

CALCULO DE REACTORES

Prof. Moira Miranda
www.moodle2.ula.ve



Bibliografía

- Elementos de la Ingeniería de las Reacciones Químicas. H. Scott Fogler. Prentice Hall.
- Ingeniería de las reacciones químicas. Octave Levenspiel. Editorial Reverte.
- The Engineering of Chemical Reactions Lanny D. Schmidt. Oxford University

Programación

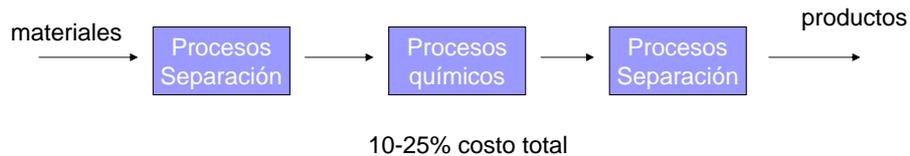
- 4 parciales (90 %)
- Proyecto final (10 %)
- Tareas en base a los parciales

Objetivos del curso de Calculo de Reactores

- Conocer los principios básicos del diseño de reactores para determinar:
 1. Tamaño del reactor y tipo de reactor
 2. Condiciones de operación T, P
 3. Alimentación, composición.
 4. Productos, impurezas

Introducción

El reactor químico es el corazón de cualquier proceso químico



Mejoras en el reactor usualmente tiene gran impacto en los procesos de separación

Que necesitamos saber

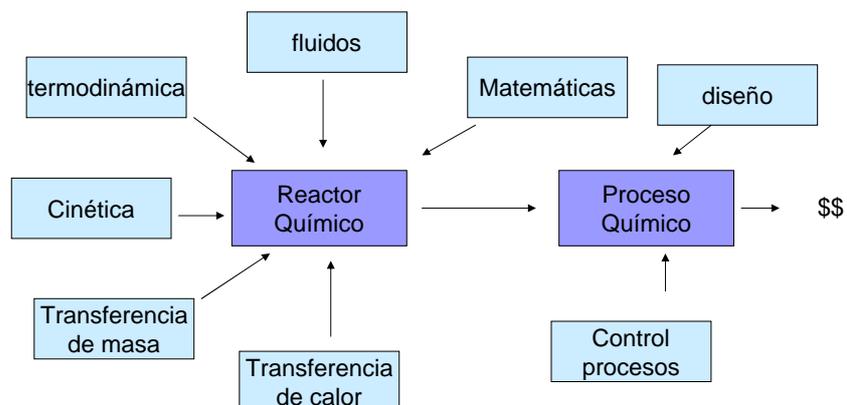
- El ingeniero químico casi nunca encontrará una simple reacción en fase ideal.
- Los reactores reales son extremadamente complejos con múltiples reacciones, múltiples fases, diferentes patrones de flujo y múltiples corrientes de salida y entrada.
- El ingeniero químico usualmente encontrará un reactor que ha sido construido hace décadas el cual ha sido modificado y opera lejos de las condiciones iniciales de diseño.



Que necesitamos saber

- Muy pocas veces el ingeniero tiene la oportunidad de diseñar un reactor desde el inicio. Básicamente las tareas típicas del ingeniero son:
 - Mantener y operar el proceso
 - Identificar algunos problemas
 - Incrementar la capacidad y selectividad a un mínimo costo.
- Los procesos reales involucran múltiples reactores. Esto puede ser simplemente reactores en serie con diferentes conversiones, temperaturas de operación o catalizadores

Que necesitamos saber



Reactores y Reacciones

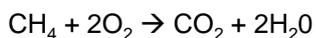
Si se desea realizar un proceso químico con la finalidad de transformar algunos reactivos en productos, nosotros debemos responder algunas preguntas básicas:

- Formular la ecuación de la reacción
→ [Estequiometría](#)
- Qué tan rápida será la reacción
→ [Cinética](#)
- Qué podemos esperar en el caso óptimo
→ [Termodinámica](#)
- Qué tipo de reactor debemos usar para esta reacción
→ [Diseño de reactores](#)
- Cual es el rendimiento en el reactor
→ [Cinética, limitaciones en transferencia de materia y calor](#)

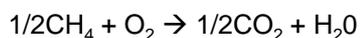
Estequiometría

[Es la ley de conservación del número de átomos durante la reacción](#)

Ejemplo: La combustión del gas natural (metano) puede ser escrita como



o equivalente



Obviamente, ambas reacciones están balanceadas y el número de átomos de C, H y O en cada lado de la ecuación son los mismos. Los coeficientes estequiométricos pueden ser multiplicados por cualquier constante y el balance de átomos permanecerá.

