

Modelado Parte V

Enrique E. Tarifa, Facultad de Ingeniería, UNJu

Mapa curricular de la materia

Simulación

Optimización



```
graph TD; A[Simulación] --> B[Optimización]
```

Mapa curricular de la materia

Simulación



Optimización

Mapa curricular de Simulación

Definiciones

Modelo de espacio de estados

Resolución de modelos

Simulación de plantas

Mapa curricular de Simulación

Definiciones

Modelo de espacio de estados

Resolución de modelos

Simulación de plantas

Mapa curricular de un reactor CSTR

1. Reactor CSTR
2. Modelo dinámico
3. Sistema de unidades inglés
4. Puesta en marcha
5. Estado de régimen
6. Detención
7. Reactor *batch*
8. Variación de volumen

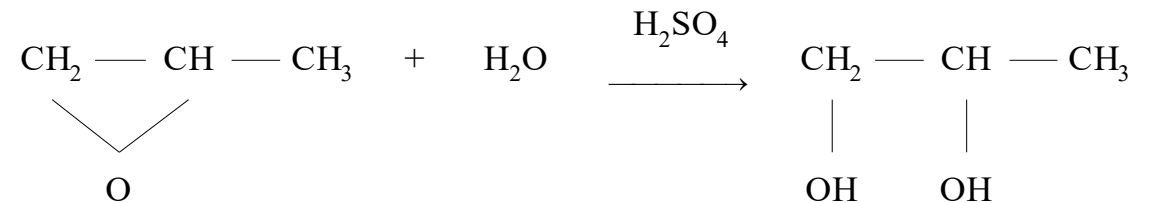
Simulación de un reactor

Reactor productor de propilenglicol

Componentes

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

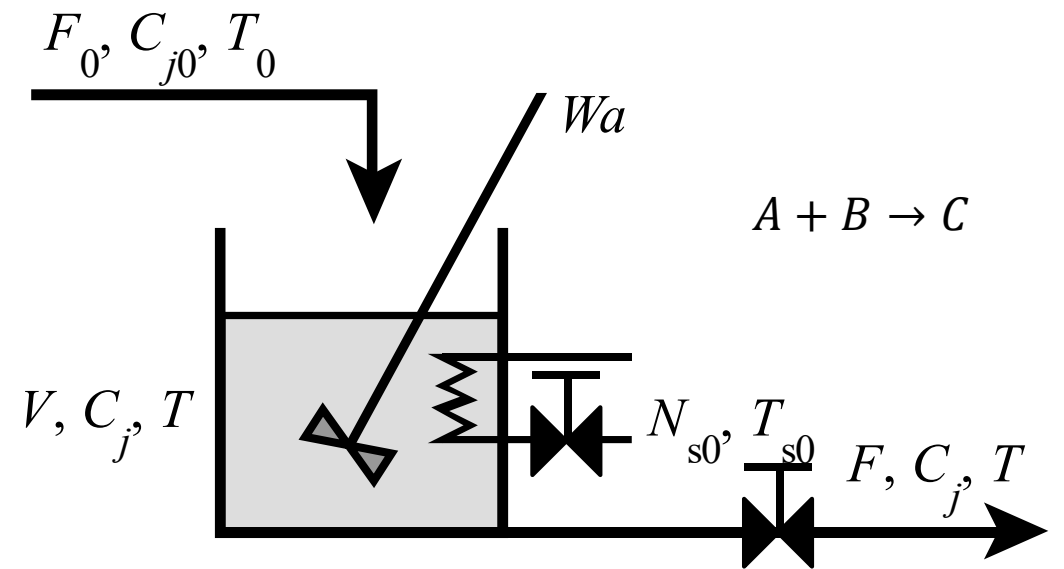
Reacción



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):

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

Modelo dinámico

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

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

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

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

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

Modelo dinámico

$$r = kC_A$$

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

$$Q = UA_s \Delta T_{ml}$$

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

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

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

$$Cp = \sum_{j=A,B,C,M} x_j Cp_{j0}$$

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

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

$$Cp_0 = \sum_{j=A,B,C,M} x_{j0} Cp_{j0}$$

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

Modelo dinámico simplificado

Forma normal

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

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

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

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

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_0 C_0 C_{p0} (T_0 - T) + Vr(-\Delta H) - Q}{VCCp}$$

