Universidad Simón Bolívar

División de Ciencias Físicas y Matemáticas

Departamento de Termodinámica y Fenómenos de Transferencia

TF3341: Reactores químicos

Preparaduría #3: Arreglos de reactores

Profesores(as): Daysi Rojas y Julia Guerra.

Preparador: Carlos Escalona (contacto: **ceea01@gmail.com**).

Trimestre: Septiembre – Diciembre 2017

Secciones: 1 y 2

Sartenejas, 19 de octubre del 2017.

Para los arreglos de reactores en serie, el flujo de salida de un reactor es el flujo de alimentación de otro. Es común para este tipo de arreglo, expresar los cálculos en función de la conversión de cada reactor y el flujo de alimentación del reactivo en el primer reactor. En este sentido, para la figura 1, las relaciones entre flujo molar y conversión vienen dadas por el conjunto de ecuaciones (1).

$$\begin{aligned} \mathbf{F_{A1}} &= \mathbf{F_{A0}} - \mathbf{F_{A0}X_1} \\ \mathbf{F_{A2}} &= \mathbf{F_{A0}} - \mathbf{F_{A0}X_2} \quad (\mathbf{1}) \\ \mathbf{F_{A3}} &= \mathbf{F_{A0}} - \mathbf{F_{A0}X_3} \end{aligned}$$

Cabe destacar que cada conversión corresponde al grado de avance de la reacción en el reactor determinado (como se observa en la figura).

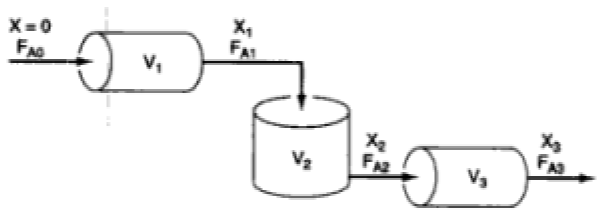


Figura 1. Arreglo de reactores FPI-TAC-FPI.

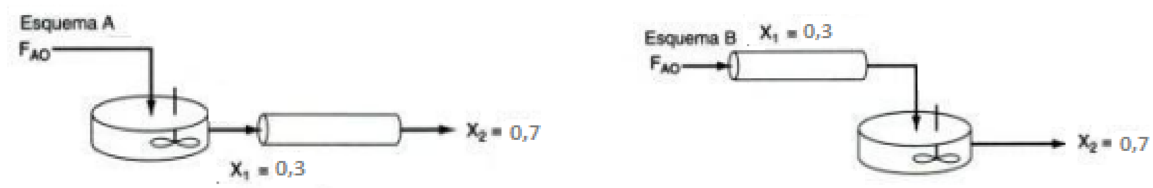
Respecto a los volúmenes de los reactores, a modo de ejemplo, es posible definir los mismos a través de las ecuaciones (2) y (3), para el TAC y el FPI respectivamente.

$$\mathbf{V_2} = \frac{\mathbf{F_{A2}} - \mathbf{F_{A1}}}{-\mathbf{r_{A2}}} = \frac{\mathbf{F_{A0}(X_{A2} - X_{A1})}}{-\mathbf{r_{A2}}} \quad (\mathbf{2}) \qquad \& \qquad \mathbf{V_3} = \mathbf{F_{A0}} \int_{\mathbf{X_{A1}}}^{\mathbf{X_{A2}}} \frac{\mathbf{dX_A}}{-\mathbf{r_A}} \quad (\mathbf{3})$$

Siempre se debe tener en cuenta que para diferentes arreglos de reactores, se tendrán diferentes conversiones y volúmenes.

Primer ejercicio: la tabla muestra $C_{A0}/-r_A$ vs X_A para una descomposición del reactivo A en fase líquida no isotérmica, no elemental, de múltiples reacciones.

