



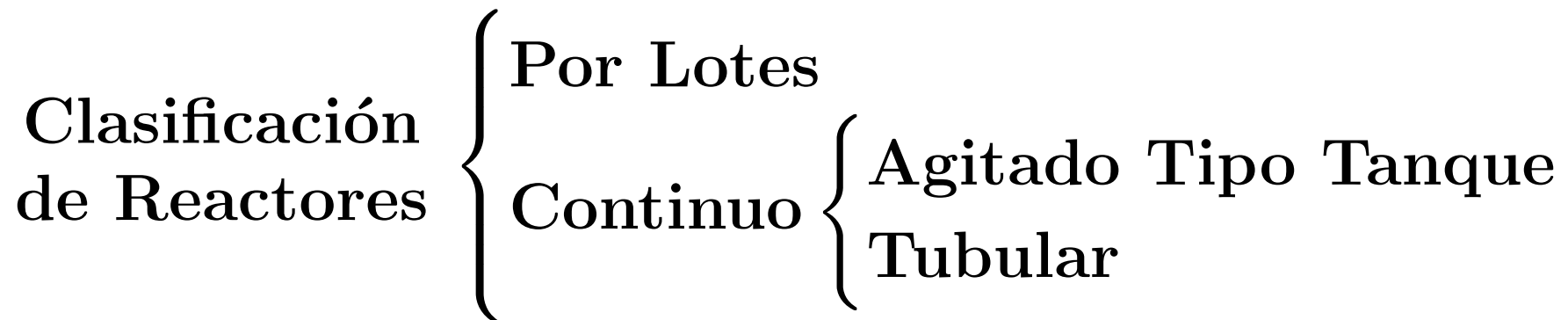
Capítulo 4

Reactores Isotérmicos en Fase Líquida

Dr. Fernando Tiscareño Lechuga

*Departamento de Ingeniería Química
Instituto Tecnológico de Celaya*

Homogéneos: Modo de Operación



■ *Por lotes*

- Gran flexibilidad pero tiempos muertos
- Producción relativamente pequeña ($\therefore \Delta\$ \uparrow$)

■ *Continuos*

- Control del proceso \leftrightarrow Calidad
- Producción alta (aún para $\Delta\$ \downarrow$)

Homogéneos Continuos

■ *De tanque agitado*

- Fase líquida
- Velocidades lentas
- Buen control de T (Agitación, $r \downarrow$, Líquida)

■ *Tubular*

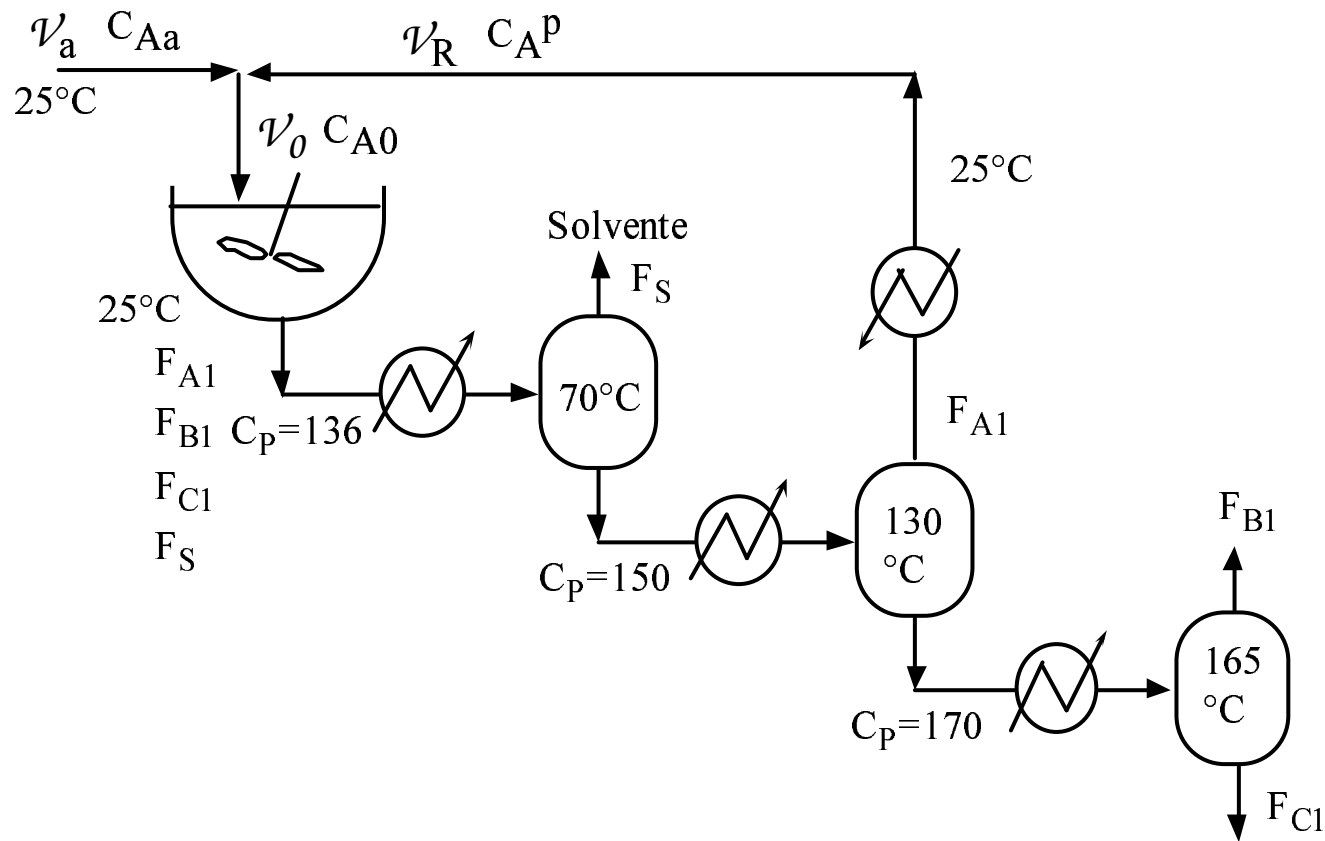
- Fase gaseosa (o Líquida)
- Mejor transferencia de calor ($\Delta H \uparrow$)
- Mayor conversión para mismo V_R
- Tubular \neq Pistón (Tapón) \neq Empacado


Procesos Químicos

“El reactor es el corazón de la planta”

- *Costos (I y O) relativamente pequeños*
 - Pero influyen directamente a los de toda la planta
- *Función Objetivo*
 - $\neq \text{Max}(\text{Conversión}), V_R \rightarrow \infty$
 - $\neq \text{Min}(\text{Costos}), V_R \rightarrow 0$
 - $\neq \text{Max}(\text{Rendimiento})$ ¡Percepción errónea muy arraigada!
 - $= \text{Max}(\text{Economía de } \underline{\text{toda}} \text{ la planta})$

Problema 4.20 (Propuesto)

