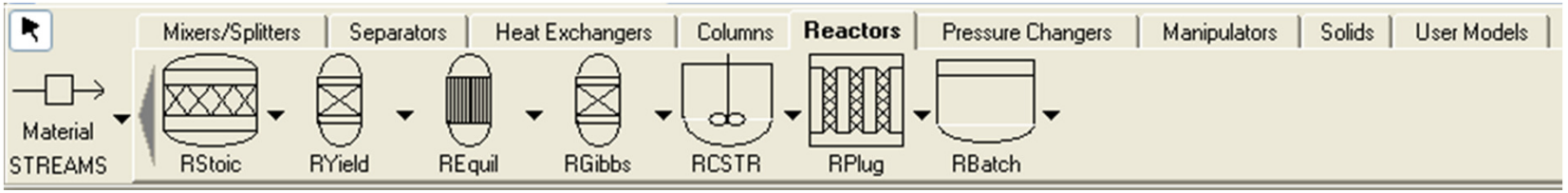
Aspen Plus.

1. Reactores en Aspen Plus
2. Simulación de un reactor CSTR.

Reactores en Aspen Plus

Hay 7 tipos de reactores en Aspen Plus:

Reactor Model	Description
RStoic	Conversion reactor with known stoichiometry
RYield	Yield reactor with known product yields
REquil	Two-phase chemical equilibrium reactor (stoichiometric)
RGibbs	Multiphase chemical equilibrium reactor (non-stoichiometric)
RCSTR	Continuous stirred-tank reactor with known kinetics
RPlug	Plug-flow reactor with known kinetics
RBatch	Batch or semi-batch reactor with known kinetics



Reactores en Aspen Plus

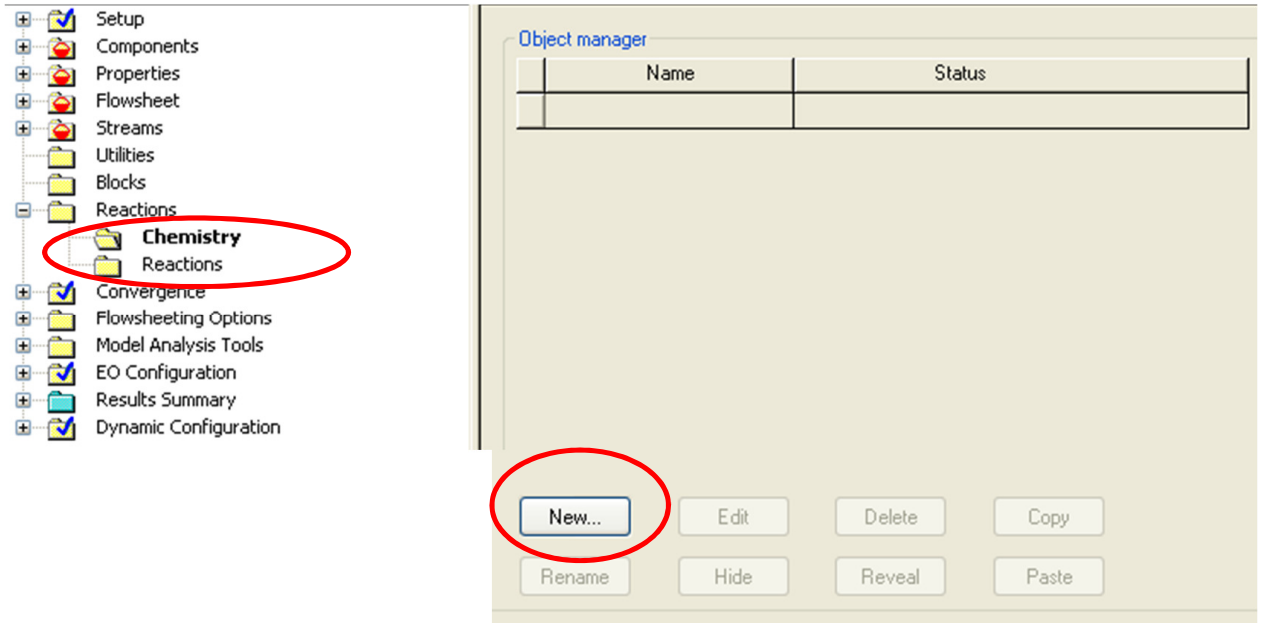
Rstoic
La cinética no se conoce o no es importante
Se conoce la estequiometría de la reacción
Se conoce la extensión de la reacción o la conversión.
Rcstr
Modelan de forma rigurosa reactores de mezcla perfecta.
La cinética se define de forma separada en el bloque Reactions
Rplug
Modelan de forma rigurosa reactores de flujo pistón (suponiendo mezcla perfecta en la dirección radial y no mezcla en la axial).
La cinética se define de forma separada en el bloque Reactions
Rbatch
Modela de forma rigurosa reactores tipo batch o semi-batch
La cinética se define de forma separada en el bloque Reactions

Reacciones en Aspen Plus

Tipo de Reacción:

Con electrolitos --- especies iónicas --- Seleccionar: Chemistry

Sin electrolitos --- Velocidades de reacción /equilibrios --- Seleccionar: Reactions



Reactions

Para especificar reacciones con cinéticas de reacción o equilibrios es sistemas sin electrolitos. Se identifican mediante un ID (R-1,R-2etc.)

