Cálculo de Reactores
Escuela de Ingeniería Química Mérida, 22 de noviembre de 2006.

PRIMER PARCIAL

Problema 1:

La reacción $2A + B \rightarrow 2C + 3D$ se lleva a cabo en fase gaseosa a 50 atm y 115 ºC, en un reactor de flujo continuo alimentado con B en una concentración de 0,5 mol/L e inertes a una tasa de 2 mol/min y una fracción molar (y_{Io}) del 25 %. También se introducen A y D a razón de 5 moles de A por mol de D. Plantee la tabla estequiométrica para esta reacción. (6 p)

Problema 2:

La reacción $2A + 2B \xrightarrow{k} P$, cuya cinética es $(-r_A) = k\,C_A C_B$, se lleva a cabo en fase gaseosa a 100 ºC. El reactor se alimenta a una tasa de 3 L/min y un flujo molar de A de 1 mol/min; B se introduce a razón de 2 moles B/mol A ($k_{50°C} = 7{,}41.10^{-2}$ L/min mol; Ea = 15 kcal/mol).

a) Obtenga la expresión de la velocidad de reacción en función de la conversión $(-r_A) = a\,f(x)$. Calcule la constante a.
b) Calcule el volumen del RAP que produce una conversión del 75 %.
c) Con base en el resultado anterior, calcule la conversión que se puede obtener en un RFP de igual volumen. Compare y discuta su resultado.
d) ¿Cuál sería el volumen del RAP en serie con el RAP obtenido en la parte b que haría falta para obtener la misma conversión que en el RFP de la parte c?
e) Suponga que dispone de los tres reactores calculados en las partes 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. (7 p)

Problema 3:

La reacción $A \rightarrow B + C$ es elemental y se lleva a cabo en fase gaseosa a 250 ºC y 2000 kPa en un RFP empacado con un catalizador. Entra al reactor A puro a una tasa de 440 mol/s.

a) Determine cuál es el régimen de flujo imperante en el reactor y calcule la correspondiente constante α.
b) Calcule la masa de catalizador que puede contener el reactor.
c) Plantee las ecuaciones que permiten obtener el perfil de conversión y de presión en función de la masa de catalizador.
d) Calcule algunos puntos de los perfiles por el método aproximado de Euler (lo que tenga tiempo de hacer). (7 p)

Datos adicionales:

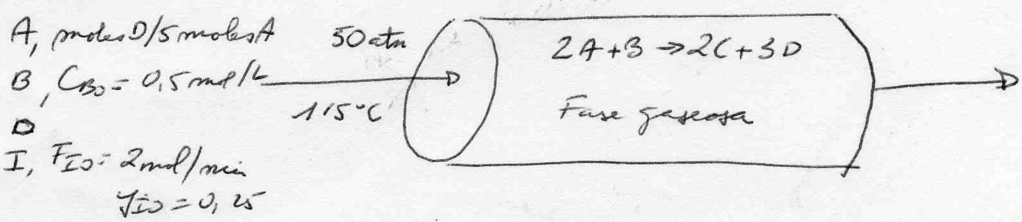
PM_A : 70 g/mol
Longitud del reactor : 25 m
Diámetro del reactor: 2,5 m
k_w: 0,02 L/kg_{cat} s
μ_A: $1{,}5.10^{-5}$ kg/m s
Diámetro de partícula catalizador: 2 mm
Porosidad del lecho: 0,4
Densidad catalizador: 2,6 g/cm^3

Cálculo de Reactores

Primer Parcial

22/11/06

Problema 1:



Cálculos:

$$C_{T0} = \frac{P_0}{R\,T_0} = \frac{50\ atm}{0,0821\ \frac{L\,atm}{mol\,K}\,(115+273)\,K} = 1,57\ mol/l$$

$$y_{B0} = \frac{C_{B0}}{C_{T0}} = \frac{0,5}{1,57} = 0,318$$

$$\Sigma y_{i0} = 1 = y_{A0} + y_{B0} + y_{D0} + y_{I0}$$; como 5 moles A/mol D $\rightarrow 5\,y_{A0} = y_{D0}$

