

Estudio experimental del tipo de flujo en un reactor tanque continuo agitado

POR

ANTONIO BODALO SANTOYO,
JOSE LUIS GOMEZ CARRASCO,
JOSEFA BASTIDA RODRIGUEZ
y ELISA GOMEZ GOMEZ

RESUMEN

En el presente trabajo, se estudia el tipo de flujo de un reactor de laboratorio, tipo tanque continuo agitado, en función de las condiciones de operación, determinando la región en que se aproxima a flujo ideal, a fin de poder utilizarlo en posteriores estudios cinéticos.

INTRODUCCION

Los datos experimentales de velocidad de reacción, se obtienen a partir de experimentos realizados en pequeños reactores a escala de laboratorio ó de planta piloto. Estos reactores químicos, según Bodenstein y Wolgast (1), admiten dos situaciones extremas de flujo ideal: el Flujo en Pistón y el Flujo en Mezcla Completa. Las situaciones intermedias a estos dos modelos ideales de flujo, fueron estudiadas con un modelo denominado de Dispersión Axial por Forster y Geib (2) y continuado por Damkohler (3).

Se puede predecir el comportamiento de un reactor, si se dispone de una representación completa de la distribución de velocidades del



fluido en el interior del mismo. En realidad, en muchos casos, basta con conocer cuánto tiempo permanece cada una de las moléculas en el recipiente, o más exactamente la distribución de «tiempos de residencia» o RTD de la corriente de fluido.

El «tiempo de residencia» de un elemento de fluido es el tiempo que transcurre desde el instante en que el elemento entra en el recipiente hasta que lo abandona.

La distribución de tiempos de residencia puede determinarse de manera fácil y directa por un método de investigación empleado ampliamente: el método de estímulo-respuesta; con esta técnica se excita al sistema mediante una perturbación y se ve cómo responde a este estímulo. En este tipo de investigación el estímulo es una inyección de trazador en el fluido que entra en el recipiente, mientras que la respuesta es una representación del mismo a la salida frente al tiempo.

Puede emplearse como trazador cualquier sustancia que se pueda detectar (un compuesto radiactivo, un colorante, una solución eléctricamente conductora, etc.), y que no perturbe el tipo de flujo en el recipiente (es decir, que tenga la misma densidad, viscosidad, etc.).

En 1953, Danckwerts (4), fue el primer investigador que abordó la interpretación y desarrollo de la mayoría de los métodos aplicables para conocer el modelo de flujo de un reactor a partir de la RTD. Las aportaciones posteriores más importantes se deben a Bischoff y McCracken (5), Levenspiel, Lai y Chatlyne (6) y Levenspiel y Turner (7), en general, casi toda la información importante sobre el tema se encuentra recopilada en los libros de Himmelblau y Bischoff (8), Kramers y Westerterp (9) y Levenspiel (10).

Cuando la corriente de fluido que entra al reactor no contiene trazador alguno, y se le impone una señal trazadora en escalón, de concentración C_0 , se denomina curva F a la curva representativa de la concentración de trazador a la salida del recipiente frente al tiempo. Se mide esta concentración a la salida en función de la concentración a la entrada, y la representación del cociente C/C_0 frente al tiempo adimensional θ (que se obtiene al dividir el tiempo por el «tiempo medio de residencia»), es siempre una función creciente desde 0 hasta 1, tal como se aprecia en la figura 1.

Cuando la corriente de fluido que entra al recipiente no contiene trazador alguno, y se le impone una señal en impulso idealizada de trazador, se denomina curva C a la representación adimensional de C frente a θ (figura 2).

