

Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría

Facultad de Ingeniería Química

*Solución de los Problemas Propuestos del
Chemical Engineering Science, O. Levenspiel,
Tercera Edición*

1999

Mercedes Rodríguez Edreira

2006

Problema 5.1 (p. 113)

Considere la reacción en fase gaseosa $2 A \rightarrow R + 2 S$ con cinética desconocida. Si se requiere una velocidad espacial de 1 min^{-1} para alcanzar 90 % de conversión de A en un reactor de flujo en pistón, halle el correspondiente tiempo espacial y el tiempo medio de residencia del fluido en el reactor de flujo en pistón

Solución

$$\tau = \frac{1}{s} = 1 \text{ min}$$

$$\bar{t} = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)(1 + \varepsilon_A X_A)}$$

$$\tau = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

Si el sistema es de densidad constante el tiempo de residencia y el tiempo espacial son iguales; pero en este caso el sistema es de densidad variable porque el flujo volumétrico varía durante la reacción, ya que es un sistema gaseoso y varía el número total de moles.

Conclusión

No se puede calcular el tiempo medio de residencia del fluido con los datos disponibles

Problema 5.2 (p. 113)

En un reactor discontinuo que opera isotérmicamente se alcanza un 70 % de conversión del reactivo líquido en 13 min. ¿Qué tiempo espacial se requiere para efectuar esta operación en un reactor de flujo en pistón y en uno de mezcla completa?

Solución

$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)(1 + \varepsilon_A X_A) \left(\frac{T}{T_0} \right)}$$

$$t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \quad \text{porque el sistema es de densidad constante (es líquido)}$$

Para el reactor de flujo en pistón

$$\tau = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

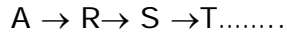
$$\therefore \tau = t = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} = 13 \text{ min}$$

$$s = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{13} \text{ min}^{-1}$$

No se puede calcular τ , ni s para el reactor de mezcla completa porque no se conoce la cinética.

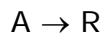
Problema 5.3 (p. 113)

Una corriente acuosa del monómero A (1 mol/L, 4 L/min) entra en un reactor de mezcla completa de 2 L donde es radiada y polimeriza de la siguiente forma



En la corriente de salida $C_A = 0,01$ mol/L y para un producto en particular W se tiene que $C_W = 0,0002$ mol/L. Halle la velocidad de reacción de A y la de W

Solución



Suponiendo que las reacciones son elementales

$$-r_A = k_1 C_A + k_2 C_A C_R + k_3 C_A C_S + k_4 C_A C_T + k_5 C_A C_U + k_6 C_A C_V$$

$$r_W = k_6 C_A C_V + k_7 C_A C_W$$

Hay 7 constantes cinéticas involucradas, así que requiero al menos 8 puntos experimentales para poder calcular el valor numérico de las constantes.

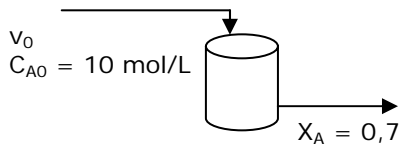
Problema 5.4 (p. 113)

Se está planeando reemplazar un reactor de mezcla completa por uno que tiene el doble del volumen. Para la misma velocidad de alimentación y la misma alimentación acuosa (10 mol de A/L), halle la nueva conversión. La cinética de la reacción está representada por



La conversión actual es del 70%.

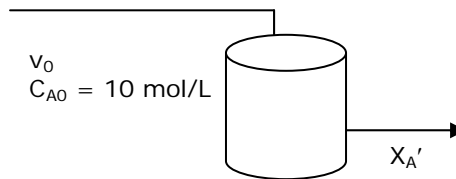
Solución



Para el reactor existente

$$\frac{V}{v_0} = \frac{C_{A0} X_A}{k C_{A0}^{1,5} (1 - X_A)^{1,5}} = \frac{0,7}{k C_{A0}^{0,5} (0,3)^{1,5}}$$

$$\frac{k V C_{A0}^{0,5}}{v_0} = 4,26$$



Para el reactor 2 veces mayor

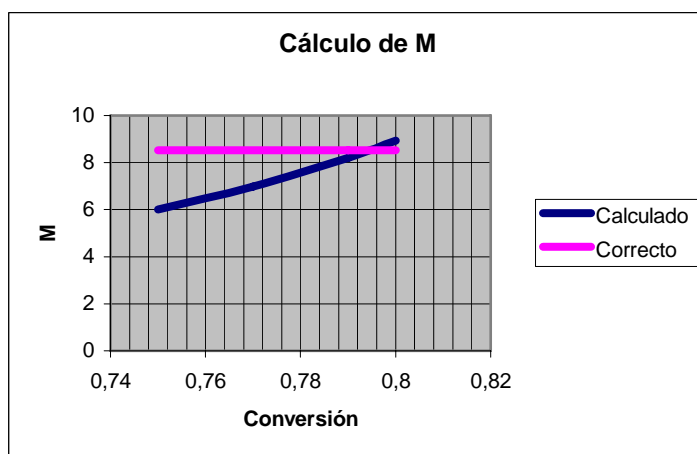
$$\frac{2V}{v_0} = \frac{C_{A0} X'_A}{k C_{A0}^{1,5} (1 - X'_A)^{1,5}}$$

$$\frac{2V k C_{A0}^{0,5}}{v_0} = 2(4,26) = 8,52$$

$$M = \frac{X'_A}{(1 - X'_A)^{1,5}} = 8,52$$

Para hallar X'_A hay que hacer un tanteo

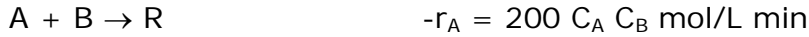
X'_A	0,8	0,75	0,77	0,79
M	8,94	6	6,98	8,21



$$X_{A'} = 0,794$$

Problema 5.5 (p. 113)

Una alimentación acuosa de A y B (400 L/min, 100 mmol/L de A, 200 mmol/L de B) va a ser convertida en producto en un reactor de flujo en pistón. La cinética de la reacción está representada por:



Halle el volumen del reactor requerido para alcanzar el 99,9% de conversión de A en producto

Solución

$$-r_A = k C_A C_B$$

Sistema líquido, así que la densidad es constante

$$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$$

$$C_B = C_{A0}(M - X_A)$$

$$M = \frac{200}{100} = 2$$

$$-r_A = k C_{A0}^2 (1 - X_A)(2 - X_A)$$

$$\tau_p = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k C_{A0}^2 (1 - X_A)(2 - X_A)}$$

$$\ln \frac{M - X_A}{M(1 - X_A)} = C_{A0}(M - 1)k\tau_p$$

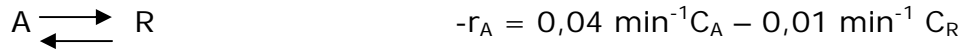
$$C_{A0} = 100 \frac{\text{mmol}}{\text{L}} \frac{1 \text{ mol}}{10^3 \text{ mmol}} = 0,1 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$\tau_p = \frac{1}{C_{A0}(M - 1)k} \ln \frac{M - X_A}{M(1 - X_A)} = \frac{1}{200(0,1)(2 - 1)} \ln \frac{2 - 0,999}{2(1 - 0,999)} = 0,31 \text{ min}$$

$$V = \tau_p v_0 = 0,31(400) = 124,3 \text{ L}$$

Problema 5.6 (p. 113)

Un reactor de flujo en pistón (2 m^3) procesa una alimentación acuosa (100 L/min) conteniendo un reactivo A ($C_{A0} = 100 \text{ mmol/L}$). Esta reacción es reversible y está representada por:



Halle primero la constante de equilibrio y después la conversión del reactor

Solución

Sistema de densidad constante porque es líquido

$$K = \frac{k_1}{k_2} = \frac{C_{Re}}{C_{Ae}} = \frac{X_{Ae}}{1 - X_{Ae}} = \frac{0,04}{0,01} = 4 \Rightarrow X_{Ae} = 0,8$$

$$-r_A = k_1 C_{A0} (1 - X_A) - k_2 C_{A0} X_A = k_1 C_{A0} (1 - X_A) - \frac{k_1 (1 - X_{Ae})}{X_{Ae}} C_{A0} X_A$$

$$-r_A = k_1 C_{A0} \left\{ 1 - X_A \left[1 + \frac{1 - X_{Ae}}{X_{Ae}} \right] \right\} = k_1 C_{A0} (1 - 1,25 X_A)$$

$$\tau_p = \frac{V}{v_0} = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k_1 C_{A0} (1 - 1,25 X_A)}$$

$$\frac{k_1 \tau}{X_{Ae}} = -\ln \left(1 - \frac{X_A}{X_{Ae}} \right) \quad \text{ecuación 5.22 (pág. 103)}$$

$$\frac{0,04 \left(\frac{2000}{100} \right)}{0,8} = -\ln \left(1 - \frac{X_A}{0,8} \right) = 1$$

$$\Rightarrow X_A = 0,8(1 - e^{-1}) = 0,506$$

Problema 5.7 (p. 114)

El gas que sale de un reactor nuclear contiene una variedad completa de trazas radioactivas, siendo de las conflictivas el Xe-133 (tiempo medio de vida = 5,2 días) Este gas fluye de forma continua por un tanque con una gran retención, con tiempo de residencia de 30 días, en el cual se puede suponer que el contenido está bien mezclado. Halle la fracción de actividad que es removida en el tanque

Solución

Suponiendo que la reacción es de densidad constante y que es de primer orden se puede calcular la constante cinética a partir del tiempo medio de vida

$$C_A = C_{A0} \exp(-kt)$$

$$0,5C_{A0} = C_{A0} \exp(-kt)$$

$$0,5 = \exp(-kt)$$

$$2 = \exp(kt)$$

$$kt = \ln 2$$

$$k = \frac{\ln 2}{t} = \frac{\ln 2}{5,2} = 0,1333 \text{ día}^{-1}$$

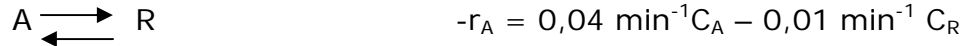
Para el reactor de mezcla completa

$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A} = \frac{C_{A0} X_A}{k C_{A0} (1 - X_A)} = \frac{X_A}{k(1 - X_A)}$$

$$\Rightarrow X_A = \frac{k \tau_m}{k \tau_m + 1} = \frac{0,1333(30)}{0,1333(30) + 1} = 0,8$$

Problema 5.8 (p. 114)

Un reactor de mezcla completa (2 m^3) procesa una alimentación acuosa (100 L/min) conteniendo un reactivo A ($C_{A0} = 100 \text{ mmol/L}$). Esta reacción es reversible y está representada por:



¿Cuál es la conversión de equilibrio y la conversión real del reactor?

Solución

Sistema de densidad constante porque es líquido

$$-r_A = k_1 C_{A0} (1 - X_A) - k_2 C_{A0} X_A = k_1 C_{A0} (1 - X_A) - \frac{k_1 (1 - X_{Ae})}{X_{Ae}} C_{A0} X_A$$

$$-r_A = k_1 C_{A0} \left\{ 1 - X_A \left[1 + \frac{1 - X_{Ae}}{X_{Ae}} \right] \right\}$$

$$X_{Ae} = 0,8$$

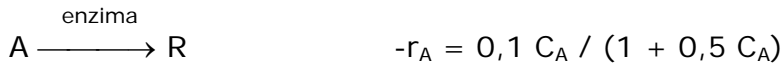
$$\tau_m = \frac{V}{v_0} = \frac{2000}{100} = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A} = \frac{C_{A0} X_A}{k_1 C_{A0} \left\{ 1 - X_A \left[1 + \frac{1 - X_{Ae}}{X_{Ae}} \right] \right\}} = \frac{X_A}{0,04(1 - 1,25 X_A)}$$

$$0,8 - X_A = X_A$$

$$X_A = 0,4$$

Problema 5.9 (p. 114)

Una enzima específica actúa como catalizador en la fermentación de A. Halle el volumen del reactor de flujo en pistón requerido para el 95 % de conversión del reactivo A ($C_{A0} = 2 \text{ mol/L}$) a una concentración dada de la enzima. La cinética de la fermentación a esta concentración de enzima viene dada por:



Solución

Sistema de densidad constante porque 1 mol de A rinde 1 mol de R

$$\tau_p = \frac{V}{v_0} = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} = \int_{C_{Af}}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{(-r_A)} = \int_{C_{Af}}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{0,1 C_A \frac{1 + 0,5 C_A}{1 + 0,5 C_A}} = \int_{C_{Af}}^{C_{A0}} \frac{(1 + 0,5 C_A) dC_A}{0,1 C_A}$$

$$\tau_p = \int_{C_A}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{0,1 C_A} + \int_{C_A}^{C_{A0}} \frac{0,5 dC_A}{0,1} = \frac{1}{0,1} \ln C_A \Big|_{C_{Af}}^{C_{A0}} + 5(C_{A0} - C_A)$$

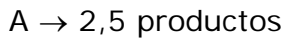
$$C_{Af} = 2(1 - 0,95) = 0,1$$

$$\tau_p = \frac{V}{v_0} = 10(\ln 2 - \ln 0,1) + 5(2 - 0,1) = 39,46 \text{ min}$$

$$V_P = \tau_p v_0 = 39,46 \text{ min} \frac{25 \text{ L}}{\text{min}} = 986,5 \text{ L}$$

Problema 5.10 (p.114)

En un reactor de flujo en pistón una alimentación gaseosa de A puro (2 mol/L, 100 mol/min) se descompone para dar una variedad de productos. La cinética de la reacción está representada por



$$-r_A = 10 \text{ min}^{-1} C_A$$

Halle la conversión esperada en un reactor de 22 L

Solución

Sistema de densidad variable porque varía F_{total} , lo que ocasiona que el flujo volumétrico varíe

$$k\tau_p = (1 + \varepsilon_A X_A) \ln \frac{1}{1 - X_A} + \varepsilon_A X_A \quad \text{ecuación 5.21 (pág. 103)}$$

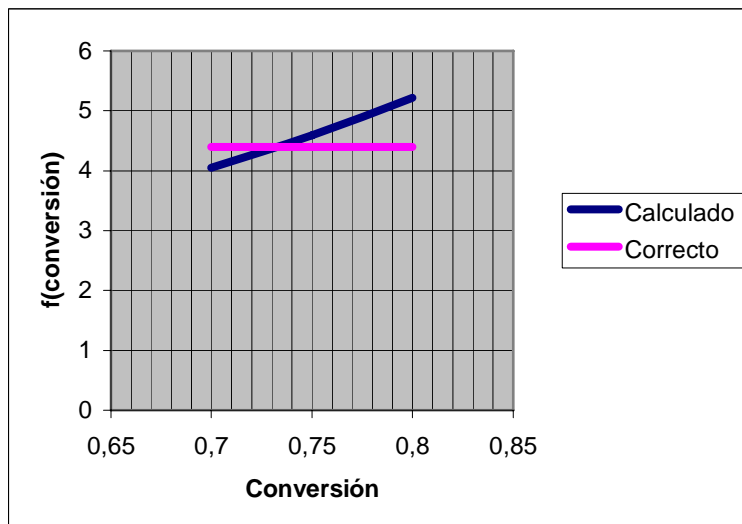
$$v_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = \frac{100 \frac{\text{mol}}{\text{min}}}{2 \frac{\text{mol}}{\text{L}}} = 50 \frac{\text{L}}{\text{min}}$$

$$\varepsilon_A = \frac{r - a}{a} y_{A0} = \frac{2,5 - 1}{1} (1) = 1,5$$

$$10 \left(\frac{22}{50} \right) = 2,5 \ln \frac{1}{1 - X_A} - 1,5 X_A$$

$$4,4 = -2,5 \ln(1 - X_A) - 1,5 X_A = f(X_A)$$

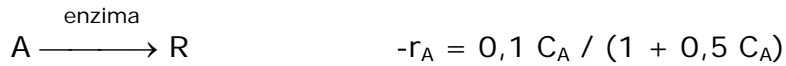
X_A	0,7	0,8	0,75
$f(X_A)$	4,05	5,22	4,59



$$X_A = 0,73$$

Problema 5.11 (p. 114)

La enzima E cataliza la fermentación del sustrato A (el reactivo), obteniéndose R. Halle el tamaño del reactor de mezcla completa requerido para el 95 % de conversión de una corriente de alimentación (25 L/min) de reactivo (2 mol/L) y enzima. La cinética de la fermentación a esta concentración de enzima viene dada por

**Solución**

Sistema de densidad constante

$$\tau_m = \frac{C_{A0} - C_{Af}}{-r_A} = \frac{C_{A0} - C_{Af}}{\frac{0,1C_{Af}}{1 + 0,5C_{Af}}}$$

$$C_{Af} = C_{A0}(1 - X_A) = 2(1 - 0,95) = 0,1$$

$$\tau_m = \frac{(2 - 0,1)[1 + 0,5(0,1)]}{0,1(0,1)} = 199,5 \text{ min}$$

$$V = \tau_m v_0 = 4987,5 \text{ L} \approx 5 \text{ m}^3$$

Problema 5.12 (p.114)

Una solución acuosa (400 L/min, 100 mmol de A/L, 200 mol de B/L) va a ser convertida en producto en un reactor de mezcla completa. La cinética de la reacción está representada por

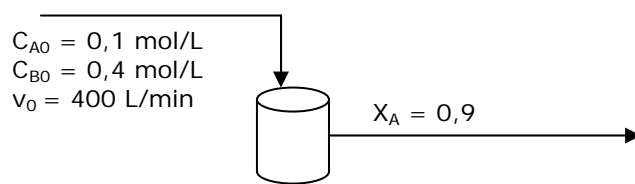


$$-r_A = 200 C_A C_B \text{ mol/L min}$$

Halle el volumen del reactor requerido para alcanzar 90 % de conversión

Solución

Sistema de densidad constante porque es líquido



$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A}$$

$$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$$

$$C_B = C_{A0} \left(M_B - \frac{b}{a} X_A \right)$$

$$M_B = \frac{C_{B0}}{C_{A0}} = \frac{200}{100} = 2$$

$$b = a = 1$$

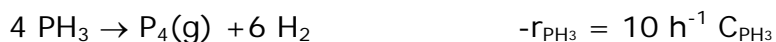
$$-r_A = 200(0,1)^2(1 - X_A)(2 - X_A)$$

$$\tau_m = \frac{0,1(0,9)}{200(0,1)^2(1 - X_A)(2 - X_A)} = 49,9 \text{ min}$$

$$V_m = \tau_m v_0 = 49,9(400) = 19960 \text{ L} \approx 20 \text{ m}^3$$

Problema 5.13 (p. 115)

A 650°C el vapor de PH₃ se descompone como sigue



¿Qué tamaño de reactor de flujo en pistón que opere a 649°C y 11,4 atm se requiere para alcanzar 75% de conversión de 10 mol/H de PH₃ que tiene 2/3 de PH₃ y 1/3 de inerte?

Solución

Sistema de densidad variable porque es gaseoso y varía F_{total}, lo que ocasiona que el flujo volumétrico varíe

$$\varepsilon_A = \left(\frac{1+6-4}{4} \right) \left(\frac{2}{3} \right) = 0,5$$

$$k\tau_p = (1 + \varepsilon_A) \ln \frac{1}{1 - X_A} - \varepsilon_A X_A \quad \text{ecuación 5.21 (pág. 103)}$$

$$\tau_p = \frac{1}{10} \left[(1 + 0,5) \ln \frac{1}{1 - 0,75} - 0,5(0,75) \right] = 0,17 \text{ h}$$

$$C_{A0} = \frac{P_{A0}}{RT_0} = \frac{11,4 \left(\frac{2}{3} \right)}{0,082(649 + 273)} = 0,1 \text{ mol/L}$$

$$v_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = \frac{10}{0,1} = 100 \frac{\text{L}}{\text{h}}$$

$$V = \tau_p v_0 = 0,17(100) = 17 \text{ L}$$

Problema 5.14 (p. 115)

Una corriente gaseosa de reactivo A puro ($C_{A0} = 660 \text{ mmol/L}$) entra en un reactor de flujo en pistón a una velocidad $F_{A0} = 540 \text{ mmol/min}$ y polimeriza de la siguiente forma



$$-r_A = 54 \text{ mmol/L min}$$

¿Qué tamaño debe tener el reactor para que $C_{Af} = 330 \text{ mmol/L}$?

Solución

Sistema de densidad variable porque es gaseoso y como varía F_{total} , el flujo volumétrico también variará

$$C_{Af} = \frac{C_{A0}(1 - X_A)}{f_e} = \frac{C_{A0}(1 - X_A)}{(1 + \varepsilon_A) \left(\frac{T}{T_0} \right) \left(\frac{P_0}{P} \right)} = \frac{C_{A0}(1 - X_A)}{(1 + \varepsilon_A)}$$

$$\varepsilon_A = \left(\frac{1-3}{3} \right) (1) = \frac{2}{3}$$

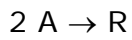
$$330 = 660 \frac{1 - X_A}{1 - \frac{2}{3} X_A} \quad \Rightarrow \quad X_A = 0,75$$

$$\tau_p = C_{A0} \int_0^{0,75} \frac{dX_A}{-r_A} = \frac{C_{A0}}{-r_A} X_A = \frac{660}{54} 0,75 = 9,17 \text{ min}$$

$$V = \tau_p \nu_0 = \tau_p \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = 9,17 \left(\frac{540}{660} \right) = 7,5 \text{ L}$$

Problema 5.15 (p. 115)

Una alimentación gaseosa de A puro (1 mol/L) entra en un reactor de mezcla completa (2 L) y reacciona como sigue:



$$-r_A = 0,05 C_A^2 \text{ mol/L s}$$

Halle la velocidad de alimentación (L/min) que dará una concentración de salida $C_{Af} = 0,5 \text{ mol/L}$

Solución

Sistema de densidad variable porque es gaseoso y como varía F_{total} durante el transcurso de la reacción, el flujo volumétrico varía

$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_A}{-r_{Af}}$$

$$\varepsilon_A = \frac{1-2}{2}(1) = -0,5$$

$$\frac{C_{Af}}{C_{A0}} = \frac{330}{660} = \frac{1-X_A}{1+\varepsilon_A X_A} = \frac{1-X_A}{1-0,5X_A} \Rightarrow X_A = \frac{2}{3}$$

$$-r_{Af} = 0,05 C_{A0}^2 \left(\frac{1-X_A}{1-0,5X_A} \right)^2$$

$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_A (1+\varepsilon_A X_A)^2}{0,05 C_{A0}^2 (1-X_A)^2} = \frac{1(0,67)[1-0,5(0,67)]^2}{0,05(1)^2(1-0,67)^2} = 54,42 \text{ min}$$

$$v_0 = \frac{V}{\tau_m} = \frac{2L}{54,42 \text{ min}} = 0,036 L/\text{min}$$

Problema 5.16 (p. 115)

El reactivo gaseoso A se descompone como sigue



Halle la conversión de A que se obtiene en un reactor de mezcla completa de 1 m^3 que se alimenta con una corriente que contiene 50 % de A y 50 % de inertes ($v_0 = 180 \text{ L/min}$, $C_{A0} = 300 \text{ mmol/L}$)

Solución

Sistema de densidad variable porque es gaseoso y como varía F_{total} durante el transcurso de la reacción, el flujo volumétrico varía

$$\tau_m = \frac{V}{v_0} = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A}$$

$$\varepsilon_A = \frac{3-1}{1}(0,5) = 1$$

$$-r_A = 0,6C_A = 0,6C_{A0} \frac{1-X_A}{1+\varepsilon_A X_A} = 0,6C_{A0} \frac{1-X_A}{1+X_A}$$

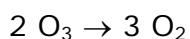
$$\tau_m = \frac{V}{v_0} = \frac{1000}{180} = \frac{C_{A0} X_A (1+X_A)}{0,6C_{A0} (1-X_A)} = \frac{X_A (1+X_A)}{0,6(1-X_A)}$$

$$3X_A^2 + 13X_A - 10 = 0$$

$$X_A = \frac{-13 \pm \sqrt{169 + 40(3)}}{2(3)} = 0,67$$

Problema 5.17 (p. 115)

Una mezcla de 20 % de ozono – 80 % de aire a 1,5 atm y 95°C pasa a una velocidad de 1 L/s a través de un reactor de flujo en pistón. Bajo estas condiciones el ozono se decompone mediante la reacción homogénea



$$\begin{aligned} -r_A &= k C_{\text{oz}}^2 \\ k &= 0,05 \text{ L/mol s} \end{aligned}$$

¿Qué tamaño de reactor se requiere para alcanzar 50 % de descomposición?

Solución

La velocidad de reacción es de segundo orden y el sistema de densidad variable porque es gaseoso y varía F_{total} . La ecuación de diseño ya integrada aparece en el texto para este caso.

$$k \tau_p C_{A0} = 2\varepsilon_A(1 + \varepsilon_A) \ln(1 - X_A) + \varepsilon_A^2 X_A + (\varepsilon_A + 1)^2 \frac{X_A}{1 - X_A} \quad \text{ecuación 5.23 (pág 103)}$$

$$C_{A0} = \frac{P_{A0}}{RT_0} = \frac{1,5(0,2)}{0,082(95 + 273)} = 0,01 \text{ mol / L}$$

$$\varepsilon_A = \frac{3-2}{2}(0,2) = 0,1$$

$$\tau_p = \frac{V}{v_0} = \frac{1}{0,05(0,01)} \left\{ 2 \left(0,1(1,1) \ln 0,5 + 0,1^2(0,5) + 1,1^2 \frac{0,5}{0,5} \right) \right\} = 2125,02 \text{ s}$$

$$V = 2125,02 \text{ s} \left(\frac{1 \text{ L}}{\text{s}} \right) = 2125 \text{ L} = 2,125 \text{ m}^3$$

Problema 5.18 (p. 116)

Una alimentación acuosa que contiene A (1 mol/L) es procesada en un reactor de flujo en pistón de 2 L ($2 A \rightarrow R$, $-r_A = 0,05 C_A^2$ mol/L s). Halle la concentración de salida de A para una velocidad de alimentación de 0,5 L/min

Solución

El sistema es líquido, así que es de densidad constante y $\therefore \varepsilon_A = 0$

$$\tau = \frac{V}{v_0} = \frac{2L}{0,5 \frac{L}{\min}} = 4 \min \left(\frac{60 s}{1 \min} \right) = 240 s$$

$$k\tau_p C_{A0} = 2\varepsilon_A (1 + \varepsilon_A) \ln(1 - X_A) + \varepsilon_A^2 X_A + (\varepsilon_A + 1)^2 \frac{X_A}{1 - X_A} \quad \text{ecuación 5.23 (pág 103)}$$

$$k\tau_p C_{A0} = \frac{X_A}{1 - X_A}$$

$$X_A = \frac{k\tau_p C_{A0}}{1 + k\tau_p C_{A0}} = \frac{0,05(240)(1)}{1 + 0,05(240)(1)} = 0,92$$

Problema 5.19 (p. 116)

Se alimenta a un reactor de mezcla completa de 1 L una corriente gaseosa de A puro aproximadamente a 3 atm y 30°C (120 mmol/L). Allí se descompone y la concentración de A en la salida es medida para cada velocidad de flujo. A partir de los datos siguientes halle la ecuación de velocidad que representa la descomposición de A. Suponga que sólo la concentración de A afecta la velocidad de reacción

v_0 (L/min)	0,06	0,48	1,5	8,1	$A \rightarrow 3 R$
C_A (mmol/L)	30	60	80	105	

Solución

El sistema es de densidad variable porque es gaseoso y varía F_{total}

$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A} = \frac{V}{v_0}$$

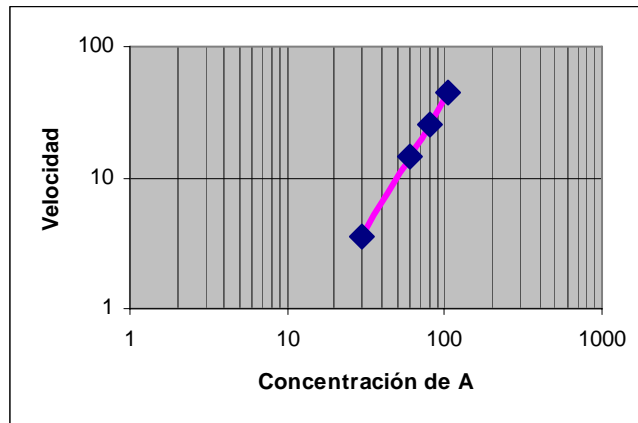
$$-r_A = \frac{C_{A0} X_A v_0}{V} = 120 X_A v_0$$

$$X_A = \frac{1 - \frac{C_A}{C_{A0}}}{1 + \varepsilon_A \frac{C_A}{C_{A0}}}$$

$$\varepsilon_A = \frac{3-1}{1}(1) = 2 \quad \Rightarrow \quad X_A = \frac{120 - C_A}{2(60 + C_A)}$$

C_A (mmol/L)	30	60	80	105
X_A	0,5	0,25	0.143	0,045
$-r_A$ (mmol/L min)	3.6	14.4	25.74	44,18

$$-r_A = k C_A^n \quad \Rightarrow \quad \ln(-r_A) = \ln k + n \ln C_A$$



$$n = \frac{\ln 4,4 - \ln 3,6}{\ln 60 - \ln 30} = 2$$

$$k = \frac{C_A^2}{-r_A} = \frac{900}{3,6} = 250$$

$$-r_A = 250 C_A^2$$

Problema 5.20 (p. 116)

Se está utilizando un reactor de mezcla completa para determinar la cinética de la reacción cuya estequiometría es $A \rightarrow R$. Para esto diferentes flujos de una solución acuosa que contiene 100 mmol/L de A son alimentados a un reactor de 1 L y para cada corrida la concentración de A de salida es registrada. Halle la ecuación de velocidad que representa los siguientes datos. Suponga que sólo el reactivo A afecta la velocidad de reacción

v (L/min)	1	6	24
C_A (mmol/L)	4	20	50

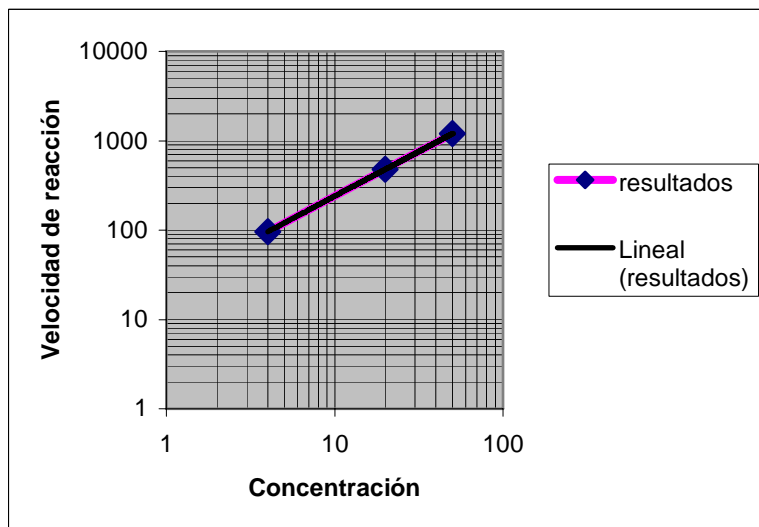
Solución

El sistema es de densidad constante porque es líquido

$$\tau_m = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A} \Rightarrow -r_A = \frac{C_{A0} - C_A}{\tau_m} \quad \therefore \quad -r_A = \frac{(100 - C_A)v_0}{V}$$

v (L/min)	1	6	24
C_A (mmol/L)	4	20	50
$-r_A$	96	480	1200

$$-r_A = k C_A^n \Rightarrow \ln(-r_A) = \ln k + n \ln C_A$$



$$n = \frac{\ln 1200 - \ln 96}{\ln 50 - \ln 4} = 1 \quad \therefore \quad k = \frac{C_A^1}{-r_A} = \frac{50}{1200} = 0,0417 \text{ min}^{-1}$$

$$-r_A = 0,0417 C_A \frac{\text{mmol}}{\text{L min}}$$

Problema 5.21 (p.116)

Se está planeando operar un reactor discontinuo para convertir A en R mediante una reacción en fase líquida con la estequiometría $A \rightarrow R$, cuya velocidad de reacción se muestra en la tabla siguiente

C_A (mol/L)	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	1,0	1,3	2,0
$-r_A$ (mol/Lmin)	0,1	0,3	0,5	0,6	0,5	0,25	0,1	0,06	0,05	0,045	0,042

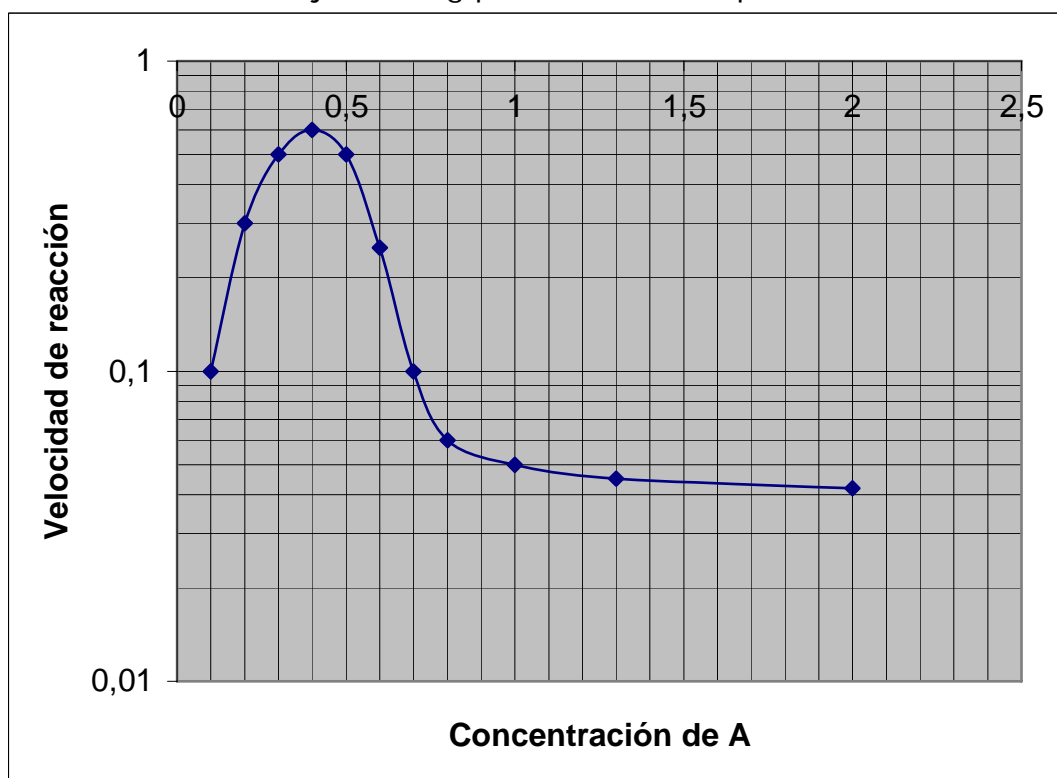
¿Qué tiempo debe reaccionar cada templa para que la concentración caiga desde $C_{A0} = 1,3$ mol/L hasta $C_{Af} = 0,3$ mol/L?

Solución

Sistema de densidad constante porque es líquido

$$t = \int_{C_{Af}}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{-r_A} = \int_{0,3}^{1,3} \frac{dC_A}{-r_A} \approx \frac{\Delta C_A}{2} \left\{ \frac{1}{-r_{A0}} + \frac{1}{-r_{Af}} + \sum_{i=1}^{f-1} \frac{1}{-r_{Ai}} \right\}$$

Se grafica $-r_A$ vs C_A para completar los datos entre $C_A = 0,8$ hasta $C_A = 1,3$ mol/L. Se utiliza un eje semilog para facilitar la representación



C_A (mol/L)	0,8	0,9	1,0	1,1	1,2	1,3
$-r_A$ (mol/Lmin)	0,06	0,053	0,05	0,0475	0,046	0,045

$$t = \frac{0,1(10)}{2} \left\{ \frac{1}{5} + \frac{1}{0,45} + \left[\frac{1}{6} + \frac{1}{5} + \frac{1}{2,5} + \frac{1}{1} + \frac{1}{0,6} + \frac{1}{0,53} + \frac{1}{0,5} + \frac{1}{0,475} + \frac{1}{0,46} \right] \right\} = 12,6 \text{ min}$$

Problema 5.22 (p. 116)

Para la reacción del problema 5.21, qué tamaño de reactor de flujo en pistón se requerirá para el 80 % de conversión de una corriente de 1000 mol de A/h con $C_{A0} = 1,5$ mol/L

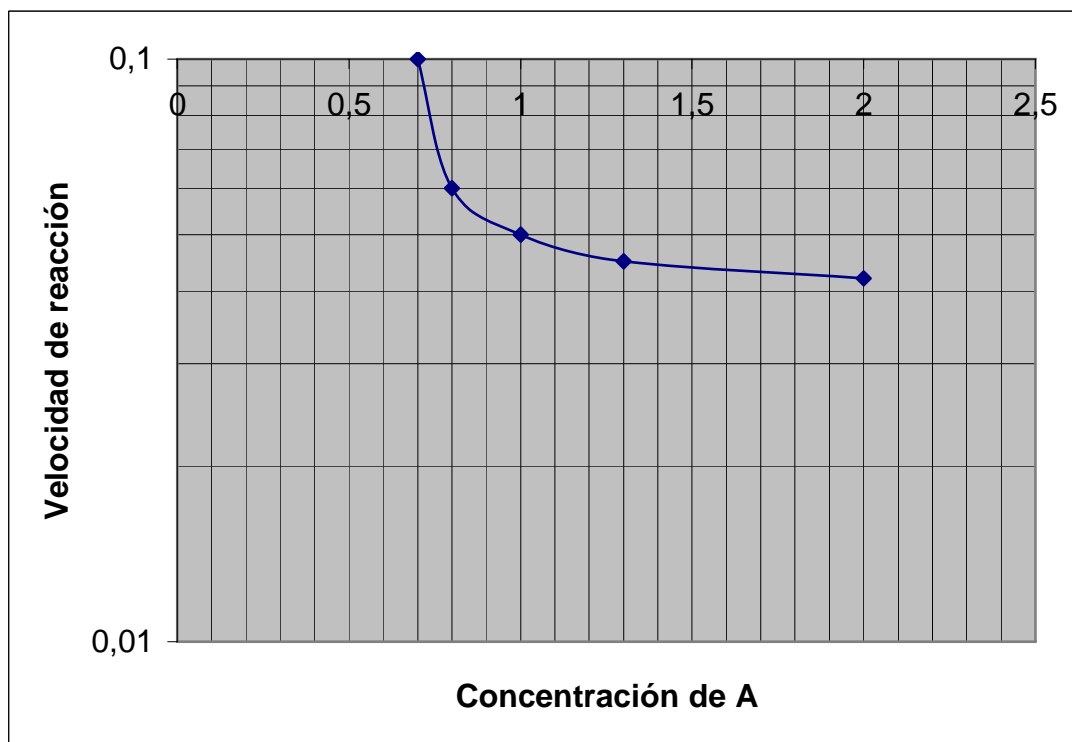
Solución

La densidad es constante y $C_{Af} = C_{A0} (1 - X_A) = 1,5 (1 - 0,8) = 0,3$ mol/L

$$\tau_p = \int_{C_{Af}}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{-r_A} = \int_{0,3}^{1,5} \frac{dC_A}{-r_A} = \int_{0,3}^{1,3} \frac{dC_A}{-r_A} + \int_{1,3}^{1,5} \frac{dC_A}{-r_A}$$

$$\int_{0,3}^{1,3} \frac{dC_A}{-r_A} = 12,8 \text{ min} \quad (\text{del problema 5.21})$$

Se toman valores del gráfico del problema 5.21. Se reproduce ampliada la parte del gráfico necesaria



C_A (mol/L)	1,3	1,4	1,5
$-r_A$ (mol/L min)	0,045	0,0445	0,044

$$\int_{1,3}^{1,5} \frac{dC_A}{-r_A} \approx \frac{0,1(10)}{2} \left\{ \frac{1}{0,45} + \frac{1}{0,44} + 2 \left(\frac{1}{0,445} \right) \right\} = 4,5 \text{ min}$$

$$\therefore \tau_p = 12,8 + 4,5 = 17,3 \text{ min}$$

Problema 5.23 (p. 117)

- a) Para la reacción del problema 5.21, qué tamaño de reactor de mezcla completa se requiere para obtener 75 % de conversión de una corriente de 1000 mol de A/h con $C_{A0} = 1,2$ mol/L
- b) Repita el inciso a) con la modificación de que la alimentación se duplica , o sea 2000 mol de A/h con $C_{A0} = 1,2$ mol/L
- c) Repita el inciso a) con la modificación de que $C_{A0} = 2,4$ mol/L, tratando 1000 mol de A/h y $C_{Af} = 0,3$ mol/L

Solución

a)

$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_A}{-r_{Af}}$$

$$C_{Af} = 1,2(1 - 0,75) = 0,3 \text{ mol / L} \quad \Rightarrow \quad -r_{Af} = 0,5 \text{ mol / l min}$$

$$\tau_m = \frac{V}{v_0} = \frac{1,2(0,75)}{0,5} = 1,8 \text{ min}$$

$$V = v_0 \tau_m = \frac{F_{A0} \tau_m}{C_{A0}} = \frac{1,8(1000)}{1,2} = 1500 \text{ L}$$

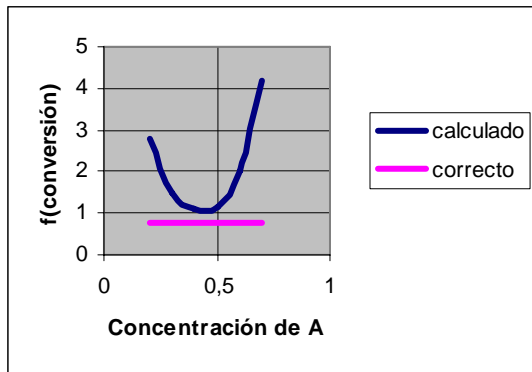
b)

Suponiendo que el volumen sigue siendo 1500 L y que lo que varía es X_A

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{X_{Af}}{-r_{Af}} = \frac{1500}{2000} = 0,75$$

$$X_A = 1 - \frac{C_A}{C_{A0}}$$

C_{Af}	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	1,2
X_{Af}	0,83	0,75		0,58	0,5	0,417	1
$-r_{Af}$	0,3	0,5	0,6	0,5	0,25	0,1	0,046
$X_{Af}/-r_{Af}$	2,78	1,5	1,11	1,17	2	4,16	21.73



$X_{Af}/-r_{Af}$ nunca va a ser 0,75,
físicamente dice que con un τ
tan pequeño no ocurre la
reacción

Suponiendo que $X_A = 0,75$ y que el volumen requerido varía

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{X_{Af}}{-r_{Af}} = \frac{0,75}{0,5} = 1,5$$

$$V = 1,5(2000) = 3000 \text{ L}$$

c)

$$X_A = 1 - \frac{C_A}{C_{A0}} = 1 - \frac{0,3}{2,4} = 0,875$$

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{X_{Af}}{-r_{Af}} = \frac{0,875}{0,5} = 1750 \text{ L}$$

Problema 5.24 (p. 117)

Un hidrocarburo gaseoso A de alto peso molecular es alimentado continuamente a un reactor de mezcla completa que se calienta a altas temperaturas para provocar el craqueo térmico (reacción homogénea gaseosa) a materiales de más bajo peso molecular, colectivamente llamado R, mediante una estequiometría aproximada de $A \rightarrow 5 R$. Cambiando la velocidad de alimentación se obtuvieron diferentes extensiones de craqueo como se muestra

