

Modelado Parte VII

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

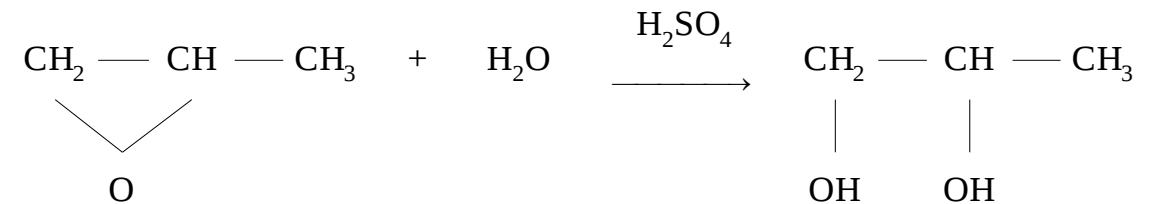
Simulación de un reactor

Reactor productor de propilenglicol

Componentes

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

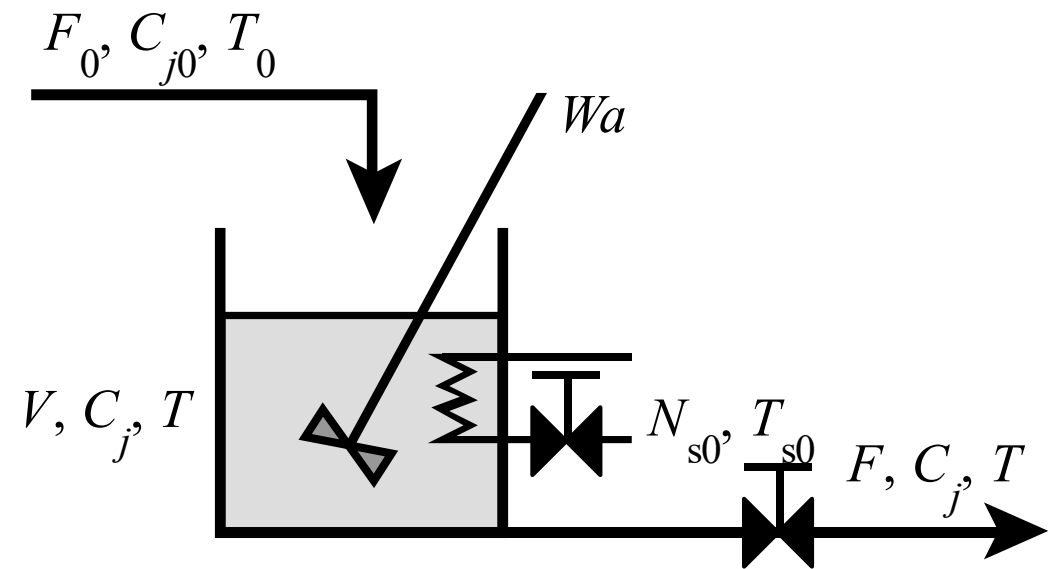
Reacción



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):

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

Estudio de estabilidad

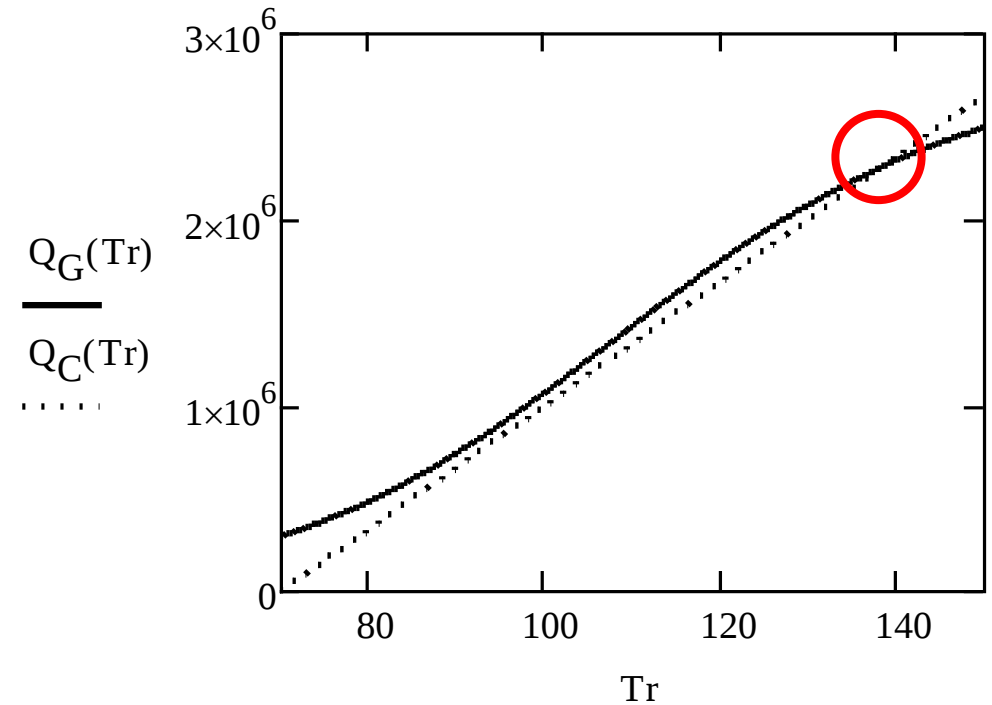
Estudio de estabilidad

Estado estacionario

$$0 = F_0 C_0 C p_0 (T_0 - T) + V r(-\Delta H) - Q$$

$$Q_G = V r(-\Delta H) \quad r(T)$$

$$Q_C = F_0 C_0 C p_0 (T - T_0) + Q \quad Q(T)$$



Calor generado

$$Q_G = Vr(-\Delta H)$$

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

$$0 = \frac{F_0(C_{A0} - C_A)}{V} - r$$

Elimina C_A

$$Q_G = \frac{V \alpha e^{-\frac{E}{RT}} C_{A0} (-\Delta H)}{\frac{V}{F_0} \alpha e^{-\frac{E}{RT}} + 1}$$

$$r = \frac{\alpha e^{-\frac{E}{RT}} C_{A0}}{\frac{V}{F_0} \alpha e^{-\frac{E}{RT}} + 1}$$

Calor consumido

$$Q_C = F_0 C_0 Cp_0 (T - T_0) + Q$$

$$Q_C = F_0 C_0 Cp_0 (T - T_0) + N_{s0} Cp_{s0} (T - T_{s0}) \left(1 - e^{-\frac{UA_s}{N_{s0} Cp_{s0}}} \right)$$

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

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

Elimina T_s

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

Estado estacionario

$$Q_C = F_0 C_0 C p_0 (T - T_0) + N_{s0} C p_{s0} (T - T_{s0}) \left(1 - e^{-\frac{UA_s}{N_{s0} C p_{s0}}} \right)$$

$$Q_C = \left(F_0 C_0 C p_0 + N_{s0} C p_{s0} \left(1 - e^{-\frac{UA_s}{N_{s0} C p_{s0}}} \right) \right) T - \left(F_0 C_0 C p_0 T_0 + N_{s0} C p_{s0} T_{s0} \left(1 - e^{-\frac{UA_s}{N_{s0} C p_{s0}}} \right) \right)$$

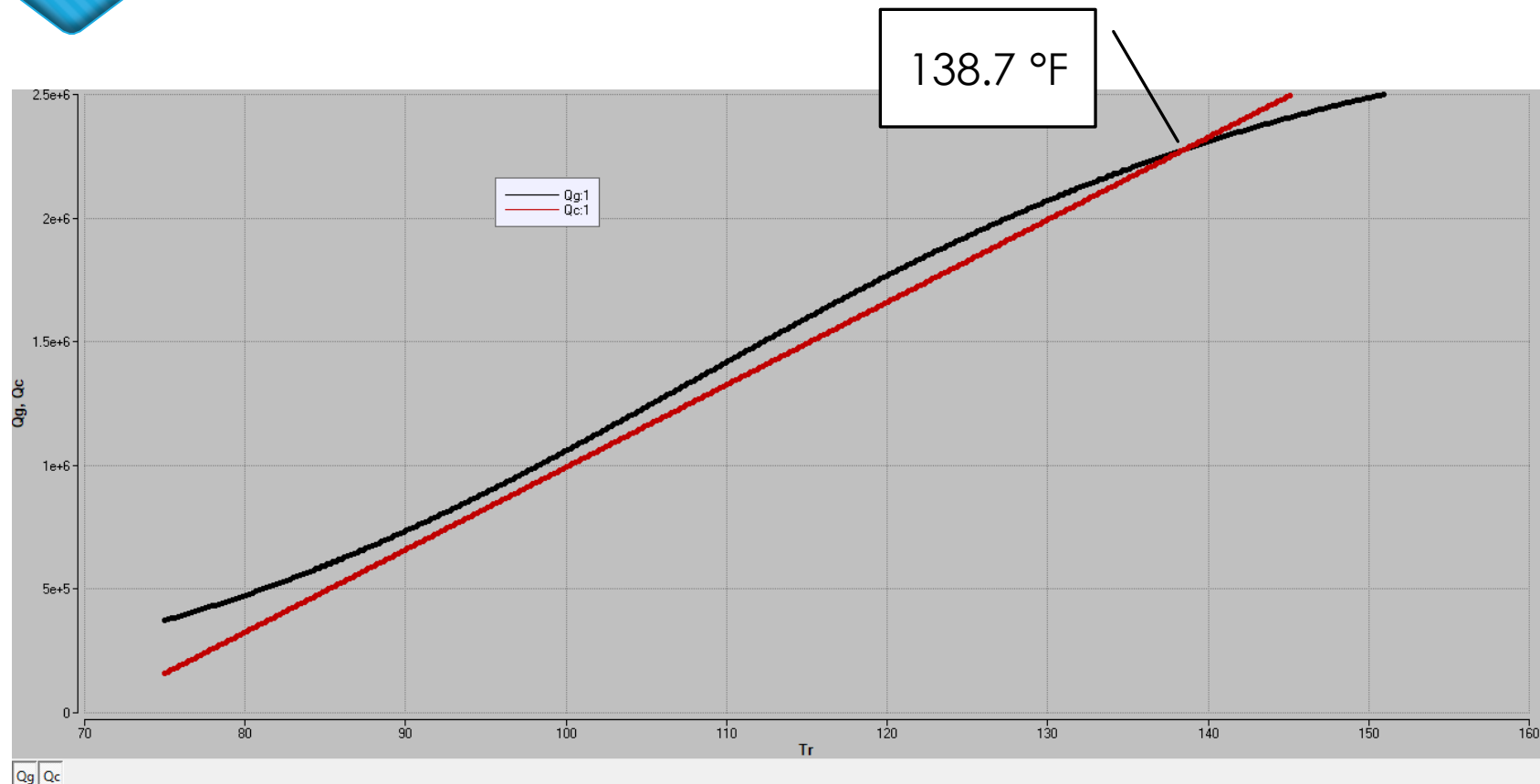
- No se puede modificar la pendiente sin modificar la distancia al origen, pero sí se puede modificar la distancia al origen sin alterar la pendiente variando T_0 y T_{s0} .
- Q_C depende de la corriente de enfriamiento, mientras que Q_G no.

