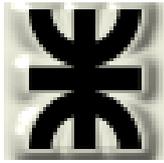


Integración IV



Trabajo práctico N° 6: Simulación de equipos con reacciones químicas con HYSYS

1. TIPOS DE REACTORES EN HYSYS

En HYSYS hay dos clases de reactores:

- Ideales
- Generales.

1.1 REACTORES IDEALES

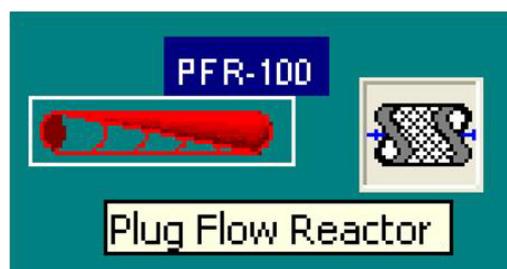
Este tipo de reactores se puede asociar únicamente con cualquiera de los modelos de reacción que emplean parámetros cinéticos.



1.1.1 PFR

El PFR (Plug Flow Reactor, or Tubular Reactor) generalmente consiste en un banco de tubos. Se supone flujo tapón, lo que implica que el flujo en la dirección radial es isotrópico (sin gradiente de masa o energía). Se desprecia el flujo radial.

Cuando los reactivos atraviesan la longitud del reactor PFR, son consumidos continuamente y hay una variación axial de concentración.



Para obtener la solución del PFR y los perfiles a través de la longitud del reactor, este se divide en varios subvolúmenes (por defecto 20 subvolúmenes en hysys).

Las EDO's del PFR son una adición reciente a los paquetes de simulación y son resueltas mediante la división del volumen en pequeños segmentos y encontrar una solución secuencial para cada volumen.

Compuesto por una serie de tubos empacados con catalizador y rodeados por una coraza con fluido térmico, la principal aplicación se presenta en la simulación de sistemas reactivos en lecho catalítico.

Se debe especificar en un PFR

- Parámetros geométricos (número de tubos, diámetro y longitud de los tubos, diámetros y esfericidad del catalizador, etc..)
- Características del fluido térmico (flujo, temperaturas de entrada y salida, etc..) ó Temperatura de salida de sus productos ó la cantidad de calor que transfiere
- Presión de salida de los productos ó la caída de presión en su interior.
- Reacción y ley de velocidad

Dimensionamiento

- Para dimensionar un PFR se deben especificar dos de los siguientes parámetros: Volumen Total, Longitud y diámetro. El tercer valor se calcula a partir de los dos especificados.
- Especifique el número total de tubos en el PFR.
- En el campo Wall Thickness especificar el espesor del tubo.
- Especifique la fracción de espacio vacío (Void fraction) en el PFR. Si esta fracción es menor a 1 se requiere especificar los datos del catalizador . El espacio vacío del reactor es calculado a partir del volumen y de la fracción de espacio vacío.

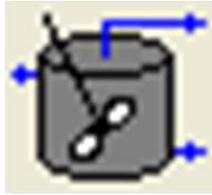
Notas

- Si no se especifica una corriente de energía la operación se considera adiabática.
- Si selecciona el boton Ergun Equation para un PFR sin catalizador sólido, Hysys fija la caída de presión en cero.
- Active el checkbox Single Phase cuando la reacción se lleva a cabo en una sola fase. Si esta opción esta inactiva Hysys considera que la reacción se lleva a cabo en fase vapor-líquido.

1.1.2 CSTR

El CSTR calcula las condiciones de las corrientes de salida del reactor considerando que está perfectamente mezclado y que la concentración en cada punto del reactor es la misma.

Se puede emplear para reacciones en fase líquida o gaseosa, pero debe especificarse.



El modelo CSTR es un modelo algebraico estándar que ha estado en los paquetes de simulación por muchos años.

Para especificar el reactor es necesario asociarle una o varias reacciones y especificar:

- Volumen del reactor
- Nivel de líquido
- Temperatura de salida de productos ó calor transferido
- Presión de salida de los productos ó la caída de presión en su interior.
- La estequiometría de las reacciones
- Los parámetros de la velocidad de reacción de cada reacción.

Dimensionamiento

- Se debe especificar por lo menos una de las siguientes medidas: volumen, diámetro o altura (altura se especifica en tanque horizontales).

Notas

- Si se especifica el volumen cilíndrico del tanque entonces por defecto la relación Longitud / Diámetro del reactor CSTR es 3:2.
- La altura del líquido en un tanque cilíndrico vertical varia linealmente con el volumen del líquido.
- La relación entre la altura y el volumen del líquido no es lineal en tanques horizontales cilíndricos y esféricos.

1.2 REACTORES GENERALES

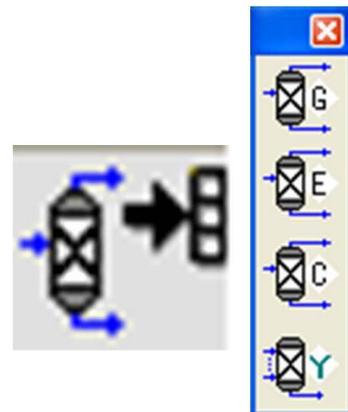
- Estos reactores trabajan con modelos de reacciones que no emplean parámetros cinéticos.
- Los Reactores generales son fundamentalmente un separador de fases al que se le asocia un conjunto de reacciones.
- Este tipo de reactores se puede asociar con cualquiera de los modelos de reacción presentados.

Para especificarlos es necesario asociarle una o varias reacciones e indicar:

- Volumen del recipiente
- Nivel de líquido
- Temperatura de salida de productos ó el calor que transfiere.
- Presión de salida de productos ó la caída de presión en su interior

Hysys tiene cuatro tipos de reactores no cinéticos que aparecen en la paleta de objetos y que se despliegan de la opción Reactores Generales:

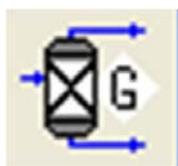
- Gibbs Reactor
- Equilibrium Reactor
- Conversion Reactor
- Yield Shift Reactor (de rendimiento)



1.2.1 REACTOR DE GIBBS

Los Reactores de Gibbs calculan la composición de equilibrio de la corriente de salida minimizando la energía libre de Gibbs de la corriente de entrada. Solo se requiere especificar la estequiometría.

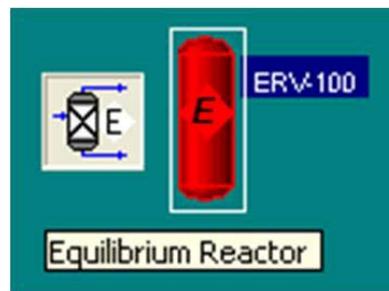
Al minimizar la energía de Gibbs se producen la reacción más probable. Este es un proceso espontáneo en la naturaleza.



- Con el Reactor de Gibbs se obtienen resultados muy parecidos que con un Reactor de Equilibrio si se suministra información correcta pero en el reactor de Gibbs no se requiere una expresión de K_{eq} en función de la temperatura. En este caso solo los reactivos reaccionan y no los productos (en la reacción inversa).
- Los Reactores de Gibbs no requieren de un set de reacciones.

1.2.2 REACTOR DE EQUILIBRIO

En los Reactores de Equilibrio se determina la composición de la corriente de salida especificando la estequiometría de las reacciones que ocurren y los valores de la constante de equilibrio o su dependencia de la temperatura para cada reacción

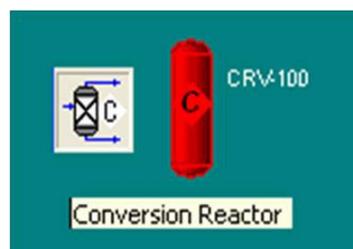


- Los Reactores de Equilibrio se pueden asociar únicamente con modelos de reacción de equilibrio.
- Hysys tiene varias reacciones de equilibrio en una lista con todos los parámetros necesarios.

1.2.3 REACTOR DE CONVERSIÓN

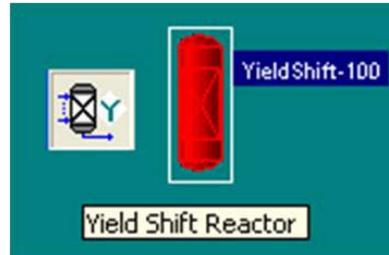
Este tipo de reactores se puede asociar únicamente con modelos de reacción de conversión.

Se debe especificar la estequiometría de todas las reacciones que se lleven a cabo y la conversión del componente base, el Reactor de Conversión calcula las composiciones de la corriente de salida.



1.2.4 YIELD SHIFT REACTOR (NO INCLUIDO EN HYSYS® 3.2)

Los reactores de rendimiento son para modelar reactores usando tablas de datos para desarrollar cálculos. Esta unidad puede usarse para reactores complejos que no tienen disponible un modelo o los que existen son de alto costo.