Sustituyendo:

$$y_{A0} + \frac{y_{A0}}{5} = 1 - y_{B0} - y_{I0} \Rightarrow y_{A0} = 0,36\ ;\ y_{D0} = 0,072$$

$$\frac{y_{A0}}{y_{B0}} = \frac{0,36}{0,318} = 1,13$$ → esto implica que A es el reactivo limitante

$$2A + B \rightarrow 2C + 3D \rightarrow A + \tfrac{1}{2}B \rightarrow C + \tfrac{3}{2}D$$

$$F_{A0} = y_{A0}\,C_{T0}\,v_0 = y_{A0}\,F_{T0} =$$

$$v_0 = \frac{F_{I0}}{y_{I0}\,C_{T0}} = \frac{2}{0,25 \times 1,57} = 5,1\ mol/L\ ;\quad F_{T0} = v_0\,C_{T0} = 8\ mol/min$$

$$F_{A0} = 0,36 \times 8 = 2,88\ mol/min\ ;\quad C_{A0} = y_{A0}\,C_{T0} = 0,565\ mol/L$$

$$\Theta_B = \frac{y_{B0}}{y_{A0}} = 0,885\ ;\quad \Theta_D = \frac{1}{5} = 0,2\ ;\quad \Theta_I = \frac{0,25}{0,36} = 0,694$$

$$\delta = \frac{3}{2} + 1 - \frac{1}{2} - 1 = 1$$

$$\varepsilon = y_{A0}\,\delta = 0,36$$

Tabla estequiométrica para operación isotérmica, presión constante y fase gaseosa, $A + \frac{1}{2}B \rightarrow C + \frac{3}{2}D$

Componente	Entrada mol/min	Generación Reacción mol/min	Salida mol/min	Concentración mol/L
A	2,88	$-2,88x$	$2,88(1-x)$	$0,565(1-x)/(1+0,36x)$
B	2,54	$-\frac{2,88}{2}x$	$2,88(0,885-\frac{x}{2})$	$0,565(0,885-\frac{x}{2})/(1+0,36x$
C	—	$2,88x$	$2,88x$	$0,565 \times \frac{3}{2}x/(1+0,36x)$
D	0,506	$\frac{3}{2}\,2,88x$	$2,88(0,2+\frac{3}{2}x)$	$0,565 \times (0,2+\frac{3}{2}x)/(1+0,36x)$
I	2	—	2	$0,565 \times 0,694/(1+0,36x)$

Se usaron las ecuaciones:

$$F_i = F_{A0}(\theta_i \pm \nu_i x)$$

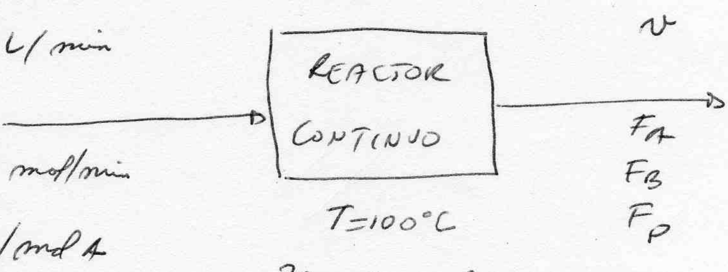
$$C_i = \frac{C_{A0}(\theta_i \pm \nu_i x)}{(1+\varepsilon x)}$$

Problema 2:

$\nu_0 = 3\,L/min$

$F_{A0} = 1\,mol/min$

2 moles B/mol A



$T = 100°C$

$2A + 2B \rightarrow P$

$(-r_A) = k\,C_A C_B$

$K_{50°C} = 7,41 \times 10^{-2}\ \frac{L}{mol\ min}$

$E_a = 15\ Kcal/mol$

$$K_{100°C} = 7,41 \times 10^{-2} \exp\left(\frac{15.000}{1,987}\left(\frac{1}{323} + \frac{1}{373}\right)\right)$$

$$K_{100°C} = 1,7\ \frac{L}{mol\ min}$$

a) Cálculos preliminares:

$F_{A0} = 2$ mol/min $\rightarrow$ A es el reactivo limitante

$$2A + 2B \rightarrow P \xRightarrow{\theta_B = 2} A + B \rightarrow \tfrac{1}{2} P$$

$$\delta = \tfrac{1}{2} - 1 - 1 = -1{,}5$$

$$C_{A0} = \frac{F_{A0}}{v_0} = \frac{1}{3} = 0{,}333 \; ; \quad y_{A0} = \frac{1}{3} = 0{,}333$$

$$\varepsilon = \delta \, y_{A0} = -\frac{3}{2} \times \frac{1}{3} = -0{,}5$$

$$C_A = \frac{C_{A0}(1-x)}{(1+\varepsilon x)} = \frac{C_{A0}(1-x)}{(1-0{,}5x)} = \frac{2C_{A0}(1-x)}{(2-x)}$$

$$C_B = \frac{C_{A0}(\theta_B - x)}{(1+\varepsilon x)} = C_{A0}\frac{2-x}{(1-0{,}5x)} = 2C_{A0}$$

$$(-r_A) = k\, C_A C_B = k\, 2C_{A0}\left(\frac{1-x}{2-x}\right) 2C_{A0} = 4kC_{A0}^2\left(\frac{1-x}{2-x}\right)$$

