

300618

13  
2e



**UNIVERSIDAD LA SALLE**

ESCUELA DE QUIMICA  
Incorporada a la U. N. A. M.

**METODOLOGIA PARA EL ESCALAMIENTO DE  
UN REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO.**

**TESIS PROFESIONAL**  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
INGENIERO QUIMICO  
P R E S E N T A  
JOSE DE JESUS MARTIN DEL CAMPO CONTRERAS

Director de Tesis:  
M. en C. José Luis González Díaz



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

# INDICE

	PAGINA
RESUMEN. ....	I
AGRADECIMIENTOS. ....	III
LISTA DE TABLAS. ....	VIII
LISTA DE FIGURAS. ....	IX
NOMENCLATURA. ....	X
INTRODUCCION. ....	XIV
CAPITULO I.                    GENERALIDADES.	
1.1 CONCEPTOS FUNDAMENTALES EN EL ESCALAMIENTO..	1
1.1.1 ESCALAMIENTO Y FACTOR DE ESCALAMIENTO. ....	1
1.1.2 IMPORTANCIA DEL ESCALAMIENTO. ....	4
1.2 ANTECEDENTES DEL ESCALAMIENTO. METODOLOGIAS EMPLEADAS.	5
1.2.1 PRINCIPIO DE SIMILITUD Y ANALISIS DIMENSIONAL. ....	5
1.2.2 MODELACION. ....	6
CAPITULO II.                   EL REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO CON FASE GASOSA.	
2.1 REACTORES TUBULARES HOMOGENOS. ....	12
2.1.1 EL REACTOR TUBULAR IDEAL. PRINCIPIO DE CONSERVACION. ....	13
2.1.2 EL REACTOR TUBULAR IDEAL. DEFINICION Y ECUACION DE DISENO. ....	16
2.2 REACTORES TUBULARES HETEROGENEOS. ....	19
2.2.1 EL REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO. ESTADO DEL ARTE. ....	19
2.3 MODELOS QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO. ....	21
2.3.1 CLASIFICACION DE MODELOS PARA REACTORES DE LECHO FIJO. ....	21
2.3.2 EL MODELO PSEUDO-HOMOGENEO BASICO EN UNA DIMENSION. ....	24
2.3.3 EL MODELO PSEUDO-HOMOGENEO EN DOS DIMENSIONES. ....	25

<b>CAPITULO III.</b>		<b>METODOLOGIAS PARA EL ESCALAMIENTO DE REACTORES T. DE LECHO FIJO.</b>	
<b>3.1</b>	<b>METODOLOGIA CON BASE EN EL PRINCIPIO DE SIMILITUD.</b>	.....	<b>20</b>
3.1.1	GRUPOS CARACTERISTICOS DE LOS PROCESOS QUIMICOS A REGIMEN PERMANENTE.	.....	20
3.1.2	LA SIMILITUD TOTAL.	.....	31
3.1.3	PRIMER CASO DE SIMILITUD PARCIAL.	.....	34
3.1.4	SEGUNDO CASO DE SIMILITUD PARCIAL.	.....	36
<b>3.2</b>	<b>METODOLOGIA CON BASE EN LA MODELACION DEL REACTOR.</b>	.....	<b>38</b>
3.2.1	LOS MODELOS DE ORDEN REDUCIDO Y SU APLICACION AL ESCALAMIENTO DE LOS REACTORES TUBULARES DE LECHO FIJO.	.....	38
<b>3.3</b>	<b>ASPECTOS PRACTICOS DE LAS METODOLOGIAS EMPLEADAS.</b>	.....	<b>43</b>
3.3.1	VENTAJAS DE LA MODELACION SOBRE EL PRINCIPIO DE SIMILITUD.	.....	43
<b>CAPITULO IV.</b>		<b>APLICACION DE LAS METODOLOGIAS DESCRITAS.</b>	
<b>4.1</b>	<b>CONSIDRACIONES PRELIMINARES AL ESCALAMIENTO POR MODELACION.</b>	.....	<b>45</b>
4.1.1	SISTEMA REACCIONANTE Y EXPRESION CINETICA.	.....	45
4.1.2	DESCRIPCION DE LA ETAPA EXISTENTE.	.....	46
4.1.3	VALIDACION TEORICA Y APROXIMACION DEL MODELO EMPLEADO.	.....	47
4.1.4	BASES DE DISEÑO.	.....	50
4.1.5	CRITERIOS DE DISEÑO.	.....	52
<b>4.2</b>	<b>SECUENCIA Y DECISIONES DE CALCULO.</b>	.....	<b>53</b>
4.2.1	PREDIMENSIONAMIENTO Y FLUJO DE FLUIDOS.	.....	53
4.2.2	TRANSFERENCIA DE CALOR.	.....	56
4.2.3	OBTENCION DE LOS PARAMETROS INVOLUCRADOS EN LA REACCION QUIMICA.	.....	57
4.2.4	SIMULACION DEL REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO A ESCALA PLANTA PILOTO.	.....	60
4.2.5	CAIDA DE PRESION A TRAVES DEL REACTOR.	.....	61

		PAGINA
<b>CAPITULO V.                    RESULTADOS DE LA APLICACION DE METODOLOGIAS PARA EL ESCALAMIENTO.</b>		
5.1	PARAMETRIZACION Y RESULTADOS DE LA SIMULACION DEL REACTOR. ....	63
5.1.1	REACTORES PROPUESTOS Y PARAMETRIZACION. ....	63
5.1.2	RESULTADOS DE LA SIMULACION. ....	64
5.2	CRITERIOS PARA LA ELECCION DEL REACTOR ADECUADO. ....	73
5.2.1	REGIMEN HIDRODINAMICO Y TRANSFERENCIA DE CALOR. ....	73
5.2.2	CAIDA DE PRESION A LO LARGO DEL LECHO CATALITICO. ....	74
5.2.3	LIMITACIONES FISICAS Y FACTORES ECONOMICOS. ....	77
5.3	ESCALAMIENTO POR SIMILITUD. ....	82
5.3.1	PROPUESTA BASADA EN EL SEGUNDO CASO DE SIMILITUD PARCIAL. ....	82
CONCLUSIONES. ....		84
RECOMENDACIONES. ....		86
BIBLIOGRAFIA. ....		87
APENDICE 1	PROGRAMAS DE COMPUTO. ....	92
APENDICE 2	METODO DE RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN PARA LA SOLUCION DE E.D.O. .	95

## LISTA DE TABLAS.

TABLA.		PAGINA.
1	EFECTO DEL CAMBIO DE DIMENSIONES DE UN REACTOR MULTIFASE SOBRE LOS FENOMENOS PRESENTES. ....	9
2	PRINCIPALES PROCESOS EN QUE INTERVIENEN REACTORES DE LECHO FIJO. ....	20
3	CLASIFICACION DE MODELOS PARA REACTORES DE LECHO FIJO CON UNA FASE FLUIDA. ....	22
4	CONDICIONES DE OPERACION DEL REACTOR. ....	50
5	PROPIEDADES TERMOFISICAS Y DE TRANSPORTE. ..	52
6	REACTORES PROPUESTOS Y PARAMETRIZACION. ..	65
7	RESULTADOS DE LA SIMULACION. ....	68
8	ALTERNATIVAS DESCARTADAS POR $Re_p \circ \Delta T_{Max}$ . ...	74
9	REACTORES QUE EXCEDEN LA CAIDA DE PRESION PERMISIBLE. ....	76
10	INVERSION FIJA POR CONCEPTO DE TUBERIA Y VOLUMEN DE CATALIZADOR. ....	78

## LISTA DE FIGURAS.

FIGURA		PAGINA
1	METODOLOGIA IDEAL PARA EL ESCALAMIENTO DE UN EQUIPO UTILIZANDO LA MODELACION. ....	10
2	METODOLOGIA PARA EL ESCALAMIENTO DE UN EQUIPO CON EL USO DE LA PLANTA PILOTO COMO RETROALIMENTACION AL MODELO. ....	11
3	ELEMENTO DIFERENCIAL DE UN REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO. ....	26
4	DIAGRAMA DE FLUJO DE LA ETAPA EXPERIMENTAL..	48
5	COMPARACION DE LOS PERFILES AXIALES DE TEMPERATURA PREDICHOS. ....	51
6	FACTOR DE FRICCION MODIFICADO. ....	62
7	EFFECTO DEL DIAMETRO DEL REACTOR EN LA TEMPERATURA LONGITUDINAL. ....	72
8	EFFECTO DEL REGIMEN HIDRODINAMICO SOBRE LA TRANSFERENCIA DE CALOR. ....	75
9	PERFIL DE CONVERSION DEL REACTOR MULTI-TUBULAR PROPUESTO. ....	80
10	PERFIL DE TEMPERATURA DEL REACTOR MULTI-TUBULAR PROPUESTO. ....	81

## NOMENCLATURA

SÍMBOLO	SIGNIFICADO	UNIDADES
A	Area de flujo.	m <sup>2</sup>
A	Componente A, Acetileno.	
B	Componente B, Acido acético.	
Bi	Número de Biot.	
CA	Concentración del reactivo A.	kgmol/m <sup>3</sup>
CAo	Concentración inicial del reactivo A.	kgmol/m <sup>3</sup>
Cp	Capacidad calorífica a presión cte.	kJ/kg <sup>o</sup> K
Der	Difusividad radial efectiva.	m <sup>2</sup> /ms
d <sub>t</sub>	Diámetro interno del reactor.	m
d <sub>t</sub>	Diámetro nominal de tubería (cuando así se especifica).	in
d <sub>p</sub>	Diámetro de partícula.	m
FA	Flujo molar del componente A	kgmol/h
FAo	Flujo molar del componente A en la corriente de alimentación.	kgmol/h
Fr	Flujo molar total.	kgmol/h
f <sub>m</sub>	Factor de fricción modificado.	
G	Masa velocidad del fluido.	kg/m <sup>2</sup> s
g	Aceleración debida a la gravedad.	m/s <sup>2</sup>
GA	Masa velocidad del componente A.	kg/m <sup>2</sup> s
Gv	Gasto volumétrico.	m <sup>3</sup> /s

SÍMBOLO	SIGNIFICADO	UNIDADES
H	Sistema escalado.	
$h_w$	Coefficiente de transferencia de calor en la pared del tubo.	$\text{kJ/m}^2 \text{s}^\circ \text{K}$
A	Elemento A-ésimo del sistema.	
$k_g$	Conductividad térmica de la mezcla	$\text{J/m}^2 \text{s}(\text{K/m})$
$k_0$	Constante cinética del sistema.	$\text{s}^{-1}$
l	Longitud efectiva del reactor.	m
$l_r$	Longitud equivalente de tubería.	m
M	Sistema original o de referencia.	
$\bar{M}$	Peso molecular promedio de la mezcla alimentada.	$\text{kg/kgmol}$
MA	Flujo másico del A-ésimo elemento.	$\text{kg/h}$
m	Exponente de las ecs. (3.1-23) a (3.1-26).	
n	Factor de escalamiento.	
n	Exponente de la ec. (4.2-25) referente al factor de fricción modif.	
$n_t$	Divisiones de flujo (no. tubos).	
Nu	Número de Nusselt.	
PA	Presión parcial del componente A en la mezcla.	atm.
Pe	Número de Péclet.	
Pop	Presión de operación del reactor.	atm.
Pr	Número de Prandtl.	
Pr	Presión total del sistema.	$\text{kg/cm}^2$
Q	Flux de calor.	$\text{kJ/m}^2 \text{s}$
R	Constante universal de los gases.	$\frac{\text{atm} \cdot \text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{K}}$
RA	Velocidad de reacción adimensional.	

SÍMBOLO	SIGNIFICADO	UNIDADES
$r'$	Velocidad de reacción intrínseca	$\text{gmol/cm}^3 \text{s}$
$r_A$	Velocidad de reacción referida al componente A.	$\text{gmol/cm}^3 \text{s}$
Re	Número de Reynolds.	
$Re_p$	Número de Reynolds de partícula.	
T	Temperatura.	$^{\circ}\text{K}$
t	Tiempo.	seg.
$T^*$	Temperatura adimensional.	
$T_0$	Temperatura inicial de la mezcla de alimentación.	$^{\circ}\text{K}$
$T_w$	Temperatura de la pared del reactor.	$^{\circ}\text{K}$
U	Coefficiente global de transferencia de calor.	$\text{kJ/m}^2 \text{s}^{\circ}\text{K}$
$u_s$	Velocidad superficial del fluido.	m/s
V	Volumen total del reactor.	$\text{m}^3$
$v$	Velocidad de flujo.	m/s
$V_{\text{cat}}$	Volumen de catalizador.	$\text{m}^3$
$W_r$	Flujo másico de alimentación.	kg/h
$W_A$	Flujo másico de alimentación referido al componente A.	kg/h
$X_A$	Conversión del reactivo A.	
$y_{A0}$	Fración molar de A en la mezcla de alimentación.	
Z	Posición en la dirección longitudinal del reactor.	m
$Z^*$	Longitud adimensional del reactor.	

SÍMBOLOS GRIEGOS.

SÍMBOLO	SIGNIFICADO	UNIDADES.
$\alpha'$	Parámetro adimensional del modelo de orden reducido.	
$\beta$	Número de Damköhler del grupo I.	
$\beta''$	Número de Damköhler del grupo II.	
$\gamma$	Factor de Arrhenius.	
$\Delta H_r$	Calor de reacción.	kJ/kgmol
$\Delta r$	Elemento diferencial del radio del reactor.	m
$\Delta t$	Elemento diferencial de tiempo.	s
$\Delta P_r$	Elemento diferencial de presión.	kg/cm <sup>2</sup>
$\Delta Z$	Elemento diferencial de longitud.	m
$\epsilon$	Factor de expansión debido al cambio en el número de moles.	
$\epsilon$	Fracción de espacios huecos del lecho catalítico.	
$\theta$	Cantidad extensiva.	
$\lambda_{er}$	Conductividad radial efectiva.	kJ/ms <sup>o</sup> K.
$\mu$	Viscosidad de la mezcla gaseosa.	kg/ms
$\rho_B$	Densidad en el seno de la mezcla gaseosa.	kg/m <sup>3</sup>
$\rho_g$	Densidad del gas.	kg/m <sup>3</sup>
$\Sigma$	Sumatoria.	
$\psi$	Factor de esfericidad de la partícula de catalizador.	

## INTRODUCCION.

El escalamiento de un proceso y de un reactor químico de manera particular, permite un cambio de dimensiones que afecta la capacidad de producción. Aumentar la producción de un proceso de manera eficiente y segura, teniendo como base la información del comportamiento de una etapa de menor escala, fácilmente manipulable, hacen atractivo al escalamiento desde los puntos de vista técnico y económico.

