

Simulación de un reactor CSTR

Autores: Bravo Erick, Jimenez Nancy, Paredes Nahir, Valencia Gabriel

Tabla de Contrenidos

Introducción.....	1
Ejemplo.....	2
Ecuaciones y Gráfico.....	2
Variables	3
Reactor.....	4
Solución en estado estacionario.....	4
Soluciones con perturbaciones	5
Escenario A:	5
Perturbación en el caudal.....	5
Perturbación en la temperatura	6
Gráficos.....	6
Escenario A:	6
Referencias.....	12

Introducción

El modelado matemático es una herramienta que emplea varios métodos para caracterizar el comportamiento de distintos fenómenos dentro de un proceso determinado en el que permite estimar los parámetros involucrados (Boyadjiev, 2010).

En el caso de ingeniería química los modelos matemáticos que se utilizan permiten caracterizar distintos procesos, entre los que se puede mencionar la termodinámica, fenómenos de transporte, etc (Boyadjiev, 2010). Los cuales están asociados a problemas de cálculo y requieren en repetidas ocasiones la resolución de ecuaciones diferenciales (ED). Entre los principales métodos numéricos empleados con el fin de resolver estos sistemas se encuentra el método de Euler, el cual parte de un valor inicial, seguido evalúa ecuaciones para obtener un resultado en el próximo valor; este proceso se realiza varias veces en un determinado intervalo para encontrar una solución aproximada a la resolución de la ED (Achieng, 2014).

Los modelos matemáticos y la resolución con el método de Euler han sido ampliamente utilizados en el análisis del comportamiento de variables como Temperatura, Presión, Concentración, etc. En distintos sistemas, en el caso de estudio, se analizará un Reactor de Tanque Agitado Continuo (CSTR), el cual se caracteriza porque permite una mezcla constante de los reactivos y resulta en una producción continua y eficiente (Kirsty, 2023).

Entre los principales puntos a considerar en un reactor CSTR, se encuentran que existe una mezcla perfecta y por otra parte que el reactor opera de manera continua, lo que permite que los reactivos fluyan constantemente y los productos sean extraídos simultáneamente, escenario en el cual el reactor se encuentra en estado estacionario al igual que la temperatura y concentración (Moran, 2017). Sin embargo, pueden existir factores que cambien dicho estado, en ese caso, habrá una denominada “perturbación” la cual se refiere a cambios que pueden afectar el comportamiento del sistema y en el tiempo generarán un nuevo estado estacionario.

Finalmente, entre las principales consideraciones en un reactor CSTR se encuentra el tiempo de residencia y la velocidad de reacción, los cuales a su vez dependen de la temperatura y la concentración de los reactivos (Barragán et al., 2016).

El objetivo de la simulación es mostrar cómo el sistema es afectado tras someterse a una perturbación en distintos casos, mediante la resolución de modelo matemático empleando el método de Euler.

Ejemplo

Se tiene un reactor cilíndrico cuyo volumen total es 45 m^3 . En estado estacionario el volumen del reactor es 39.6 m^3 , de manera que la altura del líquido en el tanque es de 3.5 m. La corriente de entrada al reactor tiene un caudal de $0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$, una concentración de 5000 kmol/s y una temperatura de 120°C . La reacción que ocurre dentro de este CSTR es: $A \rightarrow B$, con una constante de reacción de 0.25 s^{-1} a 100°C , que es la temperatura de estado estacionario. La entalpía de reacción es de -75000 kJ/kmol . La reacción es refrigerada con un gas que se condensa a 50°C que circula por un serpentín que presenta un coeficiente global de $10000 \text{ KJ}/(\text{sm}^2\text{K})$. Datos adicionales de la reacción se presentan en la siguiente tabla:

Datos	Valor	Unidad
Densidad de mezcla	950	kg/m ³
Capacidad calórica de mezcla	3,5	kJ/kgK
Energía de Activación	600	Cal/mol

