

Manual de Referencia

DIRe

Jesús Casado González

Gustavo Plaza Roma

1 de febrero de 2017

Índice general

1. Introducción	2
1.1. Ventana principal y ventana de selección	2
2. Rector Discontinuo	5
2.1. Reactor discontinuo isoterma	5
2.2. Reactor discontinuo adiabático	6
2.3. Reactor discontinuo no discontinuo y no adiabático	8
3. Condiciones óptimas	11
3.1. Condiciones óptimas	11
4. Reactor Flujo Pistón	13
4.1. Reactor flujo pistón isoterma	13
4.2. Reactor flujo pistón adiabático	15
4.3. Reactor flujo pistón no adiabático y no isoterma	16
5. Reactor Mezcla Perfecta	19
5.1. Cálculo del volumen	19
5.2. Cálculo de la conversión	21

Capítulo 1

Introducción

Este manual pretende describir el funcionamiento de la aplicación *DIRE*, esta aplicación tiene como finalidad realizar los cálculos necesarios para el diseño de reactores ideales.

Esta aplicación se ha desarrollado usando Python 3, la interfaz gráfica se ha creado con el programa *Qt Designer* y se ha transformado a Python para que sea compatible con la librería *PySide 1.2.4*.

Pues que la librería *PySide 1.2.4* no es compatible con Python 3.5, se usará Python 3.4. Es posible usar la versión 3.5 si se tiene instalado la *PySide 2*.

Para el correcto funcionamiento de la aplicación es necesario tener los siguientes módulos instalados:

- Pyqtgraph para poder visualizar gráficas dentro de la aplicación Qt.
- Matplotlib para poder visualizar y exportar los resultados de los cálculos.
- Scipy permite realizar las distintas operaciones matemáticas.
- Numpy proporciona las clases necesarias para operar con vectores.

La aplicación está dividida en distintas ventanas según se verá a lo largo de este documento.

1.1. Ventana principal y ventana de selección

La primera ventana que aparece al ejecutar la aplicación se puede ver en la Figura 1.1. Desde esta ventana se pueden realizar las siguientes acciones:

- Acceder a la ventana de selección del reactor.
- Salir de la aplicación.

- Visualizar la guía de usuario de la aplicación, en esta guía se muestran las ecuaciones usadas para el diseño de los reactores y los parámetros necesarios. Ver Figura 1.1



Figura 1.1: Ventana Principal

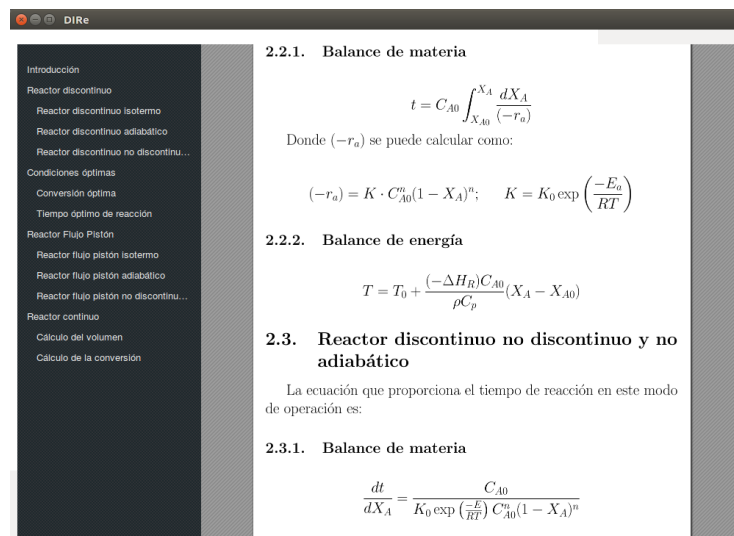


Figura 1.2: Ventana de ayuda

En la ventana de selección se muestran botones que permiten seleccionar entre los distintos tipos de reactores. Los reactores que se pueden calcular son:

- Reactores discontinuos, dentro de este tipo se divide en isoterms, adiabáticos y otro tipo que no es ni adiabático ni isoterms.

- Reactores continuos (flujo pistón), dentro de este tipo se divide en isoterms, adiabáticos y otro tipo que no es ni adiabático ni isoterms.
- Reactores de lecho fijo.

En la Figura 1.1 se puede ver la ventana de selección.



Figura 1.3: Ventana de selección

Capítulo 2

Rector Discontinuo

Son aquellos que trabajan por cargas, es decir se introduce una alimentación, y se espera un tiempo dado, que viene determinado por la cinética de la reacción, tras el cual se saca el producto.

2.1. Reactor discontinuo isoterma

A partir del balance de materia se obtiene la ecuación que proporciona el tiempo de reacción a partir de la velocidad de reacción en este modo de operación es:

$$t = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_a)}$$

Donde $(-r_a)$ se puede calcular como:

$$(-r_a) = K \cdot C_{A0}^n (1 - X_A)^n; \quad K = K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right)$$

Según el orden de reacción el tiempo se podrá calcular como:

- Orden 0: $t = \frac{C_{A0}}{K} (X_A - X_{A0})$
- Orden 1: $t = \frac{1}{K} \ln\left(\frac{1-X_{A0}}{1-X_A}\right)$
- Orden 2: $t = \frac{1}{KC_{A0}} \left(\frac{X_A}{1-X_A}\right)$

En la Figura 2.1 se puede ver la pantalla para definir los parámetros del reactor que son:

- Orden de reacción.

- Temperatura inicial [K].
- Concentración inicial [mol/l].
- Energía de activación [J/mol].
- Constante k_0 .
- Conversión inicial y final.

