

Modelado Parte VI

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

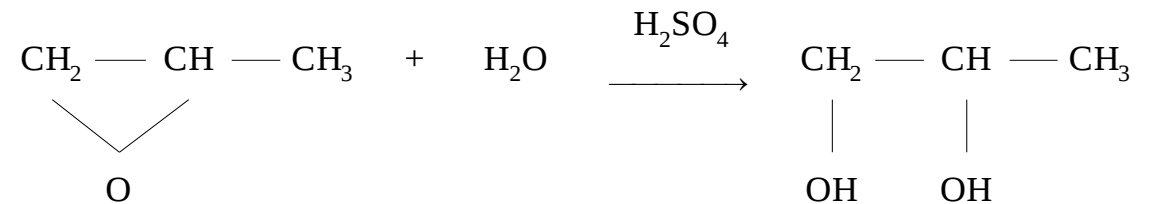
Simulación de un reactor

Reactor productor de propilenglicol

Componentes

- Propileno (A)
- Agua con 0.1 % de H_2SO_4 (B)
- Propilenglicol (C)
- Metanol (M)

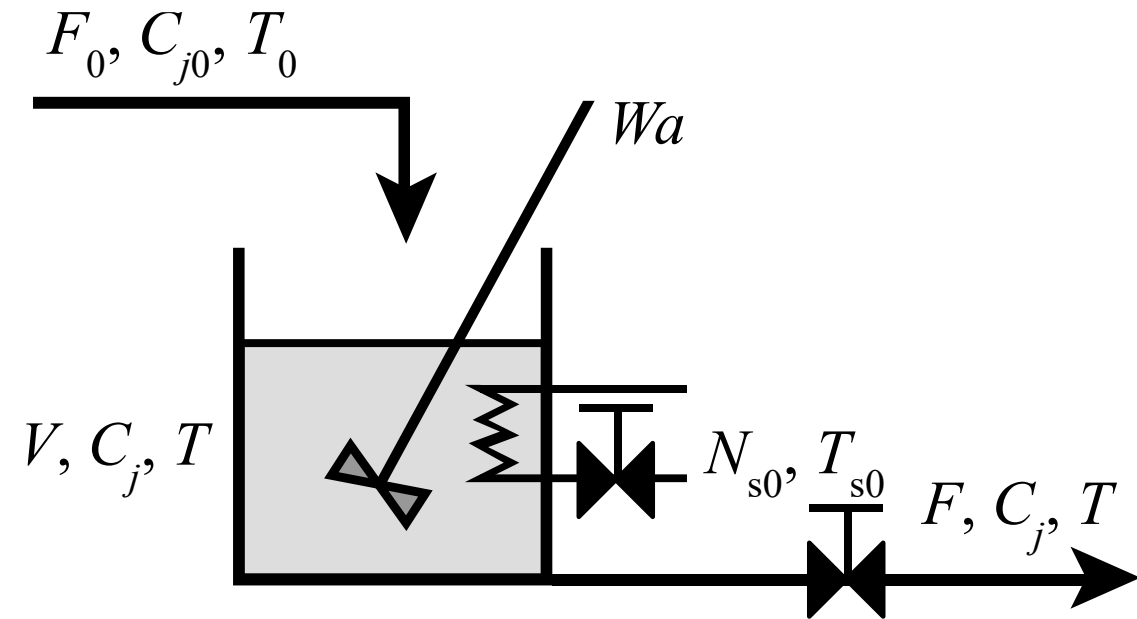
Reacción



Exotérmica

Reactor productor de propilenglicol

- El reactor está apagado.
- V es constante.
- Serpentín sumergido.
- Diseñar la puesta en marcha.
- Determinar el estado estacionario.
- Diseñar la parada.
- Analizar la estabilidad.
- Instalar un controlador de T .



Prompt para el reactor

Quiero desarrollar un modelo de espacio de estados para un reactor tanque agitado continuo. El volumen del líquido se mantiene constante. La reacción que tiene lugar en el reactor es $A+B$ que produce C . La reacción es exotérmica. El reactor está enfriado por un serpentín. Se emplea un solvente M que es inerte. Plantea todos los balances que debo incorporar al modelo.

Quiero desarrollar un modelo de espacio de estados para un reactor tanque agitado continuo. El volumen del líquido se mantiene constante. La reacción que tiene lugar en el reactor es $A+B$ que produce C . La reacción es exotérmica. El reactor está enfriado por un serpentín. Se emplea un solvente M que es inerte. Plantea todos los balances que debo incorporar al modelo.