1. Realizar un gráfico del sistema en análisis e incluir en este gráfico todas las variables y parámetros conocidos.
2. Deducir las ecuaciones requeridas para simular el estado no estacionario de este reactor: (Volumen del reactor en función del tiempo, concentración de A y B en función del tiempo, Temperatura del reactor en función del tiempo, constante de reacción en función de la temperatura) Considerar el escenario
escenarios: a. El caudal de salida es constante e igual a $0.1 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$
3. Comprobar que los datos disponibles corresponden al estado estacionario. Determinar los datos faltantes para simular el comportamiento del reactor: Concentración de salida, área de intercambio, factor preexponencial de ecuación de Arrhenius

Ecuaciones y Gráfico

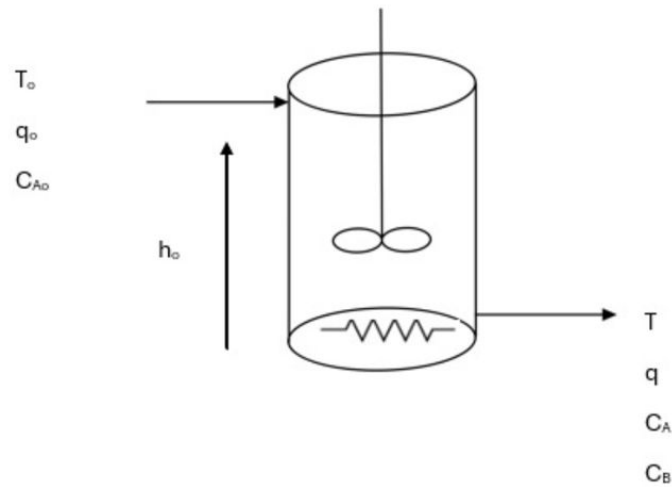


Figura 1. Reactor Cilíndrico CSTR

Para resolver el ejemplo debemos considerar algunas ecuaciones como las siguientes:

Balance de Masa General:

$$\frac{d(\rho_m V)}{dt} = q_o \rho_o - q_s \rho_s$$

Balance de Masa por especies:

A

$$\frac{d(C_A V)}{dt} = q_o C_{Ao} - q_s C_A - k C_A V$$

B

$$\frac{d(C_B V)}{dt} = -q_s C_B + k C_A V$$

Balance de Energia

$$\rho_m V C_{pm} \frac{dT}{dt} = q_o \rho_m C_{pm} (T - T_o) - r_A V (-\Delta H_{Rx}) + \dot{Q}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(q_o \rho_m C_{pm} (T - T_o) - r_A V (-\Delta H_{Rx}) + U A t * (T - T_g))}{\rho_m V C_{pm}}$$

Ecuación de Arrhenius

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Variables

```
clc;clear;close
```

En esta sección se definen y varían las variables dadas en el problema

Reactor

```
Vt=45; %Volumen total del tanque [L]
V=39.6; %Volumen utilizado [L]
h=3.5; % Altura del liquido [m]
% Reacción
k=0.25; % cte de reacción T=100°C
delta_rx=-75000; % Entalpia de Reacción [kJ/mol]
% Condiciones del gas
Tg=50; % Temperatura del gas [°C]
U=10000 % [kJ/sm2°C]
```

```
U = 10000
```

```
% Condiciones del líquido
Cp=3.5; % Capacidad calorífica [kJ/kgK]
densidad=950; % [kg/m3]
Ea=600; % Energia de Activación [cal/mol]
R=1.987; % cte en [cal/mol K]
A = k/(exp((-Ea)/(R*373))) % Factor de colisión
```

```
A = 0.5617
```

```
fprintf("%.15f", A)
```

```
0.561725079427792
```

```
% Parámetros de operación
Cao=5000; % kmol/m3
Tf=100; % °C
To=120;
Vo=39.6;
q = 0.1;
Caf=50; % kmol/m3
CBinicial = 0.25*Caf*Vo/0.1;
```

Solución en estado estacionario

Aquí se inicializará el valor de cada variable.

```
% Estado estacionario
t1 = 0;
deltat = 0.1;
for i = 1:10000
    t1(i+1) = t1(i) + deltat;
end
```

```

Tgrafico = 1:length(t1);
Tgrafico(1:end) = 100;

Vgrafico = 1:length(t1);
Vgrafico(1:end) = 39.6;

CAgrafico = 1:length(t1);
CAgrafico(1:end) = 50;

kgrafico = 1:length(t1);
kgrafico(1:end) = 0.25;

Tgrafico = 1:length(t1);
Tgrafico(1:end) = 100;

qgrafico = 1:length(t1);
qgrafico(1:end) = 0.1;

