# Problema 1.

Reactor: CSTR

Reacciones: 1. Simultáneas ,

Operación:

* a.1 Isotérmico Estacionario
* a.2 Isotérmico No estacionario
* b.1 Adiabático Estacionario
* b.2 Adiabático No Estacionario
* c.1 No isotérmico, no adiabático Estacionario

## Contents

* [1. Reactor](#2)
* [1.1. CSTR](#3)
* [1.2. Ecuaciones de conservación](#4)
* [2. Reacción](#6)
* [2.1. Estequiometría](#7)
* [2.2. Termodinámica](#8)
* [2.3. Cinética](#9)
* [2.3.1. Rapidez de generación / consumo de componentes](#10)
* [2.3.2. Rapidez de generación de calor de reacción](#11)
* [2.3.3. Constantes de rapidez](#12)
* [2.4. Transferencia de calor con el fluido de enfriamiento](#13)
* [3. Modelo matemático](#14)
* [3.1. Ecuaciones](#15)
* [3.2. Casos del modelo](#16)
* [3.2.a.1. Estado estacionario, isotérmico](#17)
* [3.2.a.1.1. Variables independientes](#18)
* [3.2.a.1.2. Variables dependientes (Valores de salida)](#19)
* [3.2.a.2 Estado no-estacionario, isotérmico](#20)
* [3.2.a.2.1. Variables independientes](#21)
* [3.2.a.2.2. Variables dependientes](#22)
* [3.2.b.1. Estado estacionario, adiabático](#23)
* [3.2.b.1.1. Variables independientes](#24)
* [3.2.b.1.2. Variables dependientes](#25)
* [3.2.b.2. Estado no-estacionario, adiabático](#26)
* [3.2.b.2.1. Variables independientes](#27)
* [3.2.b.2.2. Variables dependientes](#28)
* [3.2.c.1. Estado estacionario, no-isotérmico, no-adiabático](#29)
* [3.2.c.1.1. Variables independientes](#30)
* [3.2.c.1.2. Variables dependientes](#31)
* [4. Solución del Modelo](#32)
* [4.1. Diarama de flujo simplificado](#33)
* [4.2. Diagrama de flujo completo](#34)
* [4.3. Código en Matlab](#35)
* [4.4. Análisis de cada caso](#36)
* [4.4.a.1. Isotérmico Estacionario](#37)
* [4.4.a.2. Isotérmico No-Estacionario](#42)
* [4.4.b.1. Adiabático Estacionario](#44)
* [4.4.b.2. Adiabático No-Estacionario](#46)
* [4.4.c.1. No-Isotérmico, No-Adiabático Estacionario](#48)

## 1. Reactor

## 1.1. CSTR

## 1.2. Ecuaciones de conservación

...(Materia)

...(Materia)

...(Materia)

...(Energía Térmica)

(componentes A,B,C)

## 2. Reacción

, Exotérmica, 1er orden

, Exotérmica, 1er orden

## 2.1. Estequiometría

...(1), exotérmica, de 1er orden

...(2), exotérmica, de 1er orden

Matriz de coeficientes estequiométricos:

## 2.2. Termodinámica

...(1), ...(Exotérmica)

...(Exotérmica)

...(2), ...(Exotérmica)

...(Exotérmica)

## 2.3. Cinética

, de 1er orden

...rapidez de reacción para reacción 1

, de 1er orden

...rapidez de reacción para reacción 2

Matriz de órdenes de reacción:

## 2.3.1. Rapidez de generación / consumo de componentes

* Consumo de A
* Generación de B
* Generación de C

## 2.3.2. Rapidez de generación de calor de reacción

## 2.3.3. Constantes de rapidez

Expr. de Arrhenius

...Constante de rapidez de primer orden para reacción 1.

...Constante de rapidez de primer orden para reacción 2.

**NOTA:**

Se está utilizando la expresión de Arrhenius en una forma útil para referirla a diferentes temperaturas. Su forma más utilizada es:

A una temperatura de referencia :

La conversión entre estas formas entonces es la siguiente:

## 2.4. Transferencia de calor con el fluido de enfriamiento

## 3. Modelo matemático

Juntando los puntos anteriores.

