INTRODUCCIÓN AL DISEÑO DE REACTORES

Repartido 5

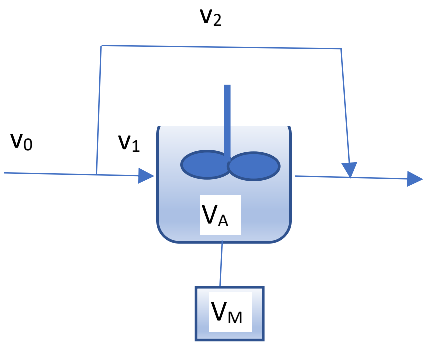
1) La reacción de hidrólisis $A \rightarrow B + C$ se lleva a cabo en un reactor continuo de tipo tanque agitado con un volumen de 1.0 m^3 alimentado con un caudal de 0.1 m^3/min de una solución de C_{A0} = 2.0 mol/L. La constante de hidrólisis es k = 0.8 min^{-1}.

Se sospecha que hay un cortocircuito y una zona muerta. Se realizó un ensayo en escalón con trazador obteniéndose la siguiente tabla

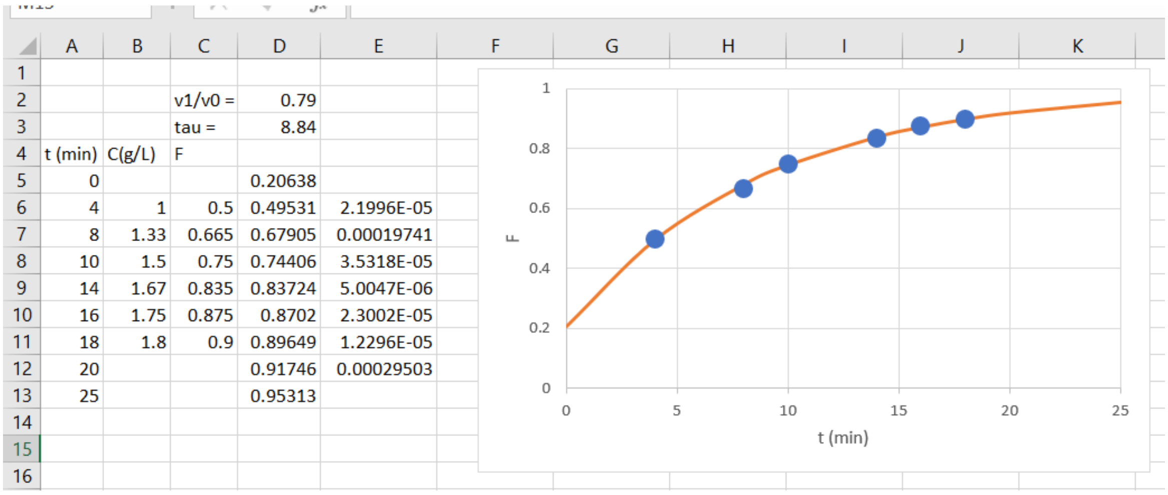
t (min)	4	8	10	14	16	18	∞
C (g/L)	1.00	1.33	1.50	1.67	1.75	1.80	2.00

RESOLUCIÓN:

Nos sugieren un modelo del tipo



Ajustamos los puntos experimentales a una curva del tipo $(1 - e^{-t/\tau_A})$ multiplicada por la fracción de caudal v_1/v_0 . Lo hacemos con solver de Excel y obtenemos:



	A	B	C	D	E
1					
2			v1/v0 =	0.79	
3			tau =	8.84	
4	t (min)	C(g/L)	F		
5	0			0.20638	
6	4	1	0.5	0.49531	2.1996E-05
7	8	1.33	0.665	0.67905	0.00019741
8	10	1.5	0.75	0.74406	3.5318E-05
9	14	1.67	0.835	0.83724	5.0047E-06
10	16	1.75	0.875	0.8702	2.3002E-05
11	18	1.8	0.9	0.89649	1.2296E-05
12	20			0.91746	0.00029503
13	25			0.95313	
14					
15					
16					

v_1/v_0 = 0.79 τ_A = 8.84 min por lo tanto $\bar{t} = 0.79 * 8.84 \cong 7.0 min$

Pero $\tau = \frac{V}{v} = \frac{1.0m^3}{0.1m^3/min} = 10.0 min$, por lo tanto el 30% del volumen es volumen muerto.

