

Ejercicios de Matlab de Simulación Dinámica

Modelización y simulación de procesos químicos

Curso 2010 – 2011

Ejercicio 1 *Balance de materia a un depósito*

Se dispone de un depósito que se vacía por gravedad y se quiere modelar y simular su comportamiento teniendo en cuenta los siguientes datos: Altura inicial de líquido en el depósito 1 m, caudal de entrada: $3 \text{ m}^3/\text{h}$, área del depósito: 10 m^2 , área de salida de la tubería: $0,001 \text{ m}^2$.

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo.
2. Resolver el modelo implementando el método de Euler explícito.
3. Comparar los resultados en función del paso de integración. Dibujar las curvas de evolución del sistema.

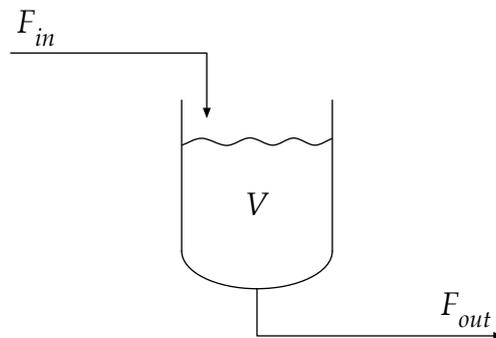


Figura 1: Depósito con salida por gravedad.

Ejercicio 2 Depósitos en serie conectados

Se dispone de dos depósitos conectados por el fondo según se ilustra en la Figura 2. La salida de los dos tanques es por gravedad. Cada depósito tiene un caudal de entrada. Se quiere modelar y simular el comportamiento de este sistema teniendo en cuenta los siguientes datos: Altura inicial de líquido en el primer depósito 0,8 m, altura inicial de líquido en el segundo depósito 0,2 m, caudal de entrada al primer depósito $2,2 \text{ m}^3/\text{h}$, caudal de entrada al segundo depósito: $1,6 \text{ m}^3/\text{h}$

Los dos depósitos son idénticos, teniendo un área de 10 m^2 y teniendo tanto la tubería que les conecta como la de salida del segundo depósito un área de salida de $0,001 \text{ m}^2$.

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo.
2. Resolver el modelo empleando el método de Runge-Kutta de orden 4.
3. Dibujar las curvas de evolución del sistema (niveles de ambos depósitos, caudal entre depósitos y caudal de salida).

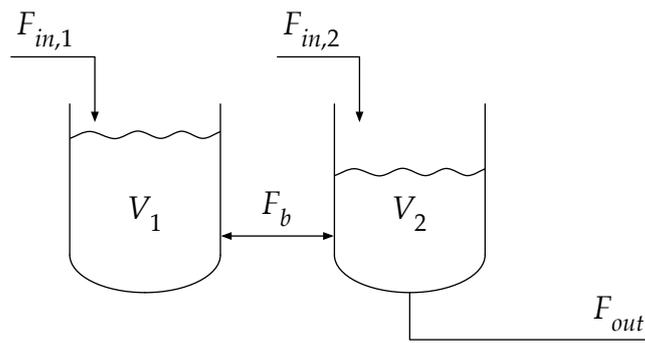


Figura 2: Depósitos conectados por el fondo.

Ejercicio 3 *Calentamiento de un depósito*

Se dispone de un tanque calentado mediante una camisa con un fluido calefactor (Figura 3). Se considera que el tanque mantiene el nivel constante. Teniendo en cuenta los siguientes datos del tanque y la camisa: Caudal de entrada al depósito 10 l/h, caudal de entrada a la camisa 15 l/h, densidad del líquido del depósito 1 kg/l, densidad del líquido calefactor 1,1 kg/l, calor específico del líquido del depósito 1,25 kcal/kg °C, calor específico del líquido calefactor 1,3 kcal/kg °C, volumen del tanque 25 l, volumen de la camisa 10 l, coeficiente global de transmisión de calor (U) 5 kcal/h m², área de intercambio 31 m², temperatura de la corriente de entrada al tanque 50°C, temperatura del fluido entrante a la camisa 150°C.

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo.
2. Resolver el modelo empleando la función `ode15s` de Matlab.
3. Dibujar las curvas de evolución del sistema.
4. Ver el comportamiento del sistema ante un salto escalón en:
 - a) El caudal de entrada a la camisa.
 - b) La temperatura de entrada a la camisa.