La comprensión de los distintos fenómenos presentes en un reactor químico y la interrelación de los mismos, se han manifestado mediante avances significativos en los campos de la cinética química, la catálisis y los fenómenos de transporte. Estos avances han demostrado su utilidad, al permitir el desarrollo de metodologías encargadas de resolver la cuestión del escalamiento de reactores, desde un punto de vista fundamental y no empírico.

Esta investigación, pretende mostrar los lineamientos teórico-prácticos en que se basa el escalamiento de un reactor tubular de lecho fijo con una fase fluida, para lo cual se han de revisar las metodologías generalmente utilizadas y ejemplificar la aplicación de éstas en un problema de interés real. De manera paralela, se señalarán las principales ventajas y desventajas de

cada una de las metodologías involucradas. Con esto se busca concluir sobre su efectividad al atacar el escalamiento hipotético de un reactor particular, sin llegar a la confrontación de las alternativas teóricas con resultados experimentales de una etapa a mayor escala.

CAPITULO I.  
GENERALIDADES.

1.1 CONCEPTOS FUNDAMENTALES EN EL ESCALAMIENTO.

1.1.1            ESCALAMIENTO Y FACTOR DE ESCALAMIENTO.

El escalamiento de un equipo industrial y de manera más general, de cualquier proceso, puede ser entendido como el diseño y operación de una unidad de mayor tamaño, con base en el conocimiento de operación de esa unidad a menor escala.

El escalamiento está sujeto a limitaciones físicas, como el tamaño final del equipo y los factores económicos inherentes a la construcción y operación del mismo.

El concepto de factor de escalamiento, surge al contemplar el proceso de escalamiento como el aumento de las dimensiones de un sistema  $n$  veces con respecto al sistema original. Dicho aumento es observable en diferentes magnitudes, tales como el tamaño de la unidad escalada, la cantidad de materia y energía involucradas y relaciones de indole diverso. Normalmente, el factor de escalamiento está dado como una relación de producción de la unidad escalada con respecto a la producción de la unidad original

( 1. 2):

$$\text{FACTOR DE ESCALAMIENTO} = \frac{\text{PRODUCCION DE LA UNIDAD ESCALADA.}}{\text{PRODUCCION DE LA UNIDAD ORIGINAL.}}$$

Al efectuar un cambio de escala, se pueden distinguir varias etapas, dependiendo del tamaño:

- a) Etapa a nivel banco o laboratorio.
- b) Etapa a nivel planta piloto.
- c) Etapa a nivel comercial o industrial.

En la etapa a nivel banco o laboratorio, el sistema es analizado de manera experimental, manipulando las condiciones de operación para comprobar las bases teóricas, o bien para buscar las condiciones que mejoren el funcionamiento del proceso.

La etapa de planta piloto es el sistema en escala intermedia entre el nivel laboratorio y el nivel comercial. Esta es sumamente útil, pues se constituye como un prototipo de el sistema comercial y permite explorar las potencialidades técnico-económicas del proceso (4).

Finalmente, la etapa a nivel industrial, es de un tamaño tal que, bajo ciertas condiciones de operación y manejando cantidades comerciales de material, redundará en un beneficio económico o social.

Los factores de escalamiento varían en un intervalo determinado de acuerdo a la etapa a la cual se refieren, pudiendo

ser del orden de 500 a 1000 para equipos piloto en relación a equipos de nivel laboratorio y de 200 a 500 para equipos industriales escalados a partir de datos de planta piloto. Sin embargo, estos factores de escalamiento tienden a reducirse en procesos que involucran materiales o reactivos líquidos y sólidos. Para manejar factores de escalamiento con cierta seguridad es necesario tener alguna experiencia práctica que permita manejar una correlación de escalamiento o resolver el problema desde un punto de vista fundamental. En aquellos casos en que los resultados obtenidos al cambiar de escala son congruentes con los resultados previstos, se dice que los principios del escalamiento han sido bien establecidos, con lo cual es posible manejar factores de escalamiento mayores.

Lo anterior ocurre generalmente en procesos que substancialmente se llevan a cabo en fase gaseosa, pudiendo manejarse factores de escalamiento de hasta 10,000 con seguridad. Esto se debe a la menor incertidumbre de las predicciones de los regímenes de flujo, coeficientes de transferencia de masa y calor y a la confiabilidad de los valores de las propiedades físicas más relevantes.

Sin embargo, en la mayoría de los casos de interés comercial, los procesos con fluidos gaseosos involucran el uso de catalizadores sólidos, esto repercute de manera significativa los perfiles de flujo y temperatura, así como en los coeficientes de transferencia de masa y calor, por lo que hablar de factores de escalamiento tan elevados (cerca de 10,000) resulta poco

confiable.

## 1.12 IMPORTANCIA DEL ESCALAMIENTO.

Desarrollar y adaptar un proceso industrial, requiere de bases teóricas y experimentales. El trabajo de laboratorio es un ensayo de ello a pequeña escala. Consecuentemente, los problemas de transferencia de masa y calor que se presentan a nivel laboratorio, no son comparables con los que pudieran presentarse en un equipo industrial. Por ello, el tratar de diseñar y operar un equipo comercial sin el conocimiento de los resultados de la experimentación a nivel banco o planta piloto, presupone dificultades que involucran pérdidas económicas. Asimismo, tratar de llegar a un diseño a gran escala, por el método de ensayo y error, construyendo modelos intermedios sin los debidos fundamentos, lleva a inversiones elevadas y resultados no correlacionables, es decir, a la deriva.

Es por esto que el escalamiento de cualquier equipo y más aún de un proceso industrial, deber ser gradual y en base a modelos que describan el comportamiento del sistema.

En la industria química y petroquímica el reactor, corazón del proceso, debe ser escalado tomando en cuenta todos los fenómenos que afectan el rendimiento y la selectividad de la reacción que se efectúa en él, y más aún, aquellos que se vuelven determinantes en la estabilidad de el sistema reaccionante (1).

## 12 ANTECEDENTES DEL ESCALAMIENTO. METODOLOGIAS EMPLEADAS.

### 12.1 PRINCIPIO DE SIMILITUD Y ANALISIS DIMENSIONAL.

El escalamiento de cualquier reactor químico, puede hacerse siguiendo varios caminos.

El principio de similitud involucra las relaciones entre sistemas de diferentes tamaños. Para el escalamiento de un reactor químico el criterio de similitud puede representarse por medio de grupos adimensionales que caracterizan los fenómenos de un proceso y permanecen constantes durante el cambio de escala (25).

Sin embargo, cuando la complejidad del proceso va en aumento, es prácticamente imposible mantener constantes los valores numéricos de todos los grupos adimensionales, de manera que la aproximación más adecuada al efectuar el escalamiento se obtiene al determinar el efecto de cada grupo adimensional (peso) y llevando a cabo la experimentación a diferentes tamaños.

La etapa experimental pone de manifiesto algunos errores del método. Una falsa interpretación de los resultados experimentales puede ocurrir al agrupar demasiadas variables en un número adimensional y obscurecer el efecto de alguna variable. Entre más variados sean los fenómenos existentes en el sistema a ser

escalado más compleja la tarea de discriminación. Claramente, por este método es más sencillo escalar un intercambiador de calor que un reactor químico, en el cual se lleva a cabo una reacción con una considerable transferencia de calor y probablemente, intervengan dos o más fases.

Siempre es recomendable realizar un escalamiento *a priori*, teniendo en cuenta el resultado esperado. Comenzando por una etapa de pre-diseño, debe considerarse la disposición y las dimensiones aproximadas de la planta a escala comercial teniendo como base datos experimentales, experiencias previas con equipos similares y algunas hipótesis razonables. De aquí puede hacerse un escalamiento de mayor a menor nivel obteniéndose un modelo cuyo diseño tendrá fines de investigación dentro del programa de desarrollo. De esta manera, el riesgo de fracaso de dicho programa, debido a un sobre-escalamiento, puede reducirse (24).

## 1.2.2 MODELACION.

Un modelo puede ser definido como una representación aproximada de un sistema. Dicha representación puede utilizarse para realizar el escalamiento de un equipo o de un proceso. El modelo puede tener una existencia material, en cuyo caso se habla de modelos análogos y homólogos, o carecer de tal, como en el caso de los modelos matemáticos (2,24,25).

Los modelos con existencia material, son equipos

experimentales de menor tamaño, que operan de manera similar o aproximada al equipo estudiado. Cuando un modelo, con existencia material, involucra una transposición de variables se trata de un modelo análogo, vgr.: la analogía hidráulica-eléctrica. De manera opuesta, el modelo que maneja las mismas variables que se presentan en el proceso real se conoce como un modelo homólogo.

La utilización de un modelo con existencia material permite cumplir los siguientes objetivos:

1) El modelo facilita el estudio de un fenómeno al cambiar a voluntad las condiciones de operación sin estar sujeto a las condiciones ambientales.

2) Los costos se reducen al utilizar fluidos de simulación.

3) El modelo contribuye a visualizar el fenómeno de una manera más completa.

4) En la mayoría de los casos, el modelo permite la separación de los aspectos del fenómeno realizándose un análisis detallado.

Los datos obtenidos al manejar un modelo con existencia material, son muy semejantes a los datos obtenidos al manejar equipos similares de menor tamaño. Dicho de otra manera, la utilización de un modelo con existencia material no es otra cosa

que una simulación experimental a pequeña escala (24,25).

Los modelos matemáticos constituyen el implemento ideal para realizar el escalamiento de un equipo o proceso. El modelo matemático es un conjunto de ecuaciones y tomado como un todo es complejo, debido a las interrelaciones de diferentes variables comunes en las ecuaciones del propio modelo. El propósito del modelo matemático es resaltar los fenómenos más importantes del escalamiento, encontrar los pasos determinantes o controlantes y manejar cuantitativamente el efecto del tamaño del equipo en cada fenómeno presente (25).

Las ecuaciones que se utilizan con mayor frecuencia son aquellas referentes a los balances de materia y de energía, a la cinética química y a las transferencias de masa y de calor.

Algunas ecuaciones provienen de trabajos teóricos y otras, en contraparte, son de naturaleza empírica; éstas últimas tienen sus fundamentos en el análisis dimensional y correlaciones de datos experimentales.

Si todas las ecuaciones que constituyen el modelo que se utiliza en el escalamiento son empíricas, se considera que el modelo es formal. Cuando las ecuaciones del modelo están fundadas en las leyes físicas o fisicoquímicas, se trata de un modelo fundamental o fenomenológico (2).

Debido a la necesidad de expresar variaciones

infinitesimales en un modelo, se utilizan con frecuencia ecuaciones diferenciales cuya complejidad varía con respecto a la precisión con que se quiere estudiar el sistema.

En el caso de los reactores químicos, particularmente cuando intervienen varias fases, el escalamiento se torna difícil, pues los fenómenos que se presentan no se ven afectados en igual grado por el cambio de las dimensiones del equipo (23). Lo anterior, puede verse con mayor claridad en la Tabla 1.

TABLA 1.

**EFFECTO DEL CAMBIO DE LAS DIMENSIONES DE UN REACTOR MULTIFASE  
SOBRE LOS FENOMENOS PRESENTES.**

DIMENSION GEOMETRICA:  FENOMENOS:	VOLUMEN $d_t^2 l$	RELACION $l/d_t$	SUP. LATERAL <hr/> VOLUMEN $l/d_t$
REACCION QUIMICA	Muy fuerte determinante.	debil e indirecta	Sin efecto o influencia
TRANSFERENCIA DE MATERIA.	Indirecta No determ.	Fuerte	Sin efecto o influencia
TRANSFERENCIA DE CALOR.	debil e indirecta	Fuerte	Fuerte y directa

$l$  = LONGITUD EFECTIVA DEL REACTOR.

$d_t$  = DIAMETRO EFECTIVO (INTERNO) DEL REACTOR.

Cuando se utiliza la modelación dentro de una metodología para el escalamiento de un equipo, en particular de un reactor, pudiera pensarse que es posible realizar el cambio de escala de nivel banco a nivel industrial de manera directa y sencilla. Indudablemente, el uso del modelo simplifica el problema de la predicción del comportamiento del sistema con el cambio de dimensiones, pero sigue existiendo un vacío entre la escala de laboratorio que aporta los datos fundamentales y la escala de equipo comercial que se constituye como objetivo primordial de la metodología (19). De lo anterior, se puede decir que existe una metodología de carácter ideal que se presenta de manera esquemática en la figura 1.

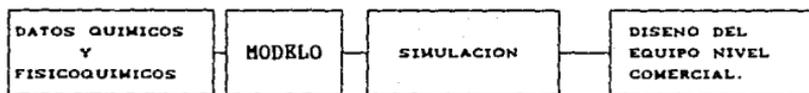


FIGURA 1. METODOLOGIA IDEAL PARA EL ESCALAMIENTO DE UN EQUIPO UTILIZANDO LA MODELACION.

Actualmente, de acuerdo con Tarhan (23), la metodología que se emplea de manera más eficiente incluye la comparación del comportamiento del modelo con la etapa a nivel planta piloto, figura 2. Lo anterior permite la retroalimentación del modelo

antes de que la metodología llegue al diseño de la etapa comercial. En esta forma se consigue un escalamiento exitoso y seguro a la vez que logran reducirse el número de etapas involucradas y los costos del proceso de escalamiento.

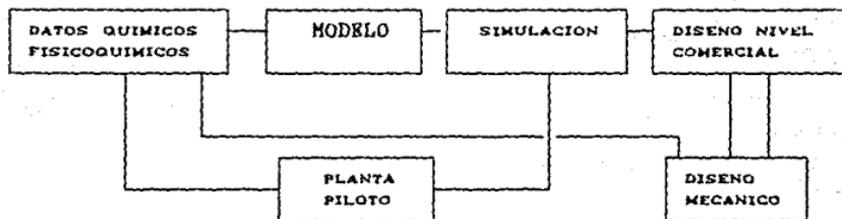


FIGURA 2. METODOLOGIA PARA EL ESCALAMIENTO DE UN EQUIPO CON EL USO DE LA ETAPA DE PLANTA PILOTO COMO RETROALIMENTACION AL MODELO.

## CAPITULO II.

### EL REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO.

#### 2.1 REACTORES TUBULARES HOMOGENEOS.

Los reactores pueden clasificarse de acuerdo con diversos criterios, sin embargo una primera división distingue dos grandes categorías, de acuerdo al número de fases presentes en el interior del mismo (22):

REACTORES {  
HOMOGENEOS.  
HETEROGENEOS.

