USO DE MATLAB:
PUESTA EN MARCHA DE UN REACTOR DISCONTINÚO
INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

RESOLUCIÓN DE EDOS:

Introducción:

La resolución de ecuaciones diferenciales se puede realizar con un método numérico aplicando MATLAB.

Se puede resolver una ecuación diferencial del tipo:

$$y' = f(t, y) \tag{1}$$

Para resolver esta ecuación se puede utilizar la función de MATLAB *ODE45*, basada en el método RUNGE-KUTTA 4,5.

Función ODE45

```
[t,y] = ode45(odefun,tspan,y0)
```

donde tspan = [t0 tf], integra el sistema de ecuaciones diferenciales y=f(t,y) de t0 a tf con condiciones iniciales y0. La solución devuelta [t, y] son los pares tiempo variable dependiente.

odefun es la función y' definida como *function* al final del archivo Script.

Resolución con parámetros

En muchas ocasiones es necesario resolver EDOs con parámetros, por ejemplo concetraciones inciciales, constantes cinéticas... A la función a resolver (*odefun*) es necesario parasarle estos parámetros. La mejor forma de resolverlos es:

```
[t,y] = ode45(@(t,y)odefun(t,y, P1,
P2),tspan,y0)
```

P1, P2 son los parámetros que se pasan a la función odefun, y puede haber tantos como sea necesario.

PUESTA EN MARCHA:

Enunciado:

Se hidroliza anhídrido acético a 40 ° C, en una operación semicontinua, cargando inicialmente un tanque agitado con 10 L de una disolución acuosa, que contiene 5 $\cdot 10^{-5} mol/cm^3$ de anhídrido acético. el recipiente se calienta a 40 ºC, y en ese instante se añade, agitando, una solución que contiene una concentración distinta de anhídrido, 3 $\cdot 10^{-4} mol/cm^3$, con un caudal de 2 l/min. El producto sale del reactor con el mismo caudal. La densidad de la solución puede suponerse constante.
La ecuación cinética es:

$$r = k \cdot C \ \ mol \cdot cm^{-3} \cdot min{-}1 \tag{2}$$

$$k(40°C) = 0{,}38 \ \ min^{-1} \tag{3}$$

Planteamiento:

El estado inicial, (t=0) el reactor está cargado con agua. El caudal de entrada y de salida es el mismo.

A tiempo t=t, la entrada de anhídrido acético comienza cuando la temperatura del reactor alcanza 40 °C.

El balance de materia:

$$E + G = S + A \tag{4}$$

En la puesta en marcha existe término de acumulación, puesto que la concentración dentro del reactor cambia hasta llegar al estado estacionario.

$$A = \frac{dC_S}{dt} V \tag{5}$$

Aplicando el balance al anhídrido acético como componente clave, y sustituyendo la velocidad de producción la Eq. 4 queda como:

$$Q_E \cdot C_E - k \cdot C_S \cdot V = Q_S \cdot C_S + \frac{dC_S}{dt} V \tag{6}$$

Las condiciones iniciales para resolver es:

$$t = 0 \ min \ \therefore \ C_S = 5 \ \cdot 10^{-5} mol/cm^3 \tag{7}$$

RESOLUCIÓN EN MATLAB

Resolución de EDOs:

1. Se crea el archivo de Matlab.
2. Se definen las variables que son datos del problema:

```
C0 = 5e-5;
CE = 3e-4;
QE = 2000;
V = 10000;
k = 0.38;
tspan = 0:0.05:20;
```

3. Se resuelve la ecuación diferencial.

```
[t, C] = ode45(@(t,C)BM(t, C,
CE, k, QE, V), tspan, C0);
```

4. Se representa la solución:

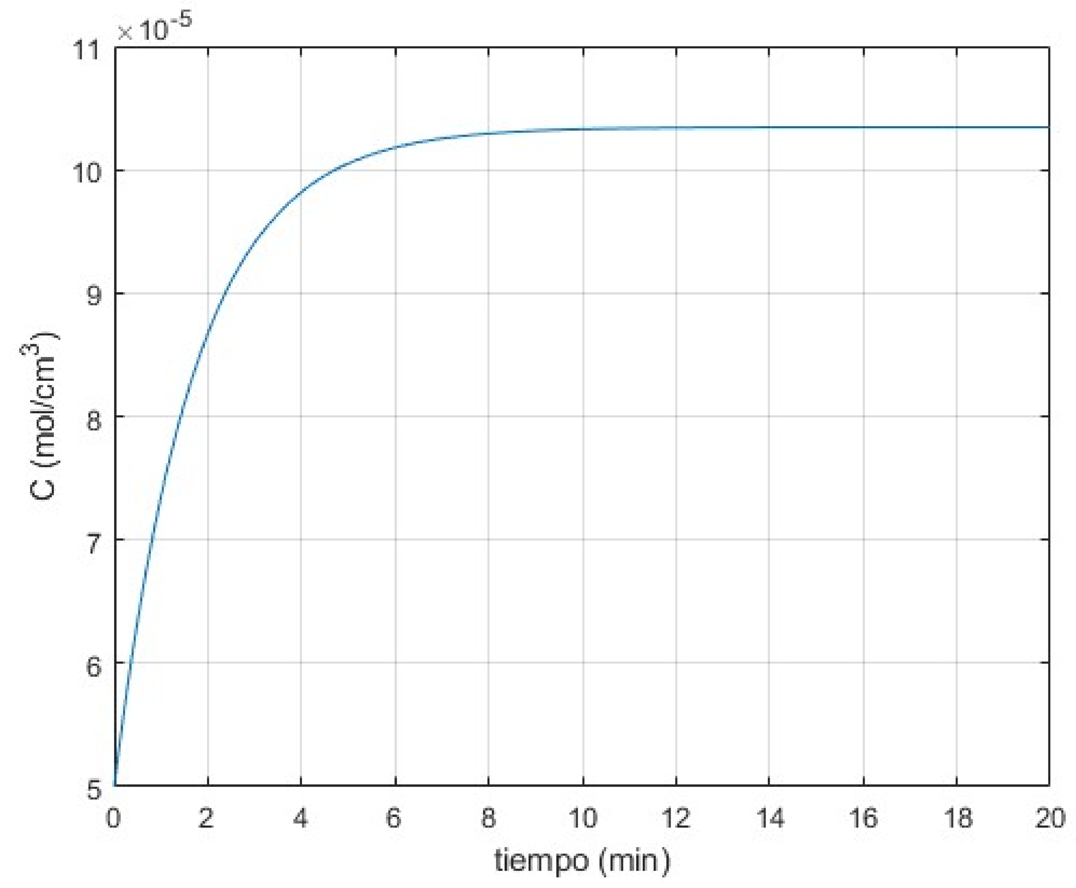
```
plot(t,C)
xlabel('tiempo (min)')
ylabel('C (mol/cm3)')
grid on
```

5. Se define una función al final del documento que contiene el balance de materia que se debe integrar para obtener el perfil de concentración.

```
function dCdt = BM(t, C, CE, k,
QE, V)
dCdt= QE ·(CE − C)/V − k · C;
end
```

SOLUCIÓN DEL PROBLEMA.

Gráfica C vs. t:



Resultados:

Se puede calcular la concentración de salida a la que se alcanza el estado estacionario:

$$0 = QE \cdot (CE - C)/V - k * C; \tag{8}$$

Se puede utilizar *fsolve*.

$$C = 1{,}03 \cdot 10^{-4} \ mol \cdot cm^{-3} \tag{9}$$