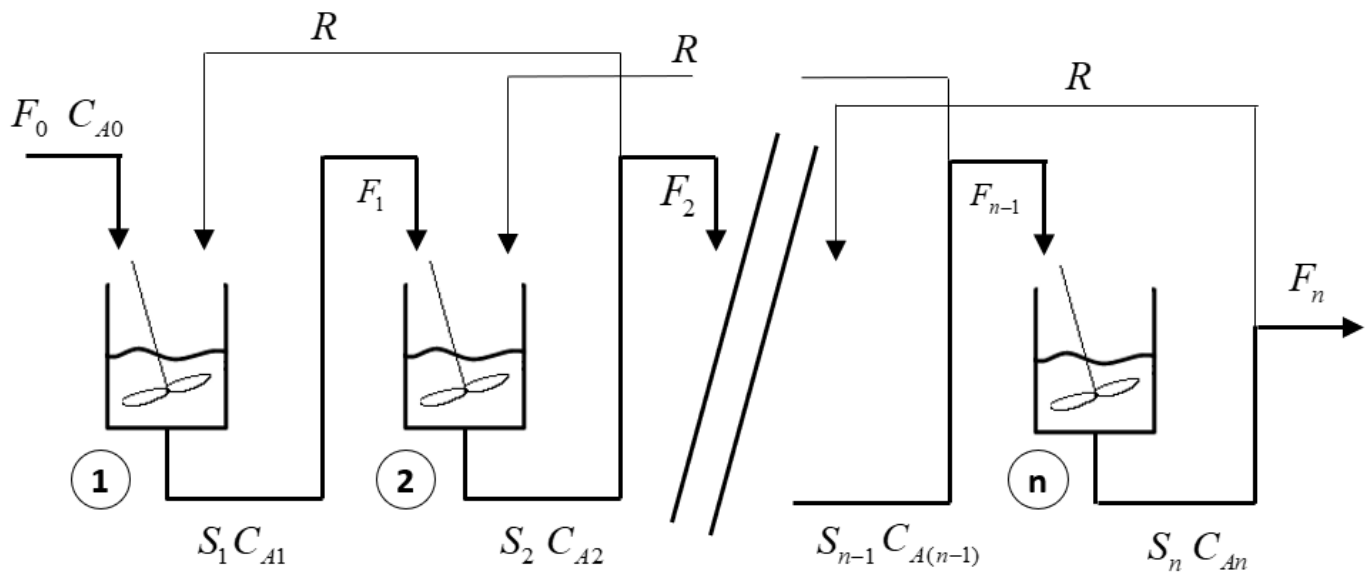


Resolución de sistemas lineales en Scilab

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.:

$$r_a = k V C_a$$

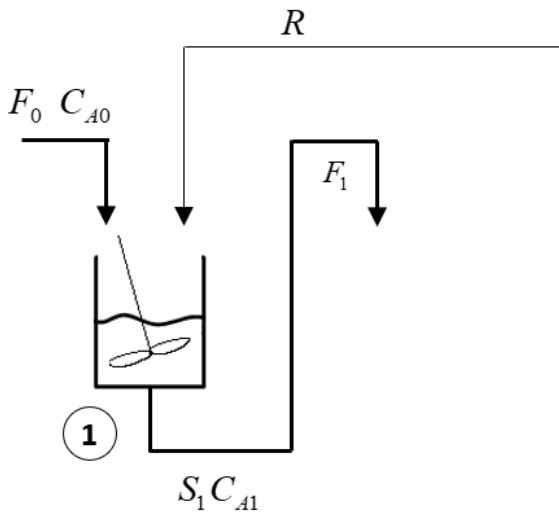
Reactor 1

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

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

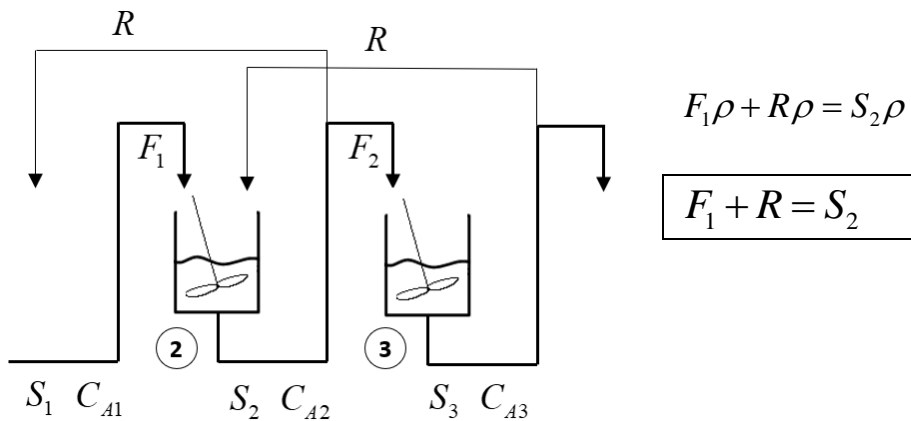
$$(F_1 + k_1 V_1) C_{A1} - R C_{A2} = F_0 C_{A0}$$

