

Simulación de reactores autotérmicos

Parte I: Sin reacción en la zona de alimentación

POR

ANTONIO LOPEZ CABANES,
ANTONIO BODALO SANTOYO,
GLORIA VILLORA CANO y
REMEDIOS GARCIA TORTOSA

RESUMEN

Siendo los reactores autotérmicos equipos habitualmente utilizados en procesos industriales es notoria la carencia de métodos que permitan afrontar su diseño. En el trabajo que aquí se presenta ha quedado resuelta la metodología de tal diseño que ha sido aplicada a los dos casos generales en los que alternativamente exista, o no, reacción en la zona de alimentación. En ambos casos se han planteado las ecuaciones de diseño, resuelto por medio de sendos programas de cálculo que, consiguientemente, configuran los correspondientes modelos digitales de simulación de los reactores en estudio.

SUMMARY

Autothermic reactors are used normally in the industrial process but it is difficult to meet methods for their design. In this work is presented the methodology for that. It has been applied to two general cases with reaction, or no, in the feed zone. In both cases were planned the design equations, resolving their with computer programs that are the simulation digital models of the reactors on study.



INTRODUCCION

Dentro de los posibles casos en que se transfiere el calor desprendido cuando tiene lugar una reacción exotérmica (1), se da aquel en el que este calor se aprovecha por la propia corriente de alimentación para elevar su nivel térmico, proceso conocido con el nombre de autotérmico. Cunningham y Lombardi (2) definen estos reactores como aquellos en los cuales se mantiene la temperatura del sistema en el nivel deseado sin necesidad de aportar energía por fuentes externas, haciendo uso única y exclusivamente del calor liberado por la reacción que tiene lugar en el interior del reactor.

De modo similar los define Van Heerden (3) como aquellos en los cuales se puede utilizar parte del calor de reacción para elevar la temperatura de los reactivos, hasta alcanzar éstos una temperatura a la cual la reacción sea posible con una velocidad adecuada.

Su funcionamiento general, aplicado a reactores tubulares, puede observarse en las figuras 1 y 2. Por el centro del reactor se alimenta una corriente a una temperatura T_{si}^o que va calentándose conforme avanza en el reactor en contracorriente con el avance del fluido reaccionante, y que puede, o no, ir reaccionando. Esta corriente llega a la salida de la zona de alimentación a una temperatura superior T_{sf}^o y con una conversión, igual o distinta de cero, $x_{A_{sf}}^o$. Finalmente, la misma pasa a la zona de reacción propiamente dicha en la que la conversión aumenta desde su valor inicial $x_{Ai}^o = x_{A_{sf}}^o$ hasta el valor final x_{Ar}^o , mientras que la temperatura, tras aumentar ligeramente al principio, desciende posteriormente hasta el valor de salida T_f^o .

La metodología seguida en el diseño de este tipo de reactores es similar a la de cualquier otro tipo de ellos (4). Es decir, se han de realizar balances de materia, de calor y de cantidad de movimiento. Este último, cuyo objetivo final es calcular la pérdida de carga, no se ha realizado en este trabajo, puesto que se ha supuesto diseño isobárico.

Para el planteamiento y resolución de los balances de materia y de calor se ha seguido el procedimiento sistematizado en otro trabajo por los autores de éste (5), utilizando procedimientos iterativos para calcular variables de salida en porciones incrementales de reactor desde los valores iniciales a los finales.

Teniendo en cuenta la posibilidad antes apuntada de que haya o no reacción en la zona de alimentación, se han diferenciado dos casos particulares, el primero de los cuales, aquel en el que no hay reacción en la zona de alimentación, se estudia a continuación.

BALANCE DE MATERIA

Puesto que el reactor a diseñar es tubular, en el que además va a admitirse la hipótesis de flujo pistón (6), y teniendo en cuenta que las propiedades del sistema varían con la longitud, para obtener las ecuaciones de diseño se ha de considerar un elemento diferencial de volumen de reactor (5) del modo representado en la figura 3.

Para el diseño se supone una ecuación estequiométrica general:



de cinética conocida:

$$(-r_A) = k_1 C_A^n C_B^m - k_s C_R^p C_S^q \tag{2}$$

y con una definición de conversión, referida al reactante limitante A, como:

$$x_A = \frac{\text{kilos de A reaccionados}}{\text{kilos totales alimentados}} = \frac{F_A^o - F_A}{F_t} \tag{3}$$

Por tratarse de un reactor estacionario el balance de materia se expresa como:

$$\left| \begin{array}{l} \text{velocidad de entrada de A} \\ \text{al elemento de reactor} \end{array} \right| = \left| \begin{array}{l} \text{velocidad de salida de A} \\ \text{del elemento de reactor} \end{array} \right| + \left| \begin{array}{l} \text{velocidad de desaparición de A} \\ \text{por reacción en dicho elemento} \end{array} \right| \tag{4}$$

ecuación que sólo habría que aplicarla a la llamada «zona de reacción», puesto que no hay variación de conversión en la alimentación.

Dando valores a los diferentes términos del balance de materia se llega a la expresión:

$$F_t(y_A^o - x_{A1}) = F_t(y_A^o - x_{A2}) + (-r_A) dV_R \tag{5}$$

teniendo en cuenta la geometría de la zona de reacción:

$$dV_R = \frac{\pi(D^2 - D_s^2)}{4} dz \tag{6}$$



Sustituyendo en la ecuación [5], simplificando y separando variables se llega a:

$$dx = \frac{4 F_t}{\pi(D^2 - D_p^2)} \frac{1}{(-r_A)} dx_A \quad [7]$$

ecuación de diseño para este tipo de reactores expresada en forma diferencial.

Para su aplicación posterior interesa la forma incremental de dicha ecuación:

$$\Delta z = G W_m \Delta x_A \quad [8]$$

donde G agrupa los valores constantes de la ecuación [7] y W_m es la media aritmética de la inversa de la velocidad de reacción calculada al principio y al final del incremento considerado que es la variable a calcular. Esta ecuación [8] permite calcular la variación de longitud conforme se va avanzando en conversión a lo largo del reactor.

