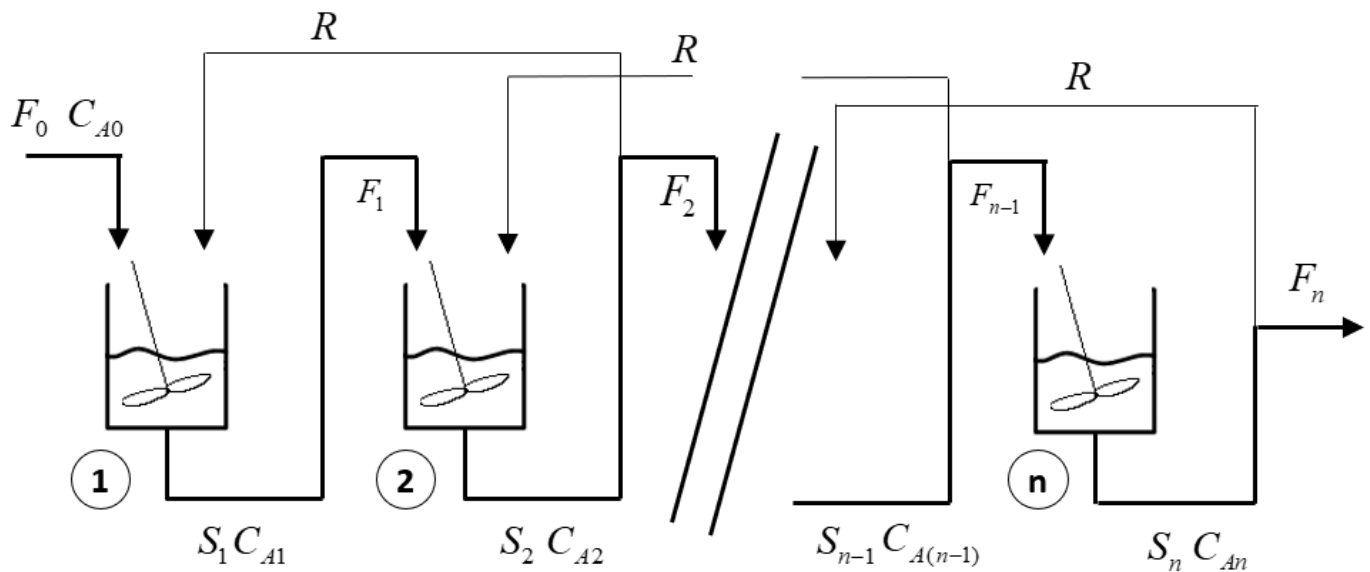


Resolución de sistemas lineales en Scilab

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.:

$$r_a = kV C_a$$

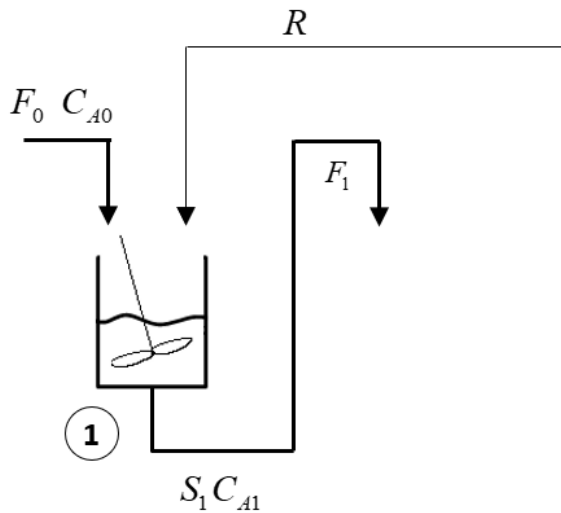
Reactor 1

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):



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

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

$$F_0 + R = F_1$$

Balace 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

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

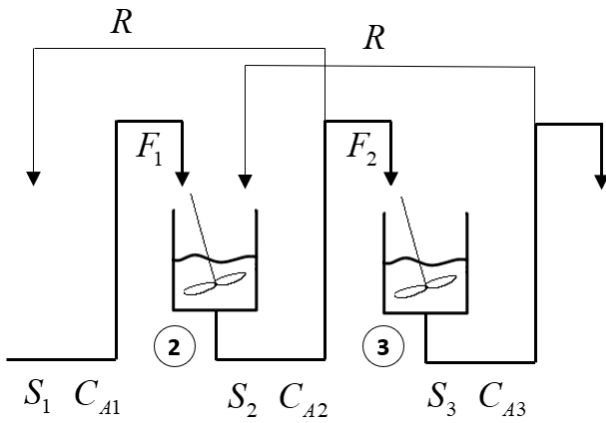
$$(F_1 + k_1 V_1) C_{A1} - R C_{A2} = F_0 C_{A0}$$