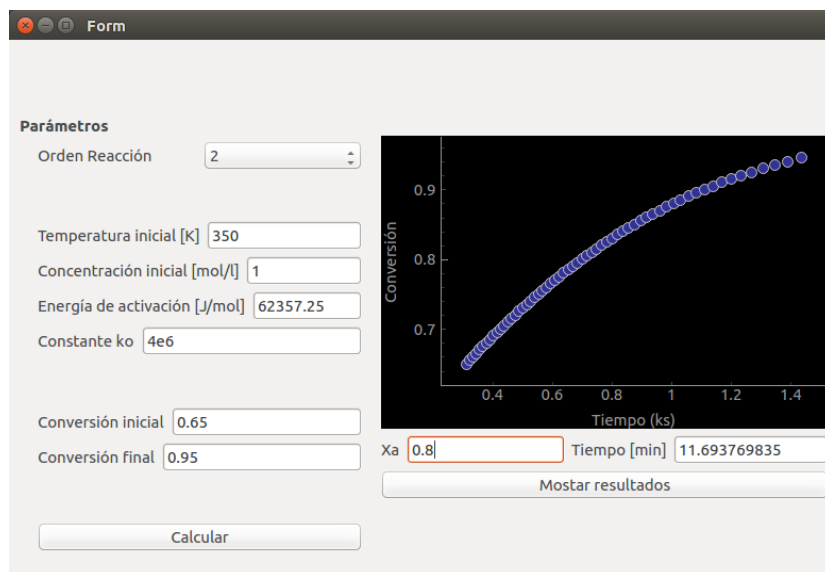


Figura 2.1: Ventana de cálculo del reactor discontinuo e isoterma.

La aplicación tiene un cuadro de texto donde se puede introducir una conversión y automáticamente se rellena el campo que se encuentra al lado con el tiempo en minutos que se tarda en alcanzar esa conversión. Todos los reactores cuentan también con esta característica.

Todas las ventanas también cuentan con un botón que pone “Mostrar resultados” este botón genera una nueva ventana donde se puede ver la misma gráfica con un cursor para poder ver los datos de la curva. Esta ventana también permite guardar la gráfica. En la Figura 2.1 se puede ver la ventana generada con el botón “Mostrar resultados”.

2.2. Reactor discontinuo adiabático

La ecuación que proporciona el tiempo de reacción en este modo de operación es:

A partir del balance de materia se obtiene:

$$t = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_a)}$$

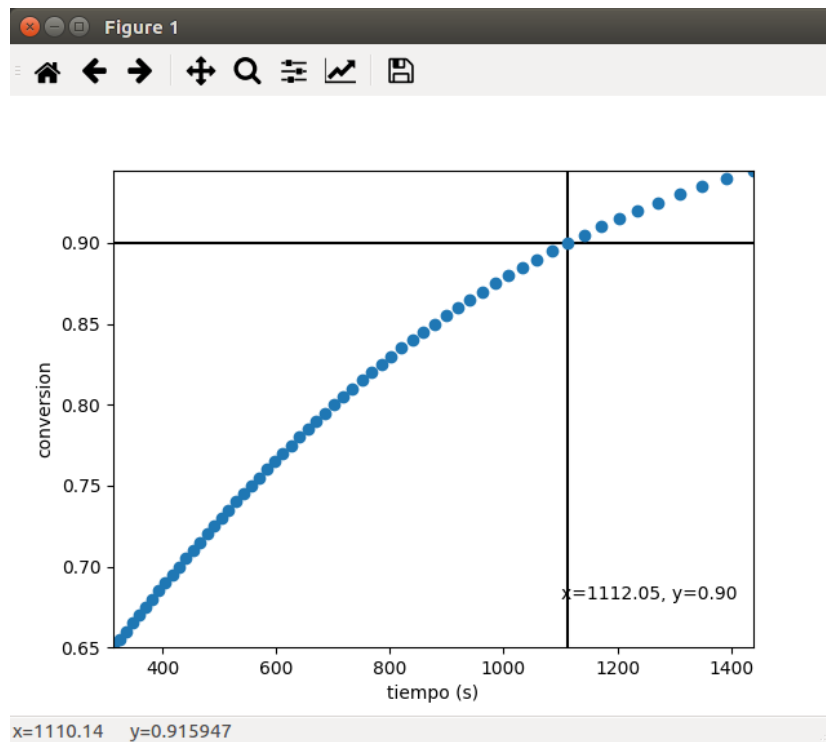


Figura 2.2: Ventana con el resultado de un reactor isoterma.

Donde $(-r_a)$ se puede calcular como:

$$(-r_a) = K \cdot C_{A0}^n (1 - X_A)^n; \quad K = K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right)$$

A partir del balance de energía se obtiene:

$$T = T_0 + \frac{(-\Delta H_R)C_{A0}}{\rho C_p}(X_A - X_{A0})$$

Los parámetros necesarios para el diseño del reactor son:

- Orden de reacción.
- Temperatura inicial [K].
- Concentración inicial [mol/l].
- Energía de activación [J/mol].
- Constante k_0 .
- Calor de reacción [J/mol].
- Peso molecular [g/mol].

- Calor específico [J/(kg·K)].
- Densidad de la mezcla [kg/m³].
- Tipo de reacción (exotérmica, endotérmica).
- Conversión inicial y final.

En la Figura 2.2 se puede ver la ventana para el cálculo de un reactor discontinuo y adiabático.