Para el cálculo de la velocidad de reacción se han de conocer, por un lado, el valor de las constantes cinéticas que están ligadas a la temperatura por la ecuación de Arrhenius:

$$k = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad [9]$$

y por otro, la concentración de cada uno de los componentes calculados como el cociente entre la masa de ese componente que aún queda sin reaccionar y el volumen ocupado por la masa total en reacción. La masa de cada componente presente en el reactor en un instante dado es función de la cantidad alimentada, de la conversión alcanzada, de su peso molecular y del coeficiente estequiométrico, según la expresión:

$$m_j = F_t(y_j^0 - x_A \nu_j \frac{PM_j}{PM_A}) \quad [10]$$

BALANCE DE CALOR

Puesto que va a haber una variación en la temperatura tanto en la zona de reacción como en la de alimentación se han de realizar dos balances de calor, uno en cada zona del reactor.



a) EN LA ZONA DE REACCIÓN.

Se parte de la ecuación general de balance de calor (4):

$$Q_{\text{acumulado}} + Q_{\text{reacción}} + Q_{\text{transferido}} = 0 \quad [11]$$

en la que el término $Q_{\text{transferido}}$ hace referencia a la transferencia de calor hacia la zona de alimentación exclusivamente, considerando el conjunto como adiabático.

Dando valores a cada uno de los términos se llega, para el intervalo de cálculo considerado, a la expresión:

$$F_t \bar{C}_p (T_f - T_i) + \Delta H_{T_m} F_t X_A + U \Delta \text{Area} (T_m - T_{sm}) = 0 \quad [12]$$

Teniendo en cuenta la geometría de la zona de transferencia:

$$\Delta \text{Area} = \pi D_s \Delta z \quad [13]$$

sustituyendo en la ecuación [12] y despejando se tiene:

$$T_f = \frac{Q_A T_i - Q_S (T_i - 2T_{sm}) - Q_R}{Q_A + Q_S} \quad [14]$$

siendo:

$$\begin{aligned} Q_A &= 2F_t \bar{C}_p \\ Q_R &= 2\Delta H_{T_m} F_t \Delta X_A \\ Q_S &= 4\pi D_s \Delta z \end{aligned}$$

De este modo, la ecuación [14] permite calcular la temperatura de salida de la zona de reacción en función de los incrementos de conversión y longitud alcanzados. Para la temperatura media de la zona de alimentación, T_{sm} , se va a tomar en el cálculo un valor igual a la temperatura inferior del intervalo, T_{st} , ya que al tratarse de pequeños incrementos su valor no diferirá notablemente del medio, mientras que significa un importante ahorro en el tiempo de cálculo.

b) EN LA ZONA DE ALIMENTACIÓN.

Una vez conocida T_f y con la condición anterior acerca de T_{sm} , puede calcularse cuál es el valor del calor que se transfiere a la zona de ali-

mentación, que se invertirá exclusivamente en elevar la temperatura desde T_{si} hasta T_{sf} , pero falta conocer cuál es el valor de T_{si} , para lo que hay que tener en cuenta que la T_{sf} ya es conocida, bien a partir del intervalo anterior, o bien, si se está en el principio del reactor, porque su valor sería $T_{sf}^o = T_i^o$. Por tanto:

$$Q_{\text{transferido}} = Q_{\text{acumulado en la alimentación}} \quad [15]$$

de donde:

$$Q_{\text{transferido}} = F_t C_p^o (T_{sf} - T_{si}) \quad [16]$$

$$T_{si} = T_{sf} - \frac{Q_{\text{transferido}}}{F_t C_p^o} \quad [17]$$

DIAGRAMA DE CALCULO

De acuerdo con las ecuaciones y consideraciones anteriormente expuestas, el diagrama simplificado de cálculo para resolver el diseño se expresa en la figura 4. Hay que tener en cuenta que (figura 3) el cálculo se inicia a partir del punto $z_i^o = 0$, por lo que en los datos ha de figurar la conversión ($x_{Ai}^o = 0$) y la temperatura ($T_i^o = T_{sf}^o$), avanzando en el mismo sentido que lo hace el fluido en reacción y, por tanto, en contracorriente con el de alimentación hasta alcanzar la conversión final x_{Af}^o , que también habrá de ser leído como dato.

Por otro lado, ha de tenerse presente que en el cálculo de la T_t aparece la variable Δz , que aún no ha sido calculada, lo que obliga a una iteración suponiéndole un valor, calculando y comparando una vez que la ecuación de diseño haya sido resuelta y realizando sucesivas iteraciones hasta conseguir la igualdad entre los valores supuesto y calculado.

Una vez acabado el cálculo para un incremento de conversión Δx_A fijado, se pasa al incremento siguiente, tomando como valores de las variables iniciales los finales del incremento anterior, y así sucesivamente, hasta que la conversión al final del intervalo, x_{Af} , sea igual a la fijada como de salida del reactor x_{Af}^o .

Con base en este diagrama se ha confeccionado un programa de cálculo en lenguaje FORTRAN IV que se ha operado en el ordenador IBM del Centro de Proceso de Datos de la Universidad de Murcia, que bajo el nombre de AUTOSINR constituye el modelo digital de simulación de este tipo de reactor autotérmico.



SUPUESTO NUMÉRICO

Para comprobar el funcionamiento del modelo AUTOSINR se ha planteado un supuesto numérico partiendo de una ecuación estequiométrica sencilla:



y con una cinética de orden uno

$$(-r_A) = k C_A \quad [19]$$

fijando como temperatura de entrada a la zona de reacción $T_i^0 = T_{sr}^0 = 600^\circ \text{K}$ y como conversión a alcanzar el valor $x_{Ar}^0 = 0.2$.

Como resultados principales del modelo se han tomado los perfiles de conversión y temperatura que aparecen representados en las figuras 5 y 6, respectivamente, perfiles que están en completa concordancia con lo esperado y que, unido a la realización de otros ensayos, cabe suponer el buen funcionamiento del modelo AUTOSINR de simulación de reactores autotérmicos sin reacción en la zona de alimentación.

