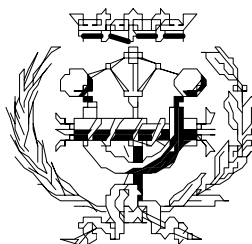


ESCUELA UNIVERSITARIA DE INGENIERÍA TÉCNICA INDUSTRIAL

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

DPTO. QUÍMICA INDUSTRIAL Y POLÍMEROS



ASIGNATURA: INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

**PRÁCTICA 3: MODELO DE FLUJO EN UN REACTOR PILOTO TIPO
TANQUE AGITADO**

**Fernando Gutiérrez Martín
Evangelina Atanes Sánchez
Alberto Cambra Pereira**

PRÁCTICA 3. MODELO DE FLUJO EN UN REACTOR PILOTO TIPO TANQUE AGITADO

1. OBJETIVO

Comparar el comportamiento de flujo en un reactor real tipo tanque agitado con un reactor ideal de mezcla completa y determinar las posibles causas de no idealidad. Para ello se realiza un experimento en escalón con un trazador.

2. FUNDAMENTO TEÓRICO

Los modelos de flujo de los reactores ideales representan los dos casos extremos de mezcla: total e instantánea en un reactor mezcla perfecta (recipiente uniforme), y ausencia total de mezcla en un reactor de flujo pistón (gradiente a lo largo del tubo producido solo por la reacción química).

Los reactores ideales son sencillos de resolver, y suelen mostrar un contacto entre los reactivos y un comportamiento óptimos. Por ejemplo, el tanque continuo ideal es un sistema perfectamente agitado con composición uniforme en el reactor y en el efluente [mezcla completa], cuyo balance de materia en estado estacionario es:

$$\tau = \frac{C_0 x}{v} \quad (1)$$

τ = tiempo de residencia medio de los elementos del fluido en el reactor

C_0 = concentración inicial de reactivo

x : conversión

v : velocidad de reacción

En muchos casos, una agitación efectiva aproxima suficientemente estos reactores a su modelo ideal. Pero hay otros donde, por distintos motivos, la desviación de la idealidad puede ser significativa: tanques grandes con insuficiente agitación, reacciones rápidas frente al tiempo de mezcla, canalizaciones, recirculación o estancamiento del fluido. Los problemas del flujo no ideal están íntimamente ligados a los cambios de escala; a menudo, el factor no controlado al pasar de un reactor de laboratorio a otro piloto o industrial es la magnitud de no idealidad del flujo.

El tiempo de residencia es el tiempo que permanece un elemento de fluido en un reactor continuo; la distribución de tiempos de residencia (RTD) debe conocerse para el correcto diseño del reactor. La RTD viene dada por la función $E(t)$ normalizada, que puede obtenerse con experimentos estímulo-respuesta de trazadores, ya sea mediante señales tipo pulso (curva E , también denominada curva C) o en escalón (curva F).

Los experimentos estímulo-respuesta consisten en estudiar la respuesta transitoria a un cambio brusco de la concentración a la entrada del reactor, en ausencia de reacción química, con el fin de caracterizar el tipo de flujo en un reactor real. Para realizar el estímulo se emplean sustancias compatibles con el fluido y fácilmente analizables. Según el tipo de perturbación hay dos curvas típicas de respuesta, como se observa en la Figura 1.

- **Curva F:** respuesta a un escalón (cambio brusco y sostenido de la concentración), que suele generalizarse con

$$F(t) = \frac{C}{C_0} \quad (2)$$

C_0 = concentración inicial del trazador

C= concentración a la salida del reactor

Para un reactor perfectamente agitado el balance al trazador es:

$$V_0(C_0 - C) = V_r \left(\frac{dC}{dt} \right) \quad (3)$$

V_r : volumen del reactor

V_0 : flujo volumétrico alimentado al reactor

Puede definirse un tiempo normalizado, adimensional, θ de la siguiente forma:

$$\theta = \frac{t}{\tau} \quad (4)$$

Integrando la ecuación (3) resulta la exponencial asintótica que define la curva F:

$$F(t) = 1 - e^{-t/\tau}$$

que puede expresarse como

$$F(\theta) = 1 - e^{-\theta} \quad (5)$$

- Curva E: respuesta a un impulso (cambio brusco e instantáneo a la entrada), que se generaliza en este caso con

$$C_0 = \frac{m}{V_r} \quad (6)$$

siendo m la cantidad de trazador inyectado.