[Esto quiere decir que no hay una única manera de escribir la ecuación](#)

Cinética

Cinética

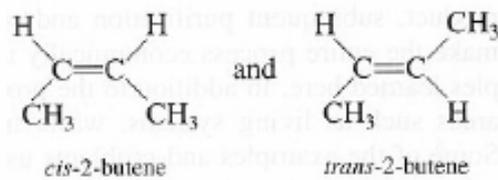
Estudia la velocidad de reacción, considerando todos los factores que influyen en ella: temperatura, presión, composición, catalizadores.

Aplicación de la cinética:

- 1- Química-física: permite comprender como se forman y se rompen los enlaces y estimar sus energías y estabilidades
- 2- Química-orgánica: el modo en que reaccionan los compuestos les sirve de guía sobre su estructura
- 3- Ingeniería química: es necesario conocer la cinética química para hacer el diseño del reactor

Conceptos básicos

Una especie química se refiere a cualquier elemento o compuesto con una identidad dada la cual es determinada por: tipo, número y configuración de átomos



Conceptos básicos

- Reacción química: cuando un número detectable de moléculas de una especie han perdido su identidad y han asumido una nueva:



- Un especie química puede perder su identidad de tres maneras:
 - Descomposición
 - Combinación
 - Isomerización

Clasificación de las reacciones

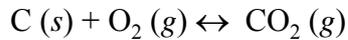
Reacciones Homogéneas: reacciones que ocurren en una sola fase.

Producción de etileno



Reacciones heterogéneas: reacciones que requieren la presencia de dos o más fases.

Combustión de carbono



Reacciones irreversibles

Reacciones reversibles

Clasificación de las reacciones

Reacciones Simples: cuando el transcurso de la misma se puede representar por una sola ecuación estequiométrica y una sola ecuación cinética

Reacciones múltiples: para representar los cambios observados se necesita más de una ecuación estequiométrica. Las reacciones múltiples pueden clasificarse en reacciones en serie $A \rightarrow R \rightarrow S$

Reacciones en paralelo



El diseño de reactores requiere que la velocidad de reacción de las especies que participan sea especificada

Velocidad de reacción ($-r_A$) para reacciones homogéneas

$(-r_A)$ = velocidad de desaparición de la especie A
= moles de A consumidos por unidad de volumen por unidad de tiempo

(r_A) = velocidad de formación de la especie A

Nota: el signo “**menos**” define consumo o desaparición

Unidades (r_A) or ($-r_A$)

- Moles/ (unidad volumen por unidad tiempo)
- mol/L-s or kmol/m³-s

Velocidad de reacción para reacciones heterogéneas

Para reacciones heterogéneas, la velocidad de desaparición de la especie A es denotada como $(-r_A)$

Las reacciones heterogéneas de interés son principalmente catalíticas. Consecuentemente, la velocidad es definida en términos de la masa del catalizador presente

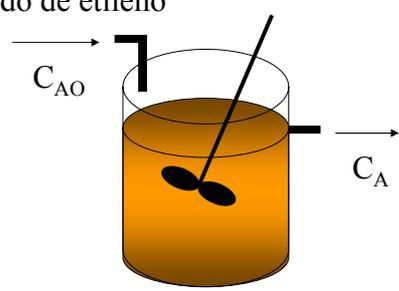
Unidades of $(-r_A)$

- mol por unidad tiempo por masa de catalizador
- mol/s-g or kmol/hr-kg catalizador

Es $(-r_A) = dC_A/dt$?

Considere el ejemplo siguiente y evalúe si dC_A/dt es igual a (r_A) .