$$a = 4kC_{A0}^2 = 0{,}7556 \ \frac{\text{mol}}{\text{L s}}$$

b) RAP para 75% de conversión

$$V = \frac{F_{A0}\, x}{(-r_A)} = \frac{1 \times 0{,}75 \times (2-0{,}75)}{0{,}7556\,(1-0{,}75)} = 4{,}9\,L$$

c) Conversión para un RFP del mismo volumen del RAP

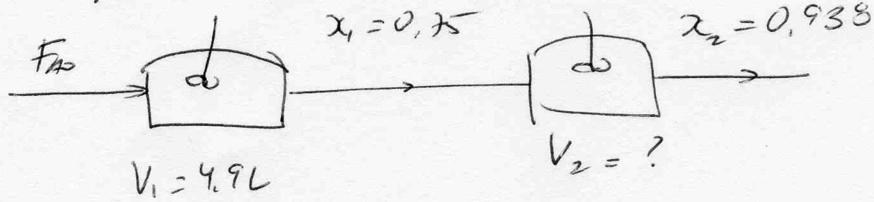
$$V = F_{A0}\int_0^x \frac{dx}{(-r_A)} = \frac{1}{0{,}7556}\int_0^x \frac{(2-x)}{(1-x)}\,dx = 4{,}9\,L$$

$$3,7024 = \int_0^x \left(\frac{2-x}{1-x}\right) = x - \ln(1-x) - 1 \Big|_0^x = x - \ln(1-x)$$

Se calcula x (por tanteo).

$x = 0,9375$; $x = 93,8\,\%$; como esperado, es superior a la conversión del RAP.

d) Volumen para un segundo RAP en serie con el anterior, para la misma conversión del RFP.



$$V_2 = \frac{F_{A0}\,(x_2 - x_1)}{(-r_A)_2} = \frac{1}{0,7556} \times \frac{(0,938 - 0,75)\,(2 - 0,938)}{(1 - 0,938)}$$

$V_2 = 4.3\,L$

$V_1 + V_2 = 4.9 + 4.3 = 9,2\,L$ → se requiere casi el doble del volumen del RFP para obtener la misma conversión con dos RAP en serie.

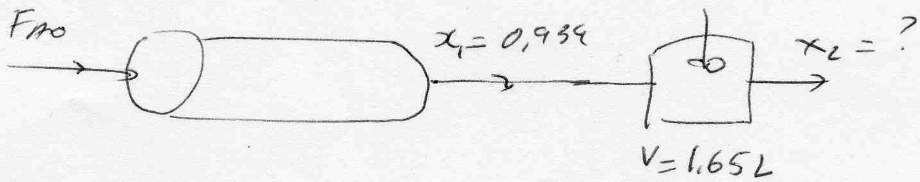
e) Puesto que se restringe el problema al uso de sólo dos reactores, se pueden probar dos tipos de arreglos: arreglo en serie y arreglo en paralelo. Los arreglos en paralelo producen una menor conversión que los arreglos en serie, por lo que se descarta el arreglo en paralelo.

También puede descartarse la combinación de los dos RAP ya que la conversión es la misma del RFP.

Lo que puede aumentar la conversión es usar el RFP con un RAP. Obviamente, el RAP a seleccionar es el de mayor tamaño.

En tal sentido, se pueden evaluar dos combinaciones: RFP + RAP ó RAP + RFP

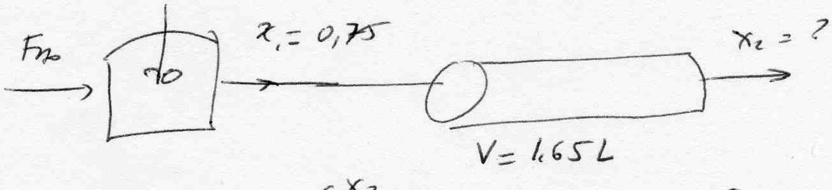
Primera combinación: RFP + RAP



$$4,90\ L = \frac{F_{Ao}}{0,7556} \times \frac{(x_2 - 0,938)(2 - x_2)}{(1 - x_2)}$$

$$x_2 = 0,987 \rightarrow 98,7\%$$

Segunda combinación: RAP + RFP



$$4,90 = F_{Ao} \int_{0,75}^{x_2} \frac{dx}{(-r_A)} = \frac{1}{0,7556} \times \left[\ln\left(\frac{1}{1-x}\right) + x - 1 \right]_{0,75}^{x_2}$$

