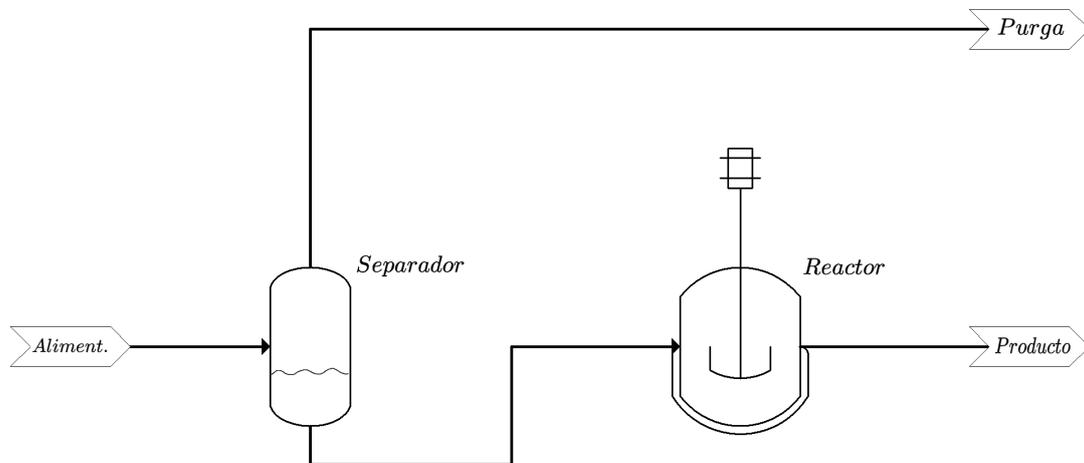


Examen de Simulación Dinámica

Modelización y Simulación de procesos químicos

Jueves, 24 de mayo de 2012

Se quiere simular el comportamiento dinámico de un sistema en el que la alimentación entra a un separador líquido-vapor para eliminar los vapores e introducir la fase líquida a un reactor CSTR.



Al separador se alimentan 50 kmol/h de una mezcla bifásica (líquido-vapor) de A y B con una composición de 0.8 (fracción molar) de A y una fracción de líquido del 35%. El separador tiene una capacidad total de 15 kmol de líquido (considérese la acumulación de la fase vapor despreciable) que se mantiene constante. Puede suponerse que en su interior la fase gaseosa y la líquida se encuentran en equilibrio. Para el cálculo del equilibrio considere la siguiente ecuación:

$$y = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x} \quad (1)$$

donde y es la fracción molar del componente ligero (B) en el vapor, x es la fracción molar del componente ligero (B) en el líquido y α es la volatilidad relativa, que tiene un valor de 2. También puede suponerse que todo el líquido de la alimentación pasa a la fase líquida del separador y que todo el vapor de la alimentación pasa a la fase vapor del separador.

El vapor del separador se extrae por la parte superior y constituye la purga del sistema. El líquido se extrae del separador a 35 °C y se introduce en el reactor. Inicialmente el separador se encuentra únicamente lleno con el componente B.

El reactor está provisto de una camisa por la que se circula agua de refrigeración ya que, a altas temperaturas, los productos se descomponen. La camisa de refrigeración, en cuyo interior se puede considerar mezcla perfecta, tiene un parámetro UA para el intercambio de calor de $8000 \frac{\text{kJ}}{\text{h} \cdot \text{K}}$ y un volumen de 1000 litros.

La temperatura del agua de refrigeración es constante e igual a 20 °C. El reactor tiene un volumen de 1200 litros y la salida del mismo se produce por rebose. Se puede considerar que la densidad del líquido para cualquier composición es de 0.07 kmol/litro.

La reacción que se produce en el reactor es del tipo $A \rightarrow C$, de primer orden respecto de A. La constante



de velocidad se rige por una ecuación de tipo Arrhenius en la que el factor preexponencial tiene un valor de $17 \times 10^{13} h^{-1}$ y la energía de activación 75000 kJ/kmol . La reacción es exotérmica siendo el valor del calor de reacción -85000 kJ/kmol de A reaccionado. Inicialmente el reactor, al igual que el separador se encuentra lleno únicamente del componente B y a una temperatura de $35 \text{ }^\circ\text{C}$. Para el cálculo del calor específico de las mezclas A , B , C , éste se supondrá constante e igual a $C_P^M = 120 \text{ kJ/kmol} \cdot \text{K}$.

