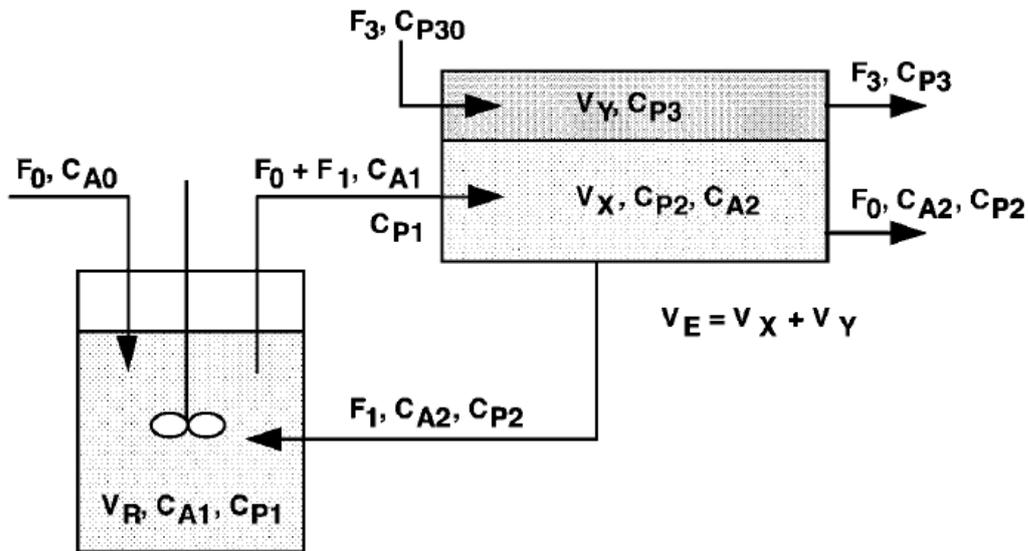


ENTREGA 2

DCP 2024

La reacción $A \rightarrow P$ se lleva a cabo en un RCAI isotérmico y presenta una cinética de inhibición por producto $r_A = \frac{k C_A}{1 + \frac{C_P}{K_I}}$ por lo cual se le acopla un sistema de extracción líquido-líquido según el siguiente esquema:



La transferencia entre fases en la unidad de separación está dada por el flujo $J = K_V V_E (C_{P3}^* - C_{P3})$ donde $C_{P3}^* = m C_{P2}$

El reactivo A no es removido en la extracción y puede asumirse que la reacción se interrumpe en el sistema de extracción. Puede definirse la relación de reciclo $R = F_1/F_0$, que se puede regular. También se puede ajustar el caudal del solvente de extracción F_3 , pero el resto del sistema, incluyendo la corriente de entrada (en caudal y concentración) están fijados. El interés principal es monitorear la concentración del producto C_{P3} .

- Deduzca las ecuaciones del modelo.
- Partiendo de todo el sistema lleno solo de solvente, grafique la evolución de las variables de estado.
- Verifique formalmente que el sistema es estable en el (o los) punto(s) de estado estacionario.
- Halle la función de transferencia del sistema de la salida a monitorear C_{P3} respecto a la relación de reciclo.
- Aproxime la función anterior a una función de transferencia de orden 2.
- Suponga que la relación de reciclo salta abruptamente de $R = 2.0$ a $R = 2.5$. Grafique la evolución de C_{P3} sin y con aproximación.

Valores de referencia:

$$\begin{array}{llllll}
 F_0 = 100 \text{ L/h} & F_3 = 25 \text{ L/h} & R = 2 & k = 2.3 \text{ h}^{-1} & K_I = 0.5 \text{ mol/L} & C_{P30} = 0 \text{ mol/L} \\
 V_R = 200 \text{ L} & V_X = 20 \text{ L} & V_Y = 10 \text{ L} & C_{A0} = 2.0 \text{ mol/L} & K_V = 23 \text{ h}^{-1} & m = 0.75
 \end{array}$$

