

Modelado Parte VII

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

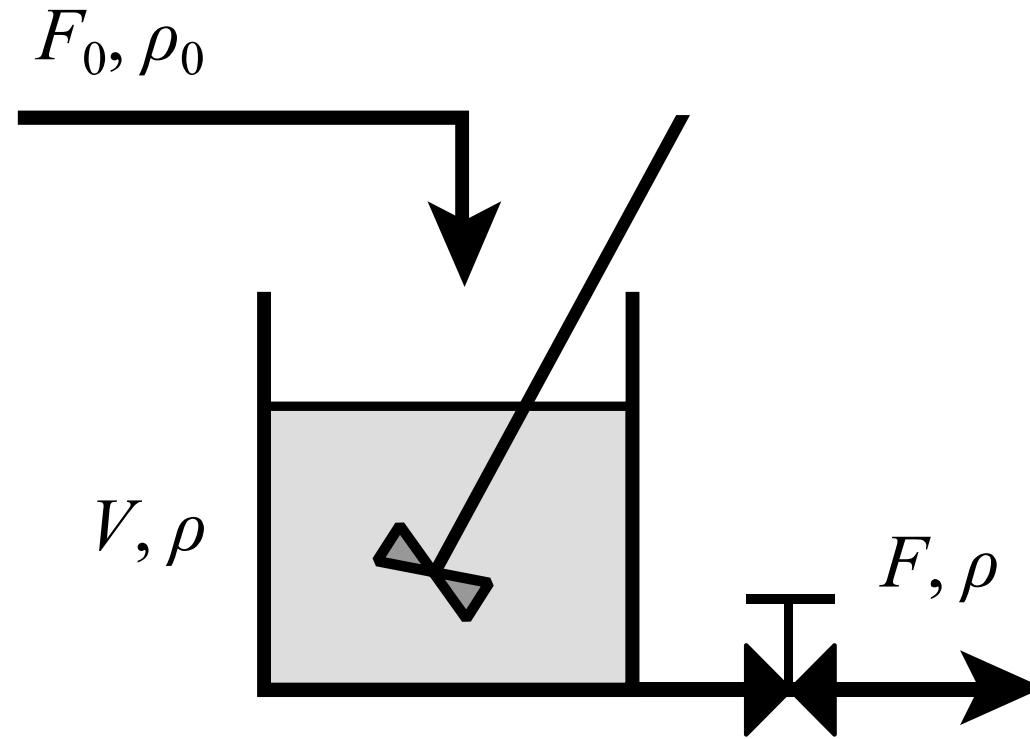
Simulación de plantas

Mapa curricular de otros equipos

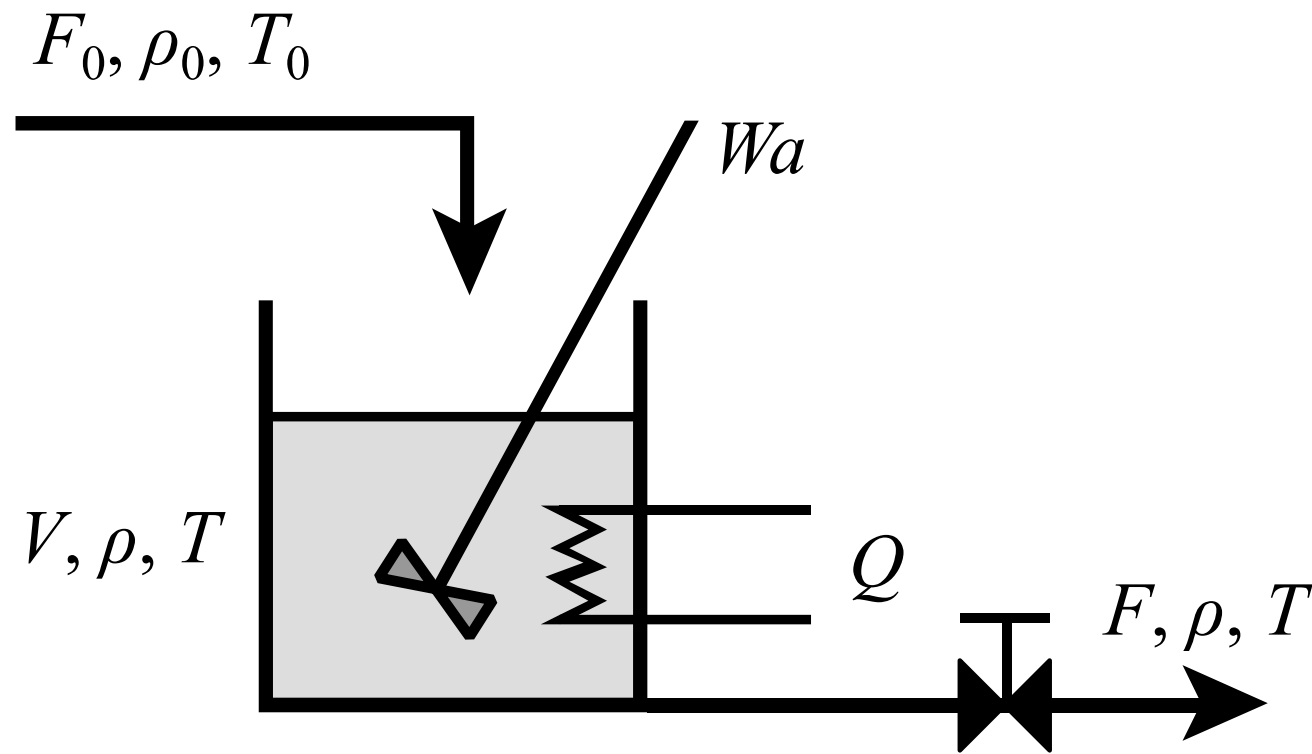
1. Equipos en serie
2. Reactor tubular 1
3. Evaporador
4. Columna de destilación
5. Extracción por solvente
6. Reactor tubular 2

