

Capítulo 3

Modelado

Desarrollo de un modelo

En este capítulo se desarrollarán varios modelos de equipos químicos. Para ello, se recurrirá a la teoría planteada en los capítulos anteriores. Básicamente, en el desarrollo de cada modelo se llevarán a cabo las siguientes etapas ya analizadas en el capítulo anterior:

1. Definición de los objetivos del modelo.
2. Formulación de un modelo conceptual.
3. Formulación del modelo matemático.
4. Estimación de parámetros.
5. Simplificación.
6. Análisis de la consistencia matemática.
7. Resolución del modelo.
8. Verificación.
9. Validación.
10. Perfeccionamiento.

Los ejemplos se iniciarán con equipos de dinámica simple, y luego se irá agregando mayor complejidad. Se pondrá especial énfasis en el estudio de las relaciones existentes entre perturbaciones y respuestas del sistema. Los modelos dinámicos son ideales para realizar este tipo de estudios que son de suma importancia para diseñar un sistema de control o elaborar el manual de procedimientos de un equipo dado, entre otras aplicaciones.

Por otra parte, la comprensión de las dinámicas involucradas en un sistema dado favorece el desarrollo de un modelo adecuado. En efecto, si se sabe que algunos fenómenos tienen una velocidad mucho mayor que otros, en el modelo se pueden desprestigiar las dinámicas de los primeros dando origen así a balances estacionarios para ellos. Esto se verá más claramente en los ejemplos a desarrollar en este capítulo.

La etapa de resolución de modelos se realizará utilizando los programas Simulink, VisSim 32 y E-Z Solve. Los dos primeros trabajan con diagramas de bloques, mientras el último trabaja directamente con el modelo de espacio de estados. Un *diagrama de bloques* es una representación gráfica del modelo. Consiste en un conjunto de símbolos, llamados bloques, interconectados por líneas. Cada bloque representa un sistema dinámico elemental que produce una salida continua (un bloque continuo) o en determinados puntos temporales (un bloque discreto). Las líneas representan las conexiones entre las salidas y las entradas de los bloques conectados. Cada bloque en un diagrama de bloques es una instancia (un miembro) de una clase (una familia) específica de bloques; es decir, es un objeto de acuerdo a la teoría de la programación orientada a objetos. La clase del objeto determina cómo las salidas son afectadas por las entradas, el estado y el tiempo. Un diagrama de bloques puede contener cualquier número de instancias de cualquier clase, tantas como sean necesarias para construir el modelo deseado.

Para ejemplificar la filosofía de estos programas, considere un *sistema de primer orden* que, por definición, son los sistemas que pueden ser modelados con una única ecuación diferencial de primer orden del tipo:

$$\frac{dy}{dt} = \frac{u - y}{\tau} \quad (1)$$

donde u es la variable de entrada, y es la variable de salida, τ es la *constante de tiempo*, y t es el tiempo. Esta ecuación también se suele denominar ecuación de retraso de primer orden (*first-order lag equation*).

Para un valor inicial $y = 0$, y un escalón a la entrada en $t = 0$:

$$u = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ u_0 & t \geq 0 \end{cases} \quad (2)$$

la solución analítica es:

$$y = u_0 (1 - e^{-t/\tau}) \quad (3)$$

La Figura 1 muestra la evolución descrita por esta ecuación.

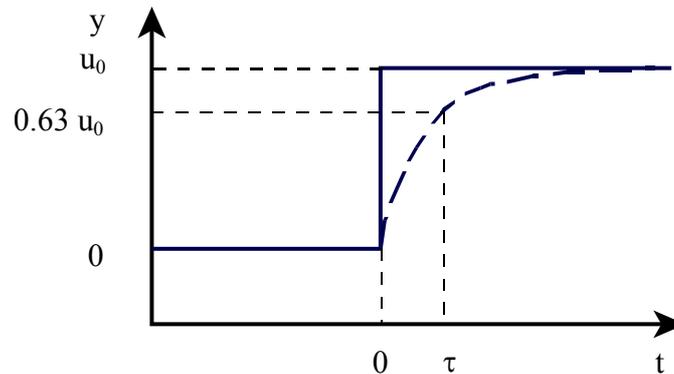


Figura 1: Respuesta a un escalón de un sistema de primer orden.

La Figura 2 muestra la solución para $u_0 = 1$ y $\tau = 1$ s implementada en E-Z Solve. Es importante respetar el orden: primero ecuaciones ODEs y luego el sistema de ecuaciones algebraicas. Las derivadas deben estar escritas en su *forma normal*; es decir, la derivada debe estar despejada en el miembro izquierdo. Los comentarios se insertan entre /* */ para más de una línea, o precedidos por // para una sola línea.

```
/* Sistema de primer orden.
u0: valor del escalón en la entrada.
tao: es la constante de tiempo
y: valor de salida */

// Sistema ODEs
y'=(u0-y)/tao

// Sistema de ecuaciones algebraicas
u0 = 1
tao = 1
```

Figura 2: Listado del código para E-Z Solve.

Una vez escrito el código, se llama al evaluador (Figura 3), al que habrá que suministrar los parámetros necesarios para realizar la simulación; esto es: intervalo para el tiempo (entre 0 y 10 s), y el valor inicial de la variable de salida ($y = 0$). La Figura 4 muestra la correspondiente gráfica producida por este programa. Note que el intervalo de tiempo especificado en el formulario del evaluador no tiene unidades. Las mismas se deducen del sistema de unidades empleado en el modelo. En este caso, como la constante de tiempo está expresada en s, ésta es la unidad que debe ser asignada a los tiempos solicitados y reportados por el programa.

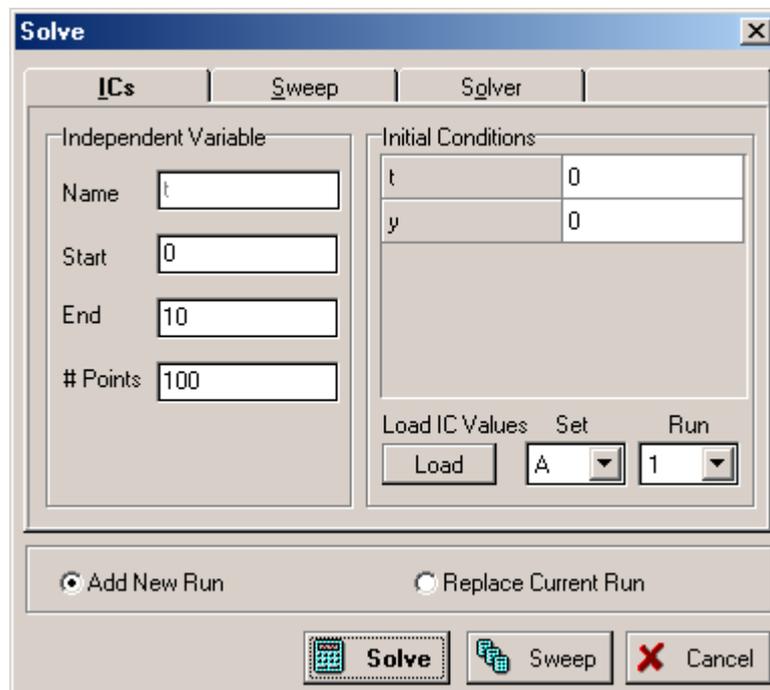


Figura 3: Cuadro del evaluador de E-Z Solve.

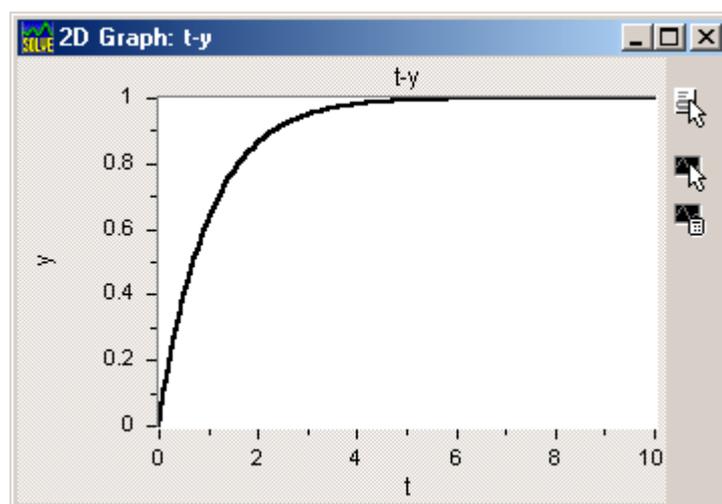


Figura 4: Respuesta del sistema evaluado por E-Z Solve.

La Figura 5 muestra el diagrama de bloques en Simulink para el sistema considerado. Note que se utilizaron dos bloques de la clase *Constant* para definir los valores de u_0 (u_0) y de τ (τ). El valor de y es generado por el bloque de la clase *Integrator*. El valor a integrar por este bloque corresponde a la ecuación diferencial (1). Para componer esta función, se utiliza

un bloque de la clase *Sum* que calcula la diferencia que aparece en el numerador de la ecuación. La incorporación del denominador se hace mediante un bloque de la clase *Product*. El bloque final (*y*) es de la clase *Scope*, y se emplea para generar una salida gráfica similar a la mostrada en la Figura 4. La Figura 6 muestra el cuadro del evaluador de Simulink. Los parámetros que deben introducirse son parecidos a los explicados para el E-Z Solve. La diferencia está en que el valor inicial para la variable *y* se ingresa en el bloque integrador.

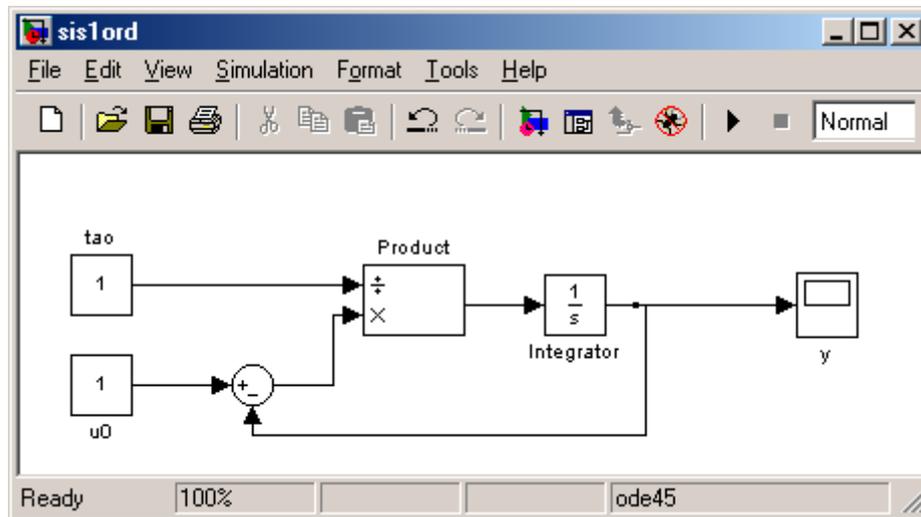


Figura 5: Diagrama de bloques en Simulink para el sistema de primer orden.

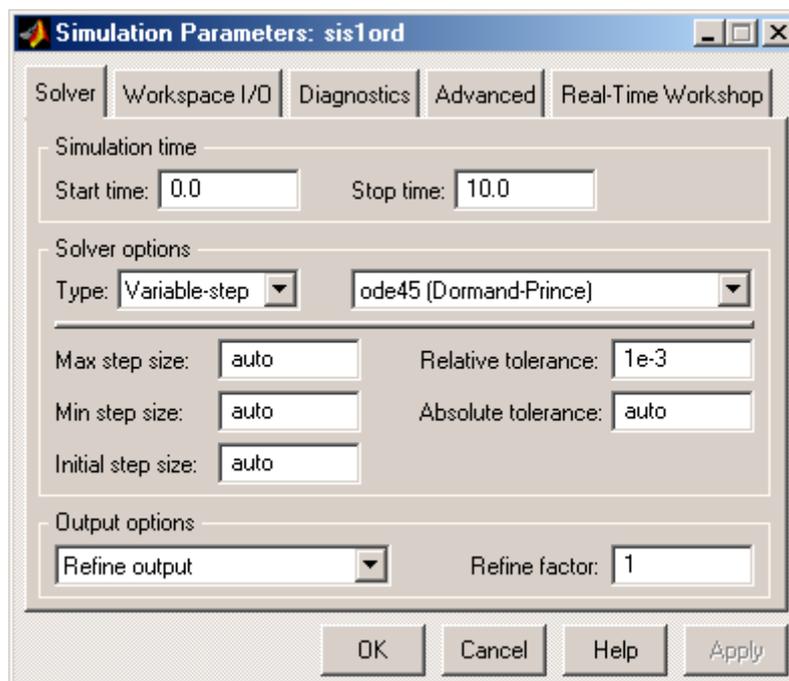


Figura 6: Cuadro del evaluador de Simulink.

La Figura 7 muestra el diagrama de bloques implementado en el programa VisSim32. Es bastante similar al anterior. Nuevamente se utilizaron bloques que permiten definir constantes, sumar, dividir, integrar y graficar. El valor inicial de la variable *y* se suministra en el bloque integrador. El cuadro del evaluador (Figura 8) no es muy diferente a los anteriores.

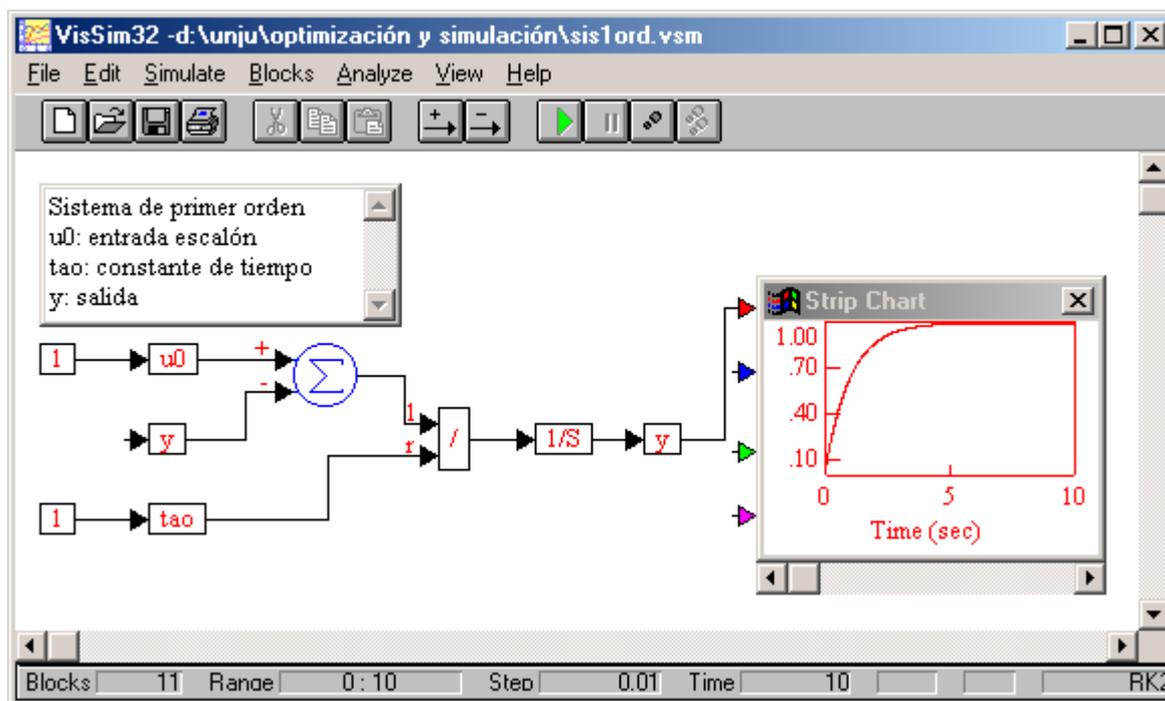


Figura 7: Diagrama de bloques en VisSim32 para el sistema de primer orden.

