

## Capítulo 4

# Reactor CSTR

### 4.1 Enunciado

Se quiere simular el comportamiento de un reactor de mezcla perfecta (CSTR). Se considera que el reactor es isotermo. La reacción que tiene lugar es  $A \rightarrow B$ . Es una reacción cuya cinética sigue la expresión de Arrhenius y es de primer orden respecto al reactivo A. El reactor tiene dos entradas y una salida, la cual se produce por el fondo del mismo por efecto de la gravedad.

Las condiciones de diseño y operación del reactor son: Caudal de entrada de la corriente  $F_1$   $5 \text{ m}^3/\text{h}$ , caudal de entrada de la corriente  $F_2$   $2 \text{ m}^3/\text{h}$ , concentración de A en la corriente  $F_1$   $0,5 \text{ kmol}/\text{m}^3$ , concentración de A en la corriente  $F_2$   $0,4 \text{ kmol}/\text{m}^3$ , área del tanque  $3 \text{ m}^2$ , área de salida de la tubería del tanque  $0,0003 \text{ m}^2$ , constante preexponencial  $9703 \cdot 3600 \text{ h}^{-1}$ , energía de activación  $11843 \text{ kcal}/\text{kmol}$ , constante de los gases ( $R$ )  $1,987 \text{ kcal}/\text{kmol K}$ , temperatura del reactor  $60^\circ\text{C}$ , densidad:  $1000 \text{ kg}/\text{m}^3$  (considérese constante).

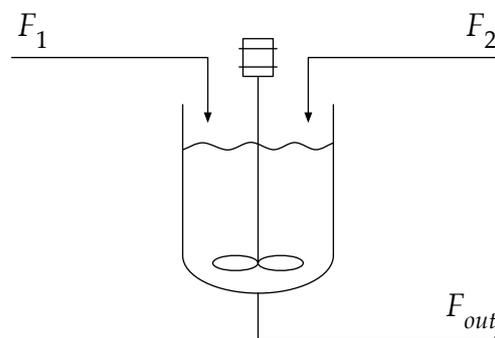


Figura 4.1: Reactor CSTR.

Se pide:

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo.
2. Resolver el modelo empleando la función `ode45` de Matlab.
3. Dibujar las curvas de evolución del sistema.
4. Ver el comportamiento del sistema ante un salto escalón en:
  - (a) El caudal de la corriente 1.
  - (b) La temperatura del reactor.

## 4.2 Modelo matemático

### Leyenda

$F_1$ : Caudal de entrada de la corriente 1 ( $\text{m}^3/\text{h}$ ).

$F_2$ : Caudal de entrada de la corriente 2 ( $\text{m}^3/\text{h}$ ).

$F_{out}$ : Caudal de salida del reactor ( $\text{m}^3/\text{h}$ ).

$V$ : Volumen de líquido en el reactor ( $\text{m}^3$ ).

$A$ : Área de la sección del reacción ( $\text{m}^2$ ).

$A_s$ : Sección de la tubería de salida del reactor ( $\text{m}^2$ ).

$h$ : Altura de líquido en el reactor (m).

$C_1^A$ : Concentración de A en la corriente 1 ( $\text{kmol}/\text{m}^3$ ).

$C_1^B$ : Concentración de B en la corriente 1 ( $\text{kmol}/\text{m}^3$ ).

$C_2^A$ : Concentración de A en la corriente 2 ( $\text{kmol}/\text{m}^3$ ).

$C_2^B$ : Concentración de B en la corriente 2 ( $\text{kmol}/\text{m}^3$ ).

$C_{out}^A$ : Concentración de A en la corriente de salida ( $\text{kmol}/\text{m}^3$ ).

$C_{out}^B$ : Concentración de B en la corriente de salida ( $\text{kmol}/\text{m}^3$ ).

$C^A$ : Concentración de A en el reactor ( $\text{kmol}/\text{m}^3$ ).

$C^B$ : Concentración de B en el reactor ( $\text{kmol}/\text{m}^3$ ).

$N^A$ : Moles de A en el reactor (kmol).

$N^B$ : Moles de B en el reactor (kmol).

$r$ : Velocidad de reacción (kmol/h m<sup>3</sup>).

$k$ : Constante de velocidad (h<sup>-1</sup>).

$k_0$ : Constante preexponencial (h<sup>-1</sup>).

$E_a$ : Energía de activación (kcal/kmol).

$R$ : Constante de los gases (kcal/kmol K).

$T$ : Temperatura en el reactor (K).

$\rho$ : Densidad de líquido (kg/m<sup>3</sup>).