La concentración de referencia en este caso, C_0 , es la que tendría el

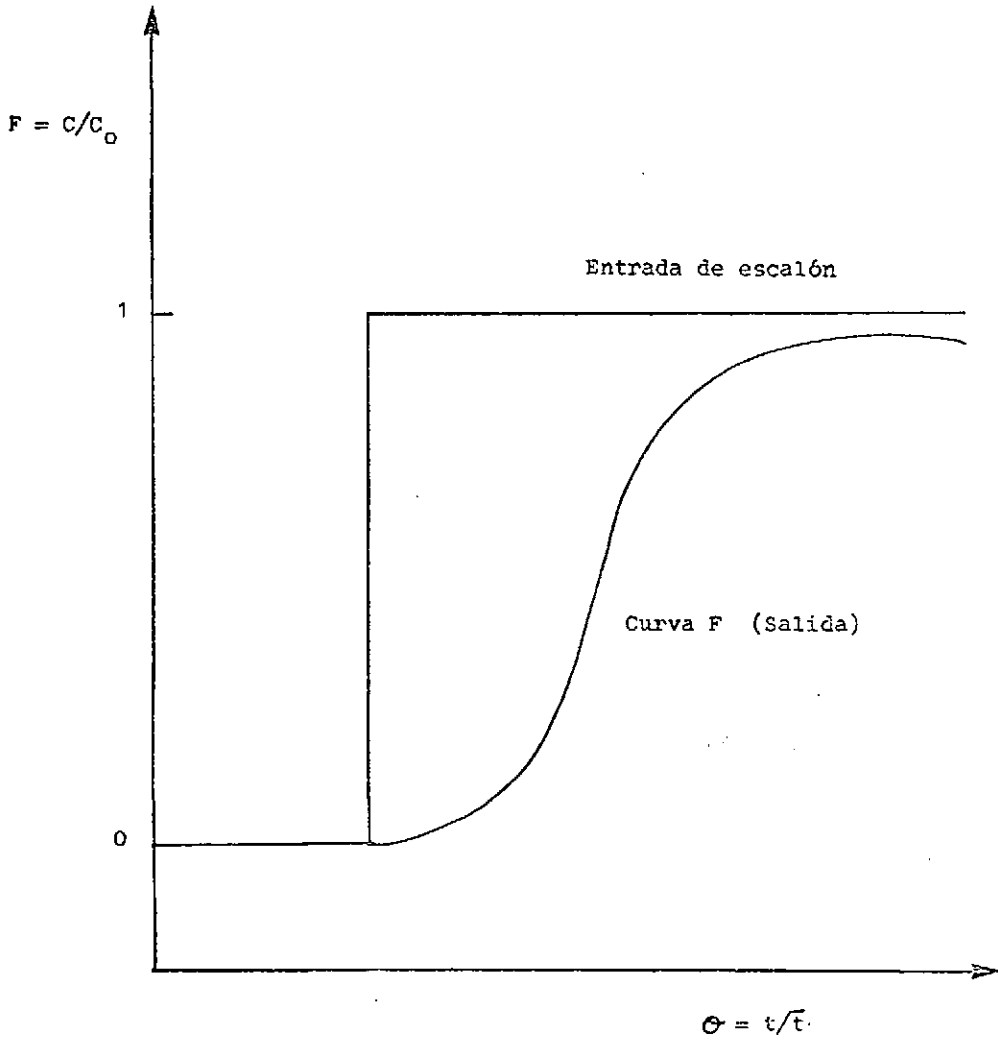


FIGURA 1



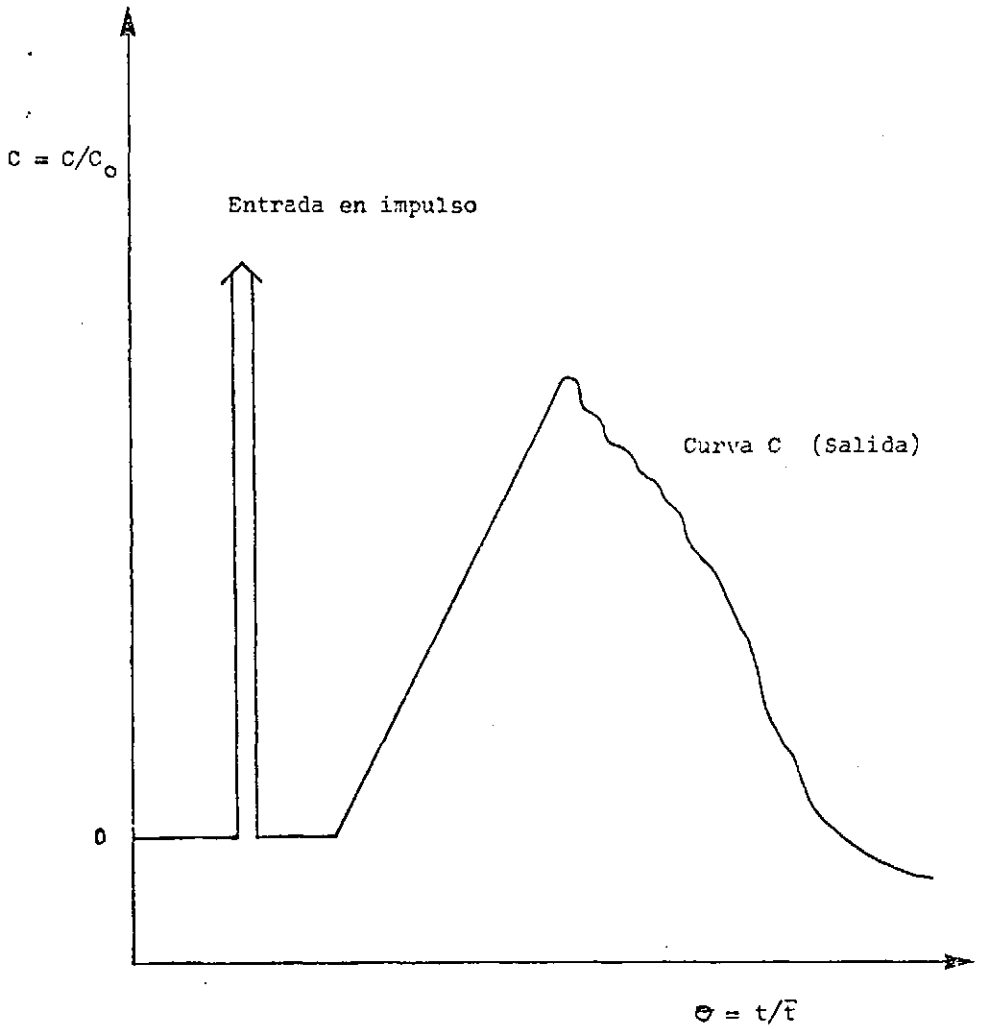


FIGURA 2

trazador si estuviese uniformemente distribuido en todo el tanque. Con esta elección de variables el área bajo la curva es siempre igual a la unidad:

$$\int_0^{\infty} C(\theta) d\theta = 1 \quad [1]$$

Se puede comprobar que un impulso es la derivada de una función en escalón:

$$C(\theta) = \frac{dF(\theta)}{d\theta} \quad [2]$$

Para un reactor tanque de mezcla completa puede demostrarse que las funciones C y F valen, respectivamente:

$$C(\theta) = e^{-t/\bar{t}} \quad [3]$$

$$F(\theta) = 1 - e^{-t/\bar{t}} \quad [4]$$

La función de intensidad $\Lambda(\theta)$ fue introducida por Naor y Shinnar (11), y se define como la fracción de fluido de edad t contenido en el recipiente que lo abandona en un tiempo comprendido entre t y $t + dt$. Se deduce que, para una entrada del trazador en impulso, es:

$$\Lambda(\theta) = \frac{C(\theta)}{1 - \int_0^{\theta} C(\theta) d\theta} \quad [5]$$

y para una función en escalón:

$$\Lambda(\theta) = \frac{dF(\theta)/d\theta}{1 - F(\theta)} \quad [6]$$

PARTE EXPERIMENTAL

El dispositivo experimental calibrado en el presente trabajo, consta de un reactor de vidrio PYREX, figura 3, encamisado, con un volumen total de 10 litros y un volumen efectivo, sin tener en cuenta la camisa, de 5 litros. En la parte superior dispone de cuatro bocas para entrada de alimentación, inyección del trazador, control de temperatura y agitación, respectivamente, y una salida para descarga en la parte inferior, regulable mediante una llave de teflón.

