

# Diseño de reactores ideales

Gustavo Plaza Roma y Jesús Casado Gonzalez

19 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:

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

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

## 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

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

## 2.3. Reactor discontinuo no discontinuo y no adiabático

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

### 2.3.1. Balance de materia

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

### 2.3.2. Balance de energía

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

### 3. Condiciones óptimas

#### 3.1. Conversión óptima

$$X_{A_{opt}} = 1 - \frac{C_{Ra}}{(\Delta w)C_{A0}VK}$$

#### 3.2. Tiempo óptimo de reacción

$$t_{opt} = \frac{1}{K} \ln \left( \frac{(\Delta w)C_{A0}VK}{C_{Ra}} \right)$$