$g$ : Gravedad (m/s<sup>2</sup>).

### Hipótesis asumidas

1. La densidad del líquido será constante en el tiempo, por lo que la reacción que tiene lugar no la afecta:  $\rho = cte$ .
2. Se considerará un modelo de mezcla perfecta en el reactor, por lo que no hay gradientes de ninguna de las propiedades del medio de reacción y las características de la salida son como las del líquido en el seno del reactor. Más en detalle, la concentración del líquido de salida es igual a la del interior, por tanto,  $C^A = C_{out}^A$  y  $C^B = C_{out}^B$ .

### Balances de materia

Puesto que la densidad es constante en el tiempo, el balance de materia global se puede realizar en volumen sin considerar las variaciones asociadas a la reacción. De este modo

$$\frac{dV}{dt} = F_1 + F_2 - F_{out} \quad (4.1)$$

no obstante, puesto que la sección en el reactor es constante

$$V = h \cdot A \quad \implies \quad \frac{dV}{dt} = \frac{d}{dt}(h \cdot V) = A \frac{dh}{dt} \quad (4.2)$$

por lo que el balance de materia global quedaría

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{A}(F_1 + F_2 - F_{out}) \quad (4.3)$$

Si el balance de materia se realiza por componentes se tiene que

$$\frac{dN^A}{dt} = F_1 \cdot C_1^A + F_2 \cdot C_2^A - F_{out} \cdot C_{out}^A - r \cdot V \quad (4.4)$$

$$\frac{dN^B}{dt} = F_1 \cdot C_1^B + F_2 \cdot C_2^B - F_{out} \cdot C_{out}^B + r \cdot V \quad (4.5)$$

Puesto que no se alimenta B en ninguna de las corrientes ( $C_1^B = C_2^B = 0$ ) y que la concentración a la salida es la misma que en el seno del reactor, los balances de materia por componentes quedarían

$$\frac{dN^A}{dt} = F_1 \cdot C_1^A + F_2 \cdot C_2^A - F_{out} \cdot C^A - r \cdot V \quad (4.6)$$

$$\frac{dN^B}{dt} = -F_{out} \cdot C^B + r \cdot V \quad (4.7)$$

#### Ecuaciones auxiliares

- *Caudal de salida de reacción:*

La salida del reactor se produce por gravedad, por lo que

$$F_{out} = A_s \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot h} \quad (4.8)$$

no obstante, puesto que la gravedad se expresa en  $m/s^2$ , es necesario utilizar un factor de conversión como es 3600 s/h para expresar el caudal de salida en  $m^3/h$ , por lo que

$$F_{out} = 3600 \cdot A_s \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot h} \quad (4.9)$$

- *Velocidad de reacción:*

Puesto que se trata de una reacción de primer orden, la velocidad de reacción viene dada por

$$r = k \cdot C^A \quad (4.10)$$

en donde, la constante de velocidad viene dada por la ecuación de Arrhenius

$$k = k_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{R \cdot T}\right) \quad (4.11)$$

- *Concentraciones en el reactor:*

Las concentraciones en el reactor se pueden relacionar con los moles acumulados y el volumen en el reactor, por tanto

$$C^A = \frac{N^A}{V} \quad ; \quad C^B = \frac{N^B}{V} \quad (4.12)$$

## 4.3 m-files

### Modelo del reactor

```
function d = cstr(t,x)

global F1 F2 C1A C2A A As k0 Ea R T rho g

h = x(1); % Altura en el reactor en m
NA = x(2); % Moles de A en el reactor en kmol
NB = x(3); % Moles de B en el reactor en kmol

V = h * A; % Volumen en el reactor m3
CA = NA/V; % Concentracion de A en el reactor en kmol/m3
CB = NB/V; % Concentracion de B en el reactor en kmol/m3
k = k0*exp(-Ea/(R*T)); % Cte de velocidad en 1/h
r = k * CA; % Velocidad de reaccion en kmol/m3 h
Fout = 3600*As*sqrt(2*g*h); % Caudal de salida en m3/h

% dh/dt
d(1,1) = (F1 + F2 - Fout)/A;

% dNA/dt
d(2,1) = F1*C1A + F2*C2A - Fout*CA - r*V;

% dNB/dt
d(3,1) = -Fout*CB + r*V;
```

