

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO

FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN



Informe Final de Investigación

**“DISEÑO OPTIMO DE UN SISTEMA DE
REACTORES CONTINUOS
INSTALADOS EN SERIE CON
REACCIONES DE SEGUNDO ORDEN”**

PABLO BELIZARIO DIAZ BRAVO

Callao, 2021

PERÚ

A handwritten signature in blue ink, appearing to be "Pablo Belizario Diaz Bravo".

DEDICATORIA

Mi gratitud eterna a Dios por iluminar cada día mi camino y hacer de su voluntad mi destino. A mis padres por haberme dado la vida. A mi esposa Guadalupe por su amor, comprensión y apoyo a mis actividades, a mis hijos Eric, Marco y Pablo por ser motivo en alcanzar mis objetivos. A mis alumnos del curso de Ingeniería de las reacciones químicas que son mi constante inspiración y con quienes compartimos y analizamos temas interesantes sobre el diseño de reactores químicos homogéneos y sistemas de baterías de reactores CSTR y PFR en serie. Finalmente, al VRI de la UNAC por el financiamiento parcial de este trabajo.



Pablo Díaz Bravo

INDICE

	Página
INDICE DE CONTENIDO	4
RESUMEN	5
ABSTRACT	6
INTRODUCCION	7
I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	8
1.1 Descripción de la realidad problemática	8
1.2 Formulación del problema	9
1.3 Objetivos	9
1.3.1 Objetivos general	9
1.3.2 Objetivos específicos	9
1.4 Limitantes de la investigación	10
1.4.1 Teórico	10
1.4.2 Temporal	10
1.4.3 Espacial	10
II. MARCO TEORICO	11
2.1 Antecedentes internacionales y nacionales	11
2.1.1 Antecedentes Internacionales	11
2.1.2 Antecedentes nacionales	12
2.2 Bases teóricas	13
2.2.1 Reactores CSTR en serie	13
2.2.2 Métodos de cálculo en una batería de reactores CSTR	15
2.2.3 Reactores PFR en serie	18



2.2.4 Reactores combinados en serie	19
2.3 Conceptual	20
2.4 Definición de términos básicos	20
III. HIPOTESIS Y VARIABLES	22
3.1 Hipótesis	22
3.1.1 Hipótesis general	22
3.1.2 Hipótesis específicas	22
3.2 Definición conceptual de las variables	22
3.2.1 Operacionalización de variables	23
IV.- DISEÑO METODOLOGICO	24
4.1 Tipo y Diseño de la Investigación	24
4.2 Método de investigación	25
4.3 Población y Muestra	25
4.4 Lugar de estudio	26
4.5 Técnicas e instrumentos de recolección de información	26
4.6 Análisis y procedimientos de datos	26
V.- RESULTADOS	27
5.1 Resultados descriptivos	27
5.2 Resultados inferenciales	38
VI.- DISCUSION DE RESULTADO	39
6.1 Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados	39
6.2 Contrastación de los resultados con otros estudios similares	39
6.3 Responsabilidad ética de acuerdo a los reglamentos vigentes	40



CONCLUSIONES	41
RECOMENDACIONES	42
REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS	43
ANEXOS	
Anexo 1: Matriz de consistencia	45
Anexo 2: Programación Excel para cinéticas de segundo orden sin Reactivo en exceso	46
Anexo 3: Programacion Excel para cineticas de segundo orden con Reactivo en exceso	47



INDICE DE CONTENIDO

	Pagina
INDICE DE FIGURAS	
Figura 1. Esquema de reactor CSTR instalado en serie	13
Figura2. Perfil de concentraciones en una batería de reactores CSTR	15
Figura 3. Esquema de reactor PFR instalado en serie	18
Figura 4. Reactores continuos instalados en serie	19
Figura 5. Diseño de la investigación	24
Figura 6. Esquema de cinco reactores CSTR en serie	32



RESUMEN

Debido a las características del reactor de flujo de mezcla completa CSTR, la velocidad de reacción es baja. Esto implica que se obtiene baja conversión de los reactantes o se necesita un gran volumen para alcanzar conversiones altas que operativamente no es práctica. Una posible solución para lograr altas conversiones es operar con una batería de reactores CSTR instalados en serie con un menor volumen de reactor cada uno de ellos. En este trabajo se ha demostrado un procedimiento analítico para determinar el tamaño óptimo de reactores CSTRs instalados en serie que operan isotérmicamente donde se efectúan una reacción de segundo orden en fase líquida. Se ha utilizado un sistema en serie de cinco reactores CSTR donde la concentración inicial a la entrada del primer reactor y a la salida del último es conocida. El método de optimización involucra la minimización del volumen total de un sistema de reactores CSTR en serie. Para el efecto se determinan las concentraciones y conversiones intermedias usando las ecuaciones de diseño respectivas mediante un procedimiento iterativo utilizando el software Excel. Los resultados indican que la minimización del volumen total del sistema de reactores CSTR conectados en serie se da cuando todos los reactores son del mismo tamaño. Por otro lado, el procedimiento reportado en esta contribución es válido para cualquier número de reactores con reacciones de segundo orden sin y con exceso de reactivo.

Palabras claves: CSTR en serie, minimización del volumen total, reacción de segundo orden



ABSTRACT

Due to the characteristics of the CSTR full-mix flow reactor, the reaction rate is low. This implies that low conversion of the reactants is obtained or a large volume is needed to achieve high conversions which is not operationally practical. A possible solution to achieve high conversions is to operate with a battery of CSTR reactors installed in series with a smaller reactor volume each. In this work an analytical procedure has been demonstrated to determine the optimal size of CSTRs reactors installed in series that operate isothermally where a second order reaction is carried out in the liquid phase. A series system of five CSTR reactors has been used where the initial concentration at the inlet of the first reactor and at the outlet of the last one is known. The optimization method involves minimizing the total volume of a series CSTR reactor system. For this purpose, the concentrations and intermediate conversions are determined using the respective design equations through an iterative procedure using Excel software. The results indicate that the minimization of the total volume of the series connected CSTR reactor system occurs when all the reactors are of the same size. On the other hand, the procedure reported in this work is valid for any number of reactors with second-order reactions without and with excess reagent.

Keywords: Series CSTR, Total Volume Minimization, Second Order Reaction



INTRODUCCIÓN

Una característica del reactor continuo tanque agitado (CSTR) es la baja conversión de salida que se logra debido a la baja velocidad de reacción. Si se quiere lograr una alta conversión se requiere un reactor CSTR de gran volumen que operativamente resulta impráctica para lograr el mezclado perfecto. Una alternativa de solución es operar con un sistema de reactores CSTRs conectados en serie y cada uno de ellos de menor volumen. Cuando las reacciones químicas son de primer y segundo orden el sistema de ecuaciones que describe estas instalaciones se puede resolver analíticamente. Uno de los problemas más comunes en estas instalaciones es el de minimizar el volumen total del sistema que implicaría menor costo, es decir hallar el volumen óptimo de cada reactor. Elizalde et al (2011) estudiaron este sistema y concluyeron que el volumen mínimo de estos sistemas se da cuando los reactores son del mismo tamaño. En esta investigación se comprueba en efecto que el volumen mínimo del sistema de reactores CSTR en serie se da cuando todos los reactores son del mismo tamaño. Para lo cual se analizaron reacciones de segundo orden sin exceso de reactivos y con exceso. Para el cálculo se proponen algoritmos de procedimiento iterativo y el uso del software Excel.

Adicionalmente, se desarrollaron sistemas combinados de reactores CSTRs y PFRs instalados en serie con reacciones de segundo orden.



I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1 Descripción de la realidad problemática

Una de las tareas fundamentales del ingeniero químico, es la transformación de materia prima a un producto de valor agregado. Estas transformaciones se dan en un reactor químico que resulta ser el corazón del proceso, por lo que su dimensionamiento resulta muy importante para la producción a escala comercial.

El reactor continuo del tipo tanque agitado denominado también como reactor de mezcla perfecta CSTR, es un dispositivo simple y práctico utilizado generalmente para reacciones químicas o bioquímicas en fase líquida. En estos reactores, la concentración de los reactantes desciende bruscamente a un valor bajo debido a la agitación, obteniéndose bajas conversiones de los reactantes. Esto implica que para lograr altas conversiones se requiere de un reactor excesivamente grande que operativamente resulta impráctica. Una solución posible consiste en operar con una batería de reactores CSTR instalados en serie con un menor volumen cada uno de ellos. En general, mediante una batería de reactores CSTR de volúmenes pequeños instalados en serie, el comportamiento del sistema es intermedio entre el reactor CSTR de volumen V y un reactor de flujo pistón. Así, para cuando el número de tanques tiende al infinito el volumen corresponde al de un reactor de flujo pistón.

Por otro lado, el conjunto de expresiones que describen la conversión a la salida de una batería de reactores CSTR a menudo no puede resolverse analíticamente, por lo que se recurre a procedimientos gráficos. Una excepción resulta, para cinéticas de reacción irreversibles de primer, y segundo orden en fase líquida, mientras que para cinéticas complejas la única alternativa son los procedimientos gráficos. Levenspiel (1999) presenta soluciones analíticas para reactores de mezcla completa instalados en serie para reacciones de segundo orden, del tipo bimolecular, sin exceso de reactante. Sin embargo, se sabe que la mayoría de las reacciones químicas ocurren con un exceso de reactante. Por lo que en



este trabajo se pretende desarrollar soluciones analíticas para encontrar el menor volumen posible en sistemas de reactores continuos instalados en serie para el caso de reacciones segundo orden. Es decir optimizar el diseño de la batería de reactores.