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

Balance de masa global)



Balance 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

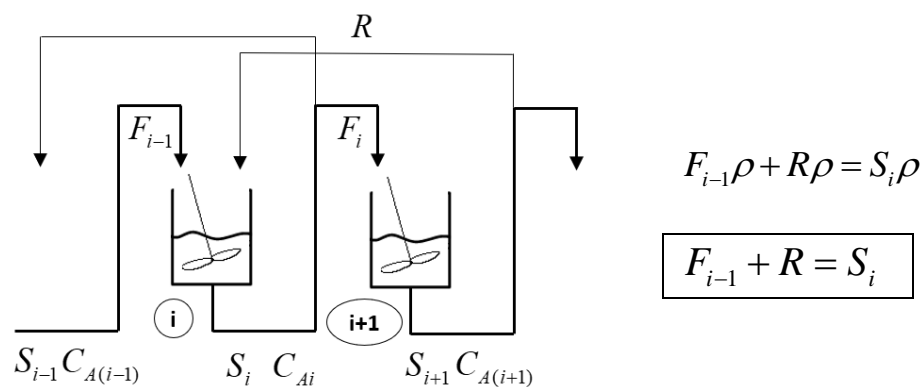
$$F_1 C_{A1} - (S_2 + k_2 V_2) C_{A2} + R C_{A3} = 0$$

Reemplazando S_2 obtenido del balance global:

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

Reactor i

Balance de masa global)



Balace de moles de A)

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

Reemplazando r_a

$$F_{i-1}C_{A(i-1)} + RC_{A(i+1)} = S_iC_{Ai} + k_iV_iC_{Ai}$$

Reagrupando

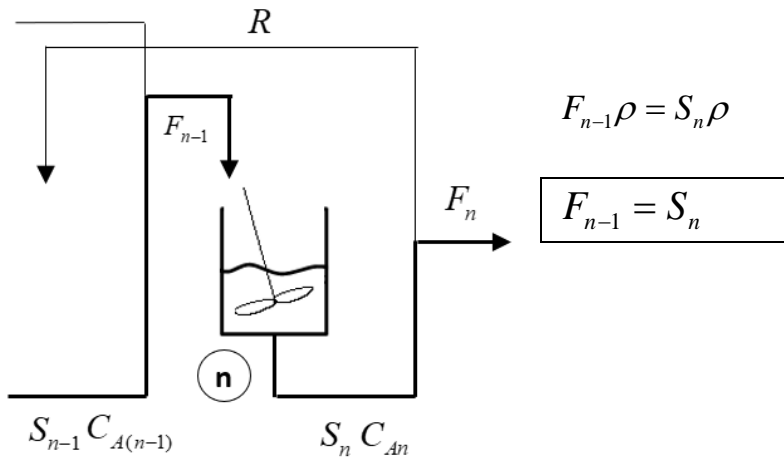
$$F_{i-1}C_{A(i-1)} - (S_i + k_iV_i)C_{Ai} + RC_{A(i+1)} = 0$$

Reemplazando S_i obtenido del balace global:

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

Reactor n

Balace de masa global)



Balace de moles de A)

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

Reemplazando r_a

$$F_{n-1}C_{A(n-1)} = S_nC_{An} + k_nV_nC_{An}$$

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:

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

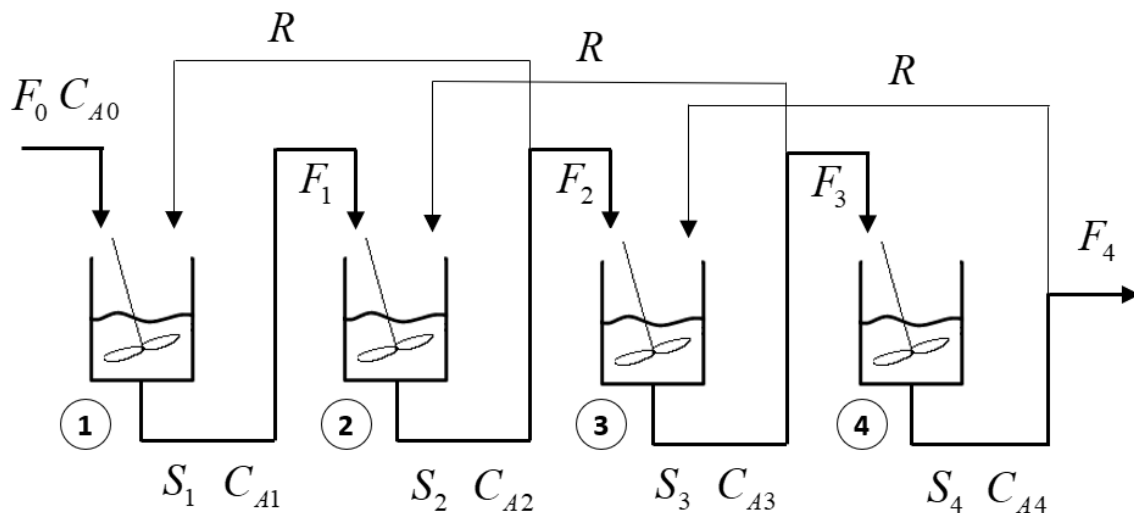
Actividades

Mostrar resultados en la ventana de comandos de Scilab.