1. **Identificación del problema:** El problema a resolver es el cálculo de la suma de los cuadrados de los primeros n números naturales, es decir, encontrar una fórmula para $1^2 + 2^2 + 3^2 + \dots + n^2$.

2. **Formulación de hipótesis:** Se supone que la suma de los cuadrados de los primeros n números naturales puede expresarse como un polinomio de grado 3 en función de n .

3. **Prueba por inducción:** Se prueba la hipótesis por inducción matemática. Se verifica que la fórmula es válida para $n=1$ y se demuestra que si es válida para $n=k$, también lo es para $n=k+1$.

4. **Conclusión:** Se concluye que la suma de los cuadrados de los primeros n números naturales está dada por la fórmula $\frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$.

5. **Verificación:** Se verifica la fórmula para algunos valores de n para asegurarse de que es correcta.

6. **Aplicación:** Se muestra cómo aplicar la fórmula para calcular la suma de los cuadrados de los primeros 10 números naturales.

7. **Resumen:** Se resume el proceso de resolución del problema, desde la identificación del problema hasta la aplicación de la fórmula.

8. **Conclusión final:** Se concluye que el problema ha sido resuelto satisfactoriamente.

9. **Reflexión:** Se reflexiona sobre el proceso de resolución del problema y se destacan los puntos clave.

10. **Final:** Se cierra el documento con una despedida y una invitación a seguir aprendiendo.



Parte II: Con reacción en la zona de alimentación

RESUMEN

Continuando con el trabajo iniciado en la parte I, que en buena parte se tomará como referencia, se aborda ahora la simulación del reactor autotérmico en el caso en que se produzca reacción además del incremento de temperatura, en la zona de alimentación.

SUMMARY

Following Part I, which will be taken as reference in a great extension, now is studied the autothermic reactor simulation with reaction and a rise of temperature in the feed zone.

BALANCE DE MATERIA

Como se producen variaciones de composición tanto en la zona de reacción como en la de alimentación el balance de materia se habrá de realizar en ambas zonas, comprendidas en un mismo elemento diferencial de volumen de reactor, figura 7. Para ello habrá que tener en cuenta que el sentido de flujo es en contracorriente, de modo que mientras que en la zona de reacción se alcanza un aumento de conversión dx_A , en la zona de alimentación lo que tiene lugar es una disminución dx_{A_0} .

Las consideraciones generales son las mismas que las expuestas en la parte I, ecuaciones 1, 2, 3 y 4.

a) EN LA ZONA DE REACCIÓN.

El balance de materia es idéntico al realizado cuando no hay reacción en la zona de alimentación, llegándose a las mismas ecuaciones que en la parte I.



b) EN LA ZONA DE ALIMENTACIÓN.

Sustituyendo los términos del balance de materia (ecuación 4, parte I) por sus correspondientes valores, se llega a la expresión:

$$F_t(y_A^o - x_{Abl}) = F_t(y_A^o - x_{Abl}) + (-r_A)_s dV_{Rb} \quad [20]$$

donde el volumen de esta zona es:

$$dV_{Rb} = \frac{\pi D_b^2}{4} dz \quad [21]$$

sustituyendo en la ecuación 20 y simplificando se llega a:

$$dz = \frac{4F_t}{\pi D_b^2} \frac{1}{(-r_A)_s} dx_{As} \quad [22]$$

ecuación diferencial del balance de materia en la zona de alimentación. En forma incremental:

$$\Delta z = G_s W_{sm} \Delta x_{As} \quad [23]$$

donde G_s agrupa los valores constantes y W_{sm} es la inversa de la velocidad de reacción, tomados de la ecuación 22.

BALANCE DE CALOR

También habrá que realizarlo en las dos zonas del reactor, ya que en ambas tendrá lugar variación de la temperatura.

a) EN LA ZONA DE REACCIÓN.

Tanto las consideraciones acerca del balance como las propias ecuaciones con las mismas que las mostradas en la parte I. Por ello, para el cálculo de la temperatura de salida del incremento de trabajo, T_t , se ha de utilizar la ecuación 14.

b) EN LA ZONA DE ALIMENTACIÓN.

Se parte del conocimiento de la temperatura T_t con la que se calcula el valor del calor transferido, manteniendo la suposición ya comentada de hacer $T_{sm} = T_{st}$ en cada intervalo de cálculo. La diferencia con el caso

en que no haya reacción está en el hecho de que la existencia de reacción provoca una aportación de calor debido a su exotermicidad. Por tanto, el balance de calor en esta zona queda como:

$$Q_{\text{transferido}} - Q_{\text{reacción}} = Q_{\text{acumulado en la alimentación}} \quad [24]$$

Dando valores:

$$Q_{\text{transferido}} - \Delta H_{T_{ms}} F_t A X_{As} = F_t \bar{C}_{ps} (T_{st} - T_{st}) \quad [25]$$

y despejando:

$$T_{st} = T_{st} + \frac{\Delta H_{T_{ms}} F_t \Delta X_{As} - Q_{\text{transferido}}}{F_t \bar{C}_{ps}} \quad [26]$$

DIAGRAMA DE CALCULO

En función de las ecuaciones anteriormente comentadas el diagrama de bloques utilizado para el cálculo es el expresado en la figura 8. De nuevo el cálculo se inicia a la entrada a la zona de reacción (figura 7) en que $z_1^0 = 0$, teniendo que conocer un valor para la conversión en ese punto $x_{A1}^0 = x_{Ast}^0 \neq 0$, y para la temperatura $T_1^0 = T_{st}^0$; avanzando en el cálculo en el mismo sentido en que lo hace el flujo de la zona de reacción hasta alcanzar, en esa zona, la conversión x_{At}^0 que habrá de ser fijada de antemano.

