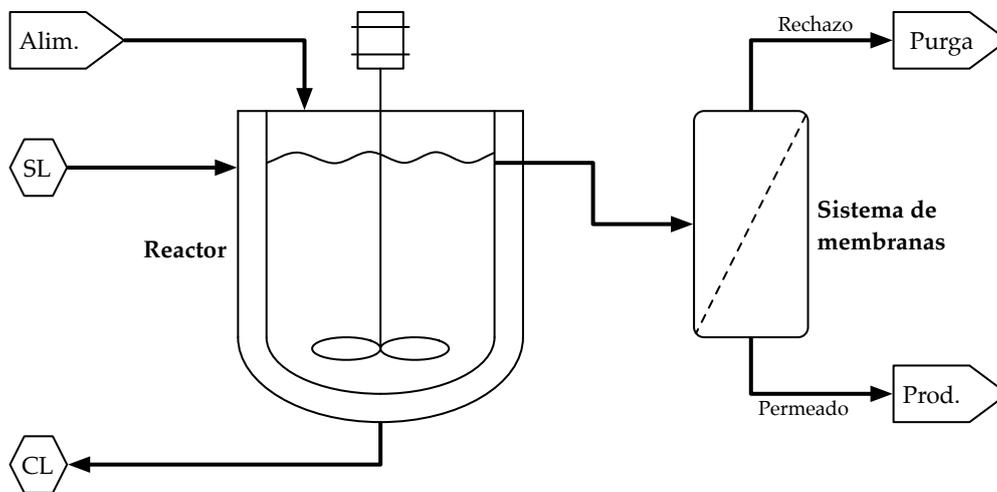


# Examen de Simulación Dinámica

Modelización y simulación de procesos químicos

Jueves, 19 de mayo de 2011

Se quiere simular la puesta en marcha y operación del sistema de reacción y separación mediante membranas representado en la siguiente figura.



Para llevar a cabo la reacción se utilizará un reactor de tipo CSTR provisto de una camisa por la que se circula vapor a presión para el calentamiento del reactor. Puesto que el calentamiento se realiza con vapor condensante, puede considerarse para el intercambio de calor que el lado de la camisa está a la temperatura a la que condensa el vapor. El reactor tiene un volumen de 5000 litros y la salida del mismo se produce por rebose. Al reactor se alimentan 500 l/min de una disolución acuosa con una concentración de A de 4 mol/l y a una temperatura de 20°C. En el reactor se produce la siguiente serie de reacciones:



Todas las reacciones tienen lugar en medio acuoso y diluido y, además, son irreversibles y de primer orden. Sus constantes de velocidad, expresadas en 1/min, son

$$k_1 = 10^6 \cdot \exp(-6000/T) \quad (2)$$

$$k_2 = 10^4 \cdot \exp(-4000/T) \quad (3)$$

$$k_3 = 10^5 \cdot \exp(-9000/T) \quad (4)$$

$$k_4 = 10^9 \cdot \exp(-12000/T) \quad (5)$$

en donde  $T$  es la temperatura del medio de reacción expresada en grados Kelvin. Se consideran despreciables todas las entalpías de reacción. Debe tenerse en cuenta que las reacciones no tienen lugar si la temperatura

del medio de reacción se encuentra por debajo de 50°C. Inicialmente el reactor se encuentra lleno de agua pura a una temperatura de 20°C.

Para separar los productos de la reacción se utiliza un equipo de separación mediante membranas. Dicho equipo permite el paso del 90 % del caudal volumétrico de disolución alimentada y del 98 % del producto T (ambos constituyen el permeado), constituyendo el resto de disolvente y de solutos el rechazo del equipo de membranas (concentrado). Nótese que los productos R, S y U, al igual que el reactivo A constituyen el rechazo, por lo que **no** atraviesan la membrana. Puede suponerse que la reacción se detiene al salir del reactor y que en las membranas no se produce acumulación.

Datos adicionales:

- Calor específico de la disolución (independiente de la concentración y de la composición):  $4180 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}\cdot\text{K}}$
- Densidad de la disolución (independiente de la concentración y de la composición): 1 kg/l
- Temperatura de condensación del vapor alimentado a la camisa: 200°C
- Coeficiente global de intercambio de calor:  $40.000 \frac{\text{kJ}}{\text{m}^2\cdot\text{min}\cdot\text{K}}$
- Área de intercambio: 25 m<sup>2</sup>
- Calor latente de condensación del vapor: 2270 kJ/kg

**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. (4 puntos).
2. Implementar en MATLAB el modelo del equipo sin tener en cuenta el balance o balances de energía y suponiendo que el reactor opera a una temperatura de 80°C. Representar gráficamente la evolución temporal de la concentración de T en ambas corrientes de salida (*Prod.* y *Purga*). En una hoja escribir el tiempo aproximado que tarda en alcanzarse el régimen permanente y esbozar las gráficas obtenidas (3 puntos).
3. Implementar en MATLAB el modelo completo del equipo. Representar gráficamente la evolución temporal de la temperatura del medio de reacción así como de la concentración de las 5 especies en la corriente de purga. Determinar y representar el caudal de vapor necesario en cada instante. En una hoja anotar los tiempos en que se estabilizan la temperatura y las concentraciones. Esbozar las gráficas obtenidas (2 puntos).
4. En un momento dado, el sistema de vapor de la planta tiene un pequeño fallo y cuando el reactor ya estaba en régimen permanente se interrumpe el suministro de vapor. Dicho fallo puede interpretarse como una interrupción en el aporte de calor desde la camisa. Represente gráficamente la evolución temporal de la temperatura y de las concentraciones en el medio de reacción. En una hoja describir y analizar el comportamiento encontrado en ambas variables (1 punto).