Modelo dinámico

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

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

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

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

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

$$C_p = \frac{1}{C} \sum_{j=A,B,C,M} C_j C_{p_{j0}}$$

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

$$C_{p_0} = \frac{1}{C_0} \sum_{j=A,B,C,M} C_{j0} C_{p_{j0}}$$

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

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

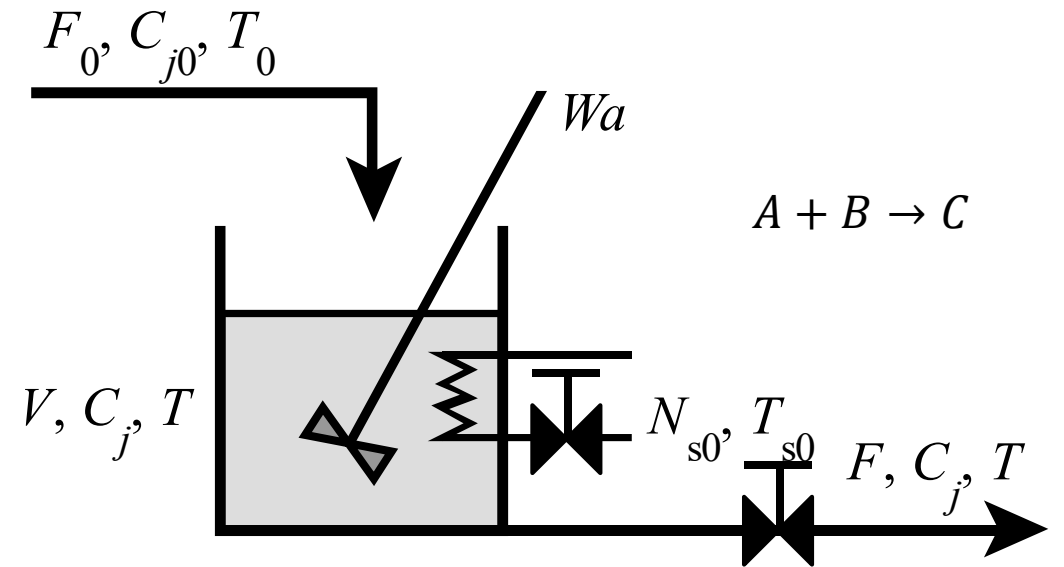
$$Q = N_{s0} Cp_{s0} (T - T_{s0}) \left(1 - e^{-\frac{UA_s}{N_{s0} Cp_{s0}}} \right)$$

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 $Cp_{M0} = 19.5 \text{ Btu}/(\text{lb-mol}\cdot^\circ\text{F})$
- $V = 66.84 \text{ ft}^3$
- $\Delta H = -36000 \text{ Btu/lb-mol}$
- $\alpha = 16.96 \times 10^{12} \text{ h}^{-1}$
- $E = 32400 \text{ Btu/lb-mol}$
- $R = 1.987 \text{ Btu}/(\text{lb-mol}\cdot^\circ\text{R})$
- $N_{s0} = 1000 \text{ lb-mol/h}$
- $T_{s0} = 60 \text{ }^\circ\text{F}$
- $Cp_{s0} = 18 \text{ Btu}/(\text{lb-mol}\cdot^\circ\text{F})$
- $UA_s = 16000 \text{ Btu}/(\text{h}\cdot^\circ\text{F})$

Puesta en marcha simplificada

- Cargar el reactor con solvente.
- Calentar hasta activación (camisa).
- Habilitar alimentación y descarga.
- Habilitar enfriamiento (serpentín).



Puesta en marcha 1

Procedimiento

- Cargar agua a 75° F.
- Habilitar serpentín.
- Habilitar carga y descarga.

Simulación

- $C_A = 0$ lb-mol/ft³
- $C_B = 3.45$ lb-mol/ft³
- $C_C = 0$ lb-mol/ft³
- $C_M = 0$ lb-mol/ft³
- $T = 75$ °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

```

```

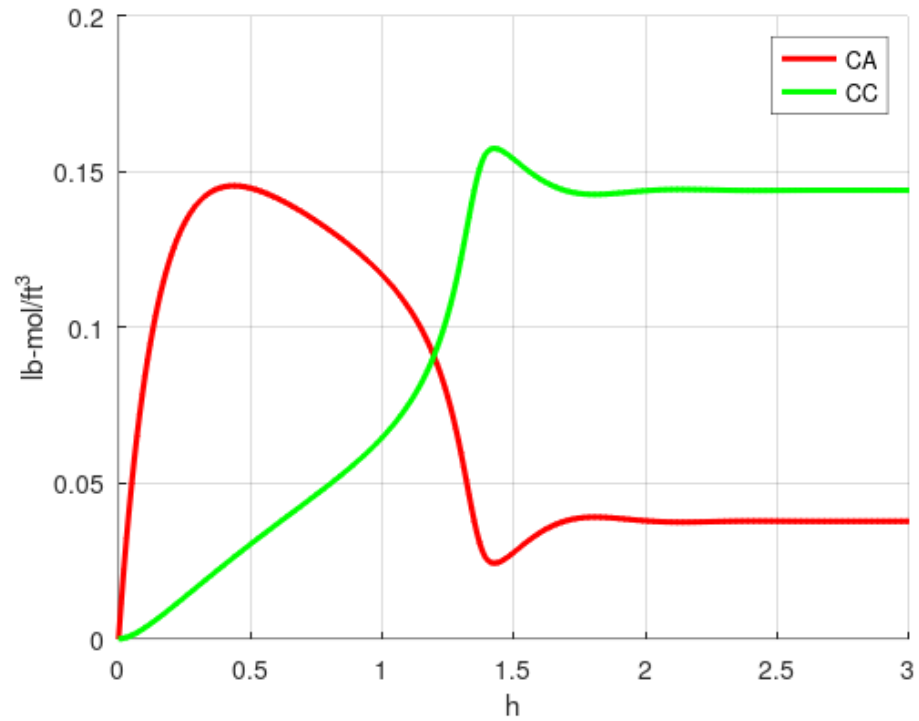
% Análisis
function analizar(LX,LY,tpts,X,Y)
    % Análisis de resultados. Funciones disponibles:
    % exportar('resultados.csv',[{leyendas}])
    % graficar({leyendas}, 'título', 'rótulo x', 'rótulo y', [limitesy])
    % vector(leyenda)
    exportar('resultados.csv', {'CA' 'CB' 'CC' 'CM' 'T'});
    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