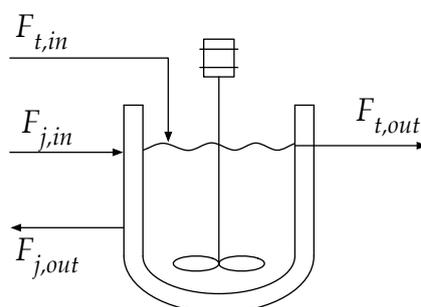


Figura 3: Tanque calentado mediante camisa.

Ejercicio 4 Reactor CSTR

Se quiere simular el comportamiento de un reactor de mezcla perfecta (CSTR). Se considera que el reactor es isoterma. La reacción que tiene lugar es $A \rightarrow B$. Es una reacción cuya cinética sigue la expresión de Arrhenius y es de primer orden respecto al reactivo A. El reactor tiene dos entradas y una salida, la cual se produce por el fondo del mismo por efecto de la gravedad.

Las condiciones de diseño y operación del reactor son: Caudal de entrada de la corriente F_1 5 m³/h, caudal de entrada de la corriente F_2 2 m³/h, concentración de A en la corriente F_1 0,5 kmol/m³, concentración de A en la corriente F_2 0,4 kmol/m³, área del tanque 3 m², área de salida de la tubería del tanque 0,0003 m², constante preexponencial $9703 \cdot 3600$ h⁻¹, energía de activación 11843 kcal/kmol, constante de los gases (R) 1,987 kcal/kmol K, temperatura del reactor 60°C, densidad: 1000 kg/m³ (considérese constante).

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo.
2. Resolver el modelo empleando la función `ode45` de Matlab.
3. Dibujar las curvas de evolución del sistema.
4. Ver el comportamiento del sistema ante un salto escalón en:
 - a) El caudal de la corriente 1.
 - b) La temperatura del reactor.

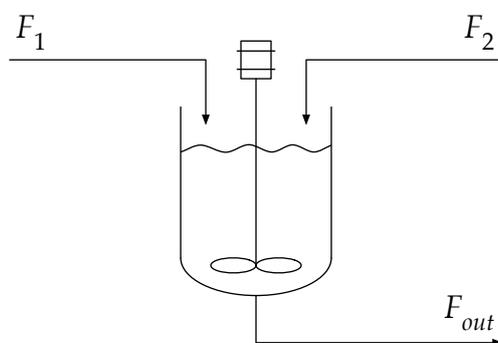


Figura 4: Reactor CSTR.

Ejercicio 5 *Columna de destilación binaria*

Se dispone de una columna de destilación binaria (Figura 5) de la cual se quiere estudiar su comportamiento en cuanto al balance de materia. La columna consta de 41 platos y la alimentación se sitúa en el plato número 21. Se sabe que la columna opera con un caudal de reflujo de 2,706 kmol/s y que el caudal de vapor que se reintroduce por el fondo de la columna es de 3,206 kmol/s.

La alimentación tiene un caudal de 1 kmol/s y entra con unas condiciones correspondientes a líquido saturado. La alimentación tiene una composición del 50 %m de cada uno de los dos componentes A y B. La volatilidad relativa —empleada para la ecuación que establece un equilibrio L-V ideal entre los componentes— es de $\alpha = 1,5$.

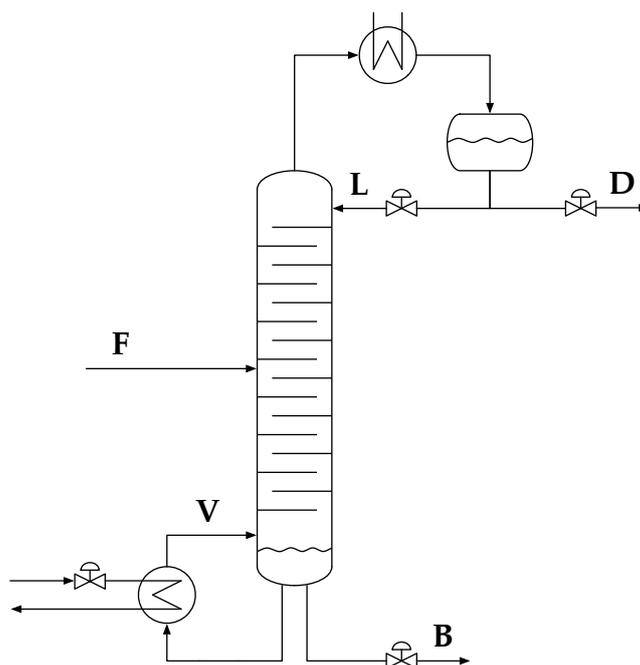


Figura 5: Columna de destilación binaria.