X_A	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
$Ca_0/-r_A$ (min)	10	20	40	50	40	30	15	13	30	100



a) Considere los sistemas mostrados arriba. Un TAC y Un FPI están conectados en serie, la conversión intermedia es de 0,3 y la final es de 0,7. ¿Cómo deben acomodarse los reactores para obtener un volumen total mínimo?
b) Si la velocidad de flujo volumétrico es de 50 L/min ¿qué volumen mínimo tendrá el reactor?
c) ¿Existe una mejor configuración (alcanzando un volumen más pequeño a la misma conversión de salida) distinta a los sistemas aquí propuestos?
d) ¿Con qué conversión el volumen del reactor requerido será idéntico para un TAC y un FPI?

Solución:

Respecto al inciso a), lo más prudente para ver qué arreglo nos conviene más, es hacer un gráfico de Levenspiel, como se muestra en la figura 2.

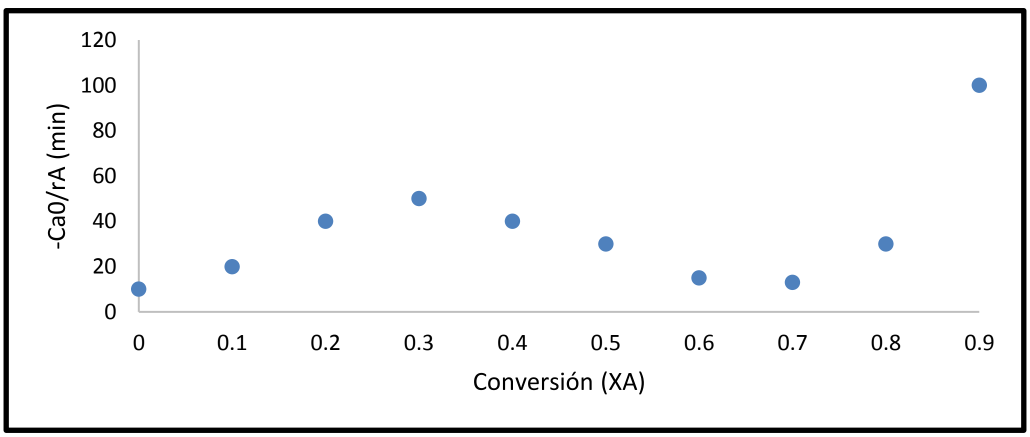


Figura 2. Levenspiel de la reacción de estudio

Observando la figura 2, vemos que es oportuno el arreglo B, puesto que al tener un TAC después de un FPI nos beneficiaría, especialmente en las conversiones entre 0,6 y 0,7 se reduciría el volumen considerablemente.

Por otra parte, si para el lector no es claro (o evidente) esta tendencia, se puede plantear la ecuación de diseño para cada uno de los reactores en cada arreglo y ver la relación que guardan, como se muestra a continuación.

Para el esquema A,

$$V_{1A} = V_{TAC} = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_{A1}} = \frac{F_{A0}(1 - X_{A1}) - F_{A0}}{-r_{A1}} = \frac{C_{A0}v_0X_{A1}}{-r_{A1}} = \left(\frac{C_{A0}}{-r_{A1}}\right) v_0X_{A1}$$

Que al evaluar nos queda:

$$\mathbf{V_{1A}} = \left(\frac{C_{A0}}{-r_{A1}}\right) v_0X_{A1} = (0{,}3)(50)v_0 = \mathbf{15}\boldsymbol{v_0}$$

Ahora para el FPI, tenemos:

$$V_{2A} = F_{A0}\int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A} = C_{A0}v_0\int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A} = v_0\left(\int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \left(\frac{C_{A0}}{-r_A}\right) dX_A\right)$$

Se nos presentan dos opciones, podríamos en primer lugar realizar la integral numérica con los datos tabulados o bien realizar un ajuste polinómico. En este caso se presentará el ajuste polinómico según:

$$V_{2A} = v_0\int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \left(\frac{C_{A0}}{-r_A}\right) dX_A = v_0\int_{0,3}^{0,7} \left(2089{,}2{X_A}^4 - 2635{,}8{X_A}^3 + 679{,}57{X_A}^2 + 101{,}53X_A + 8{,}8462\right)dX_A$$