Hay que tener presente que al circular la alimentación en sentido contrario al cálculo, en cada intervalo de trabajo se tendrá una disminución de la conversión en esta zona pasando de un valor x_{Ast} a otro inferior x_{Asi} , teniendo que cumplirse que en el punto final en que la conversión de la zona de reacción sea $x_{At} = x_{At}^0$ en la alimentación se ha de alcanzar un valor $x_{Asi}^0 = 0$. Si no se alcanza este valor el cálculo no se da como bueno, teniendo que repetirse tomando $x_{A1}^0 = x_{A1}^0 - x_{Asi}^0$ e iniciando de nuevo el cálculo.

Igual que en el caso en que no hay reacción, hay que realizar una iteración para conocer cuál es la longitud Δz , en la que se alcanza cada incremento de conversión Δx_A . Una vez conocido este Δz , se hace una nueva iteración para realizar el diseño en la zona de alimentación, manteniendo ahora el valor de la longitud, pero suponiendo una disminución de conversión, Δx_{As} , que se comprobará con la resultante de resolver la ecuación 23.

Cuando se haya finalizado el cálculo para un incremento de conversión Δx_A , se pasará al intervalo siguiente tomando como variables iniciales las finales del intervalo anterior, y así hasta que se alcance la conversión $x_{Af} = x_{Af}^o$.

La doble condición de trabajo: Alcanzar una conversión a la salida del reactor x_{Ar}^o , fijada como dato y que la entrada de la alimentación $x_{Aai}^o = 0$, obliga a definir una variable I que sólo toma dos valores. Al principio se define como $I = 0$, y cuando el cálculo ha sido acabado y ya se han alcanzado las dos condiciones clave anteriores se la cambia su valor a $I = 1$ y se repite el cálculo con la particularidad de que, antes de escribir ningún valor, se pregunta cuánto vale I, escribiendo sólo en el caso en que sea $I = 1$.

Tomando como base este diagrama, se ha confeccionado un programa de cálculo en lenguaje FORTRAN IV y se ha operado en el ordenador IBM del Centro de Proceso de Datos de la Universidad de Murcia con el nombre de AUTOCONR, que representa el modelo digital de simulación del reactor autotérmico con reacción en la zona de alimentación.

SUPUESTO NUMERICO

De la misma forma que se hizo con el modelo AUTOSINR, se ha planteado un supuesto numérico con la misma ecuación estequiométrica 18, para comprobar el modelo AUTOCONR fijando una temperatura $T_i^o = T_{st}^o = 600^\circ \text{K}$ y una conversión final de $x_{Ar}^o = 0.4$.

Como resultados principales del modelo, se exponen los perfiles de conversión y temperatura, figuras 9 y 10, respectivamente, que están en concordancia con lo esperado, y resultando un valor ajustado para la conversión inicial de cálculo $x_{Ai}^o = x_{Aaf}^o = 0.0277$. Después de ejecutar el modelo con otros datos se ha comprobado su buen funcionamiento, por lo que se considera que el modelo AUTOCONR es válido para la simulación de reactores autotérmicos con reacción en la zona de alimentación.



NOTACION

A	factor de frecuencia
A, B, R, S	componentes de la reacción
Area	área de transferencia de calor, m^2
b, r, s	coeficientes estequiométricos
C	concentración, $kg.m^{-3}$
—	
C_p	calor específico medio, $kcal.kg^{-1}.°K^{-1}$
C_p^o	calor específico de la alimentación, $kcal.kg^{-1}.°K^{-1}$
D	diámetro, m
E	energía de activación
F	velocidad de alimentación, $kg.s^{-1}$
G	parámetro constante de la ecuación de diseño
ΔH	entalpía de reacción, $kcal.kg^{-1}$
k	constante cinética
m	masa de componente, kg
n, m, p, q	órdenes de reacción
PM	peso molecular de componente, $kg.mol^{-1}$
$(-r_A)$	velocidad de reacción de A, $kg.s^{-1}.m^{-3}$
T	temperatura, $°K$
U	coeficiente global de transferencia de calor, $kcal.m^{-2}.°K^{-1}.s^{-1}$
V_R	volumen de reactor, m^3
W	parámetro variable de la ecuación de diseño
x	conversión
y	fracción másica
z	longitud, m
v	coeficiente estequiométrico general

INDICES

A	reactivo limitante
f	final del intervalo de cálculo
i	inicial del intervalo de cálculo
j	componente del sistema en reacción
m	media en el intervalo de cálculo
o	inicial o final del reactor
s	corriente de alimentación
t	total

BIBLIOGRAFIA

1. LÓPEZ CABANES, A.; BÓDALO SANTOYO, A., *Anales de la Universidad de Murcia (Ciencias)*, XXXV, 207-218, 1-4 (1981).
2. CUNNINGHAM, R. E.; LOMBARDI, J. L., *Fundamentos del Diseño de Reactores*, Ed. Universitaria de Buenos Aires (1972).
3. VAN HEERDEN, C., *Industrial and Engineering Chemistry*, 45, 1242-1247 (1953).
4. LÓPEZ CABANES, A.; BÓDALO SANTOYO, A.; GÓMEZ GÓMEZ, E., *Ingeniería Química*, 165-169, septiembre (1978).
5. LÓPEZ CABANES, A.; BÓDALO SANTOYO, A., *Ingeniería Química*, 105-109, octubre (1978).
6. LEVENSPIEL, O., *Ingeniería de las Reacciones Químicas*, Ed. Reverté (1974).



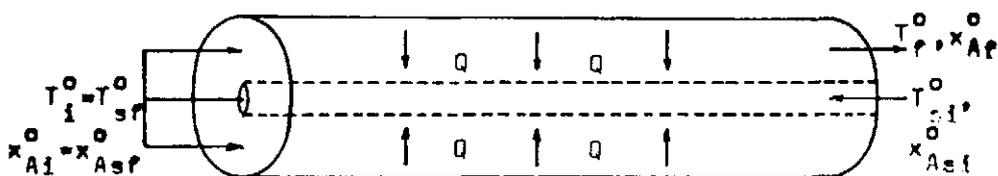


Figura 1.—Reactor tubular autotérmico.

