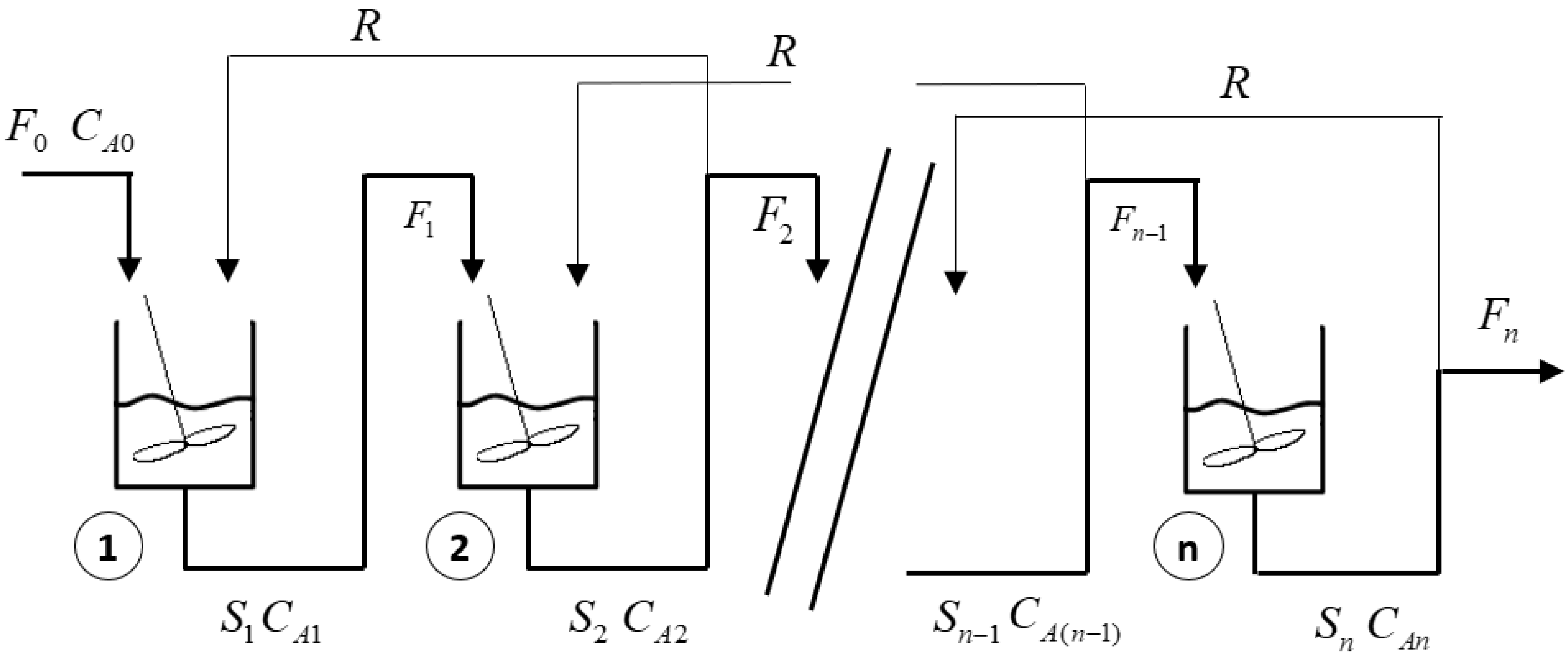
Modelado de N reactores tanque agitado en serie

Prof.: Dr. Juan Ignacio Manassaldi

J.T.P.: Ing. Amalia Rueda

CSTR en serie



$$A \rightarrow B$$

CSTR en serie

Hipótesis

- La densidad se mantiene constante
- La reacción es en fase líquida y se considera irreversible del tipo $A \rightarrow B$
- La velocidad de desaparición de A (r_A) es igual a la velocidad de aparición de B y se puede definir de la siguiente manera, donde k es la constante de reacción y V el volumen del tanque:

$$r_a = k V C_A$$

CSTR en serie

Reactor i=1 $$\left(F_0 + R + k_1 V_1\right)_1 C_{A1} - RC_{A2} = F_0 C_{A0}$$

Reacor 1<i<n $$F_{i-1} C_{A(i-1)} - \left(F_{i-1} + R + k_i V_i\right) C_{Ai} + RC_{A(i+1)} = 0$$