Para el cálculo de equilibrio considérese la ecuación:

$$y_i = \frac{\alpha \cdot x_i}{1 + (\alpha - 1) \cdot x_i} \quad (1)$$

La cantidad que se acumula en cada plato se considera constante siendo los valores obtenidos: En el condensador 5 kmol, en cada uno de los platos de la torre 0,5 kmol y en el rehervidor 5 kmol. Considérese una composición inicial en cada uno de los platos de 0,2.

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo.
2. Resolver el modelo empleando la función `ode45` de Matlab.
3. Dibujar la curva de evolución de la composición en alguno de los platos.
4. Representar el perfil de composiciones una vez se ha alcanzado el régimen permanente.

Ejercicio 6 Cambiador de carcasa y tubos discretizado

Se desea simular el comportamiento dinámico de un cambiador de carcasa y tubos con un único paso por la carcasa y doble paso por los tubos. Dicho cambiador es el mostrado en la Figura 6a.

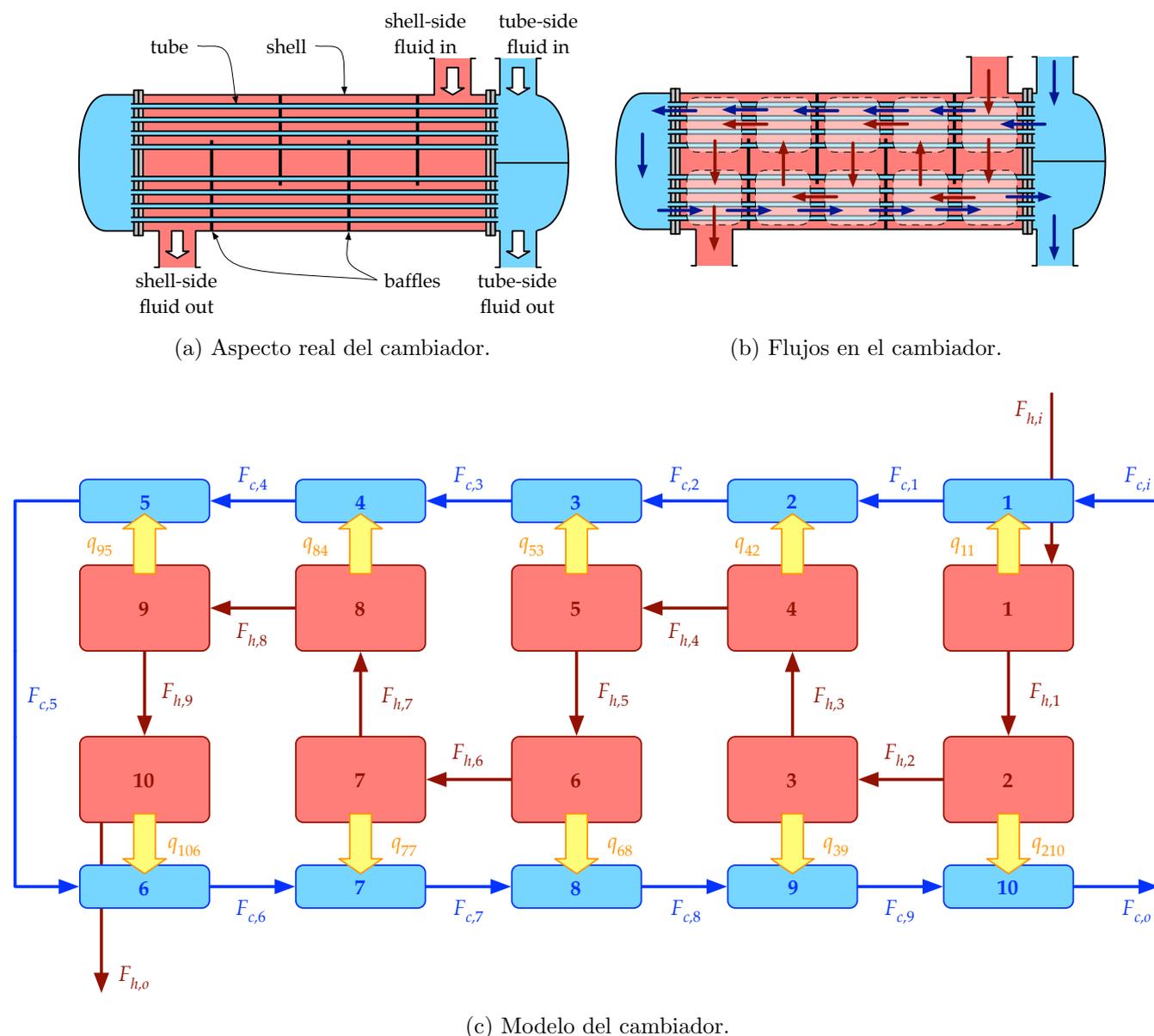


Figura 6: Cambiador de carcasa y tubos.

