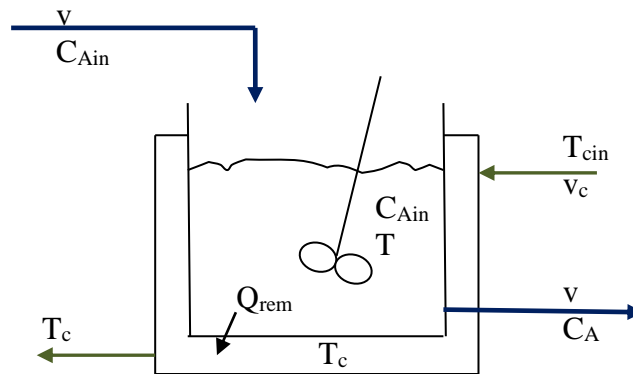


10 ESTUDIO DINÁMICO DE UN REACTOR

A modo de ejemplo de diferentes aspectos que hemos estudiado hasta el momento veremos el comportamiento dinámico de un reactor de mezcla completa no isotérmico en el que ocurre una reacción de orden uno, $A \rightarrow B$.



Para construir el modelo se realizarán las siguientes suposiciones:

- Mezcla perfecta del fluido
- Volumen constante
- Valores constantes para los parámetros
- Por simplicidad podemos asumir que la temperatura de la camisa (que se comporta en régimen de mezcla completa) puede ser manipulada directamente (y por tanto nos evitamos el correspondiente balance)

Definimos los siguientes parámetros y variables:

A	Área para el intercambio de calor
C_A	Concentración de A en el reactor
C_{Ain}	Concentración de A en la corriente de alimentación
c_p	Capacidad calorífica (energía/masa×temperatura)
v	Flujo volumétrico (volumen/tiempo)
k_0	Factor pre-exponencial (tiempo ⁻¹)
R	Constante de los gases (energía/mol×temperatura)
r_A	Velocidad de reacción por unidad de volumen (mol/volumen/tiempo)
t	Tiempo
T	Temperatura del reactor
T_{in}	Temperatura de la alimentación
T_c	Temperatura de la camisa
T_{ref}	Temperatura de referencia
U	Coefficiente global de transferencia de calor (energía/(tiempo×área×temp.))
V	Volumen de reactor
ΔE	Energía de activación (energía/mol)
$(-\Delta H)$	Entalpía de reacción (energía/mol)
ρ	Densidad (masa/volumen)

Planteamos el balance de masa global

$$\frac{d(V\rho)}{dt} = v_{in}\rho_{in} - v\rho$$

Como la cantidad de materia dentro del reactor es constante, asumiendo densidad constante $v = v_{in}$

$$\frac{dV}{dt} = 0$$

Realizamos también el balance del componente A:

$$\frac{d(VC_A)}{dt} = vC_{Ain} - vC_A - r_A V$$

Y también el balance de energía:

$$\begin{aligned} \frac{d(V\rho c_p(T - T_{ref}))}{dt} \\ = v\rho c_p(T_{in} - T_{ref}) - v\rho c_p(T - T_{ref}) + (-\Delta H\Delta)Vr_A - UA(T - T_c) \end{aligned}$$

Las ecuaciones de estado serían:

$$f_1(C_A, T) = \frac{dC_A}{dt} = \frac{v}{V}(C_{Ain} - C_A) - r_A$$

$$f_2(C_A, T) = \frac{dT}{dt} = \frac{v}{V}(T_{in} - T) + \left(\frac{-\Delta H}{\rho c_p}\right)r_A - \frac{UA}{V\rho c_p}(T - T_c)$$

Siguiendo Arrhenius la expresión de velocidad:

$$r = k_o \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) C_A$$

Las soluciones de estado estacionario serán aquellas que verifiquen

$$f_1(C_{As}, T_s) = \frac{dC_A}{dt} = 0 = \frac{v}{V}(C_{Ain} - C_{As}) - r_{As}$$

$$f_2(C_{As}, T_s) = \frac{dT}{dt} = 0 = \frac{v}{V}(T_{in} - T_s) + \left(\frac{-\Delta H}{\rho c_p}\right)r_{As} - \frac{UA}{V\rho c_p}(T_s - T_c)$$