En los reactores homogéneos, como su nombre lo indica, existe una sola fase, que en el caso de los reactores tubulares puede ser líquida o gaseosa y en la mayoría de los casos su comportamiento puede aproximarse a la idealidad.

En contraparte, los reactores heterogéneos del tipo tubular son sistemas del tipo sólido-gas o sólido-líquido, pues necesariamente están constituidos por un lecho catalítico formado por partículas sólidas a través del cuál se hace pasar la corriente de reactivos.

El reactor químico es un equipo sencillo en su concepto, pero complejo en su diseño. Constituido como el corazón de los procesos químicos y petroquímicos, ocupa un lugar aparte de los demás equipos utilizados en la Ingeniería Química. Dentro de el reactor concebido como sistema, se verifican transformaciones de la materia y la energía inherentes a las reacciones químicas, bajo ciertas condiciones de operación y la presencia de ciertos agentes reaccionantes. El reactor visto como una caja negra, debe cumplir con el principio de conservación y la segunda ley de la Termodinámica. A continuación se presenta el tratamiento realizado por Sandler (2), para explicar la conservación de masa y energía en un sistema de caja negra.

a) Puede fluir masa por uno, varios o ninguno de los orificios de entrada  $k$ , (o sea, que el sistema puede estar abierto o cerrado al flujo de masas). Puesto que interesan aquí los fluidos puros, sólo se ocupará una especie molecular, aún cuando su temperatura y presión sean distintas en cada orificio de entrada. El índice de flujo de masa que entra al sistema por el orificio de entrada  $k$ -ésimo será  $N_k$ , de modo que  $N_k > 0$  para el flujo de entrada al sistema, y  $N_k < 0$  para el flujo de salida del sistema.

b) Los límites del sistema de caja negra pueden ser

estacionarios o estar en movimiento. Si los límites del sistema se mueven, puede deberse a dilatación o contracción, porque el sistema completo se mueve o por ambas cosas.

c) Puede entrar energía en forma de calor al sistema, o bien, salir de él por los límites.

d) Puede entrar al sistema o salir de él energía en forma de trabajo (movimiento mecánico del eje, energía eléctrica, etc.), a través de los límites.

En c) y d) un flujo de energía de entrada al sistema es positivo y un flujo de energía de salida del sistema es negativo.

La ecuación de equilibrio para la carga total de cualquier cantidad extensiva  $\theta$  en este sistema se obtiene al equiparar el cambio en la cantidad  $\theta$  en el sistema entre los tiempos  $t$  y  $t+\Delta t$  a los flujos de  $\theta$  de entrada y salida al sistema y la generación de  $\theta$  dentro del sistema en el intervalo  $\Delta t$ . Así pues:

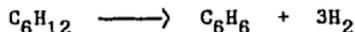
$$\begin{aligned}
 \left[ \begin{array}{c} \text{Cantidad de } \theta \text{ en el} \\ \text{tiempo } t+\Delta t \end{array} \right] & - \left[ \begin{array}{c} \text{Cantidad de } \theta \text{ en el sistema} \\ \text{en el tiempo } t \end{array} \right] \\
 & = \left[ \begin{array}{c} \text{Cantidad de } \theta \text{ que entró al sist.} \\ \text{a través de los lím. entre } t \text{ y} \\ t + \Delta t \end{array} \right] \\
 & - \left[ \begin{array}{c} \text{Cantidad de } \theta \text{ que salió del sist.} \\ \text{a través de los lím. entre } t \text{ y} \\ t + \Delta t \end{array} \right] \\
 & + \left[ \begin{array}{c} \text{Cantidad de } \theta \text{ generada dentro del} \\ \text{sist. entre } t + \Delta t \end{array} \right] \\
 & \qquad \qquad \qquad (2.1-1)
 \end{aligned}$$

El significado de los dos primeros términos del lado derecho de la ecuación está claro; pero el último requiere ciertas aclaraciones. Si la propiedad extensiva  $\theta$  es igual a la masa total, la energía total o la cantidad de movimiento total, todas ellas cantidades que se conservan, entonces la generación interna de  $\theta$  es igual a cero. Esto se observa claramente en el caso especial de un sistema aislado de su ambiente (de modo que los términos de flujo a través de los límites del sistema se desvanecen), en este caso la ecuación 2.1-1 se reduce a:

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Cantidad de } \theta \text{ en} \\ \text{el sist. en el} \\ \text{tiempo } t + \Delta t \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{Cantidad de } \theta \text{ en} \\ \text{el sist. en el} \\ \text{tiempo } t \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{l} \text{Cantidad } \theta \\ \text{generada en} \\ t \text{ y } t + \Delta t \end{array} \right]$$

(2.1-2)

Puesto que no se puede producir de manera espontánea ni masa total, ni cambio de movimiento, ni energía, si  $\theta$  es cualquiera de esas cantidades, el término de generación interna tendrá que ser cero. No obstante, si  $\theta$  es alguna otra cantidad, el término de generación interna puede ser positivo (si se produce  $\theta$  dentro del sistema), negativo (si se consume  $\theta$  dentro del sistema), o bien, cero. Por ejemplo, suponiendo que el sistema de caja negra fuera un reactor químico cerrado en el que se deshidrogena ciclohexano parcialmente a benceno e hidrógeno, según la reacción:



Si se igualara  $\theta$  a la masa total, entonces, por el principio de conservación de masa, el término de generación interna en la

ecuación (2.1-2) sería cero. Sin embargo, si  $\theta$  se considerara como la masa de benceno sería positivo, puesto que la reacción química produce benceno. A la inversa, si se considerara  $\theta$  como la masa de ciclohexano en el sistema, el término de generación interna sería negativo. En cualquier caso, la magnitud del término de generación interna dependería del índice de reacción.

## 2.12 EL REACTOR TUBULAR IDEAL. DEFINICION Y ECUACION DE DISEÑO.

Los reactores químicos, han adoptado las formas más diversas. El Reactor tubular ideal, es un reactor cilíndrico y se conoce con diferentes nombres "7": reactor de flujo tapón, reactor de flujo pistón y reactor de flujo uniforme; sin embargo sea cual fuere el nombre con que se conozca, se caracteriza porque el flujo del fluido, en su dirección axial es ordenado. Ningún elemento del mismo sobrepasa o se mezcla con cualquier otro elemento situado antes o después de aquel. En realidad, en este reactor puede haber mezcla lateral del fluido (dirección radial), pero nunca ha de existir mezcla o difusión a lo largo de la trayectoria de flujo.

En un reactor de flujo en pistón, la composición del fluido varía con la coordenada de posición en la dirección axial o dirección de flujo; en consecuencia, el balance de materia para un componente de la reacción ha de referirse a un elemento diferencial de volumen  $dV$ . Así para el reactante A, en la ecuación (2.1-1), el cambio en la cantidad  $\theta$  en el sistema entre los tiempos  $t$  y  $t+\Delta t$ , entendido como acumulación, es nulo.

Simplificando, se obtiene:

$$\text{ENTRADA DE } e = \text{SALIDA DE } e + \text{DESAPARICION DE } e \quad (2.1-3) \\ \text{POR REACCION.}$$

Para el elemento diferencial de volumen  $dV$ :

$$\text{Entrada de A, moles/tiempo} = F_A.$$

$$\text{Salida de A, moles/tiempo} = F_A + dF_A.$$

$$\begin{aligned} \text{Desaparición de A} \\ \text{por reacción,} \\ \text{moles/tiempo} \end{aligned} = \left[ \frac{\text{moles de A que reaccionan}}{(t) * (\text{Vol. fluido de reacc.})} \right] * dV \\ = (-r_A) * dV.$$

Introduciendo estos términos en la ecuación (2.1-3), se obtiene:

$$F_A = (F_A + dF_A) + (-r_A)dV \quad (2.1-4)$$

Teniendo en cuenta que:

$$dF_A = d[F_{A0} (1 - X_A)] = -F_{A0} dX_A \quad (2.1-5)$$

Por sustitución, resulta:

$$F_{A0} dX_A = (-r_A)dV \quad (2.1-6)$$

Por consiguiente, ésta es la ecuación referida a A para el volumen  $dV$  en la sección diferencial del reactor, la cual debe ser integrada. Agrupando convenientemente los términos de la ecuación anterior, teniendo en cuenta que el caudal molar de alimentación,  $F_{A0}$ , es constante, mientras que  $(-r_A)$  depende de las concentraciones de las sustancias o de la conversión, se tiene:

$$\int_0^V \frac{dV}{F_{AO}} = \int_{X_{Ai}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} ; \quad \frac{V}{F_{AO}} = \int_{X_{Ai}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (2.1-7)$$

La ecuación (2.1-7), permite calcular el tamaño del reactor, y se conoce como ecuación de diseño. Esta relación será útil para cualquier reactor tubular.

Aquí se vuelve necesario considerar el balance de energía del sistema, que no es más que un balance calórico de un elemento diferencial del reactor. Una simplificación importante que aparece en el tratamiento hecho por Froment y Bischoff (12), es la consideración de que la convección es el único mecanismo por el cual se lleva a cabo una transferencia de calor considerable. Aún más, esta convección ocurre en un flujo pistón y la temperatura es completamente uniforme en la sección transversal (dirección radial). Si existe un intercambio de calor con la pared del tubo, la diferencia total de temperatura con la pared se localiza en una película adyacente, la cual es sumamente delgada. La ecuación de balance de energía en estado estable es:

$$\sum_K m_K C_{p,K} dT + U \pi d_t (T - T_r) dz - r_A (\Delta H_R) dV = 0 \quad (2.1-8)$$

El término  $\sum_k m_k C_{p,k}$  debe ajustarse para cada incremento. Normalmente, es justificable la utilización de un valor promedio para el  $C_p$  en un intervalo de temperaturas y composiciones, por lo que dicho término, puede reemplazarse por  $m_T C_p$ , donde  $m_T$  es el flujo másico total.

Las ecuaciones (2.1-7) y (2.1-8) pueden relacionarse entre sí, pues ambas presentan la misma variable ( $-r_A$ ). Substituyendo la ecuación (2.1-7) en (2.1-8), se tiene:

$$\frac{dT}{dZ} = \frac{F_{A0} (-\Delta H_R) dX_A}{m_T C_p dZ} - \frac{U n d_t}{m_T C_p} (T - T_r) \quad (2.1-9)$$

## 2.2 REACTORES TUBULARES HETEROGENEOS.

### 2.2.1 EL REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO. ESTADO DEL ARTE.

El descubrimiento de los catalizadores sólidos y su aplicación en procesos químicos y petroquímicos en los primeros años de este siglo, abrieron nuevos horizontes a la Industria Química. La posibilidad de mejorar un proceso ya existente en cuanto a rapidez de reacción o selectividad, sin alterar el equilibrio, así como el desarrollo nuevos procesos, contribuyeron al crecimiento espectacular del conocimiento en catalisis.

La mayor parte de los procesos catalíticos a nivel industrial, se llevan a cabo en reactores tubulares de lecho fijo.

Sólo aquellos casos en que es muy difícil el control de la temperatura del reactor y se requiere un régimen isotérmico, demandan la utilización de reactores de lecho fluidizado. Para entender la importancia del reactor tubular de lecho fijo en la industria actual, en la tabla 2 se listan algunos procesos estratégicos en los cuales es protagonista (12).

TABLA 2.

PROCESOS PRINCIPALES EN QUE INTERVIENEN REACTORES DE LECHO FIJO

INDUSTRIA QUIMICA BASICA.	INDUSTRIA PETROQUIMICA.
Reformado con vapor.	Oxido de etileno.
Conversión de CO.	Acetato de vinilo.
Sintesis { Amoniaco. Acido sulfúrico. Metanol.	Butadieno.
Proceso Oxo.	Estireno.
	Hidrodealquilación.
REFINACION DEL PETROLEO.	
Reformado catalítico.	Polimerización.
Isomerización.	Hidro-cracking.

La utilización de lechos catalíticos introduce nuevas variables en el diseño y la operación de estos equipos. Los reactores tubulares heterogéneos presentan complejos fenómenos de

transporte a tres niveles distintos: intrapartícula, interpartícula e interfase. En cada uno de estos niveles la transferencia de masa y calor se ve afectada de modo distinto, haciéndose patente en las distribuciones de flujo tanto de materia como de energía. La velocidad global de reacción que incluye todos los pasos del mecanismo de reacción, (difusión externa e interna de los reactivos, adsorción, reacción, desorción y difusión de los productos), debe contemplar el efecto de éstos fenómenos y los reactores tubulares de lecho fijo, como cualquier sistema que se aleja de la idealidad, lógicamente se complican.

## 2.3. MODELOS QUE DESCRIBEN EL COMPORTAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO.

### 2.3.1 CLASIFICACION DE MODELOS PARA REACTORES DE LECHO FIJO.

Los fenómenos que pueden presentarse de manera adicional al flujo pistón ideal, hipótesis más sencilla de partida, son los siguientes "o":

- Dispersión axial de materia y calor en el lecho fijo.
- Dispersión radial de las mismas magnitudes, a nivel macroscópico
- Resistencia a la transferencia de materia y calor en la capa límite fluido-partícula.
- Resistencia a la transferencia de ambas magnitudes en el interior de las partículas..

Teniendo en cuenta la inserción de cada uno de los fenómenos reseñados, se pueden establecer los modelos que se citan en la Tabla 3. En ella, los modelos han sido agrupados por Froment (12) en dos grandes categorías : modelos pseudo-homogéneos y heterogéneos; los que a su vez se dividen de acuerdo al número de dimensiones en que se describen los fenómenos de transferencia de masa y calor. Los modelos pseudo-homogéneos no toman en cuenta de manera explícita la presencia del catalizador, asumiendo que la temperatura del fluido es la misma que la temperatura del lecho catalítico ( $T=T_s$ ); la misma condición se establece para la concentración de las especies presentes. En contraste los modelos heterogéneos, utilizan ecuaciones de conservación por separado para el fluido y el lecho (11,22).

TABLA 3.

CLASIFICACION DE MODELOS PARA REACTORES DE LECHO FIJO CON UNA FASE FLUIDA.		
	MOD. PSEUDO-HOMOGENEOS.	MOD. HETEROGENEOS.
UNIDIMENSIONAL	Ideal , básico. =(AI)	Grad. interfase. =(BI)
	(AI) + Flujo axial. =(AII)	(BI)+Grad. inter- partícula =(BII)
BIDIMENSIONAL	A(II)+Flujo radial. =(AIII)	(BII) + Flujo =(BIII)

El modelo básico que se utiliza con mayor frecuencia, es el pseudo-homogéneo unidimensional (AI), que solo considera el transporte de masa y calor por medio de un flujo tapón en la dirección longitudinal. Puede ocurrir una desviación de la idealidad, presentándose un mezclado o dispersión axial, pero el modelo es esencialmente el mismo (AII). Sin embargo, cuando existen gradientes en la dirección radial, se vuelve necesario considerar la aplicación de un modelo bidimensional. Esto debe hacerse si el intercambio de calor se vuelve un factor crítico para el rendimiento y la estabilidad del sistema.