Otros equipos

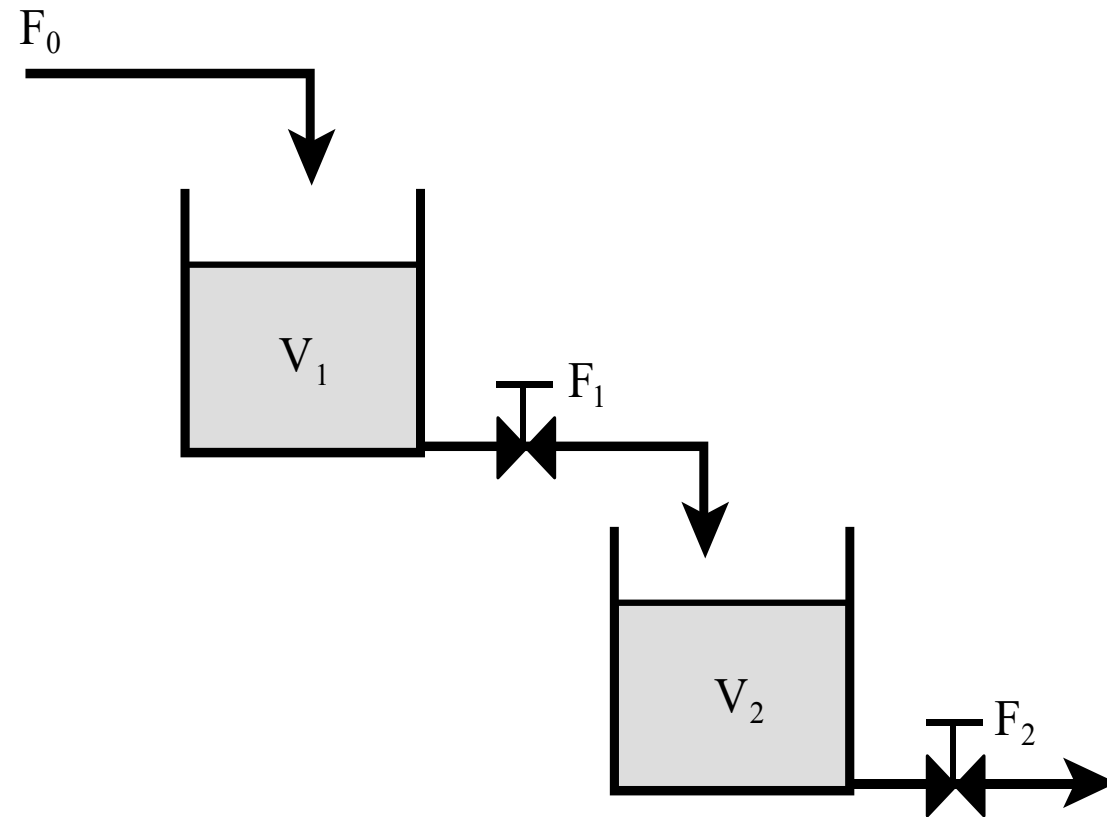
Tanque con descarga gravitatoria



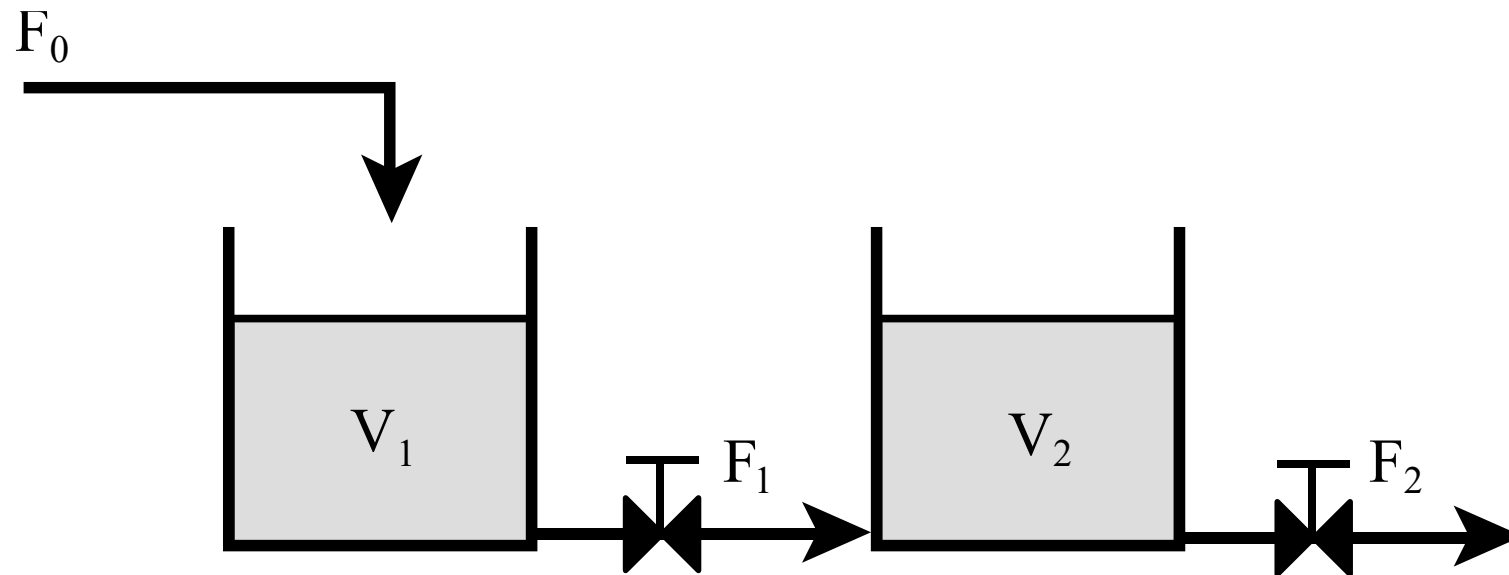
Tanque calefaccionado



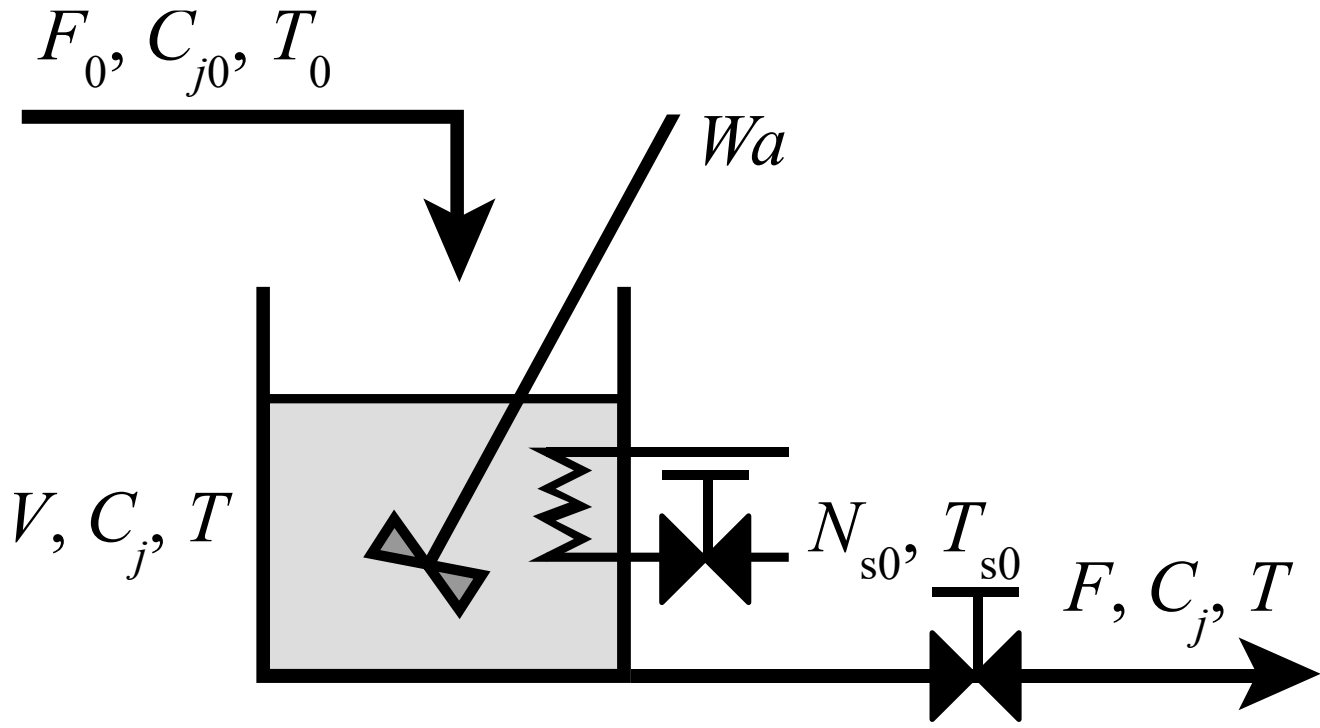
Tanques en serie no interactiva