2. REACCIONES QUÍMICAS Y REACTORES EN HYSYS

| Reactor en HYSYS | Tipos de Reacción |
|---------------------|---|
| Conversion Reactor | Conversión % ($x\% = C_0 + C_1 T + C_2 T^2$) |
| PFR | Simple Rate, Heterogeneous Catalytic, Kinetic |
| CSTR | Simple Rate, Heterogeneous Catalytic, Kinetic |
| Equilibrium Reactor | $K_{eq} = f(T)$; El equilibrio se basa en la estequiometría de la reacción K_{eq} = Estimada a partir de la Energía Libre de Gibbs K_{eq} = Especificada como una constante o desde una tabla de valores |
| Gibbs | Minimización de la Energía Libre de Gibbs de todos los componentes especificados. Hay dos opciones: 1) No es requerida la estequiometría de la reacción 2) La estequiometría de la reacción es dada |

3. EJERCITACIÓN DE REACTORES CON HYSYS

3.1 SIMULACIÓN DE UN PFR ADIABÁTICO

El Estireno es un monómero usado en la producción de diferentes plásticos. El estireno se produce a partir de la deshidrogenación de etilbenceno:



En este reactor no consideraremos el hecho de que la reacción anterior es una reacción de equilibrio y se modelará este sistema usando la expresión de Velocidad de reacción (**Kinetic Rate**):

$$r_{EB} = -4.24 \times 10^3 \frac{\text{mol EB}}{L_{\text{reactor}} \text{ kPa s}} p_{EB} \exp \left[- \frac{21708 \text{ cal/mol}}{\left(1.987 \frac{\text{cal}}{\text{mol K}} \right) T} \right]$$

Notar que la velocidad de reacción tiene unidades (gr/lit-s) y que el término de la concentración es presión parcial con unidades de KPa. E= 90826 Kjoules/Kmol

Inicie un nuevo caso con los siguientes componentes:

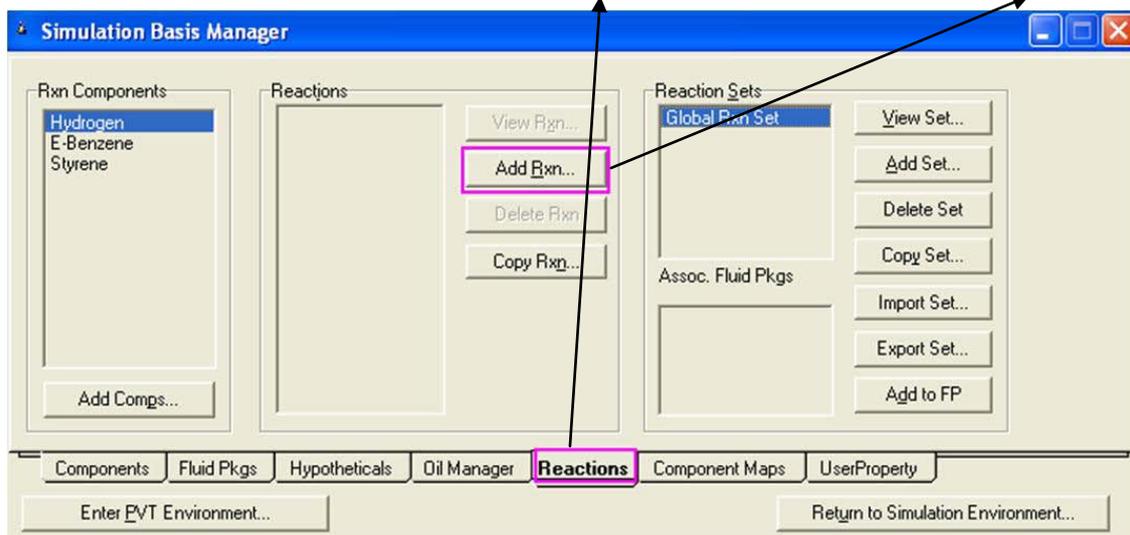
Etilbenceno (E-Benzene)

Estireno (Styrene)

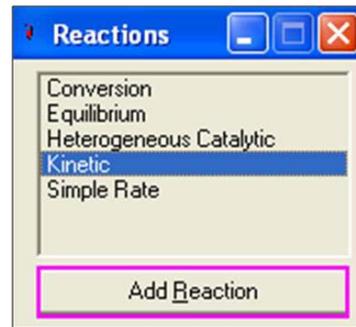
Hidrógeno (Hydrogen)

Como paquete de fluidos asóciele Peng-Robinson.

Para agregar la reacción haga clic en la pestaña “Reactions”, luego en el botón “Add Rxn..)



Luego se elige tipo “Kinetic”



Completar los formularios siguientes con los valores adecuados.

| Component | Mole Wt. | Stoich Coeff | Fwd Order | Rev Order |
|-------------|----------|--------------|-----------|-----------|
| E-Benzene | 106.166 | -1.000 | 1.00 | 0.00 |
| Hydrogen | 2.016 | 1.000 | 0.00 | 1.00 |
| Styrene | 104.152 | 1.000 | 0.00 | 1.00 |
| **Add Comp* | | | | |

Balance Error: 0.00000
Reaction Heat (25 C): 1.2e+05 kJ/kgmole

Stoichiometry Basis Parameters

Delete Name: reaccion kinetic Not Ready

Basis

Basis: Partial Pres
Base Component: E-Benzene
Rxn Phase: VapourPhase
Min. Temperature: -273.1 C
Max Temperature: 3000 C
Basis Units: kPa
Rate Units: gmole/L-s

Stoichiometry **Basis** Parameters

Delete Name: reaccion kinetic Not Ready

Kinetic Reaction: Rxn-1

Forward Reaction

| | |
|---|---------|
| A | 4240.0 |
| E | 90826 |
| β | <empty> |

Reverse Reaction

| | |
|----|---------|
| A' | <empty> |
| E' | <empty> |
| β' | <empty> |

Equation Help

$$r = k \cdot f(\text{Basis}) - k' \cdot f'(\text{Basis})$$

$$k = A \cdot \exp \left\{ -E / RT \right\} \cdot T^{\beta}$$

$$k' = A' \cdot \exp \left\{ -E' / RT \right\} \cdot T^{\beta'}$$

T in Kelvin

Stoichiometry | Basis | **Parameters**

Delete | Name: Rxn-1 | **Ready**

Cerrar los formularios correspondientes a las reacciones y volver a “Simulation Basis Manager” y agregar un set de reacciones haciendo clic en “Add Set...”

Simulation Basis Manager

Rxn Components: Hydrogen, E-Benzene, Styrene

Reactions: reaccion kinetic

Reaction Sets: Global Rxn Set

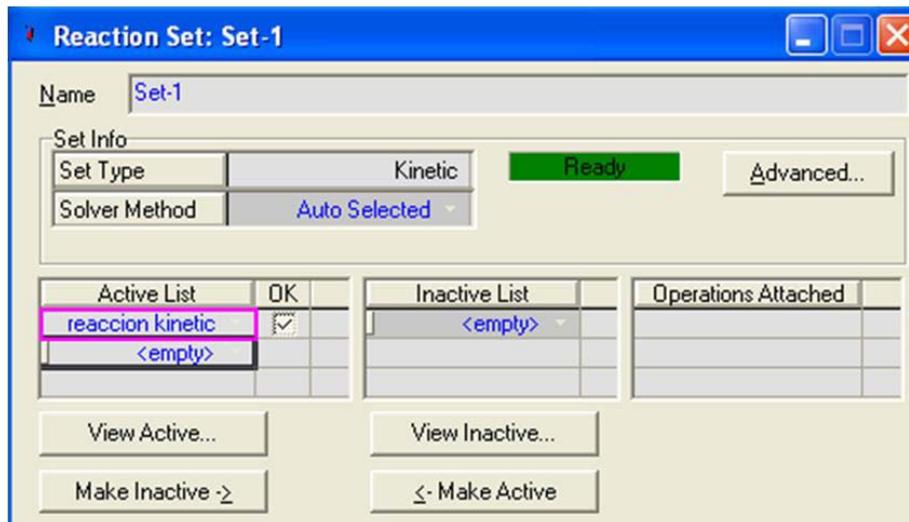
Buttons: View Rxn..., Add Rxn..., Delete Rxn, Copy Rxn..., View Set..., **Add Set...**, Delete Set, Copy Set..., Import Set..., Export Set..., Add to FP

Components | Fluid Pkgs | Hypotheticals | Oil Manager | **Reactions** | Component Maps | UserProperty

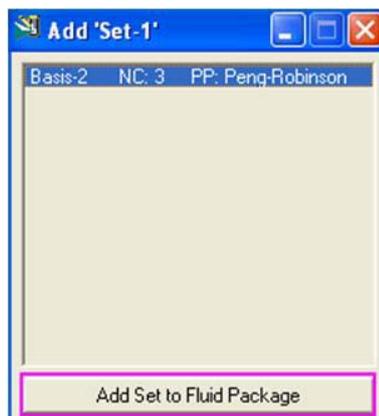
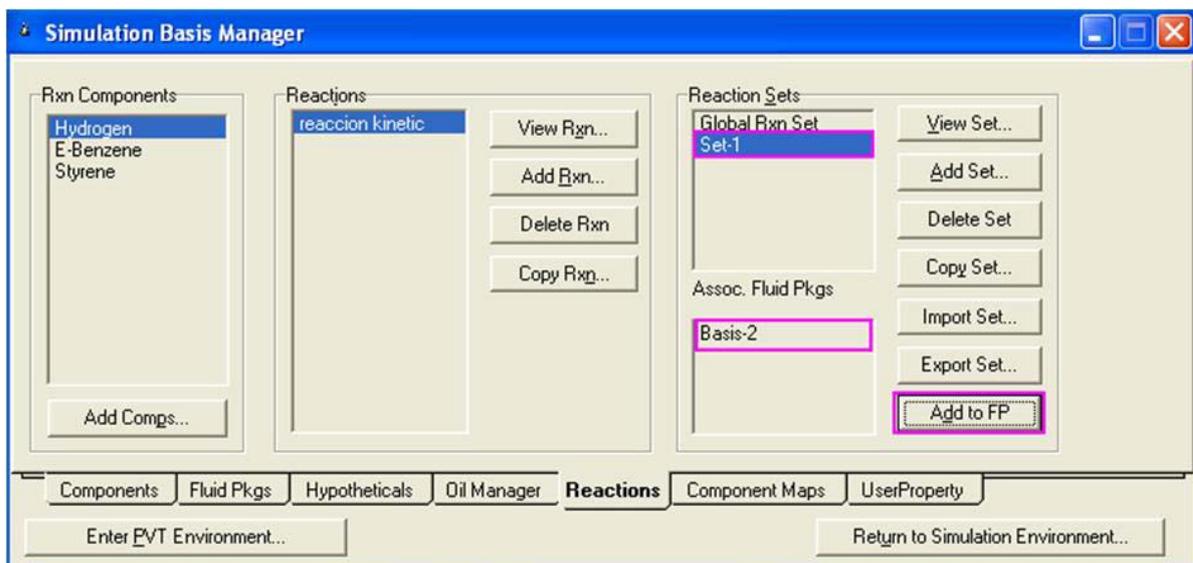
Enter EVT Environment... | Return to Simulation Environment...

Para atribuir la Reacción recién creada al Reaction Set, colocar el cursor en la celda <empty> bajo Active List. Despliegue la lista de las reacciones y seleccione el nombre de la Reacción (Reaccion kinetic).