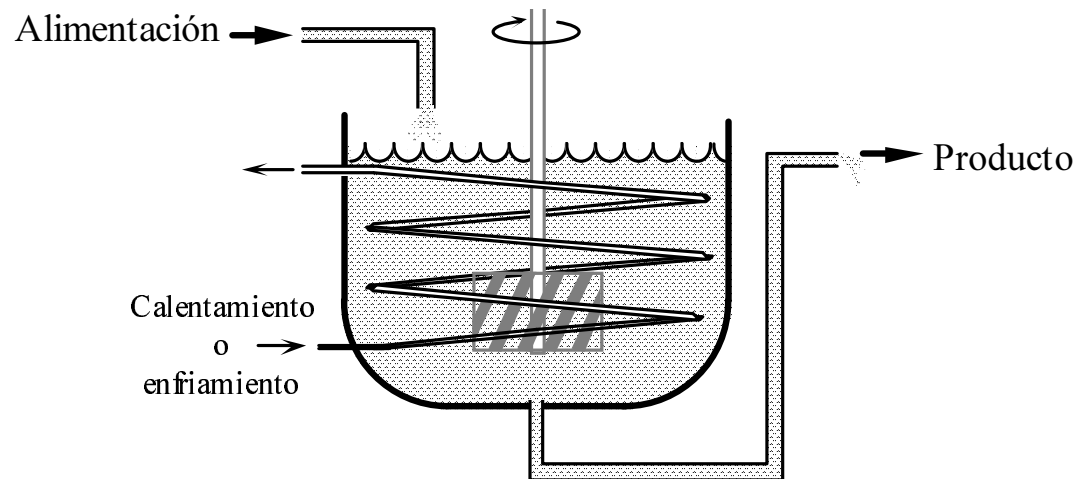
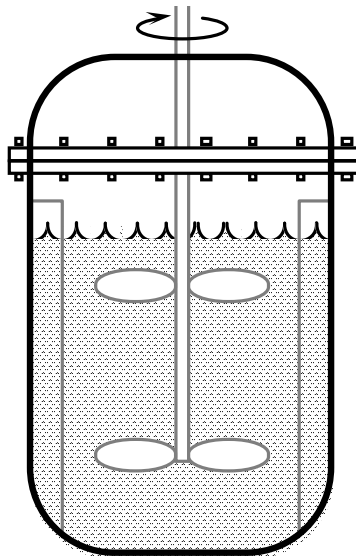


- Maximizar la tasa interna de retorno
- Solución algo laboriosa 

Definiciones:

■ *Volumen de Reactor, V_R*

- Es el espacio que ocupa el fluido
- \neq Volumen de Recipiente
- Aplica a reactores por lotes o continuos



Definiciones de Tiempo

■ *Tiempo de Retención, t*

- Es el lapso en que se permite reaccionar a la mezcla alimentada
- Aplica sólo a reactores por lotes
- No incluye tiempo muertos
- $V_R \neq F(t)$; $V_R = F(\text{Producción})$

Definiciones de Tiempo

■ *Tiempo Espacial, τ ,*

$$\tau \equiv \frac{V_R}{\dot{V}_0} \quad (4.1)$$

- Definición útil para diseño

■ *Tiempo de Residencia, t ,*

$$t = \int_0^{V_R} \frac{dV_R}{\dot{V}} \quad (4.2)$$

- Para análisis, no para diseño
- \neq Retención, aunque mismo símbolo

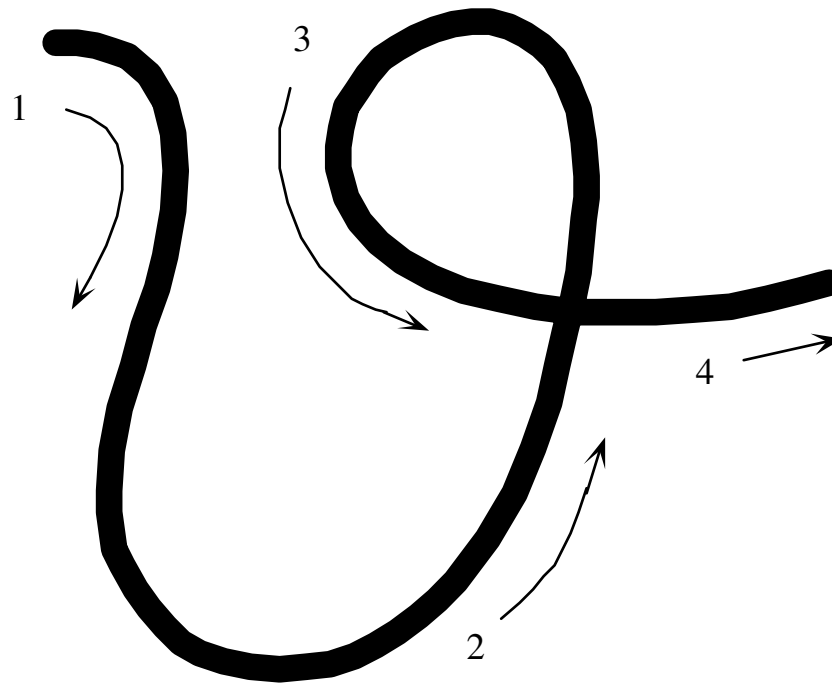
Aplican sólo a reactores continuos

$t = \tau$ para líquidos; $t \neq \tau$ para gases, salvo que...

Caligrafía

■ *Flujo volumétrico, \dot{V}*

- $\neq V$
- Al escribir a mano:



Ecuaciones de Diseño

- *Son balances de masa (molares)*
- *Número*
 - Una ecuación por reacción independiente
 - Una reacción: usar al rl
 - Varias: usar los componentes independientes
- *Tipo*
 - Tanque agitado: Algebraicas
 - Por lotes o tubular: Ecuaciones diferenciales
 - Una reacción: Diferencial \leftrightarrow algebraica

Reactor por Lotes

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{Acumulación} \\ \text{del producto} \\ i \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \text{Entradas} \\ \text{del producto} \\ i \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \text{Salidas} \\ \text{del producto} \\ i \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \text{Generación} \\ \text{por reacción} \\ \text{de } i \end{array} \right\}$$
$$\frac{dn_i}{dt} = 0 - 0 + (+r_i)V_R \quad (4.4)$$

■ **Una reacción** (V_R constante!)

$$t = C_{r10} \int \frac{df_{r1}}{(-r_{r1})} \quad (4.7)$$

■ **Varias reacciones** (V_R constante!)

$$\frac{dC_i}{dt} = (+r_i) \quad (4.8)$$

- Precaución: r_i tiene signo!
- Suposición: Mezclado perfecto
- ¿Diferencias entre 4.7 y 4.8?