F_{A0} (mmol/h)	300	1000	3000	5000
C_{A0} (mmol/L)	16	30	50	60

El volumen interno vacío del reactor es 0,1 L y a la temperatura de alimentación la concentración de A es $C_{A0} = 100$ mmol/L. Halle la ecuación que representa la reacción de craqueo

Solución

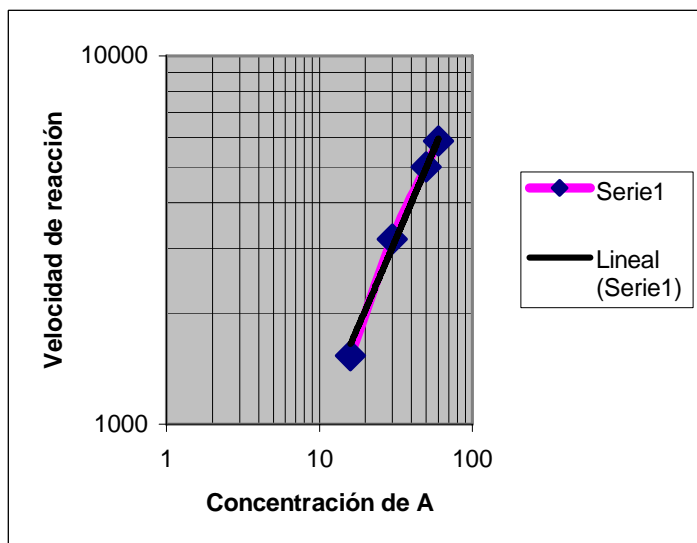
Sistema de densidad variable porque es gaseoso y varía F_{total}

$$\tau_m = \frac{V}{v_0} = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A} \Rightarrow -r_A = \frac{v_0 C_{A0} X_A}{V} = \frac{F_{A0} X_A}{V} = 10 F_{A0} X_A$$

$$X_A = \frac{1 - \frac{C_A}{C_{A0}}}{1 + \varepsilon_A \frac{C_A}{C_{A0}}} \quad y \quad \varepsilon_A = \frac{(5-1)}{1}(1) = 4$$

F_{A0}	300	1000	3000	5000
C_A	16	30	50	60
X_A	0,512	0,318	0,167	0,118
$-r_A = 10 F_{A0} X_A$	1536,6	318,8	5000	5882,4

$$-r_A = k C_A^n \Rightarrow \ln(-r_A) = \ln k + n \ln C_A$$



$$n = \frac{\ln 5000 - \ln 1536,6}{\ln 50 - \ln 16} = 1,035 \approx 1$$

$$k = \frac{C_A}{-r_A} = \frac{50}{5000} = 0,01$$

$$-r_A = 0,01 C_A$$

Problema 5.25 (p. 117)

La descomposición en fase acuosa de A es estudiada en un reactor de mezcla completa. Los resultados de la tabla P.5.25 fueron obtenidos en corridas en estado estacionario. ¿Qué tiempo de residencia se requiere para obtener 75 % de conversión del reactivo de una alimentación con $C_{A0} = 0,8$ mol/L

C_{Ae}	2,00	2,00	2,00	1,00	1,00	0,48	0,48	0,48
C_{As}	0,65	0,92	1,00	0,56	0,37	0,42	0,28	0,20
\bar{t} (s)	300	240	250	110	360	24	200	560

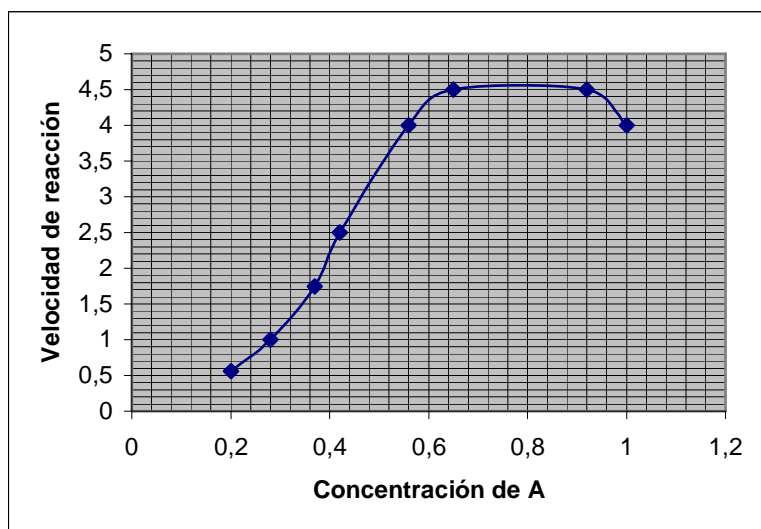
Solución

El sistema es de densidad constante, así que $\bar{t} = \tau$

$$\tau_m = \frac{C_{Ae} - C_{As}}{-r_A} \Rightarrow -r_A = \frac{C_{Ae} - C_{As}}{\tau_m}$$

C_{As}	0,65	0,92	1,00	0,56	0,37	0,42	0,28	0,20
$-r_A (10^3)$	4,5	4,5	4	4	1,75	2,5	1	0,56

Se grafican estos valores para obtener los valores de $-r_A$ vs C_A necesarios



C_{Af}	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
$-r_A (10^3)$	0,56	1,1	2,1	3,4	4,2	4,6	4,8

$$\tau_p \approx \frac{0,1(10^3)}{2} \left\{ \frac{1}{0,56} + \frac{1}{4,8} + 2 \left[\frac{1}{1,1} + \frac{1}{2,1} + \frac{1}{3,4} + \frac{1}{4,2} + \frac{1}{4,6} \right] \right\} = 313 \text{ s}$$

Problema 5.26

Repita el problema previo; pero para un reactor de mezcla completa

Solución

$$\tau_m = \frac{C_{A0} - C_{Af}}{-r_{Af}} = \frac{0,8 - 0,2}{0,56(10^{-3})} = 1071,4 \text{ s} = 0,298 \text{ h}$$

Problema 5.28 (p. 118)

En un reactor discontinuo que opera a volumen constante y 100°C se obtuvieron los siguientes datos de la descomposición del reactivo gaseoso A

t (s)	0	20	40	60	80	100	140	200	260	330	420
p _A (atm)	1,00	0,80	0,68	0,56	0,45	0,37	0,25	0,14	0,08	0,04	0,02

La estequiometría de la reacción es $2 A \rightarrow R + S$

¿Qué tamaño de reactor de flujo en pistón (en L) operando a 1 atm puede tratar 100 mol de A/h en una corriente que contiene en 20 % de inertes para obtener 95 % de conversión de A

Solución

El sistema es de densidad constante, tanto en el reactor discontinuo como en el de flujo en pistón porque $N_{\text{total}} = F_{\text{total}} = \text{constante}$

$$-r_A = kC_A^n$$

Si es de primer orden

$$kt = -\ln(1 - X_A)$$

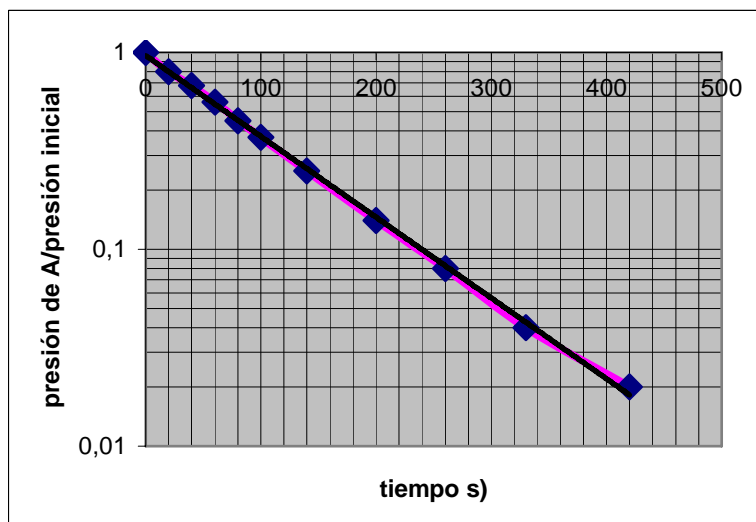
$$X_A = 1 - \frac{C_A}{C_{A0}}$$

$$C_A = \frac{p_A}{RT}$$

$$X_A = 1 - \frac{p_A}{p_{A0}} \Rightarrow 1 - X_A = \frac{p_A}{p_{A0}}$$

$$kt = \ln \frac{p_{A0}}{p_A}$$

Se grafica t vs p_A/p_{A0} y si da línea recta quiere decir que es de 1^{er} orden



Luego la reacción es de primer orden

$$k = \frac{-\ln(1 - X_A)}{t} = \frac{-\ln \frac{p_A}{p_{A0}}}{t} = \frac{\ln 0,8}{20} = 0,01116 s^{-1}$$

$$-r_A = 0,01116 C_A$$

Para el reactor de flujo en pistón se utiliza la ecuación 5.23 (p. 103)

$$k\tau_p = k \frac{V}{v_0} = -\ln(1 - X_A)$$

$$V = -\frac{v_0}{k} \ln(1 - X_A)$$

$$v_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = \frac{F_{A0} T_0 R}{p_{A0}} = \frac{100 \frac{mol}{h} (100 + 273)(0,082)}{1 atm [0,8]} = 3823,25 \frac{L}{h} \left(\frac{1h}{3600s} \right) = 1,06 \frac{L}{s}$$

$$V = \frac{1,06 \ln(1 - 0,95)}{0,01116} = 284,54 L$$

Problema 5.29 (p. 119)

Repita el problema previo; pero para un reactor de mezcla completa

Solución

$$\tau_m = \left(\frac{C_{A0} X_A}{-r_A} \right) = \left(\frac{C_{A0} X_A}{k C_{A0} (1 - X_A)} \right) = \frac{0,95}{0,01116(1 - 0,95)} = 1702,51 s$$

$$V = v_0 \tau_m = 1,06(1702,51) = 1804 L$$

Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría

Facultad de Ingeniería Química

*Solución de los Problemas Propuestos del
Chemical Engineering Science, O. Levenspiel,
Tercera Edición*

1999

Mercedes Rodríguez Edreira

2006

**Instituto Superior Politécnico José Antonio
Echeverría**

Facultad de Ingeniería Química

**Solución de los Problemas Propuestos del
Chemical Engineering Science, O. Levenspiel,
Tercera Edición
1999**

Mercedes Rodríguez Edreira

2006

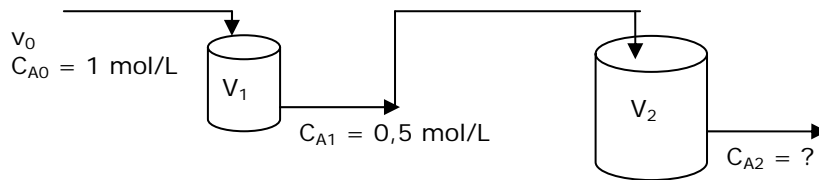
**C
A
P
Í
T
U
L
O

6**

Problema 6.1 (p. 147)

Una corriente de un reactivo líquido (1 mol/L) pasa a través de reactores de mezcla completa en serie. La concentración de A a la salida del primer reactor es 0,5 mol/L. Halle la concentración de A a la salida del segundo reactor. La reacción es de segundo orden con respecto a A y $V_2/V_1 = 2$

Solución



Sistema de densidad constante porque es líquido

$$\tau_1 = \frac{V_1}{v_0} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{(-r_A)_1} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{kC_{A1}^2} = \frac{1 - 0,5}{k(0,5)^2} = 2$$

$$k\tau_1 = 2$$

$$\tau_2 = \frac{V_2}{v_0} = \frac{2V_1}{v_0} = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{(-r_A)_2} = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{kC_{A2}^2}$$

$$k\tau_2 = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{C_{A2}^2} = 4$$

$$4C_{A2}^2 + C_{A2} - 0,5 = 0$$

$$C_{A2} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 4(4)(-0,5)}}{2(4)}$$

$$C_{A2} = 0,25$$

Problema 6.2 (p. 147)

Una corriente acuosa que contiene una sustancia radioactiva fluye de forma continua en un tanque de mezcla completa, de forma tal que se le proporciona tiempo a la sustancia radioactiva para que se transforme en residual no dañino. En estas condiciones de operación la actividad de la corriente de salida es 1/7 de la corriente de salida. Esto no está mal; pero nos gustaría que fuera un poco mejor aún.

Una de las secretarias de nuestra oficina sugiere que se inserte un deflector en el tanque de forma que se comporte como 2 tanques en serie. ¿Piensa que esto ayudaría? Si no diga por qué, si sí, calcule la actividad de la corriente de salida comparada con la de entrada.

Solución

Si $-r_A = k C_A^n$ y $n > 0$ sí es conveniente

Supongamos que $-r_A = k C_A$ y que la actividad es proporcional a la concentración

$$\frac{C_{A1}}{C_{A0}} = \frac{\text{Actividad de salida}}{\text{Actividad de entrada}} = \frac{1}{7} \quad \Rightarrow \quad \frac{C_{A0}}{C_{A1}} = 7$$

$$\tau_1 = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{k C_{A1}}$$

$$k \tau_1 = \frac{C_{A0}}{C_{A1}} - 1 = 7 - 1 = 6$$

Si divido en 2 el tanque $V' = V/2$

$$k \tau_1' = k \tau_2' = \frac{k \tau_1}{2} = 3$$

$$\frac{C_{A0}}{C_{A1}} = k \tau_1' + 1 = 3 + 1 = 4$$

$$\frac{C_{A1}}{C_{A2}} = k \tau_2' + 1 = 3 + 1 = 4$$

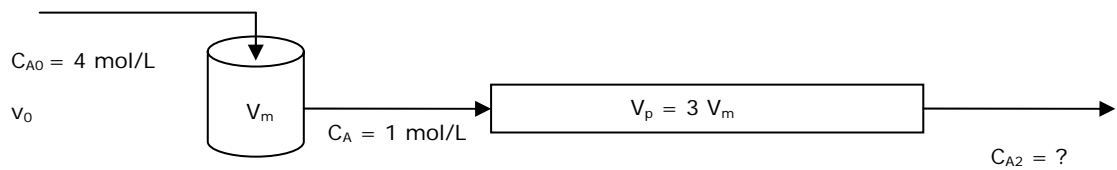
$$\frac{C_{A0}}{C_{A1}} \frac{C_{A1}}{C_{A2}} = \frac{C_{A0}}{C_{A2}} = 4(4) = 16 \quad \Rightarrow \quad \frac{C_{A2}}{C_{A0}} = \frac{1}{16}$$

La radioactividad de salida será 1/16 de la de entrada

Problema 6.3 (p. 147)

Una corriente de reactivo en solución acuosa (4 mol/L) pasa a través de un reactor de mezcla completa seguido por un reactor de flujo en pistón. Halle la concentración de salida del reactor de flujo en pistón, si la concentración en el tanque de mezcla completa es de 1 mol/L. La reacción es de segundo orden con respecto a A y el volumen del pistón es 3 veces el del mezcla.

Solución



Sistema de densidad constante porque es líquido

$$\tau_m = \frac{V_m}{v_0} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{-r_A} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{kC_A^2} = \frac{4-1}{k(1)^2} = \frac{3}{k}$$

$$k\tau_m = 3$$

$$\tau_p = \frac{V_p}{v_0} = \frac{3V_m}{v_0} = \int_{C_{A2}}^{C_{A1}} \frac{dC_A}{-r_A} = \int_{C_{A2}}^{C_{A1}} \frac{dC_A}{kC_A^2} = \frac{1}{k} \int_{C_{A2}}^{C_{A1}} \frac{dC_A}{C_A^2} = \frac{1}{k} \int_{C_{A2}}^{C_{A1}} C_A^{-2} dC_A = \frac{1}{k} \left(\frac{C_A^{-1}}{-1} \right) \Big|_{C_{A2}}^{C_{A1}}$$

$$k\tau_p = k \frac{3V_m}{v_0} = 3(3) = 9 = \frac{1}{C_{A2}} - \frac{1}{C_{A1}}$$

$$\frac{1}{C_{A2}} = 9 - \frac{1}{1}$$

$$C_{A2} = 0,125 \text{ mol/L}$$

Problema 6.4 (p. 147)

El reactivo A ($A \rightarrow R$, $C_{A0} = 26 \text{ mol/m}^3$) pasa a través de 4 tanques iguales en serie en estado estacionario ($\tau_{\text{total}} = 2 \text{ min}$). Cuando se alcanzó el estado estacionario la concentración de A era 11, 5, 2 y 1 mol/m^3 en las 4 unidades. Para esta reacción qué $\tau_{\text{pistón}}$ debe utilizarse para reducir C_A desde $C_{A0} = 26$ hasta $C_{Af} = 1 \text{ mol/L}$

Solución

El sistema es de densidad constante porque no varía el flujo molar total

$$\tau_m = \tau_{m1} = \tau_{m2} = \tau_{m3} = \tau_{m4} = \frac{2}{4} = 0,5$$

$$\tau_{m1} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{(-r_A)_1} = \frac{26 - 11}{(-r_A)_1} = \frac{15}{(-r_A)_1} \Rightarrow (-r_A)_1 = \frac{15}{0,5} = 30 \text{ mol/m}^3 \text{ min}$$

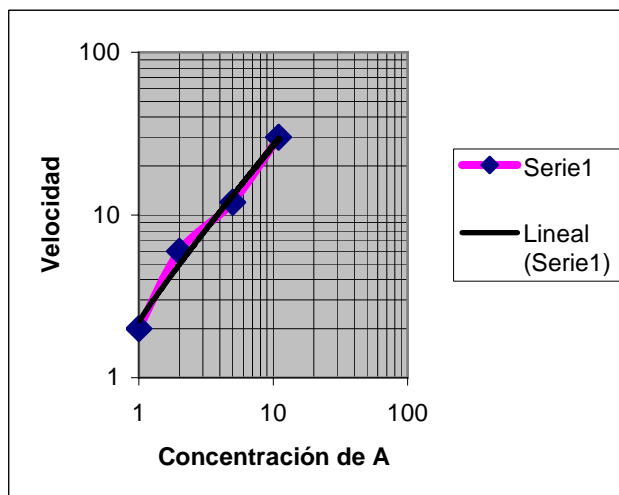
$$\tau_{m2} = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{(-r_A)_2} = \frac{11 - 5}{(-r_A)_2} = \frac{6}{(-r_A)_2} \Rightarrow (-r_A)_2 = \frac{6}{0,5} = 12 \text{ mol/m}^3 \text{ min}$$

$$\tau_{m3} = \frac{C_{A2} - C_{A3}}{(-r_A)_3} = \frac{5 - 2}{(-r_A)_3} = \frac{3}{(-r_A)_3} \Rightarrow (-r_A)_3 = \frac{3}{0,5} = 6 \text{ mol/m}^3 \text{ min}$$

$$\tau_{m4} = \frac{C_{A3} - C_{A4}}{(-r_A)_4} = \frac{2 - 1}{(-r_A)_4} = \frac{1}{(-r_A)_4} \Rightarrow (-r_A)_4 = \frac{1}{0,5} = 2 \text{ mol/m}^3 \text{ min}$$

$C_A \text{ (mol/m}^3\text{)}$	11	5	2	1
$-r_A \text{ (mol/m}^3\text{min)}$	30	12	6	2

$$\text{Si supongo que } (-r_A) = k C_A^n \Rightarrow \ln(-r_A) = \ln k + n \ln C_A$$



$$k = 2$$

$$n = \frac{\ln 30 - \ln 2}{\ln 11 - \ln 1} = 1,129 \approx 1$$

$$-r_A = 2 C_A$$

$$\tau_p = -\frac{1}{k} \ln(1 - X_A) = \frac{1}{k} \ln \frac{C_{A0}}{C_A} = \frac{1}{2} \ln \frac{26}{1} = 1,63 \text{ min}$$

Problema 6.5 (p.147)

Se había planeado originalmente disminuir la actividad de un gas que contiene el radioactivo X-133 (tiempo medio de vida = 14 min) pasando por 2 tanques de retención en serie, los 2 perfectamente mezclados y teniendo un tiempo de residencia de 2 semanas en cada tanque. Ha sido sugerido que se reemplacen los 2 tanques con una tubería larga (suponga flujo en pistón). ¿Qué tamaño debe tener esta tubería comparado con los tanques agitados originales y qué tiempo de residencia requiere la misma para alcanzar la conversión original.

Solución

Suponiendo densidad constante y reacción de primer orden

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

$$k = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} = \frac{\ln 2}{14} = 0,0495 \text{ min}^{-1}$$

$$\tau_{m1} = \tau_{m2} = 14 \text{ días} = 14 \text{ días} \left(\frac{24 \text{ h}}{\text{día}} \right) \left(\frac{60 \text{ min}}{\text{h}} \right) = 20160 \text{ min}$$

$$X_{A1} = \frac{k \tau_{m1}}{1 + k \tau_{m1}} = \frac{0,0495(20160)}{1 + 0,0495(20160)} = 0,998999131$$

$$X_{A2} = \frac{k \tau_{m1} + X_{A1}}{1 + k \tau_{m2}} = \frac{0,0495(20160) + 0,998999131}{1 + 0,0495(20160)} = 0,999998998$$

$$\tau_p = -\frac{1}{k} \ln(1 - X_A) = -\frac{1}{0,0495} \ln(1 - 0,999998998) = 13,8145 \text{ min}$$

$$\frac{V_p}{V_{N=2}} = \frac{\tau_p}{\tau_{N=2}} = \frac{13,8145}{2(20160)} = 0,000342$$

$$V_p = 0,000342(V_{m1} + V_{m2})$$

Problema 6.6 (p.148)

El reactivo A puro a 100°C reacciona con la estequiometría $2 A \rightarrow R$ en un reactor discontinuo a volumen constante como sigue

t (s)	0	20	40	60	80	100	120	140	160
p _A (atm)	1	0,90	0,80	0,56	0,32	0,18	0,08	0,04	0,02

¿Qué tamaño debe tener un reactor de flujo en pistón que opere a 100°C y 1 atm para procesar 100 mol A/h en una corriente que contiene 20% de inertes para obtener $X_A = 0,75$?

Solución

El sistema es de densidad constante porque el reactor discontinuo opera a volumen constante.

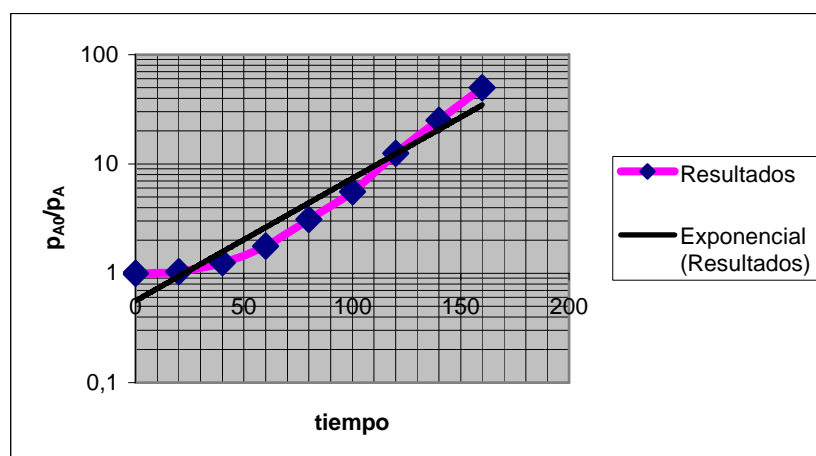
Suponiendo cinética de primer orden

$$kt = -\ln \frac{C_{A0}}{C_A}$$

$$C_A = \frac{P_A}{RT} \quad y \quad C_{A0} = \frac{P_{A0}}{RT}$$

$$kt = -\ln \frac{P_{A0}}{P_A}$$

t (s)	0	20	40	60	80	100	120	140	160
p _{A0} /p _A	1	1,04	1,25	1,78	3,125	5,55	12,5	25	50

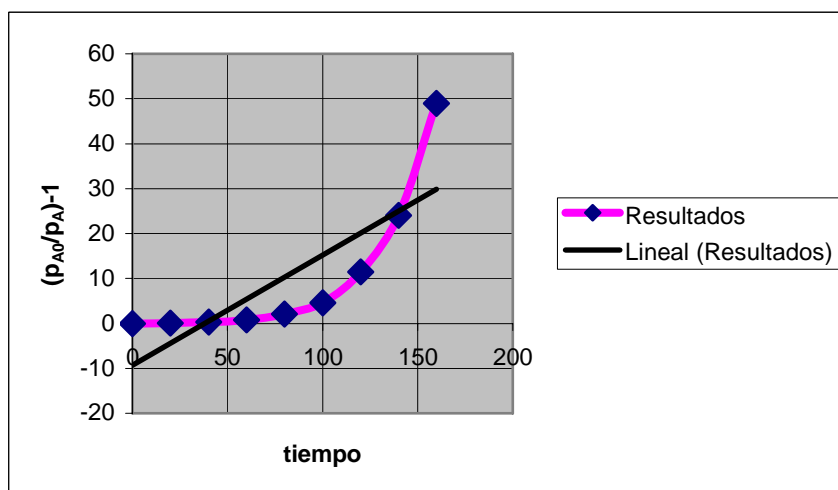


Del gráfico anterior se ve que no hay ajuste porque no da línea recta, así que la reacción no es de primer orden.

Suponiendo segundo orden

$$ktC_{A0} = \frac{C_{A0} - C_A}{C_A} = \frac{p_{A0} - p_A}{p_A}$$

t (s)	0	20	40	60	80	100	120	140	160
(p _{A0} /p _A) - 1	0,042	0,25	0,786	4	4	4,556	11,5	24	49

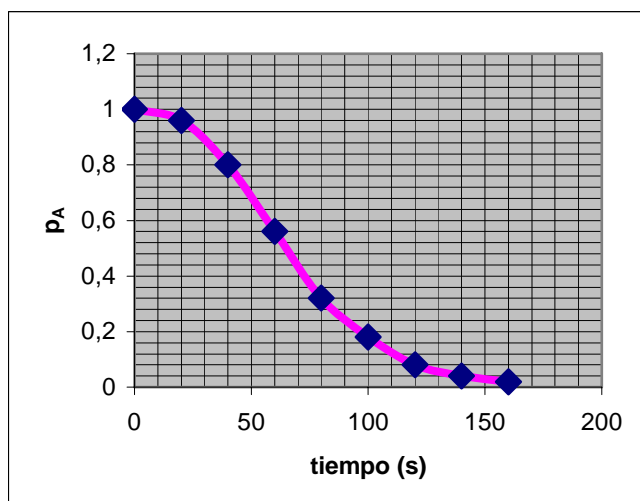


Tampoco ajusta segundo orden. Puede probarse otras ecuaciones cinéticas; pero es bastante poco probable encontrar un resultado positivo y además muy trabajoso.

Vamos a utilizar el método diferencial

$$-r_A = \frac{dC_A}{dt}$$

dC_A/dt es la pendiente de la tangente a la curva de C_A vs t en un punto dado. Los datos que tenemos es de p_A vs t , así que vamos a construir este gráfico, trazar tangentes en diferentes puntos y buscar las pendientes de las tangentes. Los valores así obtenidos divididos por RT nos darán el valor de la velocidad en cada punto.

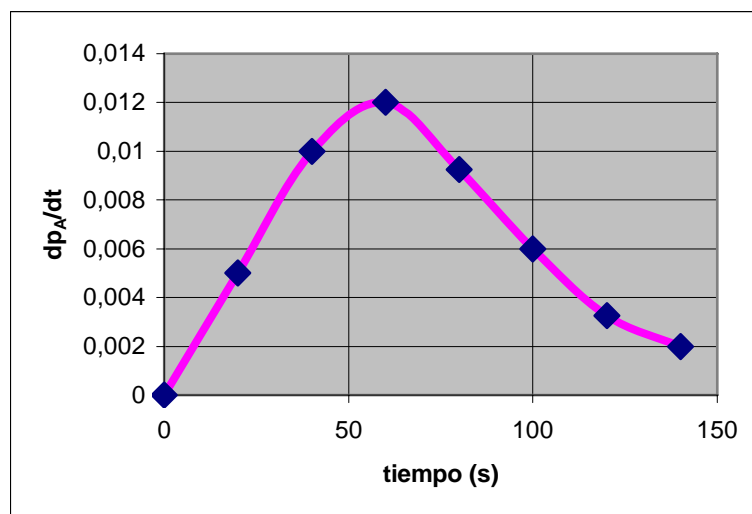


t (s)	Δt	Δ p _A	(Δ p _A /Δt) 10 ³	P _A
20	20	0,960 – 0,860	5,00	0,96
40	20	0,800 – 0,600	10,00	0,8
60	20	0,560 – 0,320	12,00	0,56
80	20	0,320 – 0,135	9,25	0,32
100	20	0,180 – 0,060	6,00	0,18
120	20	0,080 – 0,015	3,25	0,08
140	20	0,040 – 0,000	2,00	0,04

$$-\frac{\Delta p_A}{\Delta t} \approx \frac{dp_A}{dt} = RT(-r_A) = \text{constante}(-r_A)$$

$$-\frac{\Delta p_A}{\Delta t} \propto -r_A$$

Grafiquemos dp_A/dt vs t para ver cómo varía



Es obvio que no se podía ajustar ecuaciones cinéticas sencillas. Tampoco ajustará $-r_A = k C_A^n$; pero como ya tenemos valores de $-r_A$ se puede resolver la ecuación de diseño del pistón numéricamente.

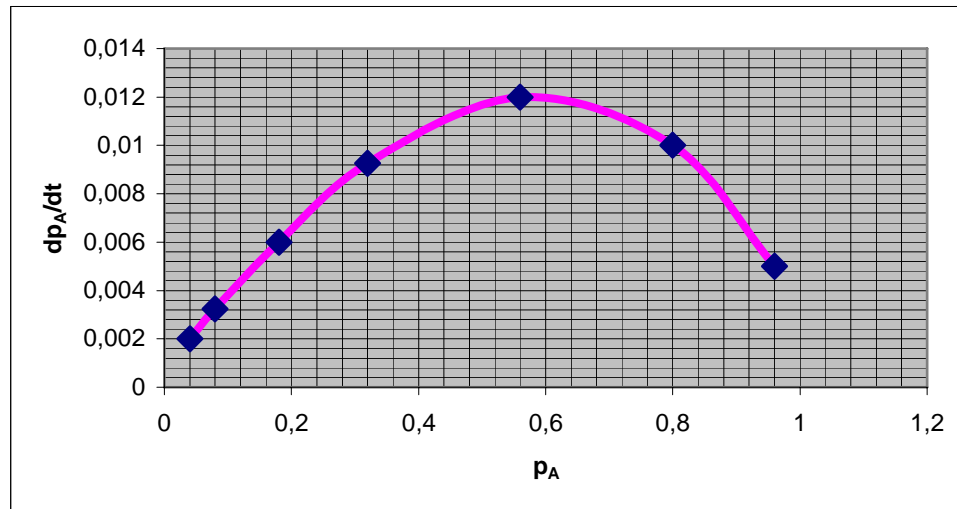
$$\tau_p = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} = \frac{P_{A0}}{RT_0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{\frac{1}{RT} \frac{dp_A}{dt}} = P_{A0} \int_0^{0,95} \frac{dX_A}{\frac{dp_A}{dt}} = \int_0^{0,95} \frac{dX_A}{\frac{dp_A}{dt}} \quad \text{porque } P_{A0} = 1 \text{ atm}$$

τ_p es el área bajo la curva de $\frac{1}{\frac{dp_A}{dt}}$ vs X_A entre 0 y 0,95.

Método de solución de la ecuación de diseño

- Se calcula para valores de X_A predeterminados la p_A correspondiente
- Para cada valor de p_A obtenido se va al gráfico de dp_A/dt vs p_A y se determina qué valor de dp_A/dt le corresponde
- Con los valores de dp_A/dt vs X_A se resuelve la ecuación de diseño

Comencemos por graficar dp_A/dt vs p_A utilizando los valores que aparecen en la tabla anterior



Para calcular p_A , hay que tener en cuenta que en el pistón la densidad es variable porque varía el flujo molar total

$$C_A = \frac{C_{A0}(1 - X_A)}{1 + \varepsilon_A X_A} \quad \Rightarrow \quad p_A = \frac{p_{A0}(1 - X_A)}{1 + \varepsilon_A X_A}$$

$$\varepsilon_A = \left(\frac{1-2}{2} \right) 0.8 = -0.4$$

$$p_A = \frac{0.8(1 - X_A)}{1 - 0.4X_A}$$

X_A	0	0,2	0,4	0,6	0,8	0,9	0,95
p_A	0,8	0,696	0,571	0,421	0,235	0,125	0,065
dp_A/dt	0,01	0,0112	0,012	0,0109	0,0073	0,0046	0,0027

$$\tau_p = \frac{.2}{2} \left[\frac{1}{.01} + \frac{1}{.0073} + 2 \left(\frac{1}{.0112} + \frac{1}{.012} + \frac{1}{.0109} \right) \right] + \frac{.1}{2} \left(\frac{1}{.0073} + \frac{1}{.0046} \right) + \frac{.05}{2} \left(\frac{1}{.0046} + \frac{1}{.0027} \right)$$

$$\tau_p = 108,98 \text{ s}$$

$$V_p = \tau_p v_0$$

$$v_0 = \left(\frac{F_{A0}}{v_0} \right) = \frac{F_{A0}}{\frac{p_{A0}}{RT_0}} = \frac{100(0.082)(373)}{1} = 3058 \frac{L}{h} \left(\frac{1h}{3600s} \right) = 0.85 \text{ L/s}$$

$$V_p = 108,98(0.85) = 92,6 \text{ L}$$

Problema 6.7 (p. 148)

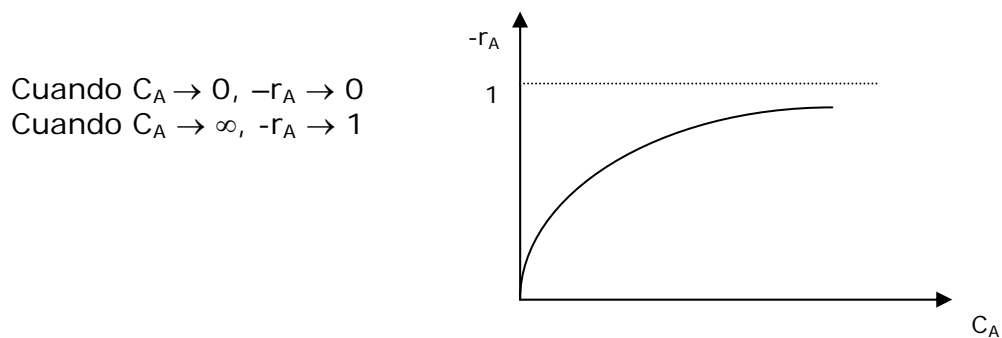
Se desea tratar 10 L/min de una alimentación líquida que contiene 1 mol de A/L y alcanzar $X_A = 0,99$. La estequiometría y la cinética de la reacción están dadas por

$$A \rightarrow R \quad -r_A = \frac{C_A}{0,2 + C_A} \frac{\text{mol}}{\text{L min}}$$

Sugiera un buen arreglo para hacer esto utilizando 2 tanques de mezcla completa y halle el tamaño de las unidades

Solución

El criterio de selección de reactores es trabajar con la máxima velocidad posible



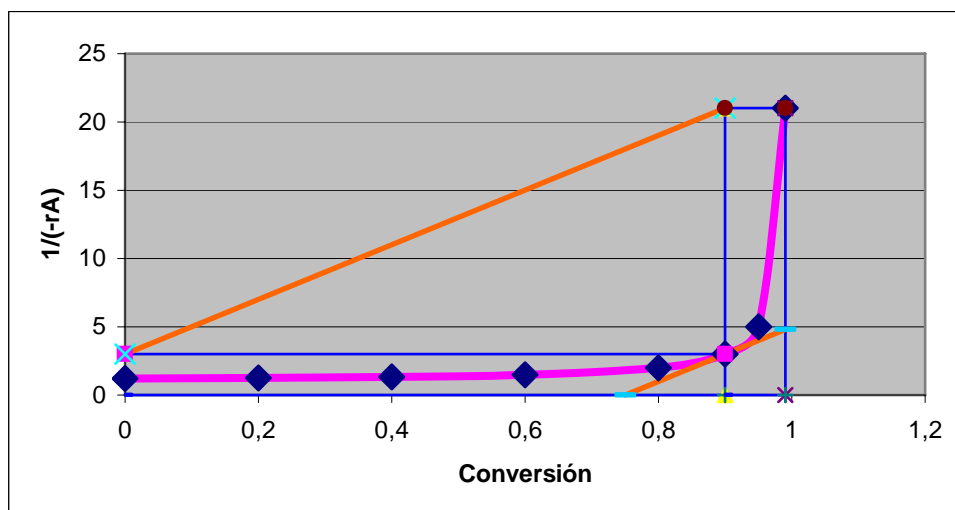
Deben colocarse en serie y por la forma de la curva el primero debe ser el mayor. Sistema de densidad constante

$$\tau_1 = \frac{C_{A0} X_{A1}}{(-r_A)_1} = \frac{X_{A1}}{(-r_A)_1} \quad y \quad \tau_2 = \frac{C_{A0} (X_{A2} - X_{A1})}{(-r_A)_2} = \frac{C_{A0} (0,99 - X_{A1})}{(-r_A)_{0,99}}$$

$$-r_A = \frac{C_{A0} (1 - X_A)}{0,2 + C_{A0} (1 - X_A)} = \frac{(1 - X_A)}{0,2 + (1 - X_A)} = \frac{1 - X_A}{1,2 - X_A}$$

Vamos a emplear el método de maximización de rectángulos que propone el texto

X_A	0	0,2	0,4	0,6	0,8	0,9	0,95	0,99
$-r_A$	0,83	0,8	0,75	0,67	0,5	0,33	0,2	0,0478
$1/(-r_A)$	1,20	1,25	1,33	1,5	2	3	5	21



$$\tau_1 = 1(0,9)(3) = 2,7 \text{ min}$$

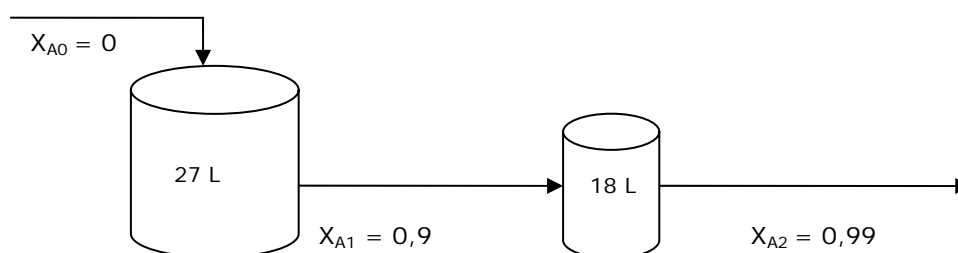
$$V_1 = \tau_1 v_0 = 2,7(10) = 27 \text{ L}$$

$$\tau_2 = 1(0,99 - 0,9)(21) = 1,89 \text{ min}$$

$$V_2 = \tau_2 v_0 = 1,89(10) = 19 \text{ L}$$

$$\tau_{total} = 2,7 + 1,89 = 4,59 \text{ min}$$

$$V_{total} = 27 + 19 = 36 \text{ L}$$



Comprobación

$$X_A = 0,88$$

$$\tau_1 = 1(0,88)(2,67) = 2,34 \text{ min}$$

$$\tau_2 = 1(0,99 - 0,88)(21) = 2,31 \text{ min}$$

$$\tau_{total} = 4,65 \text{ min}$$

$$X_A = 0,92$$

$$\tau_1 = 1(0,92)(3,5) = 3,22 \text{ min}$$

$$\tau_2 = 1(0,99 - 0,85)(21) = 1,47 \text{ min}$$

$$\tau_{total} = 4,69 \text{ min}$$

Problema 6.8 (p. 148)

Los siguientes datos sobre la reacción $A \rightarrow R$ fueron obtenidos en corridas cinéticas en estado estacionario efectuadas en un reactor de mezcla completa

τ (s)	60	35	11	20	11
C_{A0} (mmol/L)	50	100	100	200	200
C_A (mmol/L)	20	40	60	80	100

Halle el tiempo espacial requerido para tratar una alimentación con $C_{A0} = 100$ mmol/L y alcanzar 80 % de conversión

- En un reactor de flujo en pistón
- En un reactor de mezcla completa

Solución

Sistema de densidad constante porque no varía F_{total}

a)

$$X_A = 1 - \frac{C_A}{C_{A0\text{máx}}} = 1 - \frac{C_A}{200}$$
$$-r_A = \frac{C_{A0\text{máx}}(X_{A\text{ent}} - X_{A\text{sal}})}{\tau}$$

τ (s)	60	35	11	20	11
$X_{A\text{ent}}$	0,25	0,5	0,50	0	0
$X_{A\text{sal}}$	0,9	0,8	0,7	0,6	0,5
$-r_A$	1,083	0,857	1,818	3.000	4,545
C_A (mmol/L)	20	40	60	80	100

$$\tau_p = \int_{20}^{100} \frac{dC_A}{-r_A} \approx \frac{20}{2} \left[\frac{1}{1,083} + \frac{1}{4,545} + 2 \left(\frac{1}{0,857} + \frac{1}{1,818} + \frac{1}{1,083} + \frac{1}{1,083} + \frac{1}{3} \right) \right] = 52 \text{ s}$$

b)

$$\tau_m = \frac{C_{A0} - C_{Af}}{-r_A} = \frac{100 - 20}{1,083} = 73,87 \text{ s}$$

Problema 6.9 (p. 148)

En la actualidad se alcanza un 90 % de conversión de una corriente líquida ($n = 1$, $C_{A0} = 10 \text{ mol/L}$) que se alimenta a un reactor de flujo en pistón con recirculación de producto ($R = 2$). Si se elimina el reciclo, en cuánto disminuirá la velocidad de alimentación manteniendo el mismo % de conversión

Solución

Sistema de densidad constante porque es líquido

Si la reacción es de primer orden y es llevada a cabo isotérmicamente el reactor más eficiente es el de flujo en pistón, así que la velocidad de alimentación aumentará.

$$C_{Af} = C_{A0} (1 - X_{Af}) = 10 (1 - 0,9) = 1 \text{ mol/L}$$

$$\frac{k\tau_r}{R+1} = k \frac{V}{v_{0r}} = \ln \frac{C_{A0} + RC_{Af}}{(R+1)C_{Af}} \quad \text{ecuación 6.23 (p.138)}$$

$$k\tau_r = (2+1) \ln \frac{10+2(1)}{(2+1)1} = 4,159$$

$$k\tau_p = k \frac{V}{v_{0p}} = -\ln(1 - X_A) = -\ln(1 - 0,9) = 2,303 \quad \text{ecuación 5.21 (p.103)}$$

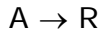
$$\frac{k \frac{V}{v_{0p}}}{k \frac{V}{v_{0r}}} = \frac{2,303}{4,159}$$

$$v_{0p} = 1,805 v_{0r}$$

El flujo aumenta 1,8 veces

Problema 6. 10 (p. 148)

Una alimentación acuosa conteniendo el reactivo A ($C_{A0} = 2 \text{ mol/L}$) entra en un reactor de flujo en pistón (10 L) que tiene posibilidades de recircular parte de la corriente que fluye. La estequiometría y la cinética de la reacción son:



$$-r_A = k C_A C_R \text{ mol/L min}$$

Se quiere alcanzar una conversión del 96 % deberíamos o no usar la corriente de reciclo. Si es así, qué valor de velocidad de flujo de reciclo se utilizaría para obtener la mayor velocidad de producción y qué flujo volumétrico podremos procesar

Solución

Sistema de densidad constante porque no varía el F_{total}

$$C_{Af} = C_{A0} (1 - X_{Af}) = 2 (1 - 0,96) = 0,08 \text{ mol/L}$$

$$C_R = C_{A0} (X_{Af}) = 2 X_A$$

X_A	0	0,05	0,1	0,2	0,4	0,6	0,8	0,96
C_R	0	0,1	0,2	0,4	0,8	1,2	1,6	1,92
C_A	2	1,9	1,8	1,6	1,2	0,8	0,4	0,08
$1/(-r_A)$	∞	5,26	2,7700	1,5625	1,042	1,042	1,5625	6,5104

Si se debe usar el reciclo porque cuando $X_A \rightarrow 0$, $1/(-r_A) \rightarrow \infty$

La razón de reciclo óptima es la que proporciona una $(\text{velocidad})^{-1}$ en la entrada igual a la media

Si suponemos $R = 1$

$$X_{A_{ent}} = \frac{R}{R+1} X_{Af} = \frac{1}{2} (0,96) = 0,48$$

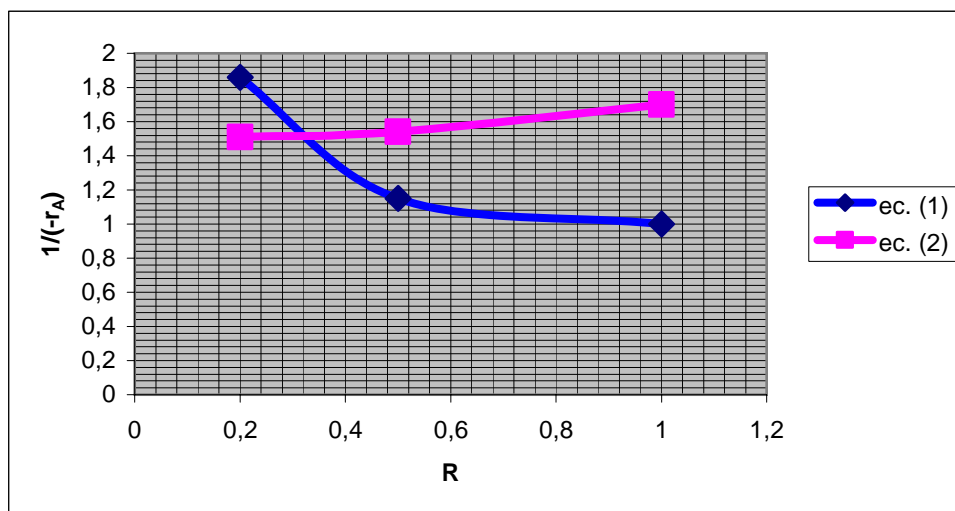
$$-r_A = C_{A0} (1 - X_A) C_{A0} X_A = C_{A0}^2 (1 - X_A) X_A = 4 X_A (1 - X_A)$$

$$\frac{1}{-r_A} = \frac{1}{4 X_A (1 - X_A)} \quad \text{ecuación (1)}$$

$$\frac{1}{-\bar{r}_A} = \frac{\int_{X_{A_{ent}}}^{0,96} \frac{dX_A}{4 X_A (1 - X_A)}}{0,96 - X_{A_{ent}}} = \frac{\frac{1}{4} \int_{X_{A_{ent}}}^{0,96} \frac{dX_A}{X_A (1 - X_A)}}{0,96 - X_{A_{ent}}} = -\frac{0,25}{0,96 - X_{A_{ent}}} \left\{ \ln \frac{1 - 0,96}{0,96} - \ln \frac{1 - X_{A_{ent}}}{X_{A_{ent}}} \right\}$$

$$\frac{1}{-\bar{r}_A} = -\frac{0,25}{0,96 - X_{A_{ent}}} \left\{ 3,1780 - \ln \frac{1 - X_{A_{ent}}}{X_{A_{ent}}} \right\} \quad \text{ecuación (2)}$$

R	$X_{A \text{ ent}}$	$1/(-r_A)_{\text{ent}}$ ec. (1)	$1/(-r_A)_{\text{ent}}$ ec. (2)
1,0	0,48	1	1,7
0,5	0,32	1,15	1,54
0,2	0,16	1,86	1,51



$R = 0,32$

Problema 6.11 (p. 149)

Considere la reacción autocatalítica $A \rightarrow R$ con $-r_A = 0,001 C_A C_R$ mol/L s. Se quiere procesar 1 L/s de una alimentación que contiene 10 mol de A/L hasta la mayor X_A posible en un sistema de 4 reactores de mezcla completa de 100L que se pueden conectar y alimentar como se desee. Haga un esquema de diseño y alimentación que usted propone y determine C_{Af} a partir de él.

