

UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO



**Universidad de Guanajuato, División de ciencias e ingenierías, Campus
León.**

Ingeniería Química Sustentable.

Métodos numéricos.

**Proyecto Final: “ Simulación numérica de una red de 4 CSTRs en serie
para la hidrogenación de etileno”**

Primer avance

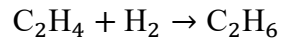
Realizado por: María Irlanda Álvarez Banda

Fecha de realización: 28/10/2025

Fecha de entrega: 16/10/2025

Descripción del problema

La reacción heterogénea de hidrogenación de etileno a etano es:



La planta constará de una cadena de 4 reactores perfectamente mezclados (CSTR) en serie. La alimentación (flujo y concentración de etileno) entra al primer reactor y el flujo entre reactores es constante, Q (caudal). Se asume cinética de primer orden en etileno (pseudo-primer orden si H_2 está en exceso), con velocidad $v_i = k_i c_i$ en cada reactor i . El objetivo es calcular las concentraciones estacionarias c_1, c_2, c_3, c_4 de etileno.

Objetivo

Modelar y resolver numéricamente una red en serie de cuatro reactores de mezcla continua (CSTRs) que operan la reacción de hidrogenación de etileno en etano. Utilizar tres métodos de resolución de sistemas de ecuaciones lineales (Gauss-Jordan, Gauss-Seidel, descomposición LU), comparar los resultados obtenidos de cada método y analizar su convergencia, eficiencia y precisión.

Suposiciones clave

- Estado estacionario (no acumulación).
- Mezcla perfecta en cada CSTR.
- Flujo constante Q entre reactores.
- Cinética de primer orden $V_i = k_i c_i$ (constantes k_i conocidas).
- Propiedades constantes (temperatura y densidad constantes).

Variables del sistema:

Datos conocidos:

- Q : caudal constante entre reactores (m^3/s).
- c_{in} : concentración de etileno en la alimentación (mol/m^3).
- V_i : volumen de cada reactor (m^3).
- k_i : constante cinética aparente en cada reactor (s^{-1}).

Variables por resolver:

- c_i ($i = 1, 2, 3$ y 4): concentración de etileno en cada reactor (mol/m^3).

Valores ejemplo para el problema estándares (aún están por proponer):

- $F = 1 [\text{m}^3/\text{s}]$

- $c_{in} = 1.0 \text{ [mol/m}^3\text{]}$
- $V = [1.0, 1.2, 0.9, 1.5] \text{ [m}^3\text{]}$
- $k = [0.10, 0.08, 0.12, 0.09] \text{ [s}^{-1}\text{]}$

Planteamiento matemático

Balance general de materia

Todo balance de materia para un componente A (en este caso, el etileno) en un volumen de control se plantea como:

$$\text{Acumulación} = \text{Entradas} - \text{Salidas} + \text{Generación}$$

Condición de estado estacionario

Para un CSTR operando en estado estacionario, la acumulación es cero. Entonces:

$$0 = Q_{in}c_{in} - Q_{out}c + vV$$

donde:

- Q_{in}, Q_{out} son los caudales volumétricos de entrada y salida (m^3/s),
- c_{in}, c son las concentraciones de A en entrada y salida (mol/m^3),
- v es la velocidad de reacción ($\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$),
- V es el volumen del reactor (m^3).

Reacción de primer orden

Para una reacción de primer orden:

$$v = -kc$$

entonces, sustituyendo:

$$0 = Q_{in}c_{in} - Q_{out}c - kcV$$

y como generalmente $Q_{in} = Q_{out} = Q$:

$$Q(c_{in} - c) - kcV = 0$$

$$Qc_{in} - (Q + kV)c = 0$$

Reactores en serie

Si hay varios reactores en este caso son 4 CSTRs en serie, la salida de uno es la entrada del siguiente:

$$c_1 = c_{in,2}$$

$$c_2 = c_{in,3}$$

$$c_3 = c_{in,4}$$

Así que para cada reactor:

$$Q c_{i-1} - (Q + k_i V_i) c_i = 0$$

Para cada reactor i en estado estacionario, el balance de masa para etileno (asumiendo mezclado perfecto, flujo de entrada desde el reactor anterior, reacción de primer orden, y flujo de salida al siguiente reactor) se escribe como:

$$\sum_{\text{entradas } j \rightarrow i} Q c_j - (Q + k_i V_i) c_i = 0$$

Para el primer reactor (alimentado directamente) se tiene:

$$Q c_{in} - (Q + k_1 V_1) c_1 = 0$$

Para los reactores 2, 3 y 4:

$$Q c_{i-1} - (Q + k_i V_i) c_i = 0 \text{ para } i = 2, 3, 4.$$

Referencias

- 1) Dooley, K. M., & Benton, M. G. (s. f.). *Catalytic Reactor: Hydrogenation of Ethylene* [Video]. JoVE. Recuperado de <https://app.jove.com/v/10427/heterogeneous-catalytic-reactor-and-hydrogenation-of-ethylene>
- 2) LibreTexts. (n.d.). *15.9: Catálisis – Hidrogenación de etileno* [Texto educativo]. Español LibreTexts. Recuperado de [https://espanol.libretexts.org/Bookshelves/Quimica/Qu%C3%ADmica_General/Mapa%3A_Qu%C3%ADmica_\(Zumdahl_y_Decoste\)/15%3A_Cin%C3%A9tica_qu%C3%ADmica/15.9%3A_Cat%C3%A1lisis?utm_source=chatgpt.com](https://espanol.libretexts.org/Bookshelves/Quimica/Qu%C3%ADmica_General/Mapa%3A_Qu%C3%ADmica_(Zumdahl_y_Decoste)/15%3A_Cin%C3%A9tica_qu%C3%ADmica/15.9%3A_Cat%C3%A1lisis?utm_source=chatgpt.com)
- 3) Levenspiel, O. (1986). *Ingeniería de las reacciones químicas* (2ª ed.). Editorial Reverté, S.A., Barcelona. Traducción de *Chemical Reaction Engineering* (2nd ed.).
- 4) Felder, R. M. & Rousseau, R. W. (2005). *Elementary Principles of Chemical Processes* (3rd ed.). Wiley.