

## TALLER 6

### Organizamos la información

```
clear
clc
% Información suministrada

%Reacciones Fase Gaseosa
% A -> X ,   rX
% A -> B ,   rB
% A -> Y ,   rY

% Condiciones de operación
T0 = 27 + 273.15; %K
P0 = 4 ; %atm
Q0 = 10 ; %L/min

% Cinética
k1_T0 = 0.004 ; % (mol/L)^0.5/min
k2_T0 = 0.3 ; % min^-1
k3_T0 = 0.25 ; % L/mol/min
E1 = 20000 ; %cal/mol
E2 = 10000 ; %cal/mol
E3 = 30000 ; %cal/mol
```

Una vez organizada la información procedemos a hacer los cálculos preliminares

```
R = 0.08205746 ; %Constante de los gases atmL/molK
Rk = 1.987207 ; %Constante de los gases cal/molK
```

```
% Flujo de entrada A
```

```
%Asumiendo gas ideal
%  $F_i/Q = C_i = P_i/RT$ 
CA0 = P0/R/T0
```

```
CA0 = 0.1624
```

```
FA0 = Q0*CA0
```

```
FA0 = 1.6241
```

```
% Cinética
```

```
k1 = @(T) k1_T0*exp(-E1/Rk*(1./T-1/T0)) ; % (mol/L)^0.5/min
k2 = @(T) k2_T0*exp(-E2/Rk*(1./T-1/T0)) ; % min^-1
k3 = @(T) k3_T0*exp(-E3/Rk*(1./T-1/T0)) ; % L/mol/min
```

```
rX = @(T,CA) k1(T).*CA.^0.5 ;% (mol/L)^0.5/min
rB = @(T,CA) k2(T).*CA ; % min^-1
rY = @(T,CA) k3(T).*CA.^2 ; %L/mol/min
```