```

Soluciones con perturbaciones

```

% Perturbación Caudal de entrada
qperturbacion=input("Ingresar la perturbación del Caudal [L/min]: ")

```

```
qperturbacion = 0.1000
```

```
qo=q+qperturbacion;
```

Escenario A:

Perturbación en el caudal

```

% PERTURBACIÓN EN EL CAUDAL (ESCENARIO A)
% qo=0.2; %l/min
Afc=74.26; %m2
V = 39.6;
Ca = 50;
Cb = k(1)*Ca(1)*V(1)/qo;
T = 100;
k = 0.25;
t = 0;
deltat = 0.1;

for i = 1:10000
    V(i+1) = V(i) + (qo-q)*deltat;
    T(i+1) = T(i) + ((-qo*densidad*Cp*(T(i)-To)-k(i)*Ca(i)*V(i)*delta_rx-
    U*Afc*(T(i)-Tg))/(V(i)*densidad*Cp))*deltat;
    Ca(i+1) = Ca(i) + ((qo*Ca0 - Ca(i)*(q + k(i)*V(i)) - Ca(i)*(qo-q))/V(i))*deltat;
    Cb(i+1) = Cb(i) + ((k(i)*Ca(i)*V(i) - q*Cb(i) - Cb(i)*(qo-q))/V(i))*deltat;
    k(i+1) = A*exp((-Ea)/(R*(T(i+1)+273)));
    t(i+1) = t(i) + deltat;

```

```
end
```

```
CB = 1:length(t1);  
CB(1:end) = CBinicial;
```

Perturbación en la temperatura

```
% PERTURBACIÓN DE LA TEMPERATURA (ESCENARIO A)
```

```
Tperturbacion=input("Ingresar la perturbación de Temperatura [°C]: ")
```

```
Tperturbacion = 130
```

```
To2=To+Tperturbacion;  
% To2 = 130;  
qo1=0.1; %l/min  
Afc=74.26; %m2  
V3 = 39.6;  
Ca3 = 50;  
Cb3 = k(1)*Ca(1)*V(1)/0.1;  
T3 = 100;  
k3 = 0.25;  
t3(1) = 0;  
deltat = 0.1;  
tf=100;  
i=1;  
  
while t3(i)<=tf  
    V3(i+1) = V3(i) + (qo1-q)*deltat;  
    T3(i+1) = T3(i) + ((-qo1*densidad*Cp*(T3(i)-To2)-k3(i)*Ca3(i)*V3(i)*delta_rx-  
U*Afc*(T3(i)-Tg))/(V3(i)*densidad*Cp))*deltat;  
    Ca3(i+1) = Ca3(i) + ((qo1*Cao - Ca3(i)*(q + k3(i)*V3(i))- Ca3(i)*(qo1-q))/  
V3(i))*deltat;  
    Cb3(i+1) = Cb3(i) + ((k3(i)*Ca3(i)*V3(i) - q*Cb3(i)- Cb3(i)*(qo1-q))/  
V3(i))*deltat;  
    k3(i+1) = A*exp((-Ea)/(R*(T3(i+1)+273)));  
    t3(i+1) = t3(i) + deltat;  
    i=i+1;  
end
```