## 3.1. Ecuaciones

Ec. 1.

Ec. 2.

Ec. 3.

Ec. 4.

* Funcionalidades con temperatura

## 3.2. Casos del modelo

## 3.2.a.1. Estado estacionario, isotérmico

En este caso el reactor ha alcanzando el estado estacionario sin haber cambiado su temperatura desde el inicio, de manera que . En el estado estacionario el balance de energía implica que será necesario extraer la cantidad de calor (en reacciones exotérmicas). Los parámetros de condiciones iniciales con las que se inició el reactor al tiempo t=0 salvo temperatura no juegan un papel en la solución, ni tampoco cómo fueron variando a lo largo del tiempo. El modelo únicamente expone las condiciones en estado estacionario.

Ec. 1.

Ec. 2.

Ec. 3.

Ec. 4.

## 3.2.a.1.1. Variables independientes

Especificar:

* Condiciones de alimentación:
* Parámetros del reactor:
* Parámetros de intercambio de calor con el fluido de enfriamiento:
* Parámetros **termodinámicos** de la reacción:
* Parámetros **cinéticos** de la reacción:

## 3.2.a.1.2. Variables dependientes (Valores de salida)

, un valor único para cada una

## 3.2.a.2 Estado no-estacionario, isotérmico

En este caso no hay variación de la temperatura con el tiempo, por lo que , y . Siendo un parámetro a especificar la temperatura inicial, el balance de energía requerirá la cantidad de calor removida que es función del tiempo , la cuál será una variable dependiente ya que se calcula en base a la temperatura inicial seleccionada. El flujo del fluido de enfriamiento tendría que controlarse para que pudiera cumplir exactamente con este perfil de calor transferido y mantener la temperatura sin cambiar mientras se alcanza el estado estacionario.

Ec. 1.

Ec. 2.

Ec. 3.

Ec. 4.

## 3.2.a.2.1. Variables independientes

Para los perfiles de:

* Tiempo:

Especificar:

* Condiciones de alimentación:
* Condiciones iniciales:
* Parámetros del reactor:
* Parámetros **termodinámicos** de la reacción:
* Parámetros **cinéticos** de la reacción:

## 3.2.a.2.2. Variables dependientes

Perfiles: ,

## 3.2.b.1. Estado estacionario, adiabático

En este caso no se extrae calor del reactor en estado estacionario , de manera que todo el calor de despedido por reacción se dirige a aumentar la temperatura (para reacciones exotérmicas). Esta temperatura estará dada por las condiciones de alimentación y las condiciones del reactor, parámetros cinéticos, etc. pero no intervienen condiciones iniciales ni a lo largo del tiempo.

El sistema de ecuaciones no tiene grados de libertad pero puesto que es no lineal, puede haber más de un conjunto de valores que satisfacen las ecuaciones 1-4. Estos representan los diferentes estados estacionarios posibles.

Ec. 1.

Ec. 2.

Ec. 3.

Ec. 4.

## 3.2.b.1.1. Variables independientes

Variar:

* Temperatura de salida:

Especificar:

* Condiciones de alimentación:
* Parámetros del reactor:
* Parámetros de intercambio de calor con el fluido de enfriamiento: (Cantidad de calor intercambiada: )
* Parámetros **termodinámicos** de la reacción:
* Parámetros **cinéticos** de la reacción:

## 3.2.b.1.2. Variables dependientes

, , para los estados estacionarios del sistema, aquéllos para los cuáles el (calor generado por reacción) = (calor removido por convección)+0, y la gráfica de qr,(qi+qs) vs T tiene cruce de las dos líneas.

## 3.2.b.2. Estado no-estacionario, adiabático

En este caso el calor liberado por la reacción únicamente irá dirigido a aumentar la temperatura de la mezcla en el reactor a lo largo del tiempo (para reacciones exotérmicas), de manera que

Ec. 1.

Ec. 2.

Ec. 3.

Ec. 4.

