

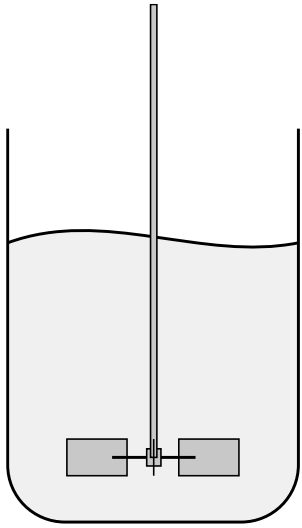
# DSOySP

## **Modelado individual de equipos en estado dinámico (II)**

2024

Profesor: Dr. Nicolás J. Scenna  
Profesor : Dr. Néstor H. Rodríguez  
JTP: Dr. Juan I. Manassaldi

# Reactor Batch



*Hipótesis:*

- Sistema adiabático
- Volumen constante
- Dos reacciones químicas en serie:



$$\begin{aligned} r_1 &= k_1 \\ r_2 &= k_2 C_B \end{aligned}$$

$$r_i = \sum_{j=1}^{NR} a_{ij} \times r_j \rightarrow i = A, B, C \quad j = r_1, r_2$$

$$\left\{ \begin{aligned} r_A &= (-1)k_1 + (0)k_2 C_B \\ r_B &= (1)k_1 + (-1)k_2 C_B \\ r_C &= (0)k_1 + (1)k_2 C_B \end{aligned} \right.$$

# Reacción de 1er. Orden en un Reactor Batch

- Balance de materia de los reactivos en el reactor:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{velocidad de variación} \\ \text{de moles del componente i} \\ \text{dentro del sistema} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{Flujo de moles} \\ \text{del componente i} \\ \text{que ingresan al sistema} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Flujo de moles} \\ \text{del componente i} \\ \text{que abandonan el sistema} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{velocidad de formación} \\ \text{de moles del componente i} \\ \text{por reacción química} \end{array} \right]$$

Acumulación = ~~Entrada~~ - ~~Salida~~ + Generación  $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$

$$\frac{dM_A}{dt} = r_A V \quad r_A = -k_1$$

$$V \frac{dC_A}{dt} = -k_1 V$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1$$

## Reacción de 1er. Orden en un Reactor Batch

- Balance de materia de los reactivos en el reactor:

Acumulación = ~~Entrada~~ - ~~Salida~~ + Generación      $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$

$$\frac{dM_B}{dt} = r_B V \quad r_B = k_1 - k_2 C_B$$

$$V \frac{dC_B}{dt} = k_1 V - k_2 C_B V$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 - k_2 C_B$$

## Reacción de 1er. Orden en un Reactor Batch

- Balance de materia de los reactivos en el reactor:

Acumulación = ~~Entrada~~ - ~~Salida~~ + Generación      $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$

$$\frac{dM_C}{dt} = r_C V \quad r_C = k_2 C_B$$

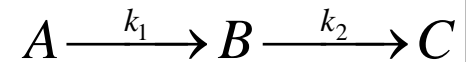
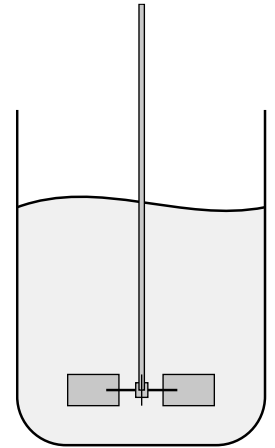
$$V \frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B V$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B$$

# Reacción de 1er. Orden en un Reactor Batch

Ejemplo practico:

- $k_1 = 0.5 \text{ mol}/(\text{litro min})$
- $k_2 = 0.3 \text{ min}^{-1}$
- La concentración inicial es de A es  $C_{A0} = 2 \text{ mol/litro}$



