

# Reactores Químicos Teoría y Ordenador

Christian Pérez Hita

# Contents

<b>Chapter 1</b>	<b>Análisis</b>	<b>Page 2</b>
1.1	Caracterización de reactores	2
1.1.1	Reactores de mezcla perfecta	3
1.1.2	Reactor de flujo pistón.	3
1.2	Modelización de reactores	4
1.2.1	Modelo de mezcla perfecta	4
1.2.2	Velocidades de reacción	6
	Fase Líquida	6
	Fase Gaseosa	7
	Calor intercambiado con el exterior	7
<b>Chapter 2</b>	<b>Reactor Discontinuo Mezcla perfecta</b>	<b>Page 9</b>
2.0.1	Isotermo	9
	Análisis de variables	10
<b>Chapter 3</b>	<b>Reactor Continuo Mezcla Perfecta</b>	<b>Page 17</b>

# Chapter 1

## Análisis

### 1.1 Caracterización de reactores

#### Definition 1.1.1: Tipos de Reactores ideales

Se pueden clasificar en función de:

- Grado de mezcla
- Condiciones de operación

En función del grado de mezcla se clasifican en:

- Reactores de mezcla perfecta
- Reactor de flujo pistón

Un reactor de mezcla perfecta es aquel en el que en todos los puntos del reactor de forma axial y radial la concentración es la misma, en cambio, en un reactor de flujo pistón la concentración varía en función de la posición en el reactor.

En función del intercambio de calor en:

- Reactores isotérmicos
- Reactores adiabáticos
- Reactores no isotérmicos-no adiabáticos

En función del régimen de operación:

- Reactores continuos
- Reactores discontinuos
- Reactores semicontinuos

Aunque existen tres posibles configuraciones de reactores según el régimen de operación, es importante recordar que, en el régimen continuo, transcurrido un tiempo  $t$ , el sistema alcanza un estado estacionario en el cual las propiedades del reactor no varían con el tiempo (ecuaciones algebraicas).

Esto es fundamental para el diseño del reactor. Sin embargo, para un adecuado control del proceso, es necesario realizar un estudio dinámico del reactor, analizando su comportamiento durante la puesta en marcha y ante distintos tipos de estímulos (ecuaciones diferenciales).

De manera evidente, un reactor de flujo pistón es un reactor continuo, ya que no existe otra forma de operación para este tipo de sistema.

### 1.1.1 Reactores de mezcla perfecta

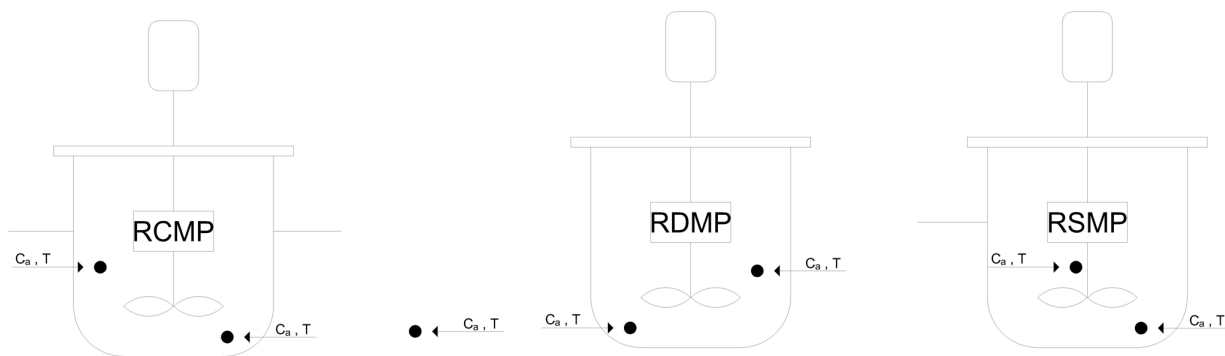
Podemos encontrar 3 tipos de reactores de mezcla perfecta:

- Reactor de tanque agitado continuo
- Reactor de tanque agitado discontinuo
- Reactor semicontinuo

El reactor de tanque agitado continuo (RCMP) es el más común, hay tanto una corriente de entrada como una salida

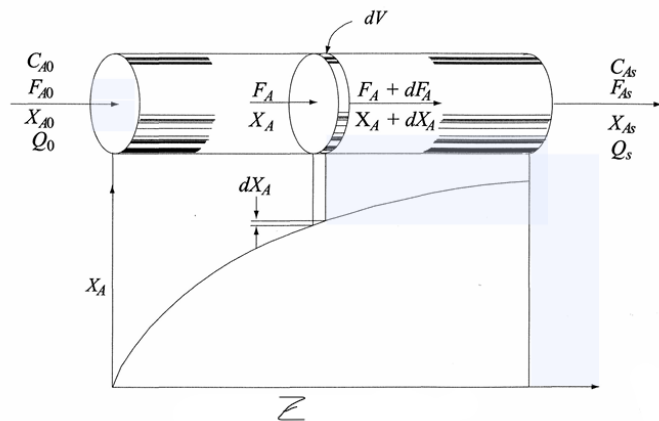
El reactor de tanque agitado discontinuo (RDMP) es un reactor en el que se trabaja por lotes, también conocidos como reactor batch, en este tipo de reactores se carga el reactivo y se deja reaccionar hasta que se obtiene el producto deseado.

El reactor semicontinuo (RSMP) puede tener una corriente de entrada o una de salida, aunque lo más común es que tenga una corriente de entrada pero no de salida



### 1.1.2 Reactor de flujo pistón

En el reactor flujo de pistón no hay mezcla a nivel axial, por lo que vamos a tener perfiles de temperatura y concentración en función de la posición en el reactor ( $Z$ ). Por ello es necesario trabajar en estado estacionario, con  $dv$  al contrario de mezcla perfecta que siempre trabajamos con  $V$ , además obviamente solo se puede trabajar en continuo.