Reactor de Tanque Agitado

$$(F_i)_{k-1} - (F_i)_k + \int_0^{V_R} (+r_i) dV_R = 0 \quad (4.9)$$

■ Suposición: Mezclado perfecto

■ $r_i \neq F(V_R) \Rightarrow (r_i)_k$ (**¡Constante!**)

• El subíndice k enfatiza a **¡condiciones de salida!**

■ *Una reacción (sin restricciones)*

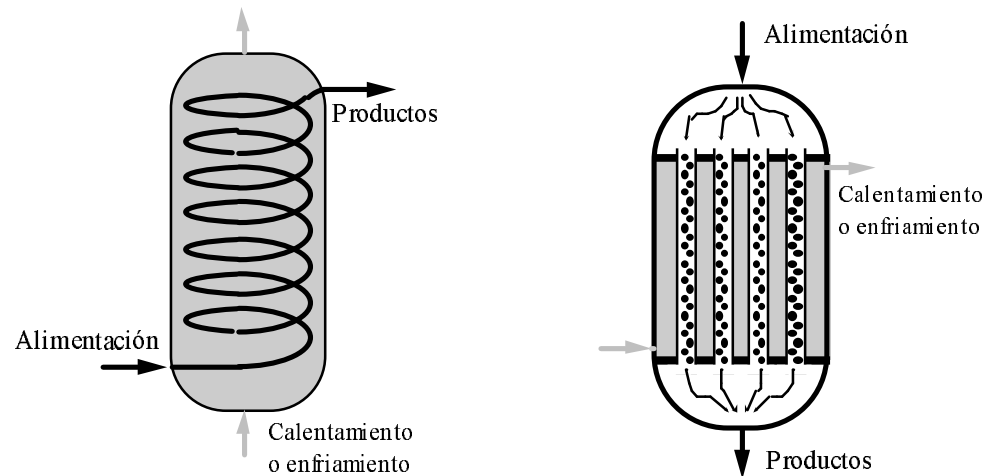
$$\tau_k = \frac{V_{Rk}}{\dot{V}_0} = \frac{C_{rl0} (f_{rlk} - f_{rlk-1})}{(-r_{rlk})} \quad (4.11)$$

■ *Varias reacciones (4.12 y 4.13)*

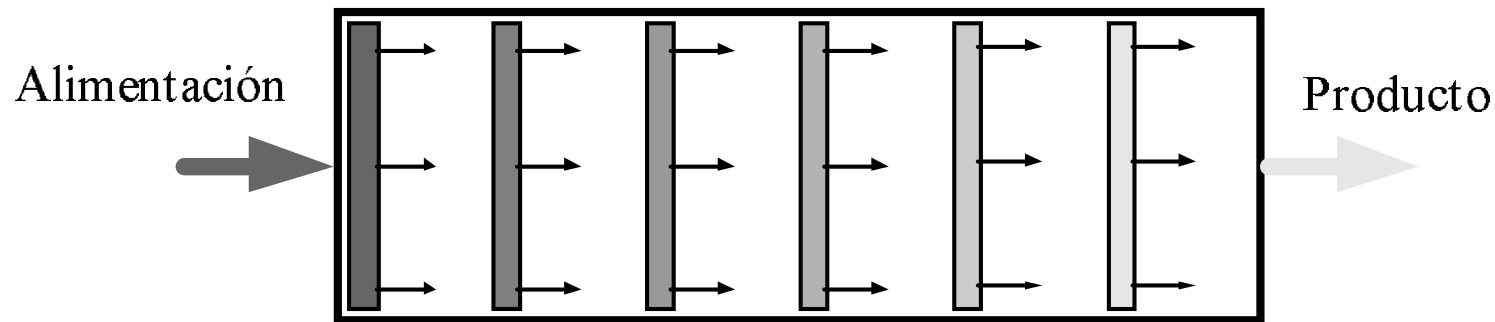
$$V_{Rk} = \frac{F_{ik} - F_{ik-1}}{(+r_i)_k}$$

$$\text{Líquidos} \Rightarrow \tau_k = \frac{V_{Rk}}{\dot{V}_0} = \frac{C_{ik} - C_{ik-1}}{(+r_i)_k}$$

¿Tubular? ¿Pistón? ¿Tapón?



- Tubular \Rightarrow Tipo de reactor; Tapón \Rightarrow Modelo



- Mezclado: Axial $\rightarrow 0$ y Radial $\rightarrow \infty$ ¿Creíble?
- ¡Elementos dentro del pistón con misma historia!

Reactor de Flujo Pistón

$$-dF_i + r_i dV_R = 0 \quad (4.15)$$

■ $r_i = F(V_R)$ (***iNO es constante!***)

■ *Una reacción (sin restricciones)*

$$\tau = C_{r10} \int \frac{df_{rl}}{(-r_{rl})} \quad (4.17)$$


■ *Varias reacciones (4.18 y 4.19)*

$$\frac{dF_i}{dV_R} = (+r_i) \quad \text{Líquidos} \Rightarrow \frac{dC_i}{d\tau} = (+r_i)$$

■ *Similar al reactor por lotes*

Consideraciones Especiales

■ Ejemplo 4.1:

- $r_{rl} = k[(1 - f) - f/K_{eq}]$ $C_{A0} = 1$, $k = 1$ y $K_{eq} = 1$
- Solución  : $f_{eq} = 0.5$ y $\tau = -0.5 \ln(1 - 2f)$

f	$\tau_{\text{Analítica}}$	$n = 10$		$n = 50$		$n = 250$	
		τ_{Num}	Error, %	τ_{Num}	Error, %	τ_{Num}	Error, %
0.1	0.11157	0.11158	0.008	0.11157	0.000	0.11157	0.000
0.2	0.25541	0.25553	0.046	0.25542	0.002	0.25541	0.000
0.3	0.45815	0.45893	0.171	0.45818	0.007	0.45815	0.000
0.4	0.80472	0.81102	0.783	0.80497	0.032	0.80473	0.001
0.45	1.1513	1.1826	2.720	1.1526	0.116	1.1514	0.005
0.49	1.9560	2.5279	29.24	1.9932	1.899	1.9576	0.081
0.499	3.1073	13.899	347.3	4.6637	50.09	3.2420	4.335
0.4999	4.2586	126.41	2868.4	27.232	539.45	8.009	88.061

- Moraleja: Cuidar n_{pasos} para reacciones reversibles

Consideraciones Especiales

VARIABLES DE DISEÑO: (Reactores Continuos)

■ f_{rl}

- Solución directa: $t = C_{rl0} \int \frac{df_{rl}}{(-r_{rl})}$ ○ $\tau = C_{rl0} \int \frac{df_{rl}}{(-r_{rl})}$

■ t, τ ○ V_R

- Solución de ecuación implícita:

$$\mathbf{F}(t) = 0 = t - C_{rl0} \int \frac{df_{rl}}{(-r_{rl})} \quad \text{○} \quad \mathbf{F}(\tau) = 0 = \tau - C_{rl0} \int \frac{df_{rl}}{(-r_{rl})}$$

- Solución directa: Runge-Kutta

$$\frac{df_{rl}}{dt} = \frac{1}{C_{rl0}}(-r_{rl}) \quad \text{○} \quad \frac{df_{rl}}{d\tau} = \frac{1}{C_{rl0}}(-r_{rl}) \quad \text{○} \quad \frac{df_{rl}}{dV_R} = \frac{1}{F_{rl0}}(-r_{rl})$$

Consideraciones Especiales

■ *Sobrediseño*

- $V_R \leftrightarrow$ Consideraciones Geométricas $\leftrightarrow V_{\text{Recipiente}}$
- $V_{\text{Recipiente}} \leftrightarrow$ Sobrediseño $\leftrightarrow V_{\text{Final}}$

