

PFR adiabático , reacciones consecutivas (2) exotérmicas, efecto de condiciones de entrada

Reactor

- Ecs. de conservación

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + u_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = R_A \quad \dots \text{Materia}$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} + u_z \frac{\partial C_B}{\partial z} = R_B$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{q_c}{\rho C_p} \quad \dots \text{Energía Térm.}$$

Reacciones

- Estequiometría

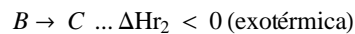
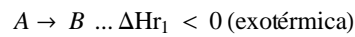


$$\nu_{A1} = -1 \quad \nu_{A2} = 0$$

$$\nu_{B1} = +1 \quad \nu_{B2} = -1$$

$$\nu_{C1} = 0 \quad \nu_{C2} = +1$$

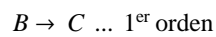
- Termodinámica



$$\Delta H_{r1} = \sum_i \nu_{i1} \Delta H_{fi} = -\Delta H_{fA} + \Delta H_{fB} < 0$$

$$\Delta H_{r2} = \sum_i \nu_{i2} \Delta H_{fi} = -\Delta H_{fB} + \Delta H_{fC} < 0$$

- Cinética



$$-r_A = k_{11}(T) C_A$$

$$+r_C = k_{12}(T) C_B$$

$$\mathcal{R}_A = \nu_{A1}(\mathcal{R}_1) + \nu_{A2}(\mathcal{R}_2) = -1(-r_A) = -(-r_A) = -k_{11}(T) C_A$$

$$\mathcal{R}_B = \nu_{B1}(\mathcal{R}_1) + \nu_{B2}(\mathcal{R}_2) = +1(-r_A) + (-1)(+r_C) = k_{11}(T) C_A - k_{12}(T) C_B$$

$$q_c = (-\Delta H_{r1})(\mathcal{R}_1) + (-\Delta H_{r2})(\mathcal{R}_2) = (-\Delta H_{r1})(-r_A) + (-\Delta H_{r2})(+r_C)$$

Modelo

- Ecuaciones

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + u_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = -k_{11}(T) C_A$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} + u_z \frac{\partial C_B}{\partial z} = k_{11}(T) C_A - k_{12}(T) C_B$$

$$\frac{dT}{dt} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{\rho C_p} ((-\Delta H_{r1})(k_{11}(T) C_A) + (-\Delta H_{r2})(k_{12}(T) C_B))$$

- Condiciones iniciales

$$t = 0, C_{A(z)} = C_{A(z)0}, C_{B(z)}, T = T_{(z)0}$$

- Valores de frontera

$z = 0, C_{A(t)} = C_{A(t)0}, C_{B(t)0}, T = T_{(t)0}$

- Valores a especificar

C_{A0}, C_{B0}, C_{C0}	ρC_p
T_0	$k_{110} = A_1 \exp\left(\frac{-E_1}{RT_0}\right)$
$C_{A(z)0}, C_{B(z)0}, C_{C(z)0}$	$k_{120} = A_2 \exp\left(\frac{-E_2}{RT_0}\right)$
$T_{(z)0}$	
$-\Delta H_{r1}, -\Delta H_{r2}$	A_1, A_2, E_1, E_2, T_0'
L, D	R
Q_0	