Matemáticamente la función impulso instantáneo es la derivada de la función escalón anterior, por lo que si la mezcla es lineal las funciones de respuesta serán igualmente:

$$E(t) = \frac{dF}{dt} = e^{-t/\tau}$$

o bien

$$E(\theta) = \frac{dF}{d\theta} = e^{-\theta} \quad (7)$$

ecuación que define la curva E, y que corresponde a una exponencial decreciente hacia el eje de abscisas. La curva E proporciona resultados más realistas, ya que la F, al integrar los efectos, puede ocultar el comportamiento real.

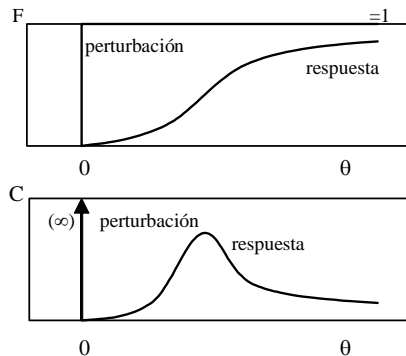


Figura 1

En esta práctica se obtienen experimentalmente las curvas F y E para el reactor bajo

estudio, comparándolas con las curvas correspondientes a sistemas ideales. Además, se proponen una serie de cálculos cuyo objetivo es determinar las posibles causas de no idealidad de un reactor, como el cálculo del tiempo medio de residencia de los elementos del fluido en el reactor (apartado 5.3.b) o la detección de efectos de mezcla en el reactor (apartado 5.3.c).

Finalmente, en el apartado 5.3.d, se aplica un método para modelizar el comportamiento del reactor mediante los modelos empíricos de flujo. Los modelos empíricos de flujo se basan en suponer un mecanismo para el proceso de mezcla que conduzca a unas distribuciones de tiempos de residencia suficientemente coincidentes con las curvas experimentales; entonces se puede simular el comportamiento del reactor para una reacción determinada, introduciendo el efecto de la reacción (cinética química) en las ecuaciones del modelo de flujo; de esta forma puede modelizarse un sistema real, y predecir por tanto la conversión real del reactor en cualquier condición de operación del mismo.

3. MATERIALES

3.1. Material

- Bomba peristáltica de velocidad variable
- 2 bidones de plástico graduados hasta 20 litros
- Matraz redondo de vidrio con descarga inferior y con tres bocas, una superior en la que se dispone el agitador, y dos laterales. Dispone de un tubo lateral de altura regulable que actúa como rebosadero
- Agitador de vidrio de hélice equipado con motor y regulador de velocidad
- Termómetro enfundado
- Tuberías de silicona
- Válvula de tres vías
- Cubo de plástico
- Cronómetro

Para la preparación de las disoluciones, toma de muestras y el análisis de las mismas se requiere el siguiente material:

- Vasos de precipitados
- Probetas
- Pipetas Pasteur
- Tubos de ensayo
- Gradilla
- Espectrofotómetro Ultravioleta-Visible

3.2. Reactivos

- Ferricianuro potásico (trazador)
- Agua (disolvente)

4. METODOLOGÍA

La experimentación se lleva a cabo en un reactor continuo tanque agitado (RCTA); el volumen de reacción puede variarse regulando la altura de la salida del rebosadero; si se

dispone la salida del rebosadero a un nivel por encima del mínimo posible el volumen de reacción aumenta, por el principio de los vasos comunicantes.

El reactor se alimenta mediante una bomba peristáltica, introduciendo la tubería de descarga (tubo de silicona) por una de las bocas laterales del reactor. A través de dicha tubería puede alimentarse alternativamente líquido procedente de cada uno de los depósitos de reactivos disponibles (disolvente o disolución de trazador), mediante una válvula de tres vías.

