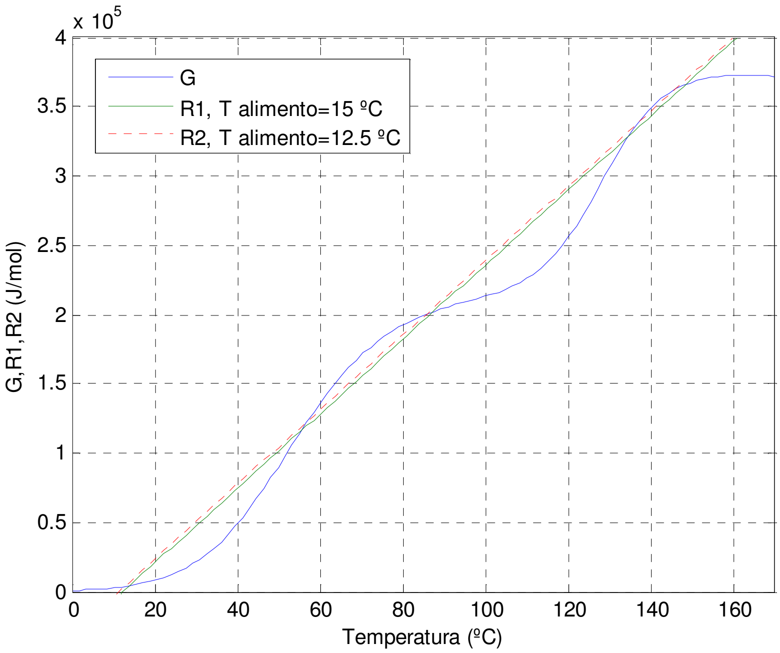
Problem 4: Stability of a constant-volume CSTR

Two exothermic reactions in series $A \rightarrow B \rightarrow C$ take place in liquid phase in a CSTR. Its volume is constant (1.56 m³). It contains a jacket for refrigeration (coolant temperature: T_w = 10 ºC and UA = 1.3×10^6 J·min^{-1}·K^{-1}). We have obtained (see figure below) the heat generated G(T) (J/mol) and the heat removed R1(T) (J/mol) for that CSTR with a feed stream temperature at 15 ºC. Note that there is multiplicity of states:



The data about the 5 possible steady states are:

Variables	Steady-state 1	Steady-state 2	Steady-state 3	Steady-state 4	Steady-state 5
T_s (ºC)	13.87	55.41	87.34	134.72	148.30
C_{As} (mol/m³)	13430	6240	884	48	23
C_{Bs} (mol/m³)	1796	8990	14310	4940	1279
C_{Cs} (mol/m³)	0	0.1	34	10237	13920

It is required that you study the stability of the 5 possible steady states shown in the table. To that end, you have to set as initial conditions the values of steady state conditions for each of the 5 cases to be solved. Therefore you should study (one at a time, 5 cases in total) the evolution of temperature and concentrations with time after a perturbation occurs, causing the system to move away from steady state conditions. Indicate, according to the results, if each of the 5 steady states is stable or not.

<u>Suggestions:</u> Run the simulation up to a time of 300 min. Make a clear distinction between C_{j0} and $C_{j,input}$. C_{j0} in this context is the concentration at time 0 inside the reactor, i.e., the values corresponding to the steady states. These values will be different for each of the 5 cases. The concentration inside the reactor is C_j, and it is a function of time. $C_{j,input}$ is the concentration of the feed stream and its value remains constant. Similarly, make a clear distinction between T_0 and T_{input}. The total volumetric flow rate can be calculated from the individual molar flow rates for each species.