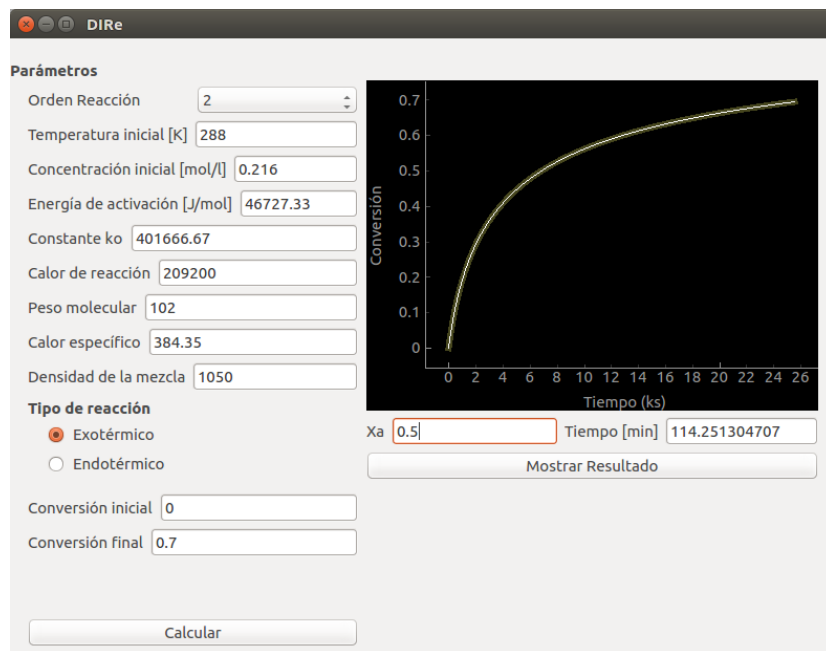


Figura 2.3: Ventana de cálculo del reactor discontinuo y adiabático.

2.3. Reactor discontinuo no discontinuo y no adiabático

La ecuación que proporciona el tiempo de reacción en este modo de operación es:

A partir del balance de materia se obtiene:

$$\frac{dt}{dX_A} = \frac{C_{A0}}{K_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) C_{A0}^n (1 - X_A)^n}$$

A partir del balance de energía se obtiene:

$$\frac{dT}{dX_A} = \frac{(-\Delta H_R) C_{A0}}{\rho C_p} + \frac{C_{A0} U S (T_c - T)}{V \rho C_p K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) C_{A0}^n (1 - X_A)^n}$$

Los parámetros necesarios para el diseño del reactor son:

- Orden de reacción.
- Temperatura inicial [K].
- Concentración inicial [mol/l].
- Energía de activación [J/mol].
- Constante k_0 .
- Calor de reacción [J/mol].
- Peso molecular [g/mol].
- Calor específico [J/(kg·K)].
- Densidad de la mezcla [kg/m³].
- Coeficiente de transmisión de calor [W/(m·K)].
- Área de transmisión de calor [m²].
- Volumen [m³].
- Tipo de reacción (exotérmica, endotérmica).
- Conversión inicial y final.

En la Figura 2.3 se puede ver la ventana para el cálculo de un reactor discontinuo que no es isoterma ni adiabático.

En este tipo de reactor cuando se pulsa el botón de “Mostrar resultados” se muestran dos gráficas, una de ellas muestra la conversión frente al tiempo y la otra la temperatura frente al tiempo. Ver Figura 2.3.

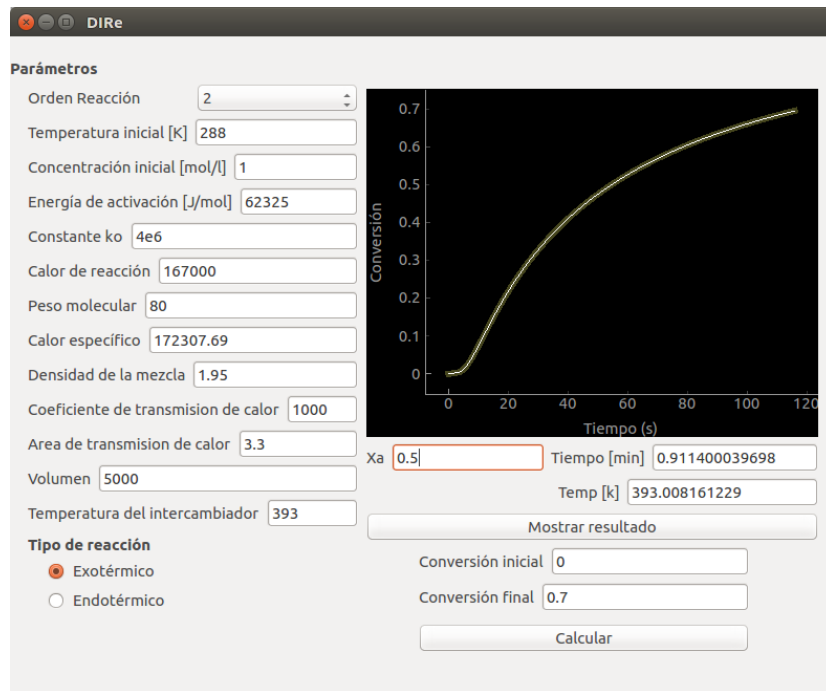


Figura 2.4: Ventana de cálculo del reactor discontinuo que no es isotermino ni adiabático.

