

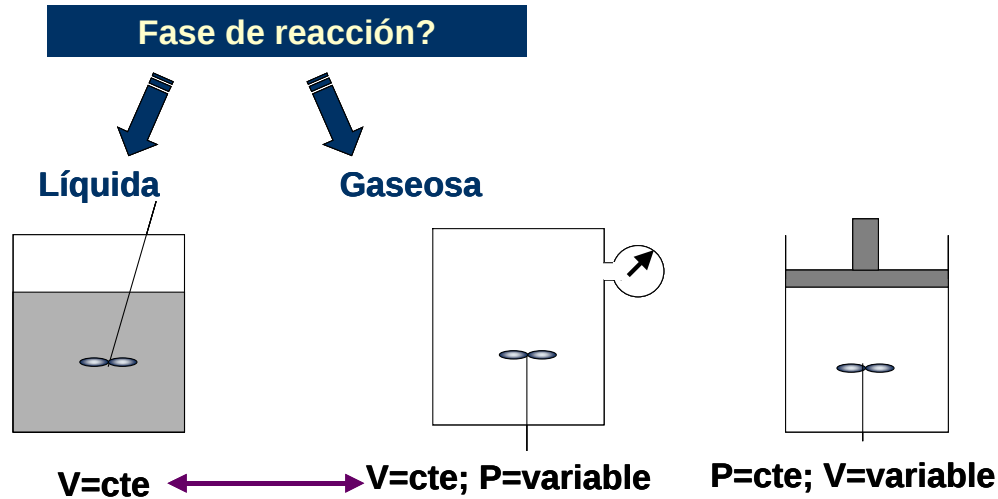
CAPITULO 3 – DISEÑO DE REACTORES ISOTÉRMICOS IDEALES

3.1 INTRODUCCIÓN

- En este capítulo se discutirán las ecuaciones de diseño de reactores isotérmicos ideales.
- Se diseñarán reactores isotérmicos para obtener una producción especificada o bien dado el volumen del reactor se estimará la velocidad de producción factible.
- Se prestará especial atención a los cambios de volumen o densidad durante la reacción.

3.2 REACTORES TAD

Los reactores TAD, según puede apreciarse en la figura que sigue, pueden procesar mezclas líquidas o bien gaseosas. Cuando una reacción se lleva a cabo en fase líquida, el volumen de reacción no cambia conforme avanza la reacción. Sin embargo cuando la reacción ocurre en fase gas y existe un cambio de número de moles durante la reacción el reactor TAD puede operar a volumen constante (con cambio en la presión del sistema) o con volumen variable (donde la presión es la condición operativa que permanece constante).



3.2.1 REACTORES TAD VOLUMEN CONSTANTE

Recordemos que la ecuación de diseño de un reactor TAD es

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

Consideremos la reacción:



Si la ecuación (1.5) es expresada para el reactivo A resulta:

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A V \quad (3.1)$$

La cinética de la reacción es dato:

$$-r_A = k C_A^2 \quad (3.2)$$

si sustituimos la ecuación 3.2 en la ecuación 3.1, resulta:

$$\frac{dN_A}{dt} = -k C_A^2 V \quad (3.3)$$

Si el reactor opera con volumen constante, el factor V que representa el volumen del reactor puede incorporarse a la derivada en el término de la izquierda, en este caso la ecuación (3.3) se convierte en:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k C_A^2 \quad (3.4)$$

donde:

$$C_A = \frac{N_A}{V} \quad (3.5)$$

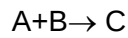
La ecuación (3.4) puede ser integrada desde un tiempo 0 hasta un tiempo t:

$$\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A^2} = -k \int_0^t dt \quad (3.6)$$

$$\frac{1}{k} \left(\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} \right) = t \quad (3.7)$$

Conociendo el valor de la constante k y C_{A0} es posible estimar el tiempo requerido para que la concentración del reactivo caiga al valor de C_A . O en caso contrario si está definido el tiempo de reacción, es posible estimar el valor final de C_A .

Consideremos la reacción:



con la siguiente cinética

$$-r_A = kC_A C_B \quad (3.8)$$

si sustituimos la ecuación 3.8 en la ecuación 3.1, resulta:

$$\frac{dN_A}{dt} = -kC_A C_B V \quad (3.9)$$

Si el reactor opera con volumen constante, la ecuación (3.9) se convierte en:

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A C_B \quad (3.10)$$

Como se ve en la ecuación 3.10, la ecuación no posee una única variable de modo que no puede ser integrada tal cual está escrita. Es necesario entonces recurrir a la conversión o bien expresar una concentración en función de la otra. En primera instancia exploraremos el caso en que se usa la conversión:

Recordemos los balances estequiométricos:

$$N_A = N_{A0}(1 - x_A) \quad (3.11)$$

$$N_B = N_{B0} - N_{A0} x_A \quad (3.12)$$

$$N_C = N_{C0} + N_{A0} x_A \quad (3.13)$$

Dividiendo por V que es igual a el volumen inicial V_0 las ecuaciones 3.11 a 3.13 resulta:

$$C_A = C_{A0}(1 - x_A) \quad (3.14)$$

$$C_B = C_{B0} - C_{A0} x_A \quad (3.15)$$

$$C_C = C_{C0} + C_{A0} x_A \quad (3.16)$$

Reemplazando las ecuaciones 3.14 y 3.15 en la ecuación 3.10, y considerando que dC_A es igual a $-C_{A0} dx_A$ resulta:

$$-C_{A0} \frac{dx_A}{dt} = -kC_{A0}(1-x_A)(C_{B0} - C_{A0}x_A) \quad (3.17)$$

La ecuación (3.17) ahora puede ser integrada desde un tiempo 0 hasta un tiempo t para estimar el tiempo de reacción. Si asumimos que C_{A0} es igual a C_{B0} , la ecuación 3.17 se reduce a :

$$-\frac{dx_A}{dt} = -kC_{A0}(1-x_A)^2 \quad (3.18)$$

Integrando esta ecuación resulta:

$$t = \frac{-x_A}{kC_{A0}(1-x_A)} \quad (3.19)$$

Como mencionamos utilizamos la conversión para transformar la ecuación (3.10) en función de una única variable. Sin embargo esta no es la única alternativa, también podemos utilizar la extensión de la reacción, o bien expresar la concentración de un reactivo en función del otro. Recordemos que si V es constante, $C_{A0} - C_A = C_{A0} x_A$ utilizando este concepto la ecuación (3.15) se convierte en:

$$C_B = C_{B0} - C_{A0} x_A = C_{B0} - C_{A0} + C_A \quad (3.20)$$

como usualmente las concentraciones iniciales son dato, podemos reemplazar la ecuación (3.20) en la (3.10):

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A(C_{B0} - C_{A0} + C_A) \quad (3.21)$$

la ecuación (3.21) es integrable en una dimensión.

