

## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### CONTENIDO

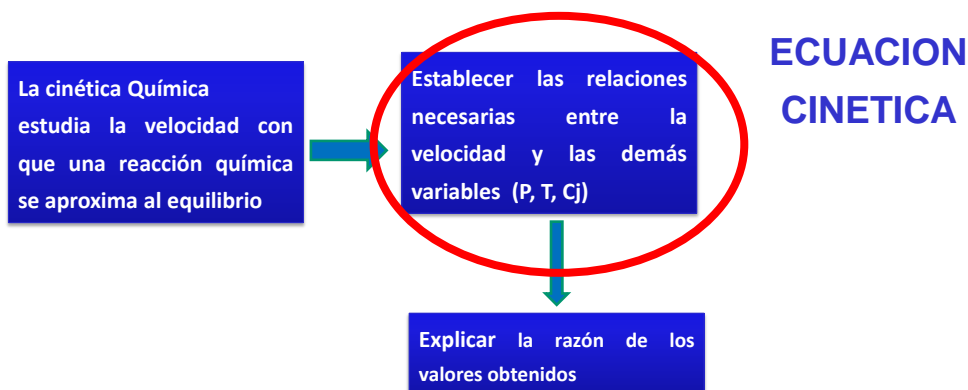
- Factores que afectan a la velocidad de reacción
  - Reacciones homogéneas
  - Reacciones heterogéneas
- Modelos cinéticos
  - Modelos empíricos
  - Modelos mecanísticos
- Obtención de datos cinéticos
  - Reactores experimentales
  - Programación y realización de los experimentos
- Interpretación de datos cinéticos
  - Modelos cinéticos en términos de velocidad de reacción
  - Modelos cinéticos en términos de la variable independiente

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### CINETICA QUIMICA APLICADA: OBJETIVOS

- *Disponer de información sobre la velocidad de la reacción química para predecir el comportamiento del R.Q. o para diseñarlo (cinética química aplicada)*

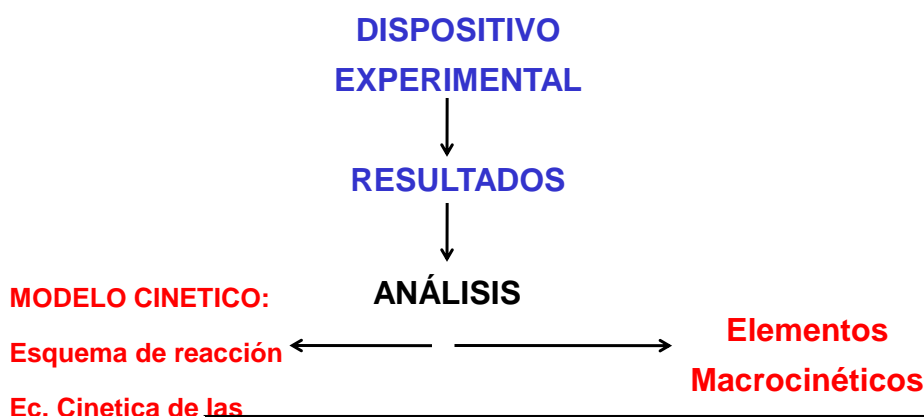
Otra característica de la Cinética Química Aplicada es que estudia reacciones de interés industrial, independientemente de la complejidad que presenten. Así, aunque se conocen más de 5 millones de productos químicos, sólo se fabrican industrialmente menos de 100.000.

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### MAGNITUDES QUE AFECTAN A LA VELOCIDAD DE REACCIÓN

#### ➤ Reacciones homogéneas

##### ➤ Etapa química

- Composición
- Temperatura
- Presión

#### ➤ Reacciones heterogéneas

##### ➤ Etapa química: composición, temperatura, presión

##### ➤ Etapas físicas

- Transferencia de materia entre fases
  - Específicos del tipo de reacción heterogénea
- Transmisión de calor entre fases
  - Específicos del tipo de reacción heterogénea

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

1- En RQ's homogéneas sólo hay que considerar los factores que afectan a la RQ

2- En RQ's heterogéneas hay que considerar también la transferencia de materia y calor

Velocidad observada transformación=(factores que afectan a la Etapa Química, Factores que afectan las etapas de transporte entre fases)

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

La ecuación cinética de la reacción  $i$  es una expresión algebraica que relaciona cuantitativamente la velocidad de la ETAPA QUIMICA con las variables de las que depende.

$$r_{EQ} = f(C_j, T)$$

siendo  $C_j$  la concentración de especies químicas medibles que modifican la velocidad

REACCIONES IRREVERSIBLES: en  $f(C, T)$  Sólo aparece  $C$  reactivos

REACCIONES REVERSIBLES: en  $f(C,T)$  aparecen  $C$  de reactivos y productos

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

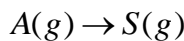
ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



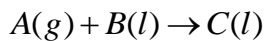
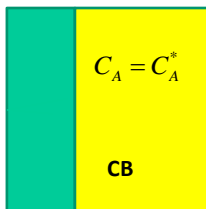
#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

##### Tratamiento cinético

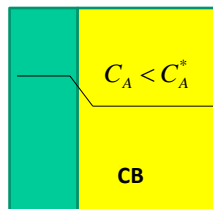
Homogeneo



Pseudo homogeneo



Heterogeneo



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

COMPOSICIÓN DE LA MEZCLA REACTANTE

- Concentración molar  $C_j, C_A$
- Densidad  $\rho_j, \rho_A$
- Fracción molar  $y_j, y_A$
- Fracción másica  $w_j, w_A$
- Conversión fraccional  $X_j, X_A$



TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

PRESION

En fase GAS  $P=f(C, T)$

GAS Ideal

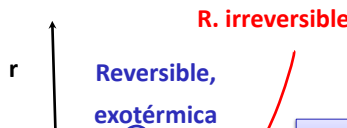
$$PV = NRT \therefore P = CRT \quad P_j = C_j RT \quad P_j = P y_j$$
$$PQ = FRT$$

La variación de P SI modifica la velocidad (relación P-C)