**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 [manuel.rodriquezh@upm.es](mailto:manuel.rodriquezh@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 supondrá que todo el intercambio de calor entre la camisa y el medio de reacción se produce por condensación de vapor en la pared del reactor, por lo que la temperatura de intercambio será la de condensación del vapor.
4. Se tomarán como volúmenes de control el líquido acumulado en el reactor, con una entrada y una salida de materia y un aporte externo de calor, y el del sistema de separación mediante membranas, con una entrada y dos salidas de materia y en el que se supondrá que no hay acumulación ni generación de materia.

### Leyenda

$F_{alim}$ : Caudal de alimentación (l/min).

$F_{int}$ : Caudal intermedio reactor-membrana (l/min).

$F_{prod}$ : Caudal de producto (permeado) (l/min).

$F_{purg}$ : Caudal de purga (rechazo) (l/min).

$F_{vap}$ : Caudal de vapor en la camisa (kg/min).

$C_{alim}^i$ : Concentración de  $i$  en la alimentación con  $i = A, R, S, T, U$  (mol/l).

$C_R^i$ : Concentración de  $i$  en el reactor con  $i = A, R, S, T, U$  (mol/l).

$C_{int}^i$ : Concentración de  $i$  en el caudal intermedio con  $i = A, R, S, T, U$  (mol/l).

$C_{prod}^i$ : Concentración de  $i$  en el caudal de producto con  $i = A, R, S, T, U$  (mol/l).

$C_{purg}^i$ : Concentración de  $i$  en el caudal de purga con  $i = A, R, S, T, U$  (mol/l).

$N_R^i$ : Número de moles de  $i$  en el reactor con  $i = A, R, S, T, U$  (mol).

$V_R$ : Volumen del reactor (l).

$r_j$ : Velocidad de la reacción  $j$ -ésima con  $j = 1, 2, 3, 4$  (mol/l · min).

$k_j$ : Constante de velocidad de la reacción  $j$ -ésima con  $j = 1, 2, 3, 4$  (1/min).

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

$T_{alim}$ : Temperatura de la alimentación (K).

$T_{vap}$ : Temperatura de condensación del vapor (K).

$C_p$ : Calor específico (kJ/mol · K).

$L_{vap}$ : Calor latente de condensación del vapor (kJ/kg).

$\rho$ : Densidad (kg/l).

$U$ : Coeficiente global de transmisión de calor (kJ/m<sup>2</sup> · min · K).

$A$ : Área de intercambio de calor (m<sup>2</sup>).

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

$t$ : Tiempo (min).

## Balances de materia

Para realizar los balances de materia se adoptarán dos volúmenes de control. Uno que se corresponde con el medio de reacción y otro con el sistema de separación mediante membranas.

El balance de materia global al reactor sería:

$$\frac{dV_R}{dt} = F_{alim} - F_{int} \quad (6)$$

no obstante, puesto que la salida del reactor se produce por rebose, el volumen es constante, por lo que

$$V_R = cte \quad \Leftrightarrow \quad \frac{dV_R}{dt} = 0 \quad (7)$$

por tanto, de acuerdo con las dos ecuaciones anteriores

$$F_{alim} - F_{int} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad F_{alim} = F_{int} \quad (8)$$

Los balances de materia al reactor por componentes son

$$\frac{dN_R^A}{dt} = F_{alim} \cdot C_{alim}^A - F_{int} \cdot C_R^A + (-r_1 - r_2) \cdot V_R \quad (9)$$

$$\frac{dN_R^R}{dt} = F_{alim} \cdot C_{alim}^R - F_{int} \cdot C_R^R + (r_1 - r_3 - r_4) \cdot V_R \quad (10)$$

$$\frac{dN_R^S}{dt} = F_{alim} \cdot C_{alim}^S - F_{int} \cdot C_R^S + r_3 \cdot V_R \quad (11)$$

$$\frac{dN_R^T}{dt} = F_{alim} \cdot C_{alim}^T - F_{int} \cdot C_R^T + r_2 \cdot V_R \quad (12)$$

$$\frac{dN_R^U}{dt} = F_{alim} \cdot C_{alim}^U - F_{int} \cdot C_R^U + r_4 \cdot V_R \quad (13)$$

No obstante, puesto que el volumen del reactor permanece constante se tiene que

$$\left. \begin{array}{l} N_R^i = V_R \cdot C_R^i \\ V_R = cte \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{dN_R^i}{dt} = \frac{d}{dt}(V_R \cdot C_R^i) = V_R \frac{dC_R^i}{dt} \quad ; \quad i = A, R, S, T, U \quad (14)$$

por tanto, los balances de materia por componentes quedarían

$$\frac{dC_R^A}{dt} = \frac{1}{V_R} [F_{alim} \cdot C_{alim}^A - F_{int} \cdot C_R^A + (-r_1 - r_2) \cdot V_R] \quad (15)$$

$$\frac{dC_R^R}{dt} = \frac{1}{V_R} [F_{alim} \cdot C_{alim}^R - F_{int} \cdot C_R^R + (r_1 - r_3 - r_4) \cdot V_R] \quad (16)$$

$$\frac{dC_R^S}{dt} = \frac{1}{V_R} [F_{alim} \cdot C_{alim}^S - F_{int} \cdot C_R^S + r_3 \cdot V_R] \quad (17)$$

$$\frac{dC_R^T}{dt} = \frac{1}{V_R} [F_{alim} \cdot C_{alim}^T - F_{int} \cdot C_R^T + r_2 \cdot V_R] \quad (18)$$

$$\frac{dC_R^U}{dt} = \frac{1}{V_R} [F_{alim} \cdot C_{alim}^U - F_{int} \cdot C_R^U + r_4 \cdot V_R] \quad (19)$$