- Solución

Código de Mathematica

```

In[492]:= (*Valores y Unidades*)
T0 = {260, 270, 275, 300, 325}; "°K, Temperatura de alimentación al PFR";
CA0 = 3; "mol/L ,Concentración de alimentación de A al PFR";
CB0 = 0; "mol/L ,Concentración de alimentación de B al PFR";
CC0 = 0; "mol/L ,Concentración de alimentación de C al PFR";
T00[z_] := T0; "°K, Temperatura inicial en el PFR";
CA00[z_] := CA0; "mol/L, Concentración inicial de A en el PFR";
CB00[z_] := CB0; "mol/L, Concentración inicial de B en el PFR";
CC00[z_] := CC0; "mol/L, Concentración inicial de C en el PFR";
Diam = Sqrt[4 * 3 /  $\pi$ ]; "cm, Diámetro de sección transv. del PFR";
Long = 400 000; "cm, Longitud del PFR";
Vr =  $\pi$  / 4 Diam2 Long / 1000 ; "L, Volumen del reactor";
Q0 = 4; "L/min, Flujo volumétrico de alimentación";
 $\theta$  = Vr / Q0; "min, Tiempo de residencia";
uz = Q0 * 1000 / ( $\pi$  / 4 Diam2); "cm/min, Velocidad axial";
 $\Delta$ Hr1 = -891.; "kJ/mol, Entalpía de reacción";
 $\Delta$ Hr2 = -1022.; "kJ/mol, Entalpía de reacción";
 $\rho$ Cp = 891. / 50.; "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 = (-7550. / 298.15) * (-R * T0ref);
"J/mol, Energía de activación Arrhenius";
A1 = Exp[20 + 25.3228]; "1/min, Preexponencial Arrhenius";
k110 = A1 Exp[(-E1) / (R T0ref)]; "1/min, Constante de rapidez a T0ref";
E2 = (-7450. / 298.15) * (-R * T0ref); "J/mol, Energía de activación Arrhenius";
A2 = Exp[20 + 16]; "1/min, Preexponencial Arrhenius";
k120 = A2 Exp[(-E2) / (R T0ref)]; "1/min, Constante de rapidez a T0ref";
tiempoSoluciones = 120; "min, tiempo a considerar total de edo. no est.";

(*Ecuaciones y Funciones*)
k11[T_] := k110 Exp[(-E1) / (R T)]; "1/min, Constante de rapidez a T";
k12[T_] := k120 Exp[(-E2) / (R T)]; "1/min, Constante de rapidez a T";
"Edo. No estacionario==>> Soluciones CA(t) y T(t)";
Module[{i = 1},
  soluciones = {};
  For[i = 1, i  $\leq$  Length[T0], i++,
    ecuaciones = {
      D[CA[z, t], t] + uz D[CA[z, t], z] == -k11[T[z, t]] CA[z, t],
      D[CB[z, t], t] + uz D[CB[z, t], z] ==
        +k11[T[z, t]] CA[z, t] - k12[T[z, t]] CB[z, t],
      D[T[z, t], t] + uz D[T[z, t], z] ==
        (- $\Delta$ Hr1 /  $\rho$ Cp)  $\times$  k11[T[z, t]] CA[z, t] + (- $\Delta$ Hr2 /  $\rho$ Cp)  $\times$  k12[T[z, t]] CB[z, t],
      CA[z, 0] == CA00[0], CB[z, 0] == CB00[0], T[z, 0] == T00[z][[i]],
      CA[0, t] == CA00[0], CB[0, t] == CB0, T[0, t] == T00[z][[i]]
    }
  ]

```

```

    };
    (*Solución adiabático*)
    soluciones = Join[soluciones, #] &@
      NDSolve[ecuaciones, {T, CA, CB}, {t, 0, tiempoSoluciones},
        {z, 0, Long}, MaxSteps → 2000];
  ]
]

"Edo. Estacionario==>> Soluciones CA(t) y T(t)";
Module[{i = 1},
  solucionesEstacionario = {};
  For[i = 1, i ≤ Length[T0], i++,
    ecuacionesEstacionario = {
      uz D[CA[z], z] == -k11[T[z]] CA[z],
      uz D[CB[z], z] == +k11[T[z]] CA[z] - k12[T[z]] CB[z],
      uz D[T[z], z] == (-ΔHr1 / ρCp) × k11[T[z]] CA[z] +
        (-ΔHr2 / ρCp) × k12[T[z]] CB[z],
      CA[0] == CA00[0], CB[0] == CB00[0], T[0] == T00[0][[i]]
    };
    (*Solución adiabático*)
    solucionesEstacionario = Join[solucionesEstacionario, #] &@
      NDSolve[ecuacionesEstacionario, {T, CA, CB}, {z, 0, Long},
        MaxSteps → 2000];
  ]
]

(*Presentación*)
"Valores, variables: "
TableForm[#,
  TableHeadings →
    {{ "T0", "CA0", "T00", "CA00", "Vr", "Q0", "θ", "Long", "ΔHr1",
      "ΔHr2", "ρCp", "R", "T0ref", "E1", "E2", "A1", "A2", "k110", "k120"},
      { "Valor", "Unidades" } } ] &@{
  {PorEj[T0[[Length[T0]]]], "°K, Temperatura de alimentación al CSTR"},
  {CA0, "mol/L ,Concentración de alimentación al CSTR"},
  {T00, "°K, Temperatura inicial en el CSTR"},
  {CA00, "mol/L ,Concentración inicial en el CSTR"},
  {Vr, "L, Volumen del reactor"},
  {Q0, "L/min, Flujo volumétrico de alimentación"},
  {θ, "min, Tiempo de residencia"},
  {Long, "cm, Longitud del PFR"},
  {ΔHr1, "kJ/mol, Entalpía de reacción"},
  {ΔHr2, "kJ/mol, Entalpía de reacción"},
  {ρCp, "kJ/mol, Capacidad calorífica con densidad"},
  {R, "J/(mol °K), Constante universal de los gases"},
  {T0ref, "°K, Temperatura de ref. paráms. Arrhenius"},

