

INTRODUCCIÓN AL DISEÑO DE REACTORES

REPARTIDO 4

1. En un reactor de 18.4 L de volumen y $v = 340$ L/h se inyecta un pulso de trazador radiactivo. Se mide la concentración del trazador en cuentas por minuto a la salida del reactor. Hallar $E(\theta)$, \bar{t}_E , $\bar{\theta}$, σ_t^2 , σ_θ^2 .

Datos:

t(min)	0.0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5
Cpmx10 ⁻³	0.0	5	22	27	26	22	19	15
t(min)	4.0	4.5	5.0	5.5	6.0	6.5	7.0	
Cpmx10 ⁻³	10	7	4	3	3	1	0	

RESOLUCIÓN

$$V = 18.4 \text{ L} \quad v = 340 \text{ L/h} \rightarrow \tau = \frac{V}{v} = \frac{18.4 \text{ L}}{340 \text{ L/h}} = 0.054 \text{ h} <> 3.25 \text{ min}$$

$$E(\theta) = \tau E(t) \quad E(t) = C(t) = \frac{C(t)}{\int_0^\infty C(t) dt}$$

$$\int_0^\infty C(t) dt \approx \int_0^7 C(t) dt = 82 \times 10^{-3} \text{ cuentas} \quad (\text{integrando numéricamente})$$

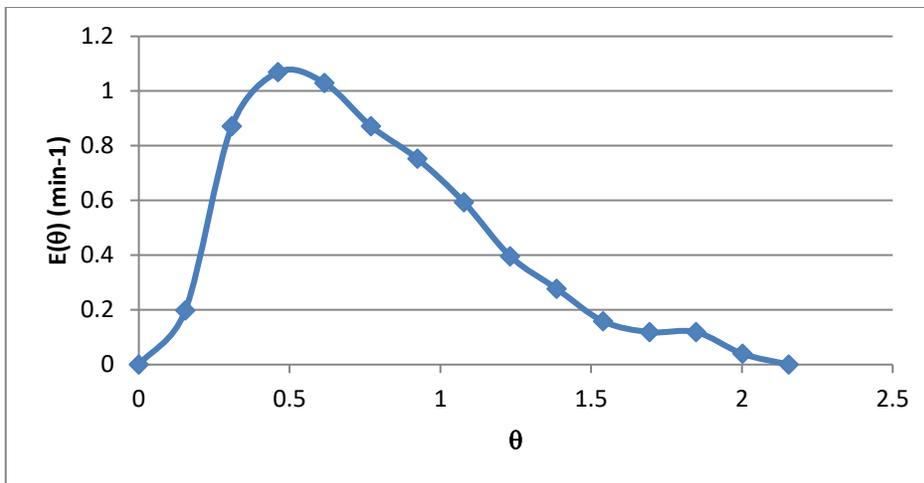
t (min)	C (cpm*10-3)	integral	E(t)
0	0		0
0.5	5	1.25	0.061
1	22	6.75	0.2683
1.5	27	12.25	0.3293
2	26	13.25	0.3171
2.5	22	12	0.2683
3	19	10.25	0.2317
3.5	15	8.5	0.1829
4	10	6.25	0.122
4.5	7	4.25	0.0854
5	4	2.75	0.0488
5.5	3	1.75	0.0366
6	3	1.5	0.0366
6.5	1	1	0.0122
7	0	0.25	0

área b.c = **82**

Puedo calcular $\theta = \frac{t}{\tau}$

$$E(\theta) = \tau E(t)$$

θ	$E(\theta)$
0	0
0.154	0.198
0.308	0.8712
0.462	1.0692
0.6159	1.0296
0.7699	0.8712
0.9239	0.7524
1.0779	0.594
1.2319	0.396
1.3859	0.2772
1.5399	0.1584
1.6938	0.1188
1.8478	0.1188
2.0018	0.0396
2.1558	0



Puedo calcular $\bar{t} = \frac{\int_0^{\infty} tE(t)dt}{\int_0^{\infty} E(t)dt} = \int_0^{\infty} tE(t)dt = 2.52min$

Como $\bar{t} < \tau$ existe volumen muerto y corresponde a $1 - 2.52/3.25 = 0.22$, 22% o sea 4.0 L.

$$\bar{\theta}_E = \frac{\bar{t}_E}{\tau} = 0.78$$

$$\sigma_t^2 = \frac{\int_0^{\infty} (t - \bar{t}_E)^2 E(t) dt}{\int_0^{\infty} E(t) dt} = \int_0^{\infty} t^2 E(t) dt - \bar{t}_E^2 = 1.69 min^2$$

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{\int_0^{\infty} (\theta - \bar{\theta}_E)^2 E(\theta) d\theta}{\int_0^{\infty} E(\theta) d\theta} = \frac{\sigma_t^2}{\tau^2} = 0.16$$

2. Se tiene la siguiente tabla de valores de $F(\theta)$ vs θ :

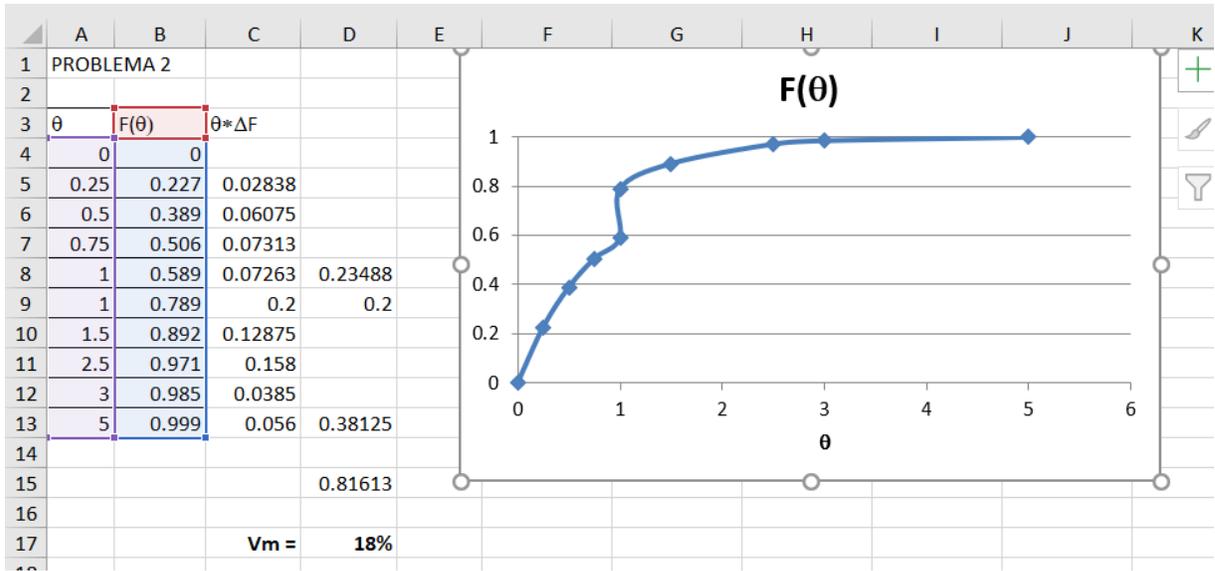
θ	0.0	0.25	0.50	0.75	1.00	1.50	2.50	3.00	5.00
$F(\theta)$	0.0	0.227	0.389	0.506	salto de 0.589 a 0.789	0.892	0.971	0.985	0.999

Determinar si existe volumen muerto en el sistema y en caso afirmativo, cuantificarlo.