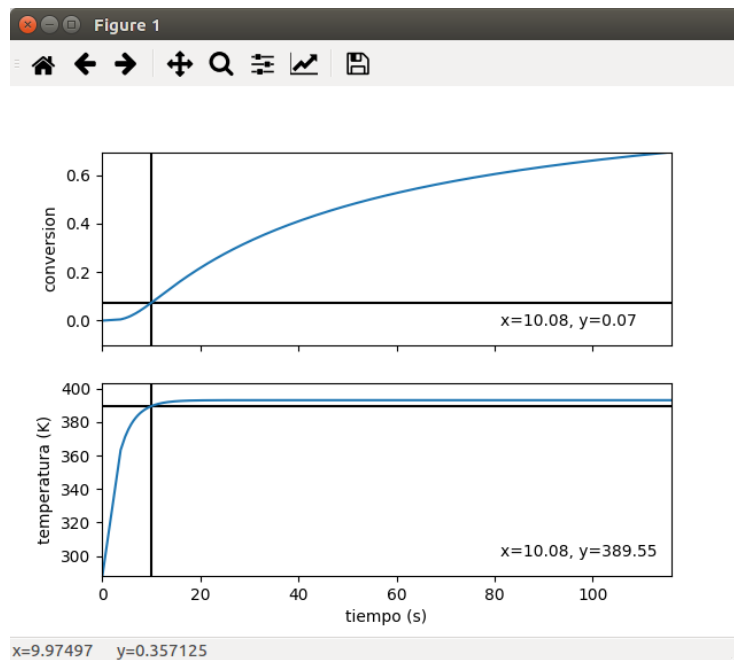


Figura 2.5: Resultado del cálculo del reactor discontinuo que no es isotermino ni adiabático.

Capítulo 3

Condiciones óptimas

3.1. Condiciones óptimas

Esta parte de la aplicación permite llevar a cabo la optimización de costes.

Para calcular la conversión óptimas se usa la siguiente expresión:

$$X_{A_{opt}} = 1 - \frac{C_{Ra}}{(\Delta w)C_{A0}VK}$$

Para calcular el tiempo óptimo se usa la siguiente expresión:

$$t_{opt} = \frac{1}{K} \ln \left(\frac{(\Delta w)C_{A0}VK}{C_{Ra}} \right)$$

Los parámetros necesarios para el cálculo de las condiciones óptimas son:

- Orden de reacción.
- Temperatura inicial [K].
- Concentración inicial [mol/l].
- Energía de activación [J/mol].
- Constante k_0 .
- Volumen [m3].
- Coste de reacción [€/s]
- Valor aumentado por mol transformado [€].

En la Figura 3.1 se puede ver la ventana para el cálculo de las condiciones óptimas para la reacción.

The screenshot shows a software window titled "DIRe" with a "Parámetros" section. It contains several input fields for reaction parameters and two output fields for optimal conditions. A "Calcular" button is located to the right of the input fields.

Parámetro	Valor
Orden Reacción	2
a [mol]	2
Temperatura inicial [K]	400
Concentración inicial [mol/l]	0.01
Energía de activación [J/mol]	50000
Constante k_0	4e6
Volumen [l]	5000
Coste de reacción [€/s]	1
Valor aumentado por mol transformado [€]	2
Conversión óptima (%)	0.983083900807
Tiempo óptimo de operación (s)	3.45045244814

Figura 3.1: Ventana para el cálculo de las condiciones óptimas para la reacción.

Capítulo 4

Reactor Flujo Pistón

El reactor de flujo pistón trabaja en estado estacionario. Esto significa que las propiedades no varían con el tiempo.

En el menú principal, encontramos tres botones dentro del apartado de reactores flujo pistón. Estos tres botones hacen referencia cada a uno a distintas condiciones en las que el reactor flujo pistón puede realizar su operación: reactor flujo pistón isoterma, reactor flujo pistón adiabático y reactor flujo pistón no isoterma y no adiabático.

4.1. Reactor flujo pistón isoterma

Si seleccionamos el caso del reactor flujo pistón isoterma, nos aparece una ventana como la que se puede observar en la Figura 4.1.

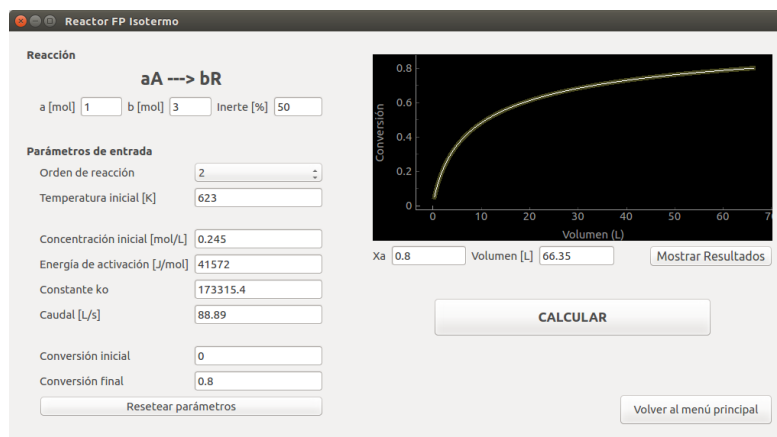


Figura 4.1: Ventana reactor FP isoterma

En la parte superior izquierda, el programa nos indica el tipo de reacción con la

que vamos a trabajar y permite modificar el número de reactivos y productos, así como añadir el porcentaje deseado de inerte en la reacción. Una vez que hayamos establecido la reacción deseada, deberemos seleccionar el orden de reacción en el desplegable e introducir todos los parámetros de entrada indicados, prestando especial atención a las unidades en las que se indican que han de ser introducidos.

Cuando tengamos introducidos todos los datos que se indican, podremos obtener el resultado final pulsado sobre el botón '**CALCULAR**' situado en la parte derecha de la ventana. Inmediatamente después de pulsar sobre dicho botón el programa representará gráficamente el resultado en el gráfico de la parte derecha de la ventana, y se indicará el resultado obtenido, en función de nuestros parámetros de entrada, en las celdas situadas en la parte inferior del gráfico.

Otra de las opciones que pone a nuestra disposición este software es la de observar el gráfico en una ventana independiente ((Figura 4.2)), pulsando sobre el botón '**Mostrar Resultados**'. En esta nueva ventana, no solo podremos ver el mismo gráfico descrito anteriormente, sino que además dispondremos de un cursor que nos permitirá ver el resultado en cada punto deseado (antes el resultado dado en las celdas inferiores al gráfico solo mostraba el resultado teniendo en cuenta los parámetros de entrada). En esta nueva ventana también se nos permite exportar el gráfico como una imagen.