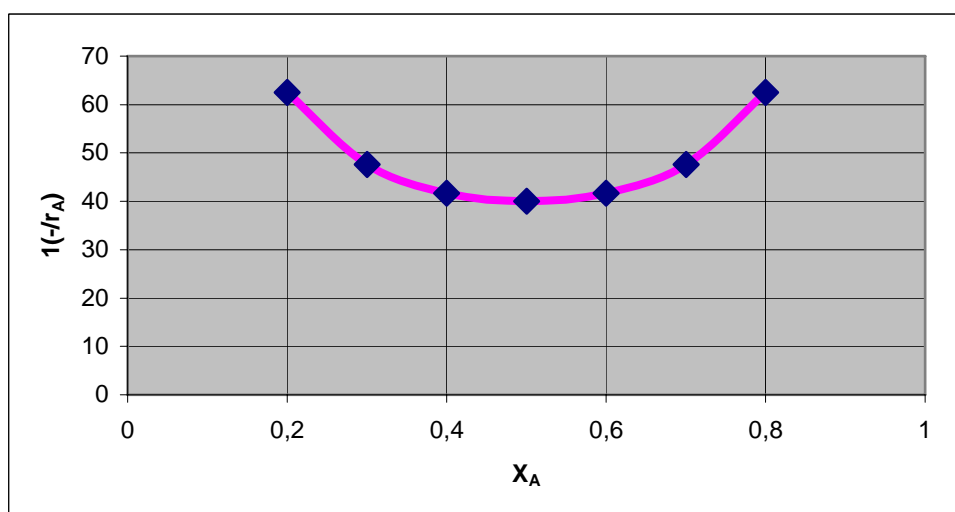
Solución

Sistema de densidad constante porque es isotérmico y no varía F_{total} .

$$-r_A = 0,001[10(1 - X_A)(10X_A)] = 0,1X_A(1 - X_A)$$

$$\frac{1}{-r_A} = \frac{10}{X_A(1 - X_A)}$$

X_A	0	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,8
$-r_A$	0	0,016	0,021	0,024	0,025	0,024	0,016
$1/(-r_A)$	∞	62,5	47,6	41,67	40	41,67	62,5



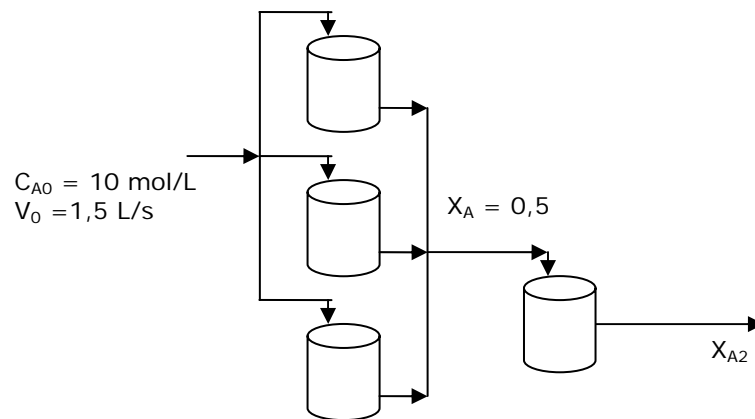
Lo mejor sería caer en $X_A = 0,5$ y de ahí seguir con un pistón

$$\tau_m = \frac{C_{A0}X_A}{-r_A} = \frac{C_{A0}X_A}{0,1X_A(1 - X_A)} = \frac{100}{1 - 0,5} = 200s$$

$$V_m = \tau_m v_0 = 200(1,5) = 300 L$$

Se necesitan 3 tanques en paralelo para procesar 1,5 L/s y tener una conversión a la salida de 0,5

La mejor variante debe ser



$$\tau_m = \frac{C_{A0}(X_{A2} - 0,5)}{0,1X_{A2}[1 - X_{A2}]} = \frac{100}{1,5}$$

$$X_A^2 + 0,5X_{A2} - 0,75 = 0$$

$$X_{A2} = \frac{-0,5 \pm \sqrt{0,5^2 - 4(1)(-0,75)}}{2(1)} = 0,65$$

La máxima conversión que se puede alcanzar con esos 4 reactores es 0,65

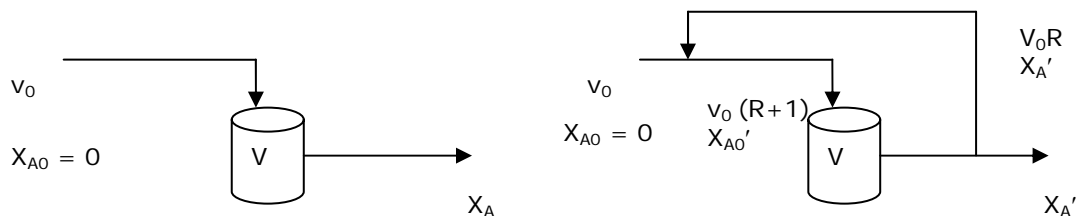
Problema 6.12 (p. 149)

Una reacción de primer orden en fase líquida es llevada a cabo en un reactor de mezcla completa con un 92 % de conversión. Se ha sugerido que una fracción de la corriente de producto, sin ningún tratamiento adicional sea recirculada. Si se mantiene constante la corriente de alimentación, en qué forma afectará eso la conversión.

Solución

No se afectará en nada la conversión porque no se afecta el nivel de concentraciones que existen en el tanque y por tanto la velocidad permanecerá constante.

Para demostrarlo supongamos una reacción de primer orden con $-r_A = k C_A$



Para un tanque de mezcla completa sin recirculación se tiene

$$\tau_m = \frac{V}{v_0} = \frac{C_{A0} X_A}{k C_{A0} (1 - X_A)} \quad \Rightarrow \quad X_A = \frac{k \tau_m}{1 + k \tau_m}$$

Para un tanque de mezcla completa con recirculación se tiene

$$\tau_m = \frac{V}{v_0(R+1)} = \frac{C_{A0}(X'_A - X'_{A0})}{k C_{A0}(1 - X'_A)}$$

$$k \tau_m = \frac{(X'_A - X'_{A0})(R+1)}{(1 - X'_A)}$$

Balance en la entrada de la recirculación

$$v_0 R X'_A + v_0(0) = v_0(R+1) X'_{A0} \quad \Rightarrow \quad X'_{A0} = \frac{R}{R+1} X'_A$$

$$k \tau_m = \frac{\left(X'_A - \frac{R}{R+1} X'_A \right) (R+1)}{(1 - X'_A)} = \frac{X'_A}{1 - X'_A} \quad \therefore \quad X'_A = X_A = \frac{k \tau_m}{1 + k \tau_m}$$

Problema 6.13 (p. 149)

Van a ser tratados 100 L/h de un fluido radioactivo que tiene un tiempo medio de vida de 20 h , pasándolos por 2 tanques de mezcla completa en serie de 40 000 L cada uno. Al pasar por el sistema cuál será el descenso de la actividad.

Solución

Suponiendo reacción de primer orden y densidad constante

$$\tau_{m1} = \tau_{m2} = \frac{V}{v_0} = \frac{40000}{100} = 400 \text{ h}$$

$$k = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} = \frac{\ln 2}{20} = 0,0346 \text{ h}^{-1}$$

$$X_{A1} = \frac{k\tau_{m1}}{1 + k\tau_{m1}} = \frac{0,0346(400)}{1 + 0,0346(400)} = 0,9327$$

$$X_{A2} = \frac{X_{A1} + k\tau_{m2}}{k\tau_{m2}} = \frac{0,9327 + 0,0346(400)}{0,0346(400)} = 0,9954$$

Problema 6.15 (p. 149)

Se investiga la cinética de la descomposición en fase acuosa de A en 2 tanques de mezcla completa en serie, teniendo el segundo el doble del volumen del primero. En estado estacionario con una concentración de A en la alimentación de 1 mol/L y un tiempo medio de residencia de 96 s en el primer reactor, la concentración de A en el mismo es 0,5 mol/L y en el segundo es 0,25 mol/L. Halle la ecuación cinética de la descomposición.

Solución

Sistema de densidad constante porque es líquido

$$\tau_m = \frac{C_{A0}(X_{A_{sal}} - X_{A_{ent}})}{-r_A} \quad \therefore \quad -r_A = \frac{C_{A0}(X_{A_{sal}} - X_{A_{ent}})}{\tau_m}$$

$$\bar{t} = \tau_m \text{ (densidad constante)}$$

$$\tau_{m1} = 96 \text{ s} \quad X_{A1} = 1 - \frac{C_{A1}}{C_{A0}} = 1 - \frac{0,5}{1} = 0,5 \quad -r_{A1} = \frac{1(0,5)}{96} = \frac{1}{192}$$

$$\tau_{m2} = 192 \text{ s} \quad X_{A2} = 1 - \frac{C_{A2}}{C_{A0}} = 1 - \frac{0,25}{1} = 0,75 \quad -r_{A2} = \frac{1(0,75 - 0,5)}{192} = \frac{0,25}{192}$$

$$-r_A = k C_A^n$$

C _A	0,5	0,25
-r _A	1/192	0,25/192

$$\frac{-r_{A1}}{-r_{A2}} = \left(\frac{kC_{A1}}{kC_{A2}} \right)^n \quad \Rightarrow \quad \frac{\frac{1}{192}}{\frac{0,25}{192}} = \left(\frac{0,5}{0,25} \right)^n = 2^n$$

$$4 = 2^n \quad \therefore \quad n = 2$$

$$-r_A = kC_A^n = kC_A^2$$

$$k = \frac{-r_A}{C_A^2} = \frac{\frac{1}{192}}{0,5^2} = \frac{0,02083}{s} \left(\frac{60 \text{ s}}{1 \text{ min}} \right) = 1,25 \frac{L}{mol \text{ min}}$$

$$-r_A = 1,25 C_A^2 \frac{mol}{L \text{ min}}$$

Problema 6.16 (p. 149)

Se desarrolló un esquema para investigar la cinética de la descomposición de A, usando un indicador colorimétrico que muestra en qué momento la concentración de A está por debajo de 0,1 mol/L. Se introduce una alimentación que contiene 0,6 mol de A/ L en el primero de 2 tanques de mezcla completa en serie, cada uno con 400 cm³. El cambio de color ocurre en el primer reactor cuando se alcanza el estado estacionario con un flujo de 10 cm³/min y en el segundo con un flujo de 50 cm³/min. Halle la ecuación de velocidad para la descomposición de A con esta información.

Solución

Corrida 1

$$\tau_{m1} = \frac{400}{10} = 40 = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{-r_{A1}} \quad \Rightarrow \quad -r_{A1} = \frac{0,6 - 0,1}{40} = 0,0125 \frac{\text{mol}}{\text{L min}}$$

Corrida 2

$$\tau_{m1} = \frac{400}{50} = 8 = \frac{0,6 - C_{A1}}{-r_{A1}}$$

$$\tau_{m2} = \frac{400}{50} = 8 = \frac{C_{A1} - 0,1}{-r_{A2}}$$

$$(-r_{A2})_{\text{segunda corrida}} = (-r_{A1})_{\text{primera corrida}} = (-r_A)_{0,1}$$

$$\frac{C_{A1} - 0,1}{0,0125} = 8$$

$$C_{A1} = 0,2 \text{ mol/L}$$

$$\frac{0,6 - 0,2}{-r_{A1}} = 8 \quad \Rightarrow \quad -r_{A1} = \frac{0,4}{8} = 0,05 \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3 \text{ min}}$$

Corrida	τ (min)	C_{A1} (mol/L)	C_{A2} (mol/L)	$(-r_A)_1$ (mol/Lmin)	$(-r_A)_2$ (mol/Lmin)
1	400/10 = 40	0,1	-	0,0125	
2	400/50 = 8	0,2	0,1	0,05	0,0125

$$\frac{-r_{A1}}{-r_{A2}} = \frac{0,05}{0,0125} = 4 = \frac{kC_{A1}^n}{kC_{A2}^n} = \left(\frac{C_{A1}}{C_{A2}}\right)^n = \left(\frac{0,2}{0,1}\right)^n = 2^n \quad \Rightarrow \quad n = 2$$

$$k = \frac{-r_A}{C_A^2} = \frac{0,05}{(0,2)^2} = 1,25 \frac{\text{L}}{\text{mol min}}$$

$$-r_A = 1,25 C_A^2$$

Problema 6.17 (p. 149)

Se lleva a cabo isotérmicamente la reacción elemental irreversible en fase acuosa $A + B \rightarrow R + S$ de la siguiente manera. Se introduce en un tanque de mezclado de 4 L, flujos volumétricos iguales de 2 corrientes líquidas. Una conteniendo 0,020 mol de A/L y la otra 1,400 mol de B/L. La corriente mezclada es pasada entonces a través de un reactor de flujo en pistón de 16 L. En el tanque de mezclado se forma algún R siendo su concentración 0,002 mol/L. Suponiendo que el tanque de mezclado es de mezcla completa, halle la concentración de R a la salida del pistón, así como la conversión.

Solución

Sistema de densidad constante porque es líquido

$$-r_A = kC_A C_B = kC_{A0}^2 (1 - X_A)(M - X_A)$$

$$M = \frac{1,4}{0,02} = \frac{140}{2} = 70$$

$$-r_A = k(0,02)^2 (1 - X_A)(70 - X_A) \approx (0,02)^2 (70)k(1 - X_A)$$

$$\tau_m = \frac{4}{v_0} = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A} = \frac{0,02 X_A}{(0,02)^2 k(1 - X_A)}$$

$$C_R = 0,002 = C_{A0} X_A \quad \Rightarrow \quad X_A = \frac{0,002}{0,02} = 0,1$$

$$k = \frac{0,1 v_0}{4(0,02)(0,9)(70 - 0,1)} = 0,02 v_0$$

$$\tau_p = C_{A0} \int_{0,1}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A} = 0,02 \int_{0,1}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{k(0,02)^2 (1 - X_A)(70 - X_A)} = \frac{1}{0,02k} \int_{0,1}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{(1 - X_A)(70 - X_A)}$$

$$\int \frac{dx}{(a + bx)(a' + b'x)} = \frac{1}{ab' - a'b} \ln \frac{a' + b'x}{a + bx} \quad a = 1, b = -1, a' = 70, b' = -1$$

$$0,02k\tau_p = \frac{1}{-1 - (-1)(70)} \ln \frac{70 - X_A}{1 - X_A} \Bigg|_{0,1}^{X_{A2}}$$

$$0,02(0,02v_0) \frac{16}{v_0} = \frac{1}{69} \left[\ln \left(\frac{70 - X_{A2}}{1 - X_{A2}} \right) - \ln \left(\frac{70 - 0,1}{1 - 0,1} \right) \right] = \frac{1}{69} \left[\ln \left(\frac{70 - X_{A2}}{1 - X_{A2}} \right) - \ln \left(\frac{69,9}{0,9} \right) \right]$$

$$0,4416 = \ln \frac{70 - X_{A2}}{1 - X_{A2}} - 4,3524$$

$$\frac{70 - X_{A2}}{1 - X_{A2}} = 120,7866$$

$$X_{A2} = 0,424$$

$$C_R = C_{A0} X_A = 0,02(0,424) = 0,0085 \frac{mol}{L}$$

Solución aproximada, considerando la ecuación de velocidad como pseudo primer orden

$$\tau_p = C_{A0} \int_{0,1}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{(0,02)^2 (70)k(1 - X_A)}$$

$$0,02(70)k = -\ln(1 - X_A) \Big|_{0,1}^{X_{A2}} = \ln(1 - X_{A2}) - \ln(1 - 0,1)$$

$$\ln(1 - X_{A2}) = 0,553$$

$$X_{A2} = 0,43$$

Problema 6.18 (p. 150)

En la actualidad se obtiene una conversión de 2/3 cuando se lleva a cabo la reacción elemental en fase líquida $2 A \rightarrow 2 R$ en un reactor de flujo en pistón con razón de reciclo igual a la unidad. ¿Qué X_A se obtendrá si se elimina el reciclo?

Solución

Sistema de densidad constante porque es líquido

$$\frac{k\tau_r C_{A0}}{R+1} = \frac{C_{A0}(C_{A0} - C_{Af})}{C_{Af}(C_{A0} + RC_{Af})} \quad \text{ecuación 6.24 (pág. 138)}$$

$$C_{Af} = C_{A0}(1 - X_A) = C_{A0}\left(1 - \frac{2}{3}\right) = \frac{C_{A0}}{3}$$

$$k\tau_r C_{A0} = \frac{C_{A0}\left[C_{A0}\left(1 - \frac{1}{3}\right)\right](1+1)}{\left(\frac{C_{A0}}{3}\right)\left[C_{A0}\left(1 + (1)\frac{1}{3}\right)\right]} = \frac{\frac{4}{3}}{\frac{4}{9}} = 3$$

$$k\tau_p C_{A0} = k\tau_r C_{A0} = 3$$

$$k\tau_p C_{A0} = \frac{X_A}{1 + X_A} \quad \text{ecuación 5.23 (pág. 103)}$$

$$X_A = \frac{k\tau_p C_{A0}}{1 + k\tau_p C_{A0}} = \frac{3}{1 + 3} = 0,75$$

Problema 6.19 (p. 150)

Se desea explorar varios arreglos para la transformación de A en R. La alimentación contiene 99 % de A, 1 % de R. El producto deseado debe contener 10 % de A, 90 % de R. La transformación tiene lugar a través de la reacción elemental



La concentración de material activo en cualquier momento es

$$C_{A0} + C_{R0} = C_A + C_R = C_0 = 1 \text{ mol/L}$$

¿Qué tiempo de residencia se requiere para obtener un producto con $C_R = 0,9 \text{ mol/L}$

- a) En un reactor de flujo en pistón?
- b) En un reactor de mezcla completa?
- c) En un arreglo de reactores sin reciclo?

Solución

Sistema de densidad constante porque no varía F_{total}

$$-r_A = k C_A C_R$$

$$C_R = 1 - C_A$$

$$-r_A = (1) C_A (1 - C_A) = C_A (1 - C_A)$$

a)

$$C_{A0} = 0,99(1) = 0,99 \text{ mol/L}$$

$$\tau_p = \int_{0,1}^{0,99} \frac{dC_A}{-r_A} = \int_{0,1}^{0,99} \frac{dC_A}{C_A(1 - C_A)}$$

$$\int \frac{dx}{x(a+bx)} = -\frac{1}{a} \ln \frac{a+bx}{x} \quad a=1, \quad b=-1$$

$$\tau_p = -\frac{1}{1} \ln \frac{1-C_A}{C_A} \Big|_{0,1}^{0,99} = -\ln \frac{1-0,99}{0,99} + \ln \frac{1-0,1}{0,1} = 6,79 \text{ min}$$

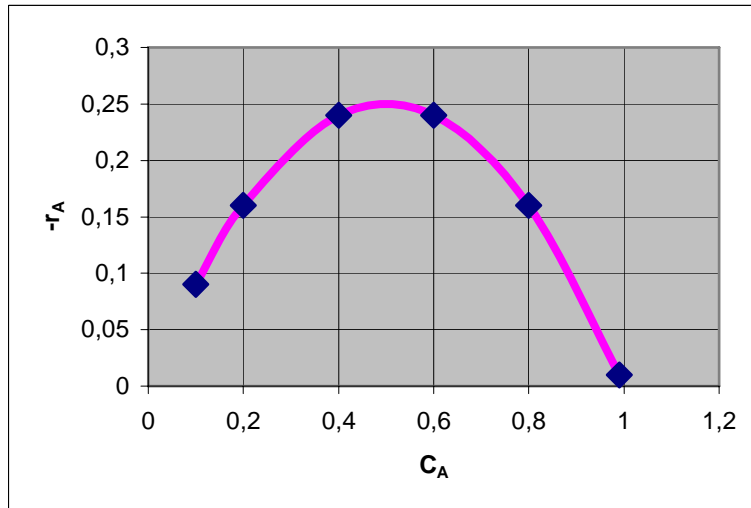
b)

$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A} = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A} = \frac{C_{A0} - C_A}{C_A(1 - C_A)} = \frac{0,99 - 0,1}{0,1(1 - 0,1)} = 9,89 \text{ min}$$

c)

Para decidir cuál es el arreglo hay que ver cómo varía $-r_A$ con la C_A

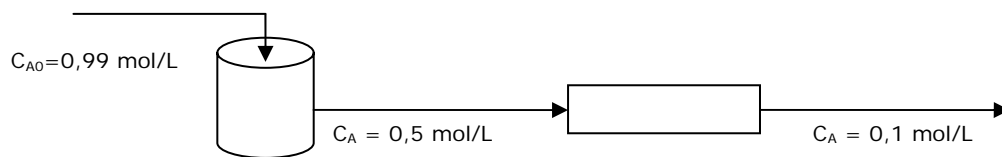
C_A	0,99	0,8	0,6	0,4	0,2	0,1
$(-r_A)$	0,009	0,16	0,24	0,24	0,16	0,09



Como se ve existe una C_A para la cual la velocidad es máxima. Vamos a encontrar ese valor exactamente.

$$\frac{d(-r_A)}{dC_A} = C_A(-1) + (1 - C_A)(1) = -C_A + 1 - C_A = -2C_A + 1 = 0$$

$$C_A = 0,5 \text{ mol/L}$$



$$\tau_m = \frac{0,99 - 0,5}{0,5(1 - 0,5)} = 1,96 \text{ min}$$

$$\tau_p = \int_{0,1}^{0,5} \frac{dC_A}{C_A(1 - C_A)} = -\frac{1}{1} \ln \frac{1 - C_A}{C_A} \Big|_{0,1}^{0,5} = -\ln \frac{1 - 0,5}{0,5} + \ln \frac{1 - 0,1}{0,1} = 2,197 \text{ min}$$

$$\tau_{total} = 1,96 + 2,197 = 4,15 \text{ min}$$

Problema 6.20 (p. 150)

El reactivo A se descompone con la estequiometría $A \rightarrow R$ y con una velocidad que sólo depende de C_A . Los siguientes datos sobre la descomposición en fase líquida fueron obtenidos en un reactor de mezcla completa.

τ (s)	14	25	29	30	29	27	24	19	15	12	20
C_{A0}	200	190	180	170	160	150	140	130	120	110	101
C_A	100	90	80	70	60	50	40	30	20	10	1

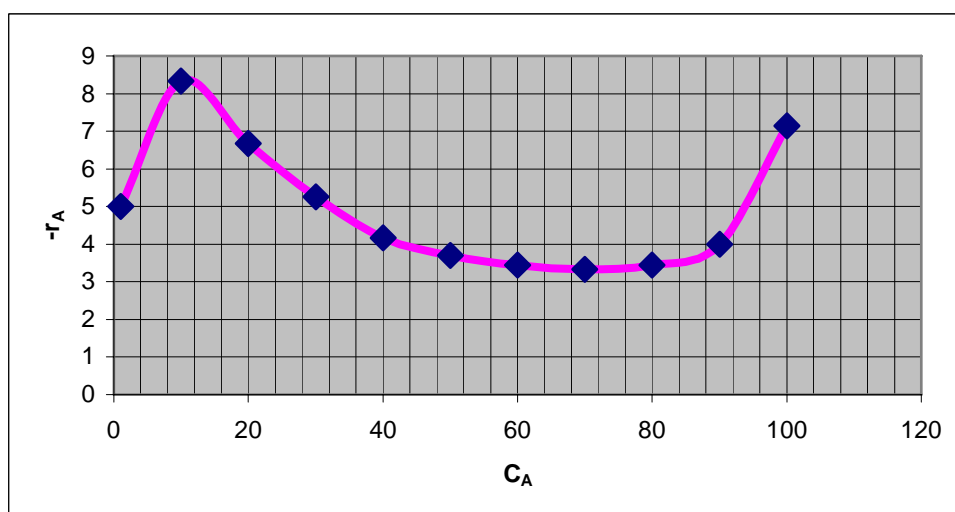
Determine qué reactor, flujo en pistón, flujo en mezcla completa o cualquier arreglo de 2 etapas brinda τ mínimo para el 90 % de conversión con una alimentación consistente en $C_{A0} = 100$. También halle este τ mínimo. Si se encuentra que el esquema de 2 reactores es el óptimo, encuentre la C_A entre etapas y el τ de cada etapa.

Solución

Sistema de densidad constante porque es en fase líquida. Para saber qué reactor es el adecuado es necesario saber cómo varía $-r_A$ con C_A .

$$\tau_m = \frac{C_{Aent} - C_{Asal}}{-r_{Asal}} \quad \therefore \quad -r_{Asal} = \frac{C_{Aent} - C_{Asal}}{\tau_m}$$

τ (s)	14	25	29	30	29	27	24	19	15	12	20
C_{A0}	200	190	180	170	160	150	140	130	120	110	101
C_A	100	90	80	70	60	50	40	30	20	10	1
$-r_A$	7,14	4	3,45	3,33	3,45	3,70	4,17	5,26	6,67	8,33	5
$1/-r_A$	0,14	0,25	0,29	0,30	0,29	0,27	0,24	0,19	0,15	0,12	0,2



Es evidente que la velocidad máxima está en $C_A = 10$. Se quiere 90 % de conversión, así que

$$C_{Af} = 100 (1 - 0,9) = 10$$

Si trabajo con un mezcla tendré en todo el reactor $C_A = 10$ y la velocidad máxima. El reactor de mezcla completa es el más adecuado

$$\tau_m = \frac{C_{A0} - C_{Af}}{-r_{Af}} = \frac{100 - 10}{8,33} = 10,8 \text{ s}$$

Comprobemos que lo afirmado es cierto calculando el τ de un pistón y de un arreglo

$$\tau_p = \int_{10}^{90} \frac{dC_A}{-r_A} \approx \frac{10}{2} \{0,14 + 0,12 + 2(0,25 + 0,29 + 0,3 + 0,29 + 0,27 + 0,24 + 0,19 + 0,15)\} = 21,1 \text{ s}$$

τ_p es mayor porque a concentraciones intermedias las velocidades son bajas. Veamos ahora un arreglo, pistón primero para aprovechar las altas velocidades y mezcla después para evitar las bajas velocidades que tienen lugar a concentraciones intermedias.

$$C_{A1} = 90$$

$$\tau_p = \frac{10}{2} (0,14 + 0,25) = 1,95 \text{ s}$$

$$\tau_m = \frac{90 - 10}{8,33} = 9,60 \text{ s}$$

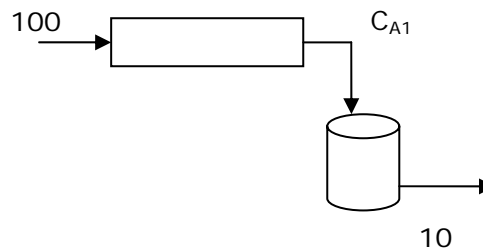
$$\tau_{total} = 11,55 \text{ s}$$

$$C_{A1} = 80$$

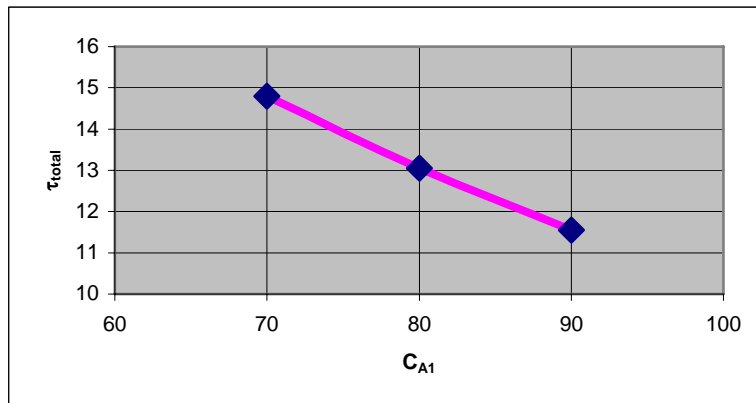
$$\tau_p = \frac{10}{2} (0,14 + 0,29 + 2(0,25)) = 4,65 \text{ s}$$

$$\tau_m = \frac{80 - 10}{8,33} = 8,40 \text{ s}$$

$$\tau_{total} = 13,05 \text{ s}$$



C_{A1}	90	80	70
τ_p	1,95	4,65	7,6
τ_m	9,60	8,40	7,20
τ_{total}	11,55	13,05	14,08



Como se ve en el gráfico el mínimo está en 100, o sea que sobra el pistón

Problema 6.21 (p. 151)

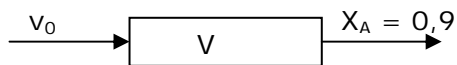
En un reactor de flujo en pistón se alcanza el 90 % de conversión para una reacción irreversible de primer orden en fase líquida. Si las 2/3 partes de la corriente de salida del reactor es recirculada y si a lo largo de todo el reactor el sistema reciclo reactor permanece invariable, qué le ocasionará esto a la corriente de salida

Solución

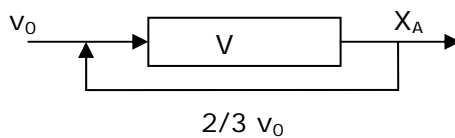
En una reacción de primer orden que se lleve a cabo isotérmicamente, si la C_A aumenta, aumenta la $-r_A$, por tanto conviene mantener las concentraciones de reactivo lo más altas posible. Si recirculo bajo el nivel de C_A , baja la $-r_A$ y bajará por tanto la X_A .

Demostración

Sistema de densidad constante porque es líquido



$$k\tau_p = k \frac{V_p}{v_0} = -\ln(1 - X_A) = \ln 0,1 = 2,3$$



$$k \frac{V_p}{v_0(R+1)} = \ln \frac{C_{A0} + RC_{Af}}{(R+1)C_{Af}} \quad \text{ecuación 6.23 (pág. 138)}$$

$$\frac{2,3}{\frac{5}{3}} = \ln \left[\frac{C_{A0} [1 + R(1 - X_A)]}{[R+1]C_{A0}(1 - X_A)} \right] = \ln \left(\frac{1 + R - RX_A}{R - RX_A + 1 - X_A} \right) = \ln \left(\frac{\frac{3}{3} + \frac{2}{3} - \frac{2}{3} X_A}{\frac{2}{3} - \frac{2}{3} X_A + \frac{3}{3} - \frac{3}{3} X_A} \right)$$

$$1,38 = \ln\left(\frac{5 - 2X_A}{5 - 5X_A}\right)$$

$$\frac{5 - 2X_A}{5 - 5X_A} = e^{1,38} = 3,975$$

$$X_A = 0,832$$

Por supuesto la conversión disminuyó

Problema 6.22 (p. 151)

A temperatura ambiente la reacción de segundo orden en fase líquida, procede como sigue



Para llenar y limpiar un reactor discontinuo se invierten 18 min. ¿Qué % de conversión y de tiempo de reacción debe ser utilizado para maximizar la salida diaria de R?

Solución

Sistema de densidad constante porque es líquido



$$C_R = r C_{A0} X_A$$

$$\text{Moles de R en cada batch} = r C_{A0} X_A V$$

Número de batch que se pueden hacer en un día = n

$$n = \frac{24h \left(\frac{60\text{min}}{1h} \right)}{18+t} = \frac{1440}{18+t}$$

$$\text{Moles de R que se producen diariamente} = R_{\text{diario}} = r C_{A0} X_A V n$$

$$R_{\text{diario}} = \frac{1440 r C_{A0} V X_A}{18+t} = K \frac{X_A}{18+t} \quad \text{donde } K = 1440 r C_{A0} V$$

$$t = \frac{1}{k C_{A0}} \frac{X_A}{1-X_A} = \frac{200 X_A}{1-X_A}$$

$$R_{\text{diario}} = K \frac{X_A}{18 + \frac{200 X_A}{1-X_A}} = \frac{K X_A (1-X_A)}{18 - 18 X_A + 200 X_A} = \frac{K X_A (1-X_A)}{18 + 182 X_A}$$

$$\frac{dR_{diario}}{dX_A} = 0 = K \frac{(18 + 182X_A)(-X_A + 1 - X_A) - X_A(1 - X_A)(182)}{(18 + 182X_A)^2}$$

$$(18 + 182X_A)(-X_A + 1 - X_A) - X_A(1 - X_A)(182) = 0$$

$$2[(9 + 91X_A)(-X_A + 1 - X_A) - X_A(1 - X_A)(91)] = 0$$

$$91X_A^2 + 18X_A - 9 = 0$$

$$X_A = \frac{-18 \pm \sqrt{18^2 - 4(91)(-9)}}{2(91)} = \frac{-18 \pm 60}{182} = \frac{42}{182} = 0,2307$$

$$t = \frac{200(0,2307)}{1 - 0,2307} = 60 \text{ min} = 1h$$

**C
A
P
Í
T
U
L
O

7**

Problema 7.1 (p. 164)

Para una corriente de alimentación dada podemos usar un reactor de flujo en pistón o uno de mezcla completa y podemos usar conversión alta, baja o intermedia para la corriente de salida. El sistema reaccionante es

R	reacción 1
A → S (deseado)	reacción 2
T	reacción 3

Se desea maximizar el $\phi(S/A)$, seleccione el reactor y nivel de conversión más adecuado

- a) $n_1 = 1, n_2 = 2, n_3 = 3$
- b) $n_1 = 2, n_2 = 3, n_3 = 1$
- c) $n_1 = 3, n_2 = 1, n_3 = 2$

donde n_1, n_2 y n_3 son los órdenes de reacción de las reacciones 1, 2 y 3 respectivamente.

Solución

- a) La reacción deseada tiene un orden intermedio, luego le corresponde una concentración y una conversión intermedia que va a hacer máximo $\phi(S/A)$, así que uso un reactor de mezcla completa con esa concentración precisa.

$$\phi(S/A) = \frac{r_R}{-r_A} = \frac{k_2 C_{A2}^2}{k_2 C_{A2}^2 + k_1 C_{A2} k_3 C_{A2}^3} = \frac{1}{1 + k_1 C_{A2}^{-1} k_3 C_{A2}}$$

$$\frac{d\phi(S/A)}{dC_A} = \frac{-[k_1(-1)C_A^{-2} + k_3]}{(1 + k_1 C_{A2}^{-1} k_3 C_{A2})^2} = 0$$

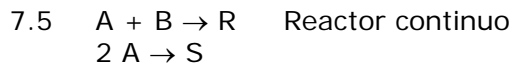
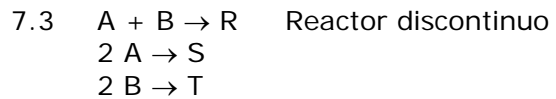
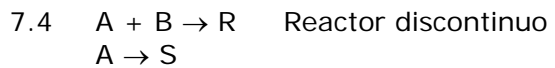
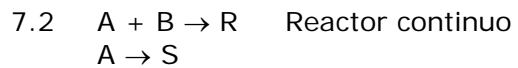
$$\frac{k_1}{C_A^2} - k_3 = 0$$

$$C_A = \sqrt{\frac{k_1}{k_3}}$$

- b) La reacción deseada es la de mayor orden, por lo que requiero concentraciones de A altas, así que uso un reactor de flujo en pistón con conversiones bajas.
- c) La reacción deseada es la de menor orden, así que se requieren bajas concentraciones de A uso un reactor de mezcla completa con alta conversión (τ grande).

Problema 7.2, 7.3, 7.4 y 7.5 (p. 165)

Usando corrientes separadas de A y B haga un esquema del patrón de contacto y de las condiciones del reactor que mejor promoverá la formación de R para la siguiente reacción elemental.



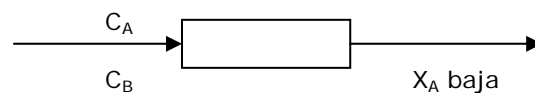
Solución

Problema 7.2

$$r_R = k_1 C_A C_B$$

$$r_S = k_2 C_A$$

El nivel de concentración de A no afecta la distribución de productos y la de B debe mantenerse alta.



Problema 7.3

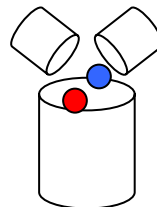


$$r_S = k_2 C_A^2$$

$$r_S = k_3 C_B^2$$

Como la reacción deseada es la de menor orden, tanto la concentración de A como la de B deben mantenerse bajas.

Adicionar A y B gota a gota

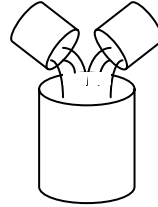


Problema 7.4

$$\begin{aligned} r_R &= k_1 C_A C_B \\ r_S &= k_2 C_A \end{aligned} \quad \text{Reactor discontinuo}$$

El nivel de concentración de A no afecta la distribución de productos, la de B debe ser alta, así que C_{B0} debe ser alta y trabajar con bajas conversiones.

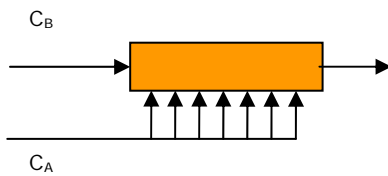
Adicionar A y B rápidamente



Problema 7.5

$$\begin{aligned} r_R &= k_1 C_A C_B \\ r_S &= k_2 C_A^2 \end{aligned} \quad \text{Reactor continuo}$$

La concentración de A debe mantenerse baja y la de B alta



Problema 7.6 (p. 165)

La sustancia A en un líquido reacciona para dar R y S como sigue:

$A \rightarrow R$ primer orden

$A \rightarrow S$ primer orden

Una alimentación ($C_{A0} = 1$, $C_{R0} = C_{S0} = 0$) entra en una cascada de 2 reactores de mezcla completa ($\tau_1 = 2,5$ min, $\tau_2 = 5$ min). Conociendo la composición en el primer reactor ($C_{A1} = 0,4$; $C_{R1} = 0,4$; $C_{S1} = 0,2$) halle la composición de salida del segundo reactor

Solución

$$\phi = \frac{dC_R}{-dC_A} = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \Rightarrow \text{La distribución de productos no depende del tipo de reactor}$$

$$\int_{C_{R0}}^{C_R} dC_R = -\frac{k_1}{k_1 + k_2} \int_{C_{A0}}^{C_A} dC_A$$

$$C_R - C_{R0} = \frac{k_1}{k_1 + k_2} (C_{A0} - C_A)$$

$$\frac{k_1}{k_1 + k_2} = \frac{C_R - C_{R0}}{(C_{A0} - C_A)} = \frac{0,4}{1 - 0,4} = \frac{2}{3} \quad \text{ecuación (1)}$$

$$\tau_1 = \frac{(C_{A0} - C_{A1})}{k_1 C_{A1} + k_2 C_{A1}} \quad \text{ecuación (2)}$$

Re solviendo ecuación (1) y (2)

$$k_1 = 0,4 \text{ min}^{-1} \quad k_2 = 0,2 \text{ min}^{-1}$$

Para el segundo reactor

$$\tau_2 = 5 = \frac{(C_{A1} - C_{A2})}{k_1 C_{A2} + k_2 C_{A2}} = \frac{0,4 - C_{A2}}{0,6 C_{A2}}$$

$$C_{A2} = 0,1 \text{ mol} / L$$

$$C_{R2} = C_{R1} + \frac{2}{3}(0,4 - 0,1) = 0,6 \text{ mol} / L \quad C_{S2} = 1 - (0,1 + 0,6) = 0,3 \text{ mol} / L$$

Problema 7.7 (p.165)

La sustancia A produce R y S mediante la siguiente reacción en fase líquida



Una alimentación ($C_{A0} = 1$, $C_{R0} = 0$; $C_{S0} = 0,3$) entra en una cascada de 2 reactores de mezcla completa ($\tau_1 = 2,5$ min, $\tau_2 = 10$ min). Conociendo la composición en el primer reactor ($C_{A1} = 0,4$; $C_{R1} = 0,2$; $C_{S1} = 0,7$) halle la composición de salida del segundo reactor.