De acuerdo con los datos del enunciado, las ecuaciones anteriores pueden simplificarse ya que

$$C_{alim}^R = C_{alim}^S = C_{alim}^T = C_{alim}^U = 0 \quad (20)$$

por tanto, finalmente, los balances de materia por componentes al reactor quedarían

$$\frac{dC_R^A}{dt} = \frac{1}{V_R} [F_{alim} \cdot C_{alim}^A - F_{int} \cdot C_R^A + (-r_1 - r_2) \cdot V_R] \quad (21)$$

$$\frac{dC_R^R}{dt} = \frac{1}{V_R} [-F_{int} \cdot C_R^R + (r_1 - r_3 - r_4) \cdot V_R] \quad (22)$$

$$\frac{dC_R^S}{dt} = \frac{1}{V_R} [-F_{int} \cdot C_R^S + r_3 \cdot V_R] \quad (23)$$

$$\frac{dC_R^T}{dt} = \frac{1}{V_R} [-F_{int} \cdot C_R^T + r_2 \cdot V_R] \quad (24)$$

$$\frac{dC_R^U}{dt} = \frac{1}{V_R} [-F_{int} \cdot C_R^U + r_4 \cdot V_R] \quad (25)$$

El otro volumen de control es el correspondiente al equipo de separación mediante membranas. Puesto que en este equipo no hay ni reacción ni acumulación, el balance de materia global quedaría:

$$F_{int} = F_{prod} + F_{purg} \quad (26)$$

Si se realizan los balances de materia por componentes, se tiene que

$$F_{int} \cdot C_{int}^A = F_{prod} \cdot C_{prod}^A + F_{purg} \cdot C_{purg}^A \quad (27)$$

$$F_{int} \cdot C_{int}^R = F_{prod} \cdot C_{prod}^R + F_{purg} \cdot C_{purg}^R \quad (28)$$

$$F_{int} \cdot C_{int}^S = F_{prod} \cdot C_{prod}^S + F_{purg} \cdot C_{purg}^S \quad (29)$$

$$F_{int} \cdot C_{int}^T = F_{prod} \cdot C_{prod}^T + F_{purg} \cdot C_{purg}^T \quad (30)$$

$$F_{int} \cdot C_{int}^U = F_{prod} \cdot C_{prod}^U + F_{purg} \cdot C_{purg}^U \quad (31)$$

No obstante, puesto que la única especie que atraviesa la membrana es T, esto es, puesto que

$$C_{prod}^A = C_{prod}^R = C_{prod}^S = C_{prod}^U = 0 \quad (32)$$

por lo que los balances de materia por componentes quedarían

$$F_{int} \cdot C_{int}^A = F_{purg} \cdot C_{purg}^A \quad (33)$$

$$F_{int} \cdot C_{int}^R = F_{purg} \cdot C_{purg}^R \quad (34)$$

$$F_{int} \cdot C_{int}^S = F_{purg} \cdot C_{purg}^S \quad (35)$$

$$F_{int} \cdot C_{int}^T = F_{purg} \cdot C_{purg}^T + F_{prod} \cdot C_{prod}^T \quad (36)$$

$$F_{int} \cdot C_{int}^U = F_{purg} \cdot C_{purg}^U \quad (37)$$

## Balance de energía

Dadas las características del sistema, sólo es necesario realizar un balance de energía al reactor

$$\frac{dH_R}{dt} = F_{alim} \cdot C_p \cdot T_{alim} - F_{int} \cdot C_p \cdot T_R + Q \quad (38)$$

en donde la entalpía en el reactor puede expresarse como

$$H_R = m_R \cdot C_p \cdot T_R = \rho \cdot V_R \cdot C_p \cdot T_R \quad (39)$$

sin embargo, puesto que el volumen del reactor así como la densidad y el calor específico permanecen constantes en el tiempo

$$\frac{dH_R}{dt} = \frac{d}{dt} (\rho \cdot V_R \cdot C_p \cdot T_R) = \rho \cdot V_R \cdot C_p \cdot \frac{dT_R}{dt} \quad (40)$$

por tanto, el balance de energía al reactor quedaría

$$\frac{dT_R}{dt} = \frac{1}{\rho \cdot V_r \cdot C_p} [F_{alim} \cdot C_p \cdot T_{alim} - F_{int} \cdot C_p \cdot T_R + Q] \quad (41)$$

Puesto que el calentamiento del reactor se hace mediante vapor condensante no es necesario realizar ni balance de energía ni balance de materia a la camisa ya que, conocida la temperatura de condensación se puede determinar la tasa de transferencia de calor.

