

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

**ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO DE
REACTORES DISCONTINUOS Y
SEMICONTINUOS: MODELIZACIÓN Y
COMPROBACIÓN EXPERIMENTAL**

Autor: M. Dolors Grau Vilalta
Director: Lluís Puigjaner Corbella

Septiembre de 1999

2. Modelización matemática de un Reactor Discontinuo y Semicontinuo

El comportamiento dinámico del reactor se modela matemáticamente a partir de una serie de ecuaciones diferenciales obtenidas a partir de los Balances de Materia y Energía referidos a la masa reaccionante, la pared del reactor, y el fluido que circula por el interior de la camisa.

En el Capítulo 1 se han introducido las diferencias y analogías entre el comportamiento de un reactor discontinuo y semicontinuo. Estas diferencias aparecen reflejadas a la hora de plantear los Balances de Materia y Energía, especialmente en las ecuaciones correspondientes al Balance de Materia y al Balance de Energía referidos a la masa reaccionante. En la Fig. 2.1. puede observarse la nomenclatura que se utilizará para cada uno de los dos reactores.

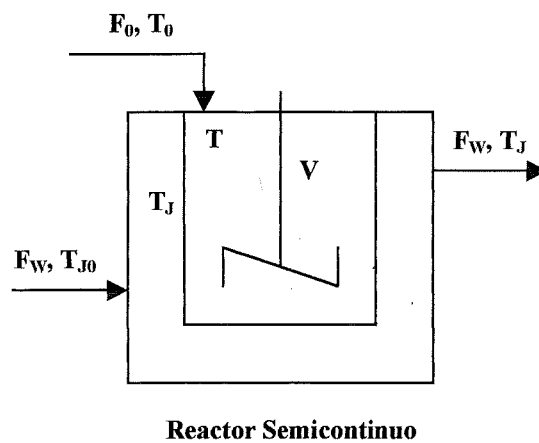
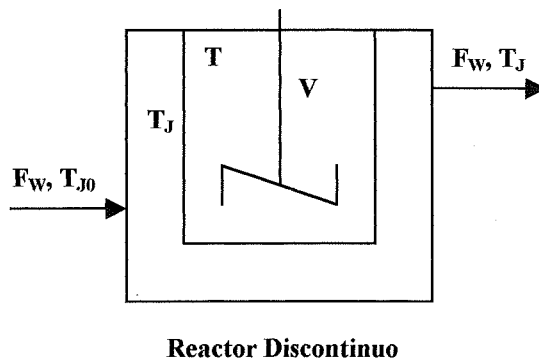


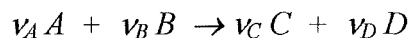
Fig. 2.1. Reactor discontinuo y semicontinuo.

Los Balances de Materia y Energía se plantearán basados en las siguientes hipótesis:

- El reactor se supone que tiene un comportamiento de mezcla perfecta y que no tiene pérdidas de calor hacia el exterior.
- El calor debido a la mezcla y agitación es despreciable.
- El calor específico y la densidad son constantes.
- La variación de volumen del contenido del reactor es despreciable para el caso del reactor discontinuo.

2.1. Balances de Materia

Las dos reacciones estudiadas en este trabajo se desarrollan a partir de dos reactivos, por este motivo se plantearán los Balances para una reacción general del tipo:



En los dos casos la ecuación cinética es de primer orden respecto a cada uno de los reactivos, y se considerará que la ley de velocidad se ajusta a la ecuación de Arrhenius. También se supone que la densidad de la masa reaccionante permanece constante.

Para el modo de operación semicontinuo, el reactivo A se adiciona de forma continua y, por tanto, el volumen de la masa reaccionante es variable a lo largo del tiempo.

Balance de Materia total

$$\begin{aligned} & \text{Reactor Discontinuo} \\ & \frac{d(\rho \cdot V)}{dt} = 0 \quad (2.1) \end{aligned}$$

$$\frac{dV}{dt} = 0 \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} & \text{Reactor Semicontinuo} \\ & \frac{d(\rho \cdot V)}{dt} = F_0 \cdot \rho \quad (2.2) \end{aligned}$$

$$\frac{dV}{dt} = F_0 \quad (2.4)$$

Balance de Materia de componentes

Reactor Discontinuo

$$\frac{V \cdot dc_A}{dt} = -V \cdot v_A \cdot k \cdot c_A \cdot c_B \quad (2.5)$$

$$\frac{V \cdot dc_B}{dt} = -V \cdot v_B \cdot k \cdot c_A \cdot c_B \quad (2.7)$$

Reactor Semicontinuo

$$\frac{d(V \cdot c_A)}{dt} = F_0 \cdot c_{A0} - V \cdot v_A \cdot k \cdot c_A \cdot c_B \quad (2.6)$$

$$\frac{d(V \cdot c_B)}{dt} = -V \cdot v_B \cdot k \cdot c_A \cdot c_B \quad (2.8)$$

2.2. Balance de Energía de la masa reaccionante

2.2.1. Funcionamiento con transmisión de calor

En el planteamiento de los Balances de Energía se tendrá en cuenta, en todos los casos, la transmisión del calor a través de la pared, puesto que el reactor es de vidrio y su efecto puede ser considerable.

Para el caso del reactor discontinuo se considerará el volumen de la masa reaccionante constante.

Reactor Discontinuo

$$\rho \cdot V \cdot C_p \cdot \frac{dT}{dt} = -\Delta H_r \cdot V \cdot k \cdot c_A \cdot c_B - Q_M \quad (2.9)$$

Esta ecuación se introducirá en los programas de simulación de la siguiente forma:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{\Delta H_r \cdot k \cdot c_A \cdot c_B}{\rho \cdot C_p} - \frac{Q_M}{V \cdot \rho \cdot C_p} \quad (2.10)$$

En el caso del reactor semicontinuo el volumen de la masa reaccionante y, por tanto, el área de transmisión de calor son variables a lo largo de la reacción.

Reactor semicontinuo

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{d(V \cdot T)}{dt} = \rho \cdot C_p \cdot F_0 \cdot T_0 - \Delta H_r \cdot V \cdot k \cdot c_A \cdot c_B - Q_M \quad (2.11)$$

Esta ecuación se introducirá en los programas de simulación de la siguiente forma:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_0 \cdot (T_0 - T)}{V} - \frac{\Delta H_r \cdot k \cdot c_A \cdot c_B}{\rho \cdot C_p} - \frac{Q_M}{V \cdot \rho \cdot C_p} \quad (2.12)$$

donde:

$$Q_M = h_i \cdot A_i \cdot (T - T_M) \quad (2.13)$$

indica la velocidad de transferencia de calor entre la masa reaccionante y la pared .

