

## TEMA 6. Reacciones múltiples

### CONTENIDO

- Reacciones múltiples
  - Diferencias con las reacciones simples
  - Rendimiento y selectividad
  - Información necesaria para transferir datos
- Metodología
  - Esquemas básicos: serie, paralelo, independientes
  - Formulación de esquemas a partir de las especies químicas
    - Determinación de componentes clave y su relación con los no clave
    - Relación entre velocidades de producción y velocidades de reacción
  - Agrupamiento de especies: lumping
- Simulación de reactores para reacciones múltiples
  - Balances de materia
  - Balances de energía

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ

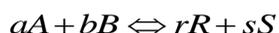


## TEMA 6. Reacciones múltiples

### DIFERENCIAS ENTRE REACCIONES SIMPLES Y MÚLTIPLES

#### R.S

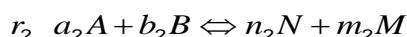
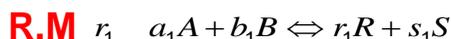
-Una sola ecuación estequiométrica



- La velocidad de producción se relaciona con la velocidad de reacción mediante el coeficiente estequiométrico

$$R_j = \nu_j r$$

- Análisis: sólo hay un componente clave



$$\text{general } \sum_{j=1}^N \nu_{ji} A_j = 0$$

$i = \text{reaccion } j = \text{componente}$

-Varias ecuaciones estequiométricas: se debe conocer más de un componente para definir el sistema: Componentes clave

- La velocidad de producción se relaciona con más de una reacción

$$R = \sum_{j=1}^R \nu_j r$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

## TEMA 6. Reacciones múltiples

### DIFERENCIAS ENTRE REACCIONES SIMPLES Y MÚLTIPLES

#### OBJETIVO EN REACCIONES SIMPLES:

- Minimizar el tamaño para conseguir un cambio de composición (seleccionar las variables, T, reactor,  $C_{j0}$ .)

#### OBJETIVO EN REACCIONES MÚLTIPLES:

- Minimizar el tamaño para conseguir un cambio de composición (seleccionar las variables, T, reactor,  $C_{j0}$ .) **INVERSIÓN**
- Optimizar la distribución de productos: hacer máximo el rendimiento del producto buscado **CONSUMO DE REACTIVO, SEPARACIÓN**
- Si las condiciones que minimizan el tamaño no hacen máximo el rendimiento, ¿Cuál prevalece?

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



## TEMA 6. Reacciones múltiples

### DIFERENCIAS ENTRE REACCIONES SIMPLES Y MÚLTIPLES

#### INFORMACIÓN NECESARIA PARA SIMULAR EL REACTOR CON REACCIONES SIMPLES:

- Estequiometría, ecuación cinética, datos termodinámicos, características y parámetros del reactor, (**TAMAÑO**)

#### INFORMACIÓN NECESARIA PARA SIMULAR EL REACTOR CON REACCIONES MÚLTIPLES:

- Estequiometría, **ECUACIONES CINÉTICAS**, datos termodinámicos, características y parámetros del reactor, (**TAMAÑO** y **RENDIMIENTO**)
- Velocidad/es de producción del reactivo/s clave/s (ecuaciones cinéticas)

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

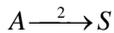
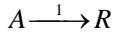
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

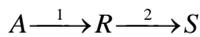
## TEMA 6. Reacciones múltiples

### CLASIFICACION REACCIONES MULTIPLES

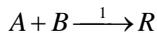
**REACCIONES EN PARALELO: el/los REACTIVOS GENERAN VARIOS PRODUCTOS EN REACCIONES INDEPENDIENTES.**



**REACCIONES EN SERIE. EL PRODUCTO DE UN REACTIVO ES REACTIVO DE OTROS PRODUCTOS**



**REACCIONES EN SERIE-PARALELO.**



INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

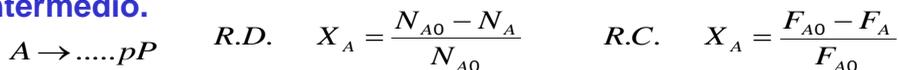
ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



## TEMA 6. Reacciones múltiples

### DEFINICIÓN DE RENDIMIENTO de A al producto P

**El reactivo A genera P directamente o través de un compuesto intermedio.**



**Rendimiento global de la operación**  $\Theta_{P/A} = \frac{N_P / p}{N_{A0}}$  *En RC. F<sub>j</sub> en lugar de N<sub>j</sub>*

**Rendimiento global relativo RENDIMIENTO**

$$\Phi_{P/A} = \frac{N_P / p}{N_{A0} X_A} = \frac{\Theta_{P/A}}{X_A}$$

**Rendimiento diferencial**  $\frac{R_P}{p}$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

TEMA 6. Reacciones múltiples

**DETERMINACIÓN DEL RENDIMIENTO GLOBAL A PARTIR DEL RENDIMIENTO DIFERENCIAL en RD y RC (V, Q=cte)**

$$RD: R_j = \frac{dC_j}{dt} \quad CSTR: R_j = \frac{C_j - C_{j0}}{V/Q} \quad FP: R_j = \frac{dC_j}{d(V/Q)}$$

$$\Phi_{P/A} = \frac{C_P / p}{C_{A0} - C_A}$$

Si  $p=1$

$$\Phi_{P/A} = \frac{C_P}{C_{A0} - C_A}$$

$$\phi'_{P/A} = \frac{R_P}{-R_A}$$

$$\phi'_{P/A} = -\frac{dC_P}{dC_A}$$

$$\Phi_{P/A} = \frac{C_P}{C_{A0} - C_A} = \frac{1}{C_{A0} - C_A} \int_{C_{A0}}^{C_A} -\phi'_{P/A} dC_A$$

Y si es un reactor SC?  
Y si Q no es cte?