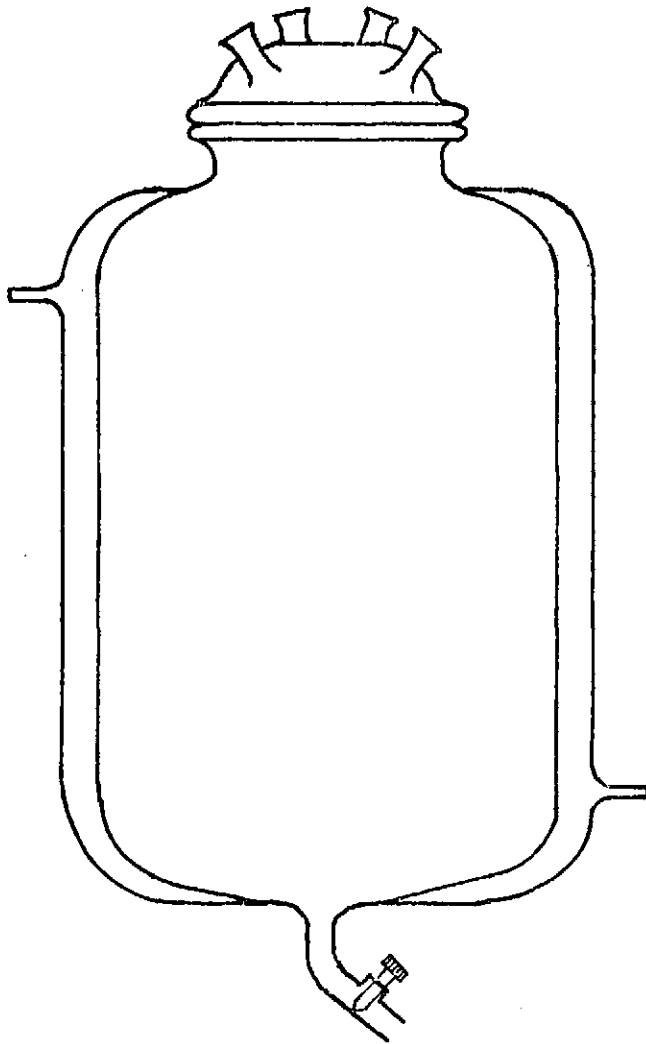


FIGURA 3

Se han ensayado distintos tipos de trazadores con el fin de seleccionar el más adecuado a las condiciones de trabajo, y a la vista de los resultados obtenidos en los experimentos realizados, se ha utilizado como sustancia trazadora ClH y se ha detectado midiendo la conductividad, de forma continua, en la corriente de salida. Para ello se ha utilizado un conductímetro CRISON con una célula para flujo continuo,

figura 4, al que se le ha acoplado una impresora térmica numérica. Entre ambos elementos se ha intercalado un temporizador que cronometra las impresiones de los valores de conductividad medidos. Con todo este sistema de medida y registro, se han podido obtener valores de conductividad a tiempos perfectamente conocidos, considerando tiempo cero el instante de la inyección del trazador.

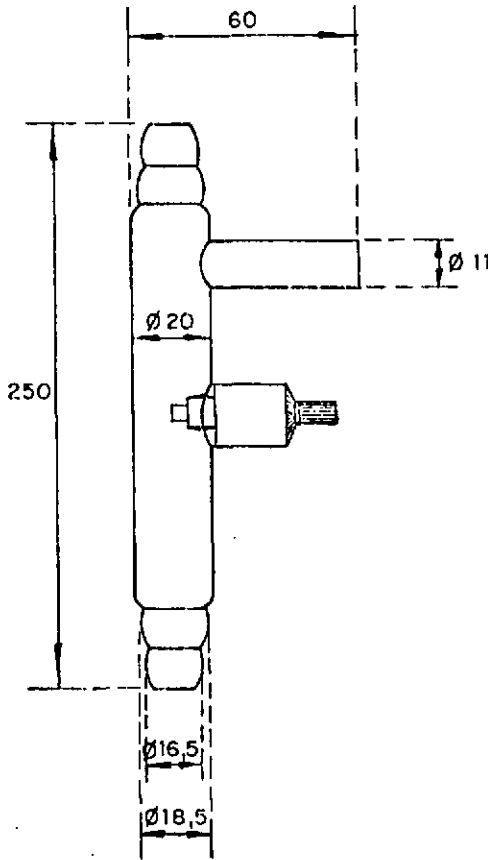


FIGURA 4

En la figura 5, se observa el dispositivo utilizado en los ensayos con entrada de trazador en impulso. El reactor, está alimentado con una corriente de agua que proviene de un depósito; dos rotámetros miden

