

11 de Febrero de 2010

ESCUELA DE INGENIERIA QUIMICA DE LA UNIVERSIDAD DE LOS ANDES  
CALCULO DE REACTORES  
SEMESTRE A-10  
PROF. ALBERTO QUINTERO

NOMBRE: \_\_\_\_\_

CEDULA DE IDENTIDAD: \_\_\_\_\_

### PRIMER PARCIAL

1.- El tiempo de vida media ( $t_{1/2}$ ) de un reactivo es el tiempo requerido para que su concentración disminuya a la mitad del valor inicial. La velocidad de hidratación del óxido de etileno (A) a etilenglicol ( $C_2H_4O + H_2O \rightarrow C_2H_6O_2$ ) en una solución acuosa diluida es proporcional a la concentración de A, con una constante de proporcionalidad de  $4,11 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  a  $20^\circ\text{C}$  para una cierta concentración constante de catalizador  $HClO_4$ . Determine el tiempo medio ( $t_{1/2}$ ) o su equivalente espacio-tiempo ( $\tau_{1/2}$ ) en segundos, de el óxido (A) a  $20^\circ\text{C}$ , si la reacción es llevada a cabo en:

- Un reactor discontinuo. 1pto
- En un reactor agitado permanente operando en estado estacionario. 1pto
- Asuma ahora que la cinética es de segundo orden con respecto a el reactivo A, calcule de nuevo la parte a) y b) asumiendo una concentración inicial de A de  $3 \text{ mol/lit}$  y una velocidad de reacción específica de  $4,11 \times 10^{-5} \text{ lit}/(\text{mol} \cdot \text{s})$ . 2pto
- Explique de manera breve la diferencia presente en las dos cantidades de tiempo obtenidas en la parte a) y b). 1pto

2.- Un reactor experimental el cual funciona como un RAP operando adiabáticamente, fue utilizado para medir la velocidad de oxidación del  $SO_2$ , a  $SO_3$  con un catalizador de Óxido de Vanadio  $V_2O_5$ . El catalizador está presente como un lecho fijo (200g) de partículas sólidas dentro del reactor, con una densidad de bulto (masa de catalizador/volumen de lecho) de  $500 \text{ g/lit}$  y una relación de volumen vacío/volumen de lecho de 0,4. Un motor dentro del reactor sirve para mezclar de manera perfectamente homogénea el gas. Basado en esta información y los datos dados al final para una corrida en estado estacionario, calcule lo siguiente:

- La fracción de  $SO_2$  convertida en la corriente de salida. 2pto
- La velocidad de reacción,  $-r_{SO_2}$ , mol de  $SO_2/(\text{g catalizador} \cdot \text{s})$ , a que temperatura se aplica? 1pto

c) El espacio-tiempo  $\tau$ , para el gas en el lecho catalítico, si la temperatura de alimentación es 548 K. 2pto

Flujo molar de alimentación total 1,2 mol/min

Composición de la alimentación 25% SO<sub>2</sub>, 25% O<sub>2</sub> y 50%N<sub>2</sub> todos en mol

Temperatura dentro del reactor 800K

Presión dentro y fuera del reactor 1,013bar

Concentración de SO<sub>3</sub> a la salida 10,5% en mol

3.- La reacción  $A+B \rightarrow C$ , cuya cinética es  $(-r_A)=kC_A C_B^2$ , se lleva a cabo en fase gaseosa a 100°C. El reactor se alimenta a una tasa de 6lt/min y un flujo molar de A de 2 mol/min; B se introduce a razón de 2 moles de B/mol de A ( $k_{50^\circ C}= 7,41 \times 10^{-2}$  lt/(min\*mol);  $E_a= 15$ Kcal/mol).