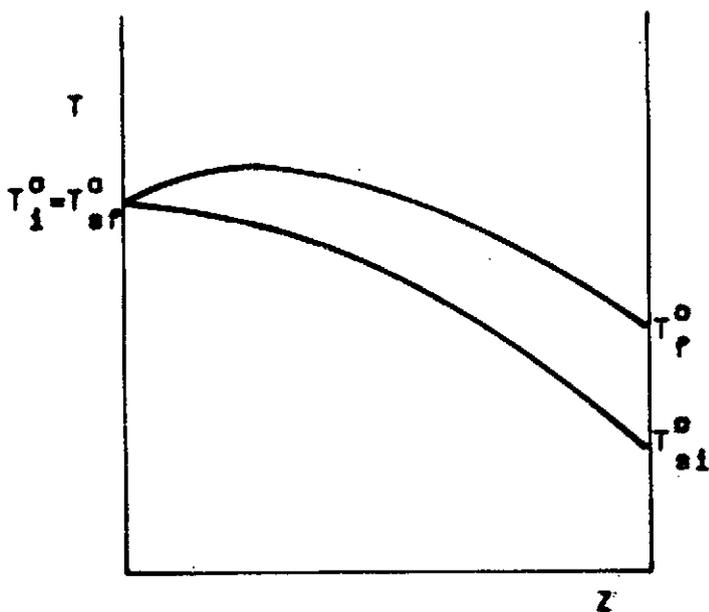


Figura 2.—Perfil de temperatura.

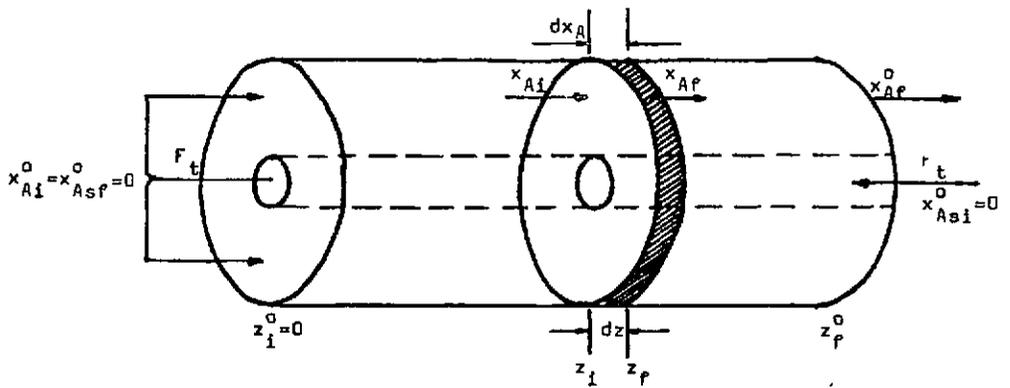


Figura 3.—Reactor tubular autotérmico sin reacción en la zona de alimentación.

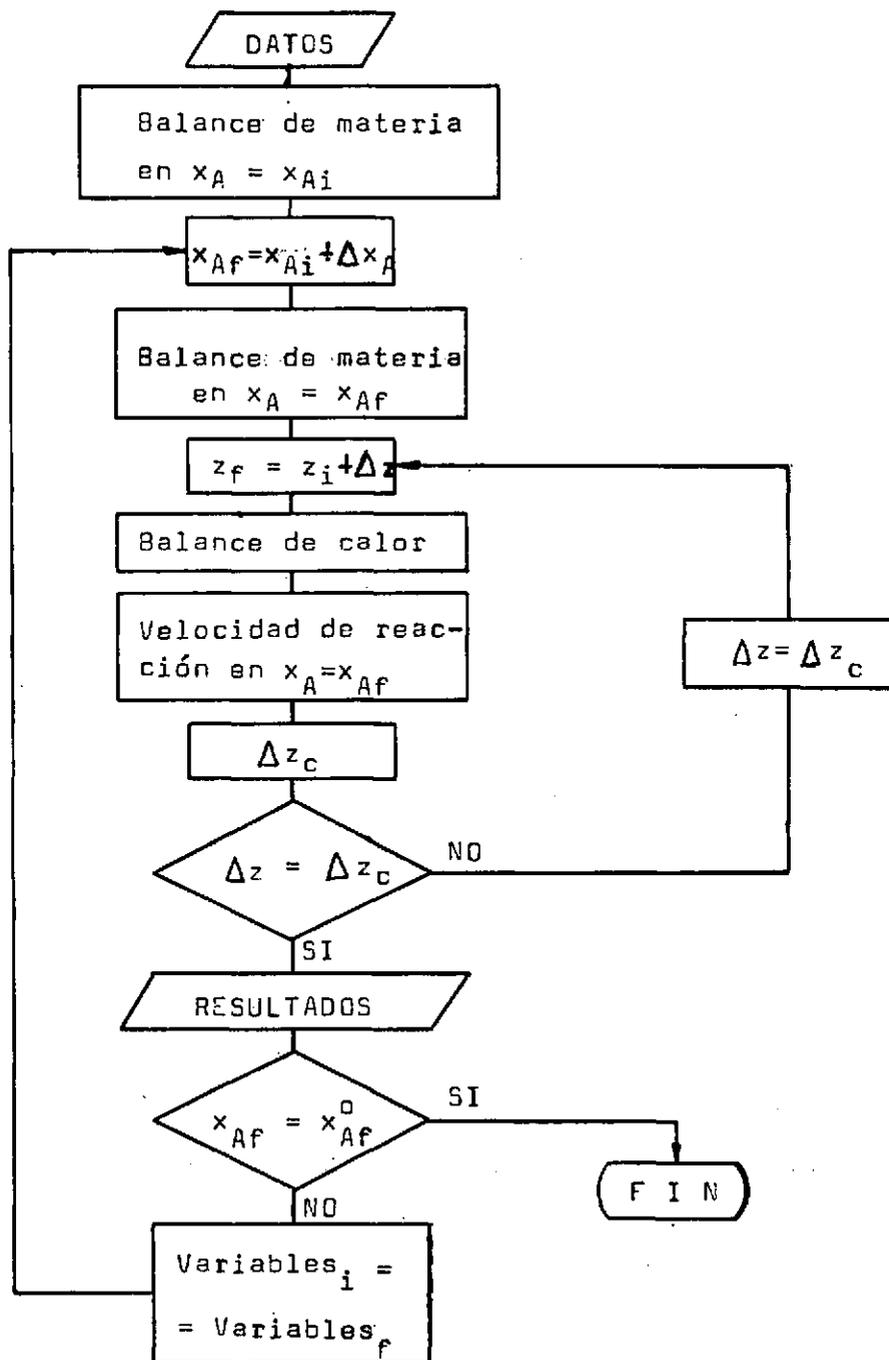


Figura 4.—Diagrama de cálculo del modelo AUTOSINR.

