Ejercicio 1.-

El proceso A(g) + B(sol) ~ C(sol) + D(g) se lleva a cabo en un reactor discontinuo, en el cual se acepta que la concentración del reactivo gaseoso es constante. El proceso está regido por el transporte de materia en el interior del sólido. Para ciertas condiciones de operación y cuando el sólido posee un diámetro de 2 cm el tiempo necesario para alcanzar una conversión del 90 por ciento es de 5 horas. Calcúlese el tiempo necesario para alcanzar la misma conversión, cuando el sólido tiene un diámetro de 3 cm, si el resto de las condiciones no varía

La expresión que relaciona tiempo y reducción de radio, si controla la difusión interna :

$$cte\,t = R_S^2\left[3\left[1-\frac{R_c^2}{R_s^2}\right]-2\left[1-\frac{R_c^3}{R_s^3}\right]\right]$$

La expresión que relaciona tiempo y conversión si controla la difusión interna

$$cte\,t = R_S^2\left[3\left[1-(1-X_B)^{2/3}\right]-2X_B\right]$$

Si el radio es 0,01m

$$cte\,5h = 0{,}01^2\left[3\left[1-(1-0{,}9)^{2/3}\right]-2(0{,}9)\right] \rightarrow cte = 1{,}105\cdot10^{-5}$$

Si el radio es 0,015m

$$0{,}015^2\left[3\left[1-(1-0{,}9)^{2/3}\right]-2(0{,}9)\right] = 1{,}105\cdot10^{-5}t \rightarrow t = 11{,}25h$$

Ejercicio 2

Comparar las velocidades iniciales en una reacción gas sólido no catalítica realizada en modo isotermo A(g) + B (s) ⟶ C (s) + D (g) de características:

velocidad de reacción química $-r_A\left(\frac{kmol}{s\ m^3_{lecho}}\right) = 0.1\left(\frac{1}{s}\right)C_A\left(\frac{kmol}{m^3}\right)$

Tabla características de los reactores:

Lecho	diámetro cm	altura cm	diámetro de partícula mm	factor de eficacia η
Fluidizado	50	5	0.2	1
Fijo	10	125	2	0.77

En el lecho fijo se supone que no controla la difusión externa .

En el lecho fluidizado se pueden tomar como valores de los parámetros de diseño.

Datos del lecho fluidizado

$(k_{bc})_b = 1s^{-1};\ (k_{ce})_b = 2s^{-2}$

$\gamma_1 = 0.001;\ \gamma_c = 0.2\ \ \gamma_e = 0.4$

$U_b = 6\ ms^{-1}$

Datos de diseño para ambos lechos

$Q = 0.5\ \frac{m^3}{s};\ C_{A_0} = 0.02\left(\frac{kmol}{m^3}\right)$

Indíquese la conversión en ambos lechos y aquél que resulta más satisfactorio.

Ecuación de diseño lecho fijo

$$\frac{dV\,\eta}{QC_{A0}} = \frac{dX_A}{kC_{A0}(1-X_A)} \qquad \text{integrada} \qquad \frac{V\eta}{Q} = \frac{1}{k}\ln\frac{1}{1-X_A}$$

Sustituyendo valores

$$\frac{V\eta k}{Q} = \ln\frac{1}{1-X_A} = \frac{\pi/4(0{,}10)^2(1{,}25)(0{,}77)(0{,}1)}{0{,}5} = 1{,}51.10^{-3}$$

de aquí X = 1,5 10^{-3}

En el lecho fluidizado , modelo de Kunii y Levenspiel La ecuación de diseño :

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \exp\left(-\frac{H\,k}{u}\left(\gamma_B + \cfrac{1}{\cfrac{k}{k_{bc)b}} + \cfrac{1}{\gamma_e + \cfrac{1}{\cfrac{k}{k_{ce)b}} + \cfrac{1}{\gamma_e}}}} \right)\right)$$