1.2 Formulación del problema

1.2.1 Problema General

¿Se podrá encontrar un diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie, para reacciones de segundo orden?

1.2.2 Problemas Específicos

- ¿En qué consiste el diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie, para reacciones de segundo orden?
- ¿El conjunto de expresiones que describen la conversión a la salida de un sistema de reactores combinados instalados en serie con reacciones de segundo orden, podrán ser resueltos analíticamente?

1.3 Objetivo

1.3.1 Objetivo General

Obtener el diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie para reacciones de segundo orden.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Encontrar el diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie.



- Obtener soluciones analíticas del conjunto de ecuaciones que describen la conversión de salida de un sistema de reactores continuos instalados en serie con reacciones de segundo orden.

1.4. Limitantes de la investigación

❖ Teórico

Limitaciones teóricas no existen, aunque hay limitada información respecto al tema, sin embargo se buscan encontrar soluciones analíticas en sistemas de reactores continuos (CSTR, PFR) instalados en serie tratando de minimizar el volumen total del sistema, de modo tal que resulte un diseño optimo que genera ahorro en costos de material, instalación y mantenimiento.

❖ Temporal

El proyecto de investigación a realizar es explorar una solución analítica al conjunto de expresiones matemáticas que describen un sistema de reactores continuos instalados en serie donde ocurren reacciones de segundo orden. Se ha considerado para su ejecución el periodo de un año calendario.

❖ Espacial

La investigación tiene carácter tecnológico sustantivo y propone alternativas de solución analítica para el tratamiento de sistemas de reactores continuos donde ocurren reacciones químicas de segundo orden.



II. MARCO TEORICO

2.1 Antecedentes

2.1.1 Internacionales

Wasserman (1936). "Estudio de la reacción de Diels-Alder entre la benzoquinona (B) y el ciclopentadieno (C) a 25°C en fase líquida". Para una cinética de segundo orden con concentraciones iniciales equimolares. Operando con dos y tres reactores CSTR instalados en serie, concluye que el volumen mínimo corresponde cuando los tanques son del mismo tamaño. Asimismo, presenta un método de optimización operando con dos reactores de distinto tamaño.

Medina (1990) "Diseño óptimo de reactores Bioquímicos mediante el método gráfico directo". Presenta un método gráfico directo para el diseño de reactores químicos, fue adaptado para la optimización de reactores bioquímicos a partir de datos cinéticos de concentración – tiempo para instalaciones de dos y tres reactores en serie. Sus resultados reafirman que para sistemas de dos hasta tres reactores CSTR en serie el método anda bien, sin embargo para mayores de tres la diferencia en el valor del volumen total es notorio.

Elizalde et al. (2013). "Solución analítica para obtener el volumen óptimo de una serie de reactores de agitación continua donde se efectúa una reacción de primer orden". Los autores desarrollaron un procedimiento analítico para determinar el tamaño óptimo de reactores CSTR que operan en forma isotérmica e isobárica en serie donde se efectúa una reacción de primer orden a densidad constante. El método de optimización involucra el cálculo de concentraciones intermedias, asimismo, el procedimiento reportado es válido para cualquier número de reactores. Bajo las restricciones impuestas el método predice que todos los reactores deben tener el mismo tamaño para minimizar el volumen total del sistema.



Del toro et al. (2015), "Modelo matemático para una batería de cinco reactores continuos con agitación". Segunda parte. Los autores desarrollaron un modelo matemático para la simulación de una batería de reactores capaz de reproducir el comportamiento de un sistema reaccionante fluido-sólido no catalítico, en una secuencia de cinco reactores continuos con agitación conectados en serie, donde el tiempo de residencia medio es igual para todos los reactores. Establecieron un algoritmo para resolver el sistema de ecuaciones del modelo matemático en función de la fracción de conversión.

Gonzales et al. (2009). "Modelamiento y Simulación de una serie de CSTR'S con alimentación distribuida para la Hidrolisis Enzimática de Bagazo de Caña". Los autores presentan consideraciones de diseño para la hidrolisis enzimática del bagazo de caña en una serie de reactores continuos de tanque agitado (CSTRs) con alimentación distribuida de sustrato. Un modelo cinético previamente ajustado y validado es usado junto con los modelos de macrofluido y microfluido para describir el sistema de reacción. La alimentación distribuida de sustrato permite aumentar la concentración de sustrato superando los problemas de viscosidad y mezclado que se presentan en reacciones con concentraciones iniciales de sustrato mayores a 8-10% w/w. En la operación con alimentación distribuida se pueden obtener conversiones similares a las obtenidas en una serie con alimentación en el primer reactor.

2.1.2 Nacionales

Soto (2015). "Modelamiento y Estudio del comportamiento y Aplicación de la variable tiempo en un reactor continuo (CSTR)". El autor desarrollo un modelo matemático que permita aplicar la variable tiempo en reactores del tipo tanque agitado continuo (CSTR). Asimismo, evaluó el comportamiento del modelo aplicando los resultados a una reacción irreversible de primer y de segundo orden, obteniendo resultados gráficos de cada una de las soluciones usando el software Excel.



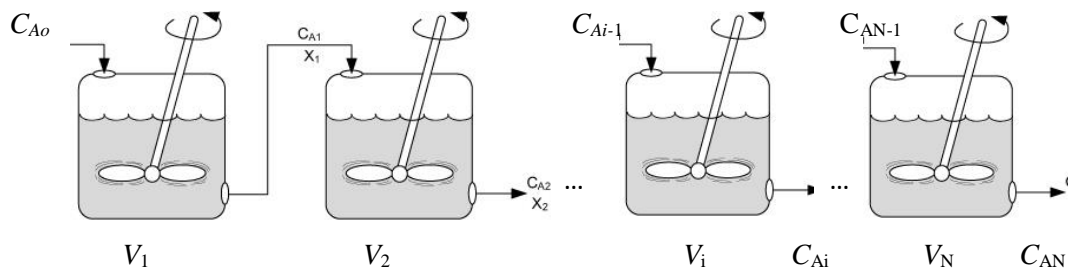
2.2 Bases teóricas:

2.2.1 Reactores CSTR en serie

Debido a las características del reactor de flujo de mezcla completa, la velocidad de reacción es baja. Esto implica que se obtiene baja conversión de los reactantes o se necesita un gran volumen para alcanzar conversiones altas. Una posible solución para lograr conversiones altas es operar con una batería de reactores CSTR instalados en serie con un menor volumen de reactor cada uno de ellos.

Figura 1

Esquema de reactores CSTR instalados en serie



Realizando el balance de materia en el reactor i -ésimo, tomando como base el caudal de alimentación del componente A del primer reactor.

$$\frac{V_i}{F_{A0}} = \frac{X_{Ai} - X_{Ai-1}}{-r_A} \quad (1)$$

Para el tanque enésimo,

$$\frac{V_N}{F_{A0}} = \sum_{i=1}^N \frac{V_i}{F_{A0}} = \sum_{i=1}^N \frac{X_{Ai} - X_{Ai-1}}{-r_A} = \frac{X_{AN} - X_{AN-1}}{-r_A} \quad (2)$$

De donde,

$$X_{AN} = X_{AN-1} + \frac{V_N}{F_{A0}} (-r_A) \quad (3)$$

La expresión (3) indica que la conversión que sale del último tanque de la batería es igual a la conversión que ingresa más el incremento de conversión en el reactor. Para una batería de tanques, la conversión total alcanzada será igual a la conversión inicial más la suma de los incrementos de conversión obtenidos en los sucesivos tanques.

$$X_{AN} = X_{A0} + \frac{1}{F_{A0}} \sum_{i=1}^N V_N (-r_A) \quad (4)$$

Se demuestra que a medida $N \rightarrow \infty$ manteniendo el volumen total constante, la batería de reactores CSTR se comporta como un reactor de flujo pistón. De (3)

$$\frac{\Delta X_{AN}}{(-r_A)} = \frac{V_N}{F_{A0}}$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{F_{A0}} \sum_1^N V_N \right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_1^N \frac{\Delta X_{AN}}{(-r_A)} \right) = \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX}{-r_A}$$

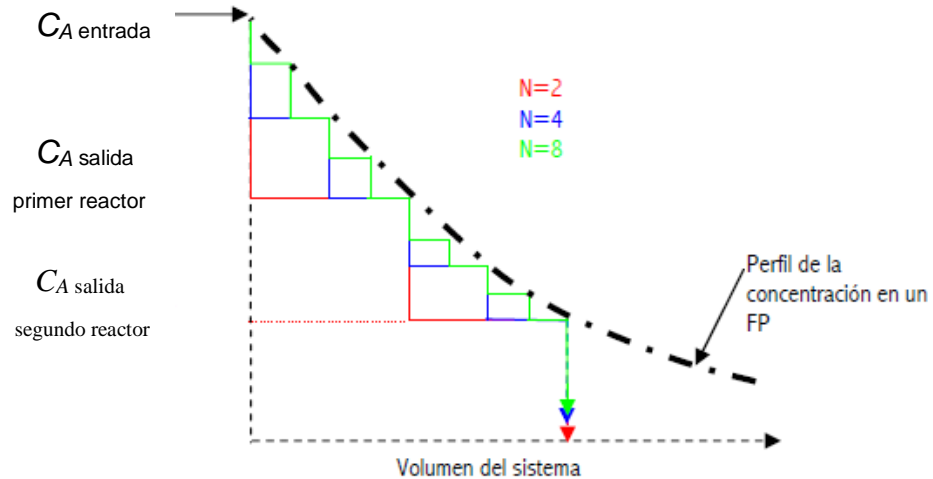
$$\frac{V_T}{F_{A0}} = \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX}{-r_A} \quad (5)$$

Donde V_T es el volumen total del sistema de reactores CSTR. La ecuación (5) corresponde a un reactor PFR. Por consiguiente, se concluye que el comportamiento de una batería de reactores CSTR es intermedio entre el comportamiento de un reactor CSTR de volumen V_T y el de flujo pistón. Esta es la razón por la que una batería de reactores CSTR montada en serie es usada a menudo en vez de un solo reactor CSTR el cual tendría un volumen excesivamente grande que resulta operativamente impráctica.

