DINÁMICA Y CONTROL DE PROCESOS

Repartido 2

2.1. Sea un RCAI isotérmico donde se lleva a cabo las reacciones irreversibles:

$$\begin{cases} A + B \rightarrow 2P & \quad r_{A1} = k_1 C_A C_B \\ 2A + P \rightarrow R & \quad r_{A2} = k_2 C_A C_P \end{cases}$$, r_{Ai} es la velocidad de consumo de A.

a. Plantear el modelo dinámico del sistema indicando suposiciones, variables, etc. ¿El modelo es lineal?

b. Asumir que el volumen es constante para simplificar el modelo. Representar gráficamente las trayectorias de las variables suponiendo que se alimenta con una concentración C_{Ain} = C_{Bin} = 1 mol/L y un caudal de 5 L/min a un reactor de 200 L partiendo del reactor lleno de solvente. k_1 = 1,0 L/mol.min, k_2 = 0,2 L/mol.min.

c. Formular el sistema en el formato de variables de estado, linealizando si fuera necesario.

d. Representar gráficamente las trayectorias de las variables en las mismas condiciones que en la parte b. Comparar las respuestas del sistema original y linealizado.

2.2. Considere un RCAI donde se lleva a cabo una reacción de segundo orden A → B. Asumiendo volumen y densidad constante, demuestre que la ecuación que describe la variación de la concentración del reactivo A es:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{F}{V} C_{A0} - \frac{F}{V} C - k_2 C^2$$

donde *F* es el caudal volumétrico.

Considere los siguientes parámetros: V/F = 5 min, k_2 = 0,32 M.min^{-1}, C_{A0} = 1,25 M

a. Calcule la concentración del reactivo A en estado estacionario.

b. En un instante (t = 0) se produce un cambio tipo escalón en la concentración de entrada, pasando esta de 1,25 M a 1,75 M. Grafique la evolución de la concentración en el reactor con el tiempo hasta que se alcance un nuevo estado estacionario.

2.3. Considere el sistema predador-presa:

$$\frac{dy_1}{dt} = \alpha(1 - y_2)y_1$$
$$\frac{dy_2}{dt} = -\beta(1 - y_1)y_2$$

Siendo los parámetros $\alpha = \beta = 1$, y la unidad de tiempo días.

a. Resuelva mediante la rutina de integración de Octave *lsode* partiendo de las condiciones iniciales $y_1(0)$ = 1,5; $y_2(0)$ = 0,75. Grafique las respuestas de cada variable en transitorio, así como el diagrama de fases para dichas trayectorias.

b. Repita la parte anterior para las siguientes condiciones iniciales [$y_1(0)$; $y_2(0)$]:
`[1.5; 1.5], [0.5; 3.0], [3.0; 0.5], [3.0; 0.1], [0.1; 3.0].`

2.4. La degradación de la glucosa a piruvato por la vía glicolítica se puede representar por la siguiente reacción:

$$C_6H_{12}O_6 + 2NAD^+ + 2ADP + 2P_i \rightarrow 2C_3H_4O_3 + 2ATP + 2NADH + 2H^+$$

La dinámica del ADP (x) y de la glucosa (y) en concentraciones normalizadas está dada por:

$$\frac{dx}{dt} = -x + \alpha y + x^2 y$$

$$\frac{dy}{dt} = \beta - \alpha y - x^2 y$$

En condiciones normales de la célula puede tomarse α = 0,08 y β = 0,6 (unidad de tiempo: h)

a. Calcule las condiciones del o de los puntos estacionarios. ¿Es (son) estable(s)?
b. Grafique la evolución de las variables a lo largo del tiempo, partiendo de un valor cualquiera.
c. Grafique el diagrama de fase.
d. En condiciones de estrés el valor de β ha caído a 0,3. Repita ahora el diagrama de fase.
e. ¿Para qué valor de β se produce el cambio de comportamiento?

2.5. Considere un reactor batch donde se lleva a cabo la producción de B según la siguiente reacción en fase líquida y diluido:

$$A \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} B \overset{k_2}{\rightarrow} C$$

Donde k_1 es la constante cinética de la reacción directa que convierte A en B, k_{-1} la constante cinética de la reacción inversa y k_2 la constante de la reacción que transforma B en C.

a. Escriba las ecuaciones del modelo del sistema.
b. Siendo k_1 = 2 h^{-1}, k_{-1} = 1 h^{-1} y k_2 = 1,25 h^{-1}, determine la respuesta del modelo cuando C_{A0} es 1 M. Grafique las tres concentraciones en función del tiempo y determine el tiempo de reacción al cual la producción de B es máxima. Considere un volumen útil de 100 L.