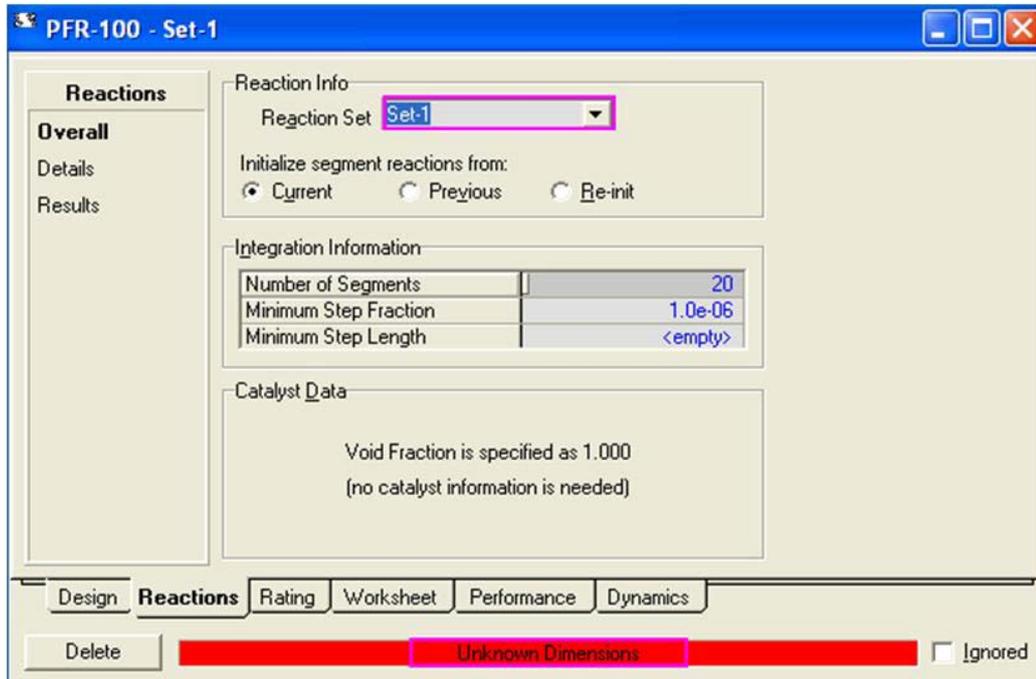
El Set Type corresponde al tipo de reacción que usted ha añadido al Reaction Set. El mensaje de estado ahora exhibirá a Ready (Ver siguiente Figura).



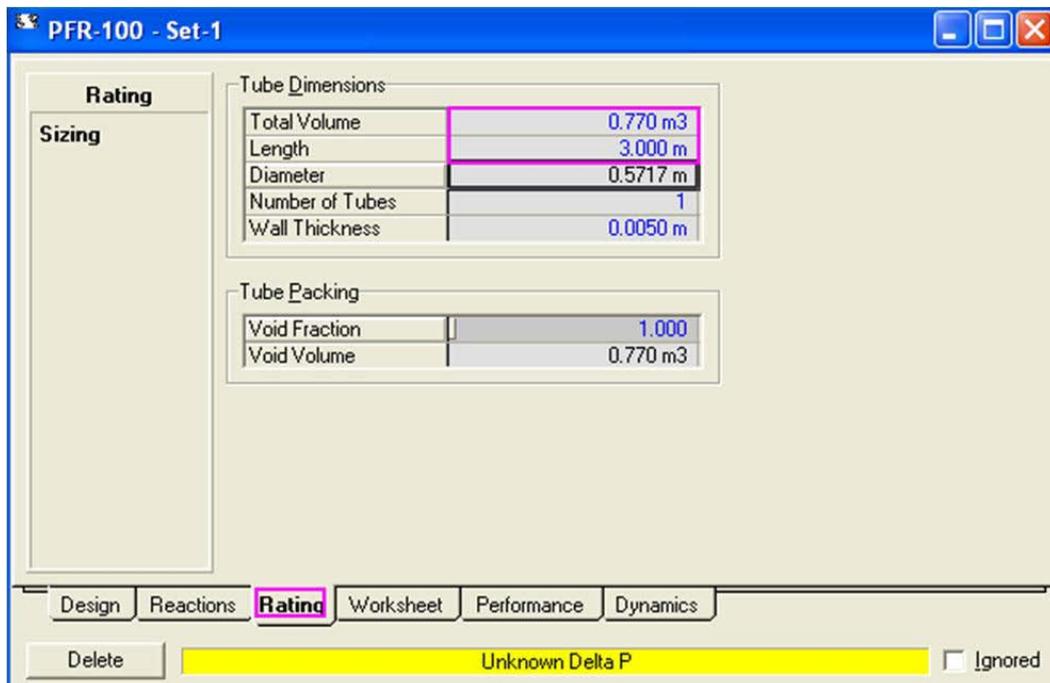
Para adjuntar el Reaction Set al Fluid Package (modelo termodinámico de Peng Robinson), resaltar a Set 1 en Reaction Sets y presiona el botón Add to FP. Cuando un Reaction Set determinado está adjuntado a un Paquete de Fluido, se vuelve disponible para las unidades de operación dentro del Flowsheet usando el Fluid Package particular.



En la pestaña “Reactions” se selecciona el set ya generado:

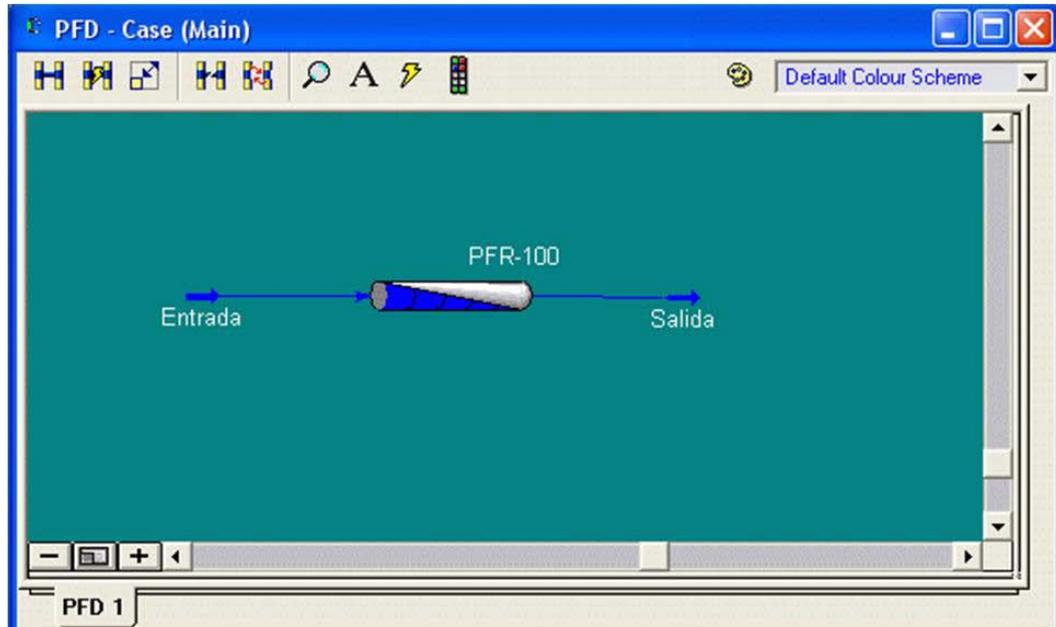
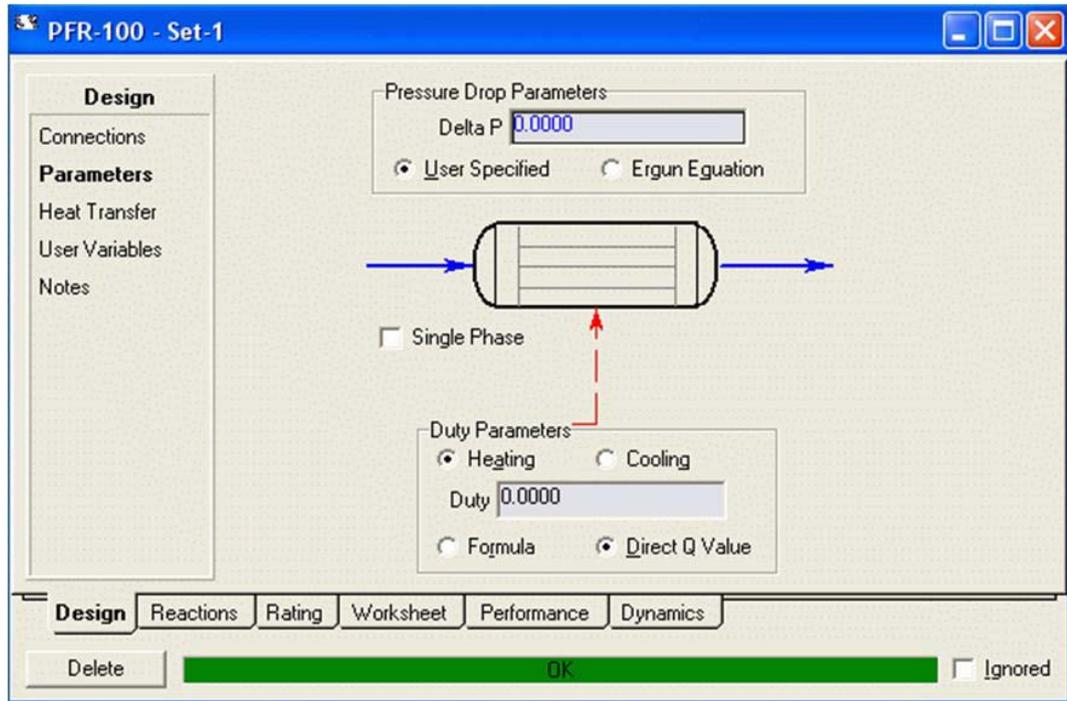


En rating, las dimensiones:



Finalmente en la pestaña “Design”, en “Parameters” agregar que la caída de presión es 0 y verificar que sea adiabático (Duty=0) lo que se logra porque no se conectó ninguna corriente energética.

La barra de estatus se podrá en verde con la leyenda “OK” indicando que la operación fue resuelta y convergió adecuadamente:



Finalmente en la pestaña “Performance” podremos visualizar los perfiles en forma tabular o gráfica para los principales resultados tales como flujos, composiciones, velocidad de reacción, etc.