## Ecuaciones auxiliares y constitutivas

- Calor aportado de la camisa al reactor:

$$Q = U \cdot A \cdot (T_{vap} - T_R) \quad (42)$$

- Vapor condensado en la camisa:

$$F_{vap} \cdot L_{vap} = Q \implies F_{vap} = \frac{Q}{L_{vap}} \quad (43)$$

- Ecuación de Arrhenius para la constante de velocidad. De acuerdo con las ecuaciones (2), (3), (4) y (5) del enunciado:

$$k_1 = 10^6 \cdot \exp(-6000/T) \quad (44)$$

$$k_2 = 10^4 \cdot \exp(-4000/T) \quad (45)$$

$$k_3 = 10^5 \cdot \exp(-9000/T) \quad (46)$$

$$k_4 = 10^9 \cdot \exp(-12000/T) \quad (47)$$

- Velocidades de reacción:

$$r_1 = k_1 \cdot C_R^A \quad (48)$$

$$r_2 = k_2 \cdot C_R^A \quad (49)$$

$$r_3 = k_3 \cdot C_R^R \quad (50)$$

$$r_4 = k_4 \cdot C_R^R \quad (51)$$

No obstante, debe tenerse en cuenta que, por debajo de 50°C las reacciones se detienen, por lo que

$$\text{Si } T_R < 323 \text{ K} \implies r_j = 0 \quad \forall j = 1, 2, 3, 4 \quad (52)$$

- Paso de disolución a través de la membrana:

$$F_{prod} = 0,9 \cdot F_{int} \quad (53)$$

- Paso de producto T a través de la membrana:

$$F_{prod} \cdot C_{prod}^T = 0,98 \cdot F_{int} \cdot C_{int}^T \quad (54)$$

## 2.- Simulación de los balances de materia

La función que recoge el modelo, sin tener en cuenta el balance de energía sería:

```
function d = modelo2(t,x)
```

```
CRA = x(1); % Concentracion de A en el reactor mol/l
```

```
CRR = x(2); % Concentracion de R en el reactor mol/l
```

```
CRS = x(3); % Concentracion de S en el reactor mol/l
```

```
CRT = x(4); % Concentracion de T en el reactor mol/l
```

```
CRU = x(5); % Concentracion de U en el reactor mol/l
```

```
% PARAMETROS
```

```
U = 40000;          % Coef. global int. calor kJ/m2.min.K
A = 25;             % Area de intermcambio m2
Tvap = 200+273;    % Temperatura de condensacion vapor K
Falim = 500;       % Caudal alimentacion l/min
Talim = 20 + 273;  % Temperatura de alimentacion K
CalimA = 4;        % Concentracion de A en la alimentacion mol/l
rho = 1;           % Densidad en kg/l
Cp = 4180;         % Calor especifico kJ/kg.K
VR = 5000;         % Volumen del reactor l
TR = 80 + 273;    % Temperatura en el reactor K
```

```
% ECUACIONES AUXILIARES
```

```
% Constantes de velocidad 1/min
k1 = (10^6) * exp(-6000/TR);
k2 = (10^4) * exp(-4000/TR);
k3 = (10^5) * exp(-9000/TR);
```



```
k4 = (10^9) * exp(-12000/TR);

% Velocidades de reaccion mol/l.min
r1 = k1*CRA;
r2 = k2*CRA;
r3 = k3*CRR;
r4 = k4*CRR;

% Caudal de salida del reactor
Fint = Falim; % l/min

% ECUACIONES DEL MODELO

% dCRA/dt
d(1,1) = (Falim*CalimA - Fint*CRA + (-r1 - r2)*VR)/VR;

% dCRR/dt
d(2,1) = (-Fint*CRR + (r1 - r3 - r4)*VR)/VR;

% dCRS/dt
d(3,1) = (-Fint*CRS + r3*VR)/VR;

% dCRT/dt
d(4,1) = (-Fint*CRT + r2*VR)/VR;

% dCRU/dt
d(5,1) = (-Fint*CRU + r4*VR)/VR;

Y el cuerpo principal del programa:

close all
clear all
clc

% PARAMETROS

U = 40000;      % Coef. global int. calor kJ/m2.min.K
A = 25;        % Area de intercambio m2
Tvap = 200+273; % Temperatura de condensacion vapor K
Falim = 500;   % Caudal alimentacion l/min
Talim = 20 + 273; % Temperatura de alimentacion K
CalimA = 4;    % Concentracion de A en la alimentacion mol/l
rho = 1;       % Densidad en kg/l
Cp = 4180;     % Calor especifico kJ/kg.K
VR = 5000;     % Volumen del reactor l

% INTEGRACION DEL MODELO

x0 = [0 0 0 0 0]; % Concentraciones iniciales mol/l
time = [0 60]; % Tiempo integracion en min
```

