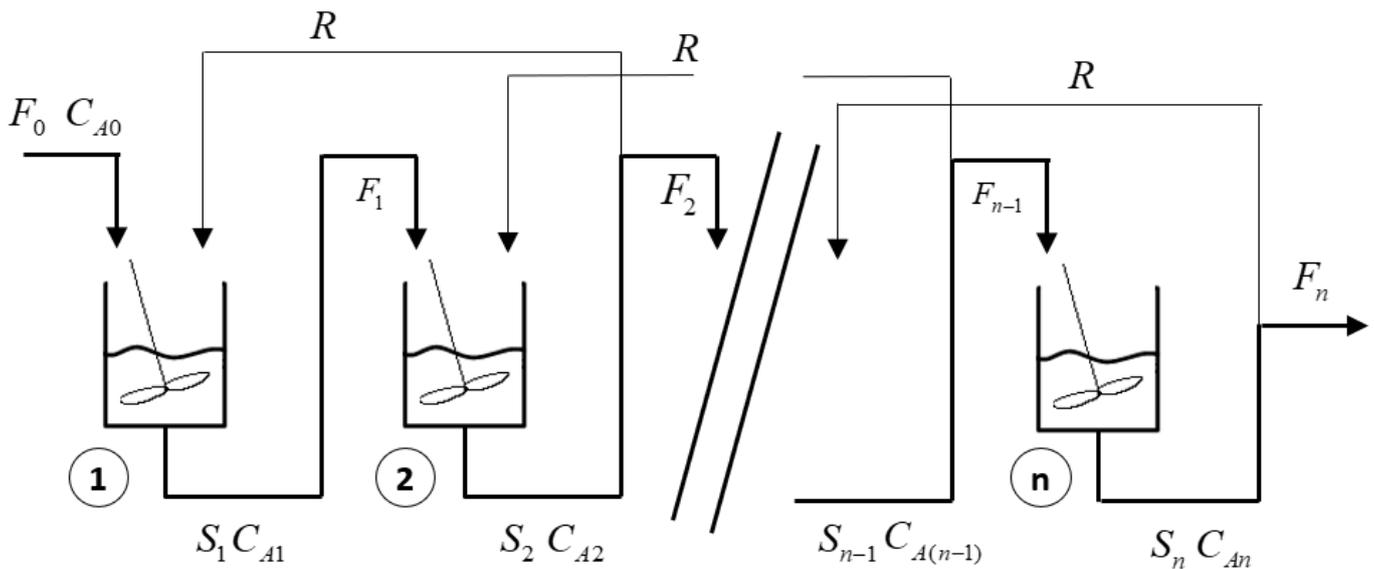


## Resolución de sistemas lineales en Scilab

### Modelado de N reactores tanque agitado en serie

Se tiene un sistema de N reactores tanque agitado en serie con recirculación:



Para modelar el sistema realizamos un balance de masa en estado estacionario en cada reactor. Tendremos en cuenta las siguientes hipótesis en nuestro modelo:

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.:

$$r_a = kV C_a$$

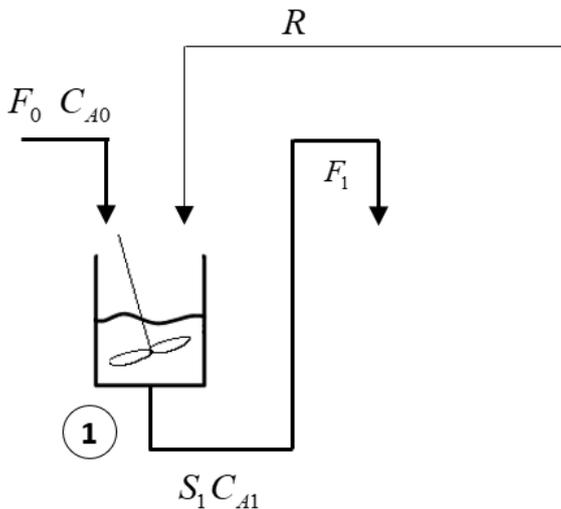
#### Reactor 1

*Balance de masa global)*

$$[Entradas] = [Salidas]$$

$$[Masa F_0] + [Masa R] = [Masa S_1]$$

Podemos reemplazar la masa de cada corriente por su densidad multiplicado el caudal volumétrico. Se considera la misma densidad para todas las corrientes (densidad constante):