### Cuerpo principal del programa

```
clear all;
close all;
clc;

global F1 F2 C1A C2A A As k0 Ea R T rho g

F1 = 5; % Caudal de entrada 1 en m3/h
F2 = 2; % Caudal de entrada 2 en m3/h
C1A = 0.5; % Concentracion de A en 1 en kmol/m3
C2A = 0.5; % Concentracion de A en 2 en kmol/m3
A = 3; % Area del tanque en m2
As = 0.0003; % Area de salida en m2
k0 = 9703*3600; % Cte preexponencial en 1/h
Ea = 11843; % Energia de activacion en kcal/kmol
R = 1.987; % Cte de los gases en kcal/kmol K
T = 60+273.15; % Temperatura en el reactor en K
rho = 1000; % Densidad en kg/m3
g = 9.81; % Gravedad en m/s2

h0 = 1; % Altura inicial en m
NA0 = 0; % Moles de A iniciales en kmol
```

```
NB0 = 0;          % Moles de B iniciales en kmol

time = [0 20];

[t,x] = ode45(@cstr,time,[h0 NA0 NB0]);

for i = 1:length(t)
    Fout(i) = 3600*As*sqrt(2*g*x(i,1)); % Caudal de salida
    V = x(i,1)*A;          % Volumen en el reactor
    CA(i) = x(i,2)/V; % Concentracion de A
    CB(i) = x(i,3)/V; % Concentracion de B
end

figure
subplot(2,2,1),
    plot(t,x(:,1),'linewidth',2)
    xlabel('Tiempo (h)')
    ylabel('Altura (m)')
    title('Altura de liquido')
subplot(2,2,2),
    plot(t,Fout,'r','linewidth',2)
    xlabel('Tiempo (h)')
    ylabel('Caudal (m^3/h)')
    title('Caudal de salida')
subplot(2,2,3),
    plot(t,CA,'g','linewidth',2)
    xlabel('Tiempo (h)')
    ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')
    title('Concentracion de A')
subplot(2,2,4),
    plot(t,CB,'g','linewidth',2)
    xlabel('Tiempo (h)')
    ylabel('Concentracion (kmol/m^3)')
    title('Concentracion de B')
```

### 4.4 Simulación

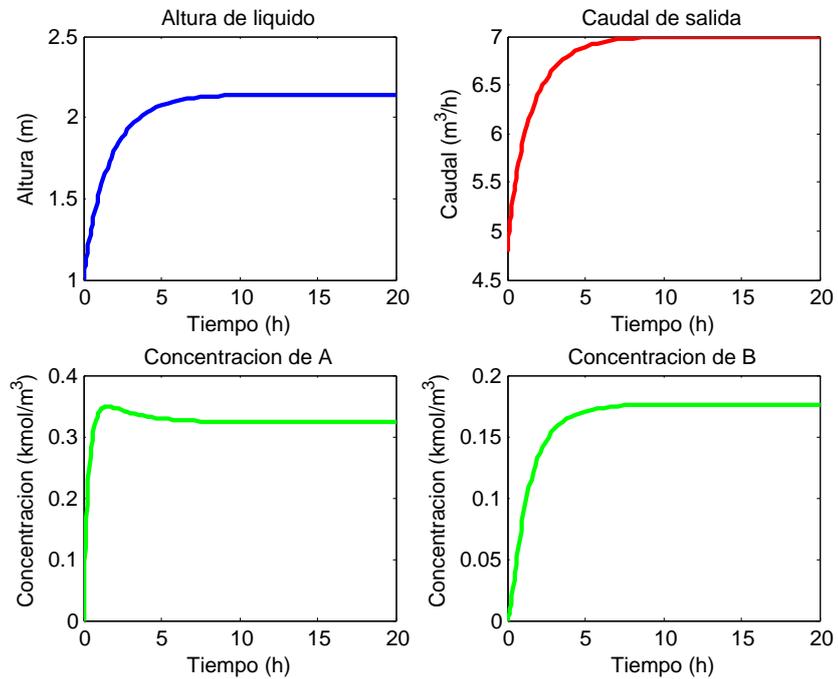


Figura 4.2: Simulación del caso base.

En la Figura 4.2 se muestra la evolución temporal del nivel ( $h$ ), caudal de salida ( $F_{out}$ ) y concentraciones de A y B ( $C^A$  y  $C^B$ ) en el reactor. Se observa el comportamiento dinámico de todos ellos y cómo evolucionan hasta alcanzar el régimen estacionario.

En la Figura 4.3 se muestra el comportamiento del sistema cuando se cambia el caudal de entrada  $F_1$  de 5 a 3 m<sup>3</sup>/h. Dicha perturbación supone, como era de esperar, que el nivel de líquido en el reactor disminuya y que también el caudal de salida sea menor. En cambio, la concentración de reactivo (A) aumenta y la de producto disminuye a pesar de que en el instante en que se introduce la perturbación se produce una oscilación en sentido contrario.