RESOLUCIÓN

- a) A partir de los balances de masa en el reactor y en las dos secciones del separador, consideradas como de mezcla completa cada una

$$\frac{dC_{A1}}{dt} = \frac{F_0}{V_R} (C_{A0} + RC_{A2} - (1 + R)C_{A1}) - r_{A1}$$

$$\frac{dC_{P1}}{dt} = \frac{F_0}{V_R} (RC_{P2} - (1 + R)C_{P1}) + r_{A1}$$

$$\frac{dC_{A2}}{dt} = \frac{F_0}{V_X} (1 + R)(C_{A1} - C_{A2})$$

$$\frac{dC_{P2}}{dt} = \frac{F_0}{V_X} [(1 + R)(C_{P1} - C_{P2})] - K_V \frac{(V_X + V_Y)}{V_X} (C_{P3}^* - C_{P2})$$

$$\frac{dC_{P3}}{dt} = \frac{F_3}{V_Y} (C_{P30} - C_{P3}) + K_V \frac{(V_X + V_Y)}{V_Y} (C_{P3}^* - C_{P3})$$

$$\text{con } r_{A1} = \frac{k C_{A1}}{1 + \frac{C_{P1}}{K_I}}$$

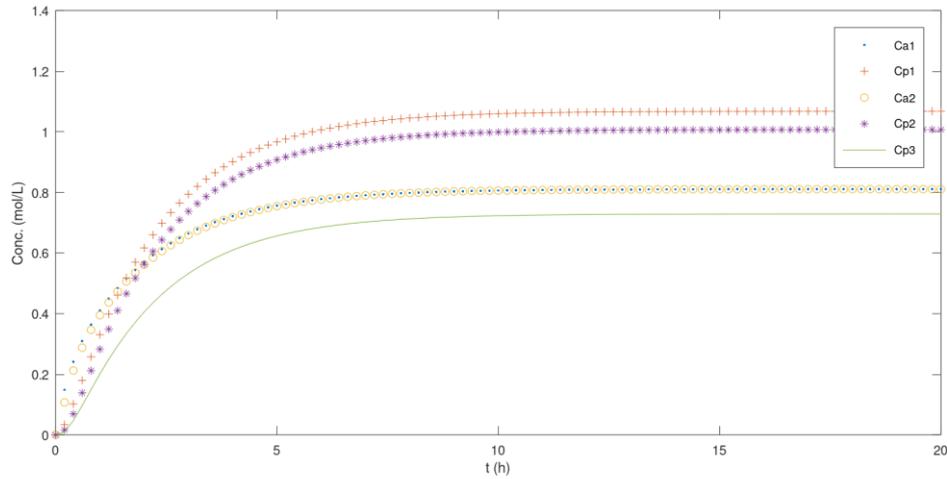
(Obsérvese que a t infinito CA1 y CA2 son iguales)

b)

```

2 F0 = 100; F3 = 25; % L/h
3 R = 2;
4 k = 2.3; % h-1
5 KI = 0.5; % mol/L
6 VR = 200; VX = 20; VY = 10; % L
7 Ca0 = 2; % mol/L
8 K = 23; % h-1
9 m = 0.75;
10
11 function dx_dt = entrega2(x,t,F0,F3,R,k,KI,VR,VX,VY,Ca0,K,m)
12     Ca1 = x(1); Cp1 = x(2); Ca2 = x(3); Cp2 = x(4); Cp3 = x(5);
13     F1 = R*F0; VE = VX + VY; Cp31 = m*Cp2;
14
15     dCa1_dt = 1/VR*(F0*Ca0 + F1*Ca2 - (F0+F1)*Ca1) - k*Ca1/(1+Cp1/KI);
16     dCp1_dt = 1/VR*(F1*Cp2 - (F0+F1)*Cp1) + k*Ca1/(1+Cp1/KI);
17     dCa2_dt = 1/VX*(F0+F1)*(Ca1-Ca2);
18     dCp2_dt = 1/VX*((F0+F1)*(Cp1-Cp2) - K*VE*(Cp31-Cp3));
19     dCp3_dt = 1/VY*(-F3*Cp3 + K*VE*(Cp31-Cp3));
20
21     dx_dt = [dCa1_dt dCp1_dt dCa2_dt dCp2_dt dCp3_dt];
22 endfunction
23
24 t = linspace(0,20,101);
25 x0 = zeros(1,5);
26 x = lsode(@(x,t) entrega2(x,t,F0,F3,R,k,KI,VR,VX,VY,Ca0,K,m),x0,t);
27 plot(t,x(:,1),'.',t,x(:,2),'+',t,x(:,3),'o',t,x(:,4),'*',t,x(:,5))
28 xlabel('t (h)'); ylabel('Conc. (mol/L)')
29 legend('Ca1','Cp1','Ca2','Cp2','Cp3')

