CSTR , reacción irreversible exotérmica, Estabilidad y Multiplicidad de Estados Estacionarios

Reacción

- Estequiometría

$A \rightarrow B$

$\nu_A = -1$

$\nu_B = +1$

- Termodinámica

$A \rightarrow B$ ... $\Delta \mathrm{Hr} < 0$ (exotérmica)

$\Delta \mathrm{Hr} = \sum_i \nu_i \Delta \mathrm{H}_{f\,i} = -\Delta \mathrm{H}_{f\,A} + \Delta \mathrm{H}_{f\,B} < 0$

- Cinética

$A \rightarrow B$ ... 1er orden

$-r_A = k_1(T)\, C_A$

$\mathcal{R}_A = \nu_A(\mathcal{R}) = \nu_A(-r_A) = -(-r_A) = -k_1(T)\, C_A$

$q_c = (-\Delta \mathrm{Hr})\,(\mathcal{R}) = (-\Delta \mathrm{Hr})\,(-r_A)$

Reactor

- Ecs. de conservación

$\frac{d\,C_A}{d\,t} - \frac{C_{\mathrm{A0}} - C_A}{\theta} = R_A$ ...Materia

$\frac{d\,T}{d\,t} - \frac{T_0 - T}{\theta} = \frac{q_c}{\rho\,\mathrm{Cp}} + \mathrm{Urem}$ ...Energía Térm.

Modelo

- Ecuaciones

$\frac{d\,C_A}{d\,t} - \frac{C_{\mathrm{A0}} - C_A}{\theta} = -k_{10} \exp\left(\frac{-E}{R\,T}\right) C_A$

$\frac{d\,T}{d\,t} - \frac{T_0 - T}{\theta} = \frac{(-\Delta \mathrm{H}_r)\, k_{10} \exp\left(\frac{-E}{R\,T}\right) C_A}{\rho\,\mathrm{Cp}} + \mathrm{Urem}$

- Condiciones iniciales

$t = 0,\ C_A = C_{\mathrm{A0}},\ T = T_{00}$

- Valores a especificar

C_{A0}	Q_0
T_0	$\rho\,\mathrm{Cp}$
C_{A00}	$k_{10} = A \exp\left(\frac{-E}{R\,T_0'}\right)$
T_{00}	A
$-\Delta \mathrm{H}_r$	E
$\theta = V / Q_0$	T_0'
	R

- Parámetro

Urem

Urem = 0 $\Longrightarrow$ adiabático

Urem ≠ 0 $\Longrightarrow$ no adiabático

Solución adiabático

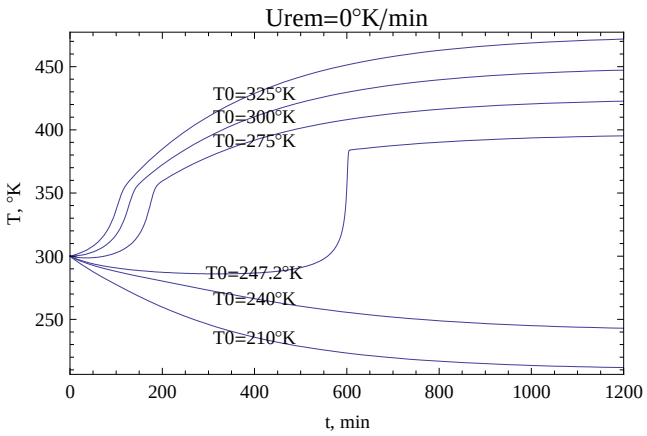
Valores, variables:

	Valor	Unidades
T0	PorEj[325]	°K, Temperatura de alimentación al CSTR
CA0	3	mol/L ,Concentración de alimentación al CSTR
T00	300	°K, Temperatura inicial en el CSTR
CA00	0	mol/L ,Concentración inicial en el CSTR
Vr	1200	L, Volumen del reactor
Q0	4	L/min, Flujo volumétrico de alimentación
Θ	300	min, Tiempo de residencia
$\triangle$Hr	−891.	kJ/mol, Entalpía de reacción
ρCp	17.82	kJ/mol, Capacidad calorífica con densidad
R	8.314	J/(mol °K), Constante universal de los gases
T0ref	298.15	°K, Temperatura de ref. paráms. Arrhenius
E1	62 770.7	J/mol, Energía de activación Arrhenius
A	4.82438×10^{19}	1/min, Preexponencial Arrhenius
k10	4.85154×10^{8}	1/min, Constante de rapidez a T0ref
Urem	0	°K/min, Calor removido/ρCp