En general, mediante una batería de reactores CSTR se simula el comportamiento de un reactor de flujo pistón. Asimismo, tiene la ventaja de operar cada reactor a distintas condiciones. Esto es incrementando la temperatura tanque a tanque, o la agitación. Sin embargo, las instalaciones en serie no exceden de 3 o 4 reactores, mayores cantidad resultan antieconómicos por instalación y/o mantenimiento.

Figura 2

Perfil de Concentraciones en una batería de reactores CSTR



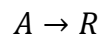
Cunill F., Iborra M., Tjero J. (2010).

2.2.2 Métodos de cálculo en una batería de reactores CSTR en serie.

El conjunto de expresiones que describen la conversión a la salida de una batería de tanques CSTR a menudo no puede resolverse analíticamente, por lo que se recurre a métodos gráficos o numéricos. Una excepción resulta reacciones de primer y segundo orden (Santa María y Herguido 1999).

Método analítico

Reacciones de primer orden:



Ecuación cinética: $-r_A = kC_A$

Balance de materia: $F_{A0} - F_A + r_A V = 0$

$$C_{A0} - C_A - k\tau C_A = 0$$

$$C_A(1 + k\tau) = C_{A0}$$

$$C_A = \frac{C_{A0}}{(1+k\tau)} \quad (6)$$

Para el primer reactor:

$$C_{A1} = \frac{C_{Ao}}{(1 + k\tau_1)}$$

Segundo reactor:

$$C_{A2} = \frac{C_{A1}}{(1 + k\tau_2)} = \frac{C_{Ao}}{(1 + k\tau_1)(1 + k\tau_2)}$$

Generalizando para una batería de tanques CSTR:

$$C_{AN} = \frac{C_{AN-1}}{(1 + k\tau_N)} = \frac{C_{Ao}}{(1 + k\tau_1)(1 + k\tau_2) \dots (1 + k\tau_{N-1}) \dots (1 + k\tau_N)} \quad (7)$$

Si todos los tanques son del mismo tamaño, es decir: $\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_N = \tau$

$$C_{AN} = \frac{C_{AN-1}}{(1 + k\tau_N)} = \frac{C_{Ao}}{(1 + k\tau)^N} \quad (8)$$

Para hallar el tamaño de cada tanque, conociendo el número de tanques y la conversión de salida,

$$\tau = \frac{1}{k} \left[\left(\frac{C_{Ao}}{C_{AN}} \right)^{1/N} - 1 \right] \quad (9)$$

Tamaño total de la batería,

$$\tau_{total} = \tau N = \frac{N}{k} \left[\left(\frac{C_{Ao}}{C_{AN}} \right)^{1/N} - 1 \right] \quad (10)$$

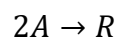
En el límite cuando $N \rightarrow \infty$, se comporta como el de flujo pistón. Luego,

$$(\tau_{total})_{fp} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N}{k} \left[\left(\frac{C_{Ao}}{C_{AN}} \right)^{1/N} - 1 \right] = \frac{1}{k} \ln \left(\frac{C_{Ao}}{C_A} \right) \quad (11)$$

Se puede comparar el funcionamiento de N reactores CSTR en serie con un reactor de flujo pistón.

Reacciones de segundo orden

Del tipo:



Ecuación cinética: $-r_A = kC_A^2$

Balance de materia: $F_{Ao} - F_A + r_A V = 0$

$$C_{Ao} - C_A - k\tau C_A^2 = 0$$

$$k\tau C_A^2 + C_A - C_{Ao} = 0 \quad (12)$$

Es una ecuación cuadrática cuya solución es,

$$C_A = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_{Ao}}}{2k\tau} \quad (13)$$

Para el primer reactor:

$$C_{A1} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau_1 C_{A0}}}{2k\tau_1} \quad (14)$$

Segundo reactor:

$$C_{A2} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau_2 C_{A1}}}{2k\tau_2} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau_2 \left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau_1 C_{A0}}}{2k\tau_1} \right)}}{2k\tau_2} \quad (15)$$

Para reactores del mismo tamaño: es decir: $\tau_1 = \tau_2 = \tau$

$$C_{A2} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau \left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_{A0}}}{2k\tau} \right)}}{2k\tau_2} = \frac{1}{4k\tau} \left[-2 + 2\sqrt{-1 + 2\sqrt{1 + 4k\tau C_{A0}}} \right] \quad (16)$$

Generalizando para una batería de N tanques CSTR sucesivos,

$$C_{AN} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau \left(\frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_{A0}}}{2k\tau} \right)}}{2k\tau_2} = \frac{1}{4k\tau} \left[-2 + 2\sqrt{\underbrace{\dots}_{\vdots]N} -1 \dots N + 2\sqrt{1 + 4k\tau C_{A0}}} \right] \quad (17)$$

Sin embargo, es preferible usar la ecuación (15) para cada tanque en forma sucesiva hasta los N tanques.

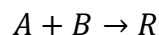
En el límite cuando $N \rightarrow \infty$, la batería de reactores se comporta como el de flujo pistón. Donde,

$$\tau = - \int \frac{dC_A}{-r_A} = - \int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{kC_A^2} = \frac{1}{k} \left(\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} \right) \quad (18)$$

Luego,

$$\frac{C_{A0}}{C_A} = 1 + k\tau_{fp} C_{A0} \quad (19)$$

Para reacciones bimoleculares, con exceso de reactantes



Cuando intervienen dos reactivos distintos en una reacción bimolecular, el que se encuentra en menor cantidad es el reactivo limitante, y el otro se encuentra en exceso. En este caso la ecuación cinética correspondiente es: $-r_A = kC_A C_B$ (20)

Para resolver analíticamente las ecuaciones de diseño, se tiene que expresar la concentración del reactivo en exceso en función del reactivo limitante a fin de resolver la integración. Otra alternativa es expresar las concentraciones de los reactantes en términos de conversión y resolver las ecuaciones de diseño. La solución se puede dar analíticamente o gráficamente.

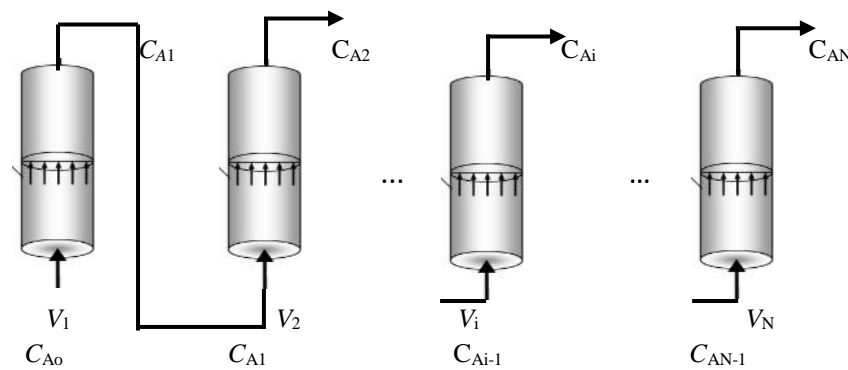
Para ecuaciones cinéticas complejas o reacciones reversibles de segundo orden son preferibles los métodos gráficos o numéricos, que no se abordara en este trabajo.

2.2.3 Reactores PFR en serie

Considerando N reactores tubulares montados en serie tal como se observa en la figura siguiente.

Figura 3

Esquema de reactores PFR instalados en serie.



Tomando como base el caudal de alimentación del componente A del primer reactor, el balance de materia en el reactor i-esimo resulta,

$$\frac{V_i}{F_{A0}} = \int_{X_{A_{i-1}}}^{X_{A_i}} \frac{dX_{A_i}}{-r_A} \quad (21)$$

Para la batería de reactores

$$\frac{V_t}{F_{A0}} = \sum_{i=1}^N \frac{V_i}{F_{A0}} = \frac{V_1 + V_2 + \dots + V_N}{F_{A0}} \quad (22)$$

De donde,

$$\frac{V_t}{F_{A0}} = \int_0^{X_{A1}} \frac{dX_A}{-r_A} + \int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A} + \dots + \int_{X_{AN-1}}^{X_{AN}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (23)$$

Por consiguiente, los N reactores PFR conectados en serie dan la misma conversión que un solo reactor PFR de volumen V_t .

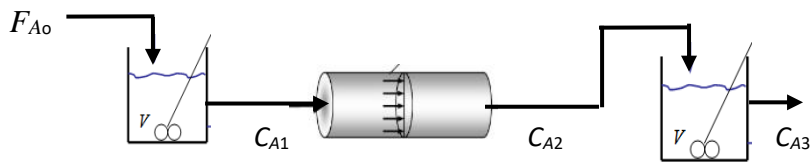
2.2.4 Reactores combinados en serie

Es común en la industria química conectar reactores en serie de modo tal que el flujo de salida de un reactor sea la alimentación del otro con diversos fines, por ejemplo elevar la conversión de salida y cierta selectividad (Ramírez L. y Hernández P., 2014).

