

5.23. DISEÑO DE UN REACTOR QUIMICO

Una característica distintiva de los procesos industriales es su estructura compleja, generalmente constituida por muchas etapas, cada una de las cuales consta de numerosos subcomponentes. Su descripción matemática genera ecuaciones que van desde las muy sencillas hasta las muy complicadas.

Se suma a esto la falta de un exhaustivo conocimiento de las características de los subcomponentes, y el elevado grado de interrelación entre las variables, generador de no linealidades que dificultan la resolución exacta de las ecuaciones.

De este modo, el diseño de plantas nuevas y la optimización de existentes, dos tareas inherentes a la actuación de los ingenieros de proceso y proyecto, requieren muchas veces de criterios intuitivos. Tampoco por razones de economía y seguridad es posible realizar excesivas simulaciones de laboratorio o a escala piloto, o experimentar con plantas existentes.

De este modo, el análisis sistémico y la creación de modelos de simulación dinámica aparecen como una forma muy atractiva de abordar el problema.

Características fisicoquímicas del proceso considerado

El presente modelo simula el comportamiento de un reactor discontinuo, perfectamente mezclado, de volumen constante, con un sistema de regulación de la temperatura mediante un serpentín interior, donde se lleva a cabo una reacción en fase gaseosa de primer orden, del tipo:



En la figura se muestra un esquema simplificado del reactor, con el agitador que asegura mezclado perfecto y el serpentín de enfriamiento, por el que circula una corriente de refrigerante a T_m , con un caudal suficiente para no experimentar un significativo cambio de temperatura.

Las ecuaciones que representan los balances de materia y energía son:

Balance de materia para el componente A:

$$dn_A / dt = - k n_A$$

donde

n_A = numero de moles de A en un tiempo t

k = constante de velocidad de reacción de primer orden, 1/hr, y depende de la temperatura en la forma $k = A_1 \cdot \exp(-B_1/T)$, donde A_1 y B_1 son propias de una cierta reacción y T la temperatura absoluta

Balance de energía:

$$C_v (dT/dt) = \Delta H_R (-k n_A) - U A (T - T_m)$$

Donde C_v = capacidad calorífica de la mezcla contenida en el reactor, a volumen constante Btu / mol lb °F

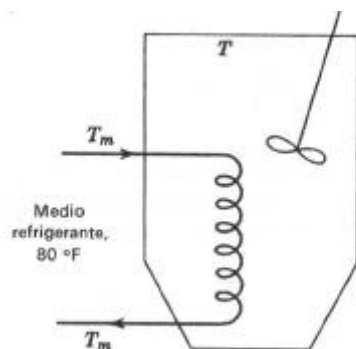
ΔH_R = calor de reacción Btu/mol-lb A

U = coeficiente global de transmisión de calor Btu/h ft² °R

T = temperatura del reactor, °R

T_m = temperatura del medio refrigerante, °R

A = área de transferencia de calor, provista por el serpentín, ft²



La reacción de conversión de A en los productos B y C es exotérmica, por lo que durante su desarrollo genera una cantidad de calor, que se puede calcular a partir de su calor de reacción, ΔH_R . De este modo, de no aplicarse un sistema de enfriamiento, la temperatura del reactor aumentará constantemente. Hay además otros factores que deben tenerse en cuenta.

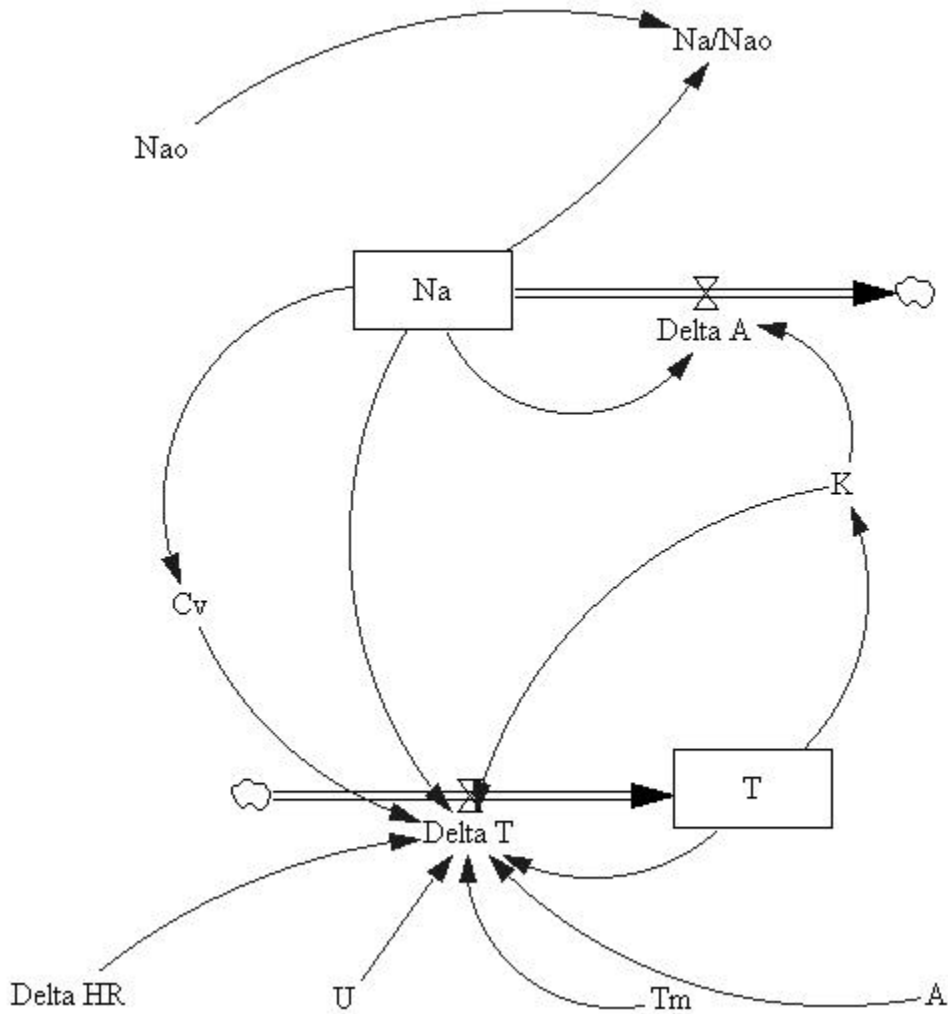
- 1) La elevación de la temperatura en el reactor está relacionada a la capacidad calorífica global de la mezcla contenida, y esta va variando con el avance de la reacción puesto que A es paulatinamente sustituido por B y C. Para una cierta composición en el reactor será:

$$C_v = n_A C_A + n_B C_B + n_C C_C$$

Donde los n_i son los moles de cada componente a un tiempo t , y las C_i son las capacidades caloríficas respectivas, consideradas constantes para cualquier valor de Temperatura. Dada una cierta estequiometría de reacción, la expresión puede simplificarse expresándola únicamente en función de n_A .

- 2) La constante k de reacción depende de la temperatura, y por otra parte, la generación de calor del número de moles de A presentes en el reactor a un tiempo t , como puede verse en la ecuación de balance de energía. Esto genera una doble vinculación entre las ecuaciones representativas del proceso, e introduce dificultades para su resolución.

Para la construcción de un modelo de simulación dinámica se han considerado dos niveles: en uno se produce la desaparición de A por reacción, en el otro la acumulación de calor por reacción y su disipación por refrigeración, que se mide a través de la temperatura. Se ha conservado la simbología de las ecuaciones, que por otra parte son las usuales en el campo de la ingeniería química.



Los datos utilizados en el modelo son:

- $n_{Ao} = 0.1$ (número de moles presentes al comienzo de la reacción)
- $k = 0.5 \cdot 10^{10} \cdot \exp(-1.394 \cdot 10^4/T)$
- $\Delta H_R = -2500 \text{ Btu/mol-lb A}$
- $U = 3 \text{ Btu/h ft}^2 \text{ }^\circ\text{R}$
- $T = 600 \text{ }^\circ\text{R}$ (inicial de la masa contenida en el reactor)
- $T_m = 540 \text{ }^\circ\text{R}$
- $A = 0.2 \text{ ft}^2$
- $C_A = 30 \text{ Btu / mol lb }^\circ\text{F}$
- $C_B = 25 \text{ Btu / mol lb }^\circ\text{F}$
- $C_c = 25 \text{ Btu / mol lb }^\circ\text{F}$

Considerando la estequiometria de la reacción, puede expresarse

$$C_v = 5 - 20 \cdot n_A$$

Ecuaciones del modelo

- (01) $A = 0$
- (02) $C_v = 5 - 20 \cdot N_a$
- (03) $\Delta A = K \cdot N_a / 60$
- (04) $\Delta \text{HR} = -2500$
- (05) $\Delta T = (\Delta \text{HR} \cdot (-K \cdot N_a) - U \cdot A \cdot (T - T_m)) / (C_v \cdot 60)$
- (06) FINAL TIME = 90
- (07) INITIAL TIME = 0
- (08) $K = 1.712 \cdot 10^{10} \cdot \exp(-1.394 \cdot 10000 / T)$
Units: 1/hr
- (09) $N_a = -\Delta A$
Initial value: N_{ao}
Units: mol/b
- (10) " N_a / N_{ao} " = N_a / N_{ao}
- (11) $N_{ao} = 0.1$
- (12) SAVEPER = 1
- (13) $T = \Delta T$
Initial value: 600
Units: Grados R
- (14) TIME STEP = 0.0625
- (15) $T_m = 540$
- (16) $U = 3$

El modelo reproduce el comportamiento obtenido mediante la aplicación de modelos analógicos más complejos como los de Himmelblau y Bischoff que se describen en "Análisis y simulación de procesos" (Ed.Reverté.1976). Permite ver con claridad el comportamiento de este reactor ideal bajo diferentes condiciones de operación, puesto que es posible cambiar la temperatura del refrigerante, el área de transferencia de calor, la temperatura inicial de proceso y el coeficiente global de transferencia de calor.

