

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 m^2
- Área de salida de la tubería del tanque: $0,0003 \text{ m}^2$

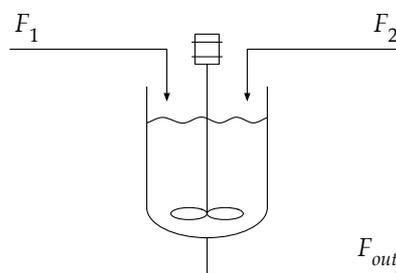


Figura 4.1: Reactor CSTR.

- Constante preexponencial: $9703 \cdot 3600 \text{ h}^{-1}$
- Energía de activación: 11843 kcal/kmol
- Constante de los gases (R): 1,987 kcal/kmol K
- Temperatura del reactor: 60°C
- Densidad: 1000 kg/m³ (considérese constante)

Objetivos

1. Plantear las ecuaciones que constituyen el modelo.
2. Resolver el modelo empleando el método de Runge-Kutta 45 de Matlab.
3. Dibujar las curvas de evolución del sistema.
4. Ver el comportamiento del sistema ante un salto escalón en el caudal de la corriente 1 y ante un salto en la temperatura del reactor.

4.2 Modelo matemático

Leyenda

F_1 : Caudal de entrada de la corriente 1 (m³/h).

F_2 : Caudal de entrada de la corriente 2 (m³/h).

F_{out} : Caudal de salida del reactor (m³/h).

V : Volumen de líquido en el reactor (m³).

A : Área de la sección del reacción (m²).

A_s : Sección de la tubería de salida del reactor (m²).

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

C_1^A : Concentración de A en la corriente 1 (kmol/m³).

C_1^B : Concentración de B en la corriente 1 (kmol/m³).

C_2^A : Concentración de A en la corriente 2 (kmol/m³).

C_2^B : Concentración de B en la corriente 2 (kmol/m³).

C_{out}^A : Concentración de A en la corriente de salida (kmol/m³).

C_{out}^B : Concentración de B en la corriente de salida (kmol/m³).

C^A : Concentración de A en el reactor (kmol/m³).

C^B : Concentración de B en el reactor (kmol/m³).

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

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

r : Velocidad de reacción (kmol/h m³).

k : Constante de velocidad (h⁻¹).

k_0 : Constante preexponencial (h⁻¹).

E_a : Energía de activación (kcal/kmol).

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

T : Temperatura en el reactor (K).

ρ : Densidad de líquido (kg/m³).

g : Gravedad (m/s²).

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

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

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 Simulación

De acuerdo con las ecuaciones establecidas, se puede realizar la simulación del reactor. No obstante, para poder llevar a cabo la integración del sistema es necesario disponer de unos condiciones iniciales. Por ejemplo, se va a partir de un reactor con un metro de líquido ($h(0) = 1$ m) y sin ninguno de los dos componentes en disolución, esto es, los moles de A y de B en el reactor son nulos ($N^A(0) = N^B(0) = 0$ kmol).

Se desea analizar el comportamiento del sistema por lo que se representará la evolución temporal de la altura de líquido en el depósito, del caudal de salida y de las concentraciones de A y B en el medio de reacción.

Además, se desea evaluar el comportamiento del sistema frente a perturbaciones, en primer lugar se analizará la perturbación en el caudal de alimentación y, en segundo, la de temperatura del medio de reacción. Para ello, se utilizará la siguiente secuencia temporal:

- 0 h – 20 h: Caudal y temperatura nominales. Se analiza la evolución del sistema de acuerdo con las condiciones establecidas.
- 20 h – 40 h: $F_1 = 3$ m³/h y temperatura nominal. Se analiza la evolución del sistema frente a la perturbación en el caudal de alimentación.
- 40 h – 60 h: Caudal y temperatura nominales. Se deja que el sistema vuelva a su régimen permanente nominal.
- 60 h – 80 h: Caudal nominal y temperatura de 70°C. Se analiza la evolución del sistema frente a la perturbación en la temperatura.

De acuerdo con lo expuesto previamente, se obtienen las evoluciones temporales recogidas en la Figura 4.2.