RESOLUCIÓN

$$\bar{\theta} = \int_0^1 \theta dF \cong \int_0^{0.589} \theta dF + \int_{0.589}^{0.789} \theta dF + \int_{0.789}^{0.99\dots} \theta dF = 0.235 + 0.200 + 0.581 \cong 0.82$$

Por lo tanto existe un 18% de volumen muerto.



3. Se quiere aplicar el análisis de la distribución de tiempos de residencia a un río de caudal medio aproximadamente constante $15,5 \text{ m}^3/\text{s}$. Como trazador se utilizará ion K^+ , habiéndose determinado un nivel de base de $8,2 \text{ mg/L}$. A tiempo cero se arrojan 400 kg de K_2CO_3 ($\text{PM} = 138,2$; peso atómico del $\text{K} = 39,1$) y se van recogiendo muestras a lo largo del tiempo aguas abajo obteniendo la siguiente tabla:

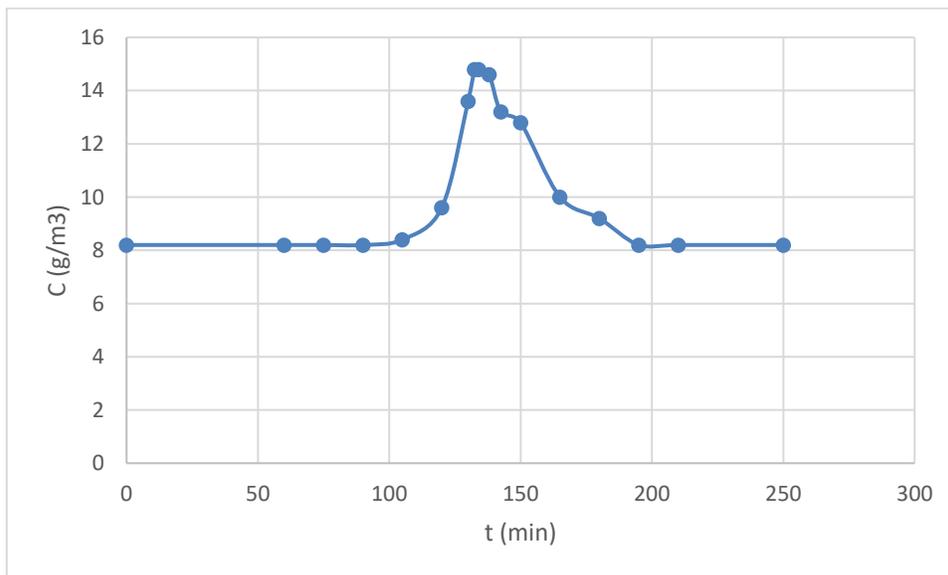
t (min)	0	60	75	90	105	120	130	132,5	134
C (g/m ³)	8,2	8,2	8,2	8,2	8,4	9,6	13,6	14,8	14,8

138	142,5	150	165	180	195	210	250
14,6	13,2	12,8	10	9,2	8,2	8,2	8,2

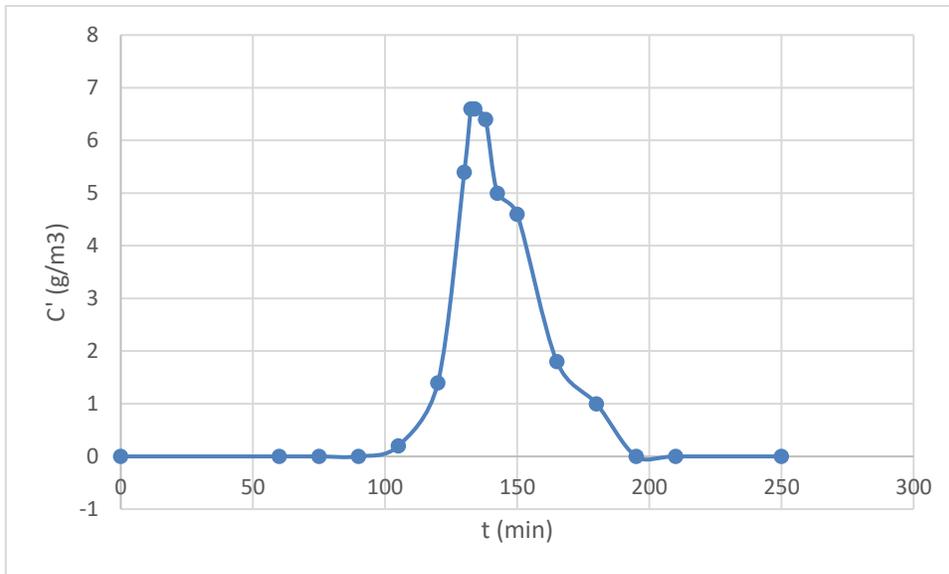
- Calcular la fracción de trazador recuperada.
- Calcular el tiempo medio de residencia
- Una especie orgánica A es un contaminante potencial y en el punto de descarga desde una fábrica se mide una concentración de 100 mg/L . Sabiendo que dicho contaminante se descompone siguiendo una cinética de primer orden y con una constante de reacción de $0,01 \text{ min}^{-1}$ a la temperatura del río, calcular cuál será la concentración en el mismo punto en que se sacaron los datos de la tabla.

