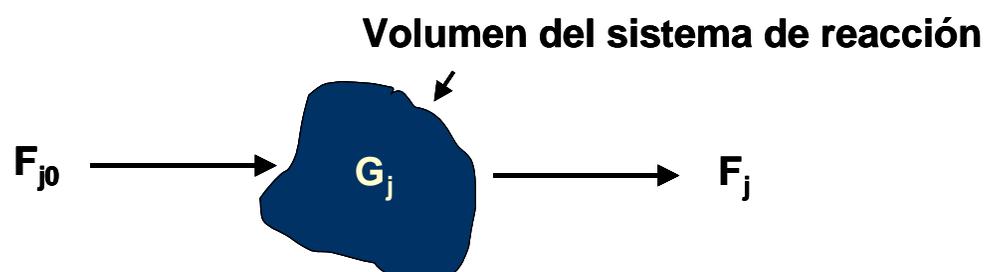


CAPITULO 1 – BALANCES MOLARES

1.1 INTRODUCCIÓN

- Los reactores químicos son el corazón de la mayoría de las industrias químicas.
- El conocimiento de la cinética química y del diseño de reactores distingue al ingeniero químico de los demás ingenieros.
- El reactor químico es el recipiente donde un reactivo de un relativo bajo valor se convierte en un producto de mayor valor. El balance económico marca la viabilidad del proyecto de reacción.
- Para diseñar reactores químicos es necesario plantear balances de masa y energía y cantidad de movimiento.
- A partir de estas ecuaciones, se relaciona la geometría del equipo con las variables operativas y las especificaciones de producción.

1.2 BALANCE DE MASA GENERAL PARA CUALQUIER TIPO DE REACTOR



ENTRADA - SALIDA + GENERACIÓN = ACUMULACIÓN

$$\left(\begin{array}{l} \text{Flujo molar} \\ \text{de la especie } j \\ \text{que ingresa al} \\ \text{sistema} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{l} \text{Flujo molar} \\ \text{de la especie } j \\ \text{que egresa al} \\ \text{sistema} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{l} \text{Velocidad de} \\ \text{generación de} \\ \text{la especie } j \text{ por} \\ \text{reacción} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{Velocidad de} \\ \text{acumulación de} \\ \text{la especie } j \text{ en} \\ \text{el sistema} \end{array} \right)$$

$$F_{j0} + G_j - F_j = \frac{dN_j}{dt} \quad (1.1)$$

$$[G_j] = \text{mol}_j/\text{s}$$

El término de generación G_j está relacionado con la velocidad de la reacción que ocurre en el volumen de control estudiado. La velocidad de generación de la especie j es la velocidad de reacción r_j que tiene unidades de mol/volumen tiempo (por ejemplo mol/m³ min). En el volumen de control V (volumen de reacción) puede ser que en diferentes ΔV la velocidad de reacción tome distintos valores, entonces la velocidad de generación de la especie j puede expresarse como:

$$G_j = \int_0^V r_j dV \quad (1.2)$$

Reemplazando la ecuación (1.2) en (1.1) resulta:

$$F_{j0} + \int_0^V r_j dV - F_j = \frac{dN_j}{dt} \quad (1.3)$$

La ecuación 1.3 es el balance de masa generalizado que se convierte en la ecuación de diseño de los reactores que se describirán a continuación. Es importante observar que se considera que ingresa y egresa del reactor una sola corriente de la especie j .

1.3 CLASIFICACIÓN DE REACTORES SEGÚN SU FORMA Y FLUJO

Los reactores según su forma se clasifican en **reactores tanque y reactores tubulares**.

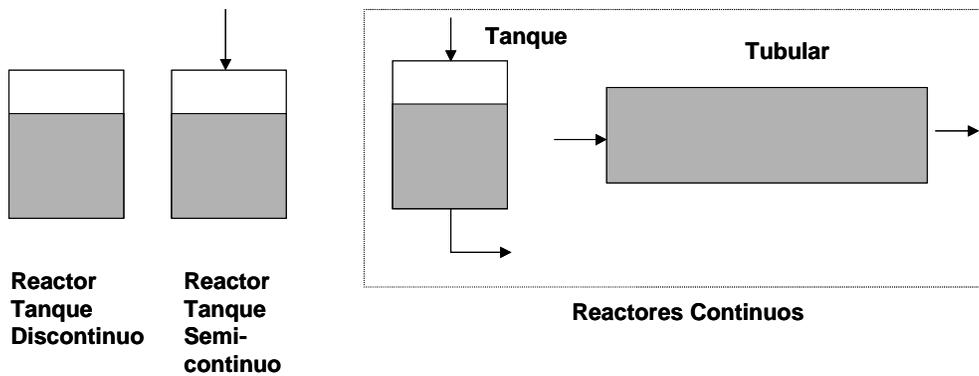


REACTOR TANQUE



REACTOR TUBULAR

Los reactores según su flujo se pueden clasificar en **reactores continuos, reactores discontinuos y semicontinuos**.