Calor generado y consumido

$$Q_G = \frac{V \alpha e^{-\frac{E}{RT}} C_{A0} (-\Delta H)}{\frac{V}{F_0} \alpha e^{-\frac{E}{RT}} + 1}$$

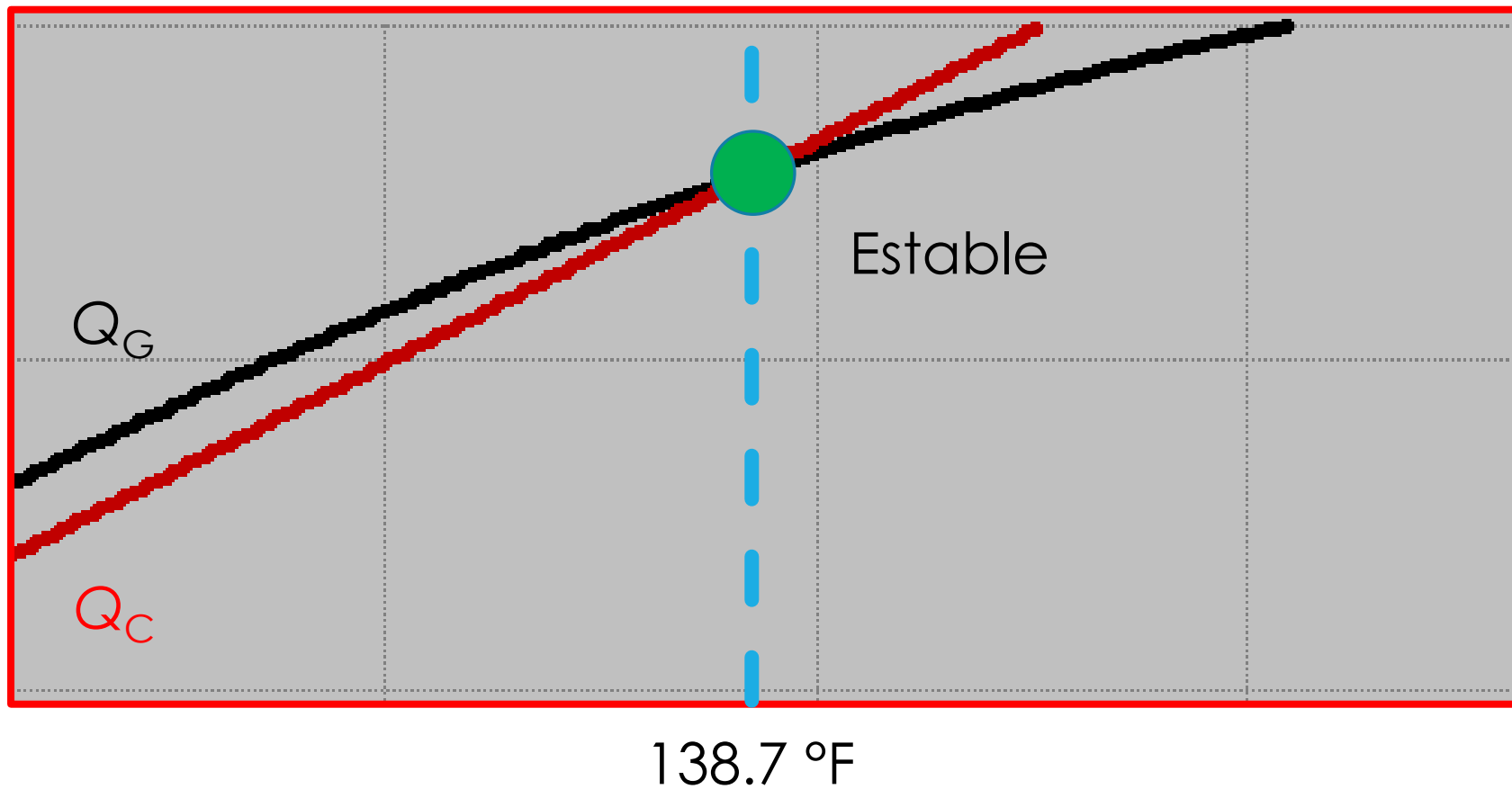
$$Q_C = F_0 C_0 C p_0 (T - T_0) + N_{s0} C p_{s0} (T - T_{s0}) \left(1 - e^{-\frac{U A_s}{N_{s0} C p_{s0}}} \right)$$