🔧 Variables de estado propuestas:

1. $C_A(t)$: concentración de A en el reactor $[mol/L]$
2. $C_B(t)$: concentración de B en el reactor $[mol/L]$
3. $C_C(t)$: concentración de C en el reactor $[mol/L]$
4. $T(t)$: temperatura del reactor $[K]$

✅ Resumen de ecuaciones del modelo (en forma de espacio de estados):

Sistema dinámico de 4 ODEs no lineales (por la cinética Arrhenius):

- $\frac{dC_A}{dt} = \frac{F}{V}(C_{A0} - C_A) - k(T)C_AC_B$
- $\frac{dC_B}{dt} = \frac{F}{V}(C_{B0} - C_B) - k(T)C_AC_B$
- $\frac{dC_C}{dt} = \frac{F}{V}(-C_C) + k(T)C_AC_B$
- $\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V}(T_0 - T) - \frac{\Delta H_r}{\rho C_p V} k(T)C_AC_B + \frac{UA}{\rho C_p V}(T_c - T)$

Modelo dinámico

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_0 (C_{A0} - C_A) - V r$$

$$V \frac{dC_B}{dt} = F_0 (C_{B0} - C_B) - V r$$

$$V \frac{dC_C}{dt} = F_0 (C_{C0} - C_C) + V r$$

$$V \frac{dC_M}{dt} = F_0 (C_{M0} - C_M)$$

$$V C C_p \frac{dT}{dt} = F_0 C_0 C_{p0} (T_0 - T) + V r (-\Delta H) - Q$$

Modelo dinámico

$$r = k C_A$$

$$k = \alpha e^{-\frac{E}{RT}}$$

$$Q = U A_s \Delta T_{ml}$$

$$Q = N_{s0} C p_{s0} (T_s - T_{s0})$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T - T_{s0}) - (T - T_s)}{\ln\left(\frac{T - T_{s0}}{T - T_s}\right)}$$

$$C = \sum_{j=A,B,C,M} C_j$$

$$C p = \sum_{j=A,B,C,M} x_j C p_{j0}$$

$$x_j = C_j / C \quad j = A, B, C, M$$

$$C_0 = \sum_{j=A,B,C,M} C_{j0}$$

$$C p_0 = \sum_{j=A,B,C,M} x_{j0} C p_{j0}$$

$$x_{j0} = C_{j0} / C_0 \quad j = A, B, C, M$$

Modelo dinámico simplificado

Forma normal

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_0(C_{A0} - C_A)}{V} - r$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{F_0(C_{B0} - C_B)}{V} - r$$

$$\frac{dC_C}{dt} = \frac{F_0(C_{C0} - C_C)}{V} + r$$

$$\frac{dC_M}{dt} = \frac{F_0(C_{M0} - C_M)}{V}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_0 C_0 C_{p0} (T_0 - T) + V r (-\Delta H) - Q}{V C C_p}$$

Modelo dinámico

Se eliminan k , ΔT_{ml} , x_j y x_{j0}

$$r = \alpha e^{-\frac{E}{RT}} C_A$$

$$Q = UA_s \frac{T_s - T_{s0}}{\ln\left(\frac{T - T_{s0}}{T - T_s}\right)}$$

$$Q = N_{s0} Cp_{s0} (T_s - T_{s0})$$

$$C = \sum_{j=A,B,C,M} C_j$$

$$Cp = \frac{1}{C} \sum_{j=A,B,C,M} C_j Cp_{j0}$$

$$C_0 = \sum_{j=A,B,C,M} C_{j0}$$

$$Cp_0 = \frac{1}{C_0} \sum_{j=A,B,C,M} C_{j0} Cp_{j0}$$

Sistema de ecuaciones

Sistema

$$Q = UA_s \frac{T_s - T_{s0}}{\ln\left(\frac{T - T_{s0}}{T - T_s}\right)}$$

$$Q = N_{s0} Cp_{s0} (T_s - T_{s0})$$

Solución

$$T_s = T_{s0} + (T - T_{s0}) \left(1 - e^{-\frac{UA_s}{N_{s0} Cp_{s0}}} \right)$$

$$Q = N_{s0} Cp_{s0} (T - T_{s0}) \left(1 - e^{-\frac{UA_s}{N_{s0} Cp_{s0}}} \right)$$

