

Simulación de reactores tanque continuo autotérmicos

A. López Cabanes, Gloria Villora Cano, María Tomás Martínez
Departamento de Ingeniería Química
Facultad de Ciencias Químicas y Matemáticas
Universidad de Murcia

Recibido: 22-12-87
Aceptado: 8-7-88

Simulation of autothermal continuous tank reactors

Summary: In that reactors whose an exothermic reaction is carried out, the heat of reaction can be used to preheat the feed. By other hand, the tank reactor is very suitable for these processes. In this work, continuous stirred-tank reactors, isolated or associated in series, are simulated with or without reaction in the cooling jacket, using a stoichiometric and kinetic general equations, and the correspondent heat and matter balances.

Those equations constitute a general model that, as an orientation, has been used to solved three examples. Such a model can be used for another cases.

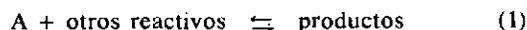
Key words: Simulation, tank, reactors, autothermal.

INTRODUCCIÓN

En un trabajo anterior ¹, se realizaba una revisión general acerca de la operación autotérmica, como una de las posibilidades de operación más ventajosas de los sistemas altamente exotérmicos, que utiliza como fluido enfriador a la propia alimentación. De forma análoga, aunque poco usual, podría pensarse en aplicar este modo de operar a sistemas con reacción endotérmica en los que la alimentación sería la que aportase el calor necesario.

En dicho trabajo, y en otro posterior ², se estudiaba igualmente la simulación de reactores tubulares, según este esquema de transferencia de calor. En el trabajo que aquí se presenta se expone la simulación del funcionamiento del reactor tanque continuo, bien aislado o asociado en serie y contemplando la posibilidad de que la reacción se inicie en la camisa de intercambio calorífico. En cualquier caso, se ha de tener en cuenta los criterios sobre estabilidad introducidos por Van Heerden ³ e incluidos en los textos usuales de Ingeniería de la Reacción, para poder discriminar, si es necesario, el punto óptimo de operación.

Con esta finalidad se va a utilizar una ecuación estequiométrica, totalmente general, que responde a la expresión:



en la que A es el reactivo limitante. La ecuación cinética también va a considerarse que responde a una expresión general:

$$(-r_A) = f(X_A, T) \quad (2)$$

sin tener en cuenta ninguna expresión concreta que restase generalidad al trabajo.

ESTUDIO DE UN TANQUE AISLADO

En el estudio de un reactor tanque autotérmico, cabe pensar en dos posibilidades de realizar la transferencia de calor, según dos esquemas distintos que se representan en la figuras 1 y 2, según que el intercambio calorífico tenga lugar en el reactor mismo —reactor encamisado—, o en un intercambio adyacente, respectivamente.

Siguiendo el esquema de funcionamiento de la figura 1, la camisa de enfriamiento se alimenta con una corriente F_1 , a una temperatura T_{s1} y con una conversión $X_{A,s1}$, que generalmente será cero. Posteriormente, se introduce en el



reactor a una temperatura distinta, $T_{sf}=T_f$, y con una conversión $X_{A,sf}=X_{A,i}$, que será igual a la anterior si no ha habido reacción en la zona de intercambio. La reacción tiene lugar y se alcanza los valores finales de temperatura y conversión, T_f y $X_{A,f}$ respectivamente.

El esquema de la figura 2 supone que la transferencia de calor se realiza no en el propio reactor, sino en un recipiente externo en el que la alimentación intercambia calor con el efluente, pasando de las condiciones iniciales $-T_{si}$ y $X_{A,si}$ a las de entrada al reactor $-T_f$ y $X_{A,i}$. Este sistema de funcionamiento no va a ser analizado en el presente trabajo, ya que no puede considerarse como un reactor autotérmico tal cual, sino que puede estudiarse como un reactor tanque y un cambiador de calor conectados en serie constituyendo entre ambos un proceso autotérmico.