Estado estacionario

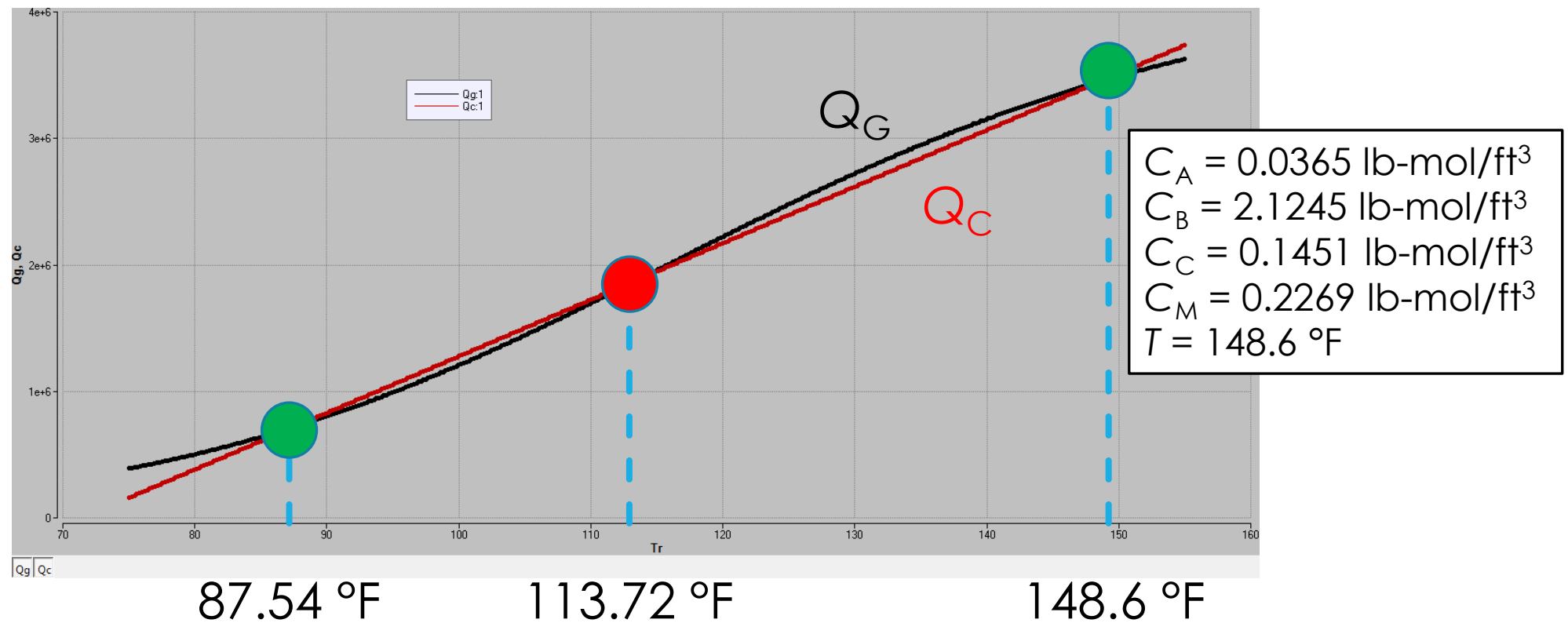


Simulación de un reactor CSTR

Estabilidad

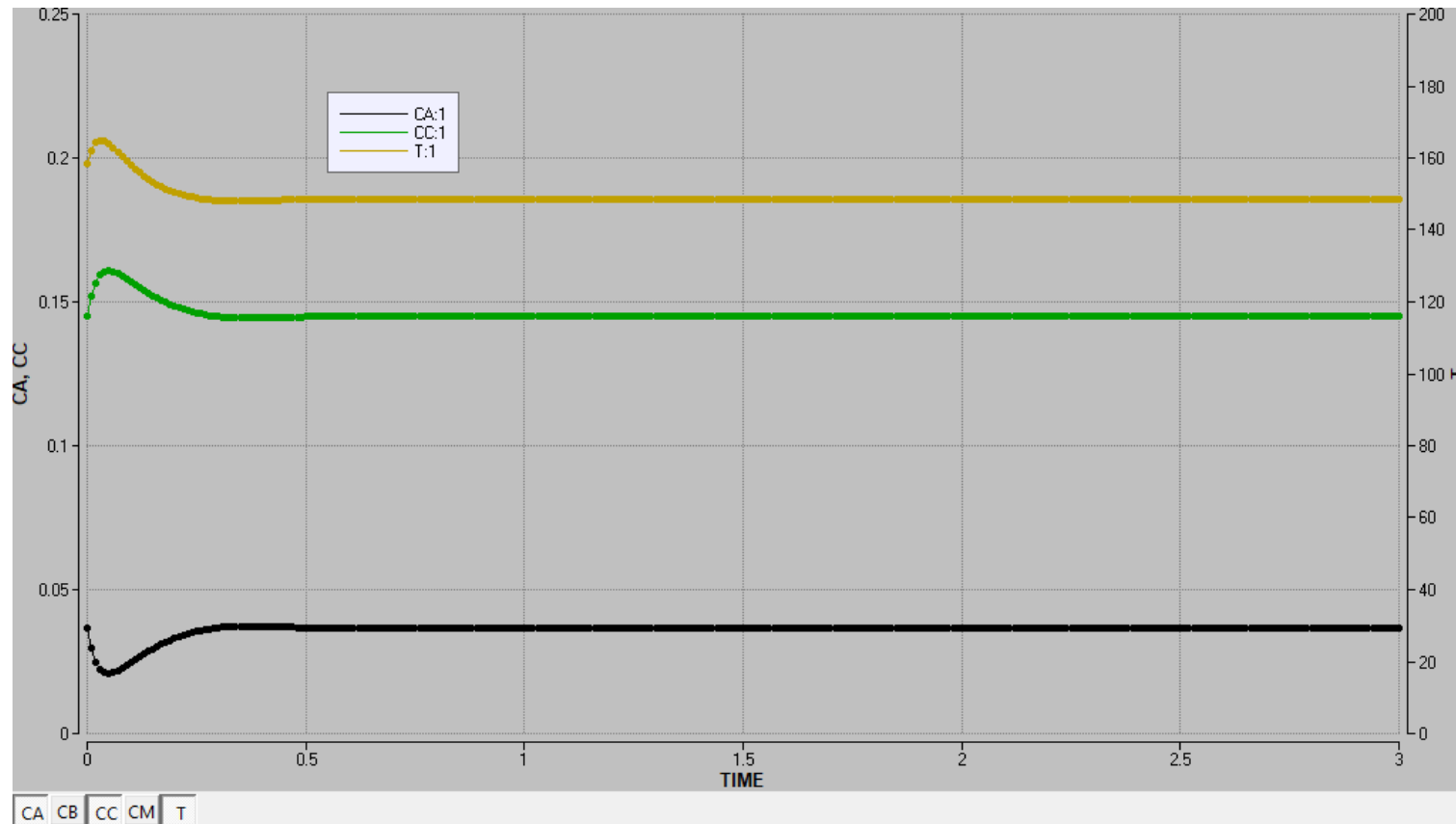


Estabilidad, 50 % de aumento en F_0

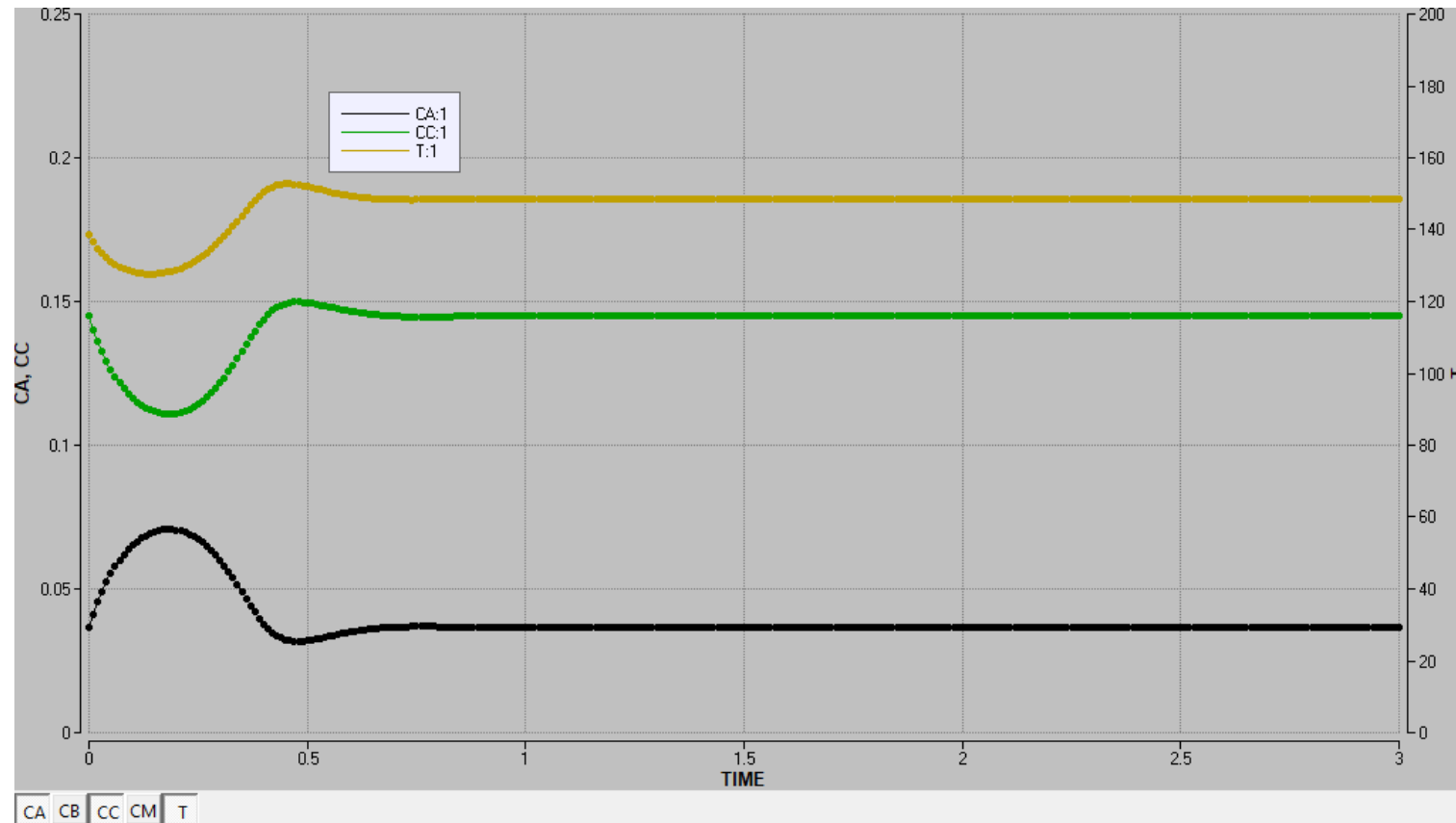


Verificar por simulación.

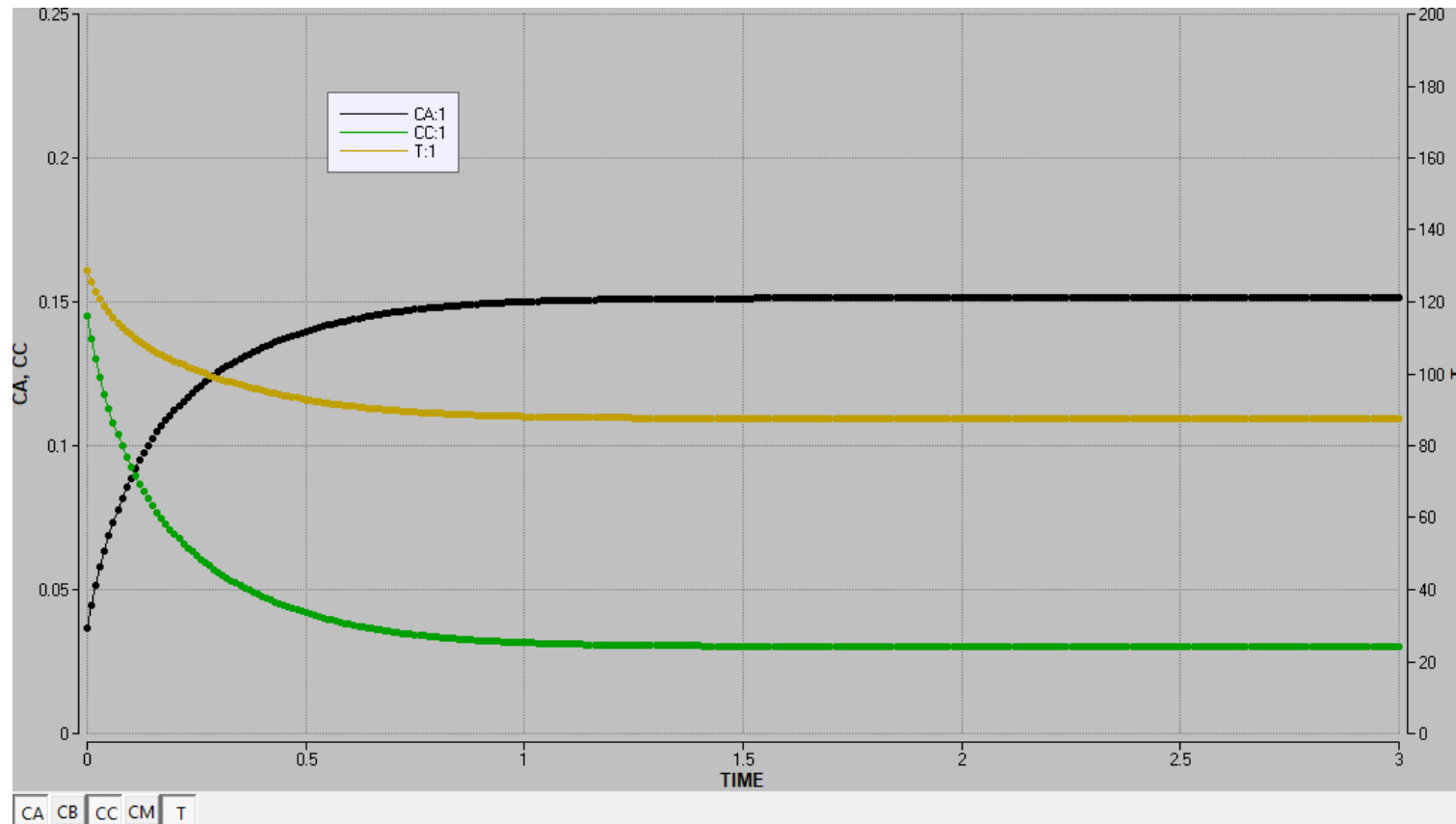
Perturbación $T(0) = 148.6 + 10\text{ }^{\circ}\text{F}$