Oxido de etileno



C_{AO} C_A

Ni C_{AO} ni C_A cambian
Con el tiempo

	C_{AO}	C_A
10:00 am	50.0	10.0
12:00 pm	50.0	10.0
3:00 pm	50.0	10.0
5:00 pm	50.0	10.0

Operación en estado estacionario

Velocidad de reacción

Velocidad de reacción

- Es función de la temperatura y de la concentración de los reactivos
- Independiente del tipo de reactor
- Descrita por la ley de velocidad de reacción.

Ley de velocidad de reacción

- Ecuación algebraica .

$$(-r_A) = k \cdot [\text{términos de concentración}]$$

$$\text{e.g. } (-r_A) = k C_A$$

$$\text{o } (-r_A) = k C_A^2$$

donde, k es la constante de velocidad específica [$k=f(T)$]

Orden de reacción

La dependencia de la velocidad de reacción ($-r_a$) respecto a las concentraciones de las especies presentes se determina por observación experimental

$$(-r_A) = k C_A^\alpha C_B^\beta$$

*El **orden de reacción** se refiere a las potencias a las que las concentraciones se elevan en la ley de la velocidad*

El orden global de la reacción n es

$$n = \alpha + \beta$$

Orden de reacción

El orden global de la reacción no tiene que ser un número entero, ni el orden tiene que ser entero con respecto a cualquier componente individual

$$(-r_A) = k C_A^{3/2} C_B^2$$

Ordenes de reacción aparentes



$$-r_{N_2O} = \frac{K_{N_2O} C_{N_2O}}{1 + k' C_{O_2}}$$

Orden de reacción

Orden cero

$$(-r_A) = k$$

$k = \text{mol/lit.s}$

Primer orden

$$(-r_A) = k_A C_A$$

$k = \text{s}^{-1}$

Segundo orden

$$(-r_A) = k C_A^2$$

$k = \text{lit/mol.s}$

Reacciones elementales y no elementales

Reacción elemental



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

Si el orden de reacción de cada especie es idéntico al coeficiente estequiométrico de esa especie en la reacción tal como esta escrita.

NOTA: ha de tener cuidado para distinguir entre la ecuación que representa la reacción elemental y las múltiples representaciones de la estequiometría.

Velocidad de reacción relativas



De la estequiometría vemos que por cada mol de A que se consumen se forman 3 moles de R. En otras palabras la velocidad de formación de R = 3(velocidad de desaparición de A)

$$(r_R) = 3(-r_A)$$

Así mismo la relación entre la velocidad de formación de A y B es

$$(r_B) = 2(-r_A)$$

Por lo cual

$$\frac{-r_A}{1} = \frac{-r_B}{2} = \frac{r_R}{3} \quad \Rightarrow \quad \frac{-r_A}{a} = \frac{-r_B}{b} = \frac{r_R}{c}$$

Velocidad de reacción relativas

Es necesario especificar en la reacción el componente a que esta referido el coeficiente cinético



$$(-r_B) = k C_A C_B^2$$

$$(-r_D) = k' C_A C_B^2$$

$$(-r_R) = k'' C_A C_B^2$$

$$\frac{k}{1} = \frac{k'}{2} = \frac{k''}{3}$$

Molecularidad y orden de la reacción

La molecularidad de una reacción elemental es el número de átomos, iones o moléculas que intervienen (chocan) en el paso de la reacción que limita la velocidad. Los términos unimolecular, bimolecular y termolecular se refieren a reacciones que intervienen uno, dos y tres átomos o moléculas.