La evolución de la altura en el reactor, al igual que en el caudal de salida, sólo se ve afectada por las variaciones en el caudal de alimentación. De hecho, en las condiciones nominales, la altura se estabiliza en torno a 2,14 metros y el caudal de salida en 7 m³/h. Pero cuando el caudal de entrada se reduce, la altura también lo hace hasta situarse en torno a los 1,09 metros, mientras que el caudal de salida lo hace en 5 m³/h. Cuando se vuelve a las

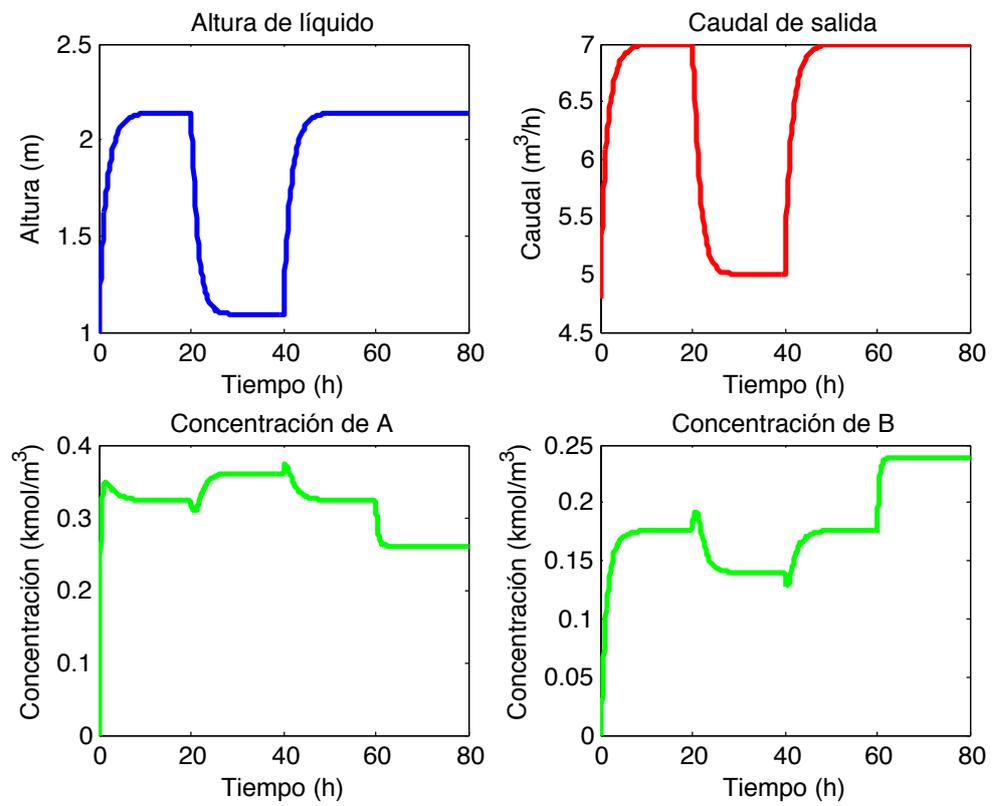


Figura 4.2: Simulación del reactor CSTR.

condiciones nominales de funcionamiento, tanto la altura como el caudal de salida vuelven a sus valores nominales.

En cambio, las concentraciones, tanto de A como de B, sí se ven afectadas, como era de esperar, tanto por variaciones en el caudal de entrada como en la temperatura del reactor. Cuando se reduce el caudal de entrada la concentración de A aumenta y la de B disminuye, aproximándose la concentración del medio de reacción a la de la corriente de alimentación. Por otro lado, cuando se aumenta la temperatura como aumenta la velocidad de reacción, la concentración de A disminuye y la de B aumenta ostensiblemente.

4.4 m-file

```
function cstr

clear all;
close all;

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

t0 = 0;
tf1 = 20;
tf2 = 40;
tf3 = 60;
tf4 = 80;

[t1,x1] = ode45(@derivada,[t0 tf1],[h0 NA0 NB0]);
[t2,x2] = ode45(@derivada,[tf1 tf2],x1(length(t1),:));
[t3,x3] = ode45(@derivada,[tf2 tf3],x2(length(t2),:));
[t4,x4] = ode45(@derivada,[tf3 tf4],x3(length(t3),:));
```

Simulación dinámica

```
t = [t1;t2;t3;t4];
x = [x1;x2;x3;x4];

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

subplot(2,2,1),
    plot(t,x(:,1),'linewidth',2)
    xlabel('Tiempo (h)')
    ylabel('Altura (m)')
    title('Altura de líquido')
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('Concentración (kmol/m^3)')
    title('Concentración de A')
subplot(2,2,4),
    plot(t,CB,'g','linewidth',2)
    xlabel('Tiempo (h)')
    ylabel('Concentración (kmol/m^3)')
    title('Concentración de B')

function d = derivada(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

if t > 20
    F1 = 3;
end
if t > 40
    F1 = 5;
end
if t > 60
    T = 70 + 273.15;
end

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
```

Simulación dinámica

```
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;
```