Sustituyendo valores

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \exp\left(-\frac{0{,}05(0{,}1)}{6}\left(0.001 + \cfrac{1}{\cfrac{0.1}{1} + \cfrac{1}{0.2 + \cfrac{1}{\cfrac{0.1}{2} + \cfrac{1}{0{,}4}}}} \right)\right)$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \exp\left(-\frac{0{,}05(0{,}1)}{6}\left(0.001 + \cfrac{1}{\cfrac{0.1}{1} + \cfrac{1}{0.2 + \cfrac{1}{2.55}}} \right)\right)$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \exp\left(-8{,}33.10^{-4}\left(0.001 + \cfrac{1}{\cfrac{0.1}{1} + \cfrac{1}{0.2 + 0.392}} \right)\right)$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \exp\left(-8{,}33.10^{-4}\left(0.001 + \frac{1}{10 + 1.69} \right)\right)$$

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \exp\left(-8{,}33.10^{-4}(0.001 + 0.0855)\right) = 0{,}99992$$

X = 7,2 10^{-5}

Dado el valor de los diferentes términos, puede afirmarse que la reacción transcurre tanto en la fase emulsión, como en la fase nube (0,2 y 0,39) ya que las constantes de transportes son de un orden superior a la velocidad de reacción.

Ambos lechos proporcionan una velocidad de gas muy lenta, el lecho fluidizado es más flexible y con más posibilidades de control, pero su costo, dado el tamaño del sólido y la necesidad de mantenerlo en un rango muy estrecho, es más alto

Ejercicio 3

En un reactor continuo se lleva a cabo un proceso gas sólido no catalítico A(g) + B(S) $\longrightarrow$ R(S). Se sabe que en el reactor un 90 por ciento de sólido permanece un tiempo superior a 2 horas, no así el 10 por ciento restante. El proceso responde bien a un modelo de núcleo decreciente o sin reaccionar. Siendo la difusión interna la etapa controlante. De acuerdo a los datos indíquese si este 90 por ciento de sólidos ha llegado a conversión total. En caso contrario ¿qué valor de R sugiere para alcanzarlo? La concentración de gas se mantiene constante y en 4 10^{-5} mol cm^{-3}

Datos:

M_B 232 g/mol	a = 1	$\rho_B = 1,15\ 10^{-3}$ g cm^{-3}
R = 0,5 cm	De 10^{-5} cm^2 s^{-1}	

Si control la difusión interna:

$$\frac{M_B k_R C_{AG}}{a\rho B}t=\frac{1}{6}\frac{k_R R^2}{D_e}\left[3\left[1-(1-X)^{2/3}\right]-2\left[1-(1-X)\right]\right]$$

$$\frac{232(4.10^{-5})}{1(1{,}15.10^{-3})}7200=\frac{1}{6}\frac{0{,}5^2}{10^{-5}}\left[3\left[1-(1-X)^{2/3}\right]-2\left[1-(1-X)\right]\right]=58101$$

$$\left[3\left[1-(1-X)^{2/3}\right]-2\left[X\right]\right]=13.94$$

A conversión total el termino de la izquierda tendría el valor 1 muy inferior a 13.94, por tanto el sólido que ha permanecido 2 horas está completamente convertido.

Ejercicio 4

Una reacción gas sólido no catalítica A (g) + B(s) $\longrightarrow$ C(s), se puede describir según el modelo de núcleo decreciente sin variación del volumen. De acuerdo a los datos indíquese la etapa más lenta, y que por lo tanto tiene más peso en la ecuación cinética, cuando la reacción alcanza el 0.5 del radio de la partícula.