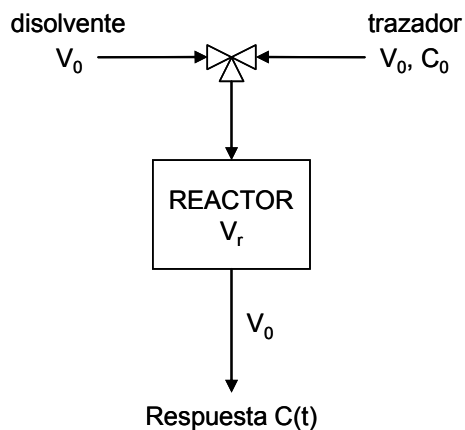


Figura 2

4.1. Experimento en escalón.-

Se fija un volumen de reactor (altura mínima del rebosadero) y se preparan 20 l de una disolución de ferricianuro potásico (trazador) de concentración $C_0 = 5 \cdot 10^{-4} M$ ($M_w = 329,25$ g/mol).

Tras comprobar que la válvula de descarga del reactor, situada en la parte inferior del mismo, está cerrada, se bombea dicha disolución (velocidad de giro de la bomba aproximadamente a 200 rpm) hasta que el reactor empiece a rebosar, lo que se consigue en aproximadamente 30 minutos.

Durante el llenado del tanque, y cuando el nivel del líquido sea el adecuado se fija una agitación suficiente (posición indicador: 40), y no se desconecta la agitación hasta vaciar el reactor una vez acabada la experimentación.

En la gráfica de calibración de la bomba se lee el flujo volumétrico proporcionado por la bomba en esas condiciones (V_0). De forma paralela, puede comprobarse este valor del flujo midiendo el descenso del nivel del tanque de alimentación con el tiempo.

Una vez alcanzado el régimen continuo (esperar cinco minutos tras el rebose del reactor) se toman muestras en el rebosadero (tomar tres muestras) para obtener la absorbancia de la disolución inicial del trazador (A_0).

A continuación se procede a realizar el escalón, sustituyendo bruscamente y de forma sostenida la corriente de ferricianuro potásico por agua; para ello se cambia la posición de la válvula de 3 vías y se activa el cronómetro cuando empieza a entrar el agua en el reactor¹.

Una vez iniciado el escalón, se toman muestras periódicas del efluente del reactor a

¹ NOTA: forma de realizar el escalón: se saca la tubería de alimentación del reactor; se para la bomba; se purga la tubería y se alimenta agua al reactor: tiempo cero.

intervalos de tiempo definidos durante aproximadamente unas 2h (ver tabla siguiente), numerando los tubos de ensayo en orden para analizarlos y determinar la concentración saliente.

Las muestras se analizan por fotocolorimetría a 420 nm, previo calibrado del espectrofotómetro con agua destilada a $\lambda = 420$ nm. Se tienen por tanto parejas de valores experimentales tiempo-absorbancia.

Durante la realización del experimento, medir la temperatura de reacción con el termómetro de la instalación.

Tras tomar la última muestra, se apaga la bomba, y sin apagar la agitación, se vacía el reactor por la boca de descarga situado en el fondo del mismo, recogiendo el líquido en uno de los depósitos graduados para conocer el volumen del reactor (V).

Una vez finalizado el experimento, medir de forma aproximada las dimensiones del tubo lateral que actúa como rebosadero (longitud y diámetro interno), con el fin de calcular el volumen aproximado de líquido que contiene.

Tabla 1

Absorbancia disolución inicial del trazador: $A_0 = A_{\text{maxima}} =$		
Temperatura T (°C):		
EXPERIMENTO EN ESCALÓN		
Muestra	Tiempo (min)	Absorbancia, A(t)
1	$t_1 = 0.5$	A_1
2	$t_2 = 1$	A_2
3	$t_3 = 1.5$	A_3
4	$t_4 = 2$	A_4
5	$t_5 = 2.5$...
6	$t_6 = 3$	
7	$t_7 = 3.5$	
8	$t_8 = 4$	
9	$t_9 = 4.5$	
10	$t_{10} = 5$	
11	$t_{11} = 7.5$	
12	$t_{12} = 10$	
13	$t_{13} = 15$	
14	$t_{14} = 20$	
15	$t_{15} = 30$	
16	$t_{16} = 45$	
17	$t_{17} = 60$	
18	$t_{18} = 90$	
n	$t_{\infty} = \infty$	$A_{\infty} = 0$

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

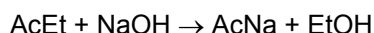
5.1. Cálculo de la conversión teórica de mezcla completa

Considerando comportamiento ideal RCTA para el reactor experimental bajo estudio,

determinar la conversión teórica de mezcla completa (x_{ideal}) que se alcanzaría en el mismo para la reacción de saponificación del acetato de etilo con NaOH en fase acuosa.