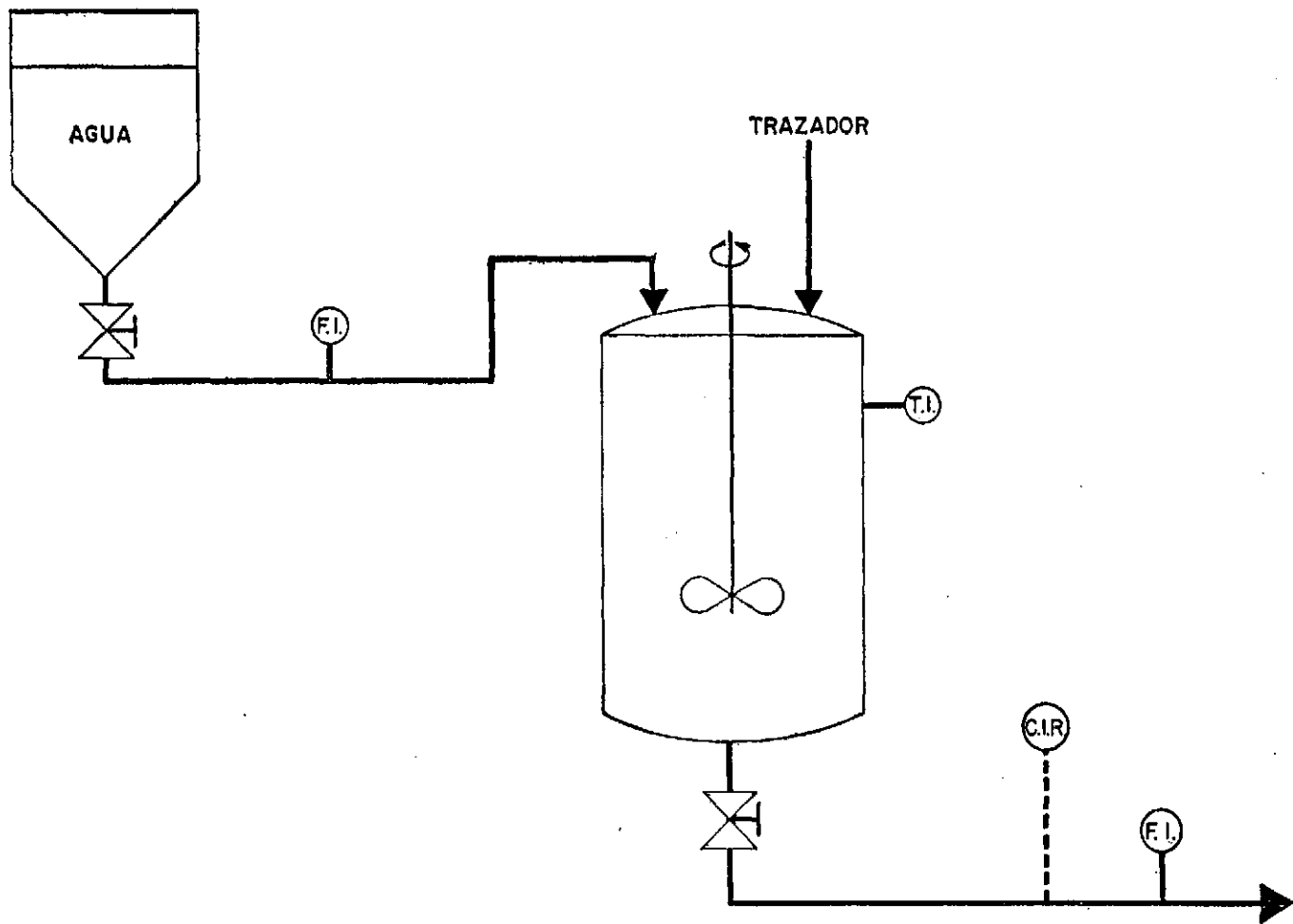


FIGURA 5

los caudales de entrada y salida del reactor; la inyección de trazador, se realiza de forma prácticamente instantánea por una de las bocas superiores del reactor.

En la figura 6, se observa el dispositivo utilizado en los ensayos con entrada del trazador en escalón, en el que se ha colocado un depósito adicional con disolución de ClH de concentración conocida, que mediante una llave de tres vías se puede introducir en el reactor, sustituyendo la corriente de entrada que lo alimentaba.

En ambos dispositivos, en la parte inferior, se encuentra la célula de conductividad conectada a los correspondientes aparatos de medida y registro.

Se han efectuado dos series distintas de ensayos, una introduciendo el trazador en el sistema con una inyección en impulso con caudales variables entre 20 y 90 l/hr, y otra usando una entrada en escalón, con caudales comprendidos entre 20 y 70 l/hr.

RESULTADOS Y DISCUSION

Con estos ensayos, se han obtenido los valores de conductividad de la corriente efluente del reactor a distintos tiempos de operación. A partir de la conductividad se calcula la concentración de trazador, para lo cual se dispone de las correspondientes curvas de calibrado conductividad-concentración, y se construyen las curvas C y F correspondientes. A título de ejemplo se incluyen (figuras 7 y 8) una curva C y una F de entre las obtenidas.

A la vista de la forma general que presentan las curvas experimentales C y F obtenidas, y dado que todos los ensayos se realizaron buscando las condiciones idóneas que hacían que el dispositivo experimental utilizado se comportara como un reactor tanque de mezcla completa, se trata ahora de buscar un modelo para flujo no ideal que se acomode a los resultados obtenidos, o bien que confirme de modo cuantitativo la aproximación a la idealidad buscada.

Como paso previo a la aplicación de un modelo más elaborado, es conveniente llegar a conocer el nivel de aproximación al flujo ideal del sistema en estudio, lo que puede conseguirse mediante una evaluación de la función de intensidad $\Lambda(\theta)$.

Haciendo uso de las ecuaciones 5 y 6 se ha calculado la función $\Lambda(\theta)$, tanto en el caso de una entrada en impulso como de una entrada en escalón, para todas las situaciones experimentales ensayadas. A modo de ejemplo se incluye una tabla de $\Lambda(\theta)$ (tabla 1).

