

EXPERIMENTACIÓN NUMÉRICA CON REACTORES IDEALES DE MEZCLA COMPLETA CONECTADOS EN SERIE

Agenor Antonio Díaz Guerra
José del Carmen Zavala Loría
Asteria Narváez García*



Resumen

La presente propuesta es un trabajo de experimentación numérica con reactores químicos ideales tipo tanque de mezcla completa (CSTR) conectados en serie. Se ha desarrollado el modelo matemático de una serie de n reactores tipo tanque agitado, ha resuelto el modelo obtenido y los resultados han sido comparados con los obtenidos utilizando un reactor tipo flujo pistón (PFR). Palabras clave: experimentación numérica, reactor químico, modelo, simulación.

Introducción

La cinética química y el diseño de reactores son fundamentales para la producción de casi todas las sustancias químicas industriales. La selección de un sistema de reacción que opere de la forma más segura y eficiente posible puede ser la clave del éxito o fracaso económico de una planta química.

Para el diseño de un reactor o reactores hay que tener en cuenta numerosos factores como: el tipo de reacción, la escala de producción, el costo de los aparatos y el de su funcionamiento, la seguridad, la estabilidad y flexibilidad de operación, la duración prevista de los aparatos, el tiempo supuesto de la fabricación de los productos y la convertibilidad del equipo para diferentes condiciones de operación o para nuevos procesos. Por lo tanto, dada la amplia variedad de sistemas posibles y de muchos factores a considerar, no es de esperar una fórmula directa que de la instalación óptima. Para la selección del diseño más adecuado es necesaria la experiencia, el criterio técnico y un conocimiento profundo de las características de los diferentes distintos sistemas de reactores. De acuerdo al tipo de flujo los reactores se clasifican en: reactores por lotes (o de flujo discontinuo) y reactores de flujo continuo.

Siendo la segunda clasificación la que nos interesa para los fines de este problema. Ya que dentro de ella se encuentran los tipos de reactores a tratar (CSTR y PFR, por sus siglas en inglés).

El reactor de tanque con agitación continua (CSTR) es de uso muy común en procesos industriales. Normalmente se opera en estado estacionario y de modo que este muy bien mezclado. Como resultado de esto, el CSTR generalmente se modela sin variaciones espaciales en la concentración (C), la temperatura (T) o velocidad de reacción en todos los

* Agenor Antonio Díaz Guerra, alumno de la Facultad de Química de la Universidad Autónoma del Carmen.

José del Carmen Zavala Loría, profesor integrante del Cuerpo Académico de Ingeniería Química Aplicada.

Asteria Narváez García, docente integrante del Cuerpo Académico de Ingeniería Química Aplicada.

puntos del recipiente. Puesto que la T y la C_j son idénticas en el interior del reactor, son también las mismas en el punto de salida. Así pues, la T y la C_j en el flujo de salida se modelan como iguales a las que imperan en el interior del reactor.

Otro tipo de reactor de uso común en la industria es el reactor tubular, que consiste en un tubo cilíndrico y normalmente se opera en estado estacionario, igual que el CSTR. Para fines de nuestra exposición, consideraremos sistemas en el que el flujo es altamente turbulento y el campo de flujo se puede modelar con el del flujo pistón, es decir no hay variación radial en la C_j , por eso se dice que el reactor es de flujo tapón.

Si bien estos dos tipos de reactores son de flujo continuo y utilizados industrialmente, la gran diferencia estriba en su funcionamiento, tamaño, forma y en que los CSTR son utilizados para reacciones en fase líquida; mientras que los PFR encuentran su aplicación en las reacciones de fase gaseosa.

Entonces, cualquier esfuerzo que permita el comparativo entre los dos equipos, pero sobre todo, proporcione elementos de discriminación entre ellos, es adecuado, por tanto, en el presente trabajo se tiene el objetivo de comparar el diseño de una serie de N reactores de mezcla completa, del mismo tamaño, con un reactor de flujo en pistón, para reacciones elementales de segundo orden.