```



c)

$$A(1,1) = -\frac{(1+R)F_0}{V_R} - \frac{k}{1+C_{P1s}/K_I} \quad A(1,2) = \frac{kC_{A1s}}{K_I(1+C_{P1s}/K_I)^2} \quad A(1,3) = \frac{RF_0}{V_R}$$

$$A(1,4) = A(1,5) = 0$$

$$A(2,1) = \frac{k}{1+C_{P1s}/K_I} \quad A(2,2) = -\frac{(1+R)F_0}{V_R} - \frac{kC_{A1s}}{K_I(1+C_{P1s}/K_I)^2} \quad A(2,3) = 0$$

$$A(2,4) = \frac{RF_0}{V_R} \quad A(2,5) = 0$$

$$A(3,1) = \frac{(1+R)F_0}{V_R} \quad A(3,2) = 0 \quad A(3,3) = -\frac{(1+R)F_0}{V_R} \quad A(3,4) = A(3,5) = 0$$

$$A(4,1) = 0 \quad A(4,2) = \frac{(1+R)F_0}{V_X} \quad A(4,3) = 0$$

$$A(4,4) = -\frac{(1+R)F_0}{V_R} - \frac{K_V V_E}{V_X} m \quad A(4,5) = \frac{K_V V_E}{V_X}$$

$$A(5,1) = A(5,2) = A(5,3) = 0 \quad A(5,4) = \frac{K_V V_E}{V_X} m \quad A(5,5) = -\frac{F_3}{V_Y} - \frac{K_V V_E}{V_Y}$$

```
31 x_s = fsolve(@(x) entrega2(x,0,F0,F3,R,k,KI,VR,VX,VY,Ca0,K,m),0.5*ones(1,5))
32 Cal_s = x_s(1); Cpl_s = x_s(2); Ca2_s = x_s(3); Cp2_s = x_s(4); Cp3_s = x_s(5);
```

0.8107 1.0678 0.8107 1.0071 0.7289

```

34 % matriz A
35 A(1,1) = -(1+R)*F0/VR - k/(1+Cp1_s/KI);
36 A(1,2) = k*Ca1_s/KI/(1+Cp1_s/KI)^2;
37 A(1,3) = R*F0/VR;
38 A(1,4) = 0;
39 A(1,5) = 0;
40
41 A(2,1) = k/(1+Cp1_s/KI);
42 A(2,2) = -(1+R)*F0/VR - k*Ca1_s/KI/(1+Cp1_s/KI)^2;
43 A(2,3) = 0;
44 A(2,4) = R*F0/VR;
45 A(2,5) = 0;
46
47 A(3,1) = (1+R)*F0/VX;
48 A(3,2) = 0;
49 A(3,3) = -(1+R)*F0/VX;
50 A(3,4) = 0;
51 A(3,5) = 0;
52
53 A(4,1) = 0;
54 A(4,2) = (1+R)*F0/VX;
55 A(4,3) = 0;
56 A(4,4) = -(1+R)*F0/VX -K*(VX+VY)/VX*m;
57 A(4,5) = K*(VX+VY)/VX;
58
59 A(5,1) = 0;
60 A(5,2) = 0;
61 A(5,3) = 0;
62 A(5,4) = K*(VX+VY)/VY*m;
63 A(5,5) = -F3/VY - K*(VX+VY)/VY;
64
65 L = eig(A)
66 if L < 0
67     disp('estable')
68 endif
69
A =
-2.2335    0.3793    1.0000         0         0
 0.7335   -1.8793         0    1.0000         0
15.0000         0   -15.0000         0         0
         0   15.0000         0  -40.8750   34.5000
         0         0         0   51.7500  -71.5000

L =
-101.1801
 -0.4978
 -1.5110
-16.0847
-12.2142

estable