## 1.2 Modelización de reactores

### 1.2.1 Modelo de mezcla perfecta

**Balance global en continuo:**

$$\frac{dM}{dt} = m_o - m_s \quad (1.1)$$

Si la masa la establecemos en función del volumen se puede establecer con el caudal volumétrico y densidad:

$$\frac{d(V\rho)}{dt} = F_o\rho_o - F_s\rho_s \quad (1.2)$$

En el caso de trabajar en condiciones isothermas  $\rho$  es constante, y en caso de que trabajemos en un rango pequeño de temperatura podemos considerar un valor medio tal que:

$$\frac{dV}{dt} = F_o - F_s \xrightarrow{V=\text{cte}} \sum F_o = \sum F_s \quad (1.3)$$

De forma que el caudal volumétrico de entrada coincide con el caudal volumétrico de salida.

**Note:-**

Esto solo se cumple cuando trabajamos en un reactor ideal, es decir, ya que se supone mezcla perfecta, un buen sistema de agitación que cumple las condiciones de homogeneidad y que mantenga un volumen constante. En caso contrario regulando por control de nivel se varía el acceso de corriente de entrada o de salida se mantiene en volumen constante

**Balance a componentes:**

$$\frac{dN_i}{dt} = ni_o - ni_s + ri \cdot V \quad (1.4)$$

Es decir la variación del número de moles del componente i respecto al tiempo es igual a la diferencia de moles de entrada y salida más la velocidad de reacción del componente i por el volumen del reactor (Término de generación).

A su vez aunque debemos trabajar en moles, puesto que estamos en una reacción química, nos interesa más trabajar en concentraciones, ya que, nos da mucha más información, y como  $V \cdot C_i = N_i$  podemos reescribir la ecuación anterior de la siguiente forma:

$$\frac{d(C_i \cdot V)}{dt} = C_{io} \cdot F_o - C_{is} \cdot F_s + r_i \cdot V \quad (1.5)$$

De donde como se ha mencionado anteriormente, V al ser constante puede salir de la derivada, el caudal volumétrico de entrada es igual al de salida (1.3), además como estamos en una mezcla perfecta.

La concentración en la entrada y salida del reactor deben de ser idénticas, ya que, para ser una mezcla perfecta en cualquier punto del reactor debe tener las mismas propiedades  $\rightarrow C_i = C_{is}$ , por lo que se simplifica a la siguiente ecuación:

$$V \frac{dC_i}{dt} = F \cdot (C_{io} - C_{is}) + V \cdot r_i \longleftrightarrow \frac{dC_i}{dt} = \frac{F}{V} \cdot (C_{io} - C_{is}) + r_i \quad (1.6)$$

F/V también se define como el tiempo de residencia  $\tau$  del reactor, es decir el tiempo que una partícula pasa en el reactor.

### Balance de energía:

El balance de energía, se trata fundamentalmente de un balance entálpico, es decir si estamos en un proceso endotérmico dará una disminución de la temperatura y si es exotérmico un aumento de la temperatura.

#### Claim 1.2.1

$$\sum_{i=A}^P (M_i \cdot C_{pi}) \cdot \frac{dT}{dt} = \sum_{i=A}^P (F_o \cdot C_{io} \cdot H_{io}) - F_s \cdot C_{is} \cdot H_{is} + V \cdot \sum_{k=1}^n \Delta H_k \cdot r_k + Q(T) \quad (1.7)$$

Donde la variación de energía, se puede calcular como la sumatoria para cada componente de su masa por su capacidad calorífica por la variación de temperatura respecto del tiempo, es decir es el término de acumulación.

El término de entalpía de entrada - el de salida de los componentes se trata de  $\sum_{i=A}^P (F_o \cdot C_{io} \cdot H_{io}) - F_s \cdot C_{is} \cdot H_{is}$

Mientras que el término de generación a diferencia del anterior depende de las reacciones químicas, de ahí que sea el índice k frente al i que era de los componentes.

$$V \cdot \sum_{k=1}^n \Delta H_k \cdot r_k$$

Cada reacción tendrá su propia entalpía, la entalpía tiene unidad de J|Kj /mol por ello debe ir multiplicada a la velocidad de reacción referida al mismo componente, de forma que queda unidad de energía/(tiempo\*V) por ello es necesario multiplicar el volumen

Por último el término Q(T) es el término de intercambio de calor, que salvo que trabajemos en condiciones adiabáticas (para el diseño principalmente) siempre ha de estar.

Teniendo en cuenta la expresión general, para poder trabajar con ello hay que tener en cuenta que al estar en ideal, mezcla perfecta se tienen las siguientes consideraciones:

- ①  $T = T_s$
- ②  $\rho \approx \text{cte}$ ,  $\rho = \sum_{i=A}^P c_i$
- ③  $cp_i \approx \text{valores medios, cp}$
- ④  $V \cdot \rho = M$
- ⑤ En sistemas a presión constante,  $\Delta H = Cp^*T$  y como en la ecuación es entrada-salida,  $\Delta H = Cp^*(T_o - T_s)$

Es decir nos quedaría la siguiente ecuación:

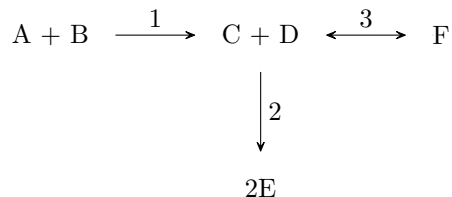
$$V \cdot \rho \cdot cp \cdot \frac{dT}{dt} = F \cdot \rho \cdot cp \cdot (T_o - T_s) + V \cdot \sum_{k=1}^n \Delta H_k \cdot r_k + Q(T) \quad (1.8)$$