Se pueden instalar distintos tipos de reactores continuos (CSTR, PFR o PFR con recirculación). Por ejemplo: Sea el sistema que se muestra en la figura siguiente.

Figura 4

Reactores continuos instalados en serie



En este caso, se utilizan las ecuaciones de diseño según corresponda a cada reactor y se resuelve. Así:

Primer reactor: CSTR

$$\frac{V_1}{F_{A0}} = \frac{X_{A1}}{-r_A} \quad (24)$$

Segundo reactor: PFR

$$\frac{V_2}{F_{A0}} = \int_{X_{A1}}^{X_{A2}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (25)$$

Tercer reactor: CSTR

$$\frac{V_3}{F_{A0}} = \frac{X_{A3} - X_{A2}}{-r_A} \quad (26)$$

Es posible estructurar diversas configuraciones de reactores CSTR y reactores PFR instalados en serie. El asunto es encontrar el menor

volumen posible del sistema de modo tal que este sea mínimo u optimo, para cinéticas de segundo orden.

2.2 Conceptual

En el modelado de reactores químicos un tema de interés resulta la minimización del volumen total de un sistema de reactores instalados en serie. Al respecto, una revisión bibliográfica de la literatura afín (Levenspiel 1999, Fogler 2001, Tiscareño 2008, Castro y otros 2011) sobre este tema conduce que el volumen mínimo del sistema de dos reactores ocurre cuando estos son del mismo tamaño. Similarmente se podría pensar que para un sistema de más de dos reactores se cumpliría esta condición de volumen mínimo. Para la solución del problema se han sugerido técnicas analíticas y el uso de métodos gráficos. Los métodos gráficos presentan algunos inconvenientes debido a que al graficar las áreas que corresponden a cada reactor, la lectura de las conversiones intermedias dan valores inexactos. Por consiguiente, en este trabajo se propone desarrollar métodos analíticos para resolver este problema de reactores continuos instalados en serie para reacciones de segundo orden, incluyendo reacciones bimoleculares con reactivo en exceso.



2.3 Definiciones de términos básicos

Reactor químico CSTR: es un recipiente de tipo tanque agitado que opera en forma continua, denominado también de mezcla perfecta o completa.

Reactor químico PFR: es un tubo de forma cilíndrica o tubular, que opera en forma continua, donde el modelado de flujo es del tipo de pistón

Instalaciones de reactores en serie: Dos o más reactores químicos instalados en serie, es decir uno a continuación de otro.

Reacciones de primer orden: cuando un reactivo se descompone para formar uno o varios productos. El orden de reacción es de primer orden

Reacciones de segundo orden: cuando dos reactivos se descomponen para formar productos. Los reactivos pueden ser iguales o distintos. Asimismo, las concentraciones iniciales pueden ser iguales o diferentes. El orden de reacción es de segundo orden

Reactivo limitante: es el que se encuentra en menor cantidad inicialmente.

Cinética química: es el área de la fisicoquímica que se encarga del estudio de la rapidez de reacción, bajo condiciones variables de temperatura, presión y concentración de reactivos. El modelo de ecuación cinética más usado es el de tipo ley de potencia, sin embargo para sistemas heterogéneos se usan modelos como el de tipo Langmuir-Hinshelwood.

Reactores combinados: consiste en el acoplamiento en serie de distintos tipos de reactores continuos. Por ejemplo CSTR-PFR-CSTR o PFR-CSTR-CSTR o CSTR-CSTR-PFR y otros.



III. HIPOTESIS Y VARIABLES

3.1 Hipótesis

3.1.1 Hipótesis General

El diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie consiste en la minimización del volumen total del sistema. Este volumen mínimo se da cuando todos los reactores son del mismo tamaño.

3.1.2 Hipótesis Específicas

- Es posible encontrar el diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie. Este diseño consiste en la minimización del volumen total del sistema, y se da cuando todos los reactores son del mismo tamaño.
- Se pueden elaborar algoritmos que permitan encontrar soluciones analíticas en un sistema de reactores continuos instalados en serie, con cinéticas de reacción de segundo orden.

3.2 Definición conceptual de las variables

La investigación a desarrollarse se caracteriza por ser longitudinal estudiando distintas configuraciones de conexión entre diversos reactores continuos instalados en serie que minimice el volumen total del sistema. Es decir, guarda la relación causa-efecto.

Por su naturaleza, todas las variables identificadas son del tipo cuantitativo. Por su dependencia Y es la variable dependiente, y las variables X_1 , X_2 , son independientes.

Es decir: $Y = f(X_1, X_2)$

Y = Volumen mínimo del sistema

X_1 = número de reactores instalados en serie.

X_2 = Configuración de reactores continuos instalados en serie.



3.2.1 Operacionalización de variables

Variable	Dimensiones	Indicador	Método
Dependiente Y = volumen mínimo del sistema de reactores continuos instalados en serie.	<ul style="list-style-type: none"> • Volumen mínimo del sistema. 	<ul style="list-style-type: none"> • Litros o m^3 	Analítico
Independiente X_1 = número de reactores continuos instalados en serie.	<ul style="list-style-type: none"> • Cantidad de reactores 	<ul style="list-style-type: none"> • 2, 3 o más reactores instalados en serie 	Analítico
X_2 = Configuración de tipos de reactores continuos instalados en serie.	<ul style="list-style-type: none"> • Configuración del sistema de reactores instalados en serie. 	<ul style="list-style-type: none"> • Orden de reactores CSTRs y PFRs. 	Analítico

IV.- DISEÑO METODOLOGICO

4.1 Tipo y Diseño de la Investigación

4.1.1 Tipo de Investigación

La propuesta de investigación que se desarrollará, corresponde:

a) Por su finalidad. Es de tipo aplicativo exploratorio, que sirve para el dimensionamiento óptimo de un sistema de reactores químicos instados en serie.

b) Por su diseño interpretativo. Es de carácter tecnológico puesto que permitirá manipular el factor causal de las variables independientes (número de reactores y tipo de configuración de reactores) para observar y determinar el efecto deseado.

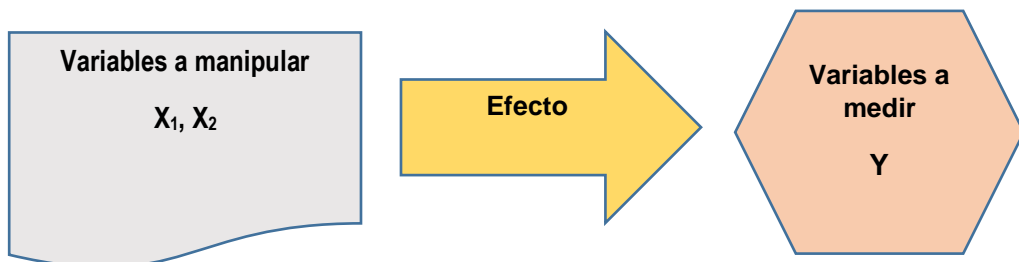
c) Por el énfasis de la naturaleza de los datos manejados. Es del tipo resolutivo analítico porque las variables de la investigación son cuantitativas.

4.1.2 Diseño de la Investigación

El diseño de la presente investigación será de tres etapas, cuya representación se puede notar en la Figura 5.

Figura 5.

Diseño de la Investigación



4.1.3 Etapas de la Investigación Se ha considerado que la investigación propuesta tendrá tres etapas.

Primera etapa de la investigación. En la primera etapa de la investigación se propondrá sistemas de instalación en serie de dos y tres reactores continuos donde se demuestre que el volumen mínimo del sistema, es decir el óptimo se da cuando los reactores son del mismo tamaño.

Segunda etapa de la investigación. Plantear diversas configuraciones de tipos de reactores CSTR y PFR instalados en serie. Plantear las ecuaciones de diseño del sistema de reactores continuos instalados en serie y encontrar formas de solución analítica para hallar el volumen mínimo del sistema.

Tercera etapa de la investigación. Encontrar la configuración optima que minimice el volumen total del sistema de reactores continuos instalados en serie. En esta etapa se identificara la variable Y.

4.2 Método de investigación

El presente proyecto de investigación se realizará aplicando el método científico, consistente en la percepción directa del objeto de investigación y estará conformado por tres etapas

4.3 Población y Muestra

La población está representada por los reactores químicos continuos ideales (CSTR y PFR).

La muestra, comprende el sistema de reactores químicos continuos instalados en serie.



4.4 Lugar de estudio

El presente trabajo de investigación se desarrollará en la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Callao

4.5 Técnicas e instrumentos de recolección de información

4.5.1 Técnica. Las técnicas que se utilizarán son:

Técnicas de análisis matemático.

4.5.2 Instrumentos

Los instrumentos de medición son las soluciones analíticas del modelo de ecuaciones que describen el sistema de reactores continuos.

4.6 Análisis y procedimientos de datos

El procesamiento de los datos será mediante programas de Excel que permitan encontrar soluciones analíticas de los problemas propuestos.



V. RESULTADOS

5.1 Resultados descriptivos

Criterio de óptimo

El criterio del diseño óptimo de reactores CSTRs conectados en serie fue estudiado por Elizalde et al (2013). Los autores estudiaron la minimización del volumen total de un sistema de 02 y 03 de reactores CSTRs conectados en serie donde ocurre una reacción de primer orden. De sus resultados concluyen que el volumen mínimo de estos sistemas resulta cuando los reactores son del mismo tamaño. En este trabajo utilizamos el mismo concepto pero para reacciones de segundo orden sin reactivos en exceso y con reactivo en exceso. Además hacemos extensivo para combinaciones de reactores CSTRs y PFRs instalados en serie.

