

# Diseño de reactores ideales

Gustavo Plaza Roma y Jesús Casado González

22 de enero de 2017

## 1. Introducción

Esta aplicación se ha desarrollado usando Python 3, la interfaz gráfica se ha creado con el programa *Qt Designer* y se ha transformado a Python para que sea compatible con la librería *PySide 1.2.4*.

Para el correcto funcionamiento de la aplicación es necesario tener los siguientes módulos instalados:

- Pyqtgraph para poder visualizar gráficas dentro de la aplicación Qt.
- Matplotlib para poder visualizar y exportar los resultado de los cálculos.
- Scipy permite realizar las distintas operaciones matemáticas.
- Numpy proporciona las clases necesarias para operar con vectores.

## 2. Reactor discontinuo

Son aquellos que trabajan por cargas, es decir se introduce una alimentación, y se espera un tiempo dado, que viene determinado por la cinética de la reacción, tras el cual se saca el producto.

### 2.1. Reactor discontinuo isoterma

La ecuación que proporciona el tiempo de reacción en este modo de operación es:

#### 2.1.1. Balance de materia

$$t = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_a)}$$

Donde  $(-r_a)$  se puede calcular como:

$$(-r_a) = K \cdot C_{A0}^n (1 - X_A)^n; \quad K = K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right)$$

Según el orden de reacción el tiempo se podrá calcular como:

- Orden 0:  $t = \frac{C_{A0}}{K} (X_A - X_{A0})$

- Orden 1:  $t = \frac{1}{K} \ln\left(\frac{1-X_{A0}}{1-X_A}\right)$

- Orden 2:  $t = \frac{1}{KC_{A0}} \left(\frac{X_A}{1-X_A}\right)$

Los parámetros del reactor son:

- Orden de reacción.
- Temperatura inicial [K].
- Concentración inicial [mol/l].
- Energía de activación [J/mol].
- Constante  $k_0$ .
- Conversión inicial y final.

### 2.2. Reactor discontinuo adiabático

La ecuación que proporciona el tiempo de reacción en este modo de operación es:

#### 2.2.1. Balance de materia

$$t = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_a)}$$

Donde  $(-r_a)$  se puede calcular como:

$$(-r_a) = K \cdot C_{A0}^n (1 - X_A)^n; \quad K = K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right)$$

#### 2.2.2. Balance de energía

$$T = T_0 + \frac{(-\Delta H_R)C_{A0}}{\rho C_p} (X_A - X_{A0})$$

Los parámetros necesarios para el diseño del reactor son:

- Orden de reacción.
- Temperatura inicial [K].
- Concentración inicial [mol/l].
- Energía de activación [J/mol].
- Constante  $k_0$ .
- Calor de reacción [J/mol].
- Peso molecular [g/mol].
- Calor específico [J/(kg·K)].
- Densidad de la mezcla [kg/m3].
- Tipo de reacción (exotérmica, endotérmica).
- Conversión inicial y final.

## 2.3. Reactor discontinuo no isoterma y no adiabático

La ecuación que proporciona el tiempo de reacción en este modo de operación es:

#### 2.3.1. Balance de materia

$$\frac{dt}{dX_A} = \frac{C_{A0}}{K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) C_{A0}^n (1 - X_A)^n}$$

#### 2.3.2. Balance de energía

$$\frac{dT}{dX_A} = \frac{(-\Delta H_R)C_{A0}}{\rho C_p} + \frac{C_{A0} U S (T_c - T)}{V \rho C_p K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) C_{A0}^n (1 - X_A)^n}$$

Los parámetros necesarios para el diseño del reactor son:

- Orden de reacción.
- Temperatura inicial [K].
- Concentración inicial [mol/l].
- Energía de activación [J/mol].
- Constante  $k_0$ .
- Calor de reacción [J/mol].
- Peso molecular [g/mol].
- Calor específico [J/(kg·K)].
- Densidad de la mezcla [kg/m3].
- Coeficiente de transmisión de calor [W/(m·K)].
- Área de transmisión de calor [m2].
- Volumen [m3].
- Tipo de reacción (exotérmica, endotérmica).
- Conversión inicial y final.