3.2.2 REACTORES TAD A VOLUMEN VARIABLE

Esta sección se refiere al tratamiento de la ecuación de diseño de un TAD cuando éste lleva a cabo reacciones en fase gas que involucren un cambio de volumen de reacción. Esto se producirá cuando exista un cambio en el número de moles de la reacción. Para estudiar este caso en particular consideremos la siguiente reacción genérica.



Consideremos que la cinética de esta reacción es la ecuación (3.2), por lo tanto la ecuación (3.3) también es válida.

$$\frac{dN_A}{dt} = -kC_A^2 V \quad (3.3)$$

Sin embargo el V no es constante, de modo que la expresión 3.4 no es correcta. Haciendo un balance estequiométrico para la reacción 3.22 resulta:

$$N_A = N_{A0}(1 - x_A) \quad (2.7)$$

$$N_B = N_{B0} - \frac{\nu_B}{\nu_A} N_{A0} x_A \quad (2.8)$$

$$N_C = N_{C0} + \frac{\nu_C}{\nu_A} N_{A0} x_A \quad (2.9)$$

$$N_D = N_{D0} + \frac{\nu_D}{\nu_A} N_{A0} x_A \quad (2.10)$$

Sumando miembro a miembro las ecuaciones (2.7) a (2.10):

$$\begin{aligned} N_T &= N_{A0} + N_{B0} + N_{C0} + N_{D0} - \left(1 + \frac{\nu_B}{\nu_A} + \frac{\nu_C}{\nu_A} + \frac{\nu_D}{\nu_A}\right) N_{A0} x_A = \\ N_T &= N_{T0} - (1 + \varepsilon) N_{A0} x_A = N_{T0} (1 - \delta y_{A0} x_A) \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde N_T , y N_{T0} son el número de moles totales a un tiempo t de reacción y a tiempo 0, respectivamente. **Si hubiese inertes en la mezcla de reacción debe sumarse $N_I=N_{I0}$** a la suma miembro a miembro realizada con las ecuaciones (2.7) a (2.10). y_{A0} representa la fracción molar del reactivo A al inicio de la reacción. El parámetro δ representa el incremento o disminución en el número de moles durante la reacción. Obsérvese que cuando la reacción procede sin cambio de número de moles (e.g. $2A \rightarrow 2B$), resulta que $\delta=0$. Si consideramos que la mezcla gaseosa se comporta como un gas ideal, vale la ecuación $PV=NRT$ (*Ley de los gases ideales*). La ecuación (3.23) puede ser entonces multiplicada a ambos miembros por RT/P , resultando:

$$\begin{aligned}
 N_T \frac{RT}{P} &= N_{T0} \frac{RT}{P} (1 - \delta y_{A0} x_A) = \\
 N_{T0} \frac{RT}{P} \frac{T_0}{T} \frac{P_0}{P} (1 - \delta y_{A0} x_A) &= \\
 \left(N_{T0} \frac{RT_0}{P_0} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) \left(\frac{P_0}{P} \right) (1 - \delta y_{A0} x_A)
 \end{aligned}
 \tag{3.24}$$

Si el proceso es isotérmico e isobárico ($P=P_0$, $T=T_0$) y vale la hipótesis de mezcla de gases ideal:

$$V = V_0 (1 - \delta y_{A0} x_A) \tag{3.25}$$

Como puede verse el volumen de la reacción puede permanecer constante (i.e., $V=V_0$) sólo si el número de moles permanece constante ($\delta=0$). Utilizando la ecuación (3.25), junto con las (3.5) y (3.3):

$$\frac{d[N_{A0}(1 - x_A)]}{dt} = -k \left(\frac{N_{A0}(1 - x_A)}{V_0(1 - \delta y_{A0} x_A)} \right)^2 [V_0(1 - \delta y_{A0} x_A)] \tag{3.26}$$

De la ecuación 3.26 puede observarse que aún cuando haya cambio de número de moles, si la reacción fuese de primer orden los cambios de volumen no afectarían la ecuación de diseño. Para el caso que nos ocupa (orden 2) la ecuación (3.26) expresarse como:

$$-\frac{dx_A}{dt} = -k \frac{C_{A0}(1 - x_A)^2}{(1 - \delta y_{A0} x_A)} \tag{3.26}$$

La ecuación (3.26) puede ser integrada y se determina la conversión en función del tiempo. Cuando el volumen varía, las integrales son más complejas, su resolución puede requerir cálculo numérico (e.g., regla de simpson). El programa POLYMATH también es una herramienta de utilidad.



Ejemplo 3.1

La reacción $A \rightarrow B$ se lleva a cabo en un reactor TAD. La constante de velocidad de reacción es 0.311 min^{-1} . Determine el tiempo de reacción necesario para alcanzar una conversión de A del 75%. El reactor está cargado inicialmente con 10 moles de A, el volumen del reactor es de 1 dm^3 .

Solución1) Volumen variable o volumen constante?

Como no hay cambio de número de moles el volumen de reacción será constante para todo tiempo.

2) Orden de reacción?

El orden de reacción es 1 porque las unidades de k son tiempo⁻¹.