En fase LIQUIDA y P no extremadamente altas  $\rightarrow P \neq f(C, T)$

La variación de P NO modifica la velocidad

TEMPERATURA



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

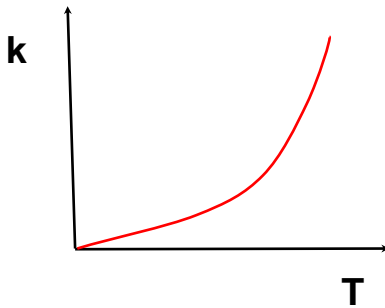
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

**Constante específica de Velocidad (o constante cinética) k**

**Ecuación de Arrhenius (empírica)**



$$k = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

**CONSTANTE ESPECÍFICA DE VELOCIDAD DE REACCIÓN**

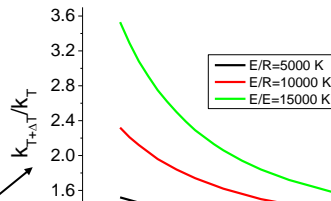
**Aumento de la constante al aumentar la temperatura:**

$$k_T = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} \quad k_{T+\Delta T} = k_0 e^{-\frac{E}{R(T+\Delta T)}}$$

$$\frac{k_{T+\Delta T}}{k_T} = \frac{e^{-\frac{E}{R(T+\Delta T)}}}{e^{-\frac{E}{RT}}} = \exp\left[-\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T+\Delta T} - \frac{1}{T}\right)\right]$$

**Ejemplo** ¿Cuánto aumenta la constante al aumentar 10

$\Delta T = 10$



**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99

## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### CONSTANTE ESPECÍFICA DE VELOCIDAD DE REACCIÓN

Aumento de la constante cinética al aumentar la temperatura:

$$k_T = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} \quad k_{T+\Delta T} = k_0 e^{-\frac{E}{R(T+\Delta T)}}$$

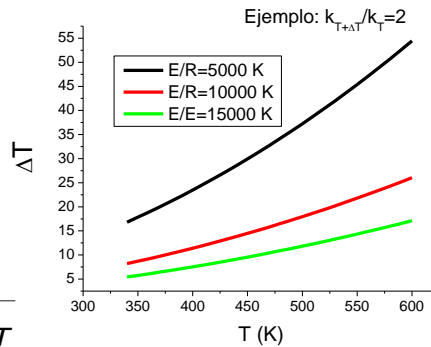
$$\frac{k_{T+\Delta T}}{k_T} = \frac{e^{-\frac{E}{R(T+\Delta T)}}}{e^{-\frac{E}{RT}}} = e^{\left[ -\frac{E}{R} \left( \frac{1}{T+\Delta T} - \frac{1}{T} \right) \right]}$$

#### Ejemplo

$$\frac{k_{T+\Delta T}}{k_T} = 2$$

¿Cuál es aumento de temperatura que se necesita para duplicar la constante cinética?

$$\Delta T = \frac{\left( \frac{R \ln 2}{E} \right) T^2}{1 - \left( \frac{R \ln 2}{E} \right) T}$$



INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### TIPOS DE ECUACIONES CINÉTICAS

#### Según su ORIGEN

- ✓ Ecuación empírica: expresiones matemáticas que no tienen fundamento físico
- ✓ Ecuación con base mecánica: Se obtienen tras proponer un mecanismo de la reacción química. Está en función de las concentraciones medibles pero se deduce teniendo en cuenta las etapas elementales por las que se produce la RQ. Se obtiene teniendo en cuenta los intermedios de reacción, aunque éstos

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### TIPOS DE ECUACIONES CINÉTICAS

Según su FUNCIÓN MATEMÁTICA

✓ Función Potencial o

de variables separables

$$r = f_1(T)f_2(C) \quad r = k \prod_{j=1}^{\text{Reactivos}} C_j^n \quad k = f_1(T)$$

$$\text{Ej } A \rightarrow \text{Ptos } r = kC_A^n \quad A + B \rightarrow \text{Ptos } r = kC_A^n C_B^m$$

n= orden parcial n+m= orden global. Caso especial las reacciones reversibles

✓ Función Hiperbólica o de variables no separables (generalmente se obtiene al proponer un mecanismo)

$$\text{Ej } A \rightarrow \text{Ptos } r = \frac{k_1 C_A^{nA}}{(1 + k_A C_A^{mA})^p} \quad r = f(T, C) \quad r = \frac{k_1 \prod_{j=1}^S C_j^{n_j}}{(1 + \sum k_j C_j^{m_j})^p}$$

$$\text{Ej } A + B \rightleftharpoons C + D \quad r = \frac{k_1 (C_A C_B - C_C C_D / Ke)}{(1 + k_A C_A^n + k_B C_B^m + k_C C_C^p + k_D C_D^q)^z} \quad k_1 = f_1(T) \quad k_j = f_j(T)$$

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### DETERMINACIÓN DEL MODELO CINÉTICO: INTERPRETACIÓN DE DATOS CINÉTICOS

#### ➤ Análisis diferencial

- Se necesitan **datos de velocidad de reacción a distintas composiciones**
- Comparan la velocidad de reacción con la función de composición
- Obtienen la constante específica de velocidad de reacción
- en su caso, las otras constantes que dependen de la

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99



TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

## DETERMINACIÓN DEL MODELO CINÉTICO: INTERPRETACIÓN DE DATOS CINÉTICOS

### ➤ Análisis Integral

- Necesitan datos de **composición del producto de reacción a distintos valores de la variable del reactor (tiempo, tiempo espacial)**
- Comparan la variable del reactor con la función de composición
- Obtienen la constante específica de velocidad de reacción y, en su caso, las otras constantes que dependen de la temperatura
- La energía/s de activación se obtienen a partir de constantes específicas a distintas temperaturas

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### EQUIPOS EXPERIMENTALES PARA OBTENER DATOS CINÉTICOS: TIPOS, CARACTERÍSTICAS y SELECCIÓN

#### TIPOS

Discontinuos: No hay entradas ni salidas de componentes en el sistema

Continuos: No hay acumulación de componentes en el sistema

Semicontinuo: Puede haber entradas al sistema, puede haber alguna salida, pero algún reactivo y/o producto se acumula en el sistema

#### OBJETIVO:

Obtener datos cinéticos en CONTROL DE LA ETAPA QUÍMICA)  
A LAS CONDICIONES DE C y T CORRESPONDIENTES