Para la demostración del criterio del volumen mínimo de n-CSTRs para reacciones de primer orden los autores suponen:

- Densidad de la mezcla reaccionantes constante.
- Reacción Irreversible de primer orden.
- La operación es isotérmica.
- Se considera reactores CSTRs ideales instalados en serie

En una instalación de reactores CSTRs en serie, la ecuación de diseño para el reactor i-esimo según el balance de materia (Cunill et al., 2010) es:

$$F_{Ai-1} - F_{Ai} = -(r_A)_i V \quad (27)$$

Luego,

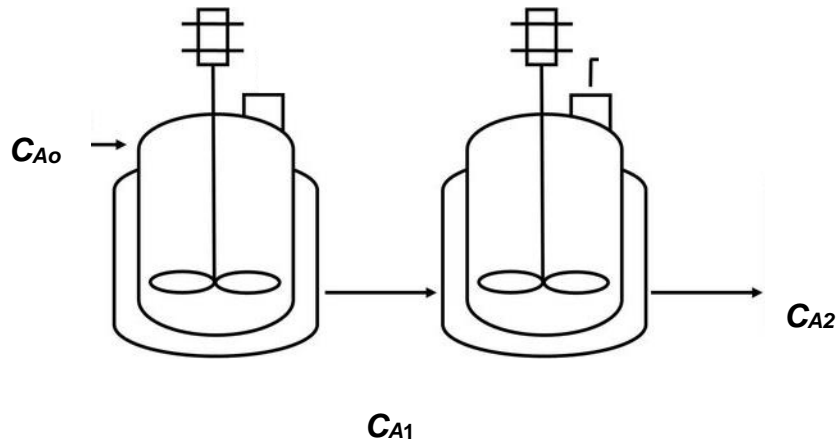
$$\tau_i = \frac{C_{Ai-1} - C_{Ai}}{-(r_A)_i} \quad (28)$$

Donde C_{Ai-1} es la concentración del reactante a la entrada del reactor i-esimo y C_{Ai} es la concentración de salida de dicho reactor, τ_i es el respectivo tiempo espacial. Conociendo las concentraciones de entrada y salida del reactante A al sistema, la minimización del volumen total de los reactores conectados en serie puede obtenerse hallando las concentraciones intermedias óptimas del sistema. Así, para una reacción irreversible de primer orden,

$$-(r_A)_i = kC_{Ai} \quad (29)$$

Para una reacción isotérmica la constante cinética k es constante.

Para un sistema de 02 reactores CSTR en serie



Para el primer reactor,

$$\tau_1 k = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{C_{A1}} \quad (4)$$

Para el segundo reactor,

$$\tau_2 k = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{C_{A2}} \quad (30)$$

El tiempo espacial total será,

$$\tau_t k = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{C_{A1}} + \frac{C_{A1} - C_{A2}}{C_{A2}} \quad (31)$$

Donde,

$$\tau_t = \tau_1 + \tau_2 \quad (32)$$

Para minimizar el volumen total de los dos reactores se impone la condición de $\frac{\partial \tau_t}{\partial C_{A1}} = 0$. Luego, derivando del tiempo espacial con respecto a la concentración intermedia de A C_{A1} .

$$k \frac{\partial \tau_t}{\partial C_{A1}} = -\frac{C_{A0}}{C_{A1}^2} + \frac{1}{C_{A2}} = 0 \quad (33)$$

Se obtiene,

$$C_{A1}^* = \sqrt{C_{A0} C_2} \quad (34)$$

El superíndice (*) indica el valor óptimo de la concentración intermedia de A que produce el mínimo del volumen del reactor. Por consiguiente, el tiempo espacial óptimo de cada reactor puede calcularse de la siguiente manera:

$$\tau_1 k = \frac{C_{A0} - C_{A1}^*}{C_{A1}^*} \quad (35)$$

$$\tau_2 k = \frac{C_{A1}^* - C_{A2}}{C_{A2}} \quad (36)$$

Multiplicando la ecuación (11) por C_{A1}^*

$$\tau_2 k = \frac{(C_{A1}^*)^2 - C_{A1}^* C_{A2}}{C_{A2} C_{A1}^*} \quad (37)$$

Usando la ecuación (9) se obtiene,

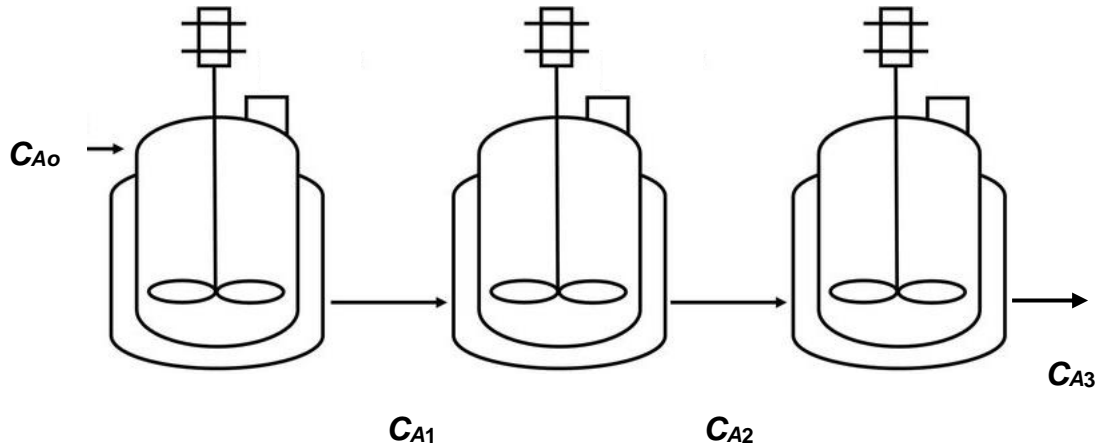
$$\tau_2 k = \frac{C_{A0} - C_{A1}^*}{C_{A1}^*} \quad (38)$$

El término del lado derecho de la ecuación (38) es el mismo que el de la ecuación (35). Por lo tanto, a partir de este resultado se concluye que ambos reactores deben tener el mismo volumen. Tomando la segunda derivada de la ecuación (31) y evaluando en el valor óptimo de la concentración intermedia,

$$k \frac{\partial(\tau_t k)^2}{\partial C_{A1}^2} = \frac{2C_{A0}}{(C_{A1}^*)^3} \quad (39)$$

Del resultado se deduce que para algún valor de la conversión intermedia $C_{A1} > 0$ la segunda derivada debe ser positiva y por consiguiente se verifica que la conversión óptima calculada a partir de la ecuación (31) permite minimizar el volumen total del sistema de dos reactores en serie según Marsden y Tromba (2011).

Para un sistema de 03 reactores CSTR en serie



Procediendo similarmente a 2 reactores se obtiene,

$$\tau_t k = \sum_{i=1}^3 \tau_i k = \frac{C_{A0} - C_{A1}}{C_{A1}} + \frac{C_{A1} - C_{A2}}{C_{A2}} + \frac{C_{A2} - C_{A3}}{C_{A3}} \quad (40)$$

Derivando con respecto a las concentraciones intermedias del reactivo A

$$k \frac{\partial \tau_t}{\partial C_{A1}} = -\frac{C_{A0}}{C_{A1}^2} + \frac{1}{C_{A2}} = 0 \quad (41)$$

$$k \frac{\partial \tau_t}{\partial C_{A2}} = -\frac{C_{A1}}{C_{A2}^2} + \frac{1}{C_{A3}} = 0 \quad (42)$$

De donde se obtienen:

$$C_{A1}^* = \sqrt{C_{A0} C_2} \quad (43)$$

$$C_{A2}^* = \sqrt{C_{A1} C_3} \quad (44)$$

Reemplazando las ecuaciones (18) y (19) en la ecuación de diseño de los tres reactores resultan,

$$\tau_1 k = \frac{C_{A0} - C_{A1}^*}{C_{A1}^*} \quad (45)$$

$$\tau_2 k = \frac{C_{A1}^* - C_{A2}}{C_{A2}} \left(\frac{C_{A1}^*}{C_{A1}^*} \right) = \frac{C_{A0} - C_{A1}^*}{C_{A1}^*} \quad (46)$$

$$\tau_3 k = \frac{C_{A2}^* - C_{A3}}{C_{A3}} \left(\frac{C_{A2}^*}{C_{A2}^*} \right) = \frac{C_{A1} - C_{A2}^*}{C_{A2}^*} \quad (47)$$

Se puede notar que las tres expresiones del lado derecho son idénticas, es decir, el volumen de los tres tanques son iguales.

Por lo tanto se concluye, que para un sistema de n-CSTRs conectados en serie, el volumen mínimo del sistema que lo hace óptimo el tamaño del reactor resulta cuando todos los reactores son del mismo tamaño. Este mismo concepto se puede extender a reacciones de segundo orden donde el tratamiento demostrativo resulta engorroso por ser ecuaciones cúbicas. Por otro lado, esta definición del volumen óptimo será válida también para sistemas donde intervienen reactores combinados CSTR y PFR conectados en serie.

Reactores CSTR instalados en serie con reacciones de segundo orden

Uno de los problemas más comunes que se presenta en un sistema de reactores CSTRs instalados en serie para reacciones segundo orden es el cálculo del volumen óptimo para lograr una conversión conocida a la salida del sistema.

