

Antes de comenzar

A continuación se detallan las reacciones que fueron modificadas para el proyecto, si ya contabas con la investigación de la reacción original asignada no tienes que repetirla, únicamente la parte práctica cambiará, por ello los incisos también se han adaptado a los cambios. Abajo se detallan aquellas reacciones que presentaron cambios:

DISTRIBUCIÓN ORIGINAL:

| | SIMULACIONES | Reacción |
|---|--|---|
| 1 | Isomerización de Cis-2-buteno a Trans-2-buteno en PFR | CH3CHCHCH3 <> CH3CHCHCH3 |
| 2 | Isomerización de Cis-2-buteno a Trans-2-buteno en CSTR | |
| 3 | Producción de dióxido de carbono e hidrógeno a partir de formaldehído PFR | HCHO <> CO + H2 |
| 4 | Producción de dióxido de carbono e hidrógeno a partir de formaldehído CSTR | |
| 5 | Hidrólisis de anhídrido acético para producción de ácido acético CSTR | CH3COOOCCH3 + HOH <> 2CH3COOH |
| 6 | Hidrólisis de anhídrido acético para producción de ácido acético PFR | |
| | Óxido de Etileno CSTR | CH2OCH2 + HOH <> HOCH2CH2OH |
| 8 | Óxido de Etileno PFR | |
| 9 | Acetato de Etilo y Agua para producir Ácido Acético y Etanol PFR | $CH_3CH_2OH + CH_3COOH \rightarrow CH_3COO$ |
| 0 | Acetato de Etilo y Agua para producir Ácido Acético y Etanol CSTR | |

CAMBIOS

- La reacción de hidrólisis de anhídrido acético se cambió por la de Reacción de descomposición del NOCI en NO y Cl2 ya solo se realizará en PFR.
- La reacción de óxido de etileno se cambió por la Reacción de síntesis de Metanotiol solo se realizará en PFR.
- La reacción de acetato de etilo se cambió por la de **producción de etileno** ya solo se realizará en PFR.

Simulación de Isomerización de Cis-2-buteno a Trans-2buteno:

CH3CHCHCH3 ──→ CH3CHCHCH3

- a) Investigación teórica 25pts
- b) Determine el volumen del reactor de acuerdo a las condiciones de operación que haya investigado, esto incluye: presión, temperatura, constante cinética, el flujo de la alimentación del reactor y conversión. Para este inciso deberá de mostrar también sus cálculos a mano y el Jupyternotebook desarrollado. 25pts
- c) Desarrolle un JupyterNotebook para la reacción con las siguientes condiciones: T=25 C; P=12 bar; Flujo volumétrico=0.6 m3/h; constante cinética: k=0.23 min-1. total:50pts
 - Determine el volumen para una conversión al 45% 10pts
 - Determine que sucede al cambiar la conversión a un 90% 10pts
 - Cambie las condiciones de temperatura y presión por T=40 C y P= 10 bar. Qué observa? 20pts
 - Cambie las condiciones de flujo volumétrico, por 0.33 m3/h. Qué observa? 10pts

Simulación de Producción de monóxido de carbono e hidrógeno a partir de formaldehído:

HCHO **→** CO + H2

- a) Investigación teórica 25pts
- b) Determine el volumen del reactor de acuerdo a las condiciones de operación que haya investigado, esto incluye: presión, temperatura, constante cinética, el flujo de la alimentación del reactor y conversión. **Debe de dejar constancia del Jupyternotebook desarrollado** 25pts
- c) Desarrolle un JupyterNotebook para la reacción con las siguientes condiciones: T=298K; P=103.421 Pa; Flujo molar=0.1666 mol/s; constante cinética: k=1 min-1. Para este inciso deberá de mostrar también sus cálculos a mano y el Jupyternotebook desarrollado. total:50pts
 - Determine el volumen para una conversión al 64% 10pts
 - Determine que sucede al cambiar la conversión a un 86% 10pts
 - Cambie las condiciones de temperatura y presión por T=480 K y P= 125 pa. Qué observa? 20pts
 - Cambie las condiciones de flujo molar, por 0.576 mol/s.
 Qué observa? 10pts

Reacción de descomposición del NOCI en NO y Cl2:

$$NOCL(g) \longrightarrow NO(g) + CL2(g)$$

- a) Investigación teórica 25pts
- b) Desarrolle un JupyterNotebook para la reacción con las siguientes condiciones: Fa0=2mol/s ; Ca0=0.2 mol/dm3, X=90% constante cinética: k=0.29 dm3/mol*s. Para este inciso deberá de mostrar también sus cálculos a mano y el Jupyternotebook desarrollado. total:50pts
 - Determine el volumen para una conversión al 70%. 5pts
 - Determine que sucede al cambiar las condiciones de Fa0 por 8mol/s y Ca0 por 0.7mol/dm3 Qué observa? 20pts

IMPORTANTE

Este problema solo se realiza en PFR, si a usted le toco en CSTR realícelo OMÍTALO y desarrolle solo en PFR

Reacción de síntesis de Metanotiol

CH4+S ——— CH3SH

- a) Investigación teórica 25pts
- b) Desarrolle lo siguientes incisos, debe de desarrollar su JupyerNotebook y dejar constancia a mano de su resolución. Total 75 pts, cada inciso tiene un valor de 25 pts

La siguiente reacción se verifica a 800°C y a una presión constante de 1 atm. En un reactor de flujo de tipo tapón:

$$CH_4 + S \longrightarrow CH_3SH$$

La velocidad de la reacción a 800 °C está dada por la expresión:

$$-r_A = k \cdot C_A \cdot C_B$$

Donde el valor de k a 800 °C es 10 L/mol·s. La alimentación de gas contiene 25% en mol de CH₄, 25% mol de N₂ y 50% de vapores de azufre.

- a) Calcular cual debe ser el tiempo de residencia para que haya un 60% de conversión de CH4 a CH3SH.
- b) Si la alimentación al reactor es de 10 mol/s en total, ¿Cuál debe ser el volumen del reactor para un 60% de conversión?
- c) ¿Cuál es el espacio velocidad medio en condiciones de operación del reactor?

 IMPORTANTE

Este problema solo se realiza en PFR, si a usted le toco en CSTR realícelo OMÍTALO y desarrolle solo en PFR

Reacción para producción de etileno

- a) Investigación teórica 25pts
- b) Desarrolle lo siguiente: Determine el volumen del PFR necesario para producir 300 millones de libras de etileno al año por desintegración catalítica de una corriente de alimentación de etano puro . La reacción es irreversible y sigue una ley de velocidad elemental. Se desea lograr una conversión del 80% de etano haciendo que el reactor funcione isotérmicamente a 1100 K Y una presión de 6 atm. 50 pts. Deberá de graficar el problema 25pts. Debe de dejar constancia de su realización de Jupyter notebook, y el procedimiento a mano

IMPORTANTE

Este problema solo se realiza en PFR, si a usted le toco en CSTR realícelo OMÍTALO y desarrolle solo en PFR