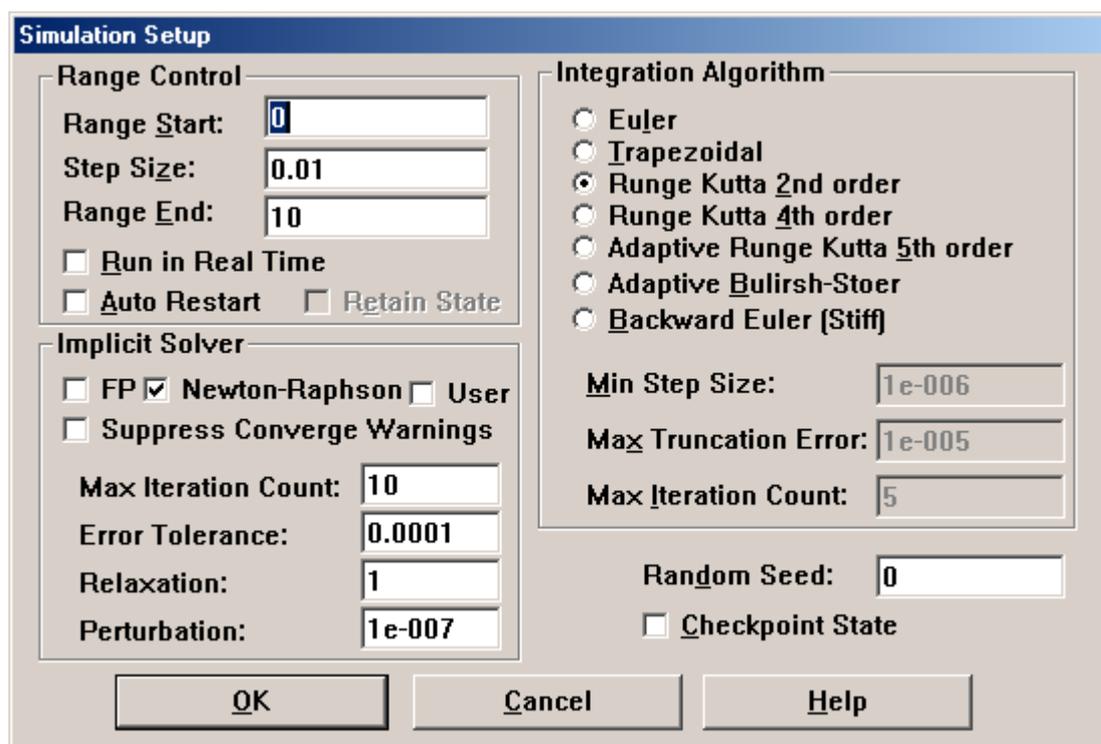


Figura 8: Cuadro del evaluador de VisSim32.

Con estas herramientas se analizarán los modelos a desarrollar en las secciones siguientes. Sin embargo, no se aplicarán todas ellas para cada caso, se deja al lector la realización de esta práctica. Igualmente, para el primer ejemplo se aplicarán una a una las etapas del modelado descritas anteriormente; pero en los ejemplos posteriores sólo se analizarán los aspectos particulares que se presenten.

Tanque con descarga gravitatoria

Modelo dinámico

El tanque con descarga gravitatoria que se muestra en la Figura 9 está en estado estacionario para un caudal de alimentación de 20 litro/s de agua y una apertura de la válvula de descarga igual al 0.5. La válvula de descarga es lineal. La presión de descarga es la atmosférica. El nivel del líquido es 1 m. El nivel máximo que puede contener el tanque es 2 m. El diámetro del tanque es 1 m. Se desea saber si el tanque rebalsará cuando la válvula se cierre a 0.25. De ser así, se desea determinar el tiempo en que esto ocurrirá.

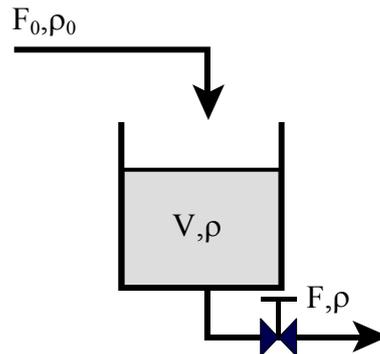


Figura 9: Tanque con descarga gravitatoria.

El objetivo está claro: averiguar si el tanque rebalsará y cuándo lo hará. En cuanto al modelo conceptual no hay mayores problemas, del análisis cualitativo de la operación del tanque se deduce que sólo interesan la acumulación de materia en el tanque y la cantidad de movimiento en la tubería. Estos fenómenos dan origen a las siguientes *relaciones causales directas* entre las variables del sistema:

- Un aumento (o disminución) en el caudal de alimentación F_0 , produce un aumento (o disminución) en el nivel del tanque L . Es una relación con ganancia positiva. Note que la relación inversa no existe; es decir, L no afecta a F_0 .
- Un aumento (o disminución) en el nivel del tanque L , produce un aumento (o disminución) en el caudal de salida F . Es una relación con ganancia positiva.
- Un aumento (o disminución) en el caudal de salida F , produce una disminución (o aumento) en el nivel del tanque L . Es una relación con ganancia negativa.
- Debido a que L es una variable de estado, ella es afectada por su valor anterior al instante considerado. En cambio, como es lógico, el valor presente no afecta al valor pasado.
- Un aumento (o disminución) en la apertura de la válvula de descarga x , produce un aumento (o disminución) en el caudal de salida F . Es una relación con ganancia positiva. Nuevamente, no existe la relación inversa porque F no tiene efecto alguno sobre x .

Estas relaciones causales se pueden representar en forma gráfica mediante un *dígrafo* o *SDG* (*Signed Directed Graph*), el cual es un tipo de *modelo cualitativo* muy utilizado para el desarrollo de sistemas de supervisión de plantas químicas (Tarifa, 1995). La Figura 10 presenta el SDG correspondiente para el tanque en estudio. La dirección causal se determina con el sentido de las flechas. Las relaciones con ganancias positivas se representan con líneas continuas, y las relaciones con ganancias negativas se representan con líneas de trazos. El

arco con ganancia 0 sobre L indica que esa variable tiene un efecto integral. Este efecto se debe a que L , al ser una variable de estado, proviene de integrar una ecuación diferencial.

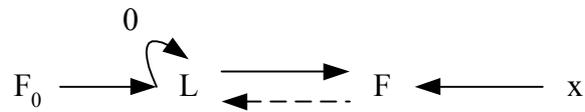


Figura 10: SDG del tanque con descarga gravitatoria.

En el SDG, es fácil ver que existe una retroalimentación negativa sobre el nivel L y el caudal de salida F . En efecto, al estar ambas variables formando parte de un ciclo con ganancia total negativa, ante una perturbación en una de ellas, la otra evolucionará para tratar de cancelar la perturbación original. Entonces, se debe esperar que estas variables tengan respuestas asintóticas; es decir, tiendan a estabilizarse ante cualquier perturbación. En especial, las perturbaciones originadas en F serán canceladas por L ; por este motivo, se dice que F presenta *respuesta compensatoria*. En efecto, si la válvula se cierra ligeramente en el tiempo t_0 , x disminuirá, y F también lo hará; esto provocará un aumento en L (Figura 11), y ésta, al ser una variable integral, incrementará su valor hasta que F recupere su valor original (Figura 12). De esta forma, el tanque actúa como un controlador integral del caudal de descarga.

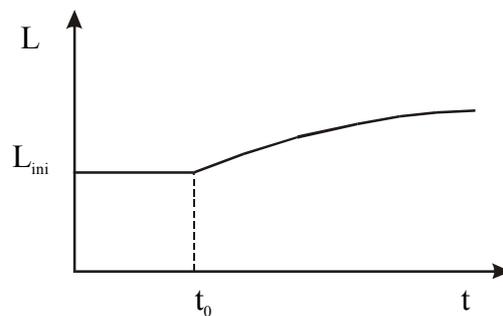


Figura 11: Posible respuesta integral del nivel.

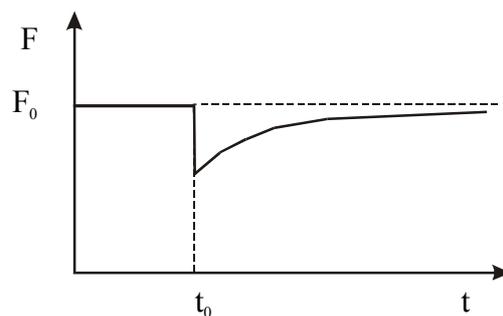


Figura 12: Posible respuesta compensatoria del caudal de descarga.

El razonamiento seguido para llegar a la conclusión anterior es un tipo de *simulación cualitativa*, y se muestra gráficamente en la Figura 13. En esta figura los valores de las variables representan los valores cualitativos adoptados por cada una de ellas, +1 es un incremento, -1 es una disminución, y 0 significa que no cambió su valor. El árbol causal obtenido al realizar una simulación cualitativa se denomina *interpretación*, y representa un camino posible de propagación de la perturbación original. En este caso la perturbación original fue el cierre de la válvula; entonces, se asigna el valor -1 a x , y se propaga este valor de acuerdo a las ganancias de las relaciones causales. De esta manera, se obtienen los posibles

valores cualitativos para las demás variables. Para el caudal de salida, la interpretación predice que éste disminuirá en un primer momento, por eso el valor -1 asignado a F . Sin embargo, también predice que el nivel aumentará. Debido a que L es una variable integral y que retroalimenta negativamente a F , es de esperar que el caudal de descarga aumente hasta recuperar su valor original.

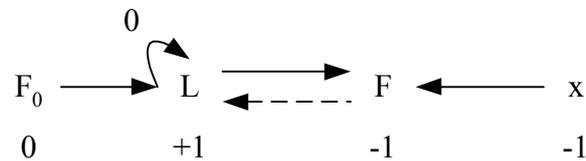


Figura 13: Interpretación para el cierre de la válvula de descarga.

El análisis cualitativo realizado provee una valiosa información para el desarrollo del *modelo cuantitativo* (el modelo de espacio de estado). Por un lado, al tener que expresar en forma explícita las relaciones causales entre las variables, se debe identificar los fenómenos más relevantes que deberán ser tenidos en cuenta. Por otro lado, el conocimiento cualitativo de la conducta que debe esperarse del modelo permite detectar errores en el modelo cuantitativo cuando este predice conductas que no son cualitativamente correctas.

La formulación matemática de este modelo se inicia con el planteo del balance de materia. Si bien el nivel del estado estacionario final puede ser determinado con un modelo estacionario, la necesidad de averiguar el tiempo en que ocurrirá obliga al planteo de un modelo dinámico. Entonces, el modelo se inicia con un balance dinámico de materia:

$$\frac{d(V \rho)}{dt} = F_0 \rho_0 - F \rho \quad (4)$$

A este balance se deben sumar tantas ecuaciones algebraicas como sean necesarias para definir las variables que figuran en el balance en función de las variables de interés o conocidas. Así, la primera ecuación adicional es la correspondiente al volumen del líquido:

$$V = AL \quad (5)$$

donde L es el nivel del líquido, y A es el área del tanque.

Por otra parte, el caudal de descarga F está determinado por la ecuación de la válvula lineal:

$$F = C_v x \sqrt{\frac{\Delta P_v}{\rho / \rho_w}} \quad (6)$$

donde, por ser agua, el denominador ρ/ρ_w es igual a uno. Si se desprecia el resto de la instalación, la caída de presión en la válvula debe ser:

$$\Delta P_v = \rho g L \quad (7)$$

Note que estas dos últimas ecuaciones surgen del plantear un balance estacionario de cantidad de movimiento y de energía mecánica en la tubería, respectivamente. Este balance es válido si se supone que la respuesta hidráulica del sistema es mucho más rápida que la respuesta de la acumulación de líquido en el tanque. Si esto es así, se puede asumir que la velocidad del fluido alcanzará su estado estacionario casi en forma instantánea, haciendo innecesario el planteo de un balance dinámico para esta parte del sistema.

Ahora restan estimar los parámetros del modelo. La densidad del agua se supone constante e igual a 1 kg/litro. El área del tanque se puede calcular con la ecuación de diseño:

$$A = \frac{\pi}{4} D^2 \quad (8)$$

donde D es el diámetro del tanque, el cual es dato.

Para estimar C_v se puede recurrir al correspondiente catálogo. Sin embargo, como es posible que por el desgaste de la válvula este valor haya sufrido alteración, es preferible determinarlo a partir de datos experimentales. Debido a que los datos disponibles provienen del estado estacionario inicial, para estimar C_v se utiliza el balance en estado estacionario:

$$0 = F_0 \rho_0 - F_{ini} \rho \quad (9)$$

Dado que la densidad es constante, $\rho_0 = \rho$, se tiene que el caudal de salida debe ser igual al de entrada; por lo tanto, usando la ecuación de la válvula, resulta:

$$C_v = \frac{F_{ini}}{x_{ini} \sqrt{\Delta P_{vini}}} \quad (10)$$

donde x_{ini} es la apertura inicial de la válvula; es decir: 0.5. La pérdida de presión inicial se determina con:

$$\Delta P_{vini} = \rho g L_{ini} \quad (11)$$

donde L_{ini} es el nivel inicial; es decir 1 m.

Debido a que se supuso densidad constante, el balance de materia simplifica a:

$$\frac{dV}{dt} = F_0 - F \quad (12)$$

Si no interesa conocer el volumen, se puede simplificar el modelo eliminando esta variable por medio de la ecuación (5). Entonces, el balance es:

$$A \frac{dL}{dt} = F_0 - F \quad (13)$$

Por el mismo motivo, se puede eliminar del modelo la caída de presión utilizando la ecuación (7). Entonces, la ecuación de la válvula se transforma en:

$$F = C_v x \sqrt{\rho g L} \quad (14)$$

Para realizar el análisis de consistencia matemática es necesario listar el modelo dinámico completo ya simplificado; esto es:

$\frac{dL}{dt} = \frac{F_0 - F}{A} \quad (15)$
--

$F = C_v x \sqrt{\rho g L} \quad (16)$
--

Las incógnitas de un modelo para simulación en modo análisis, como el que se está planteando, son las variables de estado y las variables de salida. Entonces, se tienen dos ecuaciones con dos incógnitas: L y F ; por lo tanto, el *grado de libertad* del sistema es cero (número de variables - número de ecuaciones), y se puede resolver. El nivel L es una variable de estado, y será determinada a partir de la ecuación diferencial y del valor inicial L_{ini} (que

debe ser dato por tratarse de una variable de estado). En cambio, el caudal de descarga F es una variable de salida, y será determinada a partir de la ecuación algebraica, no se necesita un valor inicial. La apertura x es una variable manipulada, y su valor es dato. El caudal de alimentación F_0 , si se considera que está determinado por otro sector de la planta, es una perturbación, y es también dato.

Para completar el análisis de consistencia matemática, se llevan todas los datos (F_0 , x y L_{ini}) y parámetros (L_{max} , D , g y ρ) al mismo sistema de unidades, en este caso se elige el sistema mks. Entonces:

$$F_0 = 20 \text{ litro/s} = 20 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$L_{ini} = 1 \text{ m}$$

$$L_{max} = 2 \text{ m (nivel máximo que puede contener el tanque)}$$

$$D = 1 \text{ m}$$

$$g = 9.81 \text{ m/s}^2$$

$$\rho = 1 \text{ kg/litro} = 1000 \text{ kg/m}^3$$

Con estos datos y las ecuaciones (8) y (10), los parámetros son $A = 0.785 \text{ m}^2$ y $C_v = 4.039 \cdot 10^{-4} \text{ m}^{3.5}/\text{kg}^{0.5}$. La Figura 14 muestra el listado correspondiente al programa E-Z Solve. La resolución del mismo plantea que el tanque rebalsa en aproximadamente 100 s.

```
// Tanque con válvula
// Sistema ODEs
L' = (F0-F)/A

// Sistema algebraico
F = Cv*x*sqrt(rho*g*L)

// Datos
F0 = 20e-3
A = 0.785
Cv = 4.039e-4
rho = 1000
g = 9.81
x = 0.25
```

Figura 14: Listado en E-Z Solve para el tanque con descarga gravitatoria.

La Figura 15 muestra el diagrama de bloques en Simulink para el tanque. En este caso, la ecuación de la válvula se implementó en un único bloque de la clase *Fcn*, para lo cual fue necesario crear un vector por medio del bloque *Matrix*.

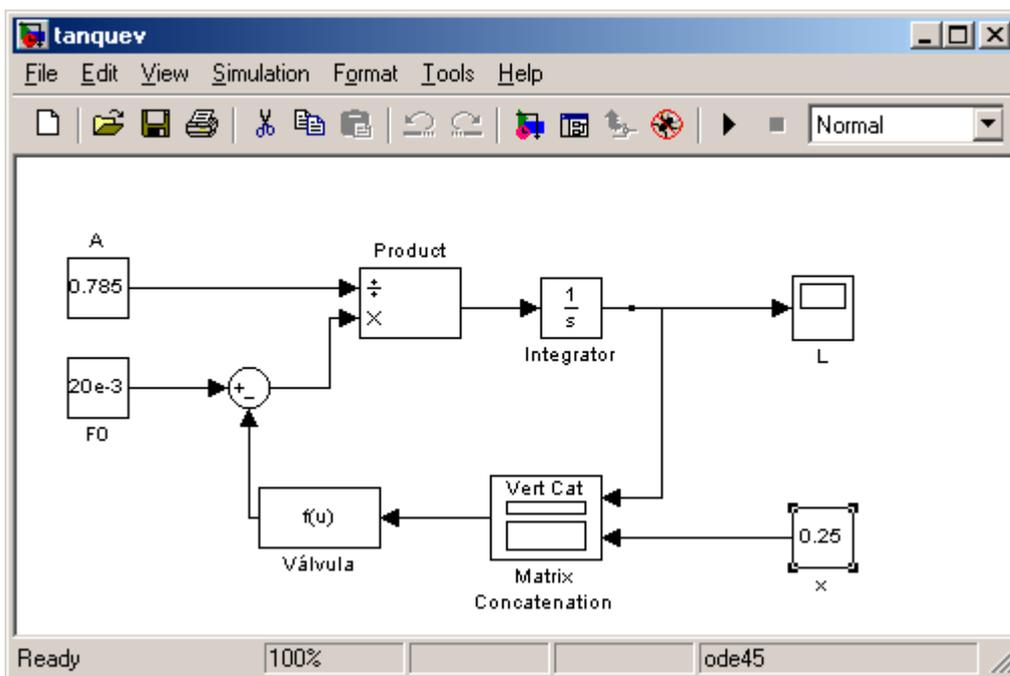


Figura 15: Diagrama de bloques en Simulink para el tanque con descarga gravitatoria.

