



## 18. GAIA

### ERREAKTORE JARRAITU IDEALAK

GAI HAU IKASTEAN GAITASUN HAUEK LORTU BEHARKO DITUZU:

1. Hodi-formako erreaktore isotermikoa diseinatu.
2. Hodi-formako erreaktore adiabatikoa diseinatu.
3. Nahaste-prefektuzko erreaktore isotermikoa diseinatu.
4. Nahaste-prefektuzko erreaktore adiabatikoa diseinatu.
5. Seriean kokatutako erreaktore sistemak diseinatu.
6. Paraleloan kokatutako erreaktore sistemak diseinatu.

Erreaktore jarraituak ekoizpen handietarako erabiltzen dira industrian. Adibidez, amoniakoa (300 t/egun) edo azido sulfurikoa (1400 t/egun) jarraian diharduten erreaktoreetan ekoizten dira (parentesi artean substantzia horien ekoizpen-maila tipoa agertzen da).

Erreaktore horietan erreaktiboak etengabe elikatzen dira eta, bihurtze-maila bat lortu ondoren, produktuen eta bihurtu gabeko erreaktiboaren nahastea etengabe irteten da erreaktoretik.

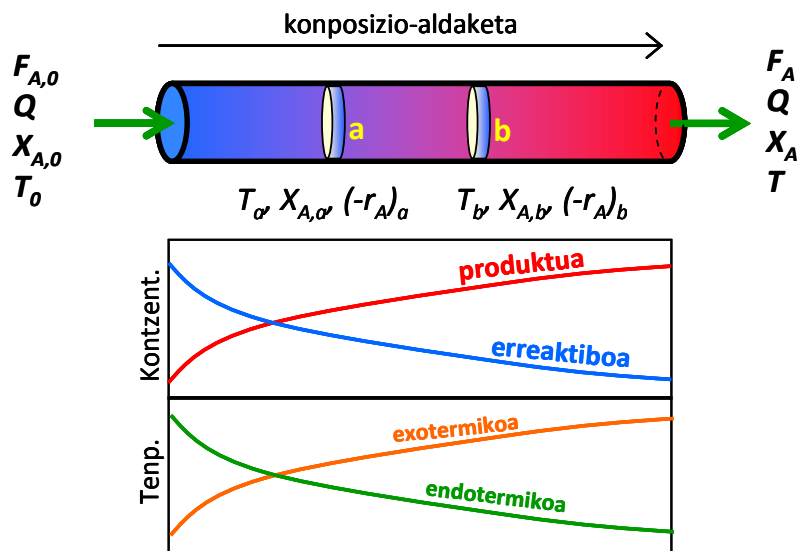
Muturreko bi motatako erreaktore jarraitu idealak bereiz daitezke: hodi-formako erreaktore idealak (PFR-*Plug-Flow Reactor*) eta nahaste perfektuzko erreaktore idealak (CSTR-*Continuously Stirred Tank Reactor*). Biak muturreko ereduak dira, eta bietan jarioaren ereduak eta nahaste-maila zeharo desberdinak dira.

Praktikan, erreaktore gehienak muturreko bi ereduren batera doitzen direlako, hemen azalduko diren ereduak izango dira.

### 18.1 HODI-FORMAKO ERREAKTORE IDEALA (PFR)

Hodi-formako erreaktore idealean, erreaktorea den hoditik doan nahasteak erreakzioa jasaten du jarioaren norabidean aurrera egin ahala. Erreaktore hau, batez ere gas-faseko erreakzioak gauzatzeko erabiltzen bada ere, erreakzio katalitikoak gauzatzeko ere erabiltzen da, hodi barruan ohandze finkoan katalizatzailea jarritz.

Hodi-formako erreaktore idealaren jario-eredua **pistoi-jarioa** da. Horren arabera, jariagai-zati guztiek batez besteko abiadura lineal berdina daukate jarioaren norabidean (ondorioz, zatiak ez dira elkarrekin nahasten eta zati guztiek denbora berdina behar dute erreaktorea den hodia zeharkatzeko, hau da, egoitza-denbora berdina daukate), eta zati mehe bakoitzean nahaste perfektua lortzen da (hau da, zati mehe osoan baldintza homogenea dago). 18.1 irudian adierazten da hodi-formako erreaktore jarraituaren irudia, eta jarioaren norabidean agertzen diren kontzentrazio eta tenperatura profila.



18.1 irudia. Hodi-formako erreaktore jarraitu idealak: pistoi-jarioaren ereduak, eta kontzentrazioaren eta erreaktore adiabatikoaren barneko tenperatura-profilak ardatzean zehar.

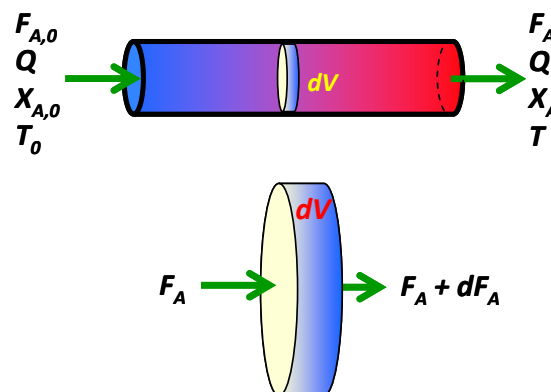
Benetako erreaktoreek, ordea, pistoi-jarioaren ereduarekiko desbideraketak dauzkate. Desbideraketa horien artean, hauek dira ohikoenak:

- (a) Abiadura-gradiente erradiala. Kontuan hartu behar da, jariagaiaren jarioan sortzen den muga-geruza dela eta, jariagaiaren abiadura lineal maximoa ardatzetik doan jariagai-elementuarena dela, eta hormetatik hurbilago doan jariagai-elementuaren abiadura lineala txikiagoa dela. Desbideraketa hori are nabarmenagoa da jario laminarrean.
- (b) Tenperatura-gradiente erradiala. Hormen inguruko jariagai-elementuen tenperatura inguruneko tenperaturatik gertuago dago. Bi desbideraketa horien erruz, zati bakoitzean ez da uniformetasunik, eta erreakzio-abiaduraren profila garatzen da erradioarekin.
- (c) Ardatzean zehar konposizio-aldaketa dagoenez (hodiaren sarrerako zatian erreaktiboa kontzentratua dago, eta irteeratik gertuko zatian kontzentrazio txikia du), barreiapen molekularra sortzen da.

Hemen azalduko den hodi-formako erreaktorea idealtzat hartuko da. Gainera, erreakzio homogeneoak gauzatzeko erabiliko da, hau da,  $(-r_A) = k \cdot C_A^n \cdot C_B^m \dots$  erako ekuazio zinetikoa duten erreakzio kimikoak gauzatzeko erabiliko dira.

## 18.2 HODI-FORMAKO ERREAKTORE IDEALAREN DISEINU-EKUAZIOA

Erreaktoreko zatiaren posizioarekin kondizioak aldatzen direnez, A osagai mugatzailearekiko masa-balantzea  $dV$  bolumeneko zati mehean egingo da (ikus 18.2 irudia), egoera geldikorra lortu ondoren:



18.2 irudia. Hodi-formako erreaktore idealeko masa-balantzea.

$$\left( \begin{array}{c} \text{A-ren} \\ \text{SARTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{A-ren} \\ \text{IRTETE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenetik} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{A-ren} \\ \text{DESAGERTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{array} \right)$$

$$\dot{F}_A = \dot{F}_A + dF_A + (-r_A) \cdot dV \quad ; \quad -dF_A = (-r_A) \cdot dV \quad (18.1)$$

Erreaktore jarraituan  $F_A = F_{A,0} - F_{A,0} \cdot X_A$  izanik, deribatzen bada:

$$-dF_A = F_{A,0} \cdot dX_A \quad (18.2)$$

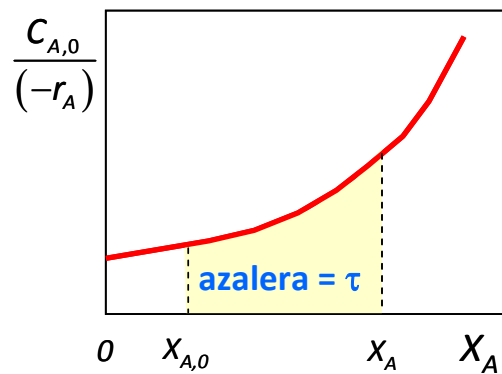
Azken adierazpen hori masa-balantzean (18.1 ekuazioan) ordezkatu eta erreaktore osoan integratzen bada ( $[V = 0, X_{A,0}]$  eta  $[V, X_A]$  muturren artean), hodi-formako erreaktorearen diseinu-ekuazioa lortuko da:

$$V = F_{A,0} \cdot \int_{X_{A,0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \quad (18.3)$$

$$\frac{V}{Q} = \tau = C_{A,0} \cdot \int_{X_{A,0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \quad (18.4)$$

18.4 ekuazioari erreparatu, hodi-formako errektorearen diseinu-ekuazioa errektore ez-jarraituaren diseinu-ekuazioaren berdina da (17.13 ekuazioa); denbora kronologikoa ( $t_R$ ) denbora espazialaz ( $\tau$ ) aldatu besterik ez da behar. Erreakzio bat bihurtze-maila finkatu bateraino gauzatzeko errektoreak behar duen bolumenaren berri ematen du diseinu-ekuazioak.

Diseinu-ekuazioa analitikoki zein grafikoki ebatz daiteke. Horretarako, ekuazio zinetikoaren adierazpena jakin behar da. 18.3 irudian agertzen da diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa,  $\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}$  vs  $X_A$  kurbaren azpiko azalera (ilundutakoa) alegia.



18.3 irudia. Hodi-formako errektorearen diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa.

### Adibidea 18.1 adibidea

A  $\rightarrow$  B erreakzioa likido-egoeran gauzaten da hodi-formako errektore batean, isotermikoki. Erreaktorea 100 l/min-ko emariaz elikatzen da, eta  $C_{A,0} = 1$  mol/l da. Kalkula dezagun (a) errektoreak zer bolumen izan behar duen 0,6ko bihurtze-maila lortzeko, (b) 3000 l-ko bolumeneko errektorean zer bihurtze-maila lortuko litzatekeen.

Datuak: erreakzioaren ekuazio zinetikoa  $(-r_A)(\text{mol/l min}) = 0,1 \cdot C_A^2$  da.



*Ebazpen analitikoa*

(a) Hasteko, errektorera sartzen den Aren emari molarra kalkulatu da:

$$F_{A,0} = Q \cdot C_{A,0} = 100 \text{ mol/min.}$$

Hau da ekuazio zinetikoa bihurtze-maila aldagaitzat hartzen bada:

$$(-r_A) \left( \frac{\text{mol}}{\text{l min}} \right) = 0,1 \cdot C_{A,0}^2 \cdot (1 - X_A)^2$$

Balioa diseinu-ekuazioan ordezkatu eta 0-0,6 tartean integratzen bada (erreaktore sarreran bihurtze-maila 0 baita):

$$\frac{V}{Q} = \tau = 1 \cdot \int_0^{0,6} \frac{dX_A}{0,1 \cdot 1^2 \cdot (1 - X_A)^2} = 15 \text{ min}$$

15 min-ko denbora espaziala behar du. Elikatzen den emaria jakina denez, zer bolumen behar den kalkulatu da:

$$V = 15 \text{ min} \cdot 100 \text{ l/min} = 1500 \text{ l}$$

(b) Bigarren ordenako ekuazioa izanik,  $\frac{X_A}{1 - X_A} = C_{A,0} \cdot k \cdot \tau$  da (17.17 ekuazioa).

$$\frac{X_A}{1 - X_A} = 1 \cdot 0,1 \cdot \frac{3000}{100}$$

Beraz,  $X_A = 0,75$  bihurtze-maila lortuko litzateke.