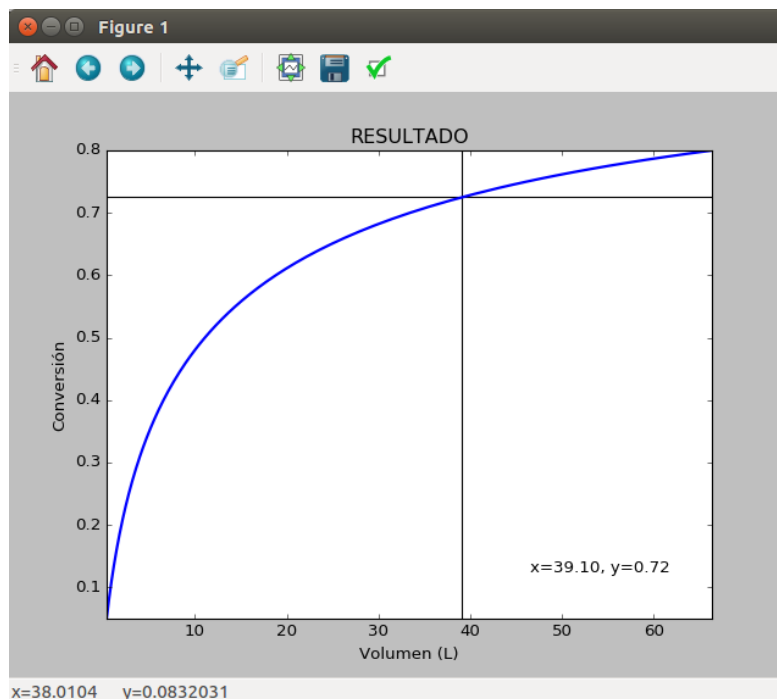


Figura 4.2: Ventana de resultados reactor FP isoterma

Finalmente, podemos realizar un borrado de todas las celdas, mediante el bo-

tón **'Resetear parámetros'**, para realizar un nuevo cálculo. Si no deseamos realizar más cálculos y queremos regresar al menú principal, podremos hacerlo pinchando sobre el botón **'Volver al menú principal'**, situado en la parte inferior derecha de la ventana.

4.2. Reactor flujo pistón adiabático

Seleccionando el reactor flujo pistón adiabático, se nos abrirá una ventana como la mostrada en la Figura 4.3.

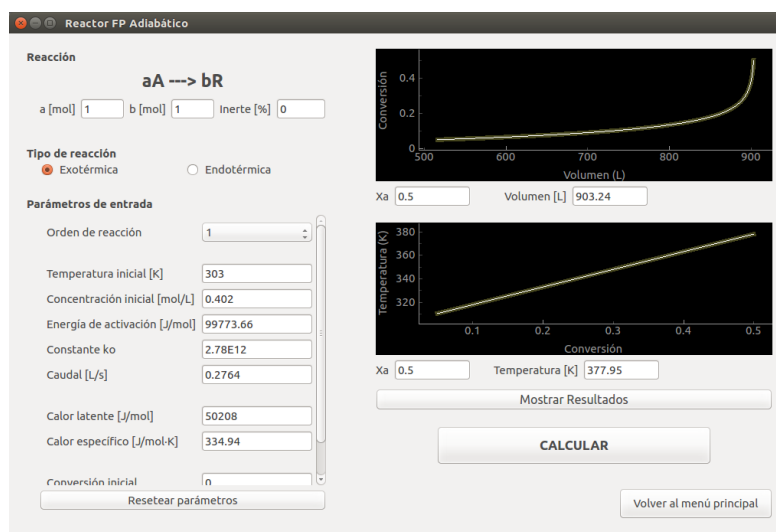


Figura 4.3: Ventana reactor FP adiabático

De nuevo, en la parte superior izquierda se nos indica el tipo de reacción con la que vamos a trabajar y se nos permite modificar el número de reactivos y productos, así como añadir el porcentaje deseado de inerte en la reacción. Seguidamente, debido a que estamos trabajando con el caso adiabático, debemos indicar si la reacción será exotérmica o endotérmica. Una vez realizadas estas operaciones, seleccionaremos el orden de reacción en el desplegable y a continuación introduciremos todos los parámetros de entrada indicados, prestando especial atención a las unidades en las que se indican que han de ser introducidos.

Cuando tengamos introducidos todos los datos que se indican, podremos obtener el resultado final pulsando sobre el botón **'CALCULAR'** situado en la parte derecha de la ventana. Para este reactor, después de pulsar sobre dicho botón, se representarán dos gráficas en lugar de una. Estas gráficas harán referencia al volumen del reactor (gráfico superior) y a la temperatura de la reacción (gráfico inferior). Los resultados numéricos obtenidos, en función de nuestros parámetros de entrada, se mostrarán en las celdas situadas en la parte inferior de cada uno de los gráficos.

Para ver los resultados en una ventana independiente (Figura 4.4) bastará con pulsar sobre el botón '**Mostrar Resultados**'. En esta nueva ventana, como en el caso anterior, dispondremos de un cursor que nos permitirá movernos a través de ambas curvas para ver el resultado del volumen y la temperatura en cada uno de los puntos que deseemos. En esta nueva ventana también se nos permite exportar el gráfico como una imagen.