#### VELOCIDAD MEDIBLE: LA DE GENERACION DE UN COMPUESTO

(MEDIDA DEL CAMBIO DE COMPOSICION DE UN COMPONENTE)

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

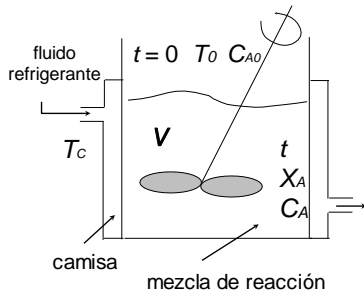
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

OBTENCION DE LA VELOCIDAD DE GENERACION DE j EN DISTINTOS EQUIPOS EXPERIMENTALES: REACTOR DISCONTINUO

Entrada j + Generación j = Salida j + Acumulación j (mol j/s)



Reactor discontinuo: Entrada=Salida=0

Ej: BALANCE AL REACTIVO A

$$R_A V = \frac{dN_A}{dt} \therefore -R_A = \frac{-dN_A}{V dt} \quad N_A = N_{A0}(1 - X_A)$$

$$-R_A = \frac{N_{A0}}{V} \frac{dX_A}{dt} \quad t = \int_0^{X_A} \frac{N_{A0} dX_A}{V(-R_A)}$$

$$V = cte \therefore \frac{N_{A0}}{V_t} = \frac{N_{A0}}{V_0} = C_{A0} \therefore C_A = C_{A0}(1 - X_A) \therefore -R_A = \frac{-dC_A}{dt} \therefore t = \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{-dC_A}{-R_A}$$

$$(-R_A) = \frac{C_{A0} dX_A}{dt} \quad t = \int_0^{X_A} \frac{C_{A0} dX_A}{(-R_A)}$$

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

REACTORES DISCONTINUOS DE LABORATORIO



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

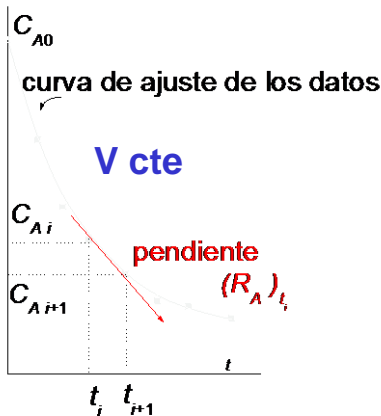
Equipos experimentales: **REACTOR DISCONTINUO**

VENTAJAS:

- Montaje sencillo, poca automatización fácil isothermicidad, control pH, etc
- Cada experimento permite obtener varios datos CA vs. t

INCONVENIENTES:

- Empleo más difícil con fase gas y en reacciones catalizadas por sólidos
- La velocidad se obtiene como derivada, error numérico en la interpretación de los datos diferenciales



T=cte		T=cte	
t	CA	-RA	r
t1	CA1	-RA1	r1
t2	CA2	-RA2	r2
t3	CA3	-RA3	r3
t4	CA4	-RA4	r4
...	...	...	...

Método Integral

Método Diferencial

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### PROCEDIMIENTOS PARA OBTENER LAS DERIVADAS A PARTIR DE DATOS CINÉTICOS C

#### ➤ Método gráfico:

- Se determina la tangente a la curva para cada una de las composiciones

#### ➤ Método numérico:

- Diferencia de concentraciones en puntos adyacentes entre los incrementos de tiempo en los que se ha producido el cambio

#### ➤ Método polinómico:

- Se ajustan los datos de concentración tiempo a una función polinómica, a

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

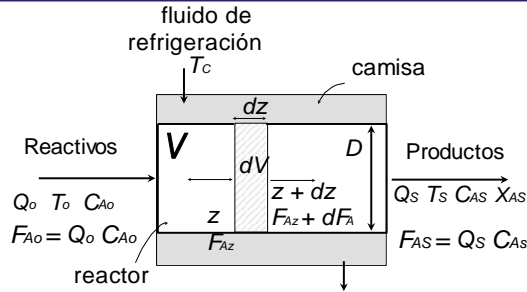
---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

**TEMA 4. Cinética Química Aplicada.**

OBTENCIÓN DE LA VELOCIDAD DE GENERACIÓN DE  $j$  EN DISTINTOS EQUIPOS EXPERIMENTALES: REACTOR CONTINUO TUBULAR



**Entrada A + Generación A = Salida A + Acumulación A (mol j/s)**

**Reactor Continuo:** Acumulación=0

Tubular:  $F_{A_v} + R_A dV = F_{A_{v+dv}} \therefore -R_A = \frac{F_{A_z} - F_{A_{z+dz}}}{dV} = \frac{-dF_A}{dV} = \frac{F_{A_0} dX_A}{dV}$

$$\boxed{-R_A = \frac{dX_A}{d(V/F_{A_0})}} \quad \frac{V}{F_{A_0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-R_A} \quad \text{Si } Q_S = Q_0 = Q \therefore \frac{V}{Q} = \int_{C_{A_0}}^{C_A} \frac{-dC_A}{-R_A} = \int_0^{X_A} \frac{C_{A_0} dX_A}{-R_A} =$$

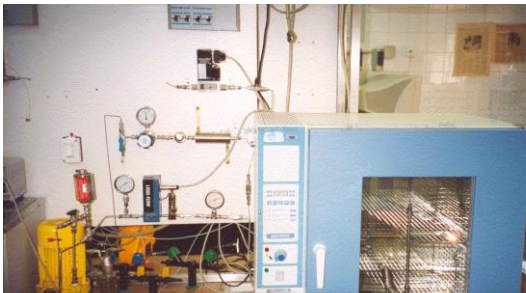
INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



**TEMA 4. Cinética Química Aplicada.**

*Equipos Experimentales: REACTOR CONTINUO TUBULAR*



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

**TEMA 4. Cinética Química Aplicada.**

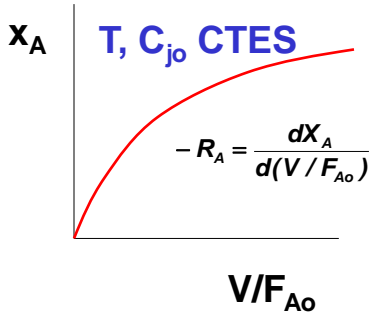
Equipos **Experimentales: REACTOR CONTINUO TUBULAR**