$$\frac{dC_A}{dt} = -0.5$$

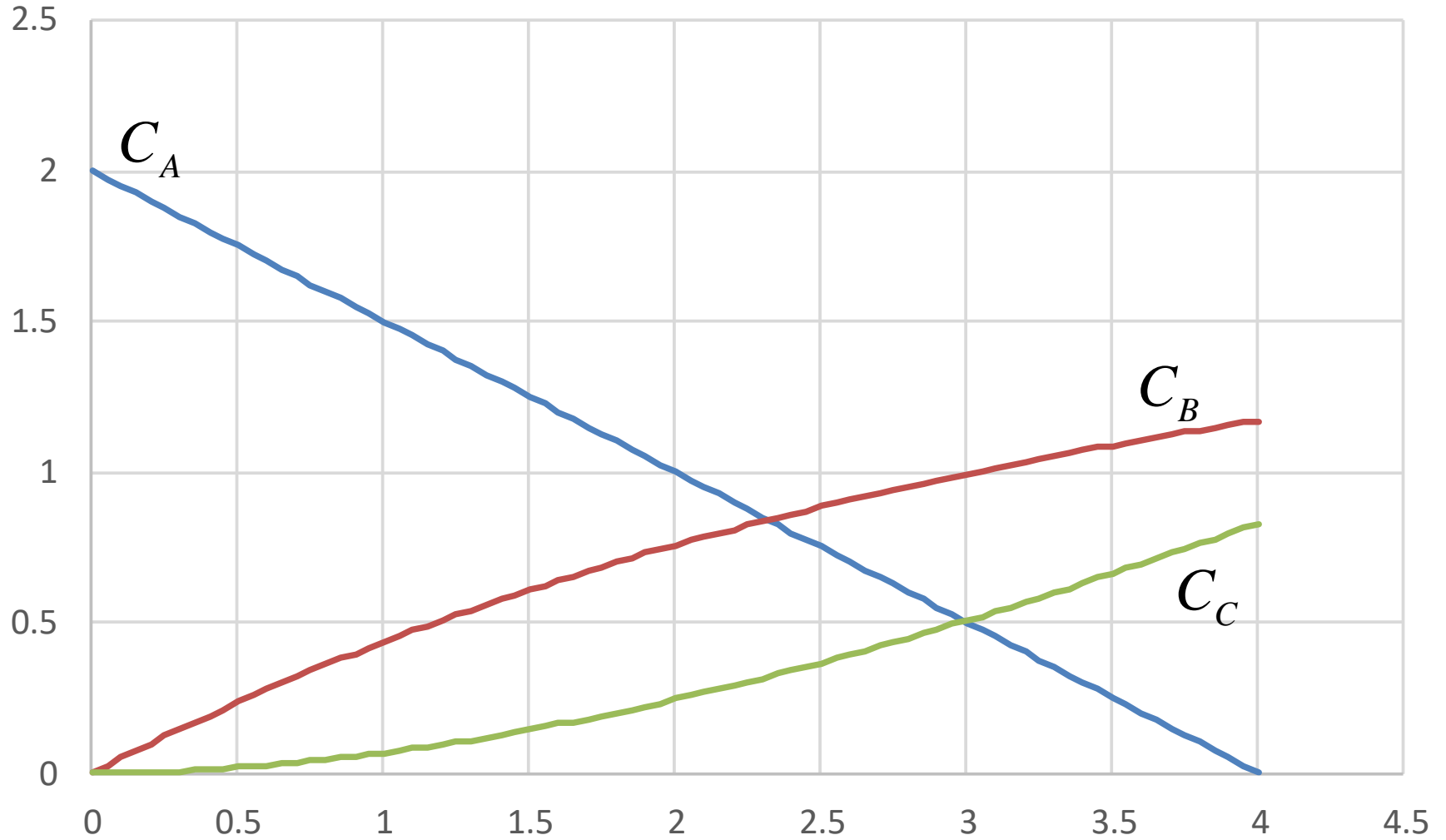
$$\frac{dC_B}{dt} = 0.5 - 0.3C_B$$

$$\frac{dC_C}{dt} = 0.3C_B$$

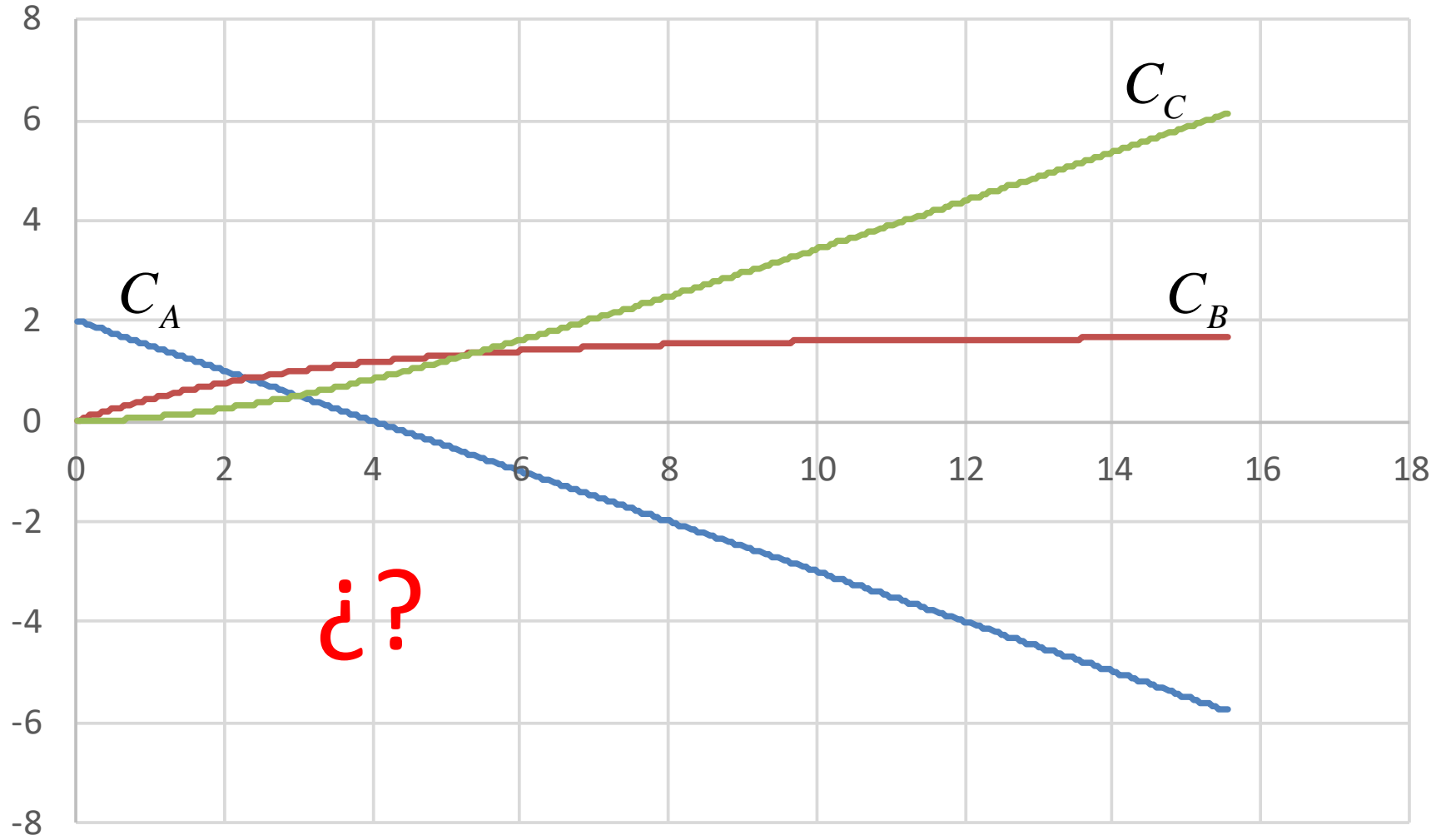
$$t = 0$$

$$C_A = 2; C_B = 0; C_C = 0$$

# Ejemplo Reactor Batch

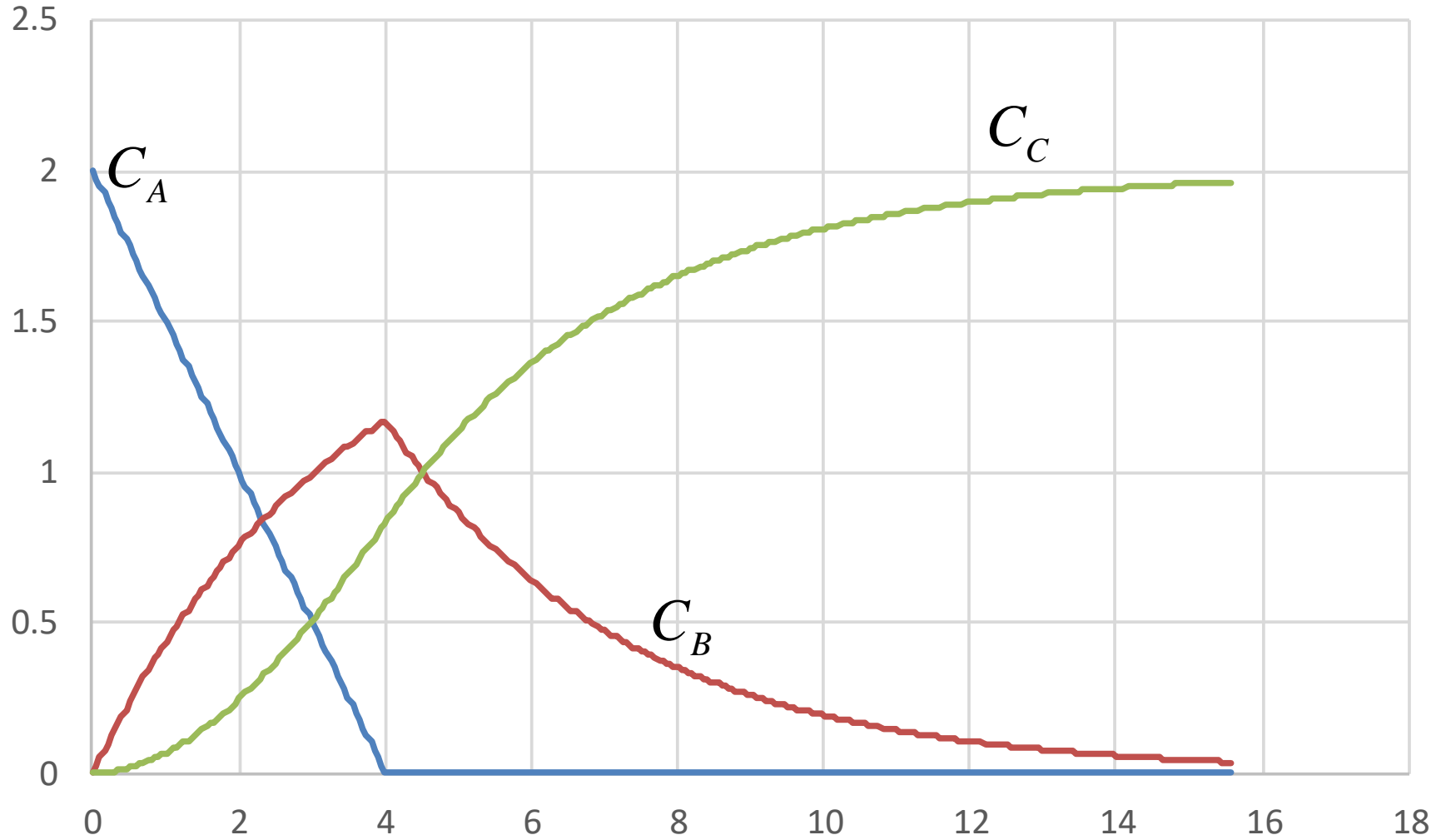


# Ejemplo Reactor Batch





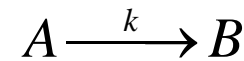
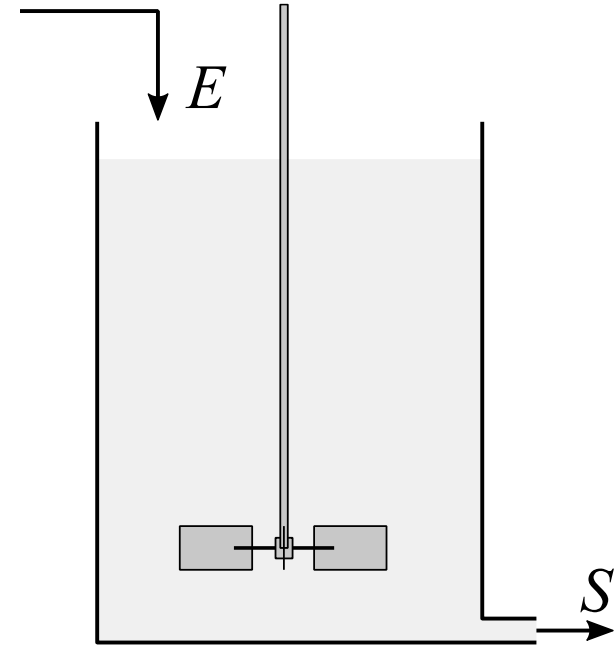
# Ejemplo Reactor Batch



# CSTR

## *Hipótesis:*

- Sistema adiabático e isotérmico
- Densidad constante
- Reacción química de 1er Orden
- Mezcla perfecta
- Se desprecia la evaporación
- Tanque cilíndrico
- Salida gravitatoria



$$r_1 = k_1 c_A$$

$$r_A = -k_1 c_A$$

# CSTR

- Balance global de materia (base másica):

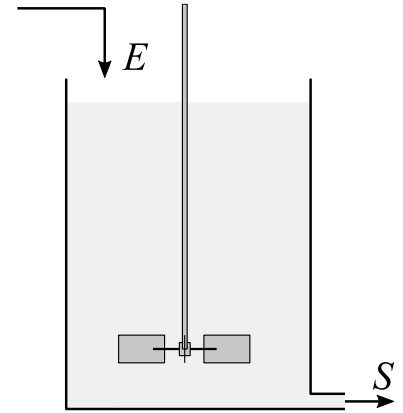
Acumulación = Entrada – Salida

$$\frac{dM}{dt} = m^E - m^S$$

$$M = \rho A_T h \rightarrow \frac{dM}{dt} = \rho A_T \frac{dh}{dt}$$

$$\cancel{\rho A_T} \frac{dh}{dt} = \cancel{\rho} E - \cancel{\rho} A_s \sqrt{2gh}$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh}$$