Nota: ver la función *max* de Octave (tener en cuenta ambos argumentos de salida).

c. Suponga que al realizar ensayos para corroborar valores de las constantes cinéticas se determina que el verdadero valor de k_2 es 1,5 h^{-1}. ¿Cuál sería la producción máxima real de B por batch si el volumen útil de reactor es 100 L?

2.6. Dado el sistema de tanques no interactivos, el modelo que se obtiene es el siguiente:

$$\begin{bmatrix} h_1' \\ h_2' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\beta_1}{A_1} & 0 \\ \frac{\beta_1}{A_2} & \frac{\beta_2}{A_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{A_1} \\ 0 \end{bmatrix} v_E$$

Considere el sistema en estado estacionario con caudales de 5 ft^{3}min^{-1} y las siguientes áreas transversales para los tanques y alturas de estado estacionario: A_1 = 2 ft^2, A_2 = 10 ft^2, h_1 = 2,5 ft y h_2 = 5 ft. Así entonces, de la relación lineal entre el caudal y la altura se obtiene: β_1 = 2 ft^2/min y β_2 = 1 ft^2/min. El modelo de estado que se obtiene es el siguiente:

$$\begin{bmatrix} h_1' \\ h_2' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ \frac{1}{5} & -\frac{1}{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} v_E$$

a. Encuentre trabajando con las variables desviación, los sub-espacios rápido y lento. Utilizando la rutina de Octave *lsim* simule el sistema en variables desviación para el caso no forzado (desviación nula para las variables de entrada). Utilizar condiciones iniciales que partan tanto del sub-espacio lento como del sub-espacio rápido.
b. A partir de la parte a) convierta los resultados a las variables del modelo de estado.
c. Trabajando con el modelo en variables de estado (no variables de desviación) y utilizando la rutina *lsim*, realice la misma simulación. Verifique que los resultados obtenidos son los mismos que los de la parte b). ¿Por qué se llega a los mismos resultados?

Nota: en este caso la entrada no es nula pues no es variable desviación.

2.7. Como profesional de una industria farmacéutica, usted es responsable de la producción de un antibiótico producido por una bacteria. En un momento dado, el reactor es involuntariamente contaminado con protozoarios, transformándose el mismo en un sistema predador-presa. Considere a las baterías como presa (*b*) y a los protozoarios como depredador (*p*). El sistema se modela mediante las siguientes ecuaciones:

$$\frac{db}{dt} = \alpha b - \gamma bp$$

$$\frac{dp}{dt} = \varepsilon\gamma bp - \beta p$$

a. Demuestre que los valores de las variables de estado, en el estado estacionario son:

$$b_s = \frac{\beta}{\varepsilon\gamma}$$

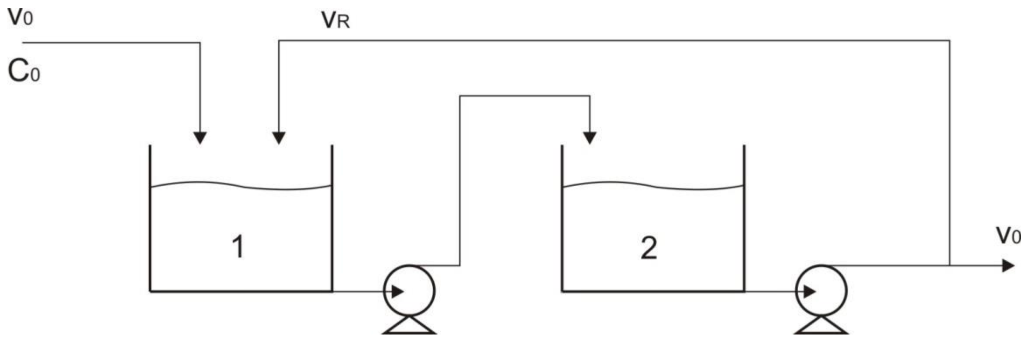
$$p_s = \frac{\alpha}{\gamma}$$

b. Escriba el sistema nuevamente usando como variables las variables normalizadas de acuerdo a:

$$w = \frac{b}{b_s} \qquad z = \frac{p}{p_s}$$

c. Encuentre los valores propios de la matriz Jacobiana del sistema con variables normalizadas, evaluada en w_s y z_s.
d. Dados $\alpha = \beta = 1$ y considerando las condiciones iniciales $w(0) = 1{,}5$ y $z(0) = 0{,}75$:
   i. Linealice y escriba el modelo del sistema en variables de estado, siendo $x_1 = w - w_s$ y $x_2 = z - z_s$. Encuentre también el vector de condiciones iniciales para usar con *lsim*.
   ii. Resuelva la formulación de estado usando la rutina *lsim* y grafique las respuestas en transitorio de x_1 y x_2 sobre el mismo par de ejes y hasta al menos t = 20.
   iii. Grafique el diagrama de fases (x_2 vs x_1).
   iv. ¿Cuál es el tiempo de "pico a pico" para las bacterias?, ¿Cuánto tiempo los protozoarios retrasan a las bacterias ("lag")?