## Dibujar $S_{B/X}$ , $S_{B/Y}$ y $S_{B/XY}$ en función de A

Empezamos por definir las expresiones de la selectividad instantánea

$$S_{B/X} = \frac{r_B}{r_X}$$

$$S_{B/Y} = \frac{r_B}{r_Y}$$

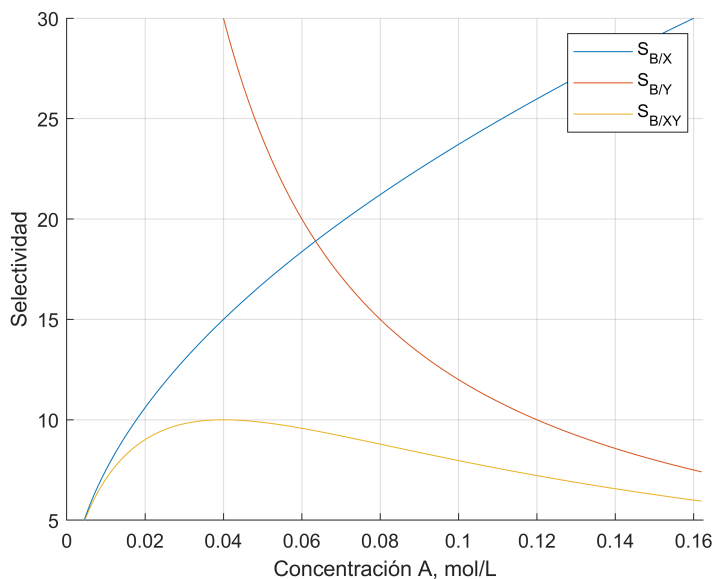
$$S_{B/XY} = \frac{r_B}{r_X + r_Y}$$

Con base en esto procedemos a graficar

```
% Creamos las funciones de selectividad
S_BX = @(T0,CA) rB(T0,CA)./rX(T0,CA) ;
S_BY = @(T0,CA) rB(T0,CA)./rY(T0,CA) ;
S_BXY = @(T0,CA) rB(T0,CA)./(rY(T0,CA)+rX(T0,CA)) ;

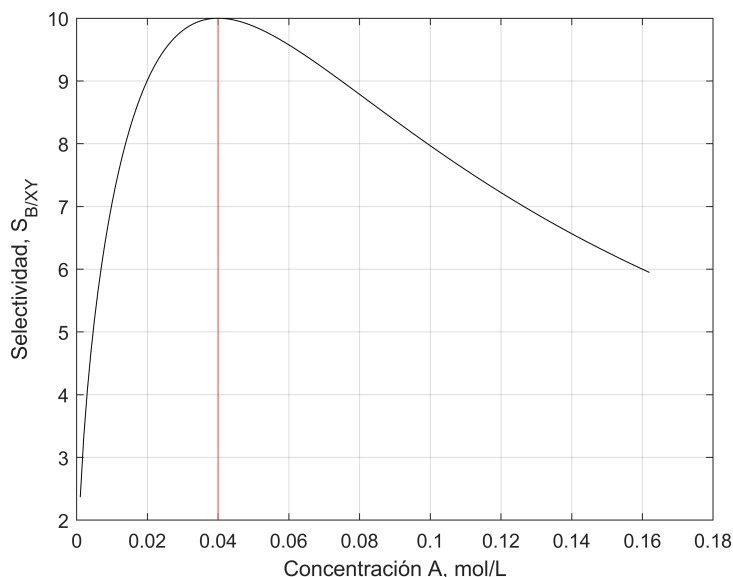
CAgraf = 0:.001:CA0 ;

figure('color','white')
hold on
plot(CAgraf,S_BX(T0,CAgraf))
plot(CAgraf,S_BY(T0,CAgraf))
plot(CAgraf,S_BXY(T0,CAgraf))
xlabel('Concentración A, mol/L')
ylabel('Selectividad')
axis([0 CA0 5 30])
grid on
legend('S_{B/X}', 'S_{B/Y}', 'S_{B/XY}')
```



Vemos que en la gráfica de selectividad instantánea tenemos un valor máximo con un valor de  $S_{max}$  a una concentración  $CA_{Smax}$

```
[Smax,indmax] = max(S_BXY(T0,CAgraf));  
CA_Smax = CAgraf(indmax);  
figure('color','white')  
plot(CAgraf,S_BXY(T0,CAgraf),'k')  
xlabel('Concentración A, mol/L')  
ylabel('Selectividad, S_{B/XY}')  
xline(CAgraf(indmax),'r')  
grid on
```



Smax

Smax = 10

CA\_Smax

CA\_Smax = 0.0400

Con base en que la selectividad instantánea es igual a la global para un reactor CSTR y, en cambio, para un PFR la selectividad global depende del área bajo la curva; sería recomendable emplear para el arreglo inicialmente un reactor CSTR (para tener el valor de selectividad máxima a la salida) y, después, el reactor PFR. Sin embargo, se compararán los diferentes arreglos que se pueden tener: CSTR+PFR, PFR+CSTR, CSTR y PFR, para ver los resultados que tendría cada uno.

## A. Arreglo CSTR + PFR

El balance de materia para el CSTR es, en este caso

$$F_{A,0} - F_{A,1} + R_A V_1 = 0$$

Donde  $R_A$  es la rapidez de reacción global, es decir,

$$R_A = \sum_j r_{A,j} = -(r_X + r_B + r_Y)$$

El balance de materia se puede reescribir y despejar el volumen del CSTR

$$Q_0 C_{A,0} - Q_1 C_{A,1} + R_{A(C_{A,1})} V_1 = 0$$

$$\rightarrow V_1 = \frac{Q_1 C_{A,1} - Q_0 C_{A,0}}{R_{A,C_{A,1}}}$$

Note que el reactor trabaja isotérmicamente, no se tienen en cuenta caídas de presión y todas las reacciones consumen y crean la misma cantidad de moles (los moles permanecen constantes), entonces