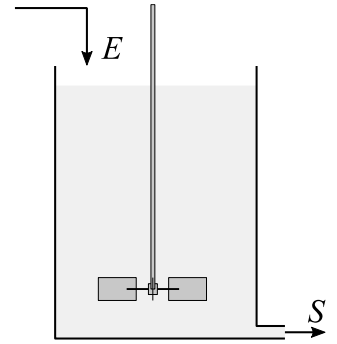
Caudal

# CSTR

- Balance de materia por componentes (base molar):

Acumulación = Entrada – Salida + Generación

$$\frac{dM_A}{dt} = m_A^E - m_A^S + r_A V \quad \left[ \frac{\text{moles}_A}{\text{tiempo}} \right]$$



$$M_A = c_A V = c_A A_T h$$

$$\frac{dM_A}{dt} = \frac{dc_A A_T h}{dt} = A_T \frac{dc_A h}{dt} = A_T c_A \frac{dh}{dt} + A_T h \frac{dc_A}{dt}$$

$$A_T c_A \frac{dh}{dt} + A_T h \frac{dc_A}{dt} = m_A^E - m_A^S + r_A A_T h$$

# CSTR

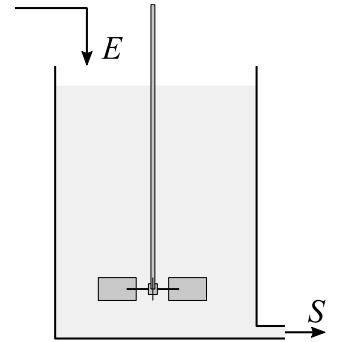
- Balance de materia por componentes (base molar):

$$A_T c_A \frac{dh}{dt} + A_T h \frac{dc_A}{dt} = m_A^E - m_A^S + r_A A_T h$$

$$A_T c_A \frac{dh}{dt} + A_T h \frac{dc_A}{dt} = E c_A^E - S c_A - k_1 c_A A_T h$$

$$A_T c_A \frac{dh}{dt} + A_T h \frac{dc_A}{dt} = E c_A^E - A_s \sqrt{2gh} c_A - k_1 c_A A_T h$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh}$$



# CSTR

- Balance de materia por componentes (base molar):

$$A_T c_A \left( \frac{E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh} \right) + A_T h \frac{dc_A}{dt} = E c_A^E - A_s \sqrt{2gh} c_A - k_1 c_A A_T h$$

$$c_A E - c_A A_s \sqrt{2gh} + A_T h \frac{dc_A}{dt} = E c_A^E - A_s \sqrt{2gh} c_A - k_1 c_A A_T h$$

$$c_A E + A_T h \frac{dc_A}{dt} = E c_A^E - k_1 c_A A_T h$$

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{E}{A_T h} (c_A^E - c_A) - k_1 c_A$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh}$$

Datos o parámetros:

$$E \quad A_T \quad A_s \quad c_A^E \quad k_1$$

Condiciones iniciales:

$$h^{(0)} \quad c_A^{(0)}$$

# Balance de energía en sistemas dinámicos

- Balance de energía global de un sistema dinámico:

$$\begin{aligned} & \left[ \begin{array}{l} \text{Flujo de energía} \\ \text{interna, cinética y/o potencial} \\ \text{que ingresa al sistema} \\ \text{por conveccion o difusion} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{Flujo de energía} \\ \text{interna, cinética y/o potencial} \\ \text{que abandona el sistema} \\ \text{por conveccion o difusion} \end{array} \right] \\ & \left[ \begin{array}{l} \text{Calor que ingresa al sistema} \\ \text{por conduccion, radiacion y/o reaccion} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{Trabajo realizado por el sistema} \\ \text{sobre sus alrededores} \\ \text{(Trabajo de Eje o mecanico y PV)} \end{array} \right] \\ & = \left[ \begin{array}{l} \text{velocidad de variación de la energía} \\ \text{interna, cinética y/o potencial} \\ \text{dentro del sistema} \end{array} \right] \end{aligned}$$

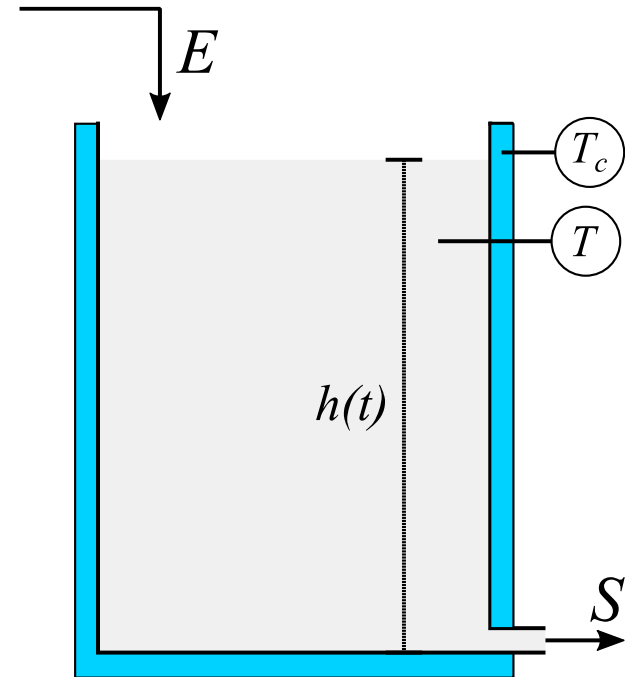
Las unidad de esta ecuación es energía/tiempo



## Ejemplo: Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento

### *Hipótesis asumida:*

- Densidad constante
- No hay reacción química
- Se desprecia la evaporación
- Tanque cilíndrico
- Altura inicial conocida
- Temperatura inicial conocida
- Líquido perfectamente mezclado
- Se supone constante la temperatura de la camisa de calentamiento
- Calor específico del fluido constante





# Ejemplo: Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento

- Balance de materia en el tanque:

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} = m_E - m_S$$

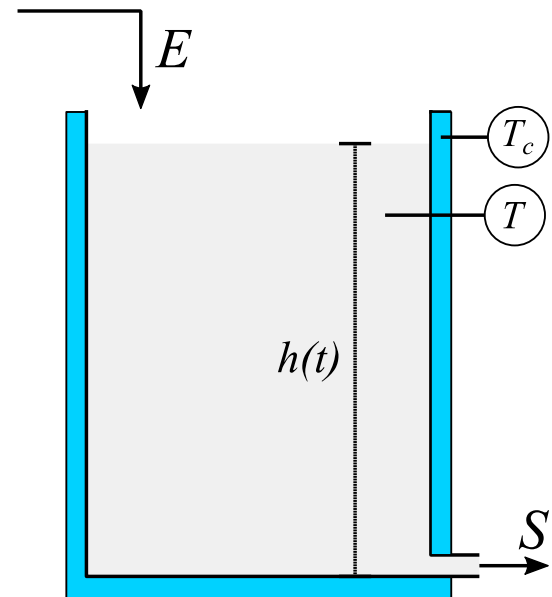
$$\frac{dM_T}{dt} = m_E - m_S$$

HOLDUP materia del tanque

Flujo másico de cada corriente

$$\frac{dh}{dt} = \frac{F_E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh}$$

EDO 1



# Ejemplo: Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento

- Balance de energía en el tanque:

HOLDUP de materia

Las propiedades de salida son idénticas a la del interior del tanque

$$\frac{dM(U + \cancel{K} + \cancel{\phi})}{dt} = Q + m_E(U_E + \cancel{K}_E + \cancel{\phi}_E) - m_S(U + \cancel{K} + \cancel{\phi}) + m_E P_E v_E - m_S P_S v$$

$$\frac{dMU}{dt} = Q + m_E(U_E + P_E v_E) - m_S(U + P_S v)$$

$$\frac{dMU}{dt} = Q + m_E H_E - m_S H$$

$$\frac{dMH}{dt} = Q + m_E H_E - m_S H$$

Para líquidos el término  $Pv$  es despreciable frente a  $U$  por lo que se sigue la evolución de la entalpía del sistema

HOLDUP de energía

$MH$  → Entalpía total del fluido dentro del tanque

$m_e H_e$  → Entalpía total de entrada de fluido

$m_s H_s$  → Entalpía total de salida de fluido

$Q$  → Calor que ingresa por la camisa

Ejemplo: Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento

$$\frac{dMH}{dt} = Q + m_E H_E - m_S H$$

$$\frac{dM}{dt} H + M \frac{dH}{dt} = Q + m_E H_E - m_S H$$

$$M = \rho V = \rho A_T h \rightarrow \frac{dM}{dt} = \rho A_T \frac{dh}{dt}$$

$$m_E = \rho F_E$$

$$m_S = \rho F_S = \rho A_s \sqrt{2gh}$$

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} H + \rho A_T h \frac{dH}{dt} = Q + \rho F_E H_e - \rho A_s \sqrt{2gh} H$$

## Ejemplo: Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento

$$\frac{dh}{dt} = \frac{F_E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh}$$

EDO 1

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} H + \rho A_T h \frac{dH}{dt} = Q + \rho F_E H_E - \rho A_s \sqrt{2gh} H$$

EDO 2

$$H = f(T)$$

$Q =$  Constante o ley funcional

## Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento I

$$\frac{dh}{dt} = \frac{F_E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh}$$

EDO 1

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} H + \rho A_T h \frac{dH}{dt} = Q + \rho F_E H_E - \rho A_s \sqrt{2gh} H$$

EDO 2

$$H = f(T)$$

$$Q = \text{Constante}$$

$t \rightarrow$  Variable independiente (tiempo)

$h \rightarrow$  Variable dependiente (altura)

$H \rightarrow$  Variable dependiente (entalpía)

## Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento I (Resolución)

- Tenemos un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas a un sistema de ecuaciones algebraicas.
- En este ejemplo simple tenemos dos EDOs y una ecuación algebraica.
- Para resolver el problema se necesitan los valores de las condiciones iniciales de las variables diferenciales (o sea al tiempo inicial).
- El objetivo es poder calcular los diferenciales para cada instante de tiempo.

$$\frac{dh}{dt} = \frac{F_E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh}$$

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} H + \rho A_T h \frac{dH}{dt} = Q + \rho F_E H_E - \rho A_s \sqrt{2gh} H$$

$$H = f(T)$$

Datos o parámetros:  $F_E$   $A_T$   $A_s$   $Q$   $\rho$   $H_E$

Condiciones iniciales:  $h^{(0)}$   $H^{(0)}$

## Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento I (Resolución)

$$h^{(0)} \quad H^{(0)} \leftarrow$$

$$H = f(T) \rightarrow T^{(0)}$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{F_E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh} \rightarrow \left( \frac{dh}{dt} \right)^{(0)}$$

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} H + \rho A_T h \frac{dH}{dt} = Q + \rho F_E H_E - \rho A_s \sqrt{2gh} H \rightarrow \left( \frac{dH}{dt} \right)^{(0)}$$

$$h^{(1)} = h^{(0)} + \left( \frac{dh}{dt} \right)^{(0)} \Delta t$$

$$H^{(1)} = H^{(0)} + \left( \frac{dH}{dt} \right)^{(0)} \Delta t$$

Repetimos para el instante (1) y así sucesivamente hasta el tiempo final

## Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento II

$$\frac{dh}{dt} = \frac{F_E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh}$$

EDO 1

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} H + \rho A_T h \frac{dH}{dt} = Q + \rho F_E H_E - \rho A_s \sqrt{2gh} H$$

EDO 2

$$H = f(T)$$

$$Q = UA(T_c - T)$$

$t \rightarrow$  Variable independiente (tiempo)

$h \rightarrow$  Variable dependiente (altura)

$H \rightarrow$  Variable dependiente (entalpía)



## Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento I (Resolución)

$$\frac{dh}{dt} = \frac{F_E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh}$$