**INCONVENIENTES:**

- Problemas para conseguir la isothermicidad (reacciones muy exo-endotérmicas)
- La velocidad se obtiene como derivada, error numérico en la interpretación de los datos.
- Solo 1 dato por experimento (salida)

**VENTAJAS:**

- Montaje sencillo, poca automatización (sólo la bomba o el compresor)
- Más fácil de operar en fase gas y con catalizadores sólidos
- Posibilidad de análisis en línea (gas)



T=cte, C <sub>jo</sub> cte				
F <sub>Ao</sub>	V/F <sub>Ao</sub>	X <sub>A</sub>	-R <sub>A</sub>	r
F <sub>Ao1</sub>	V/F <sub>Ao1</sub>	X <sub>A1</sub>	-R <sub>A1</sub>	r <sub>1</sub>
F <sub>Ao2</sub>	V/F <sub>Ao2</sub>	X <sub>A2</sub>	-R <sub>A2</sub>	r <sub>2</sub>
F <sub>Ao3</sub>	V/F <sub>Ao3</sub>	X <sub>A3</sub>	-R <sub>A3</sub>	r <sub>3</sub>
F <sub>Ao4</sub>	V/F <sub>Ao4</sub>	X <sub>A4</sub>	-R <sub>A4</sub>	r <sub>4</sub>

Método Integral

Método Diferencial

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



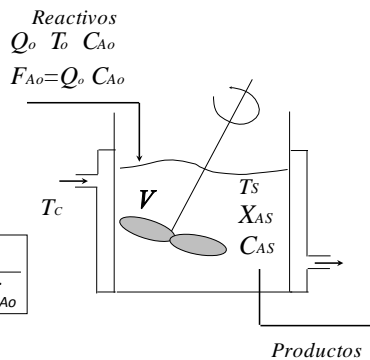
**TEMA 4. Cinética Química Aplicada.**

OBTENCIÓN DE LA VELOCIDAD DE GENERACIÓN DE j EN DISTINTOS EQUIPOS EXPERIMENTALES: **REACTOR CONTINUO MEZCLA COMPLETA**

**Reactor Continuo:** Acumulación=0

Tanque MC: 1 velocidad en todo el V

$$F_{Ao} + R_A V = F_{A\text{ salida}} \therefore -R_A = \frac{F_{Ao} - F_{As}}{V} = \frac{X_A}{V/F_{Ao}}$$



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



**TEMA 4. Cinética Química Aplicada.**

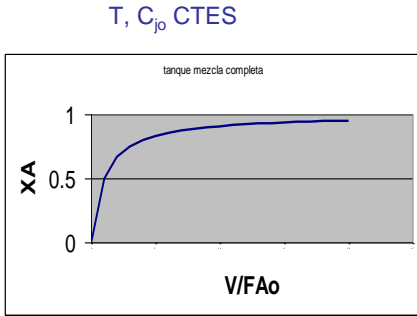
*Equipos Experimentales: REACTOR CONTINUO MEZCLA COMPLETA*

**INCONVENIENTES:**

- Mayor automatización (agitación, caudal, T)
- Solo 1 dato por experimento (salida)
- Aunque puede operar en fase gas, es más difícil conseguir la estanqueidad que en el tubular

**VENTAJAS:**

- Fácil isotermicidad
- Fácil control de pH (Fase líquida)
- Cálculo algebraico de la velocidad, minimiza el error en el método diferencial



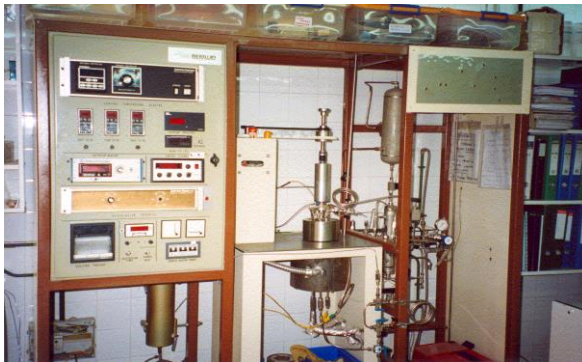
$$-R_A = \frac{F_{A0} - F_{As}}{V} = \frac{X_A}{V/F_{A0}}$$

T=cte, C <sub>jo</sub> cte			-R <sub>A</sub>	r
F <sub>A0</sub>	V/F <sub>A0</sub>	X <sub>A</sub>		
F <sub>A01</sub>	V/F <sub>A01</sub>	X <sub>A1</sub>	-R <sub>A1</sub>	r <sub>1</sub>
F <sub>A02</sub>	V/F <sub>A02</sub>	X <sub>A2</sub>	-R <sub>A2</sub>	r <sub>2</sub>
F <sub>A03</sub>	V/F <sub>A03</sub>	X <sub>A3</sub>	-R <sub>A3</sub>	r <sub>3</sub>
F <sub>A04</sub>	V/F <sub>A04</sub>	X <sub>A4</sub>	-R <sub>A4</sub>	r <sub>4</sub>

↓ Método Diferencial

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



## ➤ Programación y realización de los experimentos

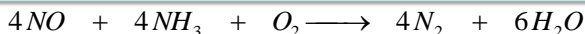
## Reacciones Simples

### ¿Cómo medir la composición a la que va referida la velocidad?

Hay que medir 1 especie que participe en la reacción. El resto de composiciones se obtienen por estequiometría. ¿Cómo elegir la especie a medir?

- No debe estar en gran exceso (debe tener una variación significativa con el tiempo o entre entrada y salida del reactor)
- El método analítico debe ser fiable y repetitivo (no interfieren otras especies en el medio en los valores del análisis) y a ser posible sencillo

Ejemplo: Reacción en fase gas de eliminación de NO



Los gases a tratar vienen de un proceso de combustión (y se añade tanto amoníaco en moles como NO haya en los gases)

¿Qué compuestos podrían ser elegidos como clave y por qué?