Simplificando:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V} \cdot (T_o - T_s) + \sum_{k=1}^n \frac{\Delta H_k \cdot r_k}{\rho \cdot cp} + \frac{Q(T)}{V \cdot \rho \cdot cp} \quad (1.9)$$

### 1.2.2 Velocidades de reacción

#### Question 1: Cálculo de velocidades de reacción



**Solution:**  $r_k$  Velocidades de reacción:

- $r_1 = k_1 \cdot C_A \cdot C_B$
- $r_2 = k_2 \cdot C_C$
- $r_3 = k_3 \cdot C_D - k_{-3} \cdot C_F$

**Solution:**  $r_i$ , Velocidades de componentes:

- |                               |                     |
|-------------------------------|---------------------|
| • $r_A = -r_1$                | • $r_D = r_1 - r_3$ |
| • $r_B = -r_1$                | • $r_F = r_3$       |
| • $r_C = r_1 - \frac{r_2}{2}$ | • $r_E = r_2$       |

#### Note:-

Las velocidades de reacción, va dirigida a uno de los componentes, normalmente en función del producto o del reactivo limitante, Vienen expresadas en términos de moles/(tiempo\*V)

#### Fase Líquida

La velocidad de reacción está en función de la constante cinética (que será en función de la temperatura y de las concentraciones) por tanto:

$$r = f(k, c_i) \rightarrow r = f(T, X_A) \quad (1.10)$$

A su vez, la constante cinética se obtiene mediante la ecuación de Arrhenius:

$$k = k_0 \cdot \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \quad (1.11)$$

Y recordando expresando en función de la conversión se puede operar de la siguiente forma:

$$X_A = \frac{N_{AR} - N_A}{N_{AR}} \rightarrow N_A = N_{AR} \cdot (1 - X_A) \quad (1.12)$$

$$N_A = f(X_A) \approx C_A = f(X_A)$$

Por lo que la concentración inicial es:

$$C_i = C_{io} - \frac{\alpha_i}{\alpha_A} \cdot (X_A - X_{Ao}) \quad (1.13)$$

Siendo  $\alpha_i$  el coeficiente estequiométrico del componente i, y  $\alpha_A$  el coeficiente estequiométrico del componente que se tomará como reactivo además considerando, en el instante inicial que la conversión es 0:

$$C_i = C_{io} - \frac{\alpha_i}{\alpha_A} \cdot C_{A0} \cdot X_A \quad (1.14)$$

## Fase Gaseosa

En fase gaseosa tenemos 2 posibilidades de trabajo, bien en función de la constante cinética y concentración, como en la fase líquida, o bien en función de la constante cinética y Presiones parciales de los componentes.

$$r = f(k, P_i) \rightarrow r = f(T, X_A)$$

$$n_i = n_{ie} - \frac{\alpha_i}{\alpha_A} \cdot n_{AR} \cdot (X_A - X_{Ae})$$

Recordando que al ser un gas ocupa todo el volumen y según la ley de los gases ideales:

$$F = \frac{R \cdot T \cdot n_t}{P} \quad (1.15)$$

Donde el número de moles se relaciona con las presiones de la siguiente forma:

$$n_t = \sum n_i \rightarrow c_i = \frac{n_i}{F} = \frac{n_i}{n_t} - \frac{P}{R \cdot T} = y_i \cdot \frac{P}{R \cdot T} \quad (1.16)$$

A su vez aplicando la ley de Dalton para las presiones parciales:

$$P_i = y_i \cdot P = \frac{n_i}{n_t} \cdot P \quad (1.17)$$

Es decir será su fracción molar por la presión total del reactor.

## Calor intercambiado con el exterior

En un intercambiador de calor, podríamos encontrarnos con varios casos, bien que solo se intercambie el calor latente es decir, que no haya variación de temperatura, ya que, es solo el cambio de estado, o bien que se intercambie calor sensible, es decir que haya variación de temperatura. También podríamos encontrarnos con una combinación de ambas.

- Intercambio de calor latente:  $T_j \approx cte$   $T_j$  se trata del calor de camisa, de forma que se puede cuantificar como  $Q = U \cdot S \cdot (T - T_j)$  es decir se trata del coeficiente global de transferencia de calor por la superficie de intercambio por la diferencia de temperaturas entre el reactor y su camisa.

el coeficiente de intercambio de calor  $U$ , es función de los coeficientes individuales de la transferencia de calor y conductividad térmica  $U = f(h_i, h_e, k)$

- Intercambio de calor sensible:  $T_j \neq cte$  en este caso el intercambio de calor se cuantifica como la masa del fluido refrigerante por el calor específico del mismo por la variación de temperatura.  $Q = m_j \cdot c_{pj} \cdot (T_{js} - T_{je})$

también se podría expresar de forma análoga al intercambio de calor latente, pero con la media logarítmica, es decir  $Q = U \cdot S \cdot \Delta T_{mlg}$

Como lo normal es conocer la masa del fluido refrigerante y la temperatura de entrada, pero no la de salida se deben correlacionar las ecuaciones anteriores.