Reactor i=n $$F_{n-1} C_{A(n-1)} - \left(F_{n-1} + k_n V_n\right) C_{An} = 0$$

$$F_i = F_{i-1} + R \qquad (i = 1)$$

$$F_i = F_{i-1} \qquad (1 < i < n)$$

$$F_i = F_{i-1} - R \qquad (i = n)$$

4 CSTR en serie

$$\begin{cases}
\left(F_0+R+k_1V_1\right)C_{A1} & -RC_{A2} & & & =F_0C_{A0} \\
F_1C_{A1} & -\left(F_1+R+k_2V_2C_{A2}{}^{n-1}\right)C_{A2} & +RC_{A3} & & =0 \\
 & F_2C_{A2} & -\left(F_2+R+k_3V_3\right)C_{A3} & +RC_{A4} & =0 \\
 & & F_3C_{A3} & -\left(F_3+k_4V_4\right)C_{A4} & =0
\end{cases}$$

$$\underline{\underline{A}}=\begin{pmatrix}
\left(F_0+R+k_1V_1\right) & -R & 0 & 0 \\
F_1 & -\left(F_1+R+k_2V_2\right) & R & 0 \\
0 & F_2 & -\left(F_2+R+k_3V_3\right) & R \\
0 & 0 & F_3 & -\left(F_3+k_4V_4\right)
\end{pmatrix}$$

$$\underline{x}=\begin{pmatrix} C_{A1} \\ C_{A2} \\ C_{A3} \\ C_{A4} \end{pmatrix} \quad \underline{b}=\begin{pmatrix} F_0C_{A0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{A}}\,\underline{x}=\underline{b}$$

CSTR en serie (reacción de orden n)

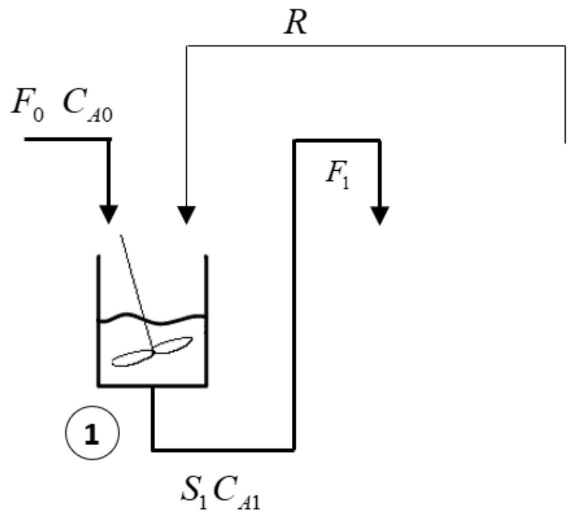
Hipótesis

- La densidad se mantiene constante
- La reacción es en fase líquida y se considera irreversible del tipo $A \rightarrow B$
- La velocidad de desaparición de A (r_A) es igual a la velocidad de aparición de B y se puede definir de la siguiente manera, donde k es la constante de reacción y V el volumen del tanque:

$$r_a = k V C_A{}^n$$

CSTR en serie (reacción de orden n)

$$F_0 C_{A0} + R C_{A2} = F_1 C_{A1} + k_1 V_1 C_{A1}^{\ n}$$



$$F_1 C_{A1} + k_1 V_1 C_{A1}^{\ n} - R C_{A2} = F_0 C_{A0}$$

$$\boxed{\left(F_1 + k_1 V_1 C_{A1}^{\ n-1}\right) C_{A1} - R C_{A2} = F_0 C_{A0}}$$

$$anterior \rightarrow \left(F_0 + R + k_1 V_1\right)_1 C_{A1} - R C_{A2} = F_0 C_{A0}$$

CSTR en serie

Reactor i=1 $$\left(F_0 + R + k_1 V_1 C_{A1}{}^{n-1}\right) C_{A1} - R C_{A2} = F_0 C_{A0}$$

Reacor 1<i<n $$F_{i-1} C_{A(i-1)} - \left(F_{i-1} + R + k_i V_i C_{Ai}{}^{n-1}\right) C_{Ai} + R C_{A(i+1)} = 0$$

Reactor i=n $$F_{n-1} C_{A(n-1)} - \left(F_{n-1} + k_n V_n C_{An}{}^{n-1}\right) C_{An} = 0$$

$$F_i = F_{i-1} + R \qquad (i = 1)$$

$$F_i = F_{i-1} \qquad (1 < i < n)$$

$$F_i = F_{i-1} - R \qquad (i = n)$$

4 CSTR en serie

$$\begin{cases} \left(F_0 + R + k_1 V_1 C_{A1}{}^{n-1}\right) C_{A1} & -RC_{A2} & & & = F_0 C_{A0} \\ F_1 C_{A1} & -\left(F_1 + R + k_2 V_2 C_{A2}{}^{n-1}\right) C_{A2} & +RC_{A3} & & = 0 \\ & F_2 C_{A2} & -\left(F_2 + R + k_3 V_3 C_{A3}{}^{n-1}\right) C_{A3} & +RC_{A4} & = 0 \\ & & F_3 C_{A3} & -\left(F_3 + k_4 V_4 C_{A4}{}^{n-1}\right) C_{A4} & = 0 \end{cases}$$

¡Sistema No-lineal!