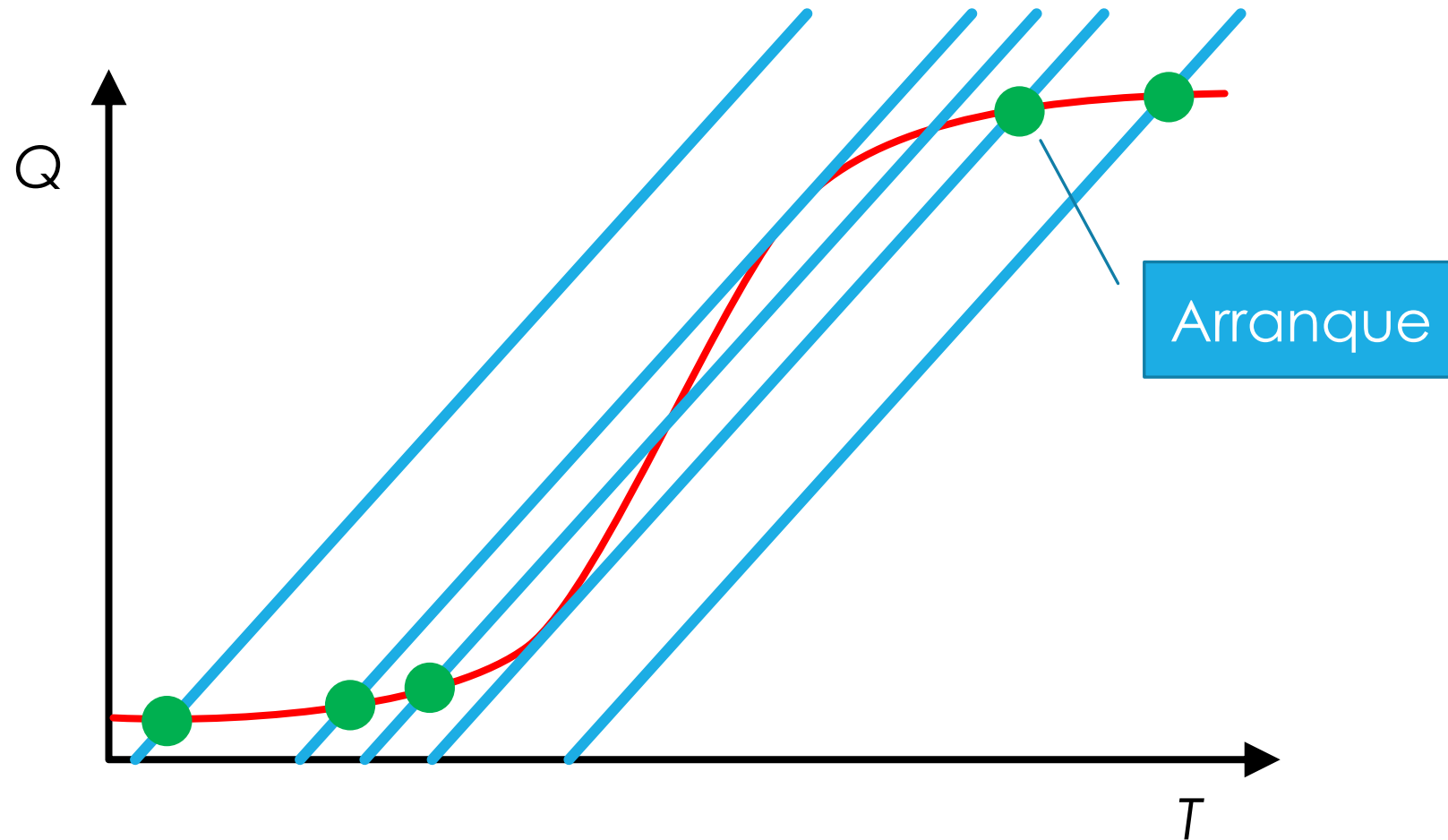
Perturbación $T(0) = 148.6 - 10\text{ }^{\circ}\text{F}$



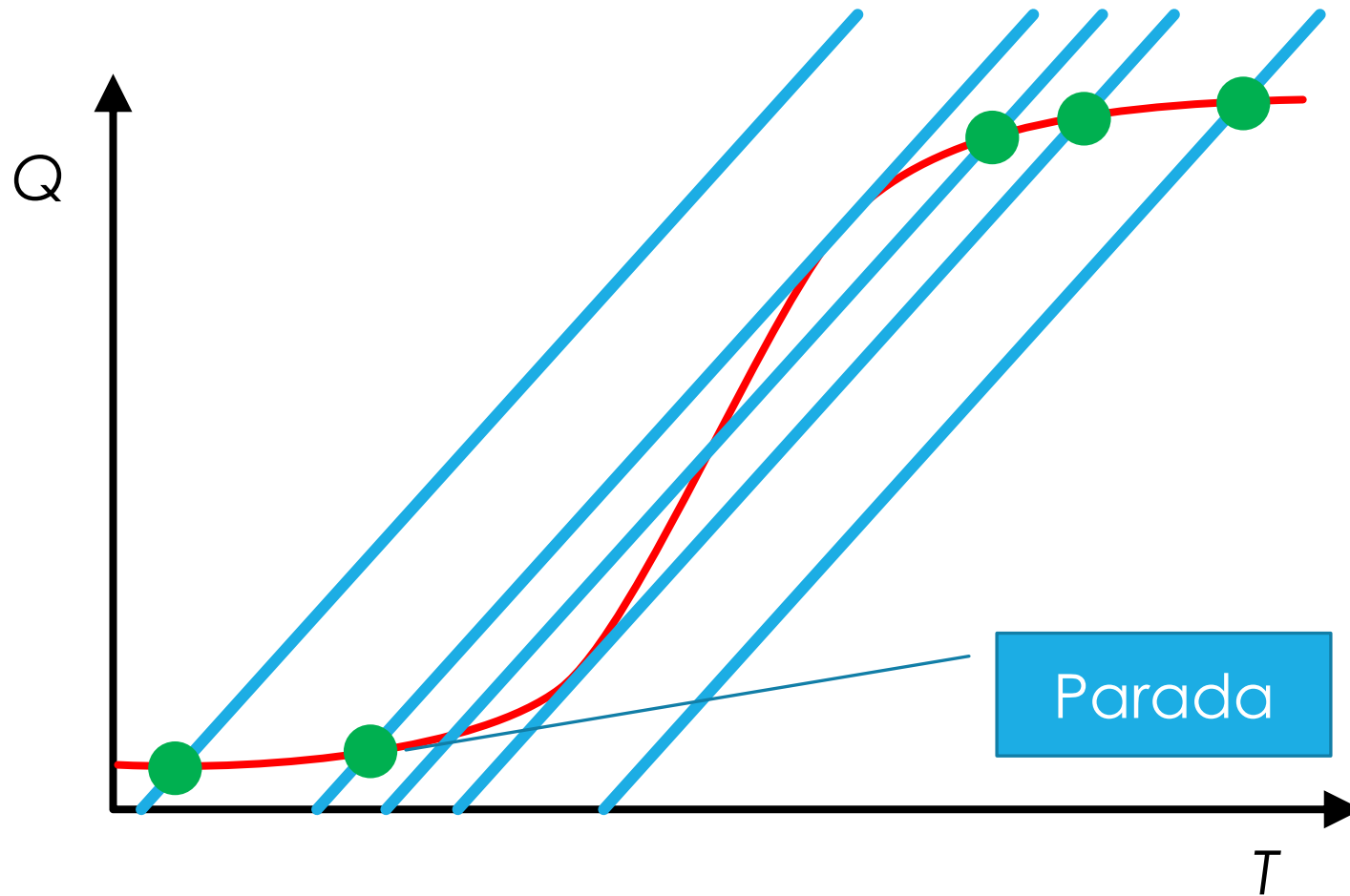
Perturbación $T(0) = 148.6 - 20\text{ }^{\circ}\text{F}$