Solución

$$\phi_m = \varphi_{C_{Af}} = \frac{\Delta C_R}{-\Delta C_A} = \frac{k_1 C_{Af}^2}{k_1 C_{Af}^2 + k_2 C_{Af}} = \frac{1}{1 + \frac{k_2}{k_1 C_{Af}}}$$

$$\frac{1}{1 + \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{1}{0,4} \right)} = \frac{0,2 - 0}{1 - 0,4} \quad \Rightarrow \quad \frac{k_2}{k_1} = 0,8 \quad \text{ecuación (1)}$$

$$\tau_1 = \frac{(C_{A0} - C_{A1})}{k_1 C_{A1}^2 + k_2 C_{A1}}$$

$$\tau_1 = \frac{(1 - 0,4)}{0,16k_1 + 0,4k_2} = 2,5$$

$$0,16k_1 + 0,4k_2 = 0,24 \quad \text{ecuación (2)}$$

De ecuación (1) y (2)

$$k_1 = 0,5 \text{ L/mol min} \quad k_2 = 0,4 \text{ min}^{-1}$$

$$\tau_2 = 10 = \frac{(C_{A1} - C_{A2})}{k_1 C_{A2}^2 + k_2 C_{A2}} = \frac{0,4 - C_{A2}}{0,5C_{A2}^2 + 0,4C_{A2}}$$

$$5C_{A2}^2 + 5C_{A2} - 0,4 = 0$$

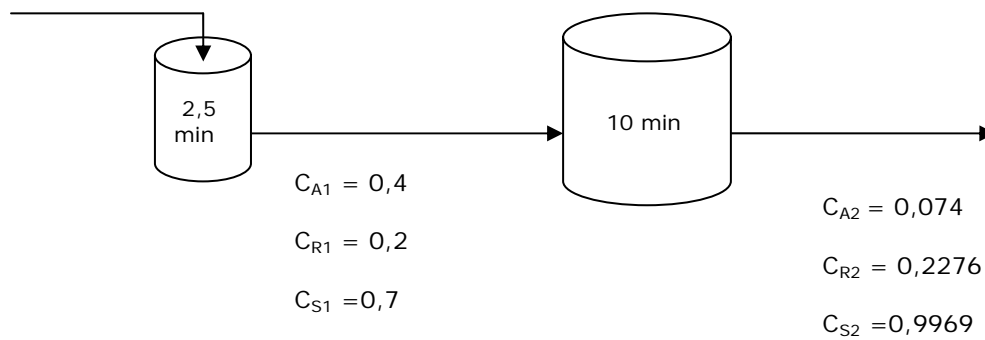
$$C_{A2} = \frac{-5 \pm \sqrt{5^2 - 4(5)(0,4)}}{2(5)} = 0,074 \text{ mol} / L$$

$$\phi_{m2} = \frac{C_{R2} - C_{R1}}{C_{A1} - C_{A2}} = \frac{1}{1 + \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{1}{C_{A2}} \right)} = \frac{C_{R2} - 0,2}{0,4 - 0,074} = \frac{1}{1 + 0,8 \left(\frac{1}{0,074} \right)}$$

$$C_{R2} = 0,2276 \text{ mol} / L$$

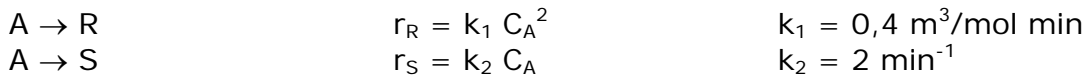
$$C_{A0} + C_{S0} = C_A + C_R + C_S$$

$$C_{S2} = 1,3 - 0,074 - 0,2276 = 0,9969 \text{ mol} / L$$



Problemas 7.8; 7.9; 7.10; 7.11 (p. 166)

El reactivo líquido A se descompone como sigue



Una alimentación acuosa ($C_{A0} = 40 \text{ mol/m}^3$) entra en el reactor, se descompone y sale una mezcla de A, R y S

7.8 Halle C_R , C_S y τ para $X_A = 0,9$ en un reactor de mezcla completa.

7.9 Idem; pero para un pistón.

7.10 Halle las condiciones de operación (X_A , τ , y C_S) que maximizan C_S en un reactor de mezcla completa.

7.11 Halle las condiciones de operación (X_A , τ y C_R) que maximizan C_R en un reactor de mezcla completa.

Solución

Problema 7.8

$$X_A = 0,9$$

$$C_{Af} = 40(1 - 0,9) = 4 \text{ mol / m}^3$$

$$\phi_m = \frac{C_R}{C_{A0} - C_A} = \phi_f = \frac{1}{1 + \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{1}{C_A} \right)}$$

$$\frac{C_R}{40 - 4} = \frac{1}{1 + \frac{2}{0,4} \left(\frac{1}{4} \right)} = 0,44 \quad \Rightarrow \quad C_R = 15,84 \text{ mol / m}^3$$

$$C_S = 40 - (4 + 15,84) = 20,16$$

$$\tau_m = \frac{C_{A0} - C_A}{k_1 C_A^2 + k_2 C_A} = \frac{40 - 4}{0,4(4)^2 + 2(4)} = 2,5 \text{ min}$$

Problema 7.9

$$\tau_P = \int_{C_A}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{(-r_A)} = \int_{C_A}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{k_1 C_A^2 + k_2 C_A} = \int_4^{40} \frac{dC_A}{0,4 C_A^2 + 2 C_A} = \int_4^{40} \frac{dC_A}{C_A (0,4 C_A + 2)}$$

$$\int \frac{dx}{x(a+bx)} = -\frac{1}{a} \ln \frac{a+bx}{x}$$

Si $a = 2$ y $b = 0,4$

$$\tau_P = -\frac{1}{2} \ln \frac{2+0,4C_A}{C_A} \Big|_4^{40} = -\frac{1}{2} \left\{ \ln \frac{2+0,4(40)}{40} - \ln \frac{2+0,4(4)}{4} \right\} = 1,039 \text{ min}$$

$$C_R = \int_4^{40} \phi dC_A = \int_4^{40} \frac{1}{1 + \frac{5}{C_A}} = \int_4^{40} \frac{C_A dC_A}{C_A + 5}$$

$$\int \frac{xdx}{a+bx} = \frac{1}{b^2} [a+bx - a \ln(a+bx)]$$

Si $a = 5$ y $b = 1$

$$C_R = \frac{1}{1} \left[5 + C_A - 5 \ln(5 + C_A) \right]_4^{40} = 5 + 40 - 5 \ln(5 + 40) - 5 - 4 + 5 \ln(5 + 4)$$

$$C_R = 27,95 \text{ mol} / L$$

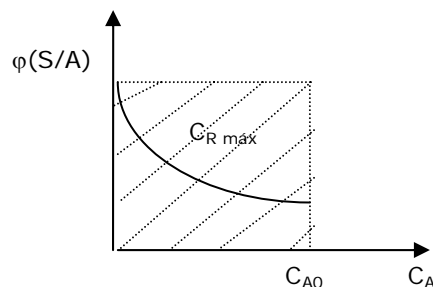
$$C_S = 40 - 27,95 - 4 = 8,05 \text{ mol} / L$$

Problema 7.10

$$C_S = \phi_f(C_{A0} - C_{Af}) = \frac{1}{1 + \frac{k_1}{k_2} C_{Af}} (C_{A0} - C_{Af}) = \frac{1}{1 + 0,2C_A} (C_{A0} - C_{Af})$$

Mientras $C_A \downarrow$, $\phi \uparrow$ y $(C_{A0} - C_{Af}) \uparrow$ y $\therefore C_S \uparrow$

Debo trabajar con la mayor conversión posible



$$C_{S\max} \begin{cases} \tau_m \rightarrow \infty \\ C_A \rightarrow 0 \\ C_S \rightarrow 40 \text{ mol} / L \\ C_R \rightarrow 0 \text{ mol} / L \end{cases}$$

Problema 7.11

$$C_{Rm} = \varphi_f (C_{A0} - C_{Af})$$

$$C_{Rm} = \frac{(C_{A0} - C_{Af})}{1 + \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{1}{C_{Af}} \right)} = \frac{40 - C_{Af}}{1 + \frac{5}{C_{Af}}} = \frac{C_{Af} (40 - C_{Af})}{5 + C_{Af}}$$

$$\frac{dC_R}{dC_A} = 0 = \frac{(5 + C_{Af})[40 - C_{Af} + C_{Af}(-1)] - C_{Af}(40 - C_{Af})(1)}{(5 + C_{Af})^2}$$

$$(5 + C_{Af})(40 - 2C_{Af}) - 40C_{Af} + C_{Af}^2 = 0$$

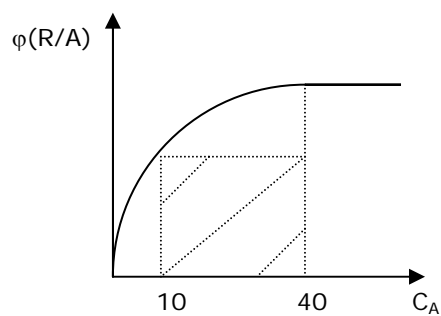
$$C_{Af}^2 + 10C_{Af} - 200 = 0$$

$$C_{Af} = 10 \text{ mol} / L$$

$$C_{R\text{máx}} = \frac{40 - 10}{5 + 10} = 20 \text{ mol} / L$$

$$C_S = 40 - 10 - 20 = 10 \text{ mol} / L$$

$$\tau_m = \frac{40 - 10}{0,4(10)^2 + 2(10)} = 0,5 \text{ min}$$

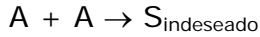


Problema 7.12 (p. 165)

El reactivo A al disolverse en líquido isomeriza o dimeriza como sigue



$$r_R = k_1 C_A$$



$$r_S = k_2 C_A^2$$

a) Plantee $\phi(R/A)$ y $\phi(R/R+S)$

Con una alimentación de concentración C_{A0} , halle $C_{R \text{ máx}}$ que puede ser formado por

- b) En un reactor de flujo en pistón
- c) En un reactor de mezcla completa

Una cantidad de A con una concentración inicial $C_{A0} = 1 \text{ mol/L}$ es echada en un reactor discontinuo y reacciona completamente

- d) Si $C_S = 0,18 \text{ mol/L}$ en la mezcla resultante qué nos dice esto en la cinética de la reacción

Solución

a)

$$\phi\left(\frac{R}{R+S}\right) = \frac{r_R}{r_R + r_S} = \frac{k_1 C_A}{k_1 C_A + k_2 C_A^2}$$

$$\phi\left(\frac{R}{A}\right) = \frac{r_R}{-r_A} = \frac{k_1 C_A}{k_1 C_A + 2k_2 C_A^2}$$

b)

$C_{R \text{ máx}}$ cuando $C_{Af} = 0$

$$C_{R \text{ máx}} = \int_0^{C_{A0}} \phi dC_A = \int_0^{C_{A0}} \frac{1}{1 + \frac{2k_2}{k_1} C_A} dC_A = \frac{k_1}{2k_2} \ln\left(1 + \frac{2k_2}{k_1} C_A\right) \Bigg|_0^{C_{A0}}$$

$$C_{R \text{ máx}} = \left(\frac{k_1}{2k_2}\right) \left\{ \ln\left(1 + \frac{2k_2}{k_1} C_{A0}\right) - \ln 1 \right\} = \frac{k_1}{2k_2} \ln\left(1 + \frac{2k_2}{k_1} C_{A0}\right)$$

c)

$$C_{Rm} = \phi_f (C_{A0} - C_A)$$

$$C_{Rm \text{ máx}} = 1(C_{A0} - 0) = C_{A0}$$

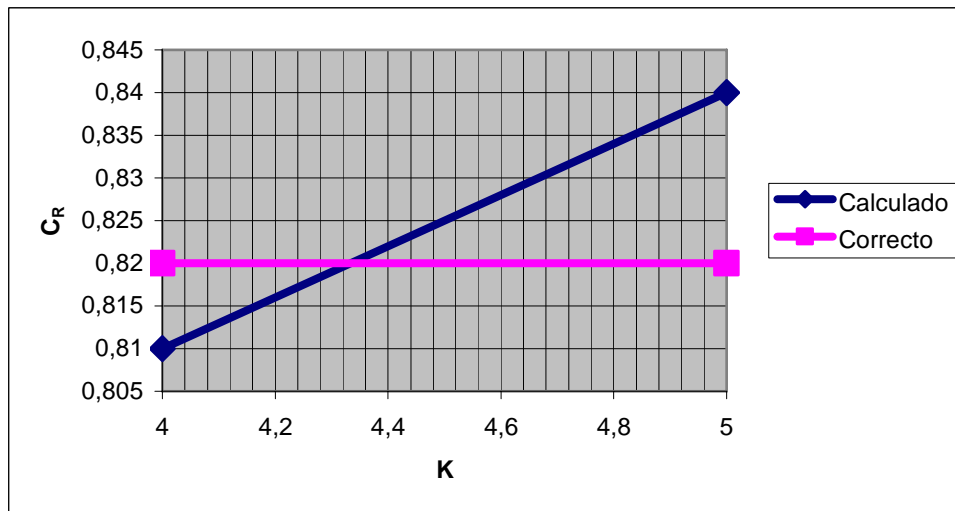
d)

$$C_S = 0,18 \quad \Rightarrow \quad C_R = C_{A0} - C_A - C_S = 1 - 0 - 0,18 = 0,82$$

La distribución de productos de un reactor de flujo en pistón es la misma de un reactor discontinuo ideal, así que

$$C_{R_{máx}} = \frac{k_1}{2k_2} \ln \left(1 + \frac{2k_2}{k_1} C_{A0} \right) \quad \text{ecuación (1)}$$

$K = k_1/k_2$	5	4
C_R calculado por (1)	0,84	0,81



$$K = 4,32$$

$$\therefore k_1/k_2 = 4,32$$

$$k_1 = 4,32 k_2$$

Problemas 7.14; 7.15; 7.16 (p. 167)

Considere la descomposición en paralelo de A



Determine la concentración máxima de producto deseado

- reactor de flujo en pistón
- rector de mezcla completa

7.14 El producto deseado es R y $C_{A0} = 2$

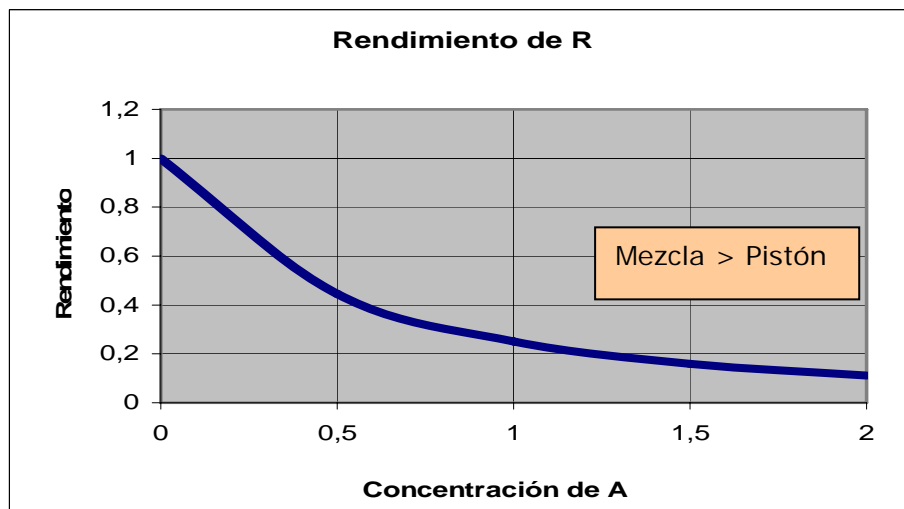
7.15 El producto deseado es S y $C_{A0} = 4$

7.16 El producto deseado es T y $C_{A0} = 5$

Solución

Problema 7.14

$$\varphi_R = \frac{1}{1 + 2C_A + C_A^2} \quad \begin{array}{ll} C_A \rightarrow 0 & \varphi_R \rightarrow 1 \\ C_A \rightarrow \infty & \varphi \rightarrow 0 \end{array}$$



a)

$$C_{R \text{ máx}} = \int_0^2 \frac{dC_A}{1 + 2C_A + C_A^2} = \int_0^2 \frac{dC_A}{(C_A + 1)^2} = \frac{(C_A + 1)^{-1}}{-1} \Big|_0^2 = -\frac{1}{1+2} + \frac{1}{1} = \frac{2}{3}$$

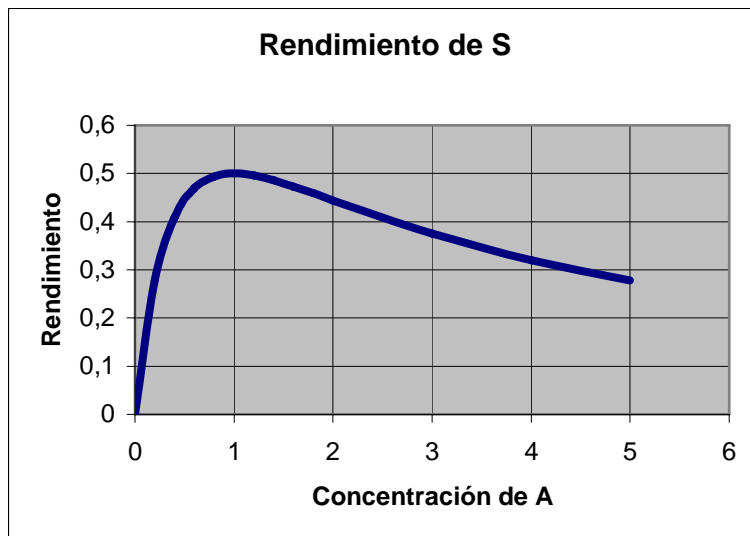
b)

$$\varphi_R = \frac{1}{1 + 2C_A + C_A^2} \Rightarrow \text{Cuando } C_A = 0; C_R = C_{R \text{ máx}}$$

$$C_{R \text{ máx}} = \varphi_{C_A=0}(2-0) = 1(2) = 2 \text{ mol/L}$$

Problema 7.15

$$\varphi_S = \frac{2C_A}{1 + 2C_A + C_A^2} = \frac{1}{\frac{1}{2C_A} + 1 + \frac{C_A}{2}}$$



Cuando $C_A \rightarrow 0$ $\varphi \rightarrow 0$

Cuando $C_A \rightarrow \infty$ $\varphi \rightarrow 0$

a)

$$C_{S \text{ P máx}} \Rightarrow C_A = 0$$

$$C_{SP \text{ máx}} = \int_0^4 \frac{dC_A}{\frac{1}{2C_A} + 1 + \frac{C_A}{2}} = 2 \int \frac{C_A dC_A}{(1 + C_A)^2}$$

$$\int \frac{x dx}{(a + bx)^2} = \frac{1}{b^2} \left[\ln(a + bx) + \frac{a}{a + bx} \right]$$

$$= 2 \left\{ \frac{1}{1} \left[\ln(1 + C_A) + \frac{1}{1 + C_A} \right] \right\} \Bigg|_0^4$$

$$C_{SP \text{ máx}} = 2 \left\{ \frac{1}{1} \left[\ln(1 + 4) + \frac{1}{5} - \ln(1 + 0) - 1 \right] \right\} = 1,6188 \text{ mol / L}$$

b)

$$C_{S \text{ máx}} = \varphi_{C_{Af}}(C_{A0} - C_{Af})$$

$$C_{Sm} = \frac{2C_A}{2C_A + 1 + C_A^2} (4 - C_A)$$

$$C_{Sm} = 2 \left\{ \frac{C_A(4 - C_A)}{2C_A + 1 + C_A^2} \right\}$$

$$\frac{dC_{Sm}}{dC_A} = 2 \left\{ \frac{(2C_A + 1 + C_A^2)[C_A(-1) + 4 - C_A] - (4C_A - C_A^2)(2 + 2C_A)}{(2C_A + 1 + C_A^2)^2} \right\} = 0$$

$$2 \left\{ (2C_A + 1 + C_A^2)(2 - C_A) - (4C_A - C_A^2)(1 + C_A) \right\} = 0$$

$$3C_A^2 + C_A - 2 = 0$$

$$C_A = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 4(3)(-2)}}{2(3)} = \frac{2}{3}$$

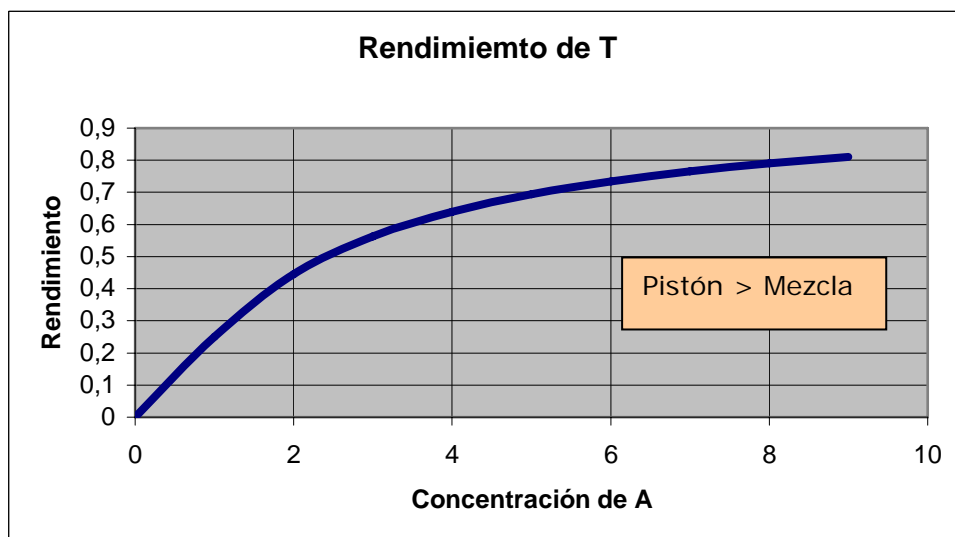
$$C_{Sm \max} = \frac{2 \left(\frac{2}{3} \right)}{2 \left(\frac{2}{3} \right) + \left(\frac{2}{3} \right)^2 + 1} \left(4 - \frac{2}{3} \right) = 1,6 \text{ mol} / L$$

Problema 7.16

$$\varphi_T = \frac{C_A^2}{2C_A + 1 + C_A^2} = \frac{1}{1 + \frac{2}{C_A} + \frac{1}{C_A^2}}$$

Cuando

$C_A \rightarrow \infty$	$\varphi \rightarrow 1$
$C_A \rightarrow 0$	$\varphi \rightarrow 0$



C_{RP} es máxima cuando $C_{Af} = 0$

$$C_{RPm\acute{x}} = \int \frac{C_A^2 dC_A}{(1 + C_A)^2}$$

$$\int \frac{x^2 dx}{(a + bx)^2} = \frac{1}{b^3} \left[a + bx - 2a \ln(a + bx) - \frac{a^2}{a + bx} \right]$$

$$C_{RPm\acute{x}} = 1 + C_A - 2 \ln(1 + C_A) - \frac{1}{1 + C_A} \Big|_0^5 = 5 - 2 \ln 6 - \frac{1}{6} - \left[0 - 2 \ln 1 - \frac{1}{1} \right] = 2,2498 \text{ mol} / L$$

b)

$$C_{Rm} = \frac{C_A^2}{C_A^2 + 2C_A + 1} (5 - C_A)$$

$$\frac{dC_{Rm}}{dC_A} = \frac{(C_A^2 + 2C_A + 1)[(5 - C_A)(2C_A) + C_A^2(-1)] - C_A^2(5 - C_A)(2C_A + 2)}{(C_A^2 + 2C_A + 1)^2} = 0$$

$$C_A \{ (C_A + 1)^2 [-C_A + 2(5 - C_A)] - C_A(5 - C_A)(2C_A + 2) \} = 0$$

$$(C_A + 1) \{ (C_A + 1)(-C_A + 10 - 2C_A) - (5C_A - C_A^2)(2) \} = 0$$

$$(C_A + 1)(10 - 3C_A) - 2(5C_A - C_A^2) = 0$$

$$C_A^2 + 3C_A - 10 = 0$$

$$C_A = \frac{-3 \pm \sqrt{9 - 4(1)(-10)}}{2} = 2 \text{ mol} / L$$

$$C_{Rmm\acute{x}} = \frac{2^2}{2^2 + 2(2) + 1} = \frac{8}{9} = 0,89 \text{ mol} / L$$

Comprobación

$$C_A = 1 \quad C_{Rm} = \frac{1}{1 + 2 + 1} (4 - 1) = 0,75 \text{ mol} / L$$

$$C_A = 3 \quad C_{Rm} = \frac{9}{9 + 6 + 1} (4 - 3) = 0,5 \text{ mol} / L$$

Problemas 7.17; 7.18; 7.19 (p. 167)

El reactivo A de una corriente ($1 \text{ m}^3/\text{min}$) con $C_{A0} = 10 \text{ kmol/m}^3$ se descompone bajo la radiación ultravioleta como sigue:



Se desea diseñar un juego de reactores para un trabajo específico. Haga un dibujo del esquema seleccionado y calcule la fracción de la alimentación que se convierte en producto deseado, así como el volumen del reactor requerido.

7.17 El producto deseado es R

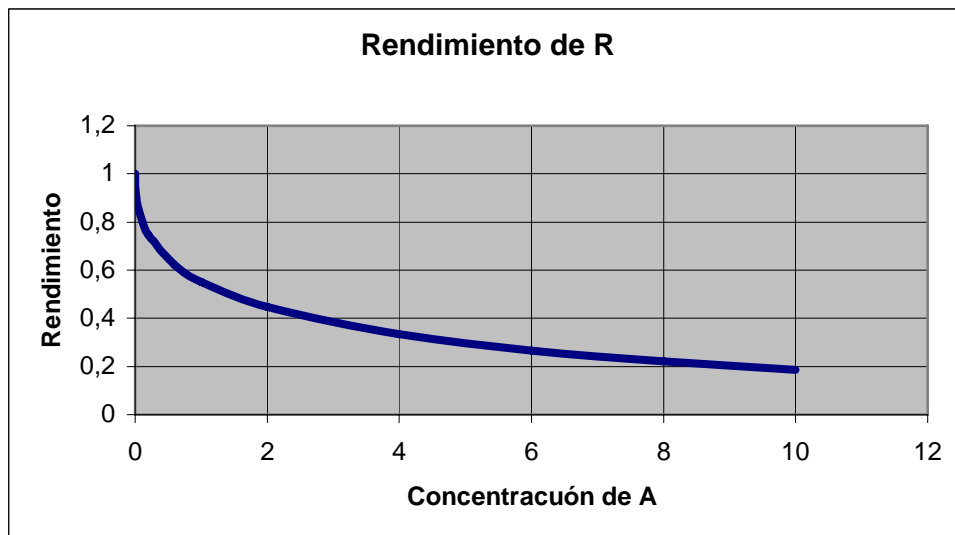
7.18 El producto deseado es S

7.19 El producto deseado es T

Solución

Problema 7.17

La reacción del producto deseado es la de menor orden, así que lo más conveniente es usar un reactor de mezcla completa con conversión alta.



$C_{Rm \text{ máx}}$ se obtiene cuando $C_{Af} = 0$; pero se requiere para eso $\tau = \infty$
 $C_{Rm \text{ máx}} = 1(10) = 10 \text{ mol/L}$

$$\varphi_R = \frac{16C_A^{0,5}}{16C_A^{0,5} + 12C_A + C_A^2} \quad \text{ecuación (1)}$$

$$C_{Rm} = \varphi_R (C_{A0} - C_A) \quad \text{ecuación (2)}$$

$$\tau_m = \frac{C_{A0} - C_A}{16C_A^{0,5} + 12C_A + C_A^2} \quad \text{ecuación (3)}$$

$$V = \tau_m (v_0) \quad \text{ecuación (4)}$$

Voy a seleccionar una conversión alta y hacer los cálculos para cada una de ellas

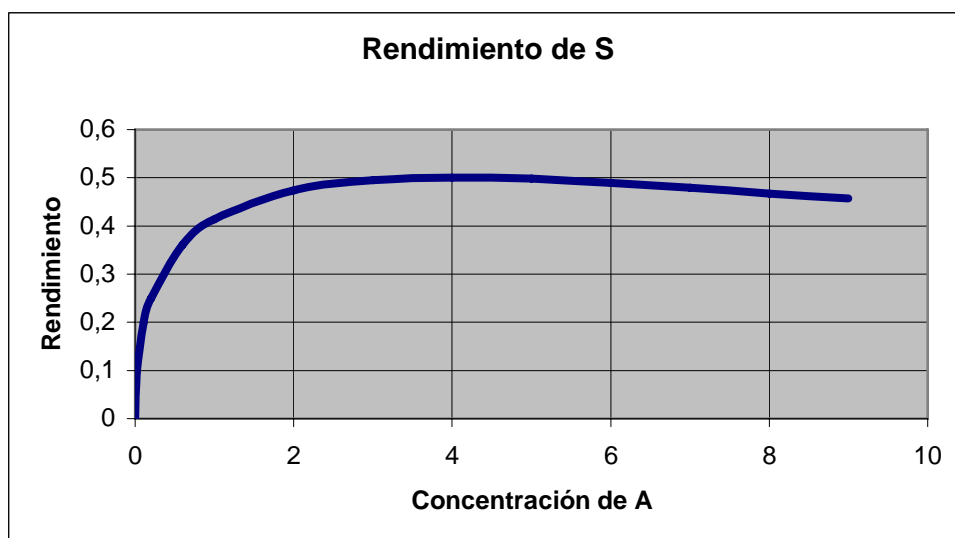
X_A	C_A (kmol/m ³)	τ (min) (3)	V (m ³) (4)	φ (1)	C_R (kmol/m ³) (2)
0,980	0,20	1,0130	1,0130	0,7370	5,8960
0,990	0,10	1,5790	1,5790	0,8070	7,9894
0,995	0,05	2,3803	2,3803	0,8558	8,5159

Como se ve al pasar de $X_A = 0,99$ a 0,995 hay un $\Delta C_R = 0,5265$ mol/L y para lograrlo se requiere un $\Delta V = 0,8013$ m³ (casi 1 m³), luego yo seleccionaría $X_A = 0,995$.

Problema 7.18

La reacción deseada es la orden intermedio, así que le corresponde una concentración intermedia, que hace el rendimiento máximo.

$$\varphi_S = \frac{12C_A}{16C_A^{0,5} + 12C_A + C_A^2}$$



- a) Si no se puede recircular el A no reaccionado, entonces uso un reactor de mezcla completa, hasta la concentración que da ϕ_{\max} y de ahí en adelante un pistón
- b) Si se puede recircular el A no reaccionado de forma económica, entonces utilizo un reactor de mezcla completa con la concentración que da ϕ_{\max} .

$$\frac{d\phi_S}{dC_A} = \frac{12(12C_A + 16C_A^{0,5} + C_{A2}^2) - 12C_A(12 + 8C_A^{-0,5} + 2C_A)}{(12C_A + 16C_A^{0,5} + C_{A2}^2)^2} = 0$$

$$18C_A^{0,5} - C_A^2 = 0$$

$$C_A = 4 \text{ kmol} / \text{m}^3$$

$$C_{Sm} = 0,5(10 - 4) = 3 \text{ kmol} / \text{m}^3$$

$$\tau_m = \frac{10 - 4}{16(4)^{0,5} + 12(4) + 4^2} = 0,0625 \text{ m}^3 = 62,5 \text{ L}$$

$C_A \text{ (kmol/m}^3\text{)}$	4	3	2	1	0,6	0,4	0,11	0,02
ϕ_S	0,5	0,4951	0,4740	0,4138	0,3608	0,2501	0,1988	0,0959

$$\text{Supongo } X_A = 0,998 \Rightarrow C_A = 0,02$$

$$C_{Sp} = \int_{0,02}^4 \phi dC_A \approx \frac{\Delta C_A}{2} \left[\phi_1 + \phi_4 + \sum_{i=2}^3 \phi_i \right]$$

$$\begin{aligned} C_{Sp} &= \frac{1}{2} [0,4138 + 0,5 + 2(0,4740 + 0,4951)] \\ &\quad + \frac{0,4}{2} [0,4138 + 0,2501 + 2(0,3608)] \\ &\quad + \frac{0,09}{2} [0,2501 + 0,0959 + 2(0,1988)] \end{aligned}$$

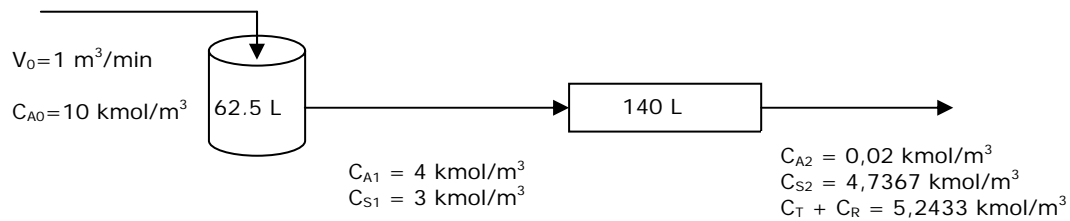
$$C_{Sp} = 1,7367 \text{ mol} / \text{m}^3$$

$$C_{Stotal} = 3 + 1,7367 = 4,7367 \text{ mol} / \text{m}^3$$

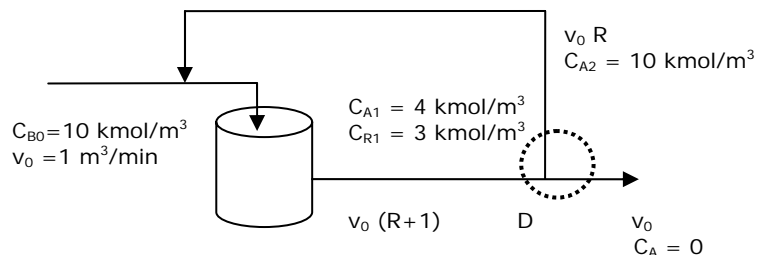
$$\tau_p = \int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \frac{dC_A}{-r_A} \approx \frac{\Delta C_A}{2} \left\{ (-r_A)_0^{-1} + (-r_A)_f^{-1} + 2 \sum_{i=1}^{f-1} (-r_A)_i^{-1} \right\}$$

$C_A \text{ (kmol/m}^3\text{)}$	4	3	2	1	0,6	0,2	0,11	0,02
$-r_A \text{ (kmol/m}^3\text{min)}$	96	72,71	50,62	29	19,95	9,60	6,64	2,50

$$\tau_p = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{29} + \frac{1}{96} + 2 \left(\frac{1}{72,71} + \frac{1}{50,62} \right) \right] + \frac{0,4}{2} \left[\frac{1}{29} + \frac{1}{9,60} + 2 \left(\frac{1}{19,95} \right) \right] \\ + \frac{0,09}{2} \left[\frac{1}{9,6} + \frac{1}{2,5} + 2 \left(\frac{1}{6,64} \right) \right] = 0,1399 \text{ min}$$



Si se puede recircular el A no reaccionado



Balance alrededor de D para hallar el flujo recirculado

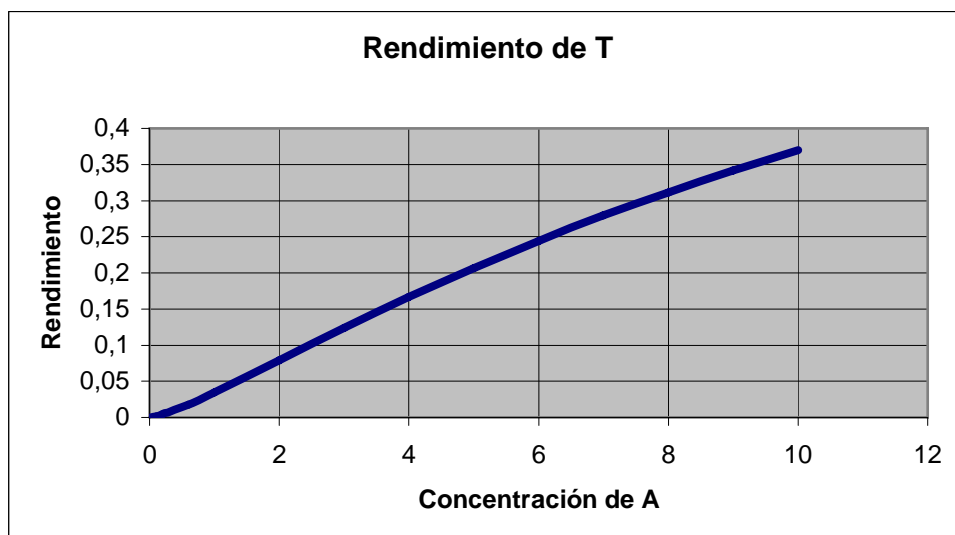
$$v_0 (R+1)(4) = 0 + v_0 R (10) \Rightarrow R = 2/3$$

$$\frac{V_m}{v_0(R+1)} = \frac{10-4}{96} \Rightarrow V_m = 0,104 \text{ m}^3 = 104 \text{ L}$$

Problema 7.19

La reacción por la que se produce T es la de mayor orden. Así que debe usarse un reactor de flujo en pistón

$$\phi_T = \frac{C_A^2}{16C_A^{0,5} + 12C_A + C_A^2}$$



$$C_{Tp} = \int_{C_{Af}}^{C_{A0}} \phi dC_A \approx \frac{\Delta C_A}{2} \left[\phi_0 + \phi_f + \sum_{i=1}^{f-1} \phi_i \right]$$

$$\tau_p = \int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \frac{dC_A}{-r_A} \approx \frac{\Delta C_A}{2} \left\{ (-r_A)_0^{-1} + (-r_A)_f^{-1} + 2 \sum_{i=1}^{f-1} (-r_A)_i^{-1} \right\}$$

La mayor cantidad de T se forma cuando $C_{Af} = 0$; pero para eso se requiere $\tau = \infty$, así que elijo $X_A = 0,998$

C_A (kmol/m ³)	ϕ	$-r_A$ (kmol/m ³ min)
0,02	0,0959	2,5031
0,11	0,1988	6,6387
0,2	0,2501	9,5954
0,6	0,3601	0,3608
1	0,0345	29
2	0,0790	50,6274
3	0,1238	72,7128
4	0,1667	96
5	0,2070	120,7771
6	0,2446	147,1918
7	0,2795	175,3320
8	0,3118	205,2548
9	0,3418	237
10	0,3696	270,5964

$$C_{Tp} = \frac{1}{2} \{ [0,0345 + 0,3696 + 2(0,079 + 0,1238 + \dots + 0,3118 + 0,3418)] + (1 - 0,05)[0,0345 + 0,0598] \}$$

$$C_{Tp} = 1,9729 \text{ kmol} / \text{m}^3$$

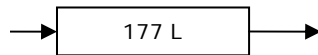
$$\tau_p = \int_4^{10} \frac{dC_A}{-r_A} + \int_{0,02}^{4_f} \frac{dC_A}{-r_A}$$

$$\tau_p = \frac{1}{2} \{ [270,6^{-1} + 96^{-1} + 2(120,8^{-1} + 147,2^{-1} + 175,3 + 205,3^{-1} + 237^{-\circ})] + 0,1399 \} = 0,0369 + 0,1399$$

$$\tau_p = 0,1768 \text{ min} \quad \Rightarrow \quad V = 177 \text{ L}$$

$$V_0 = 1 \text{ m}^3/\text{min}$$

$$C_{A0} = 10 \text{ kmol/m}^3$$



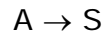
$$C_A = 0,02 \text{ kmol/m}^3$$

$$C_T = 1,9715 \text{ kmol/m}^3$$

$$C_R + C_S = 8,008 \text{ kmol/m}^3$$

Problemas 7.20; 7.21; 7.22 (p. 167-168)

Se conoce que la estequiometría de descomposición en fase líquida de A es:
 $A \rightarrow R$



En una serie de experimentos ($C_{A0} = 100$, $C_{R0} = C_{S0} = 0$) en estado estacionario en un reactor de laboratorio de mezcla completa se obtuvieron los siguientes resultados:

C_A	90	80	70	60	50	40	30	20	10	0
C_R	7	13	18	22	25	27	28	28	27	25

Experimentos posteriores indican que el nivel de C_R y C_S no tiene efecto en el avance de la reacción.

7.20 Con una alimentación $C_{A0} = 100$ y una concentración de salida $C_{Af} = 20$, halle la C_R a la salida de un reactor de flujo en pistón

7.21 Con $C_{A0} = 200$ y $C_{Af} = 20$, halle la C_R a la salida de un reactor de mezcla completa

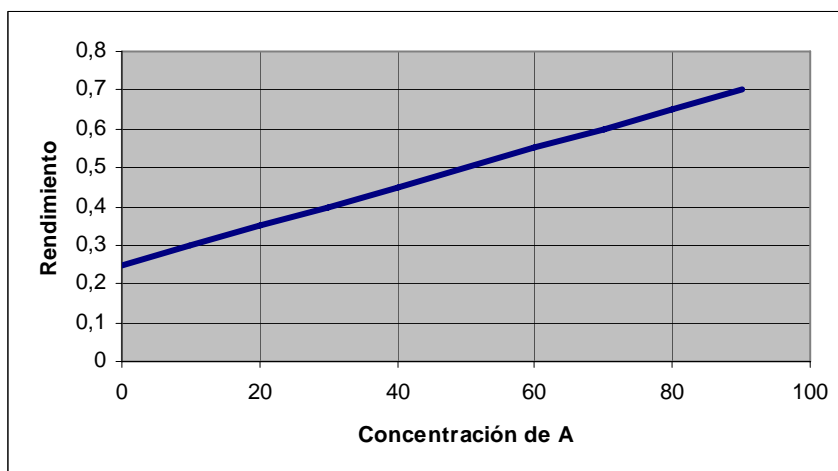
7.22 ¿Cómo debe operarse un reactor de mezcla completa para maximizar la producción de R?