### Note:-

Recordando que la media logarítmica es (la mayor diferencia - la menor diferencia)/ln(mayor/menor) y por lógica debe ser menor en la salida que en la entrada.

$$Q = U \cdot S \cdot \frac{(T - T_{je}) - (T - T_{js})}{\ln \left( \frac{T - T_{je}}{T - T_{js}} \right)}$$

ahora como nos faltaría algún dato para operar con las ecuaciones previas, la forma de correlacionar ambas es la siguiente:



*Proof.*

$$\begin{aligned}
Q &= U \cdot S \cdot (T_{js} - T_{je}) \\
U \cdot S &\cdot \frac{(T_{js} - T_{je})}{\ln \left( \frac{T - T_{je}}{T - T_{js}} \right)} \\
m_j \cdot c_{pj} \cdot (T_{js} - T_{je}) &= U \cdot S \cdot \frac{(T - T_{je}) - (T - T_{js})}{\ln \left( \frac{T - T_{je}}{T - T_{js}} \right)} \\
\ln \left( \frac{T - T_{je}}{T - T_{js}} \right) &= \frac{U \cdot S}{m_j \cdot c_{pj}}
\end{aligned}$$

donde simplemente despejando de la última ecuación:

$$\begin{aligned}
\frac{T - T_{je}}{T - T_{js}} &= \exp \left( \frac{U \cdot S}{m_j \cdot c_{pj}} \right) \\
T - T_{je} &= (T - T_{js}) \cdot \exp \left( \frac{U \cdot S}{m_j \cdot c_{pj}} \right)
\end{aligned}$$

al pasar el exponente al otro lado de la ecuación:

$$\begin{aligned}
T - T_{js} &= (T - T_{je}) \cdot \exp \left( - \frac{U \cdot S}{m_j \cdot c_{pj}} \right) \\
T_{js} &= T - (T - T_{je}) \cdot \exp \left( - \frac{U \cdot S}{m_j \cdot c_{pj}} \right)
\end{aligned}$$

y reintroduciendo en la primera ecuación queda tal que:

$$\begin{aligned}
Q &= m_j \cdot c_{pj} \cdot \left( T_{js} - \left[ T - (T - T_{je}) \cdot \exp \left( - \frac{U \cdot S}{m_j \cdot c_{pj}} \right) \right] \right) \\
Q &= m_j \cdot c_{pj} \cdot (T - T_{je}) \cdot \left[ 1 - \exp \left( - \frac{U \cdot S}{m_j \cdot c_{pj}} \right) \right]
\end{aligned}$$

⊙

## Chapter 2

# Reactor Discontinuo Mezcla perfecta

### Note:-

En un reactor biológico tenemos que  $f/v$  velocidad de dilución (D) mientras que en otros es  $v/f$ , en el primer caso, es porque se tiene cuenta los caudales de salida frente los otros son de entrada, tiempos de residencia cortos, en el segundo caso es tiempo espacial, teniendo en cuenta los caudales de entrada

### 2.0.1 Isotermo

Balance de materia:

$$\frac{dN_i}{dt} = r_i \cdot V \quad (2.1)$$

Balance de energía:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{k=1}^n \Delta H_k \cdot r_k}{\rho \cdot cp} + \frac{Q(T)}{V \cdot \rho \cdot cp} \quad (2.2)$$

2 posibles cuestiones

- **Calculo de Volumen:**  $V$
- **Calculo de Tiempo de residencia:**  $\tau = \frac{V}{F}$

Dentro de los reactivos uno sera el limitante, en la etapa de diseño va referida al reactivo limitante (A)

**Refiriéndonos a la conversión, puesto que es el parámetro que más información nos da:** ya que queremos un % mínimo de conversión, se puede calcular como:

$$X_A = \frac{N_{AR} - N_A}{N_{AR}} \rightarrow N_A = N_{AR} \cdot (1 - X_A) \quad (2.3)$$

En la etapa de diseño la masa dará el volumen y el balance entálpico como la temperatura es constante dará el diseño del intercambiador de calor. Por tanto el objetivo a calcular es el tiempo de residencia.

$$\frac{dN_A}{dt} = -r_A \cdot V \quad (2.4)$$

Para transformar en conversión:

$$X_A = \frac{N_{AR} - N_A}{N_{AR}} \rightarrow N_A = N_{AR} \cdot (1 - X_A) \quad (2.5)$$

$$\frac{dN_{AR} dX_A}{dt} = r_A \cdot V \quad (2.6)$$

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{r_A \cdot V}{N_{AR}} \quad (2.7)$$

$$N_{AR} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{r_A \cdot V} = t_R = N_{AR} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{raV} \quad (2.8)$$

2 casos

- Fase líquida  $v = \text{cte}$

$$Tr = CAR \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dx_a}{ra} \quad (2.9)$$

- para fase gaseosa

$$Tr = CAR \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dx_a}{ra \cdot (1 + eA + ra)} \quad (2.10)$$

**Note:-**

$$V = VR (1 + CA + XA)$$

**Lenma 2.0.1** Para componentes que no sean referencia

$$CB = CB_0 - CA_0 \cdot XA$$

en el TR el divisor  $ra$  sería  $k_1 \cdot CA$  que era  $CA_0(1-xA)$  lo definido arriba

**Funcionamiento:**

**Note:-**

Productividad = moles producto deseado / m<sup>3</sup>/s el tiempo de productividad depende del ciclo no es el de operación del reactor, sino que incluye el de limpieza acondicionado llenado...

Si ya está diseñado y quiero que responda al funcionamiento y no al diseño del reactor  $ci = f(t)$

$$\frac{dCA}{dt} = ra \quad (2.11)$$

$$\frac{dCB}{dt} = rb \quad (2.12)$$

$$\frac{dCC}{dt} = rc \quad (2.13)$$

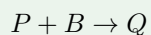
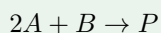
Teniendo  $V$  conocido que viene de la etapa de diseño y está construido el intercambiador de calor y conociendo los parámetros  $T_j$   $T_{\infty}$ . La  $T$  define las constantes del proceso es decir las  $K$  que también serán conocidas. Es decir el modelo se completa conociendo  $r_1, r_2, r_3, r_a, r_b, r_c, \dots$ . También se puede deducir de forma implícita que simplemente con los balances a  $f$  metiendo las cinéticas de  $r_1 \dots r_3$  aunque recomienda ser explícito para luego poder variar el estudio del sistema.