Composición	Flujo másico (kg/h)	Fracción másica (% peso)
CO <sub>2</sub>	504506	22,04
SO <sub>2</sub>	2014	0,09
H <sub>2</sub> O	101913	4,52
N <sub>2</sub>	1549783	68,67
Ar	26382	1,17
HCl	21	0,001
O <sub>2</sub>	72301	3,20
NO	1104	0,05
Cenizas	31227	1,38

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### ➤ Programación y realización de los experimentos

En qué equipo y qué experimentos (el Intervalo de variables debe ser el empleado en el proceso industrial)

Selección de las variables dependientes e independientes. Por ejemplo, independientes T y C, dependientes r, t, V/FAo.

Posibilidades:

- 1.- DISEÑO CLASICO
- 2.- DISEÑO ESTATICO
- 3.- DISEÑO DINAMICO

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### ➤ Programación y realización de los experimentos

#### 1. Diseño clásico:

##### **Fijamos una temperatura y variamos la composición**

P.ej. En un reactor discontinuo C varía con el tiempo

En un tubular y en un tanque de MC continuo variamos  $F_{A_0}$ , con lo que varía la concentración a la salida

##### AI) Analizamos los datos a cada T

Propuesta de una ecuación cinética y Ajuste de los datos experimentales a T constante

Calculo de la constante cinética a cada T

¿Se mantiene constante el orden de reacción con la T?

Si: modelo correcto.

No: el modelo propuesto es erróneo

##### AII) Analizamos todos los datos obtenidos a todas las T

Propuesta de una ecuación cinética y Ajuste de los todos los datos experimentales (k se expresa como una función de T -ec. Arrhenious-)

Calculo del factor preexponencial y energía de activación

¿Es bueno el ajuste estadístico? ¿Es  $E_a$  positivo? Si no sucede esto, el modelo propuesto es erróneo

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### ➤ Programación y realización de los experimentos

#### 2.- Diseños Estáticos

Todos los experimentos que se van a realizar se fijan desde el principio

- Diseños factoriales
- Diseños Rotacionales

Permiten disminuir el número de experimentos

#### Ejemplo:

Suponemos  $r = k_0 \exp(-E/RT) C_A^n$

Incógnitas del modelo:  $k_0$ ,  $E$ ,  $n$

Número mínimo de datos: 4, con variación de T y  $C_A$

$T_{Max} - T_{min}$

$C_{Max} - C_{min}$

Expto	$C_A$	T	r
1	$C_1$	$T_1$	$r_1$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99



## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### ➤ Programación y realización de los experimentos

#### 3.- Diseños Dinámicos

a) Se plantea inicialmente un grupo de experimentos (mínimo  $n^\circ$  el de parámetros a calcular+1)

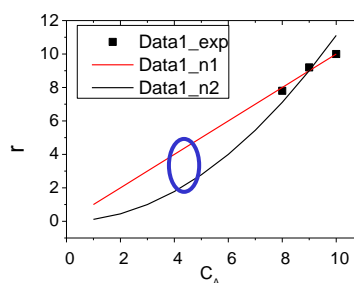
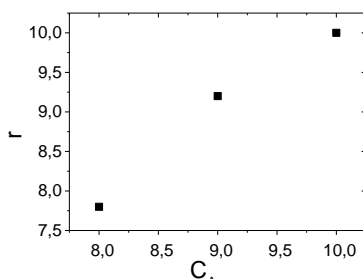
Ejemplo: Suponemos  $r=kC_A^n$

b) Experimentos: Datos  $r$  vs.  $C_A$  a  $T$  constante

c) Se ajustan los datos a los posibles modelos, Ej  $n=1$  y  $n=2$

d) Se representan las funciones de ajuste obtenidas en función de  $C_A$

e) Se realizan experimentos posteriores en las condiciones donde más se diferencien los modelos



INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

### ➤ Interpretación de datos cinéticos

#### OBJETIVOS

1. Discriminación entre modelos cinéticos o identificación de modelos
2. Estimación de parámetros
3. Precisión adecuada del modelo

#### ANÁLISIS DE DATOS

- Forma Diferencial: datos velocidad-concentración-temperatura
- Forma Integral: Datos tiempo (o tiempo espacial)-concentración-temperatura

#### ANÁLISIS DIFERENCIAL ⇒ CÁLCULO PREVIO DE LA VELOCIDAD $R_j$

- Derivando  $N_j$  vs  $t$  (ó  $C_j$  vs  $t$  si  $V$  es CTE) en R. Discontinuo
- Derivando  $dF_j$  vs  $dV$  (si  $j$  es un reactivo, p.e. A será  $dX_A/d(V/F_{A0})$ ) en R tubular
- **Algebraicamente en un reactor continuo de mezcla completa**

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

TEMA 4. Cinética Química Aplicada.  
 > Interpretación de datos cinéticos

ANALISIS DIFERENCIAL

MODELOS POTENCIALES: T cte

1 reactivo  
 (regresión lineal)  
 $r = kC_A^n$   
 $\log r = \log k + n \log C_A$

Más de 1 reactivo  
 $r = kC_A^n C_B^m$   
 $\log r = \log k + n \log C_A + m \log C_B$   
 $C_j = f(C_A)$



Regresión lineal múltiple  
 $y = a + b_1 x_1 + b_2 x_2$

**Posibles simplificaciones:**  
 Relaciones Estequiométricas:  
 Si  $C_{B_0} = C_{A_0} * (v_B / v_A)$      $C_B = C_A * (v_B / v_A) \forall X_A$   
 Si uno de los reactivos está en gran exceso  
 Ej  $C_{B_0} \gg C_{A_0} \Rightarrow C_B = C_{B_0} \forall X_A$   
 $k' = k C_{B_0}^m$      $r = k' C_A^n$

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
 AURORA SANTOS LOPEZ



TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

> Interpretación de datos cinéticos

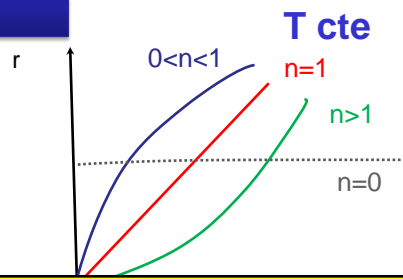
ANALISIS DIFERENCIAL

ANALISIS r-C<sub>A</sub> (Método Diferencial).