Si damos valores numéricos a los parámetros del modelo, por ejemplo

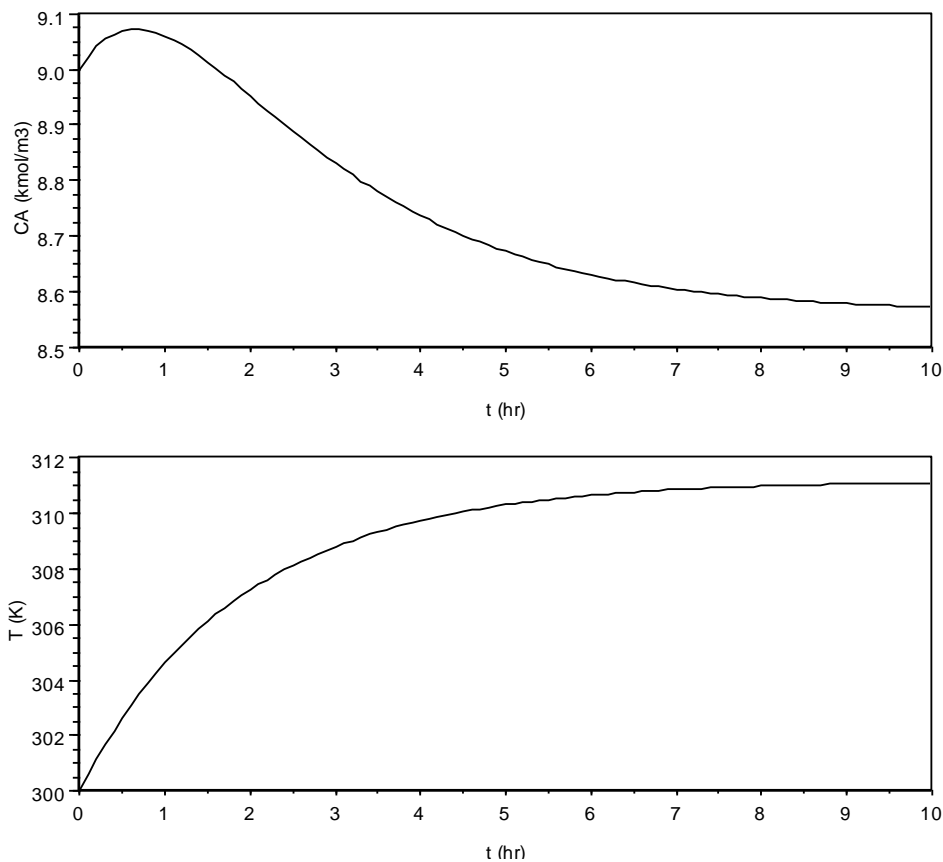
$$\begin{aligned} v/V &= 1 \text{ hr}^{-1} \\ k_o &= 9703 \times 3600 \text{ hr}^{-1} \\ -\Delta H &= 5960 \text{ kcal/kmol} \\ E_a &= 11843 \text{ kcal/kmol} \\ \rho c_p &= 500 \text{ kcal/(m}^3\text{C)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 T_{in} &= 25 \text{ }^\circ\text{C} \\
 C_{Ain} &= 10 \text{ kmol/m}^3 \\
 UA/V &= 150 \text{ kcal/(m}^3\text{ }^\circ\text{C hr)} \\
 T_c &= 25 \text{ }^\circ\text{C}
 \end{aligned}$$