$$F_0 \rho + R \rho = S_1 \rho$$

$$F_0 + R = S_1 \quad (S_1 = F_1)$$

$$F_0 + R = F_1$$

*Balance de moles de A)*

*[Velocidad de entrada de moles de A] = [Velocidad de salida de moles de A] + [Velocidad de consumo de moles de A]*

$$F_0 C_{A0} + R C_{A2} = F_1 C_{A1} + r_a$$

Reemplazando  $r_a$

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

Reagrupando

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

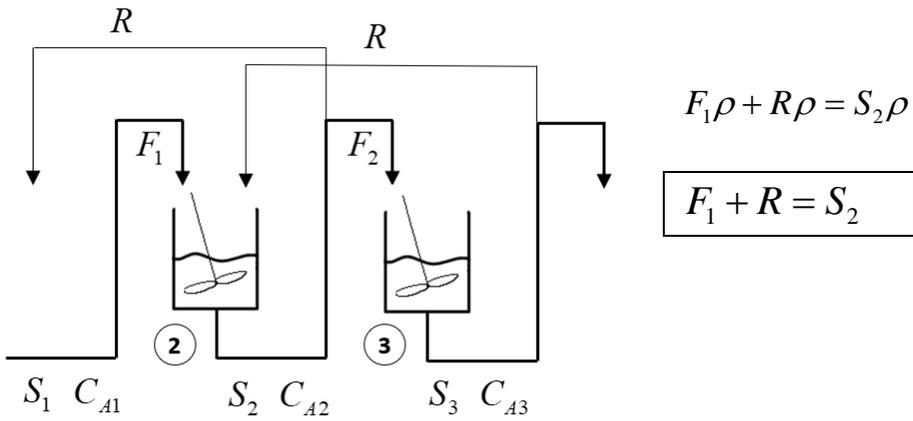
$$(F_1 + k_1 V_1) C_{A1} - R C_{A2} = F_0 C_{A0}$$

Reemplazando  $F_1$  obtenido del balance global:

$$(F_0 + R + k_1 V_1) C_{A1} - R C_{A2} = F_0 C_{A0}$$

## Reactor 2

Balace de masa global)



Balace de moles de A)

$$F_1 C_{A1} + R C_{A3} = S_2 C_{A2} + r_a$$

Reemplazando  $r_a$

$$F_1 C_{A1} + R C_{A3} = S_2 C_{A2} + k_2 V_2 C_{A2}$$

Reagrupando

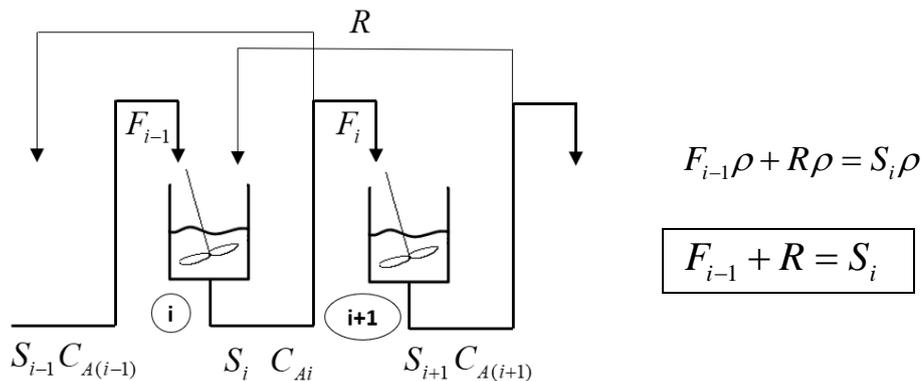
$$F_1 C_{A1} - (S_2 + k_2 V_2) C_{A2} + R C_{A3} = 0$$

