % SP de concentracion de C

ehcat = SPHcat - hcat; % error nivel catalizador
ehmix = SPHmix - hmix; % error nivel mezclador
eCmix = SPCmix - CCmix; % error composicion mezclador
eVr = SPVr - Vr; % error volumen reactor

% Controladores
Fincat = Biashcat + Kchcat*ehcat + Kchcat*Iehcat/tihcat;
Foutmix = Biashmix - Kchmix*ehmix - Kchmix*Iehmix/tihmix;
FinC = BiasCmix + KcCmix*eCmix + KcCmix*IeCmix/tiCmix;
Foutr = BiasVr - KcVr * eVr - KcVr * IeVr / tiVr;

% Restricciones a los controladores
if Fincat < 0 Fincat = 0; end
if Foutmix < 0 Foutmix = 0; end
if FinC < 0 FinC = 0; end
if Foutr < 0 Foutr = 0; end

% Alimentacion proporcional al reactor
```

```

Foutcat = K * Foutmix;

% Velocidades de reaccion
k1 = k10*exp(-Ea1/(R*Tr));
k2 = k20*exp(-Ea2/(R*Tr));
r1 = k1*CBr*CCr;
r2 = k2*CBr*CDr;

% ODEs
% dh_cat/dt
d(1,1) = (Fincat - Foutcat)/Acat;
% dIehcat/dt
d(2,1) = ehcat;
% dhmix/dt
d(3,1) = (FinB + FinC - Foutmix)/Amix;
% dNBmix/dt
d(4,1) = FinB*CinB - Foutmix*CBmix;
% dNCmix/dt
d(5,1) = FinC*CinC - Foutmix*CCmix;
% dIehmix/dt
d(6,1) = ehmix;
% dIeCmix/dt
d(7,1) = eCmix;
% dVr/dt
d(8,1) = Foutcat + Foutmix - Foutr - (r1+r2)*Vr/rho;
% dNBr/dt
d(9,1) = Foutmix*CBmix - Foutr*CBr - (r1+r2)*Vr;
% dNCr/dt
d(10,1) = Foutmix*CCmix - Foutr*CCr - r1*Vr;
% dNA/dt
d(11,1) = r2*Vr - Foutr*CAr;
% dND/dt
d(12,1) = (r1-r2)*Vr - Foutr*CDr;
% dIeVr/dt
d(13,1) = eVr;

```

Cuerpo principal del programa

```

close all
clear all
clc

global Acat Amix FinB CinB CinC rho ...
      k10 k20 Ea1 Ea2 R Tr K ...
      Biashcat Kchcat tihcat SPhcat ...
      BiasCmix KcCmix tiCmix m ...
      Biashmix Kchmix tihmix SPHmix ...
      BiasVr KcVr tiVr SPVr til ti2 ti3

% PARAMETROS DEL SISTEMA
Acat = 4;      % Area del catalizador en m2
Amix = 3;      % Area del mezclador en m2

```

Simulación dinámica

```
FinB = 5;           % Caudal de B en m3/min
CinB = 300;        % Composición de FinB en kmol/m3
CinC = 240;        % Composición de FinC en kmol/m3
rho = 450;         % Densidad molar en kmol/m3
k10 = 75e6;        % Cte preexp primera reacción en m3/kmol min
k20 = 85e5;        % Cte preexp segunda reacción en m3/kmol min
Ea1 = 78240;       % Energía activación primera reacción en kJ
Ea2 = 45605;       % Energía activación segunda reacción en kJ
R = 8.314;         % Cte de los gases en kJ/mol K
Tr = 568;          % Temperatura reactor en K
K = 0.5;           % Ratio de alimentación al reactor
Biashcat = 4;      % Bias nivel catalizador m3/min
Kchcat = 3;        % Kc PI nivel catalizador
tihcat = 2;        % Tau_i PI nivel catalizador
SPhcat = 0.7;      % Set point nivel catalizador en m
BiasCmix = 0;      % Bias composición mezclador m3/min
KcCmix = 2;        % Kc PI composición mezclador
tiCmix = 1;        % Tau_i PI composición mezclador
m = 0.4;           % Set point fracción molar de C
Biashmix = 10;     % Bias nivel mezclador m3/min
Kchmix = 3;        % Kc PI nivel mezclador
tihmix = 2;        % Tau_i PI nivel mezclador
SPhmix = 4;        % Set point nivel mezclador en m
BiasVr = 2;        % Bias volumen reactor m3/min
KcVr = 3;          % Kc PI volumen reactor
tiVr = 2;          % Tau_i PI volumen reactor
SPVr = 2.1;        % Set point volumen reactor en m3