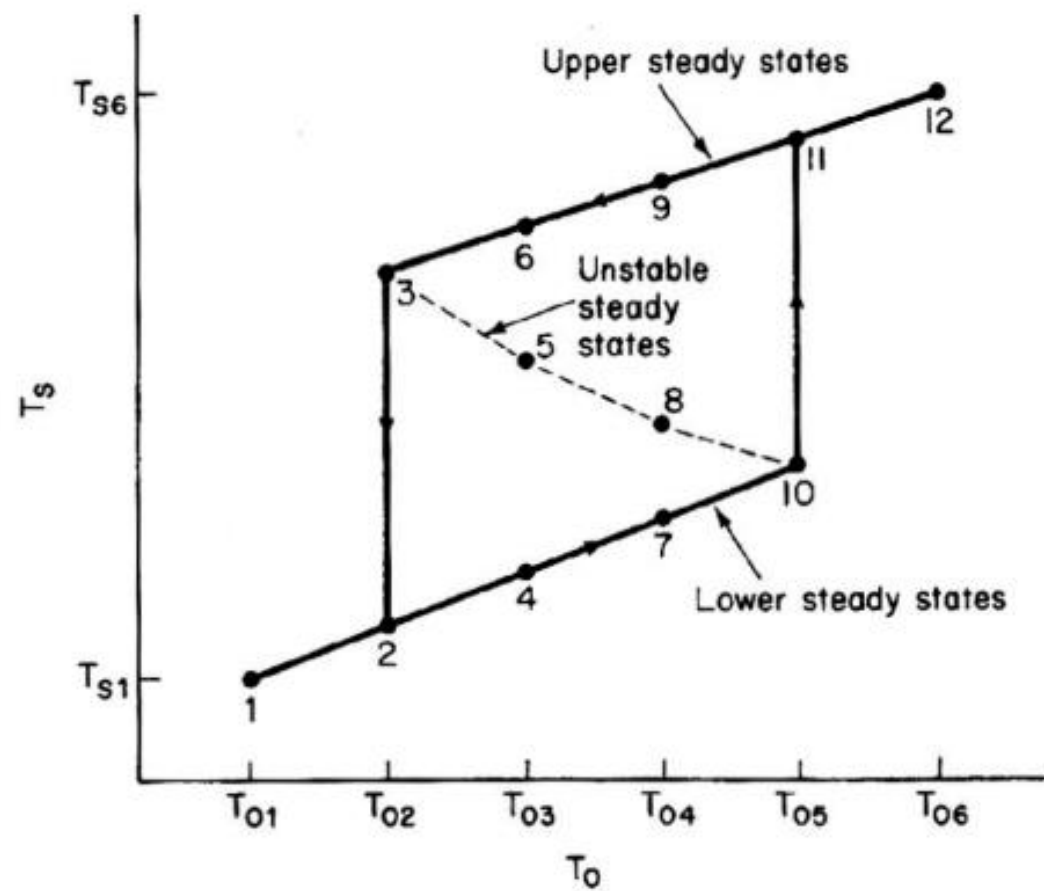
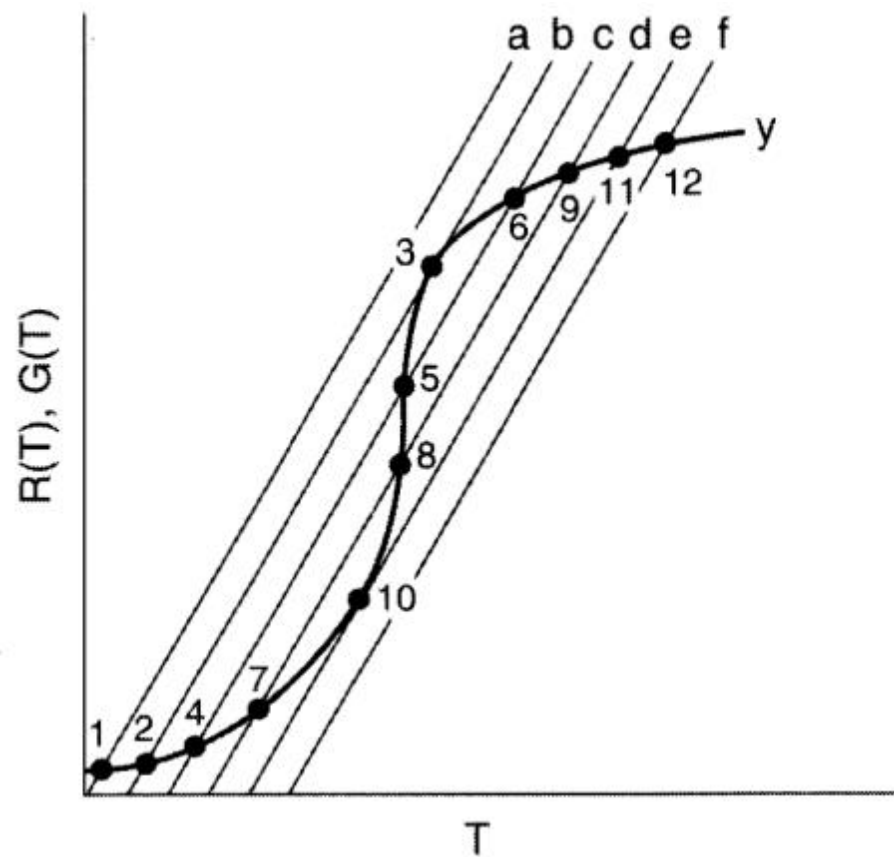
Arranque aumentando T_0