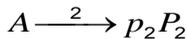
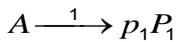
En que reactores valen y en cual no?

Como serían en ese reactor



TEMA 6. Reacciones múltiples

**DEFINICIÓN DE SELECTIVIDAD**



Selectividad global  $S_{12} = \frac{N_{P1} / p_1}{N_{P2} / p_2}$

En RC. F<sub>j</sub> en lugar de N<sub>j</sub>

Selectividad diferencial  $S'_{12} = \frac{R_{P1} / p_1}{R_{P2} / p_2}$



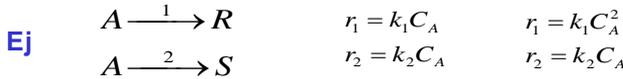
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

TEMA 6. Reacciones múltiples

REACCIONES EN PARALELO



alumnos

Número de componentes clave: 2

Relaciones estequiométricas:

$$\left. \begin{matrix} R_A = -r_1 - r_2 \\ R_R = r_1 \\ R_S = r_2 \end{matrix} \right\} R_A = -R_R - R_S \left\{ \begin{matrix} dN_A = -dN_R - dN_S & N_A - N_{A0} = -(N_R - N_{R0}) - (N_S - N_{S0}) \\ dF_A = -dF_R - dF_S & F_A - F_{A0} = -(F_R - F_{R0}) - (F_S - F_{S0}) \\ F_A - F_{A0} = -(F_R - F_{R0}) - (F_S - F_{S0}) \end{matrix} \right.$$

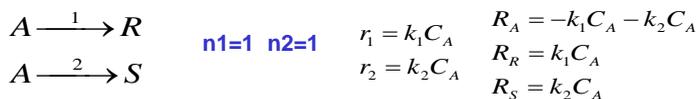
Componentes clave 2: A y R; A y S; R y S



TEMA 6. Reacciones múltiples

REACCIONES EN PARALELO

n1=1 n2=1

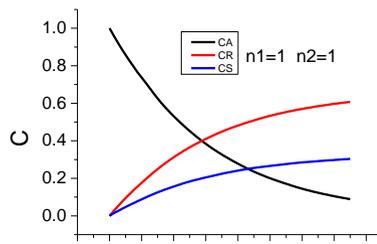


Si V (RD) o Q (FP) cte

$$-\frac{dC_A}{d\tau} = k_1 C_A + k_2 C_A \quad \ln \frac{C_A}{C_{A0}} = -(k_1 + k_2)\tau$$

$$\frac{dC_R}{d\tau} = k_1 C_A \quad C_A = C_{A0} e^{-(k_1 + k_2)\tau}$$

$$\frac{dC_S}{d\tau} = k_2 C_A \quad C_R = k_1 C_{A0} \int_0^\tau e^{-(k_1 + k_2)t} d\tau$$



$\tau =$  tiempo o V/Q

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

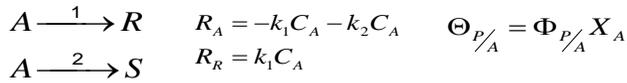
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



TEMA 6. Reacciones múltiples

RENDIMIENTOS y SELECTIVIDADES

n1=1 n2=1



$$\phi'_{R/A} = \frac{R_R/1}{R_A/-1} = -\frac{dC_R}{dC_A} = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \quad \Phi_{R/A} = \frac{C_R}{C_{A0} - C_A} = \frac{-1}{C_{A0} - C_A} \int_{C_{A0}}^{C_A} \phi'_{R/A} dC_A$$

$$\Phi_{R/A} = \frac{C_R}{C_{A0} - C_A} = -\frac{C_A - C_{A0}}{C_{A0} - C_A} \frac{k_1}{k_1 + k_2} = \frac{k_1}{k_1 + k_2} \quad \Theta_{R/A} = \frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{k_1}{k_1 + k_2} X_A$$

$$S'_{12} = \frac{R_R/r}{R_s/s} = \frac{R_R}{R_s} = \frac{k_1}{k_2} \quad S_{12} = \frac{C_R}{C_s} = \frac{k_1}{k_2} \quad \frac{k_1}{k_2} = \frac{k_{01}}{k_{02}} e^{\frac{1}{RT}(E_2 - E_1)}$$

¿Varía la selectividad con  $t$  o  $\tau$ ?

¿Varía la selectividad con  $C_{A0}$ ?

¿Cómo influye la T en S?

¿Qué cambiaría si  $n1=n2 \neq 1$ ?

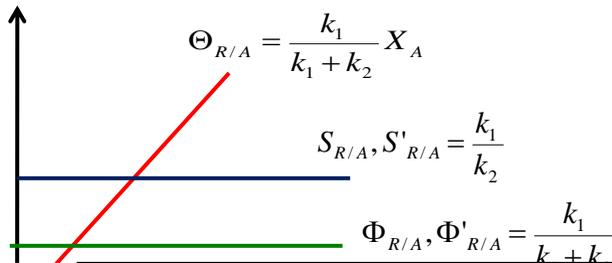
¿CSTR?