Dentro de la categoría de modelos heterogéneos, se establece nuevamente un modelo básico (BI), que considera gradientes interfaciales. El siguiente paso, en cuanto a complejidad se refiere, es tomar en cuenta los gradientes dentro de las partículas de catalizador (BII). Finalmente, se han desarrollado modelos heterogéneos bidimensionales (BIII) que toman en cuenta los fenómenos anteriormente mencionados junto con la dispersión radial.

Los grupos dedicados al análisis y diseño de reactores, continuamente se enfrentan al problema de justificar la utilización de un modelo sofisticado. La complejidad depende en primer lugar del proceso, esto es, el esquema de reacción y su sensibilidad a perturbaciones en las condiciones de operación. Igualmente importante es el grado de exactitud con que se conocen los parámetros cinéticos y de transporte. Para tal efecto, Mears

(18,19) y Carberry (9,4), proponen ciertos criterios para determinar la influencia de la transferencia de calor sobre los datos cinéticos.

### 2.3.2 EL MODELO PSEUDO-HOMOGENEO BASICO EN UNA DIMENSION.

Como se mencionó en el apartado anterior, el modelo básico o ideal para un reactor tubular de lecho fijo (AI), asume que los gradientes de concentración y temperatura solo ocurren en la dirección axial. El único mecanismo de transporte es la convección y se asocia al flujo tapón. Las ecuaciones de conservación, obtenidas a partir de los balances de materia y energía en régimen permanente y para una sola reacción son, de acuerdo con Froment y Bischoff (12):

$$-u_s \frac{dC_A}{dz} = \rho_B r_A \quad (2.3-1)$$

$$-u_s \rho_g C_p \frac{dT}{dz} = (-\Delta H_R) \rho_B r_A - \frac{4U}{d_t} (T - T_r) \quad (2.3-2)$$

$$-\frac{dPr}{dz} = \frac{2f \rho_g u_s^2}{g d_p} \quad (2.3-3)$$

Sujetas a las condiciones iniciales  $Z=0$ ,  $C_A=C_{A0}$ ,  $T=T_0$ ,  $P=P_0$ . La ecuación (2.3-1) se obtiene del balance de materia de un componente de referencia, en este caso A, sobre una sección transversal elemental del reactor tubular, mostrada en la figura 3, que contiene una cantidad de catalizador sólido  $dW$ . Se omite el procedimiento de obtención por ser análogo al descrito en las ecuaciones (2.1-3) a (2.1-9).

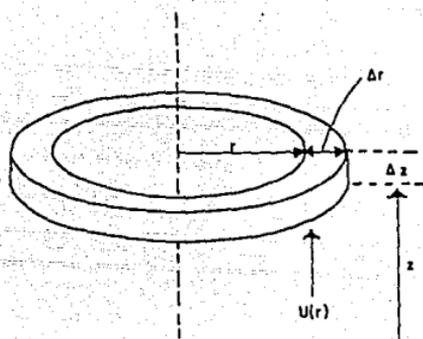
Este modelo en general, rinde resultados satisfactorios para lechos de elevada relación  $L/d_t$ , alta velocidad superficial de los gases de reacción, efectos caloríficos pequeños asociados a la reacción y tamaño pequeño en las pastillas del catalizador (12), por lo que puede ser utilizado, como lo describe Holton (15), en una primera aproximación para el diseño de la unidad.

### 2.3.3 EL MODELO PSEUDO-HOMOGENEO EN DOS DIMENSIONES.

Las reacciones que involucran una transferencia de calor importante, requieren de un modelo que prediga de manera detallada los patrones de temperatura y conversión dentro del reactor, con el fin de evitar sobre-temperaturas en el eje del mismo (13).

Lo anterior conduce a los modelos bidimensionales, que predicen las variaciones de concentración y temperatura en las direcciones axial y radial (14).

FIGURA 3.



ELEMENTO ANULAR EN UN REACTOR TUBULAR DE  
LECHO FIJO

Las ecuaciones de continuidad para el componente A, en una sola reacción a régimen permanente, son:

$$c D_{er} \left( \frac{\partial C^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) - u_s \frac{\partial C}{\partial z} - \rho_B r_A = 0 \quad (2.3-4)$$

$$\lambda_{er} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) - u_s \frac{\partial T}{\partial z} - \rho_B (-\Delta H_R) r_A = 0 \quad (2.3-5)$$

con las condiciones iniciales:

$$\begin{aligned} C_A &= C_{A0} && \text{en } z=0 && 0 \leq r \leq R_t \\ T &= T_0 && \text{en } z=0 && 0 \leq r \leq R_t \\ \partial C / \partial r &= 0 && \text{en } r=0 && \text{y } r = R_t \\ \partial T / \partial r &= 0 && \text{en } r=0 && \text{para toda } z \\ \partial T / \partial r &= -\frac{h_w}{\lambda_{er}} (T_R - T_v) && \text{en } r=R_t && \end{aligned}$$

Froment y Bischoff (12), consideran que no existe una necesidad real para un estudio detallado del mezclado axial, pues existen factores mucho más importantes que deben tomarse en cuenta en un modelo bidimensional.

Los primeros términos del lado izquierdo de las ecuaciones (2.3-4) y (2.3-5), describen de manera aproximada las transferencias de masa y calor en la dirección radial, considerándolas como resultantes de mecanismos de difusión y conducción respectivamente. La transferencia de masa, se expresa

en función de la ley de Fick, introduciendo la difusividad efectiva  $D_{er}$ , como factor de proporcionalidad entre el flujo y el gradiente. El flux de calor en la dirección radial, resulta de diversos mecanismos operando tanto en el fluido como en el catalizador. Estos son agrupados en un mecanismo similar a la conducción, descrito por una ecuación del tipo de Fourier, con un factor de proporcionalidad denominado conductividad radial efectiva  $\lambda_{er}$ . La transferencia de calor en la vecindad inmediata de la pared se expresa en términos de un coeficiente de transferencia local  $\Delta v$ , que no ha de confundirse con el coeficiente global de los modelos unidimensionales. Para efectos de cálculo de la conductividad y la difusividad radial efectiva, existen numerosas correlaciones experimentales descritas en la literatura (6,11,12).

## CAPITULO III.

### DESCRIPCION DE LAS METODOLOGIAS UTILIZADAS EN EL ESCALAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO.

#### 3.1 METODOLOGIA CON BASE EN EL PRINCIPIO DE SIMILITUD.

##### 3.1.1 GRUPOS CARACTERISTICOS DE LOS PROCESOS QUIMICOS A REGIMEN PERMANENTE

La teoría de la similitud tiene una aplicación exitosa en los campos de la hidrodinámica y la transferencia de calor por lo que se ha extrapolado al escalamiento de los reactores químicos. El principio de similitud requiere que un cierto número de grupos adimensionales que caracterizan los fenómenos presentes en el sistema a ser escalado, se mantengan constantes durante el proceso de escalamiento.

Estos grupos adimensionales se obtienen por medio del teorema  $\pi$  de Buckingham, a partir de una lista de variables que presumiblemente influyen los procesos que se llevan a cabo en el equipo estudiado (2). Dicho teorema establece que "si una ecuación es dimensionalmente homogénea, puede reducirse a una serie completa de productos adimensionales". Por ejemplo, si una

función  $f(d_t, v, \rho, \mu)=0$ , puede reducirse a una función de algún número adimensional o una serie de éstos:  $f(Re)=0$ .

Otro método para adimensionalizar, parte de las ecuaciones de conservación en las que se lleva a cabo una substitución de variables y/o una división de cada término entre otros términos de la ecuación o las condiciones límite del sistema. La manipulación de las ecuaciones de conservación es útil, pues los grupos adimensionales que resultan de este tratamiento son representativos de los fenómenos de transferencia de masa y calor. Diversos autores entre ellos Danköhler (5) y Carberry (3), hacen distinción de algunos parámetros que caracterizan a los reactores tubulares de lecho fijo, dividiéndolos en parámetros del reactor y parámetros propios de la reacción química. El siguiente tratamiento es realizado por Danköhler (5).

El número de Reynolds se define como la relación entre la fuerza de inercia y la fuerza de fricción del fluido.

$$\frac{\text{FUERZA DE INERCIA}}{\text{FUERZA DE FRICCIÓN}} = \frac{d_t v \rho}{\mu} = \text{Re} \quad (3.1-1)$$

A partir de las ecuaciones de conservación para un reactor tubular de lecho fijo, se tienen las siguientes relaciones adimensionales:

$$\frac{\text{MOLES CONVERTIDAS}}{\text{MOLES PROP. POR FLUJO DEL FLUIDO}} = \frac{r' l}{v} = I \quad (3.1-2)$$

$$\frac{\text{MOLES CONVERTIDAS}}{\text{MOLES PROP. POR DIFUSION}} = \frac{r' l^2}{D} = \text{II} \quad (3.1-3)$$

$$\frac{\text{CALOR DE REACCION DESPRENDIDO}}{\text{CALOR REMOVIDO POR FLUJO DEL FLUIDO}} = \frac{Q r l}{C_p \rho v \Delta T} = \text{III} \quad (3.1-4)$$

$$\frac{\text{CALOR DE REACCION DESPRENDIDO}}{\text{CALOR REMOVIDO POR CONDUCCION}} = \frac{Q r l^2}{\lambda \Delta T} = \text{IV} \quad (3.1-5)$$

La relación de III/IV =  $C_p \rho v l / \lambda$  es mejor conocida como número de Péclet (Pe).

Considerando despreciable el efecto de la radiación y la convección libre, la reacción es controlada por cinco grupos adimensionales característicos: el número de Reynolds y los grupos I a IV (ecuaciones 3.1-1 a 3.1-5). Si cada uno de los grupos se mantiene constante en los sistemas M (original) y H (escalado), la conversión debe permanecer constante en ambos sistemas, con flujos de salida diferentes.

Además de los grupos descritos anteriormente, existen otros números adimensionales importantes en el escalamiento, como el número de Biot (Bi), el de Damköhler ( $\beta$ ), el de Prandtl (Pr), el factor de Arrhenius ( $\gamma$ ), etc. (2).

### 3.12 LA SIMILITUD TOTAL

Las condiciones para que se verifique la igualdad de los grupos adimensionales en un escalamiento, pueden ser condiciones

referentes a la cinética de la reacción y a las propiedades de los componentes o aquellas relativas al reactor como equipo. Las condiciones del primer tipo, son obtenidas al eliminar aquellas variables características del aparato, vgr:  $l$ ,  $v$  y  $\Delta T$  de los parámetros  $Re$ ,  $I$ ,  $II$ ,  $III$ ,  $IV$  y examinando las ecuaciones resultantes. Estas últimas siempre deben cumplirse de manera independiente al tipo de reactor, si la similitud entre  $H$  y  $M$  ha de mantenerse. Las condiciones que se deben satisfacer son:

$$a) \quad r_H(C_K, \dots, \Delta T) = n r_M(C_K, \dots, \Delta T) \quad (3.1-6)$$

Las velocidades de reacción de los sistemas  $H$  y  $M$  deben mostrar la misma dependencia de la concentración y la diferencia de temperatura.

$$b) \quad Pr_H = \left[ \frac{C_p \mu}{\lambda} \right]_H = \left[ \frac{C_p \mu}{\lambda} \right]_M = Pr_M \quad (3.1-7)$$

Los números de Prandtl en  $H$  y en  $M$  deben permanecer constantes.

$$c) \quad (\mu/\rho D)_H = (\mu/\rho D)_M \quad (3.1-8)$$

$$d) \quad T_H = T_M \quad (3.1-9)$$

La temperatura para  $H$  y  $M$  ha de mantenerse constante en un sistema con reacciones consecutivas o laterales. Si el sistema

está constituido por una reacción simple,  $T_H$  será diferente de  $T_M$  con lo cual es posible cumplir las condiciones a), b) y c).

En caso de buscar la similitud total entre el sistema H y M, deben verificarse las similitudes geométrica, hidrodinámica, térmica y de cinética de reacción. Las concentraciones iniciales y las cantidades  $D$ ,  $\rho$ ,  $C_p$ ,  $\mu$  y  $\lambda$  se asumen iguales para ambos sistemas H y M en sus correspondientes posiciones en el espacio. Por lo tanto, si se desea escalar el sistema M utilizando un factor de escalamiento  $n$  referente a la salida del sistema se tiene:

$$I_H^2 v_H = n I_M^2 v_M \quad (3.1-10)$$

Por similitud geométrica e hidrodinámica,  $Re_H = Re_M$ :

$$I_H = n I_M \quad (3.1-11)$$

$$v_H = \frac{1}{n} v_M \quad (3.1-12)$$

Por similitud de cinética de la reacción,  $I_H = I_M$ ,  $II_H = II_M$ :

$$r_H = \frac{1}{n^2} r_M \quad (3.1-13)$$

Finalmente, a partir de la similitud térmica,  $III_H = III_M$ :

$$\Delta T_M = \Delta T_H \quad (3.1-14)$$

Se observa en principio que la producción de un proceso químico puede aumentarse al mismo tiempo que se mantiene la similitud total. Sin embargo, un aumento en el tamaño del reactor con similitud geométrica resultaría poco económico, pues las ecuaciones (3.1-12) y (3.1-13) implican que las velocidades del fluido y la reacción deben ser menores en el reactor de mayor tamaño  $H$ , que en el modelo original. Como consecuencia lógica, lejos de obtener un aumento se tiene una disminución en la producción, que sólo puede ser compensada por un incremento desproporcionado de las dimensiones del reactor, en conformidad con la ecuación (3.1-11).

### 3.13 PRIMER CASO DE SIMILITUD PARCIAL.

Una manera de evitar el problema anterior, consiste en conservar las similitudes hidrodinámica, térmica y cinética química, desechando la geométrica.

Para una reacción homogénea, de la relación de producción:

$$d_H^2 v_H = n d_M^2 v_M \quad (3.1-15)$$

y la condición de similitud hidrodinámica  $Re_H = Re_M$ :

$$d_H = n d_M \quad (3.1-16)$$

$$v_H = \frac{1}{n} v_M \quad (3.1-17)$$

Como la relación  $(III/IV)_H = (III/IV)_M$ :

$$I_H = n I_M \quad (3.1-18)$$

Nuevamente  $I_H = I_M$ , con lo que:

$$r_H = \frac{1}{n^2} r_M \quad (3.1-19)$$

Las condiciones para III y IV se satisfacen cuando  $\Delta T_H = \Delta T_M$ .