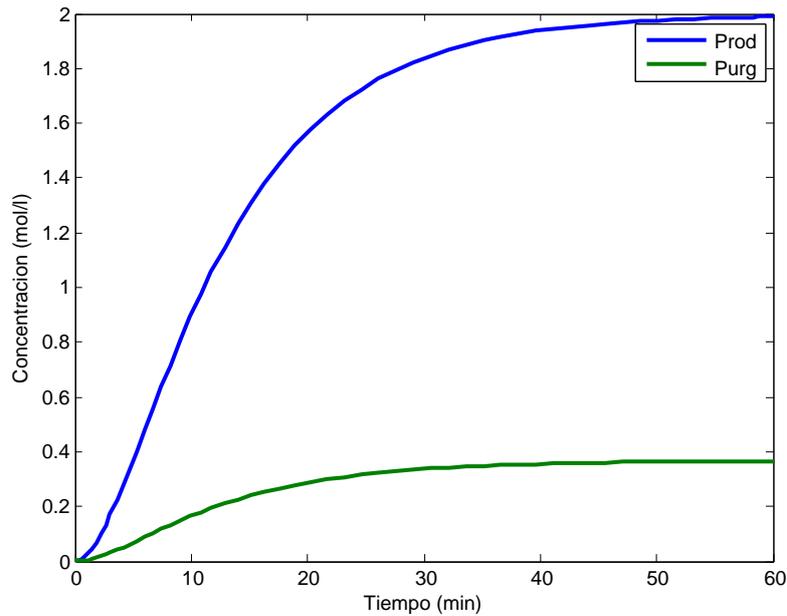


Figura 1: Evolución temporal de las concentraciones de T.

```
[t,y] = ode45('modelo2',time,x0);
```

```
% REPRESENTACION GRAFICA
```

```
Fint = Falim;           % Caudal intermedio l/min
Fprod = 0.9*Fint;       % Caudal de producto l/min
Fpurg = Fint - Fprod;   % Caudal de purga l/min
```

```
% Concentraciones de T en el producto y en la purga mol/l
```

```
CprodT = 0.98*Fint*y(:,4)/Fprod;
CpurgT = (Fint*y(:,4) - Fprod*CprodT)/Fpurg;
```

```
% Representacion de ambas concentraciones
```

```
plot(t,[CprodT CpurgT],'linewidth',2)
xlabel('Tiempo (min)');
ylabel('Concentracion (mol/l)')
legend('Prod','Purg')
```

De este modo se obtiene la evolución temporal de las concentraciones de T en el producto y en la purga recogida en la Figura 1, en donde puede apreciarse que la concentración de T en la corriente de producto es muy superior a la de la corriente de purga. El cálculo de dichas concentraciones se ha realizado a partir de los balances de materia al sistema de membranas.

### 3.- Simulación del modelo completo

Si se añade al modelo el balance de energía al medio de reacción se puede obtener la siguiente función:

```
function d = modelo3(t,x)
```

```
CRA = x(1); % Concentracion de A en el reactor mol/l
```



```
CRR = x(2); % Concentracion de R en el reactor mol/l
CRS = x(3); % Concentracion de S en el reactor mol/l
CRT = x(4); % Concentracion de T en el reactor mol/l
CRU = x(5); % Concentracion de U en el reactor mol/l
TR = x(6); % Temperatura en el reactor K
```

#### % PARAMETROS

```
U = 40000; % Coef. global int. calor kJ/m2.min.K
A = 25; % Area de intercambio m2
Tvap = 200+273; % Temperatura de condensacion vapor K
Falim = 500; % Caudal alimentacion l/min
Talim = 20 + 273; % Temperatura de alimentacion K
CalimA = 4; % Concentracion de A en la alimentacion mol/l
rho = 1; % Densidad en kg/l
Cp = 4180; % Calor especifico kJ/kg.K
VR = 5000; % Volumen del reactor l
```

#### % ECUACIONES AUXILIARES

```
% Constantes de velocidad 1/min
```

```
k1 = (106) * exp(-6000/TR);
k2 = (104) * exp(-4000/TR);
k3 = (105) * exp(-9000/TR);
k4 = (109) * exp(-12000/TR);
```

```
% Velocidades de reaccion mol/l.min
```

```
if TR < 323 % Por debajo de 50oC se anulan
```

```
    r1 = 0;
    r2 = 0;
    r3 = 0;
    r4 = 0;
```

```
else % Por encima de 50oC son reacciones elementales
```

```
    r1 = k1*CRA;
    r2 = k2*CRA;
    r3 = k3*CRR;
    r4 = k4*CRR;
```

```
end
```

```
% Calor intercambiado kJ/min
```

```
Q = U*A*(Tvap - TR);
```

```
% Caudal de salida del reactor
```

```
Fint = Falim; % l/min
```

#### % ECUACIONES DEL MODELO

```
% dCRA/dt
```

```
d(1,1) = (Falim*CalimA - Fint*CRA + (-r1 - r2)*VR)/VR;
```



```
% dCRR/dt
d(2,1) = (-Fint*CRR + (r1 - r3 - r4)*VR)/VR;

% dCRS/dt
d(3,1) = (-Fint*CRS + r3*VR)/VR;

% dCRT/dt
d(4,1) = (-Fint*CRT + r2*VR)/VR;

% dCRU/dt
d(5,1) = (-Fint*CRU + r4*VR)/VR;

% dTR/dt
d(6,1) = (Falim*Cp*Talim - Fint*Cp*TR + Q)/(rho*VR*Cp);
```

