

INSTRUCCIONES

- El primer equipo hará el primer problema, el segundo equipo el segundo, así hasta el séptimo equipo que hará el séptimo problema.
- Se realizará un reporte que debe de incluir:
 - *portada*: debe contener los datos del grupo, materia, profesor, número de equipo, nombre de los integrantes del equipo,
 - *descripción de problema*,
 - *estrategia numérica*: nombre de la estrategia, fórmulas generales y específicas para el problema (las fórmulas deben ser realizadas con la herramienta de Word, si es imagen se restarán puntos),
 - *código computacional*: con comentarios explicado,
 - *resultados obtenidos*: gráficas o tablas con su descripción en el texto (deben tener etiquetas los ejes y unidades),
 - *discusión de resultados*: analizar comportamientos de datos, tablas o gráficas, etc.,
 - *conclusiones*: breve descripción de lo que se realizó en el reporte y de los resultados obtenidos.
 - *bibliografía*: más de dos libros o artículos, sólo una página de internet (no Wikipedia).
 - *glosario*: si hay algún término que se desconozca deberá ser incluido en esta sección (preguntaré si no viene nada en esta sección).
- Se realizará una presentación oral ante grupo por equipo. El/los expositores serán elegidos por el profesor al momento de la presentación. La duración de la presentación será de **15 minutos** máximo. Después de la presentación habrá una sesión de preguntas de **5 minutos**.
- El reporte debe ser entregado antes de la presentación, para ser tomado en cuenta.
- La presentación equivale al 50% del PIA y el reporte el 50% restante.

NOTA

Resuelva los problemas mediante el método de Runge-Kutta segundo orden. Todos los problemas deben de ser programados en MATLAB. El valor de incremento h para todos los problemas es 0.0001, si con este paso tarda más de un minuto en resolverse multiplique este valor por 10 hasta que sea un tiempo sea menor de un minuto. Además, para todos los problemas muestre sus resultados en forma gráfica, etiquete los ejes correctamente, incluyendo leyenda para más de dos curvas en una gráfica.

1. En un reactor de lecho fluidizado de 0.8 m de longitud y 1 m de diámetro se lleva a cabo una reacción catalítica. El modelo de flujo aplicable es el de partículas de tamaño intermedio, con lo que las concentraciones de reactivo A en la fase burbuja (C_{Ab}) y en la emulsión (C_{Ae}) siguen las ecuaciones:

$$\begin{aligned} -u_b \frac{dC_{Ab}}{dz} &= \gamma_b k C_{Ab} + K_{be}(C_{Ab} - C_{Ae}), \\ -(1 - \delta)u_{mf} \frac{dC_{Ae}}{dz} &= (1 - \delta)(1 - \epsilon_{mf})k C_{Ae} - \delta K_{be}(C_{Ab} - C_{Ae}), \end{aligned}$$

donde:

- z es la distancia en el fondo del lecho (altura),
- k es la constante cinética de la reacción (igual a 3 seg^{-1}),
- γ_b es la fracción de sólidos en la estela (igual a 10^{-3}),
- u_{mf} es la velocidad mínima de fluidización (igual a 0.21 m/s),
- ϵ_{mf} es la porosidad en el punto de mínima fluidización (igual a 0.45),
- u_b es la velocidad de ascenso de la burbuja, que es una función de su diámetro:

$$u_b = 1.6(u_0 - u_{mf}) + 1.13d_b^{0.5}d_t^{1.35} + u_{br}, [m/s]$$

donde

- u_0 es la velocidad de alimentación del gas (igual a 0.4 m/s),
- u_{br} es la velocidad de ascenso de una burbuja individual:

$$u_{br} = 0.711(gd_b)^{0.5}$$

- d_t es el diámetro del reactor (igual a 1 m),
- d_b es el diámetro de una burbuja, que es una función de la posición:

$$d_b = 2.3(u_0 - u_{mf})^{1.11}z^{0.81}$$

- δ es la fracción de burbujas, que puede calcularse con la expresión:

$$\delta = \frac{u_0 - u_{mf}}{u_b}$$

- K_{be} es el coeficiente de transferencia de materia desde la burbuja a la emulsión que debe calcularse mediante el uso de K_{bc} (burbuja-nube) y K_{ce} (nube-emulsión):

$$\begin{aligned} \frac{1}{K_{be}} &= \frac{1}{K_{bc}} + \frac{1}{K_{ce}}, \\ K_{bc} &= 4.5 \left(\frac{u_{mf}}{d_b} \right) + 5.85 \left(\frac{D^{0.5}g^{1/4}}{d_b^{5/4}} \right), \\ K_{ce} &= 6.77 \left(\frac{D\epsilon_{mf}u_{br}}{d_b^3} \right)^{0.5}, \end{aligned}$$

donde D es la difusividad del reactivo ($9 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$).