% INTEGRACION DEL SISTEMA

% Valores iniciales
hcat0 = 1;         % Altura catalizador en m
Iehcat0 = 0;       % Integral error nivel catalizador
hmix0 = 1;         % Altura mezclador en m
NBmix0 = 2;        % Moles de B mezclador en kmol
NCmix0 = 0.8;      % Moles de C mezclador en kmol
Iehmix0 = 0;       % Integral error nivel mezclador
IeCmix0 = 0;       % Integral error composición mezclador
Vr0 = 2;           % Volumen reactor en m3
NBr0 = 1;          % Moles de B reactor en kmol
NCr0 = 10;         % Moles de C reactor en kmol
NAr0 = 6;          % Moles de A reactor en kmol
NDR0 = 1;          % Moles de D reactor en kmol
IeVr0 = 0;         % Integral error volumen reactor
% Vector de valores iniciales
y0 = [hcat0 Iehcat0 hmix0 NBmix0 NCmix0 Iehmix0 IeCmix0...
      Vr0 NBr0 NCr0 NAr0 NDR0 IeVr0];
time = [0 15];

[t,y] = ode15s(@proceso,time,y0);

% CALCULOS AUXILIARES
for i = 1:length(t)
    Vmix = y(i,3)*Amix;           % Volumen mezclador
```

Simulación dinámica

```
Cmix(i,1) = y(i,4)/Vmix; % Conc B mezclador
Cmix(i,2) = y(i,5)/Vmix; % Conc C mezclador
Cmix(i,3) = y(i,5)/(y(i,4) + y(i,5))*100; % Fraccion molar C
Cr(i,1) = y(i,9)/y(i,8); % Conc B reactor
Cr(i,2) = y(i,10)/y(i,8); % Conc C reactor
Cr(i,3) = y(i,11)/y(i,8); % Conc A reactor
Cr(i,4) = y(i,12)/y(i,8); % Conc D reactor

Iehcat = y(i,2); % Integral error nivel catalizador
Iehmix = y(i,6); % Integral error nivel mezclador
IeCmix = y(i,7); % Integral error composicion mezclador
IeVr = y(i,13); % Integral error volumen reactor

CBmix = Cmix(i,1); % Concentracion de B en el mezclador
SPCmix = CBmix*m/(1-m); % SP de concentracion de C

hcat = y(i,1); % Altura catalizador en m
hmix = y(i,3); % Altura mezclador en m
CCmix = Cmix(i,2); % Concentracion de C en el mezclador
Vr = y(i,8); % Volumen reactor en m3

ehcat = SPhcat - hcat; % error nivel catalizador
ehmix = SPhmix - hmix; % error nivel mezclador
eCmix = SPCmix - CCmix; % error composicion mezclador
eVr = SPVr - Vr; % error volumen reactor

% Controladores
Fincat = Biashcat + Kchcat*ehcat + Kchcat*Iehcat/tihcat;
Foutmix = Biashmix - Kchmix*ehmix - Kchmix*Iehmix/tihmix;
FinC = BiasCmix + KcCmix*eCmix + KcCmix*IeCmix/tiCmix;
Foutr = BiasVr - KcVr * eVr - KcVr * IeVr / tiVr;

% Restricciones a los controladores
if Fincat < 0 Fincat = 0; end
if Foutmix < 0 Foutmix = 0; end
if FinC < 0 FinC = 0; end
if Foutr < 0 Foutr = 0; end

% Alimentacion proporcional al reactor
Foutcat = K * Foutmix;

% Variables manipuladas
Fs(i,:) = [Fincat Foutcat FinC Foutmix Foutr];
end

% REPRESENTACION GRAFICA

% Alturas y volúmenes
figure;
plot(t,y(:,1),'r','linewidth',2);
hold on
plot(t,y(:,3),'b','linewidth',2);
plot(t,y(:,8),'Color',[1 .5 0],'linewidth',2);
```

```

hold off
xlabel('Tiempo (min)');
legend('h_{cat} (m)', 'h_{mix} (m)', 'V_r (m^3)', -1);
title('Inventarios')