■ *¡No siempre es ventajoso sobrediseñar!*

- Reacciones paralelas: Sólo la principal reversible

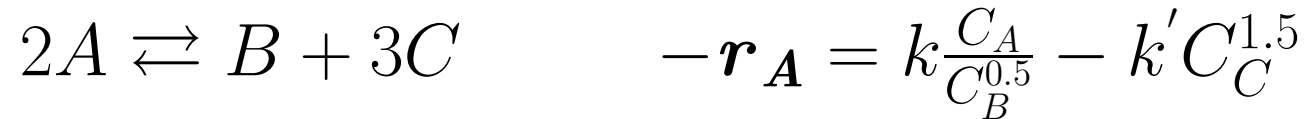


- Reacciones en serie: B es $\$ \uparrow$



■ *Ver Sección 4.3.5: Cómo relacionar velocidades de reacción*

Ejemplo 4.2: Por lotes y una reacción



Dos turnos seguidos de 8 horas (sin restricciones entre turnos)

Preparativos y primera carga: 25 min

Descarga, limpieza y carga intermedia: 8 + 12 min

Descarga y limpieza última carga:

$f_A = 0.98$, ¿ V_R para producir 1,000 kg diarios de B ?

P.M. de B : 305

- Tiempo de retención para cada carga:

$$\begin{aligned} t &= C_{A0} \int_0^{0.98} \frac{df}{(-r_A)} = 24.077 \text{ min} \\ &= 0.15 \text{ M} \int_0^{0.98} \frac{df}{0.0405 \frac{C_{A0}(1-f)}{\sqrt{0.5 C_{A0}f}} - 0.0011(1.5 C_{A0}f)^{1.5}} \end{aligned}$$

Ejemplo 4.2: Continuación 1

- Número de cargas diarias, N_c :

$$25 + 24.08 \times N_c + (12 + 8) \times (N_c - 1) + 32 = 960 \text{ min}$$

- Despejando $N_c = 20.94 \rightsquigarrow N_c \neq 21$; $N_c = 20$

- Concentración en producto: $C_B = 0.5 C_{A0} f_A = 0.0735 \text{ M}$

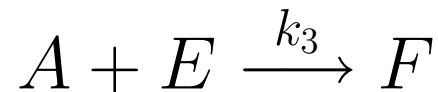
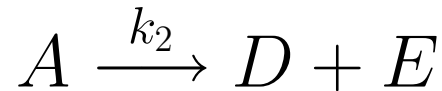
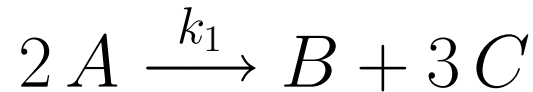
- Volumen de reactor requerido:

$$V_R = 1000 \frac{\text{kg de } B}{\text{día}} \times \frac{\text{mol}}{0.305 \text{ kg}} \times \frac{t}{0.0735 \text{ mol de } B} \times \frac{\text{día}}{20 \text{ cargas}} = 2,230 \text{ lt}$$

- Extras:

- ¿Patrón codo?: Disminuir t con 21 cargas y aumentar t con 20 cargas
- Problema 4.16: Optimizar N_c suponiendo $t_{\text{Patrón codo}}$
- ¿Consideraciones si se pide costo del reactor? \approx Problema 4.4

Ejemplo 4.3: Por lotes y varias reacciones



$$+r_B = k_1 C_A^2 = 9.5 \times 10^{18} \frac{\text{lt}}{\text{mol min}} e^{\frac{-121,000 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} T}} C_A^2$$

$$+r_D = k_2 C_A^2 = 1.8 \times 10^{24} \frac{\text{lt}}{\text{mol min}} e^{\frac{-148,000 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} T}} C_A^2$$

$$+r_F = k_3 C_A^2 = 9.1 \times 10^{14} \frac{\text{lt}}{\text{mol min}} e^{\frac{-98,000 \frac{\text{J}}{\text{mol}}}{8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} T}} C_A^2$$

Obtener f_A , $S_{A \rightsquigarrow B}$ y $R_{A \rightsquigarrow B}$ para

1) $t = 10, 20$ y 30 min a 30°C

2) $T = 30, 50$ y 70°C con $t = 20$ min

Ejemplo 4.3: Continuación 1

- Con estequiometría (Para solución simultánea numérica):

$$C_A = C_{A0} - 2C_B - C_D - C_F$$

$$C_C = 3C_B$$

$$C_E = C_D - C_F$$

- Notamos: cinéticas sólo $F(C_A) \leftrightarrow$ 

$$-r_A = 2r_B + r_D + r_F$$

$$-\frac{dC_A}{dt} = (2k_1 + k_2 + k_3)C_A^2$$

$$C_A = \left[(2k_1 + k_2 + k_3)t + \frac{1}{C_{A0}} \right]^{-1}$$

Ejemplo 4.3: Continuación 2

- Sustituyendo y resolviendo:

$$+\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A^2 = k_1 \left[(2k_1 + k_2 + k_3)t + \frac{1}{C_{A0}} \right]^{-2}$$

$$C_B = \frac{k_1}{2k_1 + k_2 + k_3} \left(C_{A0} - \left[(2k_1 + k_2 + k_3)t + \frac{1}{C_{A0}} \right]^{-1} \right)$$

- Similarmente para D , F con estequiometría

$$C_D = \frac{k_2}{2k_1 + k_2 + k_3} \left(C_{A0} - \left[(2k_1 + k_2 + k_3)t + \frac{1}{C_{A0}} \right]^{-1} \right)$$

$$C_F = \frac{k_3}{2k_1 + k_2 + k_3} \left(C_{A0} - \left[(2k_1 + k_2 + k_3)t + \frac{1}{C_{A0}} \right]^{-1} \right)$$

Ejemplo 4.3: Continuación 2

- Cálculos:

$$f_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

$$R_{A \rightsquigarrow B} = \frac{C_B}{C_{A0}} \times \frac{2 \text{ moles de A que reaccionan a B}}{\text{mol de B}}$$

$$S_B = \frac{C_B \times 2}{C_{A0} - C_A} \quad S_D = \frac{C_D}{C_{A0} - C_A} \quad S_F = \frac{C_F}{C_{A0} - C_A}$$

- Relaciones con C_i sólo por tratarse de líquidos
- Existen varias posibles definiciones
- Para éstas, $\sum S_j = 1$ donde j son los productos independientes en reacciones paralelas

Ejemplo 4.3: Continuación 3

- A 30°C

$t, \text{ min}$	10	20	30
$C_A, \text{ M}$	0.2625	0.2100	0.1750
$C_B, \text{ M}$	0.0123	0.0197	0.0247
$C_D, \text{ M}$	0.0520	0.0832	0.1040
$C_F, \text{ M}$	0.0109	0.0174	0.0217
f_A	0.2501	0.4001	0.5001
$R_{A \rightsquigarrow B}$	0.0705	0.1127	0.1409
S_B	0.2818	0.2818	0.2818
S_D	0.5943	0.5943	0.5943
S_F	0.1240	0.1240	0.1240

- $f_A \uparrow$ si $t \uparrow$
- $R_{A \rightsquigarrow B} \uparrow$ si $t \uparrow$
- ¿Por qué las selectividades $\neq F(t)$?