En la práctica 3 no se ha realizado ninguna reacción química; sin embargo, en un caso real podríamos saber si el reactor bajo estudio se comporta como ideal o no, comparando la conversión calculada considerando comportamiento ideal RCTA (x_{ideal}) con la conversión experimental medida.

Podríamos por tanto predecir dicha conversión ideal para la reacción de saponificación de acetato de etilo con NaOH en fase acuosa, cuya cinética se ha estudiado en las prácticas 1 y 2.



simplificando



La ecuación cinética de dicha reacción en función de la temperatura se obtuvo en la práctica 1 (concentraciones equimoleculares de los reactivos $C_{A0}=C_{B0}= 0,01$ M). Considerar las condiciones de trabajo utilizadas en la práctica 3 (flujo volumétrico de alimentación de reactivos V_0 , temperatura del medio de reacción medida experimentalmente T, volumen del reactor medido experimentalmente V_r). Los pasos a realizar serían los siguientes:

Paso	Objetivo de cada paso
1ª	<p>Determinación de la constante cinética k para la temperatura T</p> $k = k_0 \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \quad (8)$ <p>Datos: Parámetros cinéticos K_0 y E_A determinados experimentalmente en la Práctica 1. Temperatura T medida en la práctica 3</p>
2ª	<p>Cálculo de la velocidad de reacción a partir de la ecuación cinética para el método estequiométrico de los reactivos $C_{A0} = C_{B0} = C_0 = 0,01$ M (cinética de 2º orden, como se determinó en la práctica 1). Como en todo momento $C_A=C_B=C$</p> $v = kC_A C_B = kC^2 = k[C_0(1-x)]^2 \quad (9)$ $x = \frac{\text{moles reaccionados}}{\text{moles limitados}} = \frac{C_0 - C}{C_0} = 1 - \frac{C}{C_0}$ $C = C_0(1-x)$
3ª	<p>Cálculo del tiempo de residencia τ (h^{-1})</p> $\tau = \frac{V_r}{V_0} \quad (10)$ <p>V_r: volumen reactor medido en la práctica 3 V_0: caudal volumétrico medido en la práctica 3</p>
4ª	<p>Cálculo de la conversión ideal que se obtendría en el reactor experimental bajo estudio mediante la ecuación de diseño de un CSTR ideal</p> $\tau = \frac{C_0 \cdot x}{v} \quad (11)$
5ª	<p>Cálculo de la conversión ideal sustituyendo la velocidad de reacción para una cinética de 2º orden (ecuación 9) en la ecuación de diseño del reactor ideal mezcla perfecta (ecuación 11)</p> $\frac{C_0 \cdot x}{\tau} = k[C_0(1-x)]^2 \quad (12)$

5.2. Caracterizar el flujo real del reactor: cuantificar la desviación de la idealidad: obtención curva F y curva E

Obtención curva F real

Sea un experimento en escalón realizado de la siguiente forma: se alimenta agua al sistema (concentración cero) y para tiempo cero el agua se sustituye brusca y sostenidamente por una disolución de ferricianuro (trazador) de concentración C_0 . Determinando la evolución de la concentración del efluente del sistema C con el tiempo, se obtiene la curva F según la ecuación 2 como:

$$F(t) = \frac{C}{C_0}$$

Por tanto

$t = 0$	$C = 0$	$F(t) = 0$
$t = t$	$C(t) = C$	$F(t) = F$
....		
$t = \infty$	$C(t=\infty) = C_0$	$F(t=\infty) = 1$