$$Q_1 = Q_0$$

Encontrando

$$V_1 = \frac{Q_0 (C_{A,1} - C_{A,0})}{R_{A,(C_{A,1})}}$$

$$\begin{aligned} CA1 &= CA\_Smax ; \\ V1CSTR &= Q0 * (CA1 - CA0) / (-rX(T0, CA1) - rB(T0, CA1) - rY(T0, CA1)) \end{aligned}$$

$$V1CSTR = 92.7322$$

De manera análoga al balance de materia elaborado para A, también se puede hacer para las otras especies

$$C_{X,1} = r_{X(C_{A,1})} \frac{V_1}{Q_0}$$

$$C_{B,1} = r_{B(C_{A,1})} \frac{V_1}{Q_0}$$

$$C_{Y,1} = r_{Y(C_{A,1})} \frac{V_1}{Q_0}$$

$$CX1 = rX(T0, CA1) * V1CSTR / Q0$$

$$CX1 = 0.0074$$

$$CB1 = rB(T0, CA1) * V1CSTR / Q0$$

$$CB1 = 0.1113$$

$$CY1 = rY(T0, CA1) * V1CSTR / Q0$$

$$CY1 = 0.0037$$

y, por tanto, se calcula una conversión de

$$xA1 = (CA0 - CA1) / CA0$$

$$xA1 = 0.7537$$

Para el caso del PFR tendremos que

$$\frac{dF_A}{dV} = R_A$$

$$\rightarrow V_{2PFR} = Q_0 \int_{C_{A1}}^{C_{A2}} \frac{dC_A}{R_{A,(C_A)}}$$

Donde

$$C_{A2} = C_{A0}(1 - x_{A2})$$

Como  $x_{A2} = 0.99$  entonces

$$\begin{aligned} x_{A2} &= 0.99 ; \\ C_{A2} &= C_{A0} * (1 - 0.99) \end{aligned}$$

$$C_{A2} = 0.0016$$

Encontrando

$$V_{2PFR} = Q_0 * \text{integral}(@ (C_A) -1./ (r_X(T_0, C_A) + r_B(T_0, C_A) + r_Y(T_0, C_A)), C_{A1}, C_{A2})$$

$$V_{2PFR} = 91.1917$$

Ahora, realizando el balance de materia para todas las especies se encuentra el siguiente sistema de ecuaciones