Las ecuaciones (3.1-16) a (3.1-19) corresponden absolutamente con (3.1-11) a (3.1-13). A pesar de que la similitud geométrica no se especificó explícitamente, se llega a ella, pues la condición  $Re_H = Re_M$  una vez más conduce a la restricción (3.1-11), que ahora contiene la variable  $d$  en vez de  $l$ .

Tratándose de una reacción heterogénea, la igualdad hidrodinámica establece:

$$\nu_H = \nu_M \quad (3.1-20)$$

Combinando esta expresión con (3.1-15):

$$d_H = d_M \sqrt{n} \quad (3.1-21)$$

La condición  $(III/IV)_H = (III/IV)_M$ , permite que (3.1-18) permanezca sin cambios, al substituir ésta ecuación y (3.1-20) en

la expresión  $I_H = I_M$ , se obtiene:

$$r_H = r_M \frac{1}{n} \quad (3.1-22)$$

En este caso se requiere que la velocidad de reacción del sistema escalado, mucho más largo y delgado, se mantenga por debajo de la velocidad de reacción del sistema original. Una vez más, el escalamiento solo puede lograrse eliminando otra de las condiciones de similitud, es decir aquella referente a la hidrodinámica.

### 3.14 SEGUNDO CASO DE SIMILITUD PARCIAL

Estrictamente hablando, existe una contradicción al eliminar la similitud hidrodinámica y mantener las similitudes térmica y de cinética de reacción. Esto se debe a que parte del calor es transportado por el flujo del fluido, sin embargo existe cierto grado de similitud térmica si en ambos sistemas H y M, se desprende la misma proporción de calor en cualquier sección transversal, hacia o a través de la pared. Primeramente se analizará el escalamiento de un reactor tubular homogéneo, bajo el criterio anterior.

Este caso requiere que las condiciones I =  $(r \cdot l)/\nu$ , III =  $(r \cdot Q \cdot l)/(C_p \rho \nu \Delta T)$  y IV =  $(r \cdot Q \cdot d^2)/(\lambda \text{Nu} \Delta T)$  sean iguales en los sistemas H y M. La teoría de la transferencia de calor

propone que el número de Nusselt sólo es función del Reynolds y el Prandtl. Como el  $Pr_H = Pr_M$  de acuerdo con la ecuación (3.1-7), el Nusselt puede describirse como:

$$Nu = \text{constante } (\rho \nu d / \mu)^m \quad (3.1-23)$$

A partir de la condición  $IV'_H = IV'_M$  se tiene que  $(d^2/(\nu d))^m)_H = (d^2/(\nu d))^m)_M$ . Combinando esto con la ecuación (3.1-15), se llega a:

$$d_H = d_M n^{m/(2+m)} \quad (3.1-24)$$

$$\nu_H = \nu_M n^{(2-m)/(2+m)} \quad (3.1-25)$$

Una expresión análoga a (3.1-25) se obtiene para la longitud del reactor, al igualar las condiciones  $I_H = I_M$  y  $III_H = III_M$ :

$$l_H = l_M n^{(2-m)/(2+m)} \quad (3.1-26)$$

El valor del exponente  $m$  en las ecuaciones (3.1-23) a (3.1-26), puede tomar valores representativos de 0.8 a 0.9 en flujo turbulento, esto es con números de Reynolds mayores a 2100 en reactores homogéneos y  $Re_p > 100$  en reactores de lecho fijo.

Para los reactores heterogéneos deben cumplirse las mismas condiciones descritas anteriormente  $I_H = I_M$  y  $III_H = III_M$  con la variante de no utilizarse  $IV'$  sino  $IV = rQd^2/\lambda\Delta T$  y considerarse la conductividad térmica efectiva como  $\lambda = \text{constante } \nu^m$ , de aquí que

las expresiones (3.1-24) a (3.1-26) sufran ciertos cambios:

$$d_H = d_M n^{m/(2+2m)} \quad (3.1-27)$$

$$v_H = v_M n^{2/(2+2m)} \quad (3.1-28)$$

$$l_H = l_M n^{2/(2+2m)} \quad (3.1-29)$$

Nuevamente el sistema H resultante del escalamiento, será más largo y delgado que el sistema original M.

### 3.2 METODOLOGIA CON BASE EN LA MODELACION DEL REACTOR.

#### 3.2.1 LOS MODELOS DE ORDEN REDUCIDO Y SU APLICACION EN EL ESCALAMIENTO DE REACTORES TUBULARES DE LECHO FIJO.

La selección de un modelo que describa de manera aproximada un sistema, debe hacerse teniendo en cuenta la complejidad del mismo y la dificultad asociada a su solución (14). Debe considerarse: a) "el orden del modelo", es decir el número de funciones independientes necesarias para describir el proceso; b) el número de parámetros involucrados y c) el número de variables independientes. Lógicamente entre más simple resulte un modelo, más sencilla será su solución analítica o numérica (2).

Los modelos de *orden reducido* son una simplificación de los modelos pseudo-homogéneos bidimensionales que no altera propiamente el "orden del modelo" y resultan sumamente útiles, pues representan el comportamiento del reactor de manera más aproximada a la realidad que los modelos unidimensionales básicos. La reducción tiene verificativo sobre el orden de las ecuaciones diferenciales que utiliza el modelo, al transformar las ecuaciones diferenciales parciales del modelo bidimensional en diferenciales ordinarias, mediante una aproximación polinomial de los perfiles radiales de temperatura y concentración, con lo que es posible integrarlos a lo largo del reactor (1,10,14).

Dentro de un reactor tubular de lecho fijo, se presentan perfiles radiales de velocidad del fluido y por ende de la conductividad térmica y la difusividad (6). La resistencia a la transferencia de calor se presenta principalmente en una película muy delgada, adyacente a la pared del reactor, pero como en la vecindad inmediata de la pared la fracción de espacios huecos del lecho catalítico se aproxima a la unidad, hay un cambio en la velocidad y una alteración en la resistencia a la transferencia de calor (22). La consideración fundamental de los modelos de orden reducido, es asumir que la concentración y la temperatura son funciones cuadráticas de la posición radial y gracias a una rápida dispersión en ésta dirección, puede realizarse una aproximación polinomial para expresar las variaciones de la concentración y la temperatura a lo largo de la dirección axial (10).

La ecuación de cambio de la conversión del reactivo A, con respecto a la longitud adimensional en un reactor tubular de lecho fijo, para una sola reacción a régimen permanente es (3.10):

$$\frac{dX_A}{dZ} = \beta R_A \quad (3.2-1)$$

donde el parámetro  $\beta = (I r_{A_0}) / G_A$ , además la velocidad de reacción adimensionalizada del componente A es  $R_A = r_A / r_{A_0}$ .

Efectuando el balance entálpico en una sección transversal del reactor, se tiene:

$$\frac{\pi d_t^2}{4} G C_p dT = \frac{\pi d_t^2}{4} G_A (-\Delta H) dX_A + dQ \quad (3.2-2)$$

El flux de calor desde el lecho a través de la pared del tubo,  $dQ$  es:

$$dQ = - \frac{\lambda_w}{1 + \frac{\lambda_w d_t}{8\lambda_r}} (T - T_w) \pi d_t dZ \quad (3.2-3)$$

La substitución de (3.2-3) y  $dX_A$  a partir de la relación  $dX_A/dZ$  en la ecuación (3.2-2), lleva a la razón de cambio de la temperatura del lecho catalítico con respecto a la dirección axial del reactor:

$$\frac{dT}{dZ} = \frac{(-\Delta H) r_A}{G C_p} - \frac{4\lambda_w}{1 + (\lambda_w d_t) / (8\lambda_{or})} \frac{1}{G C_p d_t} (T - T_w) \quad (3.2-4)$$

Esta expresión se modifica al introducir las variables adimensionalizadas  $Z^* = Z/l$ ,  $RA = r_A/r_{A_0}$  y  $T^* = T/T_0$ , de manera que:

$$\frac{dT^*}{dZ^*} = \frac{(-\Delta H) r_{A_0} l (RA)}{G C_p T_0} - \frac{4 \lambda_w l}{1 + \frac{(\lambda_w d_t)}{8\lambda_{or}}} \frac{1}{G C_p d_t T_0} (T - T_w) \quad (3.2-5)$$

Dos términos se distinguen en la expresión anterior, el primero describe la generación de calor por medio de la reacción química y el segundo la transferencia de calor desde el lecho al medio exterior a través de la pared del reactor. Aquí resulta conveniente tomar en cuenta los siguientes grupos adimensionales:

$$\beta' = (-\Delta H) r_{A_0} l / (G C_p T_0)$$

$$Bi = \lambda_w d_t / (2\lambda_{or})$$

$$\alpha' = 4 l d_p / (d_t^2 P\phi_h) \quad (3.2-8)$$

$$P\phi_h = G d_p C_p / \lambda_{or}$$

Se observa que el primer término de la ecuación (3.2-5) puede reescribirse como  $\beta' RA$ . Del mismo modo en el segundo término de esta expresión, se identifican los grupos  $Bi$  y  $\alpha'$  descritos en

(3.2-6). Dentro de este término,  $(1 + \Lambda w d_c / 8 \lambda_{er})$  corresponde a  $(1+Bi/4)$ . Finalmente, es posible considerar que la temperatura inicial de la mezcla reaccionante  $T_0$  es la misma que la temperatura en la pared del reactor  $T_w$ , con lo que la ecuación (3.2-5) toma la forma:

$$\frac{dT^*}{dZ^*} = \beta^* RA - \frac{8 Bi \alpha'}{(Bi + 4)} (T^* - 1) \quad (3.2-7)$$

Esta es una ecuación análoga a la obtenida por Beek « al utilizar polinomios de Legendre en su aproximación polinomial para describir la transferencia de calor con el medio. Finlayson « utilizando polinomios de Jacobi, encontró que la resistencia a la transferencia puede expresarse como  $6Bi\alpha'/(Bi+3)$  cambiando (3.2-7) a :

$$\frac{dT^*}{dZ^*} = \beta^* RA - \frac{6 Bi \alpha'}{(Bi + 3)} (T^* - 1) \quad (3.2-8)$$

Las ecuaciones (3.2-1) y (3.2-8) han sido utilizadas en este trabajo para obtener los perfiles de conversión y temperatura axial de cualquier reactor propuesto y conforman el modelo de orden reducido de Finlayson «».

### 3.3 ASPECTOS PRACTICOS DE LAS METODOLOGIAS EMPLEADAS.

#### 3.3.1 VENTAJAS DE LA MODELACION SOBRE EL PRINCIPIO DE SIMILITUD.

El principio de similitud, se constituye como el primer intento de escalamiento no empírico. A pesar de tener sus fundamentos en las ecuaciones de conservación, tiene serias limitaciones. En la sección 3.1 se hizo notar que cualquier metodología que utilizara dicho principio, debía sacrificar alguna similitud para lograr mantener las otras. En el caso de los reactores tubulares de lecho fijo, los fenómenos son de tal complejidad que difícilmente se lograría llegar a un resultado apropiado por medio de ésta metodología.

Tomando como ejemplo un reactor tubular de lecho fijo, en el que se llevara a cabo una reacción de primer orden bajo condiciones de temperatura constante se puede afirmar (2.24) que el escalamiento correcto requerirá que se mantengan constantes tanto el tamaño de la partícula de catalizador, como la profundidad del lecho catalítico, mientras que el área de la sección transversal será multiplicada por el factor de escalamiento. Este caso sencillo, se complica al tomar en cuenta los fenómenos de generación y transferencia de calor que acompañan a la mayoría de las reacciones químicas. El principio de similitud llevaría a la construcción de un reactor formado por tubos idénticos a los de la planta piloto, montados en paralelo y en un

número igual al factor de escalamiento, sujetos a las mismas condiciones de operación que la etapa inicial, lo cual en la práctica resulta inaceptable.

El mismo Danköhler (5) señala algunas desventajas adicionales y recomienda limitar el uso de las metodologías que utilicen el principio de similitud, a factores de escalamiento de dos a cinco veces la producción de la unidad original.

Por todo lo anterior, diversos autores (1,2,14,15,25) coinciden en que las metodologías que involucran la utilización de un modelo matemático, son las que permiten la obtención de resultados positivos en escalamientos complejos.

## CAPITULO IV.

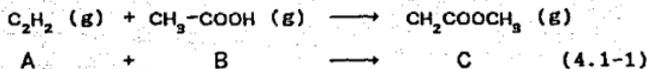
### APLICACION DE LAS METODOLOGIAS DESCRITAS.

#### 4.1 CONSIDERACIONES PRELIMINARES AL ESCALAMIENTO POR MODELACION.

La finalidad de esta sección es brindar los elementos suficientes para ejemplificar el problema del escalamiento de un reactor tubular de lecho fijo utilizado en la obtención de acetato de vinilo. Sin embargo no se pretende cuestionar los trabajos que sirven de base a la metodología del escalamiento.

##### 4.1.1 SISTEMA REACCIONANTE Y EXPRESION CINETICA.

Una de las principales rutas sintéticas comerciales para obtener acetato de vinilo, es la reacción en fase gas entre el acetileno ( $C_2H_2$ ) y el ácido acético ( $CH_3-COOH$ ), catalizada por acetato de zinc sobre carbón activado. Dicha reacción es exotérmica ( $\Delta H_R = -1.057 \pm 5$  KJ/kgmol) y se considera de primer orden con respecto al acetileno, sin presentar reacciones laterales bajo las condiciones de operación usuales (7, 8).



Se ha encontrado la siguiente expresión cinética para esta reacción (7,14):

$$r_A = \frac{4.92 \times 10^6 * \exp(-9160/T) * P_A}{R T} \quad (4.1-2)$$

La inclusión de la ecuación (4.1-2) en modelos pseudo-homogéneos unidimensionales, reporta resultados satisfactorios al comparar los perfiles obtenidos via simulación del reactor con aquellos obtenidos experimentalmente (7). Gracias a esto, se utilizará el modelo pseudo-homogéneo de orden reducido descrito por las ecuaciones (3.2-1) y (3.2-8) en el escalamiento del reactor que se estudia.

#### 4.1.2 DESCRIPCIÓN DE LA ETAPA EXISTENTE.

El punto de partida de este problema está constituido por un reactor tubular de lecho fijo a nivel banco o laboratorio, utilizado por Emig et al. (7, 8, 9) y en el cual se lleva a cabo la reacción de obtención de acetato de vinilo en fase gas (4.1-1).