## 3.2.b.2.1. Variables independientes

Para los perfiles de:

* Tiempo:

Especificar:

* Condiciones de alimentación:
* Condiciones iniciales:
* Parámetros del reactor:
* Parámetros de intercambio de calor con el fluido de enfriamiento: (Cantidad de calor intercambiada: )
* Parámetros **termodinámicos** de la reacción:
* Parámetros **cinéticos** de la reacción:

## 3.2.b.2.2. Variables dependientes

Perfiles: ,

## 3.2.c.1. Estado estacionario, no-isotérmico, no-adiabático

En este caso se tiene un sistema igual que el del reactor adiabático pero . Los parámetros de condiciones iniciales con las que se inició el reactor al tiempo t=0 no juegan un papel en la solución, ni tampoco cómo fueron variando a lo largo del tiempo. El modelo únicamente expone las condiciones en estado estacionario.

El sistema de ecuaciones no tiene grados de libertad pero puesto que es no lineal, puede haber más de un conjunto de valores que satisfacen las ecuaciones 1-4. Estos representan los diferentes estados estacionarios posibles.

Ec. 1.

Ec. 2.

Ec. 3.

Ec. 4.

## 3.2.c.1.1. Variables independientes

Variar:

* Temperatura:

Especificar:

* Condiciones de alimentación:
* Parámetros del reactor:
* Parámetros de intercambio de calor con el fluido de enfriamiento:
* Parámetros **termodinámicos** de la reacción:
* Parámetros **cinéticos** de la reacción:

## 3.2.c.1.2. Variables dependientes

en un estado estacionario dado.

## 4. Solución del Modelo

## 4.1. Diarama de flujo simplificado

[DF\_Prob\_01.pdf](file:///C:\Documents%20and%20Settings\Yo\My%20Documents\FQ\Tesis\Diagramas_de_flujo\DF_Prob_01.pdf)

## 4.2. Diagrama de flujo completo

## 4.3. Código en Matlab

[CÓDIGO](file:///C:\Documents%20and%20Settings\Yo\My%20Documents\FQ\Tesis\html\gui4.html)

## 4.4. Análisis de cada caso

* Datos

Se analiza cada caso con ayuda del programa, con los datos a continuación (ref. *[Fogler, H. Scott; Elementos de ingeniería de las reacciones químicas; Cuarta edición;Pearson Education: México;2008]* Ejemplo 8-11):

...(1), ...(Exotérmica)

...(2), ...(Exotérmica)

a 300°K con

a 500°K con

...(primer orden)

...(primer orden)

, , ,

* Conversiones

Se convierten los datos en datos que se pueden insertar en el programa, cambiando unidades, etc.

, se supone constante,

Sup.

Ent.

sup. , entonces

* Otros datos para el modelo.

Expresión de calor removido en el intercambio de calor:

Fluido de intercambio de calor: Agua, , ,

## 4.4.a.1. Isotérmico Estacionario

Se ponen los siguientes datos en el programa:

El resultado es el siguiente:

Se observa en las gráficas un estado estacionario único, que corresponde con el único estado estacionario posible si el modelo del intercambiador responde a la ecuación , y con temperatura cercana a la inicial propuesta de 283°K. Puesto que el reactor es isotérmico, la temperatura final será igual que la inicial, por lo que la temperatura inicial que se propuso de 283°K se substituyó por la temperatura del estado estacionario con este intercambiador de calor, que es 310.1°K como se lee en la gráfica. Este punto se puede precisar con ayuda del botón "Data cursor", que se ve así:

Esto permite seleccionar un punto y mostrar sus coordenadas, por ejemplo:

## 4.4.a.2. Isotérmico No-Estacionario

Se ponen los mismos datos en el programa, que 4.4.a.1, pero seleccionando la opción de "No-Estacionario":

El resultado es el siguiente:

## 4.4.b.1. Adiabático Estacionario

Se ponen los sig. Datos, donde la diferencia es que U=0Btu/(h ft2 °F):

El resultado es el siguiente:

## 4.4.b.2. Adiabático No-Estacionario

Se ponen los mismos datos en el programa, que 4.4.b.1, pero seleccionando la opción de "No-Estacionario":

El resultado es el siguiente:

## 4.4.c.1. No-Isotérmico, No-Adiabático Estacionario

Se ponen los sig. Datos, y se selecciona el modo "Estacionario":

El resultado es el siguiente:

Published with MATLAB® 7.9