Parámetros en sistema inglés

- $F_0 = 440.63 \text{ ft}^3/\text{h}$
- $T_0 = 75 \text{ }^\circ\text{F}$
- $C_{A0} = 0.1816$, $C_{B0} = 2.2695$,
 $C_{C0} = 0$ y $C_{M0} = 0.2269 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $Cp_{A0} = 35$, $Cp_{B0} = 18$, $Cp_{C0} = 46$
y $Cp_{M0} = 19.5 \text{ Btu/(lb-mol} \cdot ^\circ\text{F)}$
- $V = 66.84 \text{ ft}^3$
- $\Delta H = -36000 \text{ Btu/lb-mol}$
- $\alpha = 16.96 \times 10^{12} \text{ h}^{-1}$
- $E = 32400 \text{ Btu/lb-mol}$
- $R = 1.987 \text{ Btu/(lb-mol} \cdot ^\circ\text{R)}$
- $N_{s0} = 1000 \text{ lb-mol/h}$
- $T_{s0} = 60 \text{ }^\circ\text{F}$
- $Cp_{s0} = 18 \text{ Btu/(lb-mol} \cdot ^\circ\text{F)}$
- $UA_s = 16000 \text{ Btu/(h} \cdot ^\circ\text{F)}$

Puesta en marcha 1

- Inicialmente, agua a 75° F.
- Serpentín funcionando.
- $C_A = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_B = 3.45 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_C = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_M = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $T = 75 \text{ }^\circ\text{F}$

Listado en Berkeley Madonna

```
{Reactor de propilenglicol  
Solución analítica}
```

```
METHOD RK4
```

```
STARTTIME = 0  
STOPTIME = 3  
DT = 0.01
```

```
; Inicialización
```

```
INIT CA = 0  
INIT CB = 3.45  
INIT CC = 0  
INIT CM = 0  
INIT T = 75
```

```
; Sistema ODEs
```

```
CA' = F0*(CA0-CA)/V-r  
CB' = F0*(CB0-CB)/V-r  
CC' = F0*(CC0-CC)/V+r  
CM' = F0*(CM0-CM)/V  
T' = (F0*C0*Cp0*(T0-T)+V*r*(-DH)-Q)/(V*C*Cp)
```

```
; Sistema AEs
```

```
r = alpha*exp(-Ea/(Rg*(T+460)))*CA
```

```
; Solución Analítica
```

```
Ts = Ts0+(T-Ts0)*(1-EXP(-UAs/(Ns0*Cps0)))  
Q = Ns0*Cps0*(Ts-Ts0)
```

```
C = CA+CB+CC+CM
```

```
Cp = (CA*CpA0+CB*CpB0+CC*CpC0+CM*CpM0)/C
```

```
C0 = CA0+CB0+CC0+CM0
```

```
Cp0 = (CA0*CpA0+CB0*CpB0+CC0*CpC0+CM0*CpM0)/C0
```

```
; Datos
```

```
V = 66.84
```

```
F0 = 440.63
```

```
T0 = 75
```

```
CA0 = 0.1816
```

```
CB0 = 2.2695
```

```
CC0 = 0
```

```
CM0 = 0.2269
```

```
CpA0 = 35
```

```
CpB0 = 18
```

```
CpC0 = 46
```

```
CpM0 = 19.5
```

```
Ns0 = 1000
```

```
Ts0 = 60
```

```
Cps0 = 18
```

```
UAs = 16000
```

```
DH = -36000
```

```
alpha =
```

```
16.96E12
```

```
Ea = 32400
```

```
Rg = 1.987
```

Ver Reactor propilenglicol.mmd

reactor_propileno.m

```
% Reactor de propilenglicol. Solución analítica
% En X están las variables de estado.
% En Y deben ir las variables que se requieren en
las ODEs o que se quieren graficar.

clear all; close all; clc;

%===== Modelo =====
```

```

% ODEs
function dX = ODEs(t,X)
    % En dX devuelve el vector columna de derivadas

    % Recupera variables X
    [CA CB CC CM T] = num2cell(X') {1,:};

    % Recupera variables Y
    Y = AEs(t,X);
    [F0 CA0 CB0 CC0 CM0 T0 V r C0 Cp0 DH Q C Cp] = num2cell(Y) {1,:};

    % Ecuaciones diferenciales
    dCA = F0*(CA0-CA)/V-r;
    dCB = F0*(CB0-CB)/V-r;
    dCC = F0*(CC0-CC)/V+r;
    dCM = F0*(CM0-CM)/V;
    dT = (F0*C0*Cp0*(T0-T)+V*r*(-DH)-Q)/(V*C*Cp);

    dX = [dCA dCB dCC dCM dT]'; % vector columna
endfunction % ODEs