En los experimentos realizados sin reacción química (calentamiento/enfriamiento de agua), la ecuación (2.10) queda reducida a:

$$\frac{dT}{dt} = - \frac{Q_M}{V \cdot \rho \cdot C_p} \quad (2.14)$$

A partir de estos experimentos se han determinado los coeficientes de transmisión de calor.

2.2.2. Determinación de los coeficientes de transmisión de calor

Los cambios térmicos entre el medio reaccionante y el fluido que circula por la camisa se describen a través de la estimación de los coeficientes de transmisión de calor. Las correlaciones utilizadas para el cálculo de estos coeficientes son numerosas y tienen en cuenta el tipo y dimensiones del sistema de agitación, la configuración y características geométricas del reactor y de la camisa, y las propiedades físicas del fluido que intervienen en la transmisión de calor.

La transmisión de calor a través de la pared involucra el cálculo de dos coeficientes, calculados a partir de correlaciones obtenidas de la bibliografía:

- h_i (medio reaccionante-pared)
- h_o (fluido de la camisa-pared)

2.2.2.1. Determinación del coeficiente de transmisión de calor medio reaccionante-pared

La relación utilizada para el cálculo del coeficiente interior de transmisión de calor h_i entre el medio reaccionante y la pared es la propuesta por Fletcher (1987). El coeficiente se determina a partir de la expresión:

$$h_i = \frac{Nu \cdot \lambda_r}{d_{\text{int}}} \quad (2.15)$$

donde Nu es el número de Nusselt:

$$Nu = a \cdot Re^b \cdot Pr^c \cdot \left(\frac{\eta_r}{\eta_p} \right)^d \quad (2.16)$$

Re es el número de Reynolds:

$$Re = \frac{\omega \cdot d_{\text{agi}}^2 \cdot \rho}{\eta_r} \quad (2.17)$$

Pr es el número de Prandtl:

$$Pr = \frac{C_p \cdot \eta_r}{\lambda_r} \quad (2.18)$$

Los coeficientes a , b , c y d vienen dados para distintos tipos de agitadores y en función del tipo de régimen de circulación. En la tabla 2.1. pueden verse los valores aportados por Fletcher (1987).

Tabla 2.1. Coeficientes de la ecuación (2.16) para distintos sistemas de agitación (Fletcher, 1987)

Tipo de agitador	Re	a	b	c	d
Turbina (A)	< 400	0.54	2/3	1/3	0.14
Turbina (B)	≥ 400	0.74	2/3	1/3	0.14
"Impeller" (vitricado)	$2 \cdot 10^4 \leq Re \leq 2 \cdot 10^6$	0.33	2/3	1/3	0.14
Ancla	$30 < Re < 300$	1	0.5	1/3	0.14
Ancla	$300 < Re < 5000$	0.38	2/3	1/3	0.14

2.2.2.2. Determinación del coeficiente de transmisión de calor fluido de la camisa-pared

En este caso existen numerosas correlaciones en la bibliografía, que dependen del tipo de camisa que acompaña al reactor. En el reactor de estudio se ha considerado una camisa simple, es decir, sin sistema de inyección o de circulación forzada que permitirían mejorar la transferencia de calor. Cabe remarcar que para una camisa simple la circulación del fluido es lenta y es preferible utilizar un coeficiente del tipo convección natural.

El régimen de circulación se caracteriza por el número de Reynolds definido por:

$$Re = \frac{d_{eq} \cdot v_{fl} \cdot \rho}{\eta_{fl}} \quad (2.19)$$

donde el diámetro equivalente viene dado por (Fig. 2.2):

$$d_{eq} = \frac{4 \cdot (\text{sección de paso del fluido})}{\text{perímetro mojado}} = \frac{4 \cdot \frac{\pi}{4} \cdot (d_{ext}^2 - d_{int}^2)}{\pi \cdot (d_{int} + d_{ext})} = d_{ext} - d_{int} \quad (2.20)$$

y la velocidad del fluido de la camisa viene dada por:

$$v_{fl} = \frac{F_w}{\frac{\pi}{4} \cdot (d_{ext}^2 - d_{int}^2)} \quad (2.21)$$

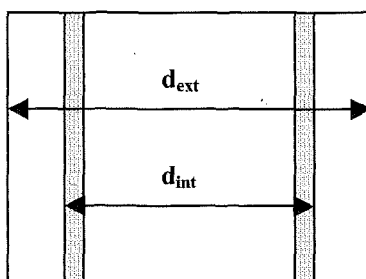


Fig. 2.2. Esquema de las paredes del reactor.

Aplicando estas ecuaciones para una camisa simple se obtiene un régimen de circulación laminar.

El coeficiente de transmisión de calor se obtiene a partir de la expresión:

$$h_0 = \frac{Nu \cdot \lambda_{fl}}{d_{eq}} \quad (2.22)$$

Las correlaciones permiten determinar el número de Nusselt en función del número de Reynolds, y del número de Prandtl definido por:

$$Pr = \frac{C_J \cdot \eta_{fl}}{\lambda_{fl}} \quad (2.23)$$

En el caso de que el número de Reynolds sea muy pequeño ($Re < 200$), es preferible modelizar la transferencia de calor por convección natural:

$$Nu = 0.8 \cdot k' \cdot Pr^{0.33} \cdot Gr^{0.33} \quad (2.24)$$

donde $k' = 0.15$ (factor que depende del sentido de circulación del fluido en la camisa) y Gr es el número de Grashof:

$$Gr = \frac{d_{eq}^3 \cdot \rho \cdot g \cdot \beta \cdot |T_M - T_J|}{\eta_{fl}^2} \quad (2.25)$$

2.2.3. Funcionamiento adiabático

Se ha utilizado la planta para llevar a cabo una serie de experimentos sin transmisión del calor, para el caso de la reacción más exotérmica y en modo de operación discontinuo. En este caso la ecuación del Balance de Energía de la masa reaccionante (2.10) queda reducida a:

$$\frac{dT}{dt} = - \frac{\Delta H_r \cdot k \cdot c_A \cdot c_B}{\rho \cdot C_p} \quad (2.26)$$

2.3. Balance de Energía de la pared del reactor

Puesto que la pared es de vidrio se ha tenido en cuenta su efecto, tal como se indica en la Fig. 2.3. De forma rigurosa, la ecuación del Balance de Energía de la pared debería ser una ecuación diferencial parcial, puesto que la temperatura varía con el tiempo y con la posición radial. Una aproximación menos rigurosa, pero utilizada

frecuentemente, considera que toda la pared se mantiene a una misma temperatura constante, T_M .

