

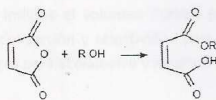
14 de Mayo de 2010

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

NOMBRE: _____
CEDULA DE IDENTIDAD: _____

TERCER PARCIAL

1.- Los ésteres de ácido maleico, debido a sus dos grupos reactivos (doble enlace y grupo carboxílico), son productos intermedios de interés comercial. Estos pueden ser producidos mediante la reacción del anhídrido maleico con un alcohol.



O bien,



Se trata, como ejemplo, la producción de maleato de hexilo. La disolución del anhídrido se efectúa de 323K a 328K. La reacción transcurre de acuerdo a una cinética elemental. Los datos de la reacción son:

$(-\Delta H_R) = 33500 \text{ J/Kmol}$
 $C_{A0} = 4,55 \text{ Kmol/m}^3$
 $C_{B0} = 5,34 \text{ Kmol/m}^3$
 $E_a = 105000 \text{ KJ/Kmol}$
 $A = 4,92 \times 10^{15} \text{ m}^3 / (\text{Kmol} \cdot \text{h})$
 $C_{p_A} = 80,322 \text{ KJ}/(\text{Kmol} \cdot \text{K})$
 $C_{p_B} = 98,870 \text{ KJ}/(\text{Kmol} \cdot \text{K})$
 $PM_{\text{anhídrido maleico}} = 98 \text{ g/gmol}$

Nota: Asuma que el cambio de ΔH_R con respecto a la temperatura es despreciable ($\Delta C_p = 0$).

Para una operación adiabática en un reactor agitado permanente, determinar los perfiles de conversión y temperatura en función del parámetro τ (tiempo espacial). 5ptos

2.- La reacción del problema anterior debe realizarse hasta alcanzar una conversión elevada. Para evitar reacciones competitivas, la temperatura del reactor no debe sobrepasar los 100°C; por lo tanto una operación adiabática no es posible. La reacción se llevara a cabo en un reactor de tanque agitado con un sistema de refrigeración interno, para el análisis se consideran los siguientes datos adicionales:

$$V = 5 \text{ m}^3$$
$$A = 20 \text{ m}^2$$
$$U = 0,5 \text{ kW}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$$

Determine los perfiles de conversión y temperatura para una temperatura del fluido refrigerante de 330K y 390K. 7ptos

3.- Se tienen las siguientes reacciones elementales en serie en fase gas:



Se alimenta A puro con una velocidad de flujo molar de 0,05 lbmol/seg, la velocidad de flujo volumétrico es de 7,85 ft³/seg, la temperatura de ingreso es de 400°F, la presión del reactor permanece casi constante con un valor de 4 atm. Las capacidades caloríficas de todas las especies involucradas es de 25 Btu/(lbmol*°F). Los parámetros para cada una de las velocidades de reacción específicas son:

Reacción 1
 $A_1 = 2 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$
 $E_{a1} = 31000 \text{ Btu/lbmol}$
 $\Delta H_{R1} = 15000 \text{ Btu/lbmol A reaccionado}$

Reacción 2
 $A_2 = 1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$
 $E_{a2} = 40000 \text{ Btu/lbmol}$
 $\Delta H_{R2} = -20000 \text{ Btu/lbmol C generado}$

Con los datos anteriores obtengas los perfiles de flujos y temperatura como función del volumen del reactor, para un RFP adiabático. Indique el volumen óptimo para el mejor desempeño del reactor, indique el valor de rendimiento, conversión y selectividad para el punto óptimo elegido. El producto deseado es B. Proponga unos valores para el diámetro y longitud del reactor. 8ptos

FORMULARIO

$$\frac{dT}{dV} = \frac{U \cdot a \cdot (T_a - T) + \sum_{i=1}^q (-r_{ij}) \cdot (-\Delta H_{Rij})}{\sum_{j=1}^m F_j \cdot C_{p_j}} \quad \text{Para "q" reacciones y "m" especies}$$

$$\frac{dF_i}{dV} = r_i$$

$$\tau = \frac{C_{A_0} \cdot x}{(-rA)_{salida}}$$

$$\frac{Q}{F_{A_0}} - \frac{W_s}{F_{A_0}} - x[\Delta H_{R_x}(T_R) + \Delta C_p(T - T_R)] = \sum_{i=1}^n \theta_i \cdot C_{p_i} \cdot (T - T_0)$$