Modelo matemático

Para realizar la confrontación de N CSTR con un PFR se tienen que encontrar las ecuaciones que conforman al sistema y para el análisis se considera el sistema de reactores tanque agitado mostrado en la Figura 1

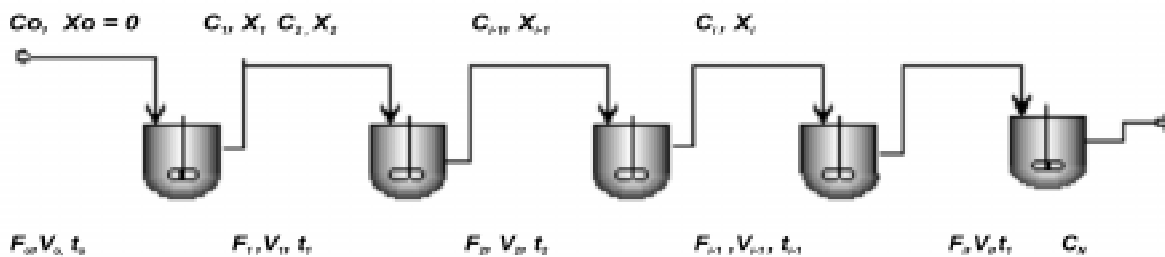


Fig. 1. Sistema de N reactores de mezcla completa (CSTR) de igual tamaño en serie.

Partiendo de la ecuación de diseño para un CSTR y haciendo el balance con respecto al reactor i , se tiene que:

$$\tau_i = \frac{C_i V_i}{F_0} = \frac{V_i}{v} = \frac{C_0 (X_i - X_{i-1})}{(-r_i)} \tag{1}$$

Considerando una reacción de segundo, la rapidez de reacción para el reactivo i viene dada por:

$$(-r_i) = kC_i^2 \tag{2}$$

Esta ecuación (1) puede emplearse para modelar un sólo reactor o también para algún reactor específico dentro de un tren de reacción.

$$\tau_i = \frac{C_0 (X_i - X_{i-1})}{(kC_i^2)} = \frac{C_{i-1} - C_i}{kC_i^2} \tag{3}$$

Reacomodando esta ecuación (3), tenemos:

$$\frac{C_{i-1}}{C_i} = 1 + k\tau_i C_i \tag{4}$$

Relación de concentraciones desde 1 hasta N reactores:

$\frac{C_0}{C_1} = 1 + k\tau_1 C_1$	Reactor 1
$\frac{C_1}{C_2} = 1 + k\tau_2 C_2$	Reactor 2
$\frac{C_2}{C_3} = 1 + k\tau_3 C_3$	Reactor 3
$\frac{C_{i-1}}{C_i} = 1 + k\tau_i C_i$	Reactor i

$$\frac{C_i}{C_o} = 1 + k\tau_p C_N$$

Reactor N

Para hallar la concentración de C_1 hasta C_N se parte de las ecuaciones anteriores, despejando C_1, C_2, \dots, C_N y aplicando la fórmula para resolver ecuaciones de segundo grado.

$$C_1 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_o}}{2k\tau} \quad (5)$$

$$C_2 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_1}}{2k\tau} = \frac{-1 + \sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4k\tau C_o}}}{2k\tau} \quad (6)$$

$$C_3 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_2}}{2k\tau} = \frac{-1 + \sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4k\tau C_o}}}}{2k\tau} \quad (7)$$

$$C_N = \frac{1}{2k\tau} \left[-1 + \sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4k\tau C_o}}}}} \right]^{1/N} \quad (8)$$

Dividiendo esta ecuación (8) por C_o tenemos:

$$\frac{C_N}{C_o} = \frac{C_o(1 - X_N)}{C_o} = \frac{1}{2k\tau C_o} \left[-1 + \sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4k\tau C_o}}}}} \right]^{1/N} \quad (9)$$

y despejando de esta ecuación (9) el factor que incluye la fracción molar se obtiene:

$$(1 - X_N) = \frac{1}{2k\tau C_o} \left[-1 + \sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4k\tau C_o}}}}} \right]^{1/N} \quad (10)$$

Despejando el término τC_o de la ecuación (10), se obtiene:

$$\tau C_o = \frac{1}{2k(1 - X_N)} \left[-1 + \sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4k\tau C_o}}}}} \right]^{1/N} \quad (11)$$

Para el sistema como un todo:

$$\tau C_o N = \frac{N}{2k(1 - X_N)} \left[-1 + \sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4k\tau C_o}}}}} \right]^{1/N} \quad (12)$$