% Concentraciones en el mezclador
figure
plot(t, Cmix(:,1), 'r', 'linewidth', 2)
hold on
plot(t, Cmix(:,2), 'b', 'linewidth', 2)
plot(t, Cmix(:,3), 'Color', [1 .5 0], 'linewidth', 2)
hold off
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')
legend('C_{mix}^B', 'C_{mix}^C', 'x_{mix}^C (%)', -1)
title('Conc. en el mezclador')

% Caudales manipulados
figure;
plot(t, Fs, 'linewidth', 2)
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Caudal (m^3/min)')
legend('F_{in, cat}', 'F_{out, cat}', 'F_{in, C}', 'F_{out, mix}', 'F_{out, r}', -1)
title('Caudales manipulados')

% Concentraciones en el reactor
figure;
plot(t, Cr(:,1), 'r', 'linewidth', 2);
hold on;
plot(t, Cr(:,2), 'b', 'linewidth', 2);
plot(t, Cr(:,3), 'Color', [0 128 64]/255, 'linewidth', 2);
plot(t, Cr(:,4), 'Color', [1 .5 0], 'linewidth', 2);
legend('C_r^B', 'C_r^C', 'C_r^A', 'C_r^D', -1)
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')
title('Conc. en el reactor')

```

10.4 Simulación