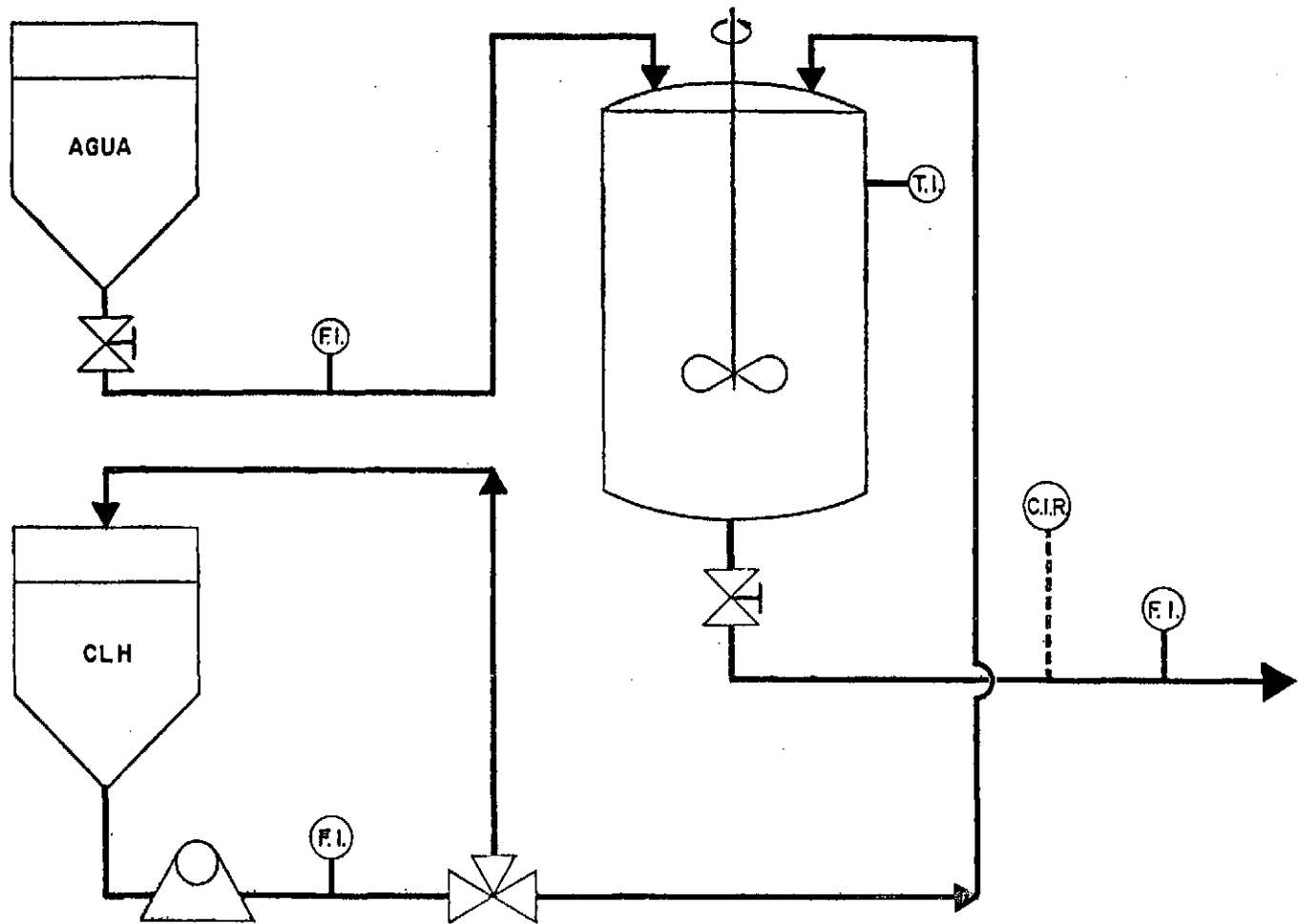


FIGURA 6

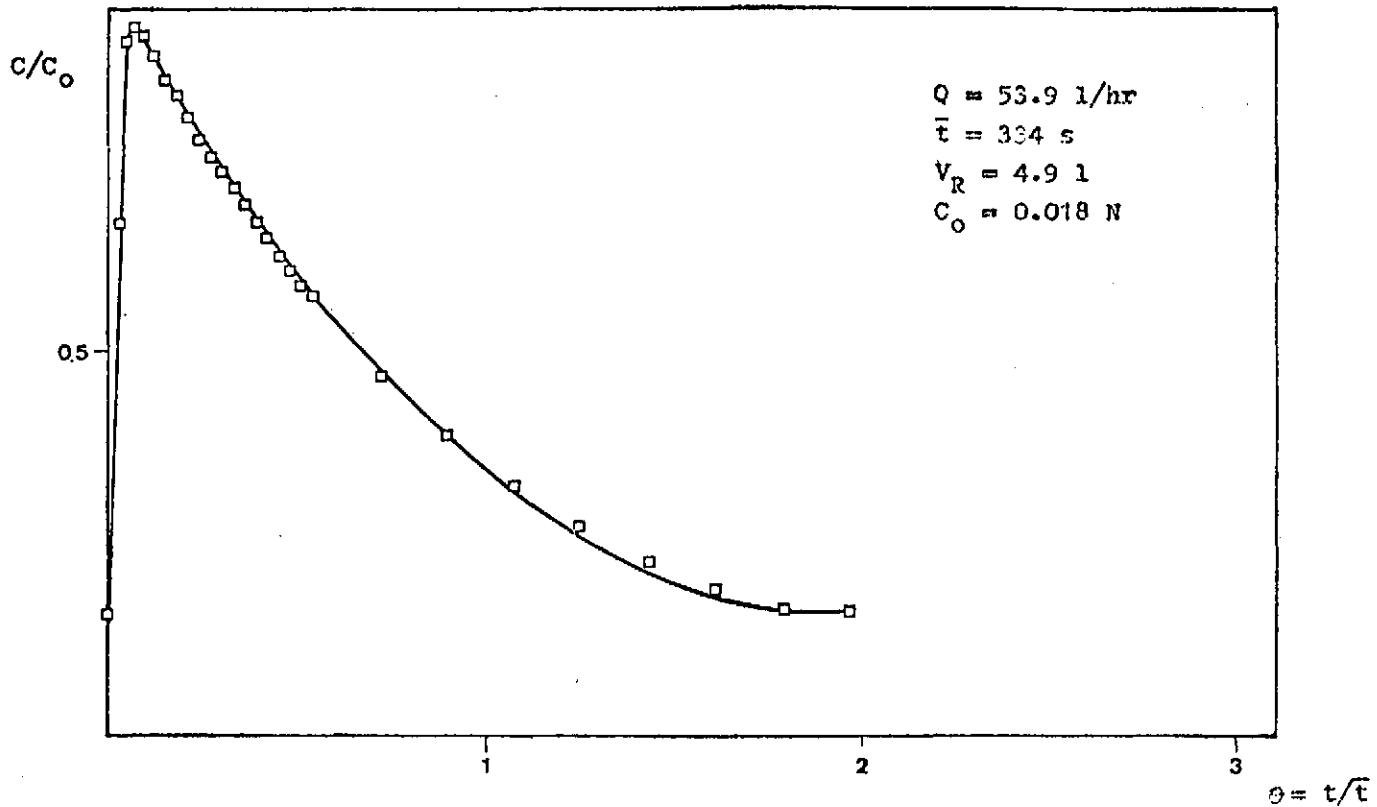


FIGURA 7

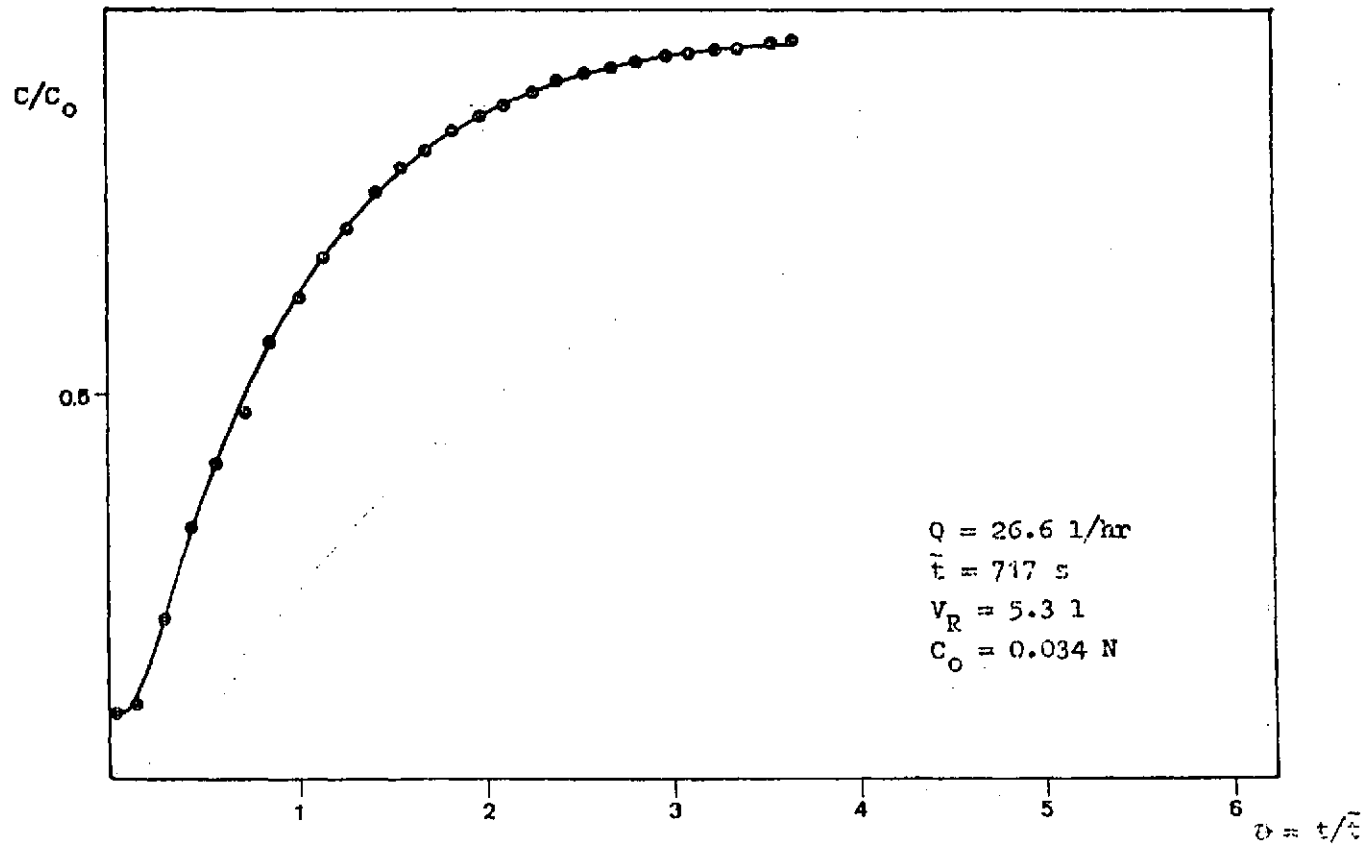


FIGURA 8

TABLA 1

θ	C/C_0	$\Lambda(\theta)$
0.01	0.142	
0.01	0.142	0.142
0.02	0.258	0.259
0.03	0.604	0.607
0.04	0.796	0.805
0.04	0.879	0.894
0.05	0.906	0.928
0.06	0.928	0.957
0.07	0.928	0.963
0.07	0.939	0.982
0.11	0.922	0.999
0.15	0.890	1.001
0.18	0.857	0.999
0.22	0.824	0.996
0.26	0.796	0.998
0.29	0.769	1.000
0.33	0.741	0.999
0.36	0.714	0.999
0.44	0.659	0.991
0.51	0.615	0.994
0.58	0.571	0.993
0.63	0.545	0.989
0.85	0.435	0.980
1.06	0.342	0.953
1.28	0.271	0.929
1.50	0.212	0.887
1.72	0.167	0.846
1.94	0.154	0.948
2.16	0.152	1.179

A la vista de los resultados obtenidos, se puede observar que la función de intensidad $\Lambda(\theta)$ tiene siempre un valor muy próximo a 1, que es el valor que debe tener dicha función para un reactor tanque de mezcla completa, con lo cual se prueba la gran aproximación a flujo ideal del sistema con el que se ha experimentado.

El modelo de tanques en serie es uno de los modelos de un parámetro, de uso más extendido para representar el flujo no ideal. En este modelo se supone que el reactor puede representarse por varios tanques en serie de mezcla completa, del mismo tamaño, y el único parámetro es el número de tanques.