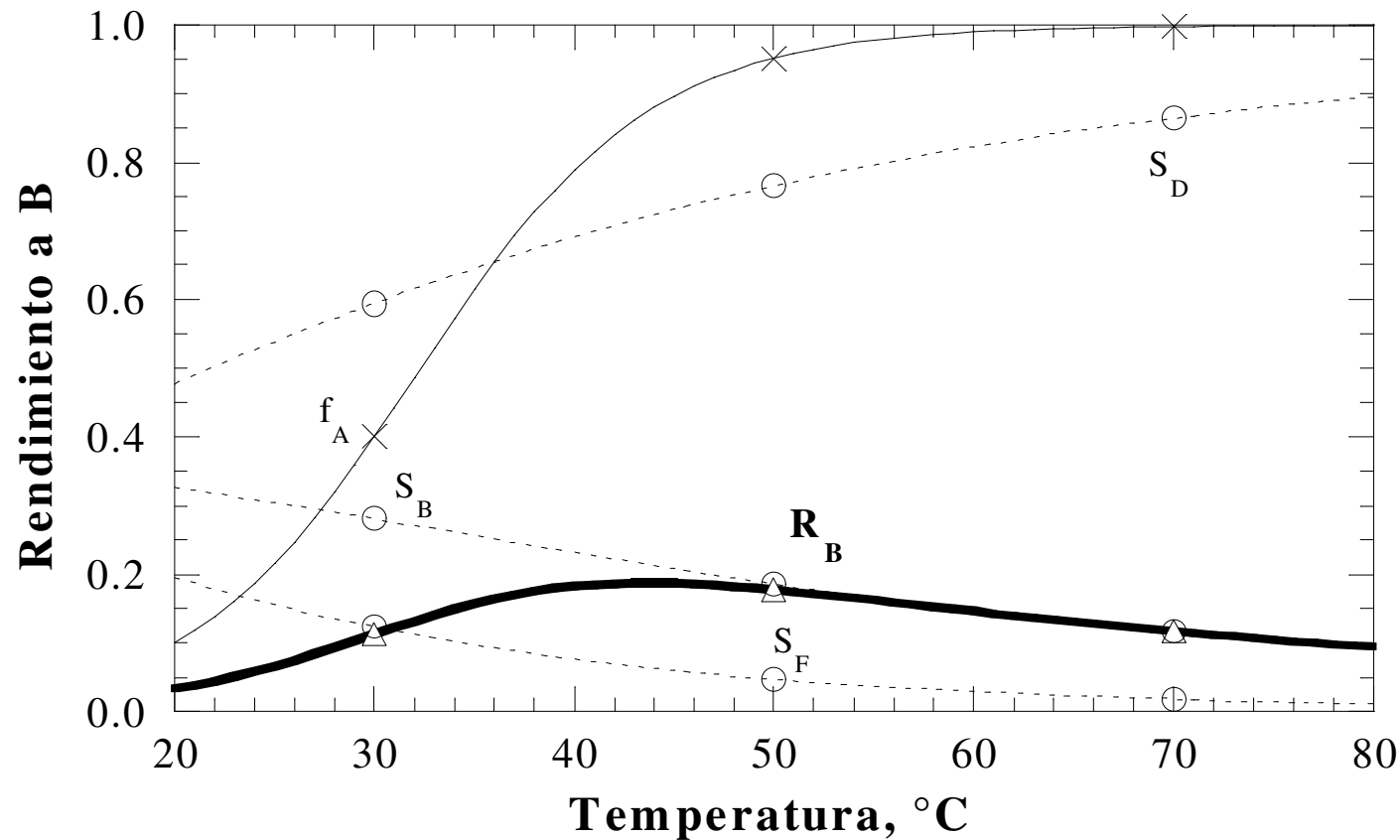
Ejemplo 4.3: Continuación 4

- Para 20 min

$T, ^\circ\text{C}$	30	50	70
C_A, M	0.2100	0.0170	0.0008
C_B, M	0.0197	0.0312	0.0205
C_D, M	0.0832	0.2551	0.3019
C_F, M	0.0174	0.0156	0.0062
f_A	0.4001	0.9515	0.9977
R_B	0.1127	0.1781	0.1173
S_B	0.2818	0.1872	0.1176
S_D	0.5943	0.7660	0.8645
S_F	0.1240	0.0468	0.0179

- $f_A \uparrow$ y $S_A \downarrow$ si $t \uparrow$
- Notar $R_{A \rightsquigarrow B}$

Ejemplo 4.3: Continuación 5



- Explicar el efecto de $T \leftrightarrow$ Energías de activación
- Óptimo económico $\neq R_{max}$
- Precaución con cinéticas $\neq F$ (Todos los reactivos)

Ejemplo 4.4: Tanque agitado y una rxn



$$-r_A = 0.316 \frac{\text{lt}^{0.5}}{\text{min mol}^{0.5}} C_C C_A^{0.5}$$

2 m³/h con $C_{C0} = 0.08$ M; Fabricante $\Rightarrow C_{A0} = 0.2$ M

Descomponer el contaminante C hasta 0.0001

¿ V_{R1} necesario? Tres reactores iguales en serie

- C es el rl

$$-r_C = -r_A \frac{(-1)}{(-2)} = 0.158 C_C (0.04 + 2C_C)^{0.5}$$

Ejemplo 4.4: Continuación 1

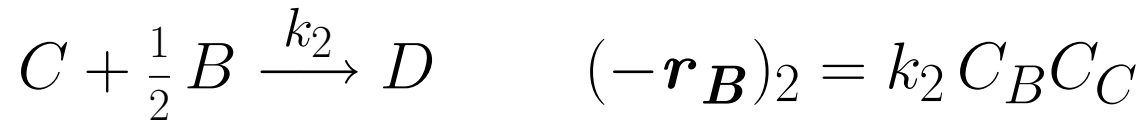
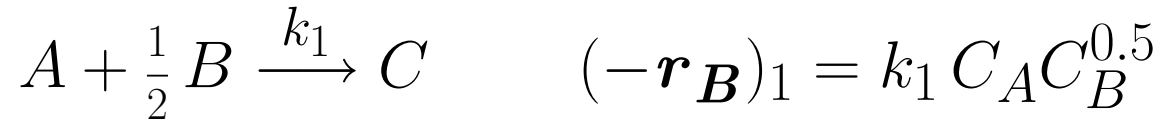
$$\tau = \frac{C_{C0} - C_{C1}}{(-r_C)_1} = \frac{0.08 \text{ M} - C_{C1}}{0.158 C_{C1}(0.04 + 2C_{C1})^{0.5}} = V_{R1}/\dot{V}_0 \quad (\text{A})$$

$$\tau = \frac{C_{C1} - C_{C2}}{(-r_C)_2} = \frac{C_{C1} - C_{C2}}{0.158 C_{C2}(0.04 + 2C_{C2})^{0.5}} \quad (\text{B})$$

$$\tau = \frac{C_{C2} - C_{C3}}{(-r_C)_3} = \frac{C_{C2} - 0.0001 \text{ M}}{3.168 \times 10^{-6} \text{ mol/min}\cdot\text{lt}} \quad (\text{C})$$

- **3 incógnitas:** $\tau > 0$; $0.08 \text{ M} > C_{C1} > C_{C2} > 0.0001 \text{ M}$
- **Paquete de matemáticas:** Algebraicas no-lineales simultáneas
- **Texto:** solución gráfica 2×2
- **Secuencial:** a) Suponer C_{C1} ; b) Ec. A $\Rightarrow \tau$
c) Ec. C $\Rightarrow C_{C2}$; d) Comprobar con Ec. B $\Rightarrow \tau$
- C_{C1} , C_{C2} y τ : 0.0079 M, 0.000088 M y 246 min. ; $V_R = \dot{V}_0 \tau = 8.2 \text{ m}^3$
- ¿Solución si τ es conocida y obtener C_{C3} ?