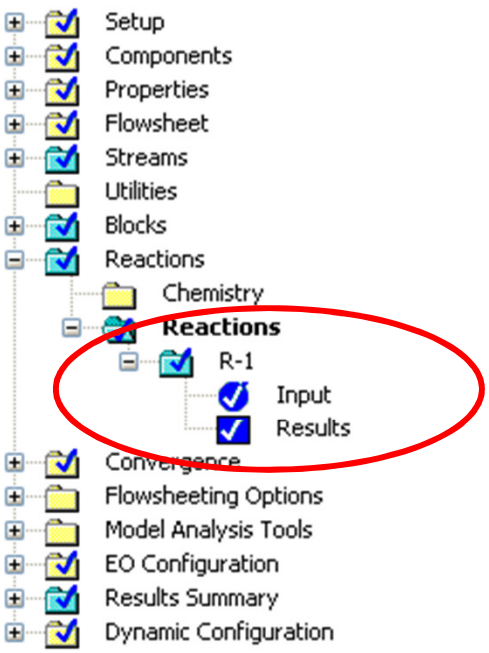
Pueden usarse en:

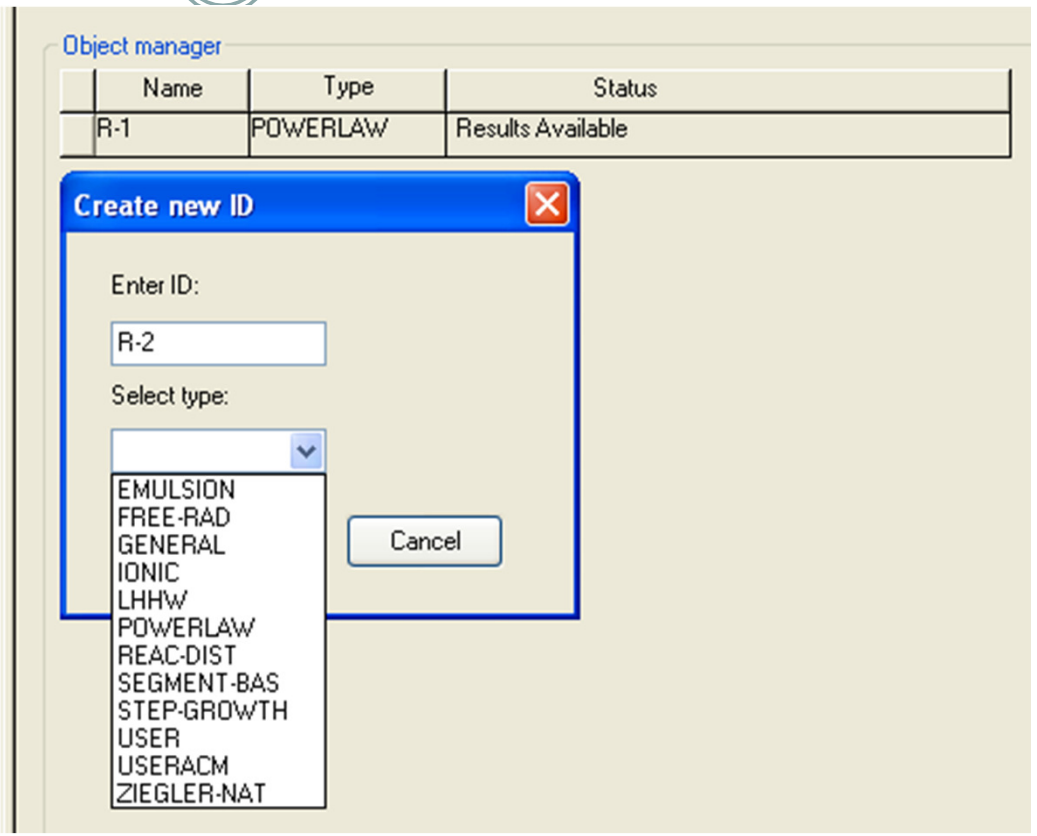
Reactores: Rbatch, RCSTR, Rplug
Columnas : Radfrac

Permite usar:

Modelo cinético Power Law (de Arrhenius)
Modelo LHHW (Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson)
Modelo de equilibrio
Cinéticas de usuario

Reactions: selección del tipo





Reactions: Power Law model

$$r = k\left(\frac{T}{T_0}\right)^n e^{-\left(\frac{E}{R}\right)\left[\frac{1}{T}-\frac{1}{T_0}\right]} \prod_{i=1}^{N} C_i^{\alpha_i}$$