$$\frac{dC_A}{dV} = R_A = \frac{-r_{X,(C_A)} - r_{Y,(C_A)} - r_{B,(C_A)}}{Q_0}$$

$$\frac{dC_B}{dV} = \frac{r_{B,(C_A)}}{Q_0}$$

$$\frac{dC_X}{dV} = \frac{r_{B,(C_A)}}{Q_0}$$

$$\frac{dC_Y}{dV} = \frac{r_{Y,(C_A)}}{Q_0}$$

Donde en  $V = 0$  se tendrán las concentraciones de salida del reactor anterior  $C_{i,1}$ . Se resuelve el sistema de ecuaciones hasta  $V_{2,PFR}$  (encontrado anteriormente), obteniendo los siguientes perfiles de concentraciones

```
% Ci = [A,B,X,Y]

%Condiciones iniciales
Ci0 = [CA1,CB1,CX1,CY1] ;

%Sistema Ecuaciones
dCidV = @(Ci) [-(rX(T0,Ci(1))+rB(T0,Ci(1))+rY(T0,Ci(1)))/Q0;...
```

```

rB(T0,Ci(1))/Q0 ;...
rX(T0,Ci(1))/Q0 ;...
rY(T0,Ci(1))/Q0 ] ;

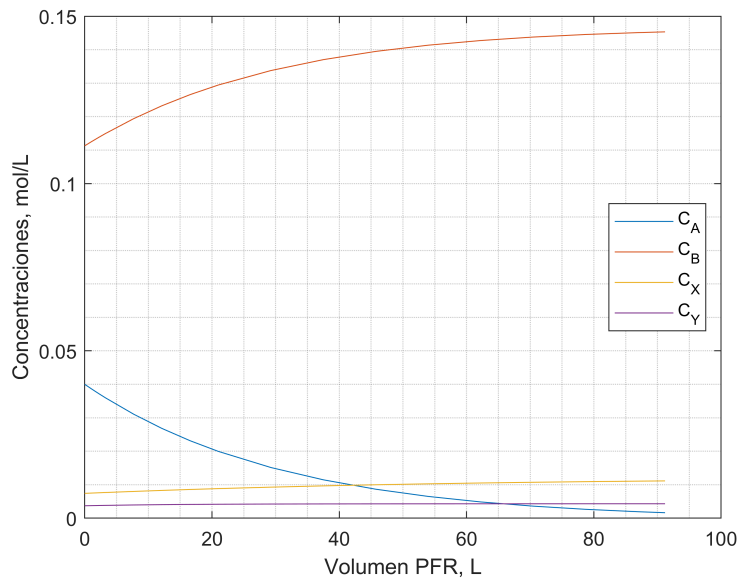
```

```
%Intervalo de solución
```

```

vspan = [0,V2PFR] ;
[v,Ci] = ode15s(@(v,Ci) dCidV(Ci'),vspan,Ci0') ;
figure('color','white')
plot(v,Ci)
xlabel('Volumen PFR, L')
ylabel('Concentraciones, mol/L')
legend('C_A','C_B','C_X','C_Y','location','best')
grid minor

```



Y las concentraciones a la salida

```
CB2 = Ci(end,2) %mol/L
```

```
CB2 = 0.1453
```

```
CX2 = Ci(end,3) %mol/L
```

```
CX2 = 0.0111
```

```
CY2 = Ci(end,4) %mol/L
```

```
CY2 = 0.0043
```

Encontrando como selectividad global

$$\hat{S}_{B/XY} = \frac{F_{B2}}{F_{X2} + F_{Y2}} = \frac{C_{B2}}{C_{X2} + C_{Y2}}$$

```
SBXY = CB2/(CX2+CY2)
```

```
SBXY = 9.4084
```

y como rendimiento global de la reacción

$$\hat{Y}_B = \frac{F_{B2}}{F_{A0} - F_{A2}} = \frac{C_{B2}}{C_{A0} - C_{A2}}$$

$$Y_{BXY} = C_{B2} / (C_{A0} - C_{A2})$$

$$Y_{BXY} = 0.9039$$

Con el flujo de B a la salida del arreglo de

$$F_{Bout} = Q_0 * C_{B2} \text{ \% molB/min}$$

$$F_{Bout} = 1.4533$$

Resumiendo los resultados en las siguientes tabla

```
ResultadosCSTR1 = [V1CSTR;CA1;CB1;CX1;CY1] ;  
ResultadosPFR2 = [V2PFR;CA2;CB2;CX2;CY2] ;  
table(ResultadosCSTR1,ResultadosPFR2, 'RowNames', {'V', 'CA', 'CB', 'CX', 'CY'})
```

ans = 5x2 table

	ResultadosCSTR1	ResultadosPFR2
1 V	92.7322	91.1917
2 CA	0.0400	0.0016
3 CB	0.1113	0.1453
4 CX	0.0074	0.0111
5 CY	0.0037	0.0043