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo dinámico del equipo indicando las suposiciones e hipótesis adoptadas, volúmenes de control y tipos de ecuaciones (conservación, constitutivas, etc.) (4 puntos).
2. Implementar en MATLAB el modelo del separador (no incluir las ecuaciones correspondientes al reactor) y representar la evolución temporal de la composición en B de ambas corrientes de salida. En una hoja esbozar las gráficas obtenidas y anotar las composiciones cuando se alcanza el estado estacionario (2 puntos).
3. Implementar en MATLAB el modelo completo del proceso. Representar la evolución temporal de la composición en el medio de reacción y de la temperatura. En una hoja anotar los valores en estado estacionario de las composiciones y esbozar las gráficas obtenidas (2 puntos).
4. Analizar y comentar el comportamiento del sistema en cuanto a composición del producto y temperatura del reactor en las siguientes situaciones (2 puntos):
 - La alimentación al proceso pasa de tener una fracción de líquido del 35 % al 45 %.

Notas

1. Se entregará en papel al finalizar el examen las respuestas a los apartados 1, 2, 3 y 4; indicando nombre y número de matrícula.
2. Se enviarán por e-mail los archivos `*.m` a la dirección de correo `ismael.diaz@upm.es`, correspondientes a los apartados 2, 3 y 4.
3. Duración del examen: **2** horas.

Resolución

1.- Modelo matemático

Suposiciones e hipótesis

1. Se supondrá que en el medio de reacción hay mezcla perfecta, por lo que no hay gradientes espaciales de ninguna propiedad física y, por tanto, las condiciones de la corriente de salida en cuanto a composición y temperatura son las mismas que en el interior del reactor.
2. Se asumirán propiedades físicas —calor específico y densidad— independientes tanto de la temperatura como de la concentración y de la composición.
3. Se tomarán como volúmenes de control el líquido acumulado en el separador con la entrada de alimentación y las salidas de líquido y vapor (purga) y el líquido contenido en el reactor, con una entrada y una salida de materia y un aporte externo de calor

Leyenda

F_{alim} : Caudal de alimentación (kmol/h).

F_{int} : Caudal intermedio separador-reactor (kmol/h).

F_{out} : Caudal de producto del reactor (kmol/h).

F_{purg} : Caudal de purga (kmol/h).

N_S^i : Número de moles de i en el reactor con $i = A, B, C$ (kmol).

N_R^i : Número de moles de i en el reactor con $i = A, B, C$ (kmol).

N_S : Número de moles totales en el separador (kmol).

N_R : Número de moles totales en el reactor (kmol).

z_{alim}^i : Concentración de i en la alimentación con $i = A, B, C$ (adim).

q : Fracción de líquido en la alimentación (alim).

α : Volatilidad relativa B/A.

y_S^i : Fracción molar de i en el vapor saliente del separador con $i = A, B, C$ (adim).

x_S^i : Fracción molar de i en el líquido saliente del separador con $i = A, B, C$ (adim).

UA : Coeficiente global de transmisión de calor ($\frac{\text{kJ}}{\text{h} \cdot \text{K}}$).

V_R : Volumen del reactor (l).

T_{cw} : Temperatura del agua de refrigeración (K).

k_0 : Factor preexponencial de la constante de velocidad de la reacción (1/h).

E_a : Energía de activación (kJ/kmol).

ρ : Densidad (kmol/l).

T_R : Temperatura en el medio de reacción (K).

N_R^i : Número de moles de i en el reactor con $i = A, B, C$ (kmol).

x_R^i : Fracción molar de i en el reactor con $i = A, B, C$ (adim).

ΔH_x : Entalpía de reacción (kJ/kmol de A).

C_P^M : Calor específico medio ($\frac{\text{kJ}}{\text{kmol} \cdot \text{K}}$).

Q : Tasa de calor intercambiado entre el vapor y el medio de reacción (kJ/min).

r : Velocidad de reacción ($\frac{\text{kmol}}{\text{h} \cdot \text{l}}$).

t : Tiempo (min).