Gráficos

Escenario A:

```
% Gráficos del escenario A
```

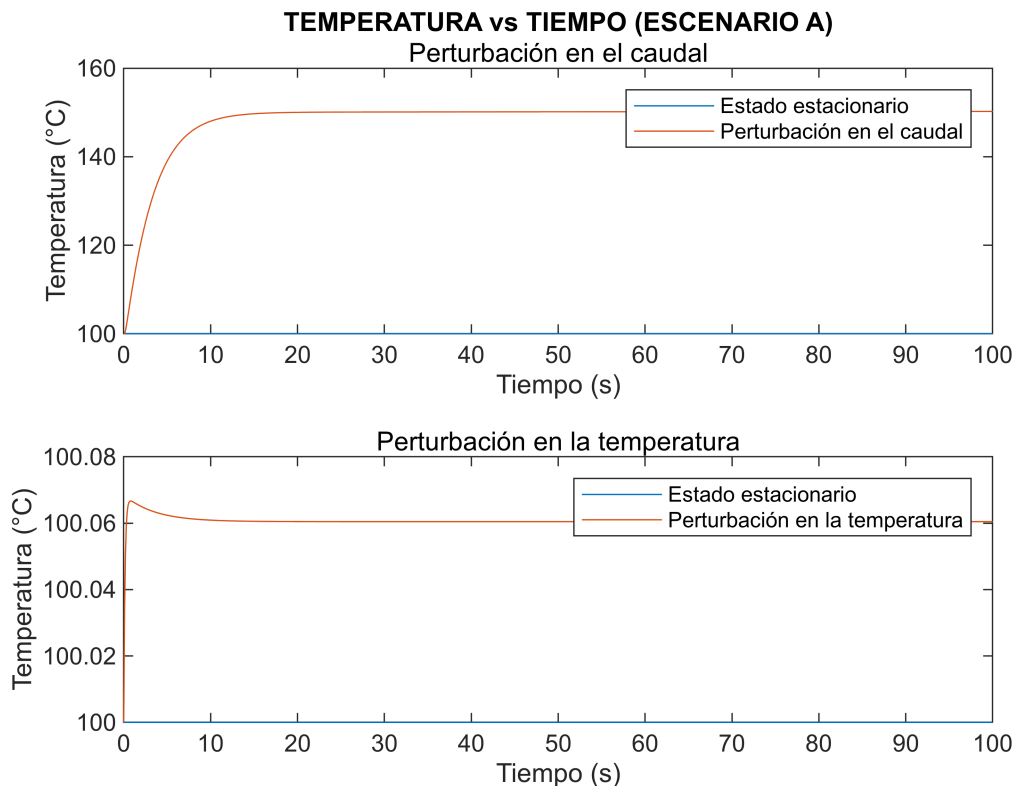
```
% Temperatura vs Tiempo  
tiledlayout(2,1)
```

```

nexttile
plot(t1, Tgrafico)
hold on
plot(t,T)
xlim([0 100])
legend 'Estado estacionario' 'Perturbación en el caudal'
title('TEMPERATURA vs TIEMPO (ESCENARIO A)', 'Perturbación en el caudal');
ylabel 'Temperatura (°C)'
xlabel 'Tiempo (s)'
hold off

nexttile
plot(t1, Tgrafico)
hold on
plot(t3,T3)
xlim([0 100])
legend 'Estado estacionario' 'Perturbación en la temperatura'
title('', 'Perturbación en la temperatura');
ylabel 'Temperatura (°C)'
xlabel 'Tiempo (s)'
hold off