CASO 1: Reacción sin exceso de reactivo

Una compañía desea instalar una batería de reactores CSTR en serie para una reacción de descomposición de reactante que obedece a una cinética de segundo orden: $A \rightarrow R$

Donde: $-r_A = kC_A^2$

La alimentación será de 0,3 mol/L y el caudal de 5 L/s. La constante $k = 0,5$ L/mol s⁻¹. Se desea conocer:

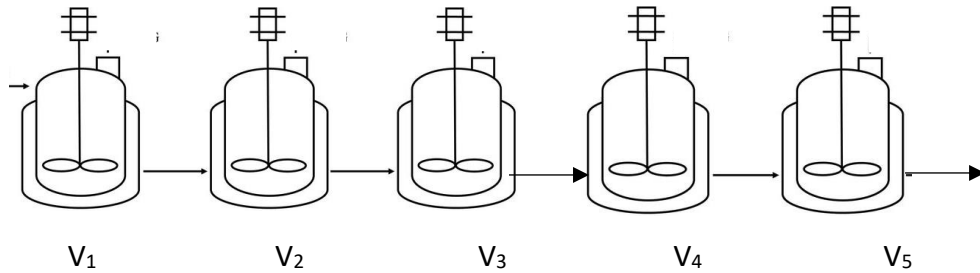
- La conversión de salida de una batería de 5 reactores CSTR de volúmenes de 10, 20, 30, 40 y 50 litros respectivamente.
- Si todos los tanques fueran del mismo tamaño ¿Cuál será el tamaño de cada tanque para lograr la misma conversión calculada en (a).

Para resolver este caso: se presenta el siguiente esquema



Figura 6

Esquema de 5 reactores CSTR de distintos tamaño



Balance de materia para reactor CSTR

$$F_{Ai-1} - F_{Ai} = -(r_A)_i V$$

Reemplazando la ecuación cinética y en términos de concentraciones resulta,

$$C_{A0} - C_A = k\tau C_A^2$$

Ordenando,

$$k\tau C_A^2 + C_A - C_{A0} = 0$$

Resolviendo la ecuación cuadrática,

$$C_A = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_{A0}}}{2k\tau}$$

Primer reactor:

$$C_{A1} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau_1 C_{A0}}}{2k\tau_1}$$

$$\tau_1 = \frac{V_1}{v_0}$$

Segundo reactor:

$$C_{A2} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau_2 C_{A1}}}{2k\tau_2}$$

$$\tau_2 = \frac{V_2}{v_0}$$

Tercer reactor:

$$C_{A3} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau_3 C_{A2}}}{2k\tau_3}$$

$$\tau_3 = \frac{V_3}{v_0}$$

Cuarto reactor:

$$C_{A4} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau_4 C_{A3}}}{2k\tau_4}$$

$$\tau_4 = \frac{V_4}{v_0}$$

Quinto reactor

$$C_{A5} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau_5 C_{A4}}}{2k\tau_5}$$

$$\tau_5 = \frac{V_5}{v_0}$$

Algoritmo de cálculo

La solución de las ecuaciones descritas para los 5 reactores CSTR se resuelve siguiendo un procedimiento iterativo:

- 1.- Conociendo τ_1 y la concentración inicial C_{A0} se determina C_{A1}
- 2.- Conociendo τ_2 y la concentración del primer reactor C_{A1} se determina C_{A2}
- 3.- Así sucesivamente hasta el quinto reactor.
- 4.- Luego se calcula la conversión de salida del quinto reactor:

$$X_5 = 1 - \frac{C_{A5}}{C_{A0}}$$

Utilizando el excel se verifica los siguientes resultados:

$$C_{A5} = 0,069442 \qquad X_5 = 0,768525$$

Para resolver la parte (b) donde todos los reactores son del mismo tamaño, es decir:

$$\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau$$

Se desea obtener la misma conversión que la calculada en (a), entonces el cálculo requiere un procedimiento iterativo usando las siguientes ecuaciones:

$$\text{Primer reactor: } C_{A1} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_{A0}}}{2k\tau}$$

$$\text{Segundo reactor: } C_{A2} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_{A1}}}{2k\tau}$$

$$\text{Tercer reactor: } C_{A3} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_{A2}}}{2k\tau}$$

$$\text{Cuarto reactor: } C_{A4} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_{A3}}}{2k\tau}$$

$$\text{Quinto reactor: } C_{A5} = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4k\tau C_{A4}}}{2k\tau}$$

Para el cálculo se requiere un procedimiento iterativo como sigue:

- 1.- Se propone un valor de τ y se calcula la concentración C_{A1}
- 2.- Luego las concentraciones C_{A2}, C_{A3}, C_{A4} y C_{A5} usando las ecuaciones descritas líneas arriba.
- 3.- Se verifica si el valor de la concentración C_{A5} es lo esperado, sino se modifica el valor de τ
- 4.- El procedimiento iterativo continúa hasta que dos valores de C_{A5} sean iguales



Para el caso en estudio usando Excel se obtiene los siguientes resultados:

$\tau = 5,906 \text{ s}$, $C_{A5} = 0,069447 \text{ mol/L}$ y volumen del reactor $V = 29,53 \text{ L}$.

El volumen total del sistema o volumen óptimo resulta $V_t = 147,65 \text{ Ls}$ que es menor a 150 litros utilizado en la parte (a).

Caso 2: Reacción con exceso de reactivo

Para una reacción de segundo orden con exceso de reactante: $A + 2B \rightarrow R$

Donde: $-r_A = kC_A C_B$

La alimentación consiste de $C_{A0} = 0,3$ y $C_{B0} = 1,5 \text{ mol/L}$ respectivamente. El caudal y la constante cinética son las mismas que en el caso 1.

Según el balance estequiométrico se tiene:

$$C_A = C_{A0}(1 - X) \text{ y } C_B = C_{A0}(5 - 2X)$$

Luego, $C_B = 0,9 + 2C_A$

Reemplazando en el balance de materia:

$$F_{A0} - F_A = -r_A V = kC_A(0,9 + 2C_A)$$

$$C_{A0} - C_A = k\tau C_A(0,9 + 2C_A)$$

Ordenando,

$$2k\tau C_A^2 + 0,9k\tau C_A = C_{A0} - C_A$$

$$2k\tau C_A^2 + (1 + 0,9k\tau)C_A - C_{A0} = 0$$

Resolviendo la ecuación cuadrática:

$$C_A = \frac{-(1 + 0,9k\tau) + \sqrt{(1 + 0,9k\tau)^2 + 8k\tau C_{A0}}}{4k\tau}$$

Primer reactor:

$$C_{A1} = \frac{-(1 + 0,9k\tau_1) + \sqrt{(1 + 0,9k\tau_1)^2 + 8k\tau_1 C_{A0}}}{4k\tau_1}$$

$$\tau_1 = \frac{V_1}{v_0}$$

Segundo reactor:

$$C_{A2} = \frac{-(1 + 0,9k\tau_2) + \sqrt{(1 + 0,9k\tau_2)^2 + 8k\tau_2 C_{A1}}}{4k\tau_2}$$

$$\tau_2 = \frac{V_2}{v_0}$$



Tercer reactor:

$$C_{A3} = \frac{-(1 + 0,9k\tau_3) + \sqrt{(1 + 0,9k\tau_3)^2 + 8k\tau_3 C_{A2}}}{4k\tau_3} \quad \tau_3 = \frac{V_3}{v_0}$$

Cuarto reactor:

$$C_{A4} = \frac{-(1 + 0,9k\tau_4) + \sqrt{(1 + 0,9k\tau_4)^2 + 8k\tau_4 C_{A3}}}{4k\tau_4} \quad \tau_4 = \frac{V_4}{v_0}$$

Quinto reactor

$$C_{A5} = \frac{-(1 + 0,9k\tau_5) + \sqrt{(1 + 0,9k\tau_5)^2 + 8k\tau_5 C_{A4}}}{4k\tau_5} \quad \tau_5 = \frac{V_5}{v_0}$$

Algoritmo de cálculo

El procedimiento de cálculo de las ecuaciones es:

- 1.- Conociendo τ_1 y la concentración inicial C_{A0} se determina C_{A1}
- 2.- Conociendo τ_2 y la concentración del primer reactor C_{A1} se determina C_{A2}
- 3.- Así sucesivamente hasta el quinto reactor.
- 4.- Luego se calcula la conversión de salida del quinto reactor:

$$X_5 = 1 - \frac{C_{A5}}{C_{A0}}$$

Utilizando el excel esto se verifica como:

$$C_{A5} = 0,00048124 \quad X_5 = 0,998396$$

Para resolver la parte (b) donde todos los reactores son del mismo tamaño, es decir:

$$\tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau$$

Se desea obtener el tamaño de cada reactor para la misma conversión obtenida en (a). Las ecuaciones que describen la concentración de cada reactor son:

Primer reactor:
$$C_{A1} = \frac{-(1+0,9k\tau) + \sqrt{(1+0,9k\tau)^2 + 8k\tau C_{A0}}}{4k\tau}$$

Segundo reactor:
$$C_{A2} = \frac{-(1+0,9k\tau) + \sqrt{(1+0,9k\tau)^2 + 8k\tau C_{A1}}}{4k\tau}$$

Tercer reactor:
$$C_{A3} = \frac{-(1+0,9k\tau) + \sqrt{(1+0,9k\tau)^2 + 8k\tau C_{A2}}}{4k\tau}$$

Cuarto reactor:
$$C_{A4} = \frac{-(1+0,9k\tau) + \sqrt{(1+0,9k\tau)^2 + 8k\tau C_{A3}}}{4k\tau}$$

Quinto reactor:
$$C_{A5} = \frac{-(1+0,9k\tau) + \sqrt{(1+0,9k\tau)^2 + 8k\tau C_{A4}}}{4k\tau}$$

Para resolver el sistema de ecuaciones planteadas para cada reactor se sigue el siguiente procedimiento iterativo:

- 1.- Se propone un valor de τ y se calcula la concentración C_{A1}
- 2.- Luego se determinan las concentraciones C_{A2}, C_{A3}, C_{A4} y C_{A5} utilizando las ecuaciones respectivas.
- 3.- Se verifica si el valor de la concentración C_{A5} es lo esperado, sino se modifica el valor de τ
- 4.- El procedimiento iterativo continúa hasta que dos valores de C_{A5} sean las mismas.