3) Tiempo de reacción para $x_A=0.75$

$$C_{A0}=N_{A0}/V_0= 5\text{mol}/1\text{dm}^3= 5 \text{ mol}/\text{dm}^3$$

$$C_A=C_{A0}(1-x_A)= 5 (1 - 0.75)= 5*0.25= 1.25 \text{ mol}/\text{dm}^3$$

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A V$$

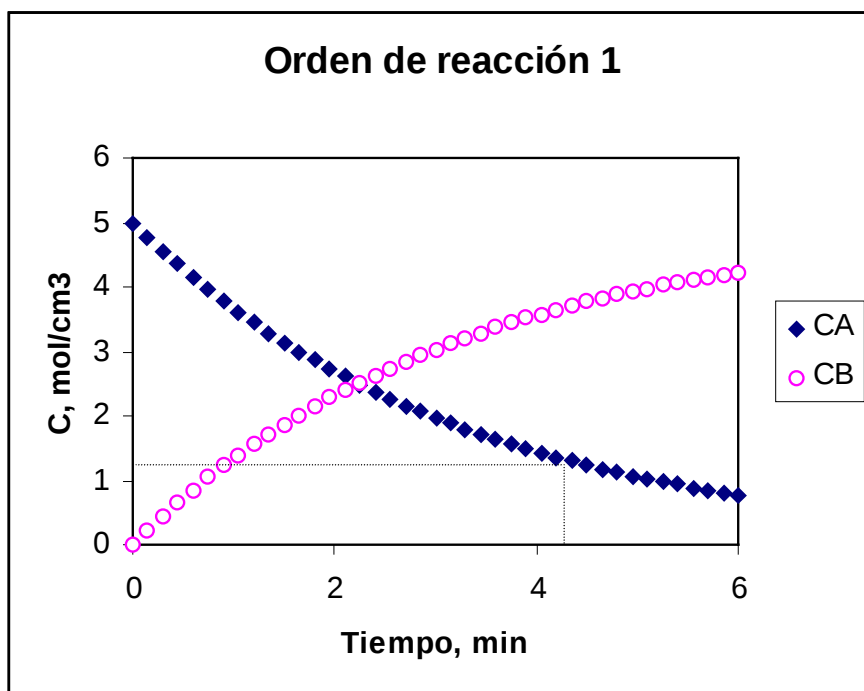
$$-r_A=kC_A$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A$$

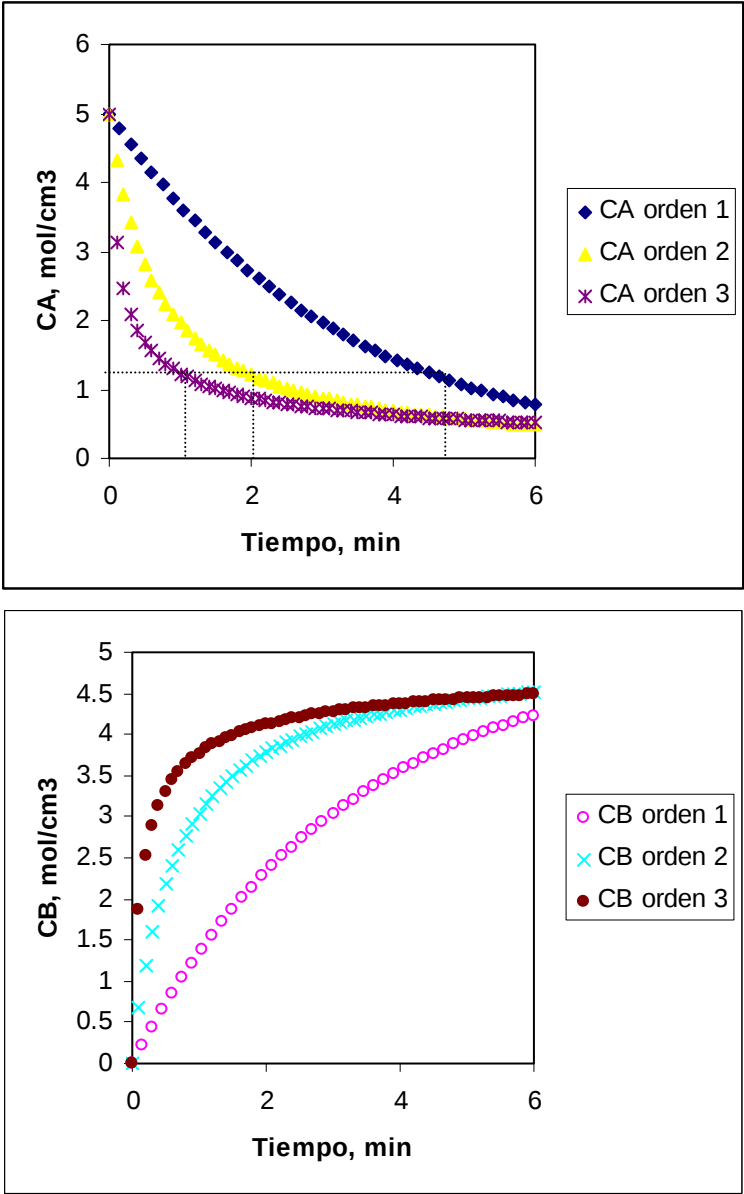
$$\int_5^{1.25} \frac{dC_A}{C_A} = \int_0^t -k dt$$

$$\ln\left(\frac{C_A}{C_{A0}}\right) = \ln\left(\frac{1.25}{5}\right) = -0.311 * t$$

$$t=4.45 \text{ min}$$

4) Perfiles de reactivos y productos en función del tiempo de reacción para orden 1

5) Perfiles de reactivos y productos en función del tiempo de reacción para distintos órdenes.

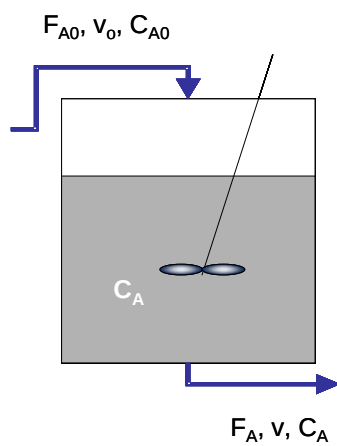


3.2.3 TIEMPOS DE OPERACIÓN ASOCIADOS A LOS REACTORES BATCH

Investigar los tiempos involucrados en la operación de un ciclo de reactores batch.

3.3 REACTORES TAC

Los reactores TAC son reactores continuos comúnmente usados para llevar a cabo reacciones en fase líquida. De manera que no nos preocuparemos si existe un cambio de número de moles durante la reacción. En efecto, para líquidos el caudal volumétrico puede considerarse que permanece constante a lo largo de la reacción. Consideremos el siguiente reactor:



Las variables F_A y C_A representan el flujo molar (mol_A/s) y concentración (mol_A) de la especie A. Por su parte la letra v se emplea para representar al caudal volumétrico (e.g., l/s). Recordemos que el TAC está perfectamente mezclado, entonces la concentración a la salida del reactor debe ser idéntica a la concentración de la misma especie dentro del reactor.