La ecuación del Balance de Energía para la pared viene dada por la expresión:

$$\rho_M \cdot V_M \cdot C_M \cdot \frac{dT_M}{dt} = Q_M - Q_J \quad (2.27)$$

Esta ecuación se introducirá en los programas de simulación de la siguiente forma:

$$\frac{dT_M}{dt} = \frac{Q_M - Q_J}{V_M \cdot \rho_M \cdot C_M} \quad (2.28)$$

donde:

$$Q_J = h_0 \cdot A_0 \cdot (T_M - T_J) \quad (2.29)$$

indica la velocidad de transferencia de calor entre la pared y el fluido que circula por la camisa.

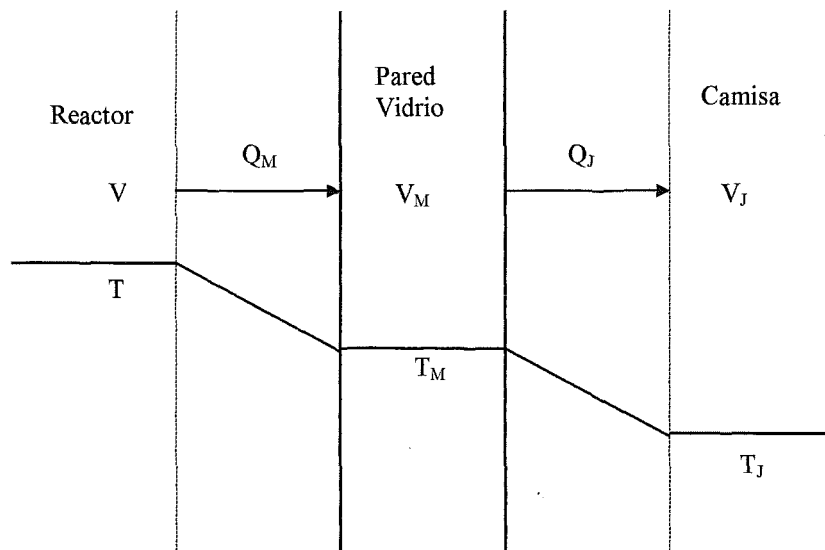


Fig 2.3. Flujo de calor a través de la pared del reactor, entre la masa reaccionante y el fluido de la camisa.

2.4. Balance de Energía del fluido de la camisa

Para extraer el calor generado por la reacción o comunicar calor si hace falta, el reactor esta envuelto por una camisa, por la que pueden circular fluidos de

calentamiento o enfriamiento según convenga. Se considera el volumen de fluido en el interior de la camisa, V_J , constante.

Las ecuaciones del Balance de Energía para el fluido de la camisa pueden ser distintas según el modelo ideal utilizado, el tipo de fluido y la forma de introducirlo, y el sistema de control utilizado.

2.4.1. Según distintos modelos

El fluido en el interior de la camisa puede tener un comportamiento que se ajuste a modelos ideales distintos, según las condiciones a las que se vea sometido.

2.4.1.1. Modelo de mezcla perfecta

Este modelo supone que la temperatura del fluido en el interior de la camisa es la misma en cualquier punto. Según este modelo la ecuación del Balance de Energía para el fluido de la camisa será:

$$\rho_J \cdot V_J \cdot C_J \cdot \frac{dT_J}{dt} = F_W \cdot \rho_J \cdot C_J \cdot (T_{J0} - T_J) + Q_J \quad (2.30)$$

Esta ecuación se introducirá en los programas de simulación de la siguiente forma:

$$\frac{dT_J}{dt} = \frac{F_W \cdot (T_{J0} - T_J)}{V_J} + \frac{Q_J}{V_J \cdot \rho_J \cdot C_J} \quad (2.31)$$

2.4.1.2. Modelo de división de la camisa en zonas

Esta alternativa supone dividir el volumen de la camisa en un número de zonas con comportamiento de mezcla perfecta cada uno de ellas, tal como se indica en la Fig. 2.4. En este caso es necesaria una ecuación de Balance de Energía para cada zona.

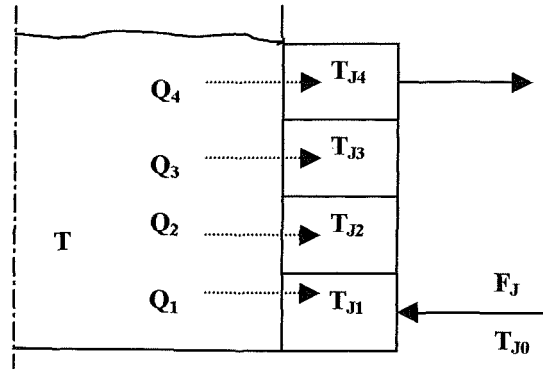


Fig. 2.4. Modelo de división de la camisa en zonas.

Si suponemos n zonas de igual volumen y área de transmisión de calor, aparecerán n ecuaciones para el Balance de Energía de la camisa:

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \cdot \rho_J \cdot V_J \cdot C_J \cdot \frac{dT_{J1}}{dt} &= F_W \cdot \rho_J \cdot C_J \cdot (T_{J0} - T_{J1}) + \frac{1}{n} \cdot Q_{J1} \quad j=1 \\ \frac{1}{n} \cdot \rho_J \cdot V_J \cdot C_J \cdot \frac{dT_{Jj}}{dt} &= F_W \cdot \rho_J \cdot C_J \cdot (T_{Jj-1} - T_{Jj}) + \frac{1}{n} \cdot Q_{Jj} \quad j=2, \dots, n \end{aligned} \quad (2.32)$$

donde:

$$Q_{Jj} = h_0 \cdot A_0 \cdot (T_M - T_{Jj}) \quad j=1, \dots, n \quad (2.33)$$

Ahora la ecuación (2.29) quedará de la forma:

$$Q_J = h_0 \cdot A_0 \cdot (T_M - T_{Jm}) \quad (2.34)$$

donde:

$$T_{Jm} = \frac{\sum_{j=1}^n T_{Jj}}{n} \quad (2.35)$$

2.4.1.3. Modelo de división de la camisa y la pared en zonas

En este caso también se considera que la temperatura de la pared varía a lo largo de la camisa y, por tanto, se divide en varias zonas de igual volumen y área.