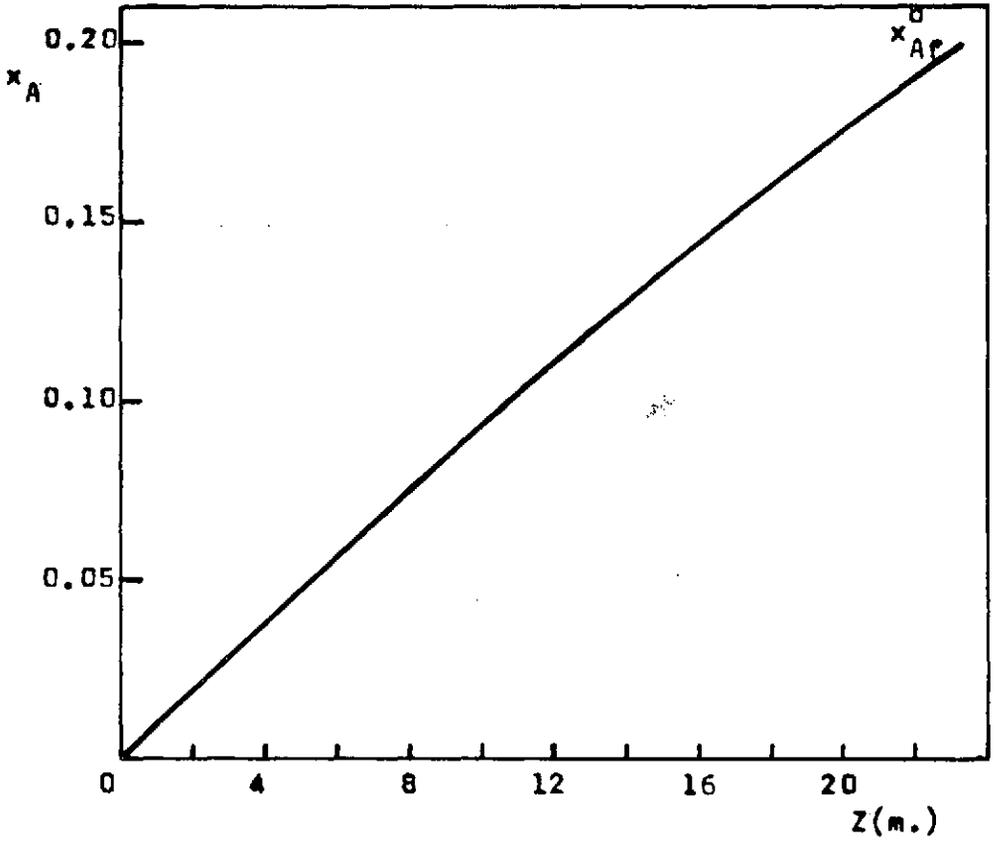


Figura 5.—Perfil de conversión. Supuesto numérico de aplicación del modelo AUTOSINR.

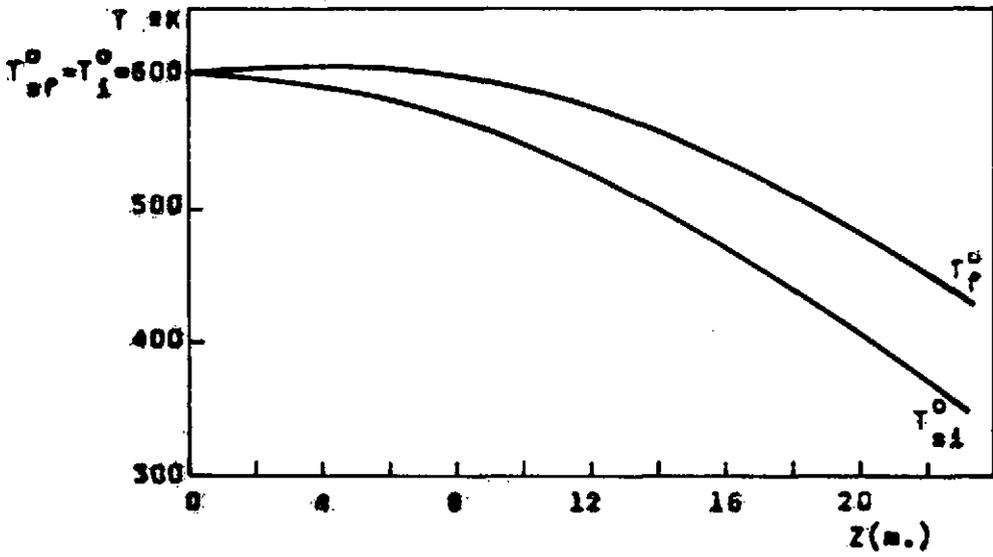


Figura 6.—Perfiles de temperatura. Supuesto numérico de aplicación del modelo AUTOCONR.