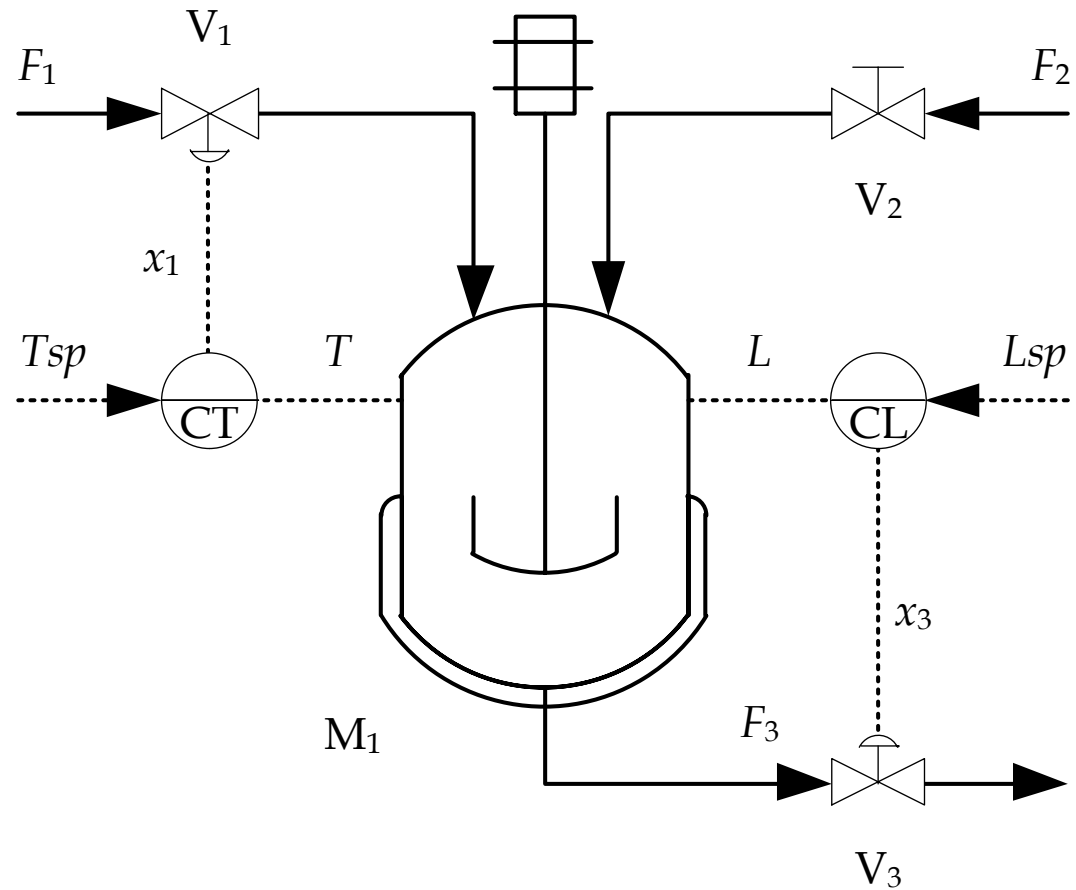
Tanques en serie interactiva



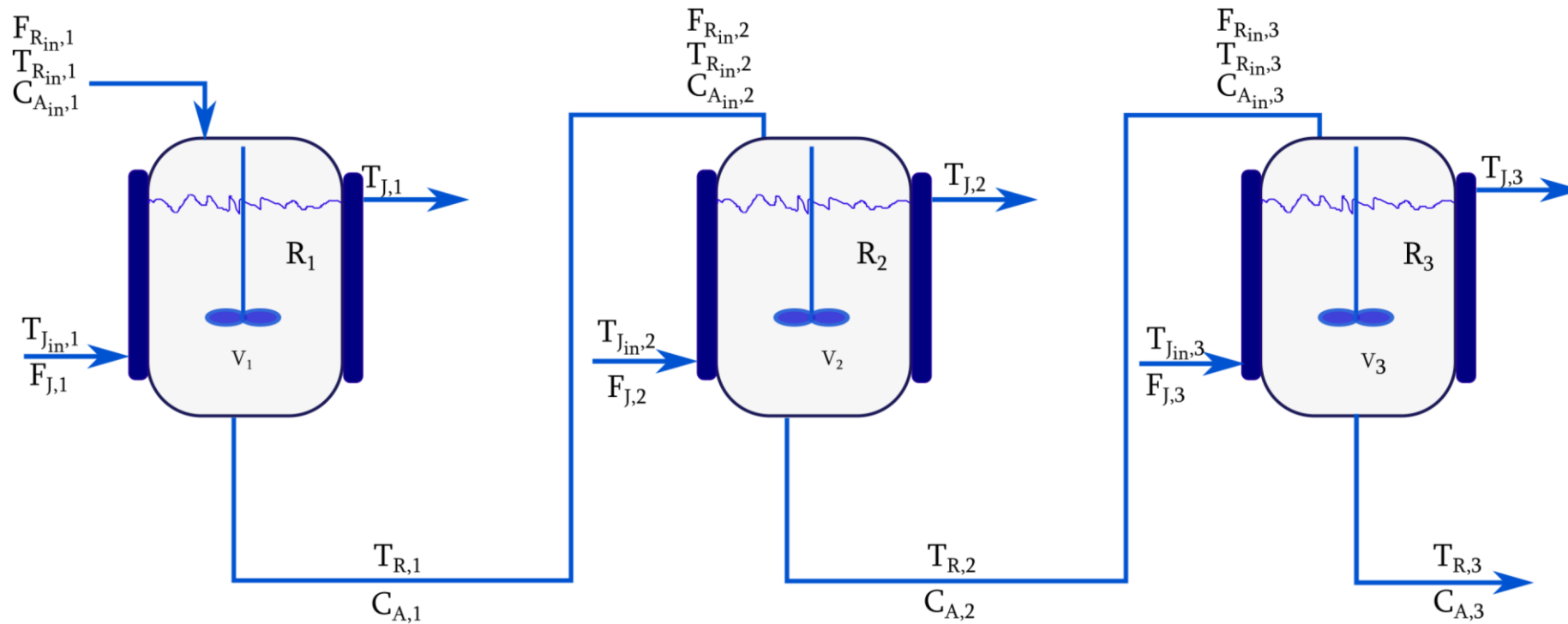
Reactor CSTR



Reactor con control

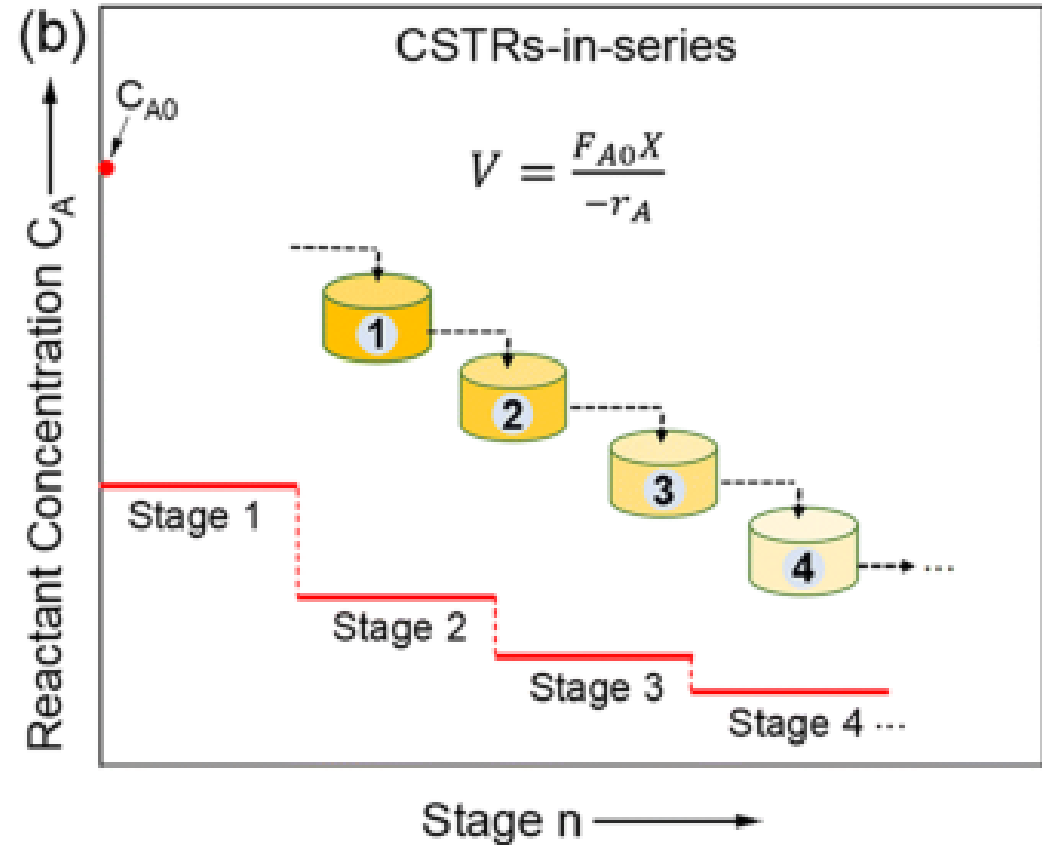
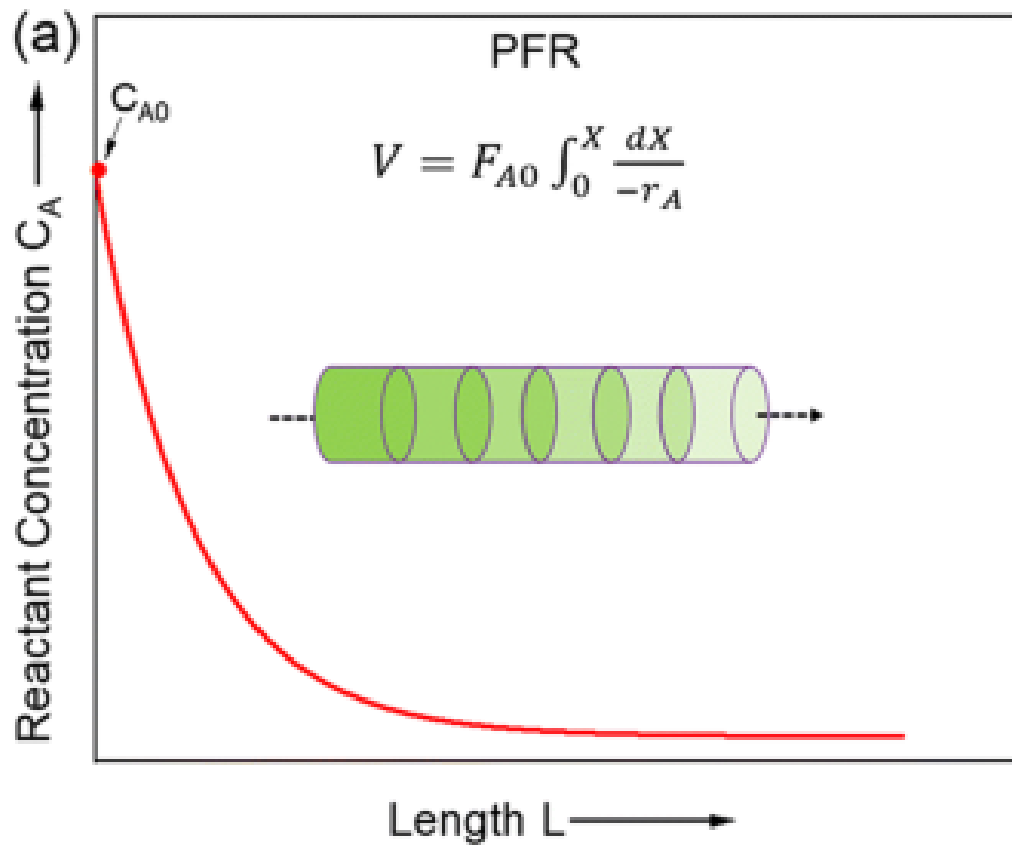