Se desea conocer cómo varían a lo largo de la altura del reactor:

- las concentraciones C_{Ab} y C_{Ae} , teniendo en cuenta que a la entrada ambas son iguales a 0.1 mol/L .
- los coeficientes de transferencia K_{bc} y K_{ce}
- el diámetro y la velocidad de las burbujas.

2. En un reactor encamisado se lleva a cabo una reacción exotérmica. Para este tipo de sistema se comprueba mediante balances de materia y energía que se cumple la siguiente ecuación:

$$\frac{dT}{d\zeta} = \Delta T_{ad} - \frac{4U(T - T_c)}{d_t \rho C_p k(1 - \zeta)},$$

donde ζ es la conversión en el reactor ($\zeta = 0$ para $\tau = 0$) y T_c es la temperatura del encamisado. A la entrada del sistema ($\tau = 0$) la temperatura es de 340 K.

En el sistema, de primer orden, se cumple la ecuación de diseño:

$$\frac{d\zeta}{d\tau} = K(1 - \zeta),$$

en la que la constante de velocidad sigue la ley de Arrhenius,

$$k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}},$$

y se dispone de los siguientes datos:

T (K)	k (s ⁻¹)
300	0.00012239
320	0.0013828
330	0.003864
340	0.0107844

En el caso de estudio se conoce que:

- $\Delta T_{ad} = 146$ K,
- $\frac{4U}{d_t \rho C_p} = 0.2$ s⁻¹.

Se desea conocer:

- la evolución de la temperatura y la conversión a medida que varía el tiempo para tres temperaturas de encamisado distintas, 330, 335 y 337 K.
- la evolución de la temperatura conforme varía la conversión para las tres temperaturas.

NOTA:

- Tenga en cuenta que la ecuación de la temperatura T la variable independiente es la conversión, y el la ecuación de la conversión es el tiempo. Cuando realice el programa ambas deben depender del tiempo.
- Para empezar los cálculos debe encontrar la constante k_0 y $\frac{E}{R}$.
- Realice los cálculos para los primeros 200 segundos.

3. La concentración de un reactivo A varía con el tiempo según la siguiente ecuación:

$$\frac{dC_A}{dt} = -9420e^{-\frac{3500}{298}} C_A \quad t \text{ en minutos, } C_A \text{ en mol/L} \quad (1)$$

que no depende de la temperatura. Se realiza un experimento y al cabo de 25 minutos se encuentran en el sistema 3.4 mol/L de A .

- (a) Cuál es la concentración inicial del reactivo A ?, dibuje la variación de la concentración con el tiempo para este reactivo.
- (b) Un segundo reactivo (B) se encuentra presente, que varía con el tiempo según la siguiente ecuación:

$$\frac{dC_B}{dt} = -5 \times 10^{15} e^{-\frac{15000}{T}} C_B^2 \quad t \text{ en minutos, } C_B \text{ en mol/LT en K} \quad (2)$$

y la temperatura varía con el tiempo según la ecuación:

$$T = 298 + 5t$$

En el sistema se parte de una concentración de B de 7 mol/L. Cuál es la concentración al cabo de 25 minutos?, dibuje la variación de la concentración del reactivo B contra el tiempo.

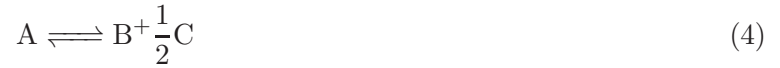
- (c) Un tercer reactivo C está presente en el sistema. La concentración de C es una función de las ecuaciones que describen al variación de A y B , de forma que:

$$\frac{dC_C}{dt} = -0.05(C_A + C_B) \quad (3)$$

La concentración inicial de C es de 20 mol/L. Dibuje la concentración de C con el tiempo para los primeros 25 minutos.