PFR-100 - Set-1

| Performance | Length [m] | Temperature [C] | Pressure [kPa] | Vap Fraction | Duty [kJ/h] | Enthalpy [kJ/kgmole] | Entropy [kJ/kgmole-C] |
|--------------|------------|-----------------|----------------|--------------|-------------|----------------------|-----------------------|
| Conditions | 0.075 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| Flows | 0.225 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| Rxn Rates | 0.375 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| Transport | 0.525 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| Compositions | 0.675 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| | 0.825 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| | 0.975 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| | 1.125 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| | 1.275 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| | 1.425 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| | 1.575 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| | 1.725 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |
| | 1.875 | 606.9 | 137.8 | 1.0000 | 0 | 16997 | 151.9 |

Design Reactions Rating Worksheet Performance Dynamics

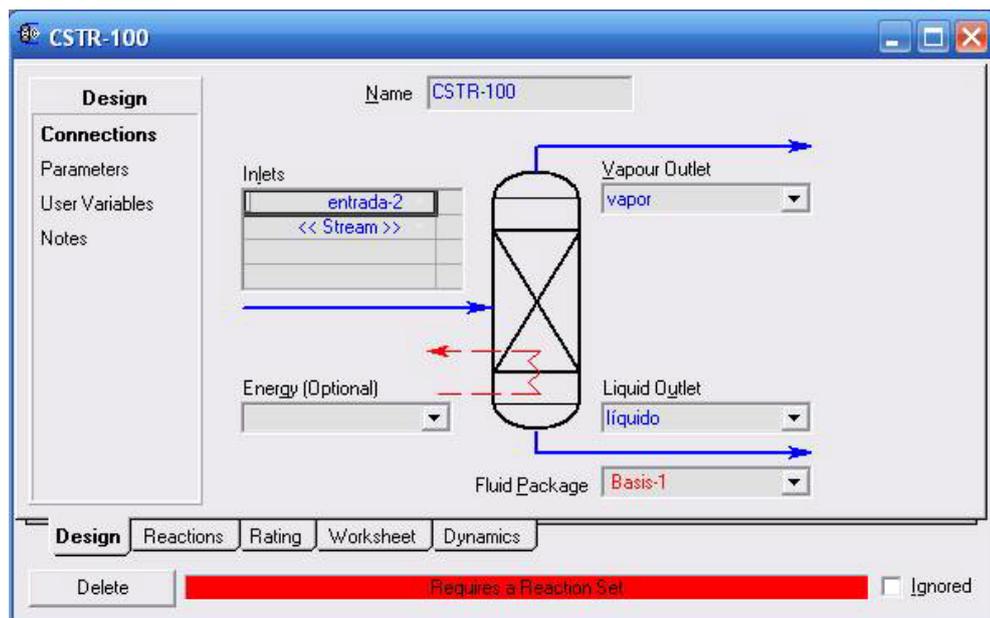
Delete OK Ignored

3.2 CSTR

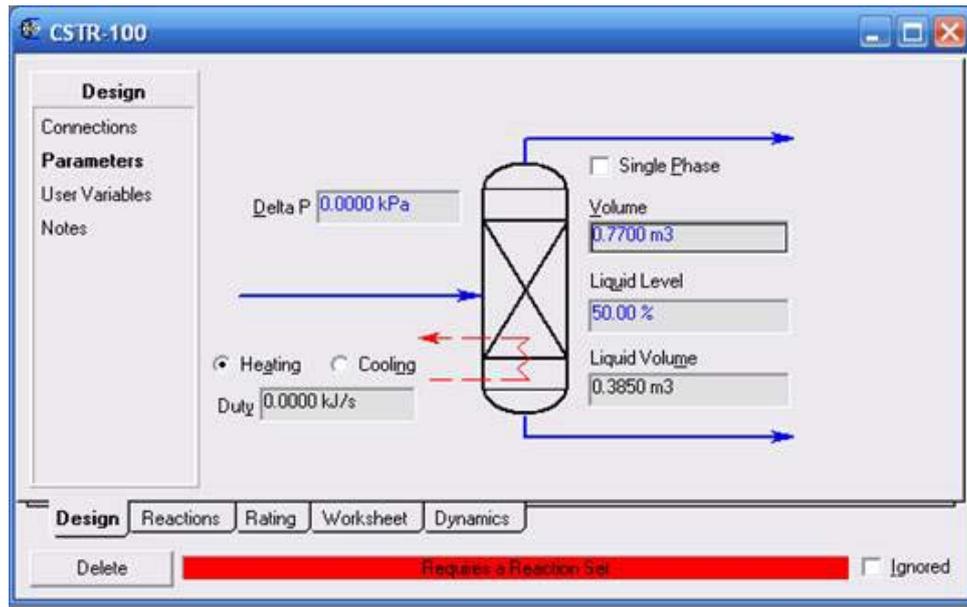
Se llevará a cabo la reacción en fase vapor siguiente en un reactor CSTR adiabático.

Para ello se deberá repetir los pasos anteriores o usar el mismo caso. Agregar al pfd una nueva corriente material (“entrada-2”) y clonar sus propiedades de la corriente “entrada”.

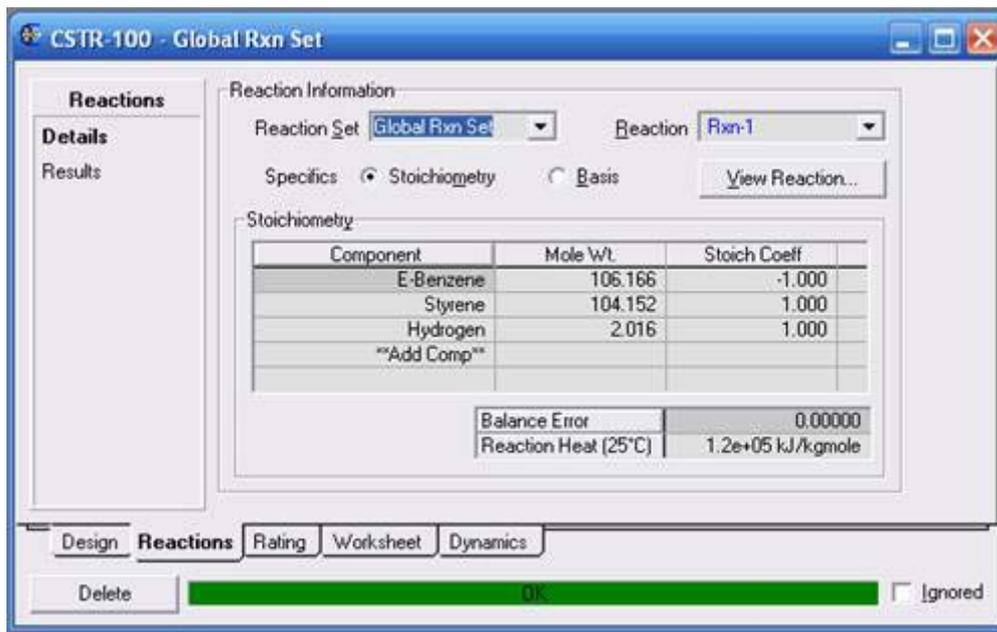
Conectar dos corrientes a la salida (no agregar corriente energética)



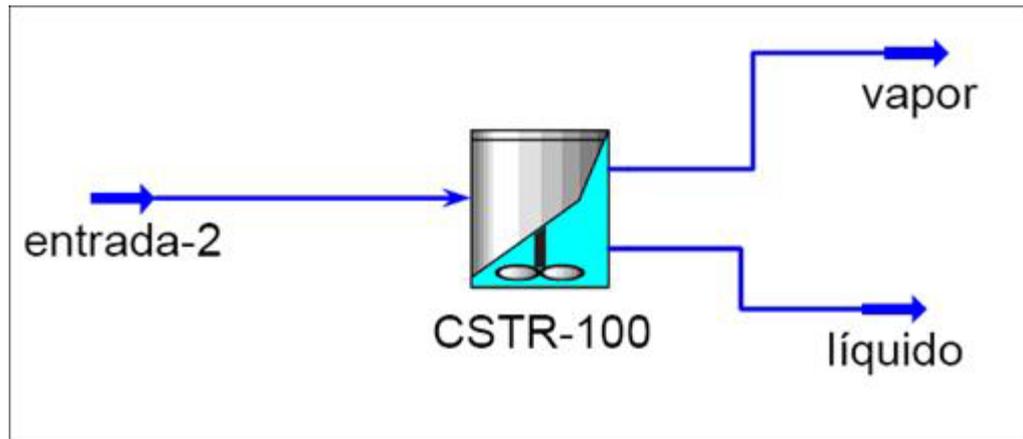
En “Design”, “Parameters” en volumen, poner el mismo que el empleado en el caso anterior.



Se agrega el set de reacciones en la pestana “Reactions”.



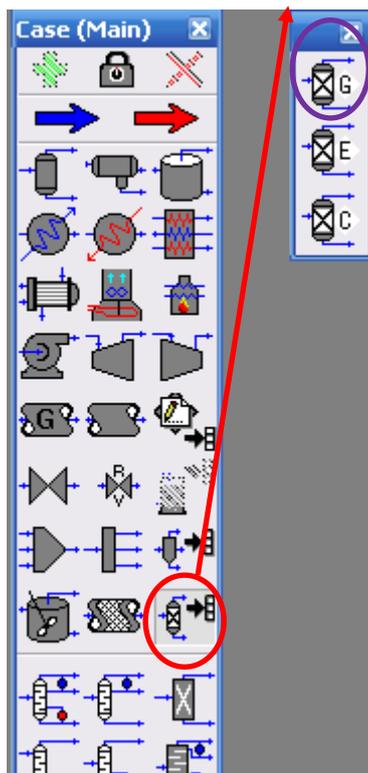
Comparar este resultado con el obtenido en el pfr. Notar que no hay corriente líquida y que a pesar de todo Hysys sólo considera el 50% del volumen de gas, ya que en “Design”, “Parameters” el valor de “Liquid level” dice 50%. Poner a cero y verificar si hay diferencia. Comparar nuevamente con el reactor flujo pistón.



3.3 REACTOR DE GIBBS

Nuevamente, se puede repetir los pasos del caso o emplear el mismo.