Ejemplo: REACCION A → Ptos

Modelos Potenciales  
 (Variables separables)  
 $r = kC_A^n$

- Al aumentar C<sub>A</sub> aumenta r, más cuanto mayor sea n



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

**TEMA 4. Cinética Química Aplicada.**

➤ Interpretación de datos cinéticos

**ANÁLISIS DIFERENCIAL**

**MODELOS HIPERBÓLICOS: T cte**

solo aparece 1 reactivo. Ej

$$r = \frac{kC_A^n}{(1 + K_A C_A)^p}$$

n, m, p  
supuestos

-Regresión lineal: Hay que linealizar

$$\left(\frac{C_A^n}{r}\right)^{1/p} = \frac{1}{k^{1/p}} + \frac{K_A}{k^{1/p}} C_A^m$$

-Regresión no lineal: no se manipula la ecuación cinética, se ajusta r vs C<sub>A</sub> (son necesarios parámetros iniciales de k y K<sub>A</sub>, se predicen mejor los valores experimentales)

Aparece más de 1 reactivo o aparecen productos: Ej

$$r = \frac{kC_A^n C_B^m}{(1 + K_A C_A^{n_A} + K_B C_B^{n_B})^p}$$

Relacionar clave y no clave por estequiometría  
Regresión no lineal

Método de las velocidades iniciales si hay productos en la ec. cinética



**TEMA 4. Cinética Química Aplicada.**

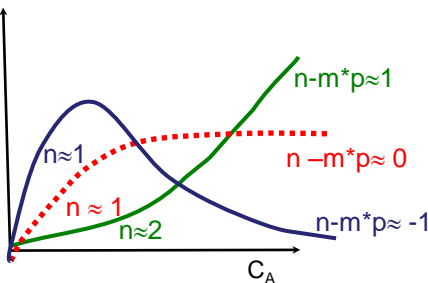
➤ Interpretación de datos cinéticos

**ANÁLISIS DIFERENCIAL**

**REACCIÓN A → Ptos**

**Modelos Hiperbólicos  
Variables no separables**

$$r = \frac{k_1 C_A^n}{(1 + k_A C_A^m)^p}$$



Es posible linealizar, puede haber varias posibles linealizaciones:

Ejemplo:

$$r = \frac{k C_A^n}{(1 + K_A C_A^m)^p} \therefore \frac{C_A}{r} = \frac{1}{k} + \frac{K_A}{k} C_A^m \therefore r = -\frac{1}{K_A} \frac{r}{C_A} + \frac{k}{K_A} \dots$$

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**



TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

ANALISIS DIFERENCIAL

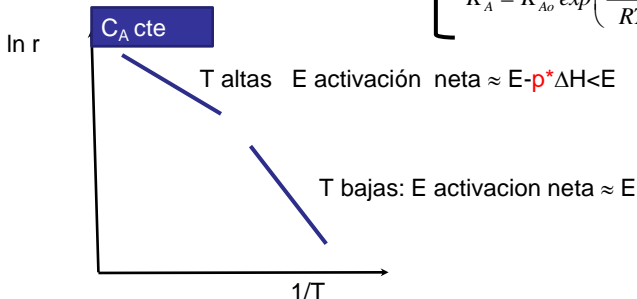
> Interpretación de datos cinéticos

REACCION A → Ptos

Variación de **Ea obs.** con la **T** en los modelos hiperbólicos ( $k \uparrow$  si  $T \uparrow$ )

Ejemplo  
si  $K_A \uparrow$  si  $T \uparrow$

$$\begin{cases} k = k_o \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) & E > 0 \\ K_A = K_{Ao} \exp\left(\frac{-\Delta H}{RT}\right) & \Delta H > 0 \end{cases}$$



$$r = \frac{k_1 C_A^n}{(1 + k_A C_A^m)^p}$$

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

ANALISIS DIFERENCIAL

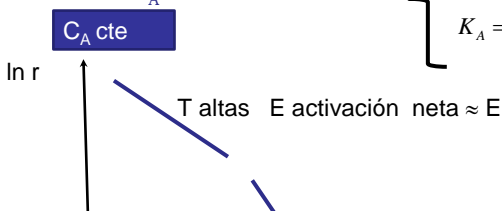
> Interpretación de datos cinéticos

REACCION A → Ptos

Variación de **Ea** con la **T** en los modelos hiperbólicos ( $k \uparrow$  si  $T \uparrow$ )

Ejemplo  
 $K_A \downarrow$  si  $T \uparrow$

$$\begin{cases} k = k_o \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) & E > 0 \\ K_A = K_{Ao} \exp\left(\frac{-\Delta H}{RT}\right) & \Delta H < 0 \end{cases}$$



$$r = \frac{k_1 C_A^n}{(1 + k_A C_A^m)^p}$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

#### ANÁLISIS DIFERENCIAL

##### > Interpretación de datos cinéticos

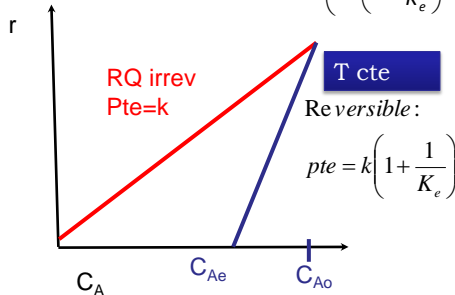
REACCIÓN  $A \rightleftharpoons R$

$$r = kC_A - k' C_R = k \left( C_A - \frac{C_R}{K_e} \right)$$

(V, Q ctes)  $C_R = C_{R0} + C_{A0} X_A$

si  $C_{R0} = 0 \therefore C_R = C_{A0} X_A = C_{A0} - C_A \therefore r = k \left( C_A \left( 1 + \frac{1}{K_e} \right) - \frac{1}{K_e} C_{A0} \right)$

Si  $C_{R0} = 0$   $X_{Ae} = \frac{1}{1 + \frac{1}{K_e}}$



INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

##### > Interpretación de datos cinéticos

#### ANÁLISIS INTEGRAL

SUSTITUCIÓN DE LA ECUACION CINÉTICA EN EL TÉRMINO DE VELOCIDAD Y AJUSTE COMPOSICIÓN-TIEMPO (o TIEMPO ESPACIAL)

**Hay que suponer una ecuación cinética** (hay que probar distintos modelos para discriminar el correcto). En el caso de modelos potenciales esto complica el cálculo respecto al método diferencial. VENTAJA: si en el método diferencial era necesario derivar, el método integral elimina ese error.