b) Si hubiera sido reactor ideal de mezcla completa la conversión hubiera sido

$$vC_{A0}X_a = VkC_{A0}(1 - X_A) \qquad X_{A,ideal} = \frac{k\tau}{1+k\tau} = \frac{0.8min^{-1} * 10min}{1+0.8*10} = 0.89$$

Pero en realidad la conversión en la parte activa es $X_{A,activo} = \frac{k\tau}{1+k\tau} = \frac{0.8min^{-1} * 8.48min}{1+0.8*8.48} = 0.876$

Y en total (el by pass tiene conversión cero) $X_{A,real} = 0.79 * 0.876 = 0.69$

2) La reacción de primer orden A → 2B se lleva a cabo en un reactor real con un volumen total de 500 L y alimentando con un caudal de 50 L/min. A pesar de que el tanque de reacción tiene un agitador se sospecha que la mezcla no es perfecta debido a las características físicas del sistema de alimentación, por lo que se decide realizar un ensayo con trazador. Sin alterar el flujo se inyecta en forma de pulso una masa de 40 g de trazador y a la salida se registra su concentración, obteniéndose la siguiente tabla:

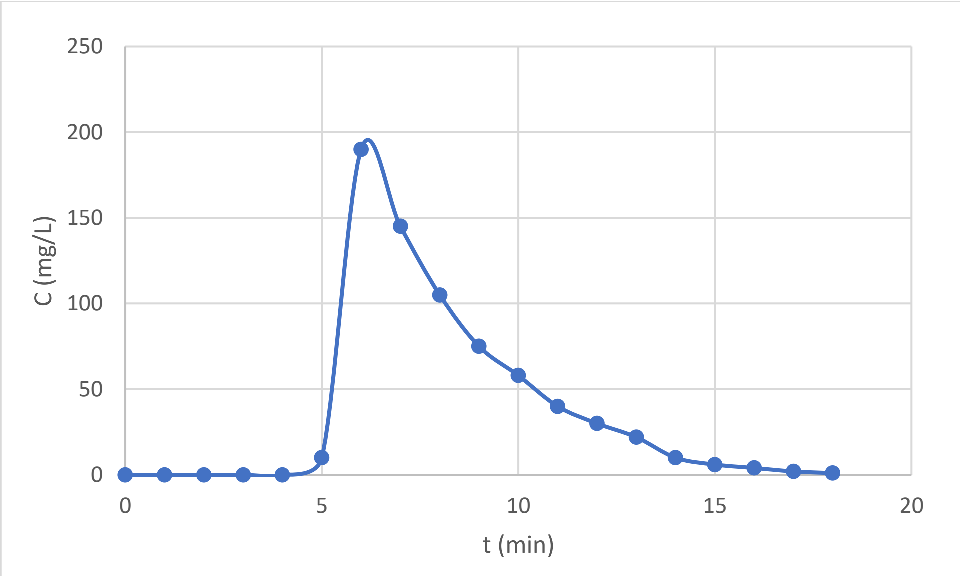
t (min)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
C (mg/L)	0	0	0	0	0	10	190	145	105	75

t (min)	10	11	12	13	14	15	16	17	18
C (mg/L)	58	40	30	22	12	6	4	2	1

a) Graficar la curva E de distribución de tiempos de residencia.
b) Proponer un modelo combinado, formado por una combinación de reactores ideales que sea consistente con esa curva E. Determinar los parámetros del modelo.
c) Calcular la conversión que puede obtenerse con ese reactor y compararla con la que surgiría de haberlo considerado como un RCAI. Considerar $r_A = kC_A$ k = 0.2 min^{-1} , C_{A0} = 1.0 mol/L