Como sucede con todos los reactores, el modelo de diseño está constituido por las ecuaciones resultantes de los balances de materia y calor —en este caso no se considera el de cantidad de movimiento—, realizados tanto en el interior del reactor como en la camisa de enfriamiento, según indiquen los correspondientes avances en conversión y temperatura.

Aunque podría realizarse el intercambio de calor de modo que la entrada del reactor se realizase a la misma temperatura de operación, es decir, que fuese $T_i=T_f$, se va a suponer la existencia de un salto térmico entre la entrada

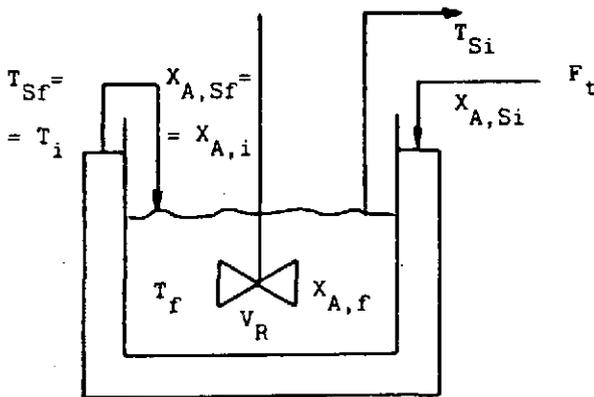


FIGURA 1. Reactor tanque autotérmico aislado.

y el interior del reactor. Además se va a suponer al conjunto térmicamente aislado del exterior, de modo que no exista transferencia de calor entre la camisa de enfriamiento y el entorno que la rodea. Así mismo, se va a considerar que la camisa de enfriamiento cumple también la hipótesis de mezcla completa.

A continuación se va a estudiar y resolver dos casos particulares de diseño, a título de ejemplo, dejando otras variantes posibles para que puedan desarrollarse de modo similar a los anteriores, los cuales pueden utilizarse como guía.

TANQUE AUTOTÉRMICO AISLADO: CASO-ESTUDIO I

Tomando como base el esquema de funcionamiento de la figura 1, se va a estudiar en primer lugar el caso en que no haya reacción en la camisa de enfriamiento, es decir:

$$X_{A, si} = X_{A, sf} = X_{A, i} = 0 \tag{3}$$

y suponiendo además que se conozca la temperatura a la que debe llegar la alimentación al reactor $-T_i=T_{sf}-$. De este modo, las variables a calcular serán la conversión y la temperatura a las que el reactor opera $-X_{A,f}$ y T_f- , y la temperatura inicial de la corriente de entrada al sistema $-T_i-$. Este caso es el más general en la operación de este tipo de reactores en procesos homogéneos.

Con estas hipótesis, el diseño resultará del sistema de ecuaciones formado por los balances de materia y calor en el reactor y de calor en la camisa de enfriamiento.

A) Balance de materia en el reactor:

Según las hipótesis anteriores, la ecuación de diseño del reactor tanque continuo de mezcla completa es:

$$\frac{V_R}{F_{A,0}} = \frac{X_{A,f}}{(-r_A)} \tag{4}$$

B) Balance de calor en el reactor:

La ecuación resultante de realizar un balance de calor en el interior del reactor, conduce a:

$$F_i \bar{C}_{pT} (T_f - T_i) + \Delta H_{T_f} X_{A,f} F_{A,0} + U \cdot \text{Area} (T_f - T_{sf}) = 0 \tag{5}$$

siendo T la temperatura media entre T_i y T_f .

