

Tarea 13

Rafael Montagut, Cristian Pineda, Deyver Rivera

Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Calle 44 # 45-67. Bogotá D.C., Colombia.
Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental,
Modelación y simulación.

Enunciado

Desarrollo de un reactor de producción de acetato de etilo a partir de ácido acético y etanol. Uso de reactores RSTOIC, RGIBBS, RCSTR y RPLUG en Aspen Plus y Aspen Hysys.

Desarrollo

Con el fin de comparar resultados, los reactores fueron trabajados de manera adiabática y de manera isotérmica a 75 °C.

La representación de lo realizado en Aspen Hysys se presenta en las siguientes figuras:

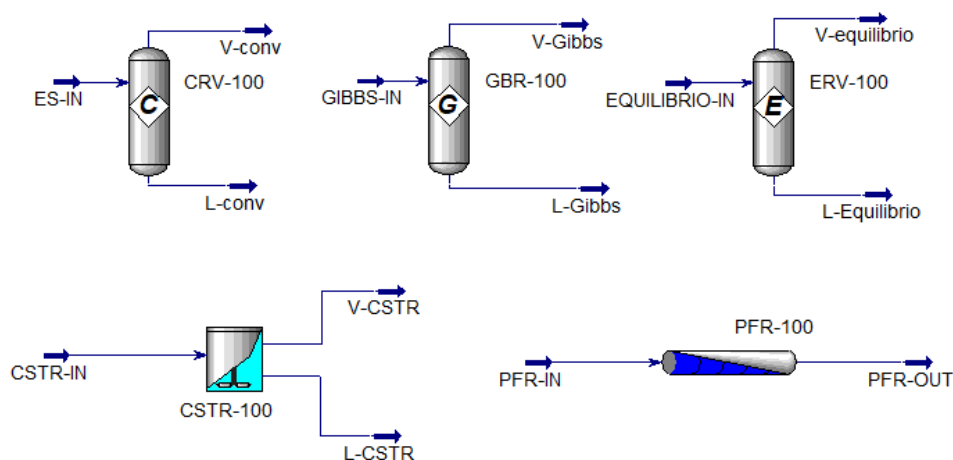


Figura 1. Diagrama en Aspen Hysys – Sistemas adiabáticos.

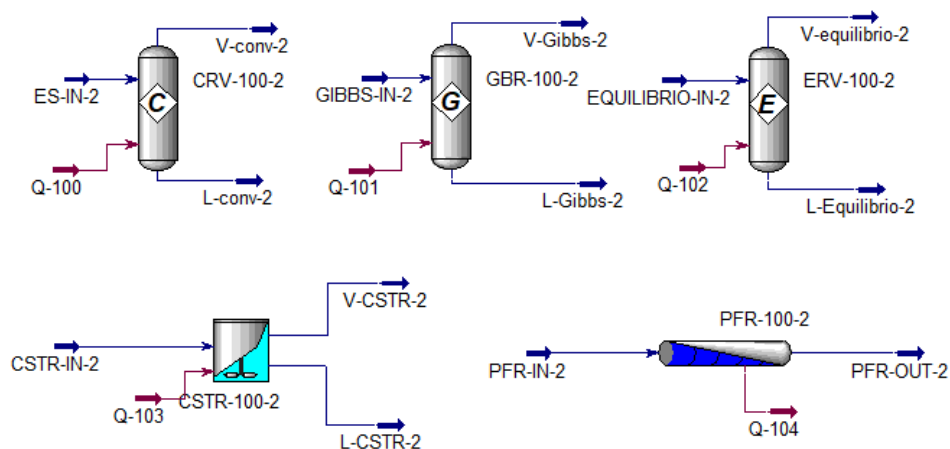


Figura 2. Diagrama en Aspen Hysys – Sistemas isotérmicos a 75 °C.