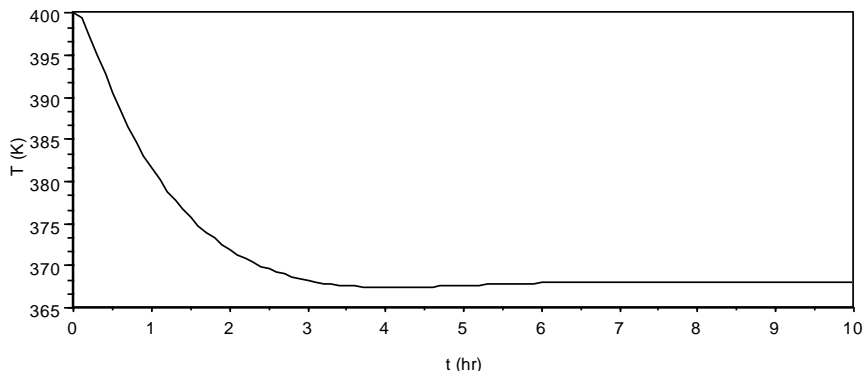
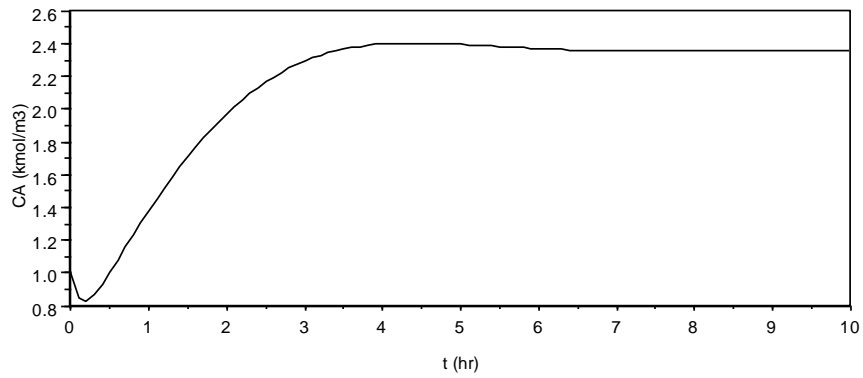
Podemos hallar las soluciones de estado estacionarioa con la función *fsolve* de Octave; previamente definimos las funciones de f_1 y f_2 de las cuales queremos hallar las raíces (ver '[ejem10.1](#)'). Por ejemplo iniciando la iteración en el punto (9 , 300) (concentración en kmol/m³ y temperatura en Kelvin), el cálculo converge al punto (8.5636 , 311.17) que es entonces una de las soluciones del sistema de ecuaciones y representa uno de los puntos de estado estacionario o puntos de trabajo del reactor. Partiendo de otros puntos iniciales se puede llegar a otras soluciones, en concreto a (5.518 , 339.1) y (2.359 , 368.1).

Para modelar la dinámica del sistema es necesario integrar las ecuaciones dinámicas, esto es, las derivadas de las variables de estado respecto al tiempo. Esto puede realizarse en Octave con el comando *lsode* , que requiere la definición previa de las funciones a integrar, el valor de las condiciones iniciales de las variables, el valor de tiempo a partir del cual iniciar la integración y el vector de tiempo durante el cual se va a realizar la integración (ver '[ejem10.2](#)').

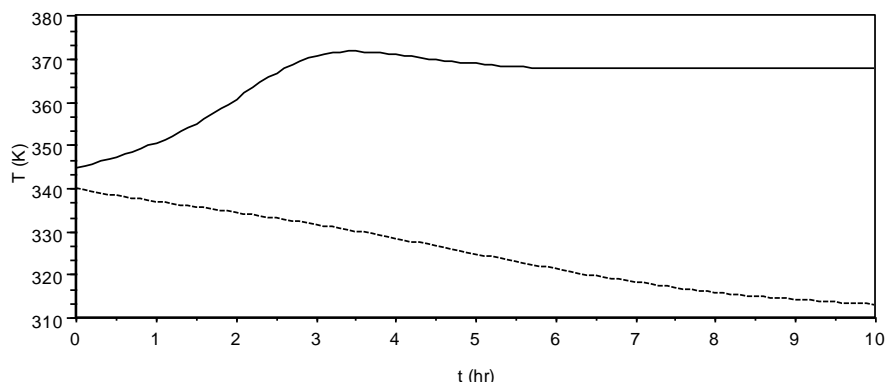
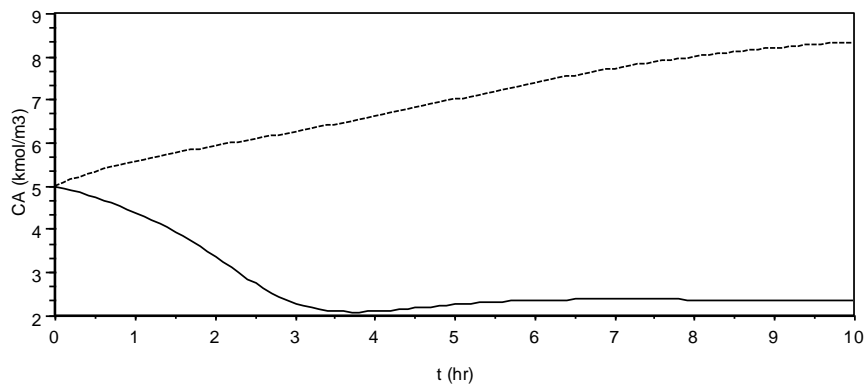
Los resultados se suelen presentar en forma gráfica y para ello puede utilizarse el comando *plot* de Octave.