La Figura 16 muestra el diagrama correspondiente a la implementación en VisSim32. En él, el modelo de la válvula fue colocado en forma explícita.

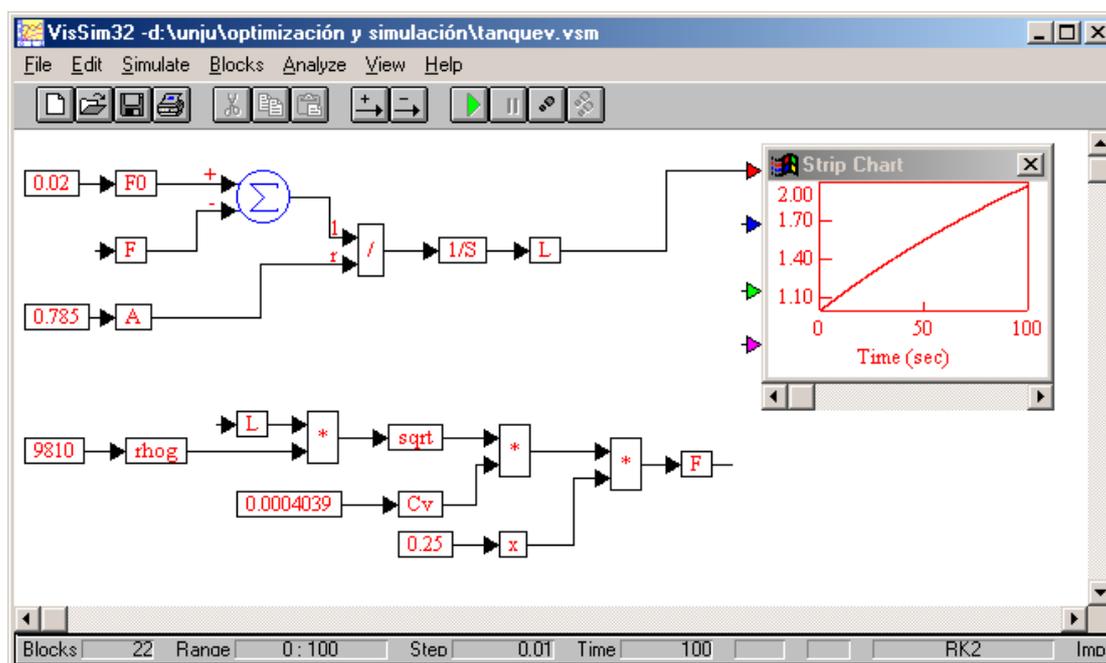


Figura 16: Diagrama de bloques en VisSim32 para el tanque con descarga gravitatoria.

Del análisis de esta información, surge la necesidad de determinar cuál es la mínima apertura que puede tener la válvula sin que el tanque rebalse. Con sólo modificar el valor de la apertura x , se puede realizar varias pruebas para encontrar el valor solicitado. Dicho valor es $x = 0.35$, para el cual el sistema alcanza el estado estacionario en aproximadamente 500 s con $L = L_{max}$.

Modelo estacionario

El modelo estacionario del sistema en estudio se obtiene al anular el término de acumulación del balance dinámico planteado en la ecuación (15); esto es:

$$0 = F_0 - F \quad (17)$$

$$F = C_v x \sqrt{\rho g L} \quad (18)$$

A continuación se reordena para explicitar el orden de resolución de estas ecuaciones para una simulación en modo análisis:

$$F = F_0 \quad (19)$$

$$L = \frac{1}{\rho g} \left(\frac{F}{C_v x} \right)^2 \quad (20)$$

Entonces, fijado el caudal de entrada y la apertura de la válvula, el modelo estacionario determina el caudal de salida y el nivel para el estado estacionario correspondiente. Note que esta vez las ecuaciones proveen una información diferente a la que suministraban en el modelo dinámico. En efecto, en el modelo estacionario la ecuación de balance de materia determina el caudal y la ecuación de la válvula determina el nivel; todo lo contrario a lo que ocurre en el modelo dinámico, ecuaciones (15) y (16).

Este modelo es útil para toda situación donde sólo interese conocer el estado estacionario final, sin importar el estado dinámico por el que atraviesa el sistema hasta llegar a dicho estado. Por ejemplo, para determinar la apertura mínima de la válvula que el tanque soporta sin rebalsar se puede utilizar este modelo estacionario. Ciertamente, el estado de interés es un estado estacionario donde el nivel se estabiliza en el valor máximo permitido. Como se desea averiguar la apertura de la válvula (variable manipulable) correspondiente a ese estado estacionario, se plantea el modelo para una simulación en modo control:

$$F = F_0 \quad (21)$$

$$x = \frac{F}{C_v \sqrt{\rho g L}} \quad (22)$$

Estas ecuaciones son válidas para cualquier estado estacionario. Sustituyendo los valores apropiados para el caudal y el nivel, se tiene la apertura mínima de la válvula:

$$x_{\min} = \frac{F_0}{C_v \sqrt{\rho g L_{\max}}} \quad (23)$$

Al igual que cuando se utilizó el modelo dinámico, la apertura mínima es 0.35. Debido a que no fue necesario evaluar la evolución del sistema hasta alcanzar este estado estacionario, y a que no fue necesario probar distintos valores de apertura como se hizo para el caso dinámico, el esfuerzo computacional realizado es mucho menor. Esta es una clara ventaja del modelo estacionario. Sin embargo, para que esta ventaja sea cierta, se debe asegurar que el tanque no rebalsará durante su evolución hacia el estado estacionario en estudio. Esto es, la evolución

del sistema, Figura 17, debe seguir una trayectoria asintótica (línea continua) y sin picos (línea de trazos). Esta suposición se debe realizar en base al conocimiento que se tiene del sistema. Para los sistemas de primer orden, la suposición es válida (como se vio en la sección anterior); no obstante, para sistemas de orden superior deberán tomarse los recaudos correspondientes.

Para el tanque en estudio, es posible deducir, a partir de las ecuaciones (15) y (16), que el nivel tendrá una respuesta asintótica ante un escalón en la apertura de la válvula. En efecto, cuando la válvula se cierre, L aumentará y, por la ecuación (16), provocará un aumento en F . Esto continuará hasta que F iguale a F_0 ; en ese momento, la ecuación (15) se hará nula, y L permanecerá constante. Por lo tanto, el nivel presentará una respuesta asintótica, y se descarta cualquier evolución similar a la presentada con línea de trazos en la Figura 17. Un razonamiento equivalente se puede hacer utilizando el modelo SDG de la Figura 10.

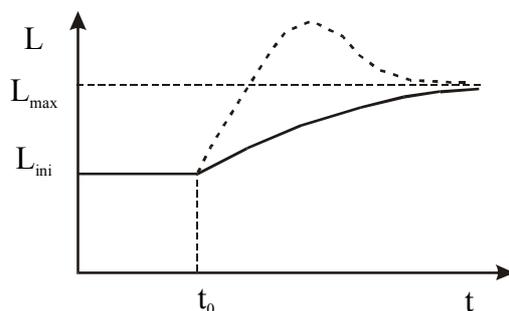


Figura 17: Estados dinámicos posibles para el tanque.

Modelo adimensional

Siempre debe recordarse que el modelo debe ser resuelto por algún método numérico. Para evitar problemas numéricos en su resolución conviene que los valores de todas las variables tengan magnitudes comparables. Es por este motivo que frecuentemente se trabaja con variables normalizadas. Este método se basa en que para la mayoría de las variables se puede determinar o estimar el valor absoluto máximo que tomará cada una de ellas durante la evolución en estudio. Si las variables originales se dividen por sus correspondientes valores absolutos máximos, se obtendrán las variables normalizadas cuyos valores pertenecerán al intervalo $[-1,1]$. Una importante excepción es el tiempo, para el cual no existe una cota superior. Sin embargo, si bien no es posible determinar un valor máximo para esta variable, es posible fijar un valor característico para el sistema en cuestión, por ejemplo: tiempo de residencia, la inversa de una constante cinética, etc. Cualquier otra variable, para la cual no es posible determinar un valor máximo, podrá ser adimensionalizada utilizando un valor característico al igual que se hace con el tiempo.

De esta manera, todas las variables, excepto el tiempo, pueden ser normalizadas con la consiguiente ventaja numérica. Note que no sólo se normalizan las variables con esta operación, sino que también se convierten en *variables adimensionales*; es decir, el modelo se hace independiente de cualquier sistema de unidades. Más aún, como resultado de estos cambios, los parámetros del modelo quedan agrupados originando nuevos *parámetros o números adimensionales*. La cantidad de nuevos parámetros es, por lo general, menor a la cantidad de parámetros originales, lo que resulta en un *modelo adimensional* más simple que el modelo original. Al simplificarse el modelo, también se simplifican los experimentos

necesarios para determinar los parámetros, y también se simplifican los estudios a realizar en la etapa de simulación.

A continuación, se adimensionaliza el modelo planteado para el tanque. El primer paso es la selección de los valores característicos para cada variable. Luego, se adimensionalizan las variables dividiéndolas por sus valores característicos, esto es:

$$L^* = \frac{L}{L_{\max}} \quad (24)$$

$$F^* = \frac{F}{F_0} \quad (25)$$

Conviene que los valores característicos sean constantes, por eso para el tiempo no se selecciona el tiempo de residencia ($\theta = V/F$) porque éste es variable, sino que se selecciona el tiempo de llenado o de carga:

$$t_{\text{car}} = \frac{A L_{\max}}{F_0} \quad (26)$$

Por lo tanto, el tiempo adimensional se define como:

$$t^* = \frac{t}{t_{\text{car}}} \quad (27)$$

Debido a que los valores seleccionados para adimensionalizar son constantes, el cálculo de los diferenciales es directo:

$$dL^* = \frac{dL}{L_{\max}} \quad (28)$$

$$dt^* = \frac{dt}{t_{\text{car}}} \quad (29)$$

Sustituyendo estas definiciones en el modelo dinámico, ecuaciones (15) y (16), resulta:

$$\frac{A L_{\max}}{t_{\text{car}}} \frac{dL^*}{dt^*} = F_0 - F_0 F^* \quad (30)$$

$$F_0 F^* = C_v x \sqrt{\rho g L_{\max} L^*} \quad (31)$$

Operando, se obtiene el modelo adimensional dinámico final:

$$\frac{dL^*}{dt^*} = 1 - F^* \quad (32)$$

$$F^* = \beta x \sqrt{L^*} \quad (33)$$

donde el único parámetro es:

$$\beta = \frac{C_v \sqrt{\rho g L_{\max}}}{F_0} \quad (34)$$

Observe que este parámetro es adimensional, y que agrupa a todos los parámetros originales en un único valor. Para el caso que se está estudiando el valor de este parámetro es 2.828. Sin embargo, este valor aplica también a todas las combinaciones posibles de valores de los parámetros originales que produzcan el mismo resultado para el número β . Es decir, que la conducta dinámica predicha por el modelo adimensional será la misma para todos los sistemas que tengan el mismo número adimensional.

Esta característica tiene una importancia fundamental, y se puede aplicar para realizar estudios de cambios de escala, y diseños de experimentos para determinar los cambios de conducta cualitativa del sistema. En efecto, cuando se tiene que realizar la planificación de experimentos, en lugar de variar los parámetros originales (C_v , ρ , g , L_{\max} y F_0) sólo se varía β , produciendo la misma información con un costo mucho menor. Desde otro punto de vista, para ajustar el modelo, sólo se debe estimar experimentalmente un único parámetro, β .

Por último, del modelo surgió la definición del parámetro β , pero no es necesario continuar utilizando el modelo para realizar simulaciones. Una alternativa comúnmente empleada es reemplazar el modelo matemático por un modelo físico, por ejemplo un tanque real a escala menor al tanque original, con un fluido que puede ser diferente al original pero cuidando que el valor del parámetro β se conserve. Tomados estas precauciones, será posible deducir la conducta dinámica del sistema original a partir de los experimentos realizados en el sistema a escala. Más aún, el sistema físico a utilizar para experimentar no tiene que ser forzosamente una copia a escala del sistema real, puede ser cualquier sistema físico cuyo modelo adimensional concuerde con el modelo adimensional del sistema real. Este es el principio en que se basan las computadoras analógicas, donde se predice la conducta del sistema real a partir de la conducta de un circuito electrónico. Con esta alternativa, la de utilizar un modelo físico, se evita tener que resolver el modelo matemático, lo cual puede ser una tarea bastante difícil para modelos complejos.

Para mostrar la potencia de este modelo, se analizarán las dos situaciones planteadas anteriormente: el tiempo de rebalse para $x = 0.25$, y la determinación de la apertura mínima para que no se produzca el rebalse del tanque. Para el primer caso, la Figura 18 muestra la implementación del modelo adimensional en E-Z Solve.

```
// Tanque con válvula
// Modelo adimensional
// Sistema ODEs
L' = 1-F

// Sistema algebraico
F = beta*x*sqrt(L)

// Datos
beta = 2.828
x = 0.25
```

Figura 18: Listado en E-Z Solve del modelo adimensional del tanque.

Con la condición inicial $L^* = 0.5$, el resultado da $t^* = 1.3$, el cual, utilizando la ecuación (26), corresponde a $t = 100$ s que concuerda con el valor obtenido con el modelo dinámico.

Para el segundo caso, se utiliza el modelo adimensional estacionario que se obtiene al anular el término de acumulación del modelo adimensional dinámico:

$$0 = 1 - F^* \quad (35)$$

$$F^* = \beta x \sqrt{L^*} \quad (36)$$

Entonces, el modelo planteado para simular en modo control es:

$$x = \frac{1}{\beta \sqrt{L^*}} \quad (37)$$

Este modelo evaluado en $L^* = 1$, produce un $x = 1/\beta$; es decir, $x = 0.35$ que es el valor que se obtuvo con el modelo estacionario original.

De esta manera, se reprodujeron los mismos resultados que se obtuvieron con los modelos originales. Sin embargo, ahora se cuenta con información que es generalizable para todos los sistemas que tengan el mismo valor del número adimensional β . Por ejemplo, se producirá un rebalse en $t^* = 1.3$ para todos los tanques cuyas combinaciones de válvulas, fluidos, dimensiones, caudales de alimentación (C_v , ρ , L_{\max} y F_0) produzcan un valor de $\beta = 2.828$. Igualmente, estos tanques no rebalsarán para aperturas mayores a 0.35.

Análisis de sensibilidad

Como parte del proceso de validación y perfeccionamiento del modelo, sobre todo cuando el sistema real no existe aún, se debe analizar la sensibilidad del mismo con respecto a los datos y a las suposiciones realizadas. Frecuentemente, en una simulación modo análisis, se adoptan valores constantes para los parámetros y variables de entradas cuando en realidad éstos no tienen valores constantes, o ante la dificultad de determinarlos experimentalmente se realizan estimaciones que tienen cierto error asociado. También, se suelen despreciar algunos fenómenos frente a otros, por ejemplo cuando se desprecia el transporte molecular frente al convectivo en un reactor tubular. Debido a esta situación, es necesario determinar el grado de impacto que estos valores y suposiciones tienen sobre los resultados. Para ello se realiza un estudio de sensibilidad. Si este estudio determina que la incertidumbre asociada a un valor dado o suposición dada origina una incertidumbre en los resultados tal que hace imposible al modelo cumplir con los objetivos para los cuales fue creado, será entonces necesario redoblar esfuerzos para precisar mejor el valor del parámetro o variable en cuestión, o incluso modificar el modelo eliminando la suposición que probó ser crítica.

Para ejemplificar estos conceptos se determinará la sensibilidad que presenta el tiempo de rebalse con respecto al caudal de entrada F_0 . Este dato fue seleccionado porque el caudal de entrada es una perturbación, y es la que tiene asociada la mayor incertidumbre. Modificando el listado correspondiente al modelo dinámico (Figura 14) para provocar una variación de $\pm 10\%$ en F_0 , se obtienen los siguientes resultados para el tiempo de rebalse: 81 s y 141 s; es decir, una disminución del 19 % y un aumento del 41 %, respectivamente, comparado con los

100 s obtenidos anteriormente. Por lo tanto, el tiempo de rebalse es más sensible a una disminución en el valor del caudal de entrada F_0 que a un aumento de esta variable. En ambos casos, la perturbación inicial del 10 % fue amplificada en el tiempo de rebalse a 19 % y 41 %, respectivamente.

Algo similar ocurre cuando se analiza la sensibilidad de la apertura mínima de la válvula de descarga que no llega a provocar el rebalse del tanque en estudio. Para una variación de $\pm 10\%$ en F_0 , utilizando esta vez el modelo estacionario, se determina que la apertura mínima es 0.39 y 0.32; esto es, un aumento del 11 % y una disminución del 9 %, respectivamente, comparado con el valor 0.35 obtenido anteriormente. Por lo tanto, los cambios observados en la apertura mínima son simétricos y de la misma magnitud que la perturbación original.