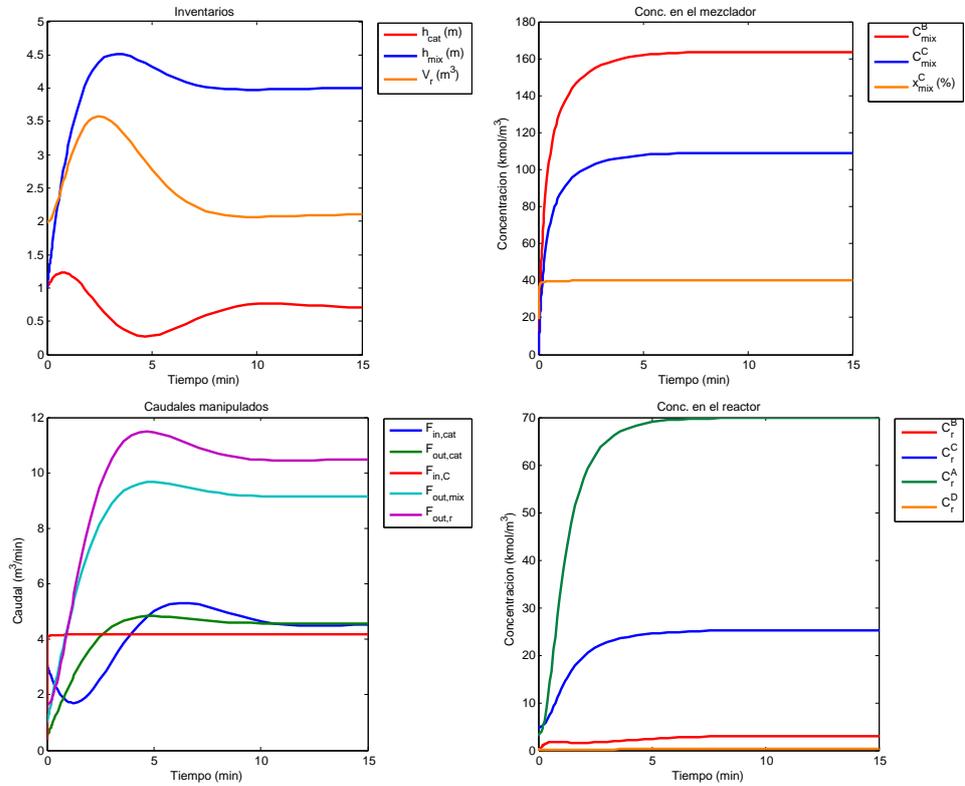


Figura 10.2: Simulación del caso base.

En la Figura 10.2 se han representado las evoluciones temporales de las variables más relevantes del proceso. Cabe destacar cómo se mantienen los inventarios en torno a sus puntos de consigna al igual que la composición a la salida del mezclador de reactivos. Nótese también cómo el control proporcional hace que el caudal $F_{out,cat}$ y $F_{out,mix}$ sea proporcional en todo momento.

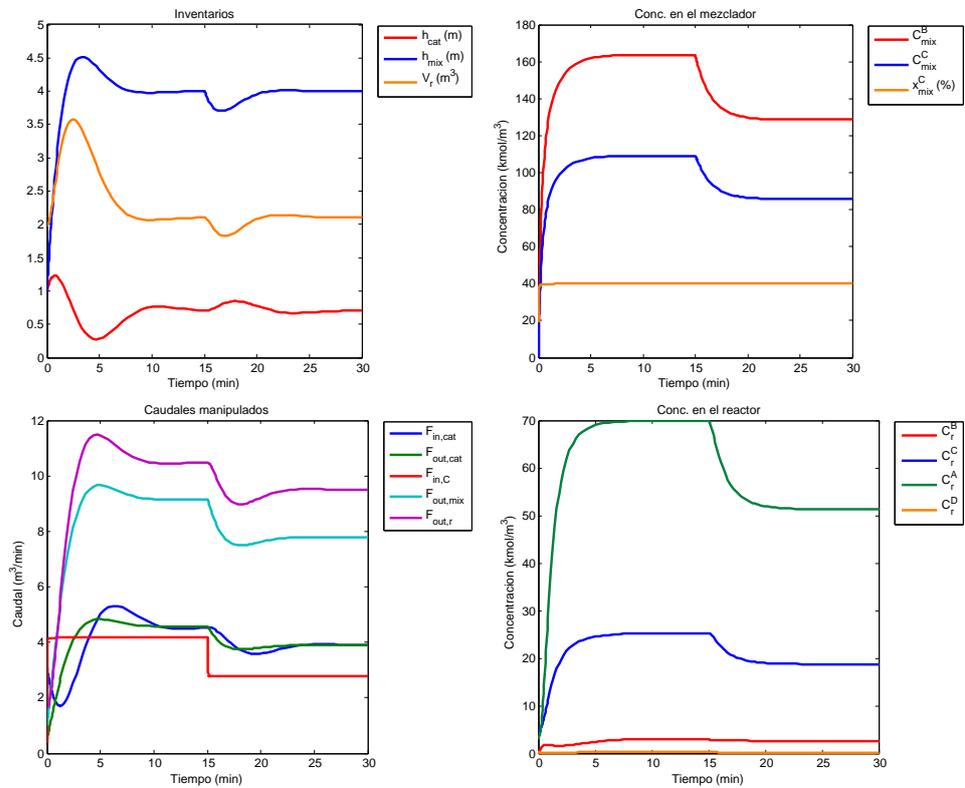


Figura 10.3: Salto escalón en la concentración $C_{in,B}^B$.

Si se modifica la concentración de alimentación del reactivo B ($C_{in,B}^B$) pasando de 300 a 200 kmol/m³ se obtiene la evolución temporal mostrada en la Figura 10.3. Puede apreciarse cómo las variables controladas, una vez absorbida la perturbación, vuelven a sus puntos de consigna. En cambio, las variables manipuladas y demás variables no están en el mismo punto que antes de la introducción de la perturbación.