$$P = F_{Bout} / (V_2PFR + V_1CSTR)$$

$$P = 0.0079$$

```
table(SBXY,YBXY,P)
```

ans = 1x3 table

	SBXY	YBXY	P
1	9.4084	0.9039	0.0079

## B. Arreglo PFR + CSTR

Realizamos el balance de materia de A para el reactor PFR

$$\frac{dF_A}{dV} = R_A$$

$$\rightarrow V_{1PFR} = Q_0 \int_{C_{A0}}^{C_{A1}} \frac{dC_A}{R_{A,(C_A)}}$$

Donde

CA0

$$CA0 = 0.1624$$

CA1

$$CA1 = 0.0400$$

Luego,

$$V_{1PFR} = Q_0 * \text{integral}(@ (CA) -1./ (r_X(T_0, CA) + r_B(T_0, CA) + r_Y(T_0, CA)), CA0, CA1)$$

$$V_{1PFR} = 41.6888$$

Analogamente al inciso anterior, se tiene el sistema de ecuaciones diferenciales de acotinuación

$$\frac{dC_A}{dV} = R_A = \frac{-r_{X,(C_A)} - r_{Y,(C_A)} - r_{B,(C_A)}}{Q_0}$$

$$\frac{dC_B}{dV} = \frac{r_{B,(C_A)}}{Q_0}$$

$$\frac{dC_X}{dV} = \frac{r_{X,(C_A)}}{Q_0}$$

$$\frac{dC_Y}{dV} = \frac{r_{Y,(C_A)}}{Q_0}$$

Donde en  $V = 0$  se tendrán las concentraciones iniciales del arreglo  $C_{i,0}$ . Se resuelve el sistema de ecuaciones hasta  $V_{1,PFR}$  encontrado anteriormente, obteniendo siguientes los perfiles de concentraciones

```
% Ci = [A,B,X,Y]

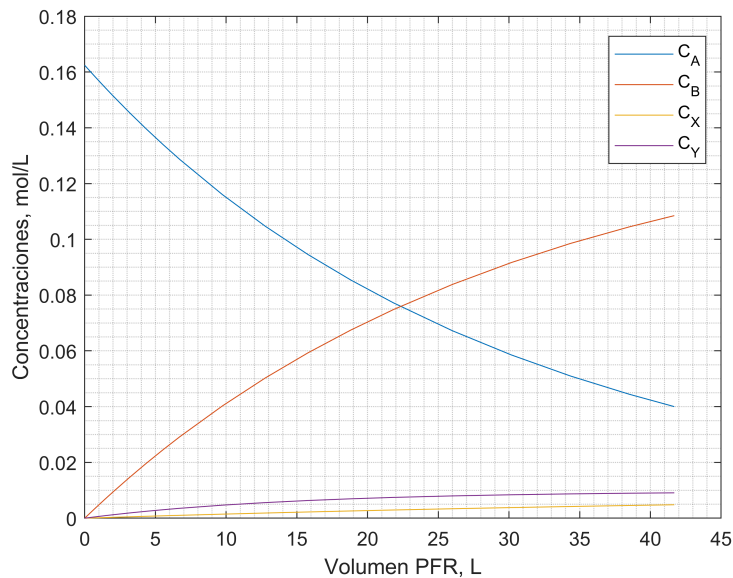
%Condiciones iniciales
Ci0 = [CA0,0,0,0] ;

%Sistema Ecuaciones
dCidV = @(Ci) [- (rX(T0,Ci(1))+rB(T0,Ci(1))+rY(T0,Ci(1)))/Q0;...
               rB(T0,Ci(1))/Q0 ;...
               rX(T0,Ci(1))/Q0 ;...
               rY(T0,Ci(1))/Q0 ] ;

%Intervalo de solución
vspan = [0,V1PFR] ;
[v,Ci] = ode15s(@(v,Ci) dCidV(Ci'),vspan,Ci0') ;
```



```
figure('color','white')
plot(v,Ci)
xlabel('Volumen PFR, L')
ylabel('Concentraciones, mol/L')
legend('C_A','C_B','C_X','C_Y','location','best')
grid minor
```



Y las concentraciones a la salida

```
CB1 = Ci(end,2) %mol/L
```

```
CB1 = 0.1085
```

```
CX1 = Ci(end,3) %mol/L
```

```
CX1 = 0.0048
```

```
CY1 = Ci(end,4) %mol/L
```

```
CY1 = 0.0091
```