Y el cuerpo principal del programa:

```
close all
clear all
clc

% PARAMETROS

U = 40000;      % Coef. global int. calor kJ/m2.min.K
A = 25;        % Area de intermcabio m2
Tvap = 200+273; % Temperatura de condensacion vapor K
Falim = 500;   % Caudal alimentacion l/min
Talim = 20 + 273; % Temperatura de alimentacion K
CalimA = 4;    % Concentracion de A en la alimentacion mol/l
rho = 1;       % Densidad en kg/l
Cp = 4180;     % Calor especifico kJ/kg.K
VR = 5000;     % Volumen del reactor l
Lvap = 2270;   % Calor latente del vapor kJ/kg

% INTEGRACION DEL MODELO
% Condiciones iniciales 5 conc. (mol/l) y una temp. (K)
x0 = [0 0 0 0 0 20+273];
time = [0 60]; % Tiempo integracion en min

[t,y] = ode15s('modelo3',time,x0);

% REPRESENTACION GRAFICA

% Temperatura
figure;
plot(t,y(:,6),'r','linewidth',2);
xlabel('Tiempo (min)');
ylabel('Temperatura (K)');

% Caudal de vapor
Q = U*A*(Tvap - y(:,6)); % Calor intercambiado kJ/min
```

```

Fvap = Q/Lvap; % Caudal de vapor kg/min
figure;
plot(t,Fvap,'r','linewidth',3);
xlabel('Tiempo (min)');
ylabel('Caudal (kg/min)');

% Caudales
Fint = Falim;          % Caudal salida reactor l/min
Fprod = Fint*0.9;     % Caudal producto l/min
Fpurg = Fint - Fprod; % Caudal de purga l/min

% Concentraciones mol/l
CintA = y(:,1);
CintR = y(:,2);
CintS = y(:,3);
CintT = y(:,4);
CintU = y(:,5);

CpurgA = Fint*CintA/Fpurg;
CpurgR = Fint*CintR/Fpurg;
CpurgS = Fint*CintS/Fpurg;
CpurgU = Fint*CintU/Fpurg;
CpurgT = (Fint*CintT - 0.98*Fint*CintT)/Fpurg;

Cpurg = [CpurgA CpurgR CpurgS CpurgT CpurgU];

figure;
plot(t,Cpurg,'linewidth',2);
xlabel('Tiempo (min)')
ylabel('Concentracion (mol/l)')
legend('C_{purg}^A','C_{purg}^R','C_{purg}^S','C_{purg}^T','C_{purg}^U')

```

De este modo se obtiene la evolución temporal de la temperatura (Figura 2), del caudal de vapor alimentado a la camisa (Figura 3) y de las concentraciones en la corriente de purga (Figura 4). Nótese cómo la temperatura del reactor aumenta hasta estabilizarse en torno a los 351 K y cómo no comienza la reacción —comienza a aparecer alguno de los productos de la reacción— hasta que la temperatura del medio de reacción no supera los 323 K (50°C).

#### 4.- Análisis del fallo en el vapor

Para analizar el fallo en el sistema de vapor basta con anular el aporte de calor una vez se haya alcanzado el régimen permanente, en este caso, a partir del minuto 60. Para ello, se construye la siguiente función (idéntica a la del apartado anterior pero introduciendo que el calor se anule para  $t > 60$  min):

```

function d = modelo4(t,x)

CRA = x(1); % Concentracion de A en el reactor mol/l
CRR = x(2); % Concentracion de R en el reactor mol/l
CRS = x(3); % Concentracion de S en el reactor mol/l
CRT = x(4); % Concentracion de T en el reactor mol/l
CRU = x(5); % Concentracion de U en el reactor mol/l

```

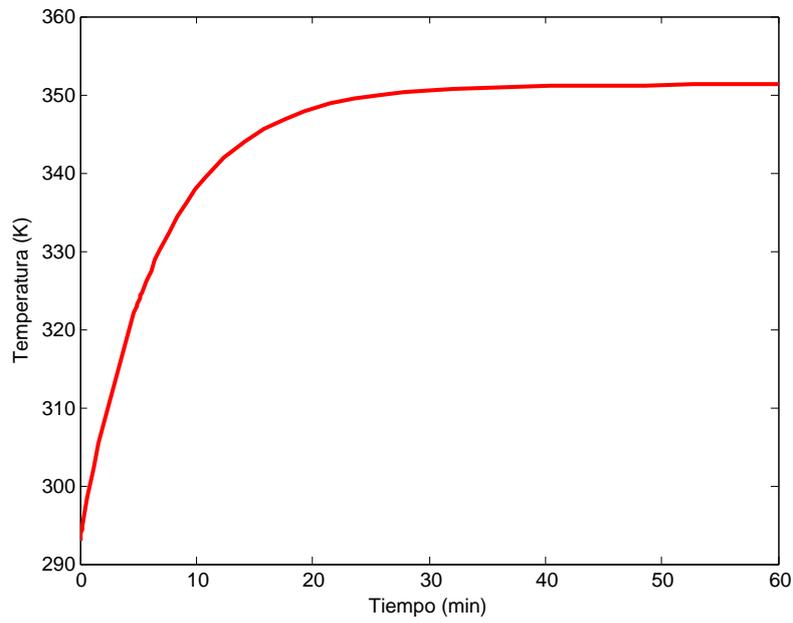


Figura 2: Evolución temporal de la temperatura en el reactor.