La concentración en un reactor continuo puede calcularse del siguiente modo:

$$C_A = \frac{F_A}{v} \quad (3.27)$$

Recordemos el balance de masa para un reactor TAC en estado estacionario:

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

La ecuación (1.7) expresada en términos de la especie A es:

$$F_{A0} + r_A(C_i)V - F_A = 0 \quad (3.28)$$

Es muy importante destacar que la velocidad debe ser evaluada utilizando los valores de concentración dentro del reactor que son coincidentes (debido a la hipótesis de mezclado perfecto) con los de la corriente de salida del reactor.

Si reemplazamos la expresión (3.27) en la (3.28) resulta:

$$C_{A0}v_0 + r_A(C_i)V - C_A v = 0 \quad (3.29)$$

Si la reacción se lleva a cabo en fase líquida se verifica que $v_0=v$, de modo que la ecuación (3.29) puede expresarse como:

$$(C_{A0} - C_A)v_0 + r_A(C_i)V = 0 \quad (3.30)$$

Dividiendo por v_0 y reorganizando la ecuación (3.30), resulta:

$$\frac{(C_{A0} - C_A)}{-r_A(C_i)} = \frac{V}{v_0} = \tau \quad (3.31)$$

τ se calcula dividiendo el volumen del reactor (e.g., l) por el caudal volumétrico (e.g., l/s), siendo sus unidades las correspondientes al tiempo (e.g., s). τ **se denomina tiempo espacial**, y representa el tiempo que residen las moléculas dentro del reactor cuando se manipulan fluidos incompresibles o bien cuando no existe un aumento o disminución de moles conforme avanza la reacción.

Las ecuaciones (3.28 a 3.31) representan la ecuación de diseño de una TAC donde se asume que el caudal volumétrico es constante. Cualquiera de ellas puede ser usada para hacer cálculos de diseño y operación de reactores.

Supongamos que la siguiente reacción posee la cinética: $-r_A = kC_A$



si sustituimos cinética dada en la ecuación en la ecuación 3.31, resulta:

$$\text{ORDEN 1} \quad \frac{(C_{A0} - C_A)}{kC_A} = \tau \quad (3.32)$$

La ecuación (3.32) puede ser empleada para calcular la concentración de A a la salida del reactor conociendo el tiempo de residencia (o bien el volumen del reactor y el caudal volumétrico tratado). También es posible dada la concentración requerida a la salida del reactor determinar el volumen de reactor, caudal volumétrico o bien el tiempo de residencia.

Supongamos que nuestro objetivo es determinar producción a la salida del reactor. Para ello debemos despejar C_A de la ecuación (3.32).

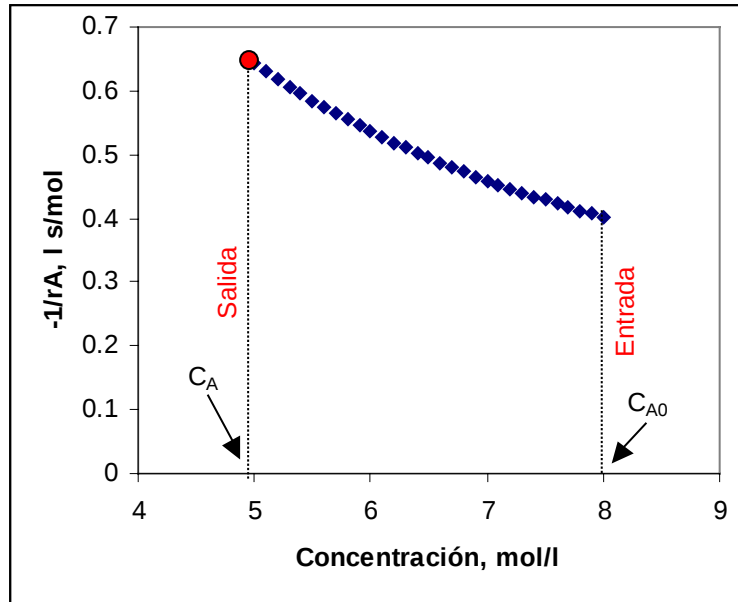
$$\text{ORDEN 1} \quad C_A = \frac{C_{A0}}{1 + k\tau} \quad (3.33)$$

Recordando que $F_A = F_{A0}(1 - x_A)$, la definición (3.27) y asumiendo que el caudal volumétrico no varía, la ecuación (3.33) puede describirse como sigue:

$$\begin{aligned} \text{ORDEN 1} \quad C_{A0}(1 - x_A) &= \frac{C_{A0}}{1 + k\tau} \\ x_A &= 1 - \frac{1}{1 + k\tau} \\ x_A &= \frac{k\tau}{1 + k\tau} \end{aligned} \quad (3.34)$$

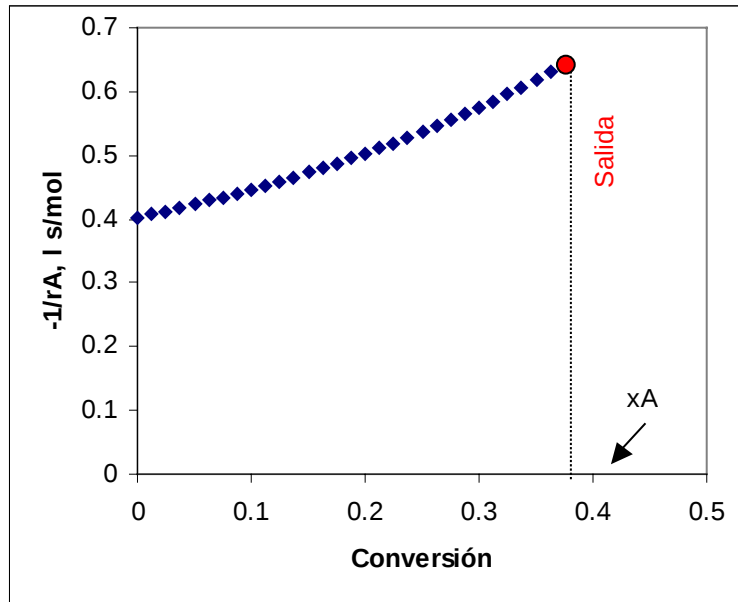
Si la velocidad de reacción está definida como $-r_A = kC_A C_B$, hay que recurrir al uso de la conversión para expresar la ecuación en términos de una sola variable.