TEMA 6. Reacciones múltiples

REACCIONES EN PARALELO

n1=n2=1



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

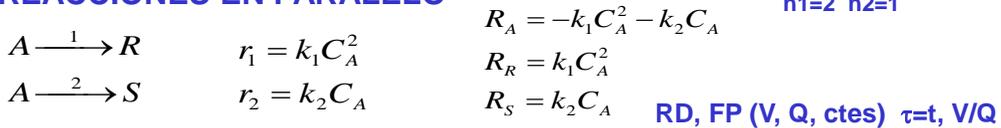
---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

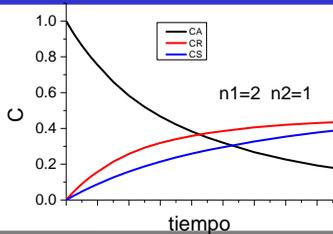


TEMA 6. Reacciones múltiples

REACCIONES EN PARALELO



$$\begin{array}{l}
 -\frac{dC_A}{d\tau} = k_1 C_A^2 + k_2 C_A \\
 \frac{dC_R}{d\tau} = k_1 C_A^2 \\
 \frac{dC_S}{d\tau} = k_2 C_A
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{l}
 \int_0^{C_R} dC_R = \int_0^t k_1 C_A^2 d\tau \\
 \int_0^{C_S} dC_S = \int_0^t k_2 C_A d\tau
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{l}
 \int_{C_{A0}}^{C_A} -dC_A = \int_0^t (k_1 C_A^2 + k_2 C_A) d\tau \\
 \frac{1}{k_2} \ln \frac{C_{A0}}{C_A} + \frac{1}{k_2} \ln \frac{k_2 + k_1 C_A}{k_2 + k_1 C_{A0}} = \tau
 \end{array}$$



$$C_A = f(t) = a + bt + ct^2 + \dots$$



TEMA 6. Reacciones múltiples

REACCIONES EN PARALELO

$$\Phi'_{R/A} = \frac{k_1 C_A^2}{k_1 C_A^2 + k_2 C_A} = \frac{k_1 C_A}{k_1 C_A + k_2} = f(C_A)$$

Depende de  $C_A$  porque  $n_1 \neq n_2$

$$\Phi_{R/A} = \frac{1}{X_A} \int_0^{X_A} \Phi'_{R/A} dX_A = \frac{1}{X_A} \int_0^{X_A} \frac{k_1 C_A}{k_1 C_A + k_2} dX_A$$

$$\Phi_{R/A} = \frac{1}{X_A} \left[ X_A + \frac{1}{C_{A0}} \frac{k_2}{k_1} \ln \frac{k_1 C_{A0} (1 - X_A) + k_2}{k_1 C_{A0} + k_2} \right]$$

Dependen de  $C_{A0}$  porque  $n_1 \neq n_2$

$$\Theta_{R/A} = \Phi_{R/A} X_A = \left[ X_A + \frac{1}{C_{A0}} \frac{k_2}{k_1} \ln \frac{k_1 C_{A0} (1 - X_A) + k_2}{k_1 C_{A0} + k_2} \right]$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



TEMA 6. Reacciones múltiples

REACCIONES EN PARALELO

n1=2 n2=1

$$S'_{R/S} = \frac{k_1 C_A^2}{k_2 C_A} = \frac{k_1 C_A}{k_2} = \frac{k_1 C_{A0} (1 - X_A)}{k_2} = f(C_A)$$

Depende de  $C_A$  porque  $n_1 \neq n_2$

$$S_{R/S} = \frac{C_R}{C_S} = \frac{\Theta_{R/A}}{\Theta_{S/A}} = \frac{\left[ X_A + \frac{1}{C_{A0}} \frac{k_2}{k_1} \ln \frac{k_1 C_{A0} (1 - X_A) + k_2}{k_1 C_{A0} + k_2} \right]}{\left[ \frac{1}{C_{A0}} \frac{k_2}{k_1} \ln \frac{k_1 C_{A0} + k_2}{k_1 C_{A0} (1 - X_A) + k_2} \right]}$$

Dependen de  $C_{A0}$  porque  $n_1 \neq n_2$

$$S_{R/S} = \left[ X_A C_{A0} \frac{k_1}{k_2} \frac{1}{\ln \frac{k_1 C_{A0} + k_2}{k_1 C_{A0} (1 - X_A) + k_2}} - 1 \right] = \frac{X_A}{K} \frac{1}{\ln \frac{1 + K}{(1 - X_A) + K}} - 1$$

$$K = \frac{k_2}{k_1 C_{A0}}$$

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



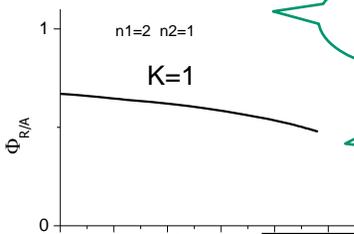
TEMA 6. Reacciones múltiples

REACCIONES EN PARALELO

n1=2 n2=1

$$\Phi_{R/A} = \frac{1}{X_A} \left[ X_A + \frac{1}{C_{A0}} \frac{k_2}{k_1} \ln \frac{k_1 C_{A0} (1 - X_A) + k_2}{k_1 C_{A0} + k_2} \right]$$

$$S_{R/S} = \frac{X_A}{K} \frac{1}{\ln \frac{1 + K}{(1 - X_A) + K}} - 1$$

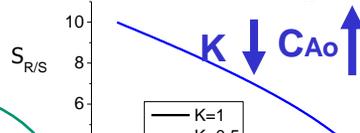


Como influye  $C_{A0}$

Como influye  $T$ ?