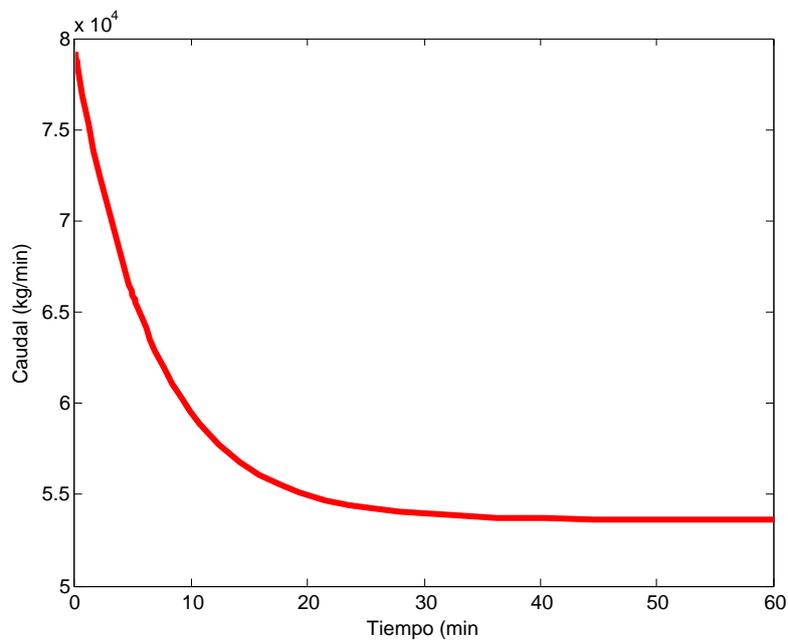


Figura 3: Caudal másico de vapor alimentado a la camisa.

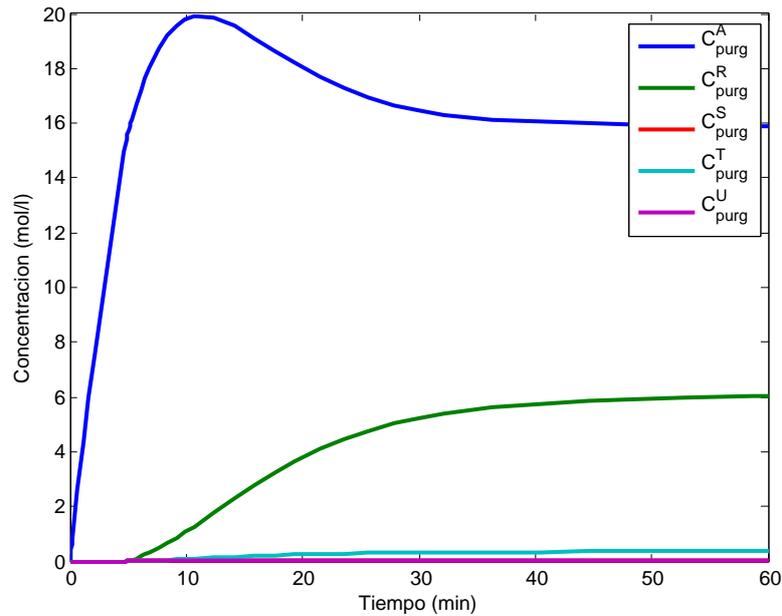


Figura 4: Evolución temporal de las concentraciones en la purga.

TR = x(6); % Temperatura en el reactor K

% PARAMETROS

```

U = 40000;      % Coef. global int. calor kJ/m2.min.K
A = 25;        % Area de intercambio m2
Tvap = 200+273; % Temperatura de condensacion vapor K
Falim = 500;   % Caudal alimentacion l/min
Talim = 20 + 273; % Temperatura de alimentacion K
CalimA = 4;    % Concentracion de A en la alimentacion mol/l
rho = 1;       % Densidad en kg/l
Cp = 4180;    % Calor especifico kJ/kg.K
VR = 5000;   % Volumen del reactor l

```

% ECUACIONES AUXILIARES

```

% Constantes de velocidad 1/min
k1 = (10^6) * exp(-6000/TR);
k2 = (10^4) * exp(-4000/TR);
k3 = (10^5) * exp(-9000/TR);
k4 = (10^9) * exp(-12000/TR);

% Velocidades de reaccion mol/l.min
if TR < 323 % Por debajo de 50oC se anulan
    r1 = 0;
    r2 = 0;
    r3 = 0;
    r4 = 0;
else % Por encima de 50oC son reacciones elementales
    r1 = k1*CRA;

```

```

    r2 = k2*CRA;
    r3 = k3*CRR;
    r4 = k4*CRR;
end

% Calor intercambiado
Q = U*A*(Tvap - TR);

% Interrupcion del suministro de vapor
if t >= 60
    Q = 0;
end

% Caudal de salida del reactor
Fint = Falim;

% ECUACIONES DEL MODELO

% dCRA/dt
d(1,1) = (Falim*CalimA - Fint*CRA + (-r1 - r2)*VR)/VR;

% dCRR/dt
d(2,1) = (-Fint*CRR + (r1 - r3 - r4)*VR)/VR;

% dCRS/dt
d(3,1) = (-Fint*CRS + r3*VR)/VR;

% dCRT/dt
d(4,1) = (-Fint*CRT + r2*VR)/VR;

% dCRU/dt
d(5,1) = (-Fint*CRU + r4*VR)/VR;

% dTR/dt
d(6,1) = (Falim*Cp*Talim - Fint*Cp*TR + Q)/(rho*VR*Cp);

Y el cuerpo principal del programa:

close all
clear all
clc

% PARAMETROS

U = 40000;      % Coef. global int. calor kJ/m2.min.K
A = 25;        % Area de intermcabio m2
Tvap = 200+273; % Temperatura de condensacion vapor K
Falim = 500;    % Caudal alimentacion l/min
Talim = 20 + 273; % Temperatura de alimentacion K
CalimA = 4;     % Concentracion de A en la alimentacion mol/l
rho = 1;       % Densidad en kg/l