```

d)

$$B(1,1) = \frac{F_0(C_{A2s} - C_{A1s})}{V_R} \quad B(1,2) = 0$$

$$B(2,1) = \frac{F_0(C_{P2s} - C_{P1s})}{V_R} \quad B(2,2) = 0$$

$$B(3,1) = \frac{F_0(C_{A1s} - C_{A2s})}{V_X} \quad B(3,2) = 0$$

$$B(4,1) = \frac{F_0(C_{P1s} - C_{P2s})}{V_X} \quad B(4,2) = 0$$

$$B(5,1) = 0 \quad B(5,2) = -\frac{C_{P3s}}{V_Y}$$

```

69
70 B(1,1) = F0*(Ca2_s - Ca1_s)/VR; B(1,2) = 0;
71 B(2,1) = F0*(Cp2_s - Cp1_s)/VR; B(2,2) = 0;
72 B(3,1) = F0/VX*(Ca1_s - Ca2_s); B(3,2) = 0;
73 B(4,1) = F0/VX*(Cp1_s - Cp2_s); B(4,2) = 0;
74 B(5,1) = 0; B(5,2) = -Cp3_s/VY;
75
76 C = zeros(5,5); C(5,5) = 1;
77
78 pkg load signal
79 [num,den] = ss2tf(A,B,C);
80 g_R_Cp3 = tf(num(5,1),den(5,1))
81 g_F3_Cp3 = tf(num(5,2),den(5,2))
82

```

B =

```

      0      0
-0.0304    0
      0      0
  0.3037    0
      0 -0.0729

```

Transfer function 'g_R_Cp3' from input 'u1' to output ...

```

              15.72 s^3 + 276.8 s^2 + 389.2 s + 44.71
y1:  -----
      s^5 + 131.5 s^4 + 3321 s^3 + 2.612e+04 s^2 + 4.223e+04 s + 1.495e+04

```

Continuous-time model.

Transfer function 'g_F3_Cp3' from input 'u1' to output ...

```

      -0.07289 s^4 - 4.372 s^3 - 59.54 s^2 - 134.2 s - 70.93
y1:  -----
      s^5 + 131.5 s^4 + 3321 s^3 + 2.612e+04 s^2 + 4.223e+04 s + 1.495e+04

```

Continuous-time model.

e) Hay varias formas de reducir el orden de la función; una de ellas podría ser observando que los primeros coeficientes del denominador son mucho más chicos, directamente despreciarlos:

$$G_1 = 0.00299 \frac{0.3515s^3 + 6.1916s^2 + 8.7044s + 1}{0.0000688s^5 + 0.008793s^4 + 0.22208s^3 + 1.7470s^2 + 2.8245s + 1}$$

$$G_2 = 0.00299 \frac{1}{1.75s^2 + 2.82s + 1}$$

```

85 a = cell2mat(num(5,1)); b=cell2mat(den(5,1));
86 num2 = a(end)/b(end);
87 den2 = b(end-2:end)/b(end);
88 g2 = tf(num2, den2)
89 x2 = Cp3_s + 0.5*step(g2,t);
90

```

Transfer function 'g2' from input 'u1' to output ...

$$y1: \frac{0.00299}{1.747 s^2 + 2.824 s + 1}$$

Continuous-time model.

Otra alternativa puede ser escribir

$$G_1 = 0.00299 \frac{0.3515 * (s + 16.0844)(s + 1.4023)(s + 0.1261)}{0.00006688 * (s + 101.1801)(s + 16.0847)(s + 12.2142)(s + 1.5110)(s + 0.4978)}$$

Y despreciar los términos con polos (o ceros) más grandes (constantes de tiempo más chicas), generando

$$G_3 = 0.00299 \frac{0.3515 * (16.0844) * (s + 0.2397)}{0.00006688 * (101.18) * (16.0847)(12.2142) * (s + 1.511)(s + 0.4978)}$$

$$= 0.0127 \frac{(s + 0.24)}{(s + 1.51)(s + 0.50)}$$

$$G_3 = 0.00299 \frac{0.3515 * (16.0844) * (0.2397)}{0.00006688 * (101.18) * (16.0847)(12.2142) * (s + 1.511)(s + 0.4978)}$$

$$= \frac{0.00305}{(s + 1.51)(s + 0.50)}$$

```

91
92 % otra forma de reducir el orden:
93 % nos quedamos con los polos más chicos en valor absoluto
94 polos = roots(b); d = sort(polos);
95 ceros = roots(a); n = sort(ceros);
96 s = tf('s');
97 g3 = num2*d(4)*d(5)/((s-d(4))*(s-d(5)))
98 g4 = -num2*d(4)*d(5)/n(3)*(s-n(3))/((s-d(4))*(s-d(5)))
99 g4 = num2*d(4)*d(5)/n(3)/n(2)*(s-n(2))*(s-n(3))/((s-d(4))*(s-d(5)))

