

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

Simulación numérica de una red de 4 CSTRs en serie para la hidrogenación de etileno.

Introducción

La hidrogenación de etileno para producir etano es una reacción de gran relevancia en la industria química, esta reacción es un ejemplo clásico y se utiliza frecuentemente en investigaciones para comprender los mecanismos de la catálisis heterogénea y el diseño de catalizadores. Esta puede modelarse y simularse en procesos de reactores ideales para optimizar su optimización y que la eficiencia sea la más alta posible.

Este proyecto tiene como finalidad modelar y resolver una red en serie de cuatro reactores de mezcla completa (CSTR) que operan en estado estacionario, donde se lleva a cabo la reacción antes mencionada. Como suposiciones tenemos un flujo volumétrico constante, cinética de pseudo primer orden y propiedades físicas constantes, se utilizará un sistema de ecuaciones lineales a partir de balances de materia.

La resolución del sistema se resolverá mediante tres métodos numéricos: eliminación de Gauss-Jordan, Gauss-Seidel y descomposición LU. Cada método tiene sus ventajas y desventajas, lo que permitirá analizar con más detenimiento cuál de los tres métodos es el óptimo y certero en este sistema.

Este trabajo busca determinar las concentraciones de etileno en cada reactor y a su vez evaluar el desempeño de cada uno de los métodos numéricos en la resolución de este problema, contribuyendo a verificar, corroborar y seleccionar el mejor método por medio de programas empleados en el lenguaje C adecuados para su simulación.

Objetivos

○ General

Modelar y resolver por medio de métodos numéricos una red en serie de cuatro reactores de mezcla completa (CSTR) para la hidrogenación de etileno, con el fin de determinar las concentraciones de etileno en estado estacionario en cada reactor.

○ Específicos

1. Obtener los balances de materia para cada reactor en estado estacionario, a partir del sistema de ecuaciones lineales de la red de reactores.
2. Implementar los métodos numéricos para la resolución del sistema: Eliminación de Gauss-Jordan, Gauss-Seidel y descomposición LU.
3. Utilizar valores estandarizados para este sistema reportados en la literatura.

4. Comparar los resultados obtenidos con cada método en términos de las concentraciones, qué tan rápido converge y la eficiencia del programa.
5. Analizar y comparar las ventajas y desventajas de cada método en el contexto de este sistema.

Marco teórico

1. Hidrogenación de Etileno

La hidrogenación de etileno (C_2H_4) para formar etano (C_2H_6) es una reacción ampliamente estudiada en ingeniería química, que se lleva a cabo en presencia de un catalizador sólido. Esta reacción es representativa de los procesos de hidrogenación catalítica y se describe mediante la ecuación:



En condiciones de exceso de hidrógeno, la cinética puede aproximarse a un comportamiento de pseudo-primer orden con respecto al etileno, simplificando la velocidad de reacción [1][2].

2. Reactores de Mezcla Completa (CSTR)

Un reactor de mezcla completa (CSTR, por sus siglas en inglés) es un modelo ideal en el que la composición y la temperatura se consideran uniformes en todo el volumen del reactor. Esto implica que la concentración de salida es igual a la concentración en el interior del reactor [3].

En estado estacionario, el balance de masa para un reactivo A (en este caso el etileno) se expresa como:

$$0 = Qc_{in} - Qc - kcV \quad (2)$$

Donde Q es el flujo volumétrico, c_{in} y c son las concentraciones de entrada y salida, k es la constante cinética y V es el volumen del reactor [4].

3. Parámetros del sistema y valores de referencia

Para la simulación de la red de 4 CSTR en serie, se utilizarán los siguientes valores de referencia, representativos de condiciones típicas de operación en procesos de hidrogenación a escala industrial:

3.1 Flujo volumétrico

$$Q = 1.0 \text{ m}^3/\text{s} \quad (3)$$

Este valor representa un caudal moderado típico en plantas de procesamiento químico, asegurando condiciones de flujo turbulento que favorecen la mezcla completa en cada reactor [4].