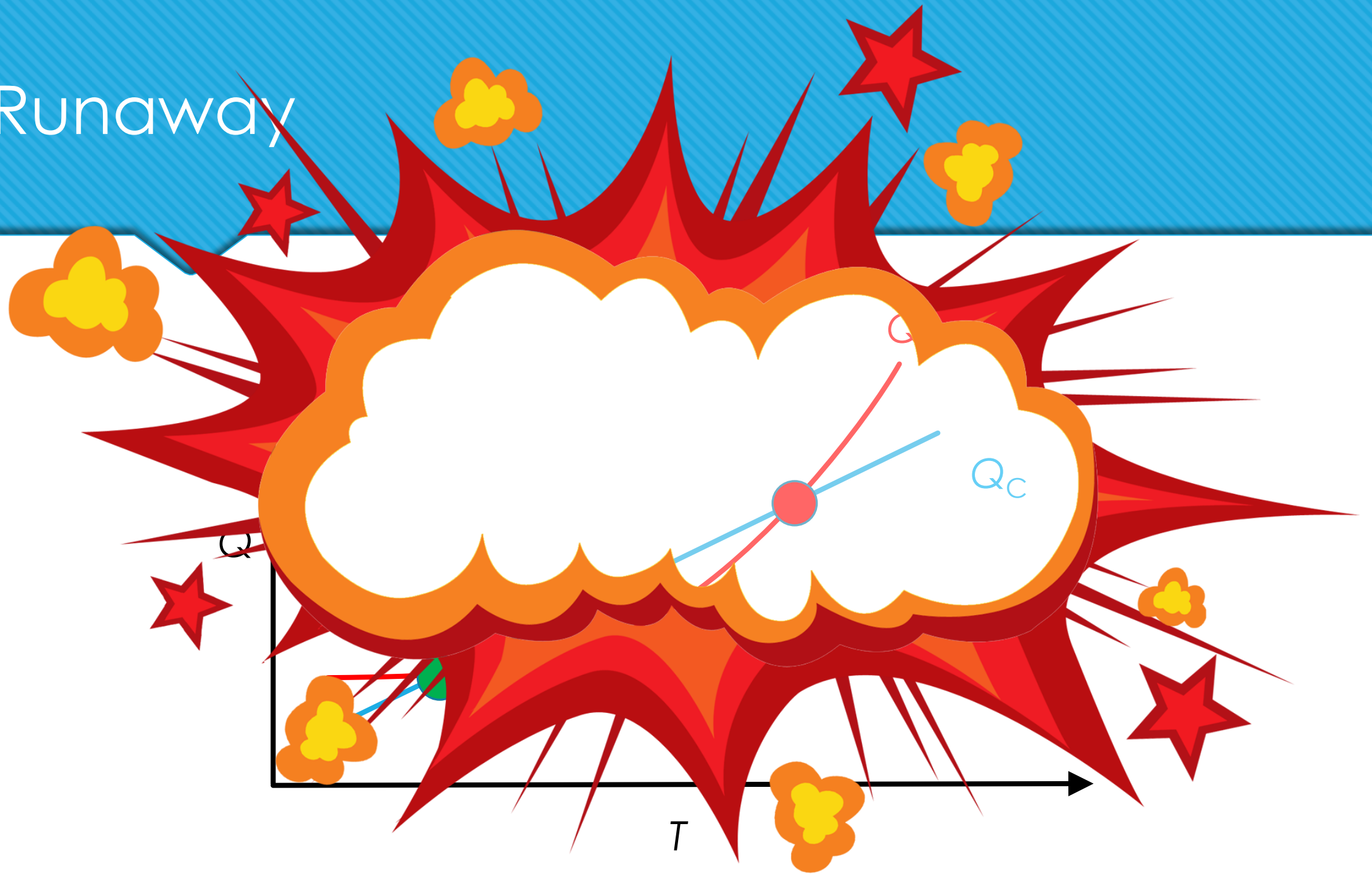
Parada disminuyendo T_0



Histéresis



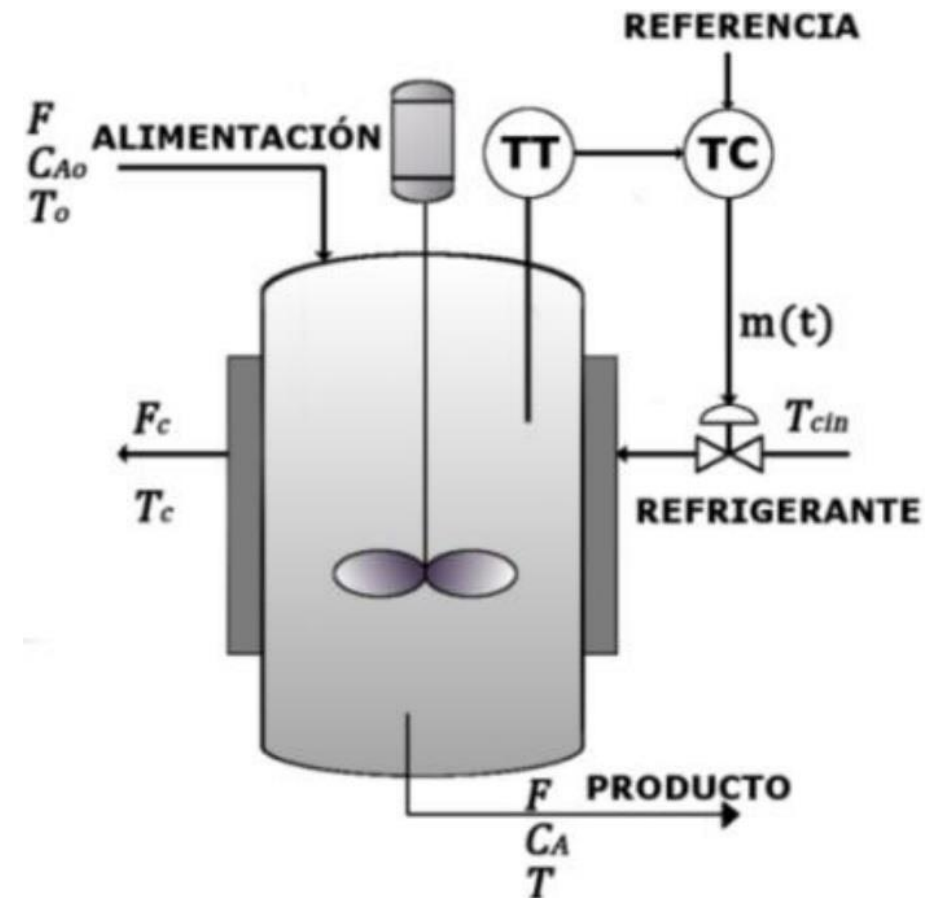
Runaway



Instalación de un controlador de temperatura

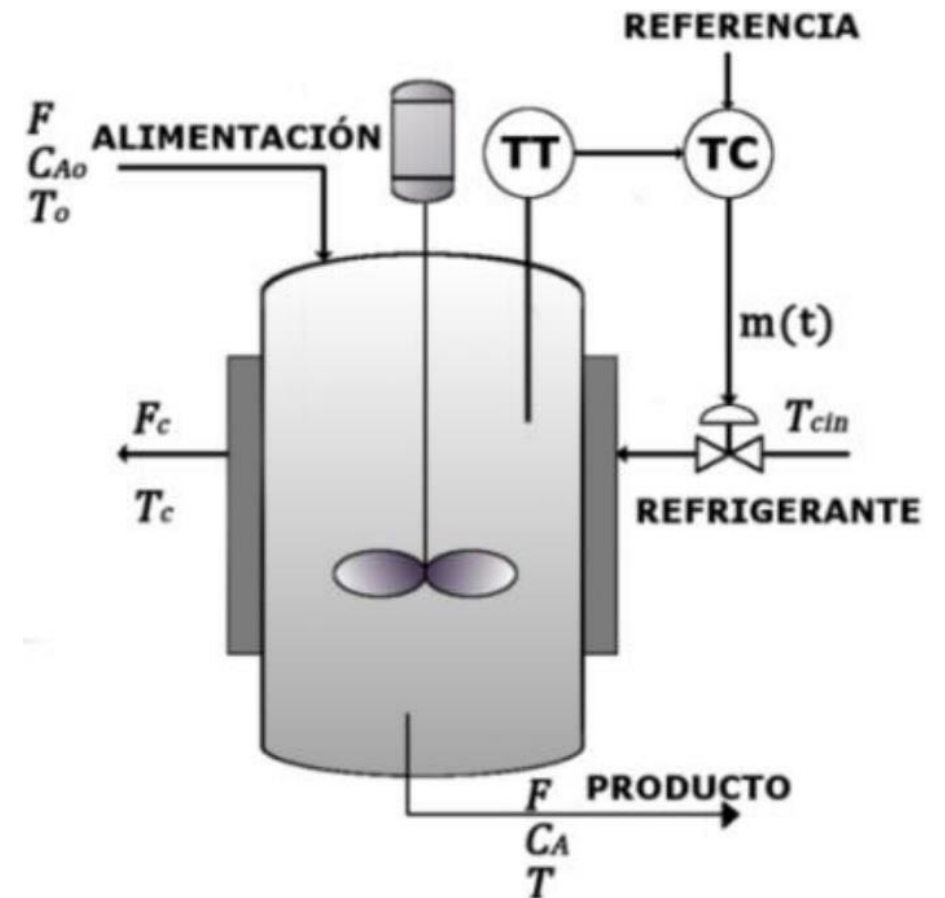
Selección de acción en modo servo

1. Acción inversa y válvula NA
2. Setpoint $T_{sp}(+)$
3. $T_{sp}(+) \rightarrow e(+) \rightarrow Ac(+) \rightarrow x(-) \rightarrow N_{s0}(-) \rightarrow Q(-) \rightarrow T(+)$
4. Si $T(+)$, aceptar la acción.



Selección de acción en modo regulador

1. Acción inversa y válvula NA
2. $T(+)$
3. $T(+)\rightarrow e(-)\rightarrow Ac(-)\rightarrow x(+)\rightarrow N_{s0}(+)\rightarrow Q(+)\rightarrow T(-)$
4. Si $T(-)$, aceptar la acción.



Prompt para determinar el tipo de acción

Actúa como un experto en Ingeniería Química. Determina el tipo de acción, directa o inversa, que deberá tener un controlador de temperatura de un CSTR cuando la válvula de control es del tipo normalmente abierta y regula el caudal de fluido de enfriamiento que se alimenta a un serpentín sumergido en el reactor. Para definir el tipo de acción, considera la convención que analiza la relación entre la salida del controlador y la variable de proceso, no con el error.

Actúa como un experto en Ingeniería Química. Determina el tipo de acción, directa o inversa, que deberá tener un controlador de temperatura de un CSTR cuando la válvula de control es del tipo normalmente abierta y regula el caudal de fluido de enfriamiento que se alimenta a un serpentín sumergido en el reactor. Para definir el tipo de acción, considera la convención que analiza la relación entre la salida del controlador y la variable de proceso, no con el error.

Tipo de acción del controlador

- Dado que la **salida del controlador (MV)** y la **variable de proceso (PV)** están en **relación directa**, se requiere una:

☒ **Acción inversa**

Justificación

- En un sistema de control automático, si un aumento en la temperatura del reactor debe ser contrarrestado por una **disminución de la salida del controlador** (para **abrir más** la válvula y permitir **más enfriamiento**), entonces el controlador debe actuar en **forma inversa** a la PV.
- Es decir, si la PV (temperatura) **sube**, la salida del controlador **baja**.

Instalación de un control PI para T

Modelo original

$$Ac = Ab + Kp \left(e + \frac{1}{\tau i} Ai \right)$$

$$e = T_{sp} - T$$

$$Ai = \int_0^t e dt$$

$$x_s = \begin{cases} 1 & Ac < 0 \\ 0 & Ac > 1 \\ 1 - Ac & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Modelo simplificado

$$\frac{dAi}{dt} = e$$

$$e = T_{sp} - T$$

$$Ac = Ab + Kp \left(e + \frac{1}{\tau i} Ai \right)$$

$$x_s = \begin{cases} 1 & Ac < 0 \\ 0 & Ac > 1 \\ 1 - Ac & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Cálculo de N_{s0}

$$F_{s0} = C_{vs} x_s \sqrt{\frac{\Delta P_{vs}}{\rho_s / \rho_w}}$$

$$N_{s0} = \frac{F_{s0} \rho_s}{PM_s}$$

Modelo de CT

$$\frac{dAi}{dt} = e$$

$$e = T_{sp} - T$$

$$Ac = Ab + Kp \left(e + \frac{1}{\tau i} Ai \right)$$

$$x_s = \begin{cases} 1 & Ac < 0 \\ 0 & Ac > 1 \\ 1 - Ac & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$F_{s0} = C_{vs} x_s \sqrt{\frac{\Delta P_{vs}}{\rho_s / \rho_w}}$$

$$N_{s0} = \frac{F_{s0} \rho_s}{PM_s}$$

Parámetros en sistema inglés

- $K_p = 4.25 \times 10^{-3} \text{ } ^\circ\text{F}^{-1}$
- $Ab = 0.5$
- $\tau_i = 0.152 \text{ h}$
- $T_{sp} = 138.7 \text{ } ^\circ\text{F}$
- $Ai(0) = 0$

- $\rho_s = \rho_w, \rho_s = 62.43 \text{ lb/ft}^3$
- $PM_s = 18 \text{ lb/lb-mol}$
- $\Delta P_{vs} = 4.383 \times 10^{11} \text{ lb/(ft}\cdot\text{h}^2\text{)}.$
- $C_{vs} = 8.71 \times 10^{-4} \text{ ft}^{3.5}/\text{lb}^{0.5}$

Condiciones iniciales

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

Listado en Berkeley Madonna

```
{Reactor de propilenglicol con CT}
```

```
METHOD RK4
```

```
STARTTIME = 0
```

```
STOPTIME = 3
```

```
DT = 0.01
```

```
; Inicialización
```

```
INIT CA = 0.0377
```

```
INIT CB = 2.1256
```

```
INIT CC = 0.1439
```

```
INIT CM = 0.2269
```

```
INIT T = 138.7
```

```
INIT Ai = 0
```

```
; 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)
```

```
Ai' = e
```

```
; Sistema AEs
```

```
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
```

```
e = Tsp-T
```

```
Ac = Ab+Kp*(e+Ai/taui)
```

```
xs = 1-Ac
```

```
LIMIT xs >= 0
```

```
LIMIT xs <= 1
```

```
Fs0 = Cvs*xs*sqrt(DPs)
```

```
Ns0 = Fs0*rhos/PMs
```

```
; Datos
```

```
V = 66.84
```

```
F0 = 440.63
```

```
T0 = 70
```

```
CA0 = 0.1816
```

```
CB0 = 2.2695
```

```
CC0 = 0
```

```
CM0 = 0.2269
```

```
CpA0 = 35
```

```
CpB0 = 18
```

```
CpC0 = 46
```

```
CpM0 = 19.5
```

```
Ts0 = 60
```

```
Cps0 = 18
```

```
UAs = 16000
```

```
DH = -36000
```

```
alpha = 16.96E12
```

```
Ea = 32400
```

```
Rg = 1.987
```

```
Tsp = 138.7
```

```
Ab = 0.5
```

```
Kp = 4.25E-3
```

```
taui = 0.152
```

```
rhos = 62.43
```

```
PMs = 18
```

```
DPs = 4.383E11
```

```
Cvs = 8.71E-4
```

Ver Reactor con CT.mmd

reactor_propileno_CT.m

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

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

    % Recupera variables Y
    Y = AEs(t,X);
    [F0 CA0 CB0 CC0 CM0 T0 V r C0 Cp0 DH Q C Cp e Tsp] =
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);
    dAi = e;

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

```

% AEs
function Y = AEs(t,X)
    % En Y devuelve el vector fila de variables requeridas por ODEs o a graficar.

    % Recupera variables X
    [CA CB CC CM T Ai] = 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;
    Ts0 = 60; Cps0 = 18; UAs = 16000;
    DH = -36000; alpha = 16.96E12; Ea = 32400; Rg = 1.987;
    Tsp = 138.7; Ab = 0.5; Kp = 4.25E-3; tau_i = 0.152;
    rhos = 62.43; PMs = 18; DPs = 4.383E11; Cvs = 8.71E-4; % Sistema inglés

```

Borrar Ns0

```
% Ecuaciones algebraicas
```

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

```
% Controlador
```

```
e = Tsp-T; % e es el número de Euler en GNU Octave
```

```
Ac = Ab+Kp*(e+Ai/taui);
```

```
xs = max(0,1-Ac);
```

```
xs = min(xs,1);
```

```
Fs0 = Cvs*xs*sqrt(DPs);
```

```
Ns0 = Fs0*rhos/PMs;
```

```
% 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;
```

```
Y = [F0 CA0 CB0 CC0 CM0 T0 V r C0 Cp0 DH Q C Cp e Tsp];
```

```
endfunction % AEs
```

```

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

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

    % Inicialización
    CAini = 0.0377; CBini = 2.1256; CCini = 0.1439; CMini = 0.2269; % lb-mol/ft3
    Tini = 138.7; % °F
    Aiini = 0;
    Xini = [CAini CBini CCini CMini Tini Aiini]; % Inicializa las variables de estado

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

