

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

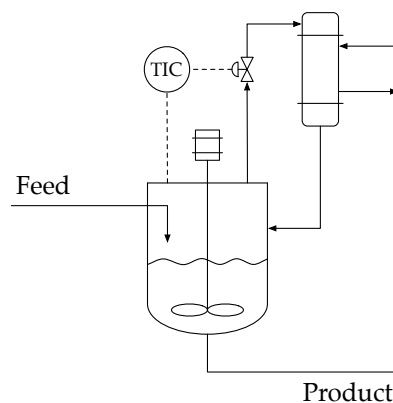


Figura 7.1: Reactor con control de temperatura.

- Temperatura de alimentación: 330 K
- Calor de reacción: -1400 kJ/kg
- Calor de vaporización: 637 kJ/kg
- Calor específico: $3,14 \text{ kJ/kg K}$
- Factor preexponencial: $7,08 \times 10^{10} \text{ 1/h}$
- Energía de activación: 76200 J/mol
- Constante universal de los gases: $R = 8,314 \text{ J/mol K}$
- Temperatura (set point) del reactor: 360 K
- Ganancia del controlador: $K_p = 30 \text{ kg/h K}$
- Tasa de vapor máxima: 1000 kg/h
- Tasa de vapor base: 330 kg/h
- Concentración inicial en el reactor: $0,25 \text{ kg/kg}$
- 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).

Objetivos

1. Realizar un modelo del sistema que incluya las ecuaciones del mismo y las suposiciones realizadas.
2. Realizar la simulación y un breve análisis de los resultados de la misma.
3. Recoger las dificultades encontradas (ecuaciones del modelo, método numérico empleado de Matlab o cualquier otra cosa).

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:

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

Balance de energía

El balance 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:

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

3. Balance de producto al reactor:

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

4. Balance de materia global al reactor:

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

5. Balance de energía:

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

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 Simulación

De acuerdo con el modelo expuesto en las ecuaciones anteriores y con los datos expuestos en el enunciado se puede simular el comportamiento del sistema. Se realizará la integración del modelo desde el instante inicial hasta que ha transcurrido 10 horas.

Resultan de interés las concentraciones en el medio de reacción tanto de reactivo como de producto así como la temperatura. Otra variable de interés es el caudal de vapor alimentado al condensador, que es la variable manipulada para controlar la temperatura del reactor. La representación de la evolución temporal de dichas variables se recoge en la Figura 7.2.

Al margen de la evolución de las concentraciones de reactivo y producto, llaman la atención dos situaciones. La primera de ellas es que el reactor no alcanza la temperatura de referencia. Esta situación, analizado el modelo, era una situación esperable, ya que refleja el comportamiento real de los controladores de tipo proporcional, en los que el error en régimen permanente no es nulo. Si se deseara obtener un error en régimen permanente nulo, se debería utilizar una acción integral, obteniéndose entonces un regulador de tipo proporcional-integral o PI.

La segunda situación que llama la atención es el comportamiento del caudal de alimentación al condensador. En los primeros instantes, el caudal que

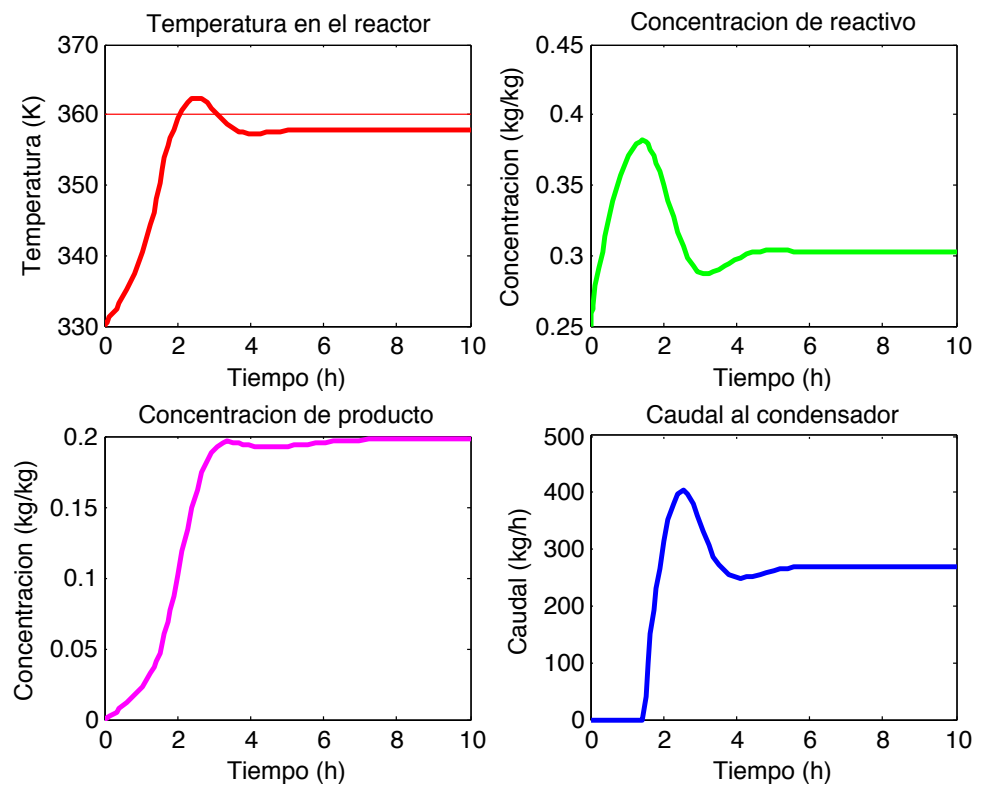


Figura 7.2: Simulación del reactor con control de temperatura.

se vaporiza es nulo ya que, puesto que la temperatura del reactor está por debajo de la temperatura de consigna, la forma de aumentar la temperatura del medio es no permitir que condense nada. En ningún momento se ha superado el valor máximo de caudal al condensador, por tanto, sólo aparece la saturación en el actuador por el límite inferior.

7.4 m-file

```
function control

clear all;
close all;

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

% Parametros de control
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)

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

[t x] = ode45(@derivada,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

% Graficos
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)')

function d = derivada(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)

%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)
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)

% 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);
```