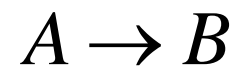
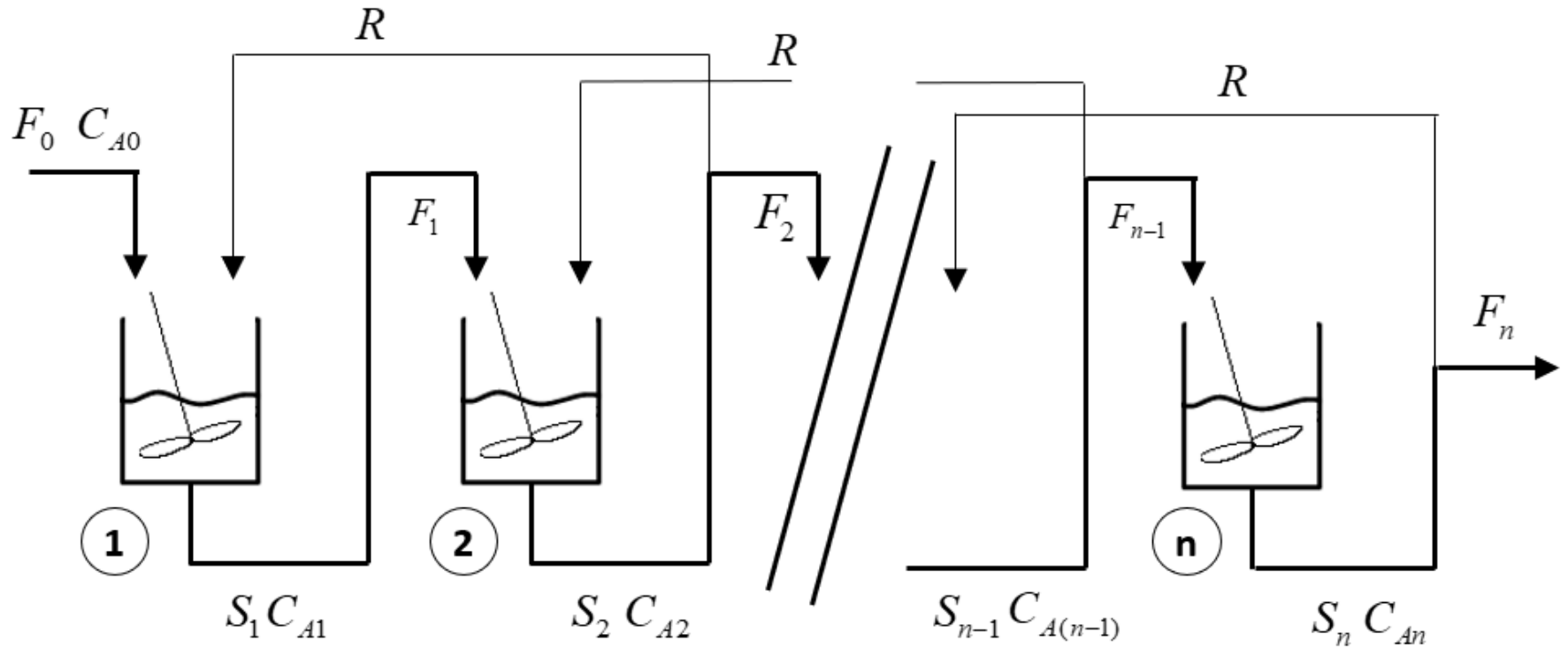


Unidad 2: Ejemplo de aplicación Modelado de N reactores tanque agitado en serie

Prof.: Dr. Juan Ignacio Manassaldi

J.T.P.: Ing. Amalia Rueda



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:

$$r_a = k V C_A$$

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

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

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

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

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

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} (F_0 + R + k_1 V_1) & -R & 0 & 0 \\ F_1 & -(F_1 + R + k_2 V_2) & R & 0 \\ 0 & F_2 & -(F_2 + R + k_3 V_3) & R \\ 0 & 0 & F_3 & -(F_3 + k_4 V_4) \end{pmatrix}$$

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

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

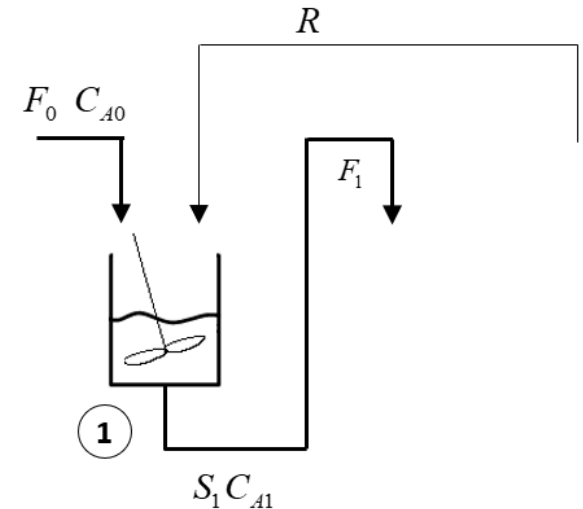
Hipótesis

- 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:

$$r_a = k V C_A^n$$

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

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



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

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

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

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

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

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

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

¡Sistema No-lineal!

Proponemos una secuencia de iteración

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

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

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

- Los errores actuales cometido en una iteración corresponde a:

$$\left\| \underline{x}^{(i+1)} - \underline{x}^{(i)} \right\| \quad \frac{\left\| \underline{x}^{(i+1)} - \underline{x}^{(i)} \right\|}{\left\| \underline{x}^{(i)} \right\|} \quad \text{No conocemos } \underline{x}^*$$

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

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

- 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.

Suponemos las composiciones de cada etapa

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

Calculamos la matriz de coeficientes

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

Resolvemos utilizando Thomas y obtenemos una solución

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

Comparamos la solución con los valores propuestos

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

Si no son similares repetimos la operación pero con

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

$$F_0 = 1000$$

$$C_{A0} = 1$$

$$R = 100$$

$$\underline{F} = (1100 \quad 1100 \quad 1100 \quad 1000)$$

$$V = 1000$$

$$k = 0.1$$

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

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

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

```

--> 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

```