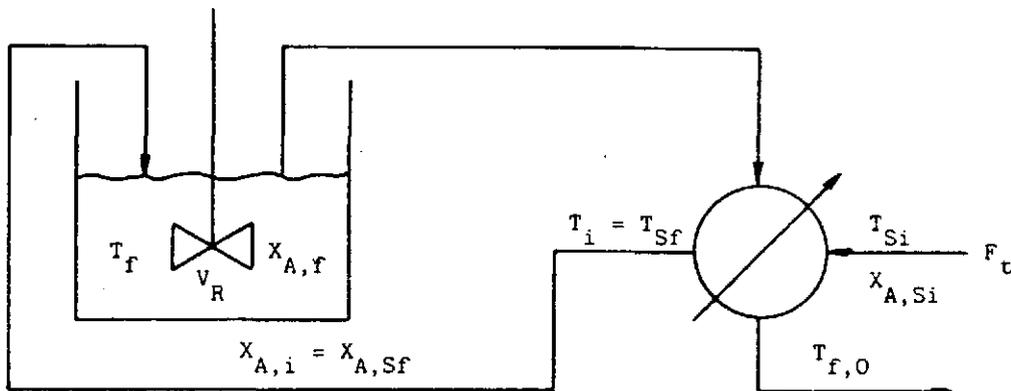


FIGURA 2. Sistema autotérmico reactor-intercambiador de calor.



De la anterior expresión, teniendo en cuenta la igualdad entre T_{sf} y T_i , se obtiene:

$$T_f = T_i - \frac{\Delta H_{T_f} X_{A,f} F_{A,0}}{F_i \bar{C}_{pT} + U \cdot Area} \quad (6)$$

C) Balance de calor en la camisa de enfriamiento:

Atendiendo al proceso de transferencia, el balance de calor en la camisa resulta:

$$Q_{transf} = F_i \bar{C}_{pT_s} (T_{sf} - T_{si}) \quad (7)$$

siendo T , la temperatura media del intervalo T_{si} a T_{sf} .

En la expresión anterior, el valor del calor transferido es el mismo que en la ecuación 5, por lo que puede ponerse:

$$Q_{transf} = F_i \bar{C}_{pT} (T_f - T_i) + \Delta H_{T_f} X_{A,f} F_{A,0} \quad (8)$$

Despejando en la ecuación 7:

$$T_{si} = T_{sf} - \frac{Q_{transf}}{F_i \bar{C}_{pT_s}} \quad (9)$$

D) Solución del modelo de diseño:

Las ecuaciones referenciadas hasta ahora, constituyen el modelo de diseño del reactor tanque autotérmico, cuya solución puede realizarse siguiendo el diagrama de cálculo indicado en la figura 3. Tras leer los datos oportunos, el cálculo comienza suponiendo un valor para la temperatura del reactor — T_f^* —, necesario para el cálculo de las constantes cinéticas. Con esta T_f^* se estima la velocidad de reacción —ecuación 2— y con ella, mediante la ecuación 4, se obtiene el valor de $X_{A,f}$ que se compara con el supuesto, realizando las iteraciones necesarias hasta lograr se ajuste, caso de que no pueda obtenerse directamente.

A continuación, la ecuación 8 permite hallar el valor del calor transferido que, sustituido en la ecuación 9, conduce a la estimación del valor de la temperatura de entrada al sistema, T_{si} , tras haber supuesto y ajustado su valor para poder conocer la temperatura media T .

Finalmente, se obtiene el valor de T_f , utilizando la ecuación 6, que se compara con el supuesto iterando sucesivamente hasta ajustar su valor. El proceso finaliza analizando los resultados obtenidos.