Si el producto

$$X_A \rightarrow 1 \therefore S_{R/S} = \frac{1}{K} \frac{1}{\ln \frac{1 + K}{K}} - 1$$



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

TEMA 6. Reacciones múltiples

REACCIONES EN SERIE



Número de componentes clave: 2

Relaciones estequiométricas: (matriz reacciones-especies)

$R_A = -r_1$ $R_R = r_1 - r_2$ $R_S = r_2$	<b>Ej A y R claves</b> $r_1 = -R_A$ $r_2 = r_1 - R_R = -R_A - R_R$	<b>S no clave</b> $R_S = r_2 = -R_A - R_R$
--	--	---

¿Influye la cinética en estas relaciones?

¿Relaciones entre cambio de moles (RD), cambio de caudal molar (RC)?

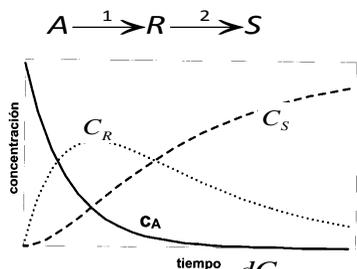
TEMA 6. Reacciones múltiples

REACCIONES EN SERIE

$$r_1 = k_1 C_A$$

$$r_2 = k_2 C_R$$

Si  $C_{R0} \neq 0$ ?  
 Si es un CSTR?  
 Si es otra cinética?  
 Si es una reacción reversible?  
 Si V o Q no son constantes?



$R_R \text{ en max} = 0 = k_1 C_A - k_2 C_{RM}$

$$C_A = C_{A0} e^{-k_1 \tau} \quad C_{RM} = \frac{k_1}{k_2} C_A = \frac{k_1}{k_2} C_{A0} e^{-k_1 \tau_M}$$

Demostración siguiente transparencia

$$C_R = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)]$$

$$\frac{dC_R}{d\tau} = 0 \Rightarrow k_1 e^{-k_1 \tau_M} - k_2 e^{-k_2 \tau_M} = 0 \Rightarrow \tau_M = \frac{\ln(k_1/k_2)}{k_1 - k_2}$$



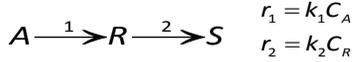
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

## REACCIONES EN SERIE

### TEMA 6. Reacciones múltiples



$$\frac{dC_R}{dt} + k_2 C_R = k_1 C_{A_0} \exp(-k_1 t) \therefore I = \exp(k_2 t)$$

$$[IC_R]_{(IC_R)_{t=0}}^{(IC_R)_t} = \int_{t=0}^t \exp(k_2 t) k_1 C_{A_0} \exp(-k_1 t) dt$$

$$\exp(k_2 t) C_R - 0 = \frac{k_1 C_{A_0}}{k_2 - k_1} [\exp((k_2 - k_1)t)]_{t=0}^t = \frac{k_1 C_{A_0}}{k_2 - k_1} [\exp((k_2 - k_1)t) - 1]$$

$$C_R = \frac{k_1 C_{A_0}}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)]$$

Factor de Integración:

$$\frac{dy}{dx} + f(x)y = g(x) \Rightarrow I = \exp \int f(x) dx$$

$$\int Idx \left( \frac{dy}{dx} + f(x)y \right) = \int g(x) Idx$$

$$\int (Idy + f(x)y Idx) = Iy$$

Caso especial  $k_1 = k_2 = k$

$$C_R = k C_{A_0} t \exp(-k t)$$

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



### TEMA 6. Reacciones múltiples

## REACCIONES EN SERIE

$$\begin{array}{l} r_1 = k_1 C_A \\ r_2 = k_2 C_R \end{array}$$

Modifica la Tª en máximo valor de R?

¿ Como?

Influye CA en este máximo?

$$C_R = \frac{k_1 C_{A_0}}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)]$$

$$\frac{dC_R}{dt} = 0 \therefore t_{\max} = \frac{\ln(k_1 / k_2)}{k_1 - k_2} \therefore C_{R\max} = C_{A_0} \left( \frac{k_2}{k_1} \right)^{\frac{k_2}{k_1 - k_2}}$$

¿ en que casos se puede aplicar esta ecuación?

$$K = \frac{k_2}{k_1} \therefore \frac{C_{R\max}}{C_{A_0}} = (K)^{\frac{K}{1-K}}$$



Si  $K \uparrow$   $C_{R\max}/C_{A_0} \downarrow$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

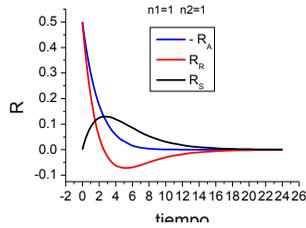
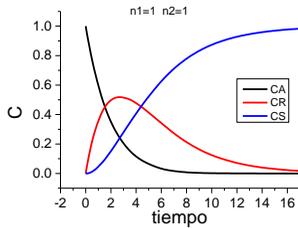
---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