Las n ecuaciones (2.32) serán las mismas, pero ahora la ecuación (2.33) tendrá la forma:

$$Q_{Jj} = h_0 \cdot A_0 \cdot (T_{Mm} - T_{Jj}) \quad j=1, \dots, n \quad (2.36)$$

donde:

$$T_{Mm} = \frac{\sum_{j=1}^n T_{Mj}}{n} \quad (2.37)$$

Las ecuaciones correspondientes a la pared (2.28) pasarán a ser:

$$\frac{dT_{Mj}}{dt} = \frac{Q_{Mj} - Q_{Jj}}{V_M \cdot \rho_M \cdot C_M} \quad j = 1, \dots, n \quad (2.38)$$

donde:

$$Q_{Mj} = h_i \cdot A_i \cdot (T - T_{Mj}) \quad j = 1, \dots, n \quad (2.39)$$

Y por último se modificará la ecuación (2.13) que pasará a ser:

$$Q_M = h_i \cdot A_i \cdot (T - T_{Mm}) \quad (2.40)$$

y la ecuación (2.29) que pasará a ser:

$$Q_J = h_0 \cdot A_0 \cdot (T_{Mm} - T_{Jm}) \quad (2.41)$$

2.4.1.4. Modelo de flujo de pistón

En el comportamiento de mezcla perfecta se considera que el fluido que circula por la camisa tiene una temperatura uniforme al estar perfectamente mezclado. A menudo este comportamiento no es del todo cierto. Si el flujo de fluido que circula por la camisa es suficientemente grande y la temperatura no cambia mucho de la entrada a la salida, entonces se puede considerar comportamiento de mezcla completa. En caso contrario, se utiliza una temperatura media de la camisa definida por:

$$T_{JA} = \frac{T_{J0} + T_J}{2} \quad (2.42)$$

Esta ecuación es la que se utiliza para determinar el valor de T_J , mientras que la temperatura media se determina mediante una ecuación que sustituye a la ecuación (2.31):

$$\frac{dT_{JA}}{dt} = \frac{F_W \cdot (T_{J0} - T_J)}{V_J} + \frac{Q_J}{V_J \cdot \rho_J \cdot C_J} \quad (2.43)$$

Pero en este caso Q_J no vendrá dada por la ecuación (2.29) sino por la expresión:

$$Q_J = h_0 \cdot A_0 \cdot (T_M - T_{JA}) \quad (2.44)$$

2.4.2. Según distintos fluidos en la camisa

Las ecuaciones que han aparecido hasta el momento han supuesto que en el interior de la camisa existe un único fluido. Por tanto, serán útiles cuando se esté en fase de enfriamiento o calentamiento exclusivamente. Si por el contrario, interesa variar el modo de operación de la camisa y calentar o enfriar la masa reaccionante alternativamente, a través de la camisa deberán circular distintos fluidos según convenga.

2.4.2.1. Vapor / agua fría

Este es el sistema utilizado por Luyben (1990) y Marroquin y Luyben (1973). En este caso, el fluido de calentamiento será vapor y el de enfriamiento agua fría. Al estar los dos fluidos en distinto estado de agregación, el modelo será distinto durante el periodo de calentamiento y de enfriamiento. Por otra parte, habrá un periodo en el que la camisa se vaciará de vapor y sucesivamente se llenará con agua fría.

Fase de calentamiento:

En primer lugar, será necesaria una ecuación para el Balance de Materia del vapor:

$$V_J \cdot \frac{d\rho_J}{dt} = W_S - W_C \quad (2.45)$$

La ecuación del Balance de Energía del vapor vendrá dada por la expresión:

$$V_J \cdot \frac{d(U_J \cdot \rho_J)}{dt} = F_S \cdot \rho_S \cdot H_S + Q_J - W_C \cdot h_C \quad (2.46)$$

Los cambios de energía interna (calor sensible) generalmente se pueden despreciar comparados con los efectos del calor latente. De esta forma la expresión anterior queda reducida a una ecuación algebraica:

$$W_C = \frac{h_{0s} \cdot A_0 \cdot (T_J - T_M)}{H_S - h_C} \quad (2.47)$$

Además, será necesaria una ecuación de estado para el vapor. Por ejemplo, si se supone comportamiento de gas ideal, la ecuación será simple:

$$\rho_J = \frac{M \cdot P_J}{R \cdot T_{Jabs}} \quad (2.48)$$

$$P_J = \exp\left(\frac{A_w}{T_{Jabs}} + B_w\right)$$

Fase de llenado con agua fría:

Durante este período el área de transmisión de calor y el volumen de la camisa variarán a medida que se vaya llenando la camisa, por tanto, las ecuaciones serán:

$$A_0 = \left(\frac{A_0}{V_J}\right)_{total} \cdot V_J \quad (2.49)$$

$$\frac{dV_J}{dt} = F_w \quad (2.50)$$

$$\frac{d(V_J \cdot T_J)}{dt} = F_w \cdot T_{J0} + \frac{Q_J}{\rho_J \cdot C_J} \quad (2.51)$$

donde Q_J viene dado por la ecuación (2.29).

Fase de enfriamiento:

Si se supone que durante esta fase el comportamiento del fluido de la camisa es de mezcla perfecta, solo será necesaria una ecuación para la camisa, se trata de la ecuación (2.30).

2.4.2.2. Agua caliente / agua fría

Este es uno de los sistemas más utilizados por su simplicidad. El fluido de calentamiento acostumbra a ser agua caliente (entre 70 y 80 °C), y el fluido de enfriamiento agua fría (entre 10 y 20 °C).