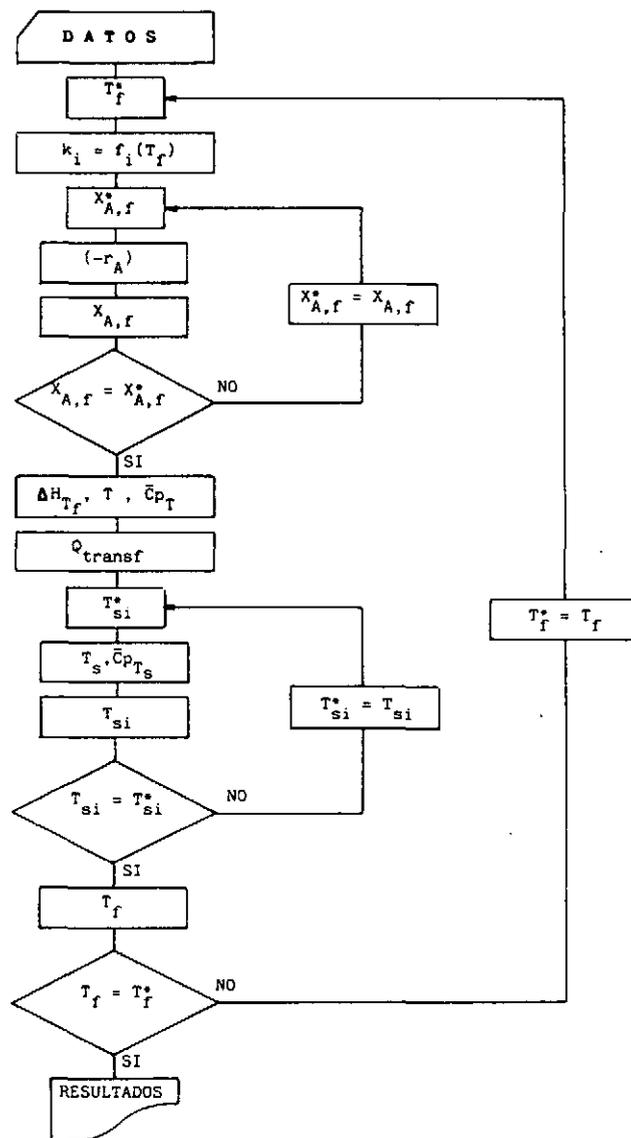


FIGURA 3. Diagrama de cálculo aplicado al Caso-estudio I.

TANQUE AUTOTÉRMICO AISLADO: CASO-ESTUDIO II

Manteniendo también el esquema de funcionamiento de la figura 1, se va a analizar ahora el caso en que se inicie la reacción en la camisa de enfriamiento, alcanzando en ésta una temperatura igual a la de operación del reactor, caso representativo de los reactores tanque autotérmico catalíticos. Por tanto, se cumple:

$$\begin{aligned} X_{A,si} &= X_{A,si} \\ T_{sf} &= T_i = T_f \end{aligned} \quad (10)$$

Partiendo de unas condiciones de alimentación dadas, T_{si} y $X_{A,si}$, el objetivo del cálculo en este caso es obtener el valor de la temperatura y de la conversión alcanzadas en el reactor, T_f y $X_{A,f}$ respectivamente, así como de la conversión lograda en la camisa de enfriamiento.

A) Balance de materia en la camisa de enfriamiento:

Considerando el avance en conversión realizado en la camisa externa, la ecuación del balance de materia es:



$$\frac{V_{R,c}}{F_{A,O}} = \frac{X_{A,sf} - X_{A,si}}{(-r_{A,c})} \quad (11)$$

B) Balance de calor en la camisa de enfriamiento:

De forma análoga, la ecuación de balance de calor en la camisa externa es:

$$F_t \bar{C}_{p_{T_s}} (T_{sf} - T_{si}) + \Delta H_{T_{sf}} (X_{A,sf} - X_{A,si}) F_{A,O} + U \text{Area} (T_f - T_{sf}) = 0 \quad (12)$$

C) Balance de materia en el reactor:

En este caso, se tiene que:

$$\frac{V_R}{F_{A,O}} = \frac{X_{A,f} - X_{A,i}}{(-r_A)} \quad (13)$$

D) Balance de calor en el reactor:

La ecuación correspondiente es:

$$F_t \bar{C}_{p_T} (T_f - T_i) + \Delta H_{T_f} (X_{A,f} - X_{A,i}) F_{A,O} + U \text{Area} (T_f - T_{sf}) = 0 \quad (14)$$

E) Solución del modelo de diseño:

Teniendo en cuenta que el valor del término correspondientes al calor transferido es el mismo en las ecuaciones 12 y 14, pueden simplificarse éstas en la forma:

$$F_t \bar{C}_{p_{T_s}} (T_{sf} - T_{si}) + \Delta H_{T_{sf}} (X_{A,sf} - X_{A,si}) F_{A,O} - \\ - F_t \bar{C}_{p_T} (T_f - T_i) - \Delta H_{T_f} (X_{A,f} - X_{A,i}) F_{A,O} = 0 \quad (15)$$

operando y teniendo en cuenta las hipótesis planteadas en la ecuación 10 y el esquema de funcionamiento, queda:

$$F_t \bar{C}_{p_{T_s}} (T_f - T_{si}) + \Delta H_{T_f} (2X_{A,i} - X_{A,si} - X_{A,fi}) F_{A,O} = 0 \quad (16)$$

De este modo, el modelo de diseño del reactor en estudio resulta constituido por las ecuaciones 11, 13 y 16, para cuya solución general se propone el proceso iterativo descrito en el diagrama de la figura 4: Después de leer los datos necesarios, se supone un valor T_f^* con el que calcular las constantes cinéticas, iniciando a continuación el ciclo de cálculo correspondiente a la estimación de la conversión alcanzada en la camisa externa, utilizando la ecuación 11.

A continuación se realiza un proceso análogo para estimar la conversión que se alcanza en el reactor, por medio de la ecuación 13 y, por último, se calcula el valor de T_f , utilizando la ecuación 16, que se compara con el supuesto inicialmente, iterando de forma sucesiva hasta lograr una buena concordancia.

ESTUDIO DE UNA ASOCIACIÓN DE TANQUES EN SERIE

De particular interés en el sistema constituido por una asociación de reactores tanque colocados en serie, ope-

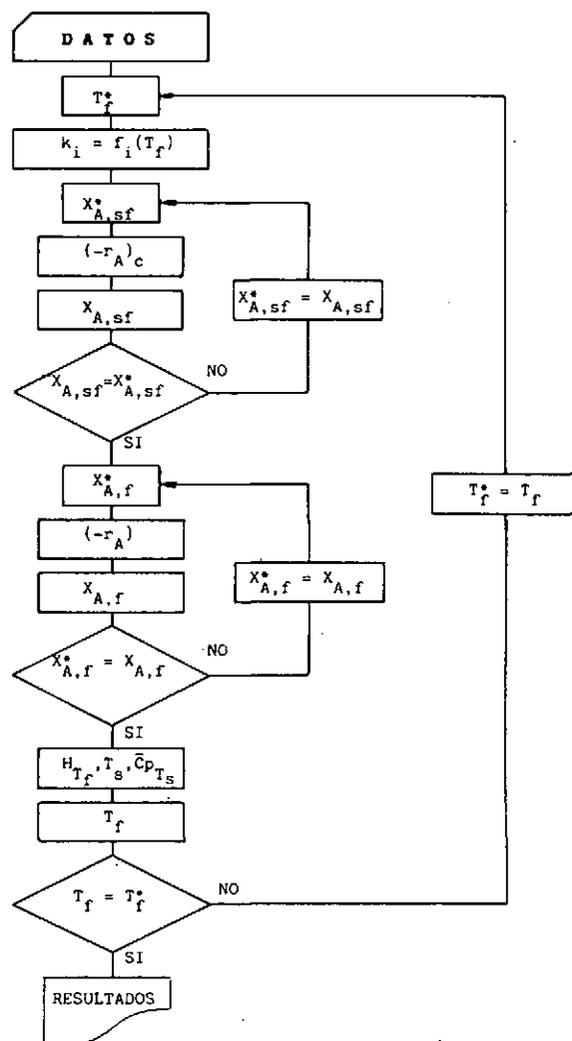


FIGURA 4. Diagrama de cálculo aplicado al Caso-estudio II.

rando cada uno de ellos de forma autotérmica, en el cual para mantener la temperatura de operación deseada en cada tanque, se utiliza como fluido intercambiar la misma corriente que ha de servir de alimentación (figura 5).