```



```
% Volumen vs Tiempo
```

```

tiledlayout(2,1)
nexttile

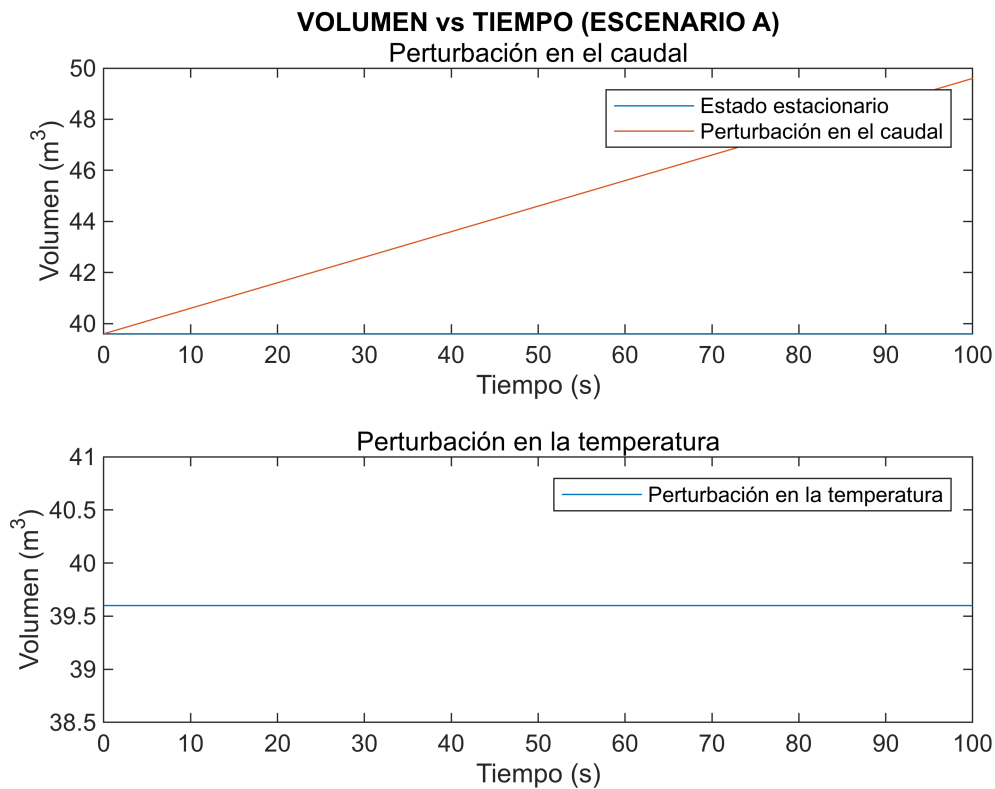
```

```

plot(t1, Vgrafico)
hold on
plot(t, V)
xlim([0 100])
legend 'Estado estacionario' 'Perturbación en el caudal'
title('VOLUMEN vs TIEMPO (ESCENARIO A)', 'Perturbación en el caudal');
ylabel 'Volumen (m^3)'
xlabel 'Tiempo (s)'
hold off

nexttile
plot(t3, V3)
xlim([0 100])
legend 'Perturbación en la temperatura'
title('', 'Perturbación en la temperatura');
ylabel 'Volumen (m^3)'
xlabel 'Tiempo (s)'

```



```

% CA vs Tiempo

tiledlayout(2,1)
nexttile
plot(t1, CAgrafico)
hold on
plot(t, Ca)

```

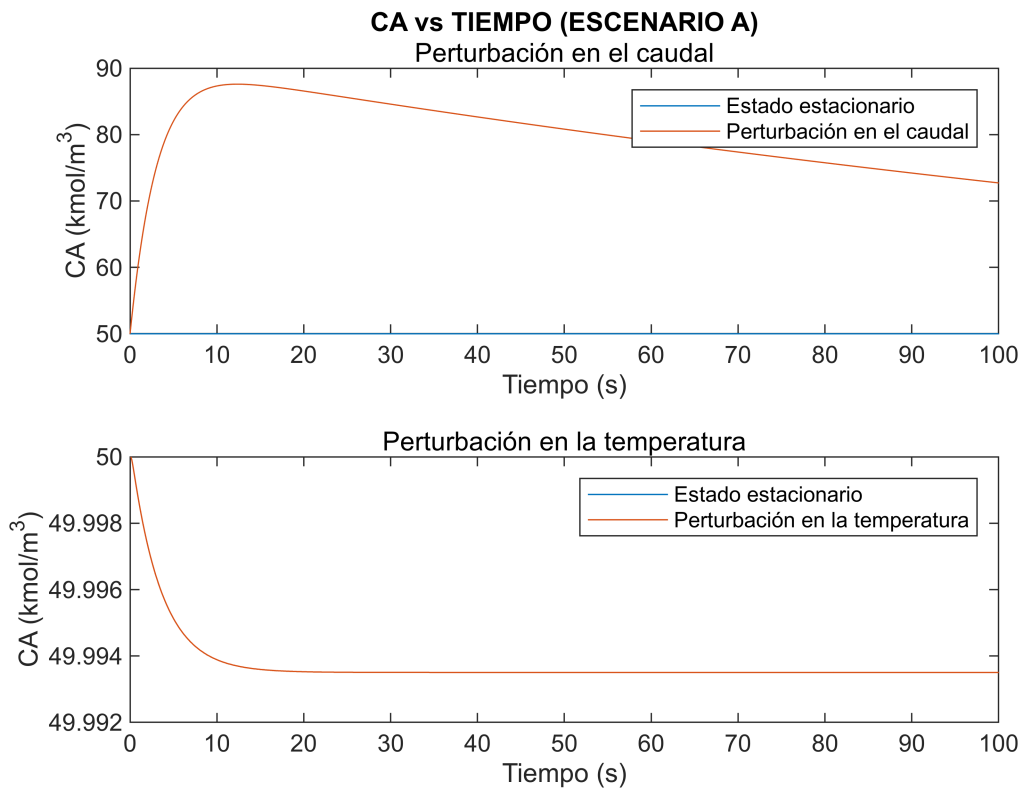


```

xlim([0 100])
legend 'Estado estacionario' 'Perturbación en el caudal'
title('CA vs TIEMPO (ESCENARIO A)', 'Perturbación en el caudal');
ylabel 'CA (kmol/m^3)'
xlabel 'Tiempo (s)'
hold off

nexttile
plot(t1, CAgrafico)
hold on
plot(t3, Ca3)
% ylim([30 100])
xlim([0 100])
legend 'Estado estacionario' 'Perturbación en la temperatura'
title('', 'Perturbación en la temperatura');
ylabel 'CA (kmol/m^3)'
xlabel 'Tiempo (s)'
hold off

