Ejercicios MATLAB y ASPEN regresión lineal

Ejercicio 1

Se dispone de un reactor de tanque agitado. Se supone que los flujos de salida y entrada son iguales, el volumen del reactor es constante y todas las propiedades físicas permanecen constantes.

En este reactor se lleva a cabo una reacción: A——->B, que sigue la expresión de velocidad $r = k_A C_A (kmol/m^3 s)$. Reacción de primero orden.

El reactor tiene un volumen de $3m^3$.
Se han realizado una serie de medidas en estado estacionario con el fin de poder determinar el coeficiente de la reacción k_A. Estos datos se presentan en la siguiente tabla:

$C_{A_i} kmol/m^3$	$C_A kmol/m^3$	Fm^3/s
.3	.2441	0.005
.32	.2659	0.005
.34	.2824	0.005
.36	.301	0.005
.38	.3151	0.005
.4	.3333	0.005
.42	.3556	0.005
.44	.3698	0.005
.46	.3844	0.005
.48	.3963	0.005
.5	.4164	0.005

Se pide:

- Plantear la ecuación del modelo a emplear en la regresión
- Resolver el problema de regresión lineal con MATLAB
- Analizar el resultado obtenido.

Ejercicio 2

Se dispone de un reactor de tanque agitado. Se supone que los flujos de salida y entrada son iguales, el volumen del reactor es constante y todas las propiedades físicas permanecen constantes.

En este reactor se llevan a cabo dos reacciones:

A——->B, que sigue la expresión de velocidad r = $-\mathrm{k_A C_A}(kmol/m^3 s)$.
B——->C, que sigue la expresión de velocidad r = $-\mathrm{k_B C_B}(kmol/m^3 s)$.

El reactor tiene un volumen de $3m^3$.
Se han realizado una serie de medidas en estado estacionario con el fin de poder determinar los coeficientes de las reacciones k_A y k_B. Estos datos se presentan en la siguiente tabla:

$C_{A_i} kmol/m^3$	$C_A kmol/m^3$	$C_{B_i} kmol/m^3$	$C_B kmol/m^3$	Fm^3/s
.3	.2495	.6	.0311	0.005
.32	.2638	.6	.0312	0.005
.34	.2866	.6	.0313	0.005
.36	.3021	.6	.0314	0.005
.38	.3231	.6	.0319	0.005
.4	.3273	.6	.0318	0.005
.42	.3437	.6	.0322	0.005
.44	.3681	.6	.0323	0.005
.46	.3867	.6	.0328	0.005
.48	.3987	.6	.0323	0.005
.5	.4192	.6	.0329	0.005

Se pide:

- Plantear la ecuación del modelo a emplear en la regresión
- Resolver el problema de regresión lineal con MATLAB
  - Resolviendo ambos parámetros a la vez (en una única regresión)
  - Resolviendo cada parámetro en una regresión.
- Analizar el resultado obtenido.

Ejercicio 3

Se dispone de un reactor de mezcla perfecta. En este reactor se produce la síntesis del amoníaco según la siguiente reaccion:

$N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$

La reacción sucede a 160bar y a 450°C (en fase vapor). La reacción sigue la ecuación de Arrhenius siendo de primer orden respecto del hidrógeno. Se conoce que la energía de activación de la misma es de 32000cal/mol pero se desconoce el valor del coeficiente preexponencial (se supone que está entre 0 y 100000. El volumen del reactor empleado es de $3m^3$.

Se han realizado una serie de ensayos con un reactor piloto obteniéndose la siguiente tabla: (se mantiene constante la cantidad alimentada de hidrógeno y se varía la cantidad de nitrógeno obteniéndose la fracción molar de amoníaco).

N_2 in (kmol/h)	x_{NH_3}
200	0,18811881
205	0,18696187
210	0,18581907
215	0,18469016
220	0,18357488
225	0,18247299
230	0,18138425
235	0,18030842
240	0,17924528
245	0,17819461
250	0,17715618

Tomando como punto de partida una corriente de alimentación a las condiciones de presión y temperatura del reactor y con una composición de 240kmol/h de nitrógeno y 760kmol/h de hidrógeno se pide:

- Obtener el valor de la constante preexponencial. Para ello se empleará el programa de simulación Aspen Plus.
- Analizar el resultado obtenido.

NOTA: Tanto la suposición de reactor de mezcla perfecta como los datos de la energía de activación no se corresponden con la realidad y únicamente se dan a efectos de la realización del ejercicio.