RESOLUCIÓN:

La curva experimental es

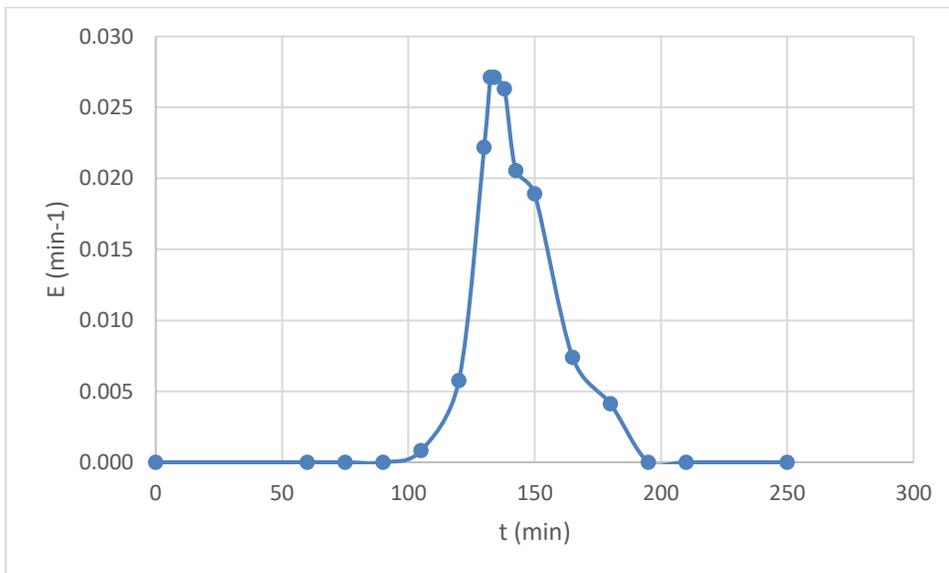


Pero hay que descontar el nivel de base ($8,2 \text{ g/m}^3$).



El área bajo esta curva es aproximadamente 237 gK/m³/min y lo comparamos con M/v, siendo $M = 400 \text{ kg} \cdot 39.1/138.2 = 226 \text{ kg K}$ y por lo tanto $M/v = 244 \text{ gK/m}^3/\text{min}$, con lo cual el área bajo la curva es el 97% de lo inyectado, o sea que en la práctica se recuperó todo el trazador.

Dividiendo la curva C' entre M/v generamos la curva E.



Podemos calcular el $\bar{t} = \int_0^{\infty} tE dt = 139 \text{ min}$

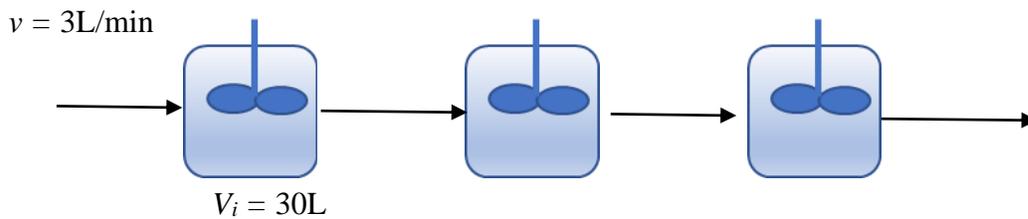
Podemos calcular la conversión $1 - \bar{X}_A = \int_0^{\infty} e^{-kt} E dt = 0.23$, entonces $X_A = 0.77$

4. Se tienen tres tanques continuos agitados en serie, de 30 litros de volumen cada uno. El caudal de alimentación es de 3 L/min.

Una cierta cantidad de impureza soluble inerte entra en forma accidental al primer tanque en $t = 0$.

- ¿Qué tiempo demora la concentración de impureza que sale del primer reactor en reducirse al 1% del valor que tendría si se distribuyera instantáneamente a tiempo cero en el primer tanque?
- Idem en la salida del sistema.
- ¿En qué tiempo pasa la concentración de impureza por un máximo en el segundo y en el tercer tanque? ¿Cuánto valen las concentraciones máximas a la salida del segundo y tercer reactor en relación a la concentración inicial en el primer tanque a $t = 0$?

RESOLUCIÓN:



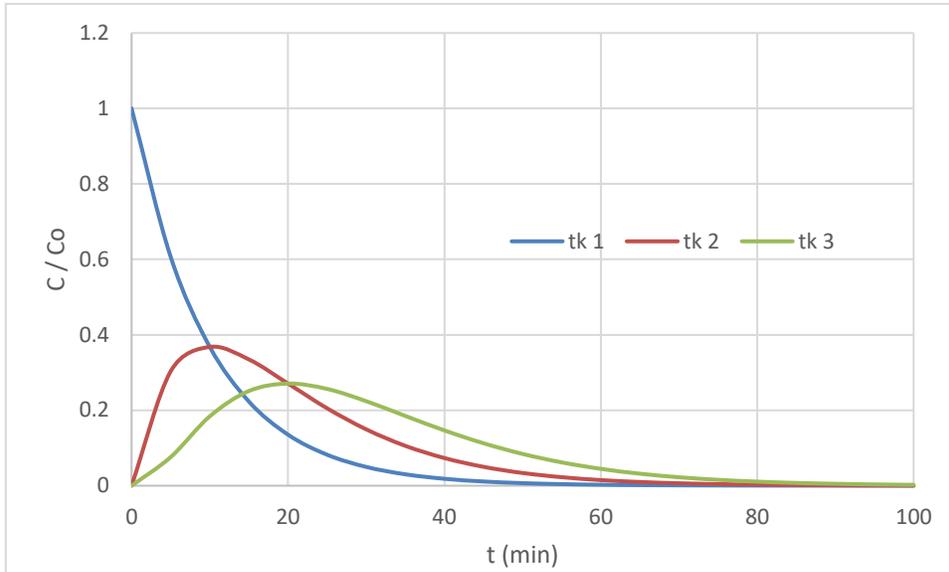
Asumiremos la entrada de impureza a un pulso a $t = 0$. Tenemos un sistema de tanques en serie cuya

$$E(t) = \frac{t^{N-1}}{\tau_i^N} \frac{1}{(N-1)!} e^{-t/\tau_i} \quad \tau_i = \frac{V_i}{v} = 10 \text{ min}$$

$$\text{a) Para el primer tanque } E_1(t) = \frac{1}{\tau_i} e^{-t/\tau_i} \quad \frac{c_1(t)}{M/v} = \frac{c_1(t)}{(M/V_i)(V_i/v)} = \frac{1}{\tau_i} e^{-t/\tau_i}$$

$$\frac{c_1(t)}{M/V_i} = e^{-t/\tau_i} = 0.01 \quad \rightarrow \quad t = \tau_i \times (-\ln(0.01)) = 46 \text{ min}$$

$$\text{b) Para el tercer tanque } \frac{c_3(t)}{M/v} = \frac{c_1(t)}{(M/V_i)(V_i/v)} = \left(\frac{t}{\tau_i}\right)^2 \frac{e^{-t/\tau_i}}{2} = 0.01 \quad \rightarrow \quad t = 81 \text{ min}$$



c) Para el segundo tanque $E_2(t) = \frac{t}{\tau_i^2} e^{-t/\tau_i}$

Derivando e igualando a cero hallamos el máximo $\frac{\partial E_2}{\partial t} = \frac{1}{\tau_i^2} \left[e^{-t/\tau_i} - \frac{t}{\tau_i} e^{-t/\tau_i} \right] =$

$$\frac{1}{\tau_i^2} e^{-t/\tau_i} \left(1 - \frac{t}{\tau_i} \right) = 0$$

Por lo tanto $\left(1 - \frac{t}{\tau_i} \right) = 0$ o sea $t_{max} = \tau_i = 10min$ Conc. Máxima en el 2° reactor. En ese tiempo

$$\frac{C_{2,max}}{M/V_i} = \frac{\tau_i}{\tau_i} e^{-\tau_i/\tau_i} = e^{-1} = 0.368$$