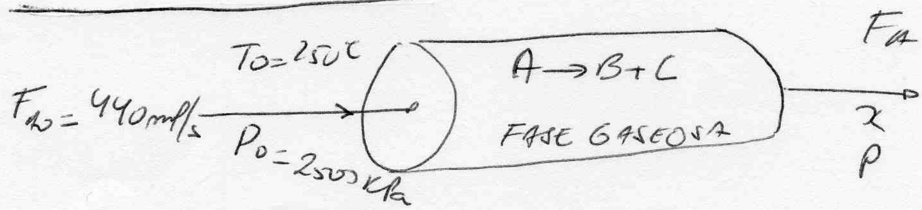
$$3,7094 = x_2 - \ln(1 - x_2) - 1 - \left(0,75 - \ln(1 - 0,75) - 1\right)$$

$$5,8387 = x_2 - \ln(1 - x_2)$$

$X_c = 0{,}9929 \rightarrow 99{,}29\ \%$

La mejor combinación es la segunda //

Problema 3:



a) Cálculos preliminares:

$$C_{A0} = \frac{P_0}{RT_0} = \frac{2000.000\ \text{Pa}}{8314\ \frac{\text{Pa}\cdot\text{m}^3}{\text{Kmol}\times\text{K}}\,(250+273)\,\text{K}} = 0{,}46\ \frac{\text{Kmol}}{\text{m}^3}$$

$$\rho_0 = C_{A0}\, M = 0{,}46 \times 70 = 32{,}2\ \text{Kg/m}^3$$

$$A_t = \frac{\pi D^2}{4} = \frac{\pi}{4} \times 2{,}5^2 = 4{,}91\ \text{m}^2 \quad , \quad V = A_t \times L = 4{,}91 \times 25 = 122{,}75\ \text{m}^3$$

$$G_0 = \frac{\dot{m}}{A_t} = \frac{F_{A0} \times M}{A_t} = 0{,}440\ \frac{\text{Kgmol}}{\text{s}} \cdot \frac{70\ \text{Kg/Kgmol}}{4{,}91\ \text{m}^2} = 6{,}27\ \text{Kg/m}^2\text{s}$$

$$Re = \frac{G \times D}{\mu} = \frac{6{,}27 \times 2{,}5}{1{,}5 \times 10^{-5}} = 1{,}05 \times 10^6 \rightarrow \text{régimen turbulento}$$ /

Para régimen turbulento se puede despreciar el primer término de la Ec. de Ergun de modo que el parámetro β es:

$$\beta = \frac{1{,}75\, G^2 (1-\phi)}{\rho_0\, d\, \phi^3} = \frac{1{,}75 \times 6{,}27^2 (1-0{,}4)}{32{,}2 \times 0{,}002 \times 0{,}4^3} = 10.015{,}2\ \text{Pa/m}$$

Entonces
$$\alpha = \frac{\beta}{A_t\, \rho_{cat} (1-\phi)\, P_0} = \frac{10.015{,}2}{4{,}91 \times 2600 \times (1-0{,}4) \times 2 \times 10^6} = 6{,}54 \times 10^{-7}\ \frac{1}{\text{kg}}$$ /

b) Masa de catalizador:

$$W = \rho_{cat}(1-\phi)V = 2600(1-0,4) \times 122,75 = 191.490 \text{ kg}$$

c) Ecuaciones perfiles de conversión y presión:

$$(-r_A) = K C_A = k C_{A0}\left(\frac{1-x}{1+\varepsilon x}\right)\underbrace{\left(\frac{P}{P_0}\right)}_{y}$$

$$\left.\begin{array}{l} y_{A0} = 1 \\ \delta = 2-1 = 1 \end{array}\right\} \varepsilon = 1$$

$$F_{A0}\frac{dx}{dw} = (-r_A) \qquad \frac{dx}{dw} = \frac{k C_{A0}}{F_{A0}} \times \left(\frac{1-x}{1+\varepsilon_x}\right) y \quad (\mathrm{I})$$

$$\frac{K C_{A0}}{F_{A0}} = \frac{0,02 \times 10^{-3}\ m^3}{K_{g\,cat}\ s} \times 0,46\ \frac{Kgmol}{m^3} \times \frac{s}{0,44\ Kgmol} = 2,091 \times 10^{-5}\ \frac{Kgmol}{Kg_{cat}\ s}$$

$$\frac{dy}{dw} = -\frac{\alpha}{y}(1+x) = -6,54 \times 10^{-7}\left(\frac{1+x}{y}\right) \quad (\mathrm{II})$$

Las ecuaciones I y II permiten calcular los perfiles de conversión (I) y de presión (II) con condiciones iniciales $x=0$, $y=1$, $w=0$ y final $W = 191.400$ kg.

d) Utilizando el método de Euler con un paso de $\Delta w = 1000$ kg, se obtiene:

$$x = 0,895 \quad ; \quad y = 0,766 \rightarrow P = 1532 \text{ kPa}$$