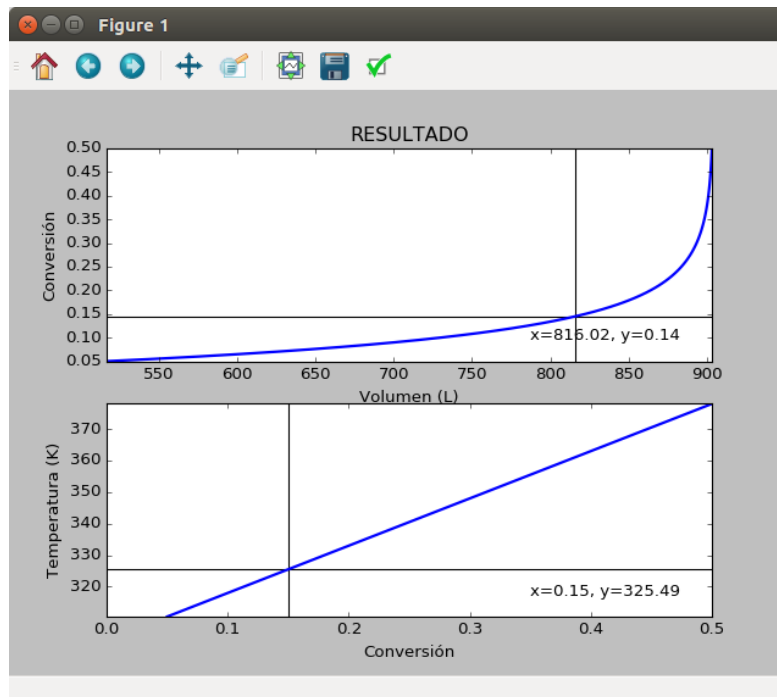


Figura 4.4: Ventana de resultados reactor FP adiabático

Finalmente, podemos realizar un borrado de todas las celdas, mediante el botón '**Resetear parámetros**', para realizar un nuevo cálculo. Si no deseamos realizar más cálculos y queremos regresar al menú principal, podremos hacerlo pinchando sobre el botón '**Volver al menú principal**' de abajo a la derecha de la ventana.

4.3. Reactor flujo pistón no adiabático y no isoterma

Seleccionando el reactor flujo pistón no adiabático y no isoterma, se nos abrirá una ventana como la mostrada en la Figura 4.5.

La estructura de esta ventana es similar a la del caso anterior (reactor flujo pistón adiabático), mostrando en la parte superior izquierda el tipo de reacción con la que vamos a trabajar. Permite modificar el número de reactivos y

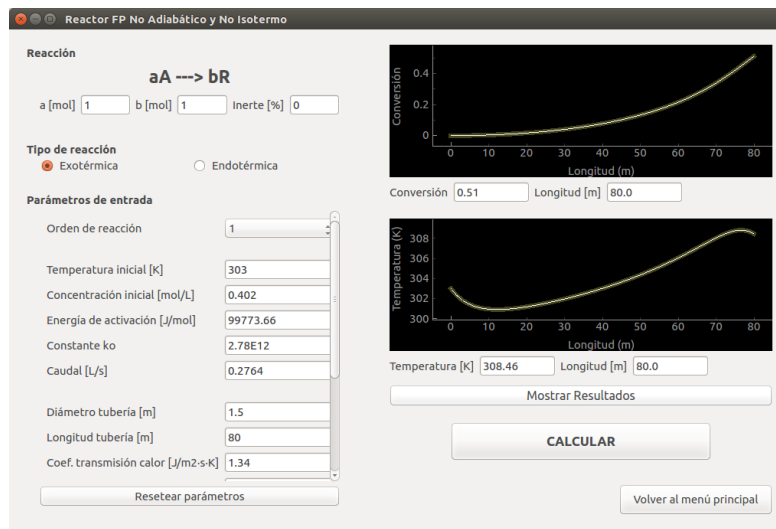


Figura 4.5: Ventana reactor FP no adiabático y no isotermo

productos, así como añadir el porcentaje deseado de inerte en la reacción. A continuación, debemos indicar si la reacción será exotérmica o endotérmica. Una vez realizadas estas operaciones, seleccionamos el orden de reacción en el desplegable y procedemos a introducir todos los parámetros de entrada indicados, prestando especial atención a las unidades en las que se indican que han de ser introducidos.

Cuando tengamos introducidos todos los datos, podremos obtener el resultado final pulsando sobre el botón '**CALCULAR**' situado en la parte derecha de la ventana. Después de pulsar sobre dicho botón, se representarán dos gráficas como ocurría en el caso anterior. Dichas gráficas harán referencia a la conversión que puede lograr el reactor (gráfico superior) y a la temperatura de la reacción (gráfico inferior), ambas en función de la longitud de la tubería. Los resultados numéricos obtenidos, en función de nuestros parámetros de entrada, se mostrarán en las celdas situadas en la parte inferior de cada uno de los gráficos.

Para ver los resultados en una ventana independiente (Figura 4.6) bastará con pulsar sobre el botón '**Mostrar Resultados**'. En esta nueva ventana, como en los casos anteriores, dispondremos de un cursor que nos permitirá movernos a través de ambas curvas para ver el resultado de conversión y temperatura en cada punto concreto. También podremos exportar el gráfico como una imagen.

Finalmente, podemos realizar un borrado de todas las celdas, mediante el botón '**Resetear parámetros**', para realizar un nuevo cálculo. Si no deseamos realizar más cálculos y queremos regresar al menú principal, podremos hacerlo pinchando sobre el botón '**Volver al menú principal**', situado en la parte inferior derecha de la ventana.