Solución

Problema 7.20

$$\varphi = \phi_m = \frac{C_R}{C_{A0} - C_A} = \frac{C_R}{100 - C_A}$$

C_A	90	80	70	60	50	40	30	20	10	0
C_R	7	13	18	22	25	27	28	28	27	25
$\varphi = \Phi_m$	0,7	0,65	0,6	0,55	0,5	0,45	0,40	0,35	0,3	0,25



No se conoce el φ a $C_A = 100$; pero extrapolando se obtiene que:

$$\varphi_{100} = 0,75$$

$$C_{Rp} = \int_{C_{Af}}^{C_{A0}} \varphi dC_A \approx \frac{\Delta C_A}{2} \left[\varphi_0 + \varphi_f + \sum_{i=1}^{f-1} \varphi_i \right]$$

$$C_{Rp} = \frac{0,75 + 0,25}{2} (100 - 20) = 44$$

Problema 7.21

$$C_{Rm} = \varphi_{20} (\Delta C_A) = 0,35 (100 - 20) = 28$$

Problema 7.22

$$y = mx + b \quad \Rightarrow \quad \varphi = 0,25 + (0,4/80) C_A$$

$$C_R = \varphi (100 - C_A) = (0,25 + 0,005 C_A) (100 - C_A)$$

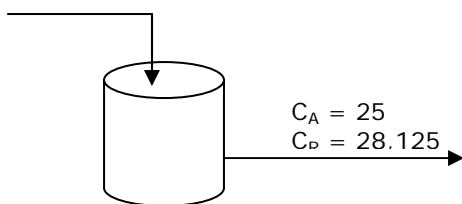
$$C_R = 25 + 0,25 C_A - 0,005 C_A^2$$

$$\frac{dC_R}{dC_A} = 0 = 0,25 - 0,005(2) C_A$$

$$C_A = 25$$

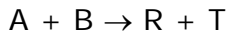
Comprobación

C_A	20	25	30
φ	0,35	0,375	0,4
C_R	28	28,125	28

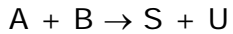


Problemas 7.23; 7.24; 7.25 (p. 168)

Cuando soluciones acuosas de A y B se unen reaccionan de 2 formas diferentes



$$r_R = 56 C_A$$



$$r_S = 100 C_B$$

Para dar una mezcla cuya concentración de componentes activos (A, B, R, T, S, U) es $C_{\text{total}} = C_{A0} + C_{B0} = 60 \text{ mol/m}^3$. Halle el tamaño del reactor requerido y la relación R/S producida para 90% de conversión de una alimentación equimolar $F_{A0} = F_{B0} = 360 \text{ mol/h}$.

7.23 En un reactor de mezcla completa

7.24 En un reactor de flujo en pistón

7.25 En el reactor que da mayor C_R , que según el capítulo 6 es un reactor de flujo en pistón con entrada lateral, de forma que la concentración de B se mantiene constante a lo largo de todo el reactor

Solución

$$C_{A0} = C_{B0} = 30 \text{ mol/m}^3$$

$$C_{A0} = 30 = \frac{F_{A0}}{v_0} = \frac{360}{v_0} \quad \Rightarrow \quad v_0 = \frac{360}{30} = 12 \text{ m}^3 / \text{h}$$

Todo el A que reacciona o pasa a R o pasa a S; pero la velocidad de reacción de A será

$$-r_A = r_R + r_S$$

$$-r_A = 56 C_A + 100 C_B$$

Como $C_{A0} = C_{B0}$ y reaccionan mol a mol,

$$C_A = C_B \therefore -r_A = 56 C_A + 100 C_A = 156 C_A$$

Problema 7.23

$$\frac{C_R}{C_S} = 0,56$$

$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_A}{156 C_A} = \frac{X_A}{156(1 - X_A)} = \frac{0,9}{156(0,1)} = 0,0577 \text{ h}$$

$$V_m = 0,0577(12) = 0,6924 \text{ m}^3 = 692,4 \text{ L}$$

Problema 7.24

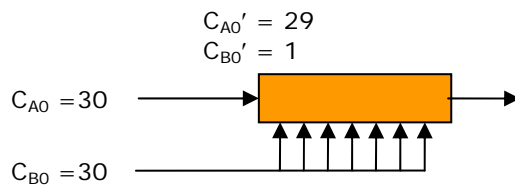
$$\tau_p = -\frac{\ln(1 - X_A)}{k} = -\frac{\ln 0,1}{156} = 0,01476 \text{ h}$$

$$V = 0,01476(12) = 0,1771 \text{ m}^3 = 177,1 \text{ L}$$

$$\frac{dC_R}{dC_S} = \frac{r_R}{r_S} = \frac{56C_A}{100C_B} = \frac{56}{100}$$

$$dC_R = 0,56dC_S \quad \Rightarrow \quad \frac{C_R}{C_S} = 0,56$$

Problema 7.25



Voy a suponer que $C_{B0}' = C_B = 1$ (constante) a lo largo del todo reactor

Balance de B en la entrada

$$R v_0 (30) = (R+1) v_0 (1)$$

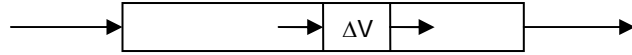
$$R = 1/29$$

Balance de A en la entrada

$$v_0 (30) = (R + 1) v_0 C_{A0}'$$

$$C_{A0}' = \frac{30}{R+1} = \frac{30}{\frac{1}{29} + 1} = 29$$

El flujo que circula por el reactor va aumentando de la entrada a la salida por la alimentación lateral



Balance de materiales para A alrededor de ΔV

$$vC_A|_V = vC_A|_{V+\Delta V} + (-r_A)\Delta V$$

$$-d(vC_A) = (-r_A)dV$$

Balance de materiales para B alrededor de ΔV

$$vC_B|_V + v'\Delta VC_{B0} = vC_B|_{V+\Delta V} + (-r_B)\Delta V$$

$$-d(vC_B) + v'C_{B0}dV = (-r_B)dV$$

Balance de Flujo

$$\frac{dv}{dV} = v'$$

Hay que resolver este sistema de 3 ecuaciones diferenciales con 3 variables

Problema 7.26 (p. 168)

El reactivo A se descompone en un reactor discontinuo que opera isotérmicamente ($C_{A0} = 100$) para producir el deseado R y el no deseado S y las siguientes lecturas son registradas

C_A	100	90	80	70	60	50	40	30	20	10	0
C_R	0	1	4	9	16	25	35	45	55	64	71

Corridas adicionales demuestran que el añadir R y S no afecta la distribución de productos y que solo A lo hace. También se encontró que el total de moles de A, R y S es constante.

a) Halle la curva de ϕ vs C_A

Con una alimentación de $C_{A0} = 100$ y $C_{Af} = 10$ halle C_R

b) En un reactor de mezcla completa

c) En un reactor de flujo en pistón

d) Repita b) con la modificación de $C_{A0} = 70$

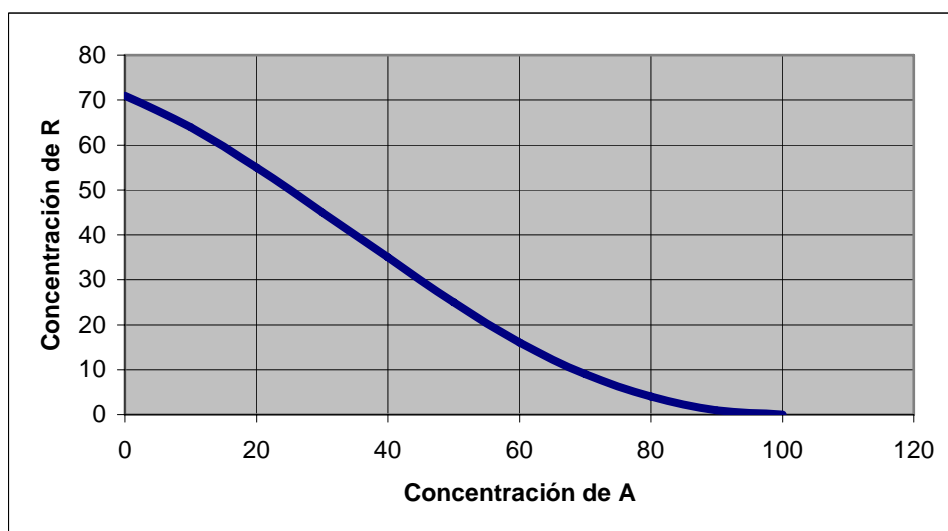
e) Repita c) con la modificación de $C_{A0} = 70$

Solución

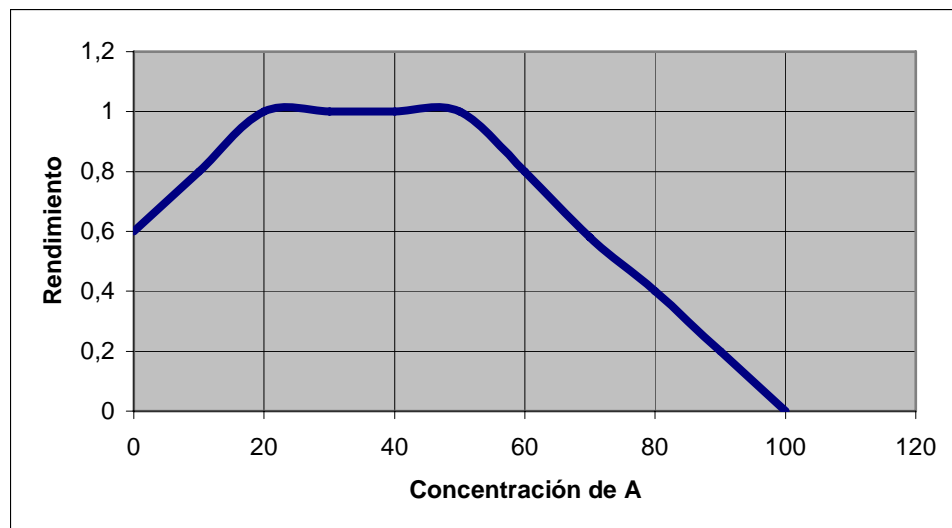
a)

$$\phi = \frac{dC_R}{-dC_A} = \text{pendiente de la tangente a la curva de } C_R \text{ vs } C_A \text{ en un punto}$$

Se grafica C_R vs C_A y se trazan las tangentes para diferentes valores de C_A . Se calculan las pendientes de las tangentes trazadas.



C_A	100	90	80	70	60	50	40	30	20	10	0
ΔC_R	0	2,0	4,0	5,8	8	10	10	10	10	8	6
ΔC_A	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
ϕ	0	0,2	0,4	0,58	0,8	1	1	1	1	0,8	0,6



b)

$$C_{Rm} = \varphi_{10} (100 - 10) = 0,8 (100 - 10) = 72$$

c)

$$C_{Rp} = \frac{10}{2} [0 + 1 + 2(0,2 + 0,4 + 0,55 + 0,75)] + 1(50 - 20) + \frac{10}{2} [1 + 0,8] = 63$$

d)

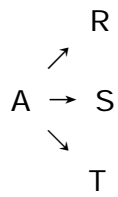
$$C_{Rm} = \varphi_{10} (70 - 10) = 0,8 (70 - 10) = 48$$

e)

$$C_{Rp} = \frac{10}{2} [0,55 + 1 + 2(0,75)] + 1(50 - 20) + \frac{10}{2} [1 + 0,8] = 54,25$$

Problema 7.28 (p. 168)

Halle el tamaño de los 2 reactores requeridos en el ejemplo 7.4 y para las velocidades de reacción dadas en unidades de mol/L s



$$r_R = 1$$

$$r_S = 2 C_A \text{ (deseado)}$$

$$r_T = C_A^2$$

Solución

$$-r_A = 1 + 2C_A + C_A^2 = (1 + C_A)^2$$

$$\tau_m = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{-r_{A1}} = \frac{2-1}{(1+1)^2} = 0,25 \text{ s}$$

$$V_m = \tau_m v_0 = 0,25(100) = 25 \text{ L}$$

$$\tau_p = \int_0^1 \frac{dC_A}{-r_A} = \int_0^1 \frac{dC_A}{(1 + C_A)^2}$$

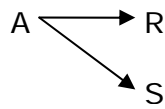
$$\int \frac{dx}{(a + bx)^2} = -\frac{1}{b(a + bx)} \quad a = 1; b = 1$$

$$\tau_p = -\frac{1}{1 + C_A} \Big|_0^1 = -\frac{1}{1+1} + \frac{1}{1} = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} = 0,5$$

$$V_p = \tau_p v_0 = 0,5(100) = 50 \text{ L}$$

Problema 7.13 (p. 166)

En un medio apropiado el reactivo A se descompone como sigue:

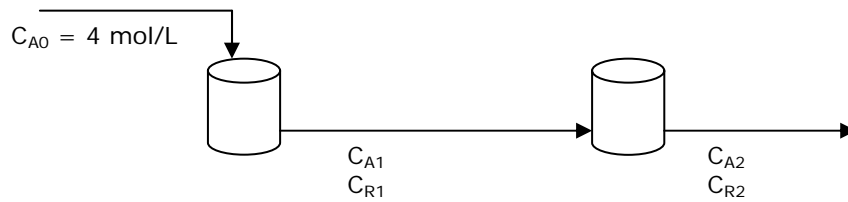


$$r_R = C_A \text{ mol/L s}$$

$$r_S = 1 \text{ mol/L s}$$

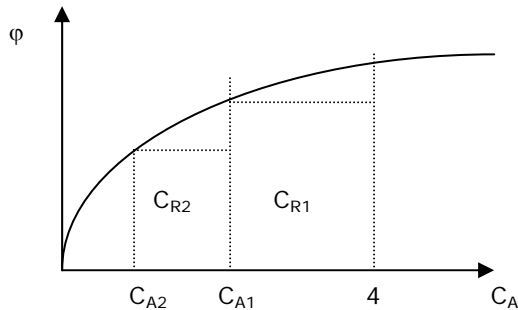
¿Qué relación debe existir entre los volúmenes de 2 reactores de mezcla completa en serie para maximizar la producción de R, si la alimentación contiene 4 mol de A/L? Halle también la composición de A y R a la salida de los reactores

Solución



$$\varphi = \frac{r_r}{-r_A} = \frac{C_A}{1 + C_A} \quad C_A \rightarrow 0 \quad \varphi \rightarrow 0; \quad C_A \rightarrow \infty \quad \varphi \rightarrow 1$$

$$C_R = \varphi \Delta C_A = \left(\frac{C_{A1}}{1 + C_{A1}} \right) (4 - C_{A1}) + \left(\frac{C_{A2}}{1 + C_{A2}} \right) (C_{A1} - C_{A2})$$



No se conoce C_{A1} ni C_{A2} ; pero fija C_{A2} existe un valor de C_{A1} que maximiza C_R y es el que hace $dC_R/dC_{A1} = 0$

$$\frac{dC_R}{dC_{A1}} = 0 = \frac{(1 + C_{A1})(4 - 2C_{A1}) - (4C_{A1} - C_{A1}^2)(1)}{(1 + C_{A1})^2} + \frac{C_{A2}}{1 + C_{A2}} (1)$$

$$\frac{4 - 2C_{A1} - C_{A1}^2}{(1 + C_{A1})^2} = -\frac{C_{A2}}{1 + C_{A2}}$$

Si $C_{A2} = 0,5 \text{ mol/L}$

$$\frac{4 - 2C_{A1} - C_{A1}^2}{(1 + C_{A1})^2} = -\frac{0,5}{1 + 0,5}$$

$$13 - 4C_{A1} - 2C_{A1}^2 = 0$$

$$C_{A1} = \frac{4 \pm \sqrt{4^2 - 4(13)(-2)}}{2(-2)} = 1,7386$$

$$C_{R2} = \frac{1,7386}{1 + 1,7386}(4 - 1,7386) + \frac{0,5}{1 + 0,5}(1,7386 - 0,5) = 1,8485$$

Vamos ahora probar $C_{A2} = 0,4 \text{ mol/L}$ y si C_{R2} disminuye, entonces probaremos $C_{A2} = 0,6 \text{ mol/L}$. Los resultados se muestran en la tabla a continuación

$C_{A2} \text{ (mol/L)}$	0,5	0,4	0,6
$C_{A1} \text{ (mol/L)}$	1,7386	1,6457	1,8284
$C_{R2} \text{ (mol/L)}$	1,8585	1,8203	1,8645

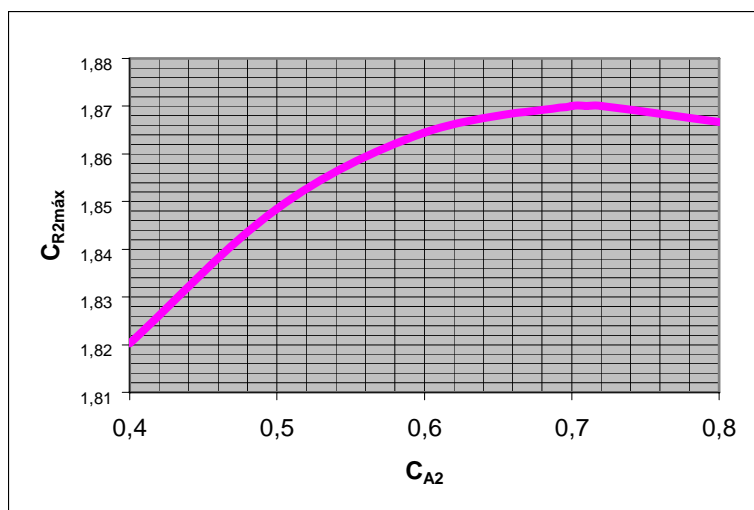
C_{R2} aumentó al pasar de $C_{A2} = 0,5$ a $C_{A2} = 0,6 \text{ mol/L}$, por lo que voy a probar valores de C_{A2} mayores. Los resultados se muestran en la tabla a continuación

$C_{A2} \text{ (mol/L)}$	0,6	0,7	0,8
$C_{A1} \text{ (mol/L)}$	1,8284	1,9155	2,00
$C_{R2} \text{ (mol/L)}$	1,8645	1,8700	1,8667

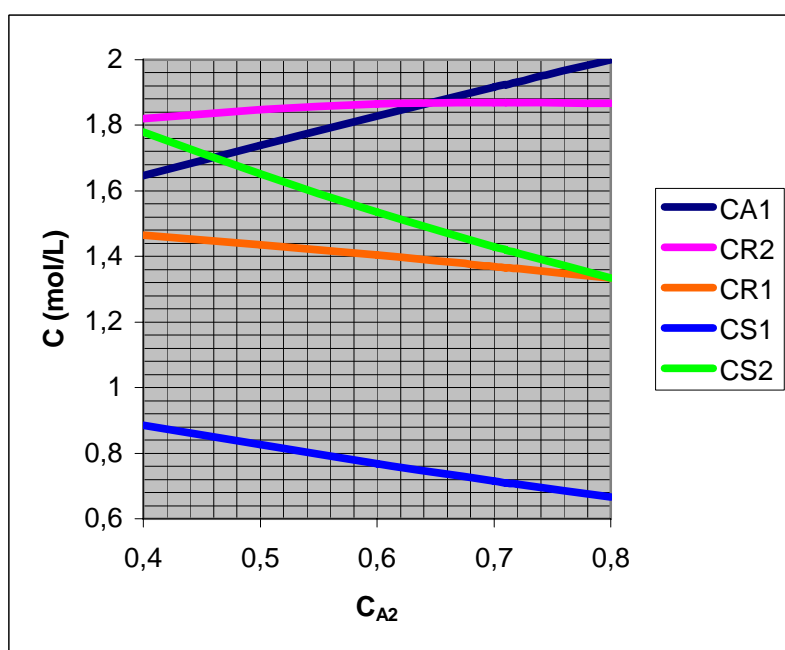
El valor de C_{A2} que maximiza C_{R2} está entre 0,7 y 0,8 mol/L. Probemos valores entre 0,7 y 0,8.

$C_{A2} \text{ (mol/L)}$	0,7	0,72	0,71
$C_{A1} \text{ (mol/L)}$	1,9155	1,9325	1,9325
$C_{R2} \text{ (mol/L)}$	1,8700	1,8700	1,8701

Los resultados de la búsqueda se muestran en el gráfico que sigue donde puede verse que C_{R2} tiene un máximo en $C_{A2} = 0,71 \text{ mol/L}$



También puede analizarse cómo varían C_{A1} , C_{R1} , C_{S1} y C_{S2} al variar C_{A2}

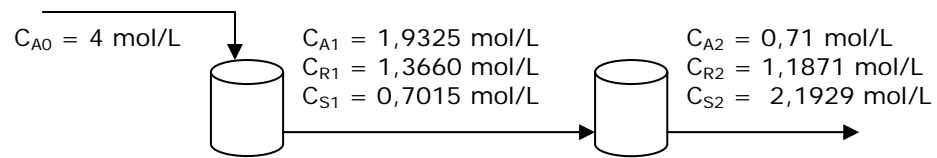


Obsérvese que, como era de esperar, tanto C_{S1} como $C_{S2} \downarrow$ al $\uparrow C_{A2}$.

$$\tau_{m1} = \frac{4 - 1,9240}{1 + 1,9240} = 0,7099 \text{ min}$$

$$\tau_{m2} = \frac{1,9240 - 0,71}{1 + 0,71} = 0,7099 \text{ min}$$

$$\frac{\tau_{m1}}{\tau_{m2}} = \frac{V_{m1}}{V_{m2}} = 1$$



**C
A
P
Í
T
U
L
O

8**

Problema 8.1 (p. 201)

Partiendo de corrientes separadas de A y B de una concentración dada (no está permitida la dilución con inertes) para la reacción serie-paralelo con la estequiometría y la velocidad mostradas



Haga un esquema del mejor patrón de contacto para ambas operaciones continua y discontinua

a) $r_1 = k_1 C_A C_B^2$
 $r_2 = k_2 C_R C_B$

b) $r_1 = k_1 C_A C_B$
 $r_2 = k_2 C_R C_B^2$

c) $r_1 = k_1 C_A C_B^2$
 $r_2 = k_2 C_R^2 C_B$

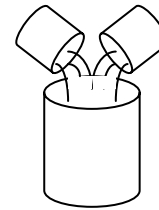
d) $r_1 = k_1 C_A^2 C_B$
 $r_2 = k_2 C_R C_B$

Solución

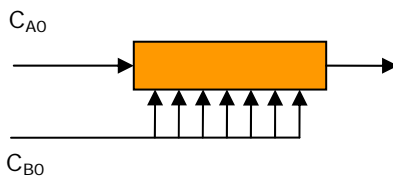
a) C_A y C_B altas



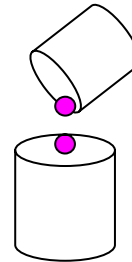
Adicionar A y B simultáneamente



b) C_A alta y C_B baja



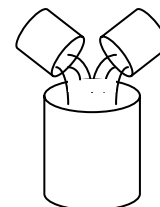
Con A dentro añadir B gota a gota



c) C_A alta y C_B no afecta la distribución de productos



Añadir A y B simultáneamente

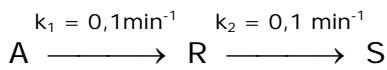


d)

C_A alta y C_B no afecta la distribución de productos, por lo tanto es idem al anterior

Problema 8.2 (p. 201)

Bajo condiciones apropiadas A se descompone como sigue



R va a ser producido a partir de 1000 L/h de una alimentación en la cual $C_{A0} = 1 \text{ mol/L}$, $C_{R0} = C_{S0} = 0$

- ¿Qué tamaño de reactor de flujo pistón maximizará la concentración de R y cuál es esta concentración en la corriente de salida?
- ¿Qué tamaño de reactor de mezcla completa maximizará la concentración de R y cuál es esta concentración en la corriente de salida?

Solución

$$\frac{C_{R_{\max}}}{C_{A0}} = \frac{1}{e} = 0,3680 \quad \Rightarrow \quad C_{R_{\max}} = 0,367879 \text{ mol/L} \quad \text{ecuación 8.38 (p.188)}$$

$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{C_A}{C_{A0}} \ln \frac{C_{A0}}{C_A} \quad \text{ecuación 8.37 (p.188)}$$

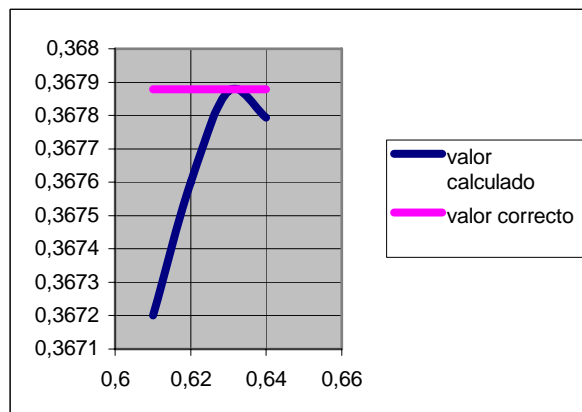
$$\frac{C_R}{C_{A0}} = (1 - X_A) \ln \frac{1}{1 - X_A} = 0,367879$$

Resolviendo la ecuación anterior por tanteo y error

X_A	Valor calculado
0,61	0,367258
0,62	0,367600
0,63	0,367873
0,64	0,367794

$$X_A = 0,632$$

$$C_R = 0,367879$$



$$\tau_p = -\frac{\ln(1 - X_A)}{k_1} = \frac{\ln(1 - 0,632)}{0,1} = 10 \text{ min} \Rightarrow V_p = 10 \text{ min} \left(\frac{1000 \text{ L}}{h} \right) \left(\frac{1h}{60 \text{ min}} \right) = 167 \text{ L}$$

b)

$$\frac{C_{R\text{máx}}}{C_{A0}} = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{k_2}{k_1}\right)^{1/2}\right]^2} = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{0,1}{0,1}\right)^{1/2}\right]^2} 0,25 \quad \Rightarrow \quad C_{R\text{máx}} = 0,25 \text{ mol/L}$$

$$\tau_{\text{ópt}} = \frac{1}{\sqrt{k_1 k_2}} = \frac{1}{\sqrt{(0,1)^2}} = 10 \text{ min} \quad \Rightarrow \quad V_m = 10 \text{ min} \left(\frac{1000 \text{ L}}{h} \right) \left(\frac{1h}{60 \text{ min}} \right) = 167 \text{ L}$$

$$\tau_{\text{ópt}} = \frac{C_{A0} - C_A}{k_1 C_A} = 10 = \frac{1 - C_A}{0,1 C_A} \quad \Rightarrow \quad C_A = 0,5 \text{ mol/L}$$

Resumen					
	C _R (mol/L)	X _A (mol/L)	V (L)	C _S (mol/L)	C _R /C _S
Pistón	0,368	0,632	167	0,267	1,38
Mezcla	0,25	0,5	167	0,25	1

Problemas 8.3; 8.4; 8.5 (p. 201)

Se alimenta A puro ($C_{A0} = 100$) a un reactor de mezcla completa donde se forman R y S y las siguientes concentraciones son registradas. Halle un esquema cinético que satisfaga estos datos.

8.3	Corrida	C_A	C_R	C_S
	1	75	15	10
	2	25	45	30
8.4	Corrida	C_A	C_R	C_S
	1	50	33 1/3	16 2/3
	2	25	30	45
8.5	Corrida	C_A	C_R	C_S
	1	50	40	5
	2	20	40	20

Solución

En los 3 casos $C_A + C_R + C_S = 100 \therefore$ de la transformación de A salen R y S

Problema 8.3

Probemos reacciones en serie de primer orden



Busquemos k_2/k_1 con los 2 puntos experimentales en la Fig. 8.14 (pág. 191)

Corrida	X_A	C_R/C_{A0}	k_2/k_1	\therefore No chequea
1	0,25	0,15	2	
2	0,75	0,45	1/2	

Probemos ahora con reacciones en paralelo

k_1	Corrida	C_A	$\Phi_R = \varphi_{Rf}$	$\Phi_S = \varphi_{Sf}$
$A \rightarrow R$	1	75	$15/25 = 0,6$	$10/25 = 0,4$
k_2	2	25	$45/75 = 0,6$	$30/75 = 0,4$
$A \rightarrow S$				

El rendimiento instantáneo no varía con la concentración, lo que indica que son reacciones en paralelo del mismo orden

$$\varphi = 0,6 = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \Rightarrow k_1 = 1,5k_2$$

Conclusión	k_1	$r_R = 1,5 k_2 C_A^n$
	$A \rightarrow R$	
	k_2	$r_S = k_2 C_A^n$
	$A \rightarrow S$	

Problema 8.4

X_A	0,50 \longrightarrow 0,75
C_A	50 \longrightarrow 25
C_R	33 1/3 \longrightarrow 30
C_S	16 2/3 \longrightarrow 45

Quando la conversión aumenta, la C_R disminuye y C_S aumenta. No es paralelo. Debe ser serie, después que se pasa el óptimo.
 Probemos $A \rightarrow R \rightarrow S$, todas de primer orden

$$C_R = \frac{C_A(C_{A0} - C_A)}{C_A + \frac{k_2}{k_1}(C_{A0} - C_A)} \quad \text{ecuación 8.41 (pág. 189)}$$

$$\frac{k_2}{k_1} = \frac{C_A + \frac{C_A(C_{A0} - C_A)}{C_R}}{(C_{A0} - C_A)} = \frac{50 + \frac{50(100 - 50)}{50}}{(100 - 50)} = 0,5$$

$$C_R = \frac{25(100 - 25)}{25 + 0,5(100 - 25)} = 30 \quad \text{Chequea}$$

Conclusión



$$-r_A = k_1 C_A$$

$$r_R = k_1 C_A - 0,5 k_1 C_R$$

$$r_S = 0,5 k_1 C_R$$

Problema 8.5

X_A	0,50 \longrightarrow 0,8
C_A	50 \longrightarrow 20
C_R	40 \longrightarrow 40
C_S	10 \longrightarrow 40

Quando la conversión aumenta, la C_R es constante y C_S aumenta. No es paralelo. Debe ser serie, con un punto antes del óptimo y uno después.
 Probemos $A \rightarrow R \rightarrow S$, todas de primer orden

$$\frac{k_2}{k_1} = \frac{C_A + \frac{C_A(C_{A0} - C_A)}{C_R}}{(C_{A0} - C_A)} = \frac{50 + \frac{50(100 - 50)}{40}}{(100 - 50)} = 1,25$$

$$C_R = \frac{20(100 - 20)}{25 + 1,25(100 - 20)} = 40 \quad \text{Chequea}$$

$$\tau_m = 5 = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A} = \frac{C_{A0} - C_A}{k_1 C_A} = \frac{100 - 50}{50 k_1} = \frac{1}{k_1} \Rightarrow k_1 = 0,2 \text{ min}^{-1} \quad \text{y} \quad k_2 = 0,05 \text{ min}^{-1}$$

$$\tau_m = \frac{C_S}{-r_S} = \frac{C_S}{k_2 C_R} = \frac{40}{0,05(40)} = 20 \quad \text{Chequea}$$

Conclusión



$$-r_A = 0,2 C_A$$

$$r_R = 0,2 C_A - 0,05 C_R$$

$$r_S = 0,05 C_R$$

Problema 8.6 (p. 202)

En la molienda continua de pigmentos para pintura nuestra compañía encontró que demasiadas partículas demasiado pequeñas y demasiadas partículas demasiado grandes salían del molino completamente mezclado. Un molino multietapa, que se aproxima a flujo en pistón pudiera también haber sido utilizado; pero no lo fue. De cualquier forma, en cualquier molino las partículas son reducidas progresivamente a menores tamaños.

Actualmente la corriente de salida de salida del molino completamente mezclado contiene 10 % de partículas muy grandes ($d_p > 147\mu\text{m}$), 32 % del tamaño justo ($d_p = 38 - 147\mu\text{m}$) y 58 % de partículas demasiado pequeñas ($d_p < 38\mu\text{m}$)

- a) ¿Puede usted sugerir un esquema de molienda mejor para nuestra unidad actual y que resultado dará?
- b) ¿Qué se puede decir acerca del molino multietapa, cómo hacerlo?

Por mejor se entiende obtener más partículas del tamaño justo en la corriente de salida. No es práctico la separación y recirculación

Solución

Partículas grandes \rightarrow Partículas apropiadas \rightarrow Partículas pequeñas

$A \rightarrow R \rightarrow S$

Base de cálculo: 100 partículas (10 de A, 32 R y 58 de S)

Hay demasiadas partículas pequeñas así que hay que reducir el tiempo de residencia, incrementando el flujo de alimentación

Para hacer un estimado, supongamos que una reacción en serie de primer orden puede representar la molienda

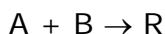
Con $X_A = 0,9$ y $C_R/C_{A0} = 0,32$ se encuentra que $k_2/k_1 \approx 0,2$

Si $k_2/k_1 \approx 0,2 \Rightarrow C_{R \text{ máx}}/C_{A0} = 0,48$ y $X_A = 0,75$ y se podrán obtener 25 % de partículas muy grandes, 48 % de partículas de tamaño apropiado y 22 % de partículas muy pequeñas

b) El multietapa es mejor, pudiéndose obtener 15 % de partículas muy grandes, 67 % de partículas de tamaño apropiado y 18 % de partículas muy pequeñas

Problema 8.7 (p. 202)

Considere el siguiente sistema de reacciones elementales



- Un mol de A y 3 moles de B son rápidamente mezclados. La reacción es muy lenta permitiendo que se realicen análisis a diferentes tiempos. Cuando 2,2 moles de B permanecen sin reaccionar 0,2 mol de S están presentes en la mezcla. ¿Cuál será la composición de la mezcla (A, B, R y S) cuando la cantidad de S presente sea de 0,6?
- Un mol de A es añadido gota a gota a 1 mol de B con un mezclado constante. Se dejó toda la noche y entonces analizado, encontrándose 0,5 mol de S. ¿Qué puede decirse acerca de k_2/k_1 ?
- Un mol de A y un mol de B son mezclados en un frasco. La reacción es muy rápida y se completa antes de poder hacer cualquier medición. Analizando los productos de la reacción se encontraron presentes 0,25 mol de S. ¿Qué puede decirse acerca de k_2/k_1 ?

Solución

a)

De la figura 8.13 (p. 190) con

$$\Delta C_B/C_{A0} = (3-2,2)/1 = 0,8 \text{ y } C_S/C_{A0} = 0,2$$

Se encuentra que $k_2/k_1 = 0,8$

$$\text{Con } k_2/k_1 = 0,8 \text{ y } C_S/C_{A0} = 0,6$$

Se encuentra que $X_A = 0,9 \Rightarrow C_A = 0,1 \text{ mol/L}$

$$C_R/C_{A0} = 0,3 \Rightarrow C_R = 0,3 \text{ mol/L}$$

$$\Delta C_B/C_{A0} = 1,5 \Rightarrow C_B = 1,5 \text{ mol/L}$$

b)

Si $k_2 \gg k_1$ todo el R que se forme reacciona inmediatamente para formar S, consumiendo la misma cantidad de B que la que se requirió para formar R, así que

B requerido para R = B consumido para S

O sea que se podrán formar 0,5 mol de S cuando todo el B haya reaccionado.

Como en este caso $S = 0,5 \text{ mol} \Rightarrow k_2 \gg k_1$

c)

Ya se dijo que si $k_2 \gg k_1$, $S = 0,5 \text{ mol}$ cuando B se agotó.

Si $S < 0,5 \text{ mol} = 0,25 \text{ mol}$, eso implica que

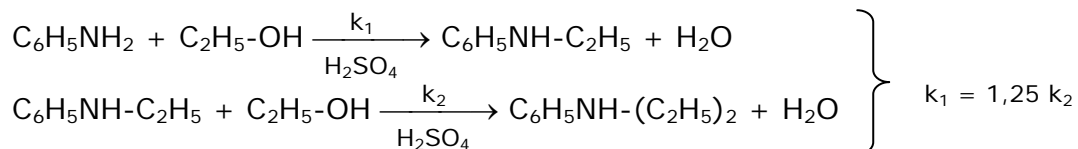
B consumido para dar $S = 0,25$

B consumido para dar $R = 0,75$

$$k_2/k_1 < 1$$

Problema 8.8 (p. 202)

La reacción en fase líquida de la anilina y el etanol produce la deseada monoetil anilina y la no deseada dietil anilina



- Una alimentación equimolar es introducida en un reactor discontinuo y se deja que reaccione completamente. Halle la concentración de reactivos y productos al final de la corrida
- Halle la razón de mono a dietil anilina producida en un reactor de mezcla completa para una alimentación 2-1 alcohol anilina y un 70 % de conversión
- Para un reactor de flujo en pistón alimentado con una corriente equimolar cuál será la conversión de los 2 reactivos cuando la concentración de monoetil anilina es máxima

Solución

a)

$$C_B = 0$$

$$C_{A0} = C_{B0} \therefore (C_{B0} - C_B)/C_{A0} = 1$$

$$k_2/k_1 = 1/1,25 = 0,8$$

En la fig. 8-13 (p. 190) se encuentra $X_A = 0,7$ y $C_R/C_{A0} = 0,42$

Base de cálculo: 100 mol de A y 100 mol de B

$$B = 0$$

$$A = 30 \%$$

$$R = 40,87 \%$$

$$S = 29,13 \%$$

b)

$$k_2/k_1 = 0,8$$

$$X_A = 0,7$$

Base de cálculo: 100 mol de A y 200 mol de B

$$C_R = \frac{C_A \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}}{\frac{C_A}{C_{A0}} + \frac{k_2}{k_1} \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}} = \frac{30(0,7)}{0,3 + 0,8(0,7)} = 24,42 \text{ mol}$$

$$C_S = 100 - 30 - 24,42 = 45,58 \text{ mol}$$

$$\Delta C_B = 24,42 + 2(45,58) = 115,58 \quad \Rightarrow \quad C_B = 84,42 \text{ mol}$$

Componente	Moles	%
A	30,00	16,26
R	24,42	13,24
S	45,58	24,72
B	84,42	45,78
Total	184,42	100,00

$$C_R/C_S = 24,42/45,58 = 0,538$$

c)

$$C_{A0} = C_{B0}$$

$$k_2/k_1 = 0,8$$

$$\frac{C_{R\max}}{C_{A0}} = \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{\frac{k_2}{k_2 - k_1}} = (1,25)^{\frac{1}{1 - 1,25}} = 0,4096$$

$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{1}{1 - \frac{k_2}{k_1}} \left[(1 - X_A)^{\frac{k_2}{k_1}} - (1 - X_A) \right] = \frac{1}{1 - 0,8} \left[(1 - X_A)^{0,8} - (1 - X_A) \right] = 0,4096$$

Por tanteo $X_A = 0,668$

$$C_{A0} = C_A + C_R + C_S \quad \Rightarrow \quad C_S = 100 - 30 - 40,96 = 29,04$$

$$\Delta C_B = \Delta C_R + 2 \Delta C_S \quad \Rightarrow \quad \Delta C_B = 40,96 + 2 (29,04) = 99,04$$

$$X_B = \Delta C_B / C_{B0} = 99,04 / 100 = 0,9904$$

Problema 8.9 (p. 203)

La monoetil anilina también puede ser producida en fase gaseosa en una cama fluidizada usando bauxita natural como catalizador. Las reacciones elementales son mostradas en el problema previo. Usando una alimentación equimolar de anilina y etanol, la cama fluidizada produce 3 partes de monoetil anilina y 2 partes de dietil anilina para un 40 % de conversión de la anilina. Suponiendo flujo en mezcla completa para la cama fluidizada, halle k_2/k_1 y la razón de concentración de reactivos y productos a la salida del reactor.

Solución

Base de cálculo: 100 mol de A y 100 mol de B

$$X_A = 0,4 \Rightarrow C_A = C_{A0} (1 - X_A) = 100 (1 - 0,4) = 60$$

$$C_{A0} = C_A + C_R + C_S$$

$$C_R/C_S = 2/3 \Rightarrow C_S = 2 C_R/3$$

$$100 = 60 + C_R + 2 C_R/3 \Rightarrow \begin{aligned} C_R &= 24 \text{ mol} \\ C_S &= 16 \text{ mol} \end{aligned}$$

$$\Delta C_B = \Delta C_R + 2 \Delta C_S$$

$$C_{B0} - C_B = 24 + 2 (16) = 56 \Rightarrow C_B = 44 \text{ mol}$$

Con $C_R/C_{A0} = 0,24$ y $X_A = 0,4$ a partir de la ecuación siguiente

$$C_R = \frac{C_A X_A}{\frac{C_A}{C_{A0}} + \frac{k_2}{k_1} X_A} = \frac{60(0,4)}{0,6 + \frac{k_2}{k_1} 0,4} = 24$$

$$\frac{k_2}{k_1} = \frac{1 - 0,6}{0,4} = 1$$

Componente	Moles	%
A	60	41,67
R	24	16,67
S	16	11,11
B	44	30,55

Problemas 8.10; 8.11 (203)

Bajo la acción enzimática A se convierte en productos como sigue



Donde las constantes cinéticas son dependientes del pH del sistema

- ¿Qué arreglo de reactor (pistón, mezcla o cascada de tanques) y qué nivel uniforme de pH usted usaría?
- Si fuera posible cambiar el nivel a lo largo del reactor, qué nivel de pH usted usaría?