- (d) Realice una gráfica comparativa de los tres reactivos.

4. La deshidrogenación de un compuesto A tiene lugar en un reactor con membrana selectiva bajo condiciones isotermas.



La reacción es reversible con constante de equilibrio K_c . La ventaja de utilizar un reactor de membrana está en que uno de los productos atraviesa de forma selectiva la membrana, de tal manera que si el componente que atraviesa la membrana es uno de los productos, la reacción se puede llevar hasta conversión completa.

La velocidad de transferencia hasta la membrana depende no sólo de la resistencia ofrecida por la membrana, si no también de las capas de concentración en cada lado de ésta. El coeficiente de transferencia de materia a través de la membrana se puede correlacionar a través de la siguiente ecuación:

$$k_c(v) = k_{c0} \left(\frac{v}{v_0} \right)^{1/2} \quad (5)$$

Si el paso limitante es el flujo a través de la membrana entonces el coeficiente se puede considerar independiente de la velocidad, pero este no es el caso. El componente C es transportado a través de la membrana, se puede calcular como:

$$r_{C(\text{membrana})} = ak_C C_c \text{ para valores de perneado C bajos.} \quad (6)$$

Las ecuaciones para este sistema serían las siguientes:

- Balances de Materia:

$$\frac{dF_A}{dW} = r'_A \quad (7)$$

$$\frac{dF_B}{dW} = -r'_A \quad (8)$$

$$\frac{dF_C}{dW} = -\frac{1}{2}r'_A - r_{C(\text{membrana})} \quad (9)$$

- Ecuación de velocidad:

$$r'_A = -k \left(C_A - \frac{C_B C_C^{0.5}}{K_C} \right) \quad (10)$$

- Relación flujo concentración y estequiometria

$$C_A = \frac{F_A}{v}; \quad C_B = \frac{F_B}{v}; \quad C_C = \frac{F_C}{v}; \quad (11)$$

$$v = v_0 \left(\frac{F_A + F_B + F_C}{F_{A0}} \right) \frac{P_0}{P} = v_0 \left(\frac{F_A + F_B + F_C}{F_{A0}} \right) \frac{1}{y} \text{ con } y = \frac{P_0}{P} \quad (12)$$

- Caída de presión.

$$\frac{dy}{dW} = \frac{-\alpha \left(\frac{F_A + F_B + F_C}{F_{A0}} \right)}{2y} \quad (13)$$

Calcule los flujos molares F , en función de la masa del catalizador W , así como la pérdida de presión para los siguientes valores:

$$\begin{aligned} k &= 0.5 \frac{\text{dm}^3}{\text{kg min}}; & v_0 &= 50 \frac{\text{dm}^3}{\text{min}}; & K_C &= 0.5 \left(\frac{\text{kmol}}{\text{dm}^3} \right)^{0.5} \\ P_0 &= 10 \text{ atm}; & F_A &= 10 \frac{\text{kmol}}{\text{min}}; & \alpha &= 0.002 \frac{\text{atm}}{\text{kg}} \\ k_{C_0} &= 0.1 \frac{\text{dm}}{\text{min}}; & a &= 2 \frac{\text{dm}^2}{\text{kg}}; & W &= 200 \text{ kg} \end{aligned}$$

5. Considere la siguiente reacción elemental e irreversible que tiene lugar en fase líquida:



Se lleva a cabo en una asociación de 3 reactores en serie de tipo tanque agitado. Las especies A y B se adicionan de forma individual al primer tanque con un flujo volumétrico (cada una de ellas) de 6 dm³/min. El volumen V de cada reactor es de 200 dm³. Considere que inicialmente cada reactor está lleno con un disolvente líquido inerte. La concentración inicial de cada reactante es $C_{A_0} = C_{B_0} = 0.5$ mol/dm³ y la constante de reacción es de $k = 0.5$ dm³/mol-min.