Para que la simulación dinámica de dicho cambiador fuese realmente precisa, habría que recurrir a la utilización de elementos finitos y de CFD¹. No obstante, de acuerdo con la hidráulica interna del cambiador, se puede realizar una discretización en zonas, tal y como se muestra en la Figura 6b.

De este modo, el modelo del cambiador quedaría reducido al mostrado en la Figura 6c. A efectos de simulación, se supondrá que cada uno de los volúmenes de control representados —tanto para el fluido caliente como para el fluido frío— tienen el mismo volumen y el mismo área de intercambio.

Del fluido caliente —que se circula por la carcasa— se alimenta una corriente de 580 kg/min a una temperatura de 320 K y del fluido frío —que circula por los tubos— 500 kg/min a 293 K. El fluido

¹Acrónimo del inglés *Computational Fluid Dynamics*.



caliente tiene un calor específico de $2160 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}}$ y el fluido frío de $4184 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}}$. La carcasa tiene una capacidad de 1000 kg de fluido caliente y los tubos de 800 kg de fluido frío, siendo el producto $U A = 1,5 \times 10^6 \frac{\text{J}}{\text{K}\cdot\text{min}}$. Inicialmente el cambiador se encuentra a la temperatura del fluido frío.

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo.
2. Resolver el modelo empleando un método de integración de Matlab apropiado.
3. Dibujar las curvas de evolución temporal de las temperaturas a la salida tanto del fluido caliente como del fluido frío.
4. Dibujar el perfil de temperaturas de ambos fluidos una vez se ha alcanzado el régimen estacionario.
5. Analizar el comportamiento de las temperaturas a la salida frente a un salto en escalón en:
 - a) La temperatura del fluido frío.
 - b) El caudal en de fluido caliente.

Ejercicio 7 Reactor con condensador y control de temperatura

La Figura 7 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.

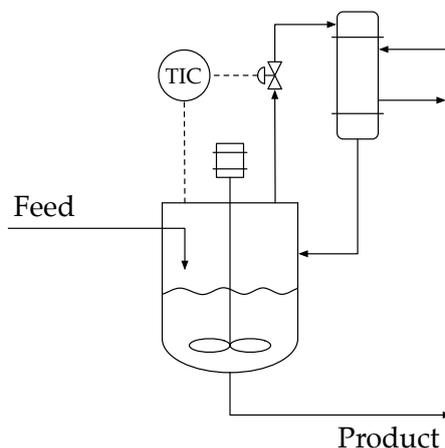


Figura 7: Reactor con control de temperatura.

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 $7,08 \times 10^{10}$ l/h, energía de 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.

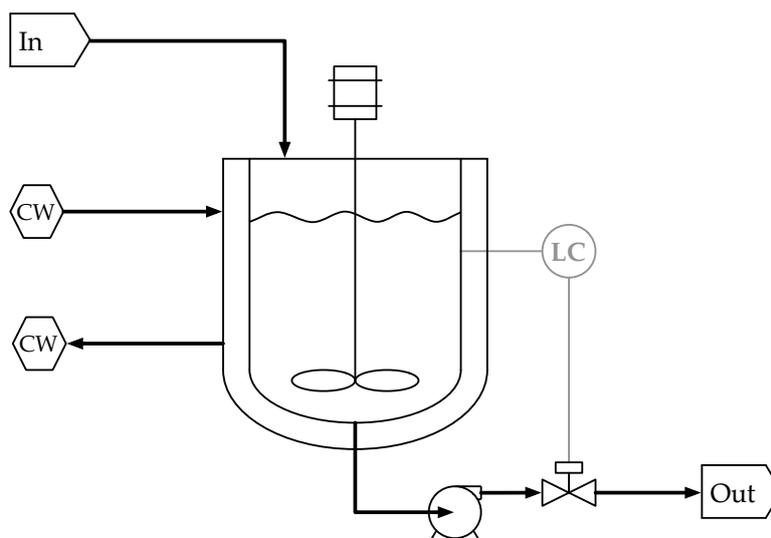


Figura 8: Reactor CSTR con camisa de refrigeración y control de nivel.