Proponemos una secuencia de iteración

Métodos iterativos

- Una solución iterativa significa comenzar con un valor inicial, $\underline{x}^{(0)}$, y generar una sucesión (secuencia) $\underline{x}^{(0)}$, $\underline{x}^{(1)}$, $\underline{x}^{(2)}$, ..., $\underline{x}^{(n)}$, tal que:

$$\lim_{n\to\infty} \underline{x}^{(n)} = \underline{x}^{*}$$

donde $\boldsymbol{n}$ representa el número de iteración (término de la correspondiente sucesión) y $\underline{\boldsymbol{x}}^{*}$ representa la solución al sistema (o ecuación) a resolver.

- Los errores actuales cometido en una iteración corresponde a:

$$\left\| \underline{x}^{(i+1)} - \underline{x}^{(i)} \right\| \qquad \frac{\left\| \underline{x}^{(i+1)} - \underline{x}^{(i)} \right\|}{\left\| \underline{x}^{(i)} \right\|}$$

No conocemos $\underline{\boldsymbol{x}}^{*}$

4 CSTR en serie

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \left(F_0 + R + k_1 V_1 {C_{A1}}^{n-1}\right) & -R & 0 & 0 \\ F_1 & -\left(F_1 + R + k_2 V_2 {C_{A2}}^{n-1}\right) & R & 0 \\ 0 & F_2 & -\left(F_2 + R + k_3 V_3 {C_{A3}}^{n-1}\right) & R \\ 0 & 0 & F_3 & -\left(F_3 + k_4 V_4 {C_{A4}}^{n-1}\right) \end{pmatrix}$$

$$\underline{x} = \begin{pmatrix} C_{A1} \\ C_{A2} \\ C_{A3} \\ C_{A4} \end{pmatrix} \qquad \underline{b} = \begin{pmatrix} F_0 C_{A0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- La matriz de coeficientes depende de las concentración, es decir, la matriz depende de la solución del sistema.
- A partir de esto proponemos una secuencia iterativa.

Modelado Matemático No Lineal

Suponemos las composiciones de cada etapa

$$\underline{x}^{*} = \left(C_{A1}, C_{A2}, C_{A3}, C_{A4}\right)^{*}$$

Calculamos la matriz de coeficientes

$$\underline{\underline{A}} = f\left(\underline{x}^{*}\right)$$

Resolvemos utilizando Thomas y obtenemos una solución

$$\underline{x} = \left(C_{A1}, C_{A2}, C_{A3}, C_{A4}\right)$$

Comparamos la solución con los valores propuestos

$$\underline{x} \text{ vs. } \underline{x}^{*}$$

Si no son similares repetimos la operación pero con

$$\underline{x}^{*} = \underline{x}$$

4 CSTR en serie

Matemática Superior Aplicada

UTN

$$F_0 = 1000$$

$$C_{A0} = 1$$

$$R = 100$$

$$\underline{F} = \begin{pmatrix} 1100 & 1100 & 1100 & 1000 \end{pmatrix}$$

$$V = 1000$$

$$k = 0.1$$

$$n = 1.2 \text{ (orden de reacción)}$$

$$\underline{x}^* = \begin{pmatrix} \\ \\ \\ \\ \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \left(F_0 + R + k_1 V_1 {C_{A1}}^{n-1}\right) & -R & 0 & 0 \\ F_1 & -\left(F_1 + R + k_2 V_2 {C_{A2}}^{n-1}\right) & R & 0 \\ 0 & F_2 & -\left(F_2 + R + k_3 V_3 {C_{A3}}^{n-1}\right) & R \\ 0 & 0 & F_3 & -\left(F_3 + k_4 V_4 {C_{A4}}^{n-1}\right) \end{pmatrix}$$

4 CSTR en serie

```
--> N
 N  =

  1197.9148  -100.        0.          0.
  1100.      -1295.6352   100.        0.
  0.          1100.      -1293.115    100.
  0.          0.          1100.      -1190.288

--> xi
 xi  =

  0.9
  0.8
  0.7
  0.6

--> x=thomas(N,b)
 x  =

  0.9037061
  0.8256300
  0.7563861
  0.6990112

--> error=norm(x-xi)
 error  =

  0.1168471
```