Datos:

C_{AG} = 0.02 kmol/m^3 y cte en todo el ensayo. M_B = 200 kg/kmol $\rho_B = 2{,}3\ 10^3$ kg/m^3

k = 5 s^{-1} k_G = 20 m / s De 5 10^{-9} m^2/s R = 1 cm

$$\frac{M_B k_R C_{AG}}{a\rho B}t=\frac{1}{3}\frac{Rk_R}{k_G}\left[1-\left[\frac{Rc}{R}\right]^3\right]+\frac{1}{6}\frac{k_R R^2}{D_e}\left[3\left[1-\left[\frac{Rc}{R}\right]^2\right]-2\left[1-\left[\frac{Rc}{R}\right]^3\right]\right]+R\left[1-\frac{Rc}{R}\right]$$

$$\frac{200(5)0{,}02}{1(2{,}3.10^3)}t=\frac{1}{3}\frac{0.01(5)}{20}\left[1-[0{,}5]^3\right]+\frac{1}{6}\frac{(5)(0{,}01)^2}{510^{-9}}\left[3\left[1-[0{,}5]^2\right]-2\left[1-[0{,}5]^3\right]\right]+0{,}01R\left[1-0{,}5\right]$$

$$8695.6t \;=\; 8{,}33.10^{-4}(0.875)+1.66.10^{4}\left[3\left[0{,}75\right]-2\left[0{,}875\right]\right]+0{,}01\left[0{,}5\right]$$

$$8{,}7\cdot 10^{-3}t \;=\; 7{,}288.10^{-4}+833.33+0{,}005$$

De los tres sumandos del miembro de la derecha el correspondiente al transporte externo tiene un valor despreciable, por tanto el transporte externo no influye en la cinética global del proceso.
El ultimo miembro corresponde a la reacción química en la interfase y tiene un valor pequeño,.

Por último el término debido a la difusión interna tiene un valor muy elevado, y es la etapa más lenta del proceso.

Se necesitarían $9{,}610^{5}$ segundos para que el frente alcanzara la mitad del radio de la pastilla debido al bajo coeficiente de difusión y al tamaño elevado del radio este tipo de proceso un radio de 1mm haría 100 veces más rápido el proceso. (Seguramente sería un lecho fluidizado) .

Ejercicio 6

Un proceso gas líquido (A(g) + B(l) ⟶ D(l)) se desea llevar a cabo en un reactor de mezcla total. De acuerdo a los datos estímese:

a) Un modelo para el proceso.

b) El volumen del reactor necesario para llevar a cabo el proceso según las condiciones de entrada y salida.

Datos:

Caudal de inertes en fase gas: 0,015 kmol s^{-1}

Caudal de inertes fase líquida: 0,9 m^3 s^{-1}

Presión total 1 atm, presión parcial reactivo a la entrada y salida: 0,1 y 0,01 atm.

Concentración de reactivo B en la fase líquida de entrada: 0,05 kmol m^{-3}

H coeficiente equilibrio 8 m^3 $kmol^{-1}$ atm.

$D_B = D_A = 4\ 10^{-9}$ m^2 s^{-1} $\qquad$ $k_R = 2000$ $kmol^{-1}$ m^3 s^{-1}

$k_G = 5$ kmol m^{-2} atm^{-1} s^{-1} $\qquad$ $k_L = 2\ 10^{-4}$ m s^{-1}

a = 12 m^2 m^{-3} (del lecho total) $\qquad$ $\varepsilon = 0,35$

Moles a transportar.

$$G_M\left[\frac{y_E}{1-y_E}-\frac{y_S}{1-y_S}\right] = 0{,}015\left[\frac{0{,}1}{1-0{,}1}-\frac{0{,}01}{1-0{,}01}\right] = 1{,}515.10^{-3}k\ mols^{-1}$$

Variación en la concentración de B

Aceptando como simplificación Q C_B = moles de B = 0,9 (0,05) =0,045 moles /s

C_B salida moles que permanecen 0,045-0,001515 = 0,0435 en 0,9 m^3, por tanto la concentración es 0,048

Es necesario fijar los parámetro ϕ_L y E_∞

$$\left[\phi_L = \frac{\sqrt{k_R D_A C_{BL}}}{k_L} = \frac{\sqrt{2000(4.10^{-9})0{,}048}}{210^{-4}} = \right] 3{,}1$$

$$\left[E_\infty = 1+\frac{D_B C_{BL}}{D_A C_{Ai}}\right] = 1+\frac{0{,}048}{0{,}01/8} = 39{,}4$$