A la vista de los resultados obtenidos para la función de intensidad $\Lambda(\theta)$, parece lógico al aplicar el modelo de tanques en serie, suponer un sólo tanque.

Haciendo uso de las ecuaciones 3 y 4, se han calculado las curvas C y F teóricas. Comparando los valores de C/C_0 teórico y C/C_0 experi-

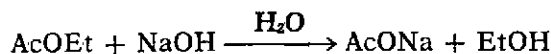
mental se observa, que tanto en el caso de la función de impulso, como en el de la función en escalón, se obtiene una aproximación aceptable a la diagonal, de lo cual se deduce que el sistema experimental utilizado se puede representar, sin incurrir en un gran error, por un sistema de un tanque perfectamente mezclado.

A título de ejemplo se incluye una de las gráficas (figura 9) en las que se comparan C/C_0 teórico y C/C_0 experimental.

APLICACION A UNA REACCION DE CINETICA CONOCIDA

A fin de comprobar que el dispositivo experimental utilizado en el presente trabajo se comporta como un reactor de mezcla completa, y como tal útil para estudios cinéticos, se ha aplicado a una reacción química de cinética conocida, al objeto de confirmar los resultados anteriores.

La reacción seleccionada ha sido la saponificación del Acetato de Etilo con Hidróxido Sódico.



esta reacción es de primer orden con respecto al AcOEt y a la NaOH. La ecuación de velocidad para esta reacción tiene un orden global de 2 y se expresa:

$$r = K C_{\text{AcOEt}} C_{\text{NaOH}} \quad [7]$$

si llamamos:

$$C_{\text{NaOH}} = C_A$$

$$C_{\text{AcOEt}} = C_B$$

la ecuación de velocidad queda:

$$(-r_A) = K C_A C_B \quad [8]$$

y en función de la conversión:

$$(-r_A) = K C_{A0} (1 - X_A) (C_{B0} - C_{A0} X_A) \quad [9]$$

siendo C_{A0} la concentración inicial de NaOH y C_{B0} la concentración inicial de AcOEt y X_A la conversión definida como:

$$X_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \quad [10]$$

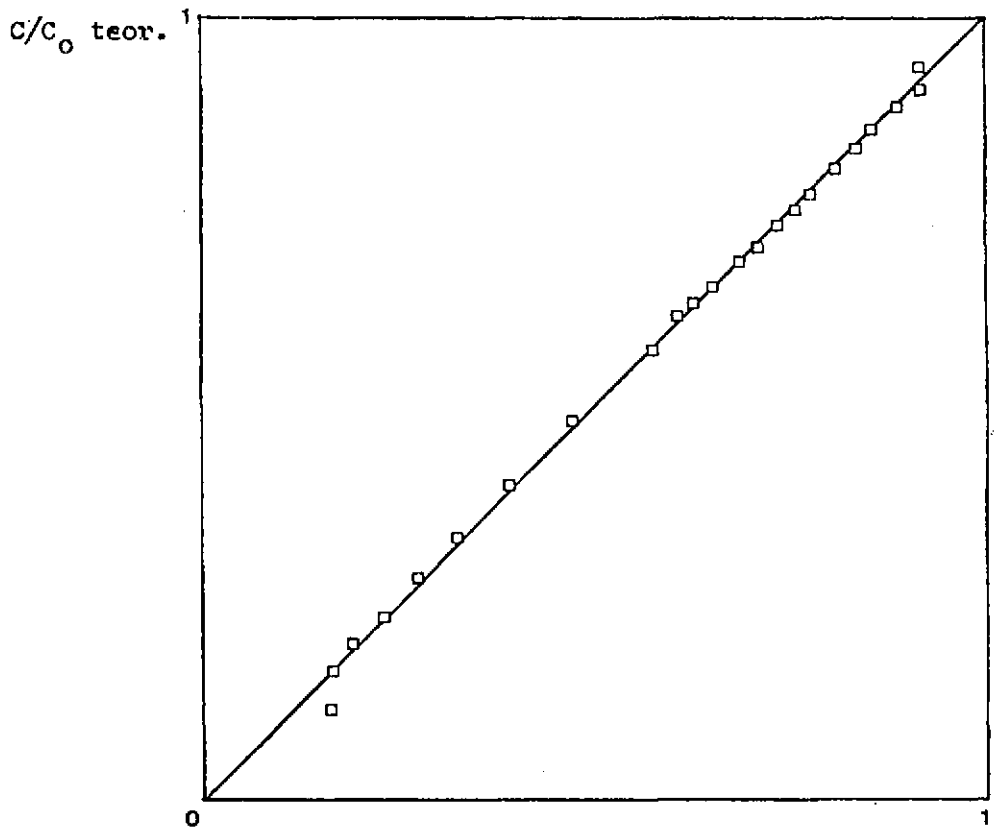
La ecuación de diseño del reactor tanque continuo agitado es:

$$F_{A0} X_A = V (-r_A) \quad [11]$$

donde:

$$F_{A0} = C_{A0} Q \quad [12]$$

siendo Q el caudal de alimentación total utilizado.



$Q = 53.9 \text{ l/hr}$
 $\bar{t} = 334 \text{ s}$
 $V_R = 5.0 \text{ l}$
 $C_0 = 0.018 \text{ N}$

$C/C_0 \text{ exp.}$

FIGURA 9



Sustituyendo la ecuación de velocidad de la reacción en la de diseño del reactor tanque continuo agitado y despejando X_A queda:

$$X_A = \frac{K C_{A0} V + K C_{B0} V}{2 K C_{A0} V} \pm \frac{\sqrt{(K C_{A0} V + K C_{B0} V + Q)^2 - 4 K C_{A0} V K C_{B0} V}}{2 K C_{A0} V} \quad [13]$$

La constante de velocidad, K , a 30° C vale:

$$K = 6.6 \text{ l/mol min.} = 396 \text{ l/mol hr.}$$

con la ecuación anterior se calcula el valor de la conversión teórica para las condiciones de caudal y concentración utilizados en cada ensayo, y se compara con la conversión que se deduce de los datos experimentales.