If T_0 is not specified the model reduces to:

$$r = kT^n e^{-\frac{E}{RT}} \prod_{i=1}^{N} C_i^{\alpha_i}$$

r = rate of reaction

k = pre-exponential factor

T = absolute temperature

T_0 = reference temperature

n = temperature exponent

E = activation energy

R = gas law constant

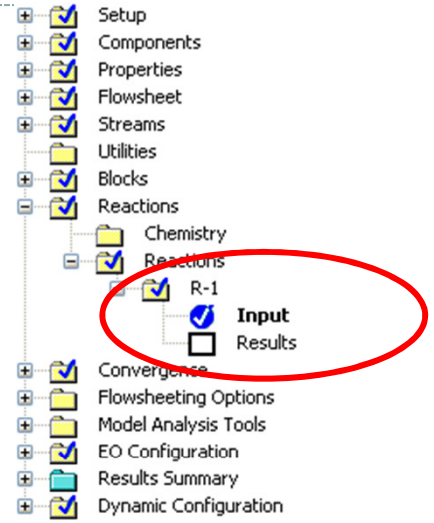
$\prod$ = product operator

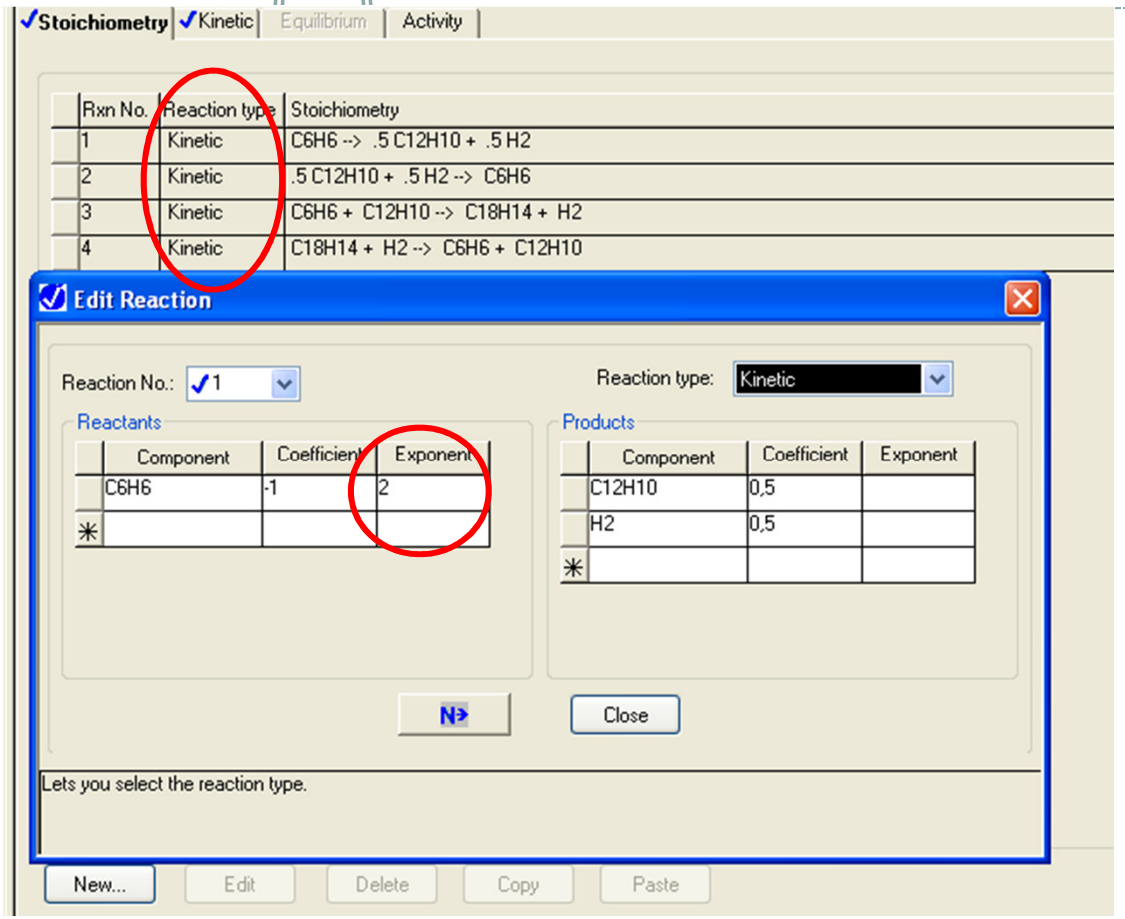
N = number of components

C_i = concentration of component i

α_i = exponent of component i

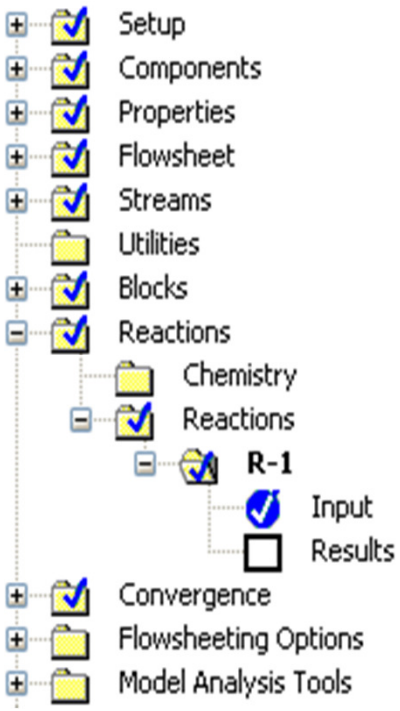
Reactions: Power Law model

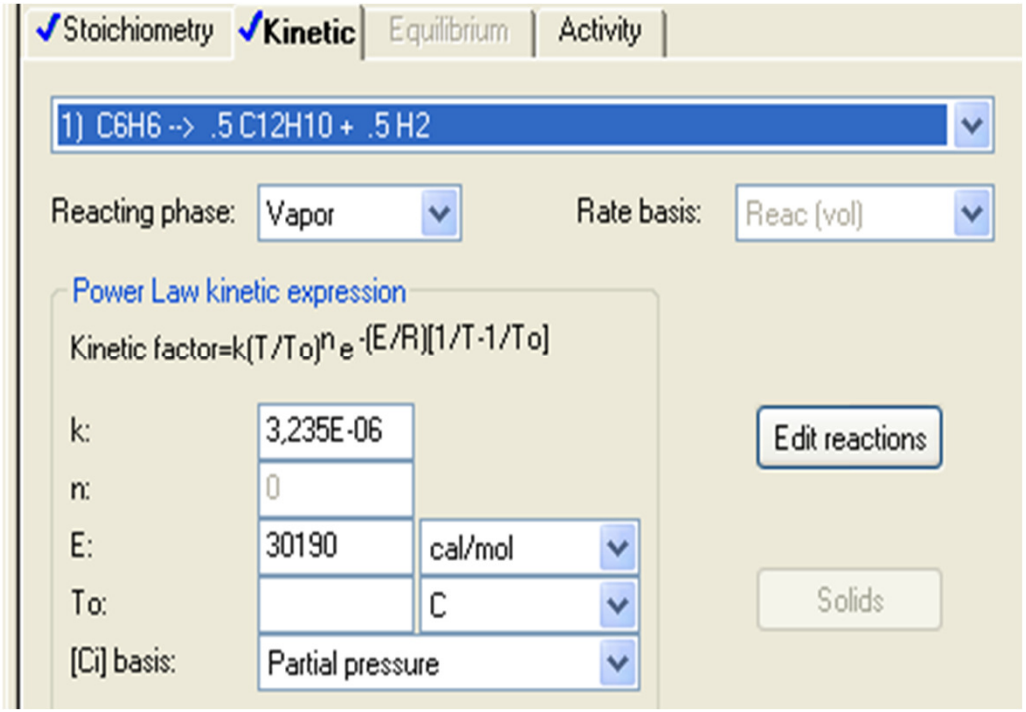




No olvidar poner el orden de la reacción (exponent)