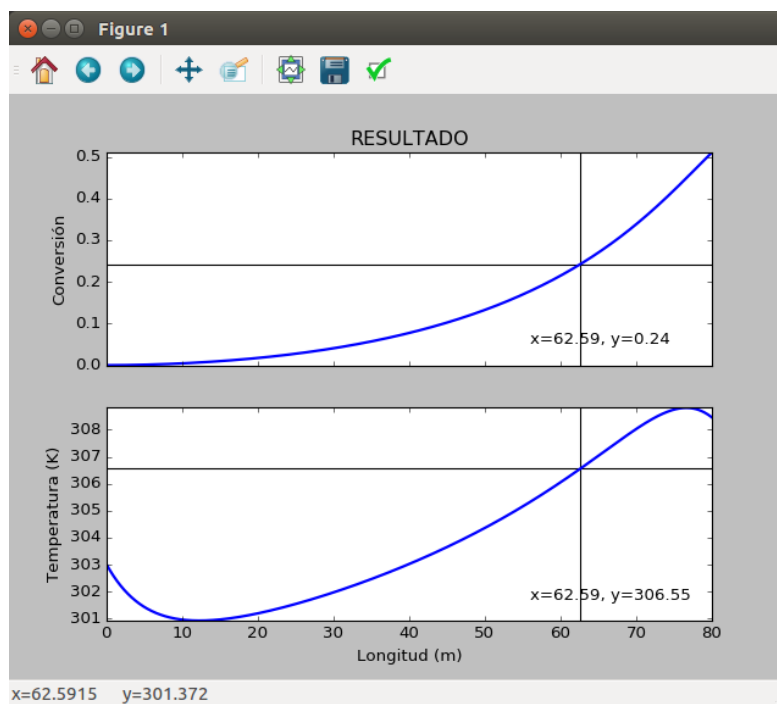


Figura 4.6: Ventana de resultados reactor FP no adiabático y no isoterma

Capítulo 5

Reactor Mezcla Perfecta

En un reactor de mezcla perfecta lo que se consigue es que exista una homogeneidad perfecta en la reacción, es decir, que todos los puntos tengan la misma temperatura y presión, consiguiendo que toda la mezcla que se extraiga tenga idénticas condiciones a la que está en el interior del reactor.

En el menú principal, encontramos dos botones dentro del apartado de reactores de mezcla perfecta. Estos dos botones serán utilizados indistintamente en función del propósito que tengamos: cálculo del volumen o cálculo de la conversión.

5.1. Cálculo del volumen

Si seleccionamos la opción de cálculo de volumen, nos aparece una ventana como la que se puede observar en la Figura 5.1.

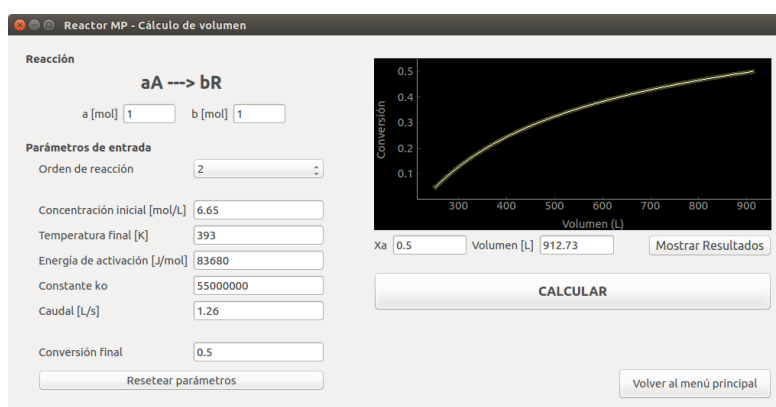


Figura 5.1: Ventana reactor MP (cálculo de volumen)

En la parte superior izquierda, el programa nos indica el tipo de reacción con la

que vamos a trabajar y permite modificar el número de reactivos y productos. Una vez que hayamos establecido la reacción deseada, deberemos seleccionar el orden de reacción en el desplegable e introducir todos los parámetros de entrada indicados, prestando especial atención a las unidades en las que se indican que han de ser introducidos.

Cuando tengamos introducidos todos los datos indicados, podremos obtener el resultado final pulsando sobre el botón '**CALCULAR**', situado en la parte derecha de la ventana. Inmediatamente después de pulsar sobre dicho botón el programa representará de forma gráfica el resultado en la parte derecha de la ventana, y se indicará el valor final obtenido como resultado, en función de nuestros parámetros de entrada, en las celdas situadas en la parte inferior del gráfico.

Si deseamos visualizar el gráfico en una ventana independiente ((Figura 5.2)), podemos hacerlo pulsando sobre el botón '**Mostrar Resultados**'. En esta nueva ventana, no solo podremos ver el mismo gráfico descrito anteriormente, sino que además dispondremos de un cursor que nos permitirá ver el resultado en cada punto de la curva. En esta nueva ventana también se nos permite exportar el gráfico como una imagen.

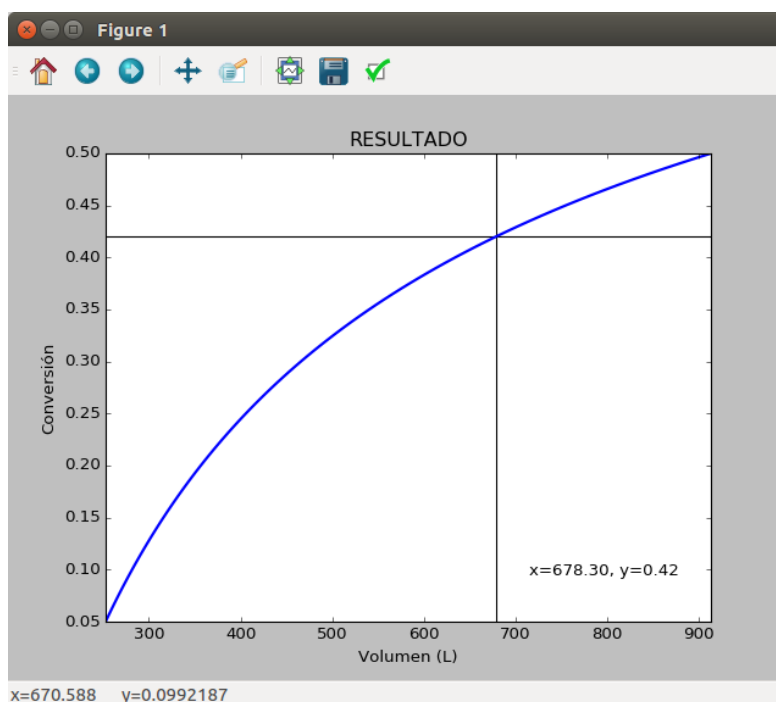


Figura 5.2: Ventana de resultados reactor MP (cálculo de volumen)

