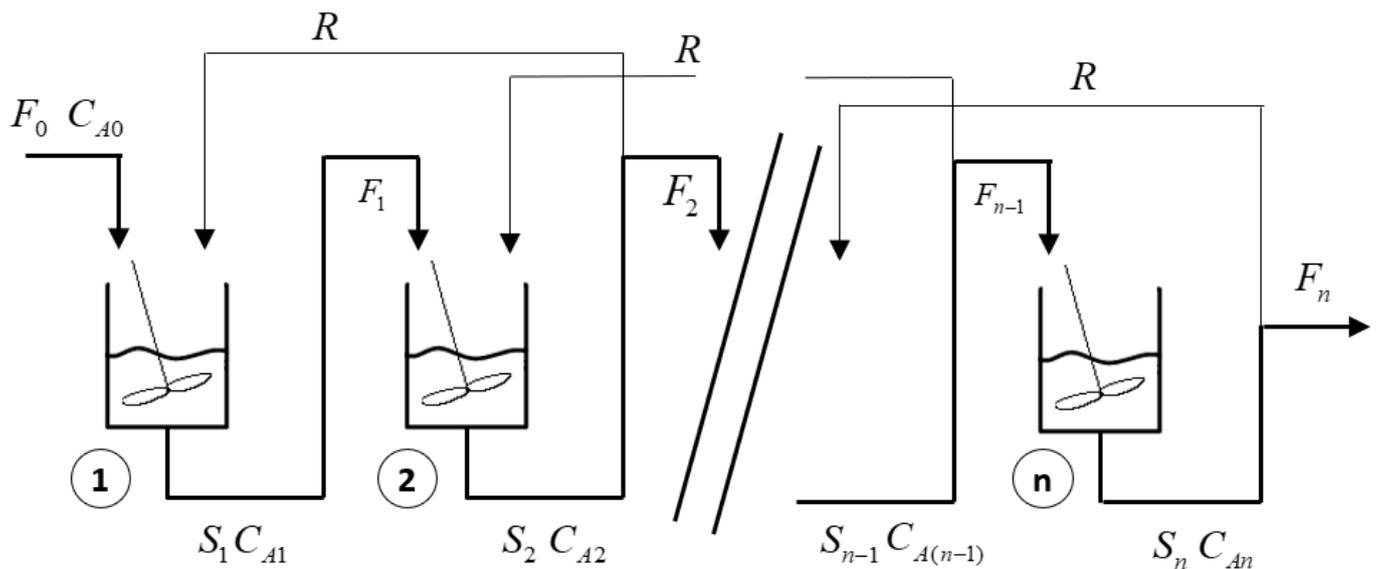


Resolución de sistemas lineales en Scilab de forma iterativa para modelos no lineales

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, V el volumen del tanque y N el orden de reacción:

$$r_a = k V C_a^N$$

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:

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

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

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

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(F_0 + R + k_1 V_1 C_{A1}^{N-1} \right)_1 C_{A1} - R C_{A2} = F_0 C_{A0} \\ F_1 C_{A1} - \left(F_1 + R + k_2 V_2 C_{A2}^{N-1} \right) C_{A2} + R C_{A3} = 0 \\ F_2 C_{A2} - \left(F_2 + R + k_3 V_3 C_{A3}^{N-1} \right) C_{A3} + R C_{A4} = 0 \\ F_3 C_{A3} - \left(F_3 + R + k_4 V_4 C_{A4}^{N-1} \right) C_{A4} + R C_{A5} = 0 \\ F_4 C_{A4} - \left(F_4 + k_5 V_5 C_{A5}^{N-1} \right) C_{A5} = 0 \end{array} \right.$$

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:

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

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

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

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

Una solución iterativa significa comenzar con un valor inicial y generar una sucesión (secuencia tal que:

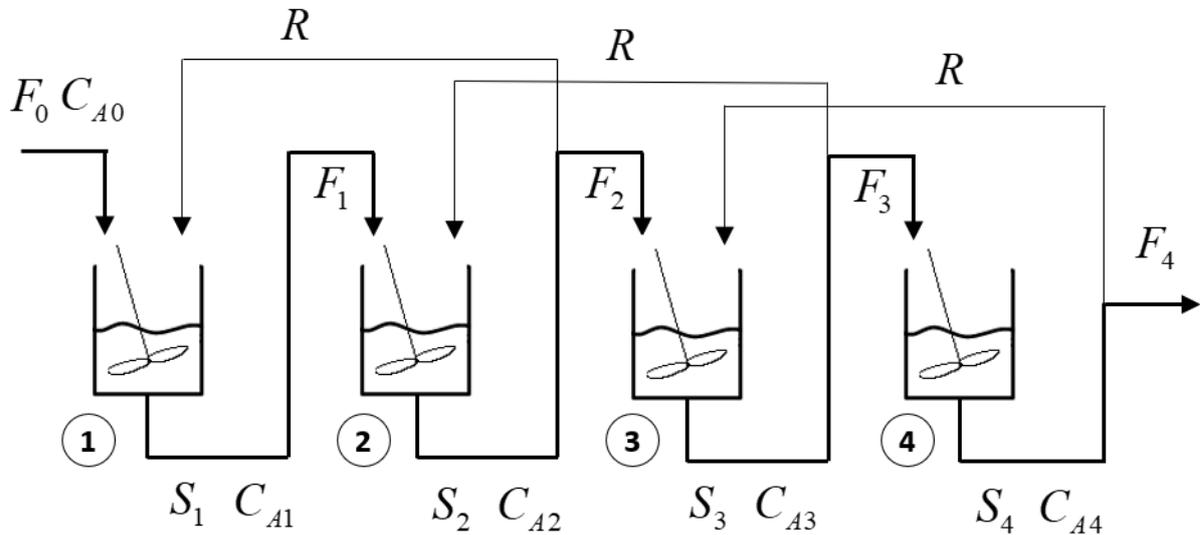
$$\lim_{n \rightarrow \infty} \underline{x}^{(n)} = \underline{x}^*$$

Los errores actuales cometido en una iteración corresponde a:

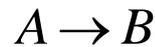
$$\left\| \underline{x}^{(i+1)} - \underline{x}^{(i)} \right\| \quad \frac{\left\| \underline{x}^{(i+1)} - \underline{x}^{(i)} \right\|}{\left\| \underline{x}^{(i)} \right\|}$$

Actividades

1) 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 h^{-1} para cualquier concentración y todos los reactores tienen el mismo volumen igual a 1000 L. **La reacción tiene un orden $N=1.2$.**

El primer reactor es alimentado con una corriente fresca de 1000 L/h y una concentración de A de 1 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 cada reactor.
- 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 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.