Reactions: Power Law model

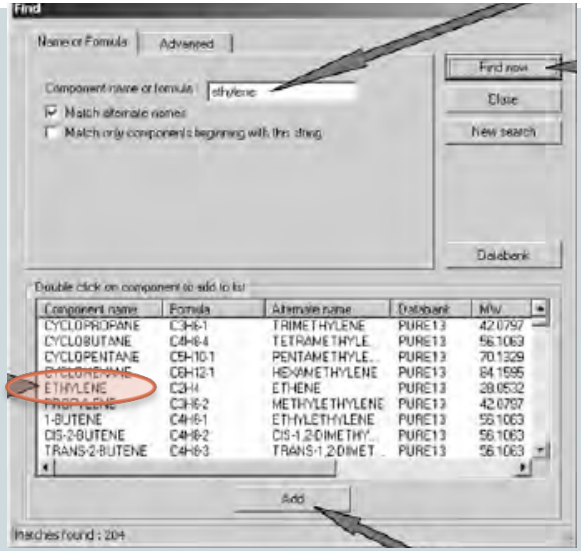


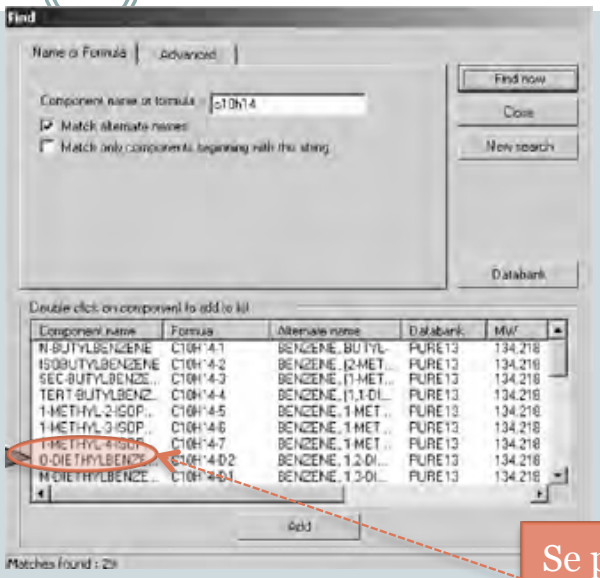


Ejemplo

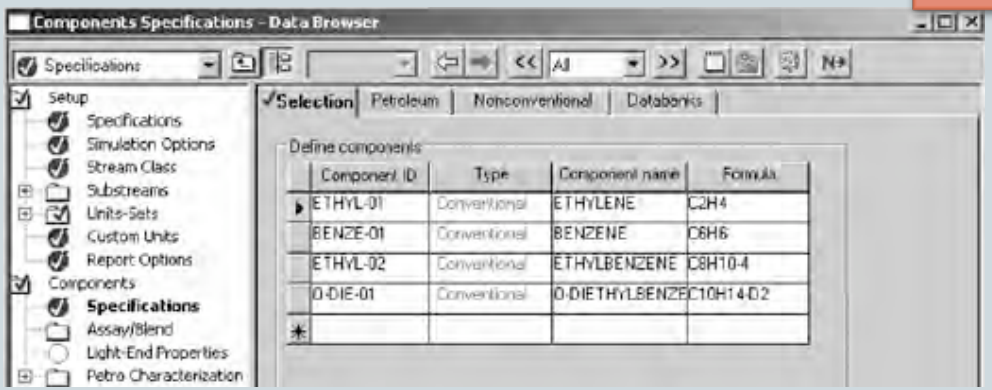
- Modelado de un Reactor CSTR

1. Establecer componentes, y propiedades físicas (Chao-Seader)

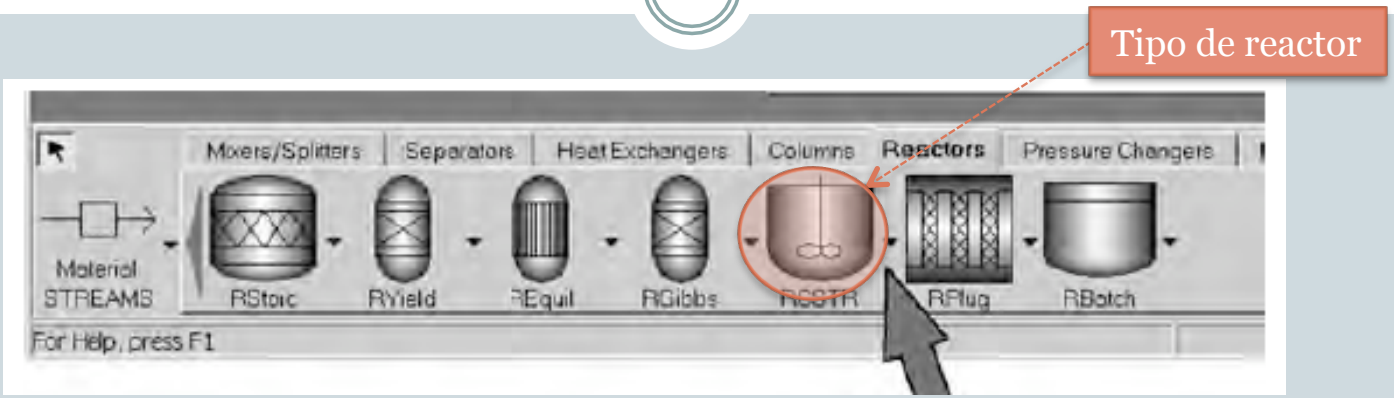


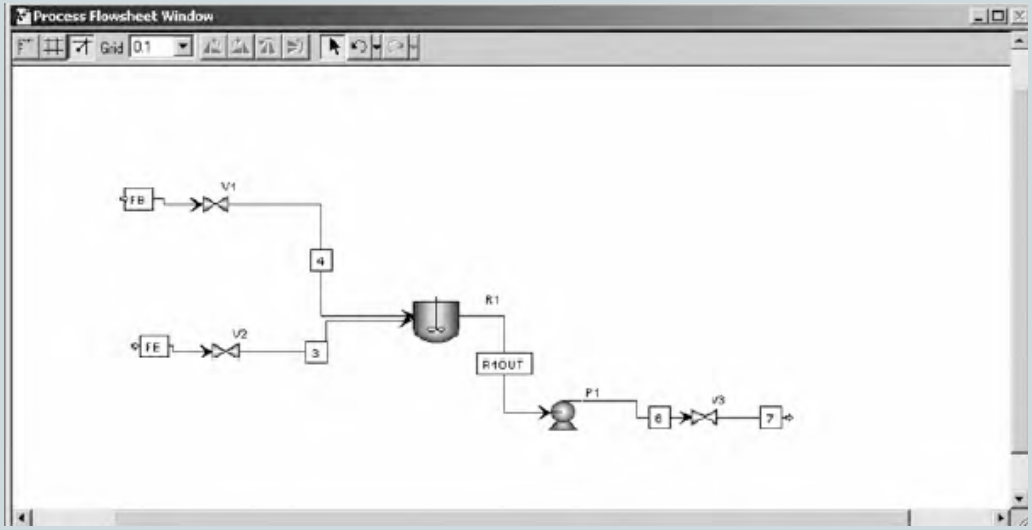


Se puede escoger cualquier Isómero del dietilbenceno.

