
Índex

Introducció	13
Capítol 1. Objecte de l'enginyeria dels reactors químics	17
1.1 Objecte de l'enginyeria química	17
1.2 L'enginyeria dels reactors químics dins de l'enginyeria química ..	17
1.3 Objectiu de l'enginyeria dels reactors químics	18
1.4 Justificació del programa	21
1.5 Algunes consideracions sobre l'ensenyament de l'enginyeria química	23
1.6 Objectius d'aquest llibre	27
Qüestions i lectures d'ampliació	28
Capítol 2. Fenomenologia de les reaccions químiques	31
2.1 Introducció	31
2.2 Estequiometria	31
2.2.1 Esquema de reacció	31
2.2.2 Mesura de la composició	34
2.2.3 Mesures de l'avanç de la reacció	34
2.3 Equilibri químic	39
2.3.1 Influència de la temperatura	39
2.3.2 Altres influències	39
2.4 Tipus de reactor	39
2.4.1 Classificació dels reactors químics	40
2.4.2 Reactors tipus o estàndard	41
2.5 Cinètica química	43
2.5.1 Influència de la composició	45
2.5.2 Influència de la temperatura	46
2.5.3 Corbes de velocitat de reacció constant en el diagrama $X-T$..	50
2.6 Equacions de conservació	55
2.6.1 Balanç de matèria	55
2.6.2 Balanç d'energia	61
2.6.3 Balanç de quantitat de moviment	64
Qüestions, problemes i lectures d'ampliació	64

Capítol 3. Reactors ideals. Comportament isotherm	69
3.1 Introducció	69
3.2 RCTA	70
3.2.1 Sistemes d'intercanvi de calor. Modelització	70
3.2.2 Relació $X-\tau$ (Q_{vo} , V) per a distintes cinètiques	71
3.2.3 Flux de calor intercanviat	73
3.2.4 Producció	73
3.3 RDTA	75
3.3.1 Sistemes d'intercanvi de calor	75
3.3.2 Relació $X-t_r$ per a distintes cinètiques	76
3.3.3 Flux de calor intercanviat	77
3.3.4 Producció	80
3.4 RFP	82
3.4.1 Sistemes d'intercanvi de calor	82
3.4.2 Relació $X-\tau$ (Q_{vo} , V) per a distintes cinètiques	82
3.4.3 Flux de calor intercanviat	82
3.4.4 Producció	83
3.5 Selecció del tipus de reactor i de les condicions d'operació. Temperatura òptima (o perfil òptim de temperatura)	85
Qüestions, problemes i lectures d'ampliació	88
Capítol 4. Reactors ideals. Comportament no isotherm	97
4.1 Introducció	97
4.2 RCTA	97
4.2.1 Equacions de disseny	97
4.2.2 Problemes de disseny	98
4.2.3 Grandària òptima d'un RCTA	105
4.3 RDTA	108
4.3.1 Equacions de disseny	108
4.3.2 Problemes de disseny	109
4.3.3 Cicle de reacció òptim	113
4.4 Reactor semicontinu	115
4.4.1 Reactor tipus A	116
4.4.2 Reactor tipus B	116
4.5 RFP	116
4.5.1 Equacions de disseny	116
4.5.2 Problemes de disseny	117
4.6 Comparació i selecció de reactors homogenis ideals	127
Qüestions, problemes i lectures d'ampliació	130
Capítol 5. Associació de reactors	141
5.1 Introducció	141
5.2 RCTA en sèrie	141
5.2.1 Solució per a algunes cinètiques senzilles (comportament isotherm)	142

5.2.2 Solució per a una cinètica qualsevol	144
5.2.3 Grandària òptima dels RCTA	147
5.2.4 Associació de RCTA adiabàtics	149
5.3 RFP en sèrie	156
5.3.1 Associació de RFP adiabàtics	157
5.4 Associació de reactors de diferent tipus	158
Qüestions, problemes i lectures d'ampliació	158
Capítol 6. Reaccions múltiples	165
6.1 Introducció	165
6.2 Reaccions múltiples: anàlisi qualitativa	166
6.2.1 Regla sobre nivells de temperatura	167
6.2.2 Regla sobre nivells de concentració	168
6.2.3 Regla sobre maximització d'un producte intermedi (R): A → R → S	168
6.2.4 Regla sobre reaccions combinades	168
6.2.5 Regla sobre optimització amb limitacions físiques	169
6.3 Reaccions múltiples: anàlisi quantitativa	170
6.3.1 Reaccions paral·leles i/o simultànies	170
6.3.2 Reaccions en sèrie	177
6.3.3 Comportament no isoterm	180
Qüestions, problemes i lectures d'ampliació	184
Capítol 7. Estabilitat dels reactors químics	195
7.1 Introducció	195
7.2 Estats estacionaris múltiples en un RCTA. Estabilitat	196
7.2.1 Influència de T_o i/o T_{fo} sobre l'estat estacionari	197
7.2.2 Influència de Q_{vo}	197
7.2.3 Estabilitat dels estats estacionaris	201
7.2.4 Aproximació a l'estat estacionari. Comportament dinàmic	202
7.3 Estabilitat de l'estat estacionari en un RFP (RDTA)	209
Qüestions, problemes i lectures d'ampliació	212
Capítol 8. Desviacions de les condicions de flux ideal	217
8.1 Introducció	217
8.2 La funció de distribució del temps de residència (DTR)	220
8.2.1 Determinació experimental de les funcions de distribució del temps de residència (DTR)	222
8.2.2 Característiques de les corbes de DTR	226
8.2.3 Corbes de DTR per a fluxos ideals	231
8.3 Modelització de reactors amb la DTR	237
8.3.1 Micromescla: el model de segregació	238
8.3.2 Models amb dos paràmetres ajustables. Modelització de reactors reals per combinació de reactors ideals	239
8.3.3 Models amb un paràmetre ajustable	242
8.3.4 Comprovació del model i determinació dels seus paràmetres	249