En forma similar $E_3(t) = \frac{t^2}{\tau_i^3} \frac{e^{-t/\tau_i}}{2}$

$$\frac{\partial E_3}{\partial t} = \frac{1}{2\tau_i^3} \left[2te^{-t/\tau_i} - \frac{t^2}{\tau_i} e^{-t/\tau_i} \right] = \frac{1}{2\tau_i^3} e^{-t/\tau_i} \left(2 - \frac{t}{\tau_i} \right) = 0$$

Por lo tanto $\left(2 - \frac{t}{\tau_i} \right) = 0$ o sea $t_{max} = 2\tau_i = 20min$ Conc. Máxima en el 3er.

reactor. En este caso $\frac{C_{3,max}}{M/V_i} = \frac{(2\tau_i)^2}{\tau_i^2} \frac{e^{-2\tau_i/\tau_i}}{2} = 2e^{-2} = 0.271$

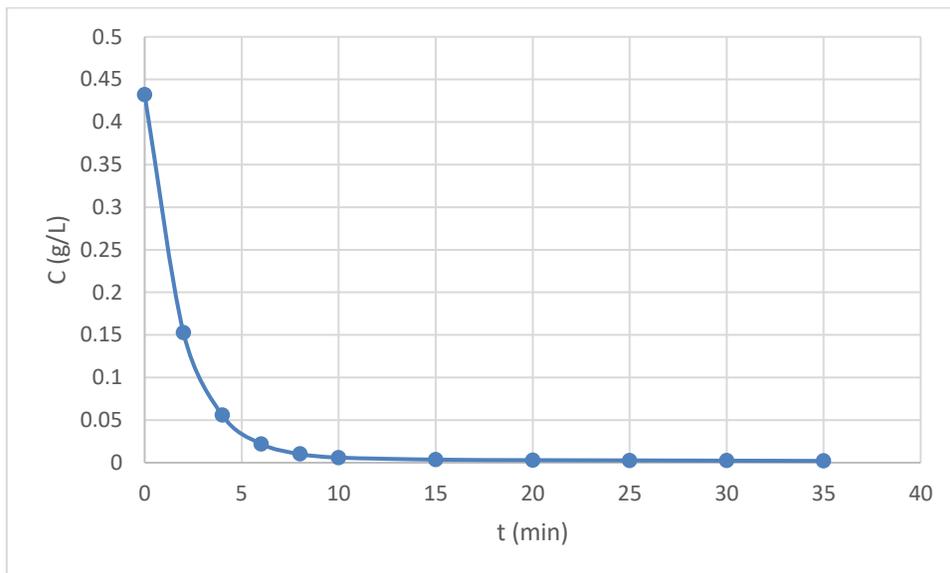
5. Se estudia el comportamiento hidrodinámico de un reactor continuo agitado de 100 litros de volumen mediante la inyección de un pulso de trazador. La masa inyectada es de 10 gramos y se obtienen las siguientes concentraciones a la salida del reactor:

t(min)	0	2	4	6	8	10
C(t) (g/L)	0.4320	0.1527	0.0558	0.0221	0.0102	0.0060
t(min)	15	20	25	30	35	
C(t) (g/L)	0.0036	0.0030	0.0027	0.0024	0.0021	

El caudal es de 10 L/min.

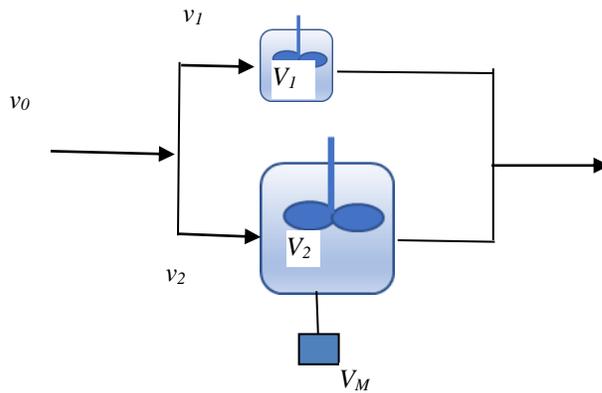
- Hallar la expresión analítica de la función $E(t)$ (Sugerencia: probar dos reactores agitados en paralelo, con τ muy distintos, más volumen muerto). Determinar los parámetros del modelo
- ¿Qué conversión se espera para una reacción $A + B \rightarrow P$ de expresión cinética $r_P = 0.1C_A$ (mol P/L.min)?

RESOLUCIÓN:



Con estos datos podemos calcular $E(t) = \frac{C(t)}{M/v_0}$ $\frac{M}{v_0} = \frac{10g}{10L/min} = 1.0 \frac{g \cdot min}{L}$

Nos sugieren un esquema así:



Con $\tau_1 = \frac{V_1}{v_1} \ll \tau_2 = \frac{V_2}{v_2}$

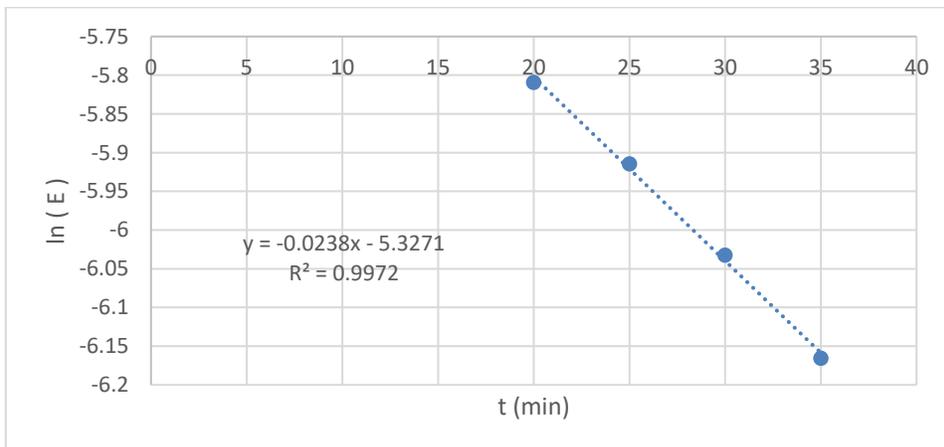
Como se trata de un sistema en paralelo, la DTR es la suma ponderada por la relación de caudales de las DTR de cada rama:

$$E(t) = \frac{v_1}{v_0} \frac{e^{-t/\tau_1}}{\tau_1} + \frac{v_2}{v_0} \frac{e^{-t/\tau_2}}{\tau_2}$$