En la presente práctica se ha utilizado la técnica de espectrofotometría visible para la determinación de la concentración del efluente del reactor, mediante la medida de la absorbancia de las muestras. La relación concentración-absorbancia es una relación lineal, que se obtiene calibrando el aparato con disoluciones de concentraciones conocidas:

$$\text{Absorbancia} = \alpha \cdot C \quad (\alpha = \text{constante})$$

Dado que la curva F representa relaciones de concentración, y dada la proporcionalidad absorbancia-concentración, la construcción de la curva F del experimento realizado en esta práctica no requiere calibrar el espectrofotómetro; la curva F se construye directamente a partir de las relaciones de absorbancia de las muestras tomadas a los distintos tiempos $A(t)$ (ver Tabla 1) con la absorbancia de la muestra inicial A_0 .

$$F(t) = \frac{C}{C_0} = \frac{A(t)}{A_0} \quad (13)$$

Ahora bien, en la presente práctica se ha realizado el escalón de forma inversa (alimentando disolución de ferricianuro y después agua), con lo cual se lleva a cabo la siguiente transformación de los datos, a partir de los cuales se obtiene la curva curva F(t) ascendente de 0 a 1

$$F(t) = 1 - \frac{A_t - A_\infty}{A_0 - A_\infty} = \frac{(A_0 - A_t)}{(A_0 - A_\infty)} \quad (14)$$

$$A_\infty = A_{H_2O} = 0$$

La curva F ideal se obtiene a partir de su definición (ecuación), y la curva F real se obtiene a partir de los datos experimentales de absorbancias, de acuerdo a la Tabla 2.

Tabla 2

t (min)	θ	Absorbancia A(t)	F(θ) real	F(θ) ideal
t_0	$\theta_0 = 0$	$A_0 = A_{\text{máxima}}$	$F_0 = \frac{(A_0 - A_0)}{(A_0)} = 0$	$F_0 = 1 - e^{\left(\frac{-t_0}{\tau}\right)} = 0$
t_1	$\theta_1 = \frac{t_1}{\tau}$	A_1	$F_1 = \frac{(A_0 - A_1)}{(A_0)}$	$F_1 = 1 - e^{\left(\frac{-t_1}{\tau}\right)}$
t_2	$\theta_2 = \frac{t_2}{\tau}$	A_2	$F_2 = \frac{(A_0 - A_2)}{(A_0)}$	$F_2 = 1 - e^{\left(\frac{-t_2}{\tau}\right)}$
t_3	$\theta_3 = \frac{t_3}{\tau}$	A_3	$F_3 = \frac{(A_0 - A_3)}{(A_0)}$	$F_3 = 1 - e^{\left(\frac{-t_3}{\tau}\right)}$
...

Obtención de la curva E

La curva E correspondiente a un sistema ideal queda descrita por la ecuación 7, mientras que la curva E real se obtiene a partir de la pendiente de la curva F experimental:

$$E(t) = C(t) = \frac{dF(t)}{dt}$$

$$E(\theta) = \tau \frac{dF(t)}{dt}$$

Si se ajustan los datos experimentales de la curva F a una ecuación analítica para su posterior derivación ha de tenerse en cuenta que el ajuste sea correcto en la primera parte de la curva, donde posiblemente se obtenga una mayor discrepancia entre la curva F ideal y la curva F real. Pueden calcularse las pendientes gráficamente utilizando el método de las varillas.