Tren de reactores

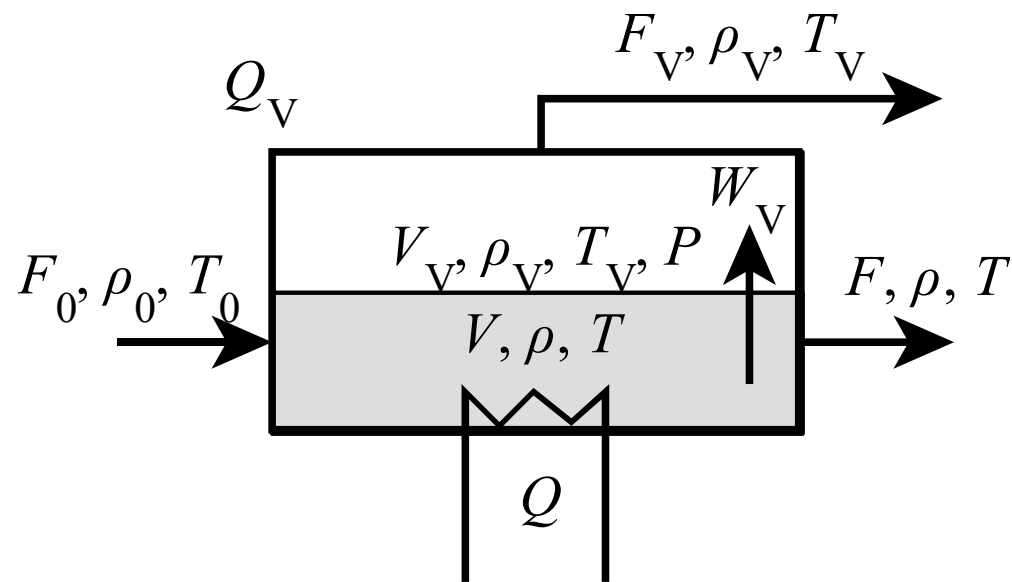


Del equipo i , salen las corrientes i .

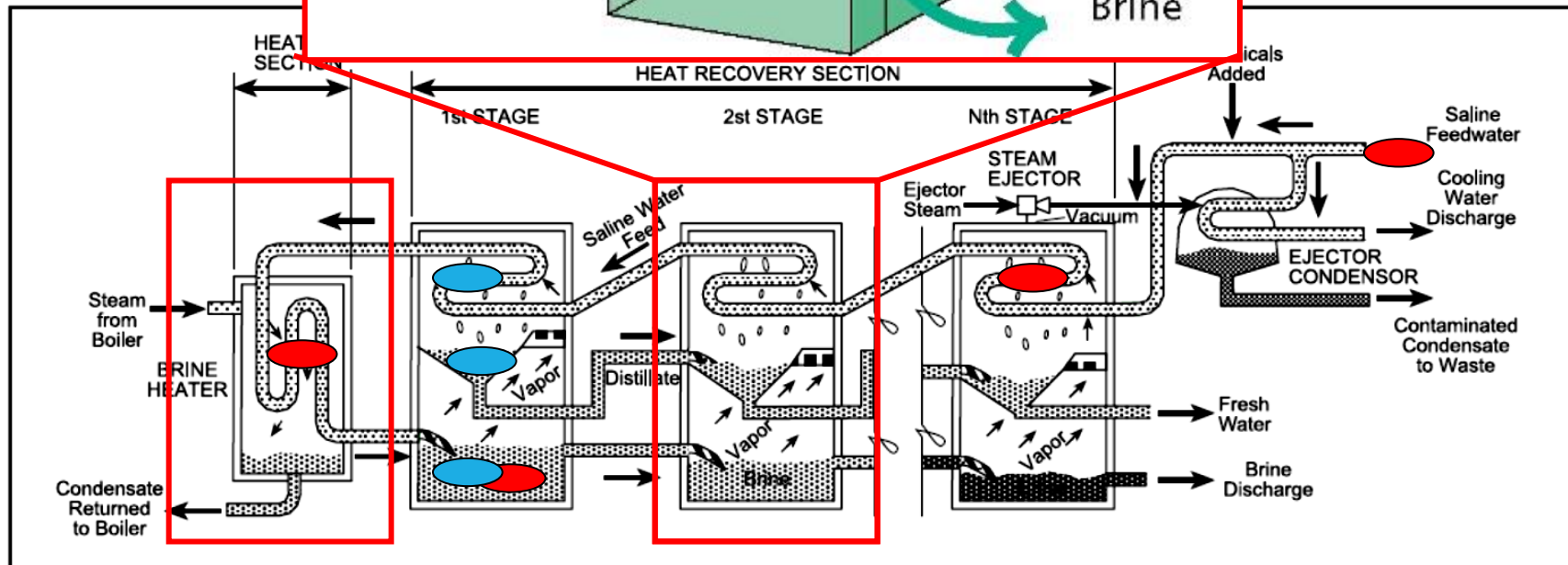
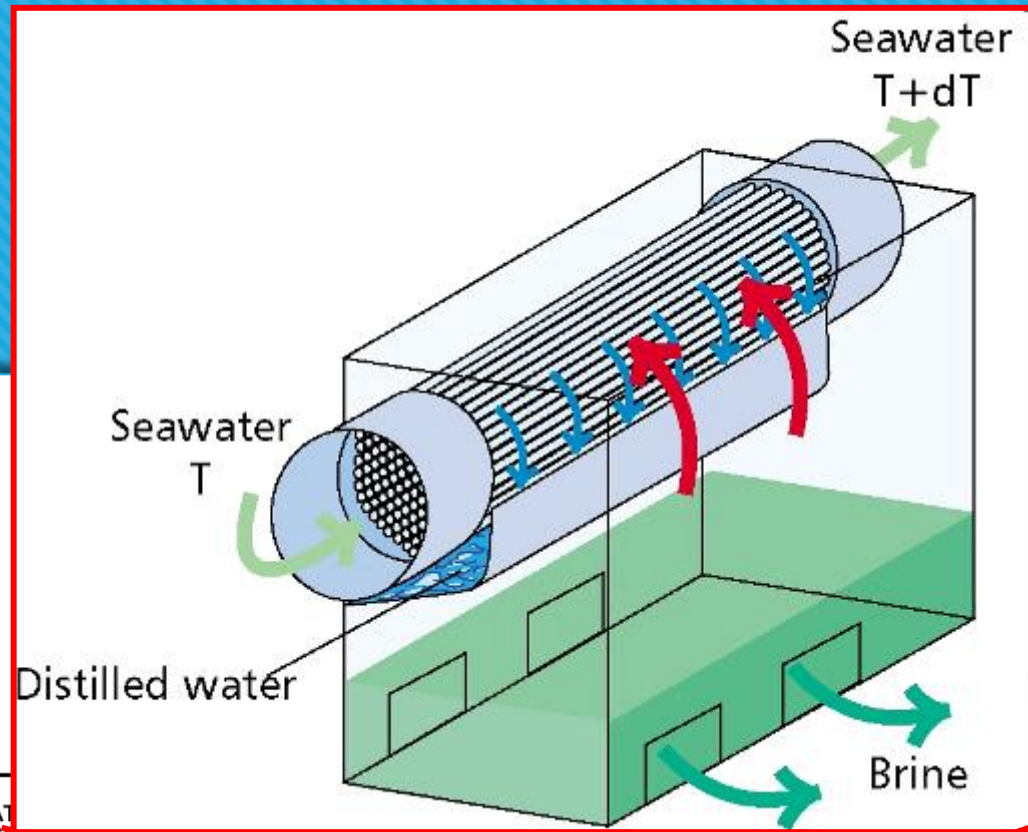
Reactor tubular