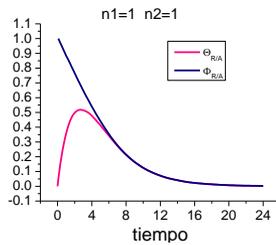
Cartagena99

TEMA 6. Reacciones múltiples

REACCIONES EN SERIE



Ejemplo  
 $C_{A0}=1$   
 $k_1=0.5$   
 $k_2=0.25$



INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
 AURORA SANTOS LOPEZ



EJERCICIO:  
 COMPARACION REACCIONES EN SERIE REACTOR CSTR-FP



Número de componentes clave: 2

Relaciones estequiométricas: (matriz reacciones-especies)

$$\left. \begin{matrix} R_A = -r_1 \\ R_R = r_1 - r_2 \\ R_S = r_2 \end{matrix} \right\} \begin{matrix} \text{Ej A y R claves} \\ r_1 = -R_A \\ r_2 = r_1 - R_R = -R_A - R_R \end{matrix} \right\} \begin{matrix} \text{S no clave} \\ R_S = r_2 = -R_A - R_R \end{matrix}$$

$$r_1 = k_1 C_A$$

$$r_2 = k_2 C_R$$

FP

$$C_{RO} = 0$$

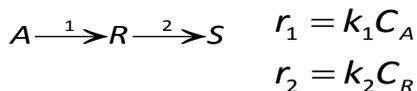
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



**EJERCICIO:  
COMPARACION REACCIONES EN SERIE REACTOR CSTR-FP**



CSTR (Q CTE)

$$\frac{V}{Q} = \frac{C_{A0} - C_A}{-R_A} = \frac{C_{A0} - C_A}{k_1 C_A} \Rightarrow C_A = \frac{C_{A0}}{1 + k_1 V/Q}$$

$$\frac{V}{Q} = \frac{C_R}{k_1 \frac{C_{A0}}{1 + k_1 V/Q} - k_2 C_R} \Rightarrow \frac{C_R}{C_{A0}} = \frac{k_1 V/Q}{(1 + k_1 V/Q)(1 + k_2 V/Q)}$$

$$\left(\frac{V}{Q}\right)_M \Rightarrow \frac{dC_R}{d(V/Q)} = 0 \quad C_{RM} \Rightarrow R_R = 0 \therefore C_{RM} = \frac{k_1}{k_2} C_{Amax} \therefore C_{RM} = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 + \frac{k_1}{k_2} \left(\frac{V}{Q}\right)_M}$$

INGENIERIA DE LA REACCION QUIMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



Ejemplo

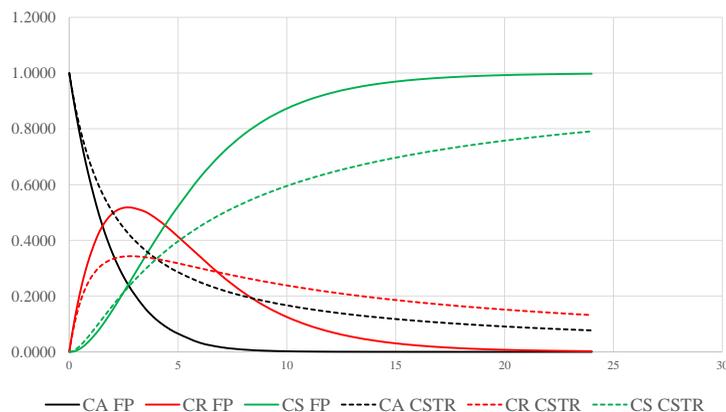
$$C_{A0} = 1$$

$$k_1 = 0.5$$

$$k_2 = 0.25$$

$$r_1 = k_1 C_A$$

$$r_2 = k_2 C_R$$

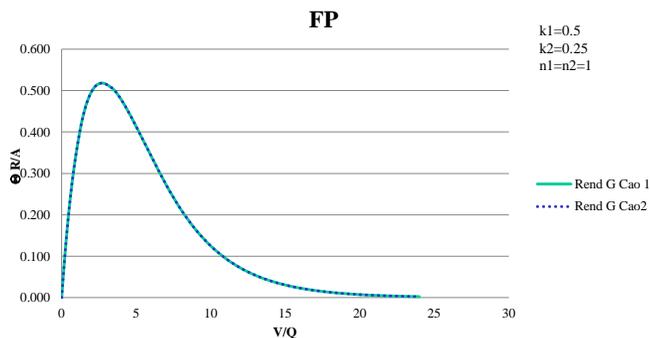


**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99



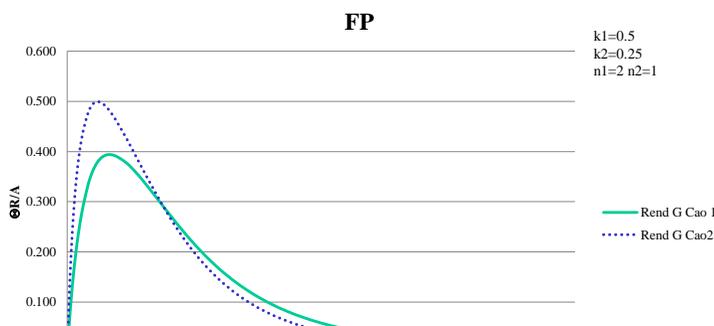
INGENIERIA DE LA REACCION QUIMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ

Ejemplo

$$k_1=0.5$$

$$k_2=0.25$$



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

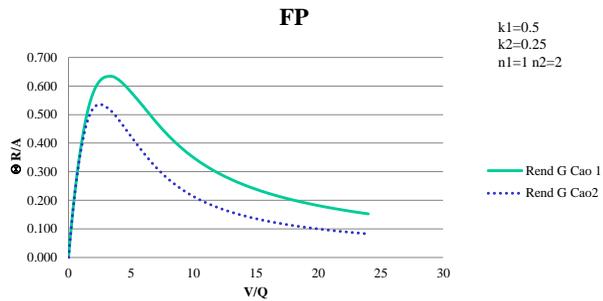
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

Ejemplo

$$k_1=0.5$$

$$k_2=0.25$$



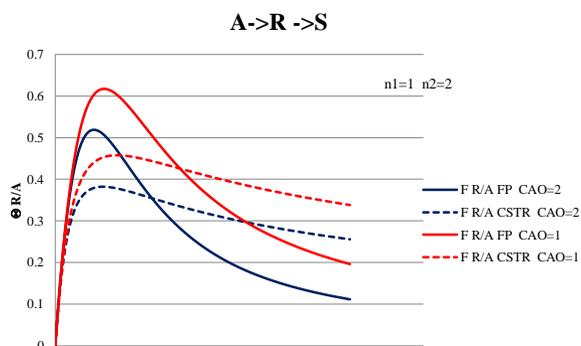
INGENIERIA DE LA REACCION QUIMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ

Ejemplo

$$k_1=0.5$$

$$k_2=0.25$$



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

Si se busca el máximo rendimiento relativo a R y la reacción es en paralelo (reactor isoterma)

Si  $n_1 = n_2$  ¿es mejor CSTR o FP?

Si  $n_1 > n_2$  ¿es mejor CSTR o FP?

Si  $n_1 < n_2$  es mejor CSTR o FP?

Si se elige CSTR, ¿Cuál es el inconveniente?

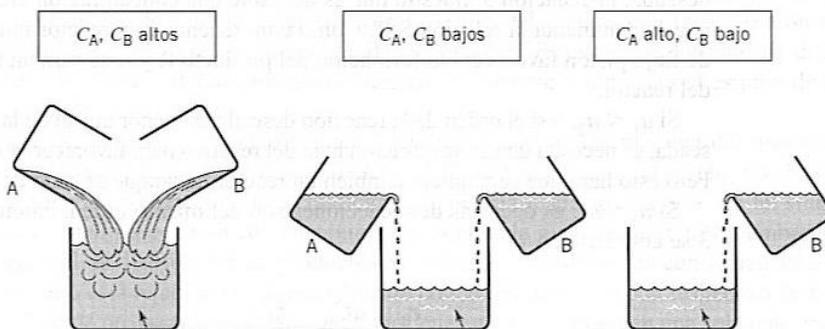
**Figuras 4.2 y 4.3  
Metcalf**

Y si hay dos reactivos A y B?  
(Levenspiel, Fogler)

INGENIERIA DE LA REACCION QUIMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ

Y si hay dos reactivos A y B en reacciones en paralelo? (Levenspiel, Fogler)



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Y si hay dos reactivos A y B en reacciones en paralelo? (Levenspiel, Fogler)

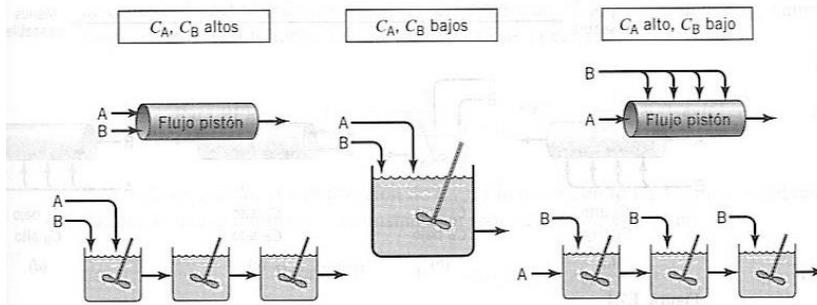


Figura 7.2. Modelos de contacto para varias combinaciones de concentraciones altas y bajas de reactivos en operaciones de flujo continuo

## TEMA 6. Reacciones múltiples

### Reacciones independientes



### Reacciones serie/paralelo



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

## TEMA 6. Reacciones múltiples

### Formulación de esquemas a partir de las especies químicas

#### Si no se conoce el esquema de reacción.

Conocidas las especies químicas:

Etapas:

- 1- Determinar los componentes clave: matriz elementos-especies
- 2.- **Formulación del esquema de reacción:** Reacciones de filiación que se obtienen por consideraciones químicas y/o análisis bibliográfico, estudios complementarios...
- 3- Determinación de los parámetros cinéticos



## TEMA 6. Reacciones múltiples

### Formulación de esquemas a partir de las especies químicas

#### Si no se conoce el esquema de reacción.

Conocidas las especies químicas:

Ejemplo: En la gasificación de metano con vapor de agua aparecen las especies siguientes, con la que la matriz B es:

	$CH_4$	$H_2O$	$H_2$	$CO$	$CO_2$	$C$	$C_2H_6$
$C$	1	0	0	1	1	1	2
$H$	4	2	2	0	0	0	6

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

## Formulación de esquemas a partir de las especies químicas Si no se conoce el esquema de reacción.

Etapa:1- Determinar los componentes clave: matriz elementos-especies (B)

Expresión de la matriz B en forma escalonada reducida

	NC			CC			
	CH <sub>4</sub>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	CO	CO <sub>2</sub>	C	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
C	1	0	0	1	1	1	2
H	0	1	0	1	2	0	0
O	0	0	1	-3	-4	-2	-1

Rango=3  
C. Clave=7-3=4

$$\sum_{j=1}^S \beta_{kj} \Delta n_j = 0 \quad (k = \text{fila matriz } B) \quad \Delta n_j = n_{jt} - n_{jo}$$

Relación de los No clave con los Clave

$$\Delta n_{CH_4} = -\Delta n_{CO} - \Delta n_{CO_2} - \Delta n_C - 2\Delta n_{C_2H_6}$$

$$\Delta n_{H_2O} = -\Delta n_{CO} - 2\Delta n_{CO_2}$$

$$\Delta n_{H_2} = 3\Delta n_{CO} + 4\Delta n_{CO_2} + 2\Delta n_C + \Delta n_{C_2H_6}$$

En Reactores Continuos  
 $\Delta F_j$



### TEMA 6. Reacciones múltiples

#### Si no se conoce el esquema de reacción.

#### FORMULACIÓN DEL ESQUEMA DE REACCIÓN

- A partir de las especies químicas que toman parte en la reacción escribir las reacciones de filiación:
  - Conocimientos de química
  - Construcción de matrices de coeficientes estequiométricos a partir de la matriz elementos/especies
- Estudio bibliográfico para eliminar las que no tienen lugar en las condiciones de operación.
- Realizar estudios experimentales complementarios.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

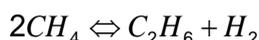
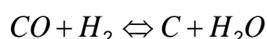
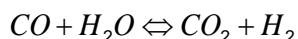
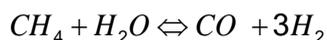
---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

## Formulación de esquemas a partir de las especies químicas Si no se conoce el esquema de reacción.

Ejemplo: propuesta de reacciones independientes en la gasificación de metano



-Las reacciones deben ser independientes

Rango de la matriz reacciones-especies=Componentes Clave (CC)

-No todas las reacciones pueden tener importancia. Si algunas se producen a velocidad insignificante:

Disminuye el nº de reacciones y de CC a considerar.

-Si se conocen las reacciones que se producen a velocidad significativa:

CC a considerar=Reacciones independientes significativas



### TEMA 6. Reacciones múltiples

## Formulación de esquemas a partir de las especies químicas

Casos Complejos: No es posible determinar todas las especies.

TRATAMIENTOS SIMPLIFICADOS: Técnicas de Lumping o agrupamiento de especies.

Ejemplo: Craqueo de gasoil



A: Gasoil  
R: Gasolina  
S: Productos indeseables

Mejora: agrupar especies que se comporten de forma similar. A se divide en

AP: Parafinas

AA: Aromáticos

AN: Nafténicos

S se divide en

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

**TEMA 6. Reacciones múltiples**  
**Formulación de esquemas a partir de las especies químicas**

**Si se conoce el esquema de reacción.**

**MATRIZ**

- $v$ : REACCIONES (i)- ESPECIES (j)
- $v^T$ : ESPECIES-REACCIONES; relación velocidades de producción de los no clave con los clave.

**Numero de compuestos clave:**

Rango  $v$   $N^o$  reacciones independientes



**TEMA 6. Reacciones múltiples**  
**Relación entre especies clave-no clave**

**Esquema de reacción conocido;**  
**Ejemplo**  
**Producción biodiesel por reacción de transesterificación de aceite vegetales**

ESQUEMA DE REACCION



TG: Triglicéridos  
 DG: Diglicéridos  
 MG: Monoglicéridos  
 ME: Metil ésteres  
 G: Glicerol o glicerina  
 MeOH: Metanol

$$R_j = \sum_{i=1} v_{ij} r_i$$

$$R_{TG} = -r_1 = -k_1[TG] \cdot [MeOH] + k_{-1}[DG] \cdot [ME]$$

$$R_{DG} = r_1 - r_2 = k_1[TG] \cdot [MeOH] - k_{-1}[DG] \cdot [ME] - k_2[DG] \cdot [MeOH] + k_{-2}[MG] \cdot [ME]$$

$$R_{MG} = r_2 - r_3 = k_2[DG] \cdot [MeOH] - k_{-2}[MG] \cdot [ME] - k_3[MG] \cdot [MeOH] + k_{-3}[G] \cdot [ME]$$

$$\begin{matrix} & 1 & 2 & 3 \\ TG & [-1 & 0 & 0] \end{matrix}$$

Rango matriz  $v=3 \Rightarrow$   
 3 reacciones independientes. 3 CC.