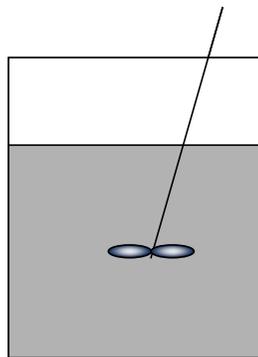


1.4 REACTORES DISCONTINUOS

Los reactores tanques discontinuos no presentan corrientes de entrada o salida, de modo que los flujos F_{j0} y F_j en la ecuación (1.3) son 0, por lo tanto el balance de masa para un reactor tanque discontinuo es:

$$\int_0^V r_j dV = \frac{dN_j}{dt} \quad (1.4)$$

Consideremos que el medio de reacción está perfectamente agitado, o sea que el reactor es un reactor tanque agitado discontinuo o **TAD** (ver figura que sigue).



TAD

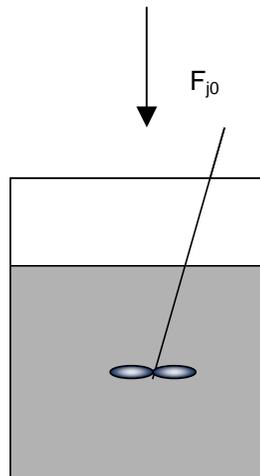
Si el agitado es perfecto en todos los lugares del reactor (i.e. en todo ΔV) la velocidad de reacción tiene igual valor, entonces la r_j puede asumirse constante en todo el volumen de reacción y sacarse del término integral. De modo que la ecuación (1.4) puede describirse como:

$$\frac{dN_j}{dt} = r_j V \quad (1.5)$$

La Ecuación 1.5 es la ecuación general de diseño de un Reactor TAD.

1.5 REACTORES SEMICONTINUOS

Los Reactores tanque agitados semicontinuos poseen una entrada de la especie j pero ninguna salida tal como se ilustra a continuación.



Reactor TA semicontinuo

Considerando que el medio de reacción está perfectamente mezclado, el balance de masa es:

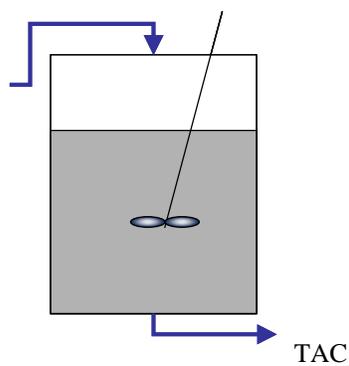
$$F_{j0} + r_j V = \frac{dN_j}{dt} \quad (1.6)$$

La ecuación (1.6) representa la ecuación de diseño de un reactor tanque agitado semicontinuo.

1.6 REACTORES CONTINUOS

1.6.1 REACTORES TANQUE AGITADO CONTINUOS

En la figura que sigue se esquematiza un reactor tanque perfectamente mezclado continuo **TAC**.



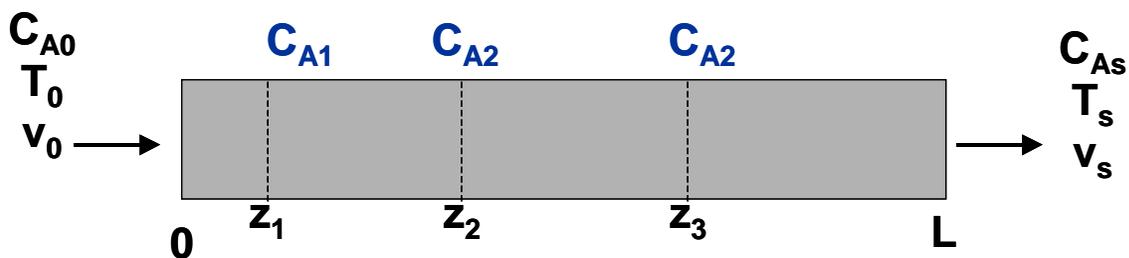
Si se considera que este reactor opera en estado estacionario y que la velocidad de reacción es idéntica en cualquier diferencial de volumen, la ecuación generalizada (1.3) se convierte en:

$$F_{j0} + r_j V - F_j = 0 \quad (1.7)$$

La ecuación (1.7) representa el balance de masa aplicable a un reactor TAC operando en estado estacionario.