L.-

(1)



$$T_0 = 323 K$$

$$\Delta H_{rx} = -33500 \text{ J/kmol}$$

$$C_{A0} = 4,55 \text{ kmol/m}^3$$

$$C_{B0} = 5,34 \text{ kmol/m}^3$$

$$E_a = 105000 \text{ kJ/kmol}$$

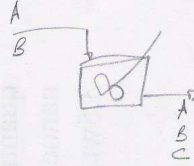
$$A = 4,92 \times 10^{15} \text{ m}^3/\text{kmol}\cdot\text{h}$$

$$C_{pA} = 803,22 \text{ J/kmol}\cdot\text{K}$$

$$C_{pB} = 988,70 \text{ J/kmol}\cdot\text{K}$$

$$P_{MA} = 98 \text{ kg/kmol}$$

$$\Delta C_p = 0$$



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

$$\dot{Q} = 0$$

Balance molar para A

$$V = \frac{F_{A0} - F_{A0}(1-x)}{(-r_A)_{\text{solida}}} \rightarrow V = \frac{F_{A0} \cdot x}{K \cdot C_A C_B}$$

$$\rightarrow V = \frac{C_{A0} \cdot V_0 \cdot x}{K C_A C_B}$$

$$x = \frac{V}{V_0} = \frac{C_{A0} \cdot x}{K C_A C_B}$$

Tabla Estequiometrica

Compuesto	Entrada	Cambio	Salida
A	F_{A0}	$-F_{A0} \cdot x$	$F_{A0}(1-x)$
B	F_{B0}	$-F_{A0} \cdot x$	$F_{A0}(\theta_B - x)$
C	-	$F_{A0} \cdot x$	$F_{A0} \cdot x$

$$C_A = \frac{F_{A0}(1-x)}{V_0} \rightarrow C_A = C_{A0}(1-x) \quad C_B = C_{A0}(\theta_B - x)$$

$$C_C = C_{A0} \cdot x$$

Por ser en fase liquida

$$\theta_0 = \frac{F_{B0}}{F_{A0}} = \frac{F_{B0}/\%_0}{F_{A0}/\%_0} = \frac{C_{B0}}{C_{A0}} = \frac{5,34}{4,55} = 1,17 \quad (2)$$

$$\chi = \frac{4,55 \cdot x}{K(4,55)^2(1,17-x)(1-x)} = \frac{x}{K \cdot 4,55(1,17-x)(1-x)} \dots (1)$$

$$K = 4,92 \times 10^{15} \cdot e^{-\frac{105000}{8314 \cdot T}} \dots (2)$$

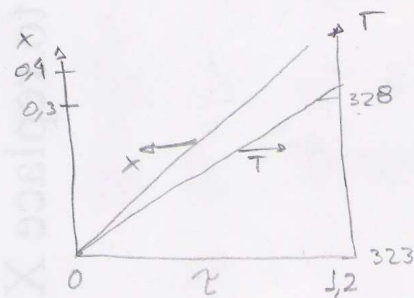
Ahora se realiza un balance de energía

$$-x \cdot \Delta H_{Rx} = \sum_{i=1}^3 \theta_i \rho_i (T - T_0)$$

$$-x[-33500] = 1.803,22(T - 323K) + 1,17 \cdot 988,70(T - 323) \dots (3)$$

$$x = \left[\frac{803,22 + 1,17 \cdot 988,7}{33500} \right] (T - 323) \rightarrow x = 0,0585(T - 323)$$

T(K)	x	\chi(w)
324	0,0585	0,21
325	0,117	0,42
326	0,1755	0,64
327	0,234	0,86
328	0,2925	1,11



2.- El balance molar permanece igual solo que ahora se debe agregar al balance de energía el término de transferencia de calor debido al refrigerante

$$\frac{Q}{F_{A0}} = x[-33500] = 1959,99(T - 323)$$

Como no hay suficientes datos para calcular F_{A0} pero se dan otros resultados, se puede conseguir la respuesta al sustituir el balance molar en el balance de energía