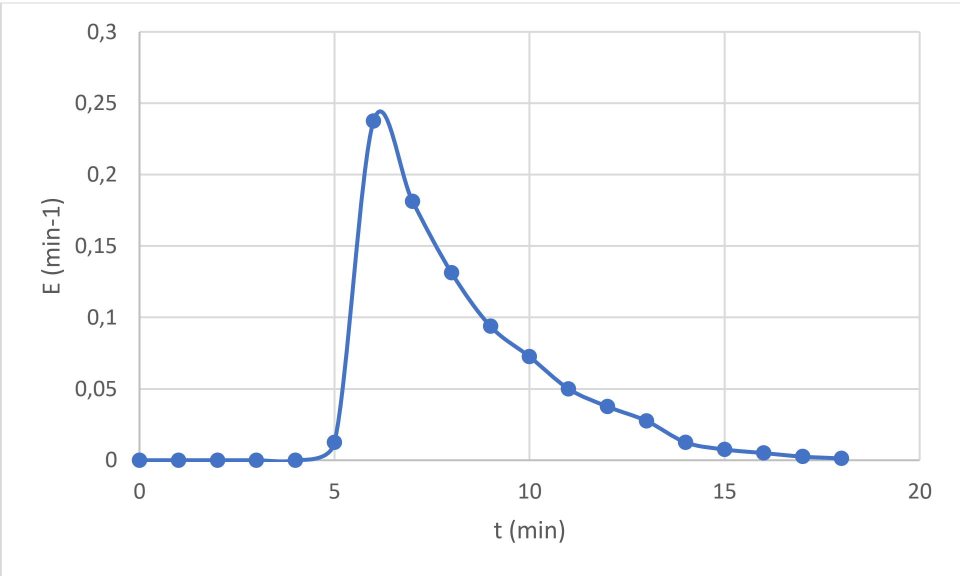
RESOLUCIÓN:

Dibujemos primero la curva experimental:

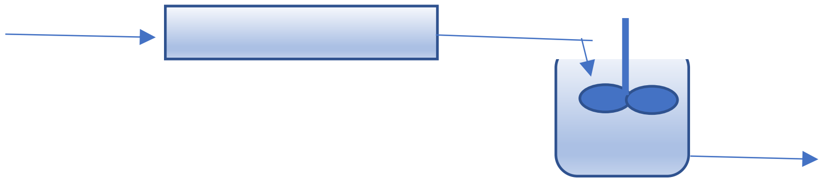


En primer lugar chequeamos que la curva que estamos viendo esté reflejando la salida de todo el trazador. Según se vio, el área bajo la curva es igual a M/v = 40000mg/50L/min = 800 (mg/L)min. Calculando numéricamente el área bajo la curva da unos 700 (mg/L)min, algo menor del valor correspondiente a la inyección. Sin embargo el hecho de tomar muestras cada minuto nos puede hacer perder el pico que se da luego de los 5 minutos y posiblemente esa sea la razón de la diferencia. Consideraremos entonces que el ensayo es correcto y no hay retención de trazador dentro del reactor.

Normalizamos la curva experimental dividiendo entre M/v y así obtenemos la curva E(t).

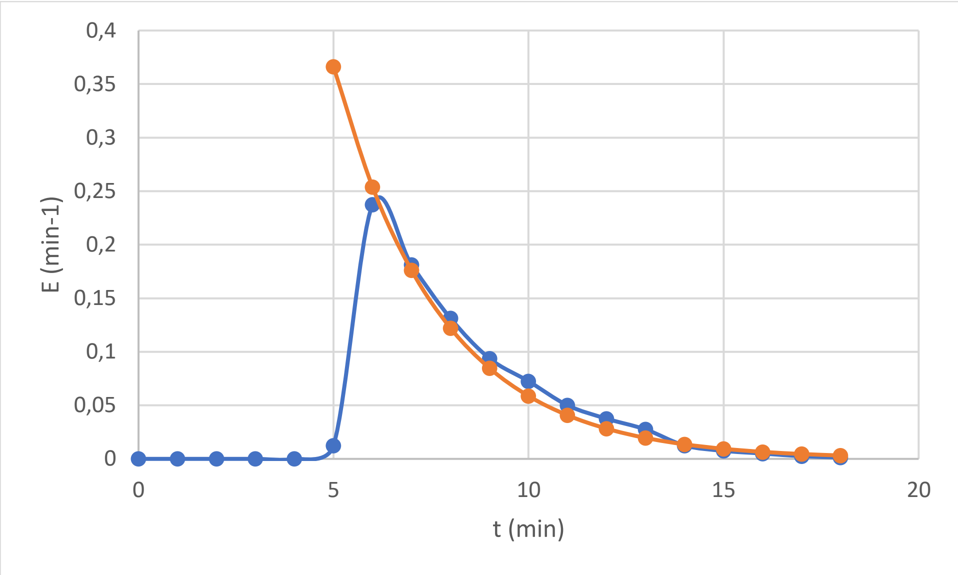


b) Puede observarse un retraso de 5 minutos y posteriormente una curva que se parece a la de decaimiento exponencial, lo cual sugiere un modelo del tipo