```

```

% AEs
function Y = AEs(t,X)

% Recupera variables X
[CA CB CC CM T] = num2cell(X') {1, :};

% Parámetros
V = 66.84;
F0 = 440.63; T0 = 75; CA0 = 0.1816; CB0 = 2.2695; CC0 = 0; CM0 = 0.2269;
CpA0 = 35; CpB0 = 18; CpC0 = 46; CpM0 = 19.5;
Ns0 = 1000; Ts0 = 60; Cps0 = 18; UAs = 16000;
DH = -36000; alpha = 16.96E12; Ea = 32400; Rg = 1.987; % Sistema inglés

% Ecuaciones algebraicas
r = alpha*exp(-Ea/(Rg*(T+460)))*CA;
Ts = Ts0+(T-Ts0)*(1-exp(-UAs/(Ns0*Cps0)));
Q = Ns0*Cps0*(Ts-Ts0);
C = CA+CB+CC+CM;
Cp = (CA*CpA0+CB*CpB0+CC*CpC0+CM*CpM0)/C;
C0 = CA0+CB0+CC0+CM0;
Cp0 = (CA0*CpA0+CB0*CpB0+CC0*CpC0+CM0*CpM0)/C0;

Y = [F0 CA0 CB0 CC0 CM0 T0 V r C0 Cp0 DH Q C Cp];
endfunction % AEs

```

```

% Inicialización
function [tfin dt Xini LX LY] = inicializacion
    % Inicializa la simulación

    % Parámetros de simulación
    tfin = 3; % tiempo final (h)
    dt = 0.01; % paso temporal (h)

    % Inicialización
    CAini = 0; CBini = 3.45; CCini = 0; CMini = 0; % lb-mol/ft3
    Tini = 75; % °F
    Xini = [CAini CBini CCini CMini Tini]; % Inicializa las variables de estado

    % Leyendas
    LX = {'CA' 'CB' 'CC' 'CM' 'T'}; % Leyendas de las variables X
    LY = {'F0' 'CA0' 'CB0' 'CC0' 'CM0' 'T0' 'V' 'r' 'C0' 'Cp0' 'DH' 'Q' 'C' 'Cp'}; %
    Leyendas de las variables Y
endfunction % inicializar

```

```

% Análisis
function analizar(LX,LY,tpts,X,Y)
    % Análisis de resultados. Funciones disponibles:
    % exportar('resultados.csv',[{leyendas}])
    % graficar({leyendas}, 'título', 'rótulo x', 'rótulo y', [limitesy])
    % vector(leyenda)
    exportar('resultados.csv', {'CA' 'CB' 'CC' 'CM' 'T'});
    graficar({'CA' 'CC'}, 'Concentraciones vs. tiempo', 'h', 'lb-mol/ft^3', [0 0.2]);
    graficar({'T'}, 'Temperatura vs. tiempo', 'h', '°F', [30 200]);

    % Determinación de temperatura máxima
    [max_valor, indice] = max(vector('T')); % Encuentra el valor máximo y su índice.
    disp('Datos del pico de temperatura');
    disp(['La temperatura máxima es ' num2str(max_valor) ' °F.']);
    dt = tpts(2); % Es el delta t.
    disp(['Ese valor se alcanza en ' num2str(tpts(indice)) ' ± ' num2str(dt) ' h.']);
endfunction % analizar