Por su parte, para el desarrollo en Aspen Plus se realizó:

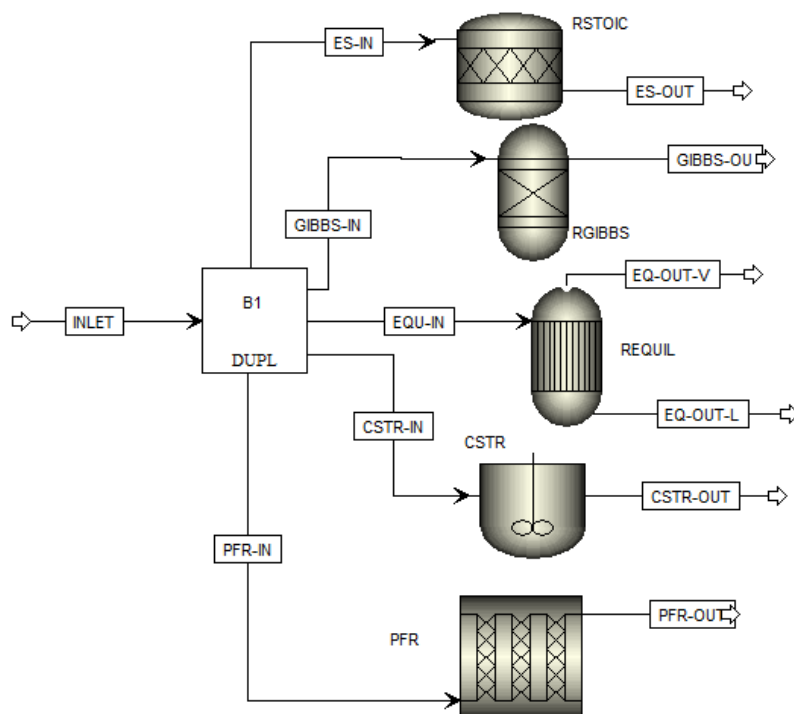


Figura 2. Diagrama en Aspen Plus.

En todos los casos se trabajó con las condiciones de reacción y los flujos de entrada dados en la tarea. Al reactor estequiométrico se le especificó una conversión del 65%.

Los resultados obtenidos se presentan en la siguiente tabla:

Aspen Hysys					
	Reactor estequiométrico	Reactor Gibbs	Reactor Equilibrio	CSTR	PFR
Conversión adiabática	65%	71,49%	71,49%	67,89%	67,44%
Conversión isotérmica	65%	68,23%	68,33%	64,78%	63,96%
Aspen Plus					
	Reactor estequiométrico	Reactor Gibbs	Reactor Equilibrio	CSTR	PFR
Conversión adiabática	65%	-	67,81%	64,85%	64,85%
Conversión isotérmica	65%	86,82%	67,80%	64,76%	64,51%

Tabla 1. Resultados.

Nota: con el reactor de Gibbs de Aspen Plus no se logró determinar la conversión de manera adiabática, ya que este no lograba converger, y cuando lo hizo, arrojó resultados ilógicos (T final de $-202\text{ }^{\circ}\text{C}$), debido a esto, este dato fue descartado.

Inicialmente, es de mencionar que claramente no hay cambios en la conversión del reactor estequiométrico independientemente de si el sistema es adiabático o no o de si se usa Plus o Hysys. Esto solo se debe a que, por el modelo de este reactor, la conversión fue especificada inicialmente y de una u otra manera se llegará a este valor.

Por parte de los reactores reales (CSTR y PFR) se encontró en ambos softwares que cuando la reacción es isotérmica, la conversión se reduce en aproximadamente 3% (Hysys) o en 0,2% (Plus) con respecto a la consideración del sistema adiabático. Esto se debe a la naturaleza del modelo de Arrhenius de las constantes cinéticas, ya que, al estar la temperatura en el denominador de un exponente negativo, su efecto en la velocidad de reacción se traduce en un aumento cuando la temperatura aumenta. Ahora, dado a que la reacción es exotérmica, cuando el sistema es adiabático la temperatura interna del reactor tiende a aumentar, por lo que, de acuerdo a lo mencionado anteriormente, la velocidad de reacción aumenta y por lo tanto, su conversión.

Este comportamiento se extiende a todos los reactores trabajados, sin embargo, se debe mencionar que el efecto es ampliamente menor en Plus (caídas cercanas a 0,2%) que en Hysys, donde el modelo isotérmico llega a perder hasta casi 4% de conversión con respecto al adiabático.