2.8. Considere el siguiente sistema de dos reactores:



Asuma caudales constantes y que se lleva a cabo una descomposición en fase líquida de primer orden A $\rightarrow$ B.

a. Desarrolle las ecuaciones de modelado para el sistema en función de la concentración de A.
b. A partir de dichas ecuaciones escriba la formulación en variables de estado.
c. Dadas las siguientes constantes calcule las concentraciones de A en los distintos reactores para el estado estacionario:
   v_0 = 1,25 m^3/h v_R = 1,75 m^3/h C_{A0} = 1,5 M k_1 = 0,10833 h^{-1}
   k_2 = 0,33333 h^{-1} V_1 = 15 m^3 V_2 = 9 m^3
d. Halle los valores propios de la matriz **A** y discuta la estabilidad del sistema.
e. Al recibir una nueva partida de materia prima para el proceso, se ve que la nueva concentración de alimentación de A es de 1,75 M a partir de un momento que se puede considerar t = 0. Use la rutina *lsim* para simular el comportamiento del sistema y determine gráficamente, las nuevas concentraciones de estado estacionario, si las hay.

2.9. Considere el siguiente modelo para una columna de absorción de dos etapas:

$$\frac{dw}{dt} = -\frac{L+Va}{M}w + \frac{Va}{M}z$$
$$\frac{dz}{dt} = \frac{L}{M}w - \frac{L+Va}{M}z + \frac{V}{M}z_f$$

Donde:

- w y z son las concentraciones en el líquido en la etapa 1 y 2 respectivamente.
- L y V son los flujos molares de líquido y vapor.
- z_f es la concentración de la corriente gaseosa entrante a la columna.

Las entradas en estado estacionario son:

- L = 80 gmol de líquido inerte por minuto.
- V = 100 gmol de gas inerte por minuto.

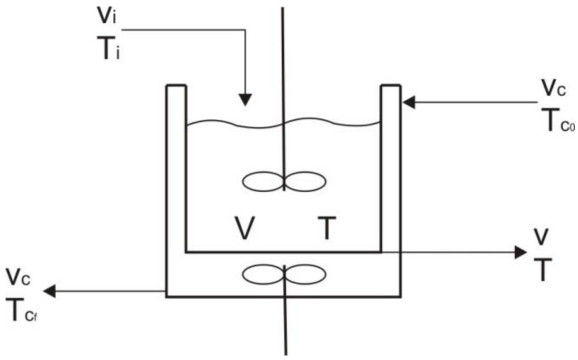
Los valores de los parámetros son:

- M = 20 gmol de líquido inerte.
- a = 0,5.
- z_f = 0,1 gmol de soluto/gmol de gas inerte.

a. Halle los valores de w y z en el estado estacionario.

b. Escriba el modelo en forma matricial en el espacio de las variables de estado, asumiendo a *L* y *V* como las entradas.
c. Encuentre los valores y vectores propios de la matriz Jacobiana. Evalúe si el punto de estado estacionario hallado es estable o inestable.
d. Encuentre los sub-espacios "lento" y "rápido".
e. Compare la variación de las concentraciones en el tiempo utilizando como condiciones iniciales las condiciones dadas por el sub-espacio "lento" y las del sub-espacio "rápido".

2.10. Un tanque agitado es usado en una planta para proveer al proceso de un fluido a temperatura constante. Dicho fluido llega al tanque de calentamiento de una parte del proceso aguas arriba, por lo cual, puede haber variaciones en la temperatura o en el caudal de entrada al mismo. El sistema de calentamiento consiste en una camisa por donde circula un fluido que no cambia de estado en el transcurso del proceso.



Parte 1

a. Escriba las ecuaciones de modelado dinámico para hallar las temperaturas del tanque y la camisa. Realice y aclare las suposiciones que crea necesarias para resolver el problema. Es razonable asumir:
   - Nivel constante.
   - Mezcla perfecta tanto en el tanque como en la camisa.
   - Caudales del tanque y la camisa variables, así como las temperaturas de entrada a éstos. Ecuación de transferencia $Q = UA(T_c - T)$, siendo U el coeficiente global y A el área de intercambio.
b. ¿Cómo se traduce en el modelo el objetivo del proceso?, ¿Cuál es la variable "medible" más importante?
c. ¿Cuál sería la variable de entrada que usted usaría para controlar el cumplimiento de ese objetivo?