8.4	Nivells de conversió en reactors de flux no ideal	250
8.4.1	El model de flux segregat	252
8.4.2	El model de dispersió longitudinal	253
8.4.3	Determinació del grau de conversió a partir del model de cascada de reactors de tanc agitat	254
8.5	Comentaris generals	255
	Qüestions, problemes i lectures d'ampliació	256
Capítol 9.	Reactors heterogenis	265
9.1	Introducció	265
9.1.1	Cinètica	266
9.1.2	Balanços	270
9.1.3	Simplificacions que condueixen a equacions pràctiques de disseny	271
9.2	Reaccions sòlid-fluid no catalítiques	274
9.2.1	Models cinètics	275
9.2.2	Determinació del mecanisme controlant	282
9.3	Disseny de reactors. Aplicació a reactors gas/sòlid amb sòlids de grandària constant (model de nucli sense reaccionar) i ambient gasós uniforme i conegut	283
9.3.1	La distribució discreta de grandàries	284
9.3.2	Disseny de reactors	284
	Qüestions, problemes i lectures d'ampliació	287
Capítol 10.	Reactors no convencionals	291
10.1	Introducció	291
10.2	Obtenció de sistemes microelectrònics	291
10.2.1	Deposició química de vapor	293
10.3	Tecnologia bioquímica	300
10.3.1	Fermentació i disseny de bioreactors	300
10.4	Reacció i separació simultànies	308
10.4.1	Destil·lació reactiva	308
10.4.2	Reactors de membrana	310
10.5	Reaccions en medis subcrítics i supercrítics	314
	Problemes i lectures d'ampliació	316
Capítol 11.	La seguretat i els reactors químics	321
11.1	Introducció	321
11.2	Principals tipus d'accidents relacionats amb els reactors químics	323
11.3	Toxicitat. MSDS	324
11.4	Inflamabilitat. Explosions	325
11.5	Explosions de pols	330
11.6	Reaccions fora de control: processos <i>runaway</i>	331
11.6.1	Reactivitat de substàncies i mescles inestables. Estimació	333
11.6.2	Anàlisi dels processos de pèrdua de control (<i>runaway</i>)	336

11.7 Sobrepressió. Pèrdues de contenció en reactors	340
11.8 Avaluació de riscos	341
11.9 Disseny de reactors més segurs	342
11.9.1 Augment de la seguretat intrínseca	342
11.9.2 Seguretat afegida	344
Qüestions, problemes i lectures d'ampliació	346
Capítol 12. Introducció al canvi d'escala en els reactors químics	351
12.1 Introducció	351
12.2 Reactors discontinus	353
12.3 Reactors semicontinus	357
12.4 Reactors continus de tanc agitat	360
12.5 Reactors tubulars	361
12.6 Exemple de canvi d'escala	364
Qüestions i lectures d'ampliació	367
 APÈNDIXS	
Apèndix I. Tècniques numèriques	371
I.1 Integrals definides útils en el disseny de reactors químics	371
I.2 Solució analítica d'algunes equacions diferencials freqüents	372
I.3 Càlcul numèric d'integrals. Mètode de Simpson	372
I.4 Mètodes numèrics per a resoldre equacions diferencials ordinàries ..	373
I.4.1 Solució numèrica d'una equació diferencial de primer ordre	373
I.4.1.1 Mètode d'Euler	373
I.4.1.2 Mètode de Runge-Kutta	375
I.4.2 Solució numèrica de sistemes d'equacions diferencials ordi-	
nàries	376
Apèndix II. Simulació dinàmica amb ordinadors personals	377
II.1 Introducció	377
II.2 Exemples de simulació	378
II.3 Altres exemples de simulació dinàmica de sistemes	393
Apèndix III. Fitxa de seguretat de l'etanol (anhidre)	405
 Bibliografia	409
 Nomenclatura	411
 Índex analític	413