Tabla 3

t (min)	θ	F(t)real	E(t)real	E(θ)real	E(θ)ideal
t_0	$\theta_0 = \frac{t_0}{\tau} = 0$	$F_0 = \frac{(A_0 - A_0)}{(A_0)} = 0$	$E(t)_0 = \left(\frac{dF}{dt}\right)_{t_0}$	$E(\theta)_0 = \tau \cdot \left(\frac{dF}{dt}\right)_{t_0} = \left(\frac{dF}{d\theta}\right)_{\theta_0}$	$E(\theta)_0 = e^{(-\theta_0)}$
t_1	$\theta_1 = \frac{t_1}{\tau}$	$F_1 = \frac{(A_0 - A_1)}{(A_0)}$	$E(t)_1 = \left(\frac{dF}{dt}\right)_{t_1}$	$E(\theta)_1 = \tau \cdot \left(\frac{dF}{dt}\right)_{t_1} = \left(\frac{dF}{d\theta}\right)_{\theta_1}$	$E(\theta)_1 = e^{(-\theta_1)}$
t_2	$\theta_2 = \frac{t_2}{\tau}$	$F_2 = \frac{(A_0 - A_2)}{(A_0)}$	$E(t)_2 = \left(\frac{dF}{dt}\right)_{t_2}$	$E(\theta)_2 = \tau \cdot \left(\frac{dF}{dt}\right)_{t_2} = \left(\frac{dF}{d\theta}\right)_{\theta_2}$	$E(\theta)_2 = e^{(-\theta_2)}$
t_3	$\theta_3 = \frac{t_3}{\tau}$	$F_3 = \frac{(A_0 - A_3)}{(A_0)}$	$E(t)_3 = \left(\frac{dF}{dt}\right)_{t_3}$	$E(\theta)_3 = \tau \cdot \left(\frac{dF}{dt}\right)_{t_3} = \left(\frac{dF}{d\theta}\right)_{\theta_3}$	$E(\theta)_3 = e^{(-\theta_3)}$
...

A partir de las curvas obtenidas,

a) Representar gráficamente $F(t)_{\text{real}}$ y $F(t)_{\text{ideal}}$ conjuntamente

b) Representar gráficamente $E(\theta)_{\text{real}}$ y $E(\theta)_{\text{ideal}}$ conjuntamente

De estas representaciones puede deducirse si el RCTA se comporta como un sistema ideal, y si no es así, se obtiene una desviación gráfica de la idealidad.

5.3. Cuantificar la desviación de la idealidad y establecer causas de no idealidad

Una vez comprobado que el sistema se desvía ligeramente de la idealidad, se persigue en este apartado encontrar posibles causas de no idealidad, y se proponen una serie de métodos que pueden utilizarse para modelizar el sistema real RCTA.

5.3.a. Comprobación de que el experimento en escalón está bien realizado

La curva E cumple la siguiente propiedad

$$\int_0^{\infty} E(\theta) \cdot d\theta \approx 1 \quad (15)$$

Determinar gráficamente el valor de la integral, y comprobar gráficamente que el área bajo la curva se aproxima a la unidad.

5.3.b. Obtención del tiempo medio de residencia de los elementos del fluido

En un reactor ideal el tiempo medio de residencia de los elementos del fluido t_m , coincide con el tiempo de residencia τ . Si se define el tiempo medio de residencia reducido, θ_m

$$\theta_m = \frac{t_m}{\tau}$$

resulta que en reactores ideales se tiene que $(\theta_m)_{\text{ideal}} = \left(\frac{t_m}{\tau}\right)_{\text{ideal}} = \left(\frac{\tau}{\tau}\right) = 1$

Para un reactor real puede evaluarse el tiempo medio de residencia reducido de acuerdo a

$$(\theta_m)_{\text{real}} = \int_0^{\infty} \theta \cdot E(\theta)_{\text{real}} \cdot d\theta \quad (16)$$

Calcular gráficamente el tiempo medio de residencia reducido a partir de la curva $E(\theta)_{\text{real}}$. De dicho valor puede deducirse si el reactor bajo estudio se comporta como ideal o no. Puede obtenerse además información adicional de las causas posibles de no idealidad, teniendo en cuenta que

a) Si $\theta_m < 1$: puede ser debido a la existencia en el reactor de zonas muertas o estancamiento

b) Si $\theta_m > 1$: puede ser debido a la existencia en el reactor de cortocircuitos o "bypass"

5.3.c. Detectar efectos de mezcla en el reactor

Hay dos aspectos relacionados con la mezcla de fluidos que tienen que ver también con el flujo no ideal: el grado de segregación (entre macro-microfluido), y el tiempo de mezcla (importante con dos corrientes de reactivos, donde puede haber zonas ricas en uno u otro). El

primero concierne a la mezcla a escala molecular, y el segundo al comportamiento global del flujo a través del tanque.

El concepto de macrofluido indica que el fluido está constituido por agregados aislados ("terrones de azúcar"), que no se mezclan entre sí. La reacción química tiene lugar en cada agregado individualmente, de forma que cada una de ellos se comporta como un reactor discontinuo en miniatura.