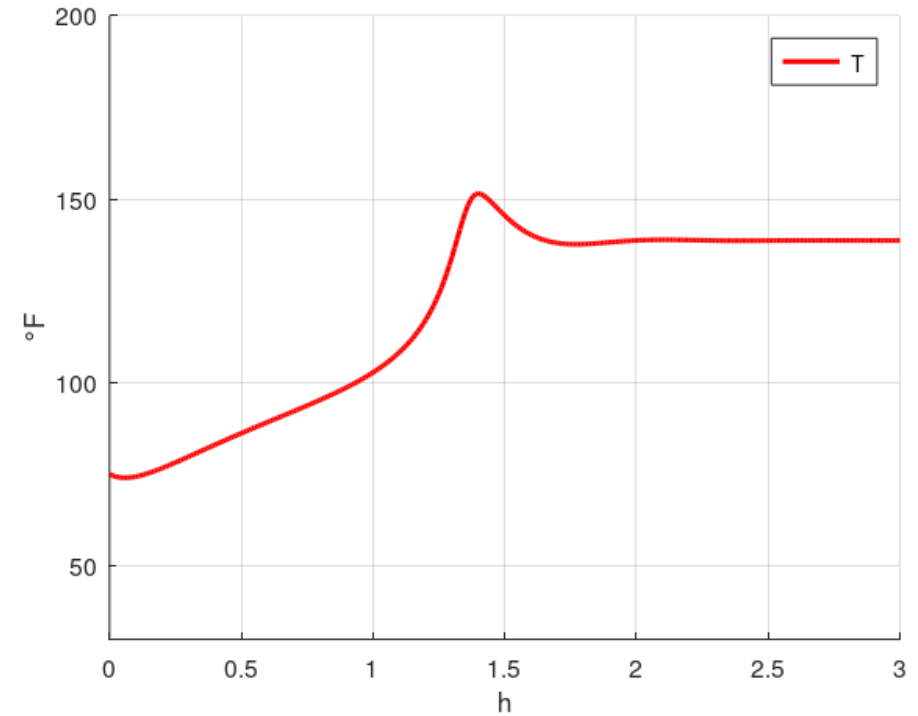
```

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
```

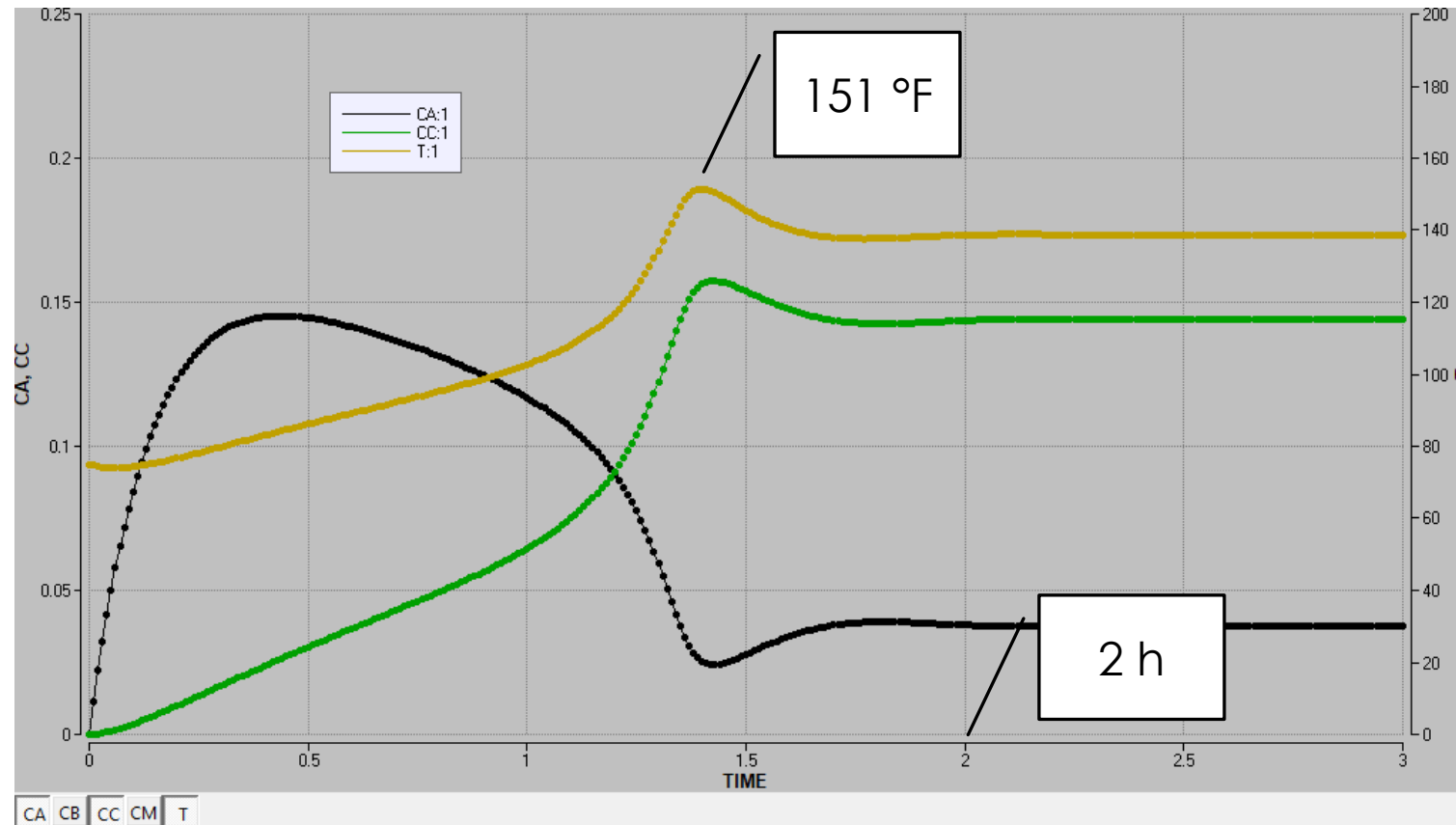
```
La temperatura máxima es 151.5016 °F.
```

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

```
Simulación finalizada.
```

```
>>
```

Puesta en marcha



Estado estacionario:

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

Puesta en marcha 2

Procedimiento

- Cargar agua a 75° F.
- Cargar A hasta hacer $C_A = 0.0377$ lb-mol/ft³.
- Calentar hasta 138.7 °F.
- Habilitar serpentín.
- Habilitar carga y descarga.