```



```
% CB vs Tiempo
```

```

tiledlayout(2,1)
nexttile
plot(t1, CB)
hold on
plot(t, Cb)

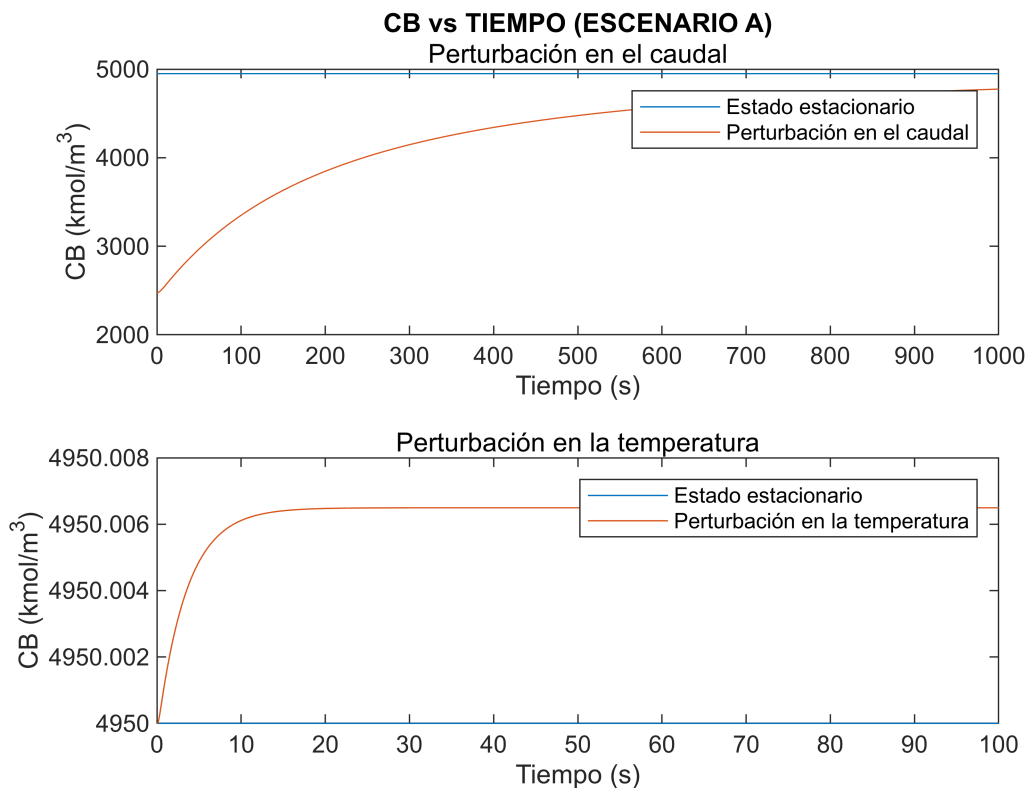
```

```

xlim([0 1000])
legend 'Estado estacionario' 'Perturbación en el caudal'
title('CB vs TIEMPO (ESCENARIO A)', 'Perturbación en el caudal');
ylabel 'CB (kmol/m^3)'
xlabel 'Tiempo (s)'
hold off

nexttile
plot(t1, CB)
hold on
plot(t3, Cb3)
xlim([0 100])
legend 'Estado estacionario' 'Perturbación en la temperatura'
title('', 'Perturbación en la temperatura');
ylabel 'CB (kmol/m^3)'
xlabel 'Tiempo (s)'
hold off