**Adibidea**

### 18.2 adibidea

$A + B \rightarrow C$  gas-egoerako erreakzioa hodi-formako erreaktore batean gauzatzen da, isotermikoki. Erreaktorean 250 mol/min-ko emaria elikatzen da (konposizio molarra % 40 A; % 50 B; % 10 inerte izanik). Erreaktore-sarreran  $C_{A,0} = 1$  mol/l bada, kalkula dezagun (a) erreaktoreak zer bolumen izan behar duen 0,6ko bihurtze-maila lortzeko, (b) 1000 l-ko bolumeneko erreaktorean A-ren zer bihurtze-maila lortuko litzatekeen.

Datuak: ekuazio zinetikoa ( $-r_A$ ) (mol/l min) =  $0,1 \cdot C_A \cdot C_B$  da.

#### Ebazpen grafikoa

Gas-faseko erreakzioa denez eta  $\Delta n \neq 0$  denez, lehenengo,  $\varepsilon_A$  kalkulatu da 17.7 ekuazioan oinarrituz:

$$\varepsilon_A = -0,4.$$

Erreaktorera sartzen den emari bolometrikoa  $Q = F_{A,0}/C_{A,0} = 250/1 = 250$  l/min da.

$M = C_{A,0}/C_{B,0} = 1,25$  bada, A eta B erreaktiboen kontzentrazioak hauek dira  $X_A$ -ren funtzioan:

$$C_A = \frac{C_{A,0} \cdot (1 - X_A)}{(1 + \varepsilon_A \cdot X_A)} = \frac{1 \cdot (1 - X_A)}{(1 - 0,4 \cdot X_A)} \quad ; \quad C_B = \frac{C_{A,0} \cdot (M - X_A)}{(1 + \varepsilon_A \cdot X_A)} = \frac{1 \cdot (1,25 - X_A)}{(1 - 0,4 \cdot X_A)}$$

Ekuazio zinetikoa hau litzateke:

$$(-r_A) = 0,1 \cdot \frac{1 \cdot (1 - X_A)}{(1 - 0,4 \cdot X_A)} \cdot \frac{1 \cdot (1,25 - X_A)}{(1 - 0,4 \cdot X_A)}$$

Diseinu-ekuazioak itxura hau hartzen du:

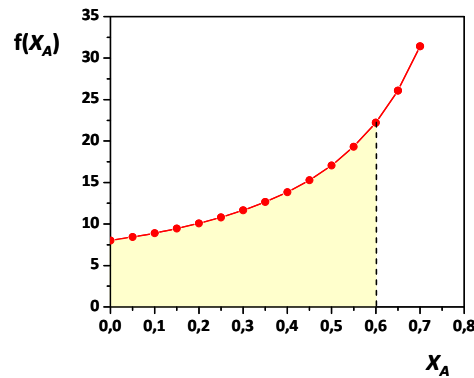
$$\frac{V}{Q} = \tau = 1 \cdot \int_0^{0,6} \frac{(1 - 0,4 \cdot X_A)^2 dX_A}{0,1 \cdot 1 \cdot (1 - X_A) \cdot 1 \cdot (1,25 - X_A)}$$

Grafikoki ebazteko,  $f(X_A)$  vs.  $X_A$  irudikatuko da ( $f(X_A) = C_{A,0}/(-r_A)$  izanik), eta kurbaren azpiko azalera kalkulatu da  $X_A = 0$  eta  $X_A = 0,6$  bitartean.

$$f(X_A) = \frac{(1 - 0,4 \cdot X_A)^2}{0,1 \cdot (1 - X_A) \cdot 1 \cdot (1,25 - X_A)}$$

Kurba irudikatu ahal izateko ondoko taula eraiki da:

|          |   |      |     |      |       |      |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
|----------|---|------|-----|------|-------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $X_A$    | 0 | 0,05 | 0,1 | 0,15 | 0,2   | 0,25 | 0,3   | 0,35  | 0,4   | 0,45  | 0,5   | 0,55  | 0,6   | 0,65  | 0,7   |
| $f(X_A)$ | 8 | 8,42 | 8,9 | 9,45 | 10,08 | 10,8 | 11,65 | 12,64 | 13,84 | 15,28 | 17,07 | 19,31 | 22,22 | 26,08 | 31,42 |



Azalera =  $\tau = 7,63$  min kalkulatu da. Erreaktorearen bolumena  $V = 7,63 \text{ min} \cdot 250 \text{ l/min} = 1907 \text{ l}$  da.

### 18.3 HODI-FORMAKO ERREAKTORE IDEALEN ERAGIKETA-MODUAK

Beste edozein erreaktore bezala, hodi-formako erreaktoreak isotermikoki, adiabatikoki edo ez-adiabatikoki eta ez-isotermikoki lan egin dezake.

Isotermikoki diharduen erreaktore idealean erreaktore osoan zehar tenperatura uniformea denez, ekuazio zinetikoko konstante zinetikoa ( $k$ ) integraletik kanpora atera daiteke, eta ebazpen analitikoa zein grafikoa egin daiteke. Arestian azaldu da, 18.1 eta 18.2 adibideen bitartez, horrelako ebazpena.

#### 18.3.1 Erreaktore adiabatikoa

Erreaktorearen diseinu-ekuazioa (osagai mugatzailearen masa-balantzea, alegia) 18.4 ekuazioa da, arestian azaldu den bezala. Hala ere, erreaktoreko zati desberdinetan tenperatura desberdina izango denez, adiabatikoki diharduen erreaktorearen diseinua egiteko orduan,  $dV$  zatian energia-balantzea egin behar da erreaktoreko zati bakoitzeko tenperatura kalkulatzeko.

$$\begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{IRTETE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenetik} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{SARTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenera} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{SORTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{pmatrix}$$

Ohar gaitezen energia-balantzea egoera geldikorra lortu duen erreaktorean egin dela. Erreaktore barruko nahastea osatzen duen osagai bakoitzaren ( $i = 1, \dots, C$ ) batez besteko bero espezifikoa hartzen bada ( $\overline{C_{p,i}}$ ) eta tenperatura-tarte guztirako erreakzio-beroaren batez besteko balioa ( $-\overline{\Delta H_r}$ ) erabiltzen bada, hau da energia-balantzea:

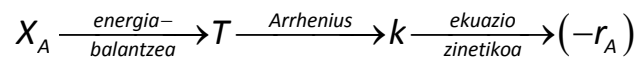
$$\sum_{i=1}^C (F_i \cdot \overline{C_{p,i}}) \cdot dT = (-\overline{\Delta H_r}) \cdot F_{A,0} \cdot dX_A \quad (18.5)$$

Ekuazioan  $\sum_{i=1}^C (F_i \cdot \overline{C}_{p,i})$  terminoa energiaren irtete- eta sartze-abiaduren erresultantea da.

Erreaktorearen sarrera ( $T_0, X_{A,0}$ ) eta irteera ( $T, X_A$ ) tartean integratuz:

$$T = T_0 + (-\overline{\Delta H}_r) \cdot F_{A,0} \cdot \int_{X_{A,0}}^{X_A} \frac{dX_A}{\sum_{i=1}^C (F_i \cdot \overline{C}_{p,i})} \quad (18.6)$$

Hala,  $X_A$  bihurtze-maila duen zatiaren tenperatura kalkula daiteke. Hemendik aurrerako prozedura erreaktore ez-jarraituan azaldutakoaren berbera da:



Hau da, bihurtze-maila bakoitza energia-balantzean sartu eta bihurtze-maila hori daukan erreaktore zatiko tenperatura kalkulatu da. Ekuazio zinetikoan erabili behar den konstante zinetikoa Arrhenius-en ekuazioak ematen du. Diseinu-ekuazioa grafikoki ebatzi behar da.

### 18.3.2 Erreaktore ez-adiabatikoa eta ez-isotermikoa

Hala diharduen erreaktoreak ingurunearekin beroa trukatu duen arren, bero hori ez da isotermikotasuna bermatzeko adina. Horregatik, energia-balantzean trukatzeko terminoa kontuan hartu behar da:

$$0 = \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{SARTZE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenera} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{IRTETE-abiadura} \\ dV \text{ bolumenetik} \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{SORTZE/XURGATZE} \\ \text{-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} \text{Energiaren} \\ \text{TRUKATZE} \\ \text{-abiadura} \\ dV \text{ bolumenean} \end{pmatrix}$$

$$\sum_{i=1}^C (F_i \cdot \overline{C}_{p,i}) \cdot dT = (-\overline{\Delta H}_r) \cdot F_{A,0} \cdot dX_A + U \cdot A \cdot (T_{ING} - T) \quad (18.7)$$

$T_{ING}$  inguruneke tenperatura,  $U$  bero-trukerako koefiziente globala eta  $A$  bero-trukerako azalera izanik.

Energia-balantzea eta masa-balantzea batera ebatzi behar dira. Ebazpena astuna izaten da, eta hurrengo ikasturte batean ikusiko dugu.

### Adibidea 18.3 adibidea

Likido-fasean  $A \rightarrow B + C$  erreakzioa gauzatzen da hodi-formako erreaktorean adiabatikoki; elikadura (100 mol/s, moleen % 100 A) 25 °C-an sartzen da. Kalkula dezagun Aren % 80 bihurtzeko erreaktoreak izan behar duen bolumena.

Datuak: elikadura  $C_{A,0} = 2$  mol/l da.

Ekuazio zinetikoa ( $-r_A$ ) (mol/l s) =  $k \cdot C_A$  da, eta  $k = 600 \cdot e^{(-2000/T)} \text{ s}^{-1}$  da.

$(-\overline{\Delta H}_r) = -5$  kcal/mol da.

Osagaien batezbesteko bero espezifikoak ( $\overline{C}_{p,i}$ ) (cal/molK): A = 15; B = 20; C = 15.

*Ebazpena*

Ekuazio zinetikoa  $(-r_A)$  (mol/l·s) =  $k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A) = k \cdot 2 \cdot (1 - X_A)$  moduan idazten da.