El modelo matemático utilizado es parecido al estudiado por Rotstein y Lewin (1992). El mecanismo de calentamiento/enfriamiento se simplifica, respecto al

propuesto en el apartado anterior, puesto que se elimina el inconveniente de la presencia de dos fases y las tres etapas (camisa con vapor, llenado y camisa con agua) quedan reducidas a una, ya que se supone que los fluidos de calentamiento y enfriamiento tienen igual densidad y capacidad calorífica, y que la camisa está siempre llena. En este caso habrá que distinguir entre el flujo de agua caliente (F_{WC}) y el de agua fría (F_{WF}). De esta forma suponiendo el modelo de mezcla perfecta, la ecuación (2.31) pasará a ser:

$$\frac{dT_J}{dt} = \frac{F_{WF} \cdot (T_{JF} - T_J)}{V_J} + \frac{F_{WC} \cdot (T_{JC} - T_J)}{V_J} + \frac{Q_J}{V_J \cdot \rho_J \cdot C_J} \quad (2.52)$$

En la Figura 2.5 puede verse el esquema del reactor con el sistema de calentamiento/enfriamiento alternativo. Inicialmente se utiliza agua caliente para aumentar la temperatura de reacción hasta el nivel deseado y seguidamente se introduce agua fría para extraer el calor generado por la reacción y mantener así la temperatura en el margen establecido previamente.

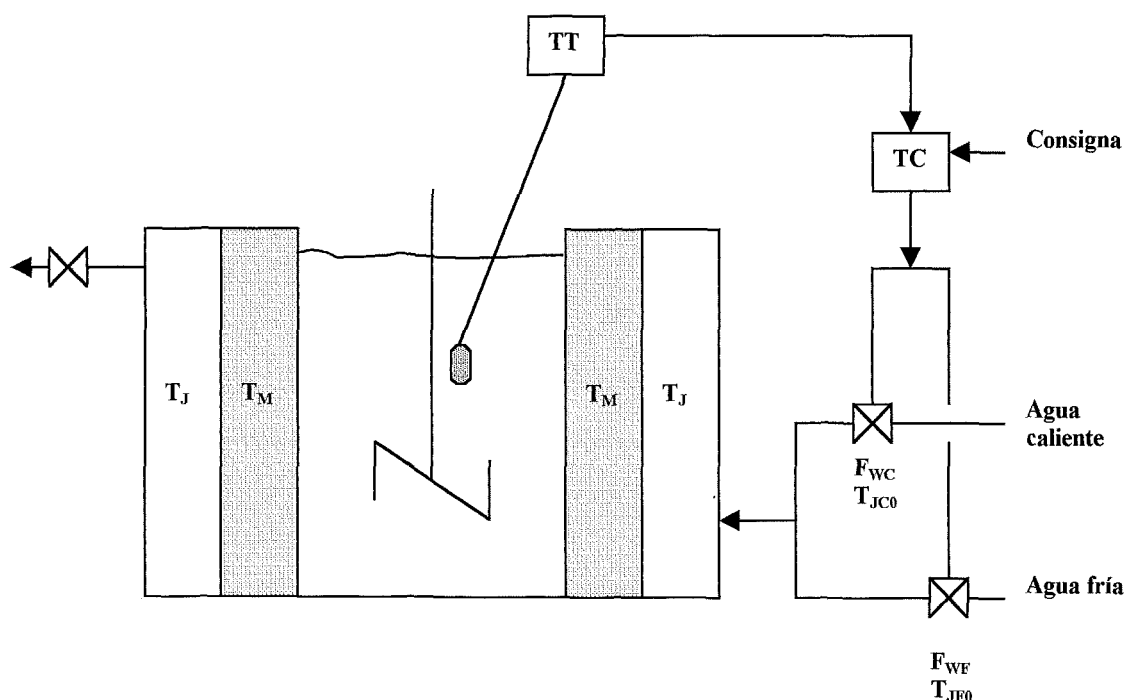


Fig. 2.5. Esquema del sistema de calentamiento/enfriamiento alternativo en la camisa.

2.4.2.3. Fluido único con tanque de mezcla externo

Este sistema está basado en el sistema utilizado por Kiparissides y Shah (1983). En este caso, la camisa se llena con un único fluido, obtenido mezclando previamente

en un tanque exterior vapor de agua de caudal variable, con agua fría de caudal fijo (Fig. 2.6).

En este caso la ecuación (2.31) pasará a ser:

$$\frac{dT_J}{dt} = \frac{(F_{WF} \cdot \rho_J + W_C) \cdot (T_{J0} - T_J)}{V_J \cdot \rho_J} + \frac{Q_J}{V_J \cdot \rho_J \cdot C_J} \quad (2.53)$$

Por supuesto, a las ecuaciones del modelo habrá que añadir las correspondientes al tanque de mezcla exterior.

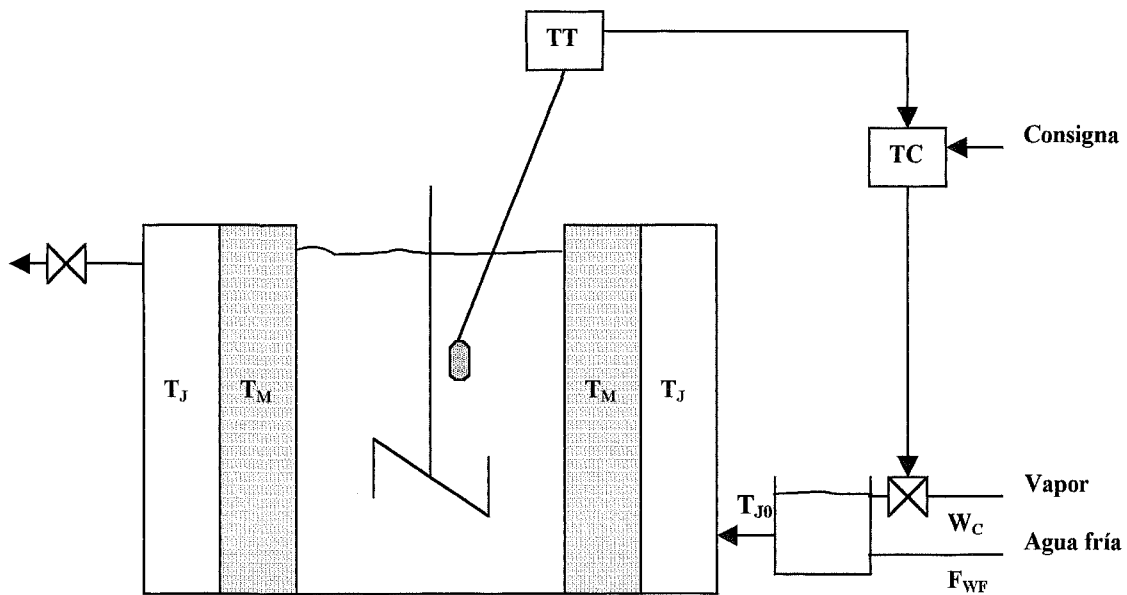


Fig. 2.6. Esquema del sistema de calentamiento/enfriamiento con fluido único en la camisa.