Tanque calefaccionado

En esta sección se adicionará al tanque de la Figura 9 un serpentín para calentar el agua condensando vapor saturado a 3 kgf/cm² y un agitador cuya potencia es 500 W. El sistema resultante se muestra en la Figura 19. En el estado estacionario inicial, la temperatura de la alimentación es 25 °C, y en el tanque es 60 °C. Se desea determinar a qué temperatura estará el fluido cuando rebalse al fijar la apertura de la válvula de descarga en 0.25. También, se desea determinar la temperatura del fluido cuando rebalse debido a un incremento del 65 % en el caudal de alimentación (la apertura de la válvula de descarga se mantiene en 0.5).

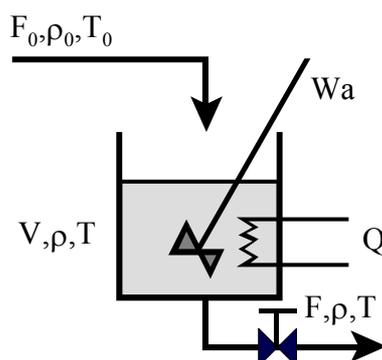


Figura 19: Tanque calefaccionado.

Al modelo dinámico de la sección anterior se debe agregar el balance de energía:

$$V \rho C_p \frac{dT}{dt} = F_0 \rho_0 C_{p_0} (T_0 - T) + Q + W_a \quad (38)$$

A éste se suma la ecuación que define el volumen líquido, ecuación (5), y la ecuación de transferencia que define el flujo de calor:

$$Q = UA(T_v - T) \quad (39)$$

donde el producto del coeficiente de transferencia de energía con el área de transferencia puede considerarse un parámetro. La temperatura de condensación T_v para la presión de 3 kgf/cm² es 132 °C (dato obtenido de bibliografía). La capacidad calorífica del agua es 1 cal/(gr °K) o, en el sistema mks, $4.187 \cdot 10^3$ J/(kg °K), se supone constante; esto es, $C_{p_0} = C_p$. La densidad también se supone constante, $\rho_0 = \rho$, e igual a 1000 kg/m³.

Para estimar el parámetro UA se utiliza el dato planteado para el sistema estacionario inicial. Anulando el término de acumulación del balance dinámico de energía y despejando el flujo de calor, se tiene

$$Q_{ini} = F_0 \rho_0 C p_0 (T_{ini} - T_0) - Wa \quad (40)$$

donde T_0 es 25 °C y T_{ini} es 60 °C. Entonces, Q_{ini} es igual a $2.93 \cdot 10^6$ W, y por la ecuación (39), UA es igual a $4.07 \cdot 10^4$ W/°K.

Al suponer que UA es un parámetro del sistema, se está despreciando la variación que éste puede tener cuando el sistema evolucione alejándose del estado estacionario para el cual fue estimado dicho valor. La bondad de esta suposición puede ser luego verificada por un estudio de sensibilidad. Si este estudio determina que la suposición no fue buena, se deberá entonces dejar de considerar a UA como un parámetro, y pasará a ser una variable interna asociada a una ecuación adicional de la cual pueda ser calculada.

A fin de simplificar el modelo, utilizando las ecuaciones (5) y (39), se eliminan las variables internas V , Q , C_p y ρ para dar lugar al siguiente balance de energía:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_0 \rho_0 C p_0 (T_0 - T) + UA(T_v - T) + Wa}{AL \rho_0 C p_0} \quad (41)$$

Esta ecuación es la única que debe agregarse al modelo dinámico planteado en la sección anterior para el tanque con descarga gravitatoria.

Note que el caudal de descarga no aparece en esta ecuación; por lo tanto, la temperatura de rebalse para el primer caso (cuando se cierra la válvula a 0.25) sigue siendo 60 °C. Este es un ejemplo de lo planteado en el primer capítulo, donde se afirmaba que en muchos casos el problema se resuelve en la etapa de modelado, sin llegar a ser necesaria la etapa de simulación. En cambio, para el segundo caso (el aumento de caudal de entrada) se debe resolver el modelo completo. La Figura 20 muestra el correspondiente listado en E-Z Solve. El valor inicial de L es nuevamente 1 m, mientras que el valor inicial de T es 60 °C. La solución reporta que el tanque rebalsará en aproximadamente 100 s y el líquido tendrá una temperatura de 49.6 C.

```

// Tanque calefaccionado con válvula
// Sistema ODEs
L' = (F0-F)/A
Tr' = (F0*rho0*Cp0*(T0-Tr)+UA*(Tv-Tr)+Wa)/(A*L*rho0*Cp0)

// Sistema algebraico
F = Cv*x*sqrt(rho*g*L)

// Datos
F0 = 1.65*20e-3
A = 0.785
Cv = 4.039e-4
rho0 = 1000
g = 9.81
x = 0.5
Cp0 = 4.187e3
UA = 4.07e4
T0 = 25
Tv = 132
Wa = 500

```

Figura 20: Listado en E-Z Solve para el tanque calefaccionado.

La Figura 21 muestra el correspondiente diagrama de bloques para Simulink. El balance de energía fue incorporado a través de un bloque *Fcn*, para lo cual fue necesario crear un vector por medio de un bloque *Matrix*. Las condiciones iniciales son las mismas que se utilizaron para E-Z Solve, pero se fijan en los respectivos bloques integradores. El diagrama para VisSim es similar pero más complejo al tener que expresar en forma explícita el balance de energía, por ese motivo ya no se presentará el correspondiente diagrama.

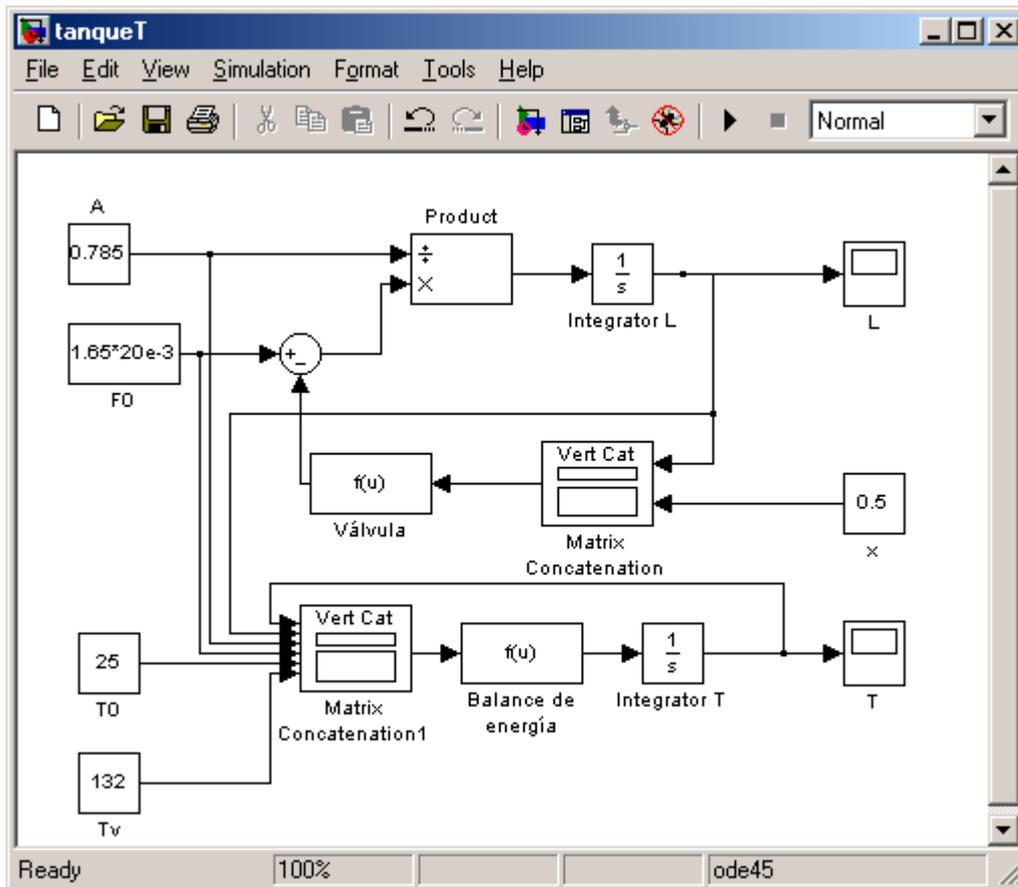


Figura 21: Diagrama de bloques de Simulink para el tanque calefaccionado.

Para terminar con este ejemplo, observe que Q_{ini} es igual a $2.93 \cdot 10^6$ W, el cual representa una potencia significativa. Este valor tendrá un elevado impacto negativo en los costos de producción si no se toma medida alguna para contrarrestar dicho efecto. A fin de atenuar ese impacto, se recurre a técnicas de recuperación de energía. Las mismas se basan en que los productos y efluentes deberán abandonar la planta a temperatura ambiente. Por lo tanto, será necesario enfriar los productos o las corrientes intermedias. Este calor puede ser empleado para calentar las materias primas u otras corrientes intermedias. De esta manera, se disminuye el consumo de servicios para calentar (vapor) y para enfriar (agua de refrigeración). El método del *pinch* plantea una técnica bastante aceptada para diseñar la red de intercambiadores y generadores de potencia que permitan obtener la máxima recuperación de energía, o también denominada máxima *integración energética y de potencia* (Seider *et al.*, 1999; Turton *et al.*, 1998).

Reactor refrigerado

Modelo dinámico

La Figura 22 muestra un reactor tanque agitado continuo con tres componentes: A, B y C. En él ocurre la reacción $A \rightarrow B$ irreversible, exotérmica y de primer orden. El compuesto C es el solvente. El reactor es refrigerado por un serpentín. Se desea estudiar la puesta en marcha y la estabilidad del estado estacionario de operación.

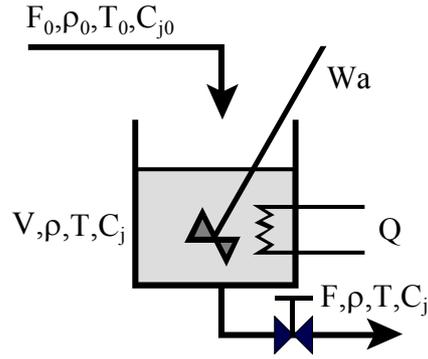


Figura 22: Reactor CSTR refrigerado.

Si se suponen constantes la densidad ($\rho_0 = \rho$), la capacidad calorífica ($Cp_0 = Cp$), el calor de reacción, y además se desprecia la potencia del agitador respecto a los otros términos del balance de energía; los balances de materia, componentes y energía son:

$$\frac{dV}{dt} = F_0 - F \quad (42)$$

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_0 (C_{A0} - C_A) - V r \quad (43)$$

$$V \frac{dC_B}{dt} = F_0 (C_{B0} - C_B) + V r \quad (44)$$

$$V \rho_0 Cp_0 \frac{dT}{dt} = F_0 \rho_0 Cp_0 (T_0 - T) + V r (-\Delta H) - Q \quad (45)$$

Note que en este caso el balance de global de materia reemplaza el balance por componente correspondiente al solvente C.

Las ecuaciones constitutivas son:

$$r = k C_A \quad (46)$$

$$k = \alpha e^{-\frac{E}{RT}} \quad (47)$$

$$Q = UA(T - T_{med}) \quad (48)$$

$$V = AL \quad (49)$$

$$F = C_v x \sqrt{\frac{\Delta P_v}{\rho_0 / \rho_w}} \quad (50)$$

$$\Delta P_v = \rho_0 g L \quad (51)$$

donde se utiliza la temperatura media T_{med} del serpentín, una variable de manipulable, en lugar de la diferencia media logarítmica. El error debido a esta aproximación es despreciable para las condiciones de trabajo del reactor.

Eliminando las variables intermedias innecesarias (k , V y ΔP_v), el modelo dinámico simplificado es:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{F_0 - F}{A} \quad (52)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_0}{AL} (C_{A0} - C_A) - r \quad (53)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{F_0}{AL} (C_{B0} - C_B) + r \quad (54)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_0 \rho_0 C_{p0} (T_0 - T) + ALr(-\Delta H) - Q}{AL \rho_0 C_{p0}} \quad (55)$$

Las ecuaciones constitutivas son:

$$r = \alpha e^{-\frac{E}{RT}} C_A \quad (56)$$

$$Q = UA(T - T_{\text{med}}) \quad (57)$$

$$F = C_v x \sqrt{\rho_w g L} \quad (58)$$

Este modelo tiene cuatro variables de estado (L , C_A , C_B y T), dos variables internas (r y Q), una variable de salida (F), cinco variables manipulables (F_0 , C_{A0} , C_{B0} , T_{med} y x) y diez parámetros (A , ΔH , ρ_0 , C_{p0} , α , E , R , UA , C_v , g y ρ_w).

Modelo adimensional

El modelo dinámico presentado en la sección anterior ya puede ser utilizado para resolver el problema que se está tratando. Sin embargo, para ampliar el rango de aplicación del modelo, se procede a adimensionalizar todas las variables:

$$t^* = \frac{t}{\frac{AL_{\text{max}}}{F_0}} \quad (59)$$

$$L^* = \frac{L}{L_{\text{max}}} \quad (60)$$

$$C_A^* = \frac{C_A}{C_{A0}} \quad (61)$$

$$C_B^* = \frac{C_B}{C_{A0}} \quad (62)$$

$$T^* = \frac{T}{T_0} \quad (63)$$

$$r^* = \frac{r}{\alpha e^{-\frac{E}{RT_0}} C_{A0}} \quad (64)$$

$$Q^* = \frac{Q}{AL_{\max} \alpha e^{-\frac{E}{RT_0}} C_{A0} (-\Delta H)} \quad (65)$$

$$F^* = \frac{F}{F_0} \quad (66)$$

Note que para algunas variables, no se utilizó el correspondiente valor máximo, sino que se utilizó un valor característico debido a la dificultad o imposibilidad de determinar dicho valor. Este proceder no afecta la utilidad del modelo. La única consecuencia visible es que las variables involucradas no estarán normalizadas, pudiendo entonces tomar valores mayores a uno en valor absoluto.

Reemplazando las nuevas variables adimensionales en el modelo dinámico se obtiene el modelo adimensional correspondiente:

$$\frac{dL^*}{dt^*} = 1 - F^* \quad (67)$$

$$\frac{dC_A^*}{dt^*} = \frac{1 - C_A^*}{L^*} - \beta r^* \quad (68)$$

$$\frac{dC_B^*}{dt^*} = \frac{C_{B0}^* - C_B^*}{L^*} + \beta r^* \quad (69)$$

$$\frac{dT^*}{dt^*} = \frac{1 - T^* + \gamma(L^* r^* - Q^*)}{L^*} \quad (70)$$

Las ecuaciones constitutivas son:

$$r^* = e^{-\eta\left(\frac{1}{T^*}-1\right)} C_A^* \quad (71)$$

$$Q^* = \kappa (T^* - T_{med}^*) \quad (72)$$

$$F^* = \lambda x \sqrt{L^*} \quad (73)$$

donde los parámetros adimensionales son:

$$\beta = \frac{\alpha e^{-\frac{E}{RT_0}} AL_{max}}{F_0} \quad (74)$$

$$\gamma = \frac{AL_{max} \alpha e^{-\frac{E}{RT_0}} C_{A0} (-\Delta H)}{F_0 \rho_0 C_{p0} T_0} \quad (75)$$

$$\eta = \frac{E}{RT_0} \quad (76)$$

$$\kappa = \frac{UAT_0}{AL_{max} \alpha e^{-\frac{E}{RT_0}} C_{A0} (-\Delta H)} \quad (77)$$

$$\lambda = \frac{C_v \sqrt{\rho_w g L_{max}}}{F_0} \quad (78)$$

Es destacable la reducción en el número de parámetros del modelo. Los cuatro parámetros adimensionales (β , γ , κ y λ) reemplazan a quince parámetros y datos del modelo original (α , E , R , T_0 , A , L_{max} , F_0 , C_{A0} , ΔH , ρ_0 , C_{p0} , UA , C_v , ρ_w y g).

De este modelo adimensional ya es posible obtener algunas conclusiones sobre el arranque sin necesidad de simular. Por ejemplo, por la ecuación (68), la concentración del reactivo A en el reactor aumentará cuando las condiciones de arranque (condiciones iniciales) cumplan:

$$\frac{1 - C_{Aini}^*}{L_{ini}^*} > \beta r_{ini}^* \quad (79)$$

y disminuirá en el caso contrario.

Algo similar se puede plantear para la temperatura. Por la ecuación (70), la misma aumentará en el arranque cuando las condiciones iniciales cumplan:

$$1 + \gamma L_{ini}^* r_{ini}^* > T_{ini}^* + \gamma Q_{ini}^* \quad (80)$$

y disminuirá en el caso contrario. Si la temperatura aumenta en el arranque, es necesario verificar que no supere el límite por sobre el cual el reactor se puede dañar o explotar.