Al evaluar, obtenemos:

$$\mathbf{V_{2A}} = \mathbf{11{,}76}\boldsymbol{v_0}$$

Así, para el esquema A,

$$\mathbf{V_{TotalA}} = \mathbf{26{,}76}\boldsymbol{v_0}$$

Para el esquema B se realiza el mismo procedimiento,

$$V_{1B} = F_{A0}\int_{0}^{X_{A1}} \frac{dX_A}{-r_A} = C_{A0}v_0\int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A} = v_0\int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \left(\frac{C_{A0}}{-r_A}\right) dX_A$$

$$V_{1B} = v_0\int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \left(\frac{C_{A0}}{-r_A}\right) dX_A = v_0\int_{0}^{0,3} \left(2089{,}2{X_A}^4 - 2635{,}8{X_A}^3 + 679{,}57{X_A}^2 + 101{,}53X_A + 8{,}8462\right)dX_A$$

Al evaluar, obtenemos:

$$V_{1B} = 9v_0$$

Respecto al TAC,

$$V_{2B} = V_{TAC} = \frac{F_{A2} - F_{A1}}{-r_{A2}} = \frac{F_{A0}(X_{A2} - X_{A1})}{-r_{A2}} = \frac{C_{A0}v_0(X_{A2} - X_{A1})}{-r_{A2}} = \left(\frac{C_{A0}}{-r_{A1}}\right) v_0(X_{A2} - X_{A1})$$

$$V_{2B} = 5{,}2v_0$$

De manera que,

$$\mathbf{V_{TotalB}} = \mathbf{14{,}2}\boldsymbol{v_0}$$

Finalmente, debido a que $V_{totalB}<V_{totalA}$ para un mismo flujo volumétrico, decimos que el arreglo B ocupa un volumen menor y por lo tanto es un mejor arreglo.

Ahora bien, si el flujo volumétrico tiene un valor de 50 L/min, el volumen de los reactoes será de:

$$\mathbf{V_{FPI}} = 9v_0 = 2{,}82(50) = \mathbf{450\ L}$$
$$\mathbf{V_{TAC}} = 5{,}2v_0 = 5{,}2(50) = \mathbf{260\ L}$$

En cuanto al inciso c), podemos ver a través de la figura 2 que si utilizamos solamente un TAC que opere hasta 70% de conversión obtendríamos un volumen menor. Demostrándolo:

$$V = V_{TAC} = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_A} = \frac{F_{A0}(1 - X_A) - F_{A0}}{-r_A} = \frac{C_{A0} v_0 X_A}{-r_A} = \left(\frac{C_{A0}}{-r_A}\right) v_0 X_A$$

Para X_A=0,7,

$$\mathbf{V_{TAC}} = 13\text{min} * 50\frac{\text{L}}{\text{min}} * 0{,}7 = \mathbf{455L}$$

Finalmente para saber en qué conversión los volúmenes de TAC y FPI serán idénticos, necesitamos hacer una igualación de expresiones y encontrar el valor que cumpla tal condición.

$$\mathbf{V_{TAC} = V_{FPI}}$$

Sustituyendo las ecuaciones de diseño,

$$\frac{F_{A0} - F_A}{-r_A} = F_{A0}\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A}$$

Haciendo un cambio de variable,

$$\frac{C_{A0} v_0 X_A}{-r_A} = v_0 \int_0^{X_A} \left(\frac{C_{A0}}{-r_A}\right) dX_A$$

Que finalmente nos lleva a,

$$\left(\frac{C_{A0}}{-r_A}\right) X_A = \int_0^{X_A} \left(\frac{C_{A0}}{-r_A}\right) dX_A$$