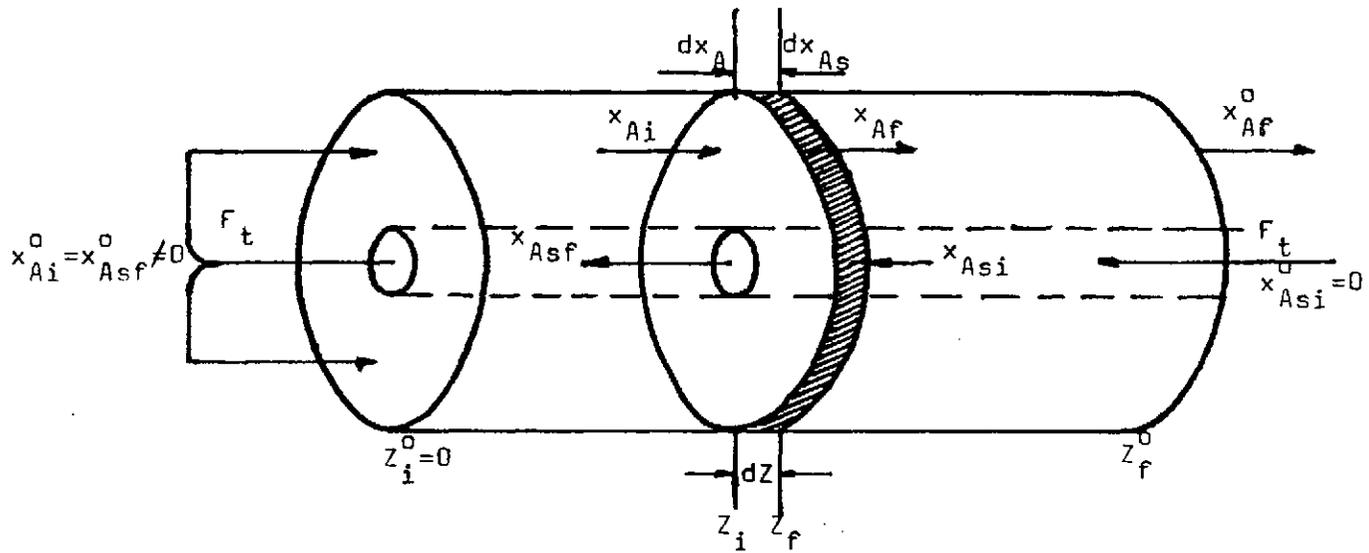


Figura 7.—Reactor tubular autotérmico con reacción en la zona de alimentación.

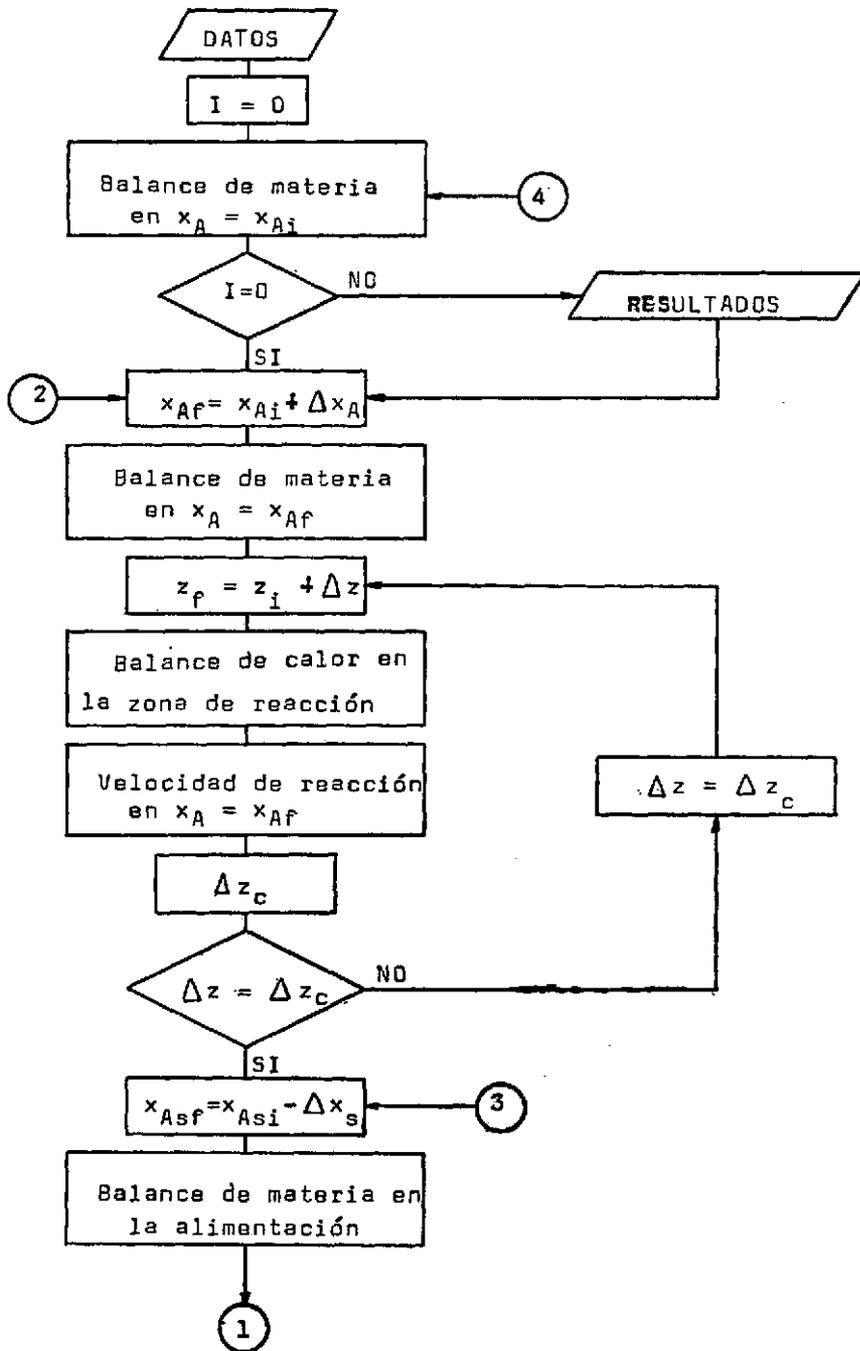


Figura 8.—Diagrama de cálculo del modelo AUTOCONR.