Si $\tau_1 \ll \tau_2$ para t suficientemente grandes $E(t) \cong \frac{v_2}{v_0} \frac{e^{-t/\tau_2}}{\tau_2}$

$$\ln(E(t)) = \ln\left(\frac{v_2}{v_0} \times \frac{1}{\tau_2}\right) - \frac{t}{\tau_2}$$

Graficamos:



pendiente = $-0.0238 \text{ min}^{-1} = -\frac{1}{\tau_2}$ entonces $\tau_2 = 42 \text{ min}$

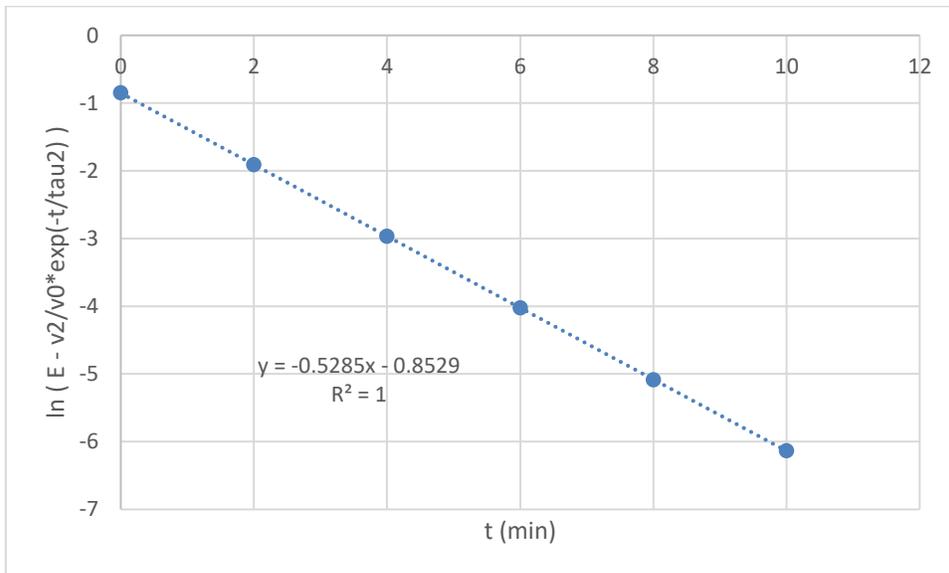
ord. origen = $-5.327 = \ln\left(\frac{v_2}{v_0} \times \frac{1}{\tau_2}\right)$ entonces $\frac{v_2}{v_0} = 0.20$

Por lo tanto $v_2 = 2.0 \text{ L/min}$ y $V_2 = 84 \text{ L}$

Ajustamos ahora toda la curva para sacar los otros dos parámetros (pero solo uso los primeros puntos porque con los últimos introduzco mucho ruido, ya que son valores pequeños):

$$E(t) - \frac{v_2 e^{-t/\tau_2}}{v_0 \tau_2} = \frac{v_1 e^{-t/\tau_1}}{v_0 \tau_1}$$

$$\ln \left[E(t) - \frac{v_2 e^{-t/\tau_2}}{v_0 \tau_2} \right] = \ln \left(\frac{v_1}{v_0} \times \frac{1}{\tau_1} \right) - \frac{t}{\tau_1}$$



pendiente = $-0.5285 \text{ min}^{-1} = -\frac{1}{\tau_1}$ entonces $\tau_1 = 1.9 \text{ min}$ (es un 4.5% de V_2)

Ya sabemos que $\frac{v_1}{v_0} = 0.80$ pero también se confirma de *ord. origen* = $-0.8529 = \ln \left(\frac{v_1}{v_0} \times \frac{1}{\tau_1} \right)$

Por lo tanto $v_1 = 8.0 \text{ L/min}$ y $V_1 = 15 \text{ L}$

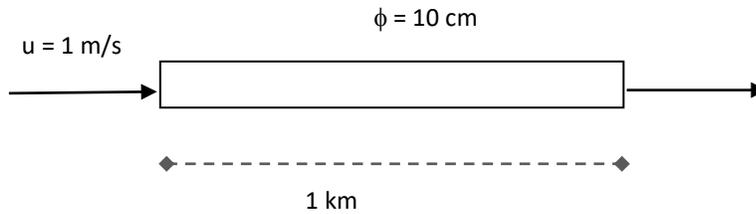
Finalmente $V_M = V_{tot} - V_1 - V_2 = 100 - 15 - 84 = 1 \text{ L}$ (despreciable)

b) Para cada reactor $X_A = \frac{k\tau}{1+k\tau}$ o sea $X_{A1} = \frac{0.1 \cdot 1.9}{1+0.1 \cdot 1.9} = 0.16$ y $X_{A1} = \frac{0.1 \cdot 42}{1+0.1 \cdot 42} = 0.80$

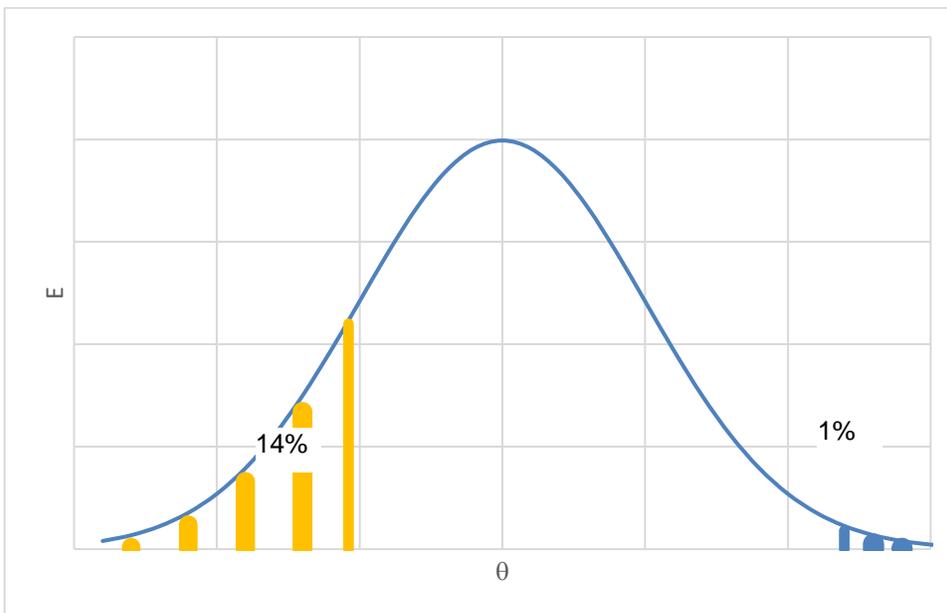
Ponderando cada rama $X_A = 0.8 \cdot 0.16 + 0.2 \cdot 0.80 = 0.29$

6. Dos líquidos diferentes A y B puros son transportados en sucesión a una distancia de 1 km a través de un caño de diámetro interno $d = 10$ cm y con una velocidad media de 1 m/s. Los dos líquidos son aproximadamente de la misma densidad y viscosidad $\nu = 5 \times 10^{-6}$ m²/s. Si la transición es instantánea en la entrada, ¿durante qué tiempo deberá una mezcla de A y B ser descargada separadamente de forma de no permitir una contaminación da A por B mayor del 14% y de B por A mayor de 1%?