Ejercicio 8 Reactor CSTR con control de nivel

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 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 \cdot 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 \cdot 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 \cdot 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 \cdot 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 Ie que representa la integral del error de modo que

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

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.

Ejercicio 9 Reactor Semi-batch

Se dispone de un reactor semicontinuo (Figura 9), 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.

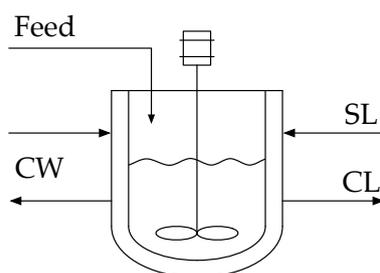


Figura 9: Reactor semibatch.

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 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 $0,01 \text{ kmol/m}^3$.

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/m^3
- Volumen total (máximo) del reactor: 10 m^3
- 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: $2,5 \text{ m}^3/\text{h}$
- 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 m³
- Concentración inicial de LA en el reactor: 100 kmol/m³
- 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.

Nota: Ejercicio de examen, convocatoria de 4 de junio de 2009.

Ejercicio 10 *Proceso químico*

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

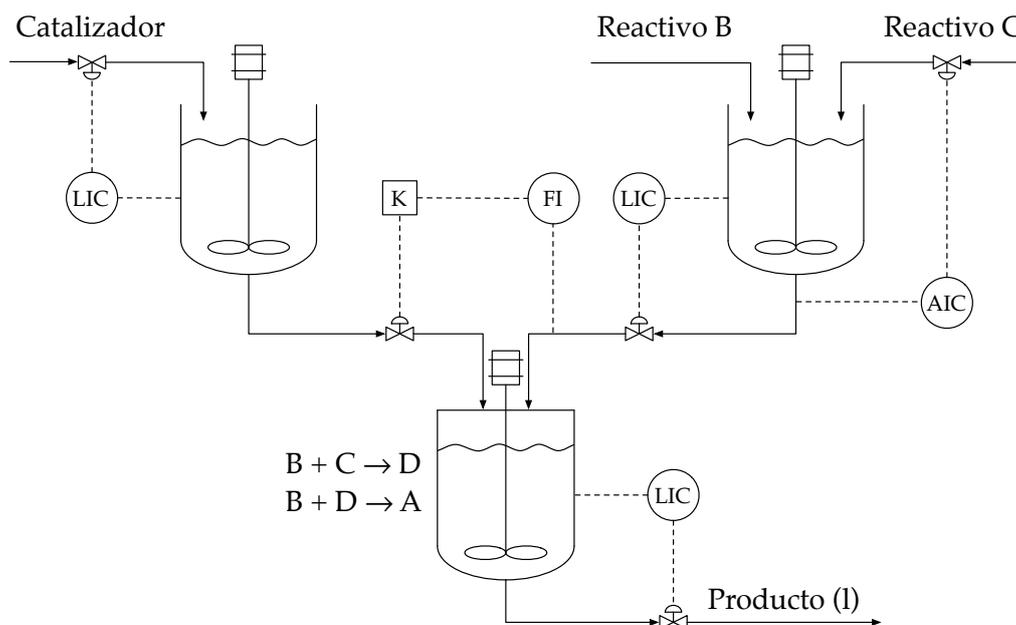


Figura 10: Proceso químico.

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

$$F_{in} = \text{Bias} + K_c \cdot e + \frac{K_c}{\tau_I} \cdot \int e \quad (2)$$

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 m^2
- Ganancia: $K_c = 3$
- Constante integral: $\tau_I = 2$

- Set point: $SP = 0,7$ m
- Bias: $4 \text{ m}^3/\text{min}$

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:

$$F_{out} = \text{Bias} - K_c \cdot e - \frac{K_c}{\tau_I} \int e \quad (3)$$

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:

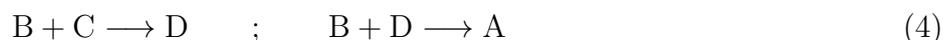
- Ganancia: $K_c = 2$
- Constante integral: $\tau_I = 1$
- Set point: $SP = 40\%$ fracción molar de C
- Bias: 0

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 kJ/mol y 45605 kJ/mol , también respectivamente. Se trata de un reactor isotermo 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:

$$F_{out} = \text{Bias} - K_c \cdot e - \frac{K_c}{\tau_I} \int e \quad (5)$$

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 poing: $SP = 2,1 \text{ m}^3$
- Bias: $2 \text{ m}^3/\text{min}$

La densidad de todas las corrientes se considerará constante y de valor 450 kmol/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.