Expresión que puede ser representada como:

$$(\tau C_o)_s = \frac{N}{2k(1 - X_N)} \left[-1 + \sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4k\tau C_o}}}}} \right]^{1/N} \quad (13)$$

Por otro lado, realizando operaciones para un reactor de flujo pistón del tipo mostrado en la Figura 2, se tiene que partiendo de la ecuación de diseño ⁽²⁾:

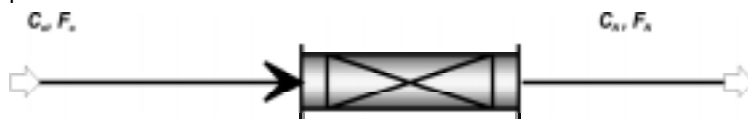


Fig. 2. Reactor de flujo pistón (PFR)

$$\frac{V}{F_o} = \frac{\tau_p}{C_o} = -\frac{1}{C_o} \int_{C_o}^{C_N} \frac{dC_N}{(-r_N)} \quad (14)$$

Integrando (para una reacción de segundo orden) y despejando el término $C_o \tau_p$

$$k\tau_p = \left[\frac{1}{C_N} \right]_{C_o}^{C_N} = \frac{1}{C_N} - \frac{1}{C_o} \quad (15)$$

$$C_o \left\{ k\tau_p = \frac{1}{C_N} - \frac{1}{C_o} \right\} \quad (16)$$

$$C_o \tau_p = (C_o \tau)_p \frac{-1 + C_o/C_N}{k} = \frac{-C_N + C_o}{kC_N} = \frac{X_N}{k(1 - X_N)} \quad (17)$$

Entonces, la relación entre los dos tipos de reactores vendrá dada por:

$$\frac{(\tau C_{D})_R}{(\tau C_{D})_P} = \frac{N}{2X^n} \left[-1 + \sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{-1 + \dots + 2\sqrt{1 + 4ktC_D}}}}}} \right]^{1/N} \tag{18}$$

Simulación

El siguiente paso es crear o utilizar un programa que ayude a resolver y visualizar las variables de interés. Para ello se hace uso de las ecuaciones (10) y (18), fijando valores para $ktCo$ que son constantes independientemente del número de reactores que se utilicen. En este caso, se ha utilizado Excel de MicroSoft™.

Tabla 1. Valores determinados en Excel para las ecuaciones (10) y (18)

ktCo	PARA UN REACTOR			PARA DOS REACTORES			PARA CINCO REACTORES		
	(1-Xn)	Xn	(tCo)nv/(tCo)	(1-Xn)	Xn	(tCo)nv/(tCo)	Xn	(tCo)nv/(tCo)	(1-Xn)
0.0001	0.99990	0.00010	1.00010	0.99980	0.00020	1.00010	0.00030	1.00010	0.99950
1	0.61803	0.38197	1.61803	0.43168	0.56832	1.51917	0.67436	1.44867	0.21324
3	0.43426	0.56574	2.30278	0.24870	0.75130	1.98617	0.83398	1.79158	0.09472
5	0.35826	0.64174	2.79129	0.18575	0.81425	2.28120	0.88286	1.99022	0.06299
10	0.27016	0.72984	3.70156	0.12180	0.87820	2.77388	0.92884	2.29840	0.03548
20	0.20000	0.80000	5.00000	0.07808	0.92192	3.38760	0.95770	2.64990	0.01963
50	0.13177	0.86823	7.58872	0.04230	0.95770	4.41704	0.97924	3.17966	0.00881
100	0.09512	0.90488	10.51249	0.02624	0.97376	5.39047	0.98805	3.62969	0.00476
200	0.06825	0.93175	14.65097	0.01614	0.98386	6.56274	0.99317	4.12328	0.00255
300	0.05609	0.94391	17.82772	0.01211	0.98789	7.35409	0.99510	4.43296	0.00177
500	0.04373	0.95627	22.86627	0.00841	0.99159	8.47684	0.99678	4.84610	0.00111
1000	0.03113	0.96887	32.12673	0.00510	0.99490	10.25530	0.99819	5.44987	0.00059
1500	0.02549	0.97451	39.23306	0.00380	0.99620	11.45048	0.99871	5.82746	0.00041
2000	0.02211	0.97789	45.22415	0.00308	0.99692	12.37596	0.99898	6.10687	0.00031
5000	0.01404	0.98596	71.21245	0.00158	0.99842	15.81335	0.99953	7.06473	0.00013
8000	0.01112	0.98888	89.94412	0.00112	0.99888	17.90855	0.99968	7.59902	0.00009
10000	0.00995	0.99005	100.50125	0.00095	0.99905	18.99313	0.99974	7.86358	0.00007

Por último, trazando los valores obtenidos para hacer la comparación y el análisis que permita tener elementos de decisión, se obtiene la Figura 3.