Lo que ahora nos queda es sustituir la funcionalidad de $Ca_0/-r_A$ según el ajuste polinomial que se hizo previamente.

$$(2089{,}2X_A{}^4 - 2635{,}8X_A{}^3 + 679{,}57X_A{}^2 + 101{,}53X_A + 8{,}8462)X_A = \int_0^{X_A} 2089{,}2X_A{}^4 - 2635{,}8X_A{}^3 + 679{,}57X_A{}^2 + 101{,}53X_A + 8{,}8462 dX_A$$

Al resolver la ecuación obtenemos:

$$\mathbf{X_{A1} = 0,462} \qquad \mathbf{X_{A2} = 0,755} \qquad \mathbf{X_{A3} = 0,0376 \approx 0\ (descartada)}$$

<u>Segundo ejercicio:</u> se ha de analizar la transformación del reactivo A en R mediante la reacción autocatalítica elemental A +R →R+R con una constante cinética k. La alimentación contiene 99% de A y 1% de R y la reacción ocurre en fase liquida. La constante de velociad de reacción a la temperatura de operación viene dada por k=60 L/molh. La concentración total de todas las especies es 1 mol/L y el caudal de alimentación es de 1000 L/h. Calcule la conversión de los siguientes arreglos de reactores de (40L cada uno):

a) FPI-FPI
b) TAC-TAC
c) TAC-FPI (ejercicio para el lector).
d) FPI-TAC (ejercicio para el lector).

Solución: Lo primero que hacemos es calcular los flujos de las especies.

$$\mathbf{F_0} = F_{A0} + F_{R0} = v(C_{A0} + C_{R0}) = 1000\frac{\text{L}}{\text{h}}\left(0{,}99\left(1\frac{\text{mol}}{\text{L}}\right) + 0{,}01\left(1\frac{\text{mol}}{\text{L}}\right)\right) = \mathbf{1000\frac{mol}{h}}$$

Por lo tanto, los flujos de los componentes individuales en la entrada serían:

$$F_{A0} = 990\frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$F_{R0} = 10\frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Debido a que la cinética es elemental, es posible decir que $-r_A=-kC_AC_R$, donde las expresiones para las concentraciones las encontramos a través de la tabla estequiométrica.

Especie	*Inicial	Cambio	Final
A	C_{A0}	$-X_AC_{A0}$	$C_{A0}(1- X_A)$
R	C_{R0}	$(2-1)X_AC_{A0}$	$C_{A0}((C_{R0}/C_{A0})+X_A)$

Por lo que al sustituir en la expresión de velocidad de reacción nos queda,

$$-r_A = kC_AC_R = k\big(C_{A0}(1-X_A)\big)\left(C_{A0}\left(\frac{C_{R0}}{C_{A0}}+X_A\right)\right) = kC_{A0}{}^2(1-X_A)(0{,}0101+X_A)$$

Hecho esto, podemos proceder a estudiar las configuraciones requeridas. Empecemos con el arreglo FPI-FPI. La ecuación de diseño viene dada por,

$$\frac{dF_A}{dV} = r_A = -kC_{A0}{}^2(1-X_A)(0{,}0101+X_A)$$

Cambiando la variable Fa por su equivalente en conversión,

$$-F_{A0}\frac{dX_{A_1}}{dV} = -kC_{A0}{}^2(1-X_{A_1})(0{,}0101+X_{A_1})$$

Lo que finalmente nos deja,

$$\frac{dX_{A_1}}{dV} = \frac{kC_{A0}{}^2}{F_{A0}}(1-X_{A_1})(0{,}0101+X_{A_1})$$

Que al separar variables,

$$\int_0^{X_{A_1}} \frac{dX_{A_1}}{(1-X_{A_1})(0{,}0101+X_{A_1})} = \frac{kC_{A0}{}^2}{F_{A0}}V_{FPI} = 2{,}376 = f$$