Corresponde a este proceso una reacción rápida

E = ϕ / tanh ϕ = 3,1

El diseño responde a

$$\left[V(1-\varepsilon)a\,J_A\big|_{\delta=0}\ \ moles\quad transportados = \ 1{,}515.10^{-3}\ \right]kmol/s$$

$$\left[J_A\big|_{\delta=0}\right]\frac{P_{AG}/H}{\dfrac{1}{HkG}+\dfrac{1}{k_L\ \ E}} = \frac{0{,}01/8}{\dfrac{1}{8(5)}+\dfrac{1}{210^{-4}(3{,}1)}} = \frac{1.25\cdot10^{-3}}{0.025+1613} = 7.75\cdot10^{-7}kmol\,m\,s^{-1}$$

$$\left[V(0.65)(12)(7{,}7510^{-7}) = \ 1{,}515.10^{-3}\ \right]$$

$$V = 250\,m^3$$

Ejercicio 7

Se desea purificar una corriente gaseosa de cierto contaminante A, mediante absorción con reacción química, se pide calcular, de acuerdo con los datos el volumen de absorbedor-reactor adecuado.

Datos:

Caudal de gas $G = 0.0505$ kmol /s; G' 0.05 kmol/s

Presión total 2 atm. Presión parcial del reactivo gaseoso P_{AE}: 0.02 atm; P_{AS}: 0.004 atm.

En la fase líquida se puede aceptar que la concentración del reactivo B, se mantiene prácticamente constante en 0.2 kmol/m^3

k_g: 0.6 kmol /(m^2 atm s) k_L $4\ 10^{-4}$ m/s k_r $2\ 10^3$ m^3/(kmol s)

$H = P_G / C_{AL}$: 0.4 m^3 atm/kmol $D_B = D_A = 5\ 10^{-9}$ m^2/s

a: 80 m^2/m^3 $\varepsilon_g = 0.7$

Tabla de cálculos:

P_A	Y	C_B	ϕ	$E\alpha$	E	J	1/J
0.004	0.002	0.2					
0.008	0.004	0.2					
0.012	0.006	0.2					
0.016	0.008	0.2					
0.020	0.010	0.2					

Al ser un reactor tipo flujo pistón en la fase gas. El cálculo del volumen se debe hacer por incrementos , teniendo en cuenta los diferentes valores en cada porción

Parámetros característicos:

$$\left[\phi_L = \frac{\sqrt{k_R D_A C_{BL}}}{k_L} = \frac{\sqrt{2.10^3 (5.10^{-9}) 0,2}}{4.10^{-4}} = 3,53\right]$$

$$\left[E_\infty = 1 + \frac{D_B C_{BL}}{D_A C_{Ai}}\right] = 1 + \frac{2}{P/0,4}$$

El valor de estos parámetros en cada punto fijado se recoge en la Tabla

Y se puede aceptar que E es siempre 3,53, proceso rápido pseudo primer orden, se desprecia C_{AL}

Y se puede aceptar que E es siempre 3,53, proceso rápido pseudo primer orden, se desprecia C_{AL}

p	y	C_{Ai}	ϕ	E_∞	E
0,004	0,002	0,01	3,53	21,000	3,53
0,008	0,004	0,02	3,53	11,000	3,53
0,012	0,006	0,03	3,53	7,667	3,53
0,016	0,008	0,04	3,53	6,000	3,53
0,02	0,1	0,05	3,53	5,000	3,53