8.10 $k_1 = \text{pH}^2 - 8 \text{ pH} + 23$ $k_2 = \text{pH} + 1$ R es el deseado

8.11 $k_1 = \text{pH} + 1$ $k_2 = \text{pH}^2 - 8 \text{ pH} + 23$ S es el deseado

Solución

Problema 8.10

Como R es el deseado lo conveniente es k_1 alta y k_2 baja

pH	k_1	k_2
2	11	3
3	8	4
4	7	5
5	8	6
6	11	7

A pH = 2 se tiene que $k_1 = 11$ (valor máximo) y $k_2 = 3$ (valor mínimo), así que lo más conveniente es trabajar con pH = 2 y mantenerlo constante. El reactor que debe usarse es el de flujo en pistón

Problema 8.11

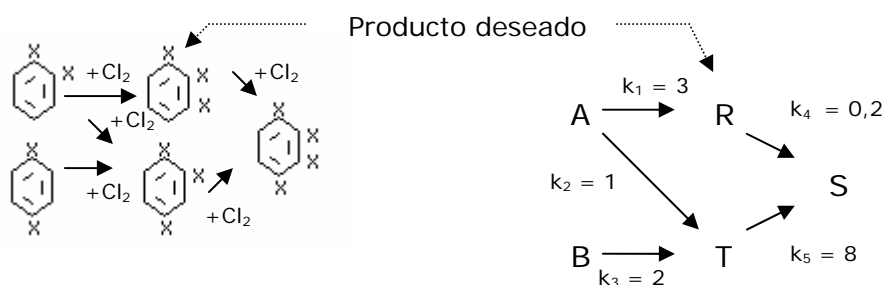
Como S es el deseado se requiere tanto k_1 como k_2 altas

pH	k_1	k_2
2	3	11
3	4	8
4	5	7
5	6	8
6	7	11

A pH = 6 se tiene que $k_1 = 7$ (valor máximo) y $k_2 = 11$ (valor máximo), así que lo más conveniente es trabajar con pH = 6 y mantenerlo constante. El reactor que debe usarse es el de mezcla completa

Problema 8.12 (p. 203)

La clorinación progresiva de o- y p- diclorobenceno ocurre con una cinética de segundo orden, como se muestra



Para una corriente de alimentación que tiene $C_{A0} = 2$ y $C_{B0} = 1$ y el 1,2,3 triclorobenceno como producto deseado

- Diga qué reactor continuo es mejor
- En este reactor halle C_R máxima

Solución

a)

R está en serie con A y S, así que lo más conveniente es usar el reactor de flujo en pistón

b)

Al igual que en reacciones en paralelo C_R es el área bajo la curva de ϕ vs C_A . Así que vamos a buscar $\phi = f(C_A)$

$$\phi = \frac{dC_R}{-dC_A} = \frac{k_1 C_A - k_2 C_R}{k_{12} C_A} \quad \text{donde} \quad k_{12} = (k_1 + k_2)$$

No es posible separar variables e integrar porque ϕ es función también de C_R ; pero es una ecuación diferencial lineal de primer orden con factor integrante.

$$\frac{dC_R}{dC_A} - \frac{k_4}{k_{12}} \frac{1}{C_A} C_R = -\frac{k_1}{k_{12}}$$

En la Sección 2, página 3 del Perry, 4^{ta} edición, se encuentra la solución

$$\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$$

$$y = e^{-\int P(x)dx} \left\{ \int Q(x) e^{\int P(x)dx} dx \right\}$$

$$y = C_R \quad x = C_A \quad P(x) = -\frac{k_4}{k_{12}} \frac{1}{C_A} \quad Q(x) = -\frac{k_1}{k_{12}}$$

$$\int P(x)dx = -\int \frac{k_4}{k_{12}} \frac{1}{C_A} dC_A = \ln C_A^{-\frac{k_4}{k_{12}}}$$

$$e^{\int P(x)dx} dx = C_A^{-\frac{k_4}{k_{12}}}$$

$$e^{-\int P(x)dx} dx = C_A^{\frac{k_4}{k_{12}}}$$

$$\int Q(x) e^{\int P(x)dx} dx = -\frac{k_1}{k_{12}} \int C_A^{-\frac{k_4}{k_{12}}} dC_A = -\frac{k_1}{k_{12}} \left(\frac{C_A^{1-\frac{k_4}{k_{12}}}}{1-\frac{k_4}{k_{12}}} \right)$$

$$C_R = C_A^{\frac{k_4}{k_{12}}} \left\{ -\frac{k_1}{k_{12}} \left(\frac{C_A^{1-\frac{k_4}{k_{12}}}}{1-\frac{k_4}{k_{12}}} \right) + \text{Constante} \right\}$$

$$\text{Cuando } C_A = C_{A0} \quad C_R = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{Constante} = \frac{k_1}{k_{12}} \left(\frac{C_{A0}^{1-\frac{k_4}{k_{12}}}}{1-\frac{k_4}{k_{12}}} \right)$$

$$C_R = C_A^{\frac{k_4}{k_{12}}} \left\{ \frac{k_1}{k_{12}} \left(\frac{C_A^{1-\frac{k_4}{k_{12}}}}{1-\frac{k_4}{k_{12}}} \right) + \frac{k_1}{k_{12}} \left(\frac{C_{A0}^{1-\frac{k_4}{k_{12}}}}{1-\frac{k_4}{k_{12}}} \right) \right\}$$

Dividiendo toda la ecuación por C_{A0} sacando factor común la relación de constantes de dentro de la llave y efectuando la multiplicación indicada

$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{\frac{k_1}{k_{12}}}{1 - \frac{k_4}{k_{12}}} \left\{ \frac{C_{A0} (C_{A0})^{\frac{k_4}{k_{12}}} (C_A)^{\frac{k_4}{k_{12}}}}{C_{A0}} - \frac{(C_A)^{1 - \frac{k_4}{k_{12}} + \frac{k_4}{k_{12}}}}{C_{A0}} \right\}$$

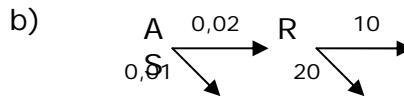
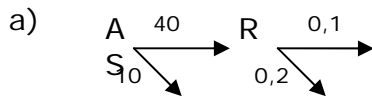
$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{k_1}{k_{12} - k_4} \left\{ \left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right)^{\frac{k_4}{k_{12}}} - \frac{C_A}{C_{A0}} \right\}$$

Nótese que se podía haber obtenido de la ecuación 8.48 (pág. 195) haciendo $k_{34} = k_3 + k_4 = k_4$ porque $k_3 = 0$

$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{k_1}{k_{12}} \left(\frac{k_{12}}{k_4} \right)^{\frac{k_4}{k_4 - k_{12}}} = \frac{3}{4} \left(\frac{4}{0,2} \right)^{0,2/(0,2+4)} = 0,865 \quad \Rightarrow \quad C_R = 2(0,865) = 1,73 \text{ mol}$$

Problema 8.13 (p. 204)

Considere las siguientes descomposiciones de primer orden con las constantes cinéticas mostradas

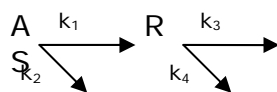


Si un colega reporta que $C_S = 0,2 C_{A0}$ en la corriente de salida de un reactor de flujo en pistón, que puede decirse de la concentración de los demás componentes, A, R, T y U en la corriente de salida

Solución

Supongo $C_{R0} = C_{T0} = C_{S0} = C_{U0} = 0$

a) Plantea Levenspiel, 3^{ra} edición para calcular la distribución de productos de las reacciones del tipo



$$k_{12} = k_1 + k_2$$

$$k_{34} = k_3 + k_4$$

las ecuaciones 8.44 a 8.50 (pág. 195) para el reactor de flujo en pistón y las ecuaciones 8.51 a 8.57 (pág. 196) para el reactor de mezcla completa. La ecuación 8.46 es:

$$\frac{C_S}{C_{A0}} = \frac{k_1 k_3}{k_{34} - k_{12}} \left[\frac{\exp(-k_{34}t)}{k_{34}} - \frac{\exp(-k_{12}t)}{k_{12}} \right] + \frac{k_1 k_3}{k_{12} k_{34}}$$

$$k_1 = 40 \quad k_2 = 10 \quad k_{12} = 50 \quad k_3 = 0,1 \quad k_4 = 0,2 \quad k_{34} = 0,3$$

$$\frac{C_S}{C_{A0}} = \frac{40(0,1)}{0,3 - 50} \left[\frac{\exp(-0,3t)}{0,3} - \frac{\exp(-50t)}{50} \right] + \frac{40(0,1)}{50(0,3)}$$

$$0,2 = 0,0805 \left[\frac{\exp(-0,3t)}{0,3} - \frac{\exp(-50t)}{50} \right] + 0,2667$$

$$\frac{\exp(-50t)}{50} \approx 0$$

$$0,2 = 0,0805 \left[\frac{\exp(-0,3t)}{0,3} \right] + 0,2667 \quad \Rightarrow \quad t = \frac{\ln \frac{0,0667(0,3)}{0,0805}}{0,3} = 4,64$$

Chequeando si la suposición $\frac{\exp(-50t)}{50} \approx 0$ fue correcta

$$\frac{C_S}{C_{A0}} = 0,0805 \left[\frac{\exp(-0,3t)}{0,3} - \frac{\exp(-50t)}{50} \right] + 0,2667 = 0,1992$$

$$\therefore t = 4,6$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \exp(-k_{12}t) = \exp[50(4,6)] = 0 \quad \text{ecuación 8.44 (pág. 195)}$$

$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{k_1}{k_{34} - k_{12}} \{ \exp(-k_{12}t) - \exp(-k_{34}t) \} = \frac{40}{0,3 - 50} \{ -\exp[-0,3(4,6)] \} = 0,2025 \quad \text{ec. 8.45 (195)}$$

$$\frac{C_T}{C_{A0}} = \frac{k_2}{k_{12}} [1 - \exp(-k_{12}t)] = \frac{10}{50} \{ 1 - \exp[-10(4,6)] \} = 0,2 \quad \text{ecuación 8.47 (pág. 195)}$$

$$\frac{C_U}{C_{A0}} = \frac{k_1 k_4}{k_{34} - k_{12}} \left[\frac{\exp(-k_{34}t)}{k_{34}} - \frac{\exp(-k_{12}t)}{k_{12}} \right] + \frac{k_1 k_4}{k_{12} k_{34}} \quad \text{igual que } C_S; \text{ pero con } k_4 \text{ por } k_3$$

$$\frac{C_U}{C_{A0}} = \frac{40(0,2)}{0,3 - 50} \left\{ \frac{\exp[-0,3(4,6)]}{0,3} \right\} + \frac{40(0,2)}{50(0,3)} = 0,3983$$

$$C_A = 0$$

$$C_R = 0,2 C_{A0}$$

$$C_S = 0,2 C_{A0}$$

$$C_T = 0,2 C_{A0}$$

$$C_U = 0,4 C_{A0}$$

Si de S hay 0,2 C_{A0} , de U debe haber 0,4 C_{A0} . Como la velocidad de descomposición de A es tan grande con respecto a la de formación de S, es obvio que si de S hay 0,2 C_{A0} , de A ya no debe quedar nada. En estas condiciones $C_T = 0,25 (C_R + C_S + C_U)$

b) Utilizando las mismas ecuaciones anteriores: pero con

$$k_1 = 0,02 \quad k_2 = 0,01 \quad k_{12} = 0,03 \quad k_3 = 10 \quad k_4 = 20 \quad k_{34} = 30$$

Se obtienen los siguientes resultados

$$t = 76,8195$$

$$C_A = 0,1$$

$$C_R = 0$$

$$C_S = 0,2 C_{A0}$$

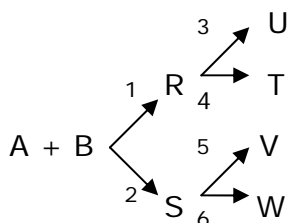
$$C_T = 0,3 C_{A0}$$

$$C_U = 0,4 C_{A0}$$

Este resultado es obvio, U debe ser el doble de S, R es 0 porque su velocidad de formación es muy pequeña comparada con la de descomposición. Por la reacción 1 se formaron 0,6 C_{A0} moles de R, entonces debe haber 0,3 C_{A0} moles de T

Problema 8.14 (p. 204)

Se unen en un recipiente los reactivos A y B y allí reaccionan de acuerdo a las siguientes reacciones elementales



$$\text{con } C_{A0} = C_{B0}$$

¿Qué puede usted decir acerca de las 6 constantes cinéticas si un análisis de la mezcla arroja

$$C_T = 5 \text{ mol/L}$$

$$C_V = 9 \text{ mol/L}$$

$$C_U = 1 \text{ mol/L}$$

$$C_W = 3 \text{ mol/L}$$

En el momento

- Que la reacción está incompleta?
- Que la reacción está completa?

Solución

a)

Puede decirse que $k_3 > k_4$ y $k_5 > k_6$. No puede concluirse nada acerca de k_1 y k_2 porque aunque por la rama de R hay menos moles que por la rama de S puede ocurrir que $k_1 > k_2$ y que k_3 y k_4 sean chiquitas y haya acumulación de R. También puede ocurrir que $k_1 < k_2$ y que $k_1 < k_3$ y k_4 de forma que todo el R que se forma pase a T y U

b)

Si la reacción ya fue completada y sólo queda T, U, V y W por la rama de arriba se formaron 5 moles de T y 1 de U, o sea que hubo 6 moles de R que se transformaron a U y T, mientras que por la rama de abajo se formaron 9 mol de V y 3 mol de W, es decir que hubo 12 mol de S. En este caso puede concluirse que

$$k_1 < k_2$$

$$\text{Velocidad de formación de R} = dC_R/dt = k_1 C_A C_B$$

$$\text{Velocidad de formación de S} = dC_S/dt = k_2 C_A C_B$$

$$dC_R = \frac{k_1}{k_2} dC_S \quad \Rightarrow \quad \frac{k_1}{k_2} = \frac{C_R}{C_S} = \frac{6}{12} \quad \Rightarrow \quad k_2 = 2k_1$$

Velocidad de formación de T = $dC_T/dt = k_3 C_A C_B$

Velocidad de formación de U = $dC_U/dt = k_4 C_A C_B$

$$dC_T = \frac{k_3}{k_4} dC_U \quad \Rightarrow \quad \frac{k_3}{k_4} = \frac{C_T}{C_U} = \frac{5}{1} \quad \Rightarrow \quad k_3 = 5k_4 \quad \text{válido para a)}$$

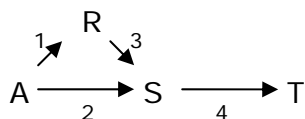
Velocidad de formación de V = $dC_V/dt = k_5 C_A C_B$

Velocidad de formación de W = $dC_W/dt = k_6 C_A C_B$

$$dC_V = \frac{k_5}{k_6} dC_W \quad \Rightarrow \quad \frac{k_5}{k_6} = \frac{C_V}{C_W} = \frac{9}{3} \quad \Rightarrow \quad k_5 = 3k_6 \quad \text{válido para a)}$$

Problema 8.15 (p. 205)

Con un catalizador particular y a una temperatura dada, la oxidación de naftaleno a anhídrido ftálico procede como sigue



A = naftaleno
 R = naftaquinona
 S = anhídrido ftálico
 T = productos de oxidación

$$k_1 = 0,21 \text{ s}^{-1}$$

$$k_2 = 0,20 \text{ s}^{-1}$$

$$k_3 = 4,2 \text{ s}^{-1}$$

$$k_4 = 0,004 \text{ s}^{-1}$$

¿Qué tipo de reactor da el máximo rendimiento de anhídrido ftálico? Estime aproximadamente este rendimiento y la conversión fraccional de naftaleno que da ese rendimiento. Note la palabra aproximadamente.

Solución

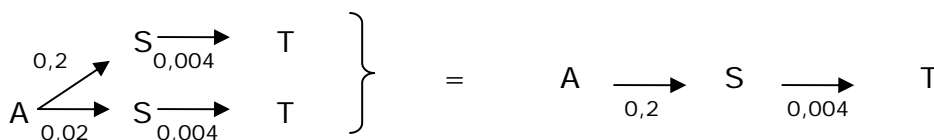
Si observamos los valores de las constantes cinéticas

$$k_1 \approx k_2 \approx 0,2 \Rightarrow \text{R y S se producen mol a mol}$$

$$k_3 = 20 k_4 \Rightarrow \text{Todo el R que se forma pasa a S y habrá poco o nada de R}$$



$$k_{13} = \frac{1}{\frac{1}{0,21} + \frac{1}{4,2}} = 0,2$$



El mejor reactor es el de flujo en pistón porque A, S y T están en serie y S (el intermedio) es el deseado.

Para estimar C_S/C_{A0} se usa el gráfico 8.13 (p. 190)

$$k_4/k_1 = 0,004/0,2 = 0,02$$

$$C_R/C_{A0} \approx 0,92$$

Problema 8.19 (p. 206)

En un tanque bien agitado se adiciona de forma lenta y continua durante 15 min un reactivo sólido en polvo X. El sólido rápidamente se disuelve e hidroliza a Y, el cual lentamente se descompone a Z como sigue



El volumen del líquido en el tanque permanece cercano a los 3 m^3 durante toda la operación y si la reacción de Y a Z no ocurriera, la concentración de Y sería 100 mol/m^3 al final del cuarto de hora de adición.

- a) ¿Cuál es la máxima concentración de Y en el tanque y cuando se alcanza?
- b) ¿Qué concentración de producto Z habrá en el tanque después de 1 hora?

Solución

Un balance de materiales para cualquier componente puede tener, en este caso, los siguientes términos

$$\text{Adición} = \text{Reacción} + \text{Acumulación}$$

Aquí hay 2 procesos

- | | | |
|-----|---------------------------------|------------------------------------|
| 1.- | Entre 0 y 15 min | Adición
Reacción
Acumulación |
| 2.- | Después de los 15 min iniciales | Reacción
Acumulación |

Analicemos el proceso 1

La velocidad de adición de Y es constante

$$\frac{\text{Moles adicionados}}{\text{min}} = \frac{100 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} (3 \text{ m}^3)}{15 \text{ min}} = 20 \frac{\text{mol}}{\text{min}}$$

La concentración de C_Y al inicio es 0 y comenzará a aumentar hasta que la velocidad de reacción sea superior a 20 mol/min . Puede que esto no ocurra en los 15 min de adición y entonces la máxima concentración de Y estará a los 15 min y a partir de ahí la C_Y disminuirá, ya que como se suspende la adición, la acumulación será negativa.

Podemos hacer un estimado de la máxima velocidad de reacción en los primeros 15 min

$$\text{Velocidad de reacción máxima posible} = \frac{1,5}{h} \frac{100 \text{ mol}}{m^3} \frac{1h}{60 \text{ min}} = 2,5 \frac{\text{mol}}{\text{min}}$$

En realidad la velocidad durante los primeros 15 min será menor porque nunca la C_Y alcanzará el valor de 100 mol/m^3 debido a la propia reacción. Como la velocidad de adición es 20 mol/min ($> 2,5 \text{ mol/min}$) la C_Y aumenta durante la adición y va a tener su máximo valor al final de la adición. Hay que determinar C_Y a los 15 min.

Adición = Reacción + Acumulación

$$20 \frac{\text{mol}}{\text{min}} = \frac{1,5}{h} \frac{1h}{60 \text{ min}} C_Y (3m^3) + \frac{d}{dt} (3C_Y)$$

$$\frac{dC_Y}{dt} = 0,025 C_Y = \frac{20}{3}$$

$$C_Y = e^{-\int P(t) dt} \left\{ \int Q(t) e^{\int P(t) dt} dt + \text{Constante} \right\}$$

$$\text{donde } P(t) = 0,025 \quad \text{y} \quad Q(t) = \left(\frac{20}{3} \right)$$

$$C_Y = e^{-0,025t} \left\{ \frac{800}{3} e^{0,025t} + \text{Constante} \right\}$$

$$\text{Cuando } t = 0 \quad C_Y = 0 \Rightarrow \text{Constante} = -\frac{800}{3}$$

$$C_Y = \frac{800}{3} e^{-0,025t} \{ e^{0,025t} - 1 \} = \frac{800}{3} \{ 1 - e^{-0,025(15)} \} = 83,39 \text{ mol/m}^3$$

La máxima C_Y es igual a $83,39 \text{ mol/m}^3$ y se alcanza al final de la adición

$$\text{Moles de Y reaccionados} = 100 - 83,39 = 16,61 \text{ mol/m}^3$$

$$\text{Moles de Z formados} = 16,61 \text{ mol/m}^3$$

Analicemos ahora el proceso 2

Adición = 0 = Reacción + Acumulación (operación discontinua)

$$\frac{C_Y}{C_{Y0}} = e^{-kt} = 83,39 e^{-\frac{1,5}{h} \frac{1h}{60 \text{ min}} 45 \text{ min}} = 27,07 \text{ mol/m}^3$$

$$C_Z = 16,61 + (83,39 - 27,07) = 72,93 \text{ mol/m}^3$$

Problema 8.20 (p. 206)

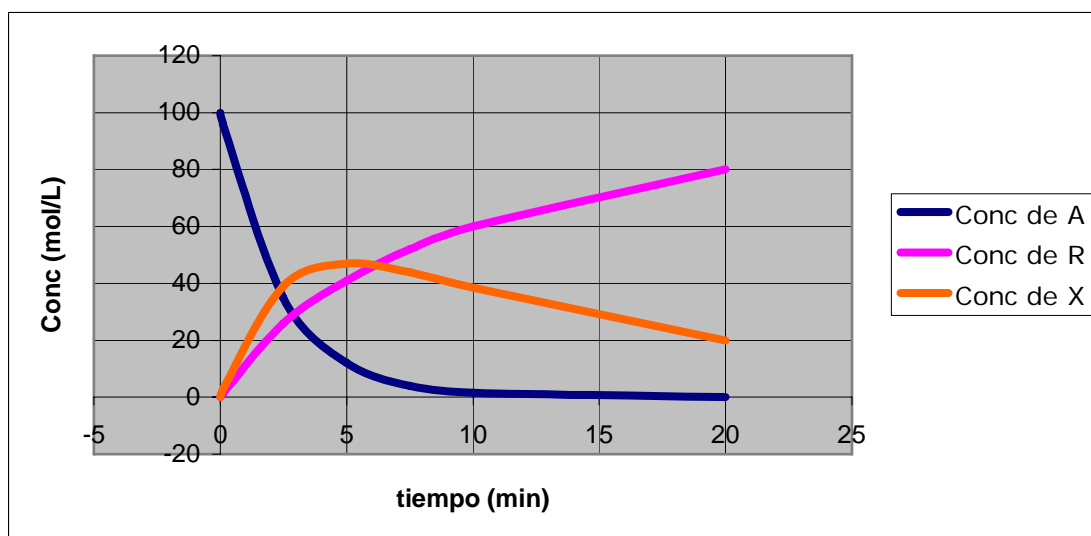
Cuando el oxígeno es burbujado a través de un reactor discontinuo que contiene A a altas temperaturas, A se oxida lentamente a un intermediario X y a un producto final R. Aquí están los resultados del experimento

t (min)	0	0,1	2,5	5	7,5	10	20	∞
C_A (mol/m ³)	100	95,8	35	12	4,0	1,5	-	0
C_R (mol/m ³)	0	1,4	26	41	52	60	80	100

No hay manera de analizar X, sin embargo es exacto suponer que en cualquier momento $C_{A0} = C_A + C_R + C_X$. ¿Qué puede decirse acerca del mecanismo y la cinética de esta oxidación. Sugerencia: Grafique los datos y examine el gráfico.

Solución

$$C_X = 100 - C_A - C_R$$

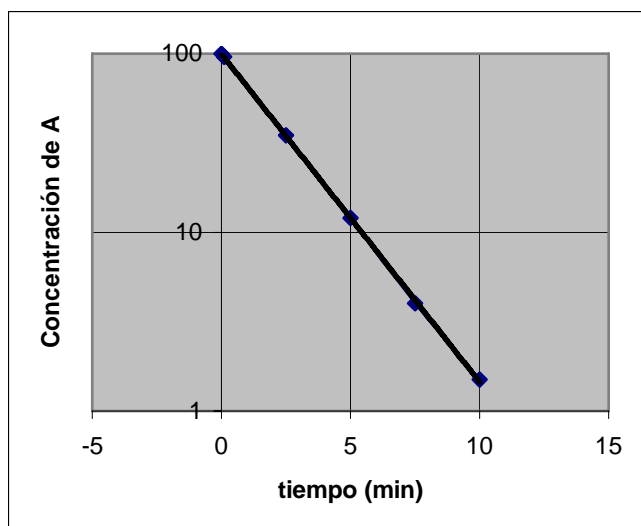


Al parecer A sigue una cinética de primer orden y para confirmarlo

$$C_A = C_{A0} e^{-kt}$$

$$\ln C_A = \ln C_{A0} - kt$$

Si se obtiene una línea recta al graficar \ln de C_A vs t , la cinética es de primer orden

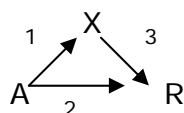


Como se puede apreciar la cinética es de primer orden

$$\left. \begin{aligned} (dC_R/dt)_{t=0} &\neq 0 \\ (dC_X/dt)_{t=0} &\neq 0 \end{aligned} \right\} \quad \begin{array}{l} \text{Esto quiere decir que A se transforma en R y} \\ \text{en X} \end{array}$$

A los 20 min ya no hay A y R sigue aumentando y X disminuyendo, después de pasar por un máximo, luego X se transforma en R

Sugiero que el mecanismo es



Al graficar $\ln C_A$ vs t dio línea recta

$$k_1 + k_2 = k_{12} = \frac{\ln 95.8 - \ln 12}{2 \cdot 0.1 - 5} = 0.42$$

$$\left(\frac{dC_R}{dt} \right)_{t=0} \approx \frac{1.4}{0.1} = k_2 C_{A0} \Rightarrow k_2 = \frac{1.4}{0.1(100)} = 0.14$$

$$\left(\frac{dC_X}{dt} \right)_{t=0} \approx \frac{2.8}{0.1} = k_1 C_{A0} \Rightarrow k_1 = \frac{2.8}{0.1(100)} = 0.28$$

X es el producto intermedio y tiene un máximo a los 5 min

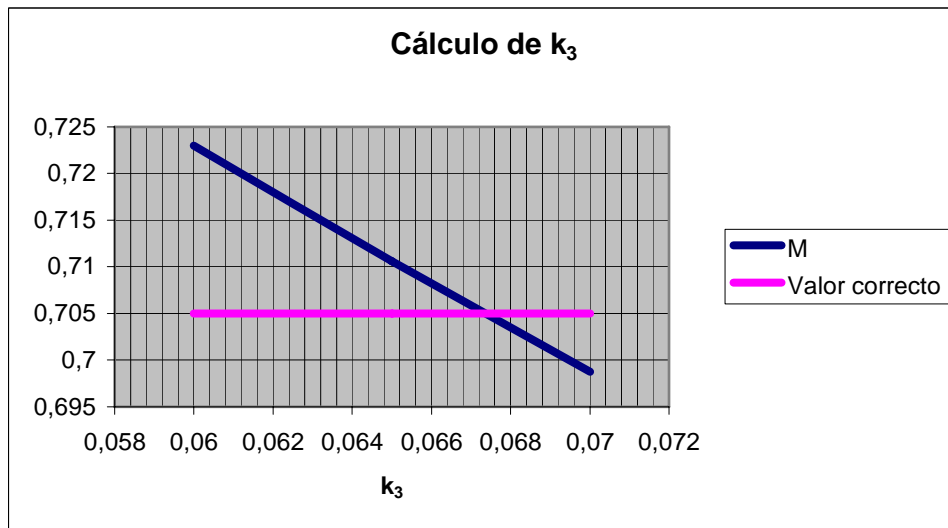
De la ecuación 8.49 (pág. 195) con $k_{34} = k_3$

$$\frac{C_{X\text{máx}}}{C_{A0}} = \frac{k_1}{k_{12}} \left(\frac{k_{12}}{k_3} \right)^{\frac{k_3}{k_3 - k_{12}}}$$

$$\frac{C_{X\text{máx}}}{C_{A0}} = \frac{0,28}{0,42} \left(\frac{0,42}{k_3} \right)^{\frac{k_3}{k_3 - 0,42}} = 0,47 \Rightarrow \left(\frac{0,42}{k_3} \right)^{\frac{k_3}{k_3 - 0,42}} = 0,705$$

$$\left(\frac{0,42}{k_3} \right)^{\frac{k_3}{k_3 - 0,42}} = M$$

k_3	0,07	0,06	0,065
M	0,6988	0,7230	0,7106



$$k_3 = 0,674$$

Para chequear si el mecanismo es el correcto utilizamos R

$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{k_1 k_3}{k_3 - k_{12}} \left\{ \frac{\exp(-k_3 t)}{k_3} - \frac{\exp(-k_{12} t)}{k_{12}} \right\} + \frac{k_1}{k_{12}} + \frac{k_2}{k_{12}} [1 - \exp(-k_{12} t)]$$

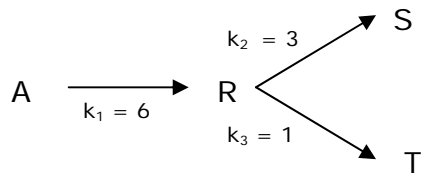
$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{0,28(0,067)}{0,067 - 0,42} \left\{ \frac{\exp 5(-0,067)}{0,067} - \frac{\exp 5(-0,42)}{0,42} \right\} + \frac{0,28}{0,42} + \frac{0,14}{0,42} [1 - \exp 5(-0,42)] = 0,4087$$

El mecanismo propuesto es correcto

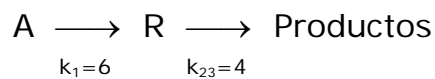
Problema 8. 21 (p. 206)

El reactivo A reacciona para formar R ($k_1 = 6 \text{ h}^{-1}$) y R se transforma en S ($k_2 = 3 \text{ h}^{-1}$). Además R se descompone lentamente para formar T ($k_3 = 1 \text{ h}^{-1}$). Si A es introducido en un reactor discontinuo cuánto tardará en llegar a $C_{R \text{ máx}}$ y cuál será esa $C_{R \text{ máx}}$.

Solución



Puede transformarse en



Y de esta forma utilizar las ecuaciones desarrolladas para este sistema

$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \left(\frac{k_1}{k_{23}} \right)^{\frac{k_{23}}{k_2 - k_1}} = \left(\frac{6}{4} \right)^{\frac{4}{4-6}} = 0,4444 \Rightarrow C_R = 0,4444 \text{ mol} / L$$

$$t_{\text{opt}} = \frac{\ln\left(\frac{4}{6}\right)}{4-6} = 0,2h$$

Problema 9.1 (p. 238)

Para el sistema reaccionante del ejemplo 9.4

- ¿Qué τ se requiere para el 60 % de conversión de reactivo usando la progresión óptima de temperatura en un reactor de flujo en pistón?
- Encuentre la temperatura de salida del reactor.

Use cualquier información que necesite del ejemplo 9.4

Solución

a)

El sistema tratado en el ejemplo 9.4 es $A \leftrightarrow R$ con $-r_A = k_1 C_A - k_2 C_R$, en donde $k_1 = \exp(17,34 - 48900/RT)$ y $k_2 = \exp(42,04 - 124200/RT)$ y $C_{A0} = 4 \text{ mol/L}$. El gráfico mostrado en el ejemplo, al no estar cuadrículado, hace que la toma de datos a partir de él sea muy imprecisa, por eso vamos a elaborar los datos necesarios, sin utilizar dicho gráfico.

Si se quiere hallar el perfil óptimo hay que considerar que en el mismo

$$\left[\frac{\partial(-r_A)}{\partial T} \right]_{X_A = \text{cte}} = 0$$

$$-r_A = k_1 C_{A0} (1 - X_A) - k_2 C_{A0} X_A$$

Derivando con respecto a T con X_A constante

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{k_{01} \exp\left(\frac{E_1}{RT}\right)}{k_{02} \exp\left(\frac{E_2}{RT}\right)} = \frac{E_2 C_{A0} X_A}{E_1 C_{A0} (1 - X_A)} = \frac{E_2 X_A}{E_1 (1 - X_A)}$$

$$\exp \frac{E_2 - E_1}{RT} = \frac{k_{02} E_2}{k_{01} E_1} \frac{X_A}{1 - X_A}$$

$$T_{\text{opt}} = \frac{R}{\ln \frac{k_{02} E_2}{k_{01} E_1} + \ln \frac{X_A}{1 - X_A}}$$

Con las ecuaciones anteriores y los datos tomados del ejemplo se puede evaluar la temperatura del perfil óptimo para cada X_A y entonces ver cómo varía $-r_A$ con X_A a lo largo del perfil óptimo

X_A	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
$T_{\text{opt}} \text{ (K)}$	368	386,47	373,54	365,43	359,02	353,35	347,84	342,04	335,22
$-r_A$	15,54	12,29	9,04	5,89	3,79	2,43	1,49	0,84	0,40
$1/-r_A$	0,06	0,08	0,11	0,17	0,26	0,41	0,67	1,19	2,5

Con estos valores se calcula el volumen del reactor de flujo en pistón, utilizando el método de los trapecios

$$\tau_p = C_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} = 4 \int_0^{0,6} \frac{dX_A}{-r_A} \approx 4 \left\{ \frac{0,1}{2} [0,06 + 0,67 + 2(0,08 + 0,11 + 0,17 + 0,26 + 0,41)] \right\} = 0,558 \text{ min}$$

b)

De la tabla anterior vemos que si $X_A = 0,6$ la temperatura en el perfil óptimo es $347,84 \text{ K} = 74,84^\circ\text{C}$

Problema 9.2 (p. 238)

Se desea convertir la solución acuosa concentrada de A del ejemplo anterior ($C_{A0} = 4 \text{ mol/L}$; $F_{A0} = 1000 \text{ mol/min}$) hasta el 70 % con el menor tamaño de reactor de mezcla completa. Haga un esquema del sistema recomendado, indicando la temperatura de la corriente de entrada y salida y el tiempo espacial requerido

Solución

De la tabla que aparece en el problema 9.1 tomamos la temperatura y la velocidad del perfil óptimo a $X_A = 0,7$

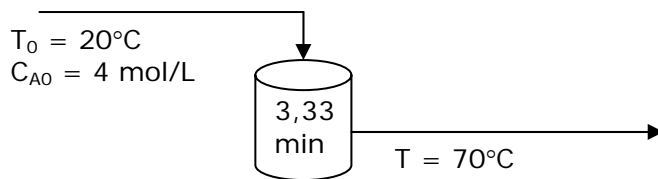
$$T = 342,04 - 273 = 69^\circ\text{C}$$

$$-r_A = 0,84 \text{ mol/L min}$$

$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A} = \frac{4(0,7)}{0,84} = 3,33 \text{ min}$$

$$X_A = \frac{C_p'}{-\Delta H_r} (T - T_0) \quad \Rightarrow \quad T_0 = T + \frac{X_A \Delta H_r}{C_p'}$$

$$T_0 = 70 + \frac{0,7 \left(-75300 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \right)}{250 \frac{\text{cal}}{\text{mol K}} \left(\frac{4,18 \text{ J}}{\text{cal}} \right)} = 20^\circ\text{C}$$



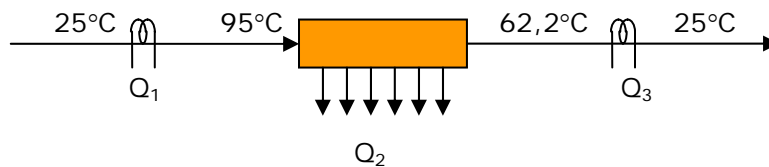
Problema 9.3 (p. 238)

Con respecto al reactor de flujo en pistón que opera sobre el perfil óptimo del ejemplo 9.4 ($C_{A0} = 4 \text{ mol/L}$; $F_{A0} = 1000 \text{ mol/min}$; $X_A = 0,8$; $T_{\min} = 5^\circ\text{C}$; $T_{\max} = 95^\circ\text{C}$) y la alimentación y la corriente producto a 25°C , cuánto calor o enfriamiento será requerido

- Para la corriente de alimentación
- En el reactor en sí
- Para la corriente de salida

Solución

De la tabla que aparece en el problema 9.1 la temperatura del perfil óptimo para $X_A = 0,8$ es $335,22 \text{ K} = 62,22^\circ\text{C}$



$$Q_1 = c_p' (T_{sal} - T_{ent}) = 250 \frac{\text{cal}}{\text{mol A K}} \frac{4,187 \text{ J}}{\text{cal}} 70^\circ\text{C} = 73272,5 \frac{\text{J}}{\text{mol A}}$$

$$Q_1 = 73272,5 \frac{\text{J}}{\text{mol A}} \left(1000 \frac{\text{mol A}}{\text{min}} \right) = 7,33 \cdot 10^7 \frac{\text{J}}{\text{min}} = 73272,5 \frac{\text{kJ}}{\text{min}}$$

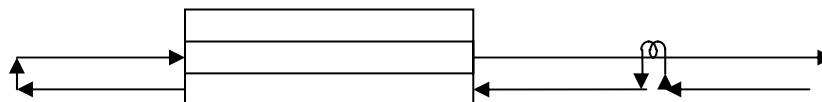
$$Q_3 = c_p' (T_{sal} - T_{ent}) = 250 \frac{\text{cal}}{\text{mol A K}} \frac{4,187 \text{ J}}{\text{cal}} (-37,2^\circ\text{C}) = -38939,1 \frac{\text{J}}{\text{mol A}}$$

$$Q_3 = -38939,1 \frac{\text{J}}{\text{mol A}} \left(1000 \frac{\text{mol A}}{\text{min}} \right) = -3,89 \cdot 10^7 \frac{\text{J}}{\text{min}} = -38939,1 \frac{\text{kJ}}{\text{min}}$$

$$Q_2 = c_p' (T_{sal} - T_{ent}) + \Delta H_r X_A = 250 \frac{\text{cal}}{\text{mol A K}} \frac{4,187 \text{ J}}{\text{cal}} (-32,8^\circ\text{C}) = -34333,4 \frac{\text{J}}{\text{mol A}}$$

$$Q_2 = -34333,4 \frac{\text{J}}{\text{mol A}} \left(1000 \frac{\text{mol A}}{\text{min}} \right) = -3,43 \cdot 10^7 \frac{\text{J}}{\text{min}} = -34333,4 \frac{\text{kJ}}{\text{min}}$$

Hay que suministrarle a la alimentación $73272,5 \text{ kJ/min}$, mientras que a la corriente de salida hay que extraerle $38939,1 \text{ J/min}$. Hay que además extraer del reactor $34333,4 \text{ kJ/min}$. En total hay que extraer $73272,5 \text{ kJ/min}$. Sugiero lo siguiente



Problema 9.4 (p. 238)

Se planea llevar a cabo la reacción del ejemplo 9.4 ($C_{A0} = 4 \text{ mol/L}$; $F_{A0} = 1000 \text{ mol/min}$) en un reactor de flujo en pistón que se mantiene a 40°C hasta $X_A = 90\%$. Halle el volumen requerido

Solución

Sistema de densidad constante

$$\frac{k_1 \tau_p}{X_{Ae}} = \ln \frac{X_{Ae}}{X_{Ae} - X_A} \quad \text{ecuación 5.22 (pág. 103)}$$

Del ejemplo 9.4

$$k_1 = \exp\left(17,34 - \frac{48900}{RT}\right) \text{ min}^{-1}$$

$$K = \exp\left(\frac{75300}{RT} - 24,7\right) \quad \text{donde } R = 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$$

$$T = 40 + 273 = 313$$

$$k_{313} = 0,2343 \text{ min}^{-1}$$

$$K_{313} = 69,1405$$

$$X_{Ae} = \frac{K}{K + 1} = 0,98$$

$$\tau_p = \frac{0,98}{0,2343} \ln \frac{0,98}{0,98 - 0,9} = 10,48 \text{ min}$$

Problema 9.5 (p. 238)

Rehaga el ejemplo 9.4 sustituyendo C_{A0} por 1 mol/L A/h.

Ejemplo 9.4. Usando la progresión óptima de temperatura en un reactor de flujo en pistón para la reacción de los ejemplos anteriores. $T_{\text{máx}} = 95^\circ\text{C}$

- Calcule el tiempo espacial y el volumen requerido para el 80 % de conversión de 1000 mol de A/min con $C_{A0} = 4$ mol/L
- Plotee la temperatura y perfil de conversión a lo largo del reactor

Solución

Sistema de densidad constante porque es líquido

$$-r_A = k_1 C_{A0} (1 - X_A) - k_2 C_{A0} X_A = C_{A0} [k_1 (1 - X_A) - k_2 X_A]$$

$$(-r_A)_1 = [k_1 (1 - X_A) - k_2 X_A]$$

$$(-r_A)_4 = 4 [k_1 (1 - X_A) - k_2 X_A] = 4 (-r_A)_1$$

$$\int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_1} = \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{\frac{(-r_A)_4}{4}} = 4 \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_4}$$

$$\int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_4} = 0,405 \quad \text{tomado del ejemplo 9.4 (p. 230)}$$

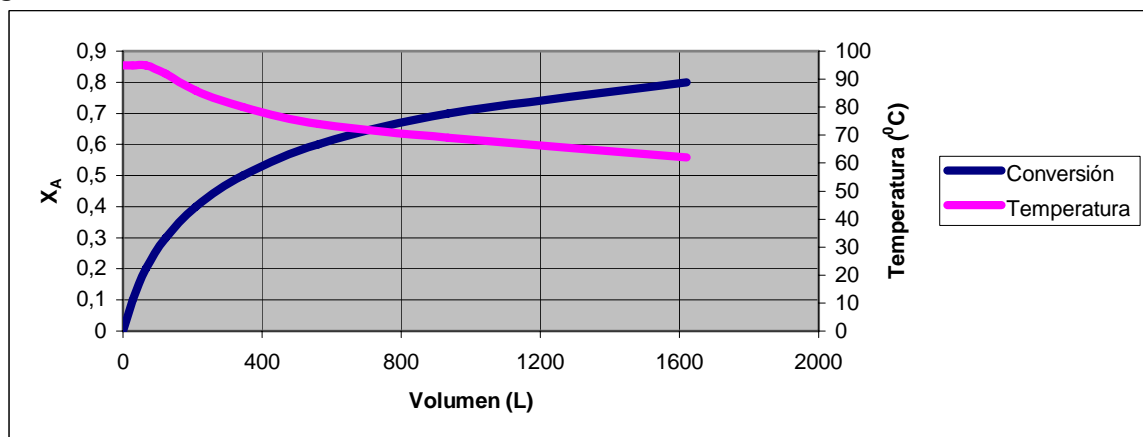
$$\int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_1} = 4(0,405)$$

$$\tau_p = C_{A0} \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_{C_{A0}}} = 1 \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_1} = (1)(4)(0,405) = 1,62 \text{ min}$$

$$v_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = \frac{1000}{1} = 1000 \text{ L/min}$$

$$V = \tau_p v_0 = 1,62(1000) = 1620 \text{ L}$$

Como son reacciones de primer orden la variación del valor de C_{A0} no afectó el valor de τ . El volumen si se afectó porque F_{A0} permaneció constante y por eso v_0 aumentó 4 veces, provocando que el volumen sea 4 veces más grande.



Problema 9.6 (p. 238)

Rehaga el ejemplo 9.5 sustituyendo C_{A0} por 1 mol/L

Ejemplo 9.5. La solución concentrada de A de los ejemplos previos ($C_{A0} = 4$ mol/L; $F_{A0} = 1000$ mol/min) va a ser 80% convertida en un reactor de mezcla completa

- ¿Qué tamaño de reactor se requiere?
- ¿Cuál debe ser la transferencia de calor si la alimentación está a 25°C y la corriente de salida debe estar a la misma temperatura?

Solución

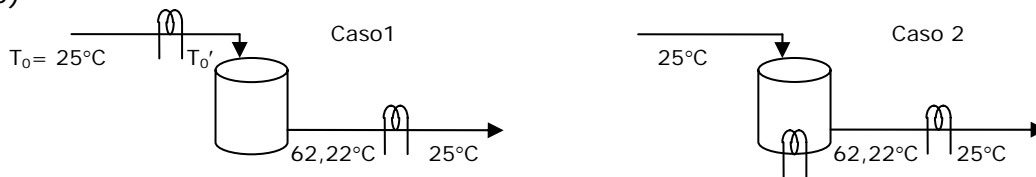
a) En la tabla del problema 9.1 aparece reportada que la velocidad en el perfil óptimo a $X_A = 0,8$ es 0,4 mol/L min; pero para $C_{A0} = 4$ mol/L y la que se necesita es la correspondiente para $C_{A0} = 1$ mol/L

$$(-r_A)_{C_{A0}=1} = \frac{(-r_A)_{C_{A0}=4}}{4} = \frac{0,4}{4} = 0,1 \frac{\text{mol}}{\text{L min}}$$

$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_{Af}}{-r_{Af}} = \frac{1(0,8)}{0,1} = 8 \text{ min}$$

$$v_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = \frac{1000}{1} = 1000 \text{ L/min} \quad \therefore \quad V = \tau_m v_0 = 8(1000) = 8000 \text{ L}$$

b)



Caso 1

$$Q = c_p' (T_{sal} - T_{ent}) + \Delta H_r X_A$$

$$0 = 250 \frac{\text{cal}}{\text{mol K}} \left(4,187 \frac{\text{J}}{\text{cal}} \right) (62,22 - T_0') + \left(-18000 \frac{\text{cal}}{\text{mol}} \right) \left(4,187 \frac{\text{J}}{\text{cal}} \right) (0,8)$$

$$T_0' = 4,62^\circ \text{C}$$

$$Q_1 = 250(4,187)(4,62 - 25) = -21332,765 \text{ J/molA}$$

$$Q_2 = 250(4,187)(25 - 62,22) = -38960,035 \text{ J/molA}$$

Caso 2

$$Q_1' = 250(4,187)(62,22 - 25) + (18000)(4,187)(0,8) = -21332,765 \text{ J/molA}$$

Puede verse que ambas formas de intercambio de calor son equivalente

Problema 9.7 (p. 238)

Rehaga el ejemplo 9.6; pero con $C_{A0} = 1$ mol/L en lugar de $C_{A0} = 4$ mol/L y considerando $F_{A0} = 1000$ mol de A/min

Ejemplo 9.6. Halle el tamaño del reactor de flujo en pistón requerido para convertir hasta el 80 % los 1000 mol de A/min con $C_{A0} = 4$ mol/L, que se utiliza en el ejemplo 9.5

Solución

En el ejemplo 9.6 aparece que

$$\tau_{4\text{mol/L}} = 4 \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_{4\text{mol/L}}} = 8,66 \text{ min}$$

$$\tau_{1\text{mol/L}} = (1) \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_{1\text{mol/L}}}$$

$$(-r_A)_{4\text{mol/L}} = 4(-r_A)_{1\text{mol/L}} \quad (-r_A)_{1\text{mol/L}} = \frac{(-r_A)_{4\text{mol/L}}}{4}$$

$$\tau_{1\text{mol/L}} = (1) \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_{1\text{mol/L}}}$$

$$(-r_A)_{4\text{mol/L}} = 4(-r_A)_{1\text{mol/L}} \quad (-r_A)_{1\text{mol/L}} = \frac{(-r_A)_{4\text{mol/L}}}{4}$$

$$\tau_{1\text{mol/L}} = (1) \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_{4\text{mol/L}}} = 4 \int_0^{0.8} \frac{dX_A}{(-r_A)_{4\text{mol/L}}} = 8,66 \text{ min}$$

$$V_{1\text{mol/L}} = \tau_{1\text{mol/L}}(v_0) = \tau_{1\text{mol/L}} \frac{F_{A0}}{C_{A0}} = 8,66 \left(\frac{1000}{1} \right) = 8660 \text{ L} = 8,66 \text{ m}^3$$

Como se observa para una reacción de primer orden el τ no depende de C_{A0} ; pero el volumen sí porque F_{A0} permanece constante, es decir que v_0 varió.