Las ecuaciones de diseño comúnmente son también interpretadas gráficamente. Consideremos un reactor TAC donde se lleve a cabo una reacción de orden 1, dibujemos en primera instancia la inversa de velocidad de reacción en función de la concentración:



La gráfica anterior se construye evaluando la velocidad de reacción en función de la concentración (eje x) y luego calculando su inversa. En el gráfico anterior se marcan la concentración de entrada y salida del reactor. El punto rojo de la gráfica representa el punto de operación de un reactor TAC, en efecto la velocidad de reacción se lleva a cabo para un único valor de concentración que corresponde al valor de salida. La conceptualización gráfica es válida para cualquier tipo de reacción.

La misma gráfica puede realizarse usando como eje x la conversión del reactivo A, en este caso:

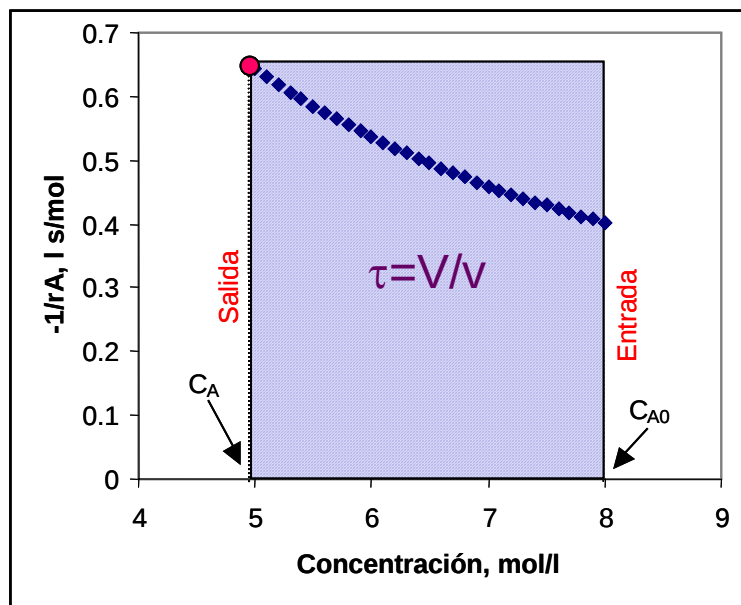


Para esta representación el punto rojo corresponde al punto de operación del TAC.

Ahora bien reformulemos ligeramente la ecuación (3.31)

$$(C_{A0} - C_A) \frac{1}{-r_A(C_A)} = \frac{V}{v_0} = \tau \quad (3.35)$$

Según la ecuación anterior si multiplico la inversa de la velocidad de reacción por la diferencia de concentraciones entrada salida obtengo el tiempo espacial. Ahora veamos esto gráficamente:

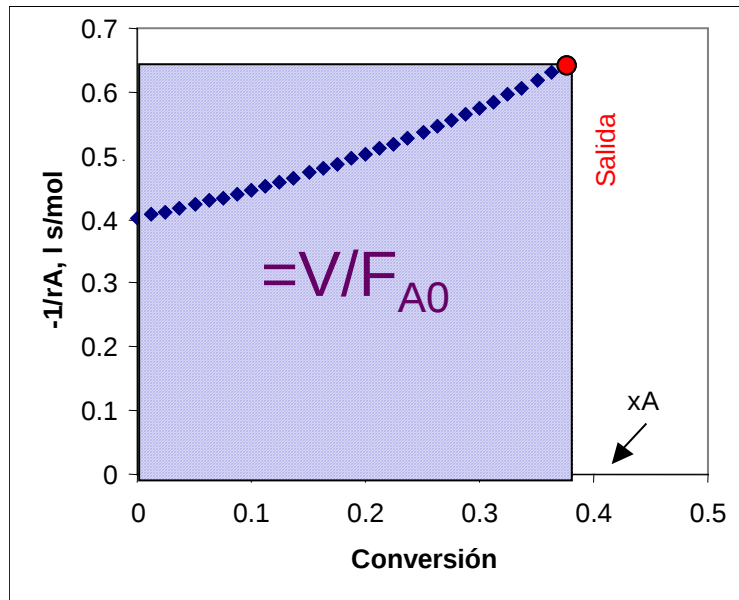


El área del rectángulo de lados $-1/r_A(C_A)$ y $(C_{A0} - C_A)$ conduce al valor del tiempo espacial τ .

La ecuación (3.31) también puede expresarse en conversiones:

$$x_A \frac{1}{-r_A(C_A)} = \frac{V}{v_0 C_{A0}} = \frac{V}{F_{A0}} \quad (3.36)$$

Por lo tanto el producto de x_A por la inversa de la velocidad de reacción conduce a la relación entre el volumen del reactor y el flujo molar de entrada:

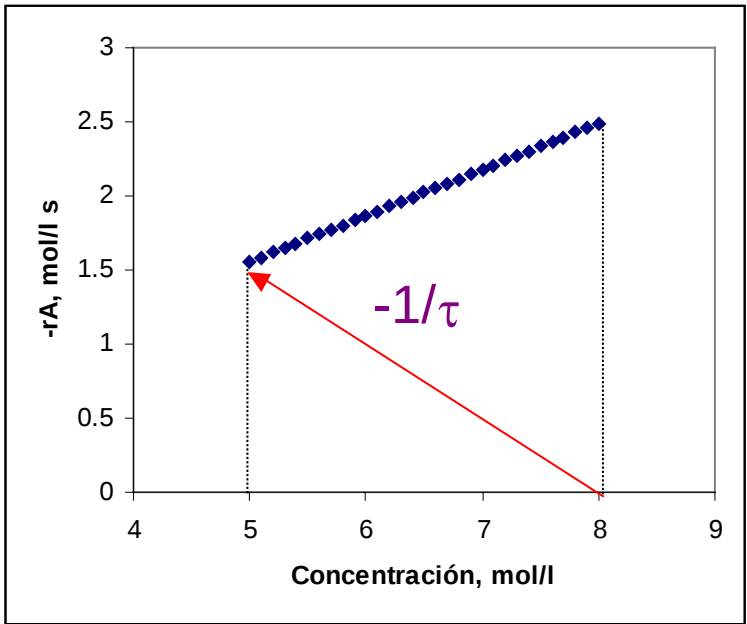


Como una última variante de la representación gráfica de un reactor TAC consideraremos la gráfica de $-r_A$ vs C_A . Para entender este gráfico reformulemos la ecuación (3.31) nuevamente:

Ahora bien reformulemos ligeramente la ecuación (3.31)

$$\begin{aligned} (C_{A0} - C_A) &= \tau [-r_A(C_A)] \\ C_A &= C_{A0} - \tau [-r_A(C_A)] \end{aligned} \quad (3.37)$$

De manera que existe una función lineal que relaciona C_A (variable x) con la velocidad de reacción (variable y), cuya pendiente es el tiempo espacial, gráficamente:

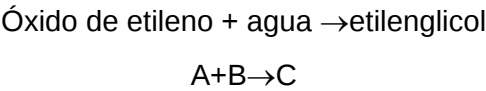


Ejemplo 3.2

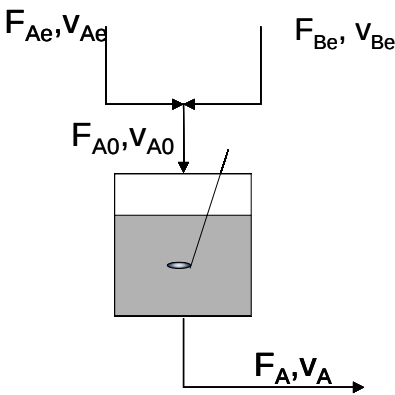
Se dispone de un reactor TAC para llevar producir etilenglicol, a partir de óxido de etileno y agua. Al reactor ingresa una corriente que posee una concentración de 4.5 kmol/m³ de óxido de etileno. Además ingresa al sistema una corriente de agua con un caudal volumétrico idéntico al de la corriente de óxido de etileno. Se desean producir 50 000 ton/año de etilenglicol. Si la constante de velocidad de reacción es 600h⁻¹, estime el volumen de reactor necesario si la conversión deseada es de 0.8.

Solución

1) **Reacción:**



2) **Esquema del reactor**



3) Determinación de caudales volumétricos y flujos molares de entrada en función del flujo molar del producto.

$$F_c^* = 50000 \frac{\text{ton}}{\text{año}} \frac{1 \text{ año}}{365 \text{ d}} \frac{1 \text{ d}}{24 \text{ h}} = 5.7 \text{ ton} / \text{h}$$

$$F_c = \frac{5700 \text{ Kg} / \text{h}}{62 \text{ Kg} / \text{Kmol}} = 91.94 \text{ Kmol} / \text{h}$$

$$F_c = F_{A0} x_A$$

$$F_{A0} = \frac{F_c}{x_A} = \frac{91.94 \text{ Kmol} / \text{h}}{0.8} = 114.93 \text{ Kmol} / \text{h} = F_{Ae}$$

$$C_{Ae} = 4.5 \text{ k mol}_A / \text{m}^3$$

$$C_{Ae} v_{Ae} = F_{Ae}$$

$$v_{Ae} = \frac{F_{Ae}}{C_{Ae}} = \frac{114.93 \text{ Kmol} / \text{h}}{4.5 \text{ k mol}_A / \text{m}^3} = 25.54 \text{ m}^3 / \text{h}$$

$$v_{Ae} = v_{Be}$$

$$v_0 = 2v_{Ae} = 51.08 \text{ m}^3 / \text{h}$$

$$C_{A0} = \frac{114.93 \text{ Kmol} / \text{h}}{51.08 \text{ m}^3 / \text{h}} = 2.25 \text{ Kmol} / \text{m}^3$$

4) Cálculo del volumen requerido

$$-r_A = k C_A = 600 \text{ h}^{-1} C_A$$

$$(C_{A0} - C_A) v_0 + r_A (C_i) V = 0 \quad (3.30)$$

$$(C_{A0} - C_A) v_0 - k C_A V = 0$$

$$C_{A0} x_A v_0 = k C_{A0} (1 - x_A) V$$

$$V = \frac{x_A v_0}{k(1 - x_A)} = \frac{0.8 * 51.08 \text{ m}^3 / \text{h}}{600 * 0.2 \text{ h}^{-1}} = 0.34 \text{ m}^3$$

$$V = 340 \text{ litros}$$

Datos adicionales:

b.p. A=11 °C, b.p. C=198 °C

3.4 REACTORES TUBULARES

Los reactores RT pueden procesar mezclas líquidas o bien gaseosas. Cuando una reacción se lleva a cabo en fase líquida, el caudal volumétrico no cambia conforme avanza la reacción. Sin embargo cuando la reacción ocurre en fase gas y existe un cambio de número de moles durante la reacción, el caudal volumétrico varía punto a punto dentro del reactor.

Consideremos la siguiente reacción genérica.



Si la cinética de esta reacción es orden 2, por lo tanto la ecuación de diseño del RT se convierte en:

$$\frac{dF_A}{dV} = -kC_A^2 \quad (3.38)$$

Ahora veamos los balances molares:

$$F_A = F_{A0}(1 - x_A) \text{ definición de conversión ec. (2.11)} \quad (2.12)$$

$$F_B = F_{B0} - \frac{\nu_B}{\nu_A} F_{A0} x_A \quad (2.13)$$

$$F_C = F_{C0} + \frac{\nu_C}{\nu_A} F_{A0} x_A \quad (2.14)$$

$$F_D = F_{D0} + \frac{\nu_D}{\nu_A} F_{A0} x_A \quad (2.15)$$

$$F_I = F_{I0} \quad (3.39)$$

Sumando miembro a miembro las ecuaciones (2.12) a (2.15) y (3.39):

$$\begin{aligned} F_T &= F_{A0} + F_{B0} + F_{C0} + F_{D0} + F_{I0} - \left(1 + \frac{\nu_B}{\nu_A} + \frac{\nu_C}{\nu_A} + \frac{\nu_D}{\nu_A}\right) F_{A0} x_A = \\ F_T &= F_{T0} - (1 + \varepsilon) F_{A0} x_A = F_{T0} (1 - \delta y_{A0} x_A) \end{aligned} \quad (3.40)$$