a) Obtenga  $(-r_A)=kf(x)$  y calcule la constante de proporcionalidad. 2pto

b) Calcule el volumen del RAP para una conversión del 75%. 2pto

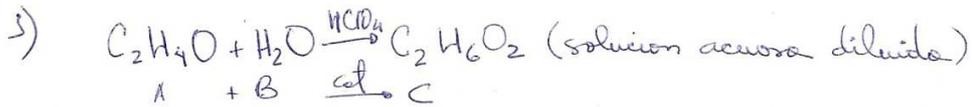
c) Con base en el resultado anterior calcule la conversión que se puede obtener en un RFP de igual volumen. Compare y discuta los resultados. 2pto

d) Cual sería el volumen del RAP en serie con el RAP obtenido en la parte b) que haría falta para obtener la conversión del RFP de la parte c). 2pto

e) Suponga que dispone de los tres reactores calculados en la parte b) a d). Proponga un esquema de producción que haga la conversión lo más alta posible con los reactores disponibles, prefiriéndose arreglos de dos reactores por economía. Razone y justifique con cálculos. 2 pto

## Solucion del primer parcial

①



$$(-r_A) = K C_A \quad K = 4,11 \times 10^{-5} \text{ seg}^{-1} @ 20^\circ\text{C}$$

a) Reactor Discontinuo

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A \cdot V \rightarrow \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{dt} = r_A \rightarrow \frac{d(N_A/V)}{dt} = r_A$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -K C_A \rightarrow -\frac{1}{K} \int_{C_{A_0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = \int_0^t dt$$

Para  $t = t_{1/2} \rightarrow F_{A_0} = \frac{1}{2} F_{A_0}$  Para este caso fase liquida  $C_{A_0} = \frac{1}{2} C_{A_0}$

$$-\frac{1}{K} \ln[C_A] \Big|_{C_{A_0}}^{\frac{1}{2}C_{A_0}} = t_{1/2}$$

$$t_{1/2} = -\frac{1}{K} \left[ \ln\left(\frac{1}{2} C_{A_0}\right) - \ln(C_{A_0}) \right] = -\frac{1}{K} \cdot \ln \left[ \frac{\frac{1}{2} C_{A_0}}{C_{A_0}} \right] = -\frac{1}{K} \ln\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$t_{1/2} = 26864,89 \text{ seg} = 4,68 \text{ h}$$

b) RAP

$$V = \frac{F_A - F_{A_0}}{r_A} \Rightarrow V = \frac{C_A \cdot V_0 - C_{A_0} \cdot V_0}{-K C_A} \rightarrow \frac{V}{V_0} = \frac{\frac{1}{2} C_{A_0} - C_{A_0}}{-K \cdot \frac{1}{2} C_{A_0}}$$

$$\tau_{1/2} = \frac{+\frac{1}{2} C_{A_0}}{+K \cdot \frac{1}{2} C_{A_0}} = \frac{1}{K} = 24330,9 \text{ seg} = 6,76 \text{ h}$$

c)  $(-r_A) = k C_A^2$   
 $C_{A0} = 3 \text{ mol/l}$   
 $k = 4,11 \times 10^{-5} \text{ (mol} \cdot \text{s)}^{-1}$

BATCH:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k C_A^2 \rightarrow -\frac{1}{k} \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A^2} = \int_0^t dt$$

Sabiendo que para este caso específico  $C_A = \frac{1}{2} C_{A0}$  en el denominado tiempo medio, esto porque es una reacción en fase líquida donde  $v = v_0$

$$-\frac{1}{k} \left[ -\frac{1}{C_A} \right]_{C_{A0}}^{\frac{1}{2} C_{A0}} = t_{1/2}$$

$$t_{1/2} = -\frac{1}{k} \left[ -\frac{1}{0,5 C_{A0}} + \frac{1}{C_{A0}} \right] = \frac{1}{k} \left[ \frac{2}{C_{A0}} - \frac{1}{C_{A0}} \right]$$

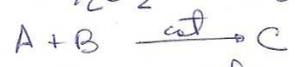
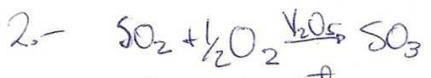
$$t_{1/2} = \frac{1}{k C_{A0}} = 8110,3 \text{ seg} = 2,25 \text{ h}$$

RAP:

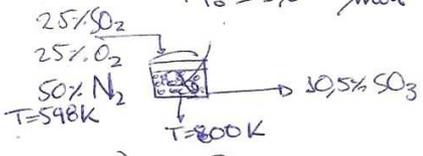
$$V = \frac{F_A - F_{A0}}{r_A} = \frac{v_0 (C_A - C_{A0})}{-k C_A^2} \rightarrow \tau = \frac{V}{v_0} = \frac{C_A - C_{A0}}{-k C_A^2}$$

$$\tau_{1/2} = \frac{\frac{1}{2} C_{A0} - C_{A0}}{-k \cdot \left(\frac{1}{2} C_{A0}\right)^2} = \frac{-\frac{1}{2} C_{A0}}{-k \cdot \frac{1}{4} C_{A0}^2} = \frac{2}{k C_{A0}} = 16220,6 \text{ seg} = 4,5 \text{ h}$$

d) Al comparar el RAP con el BATCH siempre se obtiene un tiempo medio mayor para el primero porque en este se ha hecho la suposición de que es perfectamente homogéneo en su interior y los valores de las variables en su interior son los de la salida donde la velocidad de reacción es baja por la baja concentración de A, tomando más tiempo la reacción.



$F_{T0} = 1,2 \text{ mol/min}$



a)  $x = ?$

$w = 200g$

$\rho_b = 500 \text{ g/ft}$

$\frac{0,4 \text{ m}^3 \text{ de vacio}}{\text{m}^3 \text{ de lecho}}$

$\Delta P = 0 \rightarrow P = 1,013 \text{ bar}$

Tabla Estequiometrica

| Compuesto       | Entra                          | Cambio     | Salida              |
|-----------------|--------------------------------|------------|---------------------|
| SO <sub>2</sub> | 0,25x1/2                       | -0,3·x     | 0,3(1-x)            |
| O <sub>2</sub>  | 0,25x1/2                       | -1/2·0,3·x | 0,3(1-1/2)          |
| N <sub>2</sub>  | 0,25x3/2x2                     | —          | 0,6                 |
| SO <sub>3</sub> | —                              | 0,3·x      | 0,3·x               |
|                 | $F_{T0} = 1,2 \text{ mol/min}$ |            | $F_T = 1,2 - 0,15x$ |

$F_T = 1,2 - 0,15x$  ①

La segunda ecuacion se obtiene de la condicion de salida

$0,3 \cdot x = 0,105 \cdot F_T$  ②

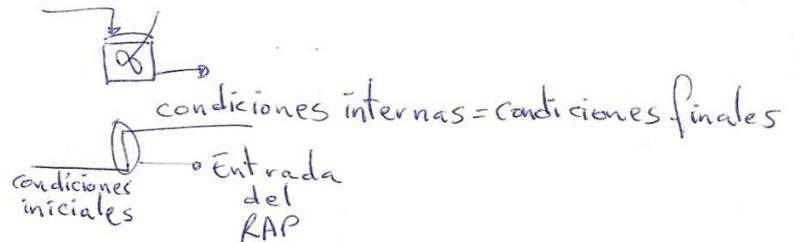
2.-  $\begin{cases} F_T + 0,15x = 1,2 \\ 0,105 F_T - 0,3x = 0 \end{cases}$

$\begin{cases} 2F_T + 0,3x = 2,4 \\ 0,105 F_T - 0,3x = 0 \end{cases}$

$2,105 F_T = 2,4 \rightarrow F_T = 1,14 \text{ mol/min}$

$x = \frac{0,105 \cdot 1,14}{0,3} = 0,3990 \approx 40\%$

b) Se debe aplicar a  $T=800K$  debido a que se ha <sup>(4)</sup> hecho la suposición de que en su interior el reactor es perfectamente homogéneo y recordamos que un RAP en su modelo funciona como si hubiese un salto  $\rightarrow$  modelo matemático OJO



c)  $\tau = \frac{V}{v} = \frac{\text{Volumen de todo el reactor por donde pasa el fluido}}{\text{flujo volumetrico dentro del reactor}}$