Trataremos de ajustar la parte exponencial de la curva a una expresión del tipo $\frac{1}{\tau_A} e^{-\left(\frac{t-\tau_p}{\tau_A}\right)}$

Consideramos τ_p = 5 min y el parámetro de ajuste es τ_A



El ajuste indica una curva con τ_A = 3 min. O sea, la fracción agitada tiene un volumen de 3min*50L/min = 150 L y el pistón un volumen de 5min*50L/min = 250 L. Para completar los 500L debe haber un volumen muerto de 100 L.

$$\tau = \frac{V}{v} = \frac{500L}{50L/min} = 10min$$

c) Considerando RCAI $\tau = \frac{C_{A0}X_A}{kC_{A0}(1-X_A)}$ $\qquad X_A = \frac{\tau k}{1+\tau k} = \frac{10min*0.2min^{-1}}{1+10min*0.2min^{-1}} = \mathbf{0.67}$

Considerando FP+RCAI:

$$\tau_p = \frac{1}{k} ln\left(\frac{1}{1-X_{A1}}\right) \qquad X_{A1} = 1 - e^{-k\tau} = 1 - e^{-0.2min^{-1}5min} = 0.632$$

$$\tau_A = \frac{(X_{A2}-X_{A1})}{k(1-X_{A2})} \qquad X_{A2} = \frac{\tau_A k + X_{A1}}{1+\tau_A k} = \frac{3min*0.2min^{-1}+0.632}{1+3min*0.2min^{-1}} = \mathbf{0.77}$$

Si lo calculamos en el orden inverso, primero el RCAI y luego el pistón:

$$\tau_A = \frac{X_{A1}}{k(1-X_{A1})} \qquad X_{A1} = \frac{\tau_A k}{1+\tau_A k} = \frac{3min*0.2min^{-1}}{1+3min*0.2min^{-1}} = 0.375$$

$$\tau_p = \frac{1}{k} ln\left(\frac{1-X_{A1}}{1-X_{A2}}\right) \qquad X_{A2} = 1 - (1 - X_{A1})e^{-k\tau} = 1 - (1 - 0.375)e^{-0.2min^{-1}5min} = 0.77$$

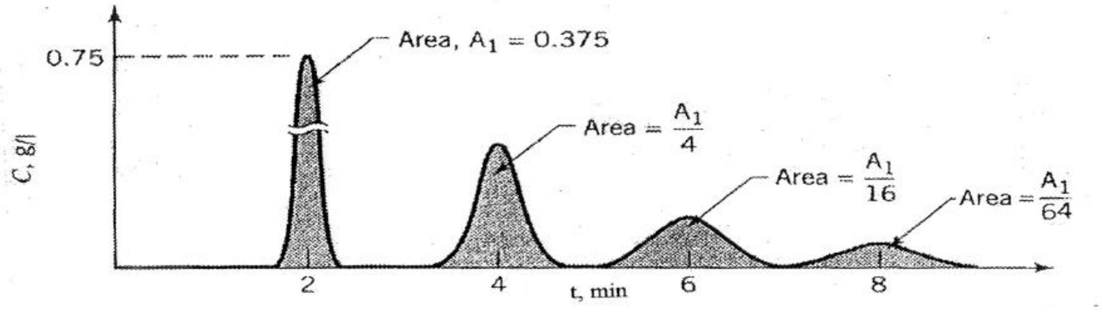
3) Un tanque de 860 L se usa como reactor líquido-gas. Las burbujas de gas suben por el reactor y salen por la parte superior. El líquido fluye en sentido contrario al gas, con un caudal volumétrico de 5 L/s. Para tener una idea del patrón de flujo del líquido en este tanque, se inyecta un pulso de trazador (M = 150 g) a la entrada del líquido, y se mide la concentración a la salida, tal y como se muestra en la figura.

a) ¿Está bien hecho este experimento? ¿Se recoge todo el trazador que se inyecta?

b) Determinar la curva E.

c) Calcule la fracción de reactor que ocupa el líquido.

d) Discuta cualitativamente qué significa el tipo de curva obtenido. Eventualmente proponga un modelo para explicarlo.