2.4.2.4. Incorporación de baños termostáticos

Los fluidos de calentamiento y enfriamiento se obtienen a partir de dos baños termostáticos (ver apartado 3.1.1.4).

Si el agua que circula por la camisa se recircula y entra de nuevo a sendos baños (Fig. 2.7), según la capacidad de calentamiento o enfriamiento de los mismos (dimensiones), puede ser necesario incluir las ecuaciones correspondientes a cada uno de ellos en el modelo matemático.

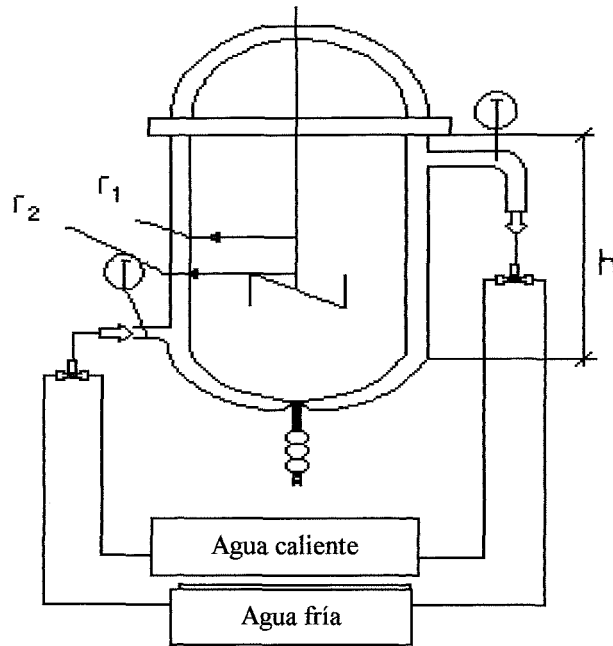


Fig. 2.7 Esquema del reactor y baños termostáticos completo.

La ecuación que se debería añadir sería según el esquema de la figura 2.8:

$$\frac{dT_{J0}}{dt} = \frac{F_w \cdot (T_J - T_{J0})}{V} - \frac{Q}{\rho_J \cdot C_J \cdot V} \quad (2.54)$$

Donde Q es la potencia del baño termostático.

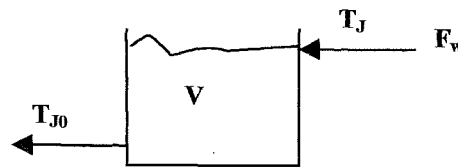


Fig. 2.8. Esquema del baño termostático.

2.4.2.5. Incorporación de retardos

En las ecuaciones del Balance de Energía de la masa reaccionante o del fluido que circula por la camisa es posible introducir un retardo, que queda justificado si se tiene en cuenta que el reactor de la planta piloto, que se utilizará para la obtención de datos experimentales, es de vidrio y por tanto tiene una respuesta lenta y una cierta inercia. La ecuación que se añadiría sería:

$$\frac{dT_{iH}}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (T_i - T_{iH}) \quad (2.55)$$

2.4.3. Según distintos sistemas de control

En el caso de un reactor químico interesará mantener la temperatura en el interior del mismo dentro de unos márgenes preestablecidos. Para conseguirlo aparecerán tres etapas:

- Medida de la variable a controlar (temperatura de la masa reaccionante).
- Comparación de la medida con el valor deseado o de consigna (*set-point*).
- Ajuste de otra variable que tenga influencia sobre la variable a controlar (apertura o cierre de la válvula de introducción del fluido caliente o frío).

El control que se utilizará será del tipo de retroalimentación (*feedback*) para controlar la temperatura del reactor (ver Fig. 2.5), que en un diagrama de bloques sería:

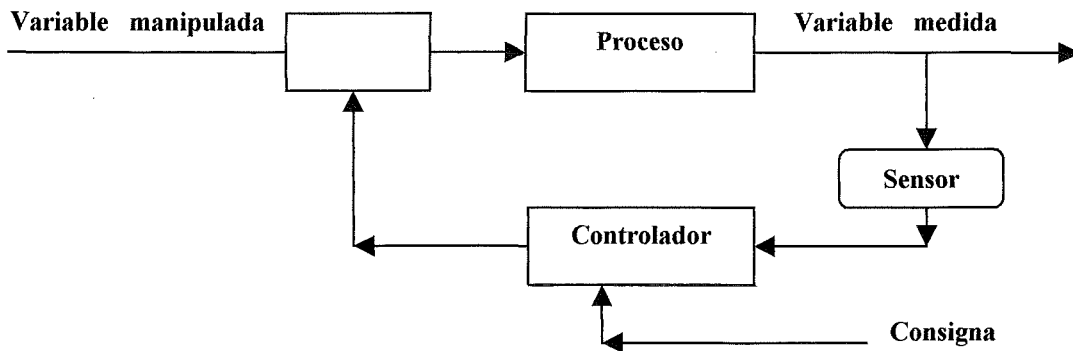


Fig. 2.9. Diagrama de bloques de un sistema de control con retroalimentación (*feedback*).

2.4.3.1. Control Todo/Nada (*On/Off*)

Es el sistema más sencillo y el más extensamente utilizado. La designación todo/nada significa que la salida del controlador, o la variable manipulada (corriente eléctrica) se encuentra o completamente abierta o completamente cerrada. En nuestro

caso o pasará a través de la válvula solamente agua caliente o solamente agua fría, no existe un estado intermedio de apertura, para ello la válvula debería ser de regulación.

Este tipo de controlador hace que el comportamiento de la variable tenga un intervalo a cada lado del valor de consigna donde el controlador no responde, es la llamada zona muerta. Cuando la variable controlada sale fuera de la zona muerta, la variable manipulada se coloca en todo o en nada. Esta desviación del valor de consigna se conoce como error estacionario (*offset*).