Calcule el perfil de concentraciones hasta que se alcanza el estado estacionario. Sabiendo que las ecuaciones en estado estacionario son:

$$\frac{dC_{A_1}}{dt} = \frac{v_{A_0}C_{A_0} - v_1C_{A_1} - kC_{A_1}C_{B_1}V_1}{V_1} \quad (15)$$

$$\frac{dC_{B_1}}{dt} = \frac{v_{B_0}C_{B_0} - v_1C_{B_1} - kC_{A_1}C_{B_1}V_1}{V_1} \quad (16)$$

$$\frac{dC_{A_2}}{dt} = \frac{v_1C_{A_1} - v_2C_{A_2} - kC_{A_2}C_{B_2}V_2}{V_2} \quad (17)$$

$$\frac{dC_{B_2}}{dt} = \frac{v_1C_{B_1} - v_2C_{B_2} - kC_{A_2}C_{B_2}V_2}{V_2} \quad (18)$$

$$\frac{dC_{A_3}}{dt} = \frac{v_2C_{A_2} - v_3C_{A_3} - kC_{A_3}C_{B_3}V_3}{V_3} \quad (19)$$

$$\frac{dC_{B_3}}{dt} = \frac{v_2C_{B_2} - v_3C_{B_3} - kC_{A_3}C_{B_3}V_3}{V_3} \quad (20)$$

donde

$$\begin{aligned} C_{A_0} &= C_{B_0} = 2; & k &= 0.5; \\ V_1 &= V_2 = V_3 = 200; & v_{A_0} &= v_{B_0} = 6 \\ v_1 &= v_2 = v_3 = 12 \end{aligned}$$

Realice una gráfica para cada reactor en el que se incluyan las concentraciones de los reactivos A, B y C.

6. En un reactor químico tiene lugar la reacción $A \longrightarrow R$, que tiene lugar en fase líquida. Se conocen los siguientes datos sobre la capacidad calorífica de la mezcla, la cinética y el calor de reacción:

$$\begin{aligned} C_{ps} &= 250 \text{ cal/mol-K} \\ \Delta H_r &= -15000 \text{ cal/mol} \\ E/R &= 12000 \text{ K} \\ k_0 &= 8 \times 10^{13} \text{ min}^{-1} \end{aligned}$$

Las condiciones de operación suponen un tiempo espacial $\tau = 100 \text{ min}$ y una temperatura de entrada de la alimentación $T = 29.5 \text{ }^\circ\text{C}$. Un balance de materia en estado no estacionario, indica que para el arranque del reactor se cumple la siguiente ecuación:

$$\frac{dx_A}{dt} = \left[k_0 e^{-\frac{E/R}{T}} \right] (1 - x_A) - \frac{x_A}{\tau} \quad (21)$$

Asimismo, un balance de energía en régimen no estacionario proporciona:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-\Delta H_r)}{C_{ps}} \left[k_0 e^{-\frac{E/R}{T}} \right] (1 - x_A) - \frac{(T - T_0)}{\tau} \quad (22)$$

En las ecuaciones anteriores, x_A representa la conversión de A y T la temperatura. Represente las variaciones de la conversión y la temperatura si la temperatura inicial es de 300 K.

7. Se pretende descomponer el sulfuro de hidrógeno en sus elementos. Para ello se dispone de un sistema en el que se difunde SH_2 dentro de las partículas esféricas de un catalizador poroso de sílica/alúmina. El sistema se caracteriza por la ley de Fick, que aplicada a un sistema con una reacción de primer orden, como es el caso, tiene la forma:

$$D_e \frac{d^2 C_A}{dx^2} - k C_A = 0, \quad (23)$$

donde D_e representa la difusividad efectiva, C_A la concentración de SH_2 , k es la constante de velocidad de reacción y x la distancia desde el centro de la partícula. Las condiciones de contorno de la ecuación anterior son:

- La concentración de SH_2 en la superficie del catalizador es conocida, e igual a 10 mol/m^3 .
- La concentración de SH_2 en el centro de la partícula presenta un mínimo, por lo que $\frac{dC_A}{dx} = 0$ en el centro.

Se desea determinar el perfil de concentración de SH_2 a lo largo de la partícula esférica.

Datos:

- $D_e = 5 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
- $k = 1 \text{ s}^{-1}$
- Radio de la partícula = 2 mm.

Realice los cálculos mediante los métodos de diferencias finitas y sustitución de ecuaciones diferenciales de orden superior, después de la sustitución utilice el método de Runge-Kutta segundo orden para resolver el sistema.