Balances de materia

El balance de materia global en el separador:

$$\frac{dN_S}{dt} = F_{alim} - F_{int} - F_{purg} \quad (2)$$

El número de moles acumulado (considerando solo el líquido) permanece constante, luego:

$$N_S = \text{cte} \quad \longrightarrow \quad \frac{dN_S}{dt} = 0 \quad (3)$$

Para describir el comportamiento del separador basta con describir el comportamiento de uno de los componentes, en este caso lo haremos para el componente volátil B :

$$\frac{dN_S^B}{dt} = F_{alim}z_{alim} - F_{int}x_S^B - F_{purg}y_S^B \quad (4)$$

Como N_S es constante, se puede expresar la ecuación anterior como:

$$\frac{dx_S^B}{dt} = \frac{F_{alim}z_{alim} - F_{int}x_S^B - F_{purg}y_S^B}{N_S} \quad (5)$$

El balance de materia global en el reactor:

$$\frac{dN_R}{dt} = F_{int} - F_{out} \quad (6)$$

Puesto que la salida del tanque es por rebose y la densidad no cambia, podemos considerar que:

$$N_R = V_R\rho = \text{cte} \quad \longrightarrow \quad \frac{dN_R}{dt} = 0 \quad (7)$$

Se llevan a cabo a continuación los balances de moles de las tres especies presentes en el reactor:

$$\frac{dN_R^A}{dt} = F_{int}x_S^A - F_{out}x_R^A - rV_R \quad (8)$$

$$\frac{dN_R^B}{dt} = F_{int}x_S^B - F_{out}x_R^B \quad (9)$$

$$\frac{dN_R^C}{dt} = -F_{out}x_R^V + rV_R \quad (10)$$

Como se ha visto en (7), $V_R\rho$ es constante, luego las ecuaciones (8) (9) y (10) se pueden escribir como:

$$\frac{dx_R^A}{dt} = \frac{F_{int}x_S^A - F_{out}x_R^A - rV_R}{N_R} \quad (11)$$

$$\frac{dx_R^B}{dt} = \frac{F_{int}x_S^B - F_{out}x_R^B}{N_R} \quad (12)$$

$$\frac{dx_R^C}{dt} = \frac{-F_{out}x_R^V + rV_R}{N_R} \quad (13)$$

Balances de energía

El balance de energía en el reactor queda como:

$$\frac{dH_R}{dt} = F_{int}C_P^M T_{int} - F_{out}C_P^M T_R - \Delta H_x r V_R - Q \quad (14)$$

El balance de materia se puede simplificar considerando la definición de entalpía:

$$H_R = N_R C_M^P T_R \quad (15)$$

Sustituyendo (15) en (14) se obtiene la expresión final del balance de energía:

$$\frac{dT_R}{dt} = \frac{1}{N_R C_M^P} (F_{int} C_P^M T_{int} - F_{out} C_P^M T_R - \Delta H_x r V_R - Q) \quad (16)$$

Ecuaciones auxiliares

- Caudales del separador

$$F_{int} = q F_{alim} \quad F_{purg} = (1 - q) F_{alim} \quad (17)$$

- Equilibrio líquido-vapor

$$y = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x} \quad (18)$$

- Fracciones molares de A y C en la corriente del reactor y de purga

$$x_S^A = 1 - x_S^B \quad y_S^A = 1 - y_S^B \quad x_S^C = y_S^C = 0 \quad (19)$$

- Velocidad de reacción

$$r = k C_R^A \quad (20)$$

donde

$$C_R^A = \frac{N_R^A}{V_R} \quad \text{y} \quad k = k_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right)$$

- Calor intercambiado

$$Q = UA(T_R - T_{cw}) \quad (21)$$

2. Simulación del separador

Ver figura 1.