Parte 2

Asuma que tanto el fluido de proceso como el de calentamiento son agua. Algunos de los parámetros del sistema, así como los valores de estado estacionario para algunas variables son:

v = 1 ft^{3}min^{-1}	ρCp = 61,3 Btu(°F.ft^3)$^{-1}$	$\rho_c Cp_c$ = 61,3 Btu(°F.ft^3)$^{-1}$
T_i = 50 °F	T = 125 °F	V = 10 ft^3
T_{c0} = 200 °F	T_c = 150 °F	V_c = 1 ft^3

a. Halle v_c y UA en estado estacionario.
b. Escriba el modelo en forma matricial en el espacio de las variables de estado.
c. Halle los valores propios de la matriz **A**.

d. Grafique la respuesta del sistema para un cambio en escalón en el caudal de la camisa, pasando éste de 1,5 ft^3min^{-1} a 1,75 ft^3min^{-1} en el instante t = 5 min.

2.11. Una planta industrial genera el contaminante A con una concentración de 1 M. Para cumplir con la reglamentación de DINAMA se debe eliminar al menos el 90 % del mismo antes de disponer el efluente en un curso de agua cercano a la planta. Se sabe que el compuesto químico se descompone mediante una reacción de segundo orden, siendo la constante cinética 1,5 $(M.h)^{-1}$. El caudal de la corriente de salida asciende a los 100 L/h y se dispone de dos reactores, conectados en serie, con un volumen de 400 L el primero y 2 m^3 el segundo.

a. Determine las ecuaciones del modelo de estado para el contaminante A si los reactores se comportan como RCAI de volumen constante.

b. Encuentre las concentraciones del contaminante en cada reactor en estado estacionario.

c. Linealice y desarrolle el modelo en variables de estado de la forma:

$$\dot{x} = Ax + Bu$$

$$x = \begin{bmatrix} C_{A1} - C_{A1s} \\ C_{A2} - C_{A2s} \end{bmatrix} \qquad u = \begin{bmatrix} v - v_s \\ C_{Ain} - C_{Ains} \end{bmatrix}$$

d. Calcule las matrices *A* y *B*.

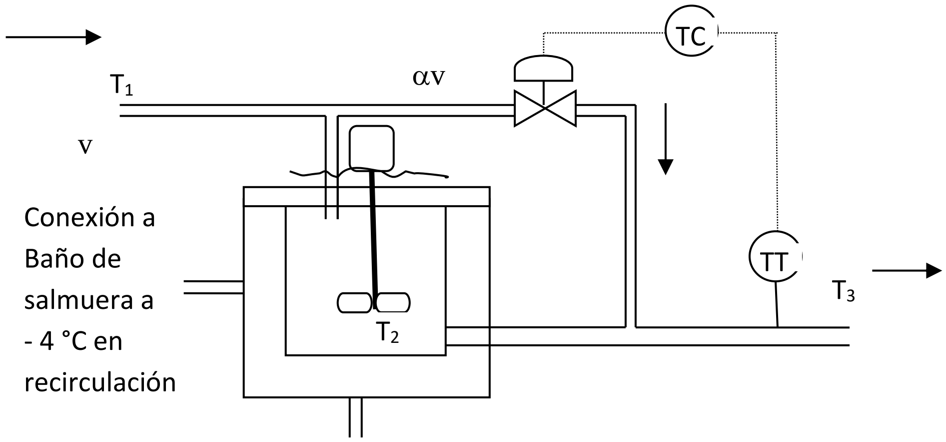
e. Encuentre los valores y vectores propios usando la función *eig* en Octave. Evalúe si el sistema en el punto de estado estacionario es estable.

f. Suponga que el sistema no parte del estado estacionario. Determine, integrando el sistema linealizado utilizando la rutina *lsim*, las respuestas para condiciones iniciales determinadas por los sub-espacios asociados a los vectores propios y observe la rapidez de las respuestas.

g. Repita la parte f. pero considerando ahora el sistema sin linealizar utilizando la rutina *lsode*.

h. Ingrese un escalón de +20 % al caudal del contaminante y simule en condiciones lineales y no lineales partiendo del estado estacionario. Para este caso, ¿se sigue cumpliendo con las especificaciones de DINAMA?