El comportamiento de macrofluido puede explicar la desviación de la idealidad de un reactor, y suele darse únicamente en sistemas muy viscosos, donde la mezcla no es buena.

La conversión predicha en el reactor considerando efectos de mezcla x_M , se define como

$$x_M = 1 - \frac{C_M}{C_0} \quad (17)$$

siendo C_M la concentración en cada uno de los agregados individuales (concentración de macrofluido).

Cuando un macrofluido entra en un RCTA la concentración en los agregados individuales no cambia instantáneamente -como sucede con un microfluido- sino de modo similar a un sistema discontinuo, por lo que puede escribirse:

$$x_M = 1 - \frac{C_M}{C_0} = 1 - \int_0^{\infty} \left(\frac{C}{C_0} \right)_{disc} \cdot E \cdot dt = 1 - \int_0^{\infty} \left(\frac{C}{C_0} \right)_{disc} \cdot dF \quad (18)$$

donde el cociente $(C/C_0)_{disc}$ representa la evolución de la concentración de los reactivos en un sistema discontinuo.

Puede aplicarse este modelo a la reacción de saponificación de acetato de etilo cuya cinética se estudió en un reactor discontinuo tanque agitado en la práctica 1, resultando ser de 2º orden.

Para una cinética de 2º orden, con concentraciones estequiométricas de los reactivos, podemos escribir la siguiente expresión

$$\left(\frac{C}{C_0} \right)_{disc} = \frac{1}{1 + C_0 \cdot k \cdot t} \quad (19)$$

Calcular x_M gráficamente resolviendo la integral de la ecuación 18, previa asignación de parejas de valores $(C/C_0)_{disc} - F(t)$ para cada valor de tiempo como se muestra en la Tabla 4 y en la Figura 3.

Tabla 4

	PRÁCTICA 1	PRÁCTICA 3
t (min)	$(C/C_0)_{disc}$ (ec. 19)	$F(t)_{real}$
0		
t_1		
t_2		
...		
∞		

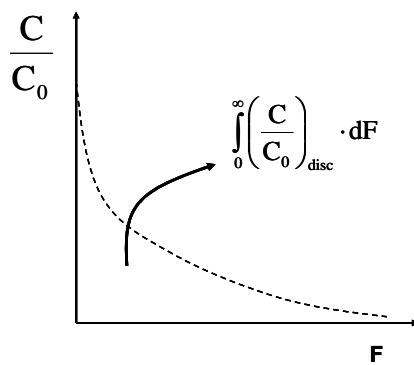


Figura 3

Este método permite relacionar la cinética (que tiene que ver con las reacciones químicas) y los experimentos con trazadores (que tienen que ver con el flujo de los fluidos), y detectar si en una reacción concreta realizada en un reactor real se está produciendo comportamiento de macrofluido que permita explicar la desviación de la idealidad.

Si la conversión observada experimentalmente no coincide con la teórica (x_{ideal}), ni tampoco con la predicha por el comportamiento de macrofluido (x_M), se utilizan los modelos empíricos de flujo como alternativa para intentar explicar el comportamiento no ideal del sistema, lo que se estudia en el siguiente apartado.

5.3.d. Uso de la correlación de Resnik para modelizar el comportamiento real del reactor

Los modelos empíricos de flujo se basan en suponer un mecanismo para el proceso de mezcla que conduzca a unas RTD suficientemente coincidentes con las curvas experimentales.

Para ello se hará uso de la correlación de Resnik, expresada por la siguiente ecuación:

$$(1 - F) = e^{-\eta \left(\theta - \frac{\varepsilon}{\tau} \right)} \quad (20)$$

Tomando logaritmos se obtiene

$$\ln(1 - F) = \eta \frac{\varepsilon}{\tau} - \eta \theta \quad (21)$$

Los parámetros η y ε caracterizan el alejamiento de la idealidad. Para un comportamiento ideal, $\eta = 1$ y $\varepsilon = 0$, de forma que la ecuación anterior adopta la expresión ya conocida de la curva F.

Representar gráficamente la ecuación 21 con los datos de la curva F_{real} obtenida experimentalmente, y determinar, a partir de la pendiente y ordenada en el origen si el reactor objeto de estudio se ajusta a la idealidad.