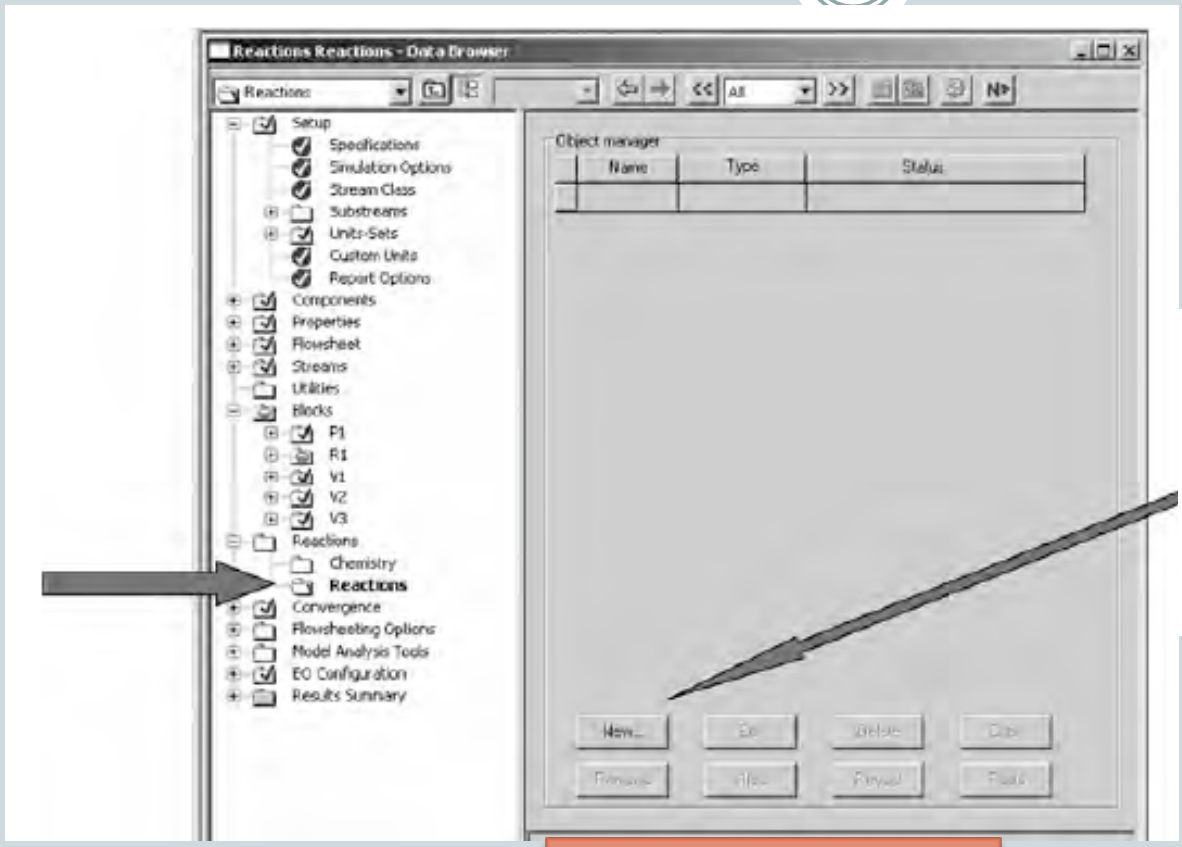


2. Seleccionar el equipo, hacer el diagrama de proceso y rellenar datos de las corrientes de entrada



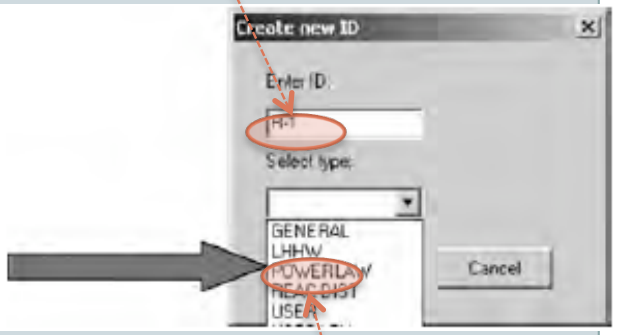


3. Definir las reacciones



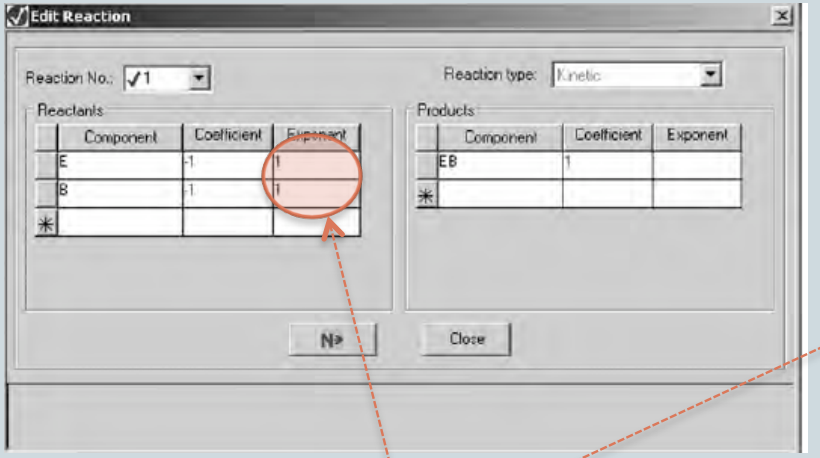
Nueva reacción