El reactor a este nivel, consiste de un solo tubo de 0.03 m. de diámetro interno y 1.44 m. de longitud, empacado con partículas de catalizador de acetato de zinc sobre carbón activado como soporte ( $d_p = 0.004$  m.). Varios termopares de Ni-Cr/Ni instalados en

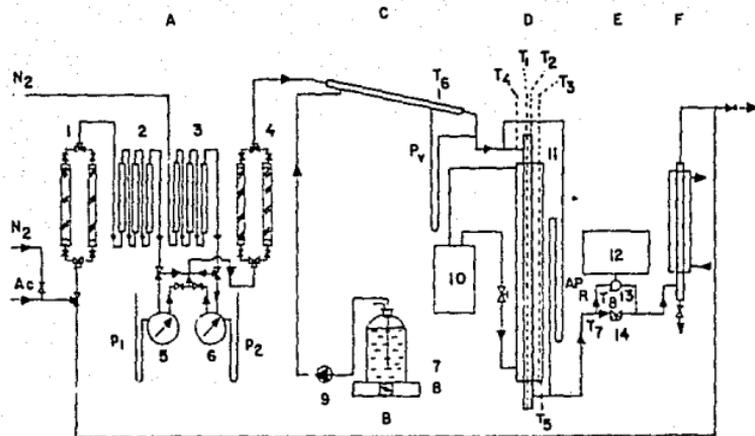
tubos capilares, permiten la determinación experimental de los perfiles de temperatura en las direcciones axial y radial del reactor bajo diferentes condiciones de operación.

En la figura 4 se muestra el diagrama de flujo de la etapa experimental, que consta de las siguientes secciones: A, la sección de dosificación de gas; B, la sección de dosificación de ácido acético; C, el evaporador; D, el reactor; E, la sección de análisis y F, el condensador. Las variables que se manejaron, de acuerdo a la literatura, son: la masa velocidad del reactor  $G$ , la temperatura  $T_0$  y la relación molar de reactivos a la entrada del reactor.

#### 4.13 VALIDACION TEORICA Y APROXIMACION DEL MODELO EMPLEADO.

Bisio et al. (2) mencionan que la validación del modelo comprende tres etapas: 1) Validación de la lógica empleada, 2) Validación del comportamiento del modelo utilizado y 3) Validación de las suposiciones en que se basa el modelo. Sin embargo la validación de cualquier modelo es todo un arte, en el sentido de que no existe una técnica formal para conocer los valores relativos del criterio utilizado en una evaluación. "A decir verdad, no hay nada mejor que la opinión de un experto que ha revisado y utilizado un modelo para describir un proceso" (2). En el caso del modelo de orden reducido que se emplea aquí, se ha mencionado que autores reconocidos (1,7,8,9) lo han utilizado con resultados satisfactorios.

FIGURA 4.



## DIAGRAMA DE FLUJO DE LA ETAPA EXPERIMENTAL

- 1.- COLUMNAS PURIFICADORAS EMPACADAS CON CARBON ACTIVADO
- 2,3- ROTAMETROS
- 4.- COLUMNA DE SECADO EMPACADA CON CLORURO DE CALCIO
- 5,6- MEDIDORES DE GAS
- 7.- ACIDO ACETICO
- 8.- BALANZA
- 9.- BOMBA DOSIFICADORA
- 10.- TERMOSTATO

- 11.- REACTOR CATALITICO
- 12.- CROMATOGRAFO
- 13.- VALVULA DE MUESTREO
- 14.- VALVULA DE AJUSTE DE PATRON

Pese a la no existencia de dicha técnica formal, debe realizarse un análisis estadístico para verificar la validez del modelo, confrontando los resultados predichos vía simulación con con la cantidad suficiente de resultados experimentales y aplicando un criterio propio. Este es el riesgo de la validación.

En el caso que se estudia en este trabajo, se ha llevado a cabo la simulación del sistema acetileno-ácido acético en un reactor tubular de lecho fijo, con el fin de obtener la conversión de acetileno a la salida y el perfil de temperatura en la dirección axial del reactor; sin poderse asegurar la validez del modelo, pues los resultados experimentales obtenidos por Emig et al. en un reactor a nivel banco (6), no son suficientes para calcular las medidas de dispersión necesarias en un análisis estadístico riguroso. Por lo anterior, sólo puede hablarse de una aproximación del modelo al sistema experimental, bajo unas condiciones de operación dadas.

El modelo de orden reducido de Finlayson (6), predice un valor de conversión de ácido acético a la salida  $X_{HAC} = 0.7750$  contra el valor reportado de  $X_{HAC} = 0.7800$ , presentando un error porcentual  $(\Delta X/X_{rep} * 100)$  de 0.6410%, con lo que se afirma que el modelo cumple para ese punto, aunque se desconozcan los resultados experimentales a lo largo del reactor. En cuanto al perfil de temperatura, éste mostro un leve un corrimiento con respecto a los resultados de Emig et al., obteniéndose una temperatura máxima  $T = 474.25$  °K en una longitud dimensional  $Z = 0.36$  m, contra  $T = 474.8$

$^{\circ}\text{K}$  en  $Z = 0.48 \text{ m}$ . La comparación de estos resultados se presenta en la Figura 5. Todo lo anterior permite decir que el modelo de orden reducido, representa de manera aproximada pero limitada, a el sistema experimental.

#### 4.14 BASES DE DISEÑO.

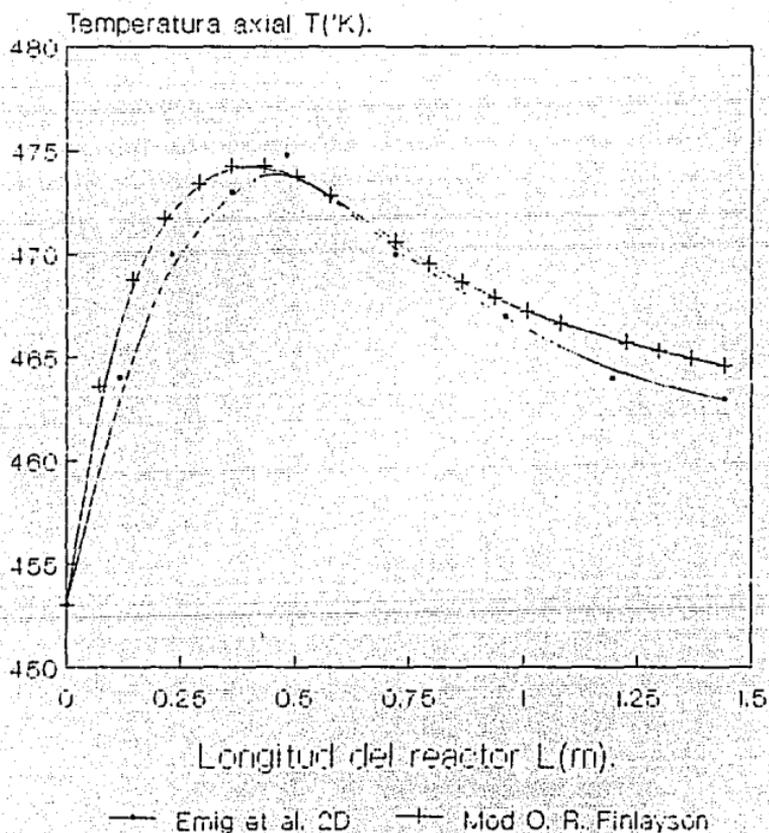
Se requiere efectuar el escalamiento del reactor tubular de lecho fijo anteriormente descrito. El aumento en la producción de la unidad piloto será de 500 veces con respecto a la unidad en nivel banco, es decir, la producción del reactor en planta piloto será de 2,275  $\text{kg}/\text{día}$  de Acetato de Vinilo.

Las condiciones de operación del reactor en la planta piloto, y los datos necesarios para efectuar el escalamiento, se dan a en las tablas 4 y 5.

TABLA 4.

OPERACION DEL REACTOR.	
PRESION DE OPERACION.	$P_{op} = 1 \text{ atmósfera aprox.}$
TEMPERATURA DE LA PARED.	$T_w = 453^{\circ}\text{K.}$
TEMPERATURA MAX. PERMISIBLE.	$T_{max} = 483^{\circ}\text{K.}$
CONVERSIONES FINALES.	$X_A = 31.2\% \quad X_B = 78\%$

Figura 5.  
COMPARACION DE LOS PERFILES DE  
TEMPERATURA PREDICHOS VIA SIMULACION.



PRODUCC. ACETATO DE VINILO.  
 $N_{ac}/N_{Hac} = 2.5$      $x_{ac} = 81.2\%$   
 $P_{oper} = 1 \text{ ata.}$

TABLA 4. (CONTINUACION).

CONDICIONES DE LA ALIMENTACION.	
FLUJO MASICO.	$W_T = 176.8990 \text{ Kg/hr.}$
TEMPERATURA DE ALIMENTACION.	$T_0 = 453 \text{ }^\circ\text{K.}$
RELACION MOLAR ACETILENO/A. ACRTICO	$= 2.5 : 1$
FRACCION MOL DE ACETILENO.	$y_{A0} = 0.7143$
PESO MOLECULAR PROMEDIO.	$\bar{M} = 35.7141 \text{ kg/kgmol.}$

TABLA 5.

PROPIEDADES TERMOFISICAS Y DE TRANSPORTE.	
CAPACIDAD CALORIFICA.	$C_{pA} = 1.7 \text{ KJ/kg }^\circ\text{K.}$
DENSIDAD DEL GAS.	$\rho_g = 1.1056 \text{ kg/m}^3.$
VISCOSIDAD.	$\mu = 1.45 \times 10^{-5} \text{ kg/ms.}$
CONDUCTIVIDAD TERMICA.	$k_g = 3.85 \times 10^{-2} \text{ J/m}^2\text{s}(\text{ }^\circ\text{K/m}).$

#### 4.15 CRITERIOS DE DISEÑO.

- 1) El reactor opera a régimen permanente.
- 2) Para asegurar flujo tapón, debe cumplirse  $L/d_t \geq 50$  (20).
- 3) Los efectos difusionales son despreciables, siempre y cuando se presente un régimen de flujo turbulento (11,12,16,20).

4) Gracias a la relación molar que se maneja, se considera que la reacción es de primer orden con respecto al acetileno, sin presentarse reacciones laterales bajo las condiciones de operación dadas.

5) Debe tomarse en cuenta el cambio total en el número de moles, es decir el factor de expansión  $\epsilon$ .

6) Las propiedades termodinámicas y de transporte se consideran constantes en un intervalo de temperatura de 30 °K.

7) La temperatura de la pared del reactor se mantiene constante.

8) La caída de presión a lo largo del reactor se debe únicamente a las pérdidas por fricción del fluido con las partículas del lecho, debiendo ser ésta menor a 0.70306 Kg/cm<sup>2</sup>.

## 4.2 SECUENCIA Y DECISIONES DE CALCULO.

En esta sección se ilustran los pasos a seguir dentro de una metodología tendiente a resolver el problema del escalamiento de un reactor determinado.

### 4.2.1 PREDIMENSIONAMIENTO Y FLUJO DE FLUIDOS.

De acuerdo con las bases de diseño, el flujo de alimentación al reactor es  $W_T = 176.7141$  kg tot/hr. Esta corriente, en términos de flujo molar es:

$$F_T = W_T/\bar{M} \quad (4.2-1)$$

con lo que  $F_T = 4.9480 \text{ kgmol tot/hr}$ , los cuales se dividen siguiendo la relación:

$$F_i = F_T y_{i0} \quad (4.2-2)$$

De aquí que  $F_A = (.7143) * (4.9480 \text{ kgmol/hr}) = 3.5343 \text{ kgmol A/hr}$  y análogamente,  $F_B = 1.4137 \text{ kgmol B/hr}$ . La distribución másica de la corriente de alimentación puede hacerse utilizando (4.2-1) con las cantidades correspondientes a cada componente, así  $W_A = 91.8936 \text{ kg A/hr}$  y  $W_B = 84.8220 \text{ kg B/hr}$ .

Considerando la posibilidad de utilizar un reactor multitubular en el cual se divida el flujo en partes iguales, la ecuación (4.2-1) puede reescribirse como:

$$F_T = W_T / (\bar{M} n_t) \quad (4.2-3)$$

Una vez que se conoce la distribución de los reactivos en la mezcla de alimentación, se procede a calcular el flujo volumétrico total por medio de la ecuación del gas ideal. Esto es posible gracias a que el fluido se encuentra en fase gas con una baja presión de operación.

$$P V = n R T \quad (4.2-4)$$

que de manera modificada es:

$$P G_v = F_T R T \quad (4.2-5)$$

La substitución de los valores respectivos en (4.2-5), permite obtener el gasto volumétrico total:

$$G_v = (4.9480 \text{ kgmol/hr})(0.082 \text{ atm m}^3/\text{kgmol } ^\circ\text{K})(453^\circ\text{K})/(1 \text{ atm})$$

$$G_v = 183.7984 \text{ m}^3/\text{hr} = .05105 \text{ m}^3/\text{s}$$

Aquí se vuelve necesario proponer el diámetro del reactor, para determinar el área de flujo y con ello el régimen hidrodinámico. La longitud del reactor también debe ser propuesta, pues a pesar de que las ecuaciones del modelo de orden reducido (3.2-1) y (3.2-8) manejan como variable independiente a la longitud adimensional, debe definirse una longitud dimensional para el cálculo de ciertos parámetros. El área de flujo es:

$$A = \frac{\pi (d_t^2)}{4} \quad (4.2-6)$$

Para un reactor constituido por un sólo tubo de acero con diámetro nominal de 6 pulgadas, el área de flujo es  $A = \pi (.1540 \text{ m})^2/4 = .01863 \text{ m}^2$ .

El siguiente paso es calcular la velocidad superficial y la masa velocidad total por medio de:

$$u_s = \frac{G_v}{A} \quad (4.2-7)$$

$$G_r = \frac{F_r \bar{H}}{A} \quad (4.2-8)$$

que para los valores correspondientes son  $u_s = 2.7402 \text{ m/s}$  y  $G_r = 2.6348 \text{ kg/m}^2\text{s}$ .