El análisis de este sistema puede abordarse siguiendo el método habitual —reactor a reactor—, teniendo presente las ecuaciones de diseño ya conocidas. A modo de caso tipo, se va a estudiar aquel en que sean conocidas las temperaturas de entrada al sistema, $T_{s,0}$, y de operación de los tres reactores — T_1 , T_2 y T_3 — que lo forman, y considerando además que no se produce avance de la reacción en las respectivas camisas de enfriamiento.

Aplicando las ecuaciones de diseño al tanque intermedio del sistema, el número 2, se tiene:

— Balance de materia:

$$\frac{V_{R2}}{F_{A,O}} = \frac{X_{A,2} - X_{A,1}}{(-r_{A2})} \quad (17)$$

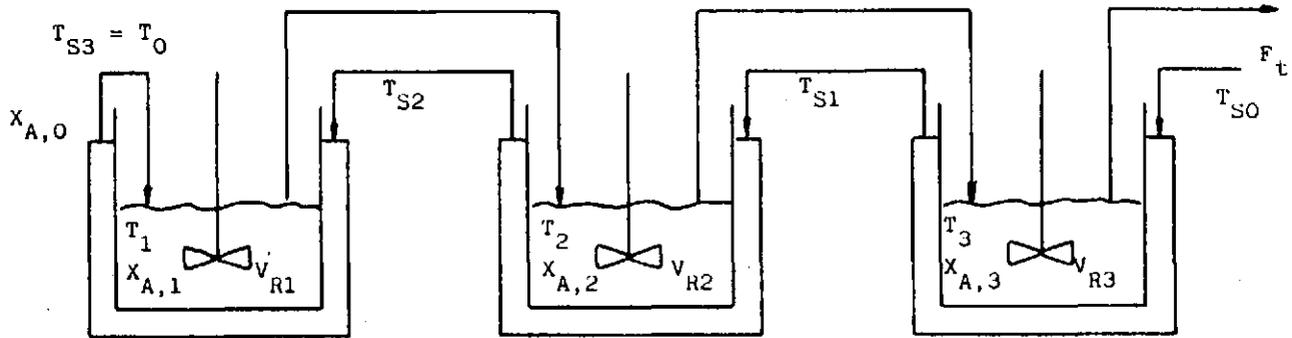


FIGURA 5. Asociación en serie de reactores tanque autotérmicos.

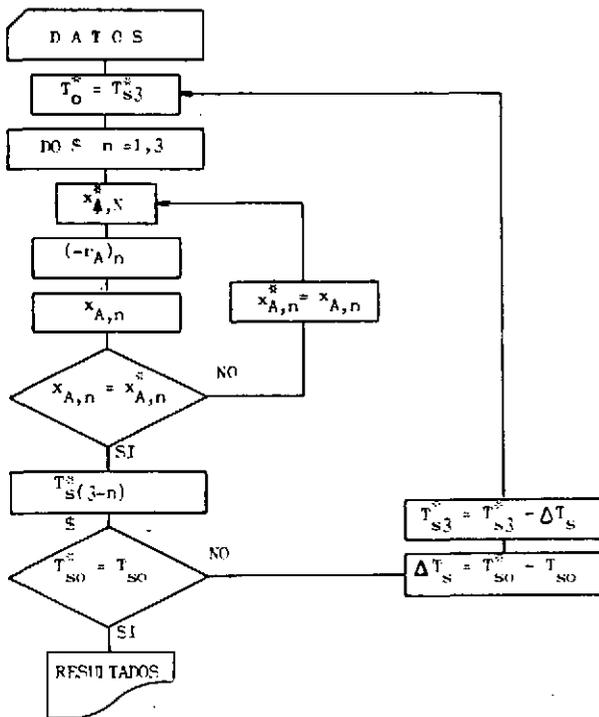


FIGURA 6. Diagrama de cálculo aplicado a la asociación de tanques.