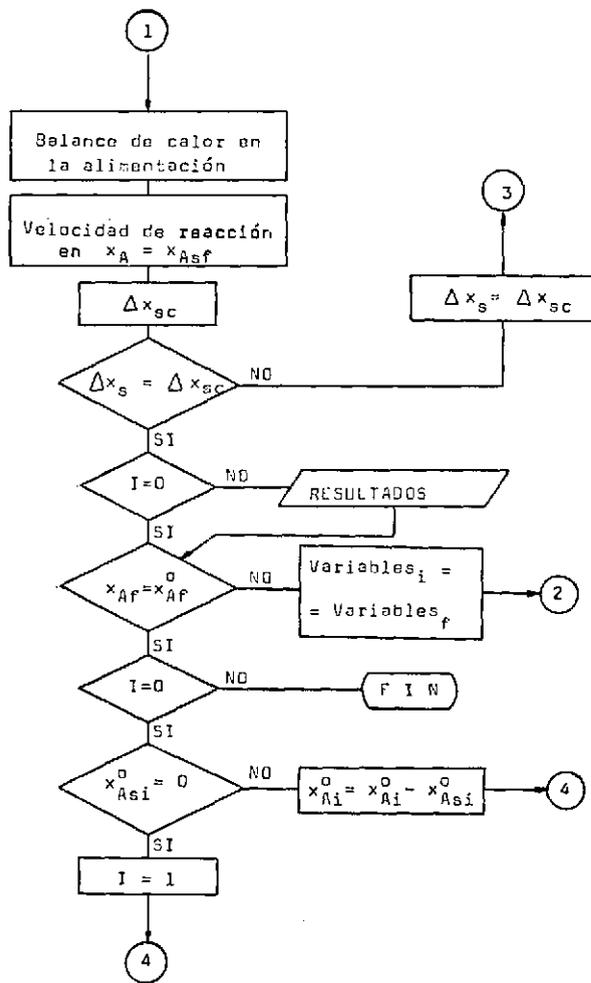


Figura 8.—Continuación.

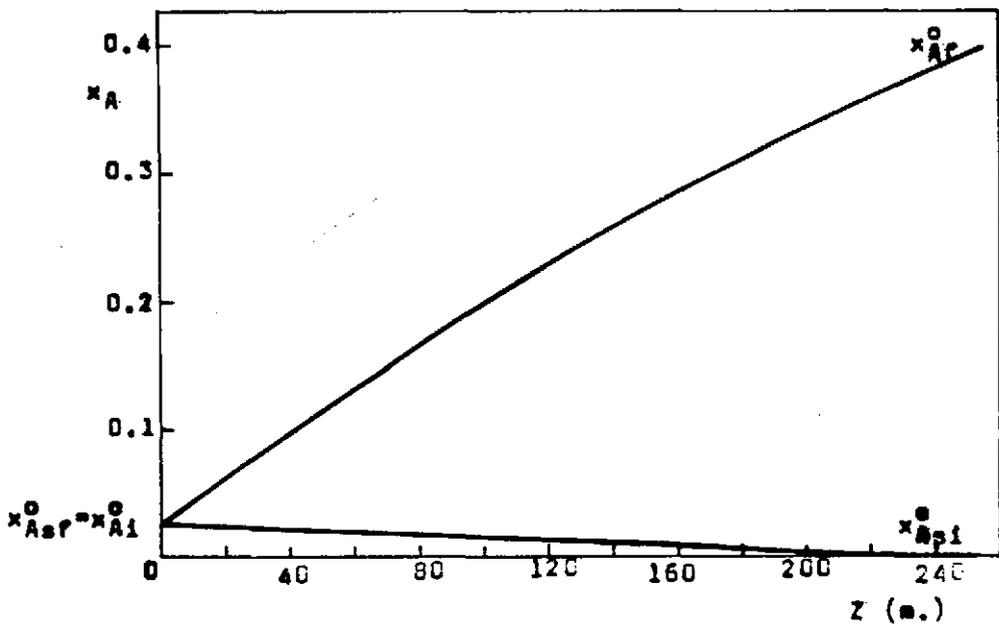


Figura 9.—Perfiles de conversión. Supuesto numérico de aplicación del modelo AUTOCONR.

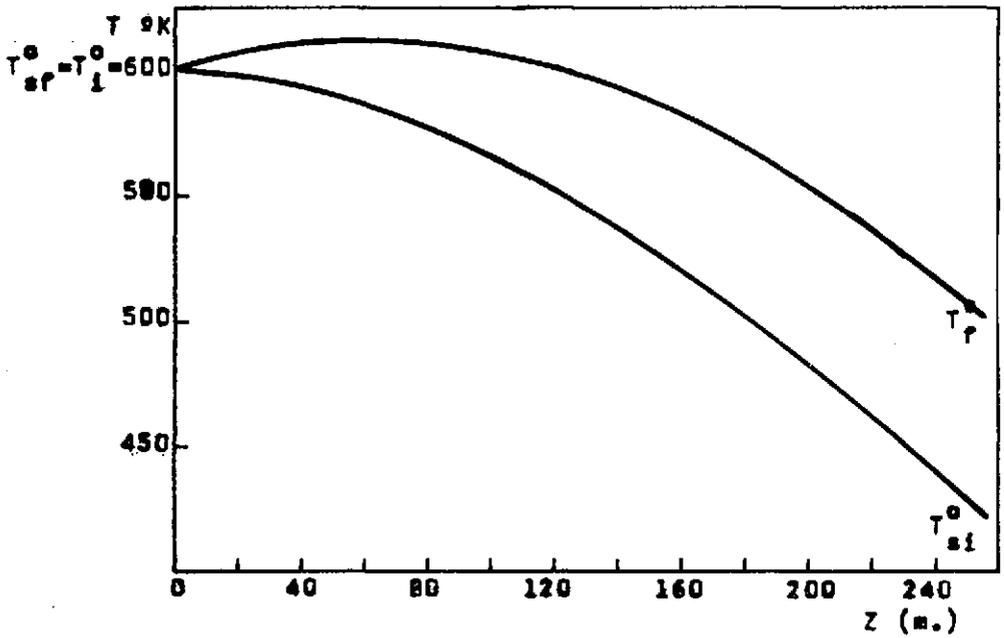


Figura 10.—Perfiles de temperaturas. Supuesto numérico de aplicación del modelo AUTOCONR.