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} H + \rho A_T h \frac{dH}{dt} = Q + \rho F_E H_E - \rho A_s \sqrt{2gh} H$$

$$H = f(T)$$

$$Q = UA(T_c - T)$$

Datos o parámetros:  $F_E$   $A_T$   $A_s$   $UA$   $\rho$   $H_E$   $T_c$

Condiciones iniciales:  $h^{(0)}$   $H^{(0)}$

## Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio y calentamiento I (Resolución)

$$h^{(0)} \quad H^{(0)} \leftarrow$$

$$H = f(T) \rightarrow T^{(0)}$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{F_E}{A_T} - \frac{A_s}{A_T} \sqrt{2gh} \rightarrow \left( \frac{dh}{dt} \right)^{(0)}$$

$$Q = UA(T_c - T) \rightarrow Q^{(0)}$$

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} H + \rho A_T h \frac{dH}{dt} = Q + \rho F_E H_E - \rho A_s \sqrt{2gh} H \rightarrow \left( \frac{dH}{dt} \right)^{(0)}$$

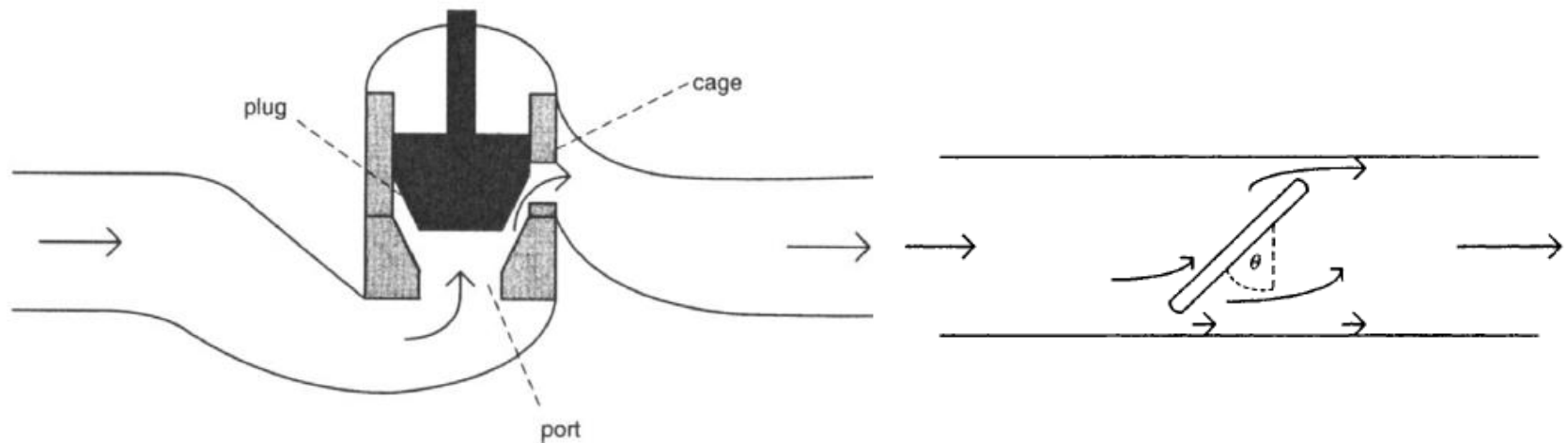
$$h^{(1)} = h^{(0)} + \left( \frac{dh}{dt} \right)^{(0)} \Delta t$$

$$H^{(1)} = H^{(0)} + \left( \frac{dH}{dt} \right)^{(0)} \Delta t$$

Repetimos para el instante (1) y así sucesivamente hasta el tiempo final

# Representación matemática de Válvulas de control (líquidos)

- Las válvulas de control ajustan el caudal cambiando el tamaño y la forma del área de flujo ofrecida al fluido que pasa a través de ella.
- Hay dos categorías principales de válvulas de control utilizadas:
  - Válvulas de globo. El área de flujo viene dictada por la posición del obturador de la válvula con respecto a su asiento.
  - Válvulas rotativas. El área de flujo depende de la posición angular de un disco o esfera con muescas dentro de un marco tubular.



## Representación matemática de Válvulas de control (líquidos)

- Anteriormente definimos la capacidad de una válvula a partir de su  $K_v$  (o  $C_v$ ).

$$Q = K_v \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$

- Ahora, el  $K_v$  (o  $C_v$ ) varía con la apertura de la válvula. Cuando la válvula está abierta al 100%, el coeficiente es el mayor que puede tener esa válvula en particular.
- Para otras aperturas existen otros  $K_v$  (siempre menores que el  $K_v$  máximo), y su relación con la apertura se pueden encontrar tabulada por cada fabricante para cada modelo de válvula.
- Todas las válvulas de control tienen una característica de flujo que define la relación entre la apertura de la válvula y el caudal que deja pasar a  $\Delta P$  constante y se la conoce como “característica inherente”.

Fuente: Di Ciancia, Guido - AADECA REVISTA - Marzo-Abril 2017 – Pág. 46

[https://www.editores-srl.com.ar/sites/default/files/aa4\\_di\\_ciancia\\_coeficiente\\_valvula.pdf](https://www.editores-srl.com.ar/sites/default/files/aa4_di_ciancia_coeficiente_valvula.pdf)

## Representación matemática de Válvulas de control (líquidos)

- Existen tres características inherentes comúnmente utilizadas: **lineal**, **igual porcentaje** y **apertura rápida**.
- En las válvulas con característica **lineal** el caudal (kv o cv) crecerá linealmente con la apertura (a delta  $\Delta P$  constante).
- En las válvulas con característica **igual porcentaje** (equal percentage = %), ante una variación de apertura, la variación de caudal (kv o cv) es un porcentaje de caudal circulante. Para una misma variación de apertura: a bajo caudal, los incrementos serán pequeños y a alto caudal, los incrementos serán grandes. Es una de las características inherentes más comúnmente seleccionadas para aplicaciones de control.
- En las válvulas con característica **apertura rápida**, el caudal aumenta rápidamente, con una pequeña variación en la posición al comenzar a abrirse la válvula.