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE**  
**LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS**  
**CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**



REACCIONES COMPLEJAS: COMPUESTOS CLAVE-NO CLAVE

Relación entre compuestos clave-no clave

De la Matriz  $\nu^T$

$$\begin{aligned} R_{TG} &= R_{TG} = -r_1 \\ R_{DG} &= R_{DG} = r_1 - r_2 \\ R_{MG} &= R_{MG} = r_2 - r_3 \\ R_{ME} &= R_{ME} = r_1 + r_2 + r_3 \\ R_{MeOH} &= R_{MeOH} = -r_1 - r_2 - r_3 \\ R_G &= R_G = r_3 \end{aligned}$$

Compuestos clave  
TG, DG, MG

$$\begin{aligned} r_1 &= -R_{TG} \\ r_2 &= r_1 - R_{DG} = -R_{TG} - R_{DG} \\ r_3 &= r_2 - R_{MG} = -R_{TG} - R_{DG} - R_{MG} \end{aligned}$$

RELACION CC NO CLAVE - CC CLAVE

$$R_{ME} = r_1 + r_2 + r_3 = -3R_{TG} - 2R_{DG} - R_{MG}$$

$$R_{MeOH} = -r_1 - r_2 - r_3 = 3R_{TG} + 2R_{DG} + R_{MG}$$

$$R_G = r_3 = -R_{TG} - R_{DG} - R_{MG}$$



REACCIONES COMPLEJAS: COMPUESTOS CLAVE-NO CLAVE

Relación  $R_j$ - $C_j$ : Balance Materia  $j$

Ej: reactor CSTR

$$F_j = R_j V \quad \mathbf{3 \text{ BM (C. CLAVE)}}$$

¿ En RD?

¿ En FP?

Relación del cambio de los no clave con los clave

$$\Delta F_{ME} = -3\Delta F_{TG} - 2\Delta F_{DG} - \Delta F_{MG}$$

$$\Delta F_{MeOH} = 3\Delta F_{TG} + 2\Delta F_{DG} + \Delta F_{MG}$$

$$\Delta F_G = -\Delta F_{TG} - \Delta F_{DG} - \Delta F_{MG}$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



## TEMA 6. Reacciones múltiples

### INTERPRETACIÓN DE DATOS

- **Matriz elementos-especies químicas:** determinar el número de componentes clave y establecer su relación con el resto de componentes.
- **Esquema de reacción:** establecer la relación entre velocidades de producción de los reactantes clave y las velocidades de reacción.
- **Velocidades de reacción:** proponer modelos cinéticos de cada una de las reacciones del esquema.
- **Datos experimentales:** identificar el modelo que mejor se ajusta
  - Seleccionar el modelo
  - Determinar los parámetros
  - Conocer su precisión

---

INGENIERÍA DE LA REACCIÓN QUÍMICA

ARTURO ROMERO SALVADOR  
AURORA SANTOS LOPEZ



## TEMA 6. Reacciones múltiples

### SIMULACION DE REACTORES

- **Balances de materia de los componentes clave en el reactor**
- **Balance de Calor si no es isoterma**
- **Balance de cantidad de movimiento si P no es constante**
- **Resolución simultánea de los balances de materia, calor y c.d.m**

**Trabajo voluntario:** para un ejemplo de los siguientes (u otro propuesto por el alumno) plantear el modelo de simulación del reactor:

**EJEMPLOS: DESHIDROGENACION Y DESHIDRATACION CICLOHEXANOL**

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

**EJERCICIO: EJEMPLO CON CAMBIO DE VOLUMEN (FASE GAS)  
DESHIDROGENACION Y DESHIDRATACION CICLOHEXANOL**



ESQUEMA DE REACCION	CHL Ciclohexanol
$C_6H_{12}O \xrightleftharpoons{1} C_6H_{10}O + H_2$	CHN Ciclohexanona
$C_6H_{12}O \xrightleftharpoons{2} C_6H_{10} + H_2O$	CHE Ciclohexeno
Ambas reacciones endotérmicas	H Hidrógeno
	W Agua
	N: N2 inerte

Ejemplo considerar cinéticas de reacciones elementales (emplear presiones parciales)

**Plantear la Simulación de la evolución de las especies y la T en REACTOR CONTINUO (FP)**

**ENTRADA CHL (90%)+inerte N2 (10%). Considerar Po cte  
CALCULAR LOS FLUJOS y PRESIONES PARCIALES DE TODAS LAS ESPECIES EN FUNCION DE LOS CLAVE (CHL, CHN):**

**Si operase adiabáticamente ¿Cómo plantear el balance de calor?**

**¿es conveniente la operación adiabática?**

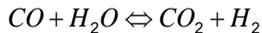
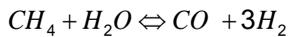
**¿Cómo podríamos modificar la selectividad a ciclohexanona?**



**EJERCICIO: EJEMPLO CON CAMBIO DE VOLUMEN (FASE GAS)  
Gasificación de Metano a gas de síntesis**



ESQUEMA DE REACCION



Reacción 1 endotérmica

Reacción 2 Exotérmica

Ejemplo considerar cinéticas de reacciones elementales (emplear presiones parciales)

**Plantear la Simulación de la evolución de las especies y la T en REACTOR CONTINUO (FP)**

**ENTRADA  $y_{CH_4o} + y_{H_2Oo} = 1$  (no inertes) Considerar P cte**

**CALCULAR LOS FLUJOS y PRESIONES PARCIALES DE TODAS LAS**

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

---

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99