**Análisis de variables**

Serían 15 ecuaciones las 6 de los componentes las 3 de reacciones y las 6 de los balances, el número de variables. Todas las concentraciones todas las  $r$  y las constantes es decir  $k_1$   $k_2$   $k_3$  y  $k_{-3}$  Número de grados de libertad 4 es decir debe conocerse las 4 constantes cinéticas a esa temperatura

**Claim 2.0.1** Prueba1

Para el sistema de reacción en serie-paralelo



Propón el modelo que permita calcular la evolución de las concentraciones de todos los componentes y la temperatura cuando en un RDMP a) adiabático, b) no isoterma-no adiabático. En cada caso realiza el análisis de variables indicando los datos que deben determinarse para la resolución del modelo.

### Question 2: RDMP-1

En un reactor discontinuo mezcla perfecta isoterma, se lleva a cabo la siguiente reacción química:  $A \rightarrow B$   
Constante de velocidad =  $0.5 \text{ h}^{-1}$  El reactor se pone en marcha con  $1 \text{ mol/L}$  de A.

- (A) Obtener la dinámica durante 5 h de reacción, es decir, la evolución temporal de las concentraciones de A y B, así como de la conversión

### Question 3: RDMP-2

La reacción química  $A \rightarrow B$

Factor preexponencial =  $4.15\text{E}5 \text{ s}^{-1}$

Energía de activación =  $11200 \text{ cal/mol}$

Entalpía de reacción =  $-50400 \text{ cal/mol}$

Se lleva a cabo en un reactor discontinuo mezcla perfecta adiabático que se pone en marcha con  $0.5 \text{ mol/L}$  de A a  $285 \text{ K}$ . Considerando para la mezcla reaccionante una capacidad calorífica de  $0.9 \text{ cal/(g} \cdot \text{K)}$  y una densidad de  $1070 \text{ g/L}$ :

- (A) Obtener la dinámica del proceso
- (B) Determinar la temperatura cuando se alcanza el 90% de conversión

### Question 4: RDMP-3a

La reacción química  $A \rightarrow B$

Factor preexponencial =  $2.2\text{E}4 \text{ s}^{-1}$

Energía de activación =  $41570 \text{ J/mol}$

Entalpía de reacción =  $-5\text{E}5 \text{ J/mol}$

Se lleva a cabo durante  $1500 \text{ s}$  en un reactor discontinuo mezcla perfecta de  $1 \text{ m}^3$  que dispone de una camisa de  $4 \text{ m}^2$  a  $283 \text{ K}$  con un coeficiente global de transmisión de calor de  $400 \text{ J/(m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K)}$ . Considerando para la mezcla reaccionante una densidad de  $980 \text{ kg/m}^3$  y una capacidad calorífica de  $4200 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$ :

- (A) Obtener la dinámica del proceso si el reactor se pone en marcha con  $500 \text{ mol/m}^3$  de A a  $283 \text{ K}$
- (B) Localizar el instante de temperatura máxima

### Question 5: RDMP-3b

La reacción química  $A \rightarrow B$

Factor preexponencial =  $2.2\text{E}4 \text{ s}^{-1}$

Energía de activación =  $41570 \text{ J/mol}$

Entalpía de reacción =  $-5\text{E}5 \text{ J/mol}$

se lleva a cabo durante  $1500 \text{ s}$  en un reactor discontinuo mezcla perfecta de  $1 \text{ m}^3$  que dispone de una camisa de  $0.1 \text{ m}^3$  y  $4 \text{ m}^2$  capaz de transmitir calor con un coeficiente global de  $400 \text{ J/(m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K)}$  y por la que circulan  $0.001 \text{ m}^3/\text{s}$  de agua que entran a  $283 \text{ K}$ . Considerando para la mezcla reaccionante una densidad de  $980 \text{ kg/m}^3$  y una capacidad calorífica de  $4200 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$ :

- (A) Obtener la dinámica del proceso si el reactor se pone en marcha con  $500 \text{ mol/m}^3$  de A a  $283 \text{ K}$
- (B) Determinar el caudal de agua que debe circular por la camisa para que la temperatura del reactor no supere en ningún momento los  $330 \text{ K}$

### Question 6: RDMP-3c

La reacción química  $A \rightarrow B$

Factor preexponencial =  $2.2\text{E}4 \text{ s}^{-1}$

Energía de activación =  $41570 \text{ J/mol}$

Entalpía de reacción =  $-5\text{E}5 \text{ J/mol}$

se lleva a cabo durante  $1500 \text{ s}$  en un reactor discontinuo mezcla perfecta de  $1 \text{ m}^3$  que dispone de un serpentín de  $13 \text{ m}$  de longitud y  $0.1 \text{ m}$  de diámetro capaz de transmitir calor con un coeficiente global de  $400 \text{ J}/(\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K})$  y por el que circulan  $0.001 \text{ m}^3/\text{s}$  de agua que entran a  $283 \text{ K}$ . Considerando para la mezcla reaccionante una densidad de  $980 \text{ kg}/\text{m}^3$  y una capacidad calorífica de  $4200 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ :

- (A) Obtener la dinámica del proceso si el reactor se pone en marcha con  $500 \text{ mol}/\text{m}^3$  de A a  $283 \text{ K}$

#### Question 7: RDMP-4

El equilibrio químico  $2\text{A} \rightleftharpoons \text{B}$

Factor preexponencial de Arrhenius =  $1.4\text{E}12 \text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{h})$

Factor preexponencial de Van't Hoff =  $6.9\text{E}8 \text{ L/mol}$

Energía de activación =  $105000 \text{ J/mol}$

Entalpía de reacción =  $63000 \text{ J/mol}$

se lleva a cabo a  $420 \text{ K}$  en un reactor discontinuo mezcla perfecta con  $5 \text{ mol/L}$  iniciales de A.