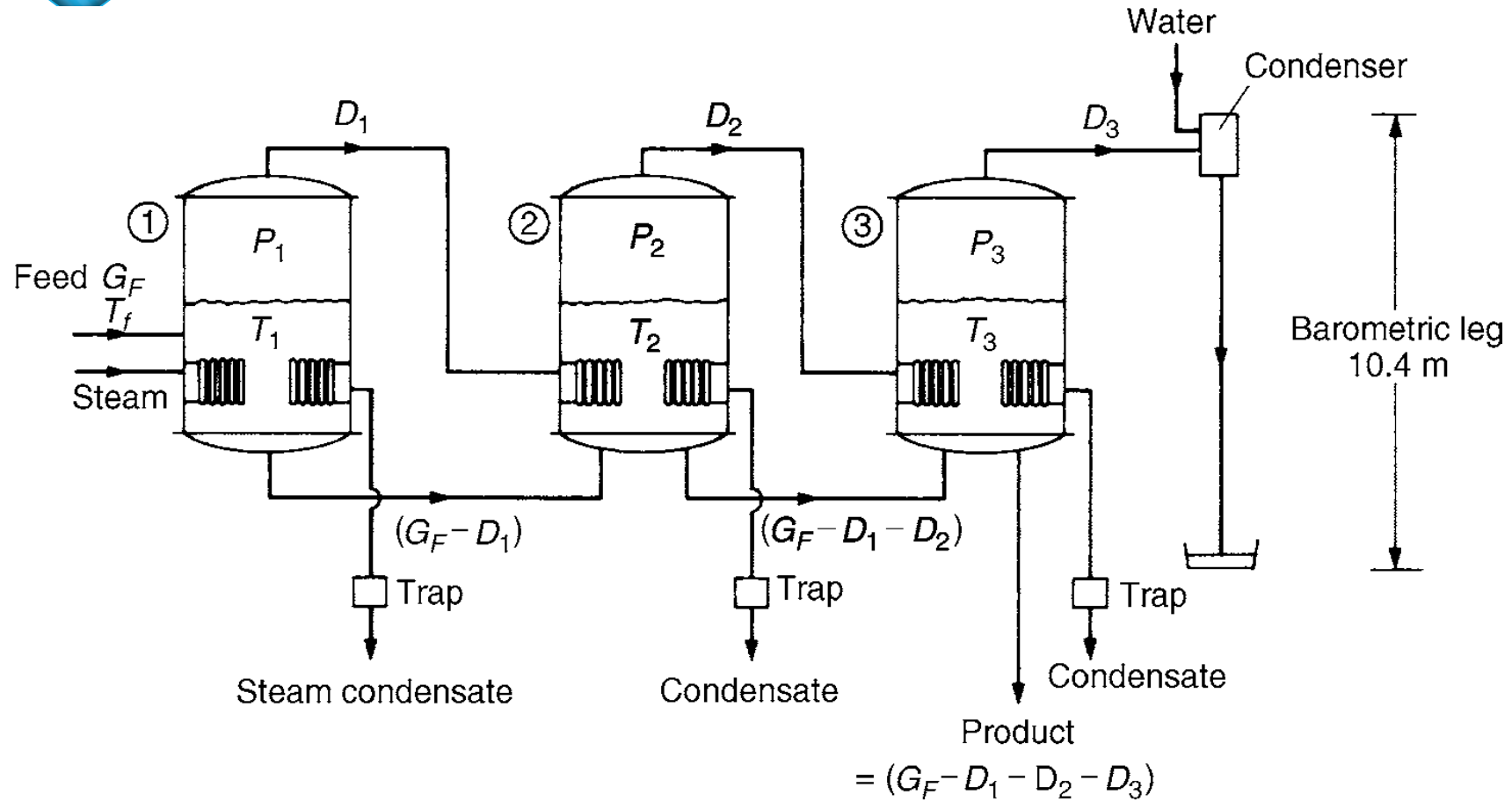
Evaporación



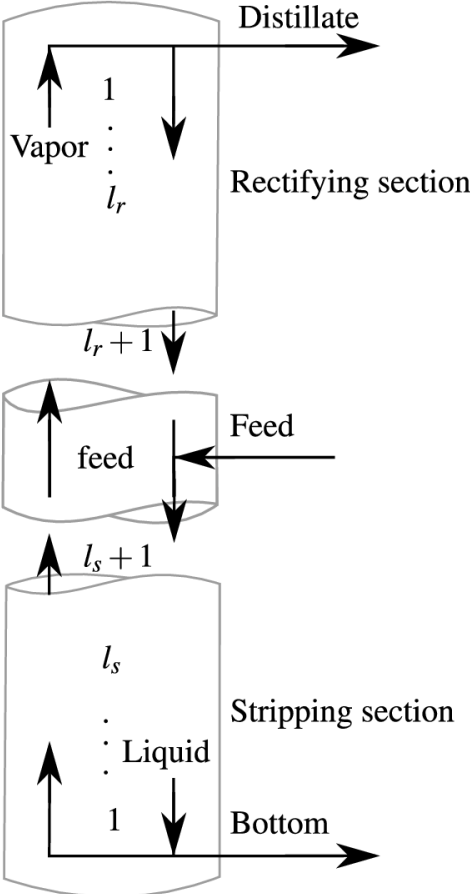
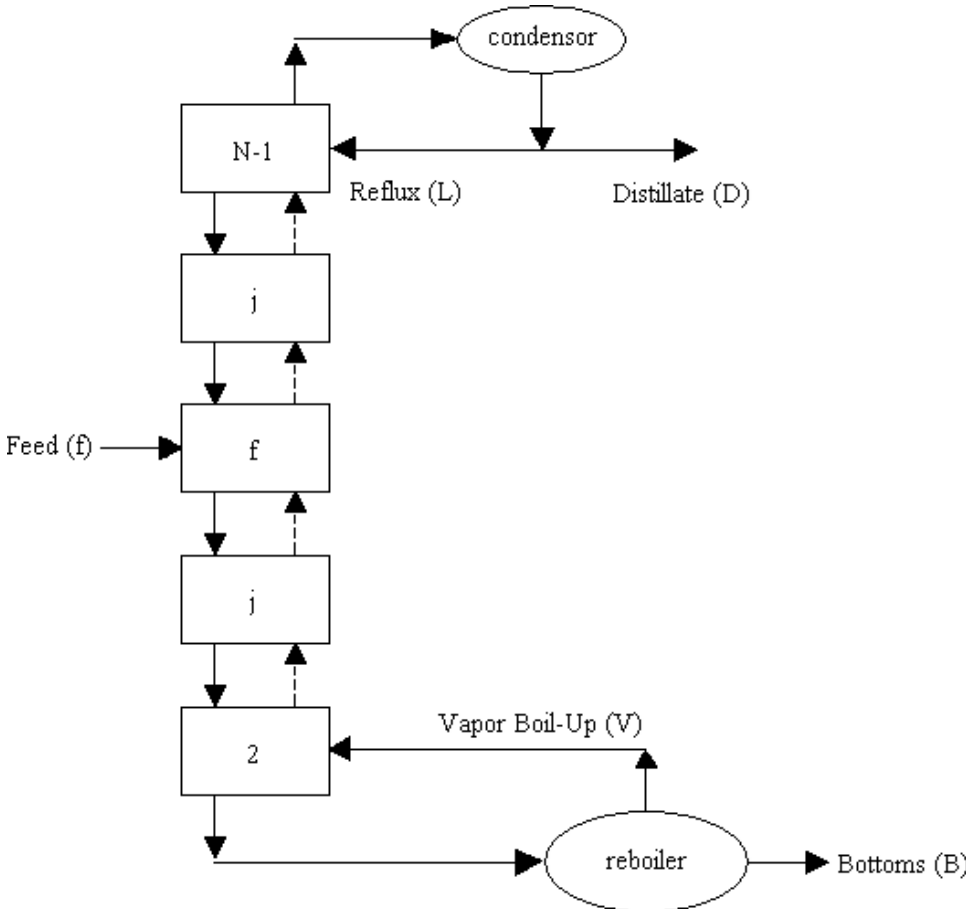
Desalador