Puesta en marcha

Para simular el arranque (o *startup*) del reactor, se adoptarán los siguientes valores para los parámetros:

$\beta = 0.5$
 $\gamma = 1.5$
 $\eta = 30$
 $\kappa = 6$
 $\lambda = 3$
 $T_{med}^* = 0.92$
 $C_{B0}^* = 0$ (no hay producto en la alimentación)
 $x = 0.5$

El procedimiento que se seguirá para el arranque es el siguiente:

1. Con la alimentación y la descarga cerrada, cargar el reactor con solvente hasta la mitad del nivel máximo, esto es: $L^* = 0.5$.
2. Pasar vapor saturado por el serpentín para calentar el solvente hasta $T^* = 1.1$.

Al final de estas etapas, las condiciones en el reactor serán:

$C_A^* = 0$
 $C_B^* = 0$
 $L^* = 0.5$
 $T^* = 1.1$

Las etapas anteriores pueden ser simuladas utilizando los modelos ya presentados del tanque con descarga gravitatoria y del tanque calefaccionado. Por lo tanto, la simulación que se realizará en esta sección tomará como condiciones iniciales los valores correspondientes al reactor cargado con solvente caliente. En el tiempo $t = 0$ de esta simulación, se abrirá la válvula de descarga a $x = 0.5$, y se permitirá el ingreso de la corriente de alimentación al reactor. Por el contrario, inicialmente no se hará circular refrigerante por el serpentín. Como resultado, la temperatura se elevará de acuerdo al progreso de la reacción. Esta etapa se denomina encendido de la reacción.

Pasado un tiempo, se deberá habilitar el paso del refrigerante para no producir daños en el reactor. Si se refrigera demasiado pronto, el reactor se “apagará” (*quenched*); si se refrigera demasiado tarde..., lamentará no haber estudiado otra carrera. A fin de determinar el tiempo apropiado de habilitación de la refrigeración se realizará una simulación dinámica. La Figura 23 muestra el correspondiente listado en E-Z Solve. Para modelar la habilitación de la refrigeración se utilizó la función $step(t, t_{enc})$. Esta función vale cero para $t < t_{enc}$, y uno para $t \geq t_{enc}$; donde t_{enc} es el tiempo en el que se habilita la refrigeración.

```

// Reactor refrigerado
// Modelo adimensional
// Sistema ODEs
L' = 1-F
CA' = (1-CA)/L-beta*r
CB' = (CB0-CB)/L+beta*r
Tr' = (1-Tr+gamma*(L*r-Q))/L

// Sistema algebraico
r = exp(-eta*(1/Tr-1))*CA
Q = kappa*(Tr-Tmed)*step(t,tenc)
F = lamda*x*sqrt(L)

// Datos
beta = 0.5

```

```
gamma = 1.5
eta = 30
kappa = 6
lamda = 3
Tmed = 0.92
x = 0.5
CB0 = 0
tenc = 0.05
```

Figura 23: Listado en E-Z Solve para la puesta en marcha del reactor.

La Figura 24 presenta dos posibles evoluciones para la temperatura del reactor durante la puesta en marcha. En el primer caso, curva inferior, la refrigeración se habilita en $t^* = 0.04$, y como consecuencia el reactor se apaga. Esto ocurre porque la reacción no tuvo tiempo suficiente para completar su etapa de encendido; por lo tanto, el reactor se enfría, y termina con una temperatura $T^* = 0.936$. Para este estado, la concentración de producto C_B^* es despreciable de acuerdo a la curva inferior de la Figura 25. En la siguiente prueba, curva superior, la refrigeración se habilita a $t^* = 0.05$, y el reactor se estabiliza en $T^* = 1.222$. Este es el estado de operación deseado porque, de acuerdo a la curva superior de la Figura 25, la concentración de producto es elevada, $C_B^* = 0.981$. Las restantes condiciones de este estado estacionario son $L^* = 0.444$ y $C_A^* = 0.019$. Sin embargo, la evolución de la temperatura presenta un pico que puede ser peligro. Para eliminar este pico, se deberán probar algunas variantes del procedimiento propuesto para el arranque.

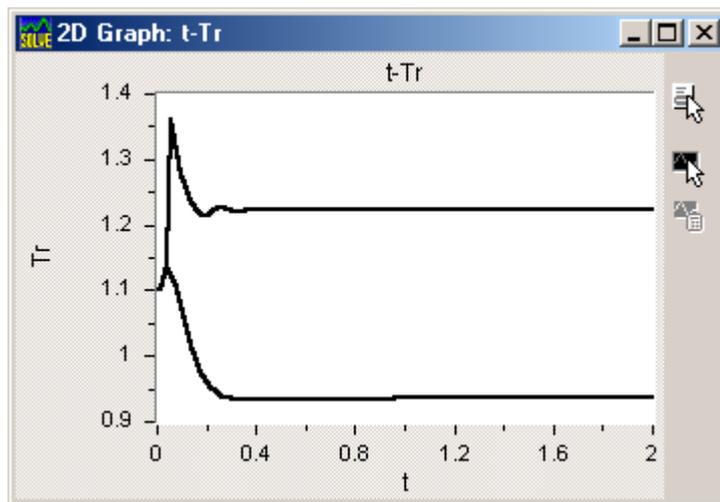


Figura 24: Evoluciones posibles de T^* durante la puesta en marcha del reactor.

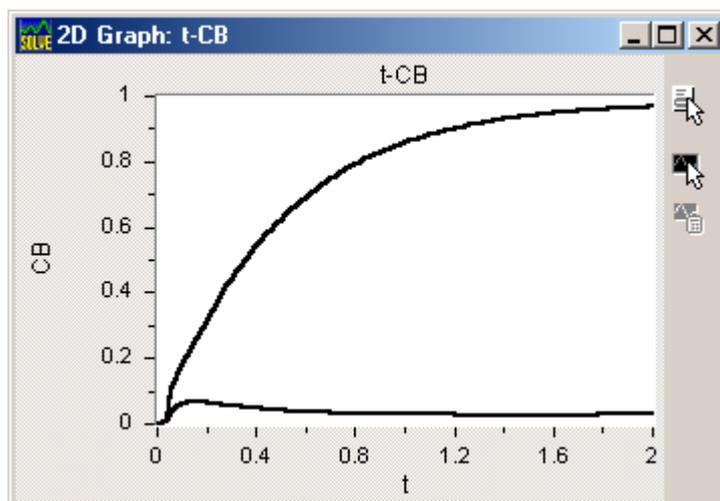


Figura 25: Evoluciones posibles de C_B^* durante la puesta en marcha del reactor.

Apagado del reactor

Alcanzado el punto de operación del reactor, la siguiente etapa crítica es el apagado (o *shutdown*) del mismo. Un procedimiento posible para apagar el reactor es reducir la concentración del reactivo A en la corriente de alimentación C_{A0} al 1 % de su valor inicial, mientras se mantienen las restantes condiciones de alimentación constantes (F_0 , T_0 , etc.). Debido a que C_{A0} figura en las magnitudes características escogidas para adimensionalizar las variables, se deben recalculer las condiciones iniciales y los parámetros afectados; los nuevos valores son:

$$L^* = 0.444$$

$$C_A^* = 0.019/0.01 = 1.9$$

$$C_B^* = 0.981/0.01 = 98.1$$

$$T^* = 1.222$$

$$\gamma = 1.5 \cdot 0.01 = 0.015$$

$$\kappa = 6/0.01 = 600$$

Por otra parte, como el estado inicial de la simulación que se realizará es el reactor operando en régimen, la refrigeración estará habilitada desde el inicio de la simulación; entonces, $t_{enc} = 0$.

Realizando las modificaciones apropiadas para el programa E-Z Solve, se obtienen las evoluciones de T^* y C_B^* . De ellas, se puede deducir que el reactor se apaga sin pasar por ninguna situación peligrosa. Por último, recuerde que los valores de las variables afectadas por este cambio de base de adimensionalización en la etapa de apagado no pueden ser comparados directamente con los correspondientes valores obtenidos en la etapa de puesta en marcha. Los mismos deberán ser convertidos teniendo en cuenta el cambio de base de adimensionalización.

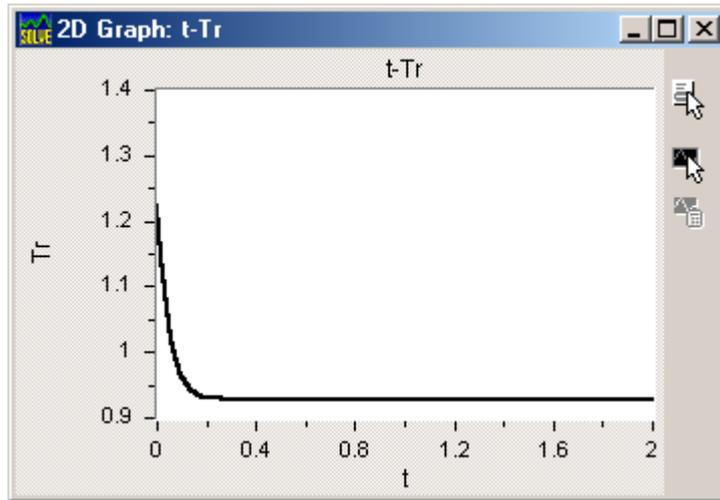


Figura 26: Evolución de la temperatura del reactor durante el apagado.

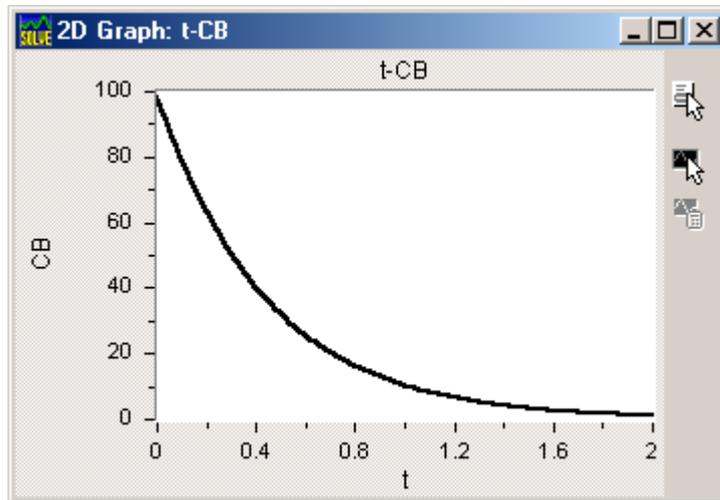


Figura 27: Evolución de la concentración del producto en el reactor durante el apagado.

Estudio de estabilidad

Para estudiar la estabilidad en las condiciones de operación del reactor, se debe primero plantear el modelo estacionario. Para ello, basta con anular los términos de acumulación del modelo dinámico adimensional, ecuaciones (67)-(73). Se puede hacer lo mismo con el modelo dinámico dimensional, pero para expandir el alcance de las conclusiones de esta sección, se trabajará con el modelo adimensional. Entonces, el modelo estacionario adimensional es:

$$0 = 1 - F^* \quad (81)$$

$$0 = \frac{1 - C_A^*}{L^*} - \beta r^* \quad (82)$$

$$0 = \frac{C_{B0}^* - C_B^*}{L^*} + \beta r^* \quad (83)$$

$$0 = 1 - T^* + \gamma (L^* r^* - Q^*) \quad (84)$$

más las ecuaciones constitutivas (71)-(73).

Resolviendo analíticamente las ecuaciones (73) y (81), se obtiene:

$$F^* = 1 \quad (85)$$

$$L^* = \left(\frac{1}{\lambda x} \right)^2 \quad (86)$$

Combinando estas ecuaciones con las ecuaciones (71) y (82), resulta:

$$C_A^* = \frac{(\lambda x)^2}{(\lambda x)^2 + \beta e^{-\eta \left(\frac{1}{T^*} - 1 \right)}} \quad (87)$$

$$r^* = \frac{(\lambda x)^2 e^{-\eta \left(\frac{1}{T^*} - 1 \right)}}{(\lambda x)^2 + \beta e^{-\eta \left(\frac{1}{T^*} - 1 \right)}} \quad (88)$$

Note que la velocidad de reacción adimensional quedó expresada sólo en función de la temperatura adimensional.

Por otra parte, el balance de energía, ecuación (84), se puede reformular de la siguiente forma:

$$\gamma L^* r^* = (T^* - 1) + \gamma Q^* \quad (89)$$

donde el miembro izquierdo es la velocidad de generación de calor debido a la reacción, el primer término del miembro derecho es la velocidad de consumo de calor para calentar los reactivos, y el segundo término es la velocidad con que el calor es removido por el refrigerante.

Como era de esperar, esta ecuación plantea que, en el estado estacionario, la velocidad de generación de calor debe ser igual la velocidad de consumo del mismo. Debido a que todos los términos fueron expresados en función de T^* , es posible construir una gráfica para determinar la temperatura para las cuales ambos miembros se igualan. Para eso, se definen la velocidad de generación de calor Q_G y de consumo Q_C como sigue:

$$Q_G = \gamma L^* r^* \quad (90)$$

$$Q_C = (T^* - 1) + \gamma Q^* \quad (91)$$

Reemplazando las variables definidas por las ecuaciones (72), (86) y (88), se tiene:

$$Q_G = \gamma \frac{e^{-\eta \left(\frac{1}{T^*} - 1 \right)}}{(\lambda x)^2 + \beta e^{-\eta \left(\frac{1}{T^*} - 1 \right)}} \quad (92)$$

$$Q_C = (T^* - 1) + \gamma \kappa (T^* - T_{med}^*) \quad (93)$$

La Figura 28 muestra estas dos variables versus T^* . Como se puede apreciar, para los valores de los parámetros considerados en la sección anterior, se tienen tres valores de temperatura que satisfacen las condiciones de estado estacionario, ellos son: 0.936, 1.028, 1.222. Por lo tanto, existen tres estados estacionarios posibles para operar el reactor. Sin embargo, dichos estados estacionarios no son equivalentes. El primero, correspondiente a $T^* = 0.936$, tiene baja producción debido a que la reacción “se apaga” a tan baja temperatura. El segundo, correspondiente a $T^* = 1.028$, es un estado inestable. En efecto, si en ese estado se calienta ligeramente el reactor por alguna perturbación (el aumento de la temperatura ambiente por ejemplo), la velocidad de generación de calor será mayor que la velocidad de consumo, y el reactor se calentará aún más, alejándose así del estado estacionario considerado. De esta manera, el reactor se calentará hasta llegar al siguiente estado estacionario, el correspondiente a $T^* = 1.222$. Este último estado es estable y de elevada producción; por lo tanto, debe ser el escogido para operar el reactor.

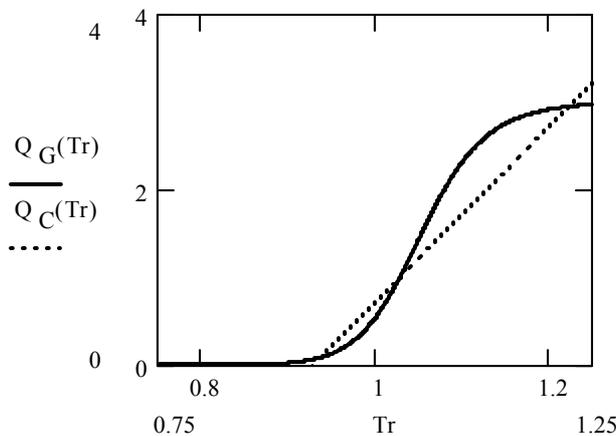


Figura 28: Curvas de generación y consumo de calor.

Se puede verificar la estabilidad del estado estacionario elegido considerando lo que ocurre cuando se perturba la temperatura del reactor. Si se aumenta ligeramente la temperatura en este estado estacionario, la velocidad de consumo de calor es mayor que la velocidad de generación, causando que la temperatura disminuya hasta retornar al valor original. Si en cambio, la perturbación hace que disminuya la temperatura del reactor, la velocidad de generación de calor será mayor que la velocidad de consumo, causando que la temperatura aumente hasta retornar al valor correspondiente al estado estacionario considerado. De esta forma, se debe concluir que el estado estacionario escogido es estable.

La Figura 29 presenta la evolución de la temperatura del reactor cuando se introdujo una perturbación inicial de $T^* = 1.21$. Nuevamente, t_{enc} debe ser cero. Como puede apreciarse en la curva superior, el reactor es capaz de recuperarse, y retorna al valor de operación $T^* = 1.22$. Sin embargo, cuando la perturbación es $T^* = 1.20$, curva inferior, el reactor no puede recuperarse, y se apaga. Para evitar esta situación, en la sección siguiente se instalará un controlador. Queda para el lector el análisis de por qué el reactor no puede recuperarse de esta última perturbación cuando, de acuerdo a la Figura 28, sí debería hacerlo.