Para la obtención de los valores de conversión, se ha utilizado el mismo dispositivo experimental que se usó para la obtención de las curvas RTD con entrada del trazador en escalón.

La reacción se ha realizado a 30° C, para poder utilizar la constante de que se dispone, ya que en la bibliografía no se han encontrado valores a otras temperaturas.

En la figura 10, se comparan las conversiones teórica y experimental, observándose una buena aproximación a la diagonal, de lo que se deduce que el dispositivo experimental utilizado se comporta, con bastante aproximación, como un reactor de mezcla completa, y por lo tanto, válido para su posterior aplicación a estudios cinéticos.

CONCLUSIONES

Se ha diseñado, construido y puesto a punto un banco experimental para estudios cinéticos, el cual se ha calibrado por métodos estímulo-respuesta.

El análisis de las curvas de distribución de tiempos de residencia (RTD) en dicho sistema, pone de manifiesto que el mismo presenta una buena aproximación a un reactor de mezcla completa en el intervalo experimental estudiado. Este resultado se ha comprobado, experimentalmente, a través de la comparación de los valores teóricos y experimentales de la conversión para una reacción de cinética conocida.

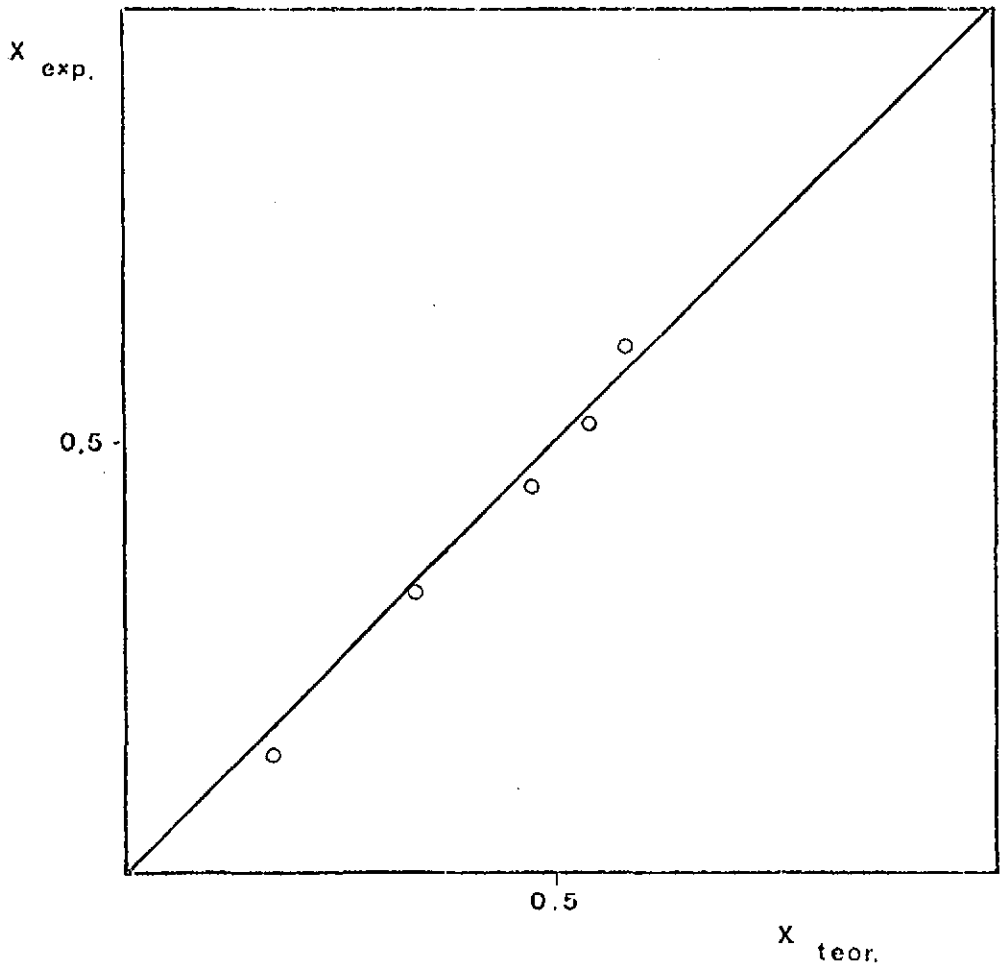


FIGURA 10



BIBLIOGRAFIA

1. M. BODENSTEIN, K. WOLGAST, *Z. Physiol. Chem.*, 61, 422 (1908).
2. TH. FORSTER, K. H. GEIB, *Ann. Physik.*, 20, 250 (1934).
3. G. DAMKÖHLER, *Der Chemie Ingenieur*. A. Eucken y M. Jacob. Eds. vol. III, part I, Akad. Verlagages, Liepzig (1937).
4. P. V. DANCKWERTS, *Chem. Eng. Sci.*, 2, 1 (1953).
5. K. B. BISCHOFF, E. A. MCCracken, *Ind. Eng. Chem.*, 58, 18 (1966).
6. O. LEVENSPIEL, B. W. LAI, C. Y. CHATLYNE, *Chem. Eng. Sci.*, 25, 1611 (1970).
7. O. LEVENSPIEL, J. C. R. TURNER, *Chem. Eng. Sci.*, 25, 1605 (1970).
8. D. M. HIMMELBLAU, F. B. BISCHOFF, *Análisis y Simulación de Procesos*, Ed. Reverté, Barcelona (1976).
9. H. KRAMERS, K. R. WESTERTERP, *Elements of Chemical Reactor Design and Operation*, Academic Press, New York (1963).
10. O. LEVENSPIEL, *Ingeniería de las Reacciones Químicas*, Ed. Reverté, Barcelona (1974).
11. P. NAOR, R. SHINNAR, *Ind. Eng. Chem. Fund.*, 2, 278 (1963).

