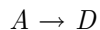
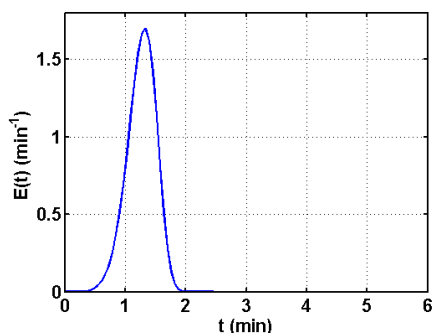


Problem 7: Multiple reactions in a nonideal reactor

Consider the following set of liquid-phase elementary reactions:



which are occurring in a nonideal reactor at constant temperature. The feed stream contains only components A and B with the same concentration, 1 mol/L. This reactor has been characterized by a residence time distribution function which can be fitted to the so called *Weibull distribution function* whose parameters are 1.36 and 6.2:



a) Determine, for the state of macromixing described by the RTD for this reactor, the average concentration for each component at the output stream using the two models corresponding to the extremes of micromixing:

- a.1.- The segregation model
- a.2.- The maximum mixedness model

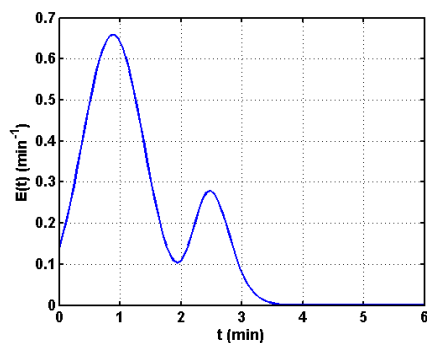
Additional information:

$k_1 = k_2 = k_3 = 1$ in appropriate units.

The Matlab command to compute this $E(t)$ for this reactor is: `wblpdf(t, 1.36, 6.2)`.

Consider that the final time required for the two models equals $5 \times t_m$ and $t_m = 1.26$ min.

b) Repeat the problem for another nonideal reactor that shares the same mean residence time value ($t_m = 1.26$ min), but with a different RTD. This RTD fits the following bimodal distribution:



Use the following Matlab command to calculate the $E(t)$ for the second reactor :

`0.8258*normpdf(t, 0.882, 0.5) + 0.2064*lognpdf(t, log(2.52), 0.12)`

Notes and suggestions:

- For the **segregation model**:

The batch reactor mole balance is required:

(in this case, density is constant)

$$\frac{dC_j}{dt} = r_j = \sum_i \alpha_{ij} r_i$$

Model equation:

$$\frac{d\bar{C}_j}{dt} = C_j(t) E(t)$$

Notice that there are two different sets of dependent variables: C_j and \bar{C}_j (both vectors containing "j" elements). Therefore, the initial conditions for the differential equations are: $C_j = C_{j0}$ and $\bar{C}_j = 0$ for all components.

- For the **maximum mixedness model**:

Model equation:

$$\frac{dC_j}{d\lambda} = -r_j + (C_j - C_{j0}) \frac{E(\lambda)}{1 - F(\lambda)}$$

where λ is the life expectancy of the fluid in the reactor. Therefore, the limits for the independent variable are:

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{initial}} &= t_{\text{final}} = 5t_m \\ \lambda_{\text{final}} &= 0 \end{aligned}$$

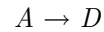
Remember that $F(\lambda)$ is the cumulative distribution function:

$$F(\lambda) = \int_0^\lambda E(\lambda) d\lambda \quad \text{or} \quad \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = E(\lambda)$$

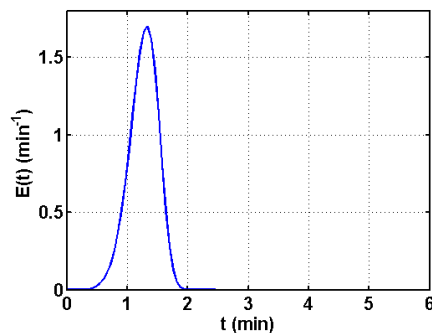
Therefore, the initial conditions for the differential equations are: for $\lambda = \lambda_{\text{initial}}$, $C_j = C_{j0}$ and $F(\lambda) = 1$ (sometimes it will only work setting $F(\lambda)$ very close to 1 instead of exactly 1 (for example, $F(\lambda) = 0.9999$)).