Energiaren irtete-eta sartze-abiaduren batukaria kalkulatu da:

$$\sum_{i=1}^3 (F_i \cdot \overline{C_{P,i}}) = F_A \cdot \overline{C_{P,A}} + F_B \cdot \overline{C_{P,B}} + F_C \cdot \overline{C_{P,C}} = F_{A,0} \cdot (1 - X_A) \cdot \overline{C_{P,A}} + F_{A,0} \cdot X_A \cdot \overline{C_{P,B}} + F_{A,0} \cdot X_A \cdot \overline{C_{P,C}}$$

$$\sum_{i=1}^3 (F_i \cdot \overline{C_{P,i}}) = 1500 + 2000 \cdot X_A \left( \frac{\text{cal}}{\text{sK}} \right)$$

(18.6) ekuazioko integrala kalkulatu da:

$$\int_{X_{A,0}}^{X_A} \frac{dX_A}{\sum_{i=1}^3 (F_i \cdot \overline{C_{P,i}})} = \int_0^{0,6} \frac{dX_A}{1500 + 2000 \cdot X_A} = \frac{1}{2000} \cdot \ln \left( 1 + \frac{1}{3} \cdot X_A \right) \left( \frac{\text{sK}}{\text{cal}} \right)$$

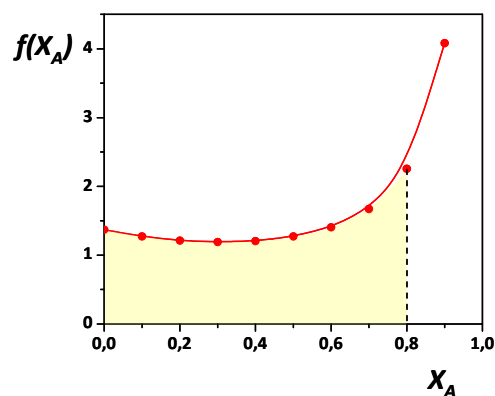
Temperatura bihurtze-mailaren funtzioan idatziz:

$$T(^{\circ}\text{C}) = 25 + 5 \cdot 10^3 \left( \frac{\text{cal}}{\text{mol}} \right) \cdot 10^2 \left( \frac{\text{mol}}{\text{s}} \right) \cdot \frac{1}{2000} \cdot \ln \left( 1 + \frac{1}{3} \cdot X_A \right) \left( \frac{\text{sK}}{\text{cal}} \right)$$

$$T(^{\circ}\text{C}) = 25 + 250 \cdot \ln \left( 1 + \frac{1}{3} \cdot X_A \right)$$

Temperatura kalkulatzeko adierazpenarekin, taula hau bete da, eta  $(C_{A,0}/(-r_A))$  vs.  $X_A$  irudia marraztu da:

| $X_A$ | $T(^{\circ}\text{C})$ | $k (\text{s}^{-1})$ | $(-r_A)$ | $f(X_A)$ |
|-------|-----------------------|---------------------|----------|----------|
| 0     | 25                    | 0,7                 | 1,46     | 1,370    |
| 0,1   | 33,2                  | 0,9                 | 1,57     | 1,271    |
| 0,2   | 41,1                  | 1,0                 | 1,65     | 1,213    |
| 0,3   | 48,8                  | 1,2                 | 1,68     | 1,190    |
| 0,4   | 56,3                  | 1,4                 | 1,66     | 1,206    |
| 0,5   | 63,5                  | 1,6                 | 1,57     | 1,270    |
| 0,6   | 70,6                  | 1,8                 | 1,42     | 1,406    |
| 0,7   | 77,4                  | 2,0                 | 1,20     | 1,672    |
| 0,8   | 84,1                  | 2,2                 | 0,89     | 2,255    |
| 0,9   | 90,6                  | 2,5                 | 0,49     | 4,081    |



Kurbaren azpiko azalera (ilundutakoa)  $V/Q = 1,1$  s izanik, erreaktorearen bolumena kalkulatu da:

$$V = 0,11 \text{ s} \cdot 50 \text{ l/s} = 5,5 \text{ l da.}$$



## 18.4 HODI-FORMAKO ERREAKTORE IDEAL SORTAK

Maiz, erreaktore bakarrarekin lan egin ordez, erreaktore sortekin lan egiten da, bai ekoizpena handitzeko, bai bihurtze-maila handitzeko. Erreaktoreak *seriean* (*ondoz ondo*) zein *paraleloan* koka daitezke, 18.4 irudian ikusten den bezala.

Seriean kokatutako erreaktore sortan,  $(N-1)$ . erreaktoreko irteerako bihurtze-mailaz elikatzen da  $N$ . erreaktorea. Hala diharduen sisteman, irteeran lortzen den bihurtze-maila azkeneko erreaktorean lortutakoa da.

Hodi-formako erreaktorearen diseinu-ekuazioaren arabera,  $\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}$  vs  $X_A$  kurbaren azpiko

azalerak erreaktorearen denbora espaziala ematen du, hau da, bolumenaren berri ematen du. 18.5 iruditik erator daitekeenez,  $X_{A,N}$  bihurtze-maila lortzeko, seriean kokatutako  $N$

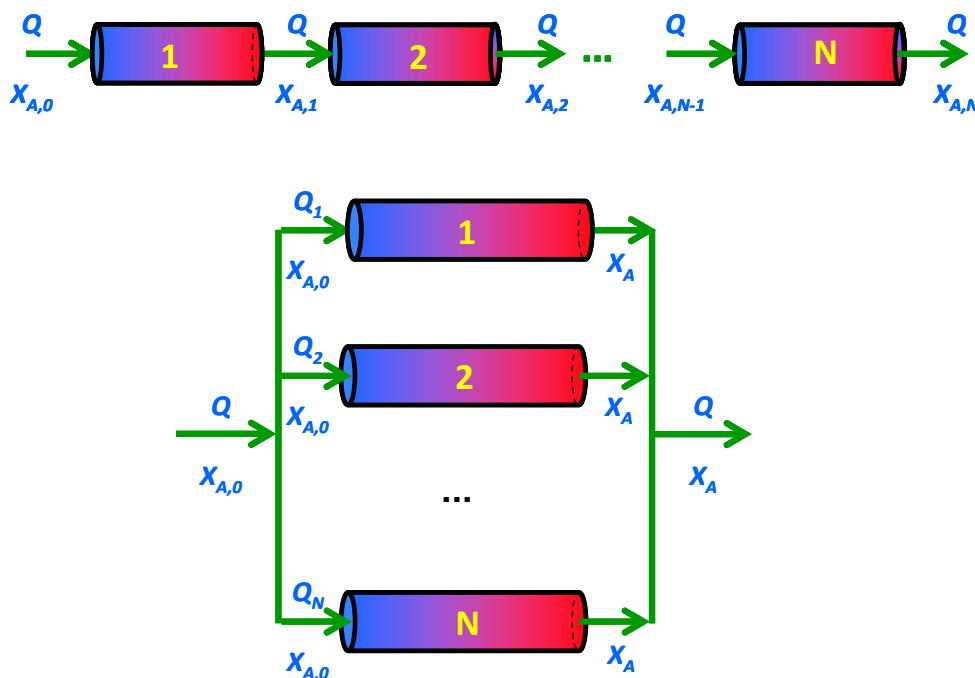
erreaktorez osatutako sistemaren denbora espazial osoa  $\left( \sum_{i=1}^N \frac{V_i}{Q} \right)$ ,  $\sum_{i=1}^N V_i$  bolumeneko

erreaktore bakarraren denbora espazialaren berdina da, hau da,

$$V_{Osoa} = \sum_{i=1}^N V_i \quad (18.8)$$

$$\tau_{OSOA} = \sum_{i=1}^N \tau_i \quad (18.9)$$

(sortako erreaktore guztiek tenperatura berean eta isotermikoki badihardute).



18.4 irudia. Seriean (*ondoz ondo*) eta paraleloan kokatutako hodi-formako erreaktore sortak.

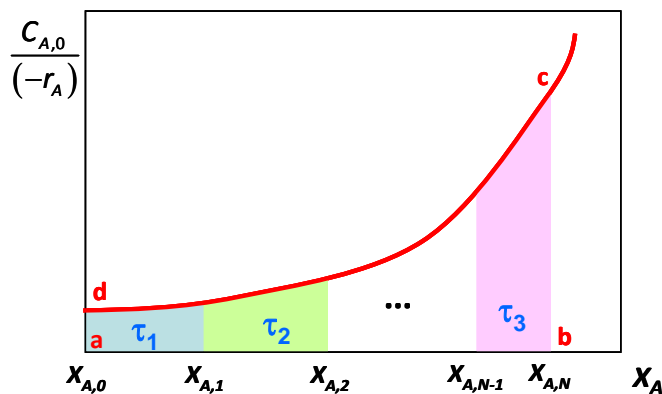
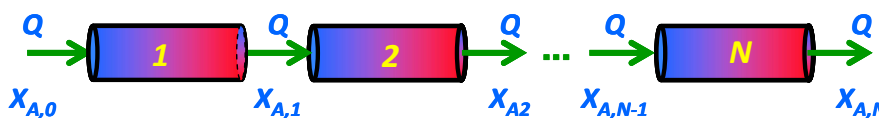
Erreaktoreak paraleloan kokatzen badira, sisteman ekoizpen maximoa lortzen da erreaktore guztietan bihurtze-maila berdina lortzen denean, hau da, guztiek denbora espazial berdina

dutenean. Bihurtu beharreko elikadura  $N$  korrontetan banatzen da, eta korronte bakoitza dagokion errektorerera sartzen da:

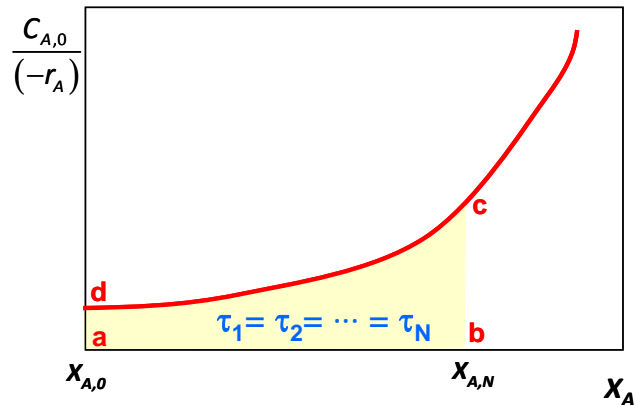
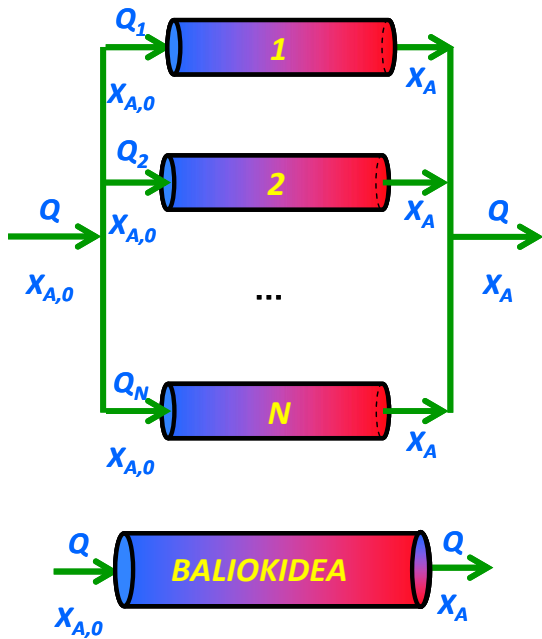
$$Q_{OSOA} = Q_1 + Q_2 + \dots + Q_N = \sum_{i=1}^N Q_i \quad (18.10)$$

$$\left(\frac{V}{Q}\right)_1 = \left(\frac{V}{Q}\right)_2 = \dots = \left(\frac{V}{Q}\right)_N \quad (18.11)$$

18.5 eta 15.6 irudietan agertzen dira seriean eta paraleloan kokatutako hodi-formako errektore sorten diseinu ekuazioa grafikoki marraztuta. Gonbaratzeko, sorta bakoitzaren baliokidea den errektorea azaltzen da. Seriean kokatutako errektore sortan, errektore bakoitzean bihurtze-maila bat lortzen da, hurrengo errektorean handitzen dena. Azken errektorean lortzen den bihurtze-maila da sorta osoan lortutakoa. Seriean kokatutako  $N$  errektore sortaren baliokidea den errektore batek, bihurtze-maila berdina lortu nahi bada, **abcd** azalerako denbora espaziala beharko luke. Paraleloan kokatutako errektore sortan, errektore guztietan bihurtze-maila berdina lortzen da, sorta osoan lortzen dena, alegia. Sortaren baliokidea den errektoreak **abcd** azalerako denbora espaziala beharko luke, sortako edozein errektoreren berdina.