La molecularidad es un número entero

Termodinámica

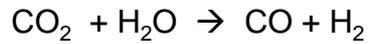
Termodinámica

La termodinámica suministra dos fuentes importantes de reacción:

- El calor desprendido o absorbido durante la reacción
- La extensión máxima posible de la reacción.
(constante de equilibrio)

$$\Delta G = -RT \ln K$$

Ejemplo: Para la siguiente reacción



Calcule la cantidad de cada especie presentes al equilibrio a una temperatura de 800 K, si la variación de la energía libre de Gibbs=-2160 cal/mol. Moles CO₂=2, Moles H₂O=1

$$\ln K = \frac{2160 \text{ cal/mol}}{1.987 \frac{\text{cal}}{\text{molK}} 800 \text{ K}} = 1.358$$

$$K = 3.884$$

	inicial	cambio	yi	
CO	2	2-x	(2-x)/3	0.386
H ₂ O	1	1-x	(1-x)/3	0.053
CO ₂	0	x	x/3	0.281
H ₂	0	x	x/3	0.281
Total	3	3	3	

$$K = \frac{(x/3)(x/3)}{\left(\frac{2-x}{3}\right)\left(\frac{1-x}{3}\right)} = 3.89 = \frac{x^2}{(2-x)(1-x)}$$

$$X=0.842$$



Diseño de Reactores



Diseño de reactores

Una vez estudiada la cinética de la reacción y las variables que afectan esta, el problema es determinar el tamaño y tipo de reactor para obtener la cantidad de producto requerido.

Clasificación de los reactores

- **Método de operación**
 - batch
 - continuos

- **Número de fases**
 - homogéneos
 - heterogéneos

- **Modo de operación**
 - isotérmico
 - adiabático
 - no isotérmico no adiabático

Tipos de Reactores Reactor Batch o por lotes

- El reactor es alimentado por el tope del tanque
- Mientras la reacción es llevada a cabo nada es agregado o removido
- El tanque es fácilmente calentado o enfriado por un chaqueta
- Utilizados en pequeña escala (farmacéutica, fermentación)



Reactor Batch o por lotes

Ventajas

- Alta conversión por unidad de volumen.
- Flexible. El mismo reactor puede ser utilizado para producir diferentes productos.
- Fácil de limpiar.

Desventajas

- Altos costos de operación
- La calidad del producto es mas variable que con los reactores de operación continua

Reactores de tanque con agitación continua RAP

- Operación en estado estacionario. Utilizados en serie
- Buena mezcla conduce a una uniforme concentración y temperatura
- Principalmente usados en fase líquida
- Deseable para líquidos viscosos
- Utilizados cuando agitación es requerida



Reactor RAP

Ventajas

- Operación continua.
- Buen control de la temperatura.
- Fácil de adaptar a dos fases
- Simple construcción
- Bajo costo de operación
- Buen control
- Fácil de limpiar

Desventajas

- Baja conversión por unidad de volumen
- Posible bypass y canales con agitación pobre

Reactores de flujo continuo

- Operación en estado estacionario.
- Principalmente usados en fase gaseosa.
- No existe variación radial en la concentración y velocidad de la reacción.
- La concentración cambia con la longitud del reactor
- Usados en grandes escalas, en reacciones rápidas, homogéneas y heterogéneas .
- Altas temperaturas



Reactores de flujo continuo

Ventajas

- Operación continua.
- Alta conversión por unidad de volumen
- Simple construcción
- Bajo costo de operación
- Buena transferencia de calor.

Desventajas

- Posibles gradientes térmicos indeseados
- Difícil control de temperatura
- Las paradas y limpiezas pueden ser costosos

Reactores de lecho empacado

- Operación en estado estacionario.
- Tubular reactor con partículas sólidas.
- Principalmente usados en fase gaseosa/ catalizadores
- Usados en reacciones heterogéneas



Reactores de lecho empaquetados

Ventajas

- Alta conversión por unidad de masa de catalizador.
- Bajo costo de operación
- Operación continua.

Desventajas

- Posibles gradientes térmicos indeseados
- Difícil control de temperatura
- Las paradas y limpiezas pueden ser costosas

Reactores de lecho fluidizado

- Operación en estado estacionario.
- Temperatura uniforme
- Principalmente usados en fase gaseosa
- Como en los reactores RAP los reactantes están bien mezclados



Reactores de lecho fluidizados

Ventajas

- Alta conversión por unidad de masa de catalizador.
- Temperatura uniforme
- El catalizador puede ser regenerado con el uso de un lazo auxiliar.

Desventajas

- La fuerte agitación puede generar la destrucción del catalizador
- Existe incertidumbre en el escalado a equipos industriales