$\Delta V(1-\varepsilon)aJ_A = \Delta moles\ transportados =$

$$\Delta V\ (1-\varepsilon)aE\left[k_L\ \ E(C_{AI}\ )\ \right] = G'\left[\frac{Y_E}{1-Y_E} - \frac{Y_S}{1-Y_S}\right]_{\text{int}\,ervalo}$$

$$\Delta V = \frac{G'\left[\frac{Y_E}{1-Y_E} - \frac{Y_S}{1-Y_S}\right]_{\text{int}\,ervalo}}{(1-\varepsilon)aE\left[k_L\ \ E(C_{AI}\ )\ \right]}$$

J	Y/1-Y		$\frac{G'}{(1-\varepsilon)aE\left[k_L\ E(C_{AI})\right]}$	$\left[\frac{Y_E}{1-Y_E} - \frac{Y_S}{1-Y_S}\right]$	ΔV
			Valor medio		
1,412E-05	0,002004	1,475E+02			
2,824E-05	0,004016	7,377E+01	1,107E+02	0,002012	0,222651
4,236E-05	0,006036	4,918E+01	6,148E+01	0,002020	0,124193
5,648E-05	0,008064	3,689E+01	4,303E+01	0,00203	0,08728
7,060E-05	0,010101	2,951E+01	3,320E+01	0,002036	0,0676
					0,50174

Ejercicio 8

Se desea realizar un proceso gas líquido A(g) + B(L) ⟶ C(L) en un reactor de mezcla total. La corriente gaseosa está a presión 1,2 atm; la presión parcial del componente A en la entrada es 0,22 y en la salida 0,02 atm respectivamente. El caudal de la fase gas es de 2,8 10^{-3} mol s^{-1} a la entrada y el de fase líquida 14 10^{-6} m^3 s^{-1} La concentración del reactivo B a la salida es de 100 mol m^{-3}. Indíquese el volumen de reactor teniendo en cuenta los siguientes datos.

Datos:

k_L 1,5 10^{-4} m s^{-1} **$k_G = 2\ 10^{-2}$ m^3 atm mol^{-1} s^{-1}**

$k_R = 10$ mol m^{-3} s^{-1} **$D_B = D_A = 10^{-9}$ m^2 s^{-1}**

H = 2 m^3 mol^{-1} atm^{-1} **a = 100 m^2 m^{-3}** **$\varepsilon_G = 0.9$**

Fase gas
Fracción molar entrada y salida 0,22/1,2 = 0,1833 y 0,02/1,2 = 0,0167
moles de inerte $G(1-Y_E)=G'$ 2,8 10-3 (1 – 0,1833) = $2{,}287\cdot 10^{-3}$

moles retenidos 0,04024kmol/s

$$\left[G'\left[\frac{Y_E}{1-Y_E} - \frac{Y_S}{1-Y_S}\right] = 2{,}287.10^{-3}\left[\frac{0{,}1833}{1-0{,}1833} - \frac{0{,}0167}{1-0{,}0167}\right] = 4{,}744.10^{-4}\right]$$

G' en kmol/m^3
Concentración de A en equilibrio con gas a P 0,02 atm
C_{AI} = 0,02/2=0,01mol/m^3
Concentración de A en la fase líquida se acepta despreciable

Parámetros característicos:

$$\left[\phi_L = \frac{\sqrt{k_R D_A C_{BL}}}{k_L} = \frac{\sqrt{10(10^{-9})100}}{1{,}5.10^{-4}} = 6{,}67\right]$$

$$\left[E_\infty = 1 + \frac{D_B C_{BL}}{D_A C_{Ai}}\right] = 1 + \frac{100}{0{,}01} = 10^5$$

Dado el valor de estos parámetros, el proceso se comporta como una reacción de pseudo primer orden, rápida, y por tanto E = 6,67. y C_{AL} resulta despreciable

El diseño:

$$V(1-\varepsilon)aJ_A = moles\ transportados = V\ (1-\varepsilon)aE\left[k_L\ E(C_{AI}\ )\right]$$

Sustituyendo valores

$$\left[V(1-0{,}9)(100)(1{,}510^{-4}\ )6{,}67(0{,}01)\ \right] = 4{,}744.10^{-4}$$

V = 4,74 m^3