- (A) Obtener la dinámica del proceso
- (B) Determinar cuándo se alcanza el equilibrio, definido por unas derivadas absolutas de las concentraciones inferiores a  $1\text{E}-5 \text{ mol}/(\text{L} \cdot \text{h})$
- (C) Localizar el momento en el que las concentraciones de A y B se igualan

#### Question 8: RDMP-5

El equilibrio químico

$\text{A} + \text{B} \rightleftharpoons \text{C}$

Factor preexponencial de Arrhenius =  $1.75\text{E}8 \text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{h})$

Factor preexponencial de Van't Hoff =  $8.25\text{E}-22 \text{ L/mol}$

Energía de activación =  $62350 \text{ J/mol}$

Entalpía de reacción =  $-136400 \text{ J/mol}$

se pone en marcha en un reactor discontinuo mezcla perfecta adiabático con  $1 \text{ mol/L}$  de A y  $2 \text{ mol/L}$  de B a  $300 \text{ K}$ . Considerando para la mezcla reaccionante una densidad de  $1150 \text{ g/L}$  y una capacidad calorífica de  $3.8 \text{ J}/(\text{g} \cdot \text{K})$ :

- (A) Obtener la dinámica del proceso
- (B) Determinar cuándo se alcanza el equilibrio, definido por una derivada absoluta de la temperatura inferior a  $1\text{E}-3 \text{ K/h}$
- (C) Estudiar la influencia de la temperatura inicial en la conversión de equilibrio y en el tiempo necesario para alcanzar el 50% de conversión

#### Question 9: RDMP-6

El equilibrio químico

$\text{A} \rightleftharpoons \text{B}$

Factor preexponencial de Arrhenius directo =  $1.94\text{E}15 \text{ h}^{-1}$

Factor preexponencial de Arrhenius inverso =  $6.26\text{E}19 \text{ h}^{-1}$

Energía de activación directa =  $44500 \text{ cal/mol}$

Energía de activación inversa =  $59500 \text{ cal/mol}$

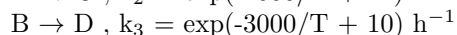
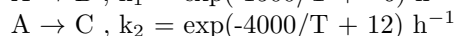
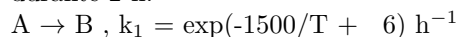
Temperatura máxima de operación =  $650 \text{ K}$

se realiza durante 5 h en un reactor discontinuo mezcla perfecta a partir de 1 mol/L de A.

- (A) Para una conversión dada, obtener la relación entre temperatura y velocidad de reacción
- (B) Determinar la progresión óptima de temperatura

#### Question 10: RDMP-MULT-1

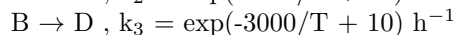
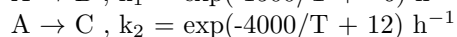
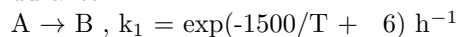
Un reactor discontinuo mezcla perfecta de 1 m<sup>3</sup> se pone en marcha a 303 K con 1 mol/L del compuesto A, transcurriendo las siguientes reacciones químicas en disolución acuosa sin generación apreciable de calor durante 2 h:



- (A) Considerando que D es el compuesto deseado, determinar cómo debe operar la camisa

#### Question 11: RDMP-MULT-1

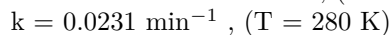
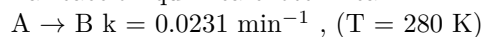
Un reactor discontinuo mezcla perfecta de 1 m<sup>3</sup> se pone en marcha a 303 K con 1 mol/L del compuesto A, transcurriendo las siguientes reacciones químicas en disolución acuosa sin generación apreciable de calor durante 2 h:



- (A) Considerando que D es el compuesto deseado, determinar cómo debe operar la camisa

#### Question 12: RDMP-O-2023

La reacción química exotérmica

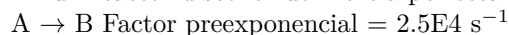


Se lleva a cabo en disolución acuosa durante 100 min en un reactor discontinuo mezcla perfecta de 2500 L que dispone de una camisa a 280 K capaz de refrigerar a 300 KJ/(min · K). El reactor se pone en marcha con 0.25 mol/L del compuesto A a 280 K.

- (A) Obtener la dinámica del proceso considerando que el reactor alcanza una temperatura máxima de 290 K
- (B) Determinar durante cuánto tiempo la temperatura está comprendida entre 284 y 288 K

#### Question 13: RDMP-O-2018

En un reactor discontinuo mezcla perfecta en fase líquida tiene lugar la reacción química exotérmica



Energía de activación = 42000 J/mol

Entalpía de reacción = -5E5 J/mol

El reactor, de 5 m<sup>3</sup> de volumen, opera durante 1200s. Dispone de una camisa de 1 m<sup>3</sup> de volumen y 10 m<sup>2</sup> de área, a la que entran 0.01 m<sup>3</sup>/s de agua a 280 K, y que refrigera el reactor con un coeficiente de 500 J/(m<sup>2</sup> · s · K).

Inicialmente, el reactor contiene 500 mol/m<sup>3</sup> de A a 280 K y la camisa se encuentra a la misma temperatura.

- (A) Calcular la dinámica del proceso

- Ⓐ Localizar el 50% de conversión
- Ⓑ Determinar durante cuánto tiempo la temperatura está comprendida entre 300 y 310 K

Asumir, cuando sea necesario, las propiedades físicas del agua.