De la paleta agregar un reactor de Gibbs:

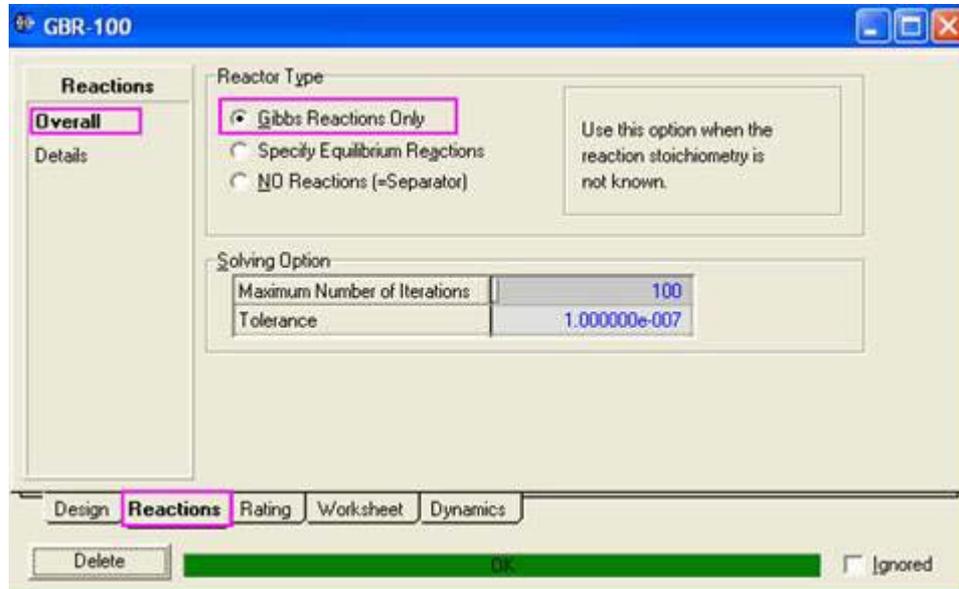


Clonar la corriente “entrada” en otra, “entrada-3” y conectarla a la entrada del reactor, luego agregarle las salidas materiales. Otra vez obviamos la corriente energética.

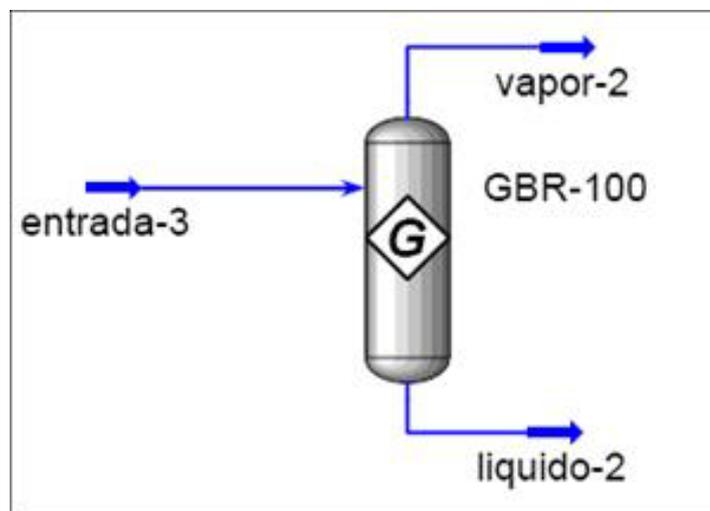
En “Design”, “Parameters” usar el mismo volumen (0.770 m^3), con nivel de líquido 0.

En la pestaña “Reactions”, “Overall” verificar que esté seleccionada la opción “Gibbs Reactions Only”. Si se eligiera “NO reactions (=Separator)” funcionaría sólo como un separador

de dos fases, mientras que si se seleccionara “Specify Equilibrium Reactions” se deberá previamente agregar una reacción de equilibrio.



Una vez lograda la conversión comparar con los dos casos anteriores.

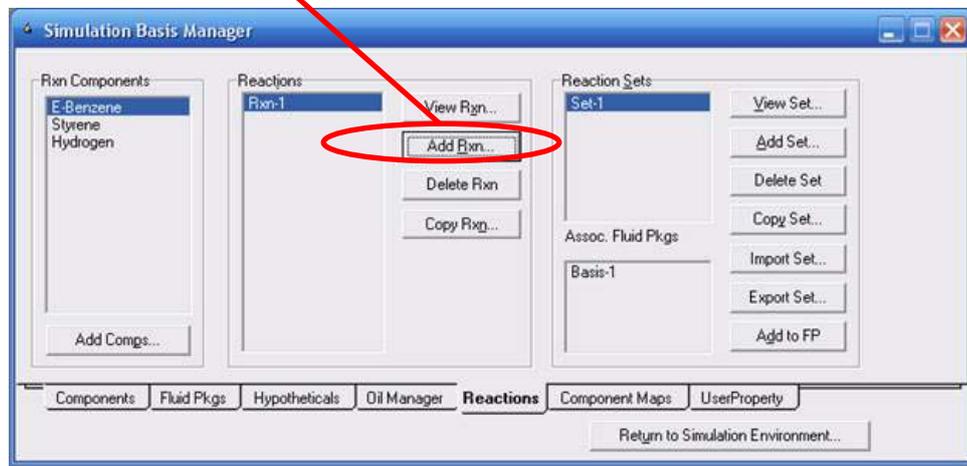


3.4 REACTORES DE EQUILIBRIO

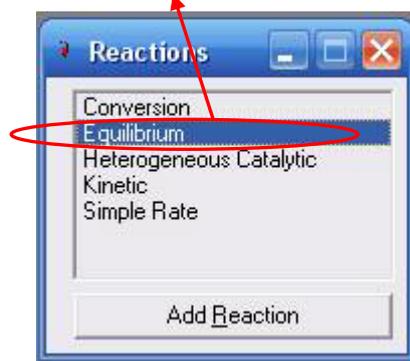
Hay dos maneras de hacerlo. Una como se mencionó, eligiendo la opción “Specify Equilibrium Reactions” en reactores de Gibbs en la pestaña “Reactions”, “Overall” (ver caso anterior) o bien agregando un reactor de equilibrio.

En todo caso debemos agregar un nuevo set de reacciones, esta vez de equilibrio:

Volvemos al medioambiente “Basis” haciendo clic en el ícono representado por un erlenmeyer. Una vez en el formulario “Simulation Basis manager” ir a la pestaña “Reactions” y agregar una nueva reacción:



Entre las opciones elegimos “Equilibrium”:



Completar el formulario siguiente:

| Component | Mole Weight | Stoich Coeff |
|----------------|-------------|--------------|
| E-Benzene | 106.166 | -1.000 |
| Styrene | 104.152 | 1.000 |
| Hydrogen | 2.016 | 1.000 |
| ***Add Comp*** | | |

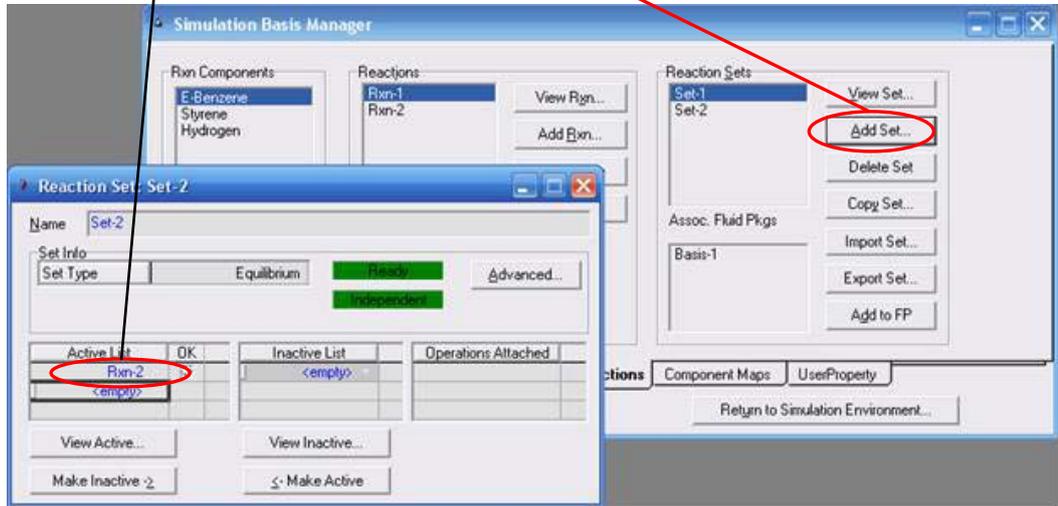
Balance Error: 0.00000
Reaction Heat (25 C): 1.2e+05 kJ/kgmole

Stoichiometry | Basis | Keq | Approach | Library

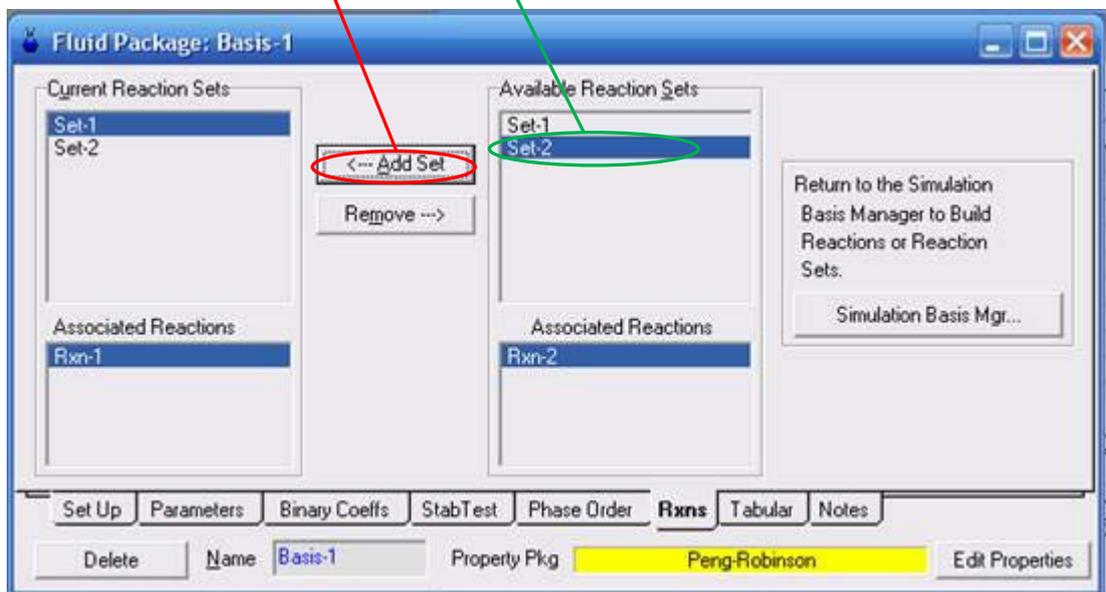
Delete | Name: Rxn-2 | Ready | Gibbs

Vemos que una vez ingresada la estequiometría la reacción ya está “lista”, esto se debe a que por defecto para el equilibrio adopta el modelo “Gibbs Free Energy” en la opción “Keq Source” de la pestaña “Basis”.