Other data:

Component	MW (g/mol)	ρ (g/cm^3)	C_p (J/(mol·K))
A	58.08	0.8590	1130
B	48.02	0.9941	1050
C	76.11	1.0360	1410

Reaction	k_0 (min^{-1})	E/R (K)	$\Delta H^*_{293\,K}$ (J/mol)
1. $A \rightarrow B$	$8.5 \cdot 10^{10}$	9250	-210000
2. $B \rightarrow C$	$2.0 \cdot 10^{21}$	21000	-190000

Component	$n_{j,input}$ (mol/min)
A	900
B	100
C	0

Procedure: At a given time (t=0) there is a perturbation in the feed stream temperature causing that temperature to decrease to 12.5ºC. This one will be the feed stream temperature (T_{input}) that you will use in your Matlab code. This small perturbation makes that the plot R(T) moves sideways (see R2 in the figure above) and it introduces instability in the reactor. To solve the problem you need to use the unsteady state equations seen in theory in chapter 4 ("dynamic behaviour of a CSTR"). These equations are copied below:

Mole balance for constant density: $$\frac{dC_j}{dt} = \frac{C_{j,input} - C_j}{\tau} + r_j$$

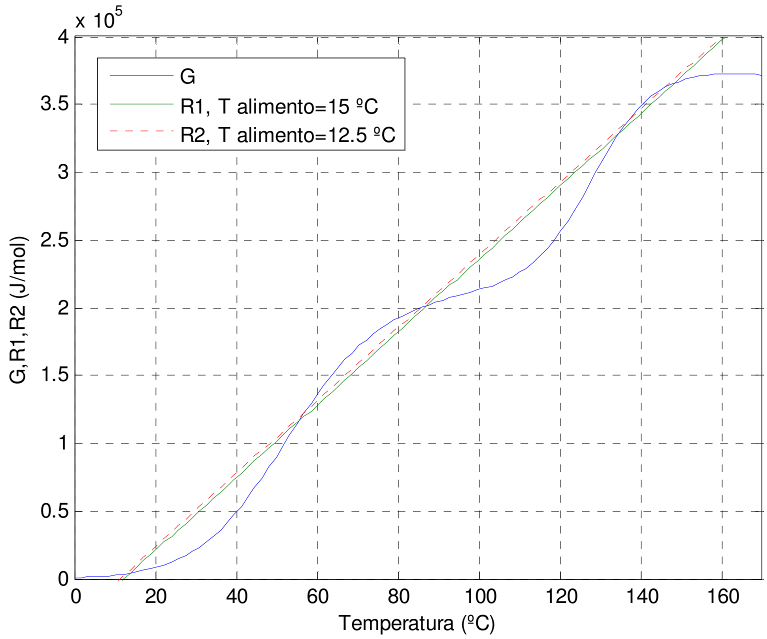
Energy balance: $$\frac{dT}{dt} = \frac{Q + Q_v \sum_{j=1}^{S} C_{j,input} C_{pj} (T_{input} - T) - V \sum_{i=1}^{R} r_i \Delta H_i(T)}{V \sum_{j=1}^{S} C_j C_{pj}}$$

EXTRA VOLUNTARY WORK: Plot the trajectories of the phase plane to find out the separatrix line. Use the following combinations for initial concentration of A (C_{A0}) and initial temperature of the reactor (T_0) (with T_{input} = 12.5 ºC and C_{B0} and C_{C0} those of the steady-state 3):

8 simulations → C_{A0} = 884 mol/m³ and T_0 = {10,20,60,70,81,82,90,100,110} °C
7 simulations → C_{A0} = 14000 mol/m³ and T_0 = {10,20,30,40,45,47,50} °C
7 simulations → C_{A0} = 6000 mol/m³ and T_0 = {50,56,57,60,65} °C

Problema 4: Estabilidad de un RCTA de volumen constante

Para un sistema reaccionante en fase líquida compuesto por dos reacciones en serie exotérmicas $A \rightarrow B \rightarrow C$ que transcurren en un RCTA de volumen constante (1.56 m³) y refrigerado (T_w = 10 ºC, UA = 1.3×10^6 J/(min·K)), se obtiene (véase figura) el calor generado por el sistema reaccionante G(T) (J/mol) y el calor eliminado R1(T) (J/mol) cuando la temperatura de la corriente de alimentación es de 15 ºC. Observa que hay multiplicidad de estados:



Los datos de los 5 posibles estados estacionarios son:

Variables	Estado estacionario 1	Estado estacionario 2	Estado estacionario 3	Estado estacionario 4	Estado estacionario 5
T_s (ºC)	13.87	55.41	87.34	134.72	148.30
C_{As} (mol/m³)	13430	6240	884	48	23
C_{Bs} (mol/m³)	1796	8990	14310	4940	1279
C_{Cs} (mol/m³)	0	0.1	34	10237	13920

Se pide estudiar la estabilidad de los 5 posibles estados estacionarios que se muestran en la tabla. Para ello hay que establecer como condiciones iniciales los valores de las condiciones de estado estacionario de cada uno de los 5 casos a resolver. Se estudiará de uno en uno (5 casos en total) la evolución de la temperatura y de las concentraciones con el tiempo cuando ocurre una perturbación en el sistema que lo aleja de la situación estacionaria. Indicar, a la vista de los resultados, si el estado estacionario inicial es estable o no.

Sugerencias: Realizar la simulación hasta un tiempo de 300 min. Distinguir claramente entre C_{j0} y $C_{j,input}$. C_{j0} es la concentración a tiempo cero en el interior del reactor, es decir, los valores de estado estacionario. Estos valores serán distintos en cada uno de los 5 casos. La concentración dentro del reactor, C_j, es función del tiempo. $C_{j,input}$ es la concentración en la corriente alimento que se mantiene constante. De modo similar, distinguir también entre T_0 y T_{input}. El caudal volumétrico total se puede calcular a partir de los flujos molares de cada especie.

Otros datos:

Componente	PM (g/mol)	ρ (g/cm³)	C_p (J/(mol·K))
A	58.08	0.8590	1130
B	48.02	0.9941	1050
C	76.11	1.0360	1410

Reacción	k_0 (min^{-1})	E/R (K)	$\Delta H^*_{293\ K}$ (J/mol)
1. $A \rightarrow B$	$8.5 \cdot 10^{10}$	9250	-210000
2. $B \rightarrow C$	$2.0 \cdot 10^{21}$	21000	-190000

Componente	$n_{j,input}$ (mol/min)
A	900
B	100
C	0

Procedimiento: En un determinado instante (t=0) se produce una perturbación en la temperatura de la corriente de alimentación provocando que dicha temperatura descienda hasta 12.5 ºC. Éste será el valor de la temperatura de entrada (T_{input}) que se usará en Matlab. Esta pequeña perturbación hace que la línea R(T) se desplace ligeramente (línea R2 de la figura) provocando una inestabilidad. Para resolver el problema se deben utilizar las ecuaciones de régimen no estacionario vistas en el tema 4 ("comportamiento dinámico de un RCTA"). Estas ecuaciones se copian abajo:

Balance molar para densidad constante: $\dfrac{dC_j}{dt} = \dfrac{C_{j,input} - C_j}{\tau} + r_j$

Balance de energía: $$\frac{dT}{dt} = \frac{Q + Q_v \sum_{j=1}^{S} C_{j,input} C_{pj} (T_{input} - T) - V \sum_{i=1}^{R} r_i \Delta H_i(T)}{V \sum_{j=1}^{S} C_j C_{pj}}$$

TRABAJO EXTRA VOLUNTARIO: Dibujar las trayectorias en el plano de fases para determinar la línea separatriz usando las siguientes combinaciones para la concentración inicial del componente A (C_{A0}) y la temperatura inicial del reactor (T_0) (con T_{input} = 12.5 ºC y C_{B0} y C_{C0} las del estado estacionario 3):

8 simulaciones → C_{A0} = 884 mol/m³ and T_0 = {10,20,60,70,81,82,90,100,110} °C
7 simulaciones → C_{A0} = 14000 mol/m³ and T_0 = {10,20,30,40,45,47,50} °C
7 simulaciones → C_{A0} = 6000 mol/m³ and T_0 = {50,56,57,60,65} °C