El número de Reynolds para tubos empacados se define como:

$$Re_p = d_p G_r / \mu \quad (4.2-9)$$

substituyendo se tiene:

$$Re_p = \frac{(.004\text{m})(2.6348 \text{ kg/m}^2\text{s})}{(1.4 \times 10^{-5} \text{ kg/ms})} = 752.8$$

Existe una relación directa entre el régimen de flujo y la transferencia de calor, la cual mejora notablemente al presentarse el flujo turbulento, que en reactores empacados con partículas de catalizador se manifiesta cuando el número de Reynolds de partícula  $Re_p$  adopta valores mayores a 100. Froment describe una zona de transición de flujo para el intervalo de valores  $10 \leq Re_p \leq 100$  (2).

#### 4.2.2 TRANSFERENCIA DE CALOR.

Como se mencionó en el capítulo anterior, la conductividad térmica efectiva en la dirección radial, así como el coeficiente de transferencia de calor correspondiente a la película adyacente a la pared interna del reactor, se pueden obtener mediante correlaciones experimentales que muestran a ambas magnitudes como una función del  $Re_p$ . Para el reactor en cuestión, la literatura presenta las siguientes correlaciones (3):

$$\begin{aligned} \lambda_{er} &= 3.6053 \times 10^{-6} (Re_p) + 4.4567 \times 10^{-4} \quad [=] \quad \text{KJ/ms}^\circ\text{K} \\ \lambda_w &= 8.7585 \times 10^{-4} (Re_p) + .0342 \quad [=] \quad \text{KJ/m}^2\text{s}^\circ\text{K} \end{aligned} \quad (4.2-10)$$

Con un valor de  $Re_p = 752.8$ , se tiene  $\lambda_{er} = .0031 \text{ KJ/ms}^\circ\text{K}$  y  $\lambda_w = .6932 \text{ KJ/m}^2\text{s}^\circ\text{K}$ . El número de Biot que representa la resistencia a la transferencia de calor en la película adyacente a la pared,

$$Bi = \frac{\lambda_w d_t}{2 \lambda_{er}} \quad (4.2-11)$$

adopta el valor de 16.9058, que indica poca resistencia a la transferencia en esta zona.

Finalmente se calcula el parámetro  $\alpha'$ , que involucra la longitud dimensional del reactor:

$$\alpha' = \frac{l d_p}{r_t^2 Pe_h} = \frac{4 l d_p}{d_t^2 \left[ \frac{G d_p C_p}{\lambda_r} \right]} \quad (4.2-12)$$

que para una  $l = 10\text{m}$  toma el valor de  $\alpha' = 1.1890$ .

#### 4.2.3 OBTENCIÓN DE LOS PARÁMETROS INVOLUCRADOS EN LA REACCIÓN QUÍMICA.

La expresión cinética (4.2-1) puede reescribirse en términos de la concentración de A, de manera que sea útil para expresar la variación de la conversión de A con respecto a la longitud del reactor. Esto es, emplear una ecuación para  $r_A$  de la forma:

$$r_{A0} = k_o C_{A0} * (1 - X_A) * \exp(\gamma) \quad (4.2-13)$$

En donde el factor  $\gamma$  es  $(-E_a/RT)$  es decir  $(-9160/T)$  para la expresión cinética propuesta. Utilizando la ecuación (4.2-4) para obtener la concentración de A y substituyendo en (4.2-1), se tiene:

$$r_A = 4.92 \times 10^6 * \exp(\gamma) * C_A \quad (4.2-14)$$

Dentro del reactor, la concentración de A es función de la

conversión de  $\lambda$  y el factor de expansión por cambio en el número de moles:  $C_A = C_{A0} * (1 - X_A) / (1 + \epsilon X_A)$ ; donde  $\epsilon = (\text{moles @ } X_A = 1 - \text{moles @ } X_A = 0) / (\text{moles @ } X_A = 1)$  y que en este caso es  $\epsilon = (2.5 - 3.5) / 2.5 = -0.2857$  :

$$r_A = 4.92 \times 10^{-6} * C_{A0} * (1 - X_A) / (1 - 0.2857 X_A) * \exp(\gamma) \quad (4.2.15)$$

$$C_{A0} = \frac{y_{A0} P}{RT} = \frac{(0.7143) * (1 \text{ atm})}{\left[ \frac{0.082 \text{ atm m}^3}{\text{kmol}^\circ \text{K}} \right] (453 \text{ K})} = 0.0192 \frac{\text{kgmol}^\lambda}{\text{m}^3} \quad (4.2.16)$$

Al substituir el valor numérico de  $C_{A0} = 1.92 \times 10^{-5} \text{ gmol/cm}^3$  en (4.2.15):

$$r_A = 94.464 * (1 - X_A) / (1 - 0.2857 X_A) * \exp(\gamma) \quad [=] \frac{\text{gmol}^\lambda}{\text{cm}^3 \text{ s}} \quad (4.2-17)$$

que presenta la misma forma de la ecuación (4.2-13) y puede ser igualmente útil para calcular la velocidad de reacción inicial a  $T = T_0$ , con un valor de  $\gamma = (-9160/453) = -20.22$  :

$$r_{A0} = (94.464) * \exp(-20.22) = 1.5613 \times 10^{-7} \text{ gmol/cm}^3 \text{ s.}$$

$$r_{A0} = 5.6276 \times 10^{-4} \text{ gmol/cm}^3 \text{ hr.}$$

La velocidad de reacción adimensional utilizada en las ecuaciones (3.2-1) y (3.2-2) se define como  $R_A = r_A / r_{A0}$ , que en términos de la temperatura adimensional  $T^* = T / T_0$  es:

$$R_A = \left[ \frac{1 - X_A}{1 + \epsilon X_A} \right] e^{\gamma - \gamma/T^*} \quad (4.2-18)$$

Para calcular el número de Damköhler I involucrado en la generación de productos a partir de la mezcla reaccionante, es preciso conocer el flux de A,  $G_A = F_A/A = (3.5343 \text{ Kgmol/hr}) / (.01863 \text{ m}^2) = 189.7101 \text{ Kgmol/m}^2\text{hr} = 18.9621 \text{ gmol/cm}^2\text{hr}$  :

$$\beta = r_{A_0} l / G_A \quad (4.2-19)$$

$$\beta = (5.6276 \text{ E } -4 \text{ gmol/cm}^3\text{hr}) * (10\text{m}) / (18.9621 \text{ gmol/cm}^2\text{hr})$$

$$\beta = .02967$$

Finalmente, el número de Damköhler para la generación de calor (II) :

$$\beta' = \frac{(-\Delta H_R) r_{A_0} l (R_A)}{G_T C_p T_0} \quad (4.2-20)$$

de manera evidente se puede expresar como una función de (4.2-19), así que (4.2-20) se transforma en:

$$\beta' = \frac{(y_{A_0})(-\Delta H_R)}{C_p T_0} \beta \quad (4.2-21)$$

que al adoptar los valores numéricos correspondientes, se convierte en una constante independiente de las dimensiones geométricas del reactor:

$$\beta' = 2.75298 \beta \quad (4.2-22)$$

El llevar a cabo una secuencia ordenada de cálculo, permite la estructuración de un programa de cómputo útil en la obtención de los parámetros descritos ésta sección. Dicho programa se lista en el Apéndice 1.

#### 4.2.4 SIMULACION DEL REACTOR TUBULAR DE LECHO FIJO A ESCALA PLANTA PILOTO.

Las ecuaciones de cambio que describen los perfiles de conversión y temperatura a lo largo del reactor manejado en ésta sección son, de acuerdo con (3.2-1) y (3.2-8):

$$\frac{dX_A}{dz} = \beta \left[ \frac{1 - X_A}{1 - 0.2057 X_A} \right] e^{20.22 - 20.22/T^*} \quad (4.2-23)$$

$$\frac{dT^*}{dz} = 2.75296 \left[ \frac{dX_A}{dz} \right] - \left[ \frac{6 Bi \alpha'}{Bi + 3} \right] (T^* - 1) \quad (4.2-24)$$

Las cuáles serán integradas a lo largo del reactor utilizando el método de Runge-Kutta de 4° orden para sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (Apéndice 2), con las siguientes condiciones iniciales:

$$X_A = X_{A0} = 0 \quad T^* = T_0^* \quad \text{en } Z^* = 0$$

De cualquier modo, si la conversión fija en las bases de diseño ( $X_A = 0.3120$ ), no es alcanzada en la longitud propuesta al resolver las ecuaciones (4.2-23) y (4.2-24) para el intervalo  $0 \leq Z^* \leq 1$ , se procede a integrar otro segmento del reactor hasta

obtener la  $X_A$  requerida, tomando nuevos valores para los límites de integración y como condiciones iniciales aquellas resultantes del segmento anterior:

$$X_{A_i} = X_{A_{f(i-1)}} \quad T_i^* = T_{f(i-1)}^* \quad \text{en } Z_i^* = Z_{f(i-1)}^*$$

Los parámetros obtenidos al variar las dimensiones geométricas y el número de tubos, así como los resultados provenientes de la simulación de los reactores propuestos, se presentan en el capítulo V.

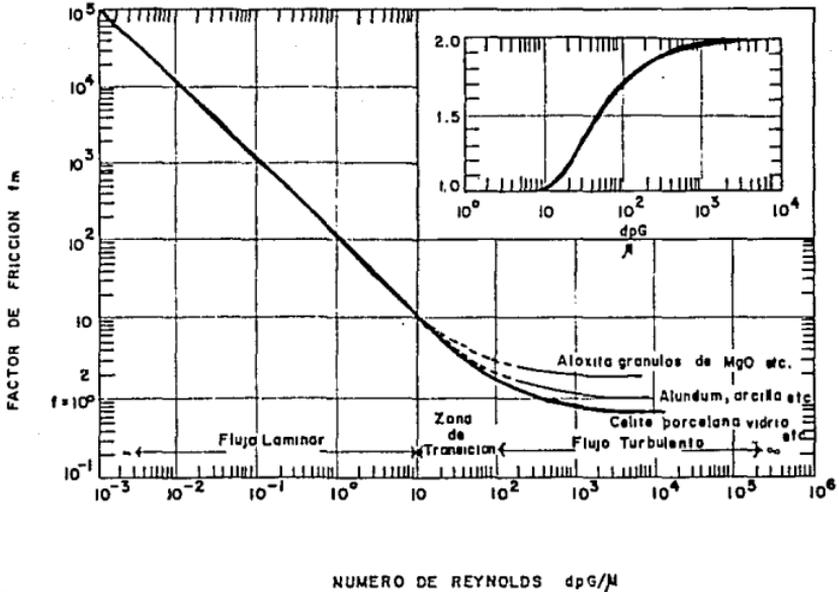
#### 4.25 CAIDA DE PRESION A TRAVES DEL REACTOR.

Una vez que se conoce la longitud del reactor para alcanzar la conversión requerida, se procede a calcular la caída de presión debida a la fricción del fluido con las partículas de catalizador que conforman el lecho fijo. Max Leva propone la siguiente ecuación, válida para condiciones de flujo laminar y turbulento (4.2-18):

$$\frac{\Delta P_T}{\Delta Z} = - \frac{2 f_m G^2 (1-\epsilon)^{3-n}}{d_p g \rho_g \psi^{3-n} \epsilon^3} \quad (4.2-25)$$

El factor de fricción modificado  $f_m$  y la  $n$ -ésima potencia de la ecuación (4.2-25) son función del  $Re_p$ , como se aprecia en la figura 4, en la que además se muestran las zonas de régimen hidrodinámico; mientras que  $\psi$  es el factor de esfericidad de las partículas y  $\epsilon$  la fracción de espacios huecos en el lecho catalítico.

FIGURA 6.



FACTOR DE FRICCIÓN MODIFICADO COMO  
 FUNCIÓN DEL REYNOLDS DE PARTICULA

## CAPITULO V.

### RESULTADOS DE LA APLICACION DE METODOLOGIAS PARA EL ESCALAMIENTO DE R. T. C.

#### 5.1 PARAMETRIZACION Y RESULTADOS DE LA MODELACION DEL REACTOR.

##### 5.1.1 REACTORES PROPUESTOS Y PARAMETRIZACION.

En la metodología para el escalamiento de un reactor tubular de lecho fijo con base en la modelación, se proponen valores para el diámetro y la longitud del equipo, mismos que junto con los parámetros propios del sistema reaccionante ( $Re_p$ ,  $Bi$ ,  $\beta$ ,  $\beta'$ , etc) condicionan el comportamiento del reactor. La simulación permite predecir los perfiles de conversión y temperatura en la dirección axial del reactor propuesto, las bases y criterios de diseño indican si éste reactor se ajusta a las necesidades del problema o dado el caso, que variables pueden manejarse dentro de cierto intervalo y que otras deben mantenerse fijas. Todo esto convierte al escalamiento en un proceso iterativo.

La utilización del modelo de orden reducido en esta metodología, presupone la obtención de ciertos parámetros o grupos adimensionales, que serán utilizados al simular el comportamiento del reactor y que varían al cambiar la magnitud de las dimensiones geométricas propuestas.

En principio se considera un sólo tubo de acero al carbón empacado con partículas de catalizador, cuyo diámetro nominal varía de 5 a 10 pulgadas, incluyendo los valores inexistentes para tubería comercial de 6.5" y 7". Existe la posibilidad de no llegar a la conversión de acetileno especificada en las bases de diseño o encontrar problemas de transferencia de calor en éstos equipos, por lo que se procede a proponer reactores multitubulares. Los valores correspondientes al número de corrientes que maneja cada reactor y su diámetro nominal así como los parámetros involucrados en la simulación se han agrupado en la tabla 6.

#### 5.12 RESULTADOS DE LA SIMULACION.

La solución de las ecuaciones (4.2-23) y (4.2-24), permite conocer la conversión de acetileno y la temperatura en cada punto de la dirección longitudinal de los diferentes reactores propuestos. En la tabla 7 se muestran los valores del número de tubos y el diámetro nominal del reactor propuesto, asociados a los valores correspondientes del número de Reynolds de partícula,  $Re_p$ ; la longitud final necesaria para obtener una conversión de acetileno  $X_A = 31.2\%$ ,  $Z_f$ ; la relación entre la longitud final y el diámetro interno del reactor,  $l/d_t$ ; el volumen de catalizador requerido,  $V_{cat.}$ ; la diferencia entre la temperatura máxima en la trayectoria longitudinal y la temperatura inicial,  $\Delta T_{max}$  y la caída de presión a lo largo del lecho catalítico,  $\Delta P_T$ .

TABLA d.