Problema 7: Reacciones múltiples en un reactor no ideal

Considera el siguiente conjunto de reacciones elementales en fase líquida:



que tienen lugar en un reactor no ideal a temperatura constante. El alimento contiene sólo componentes A y B a la misma concentración, 1 mol/L. Este reactor se ha caracterizado con su función de tiempos de residencia que coincide con la llamada *función de distribución de Weibull* con parámetros 1.36 y 6.2:



a) Determinar, para el estado de macromezcla descrito por la RTD de este reactor, la concentración media de cada componente en la corriente de salida usando los dos modelos extremos de micromezcla:

a.1.- Modelo de segregación

a.2.- Modelo de micromezcla completa

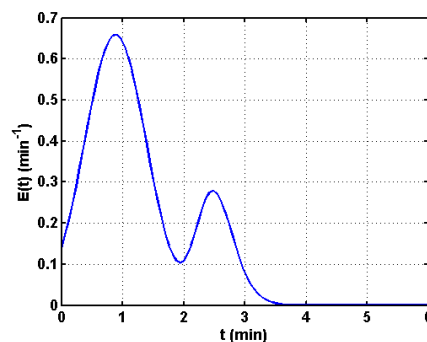
Información adicional:

$k_1 = k_2 = k_3 = 1$ en sus unidades correspondientes.

El comando en Matlab para calcular esta $E(t)$ de este reactor es: `wblpdf(t, 1.36, 6.2)`.

Considera que el tiempo final requerido para los dos modelos es igual a $5 \times t_m$ y $t_m = 1.26$ min.

b) Repetir el problema para otro reactor no ideal que tiene en común con el anterior el mismo tiempo de residencia medio ($t_m = 1.26$ min), pero con una RTD diferente. Esta RTD se ajusta a esta distribución bimodal:



Utiliza el siguiente comando de Matlab para calcular la $E(t)$ para este segundo reactor :

`0.8258*normpdf(t, 0.882, 0.5) + 0.2064*lognpdf(t, log(2.52), 0.12)`

Notas y sugerencias:

- Para el **modelo de segregación completa**:

Se necesita el balance molar de un RDTA:

(en este caso, de densidad constante)

$$\frac{dC_j}{dt} = r_j = \sum_i \alpha_{ij} r_i$$

Ecuación del modelo:

$$\frac{d\bar{C}_j}{dt} = C_j(t) E(t)$$

Hay dos conjuntos diferentes de variables dependientes: C_j and \bar{C}_j (ambos vectores contienen "j" elementos). Por tanto, las condiciones iniciales de las ecuaciones diferenciales son: $C_j = C_{j0}$ y $\bar{C}_j = 0$ para todos los componentes.

- Para el **modelo de micromezcla completa**:

Ecuación del modelo:

$$\frac{dC_j}{d\lambda} = -r_j + (C_j - C_{j0}) \frac{E(\lambda)}{1 - F(\lambda)}$$

donde λ es la expectativa de vida del fluido dentro del reactor. Por tanto, los límites de la variable independiente son:

$$\lambda_{\text{inicial}} = t_{\text{final}} = 5t_m$$

$$\lambda_{\text{final}} = 0$$

Recuerda que $F(\lambda)$ es la función de distribución acumulativa:

$$F(\lambda) = \int_0^\lambda E(\lambda) d\lambda \quad \text{o} \quad \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = E(\lambda)$$

Por tanto, las condiciones iniciales de las ecuaciones diferenciales son: para $\lambda = \lambda_{\text{inicial}}$, $C_j = C_{j0}$ y $F(\lambda) = 1$ (a veces sólo funciona poniendo el valor de $F(\lambda)$ muy próximo a 1 en vez de exactamente 1 (por ejemplo, $F(\lambda) = 0.9999$)).