Utilizando el excel se verifica que:

$$C_{A5} = 0,00048129 \frac{\text{mol}}{\text{L}}; X_5 = 0,998396, \text{ y } \tau = 5,5729$$

Para un caudal de 0,5 L/s se obtienen:

$$V = 27,8645 \text{ L. y } V_t = 139,32 \text{ Ls}$$

El volumen total del sistema o volumen óptimo resulta $V_t = 139,32 \text{ Ls}$ que es menor a 150 litros utilizado en la parte (a).

Caso 3: Reactores combinados en serie

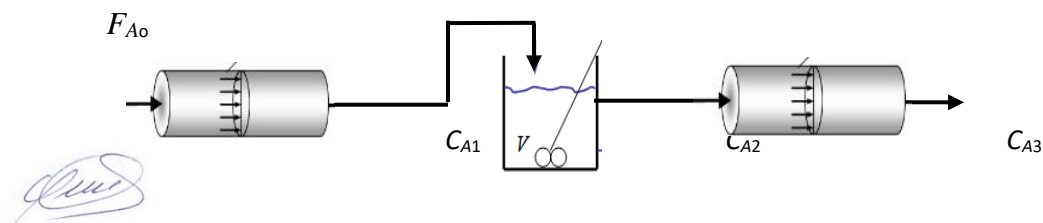
Para la misma reacción del caso 2 pero utilizando en este caso dos reactores PFR y un reactor CSTR conectados en serie. ¿Cuál será la configuración que proporciona el menor volumen posible?

Reacción: $A + 2B \rightarrow R$

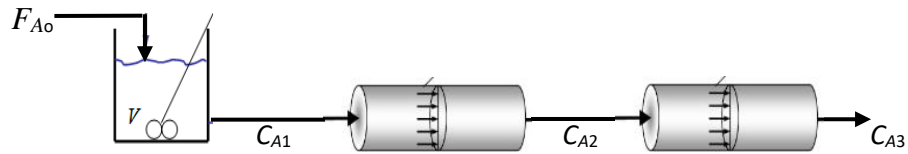
Donde: $-r_A = kC_A C_B$

La alimentación consiste de $C_{A0} = 0,3$ y $C_{B0} = 1,5$ mol/L respectivamente. El caudal y la constante cinética son las mismas que en el caso 1.

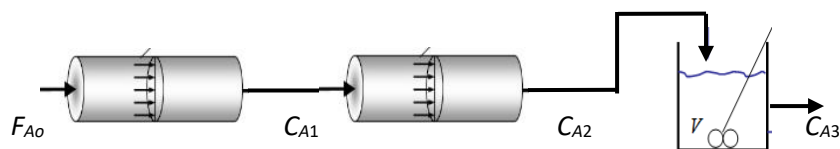
Esquema 1



Esquema 2



Esquema 3



Para el esquema 1:

Primer reactor PFR: ecuación de diseño

$$\tau_1 = \frac{1}{kC_{A0}} \left[\frac{1}{3} \ln \left(\frac{5-2X_1}{5(1-X_1)} \right) \right] \quad (a)$$

Segundo reactor CSTR: ecuación de diseño

$$\tau_2 = \frac{1}{kC_{A0}} \frac{X_{A2} - X_{A1}}{(1-X_{A2})(5-2X_2)} \quad (b)$$

Tercer reactor PFR: ecuación de diseño

$$\tau_2 = \frac{1}{3kC_{A0}} \left[\ln \left(\frac{5-2X_3}{(1-X_3)} \right) - \ln \left(\frac{5-2X_2}{(1-X_2)} \right) \right] \quad (c)$$

Algoritmo de cálculo

Se conocen \$C_{A0}\$, \$X_3\$ y la constante cinética \$k\$, además todos los tanques son del mismo tamaño entonces, el procedimiento de cálculo de las ecuaciones es:

- 1.- Se propone un valor de \$X_1\$ y se determina \$\tau\$ usando la ecuación (a)
- 2.- Conociendo \$X_3\$ y el valor de \$\tau\$ se determina \$X_2\$ usando la ecuación (c)
- 3.- Se propone una función objetivo a la ecuación (b) cuya diferencia debe ser cero.

Utilizando el excel esto se verifica que:

$$X_1 = 0,94145; \quad X_2 = 0,98274; \quad \tau = 5,2563 \quad \text{y} \quad X_3 = 0,998396$$

Para resolver el esquema 2 las ecuaciones (a), (b) y (c) cambian como sigue:

Primer reactor CSTR: ecuación de diseño

$$\tau_1 = \frac{1}{kC_{A0}} \frac{X_1}{(1-X_1)(5-2X_1)} \quad (\text{a})$$

Segundo reactor PFR: ecuación de diseño

$$\tau_2 = \frac{1}{3kC_{A0}} \left[\ln \left(\frac{5-2X_2}{1-X_2} \right) - \ln \left(\frac{5-2X_1}{1-X_1} \right) \right] \quad (\text{b})$$

Tercer reactor PFR: ecuación de diseño

$$\tau_2 = \frac{1}{3kC_{A0}} \left[\ln \left(\frac{5-2X_3}{1-X_3} \right) - \ln \left(\frac{5-2X_2}{1-X_2} \right) \right] \quad (\text{c})$$

En este caso la secuencia de la solución iterativa es:

- 1.- Se propone un valor de X_1 y se determina τ usando la ecuación (a)
- 2.- Usando la ecuación (b) se determina el valor de X_2
- 3.- Se propone una función objetivo a la ecuación (c) cuya diferencia debe ser cero para el valor de X_3 propuesto.

Utilizando el excel se verifica que:

$$X_1 = 0,74247; \quad X_2 = 0,980995; \quad \tau = 5,467982 \quad \text{y} \quad X_3 = 0,998396$$

Para resolver el esquema 3 se modifican las ecuaciones (a), (b) y (c) y se plantea una solución iterativa cuyos resultados usando el excel resultado:

$$X_1 = 0,9410; \quad X_2 = 0,99461; \quad \tau = 5,239937 \quad \text{y} \quad X_3 = 0,998396$$

El menor volumen del sistema corresponde al tercer esquema donde para un caudal de 5 L/ s el tamaño de cada reactor será de 26,2815 litros. El volumen total de la batería es de 78,8445 litros.

5.2 Resultados inferenciales

En el presente trabajo no corresponde



VI. DISCUSION DE RESULTADOS

6.1 Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados

El desarrollo del problema ejemplo muestra que para reacciones de segundo orden sin exceso de reactivo o con exceso de reactivo se pueden encontrar soluciones analíticas. Para el efecto se plantean el sistema de ecuaciones y se elabora algoritmos que pueden resolverse analíticamente. Para el caso se recurrió al software excel.

Los resultados del caso 1 y 2 también indican que para reacciones de 2do orden la minimización del tamaño del sistema de reactores CSTR conectados en serie se da para reactores del mismo tamaño. Así para un volumen total de 150 litros se obtienen conversiones de 76,8525% para el caso 1 y de 99,8396 % para el caso 2. Mientras que estos mismos resultados se obtendrían utilizando reactores del mismo tamaño que resultan con un volumen total de 147,65 litros y de 139.32 litros para los casos 1 y 2 respectivamente.

Por otro lado se buscó la mejor configuración de una batería conformada por dos reactores tubulares PFR y un reactor CSTR. Para el efecto se presentaron tres alternativas de los esquemas 1, 2 y 3. El sistema que presenta un menor volumen total es el esquema 3 conformado por 2 reactores FPR en serie seguido de un CSTR del mismo tamaño. El volumen de cada reactor es de 26,2815 litros, siendo el volumen total de 78,8445 litros para lograr una conversión final de 99,8396%.

6.2 Contrastación de resultados con otros estudios similares

Los resultados son concordantes con las demostraciones de Elizalde et al. (2013) que indican que el volumen mínimo de una batería de reactores CSTR instalados en serie se da cuando los reactores son del mismo tamaño. Aunque los autores demostraron para reacciones de primer orden, sin embargo los resultados de este trabajo demuestran que también se cumple para reacciones de segundo orden con reactivo sin exceso y con exceso.



6.3 Responsabilidad ética de acuerdo a los reglamentos vigentes.

El autor de la investigación se responsabiliza por la información emitida en el presente trabajo de investigación de acuerdo al Reglamento del Código de Ética de la Investigación de la Universidad Nacional del Callao, Resolución de Consejo Universitario N° 260-2019-CU.

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'J. M. S.', located in the lower-left quadrant of the page.

CONCLUSIONES

Se ha demostrado un procedimiento analítico para determinar el tamaño óptimo de reactores CSTRs instalados en serie que operan isotérmicamente donde se efectúan una reacción de segundo orden en fase líquida.

