

## Trabajo Práctico Final

Un reactor tanque agitado continuo (CSTR por sus siglas en inglés – *Continuous stirred-tank reactor*) es el encargado de llevar adelante una reacción química en fase líquida e irreversible donde especies químicas  $A$  reaccionan para formar especies  $B$ . La reacción puede ser representada como  $A \rightarrow B$ . Se trata de una reacción altamente exotérmica. Por esto, es necesario controlar la temperatura del reactor mediante la manipulación del fluido refrigerante en la serpentina de refrigeración. En la figura 1 se muestra un esquema de operación del sistema y las variables involucradas. El flujo de entrada es un caudal  $q$  de un reactivo  $A$ , con una concentración molar  $c_{Ai}$  y una temperatura  $T_i$ . Se tiene una serpentina de refrigeración en el interior del reactor para mantener la mezcla en la temperatura deseada de operación, removiendo el calor generado por la reacción exotérmica. Dentro del reactor existe un agitador que mantiene una mezcla homogénea. El flujo de salida (o producto) es una mezcla de los componentes  $A$  y  $B$ , con un caudal  $q$ , una concentración molar de  $A$   $c_A$ , y una temperatura  $T$ .

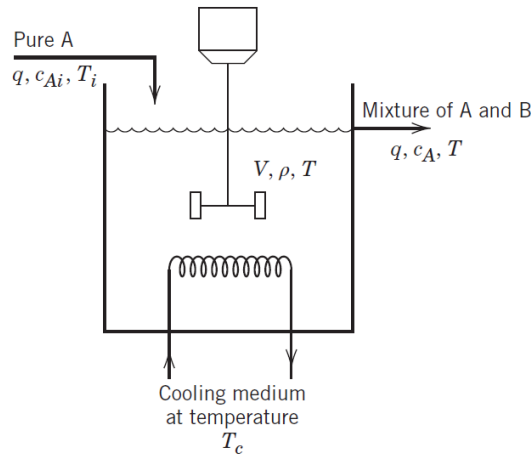


Figura 1. Esquema de funcionamiento del CSTR

Luego de considerar varias asunciones, el modelo matemático del sistema está dado por (Seborg et al., 2016):

$$V \frac{dc_A}{dt} = q(c_{Ai} - c_A) - Vkc_A \quad (1)$$

$$V\rho C \frac{dT}{dt} = wC(T_i - T) + (-\Delta H_R)Vkc_A + UA(T_c - T) \quad (2)$$

Donde  $V$  es el volumen de líquido en el reactor.  $k$  es la tasa de reacción, la cual, en este caso es una función dependiente de la temperatura (ecuación 3). Siendo  $k_0$  es el factor de frecuencia,  $E$  es la energía de activación y  $R$  es la constante de los gases.  $C$  es el calor específico.  $\rho$  es la densidad másica de los flujos de entrada y salida del proceso. La tasa de flujo másico  $w$  se define según la ecuación 4.  $\Delta H_R$  es el calor de reacción por mol de

$A$  que es reaccionado.  $T_c$  es la temperatura del agua que ingresa en la serpentina de refrigeración.  $U$  es el coeficiente global de transferencia de calor y  $A$  es el área de transferencia de calor.

$$k = k_0 e^{-E/RT} \quad (3)$$

$$w = q\rho \quad (4)$$

En la tabla 1 se muestran los parámetros y la condición nominal de operación del CSTR.  $c_A$  y  $T$  son variables de salida y  $T_c$  es la variable manipulada de entrada al proceso.

Tabla 1. Variables y parámetros del proceso.

Parámetro	Valor
$q$	100 L/min
$c_{Ai}$	1 mol/L
$T_i$	350 K
$V$	100 L
$\rho$	1000 g/L
$C$	0.239 J/g K
$-\Delta H_R$	$5 \times 10^4$ J/mol
$E/R$	8750 K
$k_0$	$7.2 \times 10^{10} \text{ min}^{-1}$
$UA$	$5 \times 10^4$ J/min K
$T_c(0)$	300 K
$c_A(0)$	0.4999182859586579 mol/L
$T(0)$	350.0055286902126 K

Se pide:

(a) Modelar y simular el sistema:

- Variando  $T_c$  en  $t = 0$ , con un cambio escalón desde 300 a 290 K
- Si efectuar variaciones en  $T_c$
- Variando  $T_c$  en  $t = 0$ , con un cambio escalón desde 300 a 305 K

Presentar los resultados de  $c_A$  y  $T$  en los tres casos para un tiempo de simulación de 10 min.

(b) Obtener el punto de operación del sistema en estado estacionario si  $T_c^e = 290$ . Considerar los valores de parámetros y condiciones iniciales de la tabla 1.

- (c) Linealizar el modelo expresándolo en variables desviadas. Considerar como punto de operación los valores presentados en la tabla 1 ( $T_c(0) = T_c^e, c_A(0) = c_A^e, T(0) = T^e$ ).
- (d) Obtener la función de transferencia  $FT \frac{\tilde{T}(s)}{\tilde{T}_c(s)}$ , a partir del modelo linealizado en variables desviadas obtenido en (c).
- (e) Sintonizar un controlador P, PI, PD o PID para establecer un control de  $T$ . Detallar las restricciones que debe cumplir un conjunto de parámetros  $\{K_p, T_I, T_D\}$  para asegurar una operatoria estable.
- (f) Dibujar el DLR si se utiliza un controlador PID con  $T_I = 1$  y  $T_D = 1$ . ¿Existe algún valor de  $K_p$  que permite una respuesta ante una entrada escalón estable y no oscilatoria? En caso contrario, fijando otros valores de  $T_I$  y  $T_D$ , ¿existiría algún conjunto de valores de  $K_p$  que permita una respuesta estable y no oscilatoria?
- (g) Determinar los valores de  $K_p$  críticos en la consigna anterior que determinan si el sistema es o no estable y si tendrá o no oscilaciones en su respuesta. Verificar los valores de  $K_p$  obtenidos mediante simulaciones numéricas.

#### Notas:

- Entregar un informe con el desarrollo de las consignas.
- Las consignas de modelado y simulación pueden desarrollarse con scilab-xcos, python o similares.
- Entregar los archivos desarrollados para el modelado y simulación.
- Indicar las unidades de trabajo en los modelos y resultados.
- Describir con sus palabras los resultados obtenidos.

#### Referencias:

Seborg, D. E., Edgar, T. F., Mellichamp, D. A., & Doyle III, F. J. (2016). Process dynamics and control. John Wiley & Sons.