donde F_T , y F_{T0} son los flujos molares totales a una dada longitud del reactor y a la entrada, respectivamente. y_{A0} representa la fracción molar del reactivo A en la corriente que entra al reactor. El parámetro δ representa el incremento o disminución total en el número de moles durante la reacción. Obsérvese que cuando la reacción procede sin cambio de número de moles (e.g. $2A \rightarrow 2B$), resulta que $\delta=0$. Si consideramos que la mezcla gaseosa se comporta como un gas ideal, vale la ecuación $Pv=F_T RT$ (*Ley de los gases ideales*). La ecuación (3.40) puede ser entonces multiplicada a ambos miembros por RT/P , resultando:

$$F_T \frac{RT}{P} = F_{T0} \frac{RT}{P} (1 - \delta y_{A0} x_A) = F_{T0} \frac{RT}{P} \frac{T_0}{T_0} \frac{P_0}{P_0} (1 - \delta y_{A0} x_A) \quad (3.41)$$

Si el proceso es isotérmico e isobárico ($P=P_0$, $T=T_0$) y vale la hipótesis de mezcla de gases ideal:

$$v = v_0 (1 - \delta y_{A0} x_A) \quad (3.42)$$

Como puede verse el caudal volumétrico puede permanecer constante dentro de todo el reactor (i.e., $v=v_0$) sólo si el número de moles permanece constante ($\delta=0$). Entonces para una **mezcla de reacción gaseosa** el caudal volumétrico puede variar a medida que aumenta la conversión (i.e., avanza dentro del reactor). Sin embargo el caudal másico debe ser idéntico para todo z , de modo que **si existe una variación en el caudal**

volumétrico existirá una variación en la densidad de la mezcla $\left(\rho = \frac{\dot{m}}{v} \right)$.

Si el RT procesa una **mezcla líquida**, aunque la reacción proceda con un cambio de número de moles se asume que **$v=v_0$, en efecto los líquidos incompresibles**.

Recordemos que la concentración del reactivo A para un reactor continuo puede calcularse según la ecuación (3.27):

$$C_A = \frac{F_{A0}(1 - x_A)}{v_0(1 - \delta y_{A0} x_A)} = \frac{C_{A0}(1 - x_A)}{(1 - \delta y_{A0} x_A)} \quad (3.43)$$

Reemplazando la ecuación (3.43) en la ecuación de diseño (3.38):

$$\frac{d[F_{A0}(1 - x_A)]}{dV} = -k \left(\frac{F_{A0}(1 - x_A)}{v_0(1 - \delta y_{A0} x_A)} \right)^2 \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned}
 -\frac{F_{A0}dx_A}{dV} &= -k\left(\frac{C_{A0}(1-x_A)}{(1-\delta y_{A0} x_A)}\right)^2 \\
 -\frac{F_{A0}dx_A}{\left(\frac{C_{A0}(1-x_A)}{(1-\delta y_{A0} x_A)}\right)^2} &= -kdV \\
 -\frac{F_{A0}(1-\delta y_{A0} x_A)^2 dx_A}{C_{A0}^2(1-x_A)^2} &= -kdV \\
 \int_0^{x_A} \frac{(1-\delta y_{A0} x_A)^2 dx_A}{C_{A0}(1-x_A)^2} &= -k \int_0^{\tau} d\tau = -k\tau
 \end{aligned} \tag{3.45}$$

Cuando el caudal volumétrico varía, las integrales son más complejas, su resolución puede requerir cálculo numérico (e.g., regla de simpson). El programa POLYMATH también es una herramienta de utilidad. Otra opción es dibujar la $f(x_A)$ vs x_A y determinar el área debajo de la curva entre 0 y x_A .



Ejemplo 3.3

Considere la reacción $A \rightarrow 2B + C$, la cual ocurre en fase gas en un RT. La reacción es de segundo orden, siendo $k=5 \text{ dm}^3/\text{mol s}$. El área transversal es de 1 dm^2 , $C_{A0}=0.2 \text{ mol/dm}^3$ y $v_0=1 \text{ dm}^3/\text{s}$. Calcule el largo del reactor necesario. Evalúe el error que comete si se desprecia la expansión.

Solución

1. Considerando que v varía

$$F_A = F_{A0}(1-x_A)$$

$$F_B = F_{B0} + 2F_{A0} x_A$$

$$F_C = F_{C0} + F_{A0} x_A$$

$$F_T = F_{T0}(1+2y_{A0} x_A)$$

$$v = v_0(1+2y_{A0} x_A)$$

$$\int_0^{x_A} \frac{(1+2y_{A0} x_A)^2 dx_A}{C_{A0}(1-x_A)^2} = -k \int_0^{\tau} d\tau = -k\tau$$

$$\int_0^{x_A} \frac{(1+2x_A)^2 dx_A}{0.2(1-x_A)^2} = -5 \int_0^{\tau} d\tau = -5 \frac{AL}{v_0} = -5z$$