Reemplazando  $S_2$  obtenido del balace global:

$$F_1 C_{A1} - (F_1 + R + k_2 V_2) C_{A2} + R C_{A3} = 0$$

### Reactor i

Balace de masa global)



Balace de moles de A)

$$F_{i-1}C_{A(i-1)} + RC_{A(i+1)} = S_i C_{Ai} + r_a$$

Reemplazando  $r_a$

$$F_{i-1}C_{A(i-1)} + RC_{A(i+1)} = S_i C_{Ai} + k_i V_i C_{Ai}$$

Reagrupando

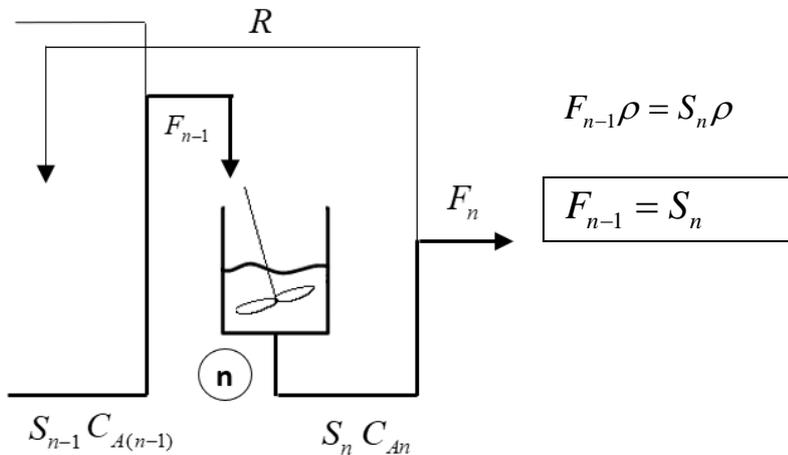
$$F_{i-1}C_{A(i-1)} - (S_i + k_i V_i) C_{Ai} + RC_{A(i+1)} = 0$$

Reemplazando  $S_i$  obtenido del balance global:

$$F_{i-1}C_{A(i-1)} - (F_{i-1} + R + k_i V_i) C_{Ai} + RC_{A(i+1)} = 0$$

### Reactor n

Balace de masa global)



Balace de moles de A)

$$F_{n-1}C_{A(n-1)} = S_n C_{An} + r_a$$

Reemplazando  $r_a$

$$F_{n-1}C_{A(n-1)} = S_n C_{An} + k_n V_n C_{An}$$

Reagrupando

$$F_{n-1}C_{A(n-1)} - (S_n + k_n V_n)C_{An} = 0$$

Reemplazando  $S_n$  obtenido del balance global:

$$F_{n-1}C_{A(n-1)} - (F_{n-1} + k_n V_n)C_{An} = 0$$

Resumiendo, el primer y último reactor por su propia configuración responden a un caso particular y deben modelarse por separado, pero cualquier reactor intermedio puede modelarse como el **reactor i**. Las ecuaciones resultantes son:

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

**Reactor  $1 < i < n$**   $F_{i-1}C_{A(i-1)} - (F_{i-1} + R + k_i V_i)C_{Ai} + RC_{A(i+1)} = 0$

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

Por ejemplo, si se tienen 5 reactores ( $n=5$ ) el sistema de ecuaciones resultante será:

$$\left\{ \begin{array}{llll} (F_0 + R + k_1 V_1)_1 C_{A1} - & RC_{A2} & & = F_0 C_{A0} \\ & F_1 C_{A1} - (F_1 + R + k_2 V_2) C_{A2} + & RC_{A3} & = 0 \\ & & F_2 C_{A2} - (F_2 + R + k_3 V_3) C_{A3} + & RC_{A4} = 0 \\ & & & F_3 C_{A3} - (F_3 + R + k_4 V_4) C_{A4} + & RC_{A5} = 0 \\ & & & & F_4 C_{A4} - (F_4 + k_5 V_5) C_{A5} = 0 \end{array} \right.$$