Necesitamos iterar para obtener el valor de la conversión correspondiente a f=2,376. Cabe destacar que f es mi punto de comparación, es el valor al que deseo llegar. Iterando,

X_A	f
0,30	3,74
0,50	4,569
0,15	2,89
0,08	2,249

Interpolando entre los dos últimos valores, obtengo:

$$\mathbf{X_{A_1} = 0,094}$$

Ahora para el segundo FPI,

$$\frac{dX_A}{dV} = \frac{kC_{A0}{}^2}{F_{A0}}(1-X_A)(0{,}0101+X_A)$$

Luego de separar variables,

$$\int_{X_{A_1}}^{X_{A_2}} \frac{dX_A}{(1-X_A)(0{,}0101+X_A)} = \frac{kC_{A0}{}^2}{F_{A0}}V_{FPI} = 2{,}376 = f$$

Necesitamos iterar para obtener el valor de la conversión correspondiente a f=2,376. Cabe destacar que f es mi punto de comparación, es el valor al que deseo llegar. Iterando,

X_A	f
0,50	2,163
0,55	2,360
0,58	2,479

Interpolando,

$$\mathbf{X_{A_2} = 0,554}$$

Ahora bien, para el arreglo TAC-TAC, empezamos con el primer tanque,

$$F_{A0} - F_{A1} + V_{TAC} r_{A1} = 0$$

En función de conversión,

$$F_{A0} - F_{A0}(1 - X_{A1}) - V_{TAC} k C_{A0}{}^2 (1 - X_{A_1})(0,0101 + X_{A_1}) = 0$$

Sustituyendo los valores conocidos,

$$990 X_{A1} - 2352,24(1 - X_{A_1})(0,0101 + X_{A_1}) = 0$$

Resolviendo,

$$\mathbf{X_{A_1} = 0,586}$$

Para el segundo tanque,

$$F_{A1} = F_{A0}(1 - X_{A1}) = 990 \frac{\text{mol}}{\text{h}} (1 - 0.586) = 409,86 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$F_{A2} = F_{A0}(1 - X_{A2})$$

Yendo a la ecuación de diseño del TAC,

$$F_{A1} - F_{A2} - V_{TAC} r_{A2} = 0$$

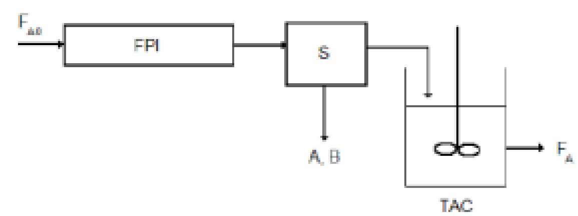
$$F_{A1} - F_{A0}(1 - X_{A2}) - V_{TAC} k \left(C_{A1}(1 - X_{A_2})\right)\left(C_{A1}\left(\frac{C_{R1}}{C_{A1}} + X_{A2}\right)\right) = 0$$

$$409,86 - 900(1 - X_{A2}) - 402,32(1 - X_{A_2})(1,44 + X_{A2}) = 0$$

Al resolver la ecuación obtenemos que:

$$\mathbf{X_{A2} = 0,771}$$

<u>Tercer ejercicio:</u> se dispone de un FPI en serie con un TAC para efectuar la reacción A↔2B en fase gas y reversible a temperatura constante. Entre los dos reactores está ubicado un separador que retira de la corriente de salida del FPI el 955% molar de B y el 5% de A. Se conoce además que F_{A0}=1 mol/h, C_{A0}=1 mol/L, V_{TAC}= V_{FPI}=1 L.



$$A \underset{\overleftarrow{K_I}}{\overset{\overrightarrow{K_D}}{\longleftrightarrow}} 2B \text{ con } -r_A = 0{,}9\left(C_A - \frac{{C_B}^2}{6}\right)$$

Calcule:

a) La conversión de A a la salida del FPI.
b) El flujo de A a la salida del TAC.