2.12. Para enfriar un fluido de proceso se dispone del equipamiento esquematizado en la figura:



La temperatura de ingreso puede variar según los procesos aguas arriba, pero se requiere una T_3 = 15 °C para lo que sigue. Puede asumirse que el caudal v = 4,7 L/min es constante.
El controlador de temperatura TC está roto y por lo tanto no está actuando el lazo de control. La válvula se ajusta manualmente.

a) Realice el modelo del sistema, aclare las suposiciones que crea necesarias para resolver el problema. Enumere las variables de estado, de entrada, de salida y los parámetros del modelo.
b) Determine la fracción de caudal α para lograr el objetivo deseado si T_1 = 27 °C.
c) Linealice y desarrolle el modelo en variables de estado.
d) Evalúe si el punto de estado estacionario hallado es estable o inestable.
e) La temperatura T_1 comienza a subir a razón de $\beta = 0{,}5$ °C/min hasta los 32 °C y se estabiliza en ese valor. Grafique la respuesta del sistema considerando el modelo original y el linealizado.

Datos adicionales:

ρ = 1,0 kg/L C_p = 1,0 kcal/(kg.°C) UA = 5,2 kcal/(min.°C) V = 20 L

2.13. Se considera el comportamiento de un reactor RCA con la cinética presentada a continuación. El objetivo es el control de la concentración de producto D en el efluente. Su supervisor propone que la concentración de reactante A en la alimentación como la variable manipulable para un control feedback. ¿Esta es una buena idea?

$$A \underset{k_1}{\rightarrow} D$$
$$A \underset{k_2}{\rightarrow} B \underset{k_3}{\rightarrow} D$$

Para responder esta pregunta, puede utilizar la siguiente información: el tanque está bien mezclado y tiene temperatura y volumen constante, todos los componentes tienen los mismos pesos molecualres y densidades, todos las reacciones son elementales y de primer orden, el caudal de entrada es constante (F) y contiene solo componente A (C_{Ain}).

a) Desarrolle el modelo del sistema para determinar la concentración de D. Indique variables de entrada, estado, salida, parámetros.
b) Linealice y desarrolle el modelo en variables de estado.
c) ¿Cuál es la relación entre C_{Ain} y C_D?
d) Agregar datos de reacciones y ver comportamiento.

2.14. Un tanque de mezclado tiene dos entradas: FA que tiene el componente A puro y FB que no tiene A. El sistema está en estado estacionario, y FA constante. El flujo de B cambia de acuerdo a la siguiente descripción: Desde el tiempo 0 hasta t1, F'B=alfa*t, y desde t1 hasta inf, F'B=alfa*t1.

Se pueden realizar las siguientes hipótesis: La densidad de las dos corrientes son constante e iguales, y no hay cambios en la densidad en la mezcla. El volumen de líquido en el tanque es constante. El tanque tiene mezcla perfecta.

a) Realice un esquema del proceso, defina el sistema y desarrolle el modelo del sistema utilizando como variable de salida la fracción de A en la salida del sistema, XA.
b) Linealice el sistema y obtenga el modelo en variables de estado.
c) Grafique el comportamiento de F'B y X'A en el tiempo.
d) Obtenga el comportamiento de FB y XA utilizando el modelo sin linealizar. Compare los resultados obtenidos con lo obtenido utilizando el modelo linealizado.

2.15. Se usa un reactor continuo agitado no isotérmico para la reacción A $\rightarrow$ B con una cinética de primer orden y, densidad y volumen constantes. Hallar los puntos de estado estacionario y construir el diagrama de fases $T - C_A$ con los siguientes datos:

C_{Ain} = 1 gmol/L	q/V = 1 min^{-1}	$-\Delta H/(\rho C_p)$ = 200 K/(gmol/L)
E_a/R = 10^4 K	k_0 = e^{25} min^{-1}	$UA/(V\rho C_p)$ = 1 min^{-1}

T_{in} = T_w = 350 K (T_w temperatura de pared)

Se usa un reactor continuo agitado no isotérmico para la reacción A $\rightarrow$ B con una cinética de primer orden y, densidad y volumen constantes. Hallar los puntos de estado estacionario y construir el diagrama de fases $T - C_A$ con los siguientes datos:

C_{Ain} = 1 gmol/L	q/V = 1 min^{-1}	$-\Delta H/(\rho C_p)$ = 200 K/(gmol/L)
E_a/R = 10^4 K	k_0 = e^{25} min^{-1}	$UA/(V\rho C_p)$ = 1 min^{-1}

T_{in} = T_w = 350 K (T_w temperatura de pared)