# Representación matemática de Válvulas de control (líquidos)

- Por lo tanto, el caudal circulante por la válvula corresponde a la siguiente expresión:

$$Q = \left( \frac{K_v}{K_{v \max}} \right) K_{v \max} \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$

$Q$  → Caudal volumetrico que atravieza la válvula [ $m^3/h$ ]

$\Delta P$  → Diferencia de presión a traves de la válvula [ $bar$ ]

$G$  → Gravedad específica del fluido [ $adim$ ]

$K_v$  → Coeficiente (actual) de la válvula


$K_{v \max}$  → Coeficiente (apertura total) de la válvula

- Pero como se mencionó, la relación entre el Kv actual y el Kv máximo es función de la apertura de la válvula, por lo que:

$$\left( \frac{K_v}{K_{v \max}} \right) = f(x) \rightarrow Q = f(x) K_{v \max} \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$

$x$  → Apertura de la válvula [ $0-1$ ] o [ $0\% -100\%$ ]

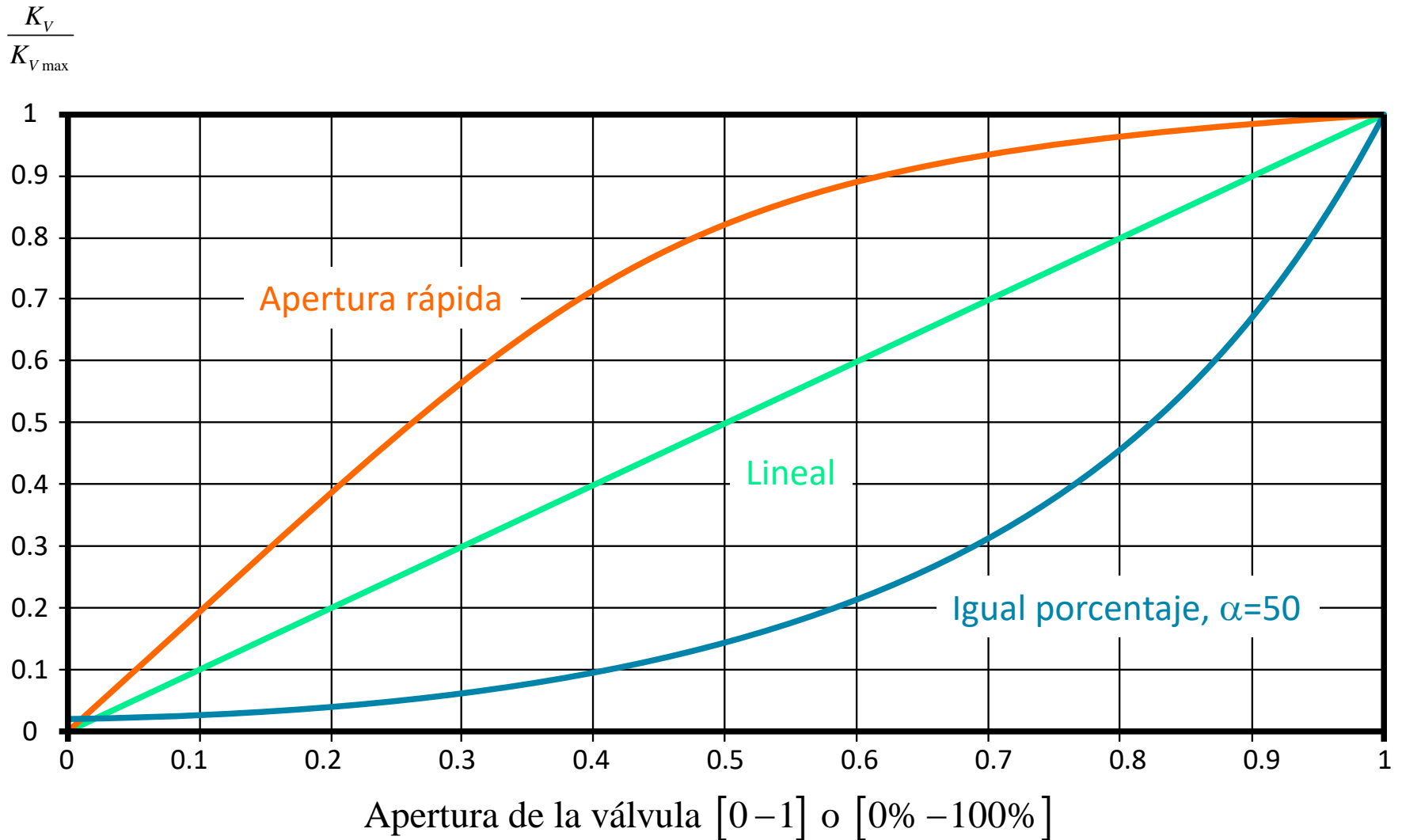
## Representación matemática de Válvulas de control (líquidos)

- Las dos características más comunes de las válvulas de globo son lineal y de igual porcentaje.
  - Lineal:  $f(x) = x$
  - Igual porcentaje:  $\frac{df(x)}{dx} = k_1 f(x) \rightarrow f(x) = \alpha^{x-1}$   
Rango de la válvula 
- Finalmente, según el caso utilizaremos cualquiera de las siguientes expresiones:

$$Q = x K_{V \max} \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$

$$Q = \alpha^{x-1} K_{V \max} \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$

# Curva característica





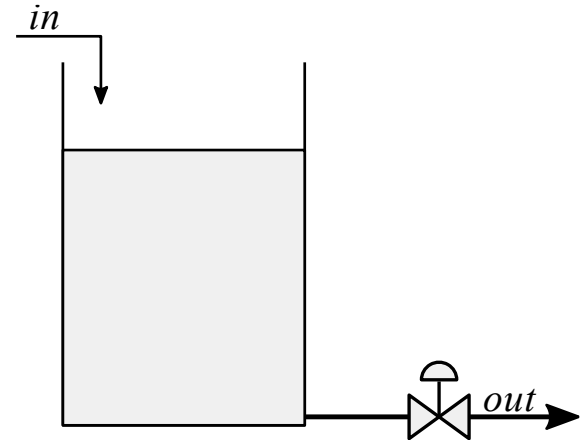
## Representación matemática de Válvulas de control (líquidos)

- Es importante destacar que en general omitiremos la dinámica de las válvulas. Es decir, su evolución entre diferentes aperturas será instantánea.
- Está claro que en la realidad una válvula no pasa de manera instantánea de una apertura a otra sin pasar por aperturas intermedias.
- De todas maneras, frente a la dinámica del sistema podemos asumir (en algunos casos) esta hipótesis sin cometer un gran error.
- Para determinadas condiciones las expresiones anteriores pueden extenderse a gases.
- Para mas información se sugiere consultar bibliografía específica.