$$\int_0^{0.6} \frac{(1+2x_A)^2 dx_A}{(1-x_A)^2} = -z$$

$$z=5 \text{ dm}$$

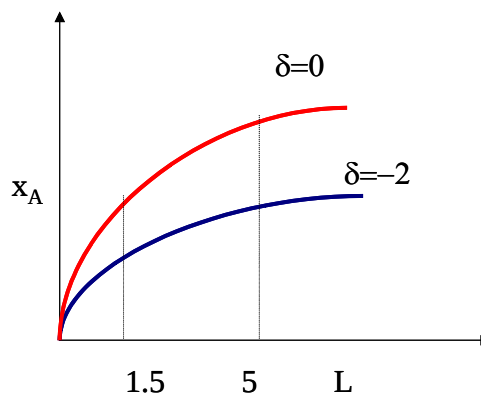
2. Considerando que v no varía $v=v_0$

$$\int_0^{0.6} \frac{dx_A}{(1-x_A)^2} = -Z$$

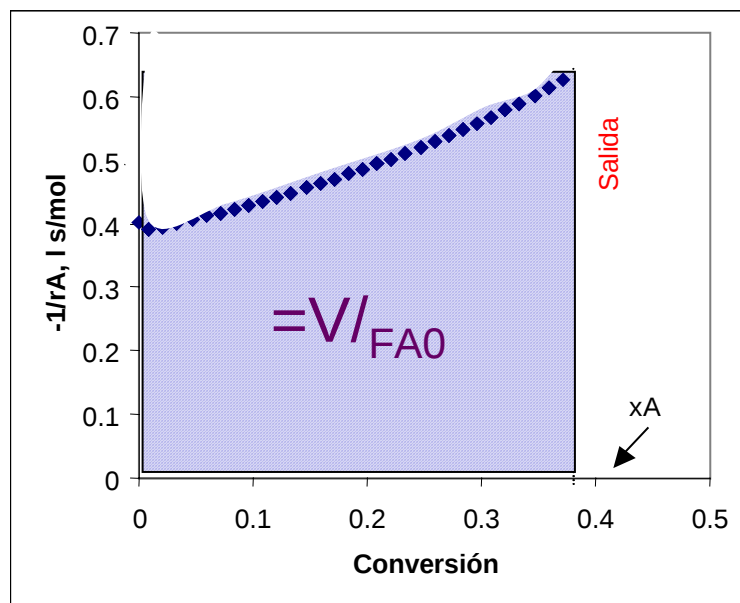
$$\frac{-1}{1-0.6} + 1 = -Z$$

$$Z = 1.5 \text{ dm}$$

Despreciar la expansión conduce a calcular menor volumen que el necesario. Esto se debe a que con la expansión el caudal volumétrico es mayor, siendo entonces el tiempo de residencia de las moléculas menor (esto implica menor conversión para igual largo del reactor).



Las ecuaciones de diseño del RT pueden ser también interpretadas gráficamente. Consideremos un reactor RT donde se lleva a cabo una reacción **de orden 1**, si dibujamos la inversa de la velocidad de reacción vs. la conversión de la reacción:



Si reacomodamos la ecuación de diseño del RT resulta:

$$\begin{aligned} \int_0^{x_A} \frac{dF_A}{r_A} &= V \\ -F_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{r_A} &= V \\ - \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{r_A} &= \frac{V}{F_{A0}} \end{aligned} \quad (3.45)$$

Como vemos en la expresión (3.45), si dibujamos la inversa de la velocidad de la reacción versus la conversión, para el **RT el área debajo de la curva representa el valor del volumen del reactor dividido el flujo molar del reactivo A a la entrada del reactor.**

3.4.1 TIEMPO DE RESIDENCIA VS. TIEMPO ESPACIAL

Investigar las diferencias existentes entre el tiempo espacial y el de residencia.

3.5 REACTORES CON RECICLO

Investigar cómo se modifican las ecuaciones de diseño de los reactores continuos cuando operan en estado estacionario y reciclaje de sus reactivos no convertidos.

3.6 RESUMEN

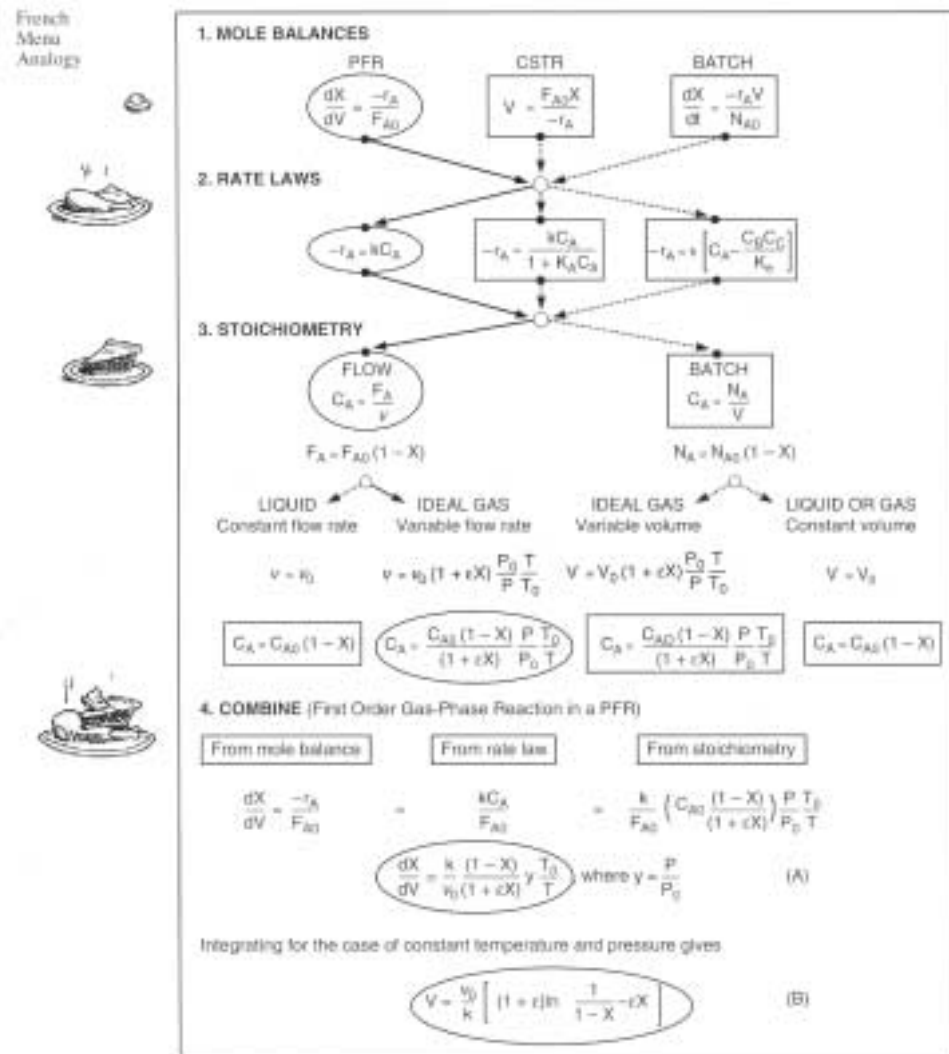


Figure 4-2 Algorithm for isothermal reactors.

Fogler, S., "Elements of Chemical Reaction Engineering", Prentice Hall.

<http://www.engin.umich.edu/~cre/elements.htm>