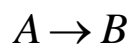
1) Crear una **function** de SCILAB que resuelva un sistema de ecuaciones lineales utilizando el método de Thomas. Recordar que este algoritmo solo se aplica cuando la matriz de coeficientes es tridiagonal en banda.

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 h^{-1} para cualquier concentración y todos los reactores tienen el mismo volumen igual a 1000 L.

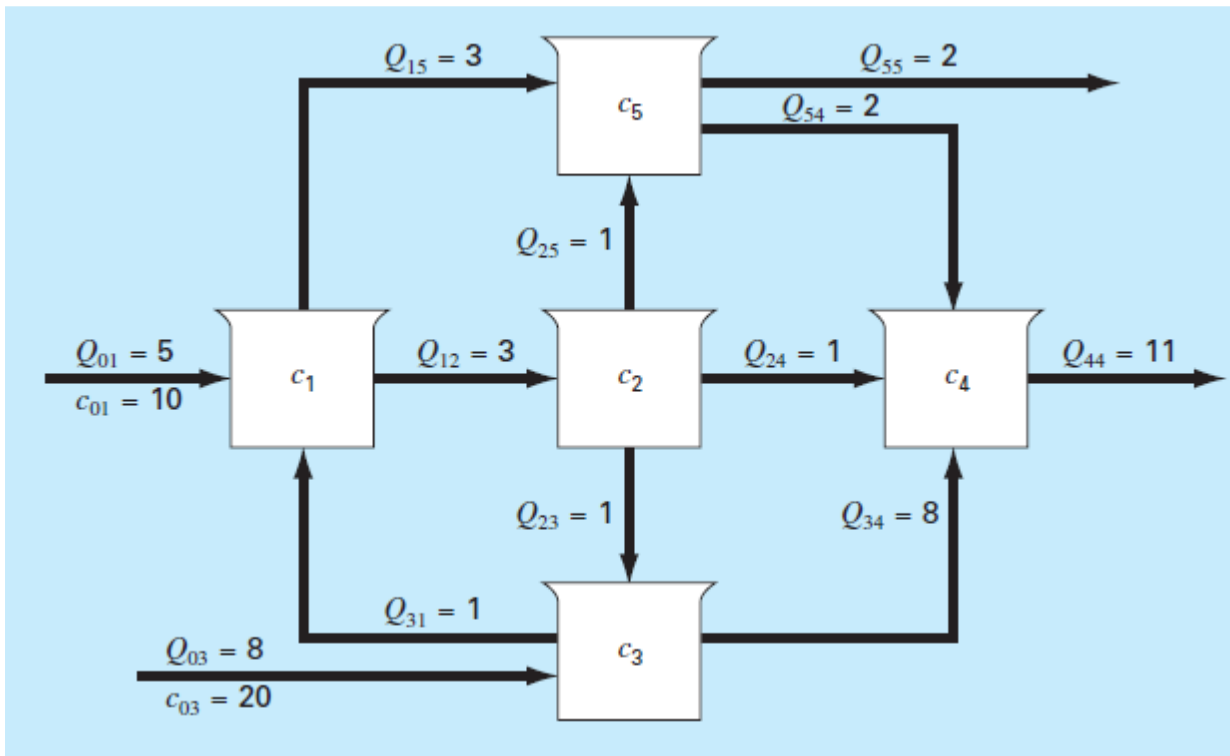
El primer reactor es alimentado con una corriente fresca de 1000 L/h y una concentración de A de 1 mol/L. La recirculación R en cada etapa es igual al 200% de la alimentación fresca al sistema (F_0).

- Utilizar la **function** Thomas.m creada en el ejercicio anterior para encontrar la concentración del compuesto A a la salida cada reactor.
- Se planifica duplicar la capacidad de procesamiento de la unidad de reactores, de manera que la alimentación será el doble. Usando como simulador de la unidad el modelo planteado en SciLab, indique qué dos opciones de cambios en la unidad pueden realizarse para obtener una concentración de A al final del último reactor no menor a la de la anterior. Presentar los resultados en SciLab y explicar en las conclusiones del problema cómo llevaría a cabo este cambio en la práctica.
- Utilizar la **function** Thomas.m creada en a) para encontrar la cantidad de reactores en serie necesarios para obtener una concentración de A menor a 0.6 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

Dada la configuración de reactores de la Figura:



El sistema cuenta 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.

Ayuda: El balance de materia obtenido es

$$\begin{aligned}6c_1 - c_3 &= 50 \\-3c_1 + 3c_2 &= 0 \\-c_2 + 9c_3 &= 160 \\-c_2 - 8c_3 + 11c_4 - 2c_5 &= 0 \\-3c_1 - c_2 + 4c_5 &= 0\end{aligned}$$