Se puede emplear como modelo de partida el obtenido de forma diferencial (si es posible).

En reactores discontinuos y tubulares hay que integrar antes de ajustar los datos

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

> Interpretación de datos cinéticos

ANÁLISIS INTEGRAL

### REACTOR DISCONTINUO, REACTOR TUBULAR

#### MODELOS POTENCIALES E HIPERBOLICOS SENCILLOS.

Datos a T cte, hay integral analítica

Ejemplo, para una reacción de primer orden

$$r = kC_A \quad v_A = -1$$

Reactor Discontinuo

$$t = \int_0^{X_A} \frac{N_{A0} dX_A}{V k C_A} = \int_0^{X_A} \frac{N_{A0} dX_A}{V k \frac{N_A}{V}} = \int_0^{X_A} \frac{N_{A0} dX_A}{k N_{A0} (1 - X_A)} = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1 - X_A}$$

Si T=cte con el tiempo

En discontinuo y con n=1, que haya expansión en fase gas no influye en la curva X vs t

Ajuste t vs. ln[1/(1-xA)]

$$r = kC_A \quad v_A = -1$$

Reactor Tubular

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k C_A} \quad \text{Si } Q = cte \therefore \frac{V}{Q} = \int_0^{X_A} \frac{C_{A0} dX_A}{k C_{A0} (1 - X_A)} = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1 - X_A}$$

Si T=cte con el tiempo de residencia

Ajuste V/Q vs. ln[1/(1-xA)]

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



## TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

> Interpretación de datos cinéticos

ANÁLISIS INTEGRAL

### REACTOR DISCONTINUO, REACTOR TUBULAR

#### MODELOS POTENCIALES E HIPERBOLICOS SENCILLOS.

Datos a T cte, hay integral analítica

Ejemplo, para una reacción de primer orden, tubular a Q variable

$$r = kC_A \quad v_A = -1$$

Reactor Tubular

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k C_A} \quad \text{Si } Q \neq cte \therefore \frac{V}{Q_0} = \int_0^{X_A} \frac{C_{A0} (1 + \varepsilon_A X_A) dX_A}{k C_{A0} (1 - X_A)}$$

$$\frac{V}{Q_0} = \frac{1}{k} \left\{ \ln \left( \frac{1}{1 - X_A} \right) (1 + \varepsilon_A) - \varepsilon_A X_A \right\}$$

$$\frac{r(\varepsilon_A = 0)}{r(\varepsilon_A \neq 0)} = (1 + \varepsilon_A X_A)$$

$$\varepsilon_A > 0$$

$$\varepsilon_A < 0$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

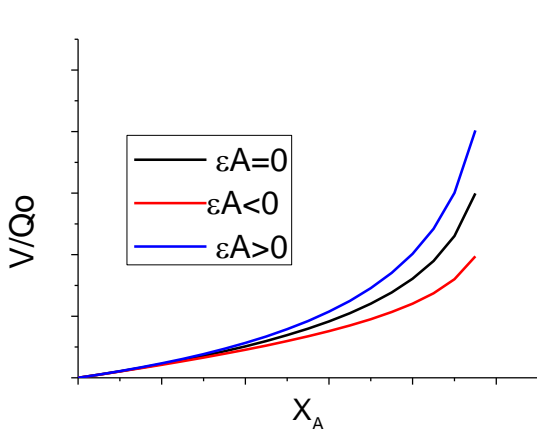
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

> Interpretación de datos cinéticos

ANÁLISIS INTEGRAL



$$r = kC_A \quad \nu_A = -1$$

Reactor Tubular

¿por qué?

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

ANÁLISIS INTEGRAL

> REACCIÓN A → Ptos Modelos Potenciales, V ó Q ctes,  $t_r = V/Q$

A → Ptos	$r = kC_A^n \quad \frac{-dC_A}{d(t \text{ ó } t_R)} = kC_A^n$	$t = 0 \therefore C_A = C_{A0} \therefore X_A = 0$
$n=0$	$C_A = C_{A0} - kt$	$X_A = \frac{k}{C_{A0}}t$
hay un t finito para $X_A=1$		
$n=1$	$C_A = C_{A0} \exp(-kt)$ $t = \frac{1}{k} \ln \frac{C_{A0}}{C_A}$	$X_A = 1 - \exp(-kt)$ $t = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1 - X_A}$
$X_A$ vs t NO depende de $C_{A0}$		
Orden 2, A	$C_A = \frac{C_{A0}}{1 + kC_{A0}t}$ $t = \frac{1}{k} \left( \frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} \right)$	$X_A = \frac{kC_{A0}t}{1 + kC_{A0}t}$ $t = \frac{1}{k} \frac{X_A}{C_{A0}(1 - X_A)}$
Fijada $X_A$ t es $\propto 1/C_{A0}$		

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

> Interpretación de datos cinéticos

ANALISIS INTEGRAL

##### Ejercicio.

Obtener la ecuación integrada en un reactor

Tubular o discontinuo (en F. líquida, o sin cambio de Q, V en fase gas)

Cinéticas hiperbólicas sencillas:  $r = \frac{kC_A}{1+K_A C_A}$   $r = \frac{kC_A}{1+K_A C_A^2}$

Cinética reversible  $r = k \left( C_A - \frac{C_R}{K_E} \right)$  para  $C_{R0} = 0$  o  $\neq 0$

Cinética con dos reactivos  $A+B \rightarrow$  Ptos ( $C_{A0} = 2C_{B0}$ )  $r = kC_A C_B$   
 $M_B = 0,5$