Simulación

- $C_A = 0.0377$ 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:

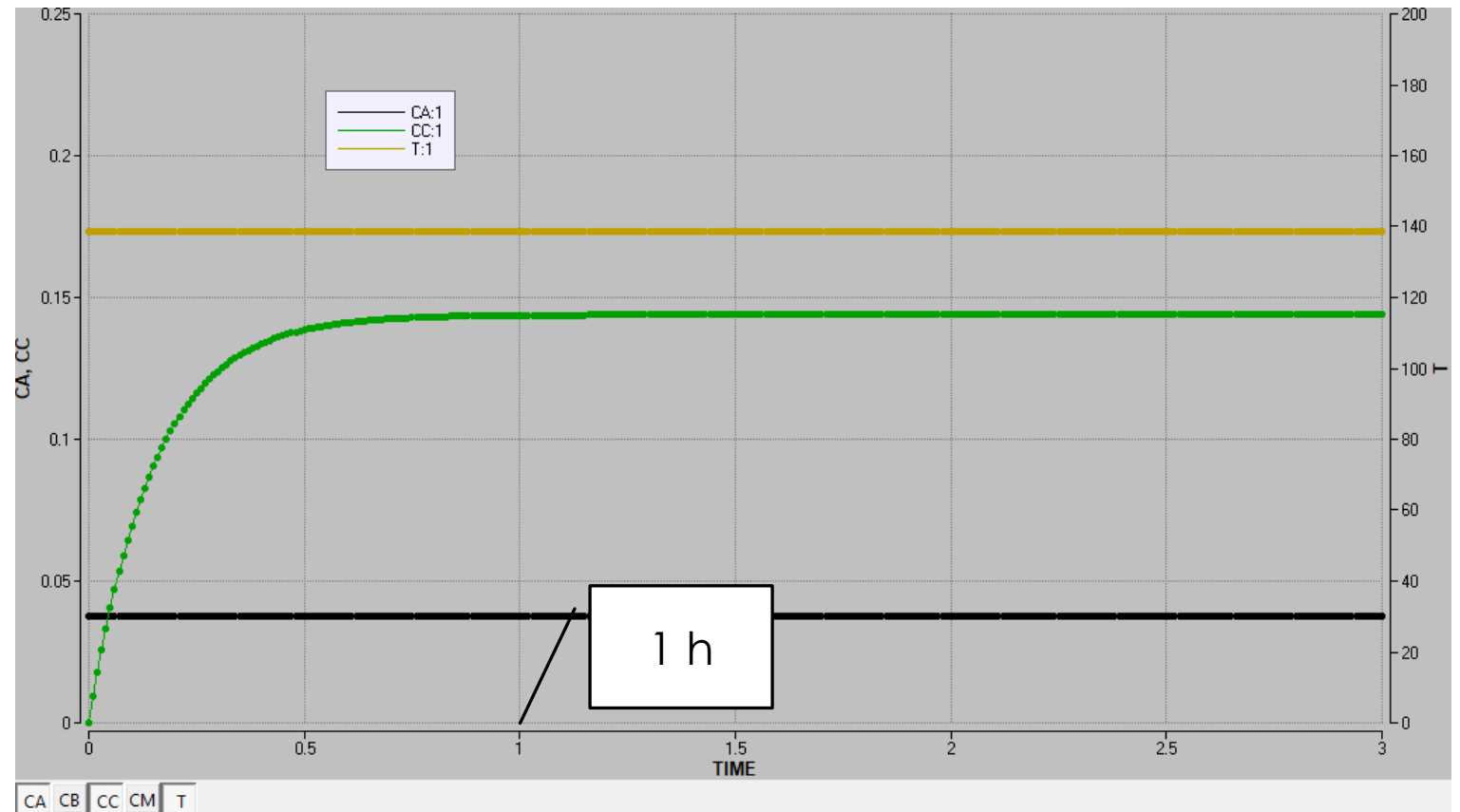
$$C_A = 0.0377 \text{ lb-mol/ft}^3$$

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

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

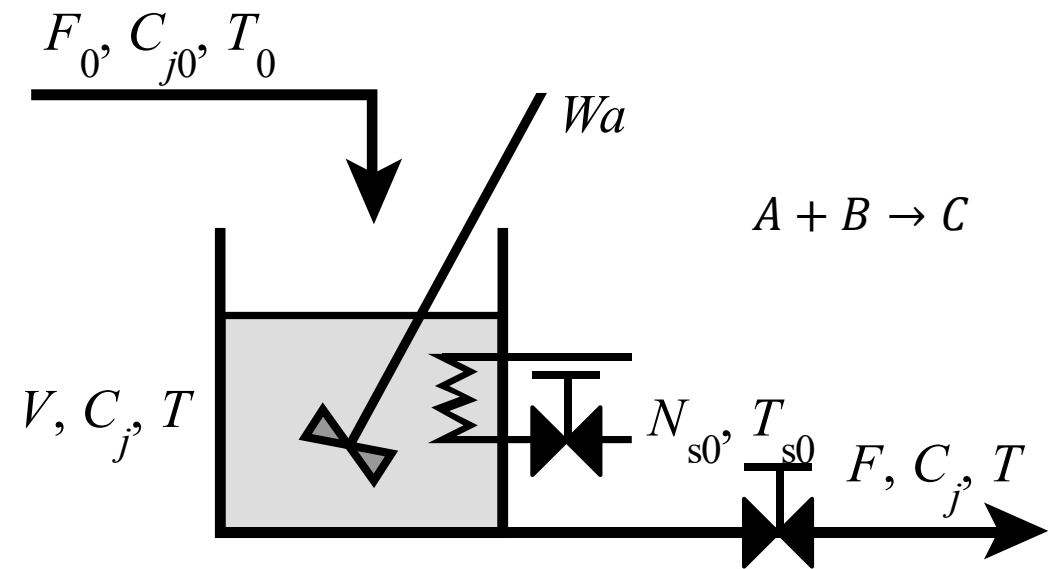
$$C_M = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$$

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



Parada simplificada

- Reducir gradualmente la de alimentación.
- Mantener agitación.
- Mantener el enfriamiento.
- Continuar hasta agotar reactivos.