```

```
Transfer function 'g3' from input 'u1' to output ...
```

$$y1: \frac{0.01783 s + 0.002249}{s^2 + 2.009 s + 0.7522}$$

```
Continuous-time model.
```

```
Transfer function 'g4' from input 'u1' to output ...
```

$$y1: \frac{0.002249}{s^2 + 2.009 s + 0.7522}$$

```
Continuous-time model.
```

Otra alternativa sería, a partir de

Otra alternativa puede ser escribir

$$G_1 = 0.00299 \frac{0.3515 * (s + 16.0844)(s + 1.4023)(s + 0.1261)}{0.00006688 * (s + 101.1801)(s + 16.0847)(s + 12.2142)(s + 1.5110)(s + 0.4978)}$$

Observar que el factor (s+16.08) del numerador se cancela con el del denominador y que el factor (s+1.40) del numerador aproximadamente cancela al (s+1.51) del denominador; adicionalmente el factor (s+101) puede despreciarse por corresponder a una constante de tiempo muy pequeña. De esta forma

$$G_4 = 0.00299 \frac{0.3515 * (s + 0.1261)}{0.00006688 * (101.1801)(s + 12.2142)(s + 0.4978)} \\ = 0.155 \frac{(s + 0.13)}{(s + 12.2)(s + 0.50)}$$

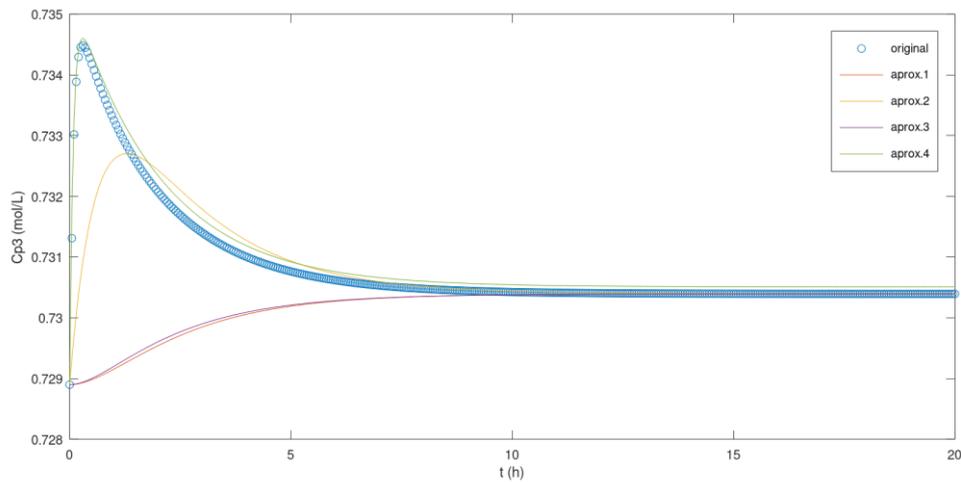
```
99 % otra forma, cancelando factores
100 g5 = -a(end)/b(end)*a(1)/a(end)/(b(1)/b(end))/d(1)*(s-n(3))/((s-d(3))*(s-d(5)))
101
```

```
Transfer function 'g5' from input
```

$$y1: \frac{0.1553 s + 0.01959}{s^2 + 12.71 s + 6.081}$$

f)

```
82
83 x1 = Cp3_s + 0.5*step(g_R_Cp3,t);
84
102 x2 = Cp3_s + 0.5*step(g2,t);
103 x3 = Cp3_s + 0.5*step(g3,t);
104 x4 = Cp3_s + 0.5*step(g4,t);
105 x5 = Cp3_s + 0.5*step(g5,t);
106
107 figure(2)
108 plot(t,x1,'o',t,x2,t,x3,t,x4,t,x5)
109 xlabel('t (h)'); ylabel('Cp3 (mol/L)');
110 legend('original','aprox.1','aprox.2','aprox.3','aprox.4')
```



Evidentemente la última aproximación es la que refleja la dinámica del sistema, mientras que las aproximaciones sin dinámica en el numerador están bastante apartadas.