Ejemplo 4.5: Orden de dos tanques



80 lt/min con 0.5 M de A y 0.1 M de B

¿Cómo ordenar V_R 5 y 2 m³ para $\uparrow R_C$?

Extra: Comparar para 0.2 M de A, ¿Efecto C_{A0} ?

- A y B independientes:

$$C_C = 2(C_{A0} - C_A) - 2(C_{B0} - C_B)$$

$$C_D = 2(C_{B0} - C_B) - (C_{A0} - C_A)$$

$$-r_A = \frac{1}{0.5}(-r_B)_1 = 2(-r_B)_1$$

$$-r_B = (-r_B)_1 + (-r_B)_2$$

Ejemplo 4.5: Continuación 1

- Ecuaciones de diseño: Solución 2(2×2)

$$\tau_1 = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{(-r_A)_{R1}} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{0.0136 C_{A1} C_{B1}^{0.5}}$$

$$\tau_1 = \frac{C_{B0} - C_{B1}}{(-r_B)_{R1}} = \frac{0.1 \text{ M} - C_{B1}}{0.0068 C_{A1} C_{B1}^{0.5} + 0.075 C_{B1} [2(C_{A0} - C_{A1}) - 2(0.1 \text{ M} - C_{B1})]}$$

$$\tau_2 = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{(-r_A)_{R2}} = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{0.0136 C_{A2} C_{B2}^{0.5}}$$

$$\tau_2 = \frac{C_{B1} - C_{B2}}{(-r_B)_{R2}} = \frac{C_{B1} - C_{B2}}{0.0068 C_{A2} C_{B2}^{0.5} + 0.075 C_{B2} [2(C_{A0} - C_{A2}) - 2(0.1 \text{ M} - C_{B2})]}$$

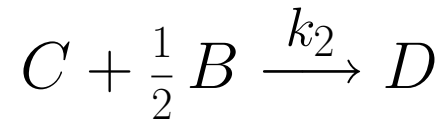
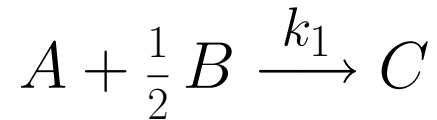
- ¡Los subíndices son importantísimos para evitar confusiones!

- Solución con 

$$\text{De (1)} \quad C_{B1} = \left(\frac{C_{A0} - C_{A1}}{0.0136 \tau_1 C_{A1}} \right)^2 \quad \text{y en (2)} \quad F_1(C_{A1}) = 0$$

$$\text{De (3)} \quad C_{B2} = \left(\frac{C_{A1} - C_{A2}}{0.0136 \tau_2 C_{A2}} \right)^2 \quad \text{y en (4)} \quad F_2(C_{A2}) = 0$$

Ejemplo 4.5: Continuación 2



- Indicadores globales

$$f_B = \frac{C_{B0} - C_{B2}}{C_{B0}}$$

$$S_C = \frac{0.5 C_{C2}}{C_{B0} - C_{B2}} = \frac{(C_{A0} - C_{A2}) - (C_{B0} - C_{B2})}{C_{B0} - C_{B2}}$$

$$R_{B \rightsquigarrow C} = \frac{0.5 C_{C2}}{C_{B0}} = \frac{(C_{A0} - C_{A2}) - (C_{B0} - C_{B2})}{C_{B0}}$$

- Selectividad OK porque son reacciones paralelas

Ejemplo 4.5: Continuación 3

C_{A0}, M	0.5	0.5	0.2
τ_1, min	62.5	25.0	25.0
τ_2, min	25.0	62.5	62.5
C_{A1}, M	0.4213	0.4576	0.1816
C_{B1}, M	0.0484	0.0742	0.0885
C_{A2}, M	0.3971	0.3967	0.01495
C_{B2}, M	0.0321	0.0327	0.0639
C_{C2}, M	0.0699	0.0720	0.0287
f_B	0.679	0.673	0.361
S_C	0.515	0.535	0.398
$R_{B \rightsquigarrow C}$	0.350	0.360	0.144

- Para $f \uparrow$, grande a chico; para éste $R \uparrow$, chico a grande
- Es conveniente $C_{A0} \uparrow$, ¿por qué?
- ¡El orden de los reactores importa!

Cómo Acomodar Tanques Agitados

■ *Una reacción y $r \uparrow$ si $C_{rl} \uparrow$*

- Si $n > 1$, mantener C_{rl} lo más alta posible
Chico a grande
- Si $0 < n < 1$, mantener C_{rl} lo más baja posible
Grande a chico
- Si $n = 1$, no importa el orden