Para el siguiente reactor, CSTR, el balance de materia para A es

$$F_{A,1} - F_{A,2} + R_A V_2 = 0$$

Donde  $R_A$  es la rapidez de reacción global, explicada anteriormente. Reescribimos la expresión y encontramos el volumen

$$\rightarrow V_2 = \frac{Q_0(C_{A,2} - C_{A,1})}{R_{A,(C_{A,2})}}$$

Como también se tiene  $x_{A2} = 0.99$  entonces

```
CA2
```

$$CA2 = 0.0016$$

Encontrando

$$V2CSTR = Q0*(CA2-CA1)/(-rX(T0,CA2)-rB(T0,CA2)-rY(T0,CA2))$$

$$V2CSTR = 591.2378$$

De manera análoga al balance de materia elaborado para A, también se hace para las otras especies y se obtiene

$$C_{X,2} = C_{X,1} + r_{X(C_{A,2})} \frac{V_1}{Q_0}$$

$$C_{B,2} = C_{B,1} + r_{B(C_{A,2})} \frac{V_1}{Q_0}$$

$$C_{Y,2} = C_{Y,1} + r_{Y(C_{A,2})} \frac{V_1}{Q_0}$$

$$CX2 = CX1 + rX(T0,CA2)*V2CSTR/Q0$$

$$CX2 = 0.0143$$

$$CB2 = CB1 + rB(T0,CA2)*V2CSTR/Q0$$

$$CB2 = 0.1373$$

$$CY2 = CY1 + rY(T0,CA2)*V2CSTR/Q0$$

$$CY2 = 0.0091$$

Encontrando como selectividad global

$$\hat{S}_{B/XY} = \frac{F_{B2}}{F_{X2} + F_{Y2}} = \frac{C_{B2}}{C_{X2} + C_{Y2}}$$

$$SBXY = CB2/(CX2+CY2)$$

$$SBXY = 5.8489$$

y como rendimiento global de la reacción

$$\hat{Y}_B = \frac{F_{B2}}{F_{A0} - F_{A2}} = \frac{C_{B2}}{C_{A0} - C_{A2}}$$

$$YBXY = CB2/(CA0-CA2)$$

$$YBXY = 0.8539$$

Con el flujo de B a la salida del arreglo de

$$FBout = Q0*CB2 \text{ \% molB/min}$$

$$FBout = 1.3730$$

Resumiendo los resultados en las siguientes tablas

```
ResultadosPFR1 = [V1PFR;CA1;CB1;CX1;CY1] ;
ResultadosCSTR2 = [V2CSTR;CA2;CB2;CX2;CY2] ;
table(ResultadosPFR1,ResultadosCSTR2, 'RowNames', {'V', 'CA', 'CB', 'CX', 'CY'})
```

ans = 5x2 table

	ResultadosPFR1	ResultadosCSTR2
1 V	41.6888	591.2378
2 CA	0.0400	0.0016
3 CB	0.1085	0.1373
4 CX	0.0048	0.0143
5 CY	0.0091	0.0091