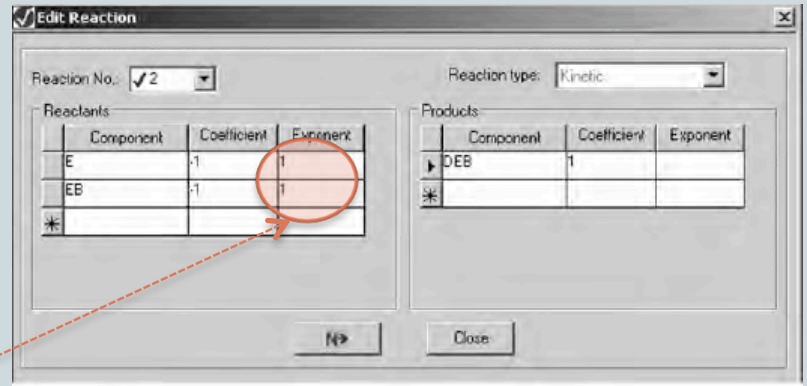
Se pueden poner en un único grupo (R-1) las tres reacciones

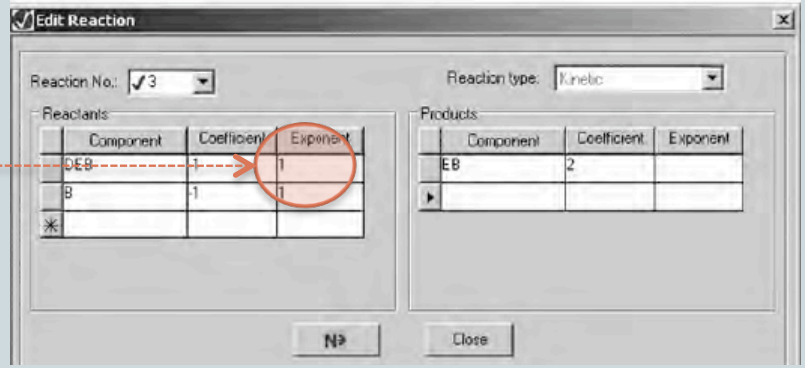


Como la cinética viene dada en exponencial (Arrhenius) escoger POWERLAW

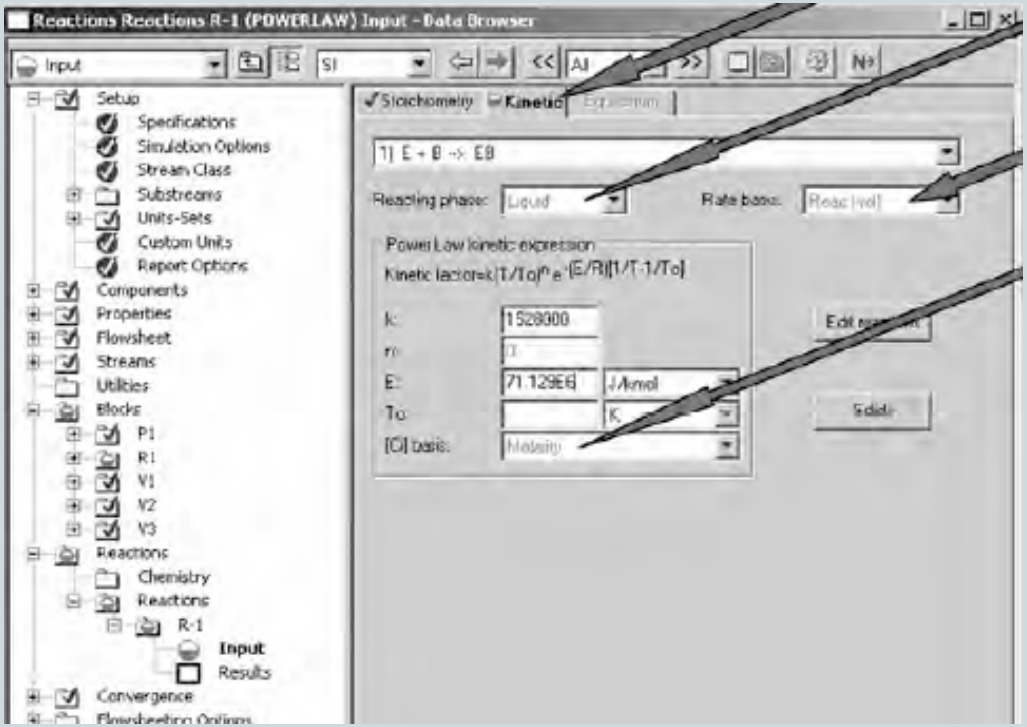
4. Poner la estequiometría de las reacciones