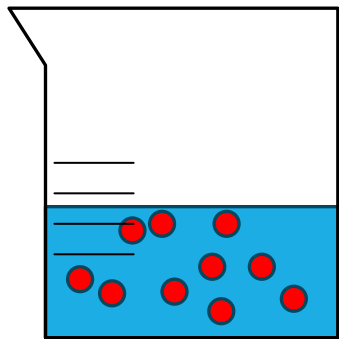
Evaporador de efecto múltiple



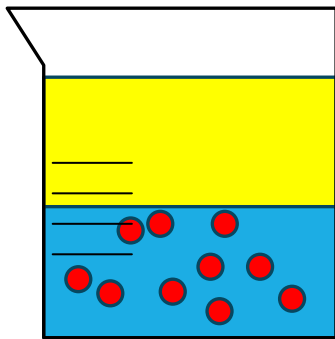
Columna de destilación



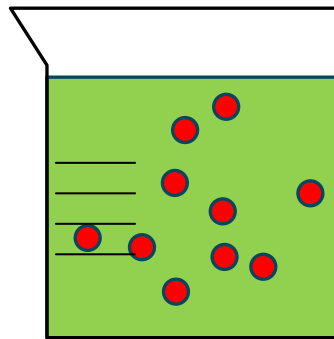
Extracción por solvente



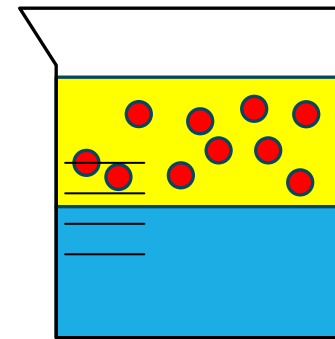
Solución original



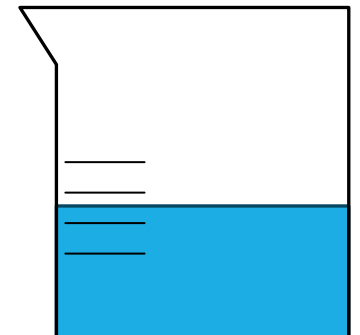
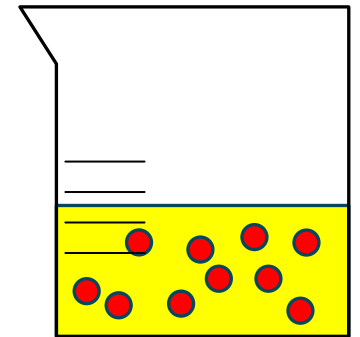
Agregado de solvente



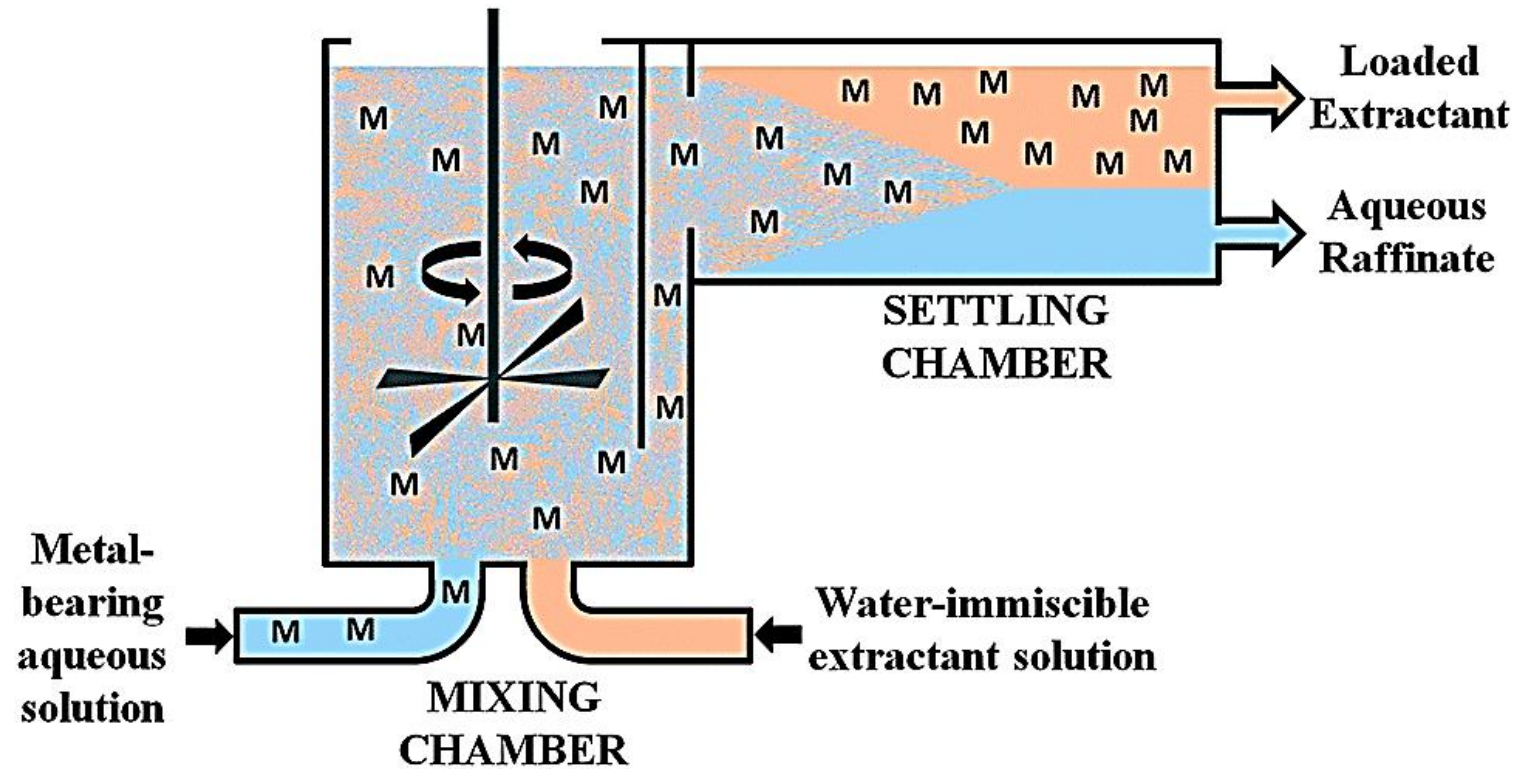
Mezclado



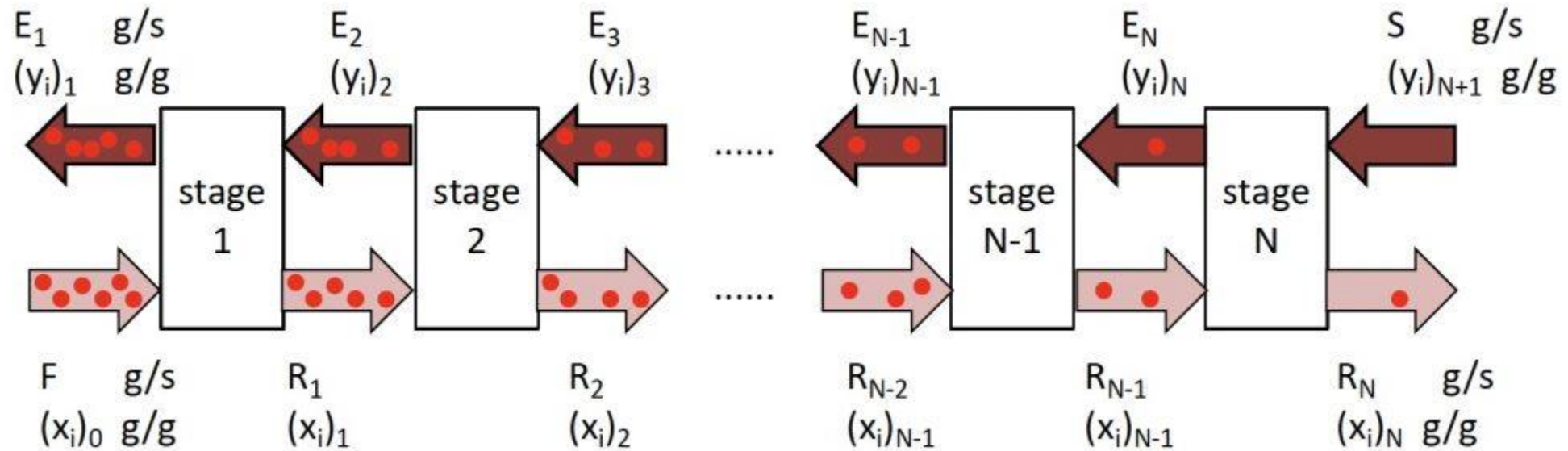
Decantación



Etapa de extracción por solvente

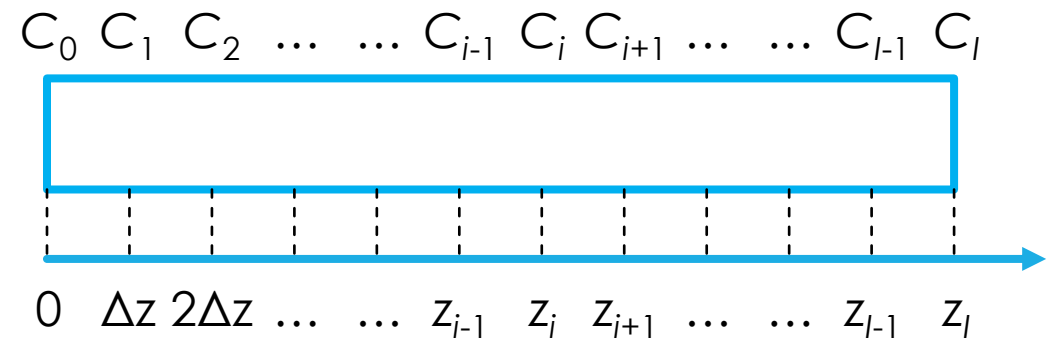


Extracción líquido-líquido contracorriente



Reactor tubular

- Perfil inicial, $t = 0$:
 - $C_A(z, 0) = C_{A0}(z)$
- Condición de contorno, $z = 0$:
 - $C_A(0, t) = C_{Ae}(t)$