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)



$$F_1\rho + R\rho = S_2\rho$$

$$F_1 + R = S_2$$

Balace de moles de A)

$$F_1C_{A1} + RC_{A3} = S_2C_{A2} + r_a$$

Reemplazando r_a

$$F_1C_{A1} + RC_{A3} = S_2C_{A2} + k_2V_2C_{A2}$$

Reagrupando

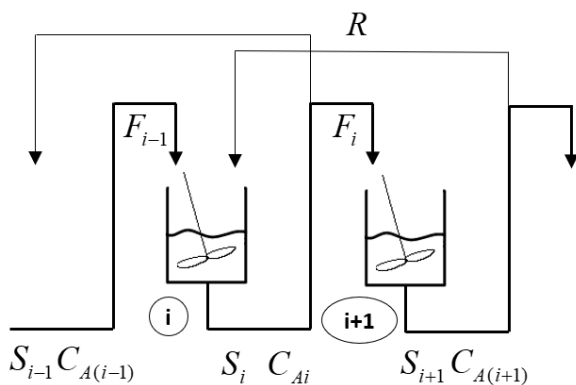
$$F_1C_{A1} - (S_2 + k_2V_2)C_{A2} + RC_{A3} = 0$$

Reemplazando S_2 obtenido del balance global:

$$F_1C_{A1} - (F_1 + R + k_2V_2)C_{A2} + RC_{A3} = 0$$

Reactor i

Balace de masa global)



$$F_{i-1}\rho + R\rho = S_i\rho$$

$$F_{i-1} + R = S_i$$

Balance 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

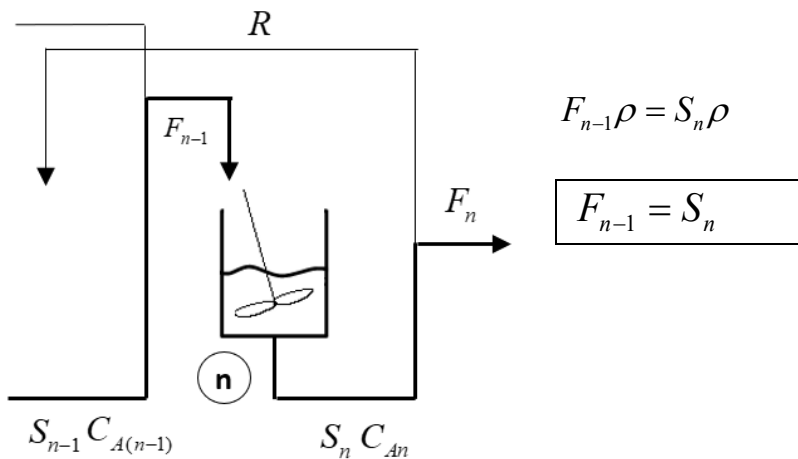
$$F_{i-1}C_{A(i-1)} - (S_i + k_i V_i)C_{Ai} + RC_{A(i+1)} = 0$$

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

Balance de masa global)



Balance 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:

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

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

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

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

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

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:

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

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

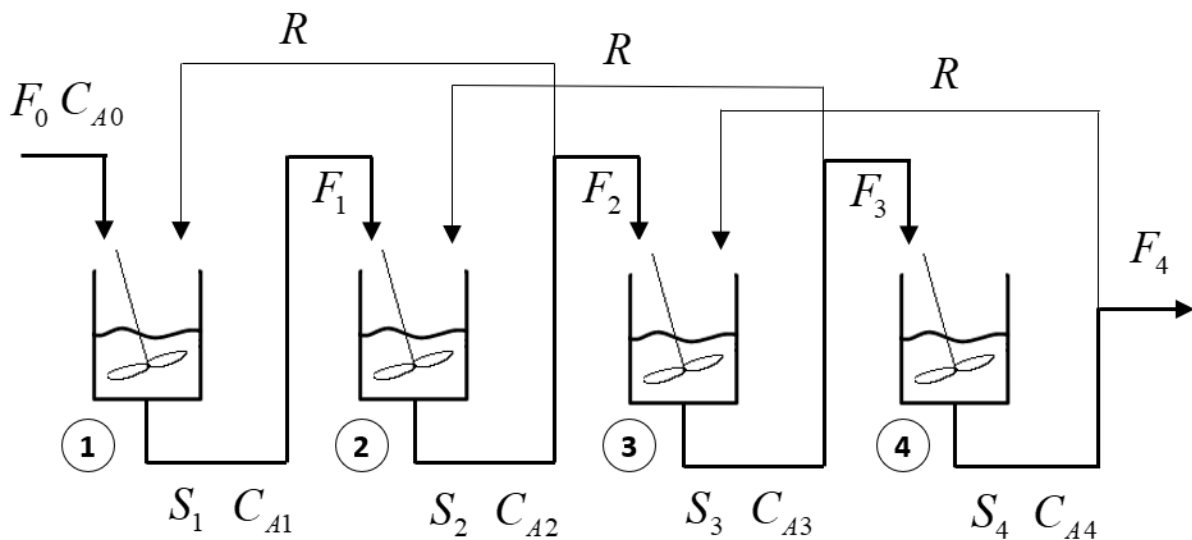
$$F_i = F_{i-1} - R \quad (i = n)$$

Actividades

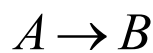
1) Crear una **funcion** de SCILAB que resuelva un sistema de ecuaciones lineales utilizando el método de Thomas. Recordar que este algoritmo solo se aplica cuando la matriz de coeficientes es tridiagonal en banda.

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 10% de la alimentación fresca al sistema (F_0).

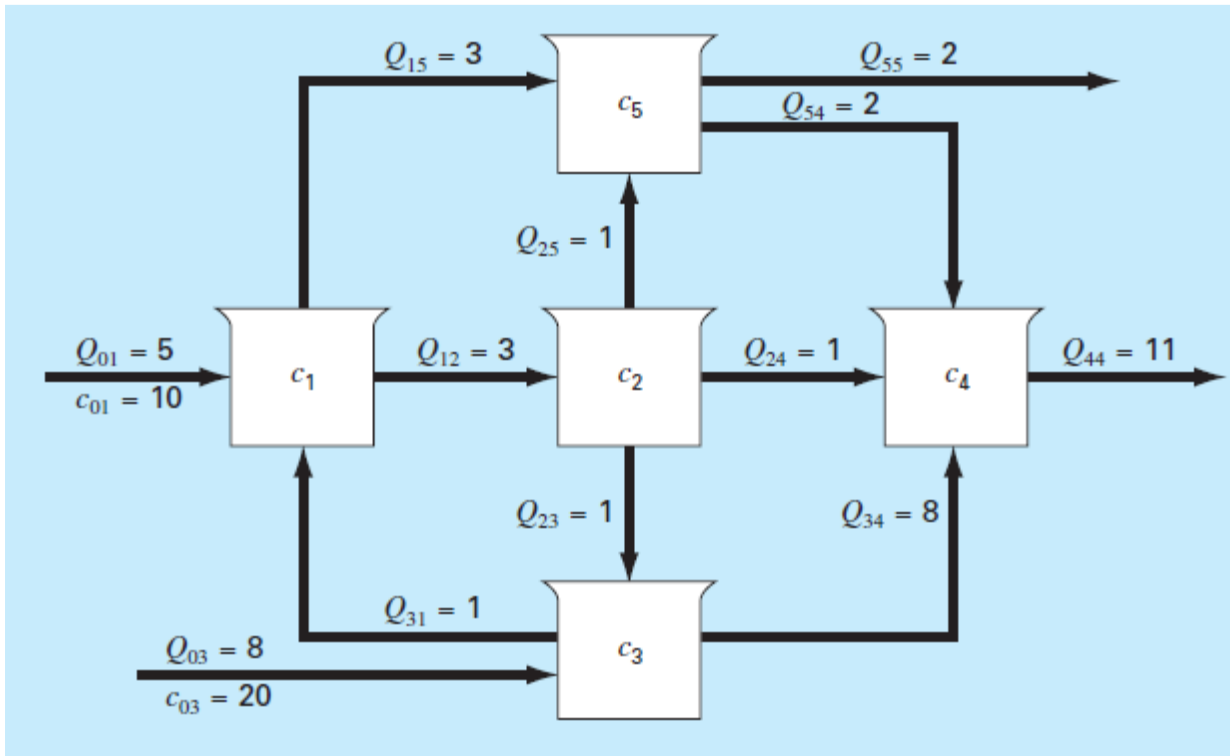
- Utilizar la **funcion** Thomas.m creada en el ejercicio anterior para encontrar la concentración del compuesto A a la salida cada reactor.
- Proponga una mejora en el proceso, que haga que aumente la concentración de B a la salida del último reactor, mediante un cambio en alguno de los parámetros del sistema. Considere que los parámetros de la entrada son fijos. Grafique la variación de C_A al final de la última etapa con la variación de ese parámetro.
Explique cómo piensa que podría llevarse a cabo ese cambio en el parámetro en la realidad.
- Utilizar la **funcion** Thomas.m creada en el ejercicio anterior para encontrar la cantidad de reactores en serie necesarios para obtener una concentración de A a la salida del último reactor 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.

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.