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

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

Parada 1

148 °F

Estado estacionario:

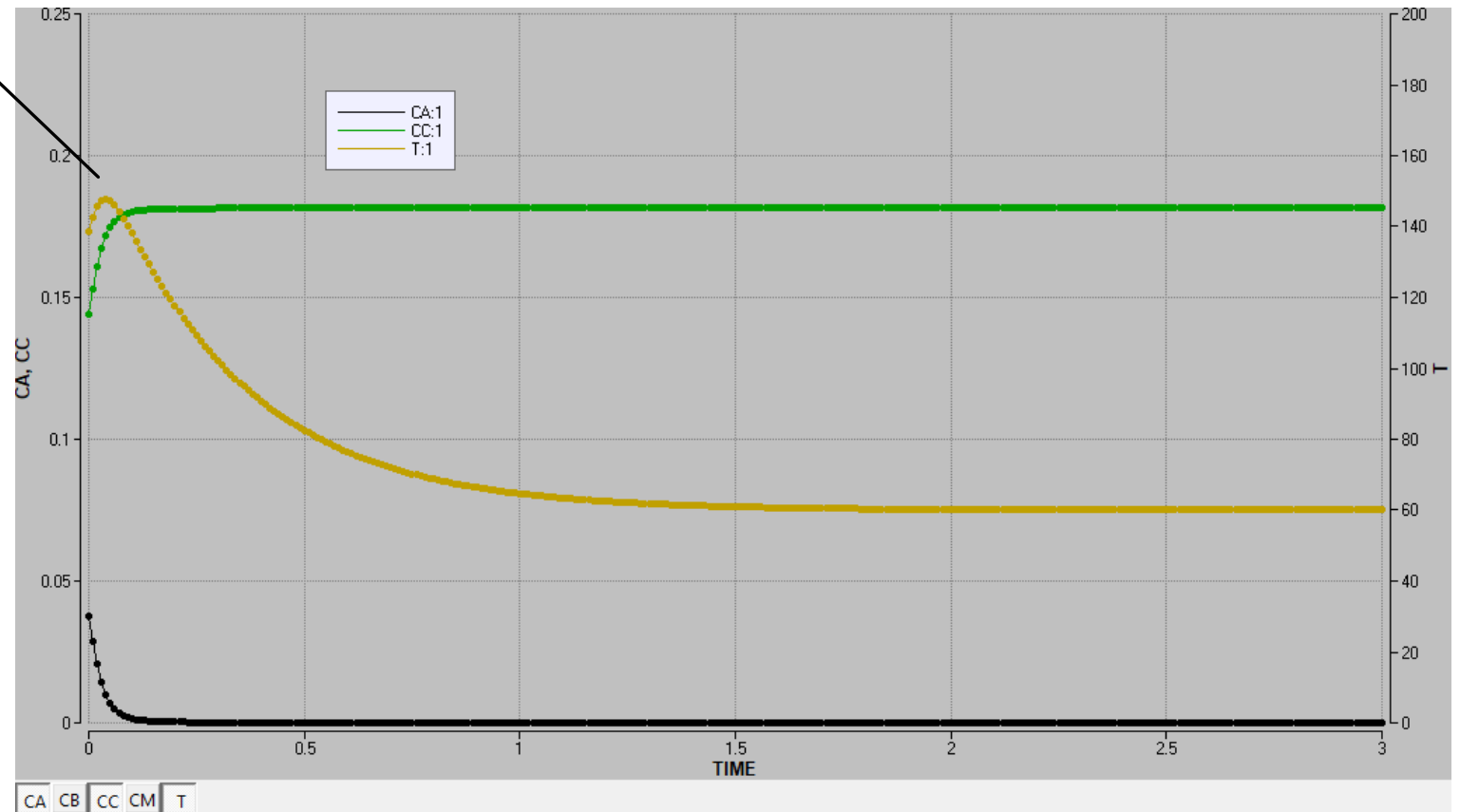
$$C_A = 0.0377 \text{ lb-mol/ft}^3$$

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

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

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

$$T = 138.7 \text{ °F}$$



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

- Retirar el reactivo A de la alimentación.
- $C_{A0} = 0 \text{ lb-mol/ft}^3$

Parada 2

Estado estacionario:

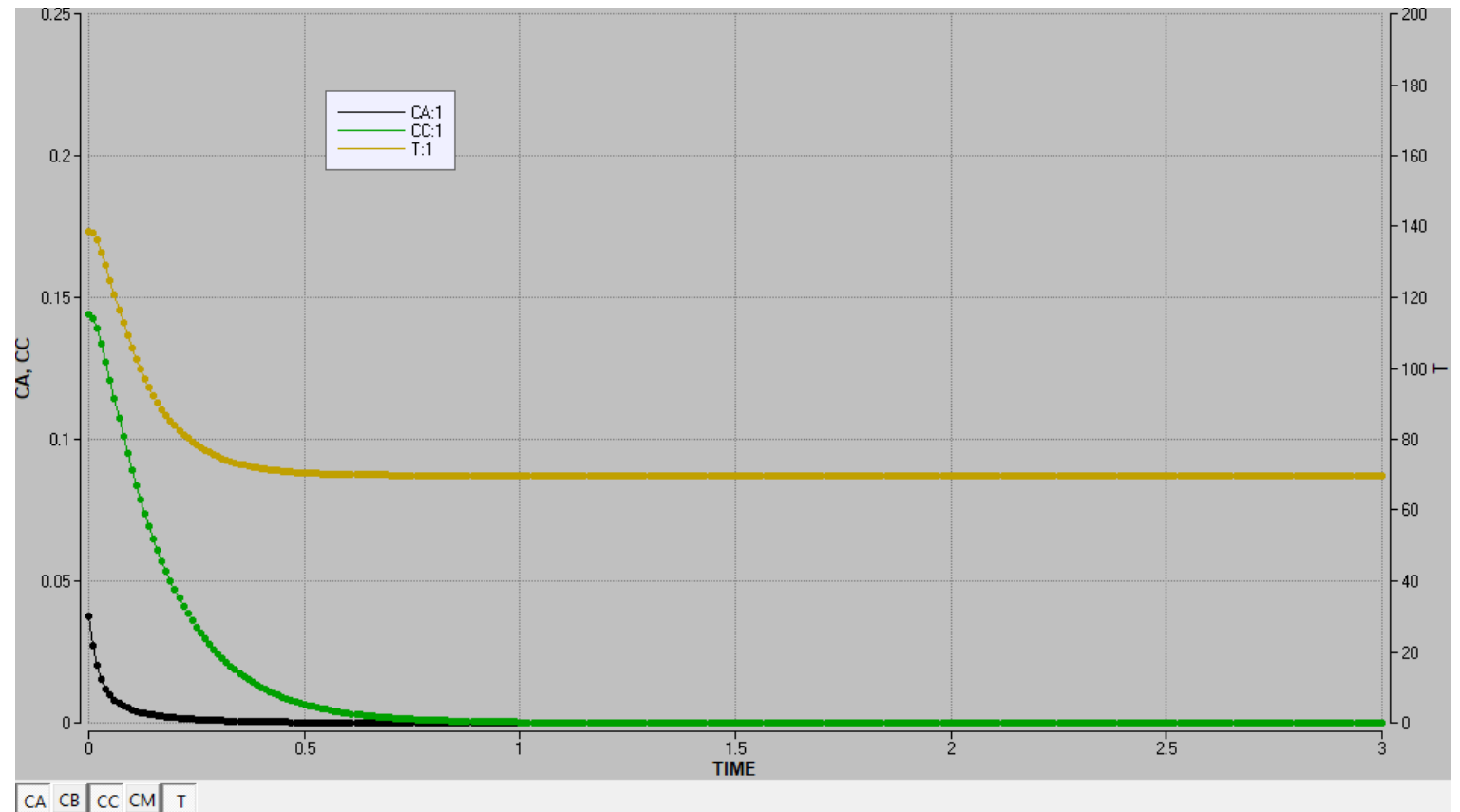
$$C_A = 0.0377 \text{ lb-mol/ft}^3$$

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

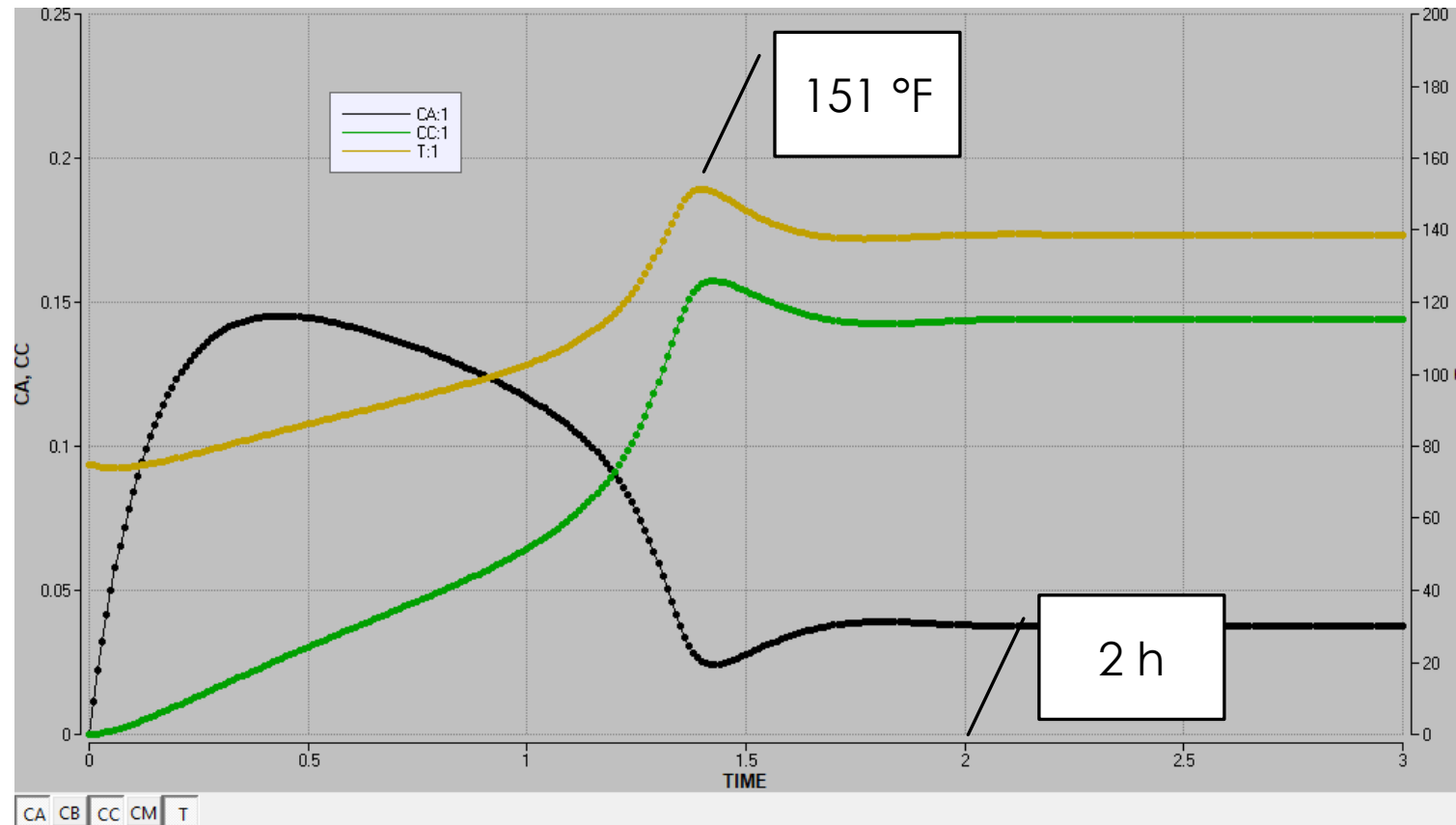
$$C_C = 0.1439 \text{ lb-mol/ft}^3$$

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

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

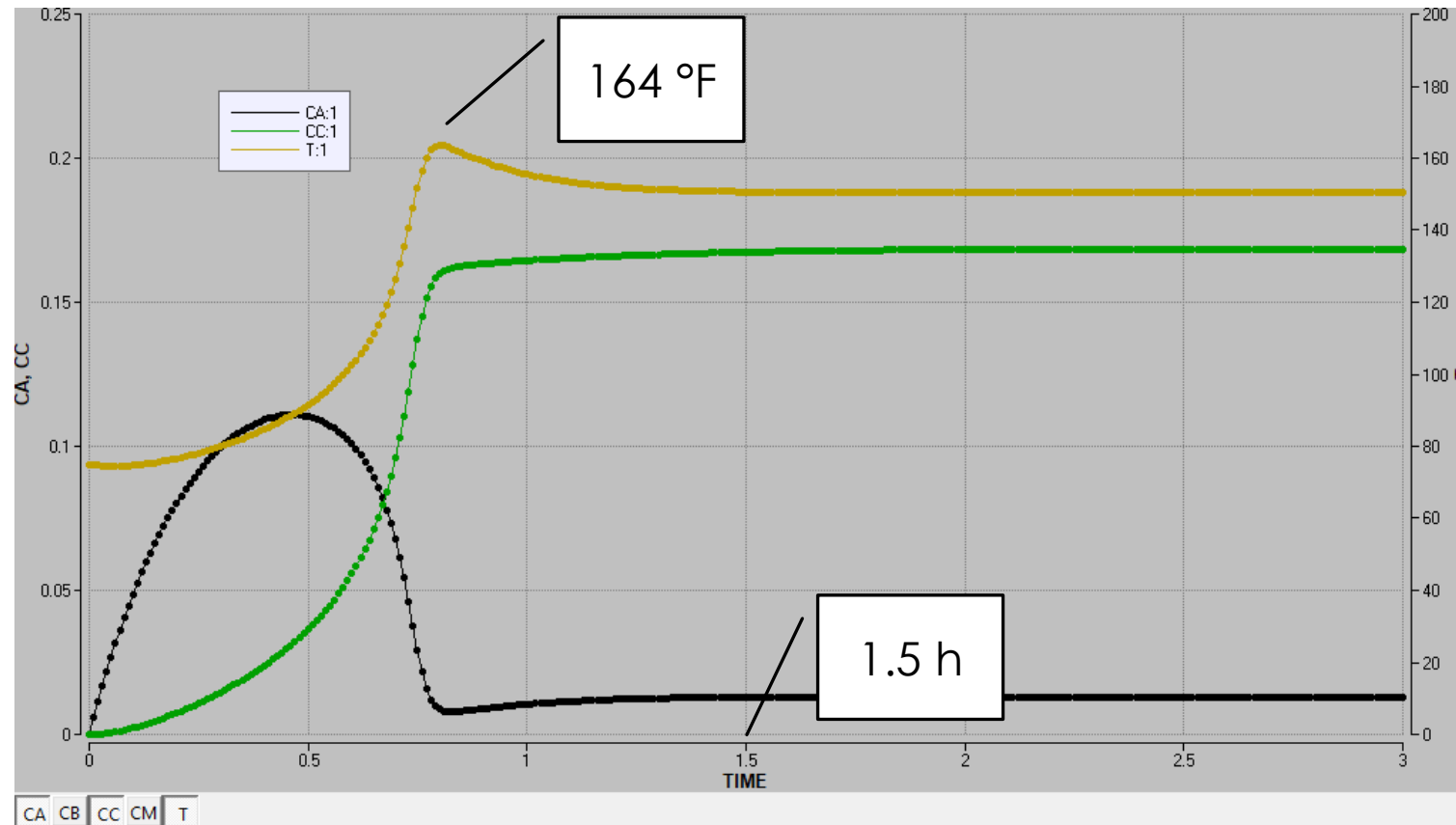


Puesta en marcha con $V = 66.84$



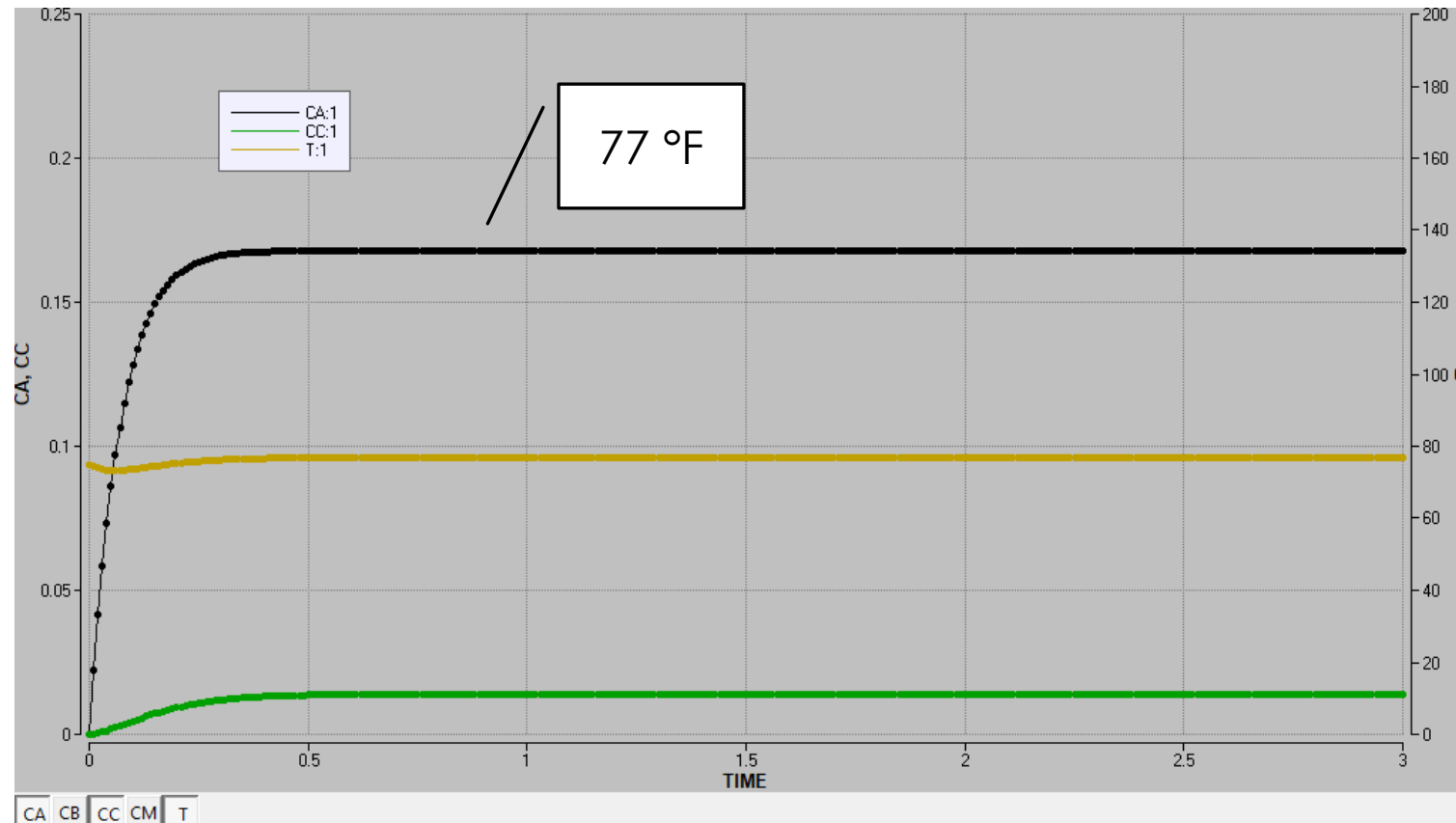
Estado estacionario:
 $C_A = 0.0377$ lb-mol/ft³
 $C_B = 2.1256$ lb-mol/ft³
 $C_C = 0.1439$ lb-mol/ft³
 $C_M = 0.2269$ lb-mol/ft³
 $T = 138.7$ °F

Puesta en marcha con $V = 66.84 \times 2$



Estado estacionario:
 $C_A = 0.0131 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $C_B = 2.1011 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $C_C = 0.1685 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $C_M = 0.2269 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $T = 150.4 \text{ °F}$

Puesta en marcha con $V = 66.84/2$



Estado estacionario:
 $C_A = 0.1677 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $C_B = 2.2556 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $C_C = 0.0139 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $C_M = 0.2269 \text{ lb-mol/ft}^3$
 $T = 76.8 \text{ }^\circ\text{F}$

No arranca.

Mapa curricular de un reactor CSTR

1. Reactor CSTR
2. Modelo dinámico
3. Sistema de unidades inglés
4. Puesta en marcha
5. Estado de régimen
6. Detención
7. Reactor *batch*
8. Variación de volumen