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

> Interpretación de datos cinéticos

ANALISIS INTEGRAL

**REACTOR DISCONTINUO, REACTOR TUBULAR**

MODELOS CON INTEGRACION ANALITICA NO POSIBLE o  
COMPLICADA: AJUSTE CON INTEGRACION NUMERICA

CASO 1: se pueden separar variables T y C

##### Ejemplo

Reactor Tubular

$$r = kC_A^{0.5} C_B C_C^2 \quad \text{Si } v_A = -I \quad \therefore \frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{kC_A^{0.5} C_B C_C^2} = \frac{I}{k} \therefore I = k \frac{V}{F_{A0}}$$

Para una  $X_A$  se conocen por estequiometría

$C_A, C_B, C_C$

Datos  $V/F_{A0}$  vs  $X_A$

$\Rightarrow$  datos  $I-X_A - V/F_{A0}$

$$\frac{1}{C_A^{0.5} C_B C_C^2}$$

Area=I

I

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99



#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

> Interpretación de datos cinéticos

ANÁLISIS INTEGRAL

#### REACTOR DISCONTINUO, REACTOR TUBULAR

MODELOS CON INTEGRACION ANALITICA NO POSIBLE o  
COMPLICADA: AJUSTE CON INTEGRACION NUMERICA

CASO 2: No se pueden separar variables T y C

**Ejemplo**

$$r = \frac{k C_A^n C_B^m}{(1 + K_A C_A^{n_A} + K_B C_A^{n_B})^p} \quad v_A = -I$$

Reactor Tubular

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_0^{x_A} \frac{dX_A}{\frac{k C_A^n C_B^m}{(1 + K_A C_A^{n_A} + K_B C_A^{n_B})^p}}$$

Métodos Numéricos:  
Regresión no lineal acoplado  
con Euler o Runge-Kutta

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

> Interpretación de datos cinéticos

CINETICAS COMPLEJAS, SIMPLIFICACIONES EN EL ANALISIS  
2. METODO de AISLAMIENTO

Se introducen unas especies químicas pero no otras  
necesarias para que ocurra la reacción

#### A) Método de las velocidades iniciales

Ejemplo  $A \rightleftharpoons R + S$

$$r = k_d C_A - k_i C_R C_S$$

Inicialmente sólo introducimos A, dejamos que se produzca una  
conversión de A pequeña ( $C_R, C_S$ , pequeños) Calculamos  $k_d$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

CINETICAS COMPLEJAS, SIMPLIFICACIONES EN EL ANALISIS: 1. METODO DE EXCESO

**Si hay más de un reactivo:**

**Un reactivo se fija en defecto y los otros en exceso**

**Ejemplo:**  $\frac{C_{j_0}}{|V_j|} > 10 \frac{C_{\text{reactivo defecto}_0}}{|V_{\text{reactivo defecto}}|}$  (10 es un valor arbitrario)

Quando el reactivo en defecto se haya convertido completamente los demás reactivos habrán cambiado menos del x% (p.e. 10%) y puede suponerse que

$$X_{\text{reactivo defecto}} = 1 \therefore C_j \approx C_{j_0} \Rightarrow C_j \approx C_{j_0} \forall t \text{ (o } \forall \frac{V}{Q})$$

*Ejemplo*

$$r = k C_A^n C_B^m C_C^p \quad \text{Si A está en defecto} \quad r \approx k' C_A^n$$

$$k' = k C_{B_0}^m C_{C_0}^p$$

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



#### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

CRITERIOS DE AJUSTE (DISCRIMINACION DEL MODELO):

Criterios físicos:

- Constantes cinéticas (o del denominador en M. Hiperbólicos) positivas
- Variación adecuada de la k cinética con la Temperatura

Criterios Estadísticos

Regresión Lineal:

Coeficiente de correlación

t de student

Fijado un número de N(datos)-P(parámetros) estos valores deben ser superiores a lo requerido para un % de fiabilidad (ej 95%), ver tablas estadísticas

Regresión no lineal

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

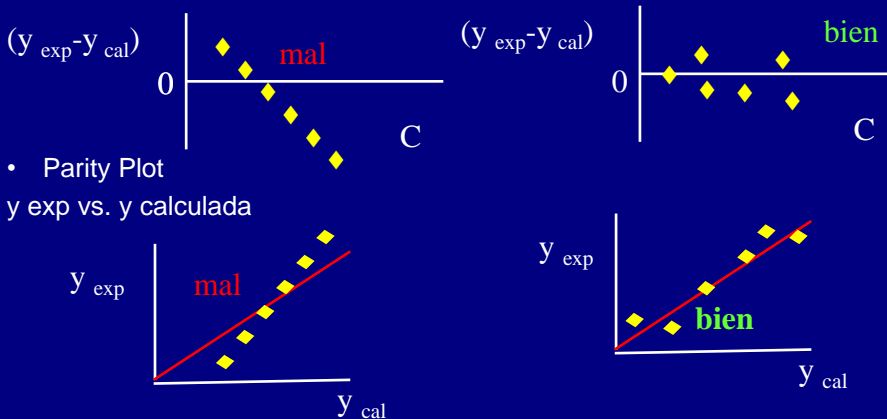
---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

## Análisis de Residuos

- Tendencia del Residuo con la Variable  
( $y_{exp} - y_{cal}$ ) vs. variable  
(ej. la variable puede ser T, C) El error debe ser aleatorio



- Parity Plot  
 $y_{exp}$  vs.  $y_{cal}$

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



### TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

## DETERMINACIÓN DEL MODELO CINÉTICO: REALIZACIÓN DE LOS EXPERIMENTOS

- Elección del reactor experimental:
  - Discontinuo
  - Continuo de mezcla completa
  - Continuo flujo pistón, flujo pistón con recirculación,
- Elección de las condiciones de operación:
  - Diferencial: método de análisis
  - Integral
- Operación en las condiciones ideales para conocer los elementos

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

TEMA 4. Cinética Química Aplicada.

## DETERMINACIÓN DEL MODELO CINÉTICO: INTERPRETACIÓN DE DATOS CINÉTICOS

- **Identificación de modelos**
  - Discriminación entre modelos
  - Estimación de parámetros
  - Precisión del modelo
- **Modo de comparar los modelos**
  - En forma diferencial: velocidad de reacción, función de composición
  - En forma integrada: composición, variable del reactor
- **Técnicas de comparación**
  - Inspección de representaciones gráficas
  - Técnicas estadísticas: R. LINEAL, RNL, ETC,

---

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99