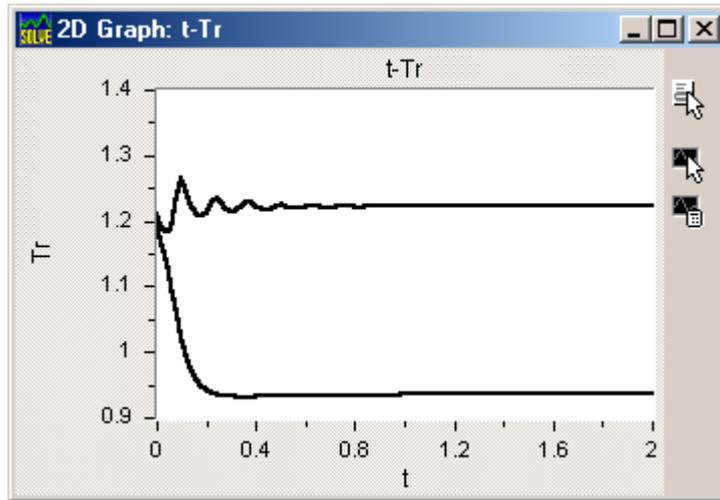


Figura 29: Respuestas de la temperatura ante perturbaciones.

Instalación de un controlador

De los estudios realizados en las secciones anteriores, se puede concluir que la temperatura tiene una fuerte influencia en el comportamiento del reactor. Esta variable puede ser afectada por un sinnúmero de perturbaciones; por ejemplo, variaciones en las condiciones: de la corriente de alimentación, del fluido refrigerante, ambientales, etc. Por otra parte, es posible contrarrestar estas perturbaciones a través de alguna variable manipulable. Esta variable debe ser seleccionada considerando el tiempo de respuesta que presenta el sistema ante un cambio de la misma (conviene que se lo más corto posible), el impacto sobre la variable controlada T^* (conviene que sea alto), y el costo asociado a esta variación (conviene que sea bajo). Debido a estos criterios, por lo general, se prefiere manipular un servicio del sistema en lugar de trabajar con el proceso en sí; es decir, para el reactor es preferible manipular el caudal de refrigerante que el caudal de alimentación.

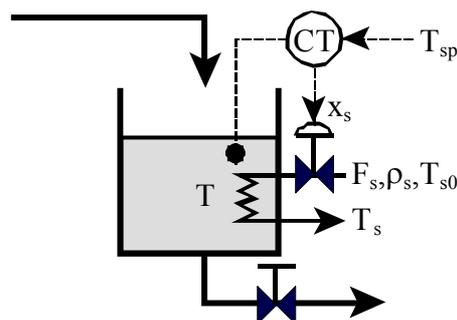


Figura 30: Controlador de temperatura.

Por los motivos señalados, se instalará en el reactor un controlador de temperatura. La variable manipulada será la apertura de la válvula de ingreso de refrigerante (Figura 30). Para evitar el error de *offset* asociado a un controlador del tipo P, el controlador a utilizar será del tipo P+I (proporcional más efecto integral). La válvula de control es lineal. Con esto, las ecuaciones adicionales para el modelo dinámico son:

$$Ac = Ab + Kp \left(e + \frac{1}{\tau i} Ai \right) \quad (94)$$

$$e = T - T_{sp} \quad (95)$$

$$x_s = Ac \quad (96)$$

$$F_s = C_{vs} x_s \sqrt{\frac{\Delta P_{vs}}{\rho_s / \rho_{ws}}} \quad (97)$$

$$Q = F_s \rho_s C_{ps} (T_s - T_{s0}) \quad (98)$$

$$T_{med} = \frac{T_{s0} + T_s}{2} \quad (99)$$

donde se despreció la dinámica del serpentín, por lo que se planteó un balance estacionario de energía.

El efecto integral Ai es por definición:

$$Ai = \int_0^t e dt \quad (100)$$

pero, para evitar la formación de un sistema de ecuaciones integro-diferenciales, se sustituye la ecuación anterior por la siguiente ecuación diferencial equivalente:

$$\frac{dAi}{dt} = e \quad (101)$$

Eliminando las variables intermedias e y Ac , se obtienen las ecuaciones que finalmente deben ser agregadas al modelo dinámico:

$$\frac{dAi}{dt} = T - T_{sp} \quad (102)$$

$$x_s = Ab + Kp \left(T - T_{sp} + \frac{1}{\tau i} Ai \right) \quad (103)$$

$$F_s = C_{vs} x_s \sqrt{\frac{\Delta P_{vs}}{\rho_s / \rho_{ws}}} \quad (104)$$

$$Q = F_s \rho_s C_{ps} (T_s - T_{s0}) \quad (105)$$

$$T_{med} = \frac{T_{s0} + T_s}{2} \quad (106)$$

Si se eligen los mismos factores de adimensionalización que se utilizaron en la sección anterior, las variables adimensionales adicionales son:

$$Ai^* = \frac{Ai}{T_0 \frac{AL_{\max}}{F_0}} \quad (107)$$

$$F_s^* = \frac{F_s}{F_0} \quad (108)$$

$$T_{\text{med}}^* = \frac{T_{\text{med}}}{T_0} \quad (109)$$

Sustituyendo las nuevas variables adimensionales se obtienen las ecuaciones adicionales que deben ser agregadas al modelo adimensional del reactor:

$$\frac{dAi^*}{dt^*} = T^* - T_{\text{sp}}^* \quad (110)$$

$$x_s = Ab + \sigma (T^* - T_{\text{sp}}^* + \omega Ai^*) \quad (111)$$

$$F_s^* = \xi x_s \quad (112)$$

$$Q^* = \psi F_s^* (T_s^* - T_{s0}^*) \quad (113)$$

$$T_{\text{med}}^* = \frac{T_{s0}^* + T_s^*}{2} \quad (114)$$

En el modelo debe tomarse las precauciones necesarias para que la apertura de la válvula de descarga x_s no abandone el intervalo $[0,1]$ para que se mantenga el sentido físico de dicha variable.

Los números adimensionales adicionales son:

$$\sigma = Kp T_0 \quad (115)$$

$$\omega = \frac{AL_{\max}}{F_0 \tau i} \quad (116)$$

$$\xi = \frac{C_{\text{vs}} \sqrt{\frac{\Delta P_{\text{vs}}}{\rho_s / \rho_{\text{ws}}}}}{F_0} \quad (117)$$

$$\psi = \frac{F_0 \rho_s C_p T_0}{AL_{\max} \alpha e^{-\frac{E}{RT_0}} C_{A0} (-\Delta H)} \quad (118)$$

Los valores de los parámetros y variables adicionales son:

$$\sigma = 100$$

$$\omega = 0.5$$

$$\xi = 25$$

$$\psi = 1$$

$$Ab = 0.5$$

$$T_{sp}^* = 1.222$$

$$T_{s0}^* = 0.85$$

Siempre conviene diseñar el proceso para que la válvula de control tenga un margen disponible para cerrar y abrir. Lo ideal es que la válvula opere en condiciones normales al 0.5 de apertura; por eso, $Ab = 0.5$.

Para estudiar el comportamiento del controlador, se realizará una simulación dinámica tomando como estado inicial el estado estacionario de operación del reactor. En ese estado, se provocará una perturbación, y se analizará la evolución del reactor. El valor inicial para el efecto integral Ai^* se podría obtener de plantear el modelo estacionario para las condiciones normales de operación del reactor. Sin embargo, un camino alternativo es suponer un valor inicial cualquiera, por ejemplo cero, y realizar una simulación dinámica. Cuando el reactor alcanza el estado estacionario de operación, se registra el valor correspondiente del efecto integral. Luego, éste será el valor inicial tomado para la siguiente simulación.

La Figura 31 presenta el listado en E-Z Solve para simular el reactor con controlador de temperatura. Debido a que físicamente la apertura de la válvula de control debe pertenecer al intervalo $[0,1]$ (o mejor $[0.01,1]$ para evitar problemas numéricos), se utiliza la función $acotado(x, Li, Ls)$ en la ecuación de la válvula. Dicha función se define de la siguiente manera:

$$acotado(x, Li, Ls) = \begin{cases} Li & x < Li \\ Ls & x > Ls \\ x & \text{otherwise} \end{cases} \quad (119)$$

Para programar esta función, se utilizaron las facilidades que ofrece el programa E-Z Solve. En la Figura 32 se presenta el listado correspondiente a esta función.

```

/ Reactor refrigerado
// Modelo adimensional
// Evaluación del controlador CT
// Sistema ODEs
L' = 1-F
CA' = (1-CA)/L-beta*r
CB' = (CB0-CB)/L+beta*r
Tr' = (1-Tr+gamma*(L*r-Q))/L
Ai' = Tr-Tsp

// Sistema algebraico
r = exp(-eta*(1/Tr-1))*CA
Q = kappa*(Tr-Tmed)*step(t,tenc)
F = lamda*x*sqrt(L)

xs = Ab+sigma*(Tr-Tsp+omega*Ai)
Fs = xi*acotado(xs,0.01,1)
Q = psi*Fs*(Ts-Ts0)*step(t,tenc)
Tmed = (Ts+Ts0)/2

```

```

// Datos
beta = 0.5
gamma = 1.5
eta = 30
kappa = 6
lamda = 3
x = 0.5
CB0 = 0
tenc = 0.0

sigma = 100
omega = 0.5
xi = 25
psi = 1
Ab = 0.5
Tsp = 1.222
Ts0 = 0.85

```

Figura 31: Listado en E-Z Solve para el reactor con controlador de temperatura.

```

FUNCTION acotado(x,Li,Ls)
/* Devuelve el valor acotado de x
entre Li y Ls */

r = x

IF x < Li THEN
r = Li
ENDIF

IF X > Ls THEN
r = Ls
ENDIF

RETURN r
END

```

Figura 32: Definición de la función *acotado(x,Li,Ls)*.

Simulando para las condiciones de operación del reactor e inicializando con cero el efecto integral, se obtiene que en el estado estacionario de operación $Ai^* = 0.00$. Tomando este valor como valor inicial, se procede a simular la perturbación analizada en la sección anterior $T^* = 1.20$. En dicho caso, el reactor no pudo recuperarse de esta perturbación, y se apagó. En cambio, de acuerdo a la Figura 33, ahora el controlador actúa, y hace que el reactor recupere su estado normal de funcionamiento.

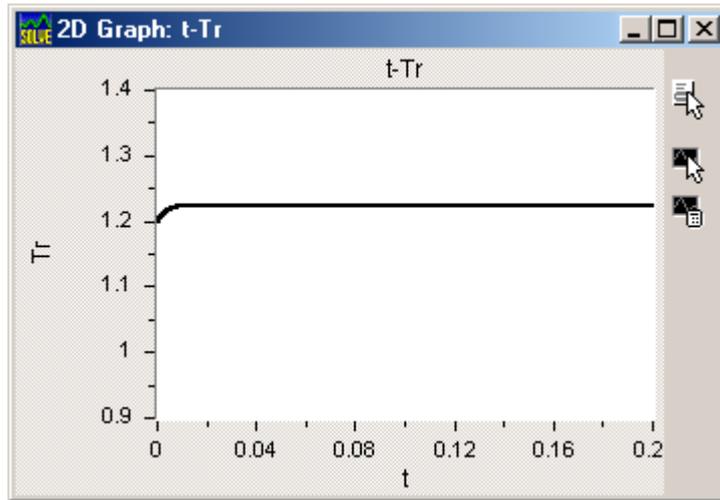


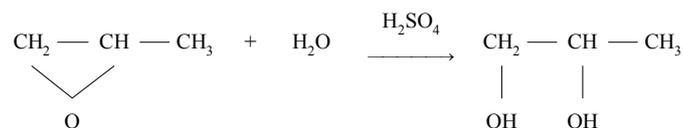
Figura 33: Respuesta del reactor con CT para la perturbación $T^* = 1.20$.

Reactor productor de propilenglicol

Modelo dinámico

En esta sección se estudiará un reactor similar al reactor de la sección anterior (Figura 22), pero esta vez, para facilitar la interpretación física, se utilizará el modelo dinámico original sin adimensionalizar; y para practicar con otro sistema de unidades, se trabajará con el sistema inglés. Nuevamente, se analizarán la puesta en marcha, la estabilidad del estado estacionario y la instalación de un controlador.

El reactor a considerar en esta sección está destinado a la producción de propilenglicol. Este compuesto es producido por la hidrólisis del óxido de propileno:



La reacción ocurre a temperatura ambiente cuando es catalizada por ácido sulfúrico. En las condiciones de operación del reactor en estudio, la reacción es de primer orden con respecto al óxido de propileno. La dependencia de la constante cinética en relación a la temperatura, está dada por la ecuación de Arrhenius:

$$k = \alpha e^{-\frac{E}{RT}} \quad (120)$$

donde $\alpha = 16.96 \cdot 10^{12} \text{ h}^{-1}$ y $E = 32400 \text{ Btu/lb mol}$. La constante de los gases R es $1.987 \text{ Btu/(lb mol } ^\circ\text{R)}$.

El reactor es del tipo CSTR refrigerado con un serpentín. Un sistema de control ideal mantiene el volumen líquido constante e igual a 66.84 ft^3 . Inicialmente sólo hay agua a $75 \text{ }^\circ\text{F}$ y 0.1% en peso de H_2SO_4 . El caudal de alimentación de reactivos es $F_0 = 440.63 \text{ ft}^3/\text{h}$, y su temperatura $T_0 = 75 \text{ }^\circ\text{F}$. Las concentraciones, en esta corriente, de óxido de propileno (A), agua (B, con 0.1% de H_2SO_4), óxido de propilenglicol (C) y metanol (M) son: $C_{A0} = 0.1816$, $C_{B0} = 2.2695$, $C_{C0} = 0$ y $C_{M0} = 0.2269$ en lb mol/ft^3 , respectivamente. Las capacidades caloríficas son: $C_{pA0} = 35$, $C_{pB0} = 18$, $C_{pC0} = 46$ y $C_{pM0} = 19.5$ en $\text{Btu/(lb mol } ^\circ\text{F)}$. La reacción química es del tipo: $A + B \rightarrow C$. El calor de reacción es constante e igual a

$\Delta H = -36000$ Btu/(lb mol). La variación de la densidad y la potencia del agitador son despreciables. Al contrario de la sección anterior, en este caso no se supondrá capacidad calorífica constante con respecto a la composición de la mezcla, pero sí con respecto a la temperatura.

El refrigerante (agua) ingresa al serpentín con una velocidad de $N_{s0} = 1000$ lb mol/h y a $T_{s0} = 60$ °F. La capacidad calorífica es $Cp_{s0} = 18$ Btu/(lb mol °F). El UA del equipo es 16000 Btu/(h °F).

Con todas las consideraciones realizadas, las ecuaciones diferenciales del modelo (balances por componentes y energía) son:

$$V \frac{dC_A}{dt} = F_0 (C_{A0} - C_A) - V r \quad (121)$$

$$V \frac{dC_B}{dt} = F_0 (C_{B0} - C_B) - V r \quad (122)$$

$$V \frac{dC_C}{dt} = F_0 (C_{C0} - C_C) + V r \quad (123)$$

$$V \frac{dC_M}{dt} = F_0 (C_{M0} - C_M) \quad (124)$$

$$V C C p \frac{dT}{dt} = F_0 C_0 C p_0 (T_0 - T) + V r (-\Delta H) - Q \quad (125)$$

donde C_0 y C son las densidades molares de la alimentación y del reactor respectivamente. Debido a que el volumen es constante, se prefirió trabajar con los balances para todos los componentes en lugar de emplear el global.

Las ecuaciones constitutivas son:

$$r = k C_A \quad (126)$$

$$k = \alpha e^{-\frac{E}{RT}} \quad (127)$$

$$Q = UA \Delta T_{ml} \quad (128)$$

$$Q = N_{s0} C p_{s0} (T_s - T_{s0}) \quad (129)$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T - T_{s0}) - (T - T_s)}{\ln \left(\frac{T - T_{s0}}{T - T_s} \right)} \quad (130)$$

$$C = \sum_{j=1}^{NC} C_j \quad (131)$$

$$x_j = \frac{C_j}{C} \quad (132)$$

$$Cp = \sum_{j=1}^{NC} x_j Cp_{j0} \quad (133)$$

$$C_0 = \sum_{j=1}^{NC} C_{j0} \quad (134)$$

$$x_{j0} = \frac{C_{j0}}{C_0} \quad (135)$$

$$Cp_0 = \sum_{j=1}^{NC} x_{j0} Cp_{j0} \quad (136)$$

donde ΔT_{ml} es la diferencia media logarítmica, x_j es la fracción molar del compuesto j .