```

```

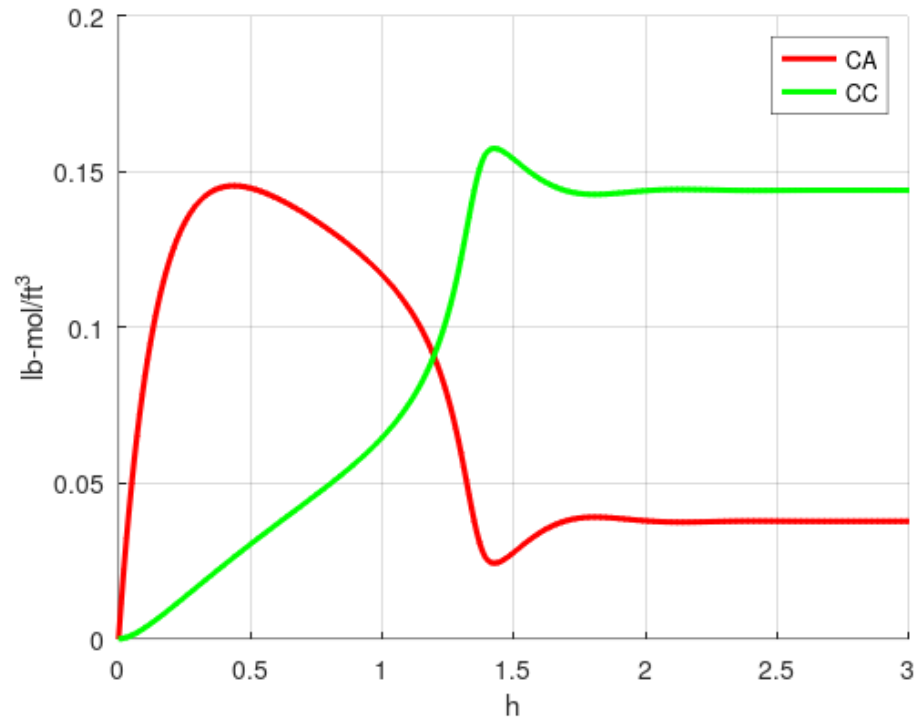
% Análisis
function analizar(LX,LY,tpts,X,Y)
    % Análisis de resultados. Funciones disponibles:
    % exportar('resultados.csv',[{leyendas}])
    % graficar({leyendas}, 'título', 'rótulo x', 'rótulo y', [limitesy])
    % vector(leyenda)
    exportar('resultados.csv', {'CA' 'CB' 'CC' 'CM' 'T'});
    graficar({'CA' 'CC'}, 'Concentraciones vs. tiempo', 'h', 'lb-mol/ft^3', [0 0.2]);
    graficar({'T'}, 'Temperatura vs. tiempo', 'h', '°F', [30 200]);

    % Determinación de temperatura máxima
    [max_valor, indice] = max(vector('T')); % Encuentra el valor máximo y su índice.
    disp('Datos del pico de temperatura');
    disp(['La temperatura máxima es ' num2str(max_valor) ' °F.']);
    dt = tpts(2); % Es el delta t.
    disp(['Ese valor se alcanza en ' num2str(tpts(indice)) ' ± ' num2str(dt) ' h.']);
endfunction % analizar

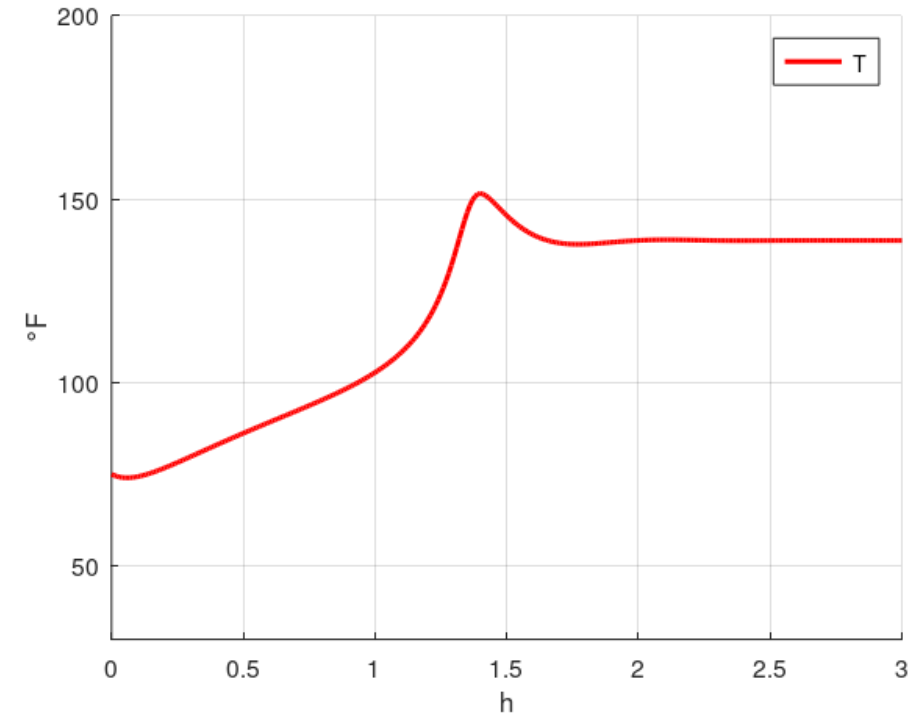
```

Puesta en marcha

Concentraciones vs. tiempo



Temperatura vs. tiempo



Puesta en marcha

```
Resolvedor v01, 2025
```

```
Resolviendo el modelo...
```

```
Archivo exportado como "resultados.csv" en el directorio  
de trabajo.
```

```
Datos del pico de temperatura
```