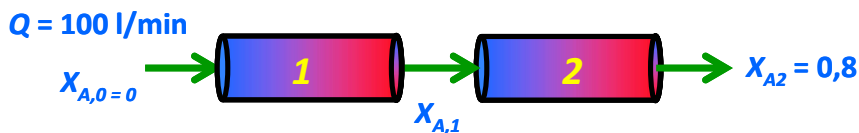
18.5 irudia. Seriean (ondo ondo) kokatutako hodi-formako errektore sorta.



18.6 irudia. Paraleloan kokatutako hodi-formako erreaktore sorta.

**Adibidea** 18.4 adibidea

Seriean dauden hodi-formako bi erreaktoreko sisteman (biak bolumen berekoak)  $A \rightarrow B$  likido faseko erreakzioa gauzatzen da, irteeran  $X_A = 0,8$  izan arte. Erreaktoreko elikadura  $Q = 100 \text{ l/min}$  eta  $C_{A,0} = 1 \text{ mol/l}$  bada, kalkula ditzagun (a) lehenengo erreaktorearen irteerako bihurtze-maila, (b) erreaktore bakoitzaren bolumena, (c) erreakzioa erreaktore bakarrean gertatuko balitz erreaktoreak izan beharko lukeen bolumena. Datuak: erreakzioa isotermikoki gauzatzen da, eta bi erreaktoreetan tenperatura berdina da.  $(-r_A)(\text{mol/lmin}) = 1 \cdot C_A$  da.



Ebazpen analitikoa

(a)

Lehen erreaktorearen diseinu-ekuazioa:

$$\tau_1 = \frac{C_{A,0}}{1 \cdot C_{A,0}} \int_0^{X_{A,1}} \frac{dX_A}{1 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_{A,1})} = \ln \left( \frac{1}{1 - X_{A,1}} \right)$$

Bigarren erreaktorearen diseinu-ekuazioa:

$$\tau_2 = \frac{C_{A,0}}{1 \cdot C_{A,0}} \int_{X_{A,1}}^{0,8} \frac{dX_A}{1 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)} = \ln \left( \frac{1 - X_{A,1}}{1 - 0,8} \right)$$

Bien bolumena berdina denez, denbora espaziala ere berdina da:  $\tau_1 = \tau_2$ .

Bi ekuazioak berdinduz,  $X_{A,1} = 0,553$  lortzen da lehen erreaktorearen irteeran.

(b)  $V_1 = V_2 = 80,5$  l.

(c)

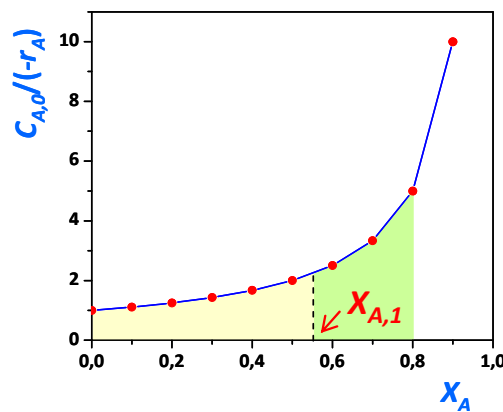
$Q = 100$  l/min  
 $X_{A,0} = 0$  → →  $X_{A2} = 0,8$

$$\tau = \int_0^{0,8} \frac{dX_A}{1 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A)} = \ln\left(\frac{1}{1 - 0,8}\right) \quad ; \quad V = 161$$

Ebazpen grafikoa

$\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}$  vs  $X_A$  kurba marraztuko da, horretarako ondoko taula eraikitzen delarik.

|                  |   |      |      |      |      |     |     |      |     |     |
|------------------|---|------|------|------|------|-----|-----|------|-----|-----|
| $X_A$            | 0 | 0,1  | 0,2  | 0,3  | 0,4  | 0,5 | 0,6 | 0,7  | 0,8 | 0,9 |
| $C_{A,0}/(-r_A)$ | 1 | 1,11 | 1,25 | 1,43 | 1,67 | 2   | 2,5 | 3,33 | 5   | 10  |

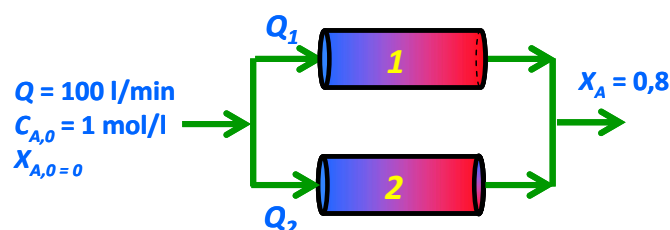


$X_{A,1}$  balioa haztapenez lortu da, eta bi azalerak berdinak izan arte aplikatu da prozedura. Irudian ilundutako azalera lehen erreaktorearen diseinu-ekuazioaren adierazpen grafikoa da, eta marrez estalitako azalera bigarren erreaktorearen diseinu-ekuazioaren adierazpen grafikoa da.

**Adibidea** 18.5 adibidea

Paraleloan dauden hodi-formako bi erreaktoreko sisteman (bolumenen arteko erlazioa  $V_1 = 2 \cdot V_2$  izanik), likido-egoerako  $A \rightarrow B$  erreakzioa gertatzen da,  $(-r_A)$ (mol/lmin) =  $1 \cdot C_A$  izanik, irteeran  $X_A = 0,8$  izan arte. Sistemara sartzen den emari osoa  $Q = 100$  l/min bada eta elikaduran  $C_{A,0} = 1$  mol/l bada, kalkula ditzagun ekoizpena maximoa izan dadin (a) erreaktore bakoitzera zer emari sartu behar den (b) erreaktore bakoitzak izan behar duen bolumena (c) zenbat B ekoizten den.

Ebazpena



Ekoizpena maximoa izan dadin, bi errektoretan bihurtze-maila berdina lortu behar da, hau da, biek denbora espazial berdina eduki behar dute.

Lehen ordenako ekuazioa izanik, hau da errektore bakoitzaren diseinu-ekuazio integratua:

$$\tau = \frac{1}{k} \ln(1 - X_A)$$

(a)

$$\left. \begin{aligned} \tau_1 &= \ln\left(\frac{1}{1-0,8}\right) = 1,61 \text{ min} \\ \tau_2 &= \ln\left(\frac{1}{1-0,8}\right) = 1,61 \text{ min} \end{aligned} \right\} \frac{2 \cdot V_2}{Q_1} = \frac{V_2}{100 - Q_1} ; Q_1 = 66,7 \text{ l/min} ; Q_2 = 33,3 \text{ l/min}$$

(b)  $\frac{V_1}{(66,7)} = 1,61 = \frac{V_2}{(33,3)} ; V_1 = 107,4 \text{ l} ; V_2 = 53,6 \text{ l}$

(c) Adar bakoitzean zenbat B ekoizten den:

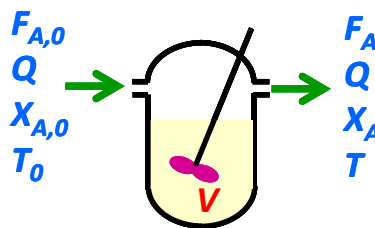
$$F_{B,1} = Q_1 \cdot C_{A,0} \cdot X_A = 66,7 \text{ (l/min)} \cdot 1 \text{ (mol/l)} \cdot 0,8 = 53,36 \text{ mol/min lehen adarreko errektorean.}$$

$$F_{B,2} = Q_2 \cdot C_{A,0} \cdot X_A = 33,3 \text{ (l/min)} \cdot 1 \text{ (mol/l)} \cdot 0,8 = 26,68 \text{ mol/min bigarren adarreko errektorean.}$$

Guztira, 80,04 mol/min ekoizten da.

## 18.5 NAHASTE PERFEKTUZKO ERREAKTORE IDEALA (CSTR)

Erreaktore mota honen ezaugarri nagusia hau da: errektoreko edukia guztiz nahasita egotea. Erreaktore idealean, errektore barruko bolumen-elementu guztiak nahasita daude, eta, horren ondorioz, errektore barruan baldintza homogeneoa dago. Gainera, errektoretik irteten den korrontea errektore barruko kondizio berean (tenperatura, bihurtze-maila eta kontzentrazio berean) dago. Baldintza edo hipotesi horri **nahaste ideal edo perfektuaren eredu** deritzo (ikusi 18.6 irudia). Erreaktorearen itxura dela eta, tangarako errektore jarraitu ere baderitze.



### 18.7 irudia. Nahaste perfektuzko errektore idealak (CSTR, *Continuously Stirred Tank Reactor*).

Nahastearen likatasuna oso handia ez bada eta irabiaketa ona bada, idealtasuna lor daiteke. Idealtasunetik desbideratzeko arrazoi nagusiak hauek dira: birziklazioak, saihesbideak eta nahasterik gabeko eremu hilak sortzea.

Horrelako kasuetan, hodi-formako errektoreak erabili beharrean errektore hauek erabiltzea hobesten da:

- (a) Tenperaturaren kontrola kritikoa denean, polimerizazioen kasuan adibidez (glizerinaren nitrazioa).

- (b) Erreakzioa fase anitzekoa denean. Adibidez, olioaren hidrogenazioa margarina ekoizteko.
- (c) Katalizatzailea esekita eduki behar denean; etilenoaren polimerizazioan, adibidez.

## 18.6 NAHASTE PERFEKTUZKO ERREAKTORE IDEALAREN DISEINU-EKUAZIOA

Egoera geldikorrean diharduen erreaktorean, hau da A osagai mugatzailearen masa-balantzea, erreaktorearen bolumen osorako ( $V$ ), egoera geldikorrean:

$$\left( \begin{array}{c} \text{A-ren} \\ \text{SARTZE-abiadura} \\ V \text{ bolumenean} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{A-ren} \\ \text{IRTETE-abiadura} \\ V \text{ bolumenetik} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{A-ren} \\ \text{DESAGERTZE-abiadura} \\ V \text{ bolumenean} \end{array} \right)$$

$$F_{A,0} = F_A + (-r_A) \cdot V \quad (18.12)$$

$$F_{A,0} \cdot (1 - X_{A,0}) = F_A \cdot (1 - X_A) + (-r_A) \cdot V \quad (18.13)$$

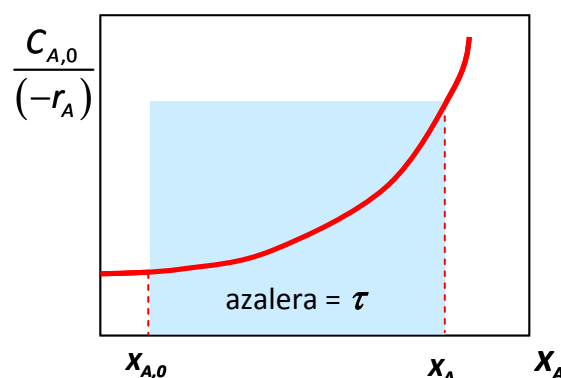
$$V = F_{A,0} \cdot \frac{(X_A - X_{A,0})}{(-r_A)} \quad (18.14)$$

$$\frac{V}{Q} = \tau = C_{A,0} \cdot \frac{(X_A - X_{A,0})}{(-r_A)} \quad (18.15)$$

Ohartu gaitezen erreakzio-abiadura erreaktore-irteerako kondizioan neurtua dagoela (irteerako  $X_A$  eta tenperatura).