$$P = FBout / (V1PFR + V2CSTR)$$

$$P = 0.0022$$

```
table(SBXY,YBXY,P)
```

ans = 1x3 table

	SBXY	YBXY	P
1	5.8489	0.8539	0.0022

## C. Reactor CSTR

El balance de materia para el CSTR es

$$F_{A,0} - F_{A,2} + R_A V = 0$$

Y, por tanto el volumen se puede calcular como

$$\rightarrow V_{CSTR} = \frac{Q_0 C_{A,2} - Q_0 C_{A,0}}{R_{A,C_{A,2}}}$$

Con la concentración a la salida que cumple el 0.99 de conversión, se obtiene

$$VCSTR = Q_0 * (CA2 - CA0) / (-r_X(T_0, CA2) - r_B(T_0, CA2) - r_Y(T_0, CA2))$$

$$VCSTR = 2.4771e+03$$

Se hacen los balances para las otras especies

$$C_{X,2} = r_{X(C_{A,2})} \frac{V_{CSTR}}{Q_0}$$

$$C_{B,2} = r_{B(C_{A,2})} \frac{V_{CSTR}}{Q_0}$$

$$C_{Y,2} = r_{Y(C_{A,2})} \frac{V_{CSTR}}{Q_0}$$

$$CX2 = r_X(T_0, CA2) * VCSTR / Q_0$$

$$CX2 = 0.0399$$

$$CB2 = r_B(T_0, CA2) * VCSTR / Q_0$$

$$CB2 = 0.1207$$

$$CY2 = r_Y(T_0, CA2) * VCSTR / Q_0$$

$$CY2 = 1.6334e-04$$

Y se calcula la selectividad global

$$\hat{S}_{B/XY} = \frac{F_{B2}}{F_{X2} + F_{Y2}} = \frac{C_{B2}}{C_{X2} + C_{Y2}}$$

$$SBXY = CB2 / (CX2 + CY2)$$

$$SBXY = 3.0102$$

y el rendimiento global de la reacción

$$\hat{Y}_B = \frac{F_{B2}}{F_{A0} - F_{A2}} = \frac{C_{B2}}{C_{A0} - C_{A2}}$$

$$YBXY = CB2 / (CA0 - CA2)$$

$$YBXY = 0.7506$$

Con el flujo de B a la salida del arreglo de

$$FBout = Q_0 * CB2 \text{ \% molB/min}$$

$$FBout = 1.2069$$

Se resumen los resultados en las siguientes tablas

```
Resultados = [VCSTR;CA2;CB2;CX2;CY2] ;
table(Resultados, 'RowNames', {'V', 'CA', 'CB', 'CX', 'CY'})
```

ans = 5x1 table

	Resultados
1 V	2.4771e+03
2 CA	0.0016
3 CB	0.1207
4 CX	0.0399
5 CY	1.6334e-04

$$P = F_{Bout}/(VCSTR)$$

$$P = 4.8722e-04$$

```
table(SBXY,YBXY,P)
```

```
ans = 1x3 table
```

	SBXY	YBXY	P
1	3.0102	0.7506	4.8722e-04

## D. Reactor PFR

Realizamos el balance de materia de A para el reactor PFR

$$\frac{dF_A}{dV} = R_A$$

$$\rightarrow V_{PFR} = Q_0 \int_{C_{A0}}^{C_{A2}} \frac{dC_A}{R_{A,(C_A)}}$$

Donde

CA0

$$CA0 = 0.1624$$

CA2

$$CA2 = 0.0016$$

Luego,

$$VPFR = Q_0 * \text{integral}(@ (CA) -1./ (rX(T_0, CA) + rB(T_0, CA) + rY(T_0, CA)), CA0, CA2)$$