3.2 Concentración de alimentación

$$c_{in} = 1.0 \text{ mol/m}^3 \quad (4)$$

Esta concentración inicial de etileno es la más usada en corrientes de alimentación en procesos de hidrogenación industrial [1].

3.3 Volúmenes de reactores

$$V = [1.0, 1.2, 0.9, 1.5] \text{ m}^3 \quad (5)$$

La variación en los volúmenes permite modelar una configuración realista donde los reactores pueden tener tamaños diferentes según su posición en la cadena [3].

3.4 Constantes cinéticas

$$k = [0.10, 0.08, 0.12, 0.09] \text{ s}^{-1} \quad (6)$$

Estos valores de constantes cinéticas de pseudo-primer orden reflejan variaciones típicas en la actividad catalítica entre diferentes reactores, debido a diferencias en temperatura o desgaste del catalizador [1,4].

4. Red de reactores en serie

Cuando múltiples CSTR se conectan en serie, la salida de un reactor se convierte en la entrada del siguiente. Esta configuración permite alcanzar mayores conversiones globales en comparación a solo utilizar un reactor del mismo volumen total [4].

Para una red de n reactores, el balance de masa para el reactor i es:

$$Qc_{i-1} - (Q + k_i V_i)c_i = 0 \quad (7)$$

donde:

- Q : caudal volumétrico constante (m^3/s)
- c_{i-1} : concentración de entrada al reactor i
- c_i : concentración de salida del reactor i
- k_i : constante cinética de pseudo-primer orden (s^{-1})
- V_i : volumen del reactor i (m^3)

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:

$$\sum_{\text{entradas } j \rightarrow i} Q c_j - (Q + k_i V_i) c_i = 0 \quad (8)$$

Para el primer reactor (alimentado directamente) se tiene:

$$Q c_{in} - (Q + k_1 V_1) c_1 = 0 \quad (9)$$

Para los reactores 2, 3 y 4:

$$Q c_{i-1} - (Q + k_i V_i) c_i = 0 \text{ para } i = 2, 3, 4. \quad (10)$$

Esto genera un sistema de ecuaciones lineales que puede resolverse de manera numérica para obtener las concentraciones en cada etapa [4].

5. Métodos numéricos para sistemas de ecuaciones lineales

5.1 Eliminación de Gauss-Jordan

Este método consiste en transformar la matriz aumentada del sistema en una forma escalonada reducida mediante operaciones elementales de fila, lo que permite obtener la solución. Es un método exacto, pero computacionalmente costoso para sistemas grandes [5].

5.2 Método de Gauss-Seidel

Es un método iterativo que actualiza secuencialmente cada variable utilizando los valores más recientes de las demás. Es eficiente para sistemas grandes y dispersos, pero su convergencia depende de la diagonal de la matriz [5].

5.3 Descomposición de LU

Este método factoriza la matriz del sistema en una matriz triangular inferior (L) y una superior (U), facilitando la resolución del sistema mediante sustitución hacia adelante y hacia atrás. Es estable para múltiples resoluciones con la misma matriz [5].

Referencias bibliográficas

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/Química/Química_General/Mapa:_Química_\(Zumdahl_y_Decoste\)/15:_Cinética_química/15.9:_Catálisis](https://espanol.libretexts.org/Química/Química_General/Mapa:_Química_(Zumdahl_y_Decoste)/15:_Cinética_química/15.9:_Catálisis)
3. Levenspiel, O. (1986). *Ingeniería de las reacciones químicas* (2ª ed.). Editorial Reverte.
4. Felder, R. M. & Rousseau, R. W. (2005). *Elementary Principles of Chemical Processes* (3rd ed.). Wiley.
5. Chapra, S. C., & Canale, R. P. (2010). *Métodos numéricos para ingenieros* (6ª ed.). McGraw-Hill.