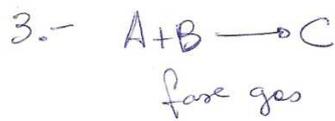
$$V_{\text{lecho}} = 200 \text{ g lecho} \cdot \frac{5 \text{ lt lecho}}{500 \text{ g lecho}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ lt}} \cdot \frac{0,4 \text{ m}^3 \text{ vacio}}{1 \text{ m}^3 \text{ lecho}} \cdot \frac{1000 \text{ lt}}{1 \text{ m}^3} = 0,16 \text{ lt}$$

$$\frac{P \cdot V}{P_0 \cdot V_0} = \frac{z F_T R T}{z_0 F_{T_0} R T_0}$$

$$V = V_0 \cdot \frac{F_T}{F_{T_0}} \cdot \frac{T}{T_0} = 53,92 \frac{\text{lt}}{\text{min}} \cdot \frac{3,14}{1,2} \cdot \frac{800}{548} = 74,78 \frac{\text{lt}}{\text{min}}$$

$$V_0 = \frac{F_{T_0} R T_0}{P_0} = \frac{1,2 \frac{\text{mol}}{\text{min}} \cdot 0,082 \frac{\text{Atm} \cdot \text{lt}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 548 \text{ K}}{1,013 \text{ bar} \cdot \frac{1 \text{ ATM}}{1,013 \text{ bar}}} = 53,92 \frac{\text{lt}}{\text{min}}$$

$$\tau = \frac{0,16 \text{ lt}}{74,78 \frac{\text{lt}}{\text{min}}} = 0,13 \text{ seg} = 2,14 \cdot 10^{-3} \text{ min}$$



$$K_{50^{\circ}C} = 7,41 \times 10^{-2} \frac{\text{lt}}{\text{min} \cdot \text{mol}}$$

$$E_a = 15 \text{ Kcal/mol}$$

$T = T_0 = 100^{\circ}C$  Isotermico

$$(-r_A) = K C_A C_B^2$$

$$V_0 = 6 \text{ lt/min}$$

$$F_{A_0} = 2 \text{ mol/min}$$

$$F_{B_0} = 2 F_{A_0}$$

(5)

a)  $(-r_A) = K f(x)??$

Reactivo limite es A

Tabla Estequiometrica

| Compuesto | Entra | Cambio                        | Salida         |
|-----------|-------|-------------------------------|----------------|
| A         | 2     | $-2 \cdot x$                  | $2(1-x)$       |
| B         | 4     | $-2 \cdot x$                  | $2(2-x)$       |
| C         | —     | $2 \cdot x$                   | $2x$           |
|           |       | $F_{T_0} = 6 \text{ mol/min}$ | $F_T = 6 - 2x$ |

Para determinar el flujo volumetrico en funcion de la conversion

$$\frac{P V}{P_0 V_0} = \frac{z F_T R T}{z_0 F_{T_0} R T_0}$$

$$V = V_0 \cdot \frac{F_T}{F_{T_0}} = 6 \frac{\text{lt}}{\text{min}} \cdot \frac{(6-2x)}{6} = 6-2x$$

Asi cada una de las concentraciones queda

$$C_A = \frac{F_A}{V} = \frac{2(1-x)}{6-2x} = \frac{2(1-x)}{2(3-x)} = \frac{1-x}{3-x}$$

$$C_B = \frac{F_B}{V} = \frac{2(2-x)}{6-2x} = \frac{2(2-x)}{2(3-x)} = \frac{2-x}{3-x}$$

$$C_C = \frac{F_C}{V} = \frac{2x}{6-2x} = \frac{2x}{2(3-x)} = \frac{x}{3-x}$$

Para calcular el valor de  $K_{@100^{\circ}\text{C}}$

⑥

$$\frac{K_{@100^{\circ}\text{C}}}{K_{@50^{\circ}\text{C}}} = \frac{K \cdot e^{-\frac{E_a}{R(100^{\circ}\text{C}+273,15)\text{K}}}}{A \cdot e^{-\frac{E_a}{R(50^{\circ}\text{C}+273,15)\text{K}}}}$$

$$K_{@100^{\circ}\text{C}} = K_{@50^{\circ}\text{C}} \cdot e^{-\frac{E_a}{R} \left[ \frac{1}{373,15\text{K}} - \frac{1}{323,15\text{K}} \right]} = 7,41 \times 10^{-2} \cdot e^{-\frac{15000\text{cal/mol}}{5,784\text{ cal/mol}\cdot\text{K}} \left[ \frac{1}{373,15} - \frac{1}{323,15} \right]}$$

$$K_{@100^{\circ}\text{C}} = 1,69 \frac{\text{lt}}{\text{min}\cdot\text{mol}}$$

Así la expresión para la velocidad de reacción a  $100^{\circ}\text{C}$  quedaría

$$(-r_A) = 1,69 \cdot \left( \frac{1-x}{3-x} \right) \left( \frac{2-x}{3-x} \right)^2$$

b)  $V_{\text{RAP}} = ? \rightarrow x = 0,75$

$$V_{\text{RAP}} = \frac{F_A - F_{A0}}{r_A} = \frac{2(1-x) - 2}{-1,69 \cdot \left( \frac{1-x}{3-x} \right) \left( \frac{2-x}{3-x} \right)^2} = 25,88 \text{ lt}$$