## 3. Condiciones óptimas

### 3.1. Conversión óptima

$$X_{A_{opt}} = 1 - \frac{C_R a}{(\Delta w) C_{A0} V K}$$

### 3.2. Tiempo óptimo de reacción

$$t_{opt} = \frac{1}{K} \ln\left(\frac{(\Delta w) C_{A0} V K}{C_R a}\right)$$

Los parámetros necesarios para el cálculo de las condiciones óptimas son:

- Orden de reacción.
- Temperatura inicial [K].
- Concentración inicial [mol/l].
- Energía de activación [J/mol].
- Constante  $k_0$ .
- Volumen [m3].
- Coste de reacción [€/s]
- Valor aumentado por mol transformado [€].

## 4. Reactor Flujo Pistón

El reactor de flujo pistón trabaja en estado estacionario. Esto significa que las propiedades no varían con el tiempo. Se dice que un fluido circula por un tubo en flujo pistón cuando no existen gradientes radiales y cuando no hay ningún tipo de mezcla (no existe difusión) axial.

### 4.1. Reactor flujo pistón isoterma

En los reactores de flujo pistón isotérmicos la temperatura no varía con la posición en el reactor. Además varía con el tiempo por tratarse de un reactor de flujo pistón en estado estacionario.

#### 4.1.1. Balance de materia

$$\tau = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_a)}$$

Donde  $(-r_a)$  se puede calcular como:

$$(-r_a) = K \cdot C_A^n$$

$$K = K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right); \quad C_A = C_{A0} \left(\frac{1 - X_A}{1 + \epsilon X_A}\right)$$

El término  $\epsilon$  se calcula con ayuda de la siguiente expresión:

$$\epsilon = \frac{V_{X=1} - V_{X=0}}{V_{X=0}}$$

Finalmente, según el orden de reacción el volumen se podrá calcular como:

- Orden 0:  $\tau = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{K}$

- Orden 1:  $\tau = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{K}$

- Orden 2:  $\tau = \frac{1}{C_A} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{(1+\epsilon X_A)^2 dX_A}{K(1-X_A)^2}$

### 4.2. Reactor flujo pistón adiabático

Este reactor está aislado del exterior. No existe transmisión de calor con el exterior. Esto hace que a lo largo del reactor se produzca un aumento o disminución de temperatura en el caso de que tengamos reacciones endotérmicas o exotérmicas respectivamente.

#### 4.2.1. Balance de materia

$$\tau = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_a)}$$

Donde  $(-r_a)$  se puede calcular como:

$$(-r_a) = K \cdot C_A^n$$

$$K = K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right); \quad C_A = C_{A0} \left(\frac{1 - X_A}{1 + \epsilon X_A}\right)$$

El término  $\epsilon$  se calcula con ayuda de la siguiente expresión:

$$\epsilon = \frac{V_{X=1} - V_{X=0}}{V_{X=0}}$$

#### 4.2.2. Balance de energía

$$T = T_0 + \frac{(-\Delta H_R)}{C_p} (X_A - X_{A0})$$

### 4.3. Reactor flujo pistón no discontinuo y no adiabático

#### 4.3.1. Balance de materia

$$\frac{dX_A}{dl} = \frac{(-r_a) \pi D^2 L}{4 v_0 C_A}$$

#### 4.3.2. Balance de energía

$$\frac{dT}{dl} = \frac{(-\Delta H_R) (-r_a) \pi D^2 L}{4 v_0 C_A C_P} + \frac{U P (T_c - T)}{v_0 C_P}$$

## 5. Reactor continuo

### 5.1. Cálculo del volumen

#### 5.1.1. Balance de materia

$$V = \frac{X_{Af} v_0 C_{A0}}{(-r_a)_f}$$

Donde  $(-r_a)_f$  se calcula como:

$$(-r_a)_f = K_f C_{A0}^n (1 - X_{Af})^n; \quad K_f = K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT_f}\right)$$

### 5.2. Cálculo de la conversión

#### 5.2.1. Balance de materia

- Orden 0:  $X_{Af} = \frac{V K_f}{v_0 C_{A0}}$

- Orden 1:  $X_{Af} = \frac{V K_f}{v_0 + K_f V}$

- Orden 2:  $X_{Af} = \frac{\left(\frac{v_0}{V K_f C_{A0}} + 2\right) \pm \sqrt{\left(\frac{v_0}{V K_f C_{A0}} + 2\right)^2 - 4}}{2}$