Respuesta con condiciones iniciales $x_0 = [9;300]$



Respuesta con condiciones iniciales $x_0 = [1;400]$



Respuestas con condiciones iniciales $x_0 = [5;345]$ (sólido) y $x_0 = [5;340]$ (punteada).

Puede observarse que pequeñas variaciones en las condiciones iniciales pueden conducir a distintos puntos de estado estacionario. Por el contrario condiciones iniciales muy diferentes pueden conducir al mismo punto estacionario.

Linealización

La estabilidad de un sistema puede estudiarse recurriendo a una linealización del mismo, esto es, llevándolo al formato

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}\mathbf{u}$$

y determinando los valores propios de la matriz \mathbf{A} : si son negativos o con parte real negativa el sistema es estable.

Retomemos las ecuaciones dinámicas del reactor:

$$f_1(C_A, T) = \frac{dC_A}{dt} = -\frac{v}{V}C_A - kC_A + \frac{v}{V}C_{Ain}$$

$$f_2(C_A, T) = \frac{dT}{dt} = -\left(\frac{-\Delta H}{\rho c_p}\right)kC_A - \frac{v}{V}T - \frac{UA}{V\rho c_p}T + \frac{UA}{V\rho c_p}T_c + \frac{v}{V}T_{in}$$

Definimos las variables desviación respecto al punto de estado estacionario (las condiciones de estado estacionario se anotan con el subíndice s)

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} C_A - C_{As} \\ T - T_s \end{bmatrix} \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} T_c - T_{cs} \\ C_{Ain} - C_{Ains} \\ T_{in} - T_{ins} \end{bmatrix}$$

Las componentes de la matriz \mathbf{A} son las derivadas de las funciones respecto a las variables de estado:

$$A_{11} = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} = \frac{\partial f_1}{\partial C_A} = -\frac{v}{V} - k_s$$

$$A_{12} = \frac{\partial f_1}{\partial x_2} = \frac{\partial f_1}{\partial T} = -C_{As}k_s'$$

$$A_{21} = \frac{\partial f_2}{\partial x_1} = \frac{\partial f_2}{\partial C_A} = \frac{(-\Delta H)}{\rho c_p}k_s$$

$$A_{22} = \frac{\partial f_2}{\partial x_2} = \frac{\partial f_2}{\partial T} = -\frac{v}{V} - \frac{UA}{V\rho c_p} + \frac{(-\Delta H)}{\rho c_p}C_{As}k_s'$$

donde se han definido los siguientes parámetros:

$$k_s = k_o \exp\left(\frac{-E_a}{RT_s}\right)$$

$$k_s' = \frac{\partial k_s}{\partial T} = k_o \exp\left(\frac{-E_a}{RT_s}\right) \left[\frac{E_a}{RT_s^2}\right]$$

O sea que la matriz **A** es

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -\frac{v}{V} - k_s & -C_A k_s' \\ \frac{(-\Delta H)}{\rho c_p} k_s & -\frac{v}{V} - \frac{UA}{V\rho c_p} + \frac{(-\Delta H)}{\rho c_p} C_{As} k_s' \end{bmatrix}$$

Para hallar los valores propios de **A** resolvemos

$$\lambda^2 - (\text{tr}\mathbf{A})\lambda + \det\mathbf{A} = 0$$

Por ejemplo en el punto correspondiente a 8.564 kmol/m³ y 311.2 K los valores propios resultan ser -0.8957 y -0.5166, ambos negativos, por lo que dicho punto es estable.

Por el contrario, los valores propios correspondientes al punto (5.518 , 339.1) resultan ser -0.8369 y 0.4942, y siendo uno de ellos positivo el punto no es estable.

Finalmente para el tercer punto estacionario (2.359 , 368.1) los valores propios son imaginarios con parte real negativa: -0.7657 + 0.9584i y -0.7657 - 0.9854i , por lo que el punto es estable aunque las soluciones son oscilantes.

Por su parte la matriz **B** surge de derivar las funciones respecto a las variables de entrada y evaluarlas en el punto de estado estacionario. De esta forma la matriz **B** es en este caso de 2 x 3, donde por ejemplo

$$B_{11} = \frac{\partial f_1}{\partial u_1} = \frac{\partial f_1}{\partial T_c} = 0$$

$$B_{21} = \frac{\partial f_2}{\partial u_1} = \frac{\partial f_2}{\partial T_c} = \frac{UA}{V\rho c_p}$$

y en forma similar respecto a las demás variables.