# Tanque abierto con descarga regulada por una válvula

## Hipótesis

- Sistema adiabático
- La densidad es constante
- Evaporación despreciable
- No hay reacción química
- Tanque cilíndrico
- Válvula de apertura lineal
- Presión sobre el líquido y de descarga similares



# Tanque abierto con descarga regulada por una válvula

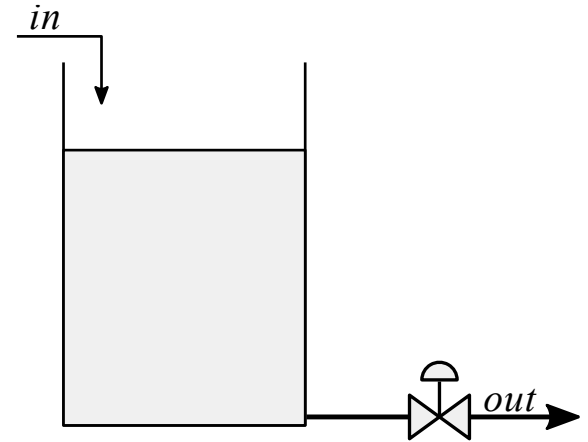
$$\frac{dM}{dt} = m_{in} - m_{out}$$

$$\rho A_T \frac{dh}{dt} = \rho Q_{in} - \rho Q_{out}$$

$$A_T \frac{dh}{dt} = Q_{in} - Q_{out}$$

$$Q_{out} = x K_{V \max} \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$

$$\Delta P = P_0 + \rho gh - P_0 = \rho gh$$

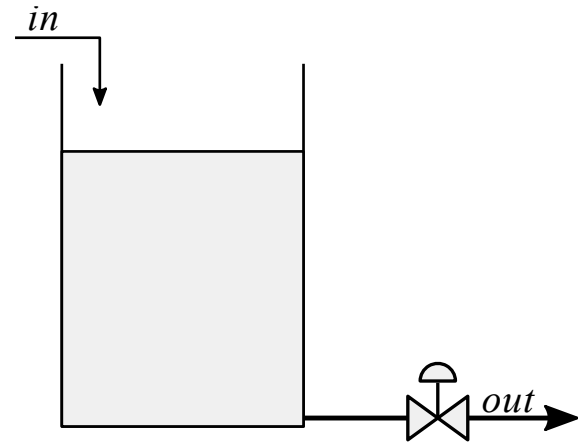


# Tanque abierto con descarga regulada por una válvula

$$\frac{dh}{dt} = \frac{Q_{in} - Q_{out}}{A_T}$$

$$\Delta P = \rho g h$$

$$Q_{out} = x K_{V \max} \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$

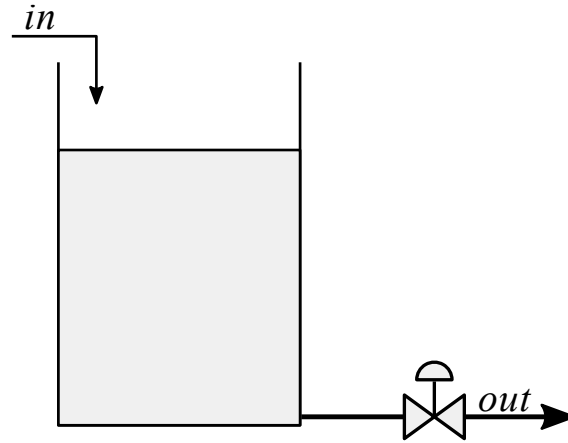


## Ejemplo numérico

$$\frac{dh}{dt} = \frac{Q_{in} - Q_{out}}{A_T}$$

$$\Delta P = \rho g h$$

$$Q_{out} = x K_{V \max} \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$



$$Q_{in} = 0.01 \text{ m}^3/\text{s} \quad G = 1$$

$$A_T = 1 \text{ m}^2$$

$$K_{V \max} = 400$$

$$h_T = 2 \text{ m}$$

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

# Contemplando la dinámica de las válvulas

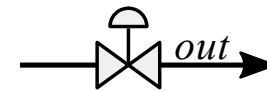
La válvula está manipulada por un mecanismo que modifica la apertura desde la posición actual  $x$  hacia la posición solicitada  $x_d$ .

Este mecanismo requerirá un cierto tiempo para mover la válvula desde la posición actual hacia la deseada.

El modelo más simple para representar esta dinámica corresponde a:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x_d - x}{\tau}$$

“First-Order exponential Lag”



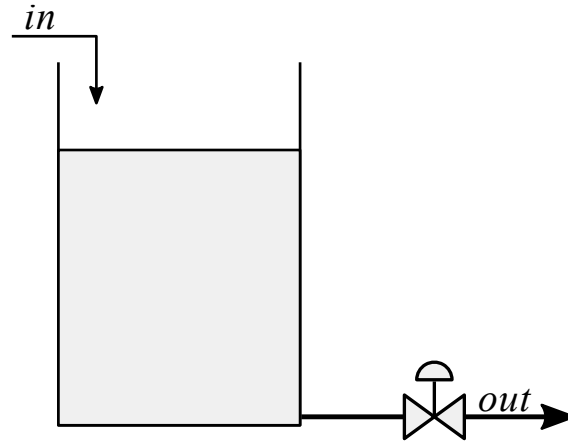
## Ejemplo numérico

$$\frac{dh}{dt} = \frac{Q_{in} - Q_{out}}{A_T}$$

$$\Delta P = \rho g h$$

$$Q_{out} = x K_{Vmax} \sqrt{\frac{\Delta P}{G}}$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x_d - x}{\tau}$$



$$Q_{in} = 0.01 \text{ m}^3/\text{s} \quad G = 1$$

$$A_T = 1 \text{ m}^2$$

$$K_{Vmax} = 400$$

$$h_T = 2 \text{ m}$$

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