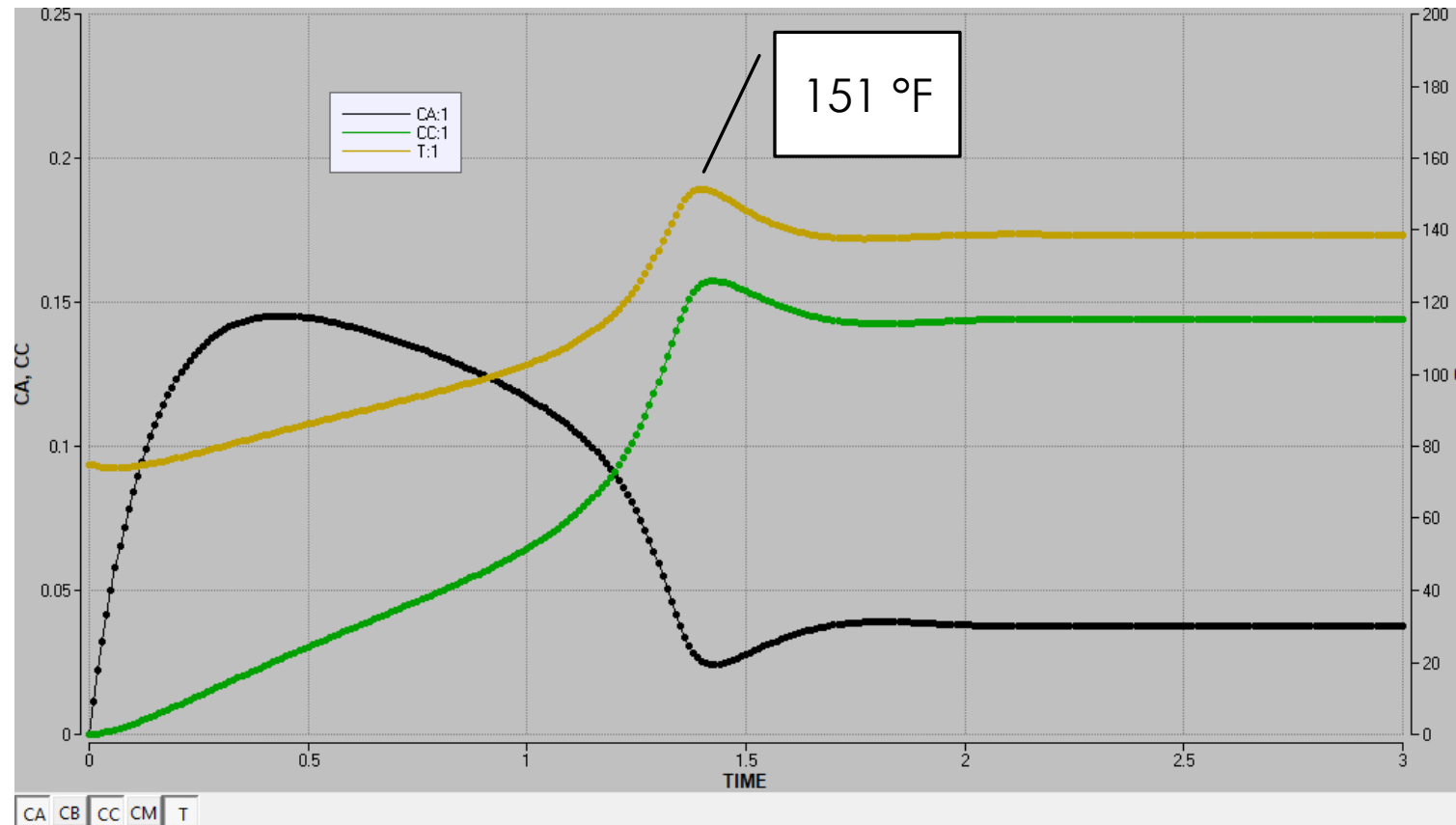
```
La temperatura máxima es 151.5016 °F.
```

```
Ese valor se alcanza en  $1.4 \pm 0.01$  h.
```

```
Simulación finalizada.
```

```
>>
```

Puesta en marcha



Estado estacionario:
 $C_A = 0.0377 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $C_B = 2.1256 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $C_C = 0.1439 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $C_M = 0.2269 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $T = 138.7 \text{ }^\circ\text{F}$

Puesta en marcha 2

- Inicialmente, agua a 75° F.
- Serpentín funcionando.
- $C_A = 0.0377$ lb-mol/ft³
- $C_B = 3.45$ lb-mol/ft³
- $C_C = 0$ lb-mol/ft³
- $C_M = 0$ lb-mol/ft³
- $T = 138.7$ °F