Modelo

```
function d=separador(t,x)
% Variables
xSB = x; % Fraccion molar de B en el separador

% Parametros
Falim = 50; % Caudal alimentacion kmol/h
zalimB = 1-0.8; % Fraccion molar B alimentacion
q = 0.35; % Fraccion liquido alimentacion adim
```



```
alpha = 2; % Volatilidad relativa B/A adim
NS = 15; % Acumulacion separador kmol

% Calculos previos
Fpurg = (1-q)*Falim; % Caudal de purga kmol/h
Fint = q*Falim; % Caudal de int kmol/h
ySB = alpha*xSB/(1 + (alpha-1)*xSB); % Fraccion molar B vapor

%Ecuaciones diferenciales
% dxSB/dt
d = (Falim*zAB - Fint*xSB - Fpurg*ySB)/NS;
end
```

Principal

```
clear all
close all
clc
xS0 = 1;
time = [0 5];
[t,x] = ode45('separador',time,xS0);
% Obtencion de las fracciones molares del vapor en equilibrio
alpha = 2;
y = alpha*x./(1 + (alpha - 1)*x);
xs = x(end);
ys = y(end);
% Representacion grafica de las
plot(t,x,'b','linewidth',2)
hold on
plot(t,y,'r','linewidth',2)
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Fraccion molar')
legend('x_{purg}^B','y_{int}^B',0)
```

3. Simulación del proceso

Ver figuras 2 y 3.

Modelo

```
function d=modelo_completo(t,x)
% Variables
xSB = x(1); % Fraccion molar de B en el separador adim
NRA = x(2); % Moles de A en el reactor kmol
NRB = x(3); % Moles de B en el reactor kmol
NRC = x(4); % Moles de C en el reactor kmol
TR = x(5); % Temperatura en el reactor K

% Parametros
```

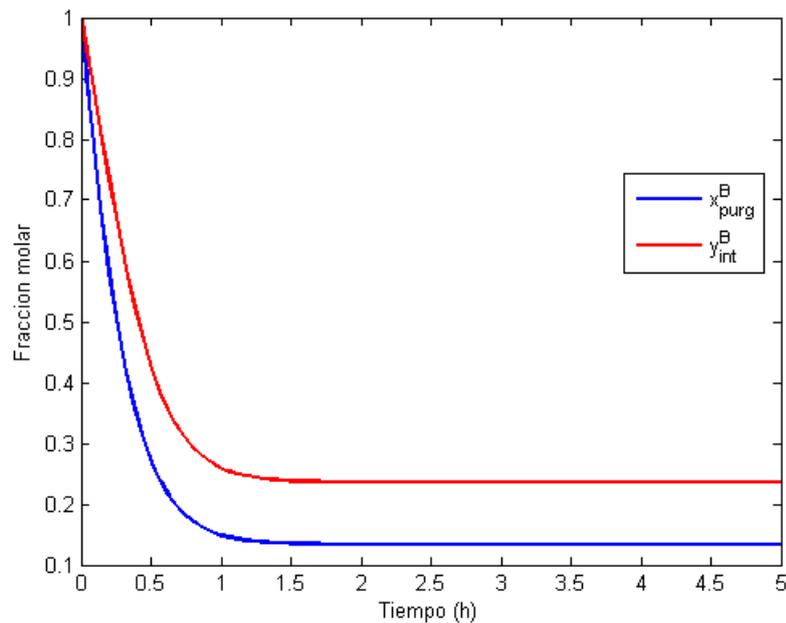


Figura 1: Evolución temporal de la fracción molar de volátil en el separador.

```

Falim = 50; % Caudal alimentacion kmol/h
zalim = 1- 0.8; % Fraccion molar de B alimentacion
q = 0.35; % Fraccion liquido alimentacion adim
alpha = 2; % Volatilidad relativa A/B adim
NS = 15; % Acumulacion separador kmol
UA = 8000; % Coef. global int. calor kJ/h.K
VR = 1200; % Volumen del reactor L
Tcw = 20+273; % Temperatura agua refrigeracion K
k0 = 17e13; % Factor preexp. cte. velocidad 1/h
Ea = 75000; % Energia activacion kJ/kmol
R = 8.314; % Cte. gases ideales kJ/kmol.K
rho = 0.07; % Densidad molar kmol/L
CPM = 120; % Calor esp. medio kJ/kmol.K
DH = -85000; % Calor de reaccion kJ/kmol
Tint = 35+273; % Temperatura int K