También podemos realizar el análisis recurriendo a la función de transferencia:

$$\mathbf{G}(s) = \mathbf{C} (s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{B}$$

En este caso, como tenemos tres variables de entrada y dos de salida, obtenemos una matriz de 2 x 3 funciones de transferencia, cada una de ellas relacionando una entrada con una salida. Y esto evaluado en cada uno de los puntos de estado estacionario en los que hemos realizado la linealización. Por ejemplo, sustituyendo los valores de los parámetros para el primer punto se llega a la siguiente función de transferencia que relaciona la temperatura de camisa con la concentración:

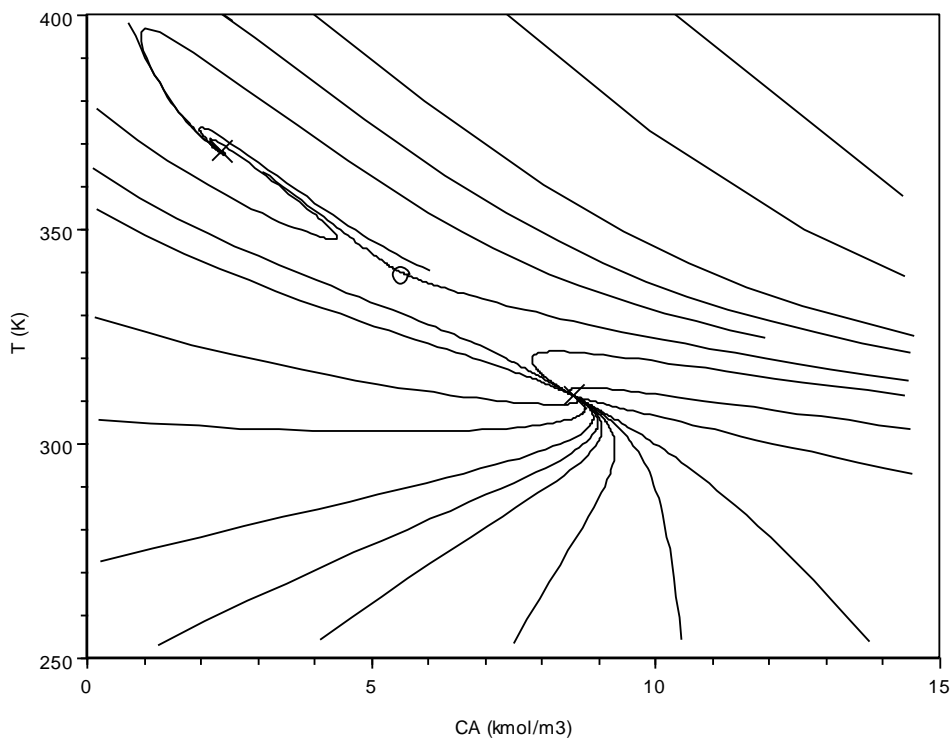
$$G_{11}(s) = \frac{-0.0266}{s^2 + 1.4123s + 0.4627} = \frac{-0.0575}{(1.1165s + 1)(1.9357s + 1)}$$

Y a la siguiente que relaciona la temperatura de camisa con la temperatura del reactor:

$$G_{21}(s) = \frac{0.3s + 0.3504}{s^2 + 1.4123s + 0.4627} = \frac{0.7573(0.856s + 1)}{(1.1165s + 1)(1.9357s + 1)}$$

En ambos casos los polos (raíces del denominador) son negativos lo cual indica que el punto es estable. Véase ‘[ejem10.3](#)’. De igual forma se puede proceder para el resto de los pares de variables.

Finalmente se puede construir el diagrama de fases, en el que se representan una variable de estado contra otra en trayectorias a partir de distintos puntos iniciales y donde el tiempo no aparece en forma explícita (ver “[ejem10.4](#)”).



En el diagrama de fases las trayectorias convergen hacia los puntos de trabajo estables (marcados con una x), que se pueden identificar por la confluencia de varias líneas hacia ellos. Por el contrario, las trayectorias eluden los puntos no estables (representado con una o) que, de no ser marcados explícitamente no aparecerían en el diagrama.