RESOLUCIÓN:

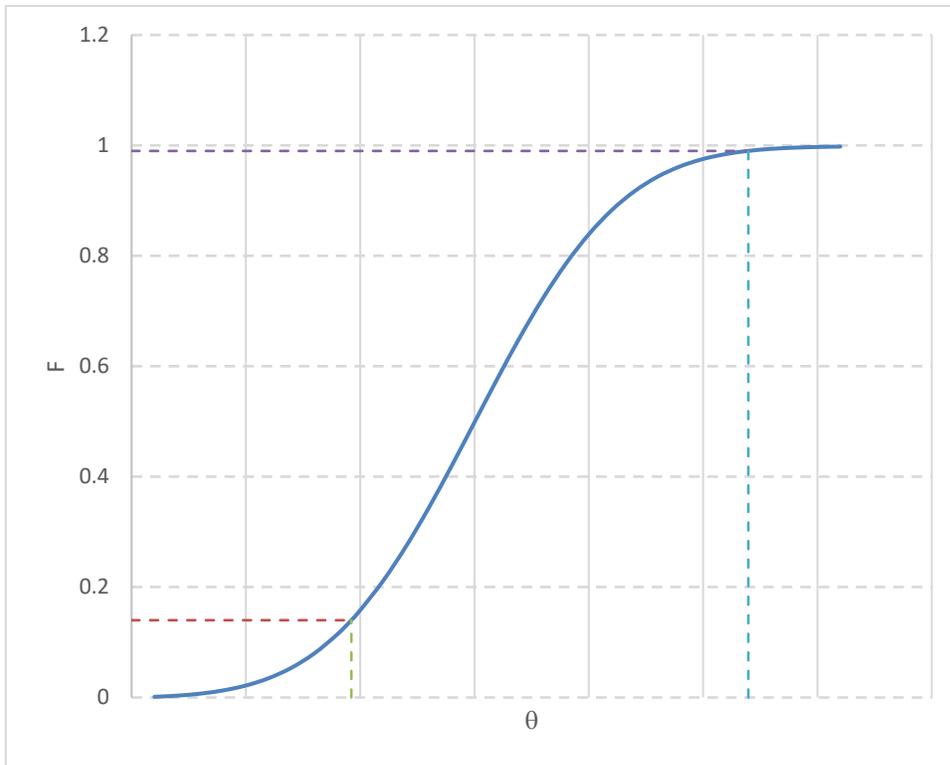


Postularemos que se aplica el modelo de dispersión.

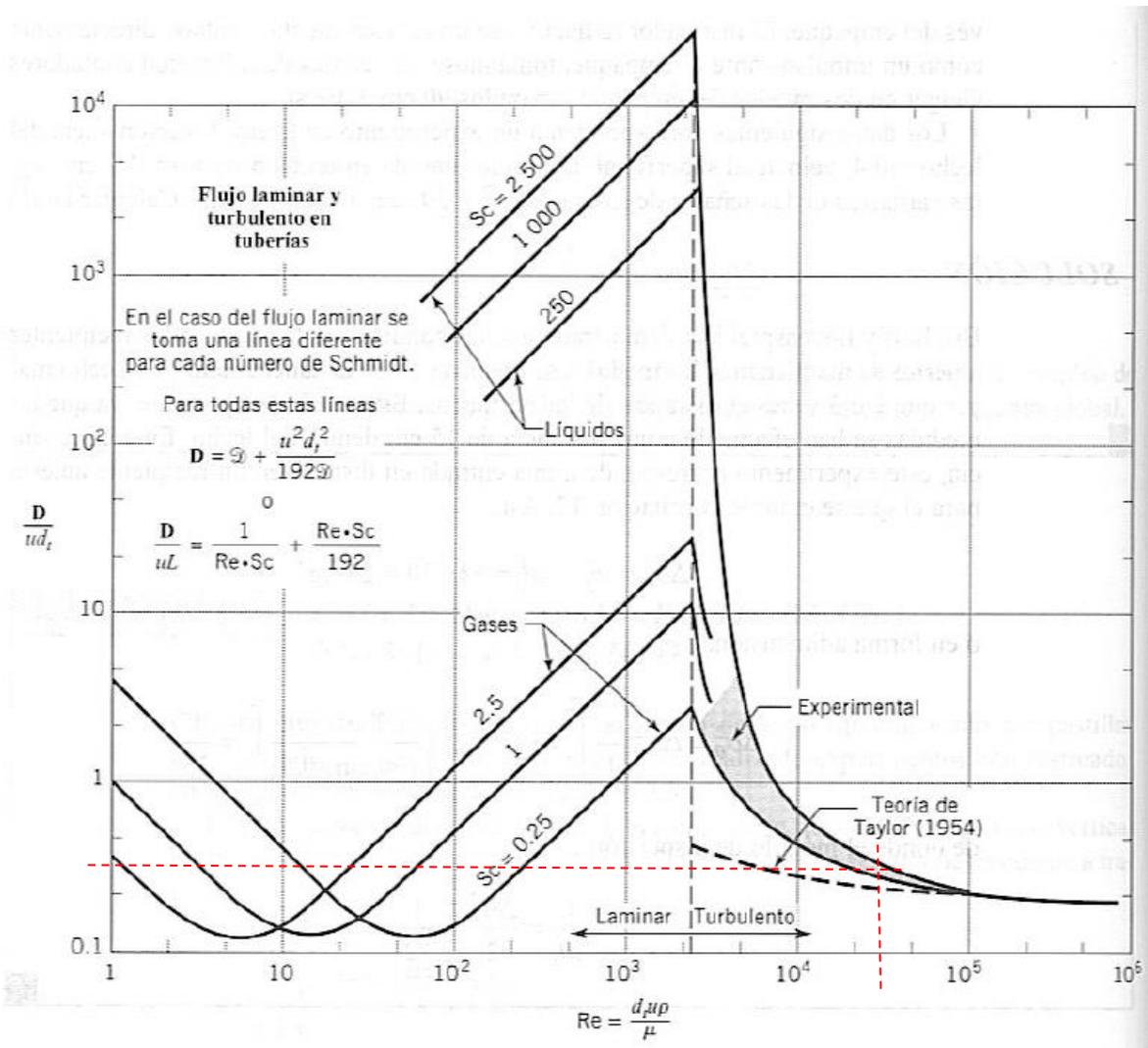


Para baja dispersión

$$E(\theta) = \frac{1}{2\sqrt{\pi \frac{D}{uL}}} \exp\left(-\frac{(1-\theta)^2}{4 \frac{D}{uL}}\right)$$