```



```

% k vs Tiempo

tiledlayout(2,1)
nexttile
plot(t1, kgrafico)
hold on
plot(t, k)
xlim([0 100])

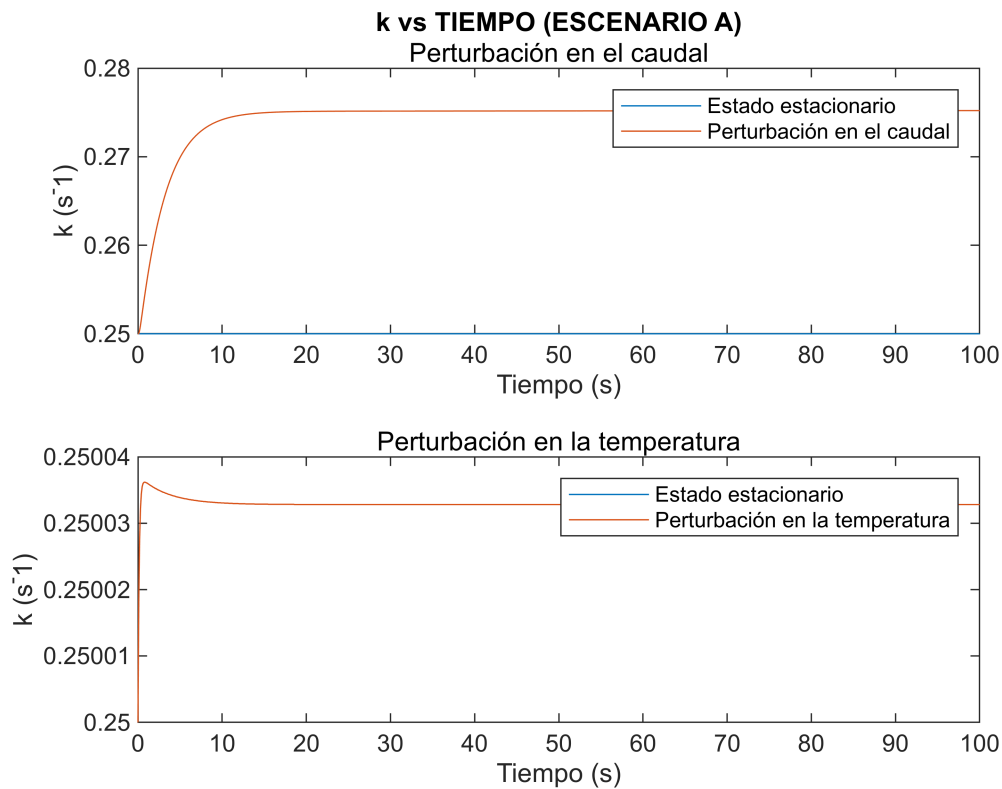
```

```

legend 'Estado estacionario' 'Perturbación en el caudal'
title('k vs TIEMPO (ESCENARIO A)', 'Perturbación en el caudal');
ylabel 'k (s-1)'
xlabel 'Tiempo (s)'
hold off

nexttile
plot(t1, kgrafico)
hold on
plot(t3, k3)
xlim([0 100])
legend 'Estado estacionario' 'Perturbación en la temperatura'
title('', 'Perturbación en la temperatura');
ylabel 'k (s-1)'
xlabel 'Tiempo (s)'
hold off