Que corresponde a un sistema tridiagonal y puede fácilmente resolverse aplicando el método de Thomas. La alimentación a cada reactor puede conocerse realizando un balance de masa:

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

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

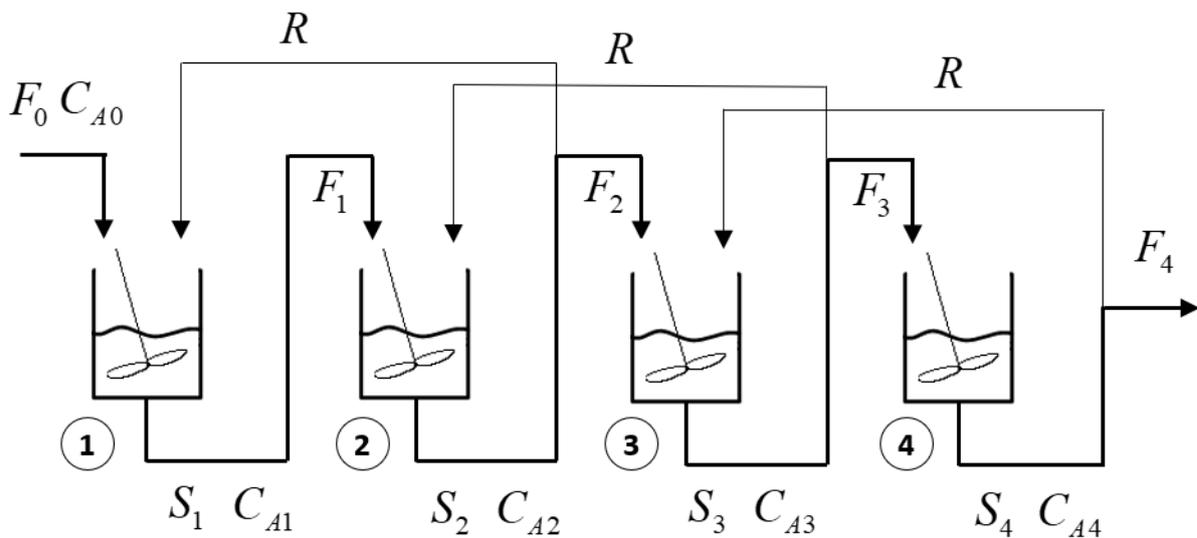
$$F_i = F_{i-1} - R \quad (i = n)$$

## Actividades

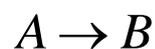
1) Crear una **function** de SCILAB que resuelva un sistema de ecuaciones lineales utilizando el método de Thomas. Recordar que este algoritmo solo se aplica cuando la matriz de coeficientes es tridiagonal en banda.

Ayuda: la función es del tipo  $x = \text{Thomas}(A,b)$

2) Una reacción química tiene lugar en cuatro reactores continuos de tanque agitado dispuestos de la siguiente manera:



La reacción es en fase líquida y se considera irreversible del tipo:



En este caso  $k$  se considera igual a  $0.1 \text{ h}^{-1}$  para cualquier concentración y todos los reactores tienen el mismo volumen igual a  $1000 \text{ L}$ .

El primer reactor es alimentado con una corriente fresca de  $1000 \text{ L/h}$  y una concentración de  $A$  de  $1 \text{ mol/L}$ . La recirculación  $R$  en cada etapa es igual al  $10\%$  de la alimentación fresca al sistema ( $F_0$ ).