donde la velocidad de reacción viene dada por una expresión similar a la de la ecuación 2:

$$(-r_{A2}) = f(X_{A,2}, T_2) \quad (18)$$

— Balance de calor:

$$F_1 \bar{C}_{pT} (T_2 - T_1) + \Delta H_{T_2} (X_{A,2} - X_{A,1}) + U \cdot \text{Area} (T_2 - T_{s2}) = 0 \quad (19)$$

— Ecuación de intercambio de calor:

$$Q_{\text{transf}} = F_t \bar{C}_{pT_s} (T_{s2} - T_{s1}) \quad (20)$$

La solución del modelo matemático constituido por las ecuaciones correspondientes a todo el sistema, puede realizarse siguiendo el diagrama de cálculo de la figura 6, que responde al esquema de funcionamiento de la figura 5, aunque fácilmente puede modificarse para otros esquemas. El cálculo se inicia suponiendo un valor para la temperatura de la corriente de alimentación al primer reactor, $T_0^* = T_{s,3}^*$, para proseguir realizando un ciclo de cálculo para cada uno de los reactores, suponiendo la conversión a la que opera y ajustando su valor según la correspondiente ecuación de balance de materia —ecuación 17 o similar—. Posteriormente, de la conjunción de las ecuaciones 19 y 20, o sus análogas, se calcula el valor de la temperatura de entrada al sistema, T_0^* , que ha de ser igual al utilizado como dato. Caso de no ser así, se supone un nuevo valor $T_0^* = T_{s,3}^*$, hasta lograr el ajuste.

NOMENCLATURA

A	reactivo limitante.
Área	área de intercambio de calor.
$\bar{C}_{pT}, \bar{C}_{pT_s}$	capacidad calorífica media a la temperatura T y T_s .
$F_{A,0}$	velocidad de alimentación de A.
F_t	velocidad total de alimentación.
$\Delta H_{Tr}, \Delta H_{Tsf}$	entalpía de reacción a la temperatura T_r y T_s .
k_i	constante cinética de la reacción i.
n	número del reactor en la asociación.
Q_{transf}	calor transferido entre el reactor y la camisa de enfriamiento.
$(-r_A), (-r_{Ac})$	velocidad de reacción en el reactor y en la camisa de enfriamiento.
T_i, T_f	temperatura de alimentación y de operación del reactor.
T	temperatura media entre T_i y T_f .
T_{si}, T_{sf}	temperatura de entrada y de salida a la camisa de enfriamiento.



T_s	temperatura media entre T_{si} y T_{sf} .
U	coeficiente global de transmisión de calor.
V_R, X_{Rc}	volumen de reactor y de la camisa de enfriamiento.
X_A	conversión de reactivo limitante.
$X_{A,i}, X_{A,f}$	conversión de A a la entrada y a la salida del reactor.
$X_{A,si}, X_{A,sf}$	conversión de A a la entrada y a la salida de la camisa de enfriamiento.

BIBLIOGRAFÍA

- 1 GARCÍA, R.: Tesis de Licenciatura. Universidad de Murcia. 1982.
- 2 LÓPEZ CABANES, A.; BÓDALO, A; VÍLLORA, G.; GARCÍA, R.: Anales de la Universidad de Murcia (Ciencias), 42 (1-4), 73-96 (1983).
- 3 VAN HEERDEN, C.: Industrial and Engineering Chemistry, 45, 1242-1247 (1953).