Hodi-formako erreaktoreetan bezala, diseinu-ekuazioa analitikoki zein grafikoki ebatz daiteke, ekuazio zinetikoa jakina bada. 18.8 irudian agertzen da erreaktore honen ebazpen grafikoa. Ikusten da erreaktorearen denbora espaziala lauki zuzen bat dela, ( $X_A - X_{A,0}$ ) oinarria

eta irteerako kondizioan  $\left( \frac{C_{A,0}}{(-r_A)} \right)$  altuera duena.



18.8 irudia. Nahaste perfektuzko erreaktore idealaren diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa.

### Adibidea 18.6 adibidea

A  $\rightarrow$  B erreakzioa likido-egoeran gauzatzen da tanga-erako erreaktore jarraian, isotermikoki. Erreaktorera 100 l/min emaria elikatzen da, eta  $C_{A,0} = 1$  mol/l da. Kalkula dezagun (a) 0,6-ko

bihurtze-maila lortzeko behar den erreaktorearen bolumena (b) 3000 l bolumeneko erreaktore isothermoan lortuko litzatekeen bihurtze-maila.

Datuak: Ekuazio zinetikoa  $(-r_A)(\text{mol/l min}) = 0,1 \cdot C_A^2$  da.

*Ebazpen analitikoa*

(a) Diseinu-ekuazioaren arabera:

$$\tau = C_{A,0} \cdot \frac{X_A - X_{A,0}}{(-r_A)} = \frac{0,6 - 0}{0,1 \cdot C_{A,0} \cdot C_{A,0} \cdot (1 - 0,6)^2} = \frac{0,6 - 0}{0,1 \cdot 1 \cdot (1 - 0,6)^2} = 37,5 \text{ min}$$

Beraz, 37,5 minutuko denbora espazialaz lan egin beharko luke.

Ohar gaitezen erreakzio bera kondizio berdinetan hodi-formako erreaktorean egitean (18.1 adibidea) 15 min denbora espaziala behar zuela.

(b)  $\frac{3000}{100} = \frac{X_A - 0}{0,1 \cdot C_{A,0} \cdot 1 \cdot (1 - X_A)^2}$ ;  $X_A = 0,566$  (18.1 adibideko hodi-formakoan 0,75 lortzen zen).

### Adibidea 18.7 adibidea

$A + B \rightarrow C$  gas-egoerako erreakzioa tanga-erako erreaktore jarraituan gauzatzen da, isothermikoki. Erreaktorera 250 mol/min emaria sartzen da (konposizio molarra % 40 A, % 50 B eta % 10 inerte da). Erreaktore-sarreran  $C_{A,0} = 1$  mol/l da. Kalkula ditzagun (a) 0,6ko bihurtze-maila lortzeko erreaktorearen bolumena, (b) 1000 l-ko bolumeneko erreaktorean lortuko litzatekeen  $A$ ren bihurtze-maila.

Datuak: ekuazio zinetikoa  $(-r_A) (\text{mol/l min}) = 0,1 \cdot C_A \cdot C_B$  da.

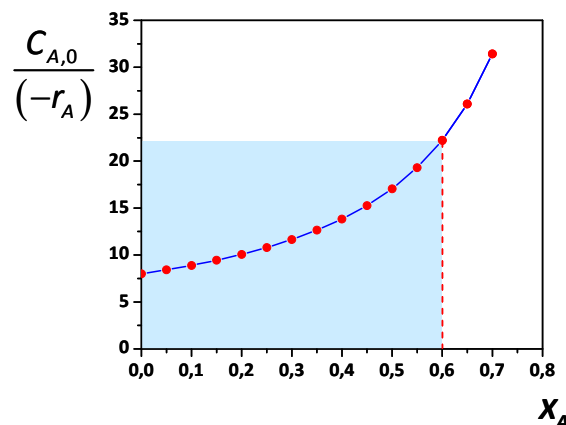
*Ebazpen grafikoa*

18.2 adibidean ikusi den bezala, erreakzio horren ekuazio zinetikoa hau da:

$$(-r_A) = 0,1 \cdot \frac{1 \cdot (1 - X_A)}{(1 - 0,4 \cdot X_A)} \cdot \frac{1 \cdot (1,25 - X_A)}{(1 - 0,4 \cdot X_A)}$$

Diseinu-ekuazioa ebazteko,  $\frac{C_{A,0}}{(-r_A)}$  vs  $X_A$  irudikatuko da  $X_A = 0$  eta  $X_A = 0,6$  tartean. Azken balio

horri dagokion laukizuzenaren azalerak denbora espaziala ematen du. (Irudia egiteko datuak 18.2 adibideko taulakoak dira).



Laukizuzenaren azalera denbora espazialaren berdina denez,

$$\tau = (0,6-0) \cdot 22,22 = 13,33 \text{ min}$$

(a)  $V = 3333 \text{ l}$

(b)  $V/Q = 4 \text{ min}$ . Haztapenez ebatziko da;  $X_A$ -ri balio bat esleitu eta azalera kalkulatu da: 4 min.

$X_A \approx 0,33$  lortzen da.

### 18.6.1 Diseinurako metodo grafikoa

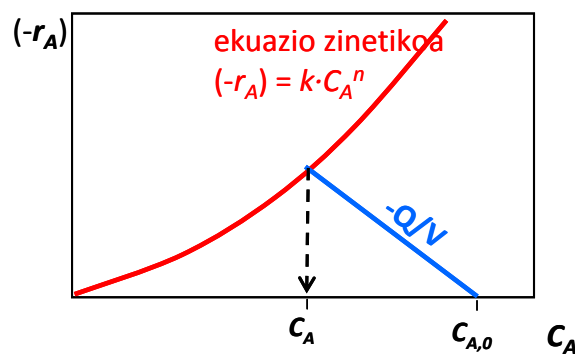
Erreaktore hauen masa-balantzeak beste modu batera ebatz daitezke, ondoren azalduko den bezala.

18.6 irudiaren arabera, A osagaiaren masa-balantzea honela idatz daiteke:

$$Q \cdot C_{A,0} = Q \cdot C_A + (-r_A) \cdot V \quad (18.16)$$

$$(-r_A) = -\frac{Q}{V} \cdot C_A + \frac{Q}{V} \cdot C_{A,0} \quad (18.17)$$

Masa-balantze hori grafikoki ebatziko da,  $(-r_A)$  vs  $C_A$  diagraman (18.9 irudia). Horretarako, ekuazio zinetikoa diagrama berean marrazten da. Masa-balantzea  $C_{A,0}$ -tik abiatzen den  $(-Q/V)$  maldako lerro zuzena da, eta ekuazio zinetikoarekin bat egiten du erreaktore-irteerako kontzentrazioan ( $C_A$ ).



18.9 irudia. Nahaste perfektuzko erreaktore idealaren diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa,  $(-r_A)$  vs  $C_A$  grafikoa.

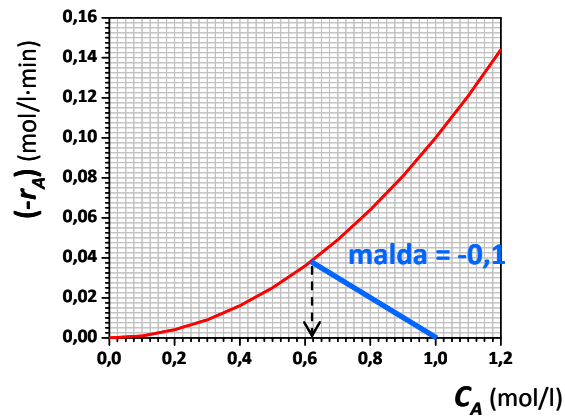
### Adibidea 18.8 adibidea

A  $\rightarrow$  B erreakzioa likido-egoeran gauzatzen da  $V = 1000 \text{ l}$  bolumeneko tanga-erako erreaktore jarraitu isotermoan. Erreaktorera  $100 \text{ l/min}$  emaria sartzen da, eta erreaktore-sarreran  $C_{A,0} = 1 \text{ mol/l}$  da. Ekuazio zinetikoa  $(-r_A) (\text{mol/l min}) = 0,1 \cdot C_A^2$  bada, kalkula dezagun zer bihurtze-maila lortzen den.

#### Ebazpena

Ekuazio zinetikoa irudikatuko da  $C_A = 0$  eta  $C_A = 1 \text{ mol/l}$  tartean. Masa-balantzearen lerroak  $(-Q/V) = -0,1 \text{ min}^{-1}$  malda badu, grafikoa  $C_A = 0,618 \text{ mol/l}$  irakurtzen da. Hala,  $X_A = 0,382$  bihurtze-maila lortzen da.





## 18.7 NAHASTE PERFEKTUZKO ERREAKTORE IDEALEN ERAGIKETA-MODUAK

Erreaktore mota hauek isotermikoki, adiabatikoki edo ez-adiabatikoki eta ez-isotermikoki lan egin dezakete. Erreaktore isotermikoa da orain arte aipatu eta landu dena. Erreaktoreak adiabatikoki edo ez-adiabatikoki eta ez-isotermikoki lan egiten duenean, energia-balantzea ebatzi behar da erreaktore barruko tenperatura kalkulatu ahal izateko.

### 18.7.1 Erreaktore adiabatikoa

Egoera geldikorrean diharduen tanga-erako erreaktore adiabatikoaren energia-balantzea egiteko orduan, erreaktore barruko nahastearen bero espezifikoa ( $\bar{C}_p$ ), dentsitatea ( $\bar{\rho}$ ) eta erreazio-beroa ( $-\bar{\Delta H}_r$ ) konstantetzat hartuko da.

Beraz, energia-balantzearen adierazpena hau da:

$$(-\bar{\Delta H}_r) \cdot (-r_A) \cdot V = (-\bar{\Delta H}_r) \cdot F_{A,0} \cdot (X_A - X_{A,0}) = \bar{Q} \cdot \bar{\rho} \cdot \bar{C}_p \cdot (T - T_0) \quad (18.18)$$

Hortik tenperatura askatzen bada:

$$T = T_0 + \frac{(-\bar{\Delta H}_r) \cdot F_{A,0} \cdot (X_A - X_{A,0})}{\bar{Q} \cdot \bar{\rho} \cdot \bar{C}_p} \quad (18.19)$$

Ekuazio hori ebaztean, irteerako bihurtze-mailari dagokion tenperatura kalkulatu da. Hortik aurrera, tenperatura horri dagokion konstante zinetikoa eta ekuazio zinetikoa kalkulatu ondoren, diseinu-ekuazioa kalkulatu behar da.

### Adibidea 18.9 adibidea

Adiabatikoki diharduen erreaktorean  $A \rightarrow B$  likido-faseko erreazioa gauzatzen da; elikadura  $C_{A,0} = 1$  mol/l,  $Q = 100$  l/min eta  $T_0 = 25$  °C dira. Kalkula ditzagun (a) erreaktoreak zer bolumen izan behar duen  $X_A = 0,6$  izateko, (b) zer bihurtze-maila lortzen den 4000 l-ko bolumeneko erreaktorean.

Datuak:  $(-r_A)(\text{mol/l min}) = k \cdot C_A$  da.

