



Ejemplos de modelos de procesos químicos

Introducción

Ejemplos

- ✓ Reactor químico
- ✓ Columna de destilación
- ✓ Reactor biológico



Introducción

Modelos

- ✓ Conjunto de restricciones matemáticas (Ecuaciones diferenciales o algebraicas) que proceden de la aplicación de diversos principios o leyes.
 - ✓ Otras representaciones
 - Sistemas lineales: Espacio de estados, Función de transferencia,...
- ✓ ¿Qué datos se pueden obtener?
 - ✓ Puntos de operación: Estacionario (Ec. Algebraica)
 - ✓ Evolución de transitorios: No estacionario (Ec. Diferencial)

Herramienta de simulación

- ✓ MatLab

Sistemas estudiados

- ✓ Reactor: Fuertemente no lineal
- ✓ Columna de destilación: Sistema grande
- ✓ Biológico: Proceso poco conocido



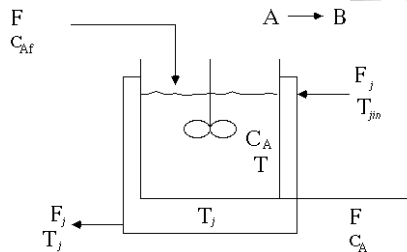
Reactor químico

Hipótesis

- ✓ Mezcla perfecta
- ✓ Volumen constante
- ✓ Valores de los parámetros ctes

Parámetros

- ✓ F/V
- ✓ Ctes de velocidad de reacción
 - ✓ K_o
 - ✓ E
- ✓ Entalpía de reacción $-\Delta H$
- ✓ Coeficiente de transmisión de calor U
- ✓ Temperatura del refrigerante T_j



Reactor químico

Modelo

$$\frac{dc_A}{dt}(t) = F/V (c_{Af}(t) - c_A(t)) - k_0 e^{-E/RT(t)} c_A(t)$$

$$\frac{dT}{dt}(t) = F/V (T_f(t) - T(t)) + \left(\frac{-\Delta H}{\rho c_p} \right) k_0 e^{-E/RT(t)} c_A(t) - \frac{UA}{V\rho c_p} (T(t) - T_j)$$

Puntos de operación

- ✓ Existen diversos puntos de equilibrio (Estacionario)
 - ✓ Dependen del valor inicial
 - En la operación
 - En la simulación
 - Punto de inicio de búsqueda
 - ✓ Dependencia
 - Calor aportado por la reacción
 - Calor liberado al refrigerante



Columna de destilación

Se considera una operación de destilación ideal binaria

✓ Hipótesis

✓ Se supone que existe un balance en las fracciones molares de las dos fases

$$y = f(x) \rightarrow y = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x}$$

✓ Balances en platos "normales"

$$\frac{dM_i x_i}{dt} = L_{i-1} x_{i-1} + V_{i+1} y_{i+1} - L_i x_i - V_i y_i$$

Evaluación de los flujos

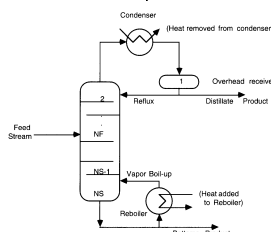
✓ Etapa de alimentación $V_{NF} = V_{NF+1} + F(1 - q_F)$
 $L_{NF} = L_{NF-1} + F q_F$

✓ Condensador $V_2 = L_D + D$

✓ Evaporador $B = L_{NS-1} - V_{reboiler}$

✓ Sección rectificado $\begin{cases} L_R = L_D \\ V_R = V_S + F(1 - q_R) \end{cases}$

✓ Sección empobrecimiento $\begin{cases} L_S = L_R + F q_F \\ V_S = V_{reboiler} \end{cases}$



Columna de destilación

Balances

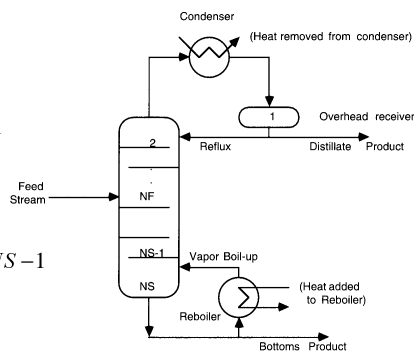
$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{1}{M_D} (V_R (y_2 - x_1))$$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{M_T} [L_R x_{i-1} + V_R y_{i+1} - L_R x_i - V_R y_i] \quad i = 2 \dots NF - 1$$

$$\frac{dx_{NF}}{dt} = \frac{1}{M_T} [L_R x_{NF-1} + V_S y_{NF+1} + F z_F - L_S x_{NF} - V_R y_{NF}]$$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{M_T} [L_S x_{i-1} + V_S y_{i+1} - L_S x_i - V_S y_i] \quad i = NF + 1 \dots NS - 1$$

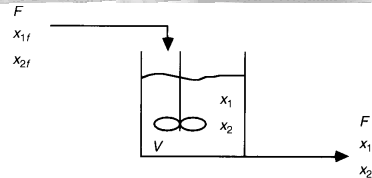
$$\frac{dx_{NS}}{dt} = \frac{1}{M_B} [L_S x_{NS-1} - B x_{NS} - V_S y_{NS}]$$





Reactor biológico

- Se considera un reactor
 - ✓ x_1 biomasa
 - ✓ x_2 sustrato
 - ✓ r_1 velocidad de generación de células
 - ✓ r_2 velocidad de consumo de sustrato
 - ✓ F flujo volumétrico



$$\frac{dVx_1}{dt} = Fx_{1f} - Fx_1 + Vr_1 \quad \frac{dVx_2}{dt} = Fx_{2f} - Fx_2 + Vr_2$$

- Se aplica un balance de componentes

Hipótesis

- ✓ Se desprecia el efecto del balance de masas global
- ✓ Se supone que la velocidad de crecimiento es de la forma $r_1 = \mu x_1$
- ✓ Las velocidades están relacionadas por una constante Y

$$\frac{dx_1}{dt} = (\mu - D)x_1$$

$$\frac{dx_2}{dt} = D(x_{2f} - x_2) - \frac{\mu x_1}{Y}$$



Reactor biológico

- Comportamiento no lineal determinado por la ley de crecimiento
 - ✓ Problema de identificación de los parámetros
- Existen diferentes puntos de operación
 - ✓ *Washout*
 - ✓ Lavado: Cuando no existe población de células
 - ✓ $\mu = D$: Velocidad de crecimiento igual a la Dilución