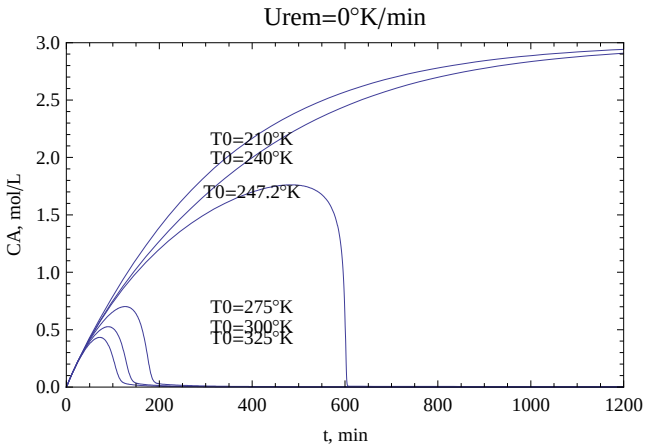
Ecuaciones, numéricas:

	Ecuación
Materia	$\frac{1}{300}\,(-3 + CA[t]) + CA'[t] == -4.85154 \times 10^{8}\, e^{-\frac{7550.}{T[t]}}\, CA[t]$
Energía	$\frac{1}{300}\,(-325 + T[t]) + T'[t] == 2.42577 \times 10^{10}\, e^{-\frac{7550.}{T[t]}}\, CA[t]$
CA inicial	CA[0] == 0
T inicial	T[0] == 300