#### Question 14: RDMP-O-?

Las siguientes reacciones químicas se llevan a cabo en un reactor discontinuo mezcla perfecta.



Las concentraciones de los compuestos A y B (que están en exceso en todo momento) pueden considerarse constantes e iguales a 1.5 y 3 mol/L, respectivamente.

- Ⓐ Representar gráficamente los balances de materia para los compuestos X e Y.
- Ⓑ Obtener los posibles estados estacionarios y determinar su estabilidad.
- Ⓒ Representar el campo vectorial.
- Ⓓ Si el reactor se pone en marcha sin los compuestos X e Y, determinar durante cuánto tiempo las concentraciones de dichos compuestos son simultáneamente mayores de 2 mol/L.

#### Question 15: RDMP-O-2022

El equilibrio químico

$A \rightleftharpoons B$  Factor preexponencial de Arrhenius =  $9.1\text{E}4 \text{ min}^{-1}$

Factor preexponencial de Van't Hoff =  $4.21\text{E}-5$

Energía de activación =  $1.12\text{E}5 \text{ J/mol}$

Entalpía de reacción =  $-1.46\text{E}5 \text{ J/mol}$

Se lleva a cabo un reactor discontinuo mezcla perfecta de 2000L equipado con una camisa a 280 K capaz de refrigerar a  $1500 \text{ J}/(\text{min} \cdot \text{K})$ . Para la mezcla reaccionante, Puede suponerse una densidad de  $0.9 \text{ Kg/L}$  y una capacidad calorífica de  $4500 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ .

- Ⓐ Obtener la dinámica de la reacción hasta alcanzar el 95% de conversión, considerando que se pone en marcha a 360 K con 1 mol/L del compuesto A
- Ⓑ Localizar el punto de inflexión en la evolución temporal de la temperatura.

#### Question 16: RDMP-E-2022

Las siguientes reacciones químicas se llevan a cabo en disolución acuosa durante 2.5h en un reactor discontinuo mezcla perfecta de  $125 \text{ cm}^3$  que se pone en marcha a 310 K con  $1 \text{ mmol}/\text{cm}^3$  del compuesto A:

$2A \rightarrow B$  Factor preexponencial =  $6.1\text{E}17 \text{ cm}^3/(\text{h} \cdot \text{mmol})$

Energía de activación =  $28 \text{ cal}/\text{mmol}$

Entalpía de reacción =  $-25 \text{ cal}/\text{mmol}$

$A \rightarrow C$  Factor preexponencial =  $5.7\text{E}14 \text{ h}^{-1}$

Energía de activación =  $21 \text{ cal}/\text{mmol}$

Entalpía de reacción =  $-20 \text{ cal}/\text{mmol}$

El reactor dispone de una camisa de 75 cm<sup>3</sup> a 300 K con un coeficiente global de transmisión de calor de 10 cal/(cm<sup>3</sup> · h · K) y cuya temperatura aumenta inicialmente desde 310 K hasta 312 K.

- (A) Determinar durante cuánto tiempo la concentración de A es inferior a 0.1 mmol/cm<sup>3</sup>
- (B) Localizar los extremos en la evolución temporal de la temperatura.

#### Question 17: RDMP-O-?

El equilibrio químico  $A + B \rightleftharpoons C$  Factor preexponencial de Arrhenius = 1.8E8 m<sup>3</sup>/(kmol · h)

Factor preexponencial de Van't Hoff = 2.5E-22 m<sup>3</sup>/kmol

Energía de activación = 1.5E4 kcal/kmol

Entalpía de reacción = -3.5E4 kcal/kmol

Se lleva a cabo durante 120h en un reactor discontinuo mezcla perfecta de 1 m<sup>3</sup> que contiene inicialmente 1 kmol/m<sup>3</sup> del compuesto A y 1.5 kmol/m<sup>3</sup> del compuesto B a 320 K. El reactor dispone de una camisa de 5 m<sup>2</sup> a 300 K con un coeficiente global de transmisión de calor de 1.5 kcal/(kg · K).

Considerando para la mezcla reaccionante una densidad de 1200 kg/m<sup>3</sup> y una capacidad calorífica de 0.9 kcal/(kg · K):

- (A) Determinar las concentraciones intermedias y finales
- (B) Determinar durante cuánto tiempo la temperatura del reactor es mayor de 330 K
- (C) Optimizar la temperatura de la camisa

#### Note:-

en el apartado C se refiere a encontrar la temperatura de la camisa para la que se consigue la mayor conversión

#### Question 18: RDMP-E-2020

En un reactor discontinuo mezcla perfecta de 1000 L se llevan a cabo durante 120 min las siguientes reacciones químicas en disolución acuosa:  $A \rightarrow B$  Factor preexponencial = 6.72 min<sup>-1</sup>

Energía de activación = 2980 cal/mol

Entalpía de reacción = -1E4 cal/mol

$B \rightarrow C$  Factor preexponencial = 367 min<sup>-1</sup>

Energía de activación = 5960 cal/mol

Entalpía de reacción = -2E4 cal/mol

El reactor dispone de una camisa de 100 L capaz de transmitir calor a 1E4 cal/(min · K). y por la que circulan 25 L/min de agua que entran a 280 K.

- (A) Obtener la dinámica del proceso considerando que inicialmente el reactor contiene 1 mol/l del compuesto A y las temperaturas del reactor y camisa se sitúan en 300 K y 280 K, respectivamente
- (B) Localizar los cruces de las curvas del grafico de concentraciones
- (C) Localizar el momento de máxima transmisión de calor.
- (D) Determinar el intervalo de valores del caudal de refrigeración que permiten superar una concentración final del compuesto C de 0.85 mol/L manteniendo siempre el reactor por debajo de 310 K

#### Question 19: RDMP-O-2017

En un reactor discontinuo mezcla perfecta se practica el equilibrio químico  $A + B \rightleftharpoons P$

Con generación de calor, pero sin transmisión. Elaborar un script de Scilab que permita obtener la dinámica del proceso y localizar una determinada conversión.