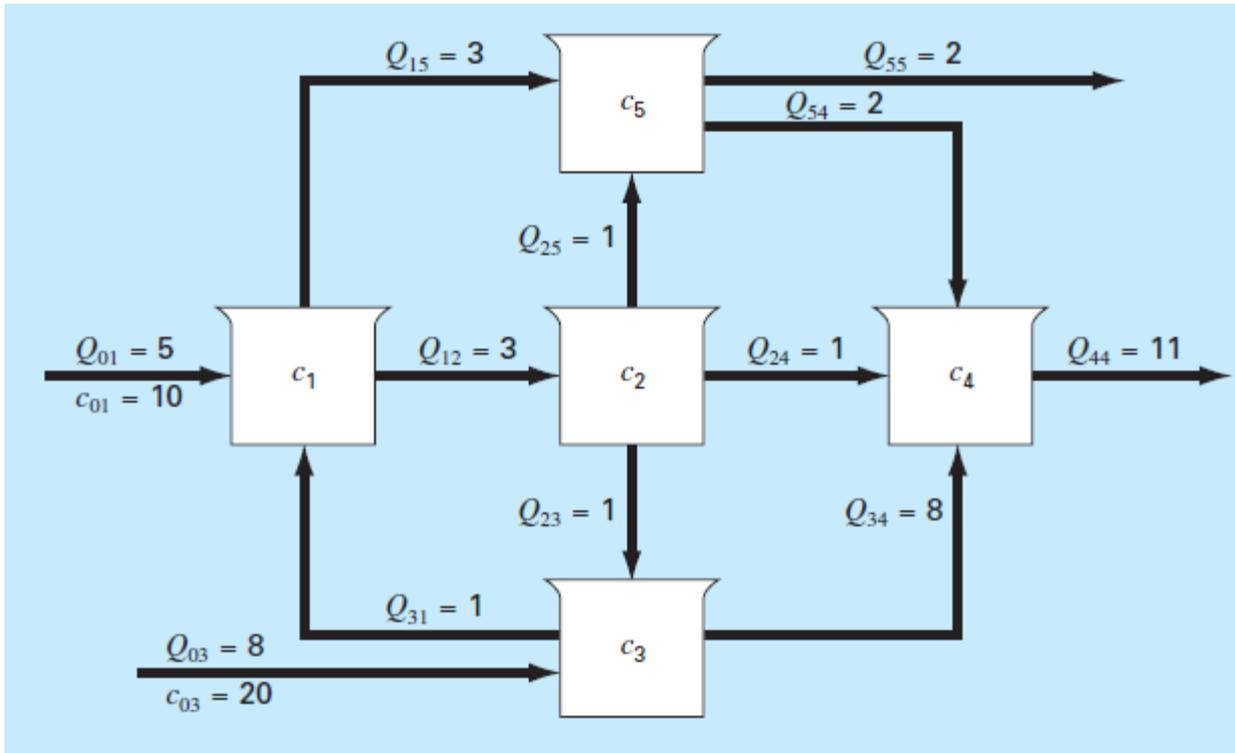
- Utilizar la **function** `Thomas.m` creada en el ejercicio anterior para encontrar la concentración del compuesto  $A$  a la salida de cada reactor.
- Elija uno de los parámetros del modelo ( $F_0$ ,  $C_{A0}$ , % de recirculación,  $V$ ,  $k$ ) y analice los resultados al aumentar o disminuir dicho parámetro. Grafique la variación de  $C_A$  al final de la última etapa con el parámetro. Investigue sobre la causa de estos resultados y explique cómo piensa que podría llevarse a cabo ese cambio en el parámetro en la realidad.
- Utilizar la **function** `Thomas.m` creada en el ejercicio anterior para encontrar la cantidad de reactores en serie necesarios para obtener una concentración de  $A$  igual a  $0.45 \text{ mol/L}$ .

Basado en Example 2.3: Solution of Chemical Reaction and Material Balance Equations Using the Jacobi Iteration for Predominantly Diagonal Systems of Linear Algebraic Equations. Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications (Alkis Constantinides & Navid Mostoufi). Página 113.

### Ejercicio opcional

Resuelva en Scilab el sistema de reactores del ejercicio **EL.1** de la Guía práctica N°1.

Dada la configuración de reactores de la Figura:



con dos tubos de entrada y dos tubos de salida donde los caudales  $Q$  están en metros cúbicos por minuto, y las concentraciones  $c$  están en miligramos por metro cúbico.

- Efectúe un balance de materia suponiendo mezcla perfecta y que los reactores operan en estado estacionario.
- Utilizando la factorización LU de la matriz de coeficientes  $A$  del SEAL, determine las concentraciones de cada reactor.