(3)

$$\frac{UA(T_a - T)}{F_{A0}} + 33500 \cdot x = 1959,99(T - 323)$$

$$\frac{V}{V_0} = \frac{C_{A0} \cdot x}{K C_{A0}^2 (1-x)(1,17-x)} \rightarrow V = \frac{C_{A0} V_0 \cdot x}{K C_{A0}^2 (1-x)(1,17-x)}$$

$$F_{A0} = \frac{V \cdot K \cdot C_{A0}^2 (1-x)(1,17-x)}{x}$$

Al sustituir en el balance de energía

$$\frac{0,5 \frac{\text{KW}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}} \cdot 20 \text{m}^2 (T_a - T) \cdot x \cdot \left(\frac{1000 \text{W}}{\text{JKW}}\right) \left(\frac{1 \text{J}}{1 \text{W}}\right)}{5 \text{m}^3 \cdot 492 \times 10^{15} \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{h}} \cdot \left(4,55 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}\right)^2 (1-x)(1,17-x) \cdot \left(\frac{1 \text{h}}{3600 \text{s}}\right) \cdot \exp\left(\frac{-105000}{8,314 \cdot T}\right)} + 33500 \cdot x = 1960(T - 323)$$

$$\frac{7,07 \times 10^{-11} (T_a - T) \cdot x}{(1-x)(1,17-x) \cdot \exp\left(\frac{-105000}{8,314 \cdot T}\right)} + 33500 \cdot x = 1959,99(T - 323)$$

Para $T_a = 330 \text{ K}$

x	T(K)
0	323
0,2	327,998
0,4	329,999
0,6	330,0008
0,8	330,0004

Operación Isotérmica

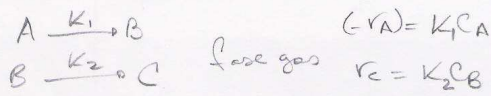
Para $T_a = 390 \text{ K}$

x	T(K)
0	323
0,2	376
0,4	382
0,6	386
0,8	388

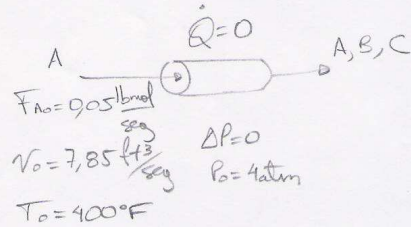
Se excede de los 100°C para conversiones altas

Es mejor la temperatura del refrigerante de 330 K

3.-



(4)



$$C_{PA} = C_{PB} = C_{PC} = 25 \frac{\text{Btu}}{\text{lbmol} \cdot ^\circ\text{F}}$$

$$K_1 = 2 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(\frac{-31000}{1.987 \cdot T}\right)$$

$$K_2 = 1 \cdot 10^{11} \cdot \exp\left(\frac{-40000}{1.987 \cdot T}\right)$$

$$V = ?$$

Balance molar para cada especie

$$\frac{dF_A}{dV} = r_A, \quad \frac{dF_B}{dV} = r_{B\text{neto}}, \quad \frac{dF_C}{dV} = r_C$$

$$r_A = -K_1 C_A$$

$$r_{B\text{neto}} = r_{B(1)} + r_{B(2)} = K_1 C_A - K_2 C_B$$

$$r_C = K_2 C_B$$

$$\frac{PV}{R_0 T_0} = \frac{F_T RT}{F_{T0} R T_0}$$

Sabiendo que $F_T = F_{T0}$ porque todos los coeficientes estequiométricos son 1 y existen igual cantidad de productos que reactivos

$$V = v_0 \frac{I}{T_0} = 7.85 \cdot \frac{T}{(400+460)}$$

$$C_A = \frac{F_A(860)}{7.85 \cdot T}, \quad C_B = \frac{F_B(860)}{7.85 \cdot T}, \quad C_C = \frac{F_C(860)}{7.85 \cdot T}$$

$$\frac{dF_A}{dV} = -2 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(\frac{-31000}{1.987 \cdot T}\right) \cdot \left(\frac{860}{7.85}\right) \cdot \frac{F_A}{T} \quad \dots (1)$$

$$\frac{dF_B}{dV} = 2 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(\frac{-31000}{1.987 \cdot T}\right) \cdot \left(\frac{860}{7.85}\right) \cdot \frac{F_A}{T} - 1 \cdot 10^{11} \cdot \exp\left(\frac{-40000}{1.987 \cdot T}\right) \cdot \left(\frac{860}{7.85}\right) \cdot \frac{F_B}{T} \quad \dots (2)$$