### Question 20: RDMP-?-?

La reacción química exotérmica

$A \rightarrow B$  Factor preexponencial =  $2.5E4 \text{ s}^{-1}$

$k = 1E8 \cdot \exp(-8000/T) \text{ s}^{-1}$

$H = -2E5 \text{ J/mol}$

Se lleva a cabo en fase acuosa en un reactor discontinuo de  $10\text{m}^3$  durante  $10000\text{s}$ . El reactor se pone en marcha con una concentración inicial de A igual a  $1000\text{mol/m}^3$  y a  $280 \text{ K}$ . Se emplea una camisa de  $1\text{m}^3$  y  $10\text{m}^2$  que está inicialmente a  $280\text{K}$  y a la que se alimentan de  $0.01\text{m}^3/\text{s}$  de agua a  $280\text{K}$ . El coeficiente global de transmisión de calor es de  $400\text{J}/(\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K})$ .

- Ⓐ Aportar scripts salidas en consola, graficas y comentarios para estudiar la dinámica del proceso

## Chapter 3

# Reactor Continuo Mezcla Perfecta

### Question 21: RCMP-E-2023

El equilibrio químico en disolución acuosa:



Factor preexponencial de Arrhenius =  $960 \text{ m}^3/(\text{mol} \cdot \text{h})$

Factor preexponencial de Van't Hoff =  $1.1\text{E-}4 \text{ m}^3/\text{mol}$

Energía de activación =  $3.2\text{E}4 \text{ J/mol}$

Entalpía de reacción =  $-1.7\text{E}5 \text{ J/mol}$

Se lleva a cabo en un reactor continuo mezcla perfecta de  $1 \text{ m}^3$  alimentado por una corriente de  $1 \text{ m}^3/\text{h}$  con  $1000 \text{ mol/m}^3$  del compuesto A y  $1500 \text{ mol/m}^3$  del compuesto B a  $300 \text{ K}$ . El reactor dispone de una camisa a  $290 \text{ K}$  capaz de transmitir calor a  $9\text{E}5 \text{ J}/(\text{K} \cdot \text{h})$ .

- (A) Empleando un sistema de ecuaciones algebraicas:
- 1 Obtener el estado estacionario usando la alimentación como solución supuesta
  - 2 Comprobar la estabilidad del estado estacionario calculado
- (B) Empleando un sistema de ecuaciones diferenciales:
- 1 Obtener la dinámica tomando la alimentación como puesta en marcha
  - 2 Determinar cuándo la concentración del compuesto C supera a la del compuesto A y la del compuesto B
  - 3 Determinar cuándo se alcanza la temperatura máxima

### Question 22: RCMP-O-2020

Las reacciones químicas



Factor preexponencial =  $4.03\text{E}2 \text{ min}^{-1}$

Energía de activación =  $5166 \text{ cal/mol}$

Entalpía de reacción =  $-1000 \text{ cal/mol}$



Factor preexponencial =  $2.41\text{E}7 \text{ min}^{-1}$

Energía de activación =  $12319 \text{ cal/mol}$

Entalpía de reacción =  $-500 \text{ cal/mol}$



Factor preexponencial =  $1.09\text{E}3 \text{ min}^{-1}$

Energía de activación =  $4371 \text{ cal/mol}$

Entalpía de reacción =  $-2000 \text{ cal/mol}$

Se llevan a cabo en disolución acuosa en un reactor continuo mezcla perfecta de 150 L alimentado por una corriente de 5L/min a 300 K con 1 mol/L del compuesto A. El reactor dispone de una camisa a 350 K capaz de transmitir calor a 700 cal/(min · K).

- Ⓐ Creando un primer script
  - ① Obtener el estado estacionario del proceso
  - ② Optimizar la temperatura de alimentación considerando que D es el compuesto deseado
- Ⓑ Creando un segundo script
  - ① Obtener la dinámica para una puesta en marcha en las mismas condiciones que la alimentación hasta alcanzar el estado estacionario definido por una variación de la temperatura inferior a 0.001 K/min
  - ② Determinar durante cuánto tiempo predomina el compuesto A
  - ③ Localizar el momento de máxima concentración del compuesto B
  - ④ Localizar el momento en el que la concentración del compuesto C supera a la concentración del compuesto B
  - ⑤ Determinar durante cuánto tiempo la concentración del compuesto D está comprendida entre 0.2 y 0.6 mol/L
  - ⑥ Localizar el momento en el que la temperatura crece a 0.1 K/min

#### Question 23: RCMP-E-2023

En un reactor continuo mezcla perfecta de 2000 L alimentado por una corriente de 1200 L/min de 2 mol/L del compuesto A a 300 K se lleva a cabo la reacción química:



Factor preexponencial =  $1.5E12 \text{ min}^{-1}$

Energía de activación = 87.8 KJ/mol

Entalpía de reacción = -293 KJ/mol

Densidad = 0.9 Kg/L

Capacidad calorífica = 3.34 KJ/(Kg · K)

El reactor dispone de una camisa capaz de refrigerar a 2510 KJ/(K · min) que se sitúa a 370 K durante los primeros 60 min de operación. A continuación, la camisa se sitúa permanentemente a 380 K.

- Ⓐ Representar gráficamente los balances de materia y energía en estado estacionario y localizar los posibles estados estacionarios.
- Ⓑ Para unas condiciones iniciales iguales a la alimentación, obtener la evolución temporal de la concentración de A y de la temperatura y representar la trayectoria en la gráfica anterior.