```

```

{E1, "J/mol, Energía de activación Arrhenius"},
{E2, "J/mol, Energía de activación Arrhenius"},
{A1, "1/min, Preexponencial Arrhenius"},
{A2, "1/min, Preexponencial Arrhenius"},
{k110, "1/min, Constante de rapidez a T0ref"},
{k120, "1/min, Constante de rapidez a T0ref"}
}
"Ecuaciones, numéricas: "
TableForm[#,
  TableHeadings →
    {{"Materia (A)", "Materia (B)", "Energía", "Conds. iniciales",
      "Conds. iniciales", "Conds. iniciales", "Conds. frontera",
      "Conds. frontera", "Conds. frontera"}, {"Ecuación"}}] &@
  (Item[#, ItemSize → {25, 3}] & /@ # & /@ (Transpose@{ecuaciones}))

"Estado Estacionario"
(T[z]) /. solucionesEstacionario //
  Plot[#, {z, 0, Long}, PlotRange → {Automatic, Automatic}, PlotLabel → "T",
    Frame → True, Axes → False, FrameLabel → {"z, cm", "T, °K"}] &
{CB[z], CA[z], CA0 - CB[z] - CA[z]} /. solucionesEstacionario //
  Plot[#, {z, 0, Long}, PlotRange → {Automatic, {0, 3}}, PlotLabel → "A,B,C",
    Frame → True, Axes → False, FrameLabel → {"z, cm", "C, mol/L"},
    PlotStyle → {Dashing[Large], Thick, Thin}] &

"Estado no Estacionario"
CA[t, z] /. soluciones[[4]] //
  Plot3D[#, {t, 0, tiempoSoluciones}, {z, 0, Long},
    AxesLabel → {"t, min", "z, cm", "CA, mol/L"},
    PlotRange → {Automatic, Automatic, {0, CA0}}] &
(CA0 - CB[t, z] - CA[t, z]) /. soluciones[[4]] //
  Plot3D[#, {t, 0, tiempoSoluciones}, {z, 0, Long},
    AxesLabel → {"t, min", "z, cm", "CC, mol/L"},
    PlotRange → {Automatic, Automatic, {0, CA0}}] &
T[t, z] /. soluciones[[4]] //
  Plot3D[#, {t, 0, tiempoSoluciones}, {z, 0, Long},
    AxesLabel → {"t, min", "z, cm", "T, °K"}] &

Manipulate[Plot[T[t, z] /. soluciones[[4]], {z, 0, Long}, Frame → True,
  FrameLabel → {"z, cm", "T, °K"}], {t, 0, tiempoSoluciones}]
Manipulate[
  Plot[{CA[t, z], CB[t, z], CA0 - CB[t, z] - CA[t, z]} /. soluciones[[4]],
    {z, 0, Long}, Frame → True, FrameLabel → {"z, cm", "C, mol/L"},
    PlotRange → {Automatic, {0, 3}}, {t, 0, tiempoSoluciones}]

```

Resultado

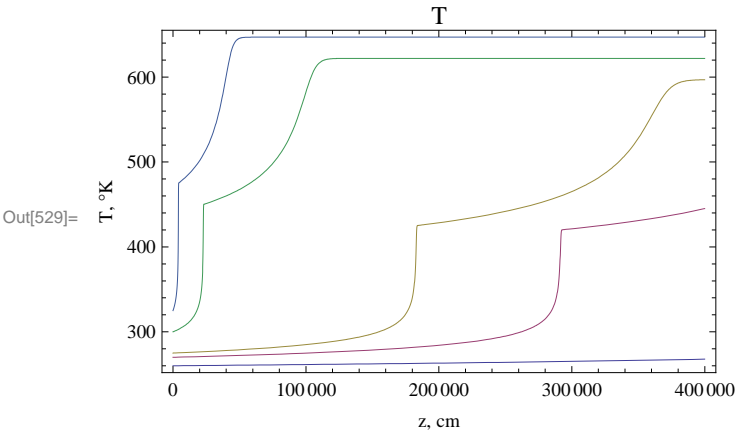
Out[524]= Valores, variables:

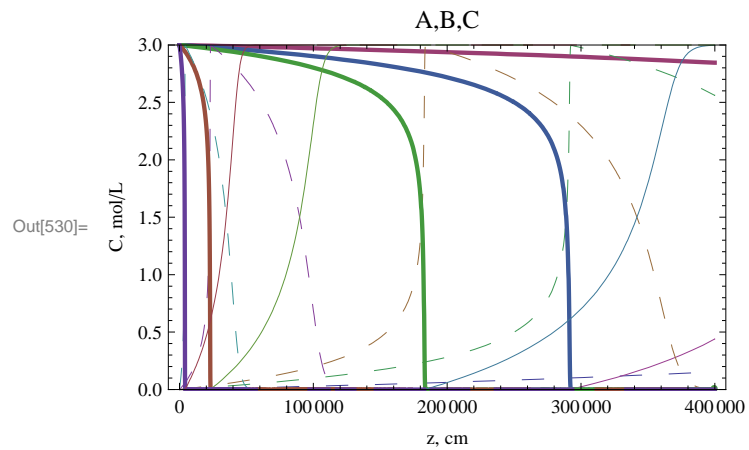
	Valor	Unidades
T0	PorEj[325]	°K, Temperatura de alimentación al CSTR
CA0	3	mol/L ,Concentración de alimentación al CSTR
T00	T00	°K, Temperatura inicial en el CSTR
CA00	CA00	mol/L ,Concentración inicial en el CSTR
Vr	1200	L, Volumen del reactor
Q0	4	L/min, Flujo volumétrico de alimentación
θ	300	min, Tiempo de residencia
Long	400 000	cm, Longitud del PFR
ΔH_{r1}	-891.	kJ/mol, Entalpía de reacción
ΔH_{r2}	-1022.	kJ/mol, Entalpía de reacción
ρC_p	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
E2	61 939.3	J/mol, Energía de activación Arrhenius
A1	4.82438×10^{19}	1/min, Preexponencial Arrhenius
A2	e^{36}	1/min, Preexponencial Arrhenius
k110	4.85154×10^8	1/min, Constante de rapidez a T0ref
k120	60 632.	1/min, Constante de rapidez a T0ref

Out[526]= Ecuaciones, numéricas:

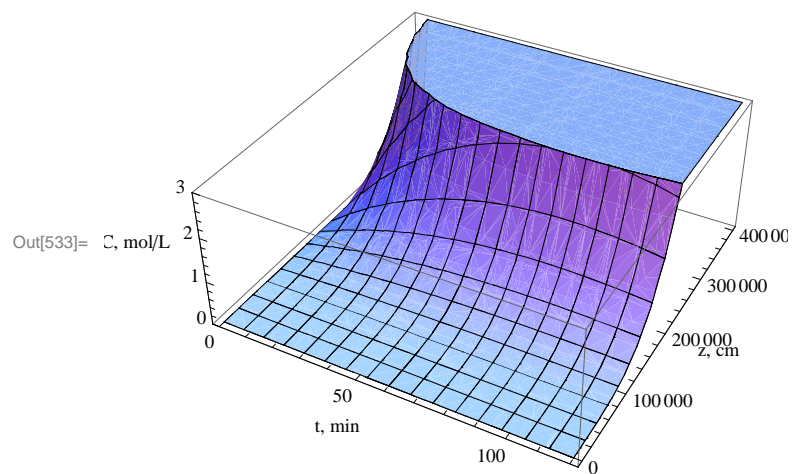
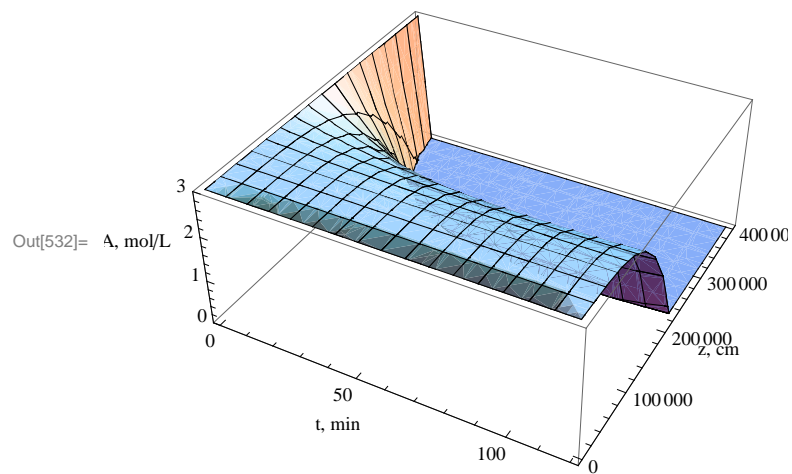
	Ecuación
Materia (A)	$CA^{(0,1)}[z,t] + \frac{4000}{3} CA^{(1,0)}[z,t] ==$ $-4.85154 \times 10^8 e^{-\frac{7550.}{T[z,t]}} CA[z,t]$
Materia (B)	$CB^{(0,1)}[z,t] + \frac{4000}{3} CB^{(1,0)}[z,t] ==$ $4.85154 \times 10^8 e^{-\frac{7550.}{T[z,t]}} CA[z,t] -$ $60632. e^{-\frac{7450.}{T[z,t]}} CB[z,t]$
Energía	$T^{(0,1)}[z,t] + \frac{4000}{3} T^{(1,0)}[z,t] ==$ $2.42577 \times 10^{10} e^{-\frac{7550.}{T[z,t]}} CA[z,t] +$ $3.47732 \times 10^6 e^{-\frac{7450.}{T[z,t]}} CB[z,t]$
Conds. iniciales	$CA[z,0] == 3$
Conds. iniciales	$CB[z,0] == 0$
Conds. iniciales	$T[z,0] == 325$
Conds. frontera	$CA[0,t] == 3$
Conds. frontera	$CB[0,t] == 0$
Conds. frontera	$T[0,t] == 325$