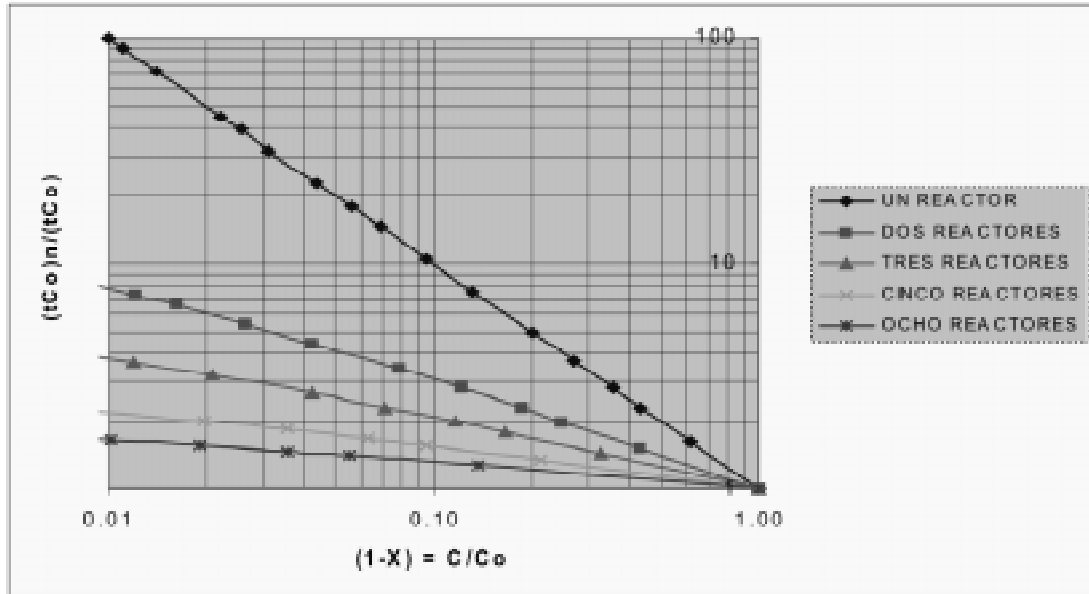


Fig. 3. Comparación del diseño de una serie de N reactores de mezcla completa, del mismo tamaño, con un reactor de flujo en pistón, para reacciones elementales de segundo orden ⁽²⁾.

Conclusiones

Para alcanzar una misma conversión de cualquier reacción dada, el reactor tipo tanque agitado debe tener un mayor volumen que el reactor flujo pistón. El comportamiento del reactor flujo pistón puede ser reproducido con una serie de reactores tipo tanque agitado considerando un número muy grande estos reactores. La Figura 3 permite tener una relación inmediata entre una serie de reactores tipo tanque agitado y un reactor flujo pistón.

Nomenclatura

C	Concentración	F	Flujo
k	Constante de reacción	N	Número de CSTR
r	Rapidez de reacción	t	Tiempo
t	Tiempo de residencia	X	Fracción Molar
V	Volumen del reactor	u	Caudal volumétrico

Referencias bibliográficas

- H. Scott Fogler. *Elements of chemical reaction engineering*. Editorial Prentice Hall, third edition, USA, 2001. Pages 1-24 and 125-148.
 Octave Levenspiel. *Ingeniería de las reacciones químicas* [Tr. Dr. Gabriel Tojo Barreiro]. Edit. Reverte, 2ª edición, Méx. 2002. Pags 137-153.
 Tiscareño Lechuga, Fernando. *Reactores químicos*. [S. 1], [S. ed.], Tomo I México, 2005. Pags. 115-126.
 J. M., Smith. *Ingeniería de la cinética química* [Tr. IQ Antonio Eroles G.] 6ª reimpresión, México, Edit. CECSA, 1991. Págs. 219-224.