$(-\bar{\Delta H}_r) = 30$  kcal/mol ;  $\bar{C}_p = 0,95$  kcal/kg°C,  $\bar{\rho} = 1,08$  kg/l.

Arrhenius-en ekuazioa  $k = 5 \cdot 10^5 \cdot e^{(-5050/T)}$  min<sup>-1</sup> da.

*Ebazpena*

(a) Energia-balantzetik kalkulatzen da  $T = 25 + \frac{30 \cdot 100 \cdot 0,6}{100 \cdot 1,08 \cdot 0,95} = 42,5^\circ\text{C}$  temperaturan lan

egiten duela. Arrhenius-en ekuazioaren arabera, temperatura horri dagokion konstante zinetikoa  $k = 0,056 \text{ min}^{-1}$  da. Masa-balantzea ebazten bada:

$$\tau = C_{A,0} \cdot \frac{X_{A,IRT} - X_{A,0}}{(-r_A)_{IRT}} = \cancel{C_{A,0}} \cdot \frac{0,6 - 0}{0,056 \cdot \cancel{C_{A,0}} \cdot (1 - 0,6)} = 27 \text{ min} \text{ eta } V = 2700 \text{ l dira.}$$

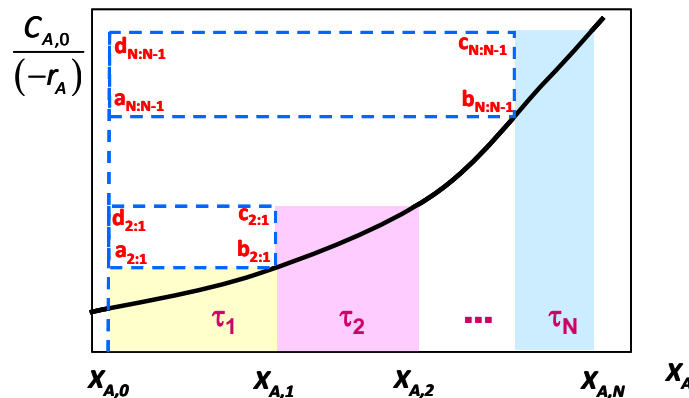
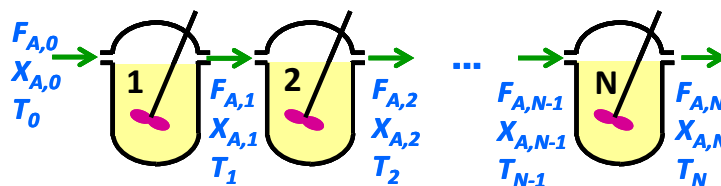
(c) Haztapenez ebatziko da. Kalkulu-prozesuaren datuak agertzen dira taulan:

| $X_A$ | $T (^\circ\text{C})$ | $k (\text{min}^{-1})$ | $\tau (\text{min})$ | $V (\text{l})$ |
|-------|----------------------|-----------------------|---------------------|----------------|
| 0,8   | 48,4                 | 0,075                 | 53,3                | 5330           |
| 0,7   | 45,5                 | 0,065                 | 36                  | 3600           |
| 0,73  | 46,3                 | 0,0676                | 39,95               | 3995           |

Beraz, erreaktorean  $\sim 0,73$ ko bihurtze-maila lortzen da.

### 18.8 NAHASTE PERFETUZKO ERREAKTORE SORTAK

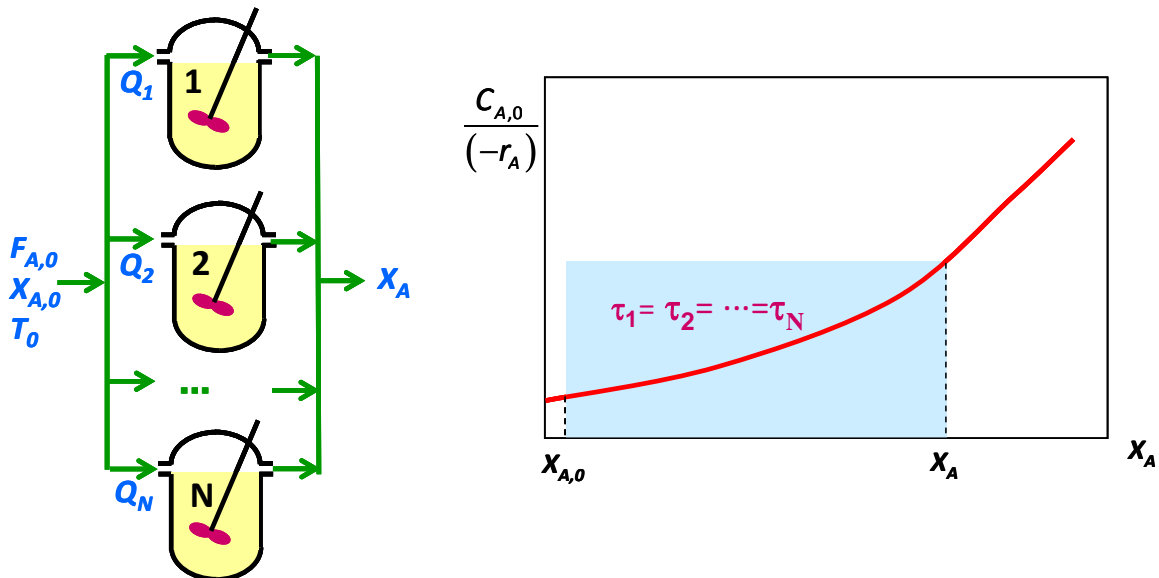
Nahaste perfektuzko erreaktore sortak seriean ala paraleloan koka daitezke, 18.10 eta 18.11 irudietan agertzen den bezala.



18.10 irudia. Seriean eraikitako erreaktore sorta eta diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa.

#### 18.8.1 Tanga-erako erreaktore sorta seriean

Bihurtze-maila finkatu bat lortzeko erreaktore handi bat erabili ordez erreaktore txikiagoz osatutako sorta erabiltzen badira, bolumen osoa txikitu egiten da. Adibidez, 18.10 irudian  $X_{A,2}$  lortzeko bi erreaktore erabiliko balira,  $V_1$  eta  $V_2$  bolumenak izango lituzkete (irudian  $\tau_1$  eta  $\tau_2$  azalera ematen dituzte). Bihurtze-maila berdina erreaktore bakarrean lortu nahi bada, azalera ( $\tau$ ) handiagoa beharko luke, marra ez-jarraituz irudikatutako azalera,  $a_{2:1}b_{2:1}c_{2:1}d_{2:1}$  (2:1 azpindizeak zera esan nahi du: erreaktore baten ordez bi erreaktore erabiltzea). Hau da, bi erreaktore erabiltzean marra ez-jarraituz irudikatutako azalera ematen duen denbora espaziala (eta, beraz, bolumena) aurreztu da.



18.11 irudia. Paraleloan eraikitako erreaktore sorta eta diseinu-ekuazioaren ebazpen grafikoa.

Argi dago: zenbat eta erreaktore gehiago erabili, orduan eta aurrezpen handiagoa lortuko da.  $N-1$  erreaktore erabili ordez  $N$  erabiltzean ere  $a_{N:N-1}b_{N:N-1}c_{N:N-1}d_{N:N-1}$  marra ez-jarraituz irudikatutako azalera aurrezten da. Limitean, oso bolumen txikiko infinitu erreaktorez osatutako sorta erabiliko balitz, laukizuzen guztien azalera osoa kurbaren azpiko azalerarekin bat letorke, hau da, hodi-formako erreaktorearekin bat letorke. Beraz, ikuspegi matematiko batetik, hodi-formako erreaktorea seriean kokatutako bolumen oso txikiko tanga-erako erreaktore sortaren baliokidea da.

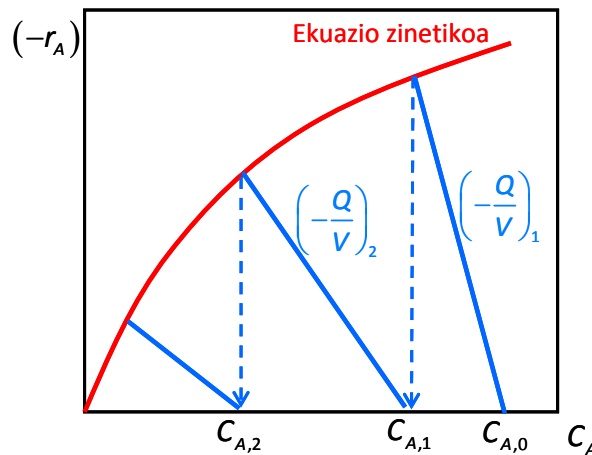
$N$ . erreaktoreko elikadura  $N-1$ . erreaktoreko irteera izanik, hau da erreaktore bakoitzaren diseinu-ekuazioa:

$$\tau_N = C_{A,0} \cdot \frac{(X_{A,N} - X_{A,N-1})}{(-r_A)_N} \quad (18.20)$$

Sortako lehen erreaktorearen diseinu ekuazioa  $\tau_1 = C_{A,0} \cdot \frac{(X_{A,1} - X_{A,0})}{(-r_A)_1}$  da, eta bihurtu gabeko elikadura bada,  $X_{A,0} = 0$  hartzen da.

Era berean,  $(-r_A)$  vs  $C_A$  grafikoa erabil daiteke masa-balantzearen ebazpen grafikoa egiteko (18.12 irudia) (masa-balantzea 18.17 ekuazio eran).

Erreaktore guztiak isotermaok badira eta tenperatura berean badihardute, laukizuzenaren azalera berdina izateaz gainera (18.10 irudian),  $(-Q/V)$  malda bereko lerro zuzenak izango dituzte (18.12 irudian). Erreaktoreek tenperatura desberdinetan lan egiten badute, tenperatura bakoitzari dagokion ekuazio zinetikoa erabili behar da.



18.12 irudia. Seriean kokatutako tanga-erako erreaktore sortaren ebazpen grafikoa,  $(-r_A)$  vs.  $C_A$  diagraman.

### Adibidea 18.10 adibidea

Seriean dauden tanga-erako bi erreaktoretan (bolumen berekoak)  $A \rightarrow B$  likido-egoerako erreakzioa gauzatzen da, irteeran  $X_A = 0,8$  izan arte. Lehen erreaktoreko elikadura  $Q = 100$  l/min eta  $C_{A,0} = 1$  mol/l bada, kalkula ditzagun (a) lehenengo erreaktorearen irteerako bihurtze-maila, (b) erreaktoreen bolumena, (c) erreaktoreak zer bolumen izan beharko lukeen erreakzioa erreaktore bakarrean egin izan balitz, (d) (b) ataleko bi erreaktoreek tenperatura desberdinean lan egingo balute lehenengo erreaktorean lortuko litzatekeen bihurtze-maila.

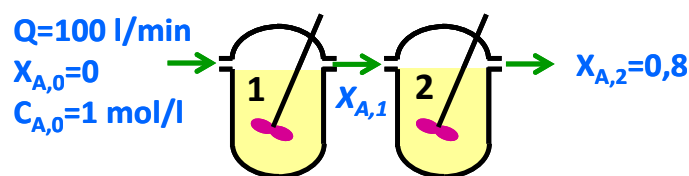
Datuak:  $(-r_A)(\text{mol/lmin}) = k \cdot C_A$  da.

(a), (b) eta (c) ataletako erreaktoreak isotermikoak dira eta  $k = 1 \text{ min}^{-1}$  balio du.