RESOLUCIÓN:

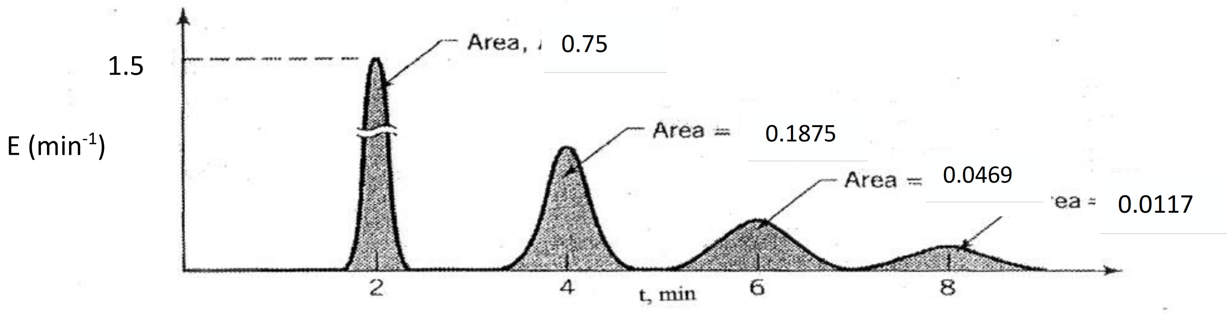
a) La suma de áreas es

$$A_t = A_1\left(1+\frac{1}{4}+\frac{1}{16}+\frac{1}{64}+\cdots\right) = 0.375 * 1.33 \ldots \cong 0.50\ g * min/L$$

Tiene que coincidir con $\frac{M}{v} = \frac{150g}{5\frac{L}{s}*60\frac{s}{min}} = 0.50g * min/L$

Por lo tanto se ha recuperado todo el trazador, o sea el experimento es exitoso.

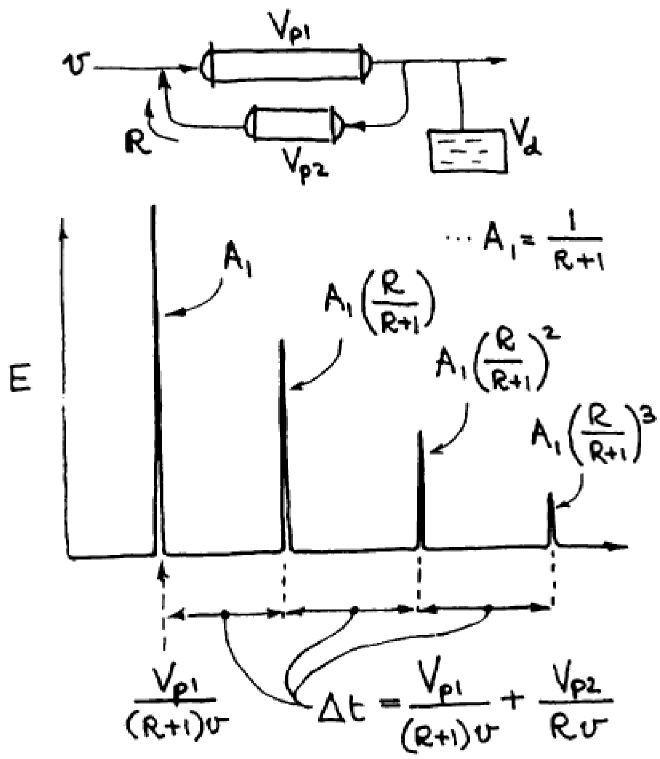
b) Dividiendo entre M/v

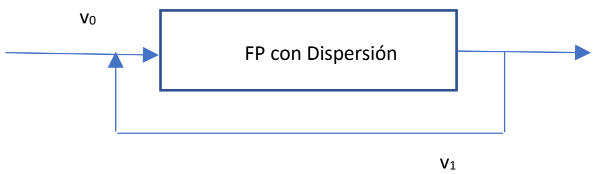


c) Calculamos el $\bar{t} =$ 2 x 0.75 + 4 x 0.1875 + 6 x 0.0469 + 8 x 0.0117 $=$ $2.66 min$, corresponde al TRH activo, mientras que $\frac{V}{v} = \frac{860L}{5\frac{L}{s}*60\frac{s}{min}} = 2.87min$