Si se modifica la temperatura del reactor ( $T$ ), pasando esta de 60 a 70°C se tiene la respuesta mostrada en la Figura 4.4. Puede apreciarse cómo ni el nivel y el caudal de salida se ven afectados, como era de esperar. La temperatura sólo influye en la constante de velocidad y, por tanto, en las concentraciones de reactivo y producto. Un aumento de temperatura hace que aumente la velocidad de reacción y, por tanto, que disminuya la concentración de reactivo (A) y que aumente la de producto (B).

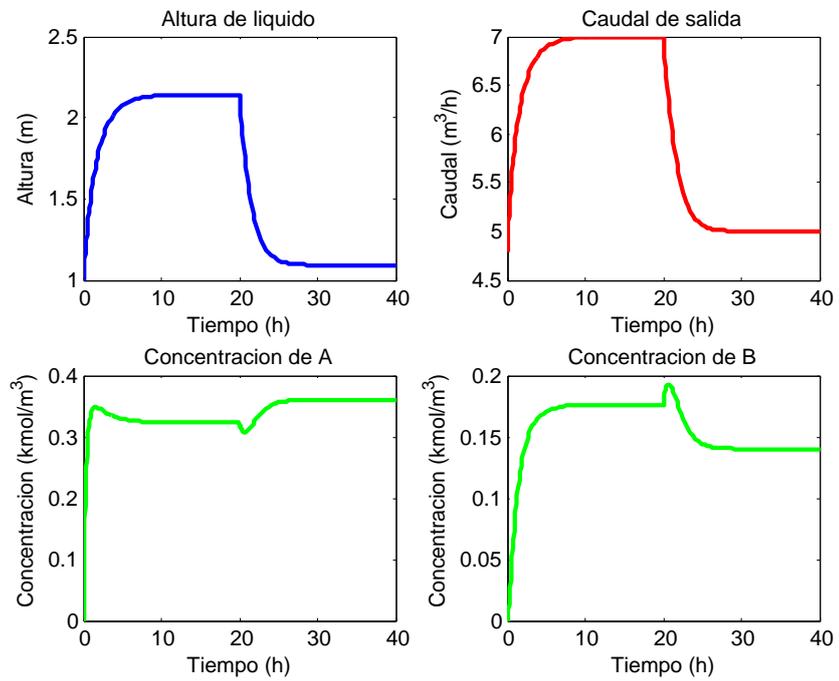


Figura 4.3: Salto escalón en el caudal de la corriente 1.

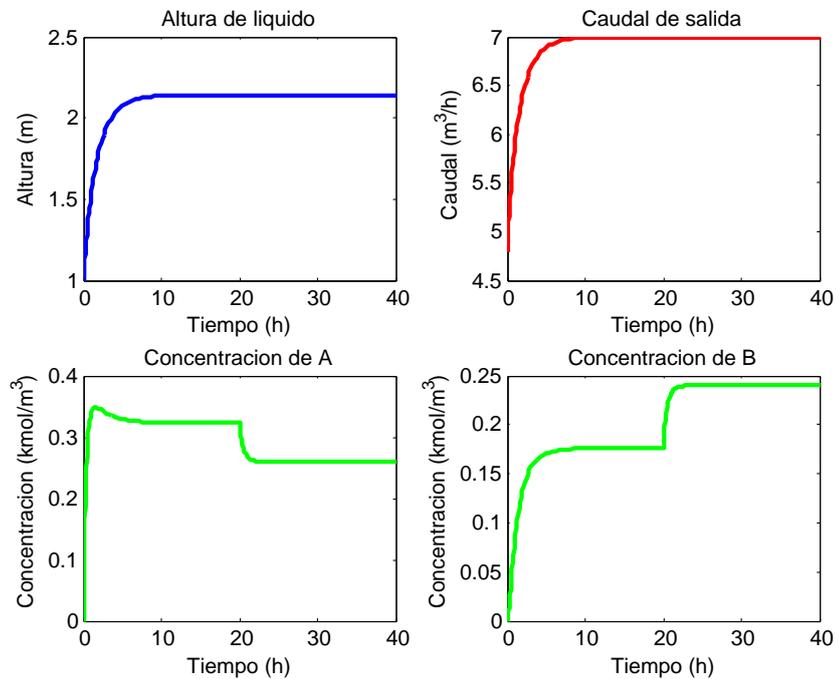


Figura 4.4: Salto escalón en la temperatura del reactor.