Eliminando las variables internas de poco interés para este estudio (k , ΔT_{ml} , x_j y x_{j0}), se tiene el modelo dinámico simplificado:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{F_0(C_{A0} - C_A)}{V} - r \quad (137)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{F_0(C_{B0} - C_B)}{V} - r \quad (138)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = \frac{F_0(C_{C0} - C_C)}{V} + r \quad (139)$$

$$\frac{dC_M}{dt} = \frac{F_0(C_{M0} - C_M)}{V} \quad (140)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_0 C_0 Cp_0 (T_0 - T) + V r (-\Delta H) - Q}{V C Cp} \quad (141)$$

Las ecuaciones constitutivas son:

$$r = \alpha e^{-\frac{E}{RT}} C_A \quad (142)$$

$$Q = UA \frac{T_s - T_{s0}}{\ln\left(\frac{T - T_{s0}}{T - T_s}\right)} \quad (143)$$

$$Q = N_{s0} Cp_{s0} (T_s - T_{s0}) \quad (144)$$

$$C = \sum_{j=1}^{NC} C_j \quad (145)$$

$$Cp = \frac{1}{C} \sum_{j=1}^{NC} C_j Cp_{j0} \quad (146)$$

$$C_0 = \sum_{j=1}^{NC} C_{j0} \quad (147)$$

$$Cp_0 = \frac{1}{C_0} \sum_{j=1}^{NC} C_{j0} Cp_{j0} \quad (148)$$

Puesta en marcha

La Figura 34 muestra el listado en E-Z Solve correspondiente al modelo dinámico desarrollado para el reactor. La Figura 35 y la Figura 36 presentan la evolución de C_A y T durante la puesta en marcha cuando las condiciones iniciales son las siguientes:

$$C_A = 0$$

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

$$C_C = 0$$

$$C_M = 0$$

$$T = 75 \text{ }^\circ\text{F}$$

```
// Reactor de propilenglicol
// 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
Tr' = (F0*C0*Cp0*(T0-Tr)+V*r*(-DH)-Q)/(V*C*Cp)

// Sistema de ecuaciones algebraicas
r = alpha*exp(-E/(R*(Tr+460)))*CA // Tr debe estar en Rankine.
Q = UA*(Ts-Ts0)/ln((Tr-Ts0)/(Tr-Ts))
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
```

$C_{pB0} = 18$
 $C_{pC0} = 46$
 $C_{pM0} = 19.5$

 $N_{s0} = 1000$
 $T_{s0} = 60$
 $C_{ps0} = 18$
 $UA = 16000$

 $DH = -36000$
 $\alpha = 16.96e12$
 $E = 32400$
 $R = 1.987$

Figura 34: Listado en E-Z Solve para el reactor productor de propilenglicol.

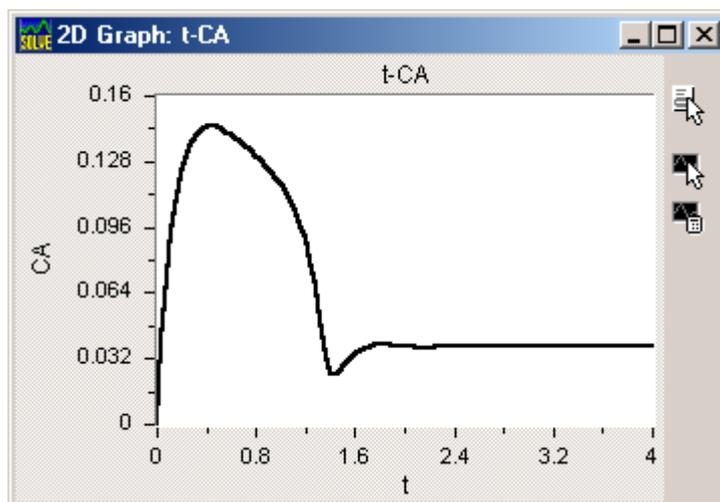


Figura 35: Evolución de C_A en la puesta en marcha.

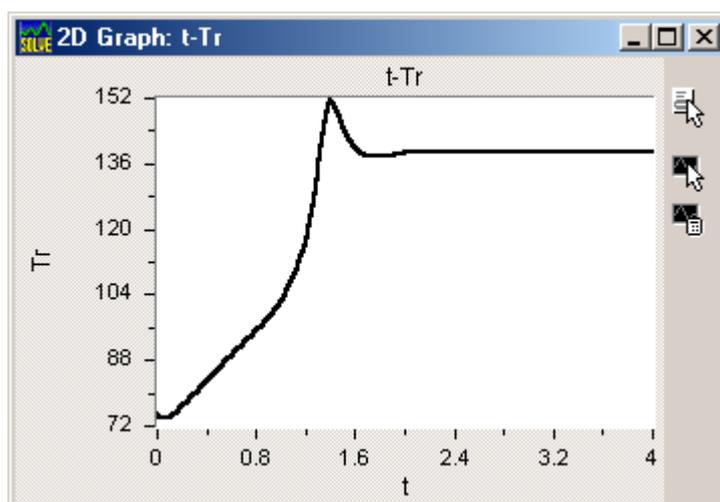


Figura 36: Evolución de la T en la puesta en marcha.

En estas condiciones, el reactor arranca (con el sistema de refrigeración encendido desde el primer momento) y se estabiliza en el siguiente estado estacionario:

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

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

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

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

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

La evolución hacia el estado estacionario de operación puede verse más claramente en los diagramas de fases. La Figura 37 presenta el diagrama correspondiente a C_A vs. T . En él se puede identificar un punto *atractor*, este punto corresponde al estado estacionario de operación. La potencia de estos diagramas radica en que el reactor alcanzará el estado de operación para cualquier estado inicial que se encuentre sobre las curvas representadas en en los mismos. Más aún, el estado evolucionará a partir de ese punto inicial respetando las trayectorias indicadas en los diagramas.

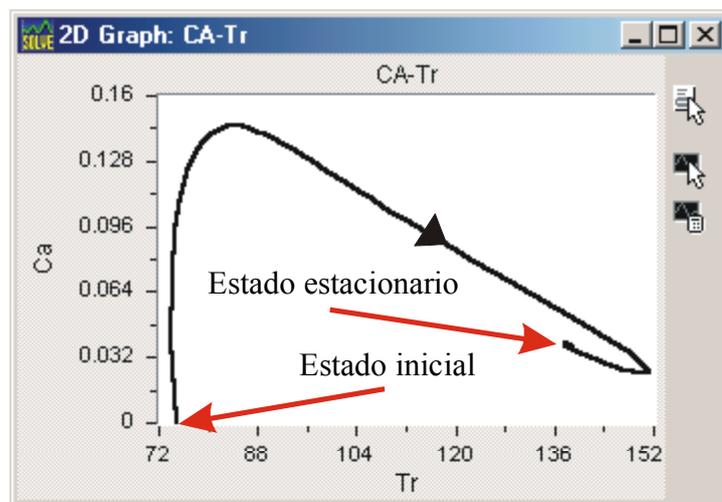


Figura 37: Diagrama de fase CA vs. T para la puesta en marcha.

La Figura 38 muestra el diagrama de fases para tres puesta en marcha a partir de las siguientes tres condiciones iniciales: $T = 75$, $C_A = 0$; $T = 150$, $C_A = 0$; y $T = 150$, $C_A = 0.14$. Todas ellas conducen al mismo estado estacionario final; sin embargo, la última presenta una elevación de temperatura excesiva que puede ser peligrosa para el reactor.

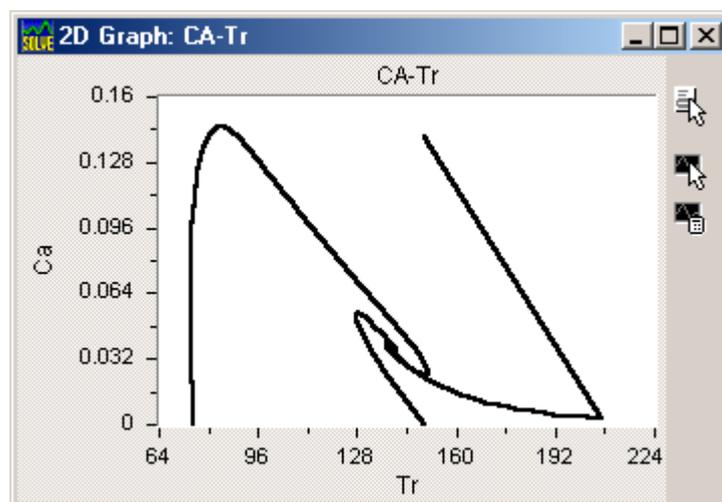


Figura 38: Puesta en marcha a partir de tres condiciones iniciales diferentes.

Por el contrario, el reactor no puede ponerse en marcha cuando la temperatura de alimentación es $T_0 = 70$ °F. En efecto, la Figura 39 muestra la evolución de T cuando las condiciones iniciales son las siguientes:

$$C_A = 0$$

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

$$C_C = 0$$

$$C_M = 0$$

$$T = 75 \text{ °F}$$

Con estas condiciones, el reactor se apaga y se estabiliza en el siguiente estado estacionario:

$$C_A = 0.1461 \text{ lb mol/ft}^3$$

$$C_B = 2.2340 \text{ lb mol/ft}^3$$

$$C_C = 0.0355 \text{ lb mol/ft}^3$$

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

$$T = 83.72 \text{ °F}$$

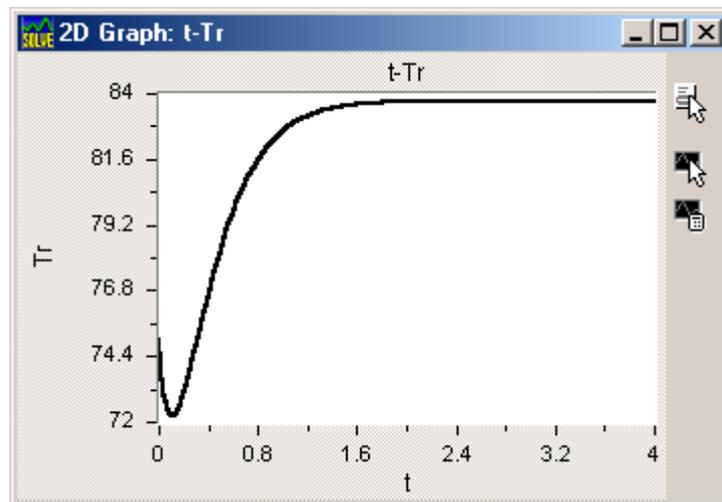


Figura 39: Puesta en marcha para $T_0 = 70$ °F.

Apagado del reactor

Un procedimiento posible para apagar el reactor consiste en hacer $C_{A0} = 0$; esto es, se elimina un reactivo de la alimentación. La Figura 40 muestra la evolución de la temperatura T cuando se sigue el procedimiento descrito. Debido a que no se observan picos peligrosos, y el reactor se apaga rápidamente, éste parece ser un procedimiento adecuado para el apagado.

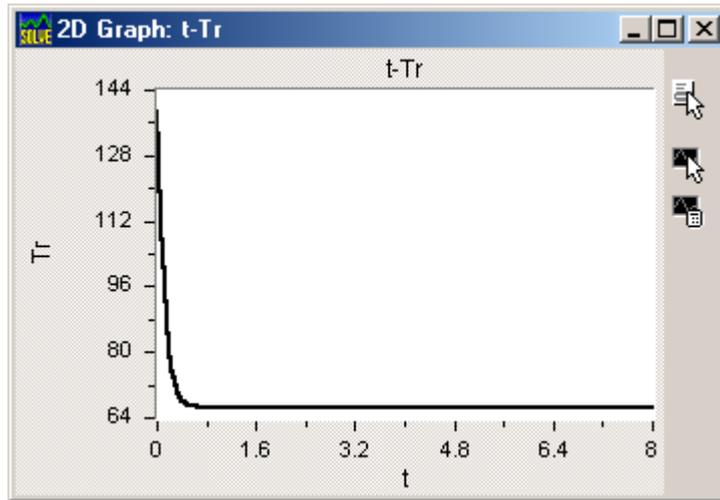


Figura 40: Evolución de la temperatura T cuando se hace $C_{A0} = 0$.

Por el contrario, anular la alimentación haciendo $F_0 = 0$ no parece un buen procedimiento de acuerdo a lo que se puede ver en la Figura 41. En este caso, la temperatura presenta un pico que puede causar problemas.

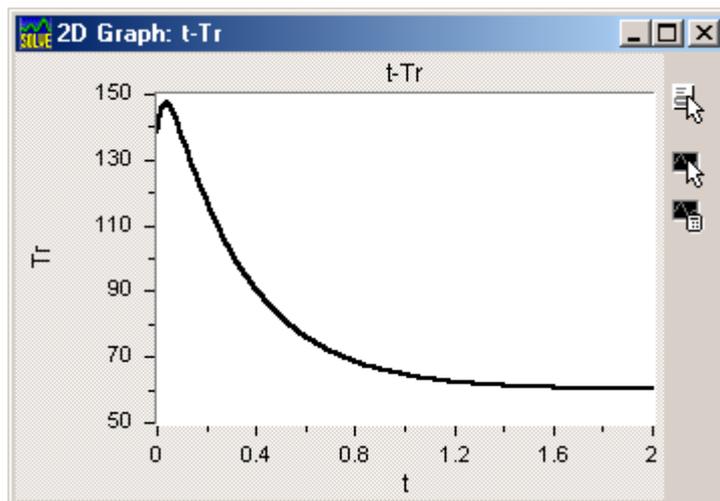


Figura 41: Evolución de la temperatura T cuando se hace $F_0 = 0$.

Estudio de estabilidad

Para comprender las diferentes conductas observadas durante la puesta en marcha, es necesario estudiar la estabilidad del estado de operación del reactor. Para ello, se plantea el modelo correspondiente al estado estacionario. Como siempre, dicho modelo se obtiene del modelo dinámico anulando los miembros izquierdos de las ecuaciones diferenciales. De este modo, del balance para el componente A se obtiene:

$$0 = \frac{F_0(C_{A0} - C_A)}{V} - r \quad (149)$$

A partir de esta ecuación y de la correspondiente a la velocidad de reacción, ecuación (142), se tienen C_A y r en función de T únicamente:

$$C_A = \frac{C_{A0}}{\frac{V}{F_0} \alpha e^{-\frac{E}{RT}} + 1} \quad (150)$$

$$r = \frac{\alpha e^{-\frac{E}{RT}} C_{A0}}{\frac{V}{F_0} \alpha e^{-\frac{E}{RT}} + 1} \quad (151)$$

Por otra parte, el balance de energía estacionario es:

$$0 = F_0 C_0 C_{p_0} (T_0 - T) + V r (-\Delta H) - Q \quad (152)$$

Al igual que se hizo con el anterior reactor, es posible definir las velocidades de generación y de consumo de calor, Q_G y Q_C , como sigue:

$$Q_G = V r (-\Delta H) \quad (153)$$

$$Q_C = F_0 C_0 C_{p_0} (T - T_0) + Q \quad (154)$$

Utilizando las ecuaciones (143) y (144), se pueden expresar las condiciones en el serpentín en función de T :

$$T_s = T_{s0} + (T - T_{s0}) \left(1 - e^{-\frac{UA}{N_{s0} C_{p_{s0}}}} \right) \quad (155)$$

$$Q = N_{s0} C_{p_{s0}} (T - T_{s0}) \left(1 - e^{-\frac{UA}{N_{s0} C_{p_{s0}}}} \right) \quad (156)$$

Entonces, con las ecuaciones (151) y (156), Q_G y Q_C dependen de la temperatura T de la siguiente manera:

$$Q_G = \frac{V \alpha e^{-\frac{E}{RT}} C_{A0} (-\Delta H)}{\frac{V}{F_0} \alpha e^{-\frac{E}{RT}} + 1} \quad (157)$$

$$Q_C = F_0 C_0 C_{p_0} (T - T_0) + N_{s0} C_{p_{s0}} (T - T_{s0}) \left(1 - e^{-\frac{UA}{N_{s0} C_{p_{s0}}}} \right) \quad (158)$$

La Figura 42 muestra estas variables en función de T . Como puede apreciarse, para $T_0 = 75$ °F, existe un único estado estacionario posible a $T = 138.7$ °F, y es el mismo que fue determinado en la sección de puesta en marcha. De acuerdo al análisis de esta gráfica, este estado debe ser de alta producción y estable.

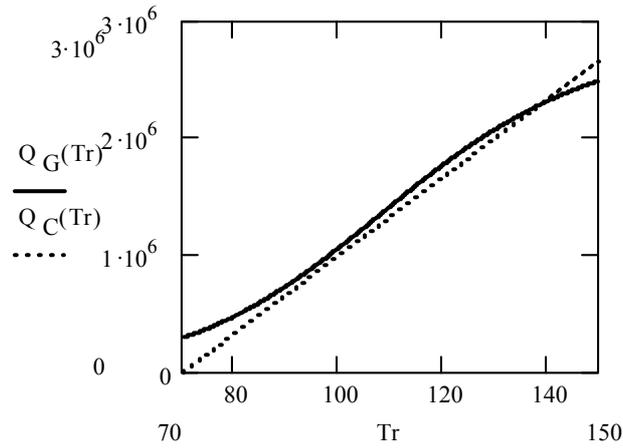


Figura 42: Curvas de generación y consumo de calor para $T_0 = 75$ °F.

Por otra parte, cuando durante la operación del reactor se perturba la alimentación haciendo $T_0 = 70$ °F, cambia el estado estacionario tal como se representa en la Figura 43. Este nuevo estado es estable pero de baja producción. Es decir, el reactor se apaga descendiendo la temperatura hasta $T = 83.72$ °F (Figura 44). El estado estacionario final es el mismo estado apagado estudiado en la sección de puesta en marcha. Este fenómeno puede utilizarse para diseñar un procedimiento de apagado del reactor.