1.6.2 REACTORES TUBULARES

Los reactores tubulares son caños cilíndricos que operan normalmente en estado estacionario. Para modelar este reactor se asume que el flujo es turbulento de modo que pueda ser considerado como un flujo pistón.



Suponer flujo pistón implica que en cualquier sección transversal normal al fluido, la velocidad, presión, temperatura y composición son uniformes no existen variaciones radiales. Si se asume esta hipótesis para todos los reactores tubulares, el reactor de flujo pistón es sinónimo de reactor tubular.

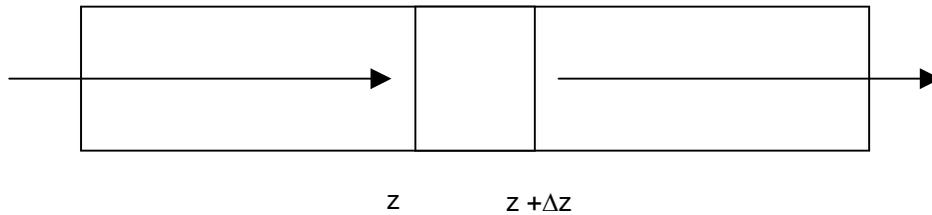
Recordemos la ecuación generalizada de diseño:

$$F_{j0} + \int_0^V r_j dV - F_j = \frac{dN_j}{dt} \quad (1.3)$$

Si se asume que el RT opera en estado estacionario la ecuación (1.3) se convierte en:

$$F_{j0} + \int_0^V r_j dV - F_j = 0 \quad (1.8)$$

La ecuación (1.8) representa la ecuación de diseño de un RT. Esta misma expresión puede ser obtenida mediante un análisis diferencial:



En el reactor tubular la concentración varía en función de Z , sin embargo si tomamos una pequeña rodaja del reactor de volumen ΔV podemos asumir que en ese pequeñísimo volumen la reacción es constante, planteemos entonces un balance en este volumen diferencial:

$$F_j(z) - F_j(z + \Delta z) + r_j \Delta V = 0 \quad (1.9)$$

Consideremos que ΔV puede ser expresado como el producto del área transversal por el diferencial de longitud, es decir:

$$\Delta V = A \Delta z \quad (1.10)$$

Reemplazando la ecuación (1.10) en la (1.9), y aplicando el lim para Δz tendiendo a 0 resulta:

$$\boxed{\frac{dF_j}{dz} = Ar_j} \quad (1.11)$$

O en otros términos:

$$\boxed{\frac{dF_j}{dV} = r_j} \quad (1.12)$$

Las ecuaciones (1.11) y (1.12) son las de diseño de un RT.

1.6.3 REACTORES EMPACADOS

Antes de comenzar con la ecuación de diseño de un reactor empacado se discutirá la diferencia entre reactores homogéneos y heterogéneos. Los reactores homogéneos son aquellos que en el volumen de reacción existe una única fase. Por ejemplo un tubo lleno de

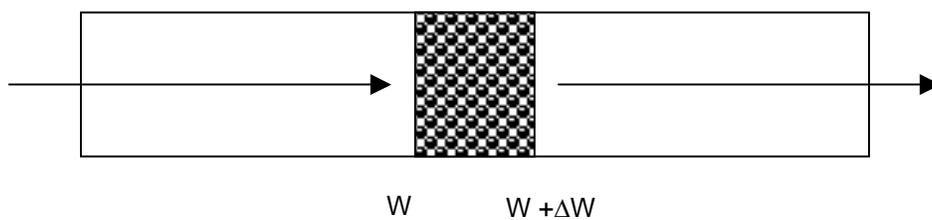
gas o un TAC con una solución reactiva líquida. Para reactores homogéneos la velocidad de reacción se expresa por unidad del volumen:

$$[r_A] = \text{mol/m}^3 \text{ min}$$

En cambio para reacciones que ocurren en reactores heterogéneos la velocidad de reacción (r_A') puede expresarse por unidad de masa de una de las fases. Tal es el caso de un reactor relleno con catalizador, la velocidad de reacción puede expresarse por unidad de masa de catalizador:

$$[r_A'] = \text{mol/Kg}_{\text{cat}} \text{ min}$$

Teniendo en cuenta esta observación podemos plantear el balance de masa para un reactor tubular empacado con catalizador, para ello observemos la siguiente figura:



En el reactor tubular la concentración varía en función de W (masa de catalizador, equivalente a z en RT), sin embargo si tomamos una pequeña rodaja ΔW podemos asumir que en ese pequeñísimo volumen la reacción es constante, planteemos entonces un balance en este volumen diferencial:

$$F_j(W) - F_j(W + \Delta W) + r_j' \Delta W = 0 \quad (1.13)$$

Aplicando el lim para ΔW tendiendo a 0 resulta:

$$\boxed{\frac{dF_j}{dW} = r_j'} \quad (1.14)$$

La ecuación (1.14) es la de diseño de un reactor empacado, y es totalmente análoga a la (1.12) del RT.

1.7 RESUMEN DE LAS ECUACIONES DE DISEÑO

Reactor	Forma Diferencial	Forma Algebraica	Forma Integral
Batch/TAD	$\frac{dN_A}{dt} = r_A V$		$t = \int_{N_{A0}}^{N_A} \frac{dN_A}{r_A V}$
Semibatch/ semicontinuo	$F_{A0} + r_A V = \frac{dN_A}{dt}$		
CSTR/TAC		$V = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_A}$	
PFR/RT	$\frac{dF_A}{dV} = r_A$		$V = \int_{F_{A0}}^{F_A} \frac{dF_A}{r_A}$
PBR/RE	$\frac{dF_A}{dW} = r'_A$		$W = \int_{F_{A0}}^{F_A} \frac{dF_A}{r'_A}$

1.8 REACTORES INDUSTRIALES

1.8.1 REACTORES DISCONTINUOS

Los reactores discontinuos o BATCH son usados para operaciones de pequeña escala, para testear procesos que no están desarrollados completamente, para la producción de productos costosos (especialidades) o para aquellos procesos que la conversión a un proceso continuo es difícil o imposible.

La **ventaja** de los reactores discontinuos es la posibilidad de alcanzar altas conversiones de reactivo ya que se puede dejar la mezcla reactiva por períodos largos. La **desventaja** de esta opción es la baja producción (i.e. generación de producto por unidad de tiempo).

1.8.2 REACCIONES EN FASE LÍQUIDA

Aunque el **reactor semibatch** tiene las mismas desventajas que el batch, puede tener un buen control de temperatura y minimizar reacciones secundarias o no deseadas mediante el agregado controlado de reactivos en el tiempo. El reactor semibatch es muy

usado para reacciones en dos fases por ejemplo líquido – gas, donde el líquido es la fase discontinua y el gas la continua que se burbujea constantemente en el medio líquido. Este es el caso de muchos fermentadores, donde se burbujea aire para proveer oxígeno a las bacterias que se encuentran en el medio líquido.

Los reactores **TAC** son muy usados cuando se requiere una agitación intensa. La mayoría de las reacciones en fase líquida y en régimen continuo se llevan a cabo en reactores TAC.

1.8.3 REACCIONES EN FASE GAS

La mayoría de las reacciones que ocurren en fase gas se llevan a cabo en **reactores tubulares**. La desventaja principal de estos reactores es la dificultad de controlar adecuadamente la temperatura a lo largo de todo el tubo. Los reactores tubulares pueden estar constituidos por un solo tubo o un banco de tubos (reactores multitubulares, similares a los intercambiadores de calor).

Cuando se requiere de catalizador para acelerar la velocidad de reacción, los reactores tubulares se denominan **reactores empacados o de lecho fijo**. Son muy usados para reacciones en fase gas.

Otro de los reactores industriales importantes son los **reactores fluidizados**, donde el gas de reacción (reactivos) fluidiza el catalizador logrando un excelente mezclado y un buen control de temperatura. Este reactor requiere un modelo propio, sin embargo no será cubierto en esta materia.

1.9 FOTOS DE REACTORES INDUSTRIALES



Reactor de Reformado de gas natural con vapor



Reactor Tanque Agitado



Reactores de Lecho Fluidizado