Finalmente, podemos realizar un borrado de todas las celdas, mediante el botón '**Resetear parámetros**', para realizar un nuevo cálculo. Si no deseamos realizar más cálculos y queremos regresar al menú principal, podremos hacerlo pinchando sobre el botón '**Volver al menú principal**' de abajo a la derecha

de la ventana.

5.2. Cálculo de la conversión

Si seleccionamos la opción de cálculo de la conversión, nos aparece una ventana como la que se puede observar en la Figura 5.3.

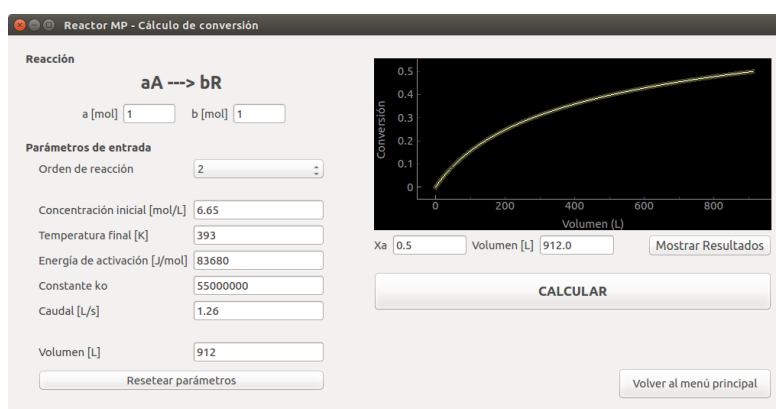


Figura 5.3: Ventana reactor MP (cálculo de conversión)

Al igual que para el cálculo del volumen descrito anteriormente, se nos informa en la parte superior izquierda de la ventana sobre el tipo de reacción con la que vamos a trabajar y se nos permite modificar el número de reactivos y productos. Una vez realizadas estas operaciones, seleccionaremos el orden de reacción en el desplegable y a continuación introduciremos todos los parámetros de entrada indicados, prestando especial atención a las unidades en las que se indican que han de ser introducidos.

Podremos obtener el resultado final, una vez que hayamos introducido todos los datos, pulsando sobre el botón '**CALCULAR**' situado en la parte derecha de la ventana. Así se representará el resultado en el gráfico de la parte derecha de la ventana. Además, los resultados numéricos obtenidos como solución final, en función de nuestros parámetros de entrada, se mostrarán en las celdas situadas en la parte inferior del gráfico mencionado.

Si deseamos ver los resultados en una ventana independiente (Figura 5.4) bastará con pulsar sobre el botón '**Mostrar Resultados**'. En esta nueva ventana, como en el caso anterior, dispondremos de un cursor que nos permitirá movernos a través de la curva obtenida para ver el resultado en cada punto concreto. En esta nueva ventana también se nos permite exportar el gráfico como una imagen.

Finalmente, podemos realizar un borrado de todas las celdas, mediante el botón '**Resetear parámetros**', para realizar un nuevo cálculo. Si no deseamos realizar más cálculos y queremos regresar al menú principal, podremos hacerlo mediante el botón '**Volver al menú principal**', situado en la parte inferior

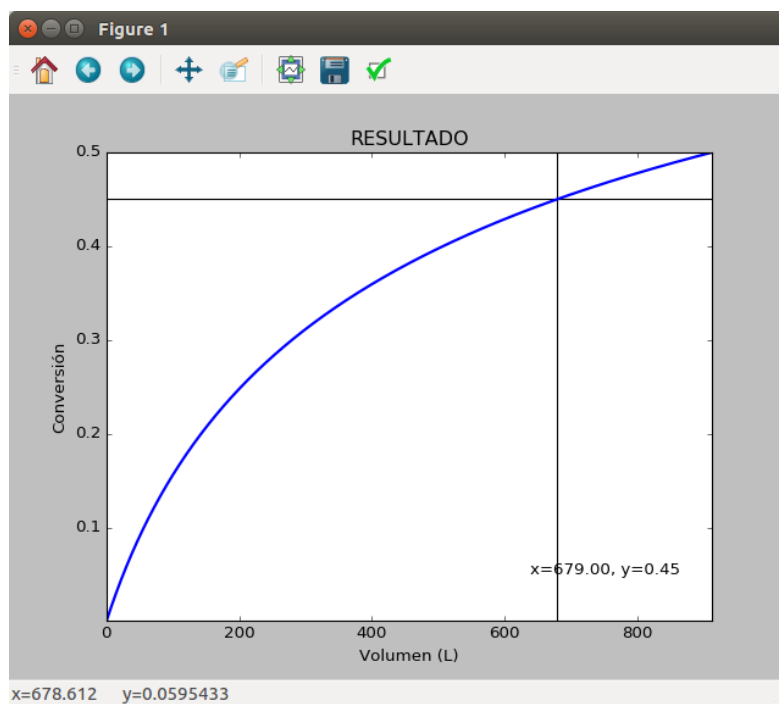


Figura 5.4: Ventana de resultados reactor MP (cálculo de conversión)

derecha de la ventana.