El método de optimización involucra la minimización del volumen total de un sistema de reactores CSTR en serie. Se ha utilizado un sistema en serie de cinco reactores CSTR donde la concentración inicial a la entrada del primer reactor y a la salida del último es conocida. Utilizando un procedimiento iterativo y con la ayuda del software Excel se resolvieron el sistema de ecuaciones. Los resultados indican que la minimización del volumen total del sistema de reactores CSTR conectados en serie se da cuando todos los reactores son del mismo tamaño. Así para el sistema de cinco reactores CSTR con un volumen total de 150 litros se obtuvo una conversión de 76,852 % para una cinética de segundo orden sin exceso de reactivo y de 99,839% para una cinética con exceso de reactivo. Utilizando reactores del mismo tamaño se obtuvieron un volumen total de 147,65 litros y de 139.32 litros respectivamente para las mismas conversiones indicadas. Por otro lado, el procedimiento reportado en este trabajo es válido para cualquier número de reactores CSTR con reacciones de segundo orden sin y con exceso de reactivo.

Por otro lado se evaluó un sistema combinado conformada por dos reactores tubulares PFR y un reactor CSTR. Para el efecto se presentaron tres alternativas de esquemas. El esquema que presenta un menor volumen total es el conformado por 2 reactores PFR en serie seguido de un CSTR del mismo tamaño. El volumen de cada reactor es de 26,2815 litros, siendo el volumen total de 78,844 litros para lograr la conversión final de 99,839% de una cinética con exceso de reactivo.



RECOMENDACIONES

Se sugiere desarrollar un procedimiento analítico para determinar el tamaño óptimo de reactores CSTRs instalados en serie que operan adiabáticamente para reacciones de segundo orden sin y con exceso de reactivo en fase líquida.

Se propone hacer extensivo la minimización del volumen total de una batería de reactores combinados PFR y CSTR isotérmicamente y adiabáticamente en fase líquida y para reacciones de segundo orden.

Utilizar el concepto de optimización de un sistema de reactores CSTR conectados en serie para reacciones de sistemas heterogéneos.



REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Castro A., De Miguel S., Garetto T., Sad M., (2011). Reactores Químicos: Curso introductorio, UNL-Argentina. Ediciones UNL.
- Cunill F., Iborra M., Tejero J. (2010). Apuntes de Reactores Químicos. Universidad Barcelona. Cap. 3 y 4
- Del Toro Álvarez D., Pons Hernández D., Viera Bertrán D., Emasabe Monier Z. (2015). Modelo matemático para una batería de cinco reactores continuos con agitación. Segunda parte. Tecnología Química, versión On-line ISSN 2224-6185. Vol. 35. Universidad de Oriente Santiago de Cuba.
- Elizalde I., Ramírez R., y Ancheyta J., (2013). Solución analítica para obtener el volumen óptimo de una serie de reactores de agitación continua donde se efectúa una reacción de primer orden. Avances en Ciencias e Ingeniería- ISSN: 0718-8706, pp. 51-59.
- Fogler Scott (2001). Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas. 3ra edición, México 2001
- Gonzales Quiroga, A., Costa, A.C., y Maciel Filho, R., (2009). Modelamiento y Simulación de una serie de CSTR'S con alimentación distribuida para la Hidrolisis Enzimática de Bagazo de Caña. Laboratorio de Otimização, Proyecto e Controle Avançado. LOPCA UNICAMP. Laboratorio de Engenharia de Processos Fermentativos e Enzimáticos LEPFE UNICAMP.
- Levenspiel, O. (1974). Ingeniería de las Reacciones Químicas. Editorial Reverte. S.A. Barcelona.
- Levenspiel, O. (1999). Design for single reactions, In Chemical Reaction Engineering. 3 rd edit. John Wiley & Sons, USA.



- Marafi, A., Stanislaus, A. & Furimsky, E. (2010). Kinetics and modeling of petroleum residues hydroprocessing. *Catal. Rev.*, 52 (2) 204-324.
- Mederos, F.S., Elizalde, I. & Ancheyta, J. (2009). Steady-state and dynamic reactor models for hydrotreating of oil fractions: A review. *Catal. Rev.*, 51 (4) 485-607.
- Medina Valtierra Jorge (1994). Diseño óptimo de tres reactores Biocatalíticos en serie mediante un método numérico. *Investigación y Ciencia de la Universidad Autónoma de Aguascalientes*. ISSN-e 1665-4412, N° 13, pp. 68-73.
- Medina Valtierra Jorge (1990) "Diseño óptimo de reactores Bioquímicos mediante el método gráfico directo". *Investigación y Ciencia de la Universidad Autónoma de Aguascalientes*, pp. 54-58.
- Ramírez López R., Hernández Pérez I. (2014). *Diseño de Reactores Homogéneos*. Editorial CENGAGE Learning, México (2014).
- Santa María J., Herguido J. y Menéndez M., (1999). *Ingeniería de Reactores*, Ed. Síntesis, Madrid, España. Pp 54-59.
- Soto Garay Clareobaldo Junior, (2015). Tesis: Modelamiento y Estudio del comportamiento y Aplicación de la variable tiempo en un reactor continuo (CSTR). Universidad Nacional de Piura. Facultad de ingeniería de Minas. Escuela Profesional de Ingeniería Química.
- Tiscareño Lechuga F. (2008). *Reactores Químicos con Multireacción*, Editorial Reverte, México.
- Wasserman (1936). Estudio de la reacción de Diels-Alder entre la benzoquinona (B) y el ciclopentadieno (C) a 25°C. *J. Chem. Soc.* p. 1028.



ANEXO 1: MATRIZ DE CONSISTENCIA.

“Diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie con reacciones de segundo orden”

PROBLEMA GENERAL	OBJETIVO GENERAL	HIPÓTESIS GENERAL	VARIABLE DEPENDIENTE	DIMENSIONES	INDICADORES	MÉTODO
¿Se podrá encontrar un diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie, para reacciones de segundo orden?	Obtener el diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie para reacciones de segundo orden.	El diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie consiste en la minimización del volumen del sistema. Este volumen mínimo se da cuando todos los reactores son del mismo tamaño.	$Y = \text{Volumen total del sistema}$ $Y = f(X_1, X_2)$	Volumen	Litros o M^3 .	Analítico
PROBLEMAS ESPECÍFICOS	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	HIPÓTESIS ESPECÍFICAS	VARIABLES INDEPENDIENTES	DIMENSIONES	INDICADORES	MÉTODO
¿En que consiste el diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie?	Encontrar el diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie.	El diseño óptimo de un sistema de reactores continuos instalados en serie, consiste en la minimización del volumen total del sistema, y se da cuando los reactores son del mismo tamaño.	$X_1 = \text{número de reactores instalados en serie}$	Cantidad de reactores continuos: 1, 2 3... reactores	Reactores: PFR, y CSTR.	Analítico
¿El conjunto de expresiones que describen la conversión a la salida de un sistema de reactores continuos instalados en serie con reacciones de segundo orden, podrán ser resueltas analíticamente?	Obtener soluciones analíticas del conjunto de ecuaciones que describen la conversión de salida de un sistema de reactores instalados en serie con reacciones de segundo orden.	Se elaboran algoritmos que permitan encontrar soluciones analíticas en un sistema de reactores instalados en serie, para cinéticas de reacción de segundo orden.	$X_2 = \text{número de configuraciones de reactores continuos CSTR y PFR instalados en serie con reacciones de segundo orden.}$	Configuraciones de reactores: CSTRs y de sistemas CSTRs y PFRs	Configuración óptima: menor volumen	Analítico

ANEXO 2: Programación en Excel para cinética de segundo orden sin reactivo en exceso

Ejemplo:

Reaccion	$A \rightarrow R$	ec. cinetica	$-r_A = kC_A^2$
CAo	0.3		
CBo	1.5		
vo (L/s)	5		
k (L/mol s)	0.5	tau	
V1	10		2
V2	20		4
V3	30		6
V4	40		8
V5	50		10

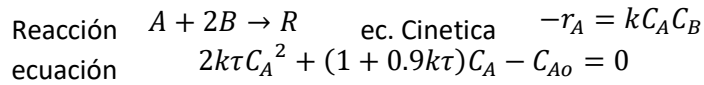
calculo iterativo

CA1	0.241619849	X1	0.1946005
CA2	0.178147083	X2	0.40617639
CA3	0.128562293	X3	0.57145902
CA4	0.093553365	X4	0.68815545
CA5	0.069442241	X5	0.76852586

Si todos los reactores son del mismo tamaño

tau	5.906
CA1	0.191597052
CA2	0.136542085
CA3	0.104372951
CA4	0.083690061
CA5	0.069447765
F(obj)	-5.5254E-06

ANEXO 3: Programación en Excel para cinética de segundo orden con reactivo en exceso



calculo iterativo

k (L/mol s)	0.5	tau	(1+0.9ktau)
V1	10	2	1.9
V2	20	4	2.8
V3	30	6	3.7
V4	40	8	4.6
V5	50	10	5.5

CA1	0.137882534	X1	0.54039155
CA2	0.046195196	x2	0.84601601
CA3	0.012242155	x3	0.95919282
CA4	0.002649133	x4	0.99116956
CA5	0.000481239	x5	0.99839587

Si todos los reactores son del mismo tamaño

tau	5.5729		
CA1	0.076279528	X1	0.74573491
CA2	0.021042215	X2	0.92985928
CA3	0.00594258	X3	0.9801914
CA4	0.001689567	X4	0.99436811
CA5	0.000481291	X5	0.9983957
F(obj)	-5.232E-08		