$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A}{\partial z} - k_A C_A$$

Discretización

Espacial

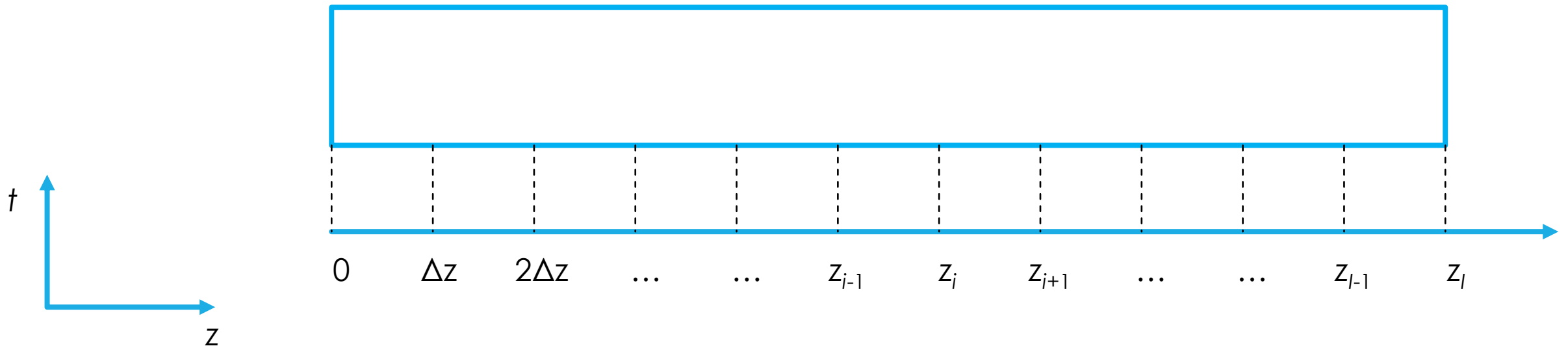
- L : Longitud
- Δz : Paso de discretización de z
- i : Índice de posición
- $I = L/\Delta z$: Cantidad de Δz
- $z_i = i \Delta z$: posición i

Temporal

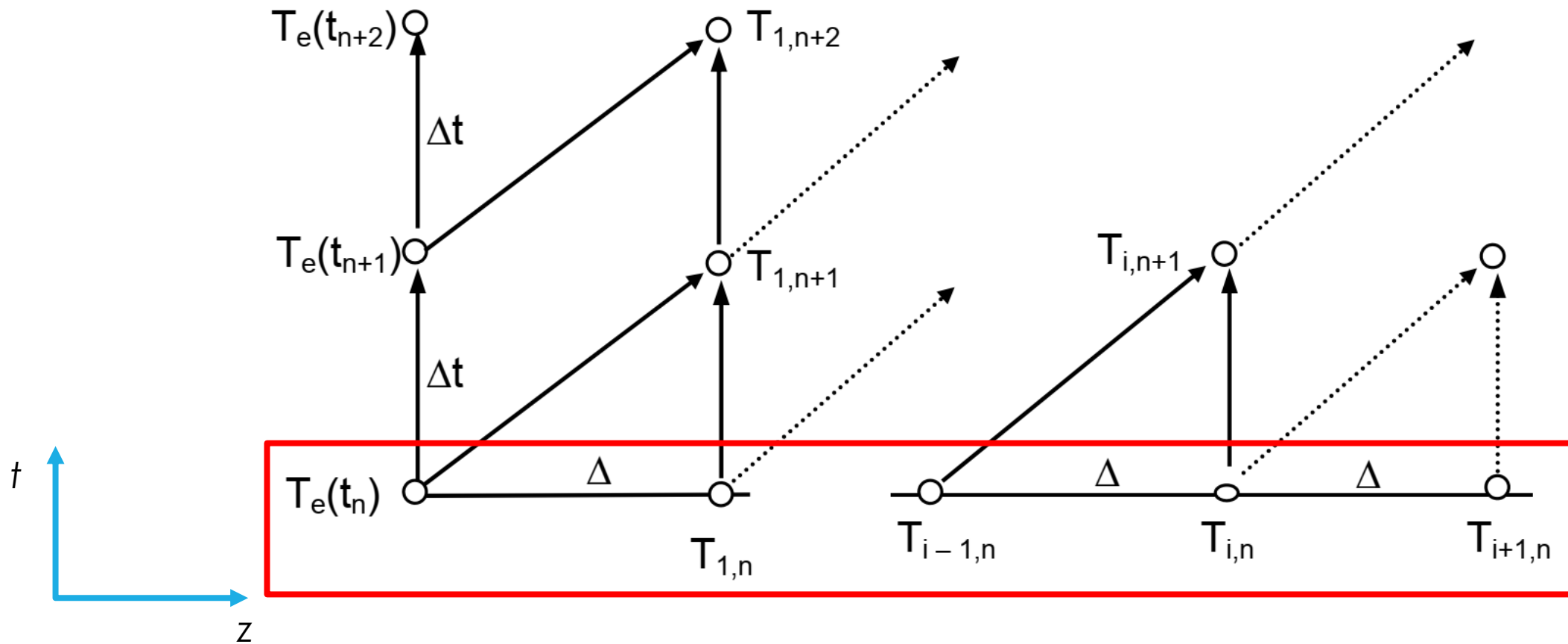
- t_f : Tiempo final de simulación
- Δt : Paso de discretización de t
- n : Índice de tiempo
- $N = t_f/\Delta t$: Cantidad de Δt
- $t_n = n \Delta t$: posición n

Discretización

t_{n+2}	$C_{0,n+2}$	$C_{1,n+2}$	$C_{2,n+2}$	$C_{i-1,n+2}$	$C_{i,n+2}$	$C_{i+1,n+2}$	$C_{l-1,n+2}$	$C_{l,n+2}$
t_{n+1}	$C_{0,n+1}$	$C_{1,n+1}$	$C_{2,n+1}$	$C_{i-1,n+1}$	$C_{i,n+1}$	$C_{i+1,n+1}$	$C_{l-1,n+1}$	$C_{l,n+1}$
t_n	$C_{0,n}$	$C_{1,n}$	$C_{2,n}$	$C_{i-1,n}$	$C_{i,n}$	$C_{i+1,n}$	$C_{l-1,n}$	$C_{l,n}$



Discretización



Reactor tubular

PDEs

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A}{\partial z} - k_A C_A$$

Diferencias finitas

$$\frac{C_{i,n+1} - C_{i,n}}{\Delta t} = -v \frac{C_{i,n} - C_{i-1,n}}{\Delta z} - k_A C_{i,n}$$

adelante

atrás

Reactor tubular

Diferencias finitas

$$\frac{C_{i,n+1} - C_{i,n}}{\Delta t} = -v \frac{C_{i,n} - C_{i-1,n}}{\Delta z} - k_A C_{i,n}$$

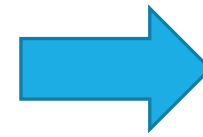
Solución

$$C_{i,n+1} = \left(v \frac{\Delta t}{\Delta z} \right) C_{i-1,n} + \left(1 - \left(k_A + \frac{v}{\Delta z} \right) \Delta t \right) C_{i,n}$$

Reactor tubular

Condición de estabilidad

$$C_{i,n+1} = \left(v \frac{\Delta t}{\Delta z} \right) C_{i-1,n} + \underbrace{\left(1 - \left(k_A + \frac{v}{\Delta z} \right) \Delta t \right)}_{\geq 0} C_{i,n}$$



