# Modelo de simulación de un reactor químico

***Juan Pablo Requez***
***juanrequez@gmail.com***
***jprequez@ucla.edu.ve***
***jrequez@unexpo.edu.ve***

Se suministra el modelo de un reactor no isotérmico y su aproximación lineal alrededor del punto de equilibrio para el cual se suministran los datos.

Se tiene un reactor donde el flujo Fj de la chaqueta es constante y se utiliza para refrigerar al fluido dentro del tanque. Las condiciones de entrada se denotan con el subíndice 0, obsérvese que la chaqueta refrigerante trabaja a volumen constante Vj, mientras que el tanque tiene un volumen variable. La reacción es de primer orden respecto al reactivo A, e irreversible, para formar al producto B.

***El modelo no lineal*** que describe al sistema está dado por

$$\frac{d}{dt}V = F_0 - F$$

$$\frac{d}{dt}C_A = \frac{C_{A0}\cdot F_0}{V} - \frac{C_A\cdot F_0}{V} - k_o\cdot e^{\frac{-E}{R\cdot T}}\cdot C_A$$

$$\frac{d}{dt}T = \frac{F_0\cdot T_0}{V} - \frac{F_0\cdot T}{V} - \frac{\lambda\cdot\left(k_o\cdot e^{\frac{-E}{R\cdot T}}\right)\cdot C_A}{\rho\cdot C_p} - \frac{U\cdot A}{\rho\cdot C_p\cdot V}\left(T - T_j\right)$$

$$\frac{d}{dt}T_j = \frac{F_j\cdot\left(T_{j0} - T_j\right)}{V_j} + \frac{U\cdot A}{\rho_j\cdot V_j\cdot C_j}\cdot\left(T - T_j\right)$$

Los valores de estado estacionario, los valores de los parámetros y entradas están dados en la siguiente tabla:

| Variable | Símbolo | tipo | valor | unidades |
|---|---|---|---|---|
| Volumen del tanque | V | estado | Estado estacionario: 48 | $ft^3$ |
| Concentración de A | $C_A$ | estado | Estado estacionario: 0.2 | $\frac{lbmol}{ft^3}$ |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| Temperatura dentro del reactor | T | estado | Estado estacionario: 532.699 | R |
| Temperatura dentro de la chaqueta | $T_j$ | estado | Estado estacionario: 532.53 | R |
| Concentración de A en la entrada | $C_{A0}$ | entrada | $0.208u(t)$ | $\frac{lbmol}{ft^3}$ |
| Temperatura de entrada del flujo de A | $T_0$ | entrada | $530\ u(t)$ | R |
| Temperatura de entrada del flujo de la chaqueta | $T_{j0}$ | entrada | $530\ u(t)$ | R |
| Flujo de entrada de A | $F_0$ | entrada | $40\ u(t)$ | $ft^3/s$ |
| Flujo de salida del reactor | $F$ | entrada | $40\ u(t)$ | $ft^3/s$ |
| Volumen de la chaqueta | $V_j$ | parámetro | 3.85 | $ft^3$ |
| Flujo del refrigerante | $F_j$ | parámetro | 40.5 | $ft^3/s$ |
| Constante cinética | $k_o$ | parámetro | $7.08 \times 10^{10}$ | 1/s |
| Energía de activación | E | parámetro | 30000 | BTU/lbmol |
| Área de transferencia de calor | A | parámetro | 250 | $ft^2$ |
| Constante de gas universal | R | parámetro | 1.99 | BTU/(lbmol R) |
| Calor de reacción exotérmico | $\lambda$ | parámetro | -30000 | BTU/lbmol |
| Densidad | $\rho$ | parámetro | 50 | $lbm/ft^3$ |
| Capacidad calorífica | $C_p$ | parámetro | 0.75 | BTU/(lbm R) |
| Capacidad calorífica del fluido refrigerante | $C_j$ | parámetro | 1 | BTU/(lbm R) |
| Densidad del fluido refrigerante | $\rho_j$ | parámetro | 62.3 | $lbm/ft^3$ |
| Coeficiente global de transferencia de calor | U | parámetro | 150 | $BTU/(s\ ft\ R)$ |

Mientras que el ***modelo lineal*** que describe al sistema (calculado alrededor del punto de estado estacionario descrito por la tabla anterior) está dado por

$$\begin{pmatrix} \frac{d}{dt} U_i \\ \frac{d}{dt} D_A \\ \frac{d}{dt} \Gamma \\ \frac{d}{dt} \Gamma_j \end{pmatrix} = A \cdot \begin{pmatrix} U_i \\ D_A \\ \Gamma \\ \Gamma_j \end{pmatrix} + B \cdot \begin{pmatrix} Q_0 \\ Q \\ D_{A0} \\ \Gamma_0 \\ \Gamma_{j0} \end{pmatrix}$$

Las matrices de linealización $A_e$ y $B_e$ (el subíndice “e” se colocó para que no sean confundidas con otros parámetros de la tabla anterior)

$$A_e = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1.458 \times 10^{-4} & -0.87 & -3.853 \times 10^{-4} & 0 \\ 0.12 & 29.013 & -21.358 & 20.833 \\ 0 & 0 & 156.344 & -166.864 \end{pmatrix}$$

$$B_e = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1.75 \times 10^{-4} & 0 & 0.833 & 0 & 0 \\ -0.056 & 0 & 0 & 0.833 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10.519 \end{pmatrix}$$

Las variables dependientes (estados) son

$$U_i = V - Veq$$
$$D_A = C_A - C_{Aeq}$$
$$\Gamma = T - T_{eq}$$
$$\Gamma_j = T_j - T_{jeq}$$

las variables independientes (entradas) son

$$Q := F - F_{eq}$$

$$Q_0 := F_0 - F_{0eq}$$

$$D_{A0} := C_{A0} - C_{A0eq}$$

$$\Gamma_0 := T_0 - T_{0eq}$$

$$\Gamma_{j0} := T_{j0} - T_{j0eq}$$