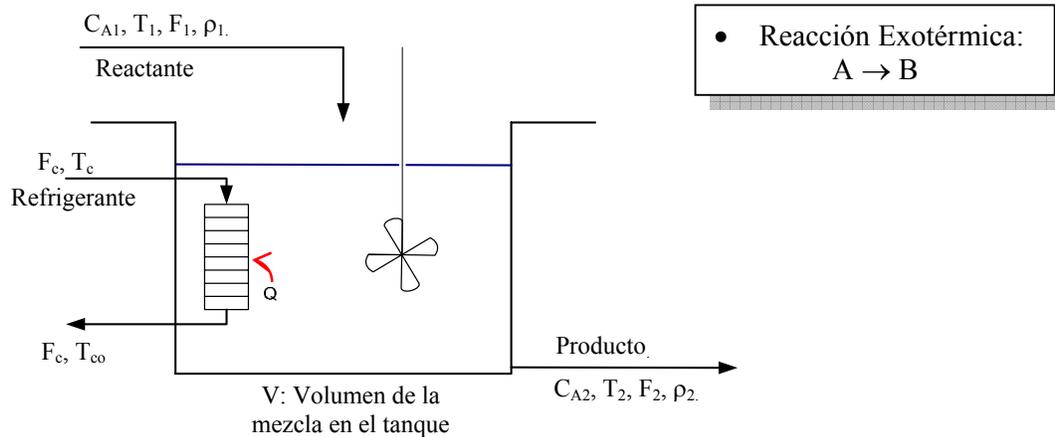


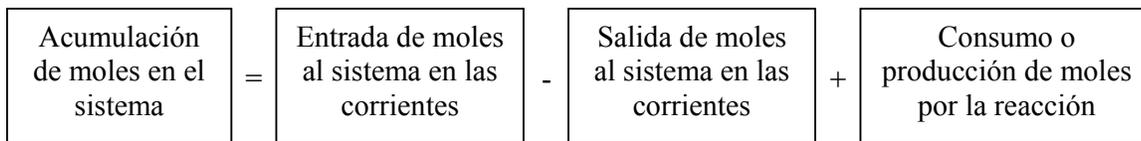
**Modelo para un Reactor Continuo tipo Tanque Agitado (CSTR)**



- Balance de Materia Total:

Vamos a realizar el balance en base molar. Entonces, los moles NO SE CONSERVAN, debido a la reacción química.

Principio de conservación:



Para éste caso:

$$\frac{\delta \rho V}{\delta t} = \rho_1 F_1 - \rho_2 F_2 \pm \{cero\}$$

El número de moles totales es el mismo por la estequiometría 1 a 1

- Balance de Materia por Componente:

Para la especie A se aplica el principio de conservación y se toma en cuenta la estequiometría:



Para éste caso:

$$\frac{\delta C_A V}{\delta t} = C_{A1} F_1 - C_{A2} F_2 - rV$$

r: Velocidad de reacción por unidad de volumen  $\frac{(\text{mol})}{(\text{tiempo} \cdot \text{Volumen})}$

Considerando volumen constante ( $F_1 = F_2$ ) y tanque perfectamente agitado:

$$V \frac{dC_{A_2}}{dt} = F_1 (C_{A_1} - C_{A_2}) - rV$$

- Balance de Energía:

Suponemos que la reacción sucede en fase líquida, entonces,  $U \approx H$

La entalpía deberá considerarse con estado de referencia de energías de formación estándar a  $T$  y  $P_{ref}$ , a la composición de la mezcla para que sea aplicable a sistemas reaccionantes.

$$h = \Delta h_f^\circ + \int_{T_{ref}}^T Cp dT$$

Entalpía de formación  
estándar a  $T$  y  $P_{ref}$ .

Entonces, para este caso, siendo el sistema el volumen de mezcla reaccionante en el reactor:

$$\frac{dH_{sis}}{dt} = \rho_1 F_1 h_1 - \rho_2 F_2 h_2 - Q$$

Ahora bien, el cambio en la entalpía del sistema se debe a tres causas: cambio en la temperatura, cambio en las moles de A y cambio en las moles de B.