Podemos estimar el parámetro de la gráfica de Levenspiel



$Re = \frac{d_t u \rho}{\mu} = \frac{d_t u}{\nu} = \frac{0.10m \times 1.0m/s}{5 \times 10^{-6} m^2/s} = 20000$ entonces $\frac{D}{u d_t} \cong 0.3 \rightarrow$
 $\frac{D}{uL} \cong 0.3 \times \frac{0.1}{1000} = 3 \times 10^{-5}$ que es mucho menor que 0.01 por lo que es válida la hipótesis de baja dispersión.

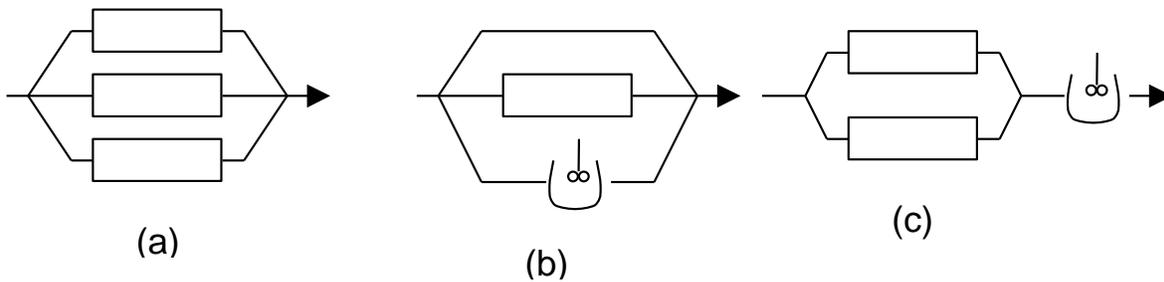
Con este valor se puede ir a las gráficas y se obtiene $\theta_1 = 0.992$ y $\theta_2 = 1.008$
 Que, como $\tau = \frac{V}{v} = \frac{L}{u} = 1000s$ corresponde a $t_1 = 994s$ y $t_2 = 1013s$

7. Se desea conocer el modelo de un determinado reactor para lo cual se procedió a la inyección de un pulso de 40 gramos de trazador. La concentración a la salida medida en función del tiempo es la siguiente:

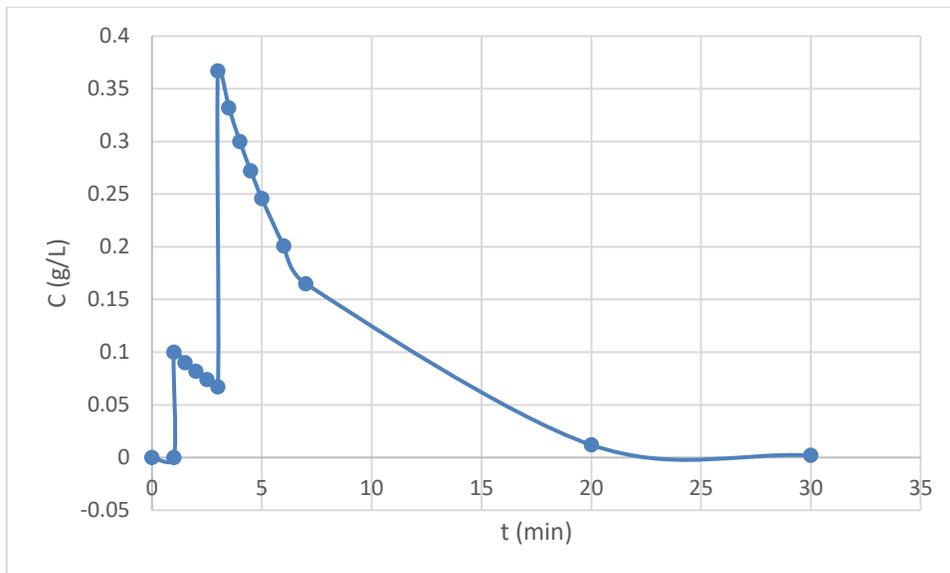
t(min)	t<1	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5
C(g/L)	0	0.100	0.090	0.082	0.074	salto de 0.067 a 0.367	0.332
t(min)	4.0	4.5	5.0	6.0	7.0	20.0	30.0
C(g/L)	0.300	0.272	0.246	0.201	0.165	0.012	0.002

El volumen de reactor es de 150 L y el caudal de alimentación es de 20 L/min.

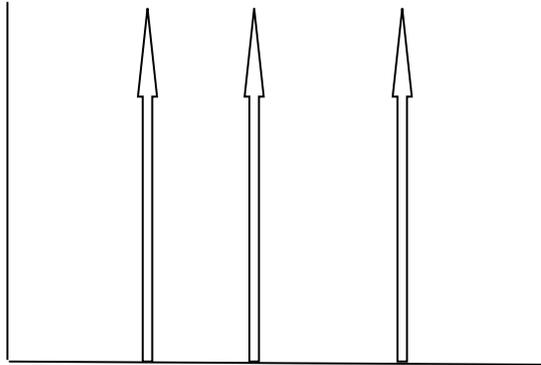
Determinar cuál de los siguientes modelos se ajusta al reactor e indicar los parámetros del modelo seleccionado. Fundamentar la selección y los rechazos.