```

```

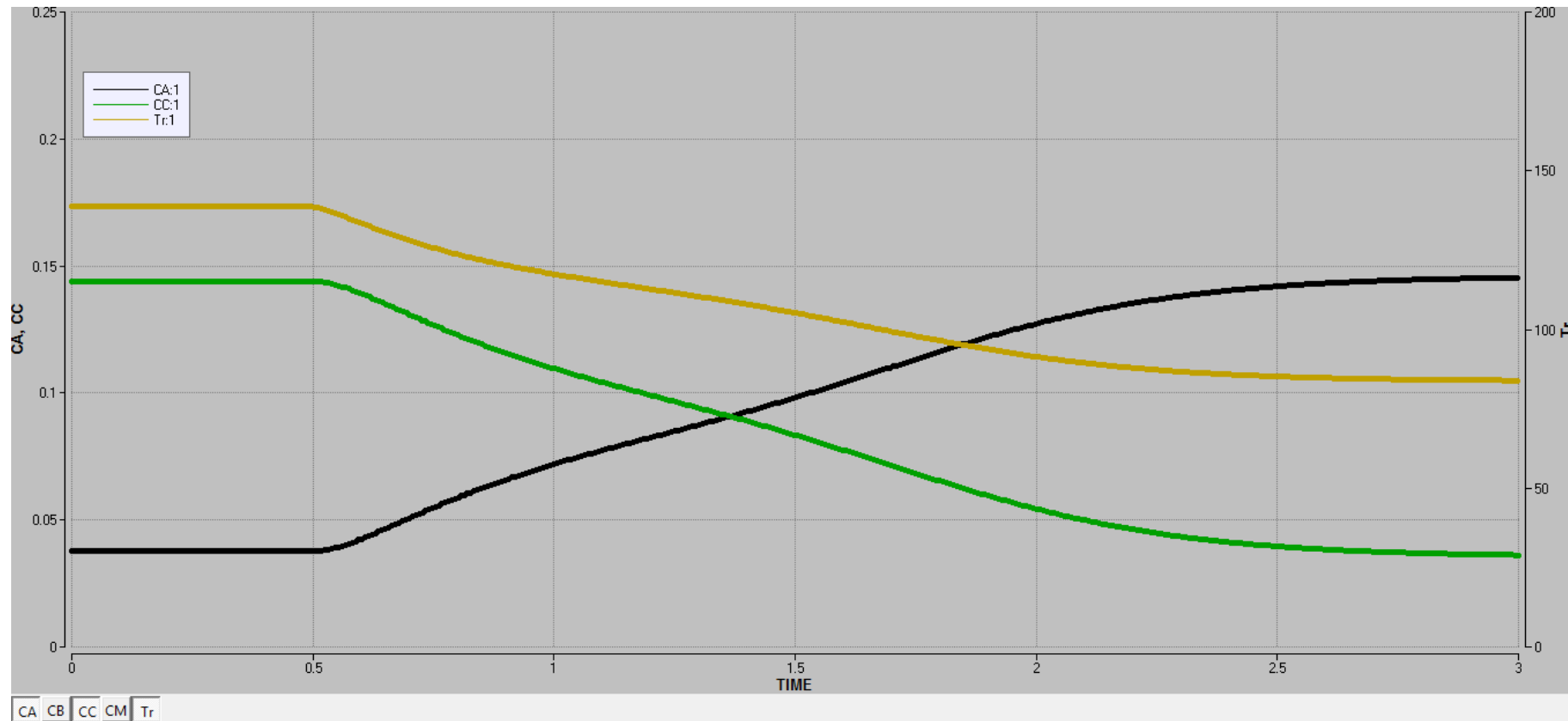
% Análisis
function analizar(LX,LY,tpts,X,Y)
    % Análisis de resultados. Funciones disponibles:
    % exportar('resultados.csv',[{leyendas}])
    % graficar({leyendas}, 'título', 'rótulo x', 'rótulo y', [limitesy])
    % vector(leyenda)
    exportar('resultados.csv', {'CA' 'CB' 'CC' 'CM' 'T'});
  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

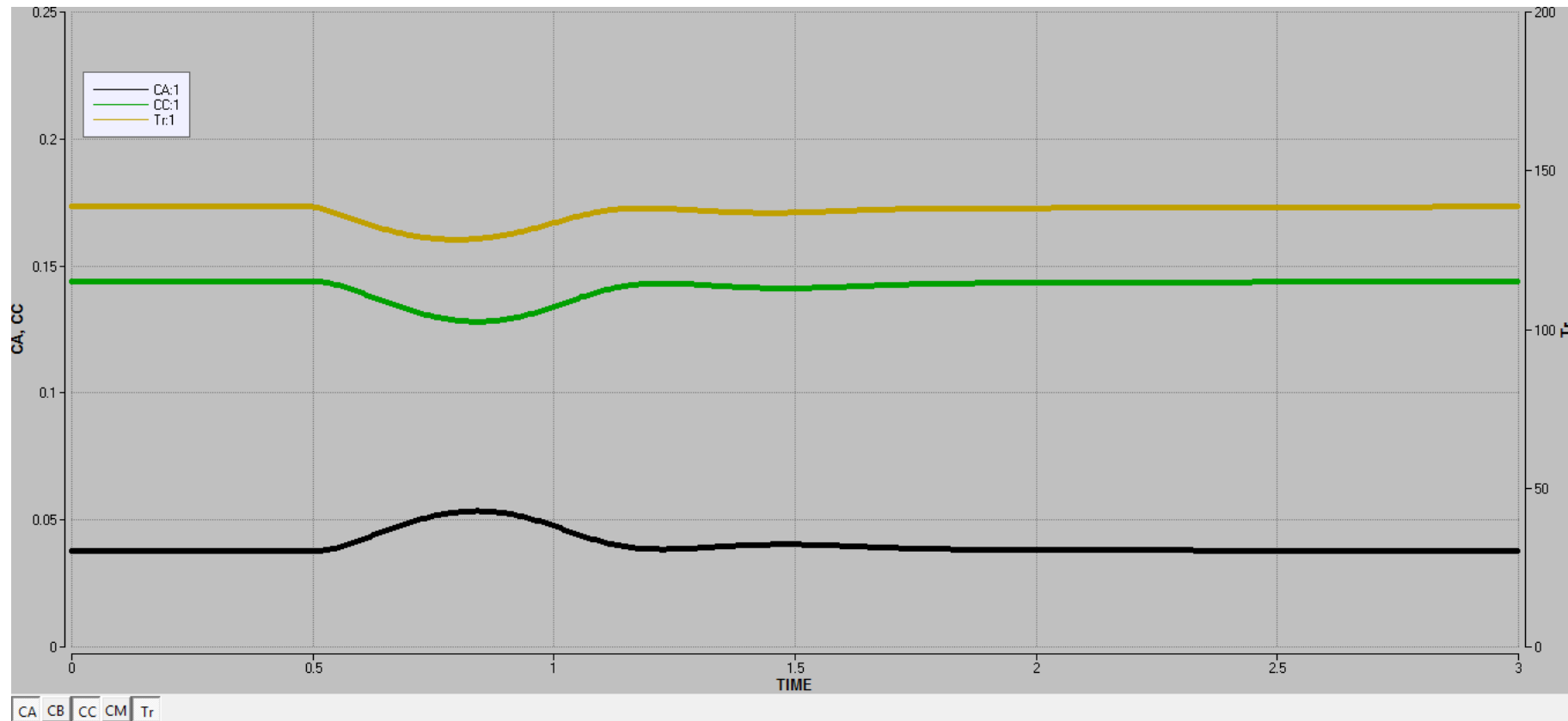
```

Verificar estado estacionario inicial.

Sin CT, $T_0 = 75 - \text{step}(5, 0.5)$



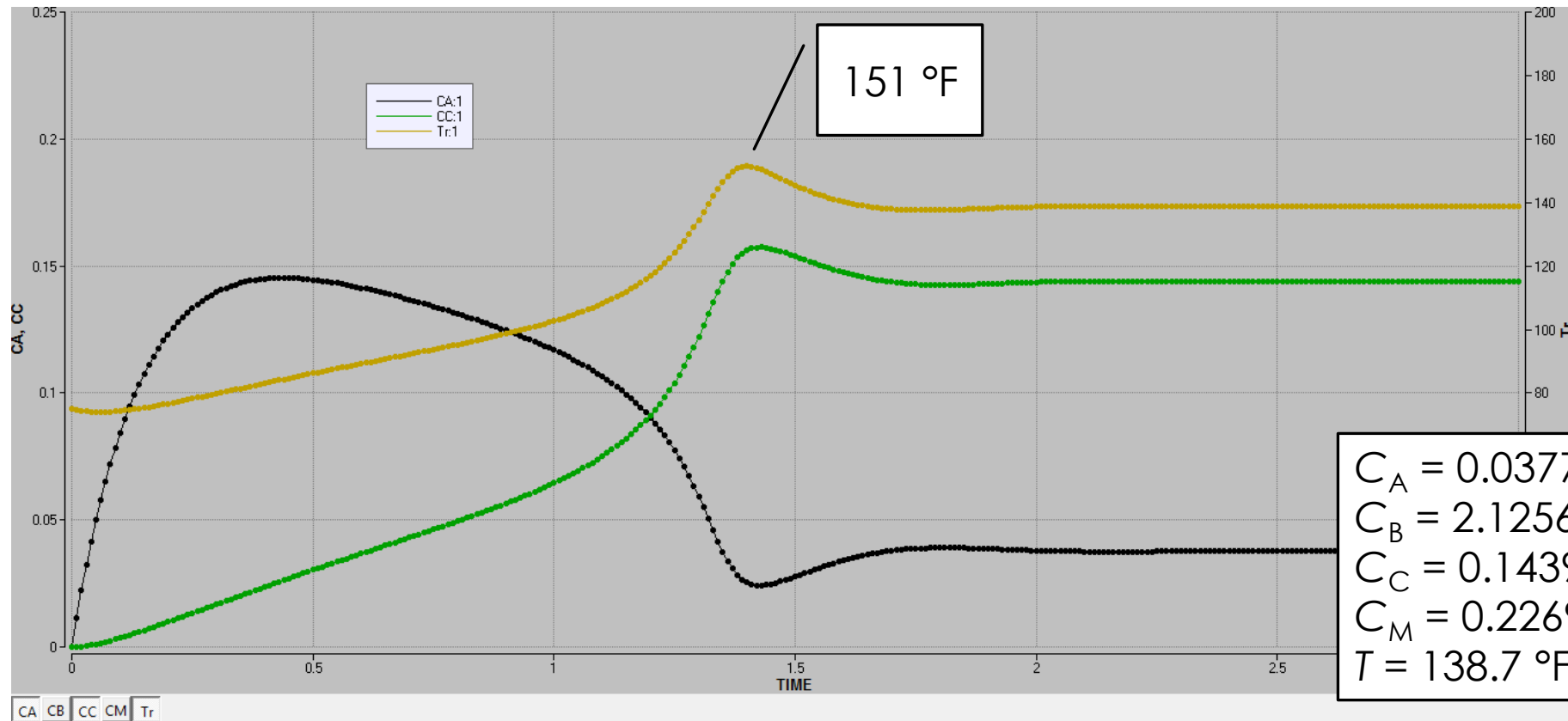
Con CT, $T_0 = 75 - \text{step}(5, 0.5)$