Solución: Lo primero que hacemos es expresar la concentración del reactivo en fase gaseosa según:

$$C_A = C_{A0}\left(\frac{\theta_A - \vartheta_A X}{1+\epsilon X}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)$$

Sabiendo que Θ_A=1 (por ser F_{A0}/F_{A0}), que $\vartheta_A = 1$ (por coeficiente estequiométrico) y que la reacción se lleva a cabo isotérmica e isobáricamente, la expresión se reduce a:

$$C_A = C_{A0}\left(\frac{1-X_A}{1+\epsilon X_A}\right)$$

En donde

$$\epsilon = \delta y_{A0} = \delta\left(\frac{F_{A0}}{F_{T0}}\right) = \delta\left(\frac{F_{A0}}{F_{A0}}\right) = \delta = 2-1 = 1$$

Por lo tanto, la expresión de concentración queda:

$$C_A = C_{A0}\left(\frac{1-X_A}{1+X_A}\right)$$

De manera similar para B,

$$C_B = C_{A0}\left(\frac{\theta_B + \vartheta_B X}{1+\epsilon X}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right) = C_{A0}\left(\frac{0+2X_A}{1+X_A}\right) = 2C_{A0}\left(\frac{X_A}{1+X_A}\right)$$

Sabemos que para un FPI la ecuación de diseño viene dada por:

$$\frac{dF_A}{dV} = r_A = -0{,}9\left(C_A - \frac{{C_B}^2}{6}\right)$$

Que al sustituir las expresiones de la concentración, pasa a ser:

$$\frac{dF_A}{dV} = -0{,}9\left(C_{A0}\left(\frac{1-X_A}{1+X_A}\right) - \frac{1}{6}\left(2C_{A0}\left(\frac{X_A}{1+X_A}\right)\right)^2\right)$$

Haciendo el cambio de variable $F_A=F_{A0}(1-X_A)$ y sustituir en la expresión, llegamos a:

$$-F_{A0}\frac{dX_A}{dV} = -0{,}9\left(C_{A0}\left(\frac{1-X_A}{1+X_A}\right) - \frac{1}{6}\left(2C_{A0}\left(\frac{X_A}{1+X_A}\right)\right)^2\right)$$

Al reemplazar las variables conocidas por sus valores numéricos, obtenemos:

$$\frac{dX_A}{dV} = 0{,}9\left(\frac{1-X_A}{1+X_A} - 0{,}6667\left(\frac{X_A}{1+X_A}\right)^2\right)$$

Si separamos variables tenemos una expresión de la forma:

$$V = 1L = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{0{,}9\left(\frac{1-X_A}{1+X_A} - 0{,}6667\left(\frac{X_A}{1+X_A}\right)^2\right)}$$

Como no conocemos el valor de la conversión que arrojaría el volumen de 1L, necesitamos variar el valor de la conversión en la integral hasta que el valor obtenido sea de 1L: Es decir, necesitamos un proceso iterativo. Después de haber realizado la iteración, encontramos que:

$$\mathbf{X_{A1} = 0,48}$$

A la salida del FPI,

$$F_{A1} = F_{A0}(1 - X_{A1}) = 0{,}52\frac{mol}{h}$$
$$F_{B1} = F_{A0}(2X_{A1}) = 0{,}96\frac{mol}{h}$$

Para las corrientes del separador,

$$F_{A2} = 0{,}05F_{A1} = 0{,}026\frac{mol}{h}$$
$$F_{B2} = 0{,}95F_{B1} = 0{,}912\frac{mol}{h}$$

Una vez conocidos los flujos que salen del separador, necesitamos realizar los balances de masa correspondientes al equipo, para determinar así el flujo que entra al TAC.

$$F_{A1} - F_{A2} = F_{A3} \Rightarrow \mathbf{F_{A3} = 0,494\frac{mol}{h}}$$
$$F_{B1} - F_{B2} = F_{B3} \Rightarrow \mathbf{F_{B3} = 0,048\frac{mol}{h}}$$