La naturaleza oscilatoria de la acción del controlador y el error estacionario hacen que resulte un control bastante imperfecto, pero su extensa utilización puede ser justificada por su simplicidad y bajo precio, y el razonable control obtenido, especialmente, para sistemas de respuesta lenta, como es el caso de estudio.

2.4.3.2. Control PID

El control proporcional (P), integral (I) y derivativo (D) se describe mediante la ecuación:

$$P = P_0 + K_p \cdot \varepsilon(t) + \frac{K_p}{\tau_I} \int_0^t \varepsilon(t) \cdot dt + K_p \cdot \tau_D \cdot \frac{d\varepsilon(t)}{dt} \quad (2.56)$$

P I D

donde,

- P_0 es la salida del controlador para un error cero.
- K_p es la ganancia proporcional.
- $\varepsilon(t)$ es el error o desviación respecto al valor deseado.
- τ_I es la constante de tiempo integral.
- τ_D es la constante de tiempo derivativo.

En el modo proporcional (controlador P), la señal de salida es proporcional al error detectado. Estos sistemas acostumbran a presentar oscilaciones y también el fenómeno del error estacionario. La eliminación del error estacionario se consigue mediante la acción integral (I), y para salvar los retardos es útil la acción derivativa (D).

En algunos casos de estudio se ha utilizado un controlador de tipo P y en otros de tipo PID. Para estos ejemplos será necesaria la incorporación de una serie de

ecuaciones correspondientes al transmisor, la apertura de las válvulas y su relación con el flujo de agua que circula por la camisa.

Para el caso de las válvulas se supondrá que la señal de salida del controlador conecta con dos válvulas de control, que funcionan de forma que justo cuando la válvula del fluido caliente (vapor o agua caliente) cierra, la válvula del fluido frío (agua fría) empieza a abrir (Fig. 2.10).

Si la instrumentación es neumática, la señal de salida del controlador es una presión (P) que puede variar entre 3 y 15 psi. Las válvulas se ajustarán de forma que la válvula del fluido caliente esté completamente abierta cuando la presión de salida del controlador sea $P = 15$ psi y esté cerrada cuando $P = 9$ psi (que corresponde a la mitad del rango completo de la salida del controlador). La válvula del fluido frío estará cerrada a $P = 9$ psi, y completamente abierta a $P = 3$ psi. Este tipo de válvulas permite operar con seguridad en caso de avería. Cuando la temperatura de consigna se alcanza, el controlador da la orden para que se abra la válvula del fluido de enfriamiento y se cierre completamente la válvula del fluido de calentamiento. A su vez durante la fase de calentamiento, la válvula del fluido de enfriamiento permanece cerrada. Si se produce una emergencia, es posible retirar la fuente de calor (fluido caliente) y entonces llenar completamente la camisa con agua fría (ver Tabla 2.2).

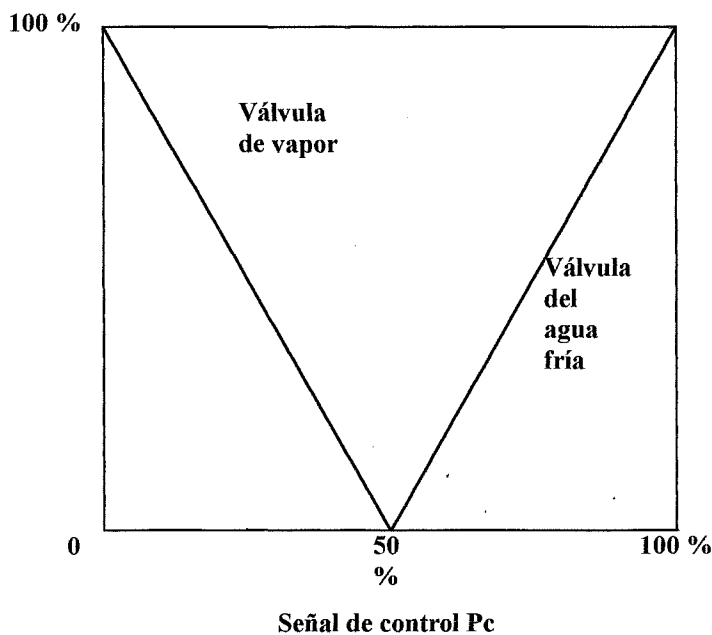


Fig. 2.10 Operación de las válvulas de control.

Tabla 2.2 Estado de apertura de las válvulas.

Rango de salida del controlador (psi)	Fracción de apertura de la válvula del fluido caliente (X_S)	Fracción de apertura de la válvula del fluido frío (X_W)
3		1 (abierta)
9	0 (cerrada)	0 (cerrada)
15	1 (abierta)	

Por lo tanto las ecuaciones para la apertura de las válvulas serán del tipo:

$$\begin{aligned} X_S &= \frac{(P - 9)}{6} \\ X_W &= \frac{(9 - P)}{6} \end{aligned} \quad (2.57)$$

Respecto a las ecuaciones para los flujos de los fluidos que circulan por la camisa, se deberá distinguir según el tipo de fluido.

Flujo de agua fría: $F_{WF} = C_{vW} \cdot \sqrt{\Delta P} \cdot X_W$ (2.58)

Flujo de agua caliente: $F_{WC} = C_{vW} \cdot \sqrt{\Delta P} \cdot X_S$ (2.59)

Flujo de vapor: $W_S = C_{vS} \cdot \sqrt{35 - P_J} \cdot X_S$ (2.60)

Por último aparecerá una ecuación más para el transmisor. En los ejemplos que se ha utilizado este tipo de control se han utilizado los mismos datos que en el texto de Luyben (1990). Se considera que el rango de temperatura del transmisor es de 50 a 250 °F, por tanto la señal de salida neumática será una presión de 3 psi a 50 °F a 15 psi a 250 °F.