```

```
% Calculos previos
```

```

Fpurg = (1-q)*Falim; % Caudal de purga kmol/h
Fint = q*Falim; % Caudal de int kmol/h
Fout = Fint; % Caudal de producto kmol/h
xSA=1-xSB; % Fraccion molar de A en la salida del separador
ySB = alpha*xSB/(1 + (alpha-1)*xSB); % Fraccion molar B vapor
ySA = 1 - ySB; % Fraccion molar de A en la salida del separador
xSC = 0; % Fraccion molar de C en la salida del separador
NR = NRA + NRB + NRC; % Moles totales en el reactor kmol
xRA = NRA/NR; % Fraccion molar de A en el reactor
xRB = NRB/NR; % Fraccion molar de B en el reactor
xRC = NRC/NR; % Fraccion molar de C en el reactor

```



```
%Ecuaciones auxiliares
Q = UA*(TR - Tcw); % Calor intercambiado kJ/h
CRA = NRA/VR;
k = k0*exp(-Ea/(R*TR)); % Cte. de velocidad 1/h
r = k*CRA; % Velocidad de reaccion kmol/h.L

% Ecuaciones diferenciales
% dxSB/dt
d(1,1) = (Falim*zalim - Fint*xSB - Fpurg*ySB)/NS;
% dNRA/dt
d(2,1) = Fint*xSA - Fout*xRA - r*VR;
% dNRB/dt
d(3,1) = Fint*xSB - Fout*xRB;
% dNRC/dt
d(4,1) = Fint*xSC - Fout*xRC + r*VR;
%dTR/dt
d(5,1)=(Fint*CPM*Tint-Fout*CPM*TR-DH*r*VR-Q)/(NR*CPM);
end
```

Principal

```
close all
clear all
clc
% Parametros

VR = 1200; % Volumen del reactor L
rho = 0.07; % Densidad molar kmol/L
CPM = 120; % Calor esp. medio kJ/kmol.K

% Condiciones iniciales
xS0 = 1; % Fraccion molar de B en el separador
NRA0 = 0; % Moles de A en el reactor kmol
NRB0 = VR*rho; % Moles de B en el reactor kmol
NRC0 = 0; % Moles de C en el reactor kmol
TRO = 35+273; % Temperatura en el reactor K

% Vector de condiciones iniciles
x0 = [xS0 NRA0 NRBO NRC0 TRO];

% Tiempo de integracion h
time = [0 25];
[t,x] = ode15s('modelo_completo',time,x0);
NRA = x(:,2); % Moles de A en el reactor kmol
NRB = x(:,3); % Moles de B en el reactor kmol
NRC = x(:,4); % Moles de C en el reactor kmol
TR = x(:,5); % Temperatura en el reactor K
NR = VR*rho; % Moles totales en el reactor kmol

for i = 1:length(t)
```

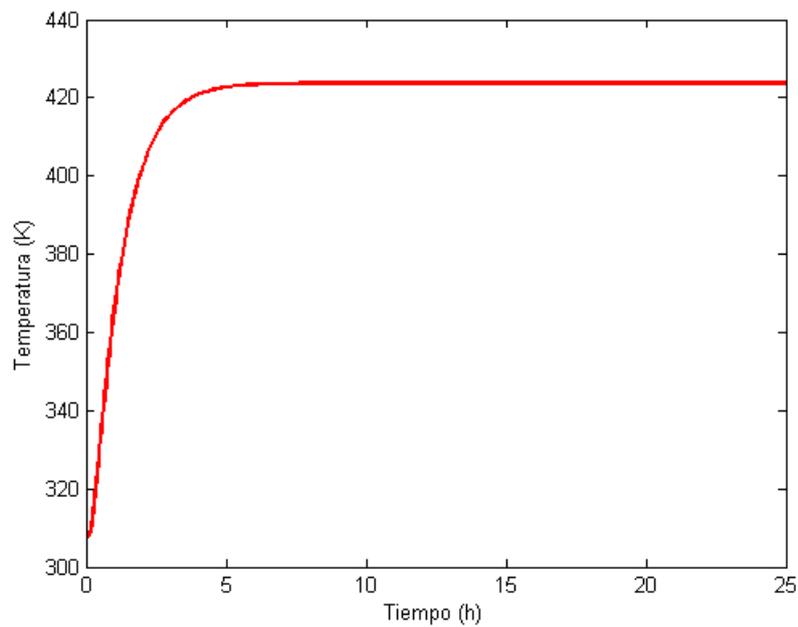


Figura 2: Evolución temporal de la temperatura del reactor

```
xRA(i) = NRA(i)/NR; % Fraccion molar de A en el reactor
xRB(i) = NRB(i)/NR; % Fraccion molar de B en el reactor
xRC(i) = NRC(i)/NR; % Fraccion molar de C en el reactor
end
```

```
% Representacion de la temperatura
plot(t,TR,'r','linewidth',2)
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Temperatura (K)')
% Representacion de las composiciones
figure
plot(t,[xRA' xRB' xRC'],'linewidth',2)
xlabel('Tiempo (h)')
ylabel('Fraccion molar (adim)')
legend('x_R^A','x_R^B','x_R^C',0)
```