(d) atala ebazteko lehenengo erreaktorean  $k = 2 \text{ min}^{-1}$  dela eta bigarren erreaktorean  $k = 1 \text{ min}^{-1}$  direla hartuko da, biak isotermikoak.

Ebazpen analitikoak

(a)



Erreaktore bakoitzaren diseinu-ekuazioak:

$$\tau = \frac{C_{A,0} \cdot (X_{A,1} - 0)}{1 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_{A,1})} \text{ eta}$$

$$\tau = \frac{C_{A,0} \cdot (0,8 - X_{A,1})}{1 \cdot C_{A,0} \cdot (1 - 0,8)}$$

dira.

Bien bolumenak berdinak izanik denbora espazialek ere berdinak izan behar dutenez, bi ekuazioak berdinduta:  $X_{A,1} = 0,55$  lortzen da.

(b) Ekuazioan ordezkaturaz,  $V_1 = V_2 = 124$  l bolumeneko erreaktoreak izan behar dute.

(c)  $\tau = \frac{0,8-0}{1 \cdot C_{A,0} \cdot (1-0,8)} = 4 \text{ min}$  eta  $V = 400 \text{ l}$ . Ikusten den bezala, 276 l aurreztea lortu da

seriean jarritako bi errektore erabilita.

(d) Erreaktore bakoitzaren diseinu-ekuazioak:

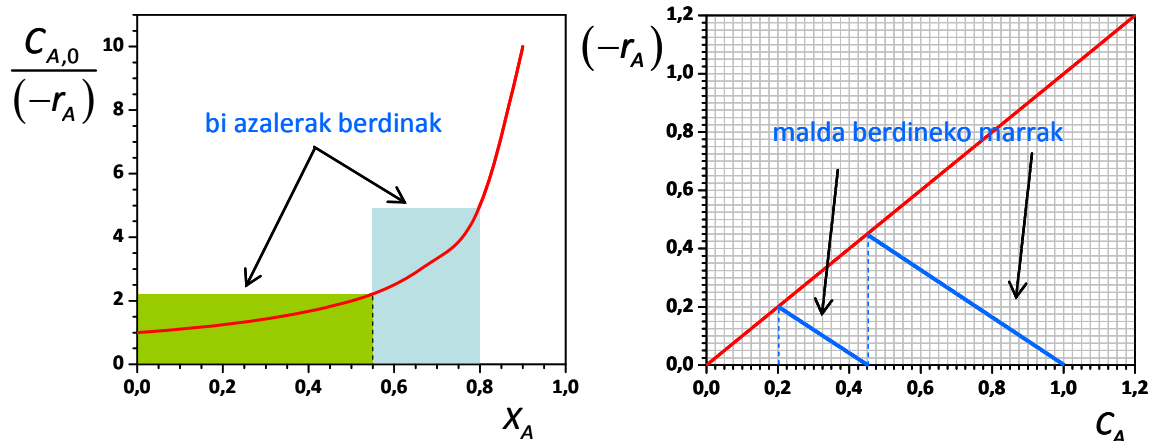
$$\tau = \frac{X_{A,1} - 0}{2 \cdot (1 - X_{A,1})} \text{ eta}$$

$$\tau = \frac{0,8 - X_{A,1}}{1 \cdot (1 - 0,8)}$$

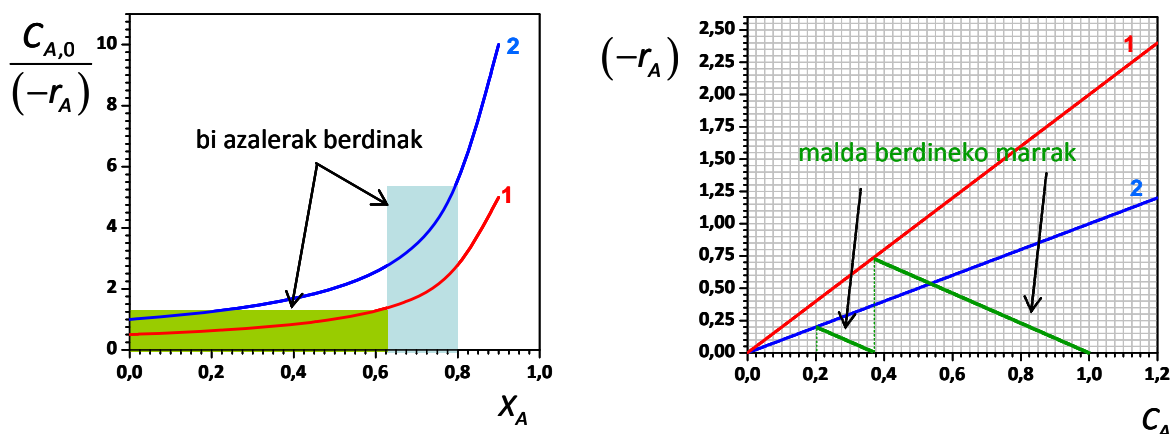
dira. Bi ekuazioak berdinduta:  $X_{A,1} = 0,63$  lortzen da. Ohartzen bagara (a) atalean baino bihurtze-maila handiagoa da, bolumen bereko errektorean azkarrago gertatzen baita erreakzioa.

Ebazpen grafikoak

(a), (b) eta (c) atalak:



(d) atala:



Lehen ordenako erreakzioa gertatzen denean  $(-r_A) = k \cdot C_A^n$  moduko ekuazio zinetikoarekin)  $N$ . errektoreetan masa-balantzea egiten bada, hau lortzen da:

$$C_{A,N} = \frac{C_{A,0}}{\prod_{i=1}^N (1 + k_i \cdot \tau_i)} \quad (18.21)$$

Erreaktore guztiek tenperatura berean badihardute eta guztien bolumena bera bada:

$$C_{A,N} = \frac{C_{A,0}}{(1 + k_i \cdot \tau_i)^N} \quad (18.22)$$

Adierazpen honetatik bihurtze-maila finko bat lortzeko zenbat erreaktore ( $N$ ) behar diren lor daiteke, konstante zinetikoa eta denbora espaziala jakinak izanik:

$$N = \frac{\ln\left(\frac{C_{A,0}}{C_{A,N}}\right)}{\ln(1 + k_i \cdot \tau_i)} \quad (18.23)$$

Halaber,  $N$  erreaktoreko sortan bihurtze-maila finkoa lortzeko erreaktore bakoitzaren denbora espaziala kalkula daiteke:

$$\tau_i = \frac{1}{k_i} \left[ \sqrt[N]{\frac{C_{A,0}}{C_{A,N}} - 1} \right] \quad (18.24)$$

### Adibidea 18.11 adibidea

A  $\rightarrow$  B likido-faseko erreakzioa isotermikoki gauzatzen da seriean kokatutako tanga-erako erreaktore-sisteman. Sistemara sartzen den emari osoa 1000 l/h da, eta  $C_{A,0} = 5$  mol/l da. Erreakzioaren ekuazio zinetikoa  $(-r_A)(\text{mol/l h}) = 1,5 \cdot C_A$  bada, kalkula ditzagun (a) 100 l-ko bolumeneko lau erreaktoreko sortan lortzen den bihurtze-maila osoa, (b) 100 l-ko bolumeneko lau erreaktoreko sortan A-ren % 80 bihur dadin, erreaktore sortara zer emarik sartu behar duen, (c) A-ren % 80 bihurtzeko, 100 l-ko zenbat erreaktore erabili behar diren 1000 l/h emariaz elikatuz gero.

#### Ebazpena

(a) Erreaktore bakoitzaren denbora espaziala = 100 / 1000 h = 0,1 h da. Ekuazio zinetikoaren arabera, laneko tenperaturan, konstante zinetikoak 1,5 h<sup>-1</sup> balio du.

Laugarren erreaktorearen irteeran hau da A-ren kontzentrazioa:

$$C_{A,4} = \frac{5 \text{ mol/l}}{(1 + 1,5 \cdot 0,1)^4} = 2,86 \text{ mol/l}$$

Beraz, sisteman orotara 0,428ko bihurtze-maila lortu da. Lehen, bigarren eta hirugarren erreaktoreetan 0,13, 0,244 eta 0,34ko bihurtze-mailak lortu dira, hurrenez hurren.

(b) 0,8ko bihurtze-maila lortu nahi bada, laugarren erreaktorearen irteeran  $C_{A,4} = 1$  mol/l izan behar da.

$$\tau_i = \frac{1}{1,5} \left[ \sqrt[4]{\left(\frac{5}{1} - 1\right)} \right] = 0,943 \text{ h-ko denbora espaziala beharko du erreaktore bakoitzak (eta$$

sistema osoak 4 · 0,943 = 3,77 h). Beraz, elikatu behar den emaria  $Q = 100 \text{ l} / 0,943 \text{ h} = 106 \text{ l/h}$  izateraino murriztu behar da.

(c)  $N$ . erreaktorearen irteeran 0,8ko bihurtze-maila lortu nahi bada,  $C_{A,N} = 1 \text{ mol/l}$  da. Erreaktore bakoitzaren denbora espaziala 0,1 h izanik:

$$N = \frac{\ln\left(\frac{5}{1}\right)}{\ln(1+1,5 \cdot 0,1)} = 11,5, \text{ hau da, } 12 \text{ erreaktore erabili beharko lirateke.}$$

### 18.8.2 Tanga-erako erreaktore sorta paraleloan

Hodi-formako erreaktoreak bezala, erreaktore hauek ere paraleloan koka daitezke, ekoizpen osoa maximizatzeko asmoz, batez ere. Hodi-formakoekin gertatzen den bezala, honelako sistemetan, ekoizpen maximoa lortzen da erreaktore guztietan bihurtze-maila berdina lortzen denean, hau da, erreaktore guztiek denbora espazial bera dutenean (ikus 18.9 eskuineko irudia).

$$Q_{\text{OSOA}} = Q_1 + Q_2 + \dots + Q_N$$

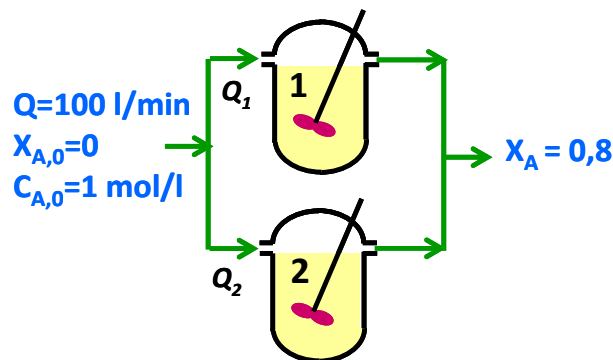
$$\left(\frac{V}{Q}\right)_1 = \left(\frac{V}{Q}\right)_2 = \dots = \left(\frac{V}{Q}\right)_N$$

### Adibidea 18.12 adibidea

Paraleloan dauden tanga-erako bi erreaktoreko sisteman ( $V_1 = 2 \cdot V_2$ ), likido-egoerako  $A \rightarrow B$  erreakzioa gauzatzen da, irteerako bihurtze-maila 0,8 izan arte.  $Q = 100 \text{ l/min}$  eta  $C_{A,0} = 1 \text{ mol/l}$  badira, kalkula ditzagun (a) erreaktore bakoitzera zer emari sartu behar den, (b) erreaktore bakoitzaren bolumena, (c) zenbat B ekoizten den.

Datuak:  $(-r_A)(\text{mol/lmin}) = 1 \cdot C_A$  da.