```

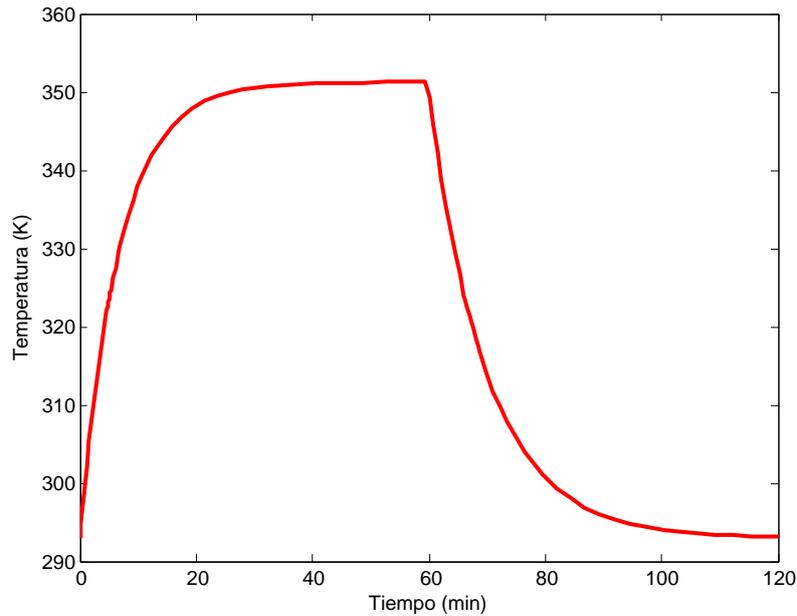


Figura 5: Evolución temporal de la temperatura en el reactor.

```

Cp = 4180;          % Calor especifico kJ/kg.K
VR = 5000;         % Volumen del reactor l

% INTEGRACION DEL MODELO

x0 = [0 0 0 0 0 20+273]; % Condiciones iniciales
time = [0 120]; % Tiempo integracion en min

[t,y] = ode15s('modelo4',time,x0);

% REPRESENTACION GRAFICA

figure;
plot(t,y(:,6),'r','linewidth',2);
xlabel('Tiempo (min)');
ylabel('Temperatura (K)');

figure;
plot(t,y(:,1:5),'linewidth',2);
xlabel('Tiempo (min)');
ylabel('Concentracion (mol/l)');
legend('A','R','S','T','U')

```

De este modo se obtienen las figuras 5 y 6, que representan la evolución de la temperatura y de las concentraciones en el reactor, respectivamente. Puede apreciarse como, una vez superado el minuto 60 la temperatura del reactor cae hasta situarse a 293 K (20°C), temperatura de la alimentación.

En las concentraciones (Figura 6) se observa que a partir del minuto 60, inicialmente la concentración del reactivo A aumenta y la de los productos cae debido a la reducción en la temperatura, lo que supone que la velocidad de reacción también caiga. No obstante, a partir de que la temperatura del medio de reacción caiga por debajo de los 293 K (50°C), las reacciones se inhiben por lo que las concentraciones de los productos caen

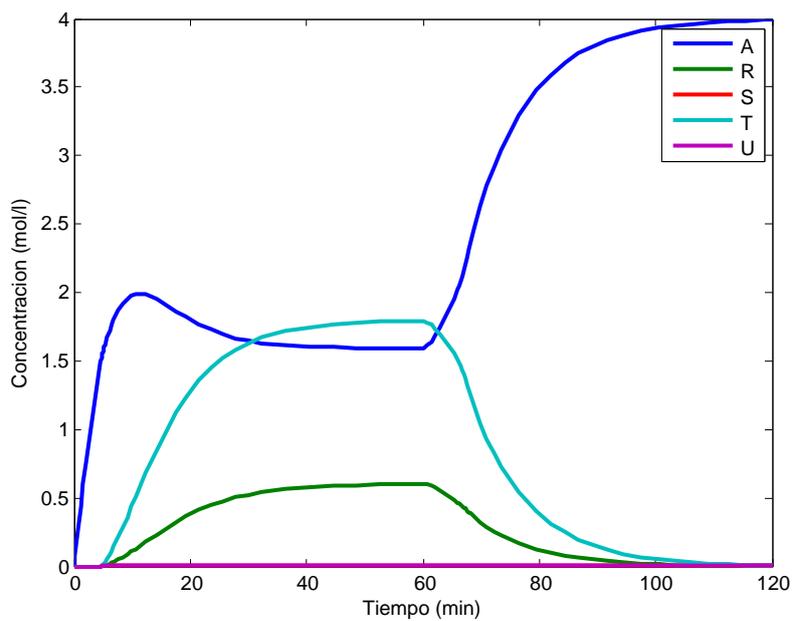


Figura 6: Evolución temporal de las concentraciones en el reactor.

más abruptamente y la del reactivo A aumenta hasta alcanzar el valor de la concentración de la alimentación (4 mol/l).

## Calificación de los apartados

1. Modelo dinámico (4 puntos):
  - Balances de materia: 1,5 puntos.
  - Balance de energía: 0,75 puntos.
  - Ecuaciones auxiliares: 1,25 puntos.
  - Restricción: 0,5 puntos.
2. Simulación del balance de materia (3 puntos):
  - Implementación del m-file: 2 puntos.
  - Resultados obtenidos: 1 punto.
3. Simulación del modelo completo (2 puntos):
  - Implementación del m-file: 1,5 puntos.
  - Resultados obtenidos: 0,5 puntos.
4. Análisis del fallo en el vapor (1 punto):
  - Resultado obtenido: 0,5 puntos.
  - Justificación de la respuesta: 0,5 puntos.