O sea que el $V_L = \frac{2.66}{2.87} * 860L = 0.93 * 860L \cong 800L$ (93%)

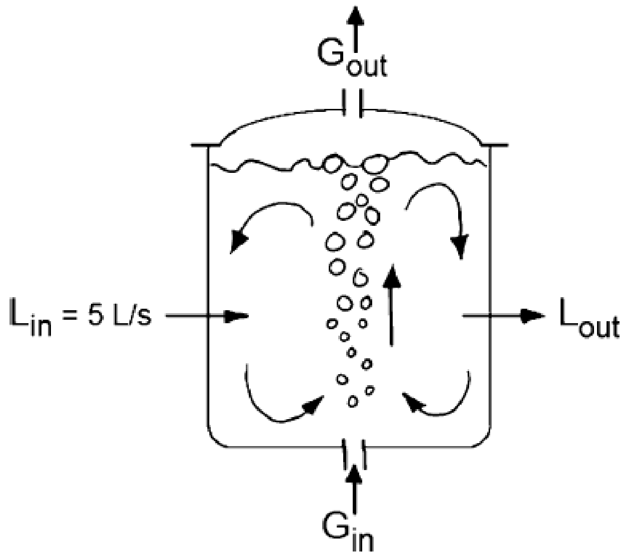
d) Este tipo de curvas corresponde a un sistema con un reciclo (interno), por eso aparecen picos a intervalos regulares; o sea hay una parte del trazador que vuelve a pasar por el reactor cada dos minutos en este caso. Por la forma gaussiana de las curvas podría pensarse en un modelo de dispersión. A medida que el trazador vuelve a pasar por el pistón con dispersión esta aumenta, lo que explica que las curvas vayan "engordando".

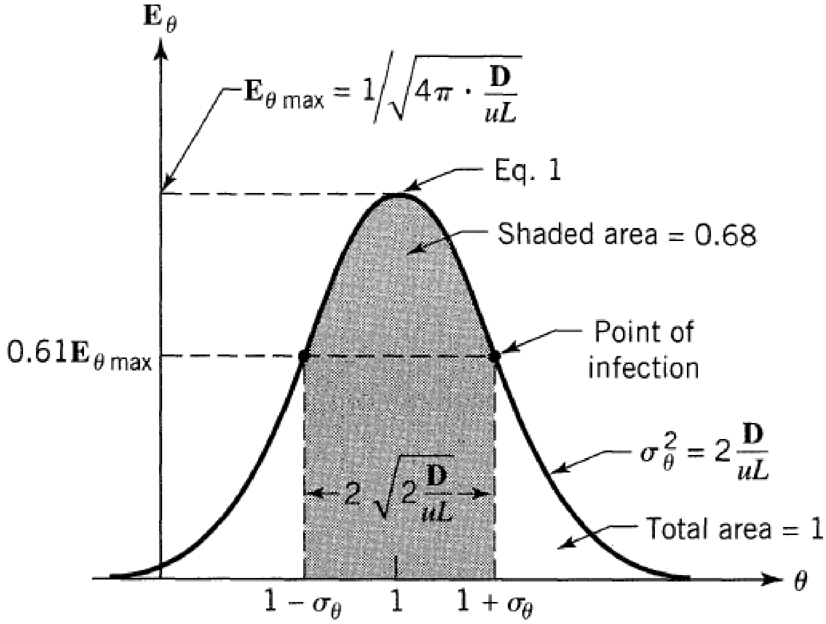




El hecho de que las áreas se amortigüen con una razón ¼ indica que $R = \frac{v_1}{v_0} = 1/3$

(En este caso $V_{p1} = (R+1)v = 1.333 * 300\frac{L}{min} = 800L$ que es el mismo valor que calculábamos antes, por lo que V_{p2} = 0).





Recordemos que $E_\theta = \tau E_t$ entonces en el máximo $2min * 1.5min^{-1} = 3 = \frac{1}{\sqrt{4\pi \frac{D}{uL}}}$

Por lo tanto $\frac{D}{uL} = 0.0088$ que corresponde a un modelo con poca dispersión.