$$VPFR = 132.8805$$

Nuevamente se realiza el balance para todas las especies

$$\frac{dC_A}{dV} = R_A = \frac{-r_{X,(C_A)} - r_{Y,(C_A)} - r_{B,(C_A)}}{Q_0}$$

$$\frac{dC_B}{dV} = \frac{r_{(C_A)}}{Q_0}$$

$$\frac{dC_X}{dV} = \frac{r_{B,(C_A)}}{Q_0}$$

$$\frac{dC_Y}{dV} = \frac{r_{Y,(C_A)}}{Q_0}$$

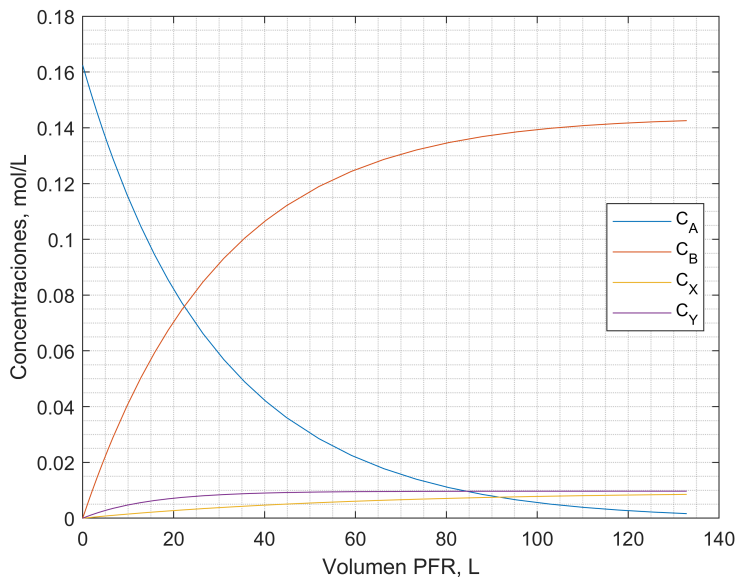
Y se resuelve el sistema de ecuaciones hasta  $V_{1,PFR}$  teniendo en cuenta que en  $V = 0$  se tendrán las concentraciones de entrada  $C_{i,0}$ . Encontrando los siguientes perfiles de concentraciones

```
% Ci = [A,B,X,Y]

%Condiciones iniciales
Ci0 = [CA0,0,0,0] ;

%Sistema Ecuaciones
dCiV = @(Ci) [-(rX(T0,Ci(1))+rB(T0,Ci(1))+rY(T0,Ci(1)))/Q0;...
              rB(T0,Ci(1))/Q0 ;...
              rX(T0,Ci(1))/Q0 ;...
              rY(T0,Ci(1))/Q0 ] ;

%Intervalo de solución
vspan = [0,VPFR] ;
[v,Ci] = ode15s(@(v,Ci) dCiV(Ci'),vspan,Ci0') ;
figure('color','white')
plot(v,Ci)
xlabel('Volumen PFR, L')
ylabel('Concentraciones, mol/L')
legend('C_A','C_B','C_X','C_Y','location','best')
grid minor
```



Y las concentraciones a la salida

```
CB2 = Ci(end,2) %mol/L
```

```
CB2 = 0.1426
```

```
CX2 = Ci(end,3) %mol/L
```

```
CX2 = 0.0085
```

$$CY2 = Ci(end,4) \%mol/L$$

$$CY2 = 0.0097$$

Encontrando como selectividad global

$$\hat{S}_{B/XY} = \frac{F_{B2}}{F_{X2} + F_{Y2}} = \frac{C_{B2}}{C_{X2} + C_{Y2}}$$

$$SBXY = CB2/(CX2+CY2)$$

$$SBXY = 7.8243$$

y como rendimiento global de la reacción

$$\hat{Y}_B = \frac{F_{B2}}{F_{A0} - F_{A2}} = \frac{C_{B2}}{C_{A0} - C_{A2}}$$

$$YBXY = CB2/(CA0-CA2)$$

$$YBXY = 0.8866$$

Con el flujo de B a la salida del arreglo de

$$FBout = Q0*CB2 \% molB/min$$

$$FBout = 1.4256$$

Y se resumen los resultados a continuación

```
Resultados = [VPFR;CA2;CB2;CX2;CY2] ;
table(Resultados, 'RowNames', {'V', 'CA', 'CB', 'CX', 'CY'})
```

ans = 5x1 table

	Resultados
1 V	132.8805
2 CA	0.0016
3 CB	0.1426
4 CX	0.0085
5 CY	0.0097

$$P = FBout/(VPFR)$$

$$P = 0.0107$$

```
table(SBXY,YBXY,P)
```

ans = 1x3 table

	SBXY	YBXY	P
1	7.8243	0.8866	0.0107