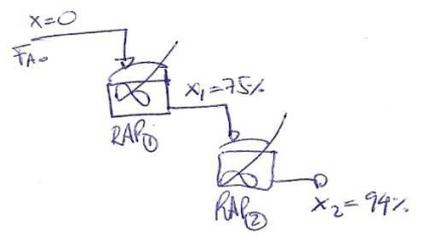
c)  $V_{\text{RFP}} = V_{\text{RAP}} = 25,88 \text{ lt} \rightarrow x_{\text{RFP}} = ?$

$$V_{\text{RFP}} = F_{A0} \int_0^x \frac{dx}{(-r_A)} = \int_0^x \frac{F_{A0}}{(-r_A)} dx = 25,88 \text{ lt}$$

$$V_{\text{RFP}} = \int_0^x \frac{2(3-x)^3}{1,69(1-x)(2-x)^2} dx = 25,88 \text{ lt}$$

Para el valor de  $x = 0,94$  usando excel con el método de los rectángulos la integral da  $25,93 \text{ lt}$  con un peso. Lo que demuestra que para igual volumen un RFP da una mayor conversión que un RAP, por ser un reactor diferencial.

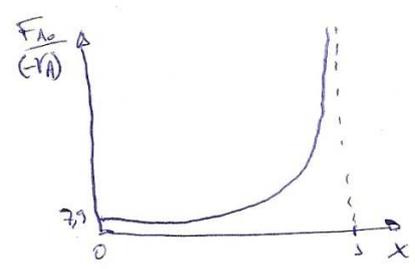
d)  $V_{RAP_2} = ?$



$$V_{RAP_2} = \frac{F_{A0} (X_2 - X_1)}{(-r_A)_{\text{salida RAP}_2}} = \frac{F_{A0} (X_2 - X_1)}{K_{1000C} \left( \frac{1-X_2}{3-X_2} \right) \left( \frac{2-X_2}{3-X_2} \right)^2}$$

$$V_{RAP_2} = \frac{2 (0,94 - 0,75)}{5,69 \left( \frac{1-0,94}{3-0,94} \right) \left( \frac{2-0,94}{3-0,94} \right)^2} = 29,16 \text{ lt}$$

e) En esta ultima seccion al elaborar la curva de Levenspiel para la reaccion se tiene lo siguiente



Se observa que como 1 es una raiz de la expresion de velocidad de reaccion esta velocidad se vuelve muy lenta cuando se acerca a la conversion completa de los reactivos no pudiendo lograrse esto nunca. Por otra parte por la forma de la curva y los resultados obtenidos anteriormente conviene mas poner primero el PFR, ahora se evalua cual de los dos RAP es preferible colocar y si de verdad vale la pena

Para cualquiera de los dos RAP la ecuación sera

⑧

$$V_{RAP} = \frac{F_{A0} (x_f - 0,94)}{1,69 \left( \frac{1-x_f}{3-x_f} \right) \left( \frac{2-x_f}{3-x_f} \right)^2}$$

RAP①:

$$\frac{2(x_f - 0,94)}{1,69 \left( \frac{1-x_f}{3-x_f} \right) \left( \frac{2-x_f}{3-x_f} \right)^2} = 25,88 \text{ lt} \rightarrow x_f \approx 0,984$$

RAP②:

$$\frac{2(x_f - 0,94)}{1,69 \left( \frac{1-x_f}{3-x_f} \right) \left( \frac{2-x_f}{3-x_f} \right)^2} = 29,16 \text{ lt} \rightarrow x_f \approx 0,9854$$

La conversion no aumentara de manera considerable pero si se pueden utilizar dos reactores preferiblemente uso el RAP①. Asi la configuracion es