3. Perturbación de la fracción de alimentación

Ver figura 4.

Se añade el siguiente código al modelo completo:

```
if t<10
q=0.35
else
q=0.45
end
```

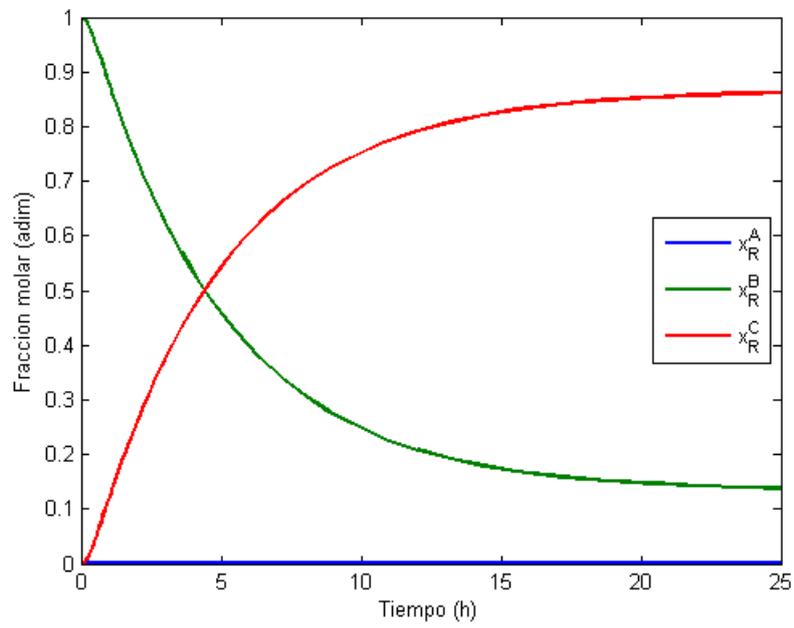


Figura 3: Evolución temporal de las composiciones en el reactor

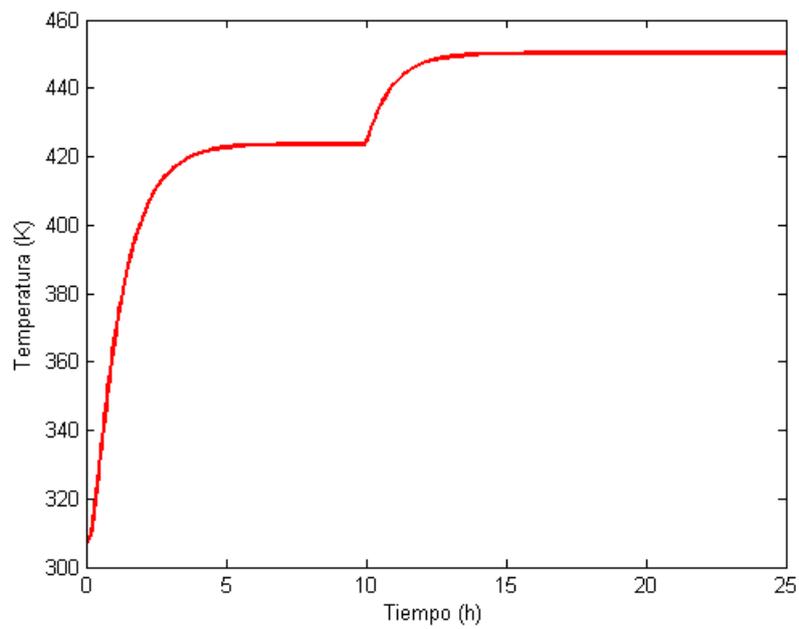


Figura 4: Efecto de q sobre T