Entonces:

$$H_{sis} = H(T, N_A, N_B)$$

Calculando la diferencial total por la regla de la cadena:

$$\frac{dH_{sis}}{dt} = \left( \frac{\partial H_{sis}}{\partial T} \right)_{N_A, N_B} \frac{dT}{dt} + \left( \frac{\partial H_{sis}}{\partial N_A} \right)_{N_B, T} \frac{dN_A}{dt} + \left( \frac{\partial H_{sis}}{\partial N_B} \right)_{N_A, T} \frac{dN_B}{dt}$$

Luego:

$$\frac{\partial H_{sis}}{\partial T} = \frac{\partial \rho V \int_{T_{ref}}^T Cp dT}{\partial T} = \rho V Cp$$

$$\left( \frac{\partial H_{sis}}{\partial N_A} \right)_{N_B, T} = \bar{H}_A \quad \text{“Entalpía molar parcial de A”}$$

$$\left( \frac{\partial H_{sis}}{\partial N_B} \right)_{N_A, T} = \bar{H}_B \quad \text{“Entalpía molar parcial de B”}$$

Además del balance de materia por componente:

$$\frac{dN_A}{dt} = V \frac{dC_{A_2}}{dt} = C_{A1} F_1 - C_{A2} F_2 - rV$$

$$\frac{dN_B}{dt} = V \frac{dC_{B_2}}{dt} = C_{B_1} F_1 - C_{B_2} F_2 + rV$$

Se hace cero por que NO HAY B en la alimentación

Ojo: El signo (+) es porque la especie aparece

Entonces, substituyendo en la expansión:

$$\frac{dH_{sis}}{dt} = \rho V C_p \frac{dT}{dt} + \bar{H}_A [C_{A_1} F_1 - C_{A_2} F_2 - rV] + \bar{H}_B [-C_{B_2} F_2 + rV]$$

Igualando esta expansión con la ecuación de balance de energía:

$$\begin{aligned} \frac{dH_{sis}}{dt} &= \rho V C_p \frac{dT}{dt} + \bar{H}_A [C_{A_1} F_1 - C_{A_2} F_2 - rV] + \bar{H}_B [-C_{B_2} F_2 + rV] \\ &= \rho_1 F_1 h_1 - \rho_2 F_2 h_2 - Q \end{aligned}$$

Reconociendo que:

$$\bar{H}_A \equiv \Delta h_{f_A}^\circ \text{ y } \bar{H}_B \equiv \Delta h_{f_B}^\circ$$

Y que:

$$C_A = \chi_A \rho \text{ y } C_B = \chi_B \rho$$

Donde  $\chi_i$  = fracción mol de i

Entonces:

$$F_1 \rho_1 h_1 = F_1 [\rho_1 \Delta h_{f_1}^\circ + \rho_1 C_{p1} (T_1 - T)]$$

$$= F_1 [C_{A_1} \bar{H}_{A_1} + \rho_1 C_{p1} (T_1 - T)]$$

Como  $\chi_A = 1$ ;  $\rho_1 \equiv C_{A_1}$

$$F_2 \rho_2 h_2 = F_2 [\rho_2 (\chi_A H_A + \chi_B H_B) + \rho_2 C_{p2} (T_2 - T)]$$

Haciendo  $T \equiv T_2$  para simplificar la expresión:

$$F_2 \rho_2 h_2 = F_2 [\rho_2 \chi_A \bar{H}_A + \rho_2 \chi_B \bar{H}_B]$$

$$F_2 \rho_2 h_2 = F_2 [C_{A_2} \bar{H}_A + C_{B_2} \bar{H}_B]$$

Substituyendo estas identidades en la ecuación de energía; y resolviendo para  $T_2$ :

$$\begin{aligned} \rho V C_p \frac{dT}{dt} &= -\bar{H}_A C_{A_1} F_1 + \bar{H}_A C_{A_2} F_2 + \bar{H}_A rV + \bar{H}_B C_{B_1} F_2 - \bar{H}_B rV + \bar{H}_A C_{A_1} F_1 \\ &\quad + F_1 \rho_1 C_{p1} (T_1 - T_2) - \bar{H}_A C_{A_2} F_2 - \bar{H}_B C_{B_2} F_2 - Q \end{aligned}$$

Además definiendo:

$$(\text{Calor de Reacción a } T_2) = \left( \bar{H}_A - \bar{H}_B \right) = -\Delta H_r$$

Así como  $\rho \equiv \rho_1$  (despreciando el cambio de densidad) y  $C_p \equiv C_{p1}$  (despreciando el cambio en la capacidad calorífica)

Resulta:

$$V \frac{dT_2}{dt} = F_1(T_1 - T_2) + \frac{(-\Delta H_r)rV}{\rho C_p} - \frac{Q}{\rho C_p}$$

Considerando que la cinética de la reacción sea de primer orden:

$$r = \kappa_0 e^{\frac{-\Delta G}{RT}} C_A$$

Donde:

$\Delta G$ : Energía de Gibas de reacción a  $T_2$ .