Se agrega un nuevo set de reacciones químicas y se le asocia como activa a la recién generada reacción:

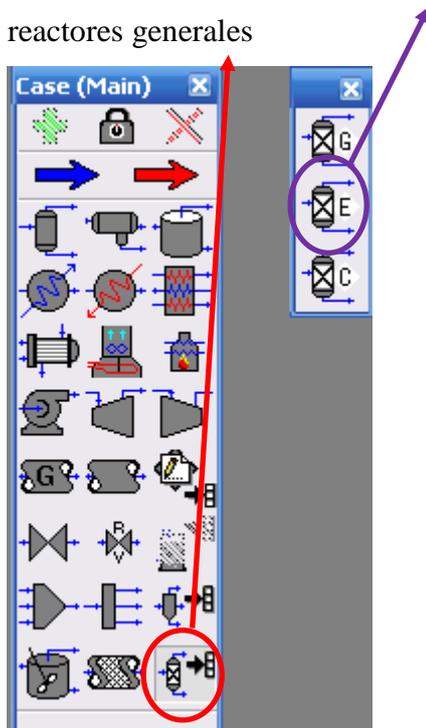


Nuevamente en “Simulation Basis manager”, ir a la pestaña “Fluid Pkgs”, oprimir el botón “View” seleccionar el set recién creado:



Volver al medio ambiente de trabajo y agregar una corriente material (“entrada-4”) clonada de “entrada”

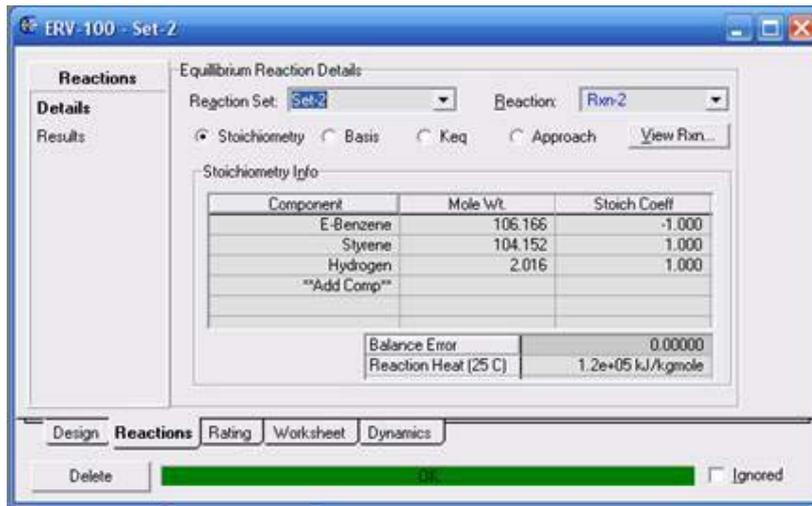
Para seleccionar un reactor de equilibrio lo elegimos de la paleta de objetos, en reactores generales



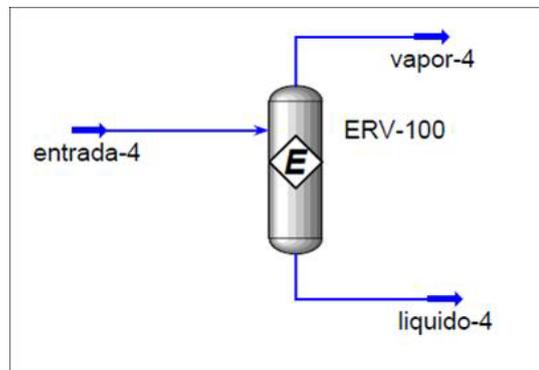
Completar las corrientes de salida (sin corriente de energía: adiabático)

| Worksheet | Name | entrada-4 | liquido-4 | vapor-4 |
|-------------|-------------------------------|------------|-----------|---------|
| Conditions | Vapour | 1.0000 | <empty> | <empty> |
| Properties | Temperature [K] | 880.0 | <empty> | <empty> |
| Properties | Pressure [atm] | 1.360 | <empty> | <empty> |
| Composition | Molar Flow [kgmole/h] | 547.9 | <empty> | <empty> |
| PF Specs | Mass Flow [kg/h] | 5.817e+004 | <empty> | <empty> |
| | Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 66.86 | <empty> | <empty> |
| | Molar Enthalpy [kJ/kgmole] | 1.611e+005 | <empty> | <empty> |
| | Molar Entropy [kJ/kgmole-C] | 245.3 | <empty> | <empty> |
| | Heat Flow [kJ/s] | 2.452e+004 | <empty> | <empty> |

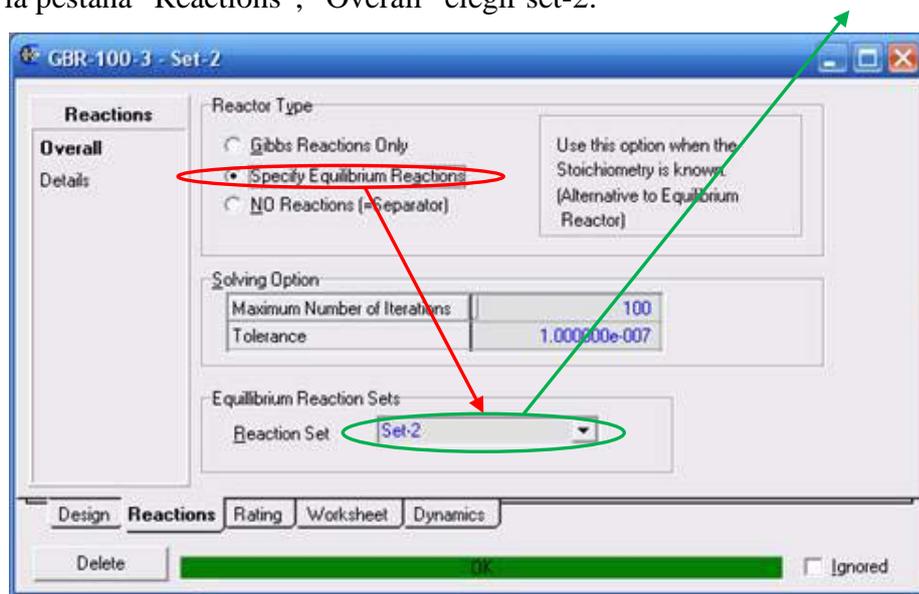
Una vez en la pestaña “Reactions” seleccionar el set-2 y el reactor podrá converger.



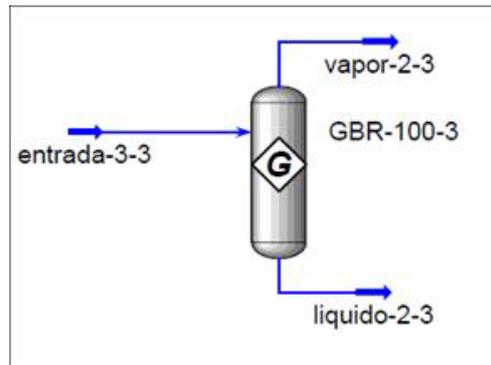
Comparar los resultados con los casos anteriores



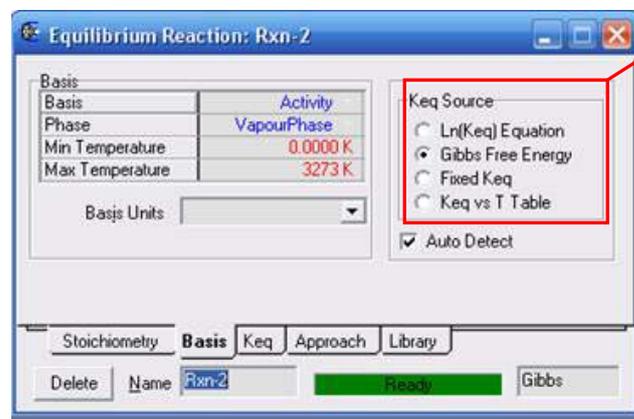
Como actividad extra, ir al reactor de Gibbs y seleccionar la opción “Specify Equilibrium Reactions” de la pestaña “Reactions”, “Overall” elegir set-2:



Ver el resultado logrado y comparar:



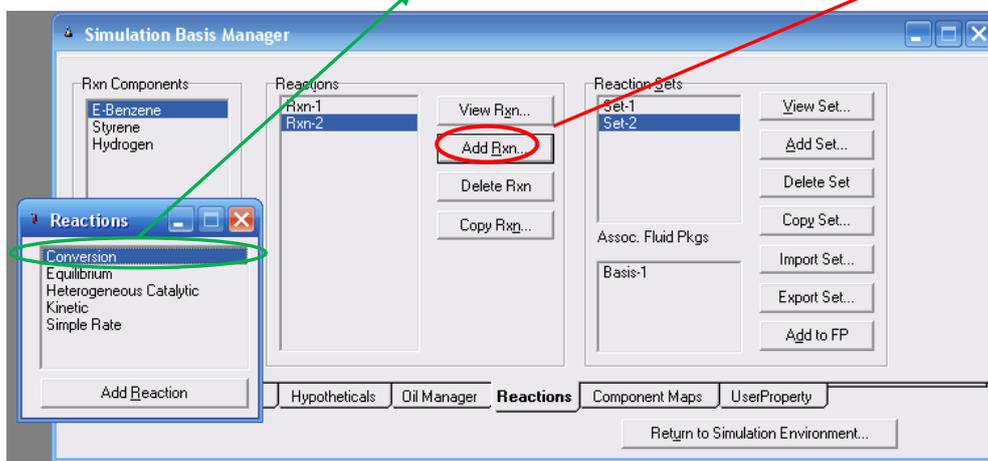
Se vio que al definir la reacción de equilibrio la constante era calculada según la energía libre de Gibbs, no obstante hay otras variantes con las que se puede ensayar:



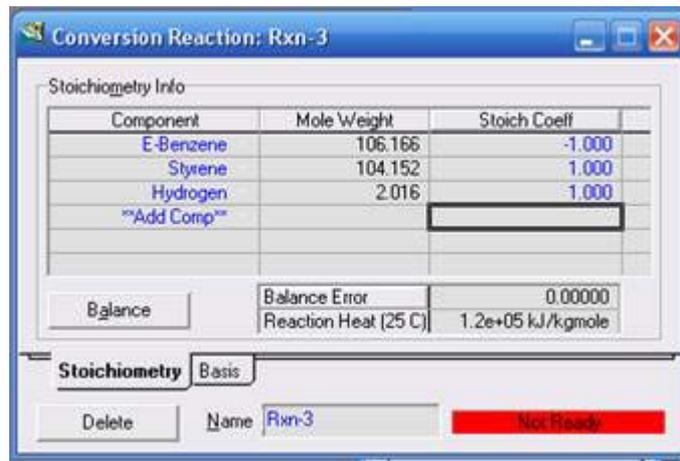
3.5 REACTOR DE CONVERSIÓN

Lleve a cabo la reacción en fase vapor de deshidrogenación del etilbenceno en un reactor de conversión, donde la conversión del etilbenceno es del 80%.

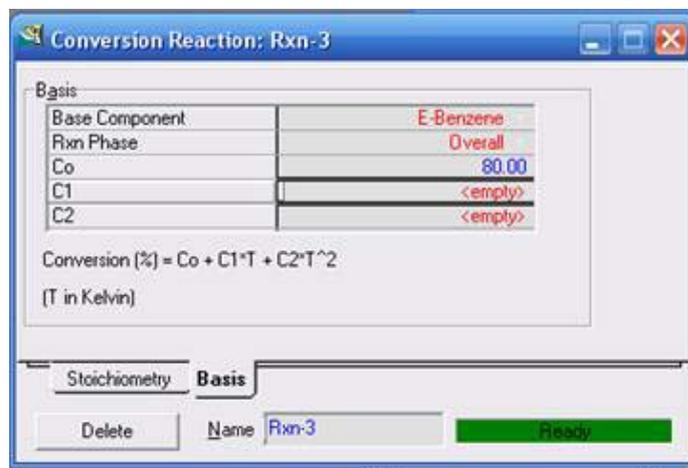
Repetiendo los pasos del caso anterior ir al entorno “Basis”, y una vez allí agregar una nueva reacción, esta vez de conversión:



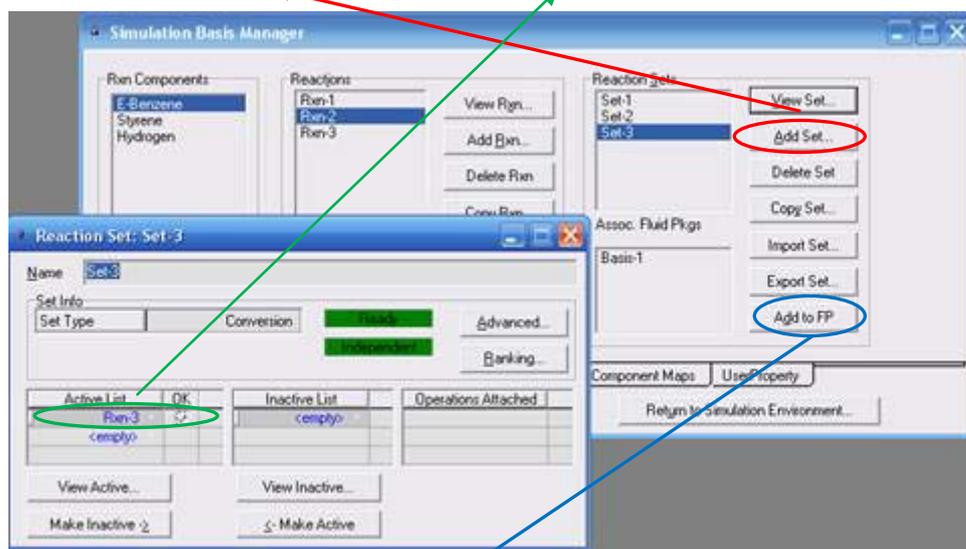
En estequiometría completar:



En "Basis":

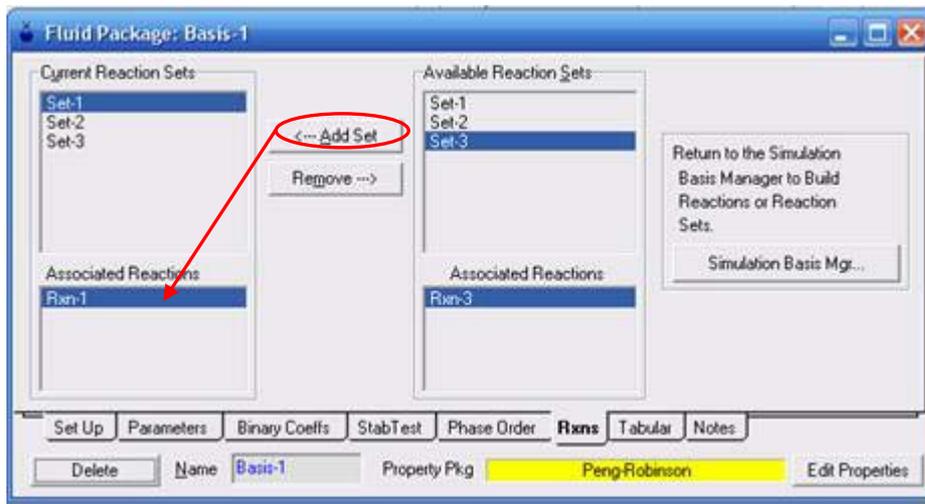


Nuevamente agregar un set con la reacción de conversión:



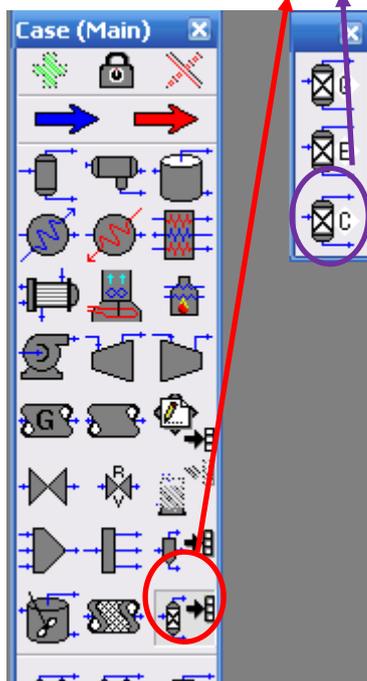
Asociar con el paquete físico químico

Finalmente, en Simulation Basis manager”, ir a la pestaña “Fluid Pkgs”, oprimir el botón “View” seleccionar el set recién creado



Ya se puede ir al medioambiente de trabajo y clonar otra corriente (entrada-5) con los datos de la corriente “entrada”.

Agregar un reactor de conversión:



Acoplar la corriente a la entrada del reactor y completar:

| Worksheet | Name | entrada-5 | liquido-5 | vapor-5 |
|-------------|-------------------------------|------------|-----------|---------|
| Conditions | Vapour | 1.0000 | <empty> | <empty> |
| Properties | Temperature [K] | 880.0 | <empty> | <empty> |
| | Pressure [atm] | 1.360 | <empty> | <empty> |
| Composition | Molar Flow [kgmole/h] | 547.9 | <empty> | <empty> |
| | Mass Flow [kg/h] | 5.817e+004 | <empty> | <empty> |
| PF Specs | Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 66.86 | <empty> | <empty> |
| | Molar Enthalpy [kJ/kgmole] | 1.611e+005 | <empty> | <empty> |
| | Molar Entropy [kJ/kgmole-C] | 245.3 | <empty> | <empty> |
| | Heat Flow [kJ/s] | 2.452e+004 | <empty> | <empty> |

En la pestaña, “Reactions” agregar el set-3

Conversion Reaction Details

Reaction Set: Set-3 Reaction: Rxn-3

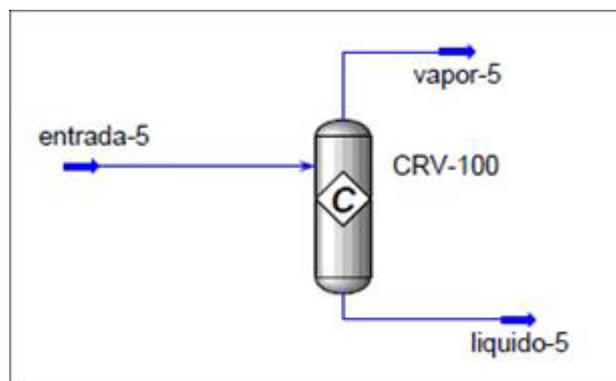
Stoichiometry Basis Conversion % [View Reaction...](#)

Stoichiometry Info

| Component | Mole Wgt. | Stoich Coeff |
|--------------|-----------|--------------|
| E-Benzene | 106.166 | -1.000 |
| Styrene | 104.152 | 1.000 |
| Hydrogen | 2.016 | 1.000 |
| **Add Comp** | | |

Balance Error: 0.00000
Reaction Heat (25 C): 1.2e+05 kJ/kgmole

Una vez convergido comparar con los resultados anteriores:

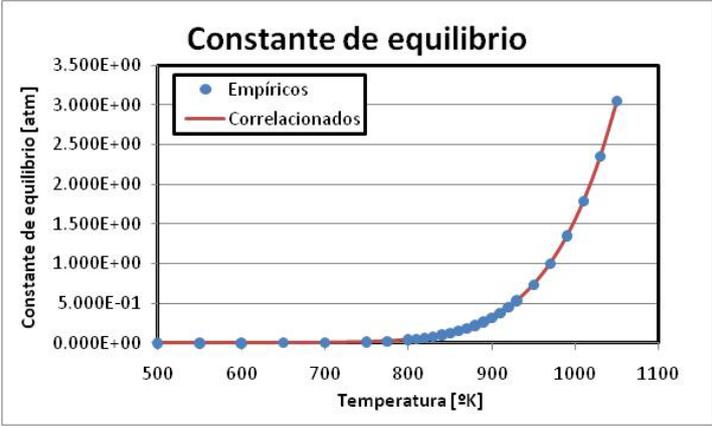


3.6 DE VELOCIDAD SIMPLE

Cuya cinética responde a la ecuación: $r_A = -k_f \left(C_A^\alpha C_B^\beta - \frac{C_R^\phi C_S^\gamma}{K_{eq}} \right)$

Para ello se necesita la dependencia de la constante de equilibrio en función de la temperatura. En nuestro caso:

| T [°K] | Kp [atm] |
|--------|-----------|
| 500 | 7.920E-07 |
| 550 | 1.100E-05 |
| 600 | 9.990E-05 |
| 650 | 6.460E-04 |
| 700 | 3.200E-03 |
| 750 | 1.300E-02 |
| 775 | 2.400E-02 |
| 800 | 4.300E-02 |
| 810 | 5.400E-02 |
| 820 | 6.700E-02 |
| 830 | 8.200E-02 |
| 840 | 1.010E-01 |
| 850 | 1.240E-01 |
| 860 | 1.510E-01 |
| 870 | 1.830E-01 |
| 880 | 2.210E-01 |
| 890 | 2.660E-01 |
| 900 | 3.180E-01 |
| 910 | 3.790E-01 |
| 920 | 4.500E-01 |
| 930 | 5.320E-01 |
| 950 | 7.360E-01 |
| 970 | 1.003E+00 |
| 990 | 1.348E+00 |
| 1010 | 1.791E+00 |
| 1030 | 2.351E+00 |
| 1050 | 3.051E+00 |



Donde la correlación ajusta a una expresión del tipo:

$$\ln(K) = A + \frac{B}{T} + C \ln(T) + DT$$

Siendo las constants entonces:

| | |
|---|------------|
| A | -13.210961 |
| B | -13122.000 |
| C | 4.353830 |
| D | -0.0032996 |

Iniciar un nuevo caso con los siguientes componentes:

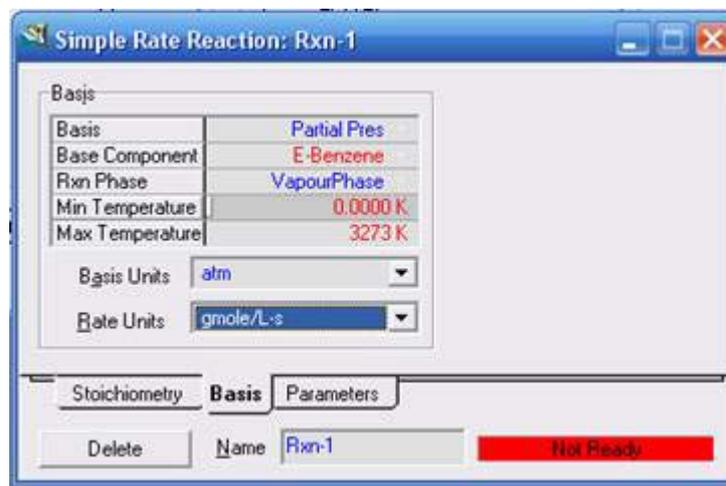
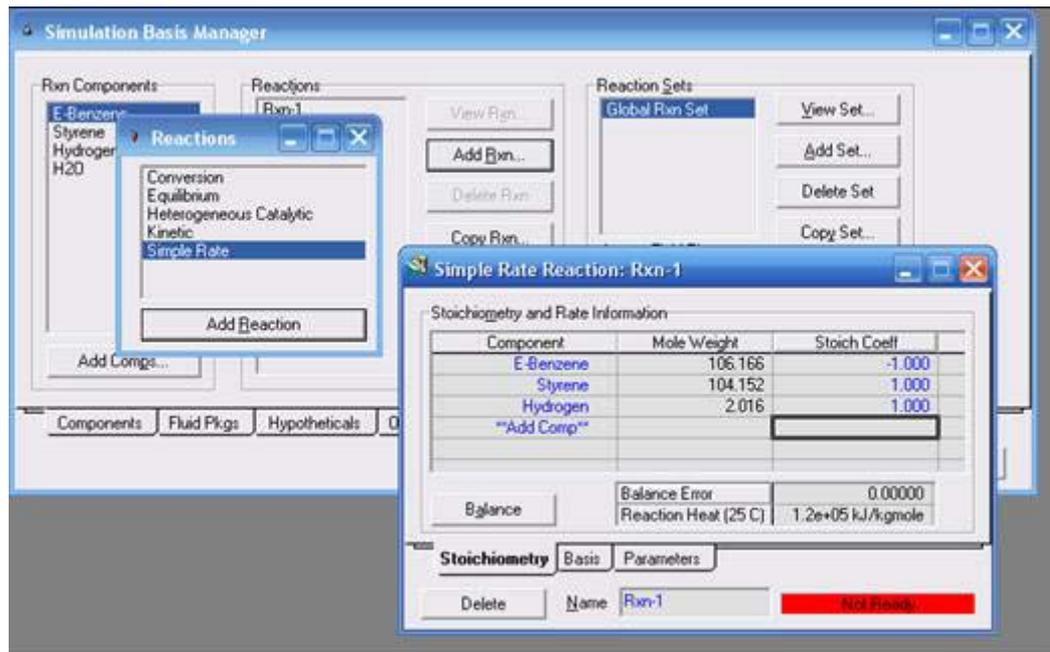
Etilbenceno (E-Benzene)

Estireno (Styrene)

Hidrógeno (Hydrogen)

Elegir Peng-Robinson, como paquete de estimación de propiedades.

En reacciones elegir “Simple Rate” y completar como sigue:



Para la reacción directa: $E = 21874[\text{cal/mol}]$; $A = 20315 \text{ gmol/gcat s atm}$

Para la reacción inversa:

$A = -13.210961$

$B = -13122.000$

$C = 4.353830$

$D = -0.0032996$

Con lo que el formulario queda:

Simple Rate Reaction: Rxn-1

Forward Reaction

| | |
|---|---------|
| A | 2.0e+04 |
| E | 9.2e+04 |
| B | <empty> |

Reverse Reaction

| | |
|----|----------|
| A' | -1.3e+01 |
| B' | -1.3e+04 |
| C' | 4.4e+00 |
| D' | -3.3e-03 |

Equation Help

$$r = k \cdot (f(\text{Basis}) - f(\text{Basis}) / K')$$

$$k = A \cdot \exp \{ -E / RT \} \cdot T^B$$

$$\ln(K') = A' + B'/T + C' \ln(T) + D' \cdot T$$

T in Kelvin

Stoichiometry | Basis | **Parameters**

Delete | Name: Rxn-1 | Ready

Agregar el set y asociar a la fisicoquímica. Luego agregar nuevamente el set ya asociado al paquete fisicoquímico como se hizo en los casos anteriores e ir al medio ambiente de trabajo.

Una vez allí crear una corriente de etilbenceno puro y completar:

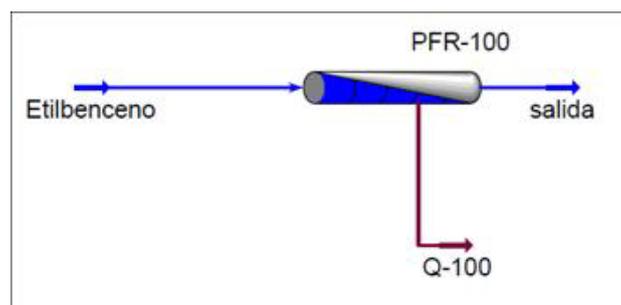
Etilbenceno

| | |
|-------------------------------|-------------|
| Stream Name | Etilbenceno |
| Vapour / Phase Fraction | 1.0000 |
| Temperature [K] | 880.0 |
| Pressure [atm] | 1.378 |
| Molar Flow [gmole/s] | 152.2 |
| Mass Flow [kg/h] | 5.817e+004 |
| Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 66.86 |
| Molar Enthalpy [kJ/kgmole] | 1.611e+005 |
| Molar Entropy [kJ/kgmole-C] | 245.1 |
| Heat Flow [kJ/s] | 2.452e+004 |
| Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h] | 66.70 |
| Fluid Package | Basis-1 |

Worksheet | Attachments | Dynamics

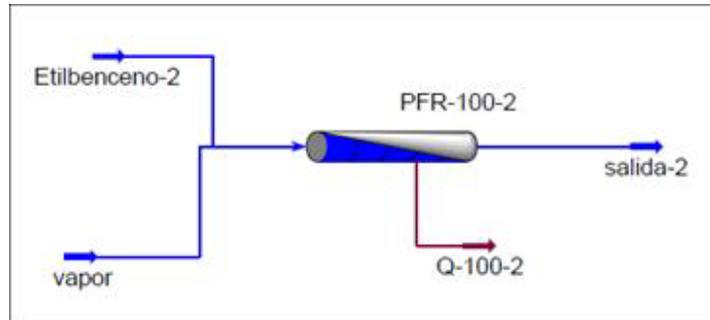
Delete | Define from Other Stream...

Conectar a un PFR con temperatura de salida igual a la entrada (isotérmico) y que la caída de presión sea estimada por Ergun (“Design”, “Parameters”) con un volumen de 250 m³ y un largo de 7 m (“Rating”, “Sizing”), agregándole el set de reacciones (“Reactions”, “Overall”)



En la pestaña “Reactions”, “Results” ver el rendimiento de la reacción.

Copiar o repetir el flowsheet y agregarle una nueva corriente, esta de vapor de agua:
A 880 °K de temperatura, 1.378 atm de presión con un flujo de 1522 gmol/s y ver ahora el rendimiento de la reacción.



Utilizando el databook graficar el rendimiento de la reacción para un flujo de vapor desde 0 a 10000 gmol/s con saltos de 100 gmol/s. Ver cuando se produce el máximo rendimiento y de cuanto es.