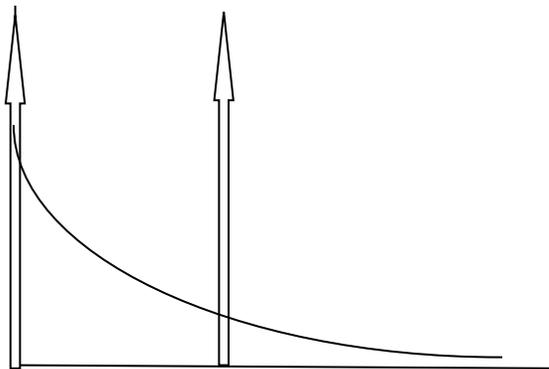
RESOLUCIÓN:



El modelo a) generaría una gráfica del tipo



El modelo b) generaría una gráfica del tipo



Podría ser el c) siempre que se encuentre un set de parámetros que ajuste a los datos experimentales.

$$E(t) = \begin{cases} 0, & t < \tau_1 \\ \frac{v_1}{v_0} \frac{1}{\tau_3} e^{-\frac{t-\tau_1}{\tau_3}}, & \tau_1 < t < \tau_2 \\ \frac{v_1}{v_0} \frac{1}{\tau_3} e^{-\frac{t-\tau_1}{\tau_3}} + \frac{v_2}{v_0} \frac{1}{\tau_3} e^{-\frac{t-\tau_2}{\tau_3}}, & \tau_2 < t \end{cases}$$

Los saltos nos indican $\tau_1 = 1 \text{ min}$ y $\tau_2 = 3 \text{ min}$

Podemos ajustar de a tramos o podemos usar toda la curva y sacar los parámetros con el Solver de Excel:

M =	40 g	$v_1/v_0 =$	0.25
v =	20 L/min	tau1 =	1
M/v =	2 g.min/L	tau2 =	3
		tau3 =	5.0

t (min)	C (g/L)	área	E (min-1)	modelo	error^2
0	0		0		
1	0		0		
1	0.1		0.05	0.0499	3.4621E-09
1.5	0.09	0.0475	0.045	0.0452	3.6653E-08
2	0.082	0.043	0.041	0.0409	1.1349E-08
2.5	0.074	0.039	0.037	0.0370	1.8052E-11
3	0.067	0.03525	0.0335	0.0335	2.2746E-10
3	0.367	0	0.1835	0.1834	6.5689E-09
3.5	0.332	0.17475	0.166	0.1660	6.4074E-10
4	0.3	0.158	0.15	0.1502	3.5902E-08
4.5	0.272	0.143	0.136	0.1359	8.9224E-09
5	0.246	0.1295	0.123	0.1230	3.9627E-10
6	0.201	0.2235	0.1005	0.1007	4.0061E-08
7	0.165	0.183	0.0825	0.0825	1.8834E-09
20	0.012	1.1505	0.006	0.0061	1.8034E-08
30	0.002	0.07	0.001	0.0008	2.8486E-08
		2.397			1.9261E-07

(Obsérvese el error cometido al calcular el área bajo la curva por trapecios: nos faltan datos entre 7 y 20 minutos).

O sea que $\frac{v_1}{v_0} = 0.25$ $\tau_3 = 5.0 \text{ min}$

$$V_1 = 1 \text{ min} * 0.25 * 20 \text{ L/min} = 5 \text{ L}$$

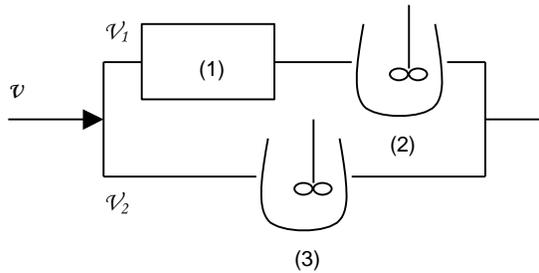
$$V_2 = 3 \text{ min} * 0.75 * 20 \text{ L/min} = 45 \text{ L}$$

$$V_3 = 5 \text{ min} * 20 \text{ L/min} = 100 \text{ L}$$

$$V_{\text{activo, total}} = 5 + 45 + 100 = 150 \text{ L}$$

No existe volumen muerto.

8. El siguiente modelo compuesto representa el comportamiento de un reactor real:



RTFPI $V = 100 \text{ L}$

RCAI $V = 500 \text{ L}$

RCAI $V = 500 \text{ L}$

$v = 200 \text{ L/min}$

$v_1 = v_2 = 100 \text{ L/min}$

En un instante dado se inyecta una solución que contiene 220 g de KCl y se pide hallar: $G(s)$, $C(\theta)$, $F(\theta)$, el tiempo en el cual la concentración de trazador a la salida pasa por un máximo y el valor de esa concentración máxima. Asumir que no existe volumen muerto.

RESOLUCIÓN:

$$G(s) = \frac{v_1}{v} G_I(s) + \frac{v_2}{v} G_{II}(s)$$

$$G_I(s) = G_1(s) \times G_2(s) = e^{-\tau_1 s} \times \frac{1}{1 + \tau_2 s}$$

$$\text{Con } \tau_1 = \frac{V_1}{v_1} = \frac{100 \text{ L}}{100 \text{ L/min}} = 1 \text{ min} \quad \tau_2 = \frac{V_2}{v_1} = \frac{500 \text{ L}}{100 \text{ L/min}} = 5 \text{ min}$$

$$G_{II}(s) = \frac{1}{1 + \tau_3 s} \quad \text{con } \tau_3 = \frac{V_3}{v_2} = \frac{500 \text{ L}}{100 \text{ L/min}} = 5 \text{ min}$$

$$\text{Entonces } G(s) = \frac{0.5(1 - e^{-s})}{1 + 5s}$$

$$\text{Si la señal de entrada es un pulso de } \frac{M}{v} = \frac{220 \text{ g}}{200 \text{ L/min}} = 1.1 \frac{\text{g} \cdot \text{min}}{\text{L}}$$

$$\text{Antitransformando } \frac{M}{v} \frac{0.5(1 - e^{-s})}{1 + 5s}$$

$$E(t) = 0.5 \frac{M}{v} \left[\frac{e^{-t/5}}{5} + \frac{e^{-(t-1)/5}}{5} \right] = 0.1 \frac{M}{v} e^{-t/5} (1 - e^{1/5}) = 1.134 e^{-t/5} \quad \text{para } t > 1$$

$$E(t) = 0.5 \frac{M}{v} \frac{e^{-t/5}}{5} = 0.11 e^{-t/5} \quad \text{para } 0 < t < 1$$

9. Se tienen dos reactores tubulares de 100L cada uno, que presentan como únicas desviaciones de la idealidad las siguientes: ambos tienen un 20% de volumen muerto y uno de ellos presenta además una canalización del 20% del flujo de entrada. Se desea utilizar estos reactores en serie, colocando en segundo lugar el reactor con canalización. El caudal de alimentación será de 10L/h.

1) Determine las curvas $E(t)$, $E(\theta)$ y $F(\theta)$ para el sistema compuesto por los dos reactores en serie. Gráfiqúelas e indique los valores de los parámetros.

2) Calcule el tiempo medio de residencia y θ medio para el sistema anterior.

3) Si se colocan los dos reactores en paralelo, la curva $E(t)$ del sistema presenta 3 pulsos. ¿Qué representan el área y el tiempo de salida de los mismos en función de los parámetros del sistema?