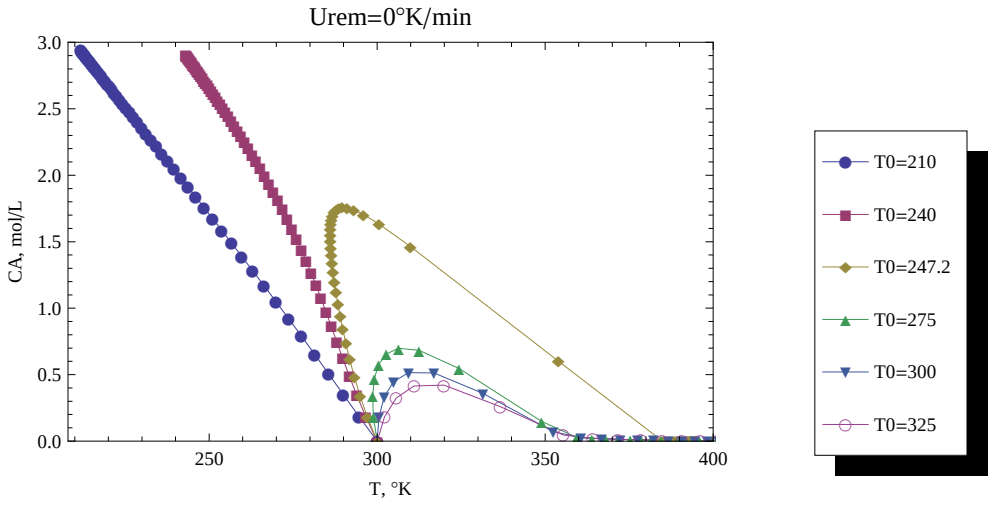
Gráfica 1, Edo. No estacionario, T vs t



Gráfica 2, Edo. No estacionario, CA vs t



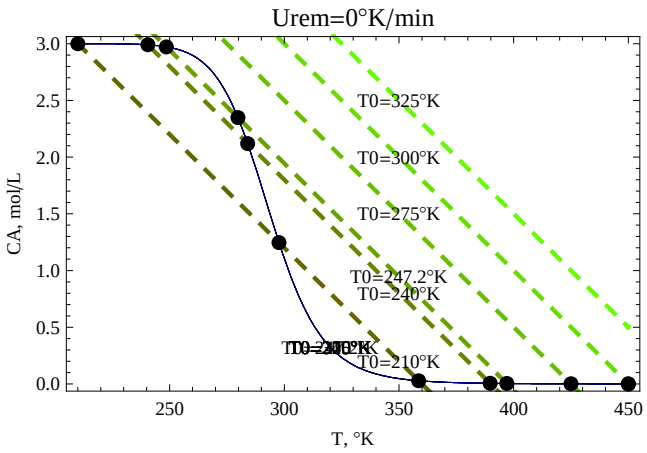
Gráfica 3, Edo. No estacionario, CA vs T



Soluciones de Edo. estacionario

```
T0=210
CA → 2.99989          T → 210.005
CA → 1.24624          T → 297.688
CA → 0.0284608        T → 358.577
T0=240
CA → 2.98988          T → 240.506
CA → 2.11951          T → 284.024
CA → 0.00532834       T → 389.734
T0=247.2
CA → 2.97205          T → 248.597
CA → 2.34851          T → 279.774
CA → 0.00373731       T → 397.013
T0=275
CA → 3.19898          T → 265.051
CA → 3.20323          T → 264.838
CA → 0.00107165       T → 424.946
T0=300
CA → 3.73213          T → 263.394
CA → 0.000398917      T → 449.98
CA → 0.000398917      T → 449.98
T0=325
CA → 4.25939          T → 262.028
CA → 0.000164897      T → 474.992
CA → 0.000164897      T → 474.992
```

Gráfica 4, Edo. estacionario, CA vs T



Solución no adiabático

Out[23]= Valores, variables:

Out[24]//TableForm=

	Valor	Unidades
T0	PorEj[325]	°K, Temperatura de alimentación al CSTR
CA0	3	mol/L ,Concentración de alimentación al CSTR
T00	300	°K, Temperatura inicial en el CSTR
CA00	0	mol/L ,Concentración inicial en el CSTR
Vr	1200	L, Volumen del reactor
Q0	4	L/min, Flujo volumétrico de alimentación
Θ	300	min, Tiempo de residencia
$\triangle$Hr	−891.	kJ/mol, Entalpía de reacción
ρCp	17.82	kJ/mol, Capacidad calorífica con densidad
R	8.314	J/(mol °K), Constante universal de los gases
T0ref	298.15	°K, Temperatura de ref. paráms. Arrhenius
E1	62 770.7	J/mol, Energía de activación Arrhenius
A	4.82438×10^{19}	1/min, Preexponencial Arrhenius
k10	4.85154×10^{8}	1/min, Constante de rapidez a T0ref
Urem	−0.1	°K/min, Calor removido/ρCp

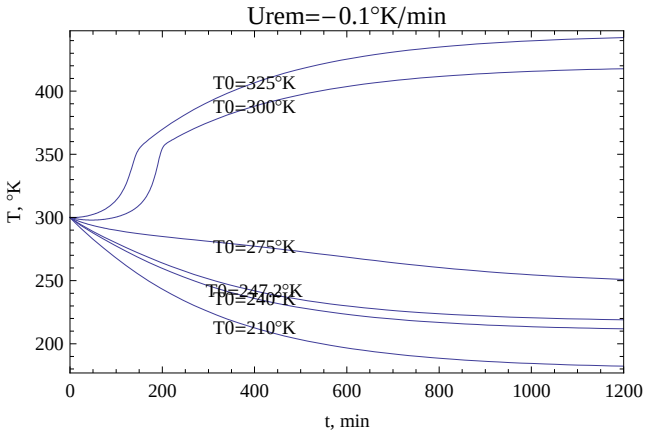
Out[25]= Ecuaciones, numéricas:

Out[26]//TableForm=

	Ecuación
Materia	$\frac{1}{300}(-3 + CA[t]) + CA'[t] == -4.85154 \times 10^{8}\, e^{-\frac{7550.}{T[t]}}\, CA[t]$
Energía	$\frac{1}{300}(-325 + T[t]) + T'[t] == -0.1 + 2.42577 \times 10^{10}\, e^{-\frac{7550.}{T[t]}}\, CA[t]$
CA inicial	CA[0] == 0
T inicial	T[0] == 300