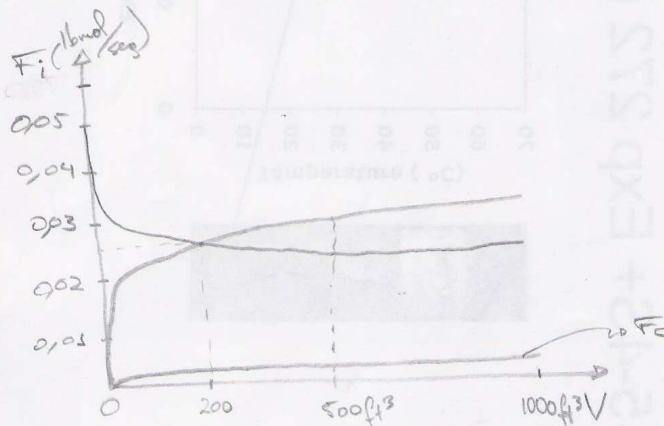
$$\frac{dF_C}{dV} = 1 \cdot 10^{11} \cdot \exp\left(\frac{-40000}{1.987 \cdot T}\right) \cdot \left(\frac{860}{7.85}\right) \cdot \frac{F_B}{T} \quad \dots (3)$$

$$\frac{dT}{dV} = \frac{0 + [(-r_A) \cdot (-\Delta H_{rx1})] + (r_C) \cdot (-\Delta H_{rx2})}{25(F_A + F_B + F_C)} \quad (5)$$

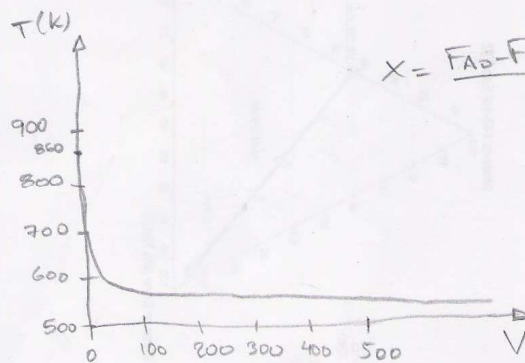
$$\frac{dT}{dV} = \frac{2 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(\frac{-31000}{1987 \cdot T}\right) \cdot \left(\frac{860}{7,85}\right) \cdot \left(\frac{F_A}{T}\right) \cdot (-15000) + 1 \cdot 10^{11} \cdot \exp\left(\frac{-40000}{1987 \cdot T}\right) \cdot \left(\frac{860}{7,85}\right) \cdot \frac{F_B}{T} \cdot (20000)}{25(F_A + F_B + F_C)}$$

$$\frac{dT}{dV} = \frac{-3,29 \cdot 10^{15} \cdot \exp\left(\frac{-31000}{1987 \cdot T}\right) \cdot \left(\frac{F_A}{T}\right) + 2,19 \cdot 10^{17} \cdot \exp\left(\frac{-40000}{1987 \cdot T}\right) \cdot \left(\frac{F_B}{T}\right)}{25(F_A + F_B + F_C)} \dots (4)$$

Al resolver las ecuaciones diferenciales en MATLAB



Aproximadamente en 500 ft³ los flujos permanecen constantes este sera el pto. optimo



$$X = \frac{F_{A0} - F_A @ 500 \text{ ft}^3}{F_{A0}} = \frac{0,05 - 0,023}{0,05} = 54\%$$

$$\text{Selectividad} = \frac{F_B}{F_C} @ 500 \text{ ft}^3 = \frac{0,0264}{0,0006} = 44 \quad \text{Rendimiento} = \frac{F_B}{F_A} @ 500 \text{ ft}^3 = \frac{0,0264}{0,05 - 0,023} = 0,98$$