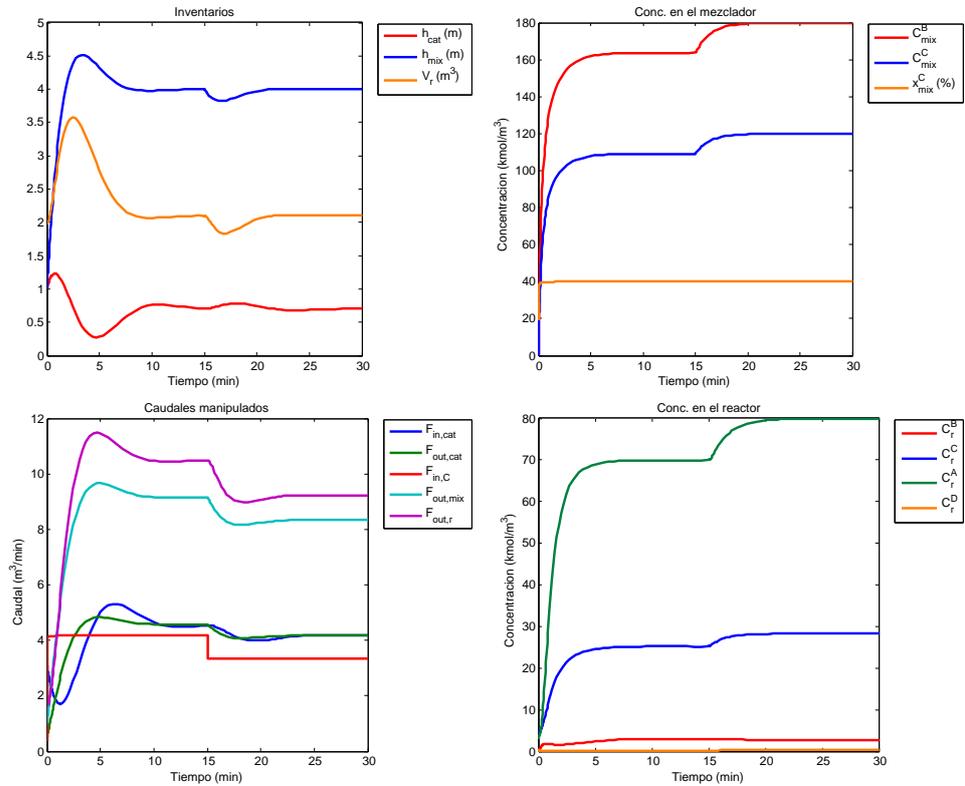


Figura 10.4: Salto escalón en la concentración $C_{in,C}^C$.

Al cambiar la concentración de alimentación del reactivo C ($C_{in,C}^C$) de 240 a 300 $kmol/m^3$ se obtiene la Figura 10.4, que refleja la evolución temporal del sistema. Al igual que con la perturbación anterior, las variables controladas vuelven a sus puntos de consigna mientras que el resto de variables alcanzan que un valor en régimen permanente diferente del anterior a la introducción del salto escalón.

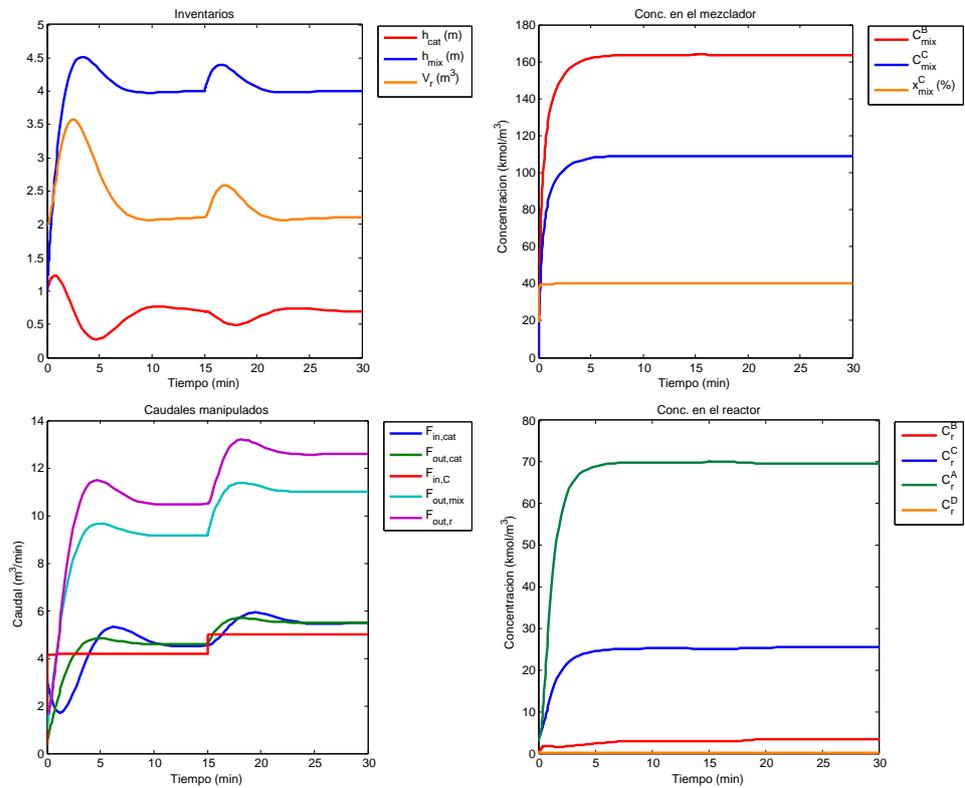


Figura 10.5: Salto escalón en el caudal $F_{in,B}$.

Por último, si se modifica el caudal de entrada $F_{in,B}$ de 5 a 6 m³/min se obtiene el comportamiento reflejado en la Figura 10.5. De nuevo, los controladores hacen que las variables controladas se mantienen en su punto de consigna mientras que el resto de variable sí se desvían de su estado estacionario anterior, como era de esperar.