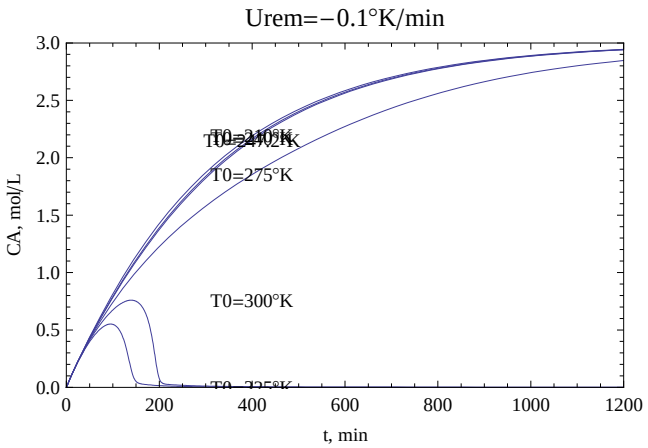
Out[27]= Gráfica 1, Edo. No estacionario, T vs t

Out[28]=



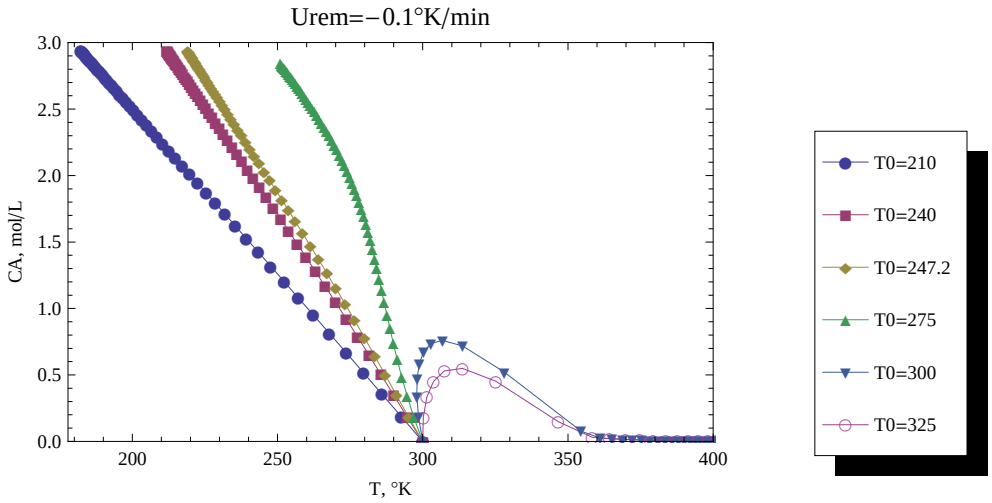
Out[29]= Gráfica 2, Edo. No estacionario, CA vs t

Out[30]=



Out[31]= Gráfica 3, Edo. No estacionario, CA vs T

Out[32]=



Out[33]= Soluciones de Edo. estacionario

Out[34]//TableForm=

T0=210	
CA → 0.273767	T → 320.46
CA → 0.276897	T → 320.651
CA → 0.289463	T → 321.621
T0=240	
CA → 2.99989	T → 209.999
CA → 1.24624	T → 297.688
CA → −0.0058128	T → 403.968
T0=247.2	
CA → 2.99987	T → 209.999
CA → 1.4559	T → 294.405
CA → −0.00422413	T → 411.137
T0=275	
CA → 2.99977	T → 209.999
CA → 2.27597	T → 281.201
CA → −0.00127056	T → 439.076
T0=300	
CA → 0.0142461	T → 350.283
CA → 0.0200294	T → 343.874
CA → −0.000210427	T → 473.751
T0=325	
CA → 2.99781	T → 220.956
CA → −0.000195941	T → 490.141
CA → −0.0000912334	T → 499.268

Out[35]= Gráfica 4, Edo. estacionario, CA vs T

Out[38]=