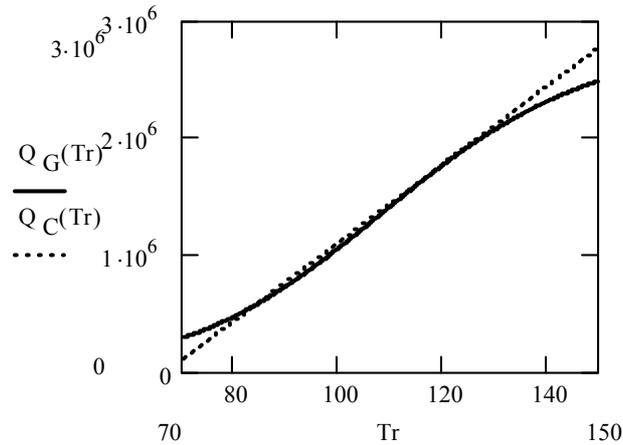


Figura 43: Curvas de generación y consumo de calor para $T_0 = 70$ °F.

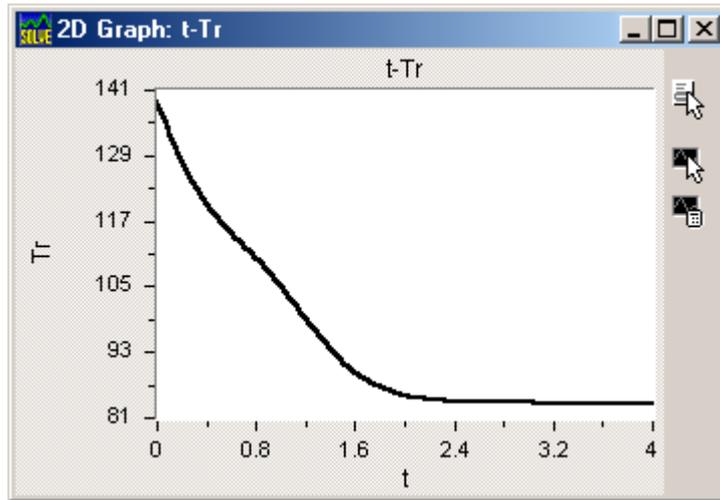


Figura 44: Descenso de la temperatura T cuando se hace $T_0 = 70$ °F.

Instalación de un controlador de temperatura

Como se puede concluir del análisis realizado, es necesario contar con algún medio para eliminar los efectos de las perturbaciones sobre el reactor. Este medio puede ser un controlador P+I que supervise a la temperatura (variable controlada) y manipule el caudal de refrigerante (variable manipulada) a fin de mantener la temperatura en un valor deseado T_{sp} . Para ello, se deberán agregar las siguientes ecuaciones al modelo dinámico:

$$\frac{dAi}{dt} = e \quad (159)$$

$$Ac = Ab + Kp \left(e + \frac{1}{\tau i} Ai \right) \quad (160)$$

$$e = T - T_{sp} \quad (161)$$

$$N_{s0} = Ac \quad (162)$$

Eliminando las variables intermedias e y Ac , se tienen las ecuaciones finales que deben agregarse al modelo dinámico:

$$\frac{dAi}{dt} = T - T_{sp} \quad (163)$$

$$N_{s0} = Ab + Kp \left(T - T_{sp} + \frac{1}{\tau i} Ai \right) \quad (164)$$

Para la ganancia Kp se toma el valor 8.5 lb mol/(h °F), para el bias Ab el valor 1000 lb mol/h, para el tiempo integral el valor $V/F_0 = 0.152$ h, y para el *set point* se toma la temperatura del estado estacionario de operación $T_{sp} = 138.7$ °F.

La Figura 45 muestra el correspondiente listado en E-Z Solve para el caso en que la temperatura de alimentación T_0 desciende a 70 °F durante la operación del reactor (las condiciones iniciales son las pertenecientes al estado estacionario de operación).

```

// Reactor de propilenglicol
// Sistema ODEs
// Con control CT
CA' = F0*(CA0-CA)/V - r
CB' = F0*(CB0-CB)/V - r
CC' = F0*(CC0-CC)/V + r
CM' = F0*(CM0-CM)/V
Tr' = (F0*C0*Cp0*(T0-Tr)+V*r*(-DH)-Q)/(V*C*Cp)
Ai' = Tr-Tsp

// Sistema de ecuaciones algebraicas
r = alpha*exp(-E/(R*(Tr+460)))*CA // Tr debe estar en Rankine.
Q = UA*(Ts-Ts0)/ln((Tr-Ts0)/(Tr-Ts))
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
Ns0 = Ab+Kp*(Tr-Tsp+Ai/taoi)

// 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
UA = 16000

DH = -36000
alpha = 16.96e12
E = 32400
R = 1.987

Tsp = 138.7
Ab = 1000
Kp = 8.5
taoi = 0.152

```

Figura 45: Listado en E-Z Solve para el reactor con control de temperatura.

La Figura 46 presenta la evolución de la temperatura T del reactor para la perturbación simulada. Al contrario de lo que ocurrió con el reactor sin controlador (sección anterior), esta vez el reactor se recupera de dicha perturbación.

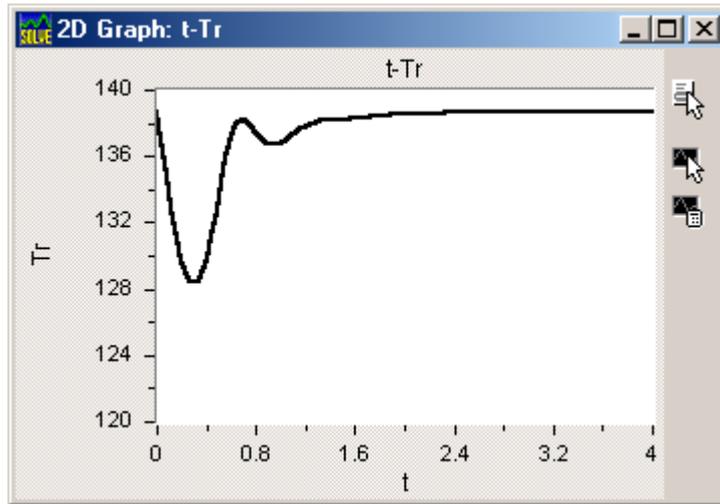


Figura 46: Respuesta del reactor controlado ante la perturbación $T_0 = 70$ °F.

La Figura 47 presenta la evolución de la variable manipulada N_{s0} . Debido a que esta variable no alcanza valores extremos, esta vez no fue necesario programar una función que considere la limitación física de la apertura de la válvula del refrigerante ($x_s \in [0,1]$).

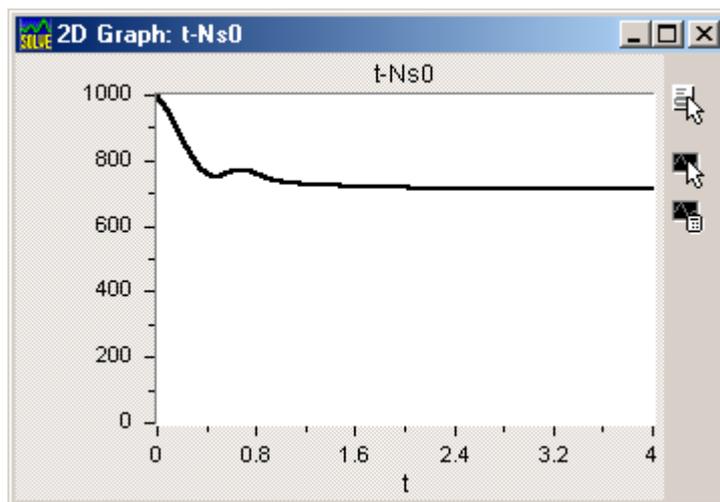


Figura 47: Evolución de la variable manipulada N_{s0} .

Instalación de un controlador de nivel

Inicialmente se supuso la existencia de un controlador de nivel ideal, en esta sección se eliminará esa restricción. Para ello, se agregarán al modelo dinámico las ecuaciones correspondientes a un controlador P+I que supervise el nivel (variable controlada) y manipule el caudal de salida (variable manipulada) a fin de mantener el nivel en un valor deseado L_{sp} . Las ecuaciones adicionales son:

$$\frac{dA_{iL}}{dt} = e_L \quad (165)$$

$$A_{cL} = A_{bL} + K_{pL} \left(e_L + \frac{1}{\tau_{iL}} A_{iL} \right) \quad (166)$$

$$e_L = L - L_{sp} \quad (167)$$

$$F = Ac_L \quad (168)$$

El caudal F de salida fue seleccionado como variable manipulada porque afecta directamente a la variable controlada, el nivel L , sin perturbar a la temperatura T . En cambio, si bien el caudal de alimentación F_0 también afecta directamente al nivel, tiene el inconveniente de perturbar a la temperatura. Por este motivo, se prefirió manipular el caudal de salida en lugar del caudal de entrada.

Eliminando las variables intermedias e_L y Ac_L , se tienen las ecuaciones finales que deben agregarse al modelo dinámico:

$$\frac{dA_{iL}}{dt} = L - L_{sp} \quad (169)$$

$$F = Ab_L + Kp_L \left(L - L_{sp} + \frac{1}{\tau_{iL}} A_{iL} \right) \quad (170)$$

Para la ganancia Kp_L se toma el valor $100 \text{ ft}^2/\text{h}$, para el bias Ab_L el valor $F_0 = 440.63 \text{ ft}^3/\text{h}$, para el tiempo integral el valor $V/F_0 = 0.152 \text{ h}$, y para el *set point* se toma el valor $L_{sp} = 3 \text{ ft}$.

Por otra parte, se deben agregar al modelo dinámico las siguientes ecuaciones para determinar el nivel:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{F_0 - F}{A} \quad (171)$$

$$V = AL \quad (172)$$

donde $A = 22.28 \text{ ft}^2$. La primera ecuación corresponde al balance global de materia. A pesar de que el modelo contiene los balances para todos los componentes, no es necesario eliminar ninguna de esas ecuaciones para agregar el balance global. Esto es posible debido a que no se incorporó en el modelo la ecuación algebraica que define la densidad; por lo tanto, el balance global de materia es una ecuación independiente a pesar de tener los balances de todos los componentes.

La Figura 48 muestra el correspondiente listado en E-Z Solve para simular una disminución del 10 % en el caudal de entrada F_0 durante la operación del reactor (las condiciones iniciales son las pertenecientes al estado estacionario de operación).

```
// Reactor de propilenglicol
// Sistema ODEs
// Con control CT y CL
// y una disminución de 10 % en F0
CA' = F0*(CA0-CA)/V - r
CB' = F0*(CB0-CB)/V - r
CC' = F0*(CC0-CC)/V + r
```

```

CM' = F0*(CM0-CM)/V
Tr' = (F0*C0*Cp0*(T0-Tr)+V*r*(-DH)-Q)/(V*C*Cp)
Ai' = Tr-Tsp
L' = (F0-F)/A
AiL' = L-Lsp

// Sistema de ecuaciones algebraicas
r = alpha*exp(-E/(R*(Tr+460)))*CA // Tr debe estar en Rankine.
Q = UA*(Ts-Ts0)/ln((Tr-Ts0)/(Tr-Ts))
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
Ns0 = Ab+Kp*(Tr-Tsp+Ai/taoi)
F = AbL+KpL*(L-Lsp+AiL/taoiL)
V = A*L

// Datos
F0 = 440.63*0.9
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
UA = 16000

DH = -36000
alpha = 16.96e12
E = 32400
R = 1.987

Tsp = 138.7
Ab = 1000
Kp = 8.5
taoi = 0.152

Lsp = 3
AbL = 440.63
KpL = 100
taoiL = 0.152

A = 22.28

```

Figura 48: Listado en E-Z Solve para el reactor con control de temperatura y de nivel.

La Figura 49 presenta la evolución de la temperatura T del reactor para la perturbación simulada, mientras la Figura 50 muestra la evolución del nivel L . En ambos casos, los controladores son capaces de estabilizar las variables controladas.

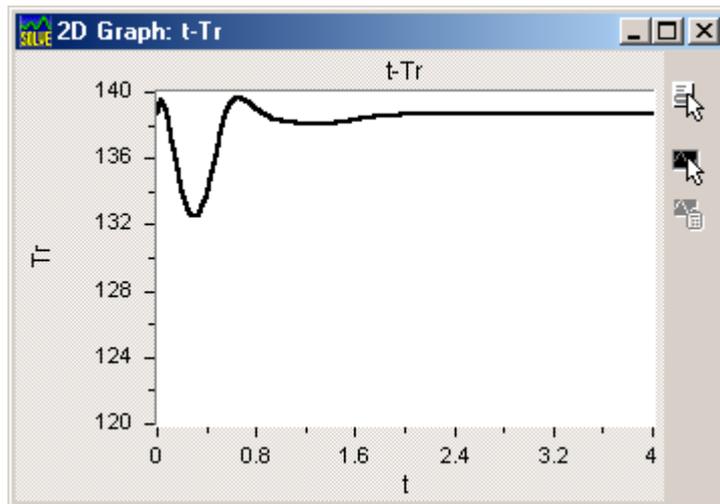


Figura 49: Respuesta de la temperatura T ante una disminución del 10 % en F_0 .

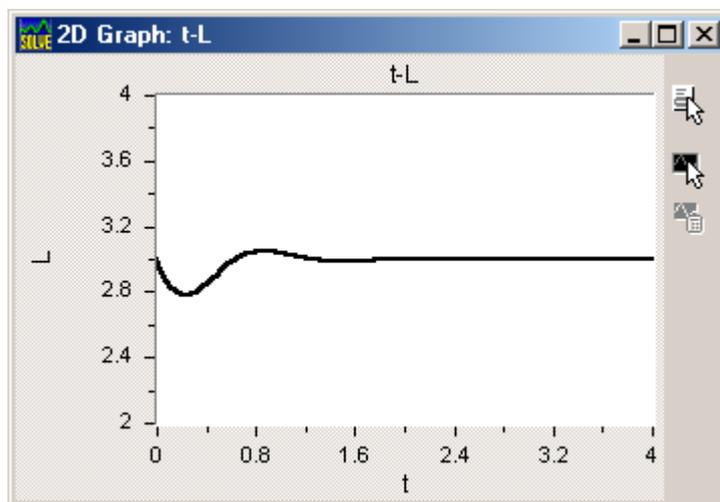


Figura 50: Respuesta del nivel L ante una disminución del 10 % en F_0 .

La Figura 51 presenta la evolución de la variable manipulada F . Debido a que esta variable no alcanza valores extremos, esta vez tampoco fue necesario programar una función que considere la limitación física de la apertura de la válvula de descarga ($x \in [0,1]$).

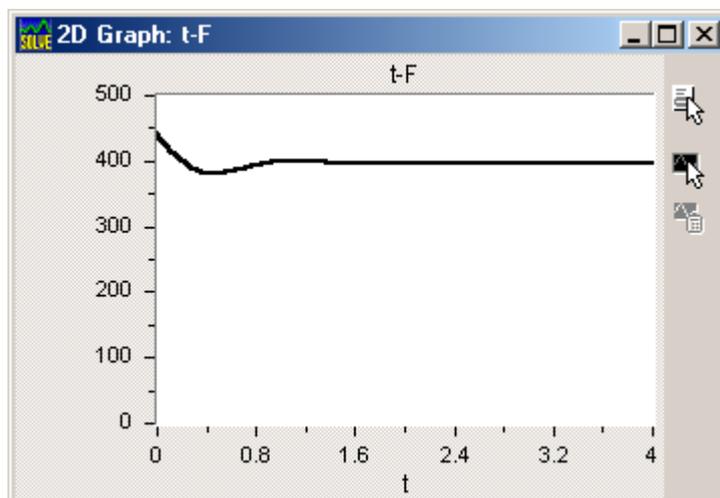


Figura 51: Evolución de la variable manipulada F .

Bibliografía

- Bequette B.W., 1998, "Process Dynamics - Modeling, Analysis, and Simulation", Prentice Hall, New Jersey.
- Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N., 1995, "Fenómenos de transporte", Reverté, Barcelona.
- Fogler H. S., 1999, "Elements of Chemical reaction Engineering - Third edition", Prentice Hall, New Jersey.
- Franks R.G.E., 1972, "Modeling and Simulation in Chemical Engineering", John Wiley & Sons, New York.
- Ingham J., Dunn I.J., Heinzle E., Prenosil J.E., 1995, "Chemical Engineering Dynamics - Modelling with PC Simulation", VCH, New York.
- Luyben W.L., 1990, "Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers - Second Edition", MacGraw-Hill, New York.
- Ogunnaike B.A., Ray W.H., 1994, "Process dynamics, modeling, and control", Oxford University Press, New York.
- Reid R.C., Prausnitz J.M., Poling B.E., 1987, "The properties of Gases & Liquids - Fourth Edition", Mc Graw Hill, Boston.
- Seider W.D., Seader J.D., Lewin D.R., 1999, "Process Design Principles", John Wiley & Sons, New York.
- Tarifa E.E., 1995, "Diagnosis en Plantas Químicas Complejas: Plantas de Grandes Dimensiones y Procesos Batch", Tesis doctoral, Universidad Nacional del Litoral (UNL), Santa Fe, Argentina.
- Turton R., Bailie R., Whiting W., Shaeiwitz J., 1998, "Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes", Prentice Hall, New Jersey.