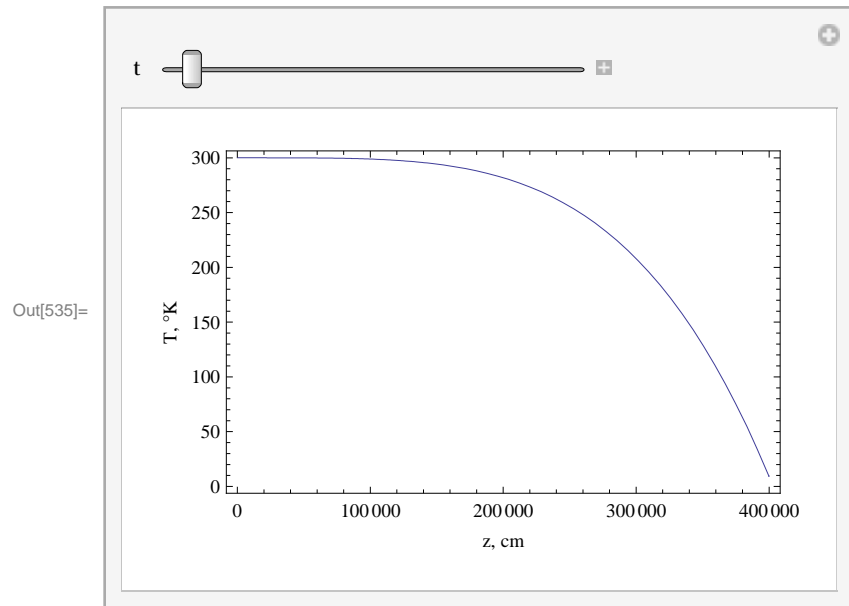
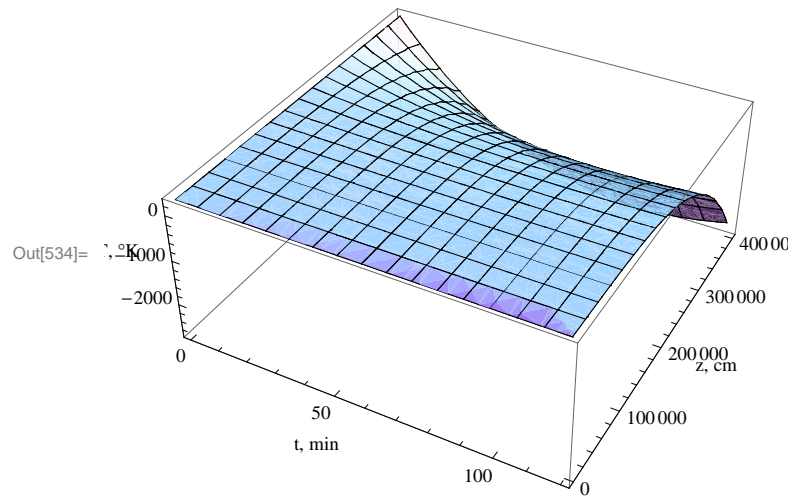
Out[528]= Estado Estacionario





Out[531]= Estado no Estacionario





Out[536]=