Problema 9.8 (p. 238)

Rehaga el ejemplo 9.7; pero con $C_{A0} = 1$ mol/L en lugar de $C_{A0} = 4$ mol/L y considerando $F_{A0} = 1000$ mol de A/min

Ejemplo 9.7. Halle el tamaño del reactor de reciclo adiabático requerido para convertir hasta el 80% 1000 mol de A/min con $C_{A0} = 4$ mol/L

Solución

$$(-r_A)_{4\text{mol/L}} = 4 (-r_A)_{1\text{mol/L}}$$

$$\frac{1}{(-r_A)_{4\text{mol/L}}} = \frac{1}{4} \frac{1}{(-r_A)_{1\text{mol/L}}}$$

$$\frac{1}{(-r_A)_{1\text{mol/L}}} = 4 \frac{1}{(-r_A)_{4\text{mol/L}}}$$

La escala de la fig. E9.7 (p. 234) se multiplica por 4 si se reduce la C_{A0} de 4 a 1 mol/L

Área bajo la curva de $1/(-r_A)$ vs X_A del ejemplo 9.7 con 4 mol/L de $C_{A0} = 1,2$

Área bajo la curva de $1/(-r_A)$ vs X_A con 1 mol/L de $C_{A0} = 1,2 (4) = 4,8 = \tau/C_{A0}$

$$\tau = 4,8 (1) = 4,8 \text{ min (el mismo } \tau \text{ del ejemplo)}$$

$$V = \tau v_0 = 4,8 (1000) = 4800 \text{ L (4 veces más grande que el del ejemplo)}$$

El tiempo espacial no se afecta por la variación de la concentración; pero si F_{A0} permanece constante el volumen sí varía

Problema 9.9 (p. 238)

Se desea llevar a cabo la reacción del ejemplo 9.4 en un reactor de mezcla completa hasta el 95 % de conversión de una alimentación con $C_{A0} = 10$ mol/L y un flujo volumétrico de 100 L/min ¿Qué tamaño de reactor se requiere?

Solución

$$T_{opt} = \frac{\frac{E_2 - E_1}{R}}{\ln \frac{k_{02} E_2}{k_{01} E_1} + \ln \frac{X_A}{1 - X_A}} = T_{opt} = \frac{\frac{124200 - 48900}{8,314}}{\ln \frac{e^{42,04}(124200)}{e^{17,34}(48900)} + \ln \frac{0,95}{1 - 0,95}} = 316,94 \text{ K}$$

$$-r_A = 10 \left\{ \left[\exp \left(17,34 - \frac{48900}{RT} \right) \right] (1 - X_A) - \left[\exp \left(42,04 - \frac{124200}{RT} \right) (X_A) \right] \right\}$$

$$-r_A = 10 \left\{ \left[\exp \left(17,34 - \frac{48900}{8,314(316,94)} \right) \right] (1 - 0,95) - \left[\exp \left(42,04 - \frac{124200}{8,314(316,94)} \right) (0,95) \right] \right\}$$

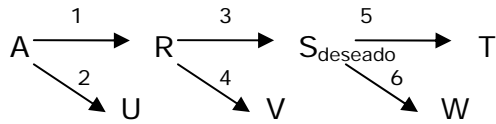
$$-r_A = 0,0897 \frac{L}{mol \text{ min}}$$

$$\tau_m = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A} = \frac{10(0,95)}{0,0897} = 105,91 \text{ min}$$

$$V = \tau_m v_0 = 10590,85 \text{ L} \approx 10,6 \text{ m}^3$$

Problema 9.10 (p. 239)

Halle cualitativamente la progresión óptima de temperatura para maximizar C_S pr el esquema reaccionante siguiente



Datos: $E_1 = 10$ $E_2 = 25$ $E_3 = 15$ $E_4 = 10$ $E_5 = 20$ $E_6 = 25$

Solución

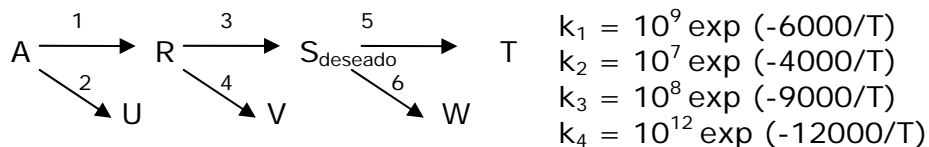
Como $E_1 < E_2$ se debe tener la temperatura baja al principio de la reacción

Como $E_3 > E_4$ se debe subir la temperatura cuando ya la reacción ha avanzado

Como $E_3 < E_5$ se debe bajar la temperatura en las últimas etapas de la reacción
 $E_3 < E_6$

Problema 9.11 (p. 239)

En 2 reactores de mezcla completa en serie, a una temperatura que puede oscilar entre 10°C y 90°C, van a llevarse a cabo las reacciones de primer orden siguientes



Si se mantienen los reactores a diferentes temperaturas, cuáles deben ser estas temperaturas para que el rendimiento fraccional sea máximo. Hállelo.

Solución

Si se analiza las E/R se llega a la conclusión que en la primera etapa de reacción (descomposición de A) la temperatura debe ser alta y en la etapa final baja. Veamos los valores de las constantes cinéticas en las 2 temperaturas extremas

T (°C)	k_1	k_2	k_1/k_2	k_3	k_4	k_3/k_4
10 (283)	0,62	7,27	0,085	$1,51 \cdot 10^{-6}$	$3,84 \cdot 10^{-7}$	4,00
90 (363)	66,31	163,82	0,400	$1,71 \cdot 10^{-3}$	$4,40 \cdot 10^{-3}$	0,39

Del análisis de los valores de las constantes se concluye lo que ya sabíamos y más

Sabíamos que el perfil debía ser decreciente porque la reacción que primero debe ocurrir es la descomposición de A y R se favorece con las altas temperaturas ($k_1/k_2 = 0,4$ a 90°C), después debe disminuir la temperatura porque la formación de S se favorece con temperaturas bajas ($k_3/k_4 = 4,00$ a 10°C).

Añadimos a esto, lo que no sabíamos, que k_1 y $k_2 \gg k_3$ y k_4 , luego A se agota prácticamente sin que R haya reaccionado aún. Puede por tanto suponerse que en el primer tanque sólo ocurre la descomposición de A y que en el segundo la de R. Así que el primer tanque se mantiene a 90°C y el segundo a 10°C

$$\varphi_R = \frac{r_R}{-r_A} = \frac{k_1}{k_1 + k_2} = \frac{66,31}{66,31 + 163,82} = 0,288$$

$$\varphi_S = \frac{r_S}{-r_R} = \frac{k_3}{k_3 + k_4} = \frac{1,54(10^{-6})}{1,54(10^{-6}) + 3,84(10^{-7})} = 0,800$$

$$\varphi\left(\frac{S}{A}\right) = \frac{r_R}{-r_A} = 0,288(0,800) = 0,23$$

Problema 9.12 (p. 239)

La reacción reversible en fase gaseosa $A \leftrightarrow R$ va a ser llevada a cabo en un reactor de mezcla completa. Si se opera a 300 K el volumen requerido del reactor es 100 L para un 60 % de conversión. ¿Cuál debe ser el volumen del reactor para la misma alimentación y la misma conversión; pero operando a 400 K.

Datos: A puro $k_1 = 10^3 \exp(-2416/T)$ $\Delta C_p' = 0$
 K = 10 a 300 K $\Delta H_r = -8000$ cal/mol de A a 300 K

Solución

Con los datos a 300 K se puede calcular v_0 y con v_0 el volumen requerido a 400 K. Debe notarse que v_0 varía al variar la temperatura y que ΔH_r es constante porque $\Delta C_p' = 0$

$$\tau_m = \frac{V_m}{v_0} = \frac{C_{A0} X_A}{-r_A} = \frac{C_{A0} X_A}{k_1 C_{A0} (1 - X_A) - k_2 C_{A0} X_A} = \frac{X_A}{k_1 (1 - X_A) - k_2 X_A}$$

$$v_0 = V_m \left(\frac{k_1(1 - X_A) - k_2 X_A}{X_A} \right)$$

$$k_{1(300K)} = 0,318 \text{ min}^{-1}$$

$$k_{2(300K)} = \frac{k_1}{K} = \frac{0,318}{10} = 0.0318 \text{ min}^{-1}$$

$$v_0 = \frac{100[0,318(1 - 0,6) - 0,0318(0,6)]}{0,6} = 18,02 \text{ L/min}$$

$$K_{400K} = K_{300K} \exp \left[-\frac{\Delta H_r}{R} \left(\frac{1}{400} - \frac{1}{300} \right) \right] = 10 \exp \left[-\frac{8000}{8.314} \left(\frac{1}{400} - \frac{1}{300} \right) \right] = 4,485$$

$$k_{1(400\text{ K})} = 2,382 \text{ min}^{-1}$$

$$k_{2(400\text{ K})} = \frac{2,382}{4,485} = 0,531 \text{ min}^{-1}$$

$$v_{0(400K)} = v_{0(300K)} \left(\frac{400}{300} \right) = 18,02 \left(\frac{400}{300} \right) = 24,03 \text{ L/min}$$

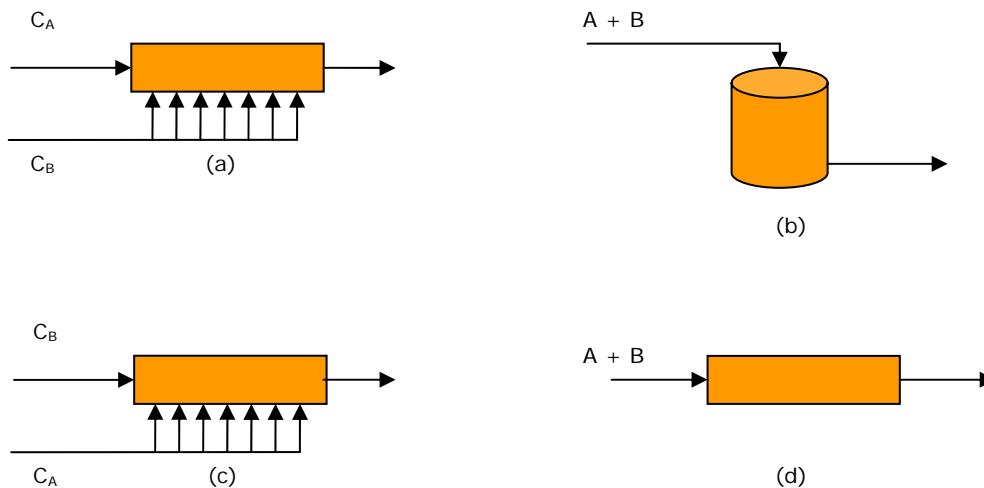
$$V = v_0 \left(\frac{X_A}{k_1(1 - X_A) - k_2 X_A} \right) = 24,03 \left[\frac{0,6}{2,382(1 - 0,6) - 0,531(0,6)} \right] = 22,73 L$$

Problema 10.1 (p. 246)

Dada las 2 siguientes reacciones



donde R es el producto deseado, el cual se quiere maximizar, evalúe los esquemas mostrados en la figura, o bien "bueno" o bien "no tan bueno". Por favor sólo razonamientos, nada de cálculos complicados.



Solución

$$\phi = \frac{dC_R}{dC_A} = \frac{r_R}{-r_A} = \frac{k_1 C_A C_B - k_2 C_A C_B}{k_1 C_A C_B} = \frac{k_1 - k_2}{k_1}$$

La distribución de productos (R/S) está determinada por la razón de constantes k_1/k_2 porque las reacciones son del mismo orden con respecto a A y a B, así que si quiero más R, al igual que en una reacción simple, lo que requiero es mayor X_A . Eso se logra trabajando con las máximas velocidades. Suponiendo operación isotérmica, $-r_A$ crece cuando la concentración es alta, así que considerando todo lo anterior.

- (d) El mejor porque C_A y C_B altas
- (a) y (c) Iguales porque tienen una concentración alta y otra baja
- (b) El peor porque ambas concentraciones están bajas

Problema 10.2 (p. 247)

Repita el problema 10.1 con un solo cambio: $-r_2 = k C_R C_B^2$

Solución

$$\phi = \frac{dC_R}{dC_A} = \frac{r_R}{-r_A} = \frac{k_1 C_A C_B - k_2 C_R C_B^2}{k_1 C_A C_B} = 1 - \frac{k_2 C_R C_B}{k_1 C_A}$$

Es una reacción serie paralelo típica y el rendimiento nos dice eso precisamente. Hay que analizar por separado los componentes en serie y los componentes en paralelo.

$A \rightarrow R \rightarrow S$ están en serie así que **C_A debe ser alta**

El reactivo en paralelo, B, tiene menor orden en la reacción deseada que en la no deseada, así que **B debe mantenerse con concentraciones bajas**

- (a) El mejor porque C_A alta y C_B baja
- (b) y (d) Intermedios porque en (b) C_A y C_B bajas y en (d) C_A y C_B altas, sólo cumplen 1 requisito ambas
- (c) El peor porque C_A baja y C_B alta

Problema 10.3 (p. 247)

Repita el problema 10.1 con un solo cambio: $-r_2 = k C_R^2 C_B$

Solución

$$\phi = \frac{dC_R}{dC_A} = \frac{r_R}{-r_A} = \frac{k_1 C_A C_B - k_2 C_R^2 C_B}{k_1 C_A C_B} = 1 - \frac{k_2 C_R^2}{k_1 C_A}$$

Es una reacción serie paralelo y el rendimiento nos dice eso precisamente. Hay que analizar por separado los componentes en serie y los componentes en paralelo.

$A \rightarrow R \rightarrow S$ están en serie así que **C_A debe ser alta**

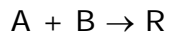
El reactivo en paralelo, B, tiene el mismo orden en la reacción deseada que en la no deseada, así que **B no influye en la distribución de productos**

(a) y (d) Son los mejores porque C_A alta

(b) y (c) Son los peores porque C_A baja

Problema 10.4 (p. 247)

Para las reacciones

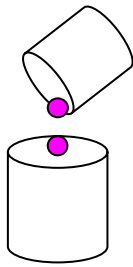


$$-r_1 = k_1 C_A C_B$$

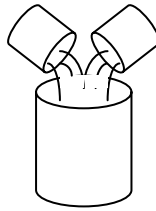


$$-r_2 = k_2 C_R C_B^2$$

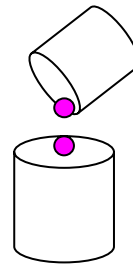
Donde R es el producto deseado, cuál de las siguientes formas de operar un reactor discontinuo es favorable y cuál no



(a) Añadir B
gota a gota



(b) Añadir A y
B simultáneamente



(c) Añadir A
gota a gota

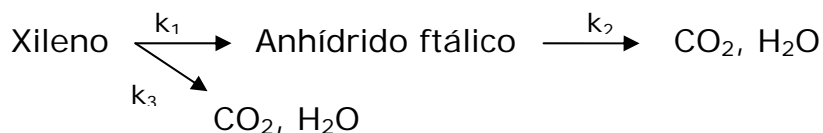
Solución

Se había visto en el problema 10.2 que **C_A debe ser alta y C_B debe ser baja.**

- (a) El mejor porque C_A alta y C_B baja
- (b) Intermedio porque $C_A = C_B$ bajas
- (c) El peor porque C_A baja y C_B alta, no es adecuado

Problema 10.5 (p. 247)

La oxidación violenta del xileno produce CO_2 y H_2O , sin embargo cuando es moderada y cuidadosamente controlada, también puede producir cantidades de consideración del valioso anhídrido ftálico, como se muestra.



Además se sabe que por el riesgo de explosión la concentración de xileno en la mezcla reaccionante debe ser mantenida por debajo del 1%. Naturalmente el problema en este proceso es obtener una distribución de productos favorable

- En un reactor de flujo en pistón que valores de energía de activación harán que se trabaje a temperatura máxima permisible
- Bajo qué circunstancias el reactor de flujo en pistón debería utilizar un perfil decreciente de temperaturas

Solución

- a) Si $E_1 > E_2$
 $E_1 > E_3$

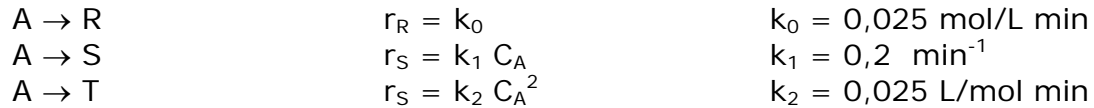
La deseada es la de mayor energía de activación y se verá favorecida por las altas temperaturas, así que debe trabajarse a la máxima temperatura permisible.

- b) Si $E_1 > E_3$
 $E_1 < E_2$

Al principio debe trabajar con altas temperaturas para favorecer la reacción 1 frente a la 3 y después la temperatura debe descender para no favorecer el paso 2. Luego el perfil que se debe utilizar es decreciente.

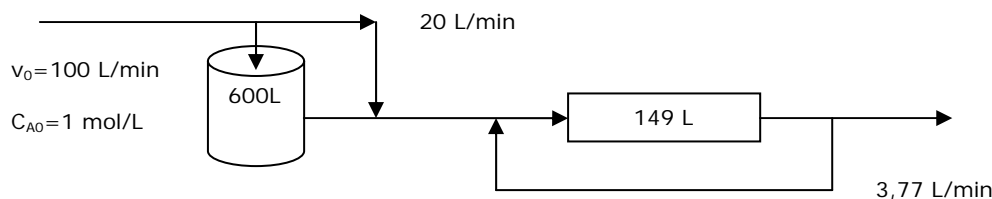
Problema 10.6 (p. 248)

Dado el sistema de reacciones elementales siguientes y una alimentación de 100 L/min con una concentración de A de 1 mol/L, se desea maximizar el rendimiento fraccional, no la producción de S, en el sistema de reactores de su elección



La computadora a través de una búsqueda multidimensional (ver problema 3. Chem. Eng. Science, 45, 595-614, 1990) arribó al arreglo mostrado en la figura a continuación, el cual es señalado por los autores como un óptimo local o punto estacionario. No se está interesado en óptimos locales, si tal cosa existe. Se está interesado en óptimos globales. Así que con esto en mente

- ¿Cree que el arreglo de la figura es el mejor?
- Si no, sugiera un esquema mejor. Haga un esquema de su arreglo y calcule el volumen de los reactores



Solución

El orden de la reacción deseada determina cómo deben ser las concentraciones, si altas o bajas. En este caso

$$\text{Orden}_{A \rightarrow R} < \text{Orden}_{A \rightarrow S} < \text{Orden}_{A \rightarrow T}$$

El orden de la reacción deseada es intermedio. C_A altas favorecen a $A \rightarrow R$ y C_A bajas a $A \rightarrow T$. Es obvio que debe existir una concentración intermedia que favorezca a $A \rightarrow S$. Para encontrar esa C_A que hace el rendimiento máximo hay que plantear que $d\phi(S/A)/dC_A = 0$

$$\phi\left(\frac{S}{A}\right) = \frac{0,2C_A}{0,025 + 0,2C_A + 0,4C_A^2}$$

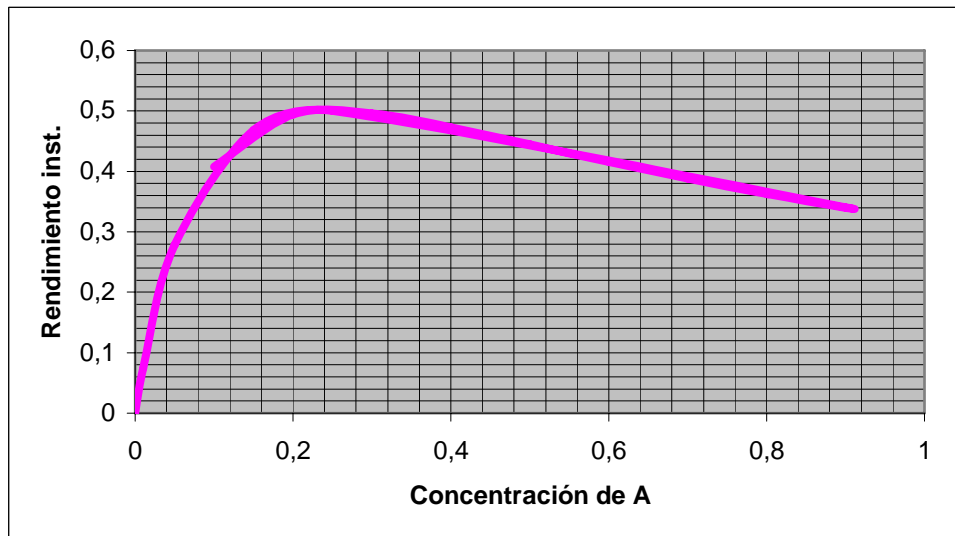
$$\frac{d\phi\left(\frac{S}{A}\right)}{dC_A} = \frac{(0,025 + 0,2C_A + 0,4C_A^2)0,2 - 0,2C_A(0,2 + 0,8C_A)}{(0,025 + 0,2C_A + 0,8C_A^2)^2} = 0$$

$$0,025 + 0,2C_A + 0,4C_A^2 - 0,2C_A - 0,8C_A^2 = 0$$

$$C_A = \pm \sqrt{\frac{0,025}{0,4}} = \pm 0,25$$

La única solución posible es $C_A = 0,25 \text{ mol/L}$ y es el valor de concentración que hace el rendimiento máximo

$C_A \text{ (mol/L)}$	1	0,25	0
φ	0,32	0,5	0



Lo mejor es trabajar con un mezcla para que en todo el reactor el rendimiento instantáneo sea igual a 0,5 que es su máximo valor

b)

$$\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A} = \frac{C_{A0} - C_A}{0,025 + 0,2C_A + 0,4C_A^2} = \frac{1 - 0,25}{0,025 + 0,2(0,25) + 0,4(0,25^2)} = 7,5 \text{ min}$$

$$V = \tau v_0 = 7,5(100) = 750 \text{ L}$$

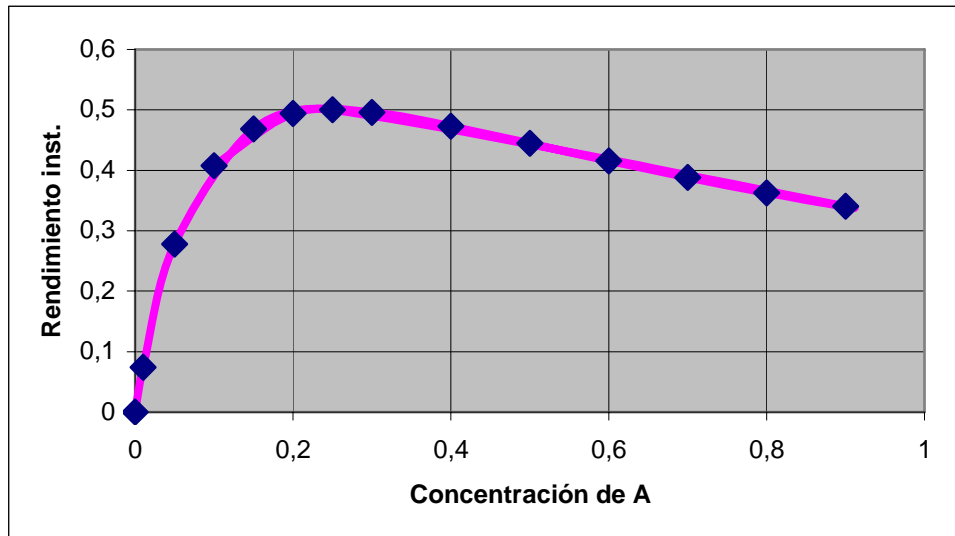


Problema 10.7 (p. 248)

Para el sistema reaccionante anterior y la misma alimentación se quiere maximizar la velocidad de producción de S (no el rendimiento fraccional) en un arreglo de reactores de su elección.

Haga un esquema del sistema de reactores escogido y determine la C_S máxima alcanzable.

Solución



Dada la forma de la curva de ϕ vs C_A hay que trabajar con un reactor de mezcla completa que vaya de $C_A = 1$ hasta $0,25$ mol/L, que tendrá el rendimiento máximo, y en serie con éste un reactor de flujo en pistón que vaya desde $C_A = 0,25$ hasta 0 mol/L, para aprovechar todo lo posible los altos rendimientos. La concentración final es 0 porque $C_R \uparrow$ si $\Delta C_A \uparrow$ y se quiere C_R máximo

$$C_{S \text{ máx}} = C_{S m} + C_{S p}$$

$$C_{S m} = 0,5 (1 - 0,25) = 0,375 \text{ mol/L}$$

$$C_{S p} = \int_0^{0,25} \phi dC_A = \int_0^{0,25} \frac{0,2C_A dC_A}{0,025 + 0,2C_A + 0,4C_A^2}$$

Dividiendo numerador y denominador por $0,4$

$$C_{SP} = 0,5 \int_0^{0,25} \frac{C_A dC_A}{0,0625 + 0,5C_A + C_A^2} = 0,5 \int_0^{0,25} \frac{C_A dC_A}{(0,25 + C_A)^2}$$

$$\int \frac{xdx}{(a+bx)^2} = \frac{1}{b^2} \left[\ln(a+bx) + \frac{a}{a+bx} \right]$$

$$C_{SP} = 0,5 \left\{ \frac{1}{1^2} \left[\ln(0,25 + C_A) + \frac{0,25}{0,25 + C_A} \right]_0^{0,25} \right\} = 0,5 \left[\ln(0,25 + 0,25) + \frac{0,25}{0,25 + 0,25} - \ln(0,25) - \frac{0,25}{0,25} \right]$$

$$C_{SP} = 0,5[(\ln 2) - 0,5] = 0,0966 \text{ mol/L}$$

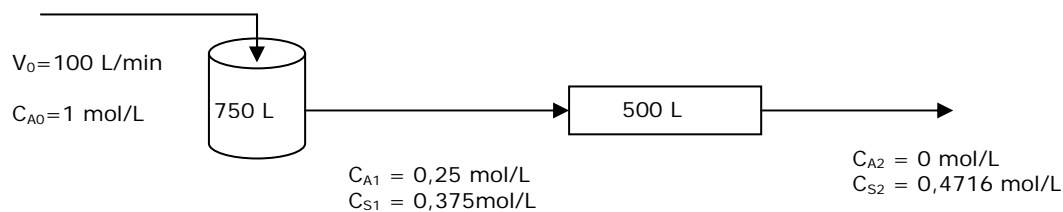
$$C_{S_{\max}} = 0,375 + 0,0966 = 0,4716 \text{ mol/L}$$

$$\tau_p = \int_0^{0,25} \frac{dC_A}{-r_A} = \int_0^{0,25} \frac{dC_A}{0,025 + 0,2C_A + 0,4C_A^2} = \frac{1}{0,4} \int_0^{0,25} \frac{dC_A}{(0,25 + C_A)^2}$$

$$\int \frac{dx}{(a+bx)^2} = -\frac{1}{b(a+bx)}$$

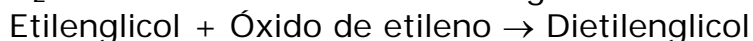
$$\tau_p = 2,5 \left\{ -\frac{1}{0,25 + C_A} \right\}_0^{0,25} = 2,5 \left\{ -\frac{1}{0,5} + \frac{1}{0,25} \right\} = 5 \text{ min}$$

$$V_p = 5(100) = 500 \text{ L}$$



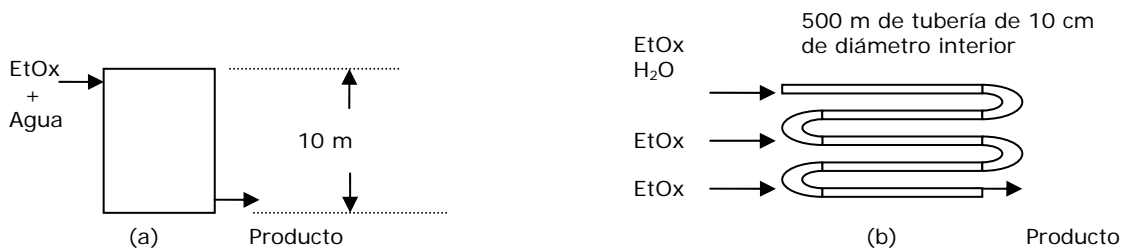
Problema 10.8

El etilenglicol y el dietilenglicol son usados como anticongelante de automóviles y son producidos por las reacciones entre el óxido de etileno y el agua como se muestra

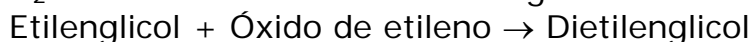


Un mol de etilenglicol en agua es tan efectivo en la reducción del congelamiento del agua como un mol de dietilenglicol, sin embargo sobre la base molar éste último es el doble de caro que el primero, así que se quiere maximizar el etilenglicol y minimizar el dietilenglicol en la mezcla.

Uno de los mayores suministradores produce anualmente millones de kg de anticongelante en reactores como los mostrados en la figura (a). Uno de los ingenieros de nuestra compañía sugirió que reemplazaran sus reactores por unos como los de la figura (b). ¿Qué piensa Ud. de esta sugerencia?



Solución



Si $\text{H}_2\text{O} = \text{A}$, el óxido de etileno = B , el etilenglicol = R y el dietilenglicol = S

La reacción puede expresarse como

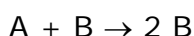


Analizando los componentes en serie $\text{A} \rightarrow \text{R} \rightarrow \text{S}$ lo más conveniente es el reactor de flujo en pistón y el reactor de la figura (b) puede ser considerado como tal por su relación diámetro/longitud.

En cuanto a la adición de B , el componente en paralelo no se puede concluir nada porque no se conoce el orden de reacción de este componente en la reacción deseada y la no deseada. Si la deseada fuera la de mayor orden, entonces la adición de B , que sube la concentración de este componente es adecuada.

Problema 10.9 (p. 249)

Considere la reacción elemental



$$-r_A = k C_A C_B$$

$$k = 0,4 \text{ L/mol min}$$

Para la alimentación y tiempo especial siguientes

Flujo

$$v_0 = 100 \text{ L/min}$$

Composición de la alimentación

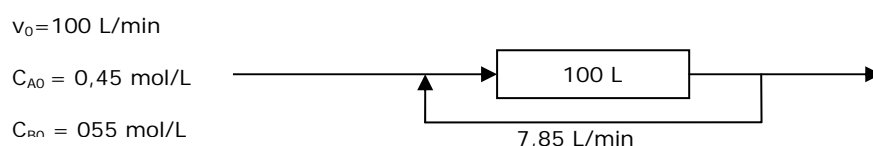
$$C_{A0} = 0,45 \text{ mol/L}$$

$$C_{B0} = 0,55 \text{ mol/L}$$

Tiempo espacial

$$\tau = 1 \text{ min}$$

Se quiere maximizar la concentración de B en la corriente producto. Nuestra inteligente computadora (ver problema 8, Chem. Eng. Sci., 45, 595, 595-614, 1990) da el diseño mostrado como su mejor resultado.



Piensa Ud. que esta es la mejor forma de llevar a cabo esta reacción. Si no sugiera un esquema mejor. No se moleste en calcular tamaño de reactor, razón de reciclo, etc. Sólo indique un esquema mejor.

Solución

Como este es un sistema reaccionante simple el criterio utilizado es eficiencia en cuanto la producción, el sistema más eficiente es el que tiene mayores velocidades. Así que para saber qué reactor es más conveniente es necesario saber cómo varía $-r_A$ con la conversión

$$-r_A = k C_A C_B \text{ (sistema elemental)}$$

$$C_A = C_{A0} (1 - X_A)$$

$$C_B = C_{B0} - C_{A0} X_A + 2C_{A0} X_A \text{ (por estequiometría)}$$

$$C_B = C_{A0} (M + X_A) \quad \text{donde } M = C_{B0}/C_{A0} = 0,55/0,45 = 1,22$$

$$-r_A = k C_{A0}^2 (1 - X_A)(M + X_A)$$

Si $X_A \uparrow$, $(1 - X_A) \downarrow$ y $(M + X_A) \uparrow$, así que $-r_A$ puede aumentar o disminuir, según el peso relativo de los factores. Una forma de saber cómo varía $-r_A$ con X_A es buscar la derivada de la función

$$\frac{d(-r_A)}{dX_A} = k C_{A0}^2 [(1 - X_A)(1) + (M + X_A)(-1)] = k C_{A0}^2 (1 - M - 2X_A) < 0$$

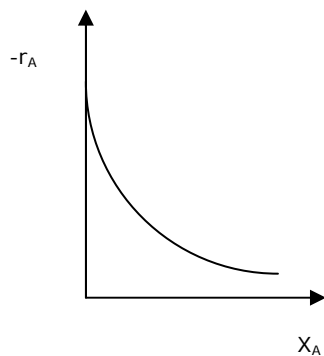
Si consideramos que $M = 1,22$ y analizamos la derivada vemos que es negativa en todo el rango de conversiones, lo que indica que la función es decreciente para cualquier valor de X_A , es decir que la velocidad disminuye al aumentar la conversión.

Otra forma de saber cómo varía la velocidad con la conversión, menos precisa, es evaluar la función en el intervalo

$$-r_A = 0,4 (0,45)^2 (1 - X_A) (1,22 + X_A)$$

$$-r_A = 0,081 (1 - X_A) (1,22 + X_A)$$

X_A	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
$-r_A \cdot 10^2$	9,9	9,6	9,2	8,6	7,8	7,0	5,9	4,7	3,3	1,7

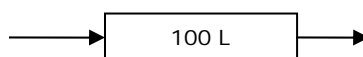


La mayor velocidad está en $X_A = 0$ (altas concentraciones) por lo que el reactor más conveniente es pistón sin reciclo, porque el reciclo baja el perfil de concentraciones que tiene lugar en el reactor y por tanto bajará la velocidades que ocurren en el reactor.

$$V_0 = 100 \text{ L/min}$$

$$C_{A0} = 0,45 \text{ mol/L}$$

$$C_{B0} = 0,55 \text{ mol/L}$$



Problema 10. 10 (p. 250)

Cuando el viscoso sirope de maíz es calentado se carameliza (se vuelve carmelita oscuro). Sin embargo si es calentado más lo debido se vuelve carbón.

Sirope de maíz → Caramelo → Partículas de carbón

El líquido caramelizado es enviado por coches tanques férreos a los formuladotes de sirope de cola, donde se prueba la calidad del sirope. Si el color es demasiado claro, penalizan y si tiene demasiadas partículas de carbón rechazan el tanque completo. O sea que hay un balance delicado entre lo no reaccionado y lo reaccionado.

Actualmente el reactor discontinuo es calentado a 154°C por un tiempo preciso. Entonces es rápidamente descargado, limpiado (una tarea ardua) y entonces recargado.

La compañía quiere reducir costos y sustituir esta costosa e intensa labor del reactor discontinuo por un sistema a flujo. Por supuesto se usará un reactor tubular (regla 2). ¿Qué piensa Usted de esta idea?. Comente por favor mientras se sienta y sorbe su cola.

Solución

La sustitución teóricamente está fundamentada porque a lo largo del pistón tienen lugar la misma historia de concentraciones, y por tanto de velocidades, que las que tienen lugar con el tiempo en el discontinuo, y se le suma además las ventajas de la operación continua.

Sin embargo, en este sistema se forma inevitablemente sólidos, que se adhieren en la pared del reactor en alguna medida (razón por la cual la limpieza del reactor discontinuo era una tarea ardua) y resulta que si el licor es viscoso y se calienta a través de las paredes se va a crear un gradiente de temperaturas y el carbón que se forme se va a adherir a las paredes de la tubería impidiendo el correcto funcionamiento. Ni que pensar en parar y limpiar la tubería.

Concluyo que la sustitución no es adecuada

Problema 10.11 (p. 251)

Se pretende llevar a cabo las reacciones siguientes



en un sistema continuo con las siguientes condiciones

Flujo de alimentación:

$$v = 100 \text{ L/s}$$

Composición de la alimentación:

$$C_{A0} = 6 \text{ mol/L}; C_{R0} = 0,6 \text{ mol/L}$$

Se quiere maximizar la razón de concentraciones C_R/C_T en la corriente producto. Como se ha reportado (vea Problema 7, Chem. Eng. Sci. 45,595-614, 1990) el ataque de este problema conlleva 2077 variables continuas, 204 variables enteras, 2108 constreñimientos y da como solución óptima el diseño mostrado en la fig. P.10.11.

- ¿Piensa usted que puede hacerlo mejor? Si es así, qué diseño de reactor sugiere y qué C_R/C_T espera obtener
- Si se desea minimizar la razón C_R/C_T qué haría usted

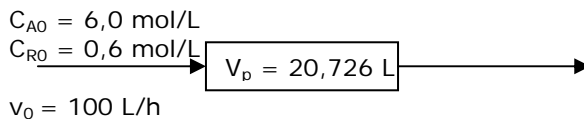


Fig. P.10.11

Solución

Como es una reacción serie paralelo la selección del sistema de reactores más adecuado se hace analizando sus componentes serie y paralelo por separado.

Si queremos maximizar C_R/C_T es necesario:

- En la descomposición de A, favorecer a R frente a T
- Evitar la descomposición de R en la medida de lo posible, es decir en la reacción, $A \rightarrow R \rightarrow \text{productos}$, favorecer a R frente a los productos S y U

Si atendemos a la descomposición de A (reacciones 1 y 2) la reacción (1) es la de mayor orden, así que hace falta que C_A sea lo más alta posible y **lo conveniente sería un reactor de flujo en pistón.**

Si atendemos a $A \rightarrow R \rightarrow \text{Productos}$, el producto intermedio es R y para favorecerlo **lo conveniente es un reactor de flujo en pistón.**

Teniendo en cuenta los resultados de los análisis se concluye que la selección de un reactor de flujo en pistón fue adecuada. No sé si el volumen coincide con el indicado.

Si quisiera minimizar C_R/C_T es obvio que es necesario seleccionar un reactor de mezcla completa.

Problema 10.12 (p. 251)

Para la reacción homogénea catalítica



Y con una alimentación que contiene $C_{A0} = 90 \text{ mol/l}$ y $C_{B0} = 10 \text{ mol/L}$ se desea 44% de conversión de A. ¿Qué tipo de reactor continuo es mejor en el sentido que da menor volumen total. No es necesario intentar calcular el volumen de los reactores requeridos, sólo determinar el sistema de reactores y el flujo a través de ellos.