Puesta en marcha sin CT

- Inicialmente, agua a 75° F.
- Serpentín funcionando.
- $C_A = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_B = 3.45 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_C = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_M = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $T = 75 \text{ }^\circ\text{F}$
- $Ai(0) = 0$
- $Kp = 0 \text{ }^\circ\text{F}^{-1}$

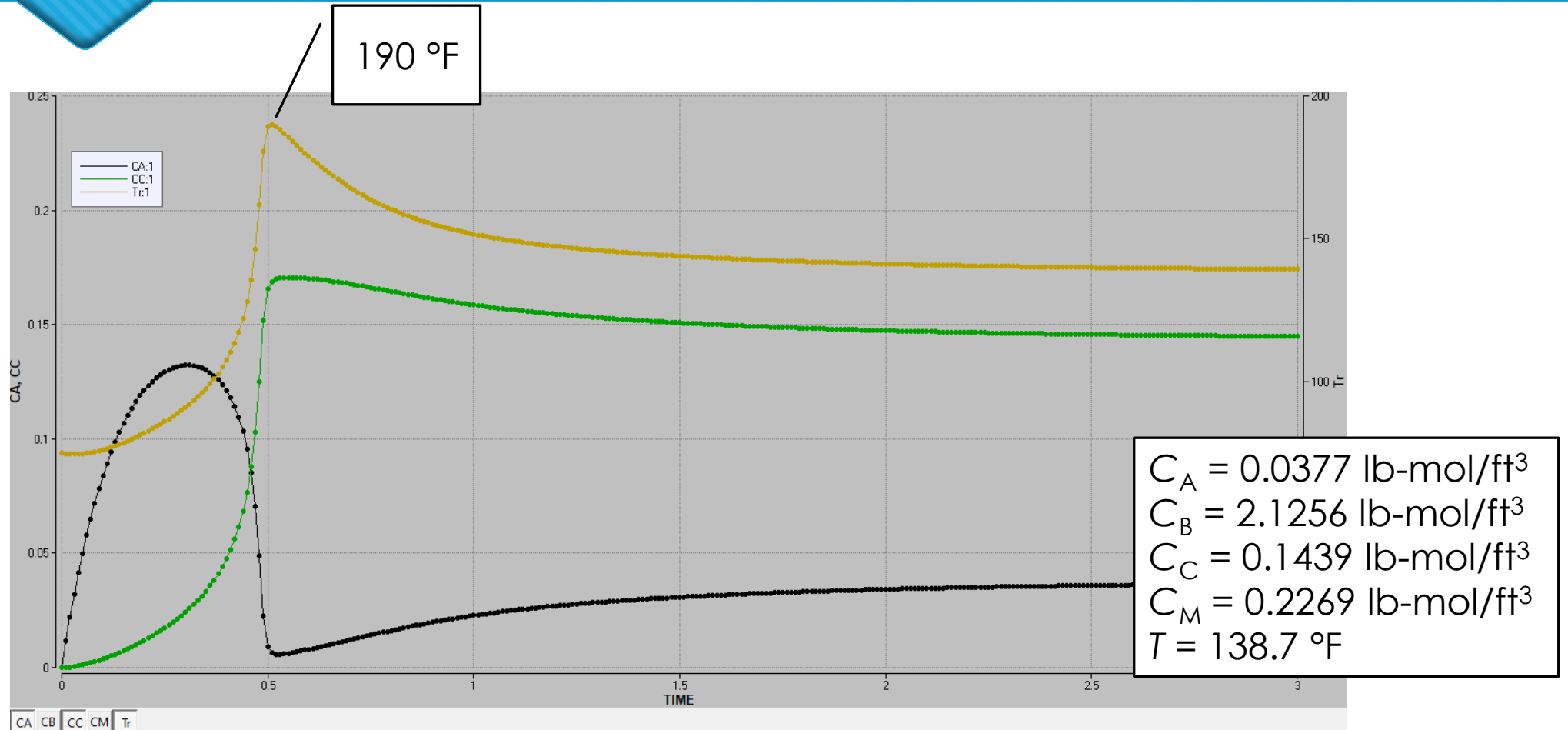
Puesta en marcha sin CT



Puesta en marcha con CT

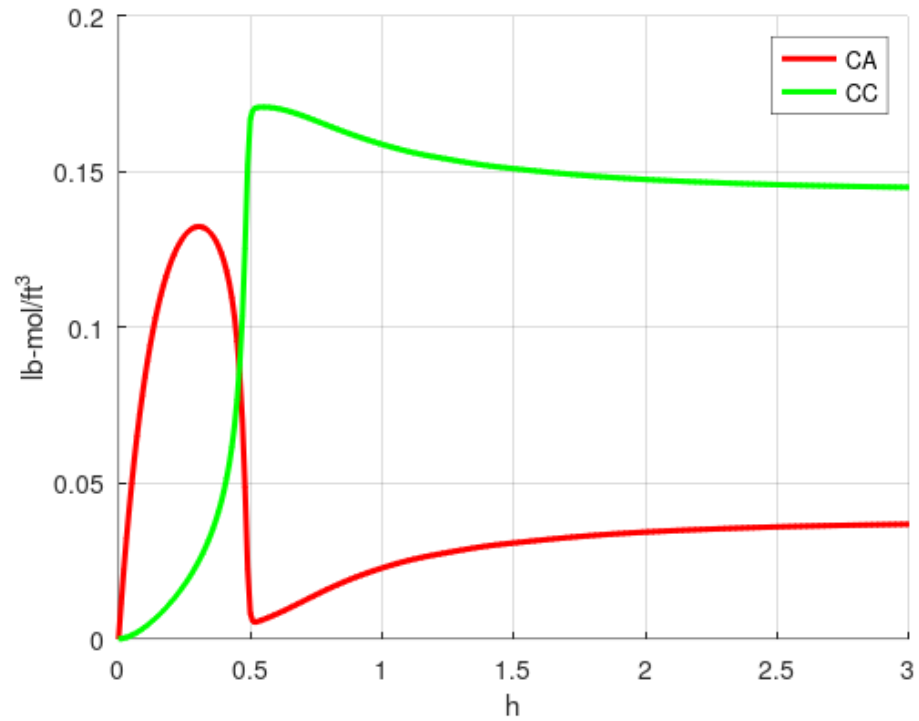
- Inicialmente, agua a 75° F.
- Serpentín funcionando.
- $C_A = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_B = 3.45 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_C = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $C_M = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$
- $T = 75 \text{ }^\circ\text{F}$
- $Ai(0) = 0$
- $Kp = 4.25 \times 10^{-3} \text{ }^\circ\text{F}^{-1}$
- $x_{\min} = 1 \times 10^{-4}$

Puesta en marcha con CT

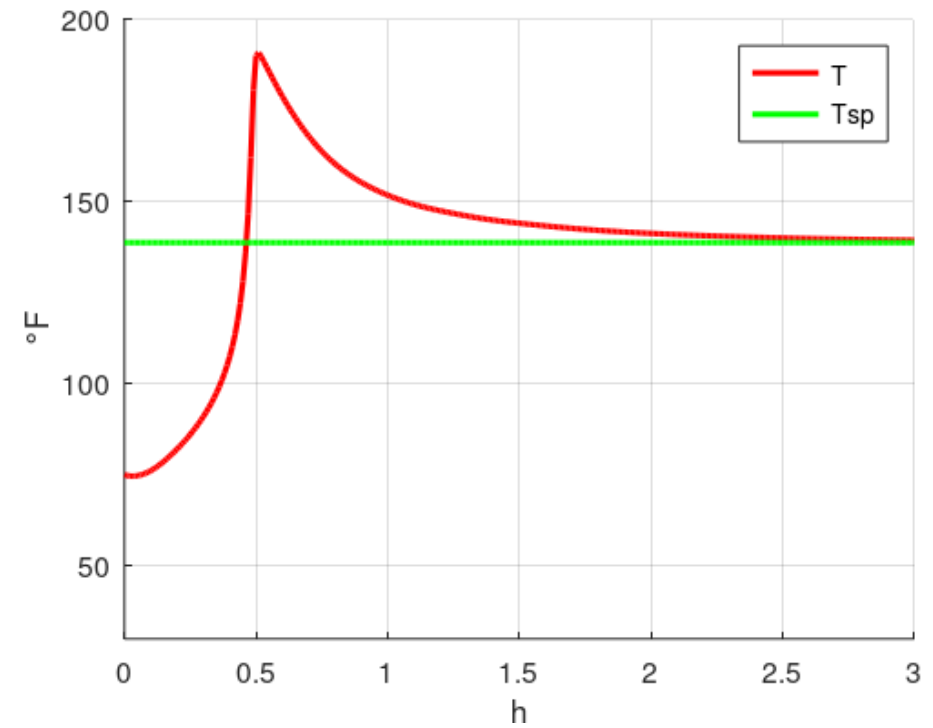


Puesta en marcha con CT

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 190.7753 °F.
```

```
Ese valor se alcanza en 0.51 ± 0.01 h.
```

```
Simulación finalizada.
```

```
>>
```