Puesta en marcha

Condiciones iniciales:

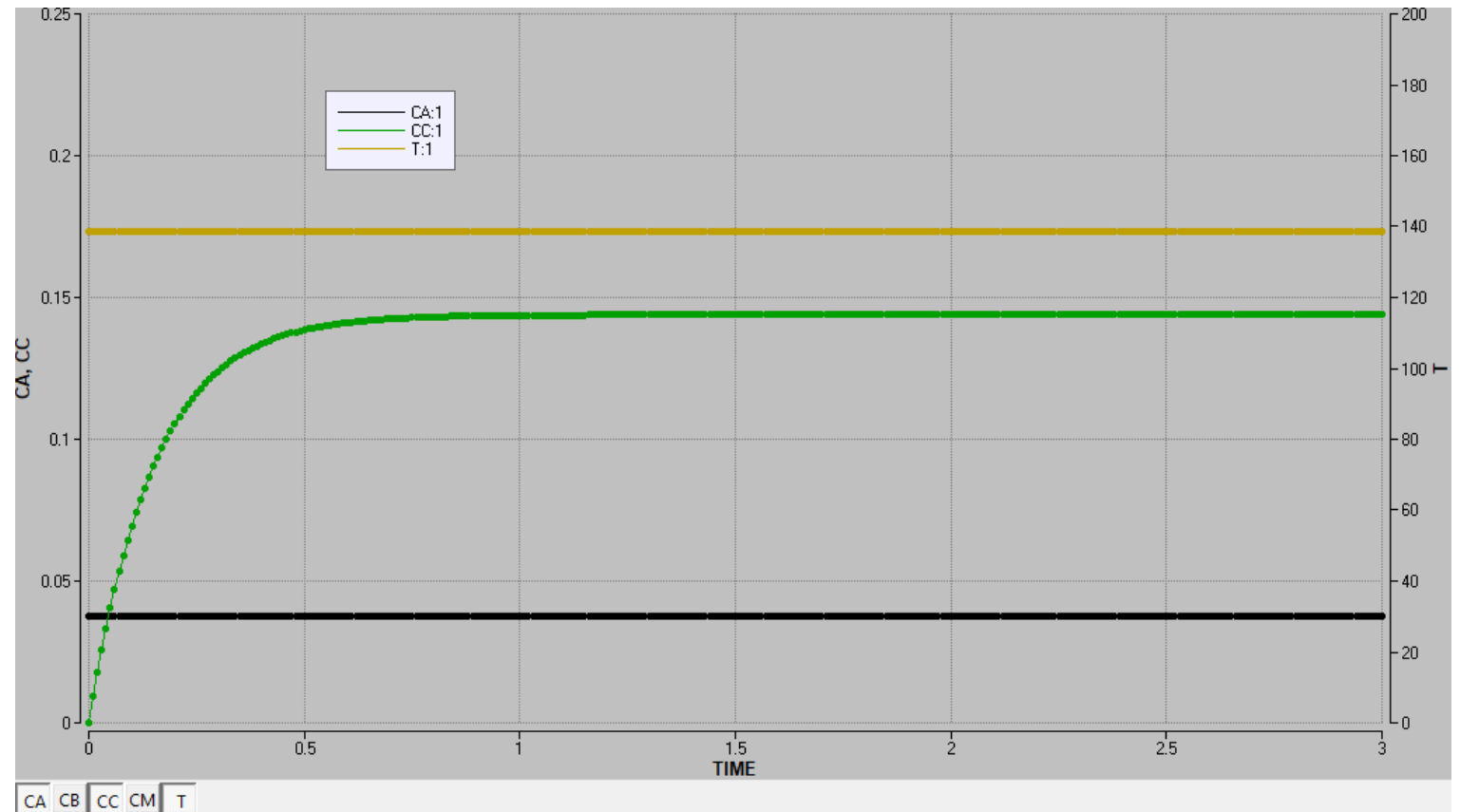
$$C_A = 0.0377 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$C_B = 3.45 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$C_C = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$C_M = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$T = 138.7 \text{ }^{\circ}\text{F}$$



Parada 1

Estado de régimen

- $C_A = 0.0377 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_B = 2.1256 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_C = 0.1439 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_M = 0.2269 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $T = 138.7 \text{ }^\circ\text{F}$

Parada

- $F_0 = 0 \text{ ft}^3/\text{h}$
- $V = \text{cte.} \Rightarrow F = 0 \text{ ft}^3/\text{h}$
- Se vuelve un reactor *batch*.