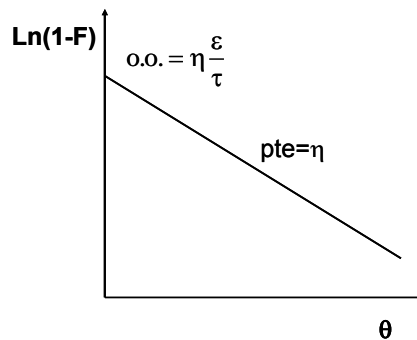


Figura 4

Además, los valores de η y ε obtenidos permiten inferir el tipo de flujo en el tanque agitado mediante combinaciones de modelos ideales.

Se presenta en la Tabla 5 un ejemplo de un reactor real cuyo comportamiento pudiera ajustarse a un modelo combinado de reactor continuo tanque agitado ideal seguido de un flujo pistón ideal (RCTA+RPF). Se elige este ejemplo dada la geometría del reactor bajo estudio, constituido físicamente por un reactor esférico con agitación seguido de un tubo que constituye el rebosadero. En este caso, el volumen del reactor V_r puede considerarse formado por la suma del volumen de reacción que se comporta como un RCTA con mezcla perfecta (V_m) y del volumen de reacción que se comporta como un RFP (V_p), es decir:

$$V_r = V_m + V_p$$

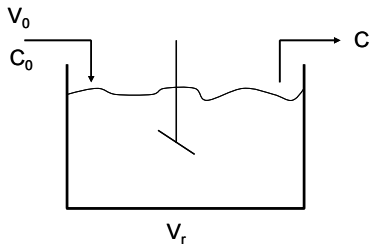
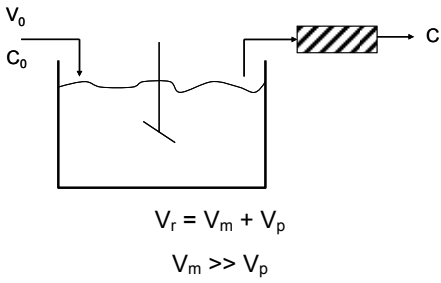
Realizando los balances de materia correspondientes para cada sistema se obtendrían las ecuaciones integradas 24 y 25 en respuesta a un experimento en escalón para un RCTA y (RCTA+RFF) respectivamente, como se observa en la Tabla 5. Para un reactor modelizado como (RCTA+RPF), puede calcularse V_m a partir de la pendiente de la representación anterior (conocido el volumen de reactor V), y V_p a partir de la ordenada en el origen:

$$pte = -\eta = \frac{V}{V_m} \quad (22)$$

$$o.o = \eta \frac{\varepsilon}{\tau} = \frac{V_p}{V_0} \quad (23)$$

Puede compararse este volumen V_p calculado para el reactor tubular acoplado en serie al reactor tanque agitado con el volumen del trozo de tubo estimado a partir de la medida de las dimensiones del tubo, tal y como se describe en la Metodología.

Tabla 5

MODELO	ESQUEMA	EC.DIFERENCIAL	COND. LIMITE	RESPUESTA A UN ESCALON	η	ε
RCTA IDEAL		$V_0 \cdot C_0 = V_0 \cdot C + V_r \frac{dC}{dt}$	$t = 0$ $C = 0$	$\frac{C}{C_0} = 1 - e^{\left(\frac{-V_0}{V_r}\right)t} \quad (24)$	1	0
RCTA+RFP		$V_0 \cdot C_0 = V_0 \cdot C + V_m \frac{dC}{dt}$	$t < \frac{V_p}{V_0}$ $C = 0$	$\frac{C}{C_0} = 1 - e^{\left(\frac{-V_0}{V_m}\right) \cdot \left(t - \frac{V_p}{V_0}\right)} \quad (25)$	$\eta = \frac{V}{V_m} > 1$	$\varepsilon = \frac{V_p}{V_0}$

Interpretación física para RCTA+RFP:

$\eta = \frac{V}{V_m}$: fracción del volumen del reactor que se comporta como mezcla perfecta

ε : da idea del tiempo de retardo introducido por el pistón