Ebazpen analitikoak



(a) Bi erreaktoreen denbora espazialak berdinak izanik:

$$\tau_1 = \frac{0,8-0}{1 \cdot C_{A,0} \cdot (1-0,8)} = 4 \text{ min} = \tau_2$$

$$\frac{2 \cdot V_2}{Q_1} = 4 \text{ min} = \frac{V_2}{100 - Q_1}$$

Hortik,

$Q_1 = 66,7 \text{ l/min}$  eta  $Q_2 = 33,3 \text{ l/min}$  lortzen dira.

(b)  $V_1 = 267 \text{ l}$  eta  $V_2 = 134 \text{ l}$  dira.

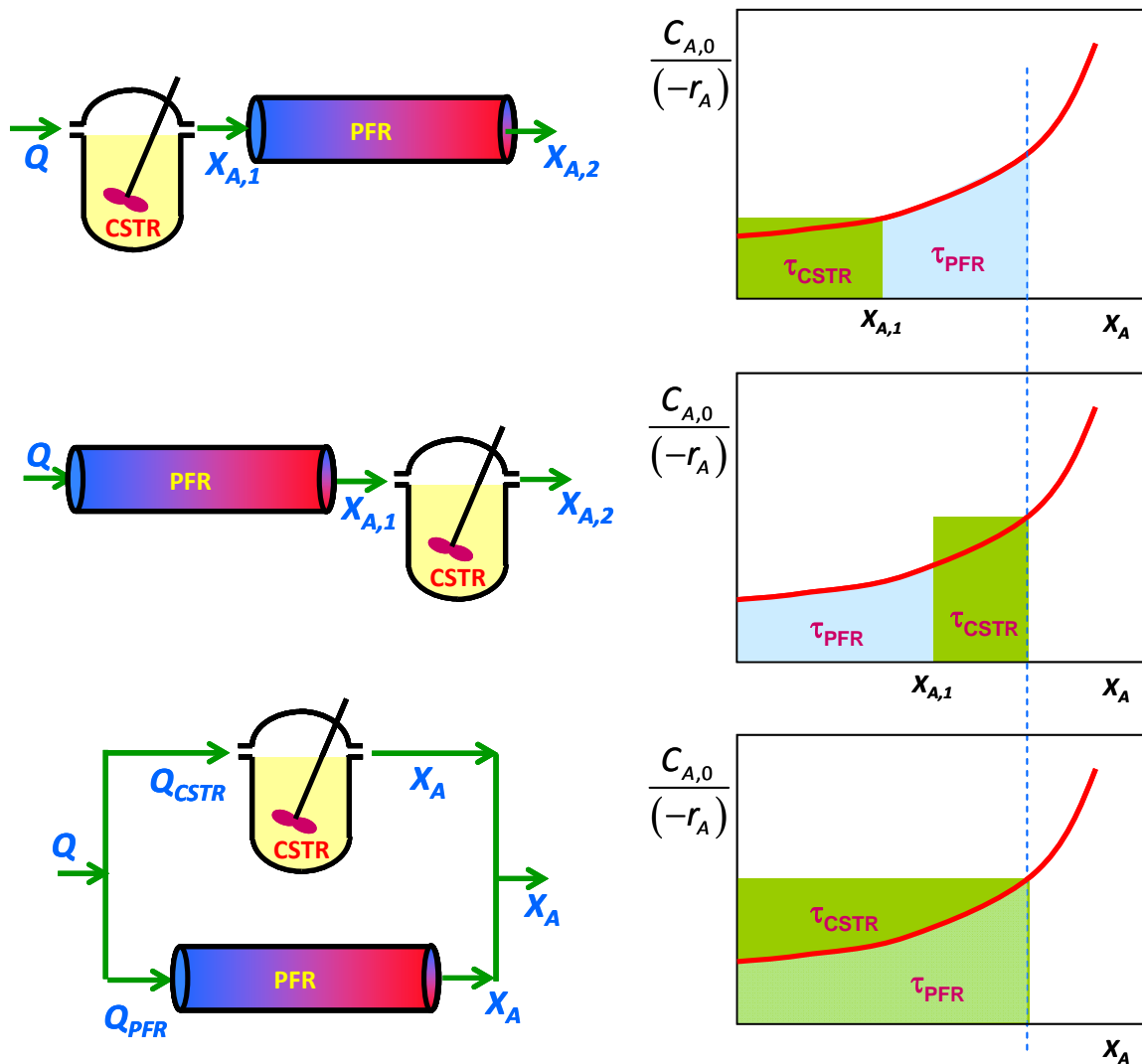
(c)  $F_{B,1} = Q_1 \cdot C_{A,0} \cdot X_A = 66,7(\text{l/min}) \cdot 1(\text{mol/l}) \cdot 0,55 = 53,36 \text{ mol/min}$  lehen adarreko erreaktorean.

$$F_{B,2} = Q_2 \cdot C_{A,0} \cdot X_A = 33,3(\text{l/min}) \cdot 1(\text{mol/l}) \cdot 0,55 = 26,68 \text{ mol/min bigarren adarreko erreaktorean.}$$

Guztira, 80,04 mol/min ekoizten da.

### 18.9 ERREAKTORE MOTA DESBERDINEZ OSATUTAKO SORTAK

Orain arte, mota bereko erreaktorez osatutako erreaktore sortak (paraleloan zein seriean osatutakoak) azaldu dira (denak hodi-formakoak ala denak tanga-erakoak). Hala ere, aipatutako bi erreaktore mota idealek elkarrekin sortak osa ditzakete, seriean zein paraleloan. Erreaktore mota desberdinez osatutako sorta hauek orain arte bezala ebazten dira. Adibide gisa, hiru kasuren ebazpen grafikoa azaltzen da 18.13 irudian.



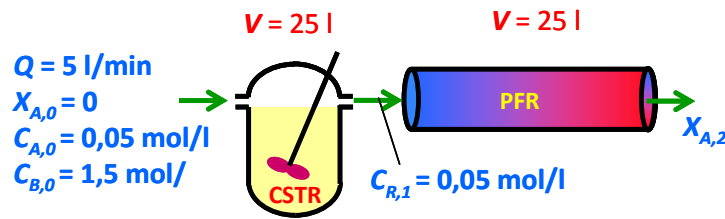
18.13 irudia. Erreaktore mota desberdinez osatutako zenbait sorta eta haien ebazpen grafikoa.

### Adibidea 18.13 adibidea

$A + B \rightarrow 2R$  erreakzioa isotermikoki gauzatzen da irudiko sisteman. 25 l-ko bolumeneko tanga-erako erreaktorera A eta B osagaien nahastearen 5 l/min elikatzen da (0,05 mol/l A eta 1,5 mol/l B kontzentrazioz). Erreaktore horretan bihurtu ondoren, 25 l-ko bolumeneko hodi-formako erreaktorean gehiago bihurtzen da. Tanga-erako erreaktore-irteeran  $C_R = 0,05$  mol/l neurtu da. Erreakzioaren ekuazio zinetikoa  $(-r_A)(\text{mol/lmin}) = k \cdot C_A \cdot C_B$  modukoa bada,



kalkula ditzagun sistema osoan zer bihurtze-maila lortzen den eta sistematik irteten den nahasteak zer konposizio duen.



### Ebazpena

Erreakzioaren ekuazio zinetikoa moldatzen bada,  $M = C_{B,0}/C_{A,0} = 30$  izanik:

$$(-r_A)(\text{mol/lmin}) = k \cdot C_{A,0} \cdot (1 - X_A) \cdot C_{A,0} \cdot (M - X_A) = k \cdot C_{A,0}^2 \cdot (1 - X_A) \cdot (M - X_A)$$

Sarrerako kontzentrazioen balioak ordezkatzeko badira,

$$(-r_A)(\text{mol/lmin}) = k \cdot 0,05^2 \cdot (1 - X_A) \cdot (30 - X_A)$$

Lehen erreaktorearen irteeran  $C_{R,1} = 0,025$  mol/l kontzentrazioa badago, erreaktore honen irteeran dagoen bihurtze-maila kalkulatu da,  $C_{R,0}$  dela kontsideratuta:

$$C_{R,1} = C_{R,0} + 2 \cdot C_{A,0} \cdot X_{A,1}$$

$X_{A,1} = 0,5$  bihurtze-maila lortzen da.

Lehen erreaktorean diseinu-ekuazioa aplikatzen bada:

$$V/Q = 25 \text{ l} / 5 \text{ l/min} = 5 \text{ minutuko denbora espaziala dauka.}$$

Laneko tenperaturaren konstante zinetikoak  $k = 0,136 \text{ min}^{-1}$  balio du.

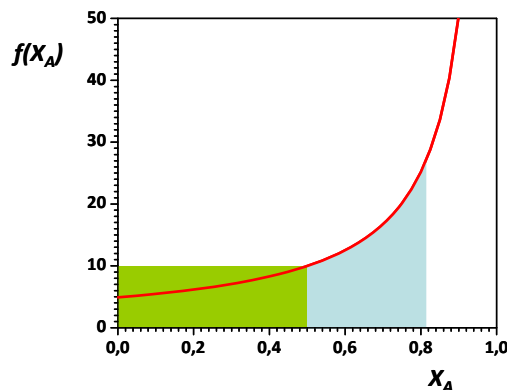
Bigarren erreaktoreak (hodi-formakoak) tenperatura berean diharduenek, konstantearen balio bera erabiliko da.

$V/Q = 5 \text{ min}$  izanik:

$$5 \text{ min} = \int_{0,5}^{X_{A,2}} \frac{dX_A}{0,136 \cdot 0,05 \cdot (1 - X_A) \cdot (30 - X_A)}$$

Ebazpen grafikoa egiten bada,  $f(X_A) = \frac{1}{0,136 \cdot 0,05 \cdot (1 - X_A) \cdot (30 - X_A)}$  hartuta, haztapenez,  $X_{A,2}$

$\approx 0,817$  lortzen da.

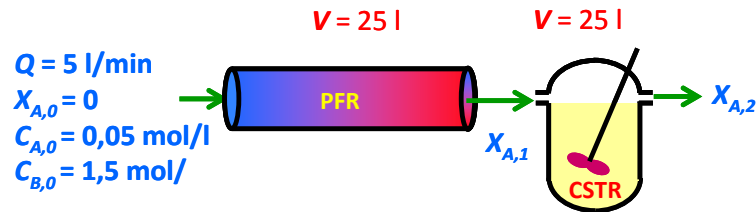


## Adibidea 18.14 adibidea

18.13 adibideko erreaktoreak ordenaz aldatuko balira, sisteman lortuko litzatekeen bihurtze-maila.

Datuak: elikadura, bi erreaktoreen bolumenak eta tenperaturak 18.14 adibidean kalkulatuak dira.

Ebazpena



Hodi-formako erreaktorean:

$$V/Q = 5 \text{ min}$$

$$5 \text{ min} = \int_0^{X_{A,1}} \frac{dX_A}{0,136 - 0,05 \cdot (1 - X_A) \cdot (30 - X_A)}$$

Ebazten bada,  $X_{A,1} = 0,635$  lortzen da.

Bigarren erreaktorearen denbora espaziala 5 minutukoa da, eta diseinu-ekuazioa ebazten bada:

$$5 \text{ min} = \frac{X_{A,2} - 0,637}{0,136 - 0,05 \cdot (1 - X_{A,2}) \cdot (30 - X_{A,2})}$$

$X_{A,2} = 0,818$  lortzen da.