Parada 1

148 °F

Estado estacionario:

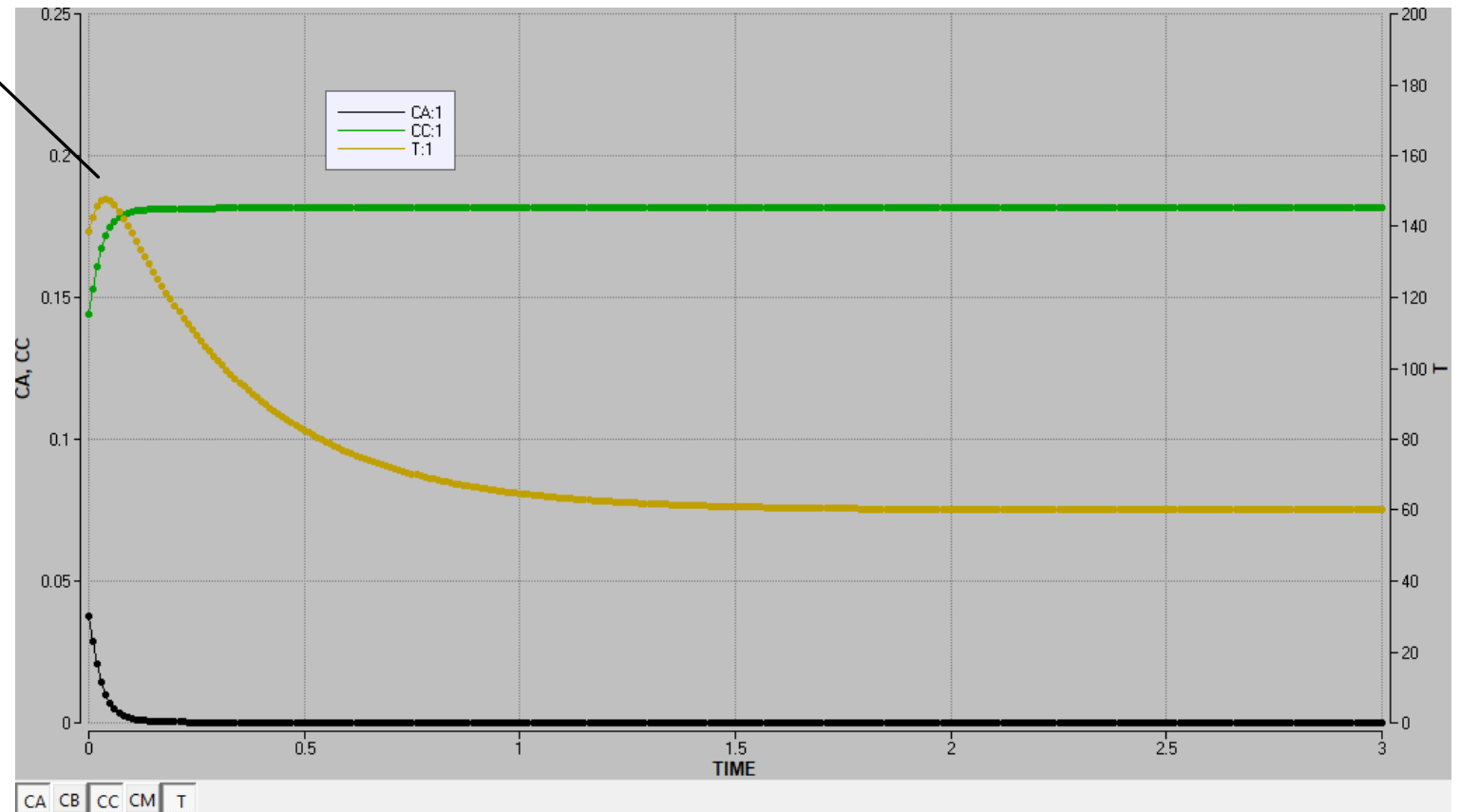
$$C_A = 0.0377 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$C_B = 2.1256 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$C_C = 0.1439 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$C_M = 0.2269 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$T = 138.7 \text{ °F}$$



Parada 2

Estado de régimen

- $C_A = 0.0377 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_B = 2.1256 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_C = 0.1439 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_M = 0.2269 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $T = 138.7 \text{ }^\circ\text{F}$

Parada

- $C_{A0} = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$

Parada 2

Estado estacionario:

$$C_A = 0.0377 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$C_B = 2.1256 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$C_C = 0.1439 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$C_M = 0.2269 \text{ lb-mol/ft}^3$$

$$T = 138.7 \text{ } ^\circ\text{F}$$