■ *Varias reacciones o cinéticas complejas*

- Difícil generalizar
- Analizar caso por caso

Ejemplo 4.6: Tubular y una reacción



$$-r_A = 0.316 \frac{\text{lt}^{0.5}}{\text{min mol}^{0.5}} C_C C_A^{0.5}$$

2 m³/h con $C_{C0} = 0.08$ M; Fabricante $\Rightarrow C_{A0} = 0.2$ M

Descomponer el contaminante C hasta 0.0001

¿ V_R necesario? Comparar contra 3 reactores del Ejemplo 4.4

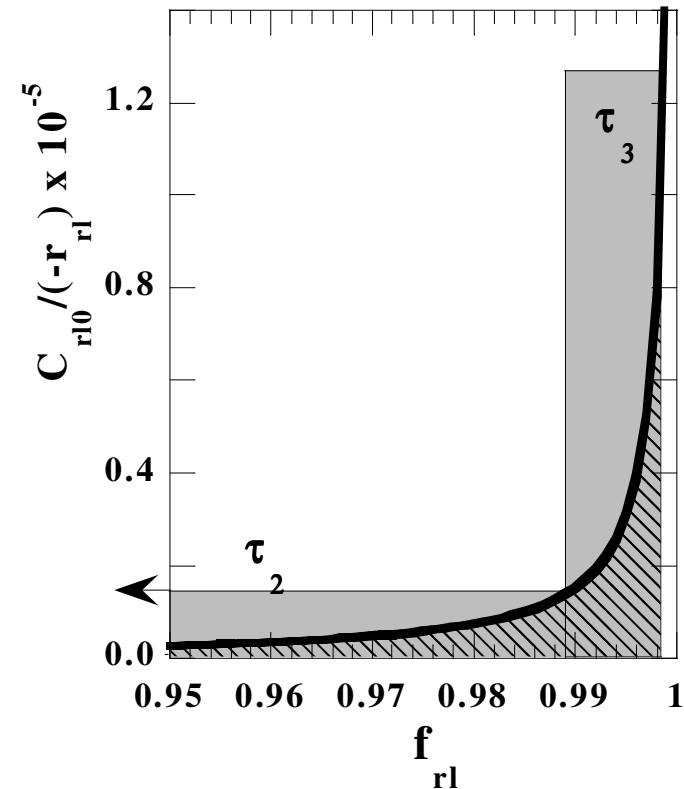
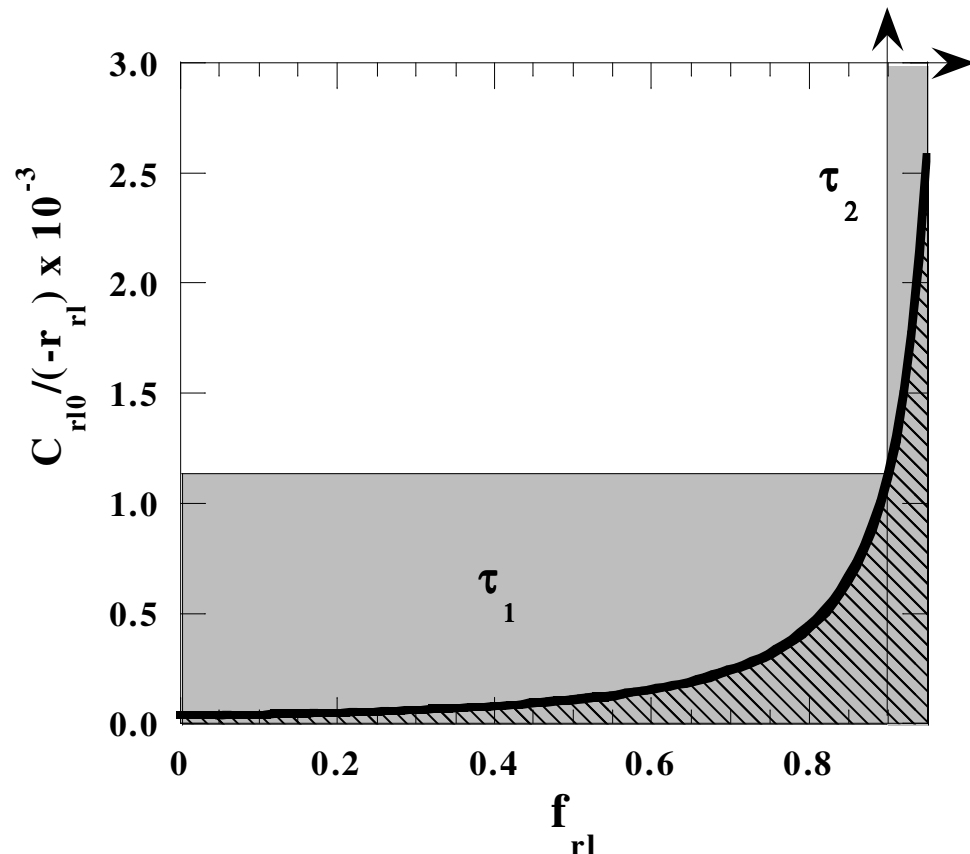
- $C_C = 0.0001$ M equivale $f_C = 0.99875$

$$\tau = \int_0^{f_C} \frac{C_{C0} df_C}{-r_C} = \int_0^{0.99875} \frac{df_C}{0.158 (1 - f_C)(0.2 - 0.16 f_C)^{0.5}} = 181.2$$

$$V_R = \dot{V}_0 \times \tau = 2 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} \times 181.2 \text{ min} \times \frac{1 \text{ h}}{60 \text{ min}} = 6.04 \text{ m}^3$$

- Tanque agitado de 8.2 m³ c/u (24.6 en total)

Ejemplo 4.6: (Continuación 1)



- Extra: Si $V_R = 24.6 \text{ m}^3$

$$F(f_C) = 0 = \int_0^{f_C} \frac{df_C}{0.158(1-f_C)(0.2-0.16f_C)^{0.5}} - 738 \text{ min}$$

¡Problemas de convergencia numérica!

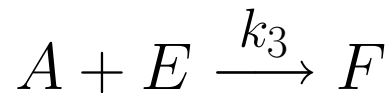
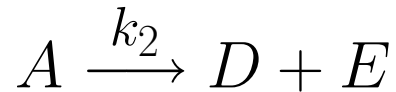
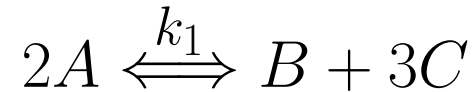
Ejemplo 4.6: (Continuación 2)

- Otra opción: Runge-Kutta

$$\frac{df_C}{d\tau} = 0.158 (1 - f_C) (0.2 - 0.16 f_C)^{0.5}$$

- $f_C = 0$ a $\tau = 0$, hasta $\tau = 738$ min obtenemos
 $f_C = 0.99999999999972$

Ejemplo 4.7



$$r_1 = 5.5 \times 10^{19} e^{\frac{-125,000}{8.314(T+273.2)}} \left(C_A^2 - \frac{C_B C_C^3}{9.5 \times 10^{21} e^{\frac{-141,000}{8.314(T+273.2)}}} \right)$$

$$r_2 = 7.2 \times 10^{24} e^{\frac{-158,000}{8.314(T+273.2)}} C_A^2$$

$$r_3 = 9.1 \times 10^{14} e^{\frac{-98,000}{8.314(T+273.2)}} C_A C_E$$

“Optimizar” V_R maximizando $R_{A \rightsquigarrow B}$ a 30, 40, 50 y 60°C
Similar a Ejemplo 4.3 pero diferentes cinéticas

Ejemplo 4.7: (Continuación 1)

- Condiciones iniciales; sólo variables “dependientes” e independiente

$$\frac{dC_A}{d\tau} = -2r_1 - r_2 - r_3 = -2k_1 \left[C_A^2 - \frac{C_B (3C_B)^3}{K} \right] - k_2 C_A^2 - k_3 C_A C_E$$

$$\frac{dC_B}{d\tau} = r_1 = k_1 \left[C_A^2 - \frac{C_B (3C_B)^3}{K} \right]$$

$$\frac{dC_E}{d\tau} = r_2 - r_3 = k_2 C_A^2 - k_3 C_A C_E$$

- Posteriormente

$$f_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

$$S_B = \frac{2C_B}{C_{A0} - C_A}$$

$$R_B = \frac{2C_B}{C_{A0}}$$

Ejemplo 4.7: (Continuación 2)