```



% Caudal de salida vs Tiempo

```

tiledlayout(2,1)
nexttile
plot(t1, qgrafico)
ylim([0 0.5])
xlim([0 100])
title('CAUDAL DE SALIDA vs TIEMPO (ESCENARIO A)', 'Perturbación en el caudal');
ylabel 'q (m3/s)'

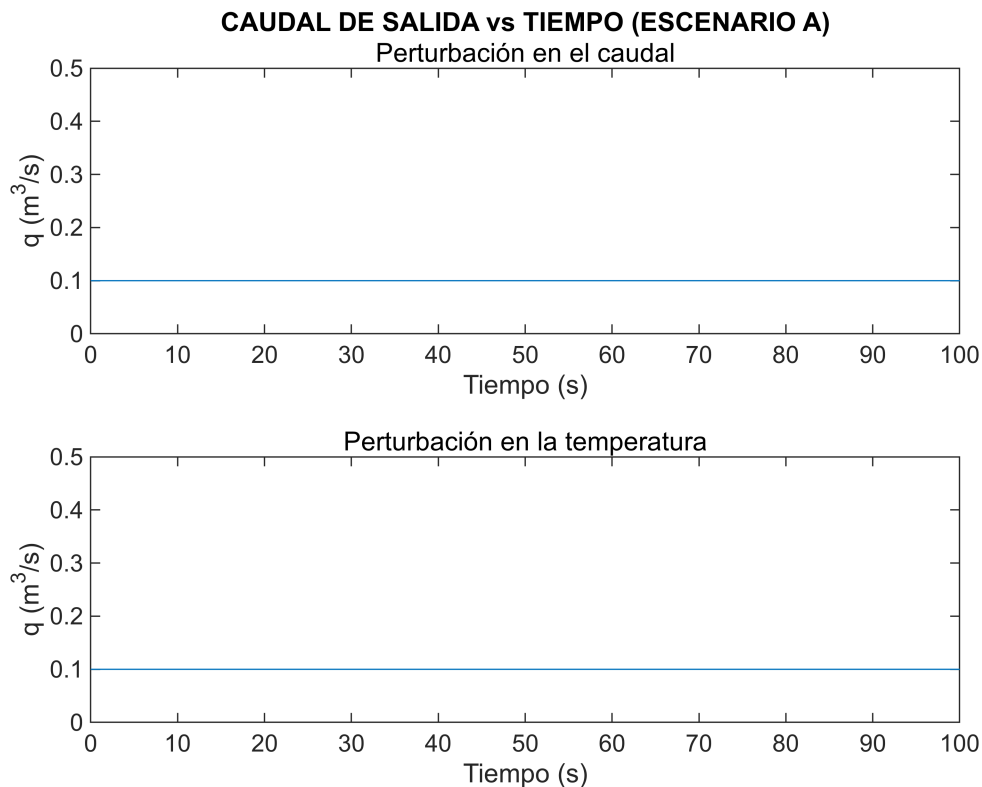
```

```

xlabel 'Tiempo (s)'

nexttile
plot(t1, qgrafico)
ylim([0 0.5])
xlim([0 100])
title('','Perturbación en la temperatura');
ylabel 'q (m^3/s)'
xlabel 'Tiempo (s)'

```



Referencias

- Achieng, E. (2014). Comparative Analysis of the Numerical Methods for solving Ordinary Differential Equations. African Institute for Mathematical Science. Cameroon.
- Ahmed, Y., Yaakob, Z., Akhtar, P., & Sopian, K. (2015). Production of biogas and performance evaluation of existing treatment processes in palm oil mill effluent (POME). *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 42, 1260-1278. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.10.073>
- Barragán, L. P., Figueroa, J., Durán, L. R., González, C. A., & Hennigs, C. (2016). Fermentative production methods. In *Elsevier eBooks* (pp. 189–217). <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-803622-8.00007-0>
- Boyadjiev, C. (2010). *Theoretical Chemical Engineering: Modeling and Simulation*. Springer Science & Business Media.

Kirsty (2023). *¿Cómo funciona un CSTR?* Asynt. <https://www.asynt.com/es/blog/how-does-a-cstr-work/>

Moran, S. (2017). Reactors. In *Elsevier eBooks* (pp. 355–368). <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-803355-5.00024-x>

Saratale, G. D., Saratale, R. G., Banu, J. R., & Chang, J. (2019). Biohydrogen production from renewable biomass resources. In *Elsevier eBooks* (pp. 247–277). <https://doi.org/10.1016/b978-0-444-64203-5.00010-1>