Solución

Si se quiere el volumen mínimo, es eficiencia en cuanto a la producción y la clave está en trabajar con las velocidades máximas. Hay que saber cómo varía $-r_A$ en función de la conversión

$$-r_A = k C_A C_B$$

$$C_A = C_{A0} (1 - X_A) = C_{A0} (1 - X_A)$$

$$C_B = C_{B0} - C_{A0}X_A + 2C_{A0}X_A = C_{A0} (M + X_A) \quad \text{donde } M = C_{A0}/C_{B0}$$

$$-r_A = k C_{A0}^2 (1 - X_A) (M + X_A)$$

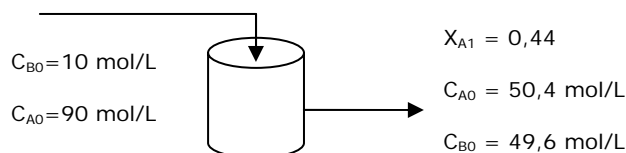
$$\frac{d(-r_A)}{dX_A} = k C_{A0}^2 (1 - M - 2X_A)$$

$M = 1/9 = 0,11$, así que la derivada es positiva para valores de X_A bajas y negativa para valores altos y en el máximo de $-r_A$ la derivada es 0, así que

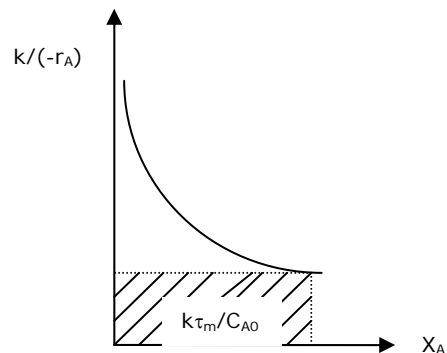
$$X_A = (1-M)/2 = 0,44$$

También puede evaluarse la velocidad: $(-r_A/k) = 8100 (1 - X_A) (1/9 + X_A)$

X_A	0	0,11	0,22	0,33	0,44
$-r_A/k$	900	1600	2100	2400	2500



La mejor opción porque trabaja con $-r_A$ máxima, así que tendrá el menor volumen



Problema 10.13 (p. 251)

Repetir el problema 10.12, considerando que se requiere 90% de conversión

Solución

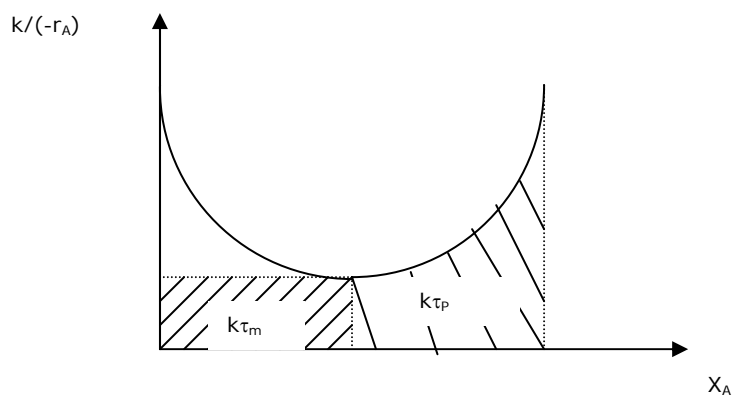
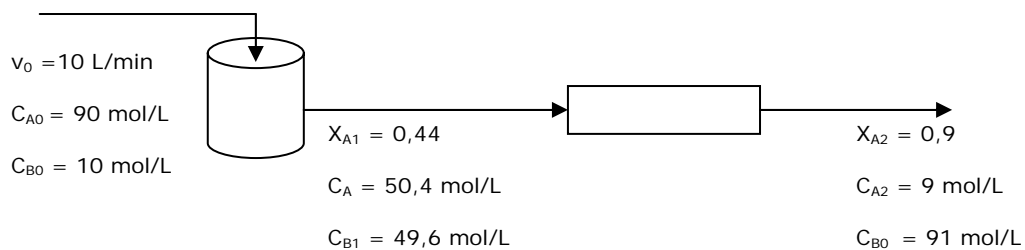
Ya se demostró que $-r_A$ tiene un máximo en $X_{A1} = 0,44$; pero podemos evaluar $-r_A/K$, que es proporcional a la velocidad, para diferentes valores de X_A si queremos

$$-r_A = k (90)^2 (1 - X_A) (1/9 + X_A)$$

$$(-r_A/k) = 8100 (1 - X_A) (1/9 + X_A)$$

X_A	0	0,11	0,22	0,33	0,44	0,55	0,66	0,77	0,88
$-r_A/k$	900	1600	2100	2400	2500	2400	2100	1600	900

El volumen mínimo lo alcanzo trabajando con un mezcla desde $X_A = 0$ hasta 0,44, valor de conversión en que la velocidad tiene su máximo valor, logrando así que en todo el reactor la velocidad sea máxima, y desde $X_A = 0,44$ hasta 0,9 trabajo con un pistón para aprovechar las altas velocidades que tienen a las conversiones medias

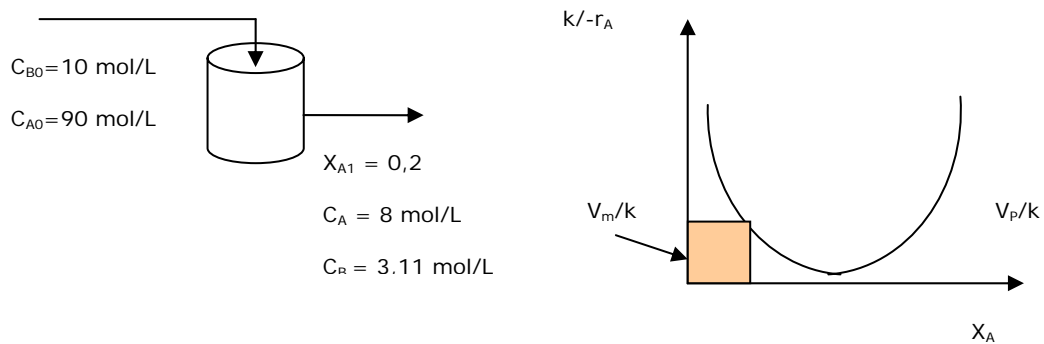


Problema 10.14 (p. 251)

Repita el problema 10.12 considerando que sólo se quiere un 20% de conversión de A

Solución

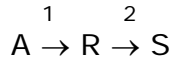
Como la curva de $1/-r_A$ vs X_A es descendente en el intervalo de $X_A = 0$ hasta 0,2 lo más conveniente es trabajar con un reactor de mezcla completa, que tendrá la mayor velocidad del intervalo y por lo tanto requerirá el menor τ



La mejor opción porque trabaja con $-r_A$ mayor del intervalo de conversiones 0-0,2 y por tanto tendrá el menor volumen

Problema 10.15 (p. 252)

Se desea producir R a partir de A en un reactor discontinuo con un tiempo de corrida no mayor de 2 h y una temperatura entre 5 y 90°C. la cinética de este sistema reaccionante de primer orden en fase líquida es la siguiente



$$k_1 = 30 e^{-20\,000/RT}$$

$$k_2 = 1,9 e^{-15\,000/RT}$$

Determine la temperatura óptima (para dar C_R máximo), el tiempo de corrida requerido y la correspondiente conversión de A en R

Solución

Cuando la reacción deseada es la de mayor energía de activación se debe a la temperatura máxima. Por lo tanto $T = 90^\circ\text{C} = 363\text{ K}$

$$\frac{k_2}{k_1} = \frac{1,9 e^{-15000/RT}}{30 e^{-20000/RT}} = \frac{1,9}{30} e^{\left(\frac{20000-15000}{8,314(363)}\right)} = 0,332$$

$$A \quad 90^\circ\text{C}$$

$$k_1 = 30 e^{-20000/(8,314)(363)} = 0,0395 \text{ min}^{-1}$$

$$k_2 = 1,9 e^{-15000/(8,314)(363)} = 0,01315 \text{ min}^{-1}$$

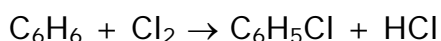
$$\frac{C_{R \text{ máx}}}{C_{A0}} = \left(\frac{k_1}{k_2}\right)^{\frac{k_2}{k_2-k_1}} = \left(\frac{0,0395}{0,0132}\right)^{\frac{0,0135}{0,1315-0,0395}} = 0,5778 \text{ mol/L}$$

$$t_{\text{opt}} = \frac{\ln \frac{k_2}{k_1}}{k_2 - k_1} = \frac{\ln 0,3323}{0,01315 - 0,0395} = 42,37 \text{ min}$$

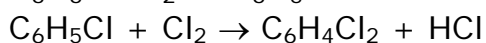
$$X_A = 1 - e^{-k_1 t} = 1 - e^{-0,0395(42,37)} = 0,8124$$

Problema 10.16 (p. 252)

Se tiene el siguiente sistema de reacciones elementales



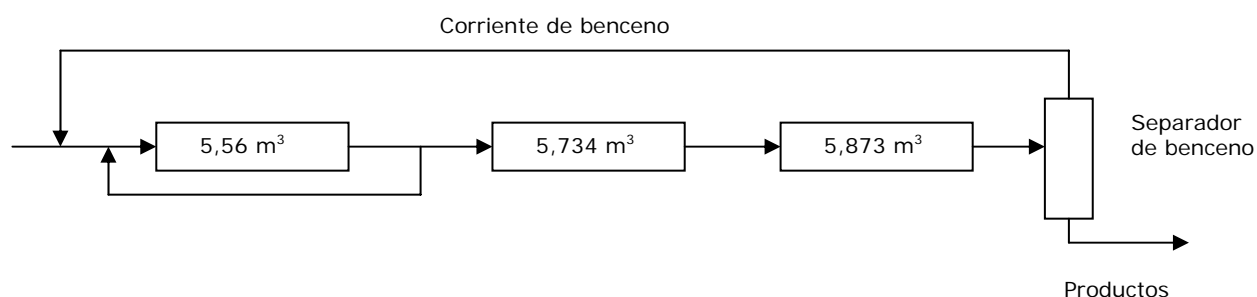
$$k_1 = 0,412 \text{ L/kmo h}$$



$$k_2 = 0,055 \text{ L/kmol h}$$

El producto deseado es monoclorobenceno. Suponga también que el benceno que no reacciona puede ser completamente separado y recirculado si se desea.

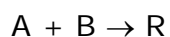
Con el requerimiento de usar un mínimo de 3 reactores en cualquier arreglo y el separador y el reciclo del benceno no reaccionado (ver Caso 3, Chem. Eng. Sci. 46, 1361-1383, 1991) el mejor arreglo seleccionado fue el mostrado



¿Puede usted hacerlo mejor? No es necesario calcular el volumen y velocidades de flujo. Sólo que aparezca un esquema mejorado.

Solución

Si $A = \text{C}_6\text{H}_6$



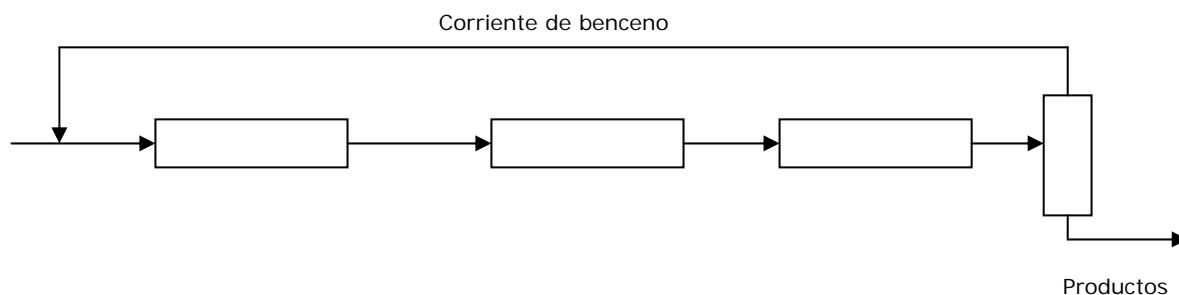
Lo más conveniente es usar un reactor de flujo en pistón. No conviene el reciclo del primer reactor

$B = \text{Cl}_2$



$C = \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$

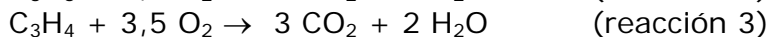
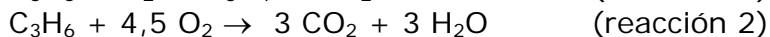
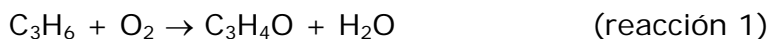
$D = \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$



Conviene trabajar a bajas conversiones de benceno. Por ejemplo, para $X_A = 0,4$, con $k_2/k_1 = 0,1335$, $C_R/C_{A0} = 0,3855$, $C_S/C_{A0} = 0,0145$ y $C_R/C_S = 26,68$

Problema 10.17 (p. 252)

Adams y sus colaboradores (J.Catalysis, 3, 379,1964) estudió la oxidación catalítica del propileno sobre catalizador de molibdato de bismuto para formar acroleína. A 460° con una alimentación de oxígeno y propileno las siguientes 3 reacciones ocurren



Las reacciones son todas de primer orden con respecto a la olefina e independientes de la del oxígeno y los productos de la reacción, con las siguientes razones de constantes cinéticas

$$k_2/k_1 = 0,1$$

$$k_3/k_2 = 0,25$$

Si no se requiere enfriamiento para mantener la temperatura de reacción cercana a los 460° y si no se permite la separación y recirculación del C_3H_6 no reaccionado, qué tipo de reactor usted sugiere como el mejor y cuál será la máxima velocidad de producción de acroleína que se puede esperar

Solución

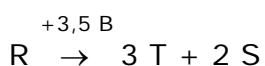
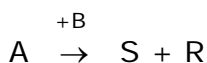
Si llamamos A a la olefina, B al oxígeno, R a la acroleína, S al H_2O y T al CO_2 , el sistema reaccionante será:



A y B están en paralelo, por la reacción 1 dan R, que es el deseado y por la 2 dan los indeseados S y T. Como ambas reacciones son de primer orden con respecto a la olefina y como no dependen del oxígeno, ni de los productos, eso implica que:

cantidad de R formado por (1)/cantidad de T y S formado por (2) = f (k_1 , k_2)

Si analizamos la reacción 1 y 3 vemos que A, R y S y T están en serie



De acuerdo a esto la C_A debe ser alta y **el reactor indicado es el reactor de flujo en pistón**

Para calcular la máxima producción que se puede esperar hay que plantear el rendimiento instantáneo

$$\varphi = \frac{dC_R}{-dC_A} = \frac{r_R}{-r_A} = \frac{k_1 C_A - k_3 C_R}{k_1 C_A + k_2 C_A} = \frac{k_1}{k_1 + k_2} - \frac{k_3}{k_1 + k_2} \frac{C_R}{C_A}$$

$$\varphi = \frac{dC_R}{-dC_A} = K_1 - \frac{K_3}{C_A} C_R \quad \text{donde} \quad K_1 = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \quad y \quad K_3 = \frac{k_3}{k_1 + k_2}$$

$$\frac{dC_R}{dC_A} - \frac{K_3}{C_A} C_R = -K_1 \quad \text{ecuación lineal de primer orden con factor integrante}$$

$$\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$$

$$y = e^{-\int P(x)dx} \left\{ \int Q(x) e^{\int P(x)dx} dx + Cte \right\}$$

$$\int P(x)dx = -0,227 \int \frac{dC_A}{C_A} = \ln C_A^{-K_3}$$

$$e^{\int P(x)dx} = C_A^{-K_3}$$

$$e^{-\int P(x)dx} = C_A^{K_3}$$

$$\int Q(x) e^{\int P(x)dx} dx = -K_1 \int C_A^{-K_3} = -\frac{K_1}{1-K_3} C_A^{1-K_3}$$

$$C_R = C_A^{K_3} \left\{ \frac{K_1}{1-K_3} C_A^{1-K_3} + Cte \right\}$$

$$\text{Cuando } C_A = C_{A0}, \quad C_R = 0 \quad \Rightarrow \quad Cte = \frac{K_1}{1-K_3} C_{A0}^{1-K_3}$$

$$C_R = \frac{K_1 C_A^{K_3}}{1-K_3} \left\{ C_{A0}^{1-K_3} - C_A^{1-K_3} \right\} = \frac{K_1}{1-K_3} \left\{ C_{A0} \left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right)^{K_3} - C_A \right\}$$

$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{\frac{k_1}{k_1 + k_2}}{1 - \frac{k_3}{k_1 + k_2}} \left\{ \left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right)^{l_3 / k_1 + k_2} - \frac{C_A}{C_{A0}} \right\} = \frac{k_1}{k_1 + k_2 - k_3} \left\{ \left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right)^{l_3 / k_1 + k_2} - \frac{C_A}{C_{A0}} \right\} \left\{ \right\}$$

Para obtener $C_{R \text{ máx}}$ hay que derivar con respecto a τ e igualar a 0 la derivada

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = e^{-(k_1+k_2)\tau} = e^{-K\tau} \quad \text{donde } K = k_1 + k_2$$

$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{K_1}{1-K_3} \left\{ \left(\frac{C_A}{C_{A0}} \right)^{K_3} - \frac{C_A}{C_{A0}} \right\} = \frac{K_1}{1-K_3} \left\{ \left(e^{-K\tau} \right)^{K_3} - e^{-K\tau} \right\} = \frac{K_1}{1-K_3} \left\{ e^{-KK_3\tau} - e^{-K\tau} \right\}$$

$$\frac{dC_R}{d\tau} = \frac{K_1}{1-K_3} \left\{ -KK_3 \left(e^{-KK_3\tau} \right)^3 + K e^{-K\tau} \right\} = 0$$

$$\left\{ -KK_3 \left(e^{-KK_3\tau} \right)^3 + K e^{-K\tau} \right\} = 0 \quad \Rightarrow KK_3 \left(e^{-KK_3\tau} \right)^3 = K e^{-K\tau} \quad \Rightarrow K_3 \left(e^{-KK_3\tau} \right)^3 = e^{-K\tau}$$

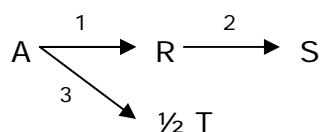
$$\ln K_3 - K_3 K \tau = -K \tau$$

$$\tau_{\text{ópt}} = \frac{\ln K_3}{KK_3 - K} = \frac{\ln \frac{k_3}{k_1 + k_2}}{k_3 - (k_1 + k_2)}$$

$$\left(\frac{C_R}{C_{A0}} \right)_{\text{máx}} = \frac{K_1}{1-K_3} \left\{ \left(e^{-KK_3\tau} \right)^3 - e^{-K\tau} \right\} = \frac{k_1}{k_1 + k_2 - k_3} \left\{ e^{-k_3\tau_{\text{ópt}}} - e^{-(k_1+k_2)\tau_{\text{ópt}}} \right\}$$

Problema 10.18 (p. 253)

Considere las siguientes reacciones

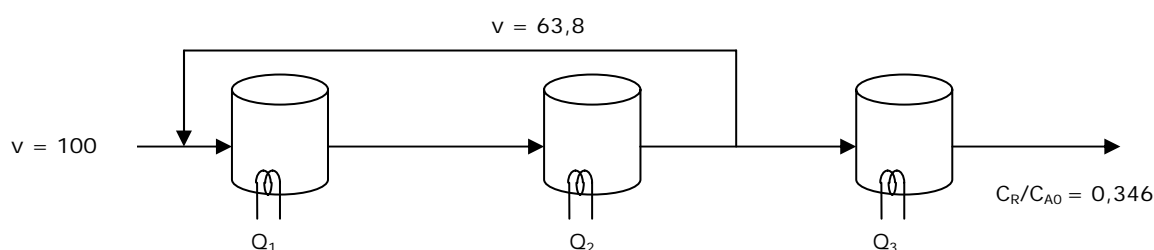


$$\begin{array}{ll} k_1 = 5,4 \cdot 10^8 e^{-66275/RT} & \text{s}^{-1} \\ k_2 = 3,6 \cdot 10^3 e^{-33137/RT} & \text{s}^{-1} \\ k_3 = 1,6 \cdot 10^{10} e^{-99412/RT} & \text{L/mol s} \end{array}$$

donde la energía de activación está en J/mol . Se quiere maximizar C_R y $C_{A0} = 1 \text{ mol/L}$.

Con la premisa de utilizar 3 reactores de mezcla completa con posible intercambio de calor y un rango de temperatura entre 360 K y 396 K, el mejor esquema dado por la computadora es el mostrado (ver ejemplo 2, AIChE J., 40, 849,1994)

- ¿Le gusta este diseño? Si no, qué sugiere con este sistema. Retenga los 3 reactores de mezcla completa, por favor.
- ¿Qué C_R/C_{A0} puede ser obtenido y qué τ debe ser usado en el mejor reactor con una transferencia de calor ideal?



Solución

Es un sistema serie paralelo, así que la selección se basa en analizar sus componentes serie y sus componentes en paralelo por separado.

En paralelo está $A \rightarrow R$ y $A \rightarrow T$ y si vemos los órdenes de las reacciones, la deseada es de menor orden, por lo tanto teniendo en cuenta los componentes en paralelo **la concentración de A debe mantenerse baja** durante el transcurso de la reacción.

Los componentes en serie son $A \rightarrow R \rightarrow S$ y como R es el deseado teniendo en cuenta los componentes en serie **la concentración de A debe permanecer lo más alta posible** durante el transcurso de la reacción.

Existe una contradicción y la decisión final depende del peso relativo de las reacciones, es decir, depende de las velocidades relativas de ellas.

Analicemos las constantes cinéticas

T (K)	k_1	k_2	k_3	k_1/k_3	k_1/k_2
360	0,1306	0,0560	0,00006	2176,0	2,33
396	0,9700	0,1530	0,00120	808,3	6,33

Del análisis de esta tabla vemos que entre 360 y 396 K, $k_3 \ll k_1$ y que sin embargo k_1 y k_2 tienen ordenes similares o iguales.

Conclusión

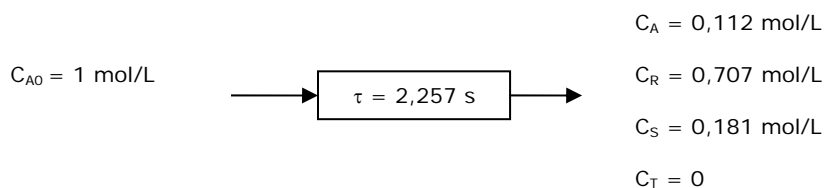
La reacción que pesa es $A \rightarrow R \rightarrow S$, mientras que $A \rightarrow \frac{1}{2} T$ puede ser despreciada porque ocurre muy lentamente con respecto a las restantes. Si eso es así el reactor de flujo en pistón es el más conveniente. La cascada de 3 tanques; pero sin la recirculación, resulta un diseño aceptable. La temperatura de trabajo, atendiendo a E_1 y E_2 , debe ser 396 K.

b) Trabajando con un pistón a 396 K

$$\frac{C_R}{C_{A0}} = \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{k_2 / (k_2 - k_1)} = \left(\frac{0,97}{0,1532} \right)^{0,1532 / (0,1532 - 0,97)} = 0,707 \text{ mol/L}$$

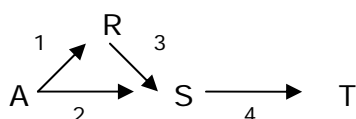
$$\tau_{opt} = \frac{\ln \left(\frac{k_2}{k_1} \right)}{k_2 - k_1} = \frac{\ln \left(\frac{0,1532}{0,97} \right)}{0,1532 - 0,97} = 2,257 \text{ s}$$

$$X_A = 1 - \exp(-k_1 \tau) = 1 - \exp(-0,97)(2,257) = 0,8880$$



Problema 10.19 (p. 254)

El mecanismo aceptado para la oxidación del naftaleno, altamente exotérmica y catalizada por sólido para obtener anhídrido ftálico es:

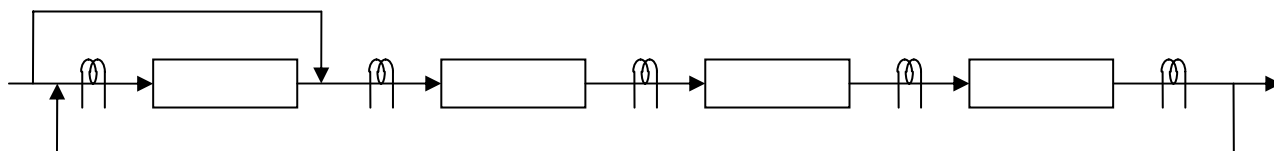


$$\begin{aligned}
 k_1 &= k_2 = 2 \cdot 10^{13} e^{-159000/RT} \\
 k_3 &= 8,15 \cdot 10^{17} e^{-209000/RT} \\
 k_4 &= 2,1 \cdot 10^5 e^{-83600/RT}
 \end{aligned}$$

Donde A = naftaleno, R = naftaquinona, S = anhídrido ftálico y T = CO₂ + H₂O

Y las energías de activación en unidades de J/mol. Esta reacción puede ser corrida a cualquier temperatura entre 900 y 1200 K.

Un arreglo para un óptimo local descubierto por la computadora (ver ejemplo 1, Chem. Eng. Sci., 49, 1037-1051, 1994) es mostrado en la figura



- ¿Le gusta este diseño? Puede hacerlo mejor
- Si pudiera mantener cualquiera y el τ deseado y si el reciclo es permitido cuánto anhídrido ftálico puede ser producido por mol de naftaleno

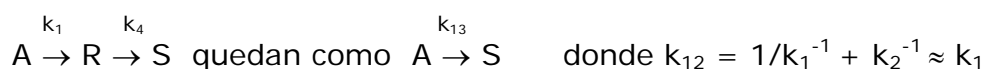
Sugerencia: Por qué no determinar los valores de k_1 , k_2 , k_3 y k_4 para ambos extremos de temperatura, ver los valores y entonces proceder a la solución del problema.

Solución

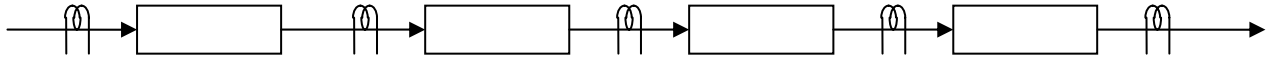
T (K)	k_1 (h ⁻¹)	k_2 (h ⁻¹)	k_3 (h ⁻¹)	k_4 (h ⁻¹)	k_3/k_1	k_4/k_1
900	11 818.9	11 818.9	603 497,3	2,95	51	$2,5 \cdot 10^{-4}$
1200	2 397 122.5	2 397 122.5	650 572 794,1	48,20	271	$2,0 \cdot 10^{-5}$

Al ser las reacciones 1 y 2 de primer orden y además $k_1 = k_2$ trae como consecuencia que R y S se formen en cantidades estequiométricas, independientemente del tipo de reactor y las temperatura seleccionada.

Si $k_3/k_1 \gg 1$ quiere decir que la reacción 3 es mucho más rápida que la 1 y no bien se forma R que se transforma en S, o sea que $C_R \approx 0$. O sea que las reacciones siguientes



Con esto el sistema se transforma en $A \rightarrow S \rightarrow T$, que es un sistema reaccionante en serie, por lo que **lo más conveniente es un reactor de flujo en pistón sin recirculación, ni adiciones de alimentación fresca.**



Mientras más chiquito k_4/k_1 mejor y eso se logra a 1200 K porque $E_1 > E_4$ y las altas temperaturas favorecen la reacción $A \rightarrow S$. **Se selecciona 1200 K**

A 1200 K,

$$k_2 = 2\,397\,122,5 \text{ h}^{-1} = 39952,04 \text{ min}^{-1} = 665,86 \text{ s}^{-1} \quad (\text{demasiado grande})$$

$$k_4/k_1 = 0,00002$$

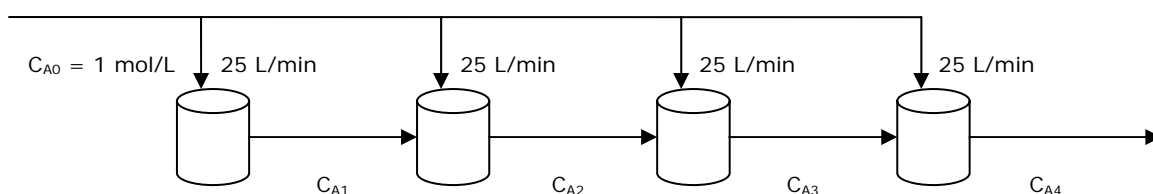
Estos valores de constantes cinéticas reflejan que el naftaleno se transforma inmediatamente en anhídrido ftálico y no se forma prácticamente CO_2 ni H_2O

Problema 10.20 (p. 254)

Al profesor Turton no le gusta usar reactores en paralelo. El se amilanó cuando vio lo propuesto por mí como mejor diseño para el ejemplo 10.1. El propuso usar el diseño de la fig. E.10.1 sin ningún reciclo

Determine el rendimiento fraccional de S, $\Phi(S/A)$ alcanzable con el diseño de Turton y vea si juega con el obtenido en el ejemplo 10.1

Solución



$$\tau_1 = \frac{V}{25} = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{(-r_A)_1}$$

$$\tau_2 = \frac{V}{50} = \frac{C'_{A1} - C_{A2}}{(-r_A)_2} \quad \text{donde} \quad C'_{A1} = \frac{1}{2}C_{A1} + \frac{1}{2}$$

$$\tau_3 = \frac{V}{75} = \frac{C'_{A2} - C_{A3}}{(-r_A)_3} \quad \text{donde} \quad C'_{A2} = \frac{2}{3}C_{A2} + \frac{1}{3}$$

$$\tau_4 = \frac{V}{100} = \frac{C'_{A3} - 0,25}{(-r_A)_{0,25}} \quad \text{donde} \quad C'_{A3} = \frac{3}{4}C_{A3} + \frac{1}{4}$$

Es un sistema de 4 ecuaciones y 4 incógnitas, así que está determinado; pero hay que resolverlo por tanteo y error y una vez que se conozcan las concentraciones determinar la C_R de salida de cada reactor.

Está claro que el procedimiento es bastante engorroso y el método gráfico para la solución del balance de materiales del reactor mezcla puede ayudar a la solución. Según el método el punto de operación del reactor se encuentra donde se corta la curva de $(-r_A)$ vs C_A con el balance de materiales que en el plano $(-r_A) - C_A$ es una línea recta que pasa por la concentración de entrada al reactor y que tiene como pendiente $-1/\tau_i$.

$$(-r_A) = 0,025 + 0,2 C_A + 0,4 C_A^2$$

C_A	0,6	0,55	0,5	0,45	0,4	0,35	0,3	0,25	0,2	0,15	0,1	0,05
$(-r_A)$	0,625	0,256	0,225	0,196	0,169	0,144	0,121	0,100	0,081	0,064	0,049	0,036

Los pasos seguidos en la solución del problema son:

1. Con estos valores se obtiene la curva de $(-r_A)$ vs C_A
2. Se supone C_{A1} y se calcula τ_1 por la ecuación 1
3. Con τ_1 se calcula V
4. Con V se calcula τ_2, τ_3 y τ_1
5. Con $C_{A1}' = \frac{1}{2} C_{A1} + \frac{1}{2}$, y τ_2 se calcula el punto de operación del reactor 2
6. Con $C_{A2}' = \frac{2}{3} C_{A2} + \frac{1}{3}$ y τ_3 se calcula el punto de operación del reactor 3
7. Con $C_{A3}' = \frac{3}{4} C_{A3} + \frac{1}{4}$ y τ_4 se calcula el punto de operación del reactor 4
8. Si $C_{A4} = 0,25$, el valor supuesto de C_{A1} es correcto, si no se vuelve al paso 2

Supongo $C_{A1} = 0.3$

$$V = \frac{(1-0,3)(25)}{0,025 + 0,2(0,3) + 0,4(0,3^2)} = 144,6281 \text{ L}$$

$$\tau_2 = \frac{144.6281}{50} = 2,8925 \text{ min} \Rightarrow \frac{1}{\tau_2} = 0,3457 \text{ min}^{-1}$$

$$\tau_3 = \frac{144.6281}{75} = 1,9283 \text{ min} \Rightarrow \frac{1}{\tau_3} = 0,5186 \text{ min}^{-1}$$

$$\tau_2 = \frac{144.6281}{100} = 1,4462 \text{ min} \Rightarrow \frac{1}{\tau_2} = 0,6914 \text{ min}^{-1}$$

$$C_{A1}' = \frac{0,3}{2} + \frac{1}{2} = 0,65 \text{ mol/L}$$

Con C_{A1}' y $-1/\tau_2$ trazo el balance de materiales del reactor 2 y la concentración de salida del segundo tanque es 0,3. El gráfico se encuentra al final del problema.

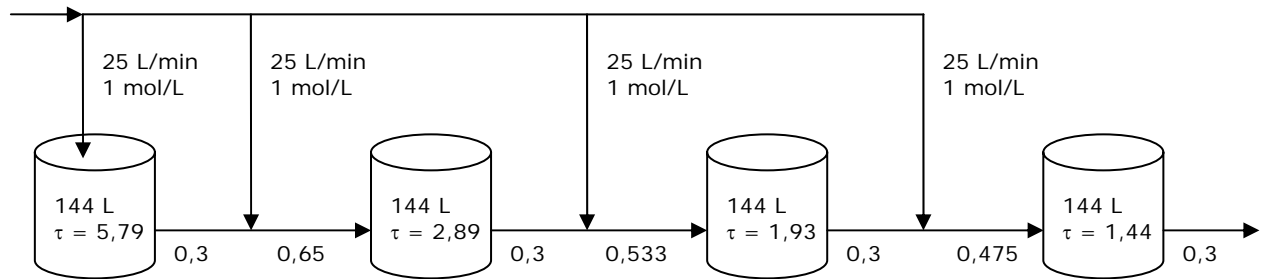
$$C_{A2}' = \frac{2(0,3)}{3} + \frac{1}{3} = 0,5333 \text{ mol/L}$$

Con C_{A2}' y $-1/\tau_3$ trazo el balance de materiales del reactor 3 y la concentración de salida del tercer tanque es 0,3

$$C_{A3}' = \frac{3(0,3)}{4} + \frac{1}{4} = 0,475 \text{ mol/L}$$

Con C_{A3}' y $-1/\tau_4$ trazo el balance de materiales del reactor 4 y la concentración de salida del cuarto tanque es 0,3

Los resultados se muestran en la siguiente figura



Supongo $C_{A1} = 0,25 \text{ mol/L}$ y repito el procedimiento. Los resultados están a continuación

$$V = \frac{(1 - 0,25)(25)}{0,025 + 0,2(0,25) + 0,4(0,25^2)} = 187,5 \text{ L}$$

$$\tau_2 = \frac{187,5}{50} = 3,75 \text{ min} \Rightarrow \frac{1}{\tau_2} = 0,2667 \text{ min}^{-1}$$

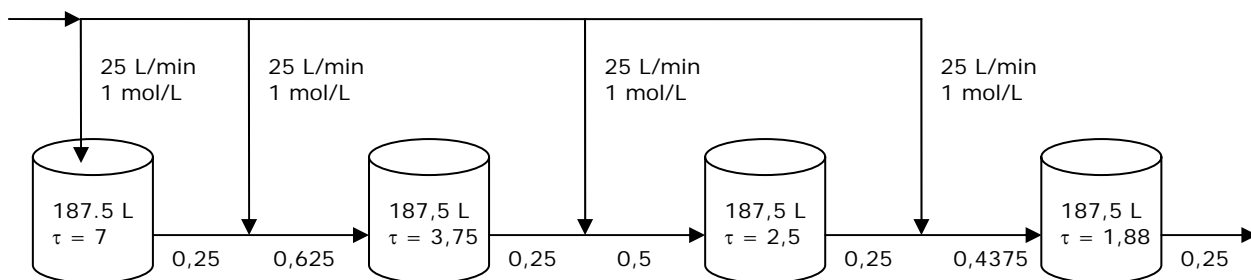
$$\tau_3 = \frac{187,5}{75} = 2,5 \text{ min} \Rightarrow \frac{1}{\tau_3} = 0,4 \text{ min}^{-1}$$

$$\tau_2 = \frac{187,5}{100} = 1,875 \text{ min} \Rightarrow \frac{1}{\tau_2} = 0,5333 \text{ min}^{-1}$$

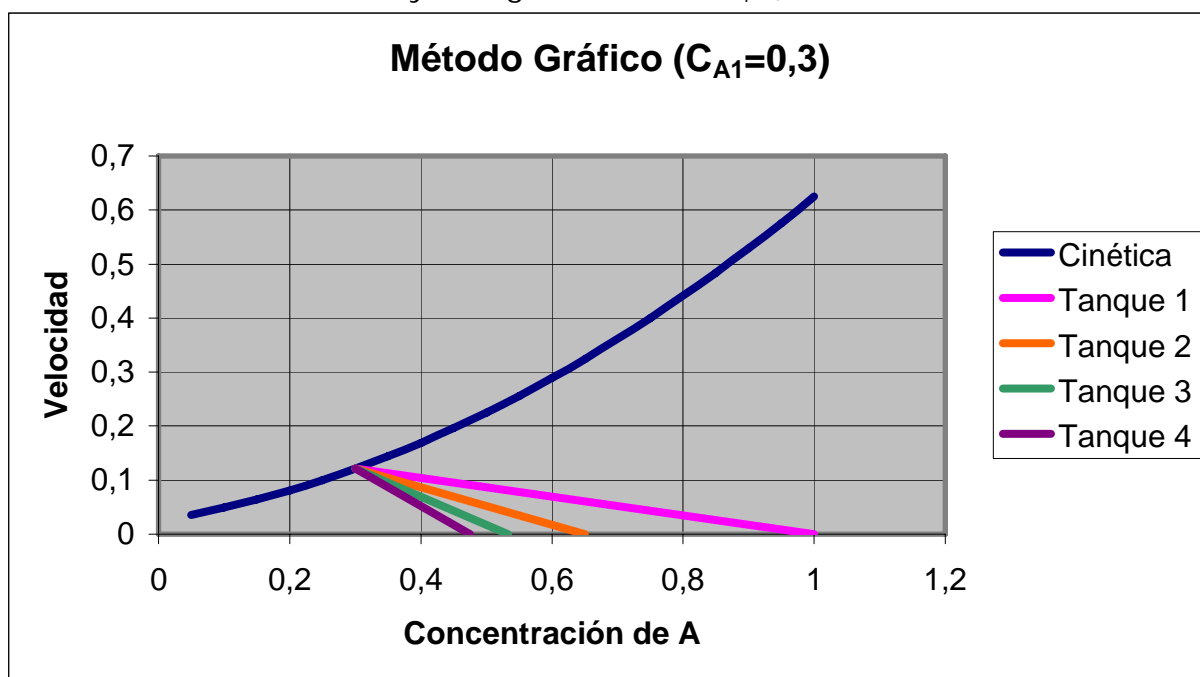
$$C'_{A1} = \frac{0,25}{2} + \frac{1}{2} = 0,625 \text{ mol/L}$$

$$C'_{A2} = \frac{2(0,25)}{3} + \frac{1}{3} = 0,5 \text{ mol/L}$$

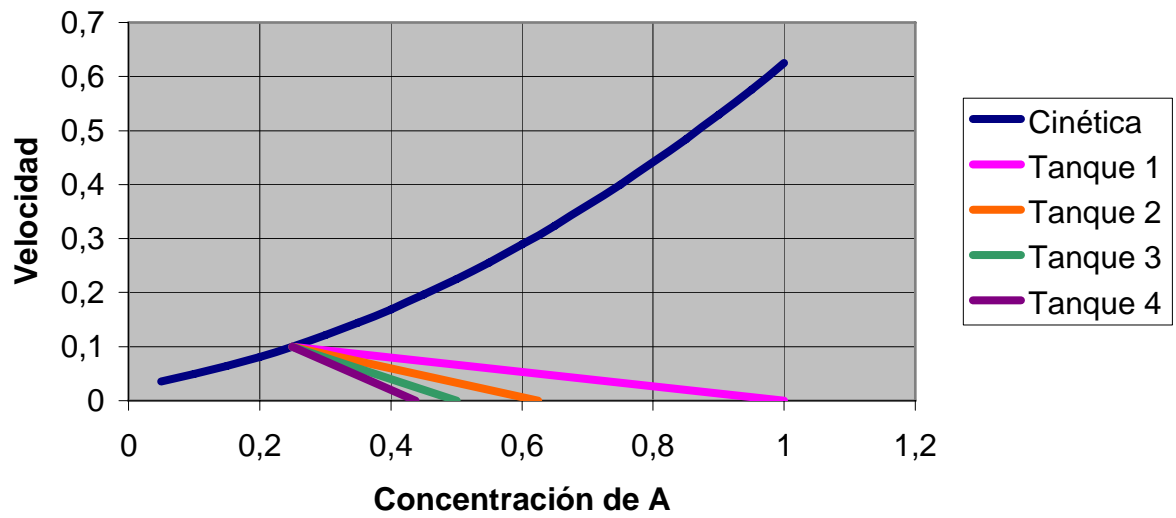
$$C'_{A3} = \frac{3(0,25)}{4} + \frac{1}{4} = 0,4375 \text{ mol/L}$$



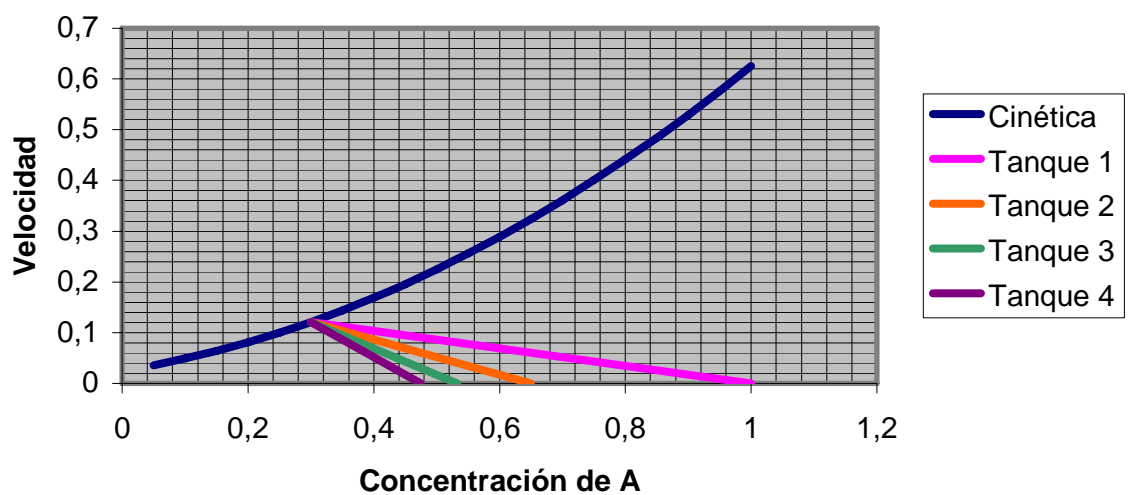
Este sistema es equivalente al del ejemplo 10.1, en todos los tanques la concentración de A es 0,25 y se logra en todos el $\phi_{\text{máx}}$.

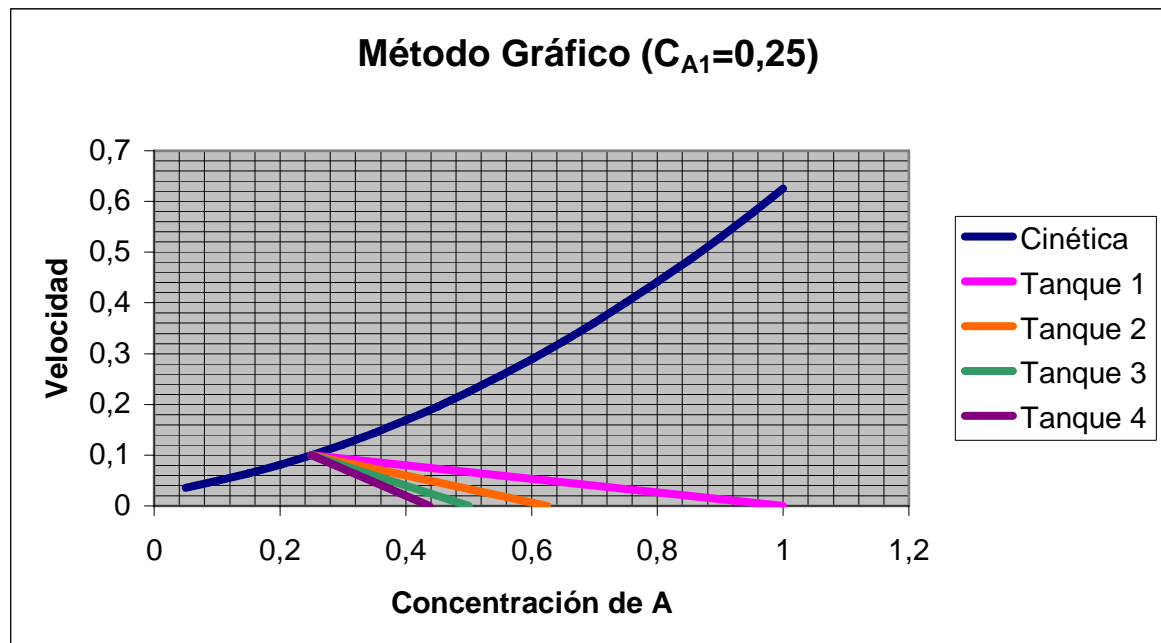


Método Gráfico ($C_{A1}=0,25$)



Método Gráfico ($C_{A1}=0,3$)





También puede resolverse analíticamente; pero hay que resolver 3 veces una ecuación de segundo grado con números bastantes incómodos. Voy a hacerlo con $C_{A1} = 0,25$ porque es el resultado del tanteo y porque tiene números no tan incómodos

$$3,75 = \frac{0,625 - C_{A2}}{0,025 + 0,2C_{A2} + 0,4C_{A2}^2}$$

$$1,5C_A^2 + 1,75C_A - 0,53125 = 0$$

$$C_A = \frac{-1,75 \pm \sqrt{1,75^2 - 4(1,5)(-0,53125)}}{2(1,5)}$$

$$C_A = 0,25 \text{ mol} / L$$

$$2,5 = \frac{0,5 - C_{A3}}{0,025 + 0,2C_{A3} + 0,4C_{A3}^2}$$

$$C_{A3}^2 + 1,5C_{A3} - 0,4375 = 0$$

$$C_{A3} = \frac{-1,5 \pm \sqrt{1,5^2 - 4(1)(-0,4375)}}{2}$$

$$C_{A3} = 0,25 \text{ mol} / L$$

$$1,875 = \frac{0,4375 - C_{A4}}{0,025 + 0,2C_{A4} + 0,4C_{A4}^2}$$

$$0,75C_{A4}^2 + 1,375C_{A4} - 0,390625 = 0$$

$$C_{A4} = \frac{-1,375 \pm \sqrt{1,375^2 - 4(0,75)(-0,390625)}}{2}$$

$$C_{A4} = 0,25 \text{ mol} / L$$