■ *Cálculo de otras concentraciones*

- **Opción 1: Estequiometría**

$$C_C = 3 C_B$$

$$C_D = 0.5 (C_{A0} - C_A) - C_B + 0.5 C_E$$

$$C_F = 0.5 (C_{A0} - C_A) - C_B - 0.5 C_E$$

- **Opción 2: Ecuaciones diferenciales extra**

$$\frac{dC_A}{d\tau} = -2k_1 \left(C_A^2 - \frac{C_B C_C^3}{K} \right) - k_2 C_A^2 - k_3 C_A C_E$$

$$\frac{dC_B}{d\tau} = k_1 \left(C_A^2 - \frac{C_B C_C^3}{K} \right)$$

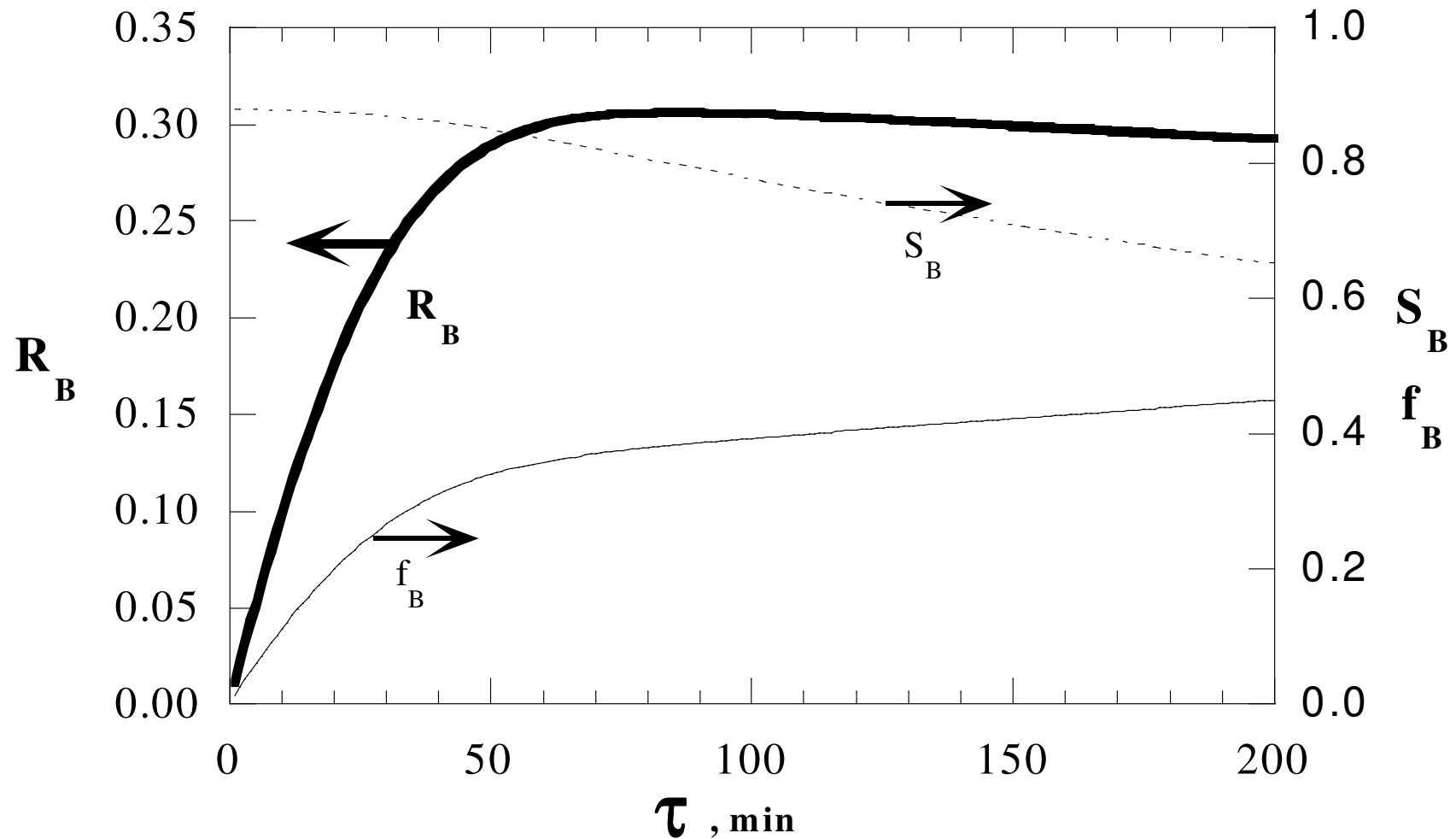
$$\frac{dC_C}{d\tau} = 3 k_1 \left(C_A^2 - \frac{C_B C_C^3}{K} \right)$$

$$\frac{dC_D}{d\tau} = k_2 C_A^2$$

$$\frac{dC_E}{d\tau} = k_2 C_A^2 - k_3 C_A C_E$$

$$\frac{dC_F}{d\tau} = k_3 C_A C_E$$

Ejemplo 4.7: (Continuación 3)



Ejemplo 4.7: (Continuación 4)

- “Óptimos”

$T, ^\circ\text{C}$	30	40	50	60
τ^*	85.5	29.0	11.0	5.0
C_A^*	0.2157	0.1582	0.1009	0.0535
C_B^*	0.0536	0.0718	0.0870	0.0947
f_A^*	0.3837	0.5479	0.7118	0.8471
S_B^*	0.7989	0.7493	0.6985	0.6388
R_B^*	0.3065	0.4105	0.4972	0.5411

- Principal limitada por equilibrio, secundarias no

$T, ^\circ\text{C}$	K	$(f_{eq})_1$	k_1	k_2	k_3	k_2/k_1	k_3/k_1
30	0.0048	0.222	0.0159	0.0043	0.0118	0.2696	0.7432
40	0.0287	0.269	0.0775	0.0317	0.0409	0.4095	0.5279
50	0.1532	0.370	0.3423	0.2075	0.1311	0.6062	0.3830
60	0.7405	0.491	1.3832	1.2123	0.3918	0.8764	0.2832

Cómo Acomodar Reactores Continuos

Para cinéticas convencionales,

$$f_{\text{tubular}} > f_{\text{tanque agitado}} \text{ mismo } V_R$$

■ *Tubulares*

- No importa orden ni acomodo (serie o paralelo)
(OJO: En cuanto al modelamiento matemático)

■ *Tubulares y tanques agitados (Una reacción simple)*

- Si $n > 1$, mantener C_{rl} lo más alta posible
Tubulares seguidos por tanques de chico a grande
- Si $0 < n < 1$, mantener C_{rl} lo más baja posible
Tanques de grande a chico seguidos por tubulares
- Si $n = 1$, no importa el orden

■ *Varias Reacciones: Analizar caso por caso*

Resapitulación

- Modelos ideales: Por lotes, tanque agitado y tapón
- V_R , t retención y residencia, y τ
- Ecuaciones de diseño = balances molares de masa
Entenderlas y utilizarlas: ¡No reinventar el hilo negro!
 - Una reacción: Basarse en rl (fracción conversión)
 - Por lotes y tapón: Una ecuación diferencial por reacción independiente
 - Tanque Agitado: Una ecuación de algebraica por reactor por reacción independiente
 - Desarrollarlas: Problemas 4.18 y 4.19
- El acomodo de los reactores puede ser importante
- Optimización \leftrightarrow economía de toda la planta