Paso máximo

$$\Delta t_{\max} = \frac{1}{k_A + \frac{v}{\Delta z}}$$

Caso de estudio

Reactor

- Ejemplo 5.5, pg. 81, de *Análisis y Simulación de Procesos con Mathcad* (Gozálvez Zafrilla y Santafé Moros, 2015).
- Reactor tubular:
 - $L = 10 \text{ m}$
 - $D_{\text{int}} = 0.113 \text{ m}$

Estado

- Estado estacionario inicial:
 - $Q = 2 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$
 - $C_{Ae} = 500 \text{ mol/m}^3$
 - $T_e = 298 \text{ K}$
- Perturbación escalón:
 - $C_{Ae} = 1000 \text{ mol/m}^3$

Modelo

Dinámico

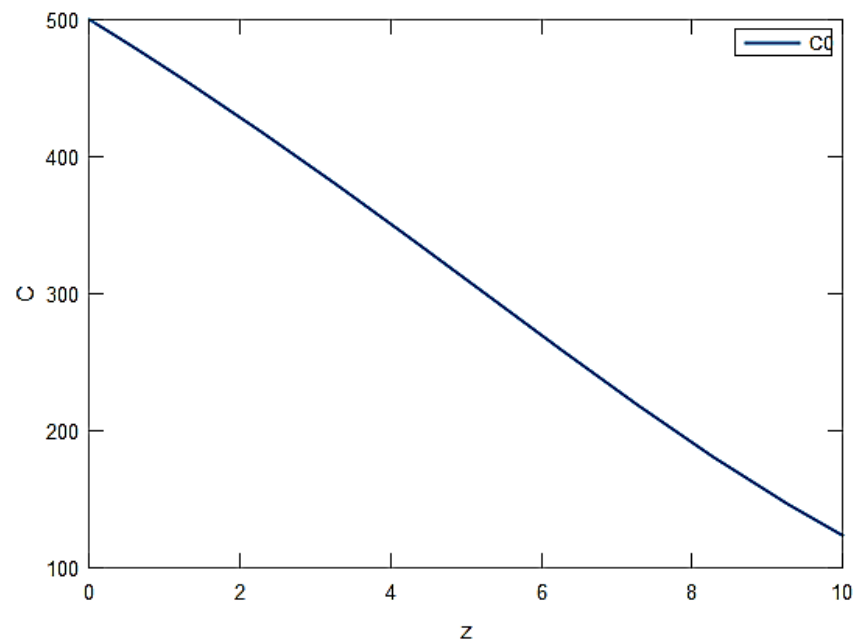
- $\frac{\partial C_A}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A}{\partial z} - k_A C_A$
- $\frac{\partial T}{\partial t} = -v \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{k_A C_A (-\Delta H_R)}{\rho C_p}$
- $k_A = \alpha \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$

Estacionario

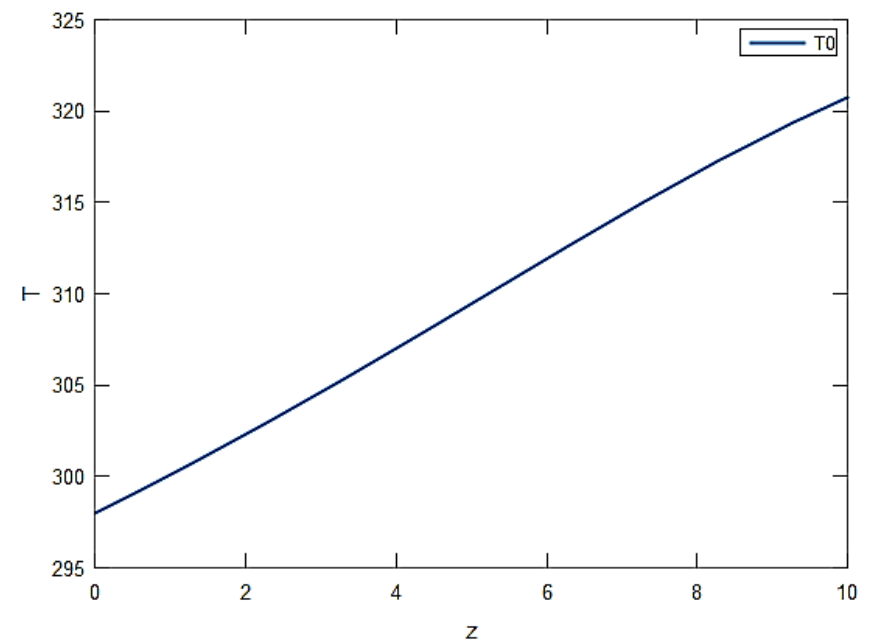
- $\frac{\partial C_A}{\partial z} = -\frac{k_A C_A}{v}$
- $\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{k_A C_A (-\Delta H_R)}{\rho C_p v}$
- $k_A = \alpha \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$

GNU Octave

Perfil inicial de C

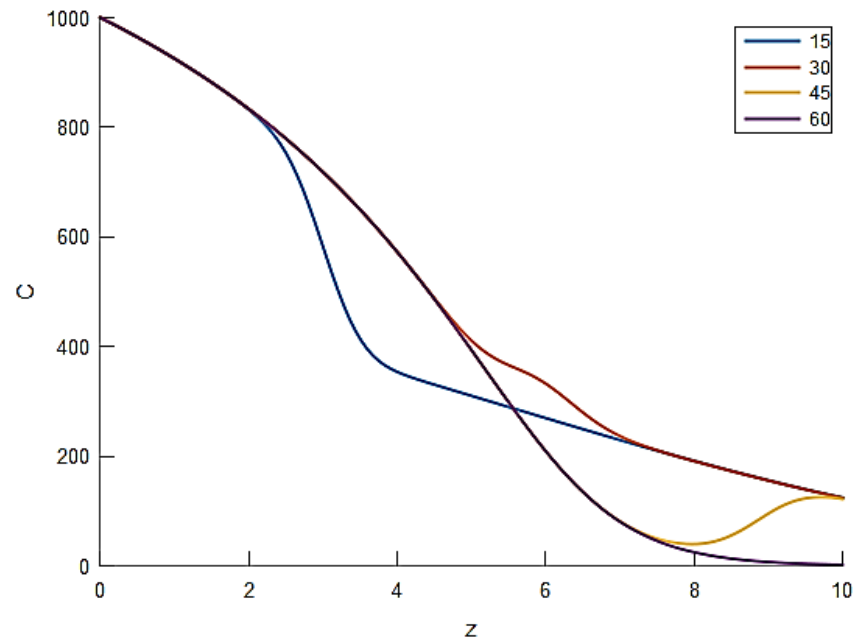


Perfil inicial de T

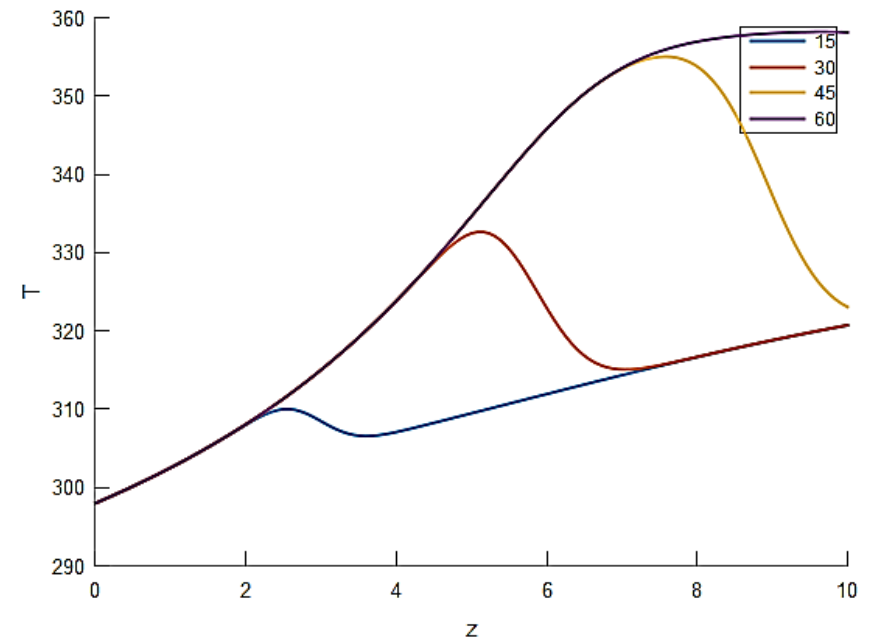


GNU Octave

C en el tiempo



T en el tiempo



reactor_tubular_Octave.m

Mapa curricular de otros equipos

1. Equipos en serie
2. Reactor tubular 1
3. Evaporador
4. Columna de destilación
5. Extracción por solvente
6. Reactor tubular 2