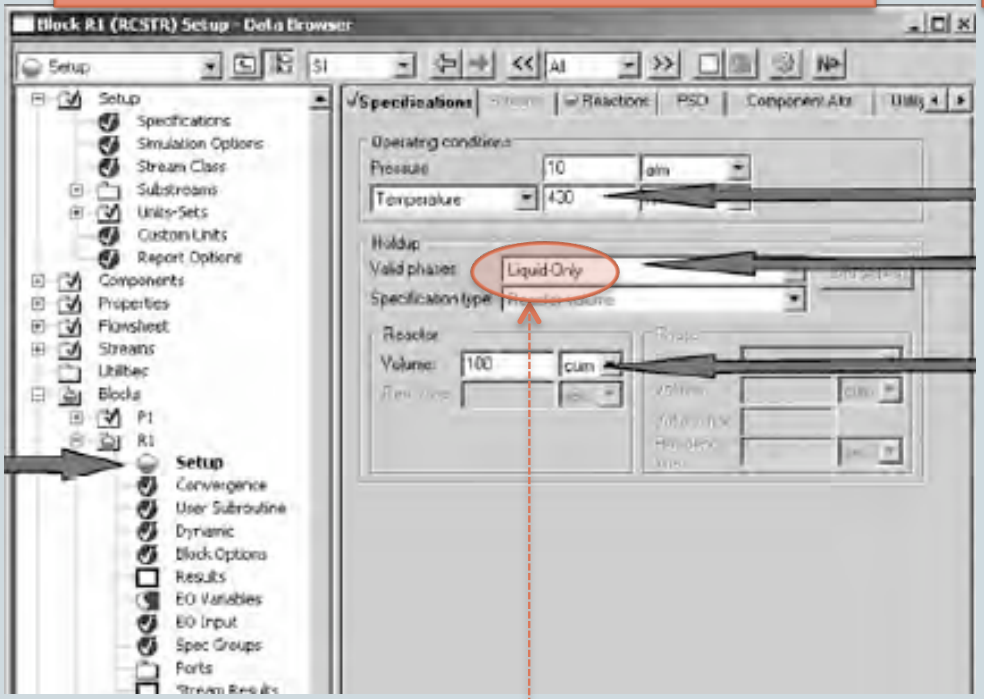


No olvidar los exponentes que indican el orden de la reacción

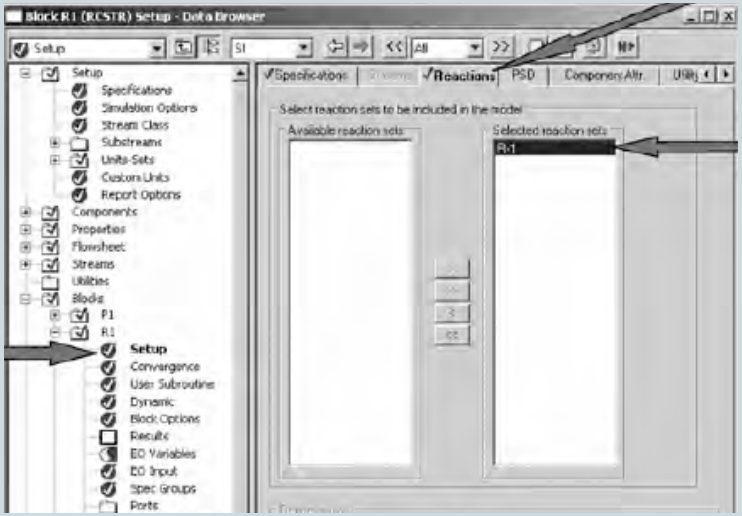


Poner los datos de la cinética de la reacción (con la formulación dada no es necesario poner nada en To)

Poner las condiciones de operación del reactor.



Añadir el grupo de reacciones que tiene lugar



Nótese que en este caso se debe poner líquido únicamente