R: Constante de los gases.

$\kappa_0$ : Factor pre exponencial cinético.

También se tomará la ecuación constitutiva:

$$Q = UA_t(T_2 - T_C)$$

Suponiendo  $T_E = T_{Co} = T_C$

Entonces resulta que el modelo del reactor es:

- Balance de Materia de A:

$$V \frac{dC_{A2}}{dt} = F_1(C_{A1} - C_{A2}) - \kappa_0 e^{\frac{-\Delta G}{RT_2}} C_{A2}$$

- Balance de Energía:

$$V \frac{dT_2}{dt} = F_1(T_1 - T_2) + \frac{(-\Delta H_r)V}{\rho C_p} \kappa_0 e^{\frac{-\Delta G}{RT_2}} C_{A2} - \frac{UA}{\rho C_p} (T_2 - T_C)$$

Tomando variables de desviación y considerando que  $F_1$  no cambia en el tiempo se tiene que:

$$\frac{V}{F_1} \frac{dC'_{A2}}{dt} = C'_{A1} - C'_{A2} - \kappa_0 \left[ e^{\frac{-\Delta G}{RT_2}} C_{A2} - e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}} C_{A2s} \right]$$

Término no lineal

$$\frac{V}{F_1} \frac{dT'_2}{dt} = T'_1 - T'_2 + \frac{(-\Delta H_r)V\kappa_0}{\rho C_p F_1} \left[ e^{\frac{-\Delta G}{RT_2}} C_{A2} - e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}} C_{A2s} \right] - \frac{UA_t}{\rho C_p} (T'_2 - T'_C)$$

Linealizando el término no-lineal:

$$\left[ e^{\frac{-\Delta G}{RT_2}} C_{A2} - e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}} C_{A2s} \right] = \frac{\Delta G}{RT_{2s}^2} e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}} C_{A2s} * T'_2 + e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}} C'_{A2}$$

(Queda al lector la oportunidad de demostrar ésta ecuación)

Entonces el modelo que resulta es el siguiente:

$$\begin{cases} \tau_{pa} \frac{dC'_{A2}}{dt} + C'_{A2} = K_{pa} - K_{pb} T'_2 \\ \tau_{pb} \frac{dT'_2}{dt} + T'_2 = K_{pc} T'_1 + K_{pd} C'_{A2} + K_{pe} T'_C \end{cases}$$

Donde:

$$\tau_{pa} = \frac{V}{F_1 \left( 1 + \kappa_0 e^{\frac{-\Delta G}{RT_2}} \right)} ; K_{pa} = \frac{1}{1 + \kappa_0 e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}}}$$

$$K_{pb} = \frac{\kappa_0 \frac{\Delta G}{RT_{2s}} e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}}}{1 + \kappa_0 e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}}} ; K_{pc} = \frac{1}{1 + \frac{UA}{\rho Cp} - \left( \frac{(-\Delta Hr) V \kappa_0}{\rho Cp F_1} \right) \left( \frac{\Delta G C_{A2s}}{RT_{2s}^2} e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}} \right)}$$

$$K_{pd} = \frac{\left( \frac{(-\Delta Hr) V \kappa_0}{\rho Cp F_1} \right) e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}}}{1 + \frac{UA}{\rho Cp} - \left( \frac{(-\Delta Hr) V \kappa_0}{\rho Cp F_1} \right) \left( \frac{\Delta G C_{A2s}}{RT_{2s}^2} e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}} \right)}$$

$$K_{pe} = \frac{\left( \frac{UA}{\rho Cp} \right)}{1 + \frac{UA}{\rho Cp} - \left( \frac{(-\Delta Hr) V \kappa_0}{\rho Cp F_1} \right) \left( \frac{\Delta G C_{A2s}}{RT_{2s}^2} e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}} \right)}$$

$$\tau_{pb} = \frac{V}{F_1 \left[ 1 + \frac{UA}{\rho Cp} - \left( \frac{(-\Delta Hr) V \kappa_0}{\rho Cp F_1} \right) \left( \frac{\Delta G C_{A2s}}{RT_{2s}^2} e^{\frac{-\Delta G}{RT_{2s}}} \right) \right]}$$