$$P_{TT} = 3 + (T - 50) \cdot \frac{12}{200} \quad (2.61)$$

De esta forma si el control es de tipo P, la ecuación (2.56) quedaría de la forma:

$$P = P_0 + K_P \cdot (T_{set} - P_{TT}) \quad (2.62)$$

2.5. Nomenclatura

A	Reactivo	
A_i	Area interna de transmisión de calor	m^2

A_0	Area externa de transmisión de calor	m^2
A_W	Constante de presión de vapor para el agua	K
a	Coficiente de la ecuación del número de Nusselt	
b	Coficiente de la ecuación del número de Nusselt	
B	Reactivo	
B_W	Constante de presión de vapor para el agua	K
c	Coficiente de la ecuación del número de Nusselt	
c_A	Concentración del reactivo A	mol / l ($kmol / m^3$)
c_{A0}	Concentración inicial del reactivo A	mol / l
c_B	Concentración del reactivo B	mol / l
C	Producto	
C_J	Capacidad calorífica del fluido que circula por la camisa	$kcal / kg \cdot ^\circ C$
C_M	Capacidad calorífica de la pared	$kcal / kg \cdot ^\circ C$
C_P	Capacidad calorífica de la masa reaccionante	$kcal / kg \cdot ^\circ C$
C_{VS}	Coficiente de calibración de la válvula para vapor	$gpm / psi^{0.5}$
C_{VW}	Coficiente de calibración de la válvula para el agua	$gpm / psi^{0.5}$
d	Coficiente de la ecuación del número de Nusselt	
d_{agi}	Diámetro de la hélice del agitador	m
d_{ext}	Diámetro exterior	m
d_{int}	Diámetro interior	m
d_{eq}	Diámetro equivalente	m
D	Producto	
F_0	Caudal volumétrico de alimentación de reactivo	m^3 / min (l / min)
F_S	Caudal volumétrico de alimentación de vapor en la camisa	m^3 / min
F_W	Caudal volumétrico de alimentación de fluido en la camisa	m^3 / min
F_{WC}	Caudal volumétrico de alimentación de agua caliente en la camisa	m^3 / min
F_{WF}	Caudal volumétrico de alimentación de agua fría en la camisa	m^3 / min
Gr	Número de Grashof	
g	Gravedad	m / s^2
ΔH_r	Calor de reacción	$kcal / kmol$
h_C	Entalpía del líquido condensado	$kcal / kg \cdot min$
h_i	Coficiente de transmisión de calor interno	$kcal / min \cdot m^2 \cdot ^\circ C$
h_0	Coficiente de transmisión de calor externo para agua	$kcal / min \cdot m^2 \cdot ^\circ C$
h_{0S}	Coficiente de transmisión de calor externo para vapor	$kcal / min \cdot m^2 \cdot ^\circ C$
H_s	Entalpía del vapor alimentado	$kcal / kg$
j	Zona j -ésima de la camisa	
k	Constante de velocidad de la reacción	$m^3 / kmol \cdot s$
k'	Factor de corrección	

K_p	Ganancia proporcional	
M	Peso molecular	kg / kmol
n	Número de zonas en las que se divide la camisa	
Nu	Número de Nusselt	
ΔP	Caída de presión a través de la válvula	psi
P	Salida del controlador	psi
P_0	Salida del controlador para un error cero	psi
P_j	Presión de vapor	atm (psi)
Pr	Número de Prandtl	
P_{TT}	Señal de salida del transmisor	°C (°F)
Q	Potencia del baño termostático	kcal / min
Q_J	Velocidad de transferencia de calor externa	kcal / min
Q_{Jj}	Velocidad de transferencia de calor externa en la zona j-ésima	kcal / min
Q_M	Velocidad de transferencia de calor interna	kcal / min
Q_{Mj}	Velocidad de transferencia de calor interna en la zona j-ésima	kcal / min
R	Constante de los gases	kcal / kmol.K (atm.l / mol.K)
Re	Número de Reynolds	
t	Tiempo	min (s)
T	Temperatura de la masa reaccionante	°C
T_0	Temperatura a la que se adicionan los reactivos	°C
T_i	Cualquier temperatura medida	°C
T_{iH}	Cualquier temperatura medida retardada	°C
T_J	Temperatura del fluido que circula por la camisa	°C
T_{JA}	Temperatura media del fluido de la camisa para el modelo de flujo de pistón	
T_{JC}	Temperatura de entrada de agua caliente en la camisa	°C
T_{JF}	Temperatura de entrada de agua fría en la camisa	°C
T_{J0}	Temperatura de entrada del fluido en la camisa	°C
T_{Jj}	Temperatura del fluido en la camisa para la zona j-ésima	°C
T_{Jm}	Temp. media del fluido de la camisa para el modelo de división en zonas	°C
T_M	Temperatura de la pared	°C
T_{Mj}	Temperatura de la pared para la zona j-ésima	°C
T_{Mm}	Temperatura media de la pared para el modelo de división en zonas	°C
T_{set}	Temperatura de <i>set-point</i>	°C
U_J	Energía interna del vapor en la camisa	kcal / kg
V	Volumen de la masa reaccionante	m ³
V_J	Volumen de la camisa	m ³
V_M	Volumen de la pared	m ³
W_C	Velocidad másica de condensación del vapor	kg / min

W_S	Velocidad másica de entrada del vapor	kg / min
X_S	Fracción de apertura de la válvula del vapor	
X_W	Fracción de apertura de la válvula del agua	
β	Coefficiente de expansión volumétrica	K ⁻¹
$\varepsilon(t)$	Error o desviación respecto al valor deseado	
λ_r	Coefficiente de conductividad térmica del medio reaccionante	kcal / h.m.°C
η_r	Viscosidad dinámica del medio reaccionante a la temperatura T	kg / m.s
η_p	Viscosidad dinámica del medio reaccionante a la temperatura T_M	kg / m.s
η_f	Viscosidad dinámica del fluido de la camisa	kg / m.s
v_A	Coefficiente estequiométrico respecto al reactivo A	
v_B	Coefficiente estequiométrico respecto al reactivo B	
v_C	Coefficiente estequiométrico respecto al reactivo C	
v_D	Coefficiente estequiométrico respecto al reactivo D	
v_f	Velocidad del fluido de la camisa	m / min
ρ	Densidad de la masa reaccionante	kg / m ³
ρ_f	Densidad del fluido de la camisa	kg / m ³
ρ_M	Densidad de la pared	kg / m ³
ρ_S	Densidad del vapor de entrada	kg / m ³
τ	Tiempo de retardo	min
τ_D	Constante de tiempo derivativo	min
τ_I	Constante de tiempo integral	min
ω	Número de revoluciones por minuto del agitador del reactor	min ⁻¹