Para conocer el flujo volumétrico a la salida del TAC debemos encontrar los demás flujos. Para la entrada al FPI, sabemos que en fase gas:

$$\mathbf{v_1} = v_0(1+\epsilon X_A) = \left(\frac{F_{A0}}{C_{A0}}\right)(1+\epsilon X_A) = (1+\epsilon X_A) = \mathbf{1,48\frac{L}{h}}$$

Como no hay cambios de presión y temperatura, además en el separador no ocurre una reacción química, podemos suponer la densidad constante.

$$\begin{matrix} \rho_1 \mathbf{v_1} = F_1 \\ \rho_3 \mathbf{v_3} = F_3 \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} \mathbf{v_1} = F_1 \\ \mathbf{v_3} = F_3 \end{matrix} \Rightarrow \left(\frac{F_3}{F_1}\right) = \left(\frac{v_3}{v_1}\right) \Rightarrow \mathbf{v_3} = \mathbf{v_1}\left(\frac{\mathbf{F_3}}{\mathbf{F_1}}\right)$$

Sustituyendo el valor de los flujos tenemos que:

$$\mathbf{v_3} = \mathbf{0,542\frac{L}{h}}$$

Por haber definido que la densidad era constante, C_{A3}= F_{A3}/v_3=0,911 mol/L y C_{B3}= F_{B3}/v_3=0,089 mol/L. Luego para las expresiones de concentración tenemos que:

$$C_A = C_{A3}\left(\frac{1-X_{A2}}{1+\epsilon X_{A2}}\right), con\ \epsilon = \delta y_{A3} = \delta\left(\frac{0{,}494}{0{,}542}\right) = \delta(0{,}911) = 0{,}911$$

Nos queda,

$$\mathbf{C_A} = \mathbf{C_{A3}}\left(\frac{\mathbf{1 - X_{A2}}}{\mathbf{1 + 0,911X_{A2}}}\right)$$

Ahora respecto a B,

$$\mathbf{C_B} = C_{A3}\left(\frac{\frac{C_{3B}}{C_{3A}} + 2X_{A2}}{1+\epsilon X_{A2}}\right) = C_{A3}\left(\frac{0{,}097 + 2X_{A2}}{1 + 0{,}911X_{A2}}\right) = \mathbf{C_{A3}}\left(\frac{\mathbf{0,097 + 2X_{A2}}}{\mathbf{1 + 0,911X_{A2}}}\right)$$

Según la ecuación de diseño del TAC,

$$F_{A3} - F_{A4} + V_{TAC} r_{A4} = 0$$

Sustituyendo las expresiones conocidas,

$$0{,}494 - 0{,}494(1 - X_{A2}) - 0{,}9\left(C_{A3}\left(\frac{1 - X_{A2}}{1 + 0{,}911X_{A2}}\right) - \frac{1}{6}\left(C_{A3}\left(\frac{0{,}097 + 2X_{A2}}{1 + 0{,}911X_{A2}}\right)\right)^2\right)V_{TAC} = 0$$

Reemplazando los valores numéricos obtengo:

$$0{,}494X_{A2} - 0{,}9\left(0{,}911\left(\frac{1 - X_{A2}}{1 + 0{,}911X_{A2}}\right) - 0{,}138\left(\frac{0{,}097 + 2X_{A2}}{1 + 0{,}911X_{A2}}\right)^2\right) = 0$$

Si resolvemos la ecuación implícita obtenemos que:

$$\mathbf{X_{A2}} = \mathbf{0,476}$$

Por lo que el flujo a la salida del TAC sería:

$$\mathbf{F_{A4}} = 0{,}494(1 - \mathrm{X_{A2}}) = \mathbf{0,259}\,\frac{\mathbf{mol}}{\mathbf{h}}$$

Se agradece la notificación de errores y envío de comentarios.

Carlos E. Escalona A.

Ing. Química USB.