PARAMETRIZACION.					
dt (in)	Ga (gmol/cm2h)	Beta	Beta'	Bi	Alfa'
nt = 1					
5	27.3847	.02055	.06657	14.4828	1.6427
6	18.9621	.02967	.05657	16.9058	1.1890
6.5 *	16.5090	.034089	.09380	17.8763	1.0569
7 *	14.2348	.03953	.10884	18.9440	0.9344
8	10.9505	.05139	.14148	20.8926	0.7575
10	6.9477	.08100	.22290	24.3664	0.5419
nt = 4					
5	6.8558	.08208	.22598	12.2342	2.1481
nt = 5					
4	8.6506	.06505	.17910	10.1455	3.1685
nt=10					
3	7.4103	.07594	.20900	7.5490	5.6690
3.5	5.5409	.10150	.27960	8.2514	4.6621
4	4.3083	.13060	.35960	8.8501	3.9983

\* No existente como tubería comercial.

TABLA 6. (CONTINUACION).

PARAMETRIZACION.					
dt (in)	Ga (gmol/cm <sup>2</sup> h)	Beta	Beta'	Bi	Alfa'
nt= 15					
3	4.9402	.11392	.313614	6.9613	6.5079
3.5	3.6939	.15235	.41940	7.5204	5.5010
4	2.8722	.19593	.53941	7.9953	4.8372
nt= 20					
3	3.7052	.15180	.41815	6.5078	7.3468
3.5	2.7704	.20314	.55920	6.9828	6.3399
nt= 25					
2.5	4.5768	.12296	.33851	5.5070	10.3572
3	2.9641	.18980	.52269	6.1473	8.1857
nt= 30					
2	5.4422	.10340	.28468	4.7888	13.8270
2.5	3.8140	.14755	.40621	5.2746	11.1960
3	2.4701	.22780	.62720	5.8538	9.0246

TABLA 6. (CONTINUACION).

PARAMETRIZACION.					
dt (ln)	Ga (gmol/cm <sup>2</sup> h)	Beta	Beta'	Bi	Alfa'
nt= 35					
2	4.6647	.12060	.33210	4.6301	14.6650
2.5	3.2691	.17215	.47391	5.0740	12.0350
nt= 40					
2	4.0811	.13788	.37952	4.4886	15.5040
2.5	2.8605	.19670	.54160	4.9008	12.8740
nt= 45					
2	3.6281	.15511	.42700	4.3616	16.3437
2.5	2.5426	.22133	.60930	4.7482	13.7129
nt= 50					
2	3.2653	.17235	.47440	4.2470	17.1826
2.5	2.2884	.24593	.67703	4.6132	14.5518

TABLA 7.

RESULTADOS DE LA SIMULACION.						
dt (in)	Rep	Zf (m)	l/dt	Vcat. (m3)	DTmax. (°K)	DeltaP. (kg/cm2)
nt = 1						
5	1086.6	*	*	*	3.634	*
6	752.5	*	*	*	8.61	*
6.5	655.1	*	*	*	13.11	*
7	564.8	30	168.7	.7446	33.87	>2
8	434.5	*,**	*,**	*,**	90	*,**
10	275.7	*,**	*,**	*,**	105	*,**
nt = 4						
5	272.1	18	140.5	.9274	25.86	.6598
nt = 5						
4	343.2	40	391.4	1.6374	7.44	>2
nt = 10						
3	294.0	39	500	1.8599	4.70	1.8377
3.5	219.8	25.5	249.6	1.4350	8.75	.8118
4	170.9	14.5	141.8	1.1871	18.59	.3257

\* No se alcanza la conversión requerida a los 30 m.  
 \*\* Disparo del reactor.

TABLA 7. (CONTINUACION).

RESULTADOS DE LA SIMULACION.						
dt (in)	Rep	Zf (m)	l/dt	Vcat. (m3)	DTmax. (°K)	DeltaP. (kg/cm2)
nt = 15						
3	196.0	25	320.8	1.7880	6.85	.7066
3.5	146.6	14.5	160.9	1.3872	13.87	.2518
4	113.9	*,**	*,**	*,**	50	*,**
nt = 20						
3	147.1	17.0	218.1	1.6214	8.96	.2971
3.5	109.9	8.5	94.3	1.0843	21.61	.0919
nt = 25						
2.5	181.6	24.5	390.7	1.8914	4.57	.6078
3	117.6	12.5	160.4	1.4903	11.94	.1531
nt = 30						
2	215.9	31.0	590.4	2.0120	2.83	.9521
2.5	151.3	20.0	318.9	1.8528	5.32	.3703
3	98.0	10.0	128.32	1.4307	13.46	.0876

\* No se alcanza la conversión requerida a los 30 m.

\*\* Disparo del reactor.

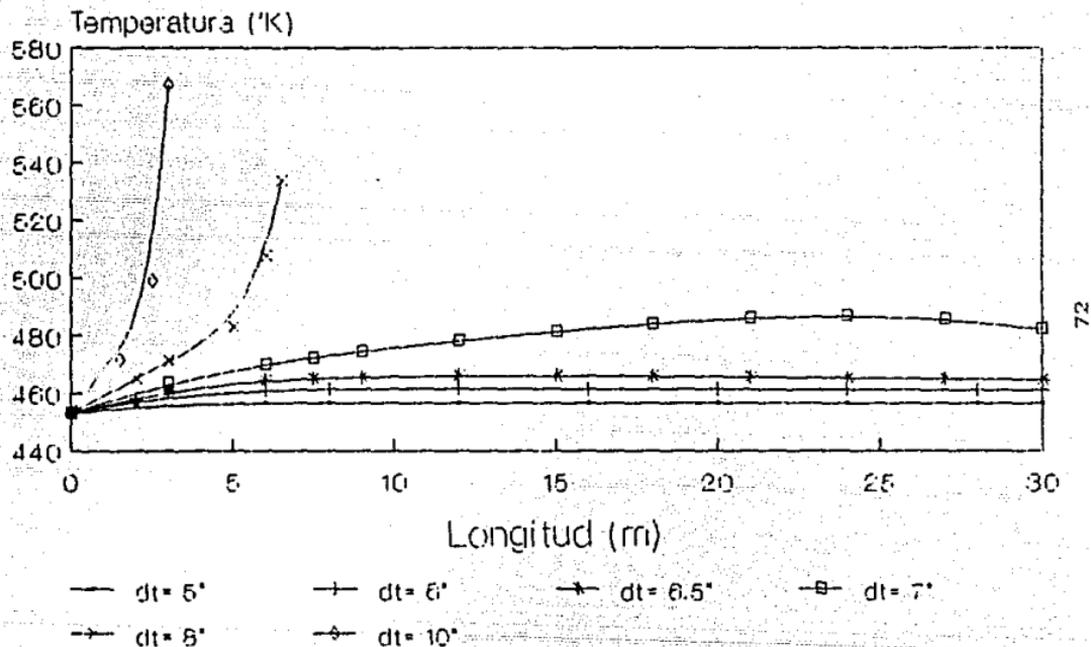
TABLA 7. CONTINUACION.

RESULTADOS DE LA SIMULACION.						
dt (in)	Rep	Zf (m)	l/dt	Vcat. (m3)	Dtmax. (°K)	DeltaP. (kg/cm2)
nt = 35						
2	185.1	26.0	495.2	1.9692	3.20	.6084
2.5	129.7	16.5	263.1	1.7833	6.03	.2256
nt = 40						
2	162.0	22.5	428.6	1.9476	3.55	.4210
2.5	113.5	14.0	223.2	1.7293	6.69	.1596
nt = 45						
2	144.0	20.0	380.9	1.9476	3.88	.3351
2.5	100.9	12.5	199.3	1.7370	7.34	.1161
nt = 50						
2	129.6	17.5	333.3	1.8935	4.21	.2387
2.5	90.8	11.0	175.40	1.6984	7.95	.0911

En la mayoría de los reactores constituidos por un sólo tubo, no se llega a la conversión estipulada en las bases de diseño, con excepción de aquel con diámetro de 7", que alcanza la conversión requerida en una longitud de 30 m. Para los reactores de mayor diámetro (8 y 10"), resulta imposible calcular los perfiles de conversión y temperatura completos, pues presentan lo que se conoce como disparo del reactor, ésto es un aumento súbito de la temperatura fuera de los límites de operación normales (12.19). El comportamiento térmico de los reactores unitubulares se representa gráficamente en la figura 7.

El resto de los reactores propuestos son multitubulares y al efectuar la simulación de los mismos se obtienen valores de conversión y temperatura aceptables, exceptuándose al reactor dividido en 15 corrientes con diámetro nominal de 4", que exhibe un comportamiento similar al descrito previamente.

Figura 7.  
EFECTO DEL DIAMETRO DEL REACTOR  
EN LA TEMPERATURA LONGITUDINAL.



dt = diametro nominal, (in).  
 $G_v = 193.7995 \text{ m}^3/\text{h}$ .  
 (1 corriente)

## 5.2 CRITERIOS PARA LA ELECCION DEL REACTOR ADECUADO.

Debido a la gran variedad de alternativas para el prediseño de la unidad escalada, es necesario tomar en cuenta ciertos elementos de juicio adicionales a las bases y criterios de diseño, para elegir un reactor cuya construcción sea viable y de operación segura.

### 5.2.1 REGIMEN HIDRODINAMICO Y TRANSFERENCIA DE CALOR.

En éste apartado deben tomarse en cuenta dos puntos: 1) el criterio de diseño que establece la necesidad de operar bajo un régimen de flujo turbulento para evitar efectos difusionales adversos, mejorando la transferencia de calor del lecho catalítico y, 2) la temperatura máxima de operación establecida en las bases de diseño.

En lo referente al régimen hidrodinámico, es preciso que el número de Reynolds de partícula adopte valores mayores a 100, mientras que para la temperatura máxima a lo largo del reactor, cualquier alternativa de prediseño que exceda  $30^{\circ}\text{K}$  de  $\Delta T_{\text{max}}$  resulta inaceptable. En la tabla se muestran las alternativas que se descartan por alguno de éstos conceptos.

TABLA 8.

ALTERNATIVAS DESCARTADAS POR  $Re_p \propto \Delta T_{max}$ .

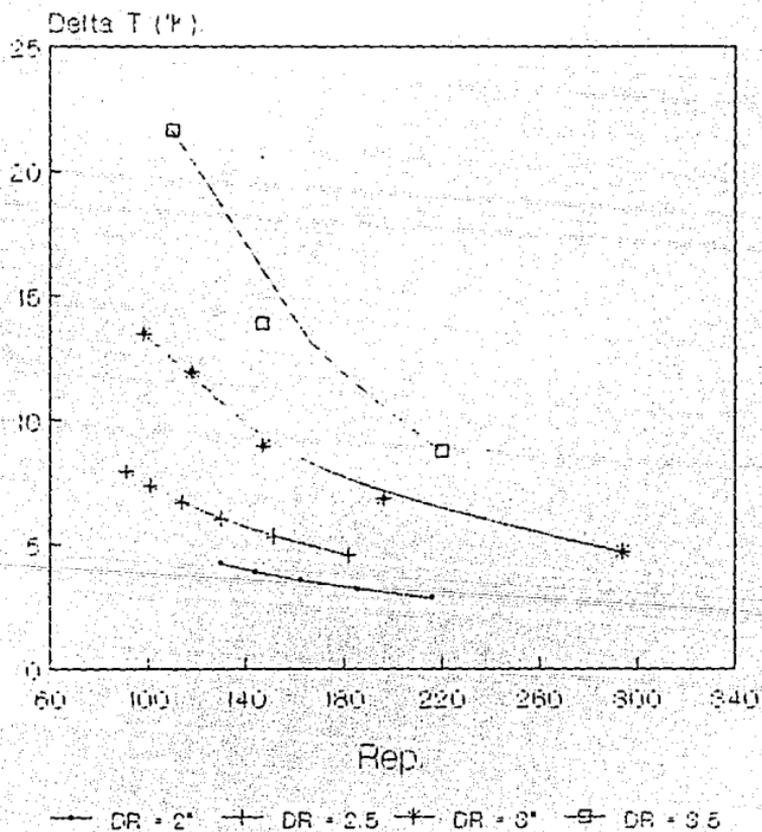
nt	$d_t$ (in)	$Re_p$	$\Delta T_{max}$ (°K)
1	7	564.8	33.87
1	8	434.5	DISPARO
1	10	275.7	DISPARO
15	4	113.9	DISPARO
30	3	98.0	13.46
50	2.5	90.8	7.95

En la figura 8, se aprecia que el  $Re_p$  sólo puede correlacionarse manteniendo el diámetro del reactor fijo para un número de tubos variable o viceversa. Así al aumentar el número de divisiones del flujo para un reactor de diámetro dado, se verifica una reducción proporcional del valor del Reynolds de partícula, que afecta de manera directa la eficacia de la transferencia de calor, reflejándose todo esto en un mayor  $\Delta T$  longitudinal.

5.2.2 CAIDA DE PRESION A LO LARGO DEL LECHO CATALITICO.

Una vez más se empleará un criterio de diseño para eliminar algunas de las alternativas menos favorables. La caída de presión debida a las pérdidas por fricción con las partículas de

Figura 8.  
EFECTO DEL REGIMEN HIDRODINAMICO  
SOBRE LA TRANSFERENCIA DE CALOR.



$T_c = 452^\circ \text{F}$   
 $\gamma_a = 0.312$   
 $\text{Rep} = 66 \text{ G/Mu}$

catalizador, no debe exceder  $0.70306 \text{ kg/cm}^2$  (10 psi), por lo que cualquier caso que presente una  $\Delta P_T$  mayor debe desecharse. La utilización de la correlación de Leva para reactores de lecho fijo, fácilmente programable (Apéndice 1), proporciona los resultados que se aprecian en la tabla 7 y que se detallan a continuación:

TABLA 9.

REACTORES QUE EXCEDEN LA CAIDA DE PRESION PERMISIBLE.

nt	$d_t$ (in)	$\Delta P_T$ ( $\text{kg/cm}^2$ )
1	7	4.3337
5	4	2.2524
10	3	1.8377
10	3.5	0.8118
15	3	0.7066
30	2	0.09521

Hasta aquí se han revisado ciertos criterios acordados con la factibilidad de operación del reactor a nivel planta piloto. Sin embargo, se ha señalado que el escalamiento está sujeto tanto a limitaciones físicas, tales como el tamaño final del equipo, como a los factores económicos inherentes a la construcción y operación del mismo (4.2.24.25). Dentro de este último rubro, se ha efectuado un análisis general de la inversión fija por concepto de tubería y cantidad de catalizador requerido.

La simulación de los reactores propuestos indica la longitud necesaria para alcanzar la conversión de acetileno estipulada en las bases de diseño, de aquí que pueda calcularse el volumen de catalizador requerido para empacar la zona de reacción del equipo. El punto es meramente económico, pues la cantidad de tubería de acero y de catalizador empleados en la construcción del reactor, corresponden de manera directamente proporcional a la inversión fija que deberá efectuarse al construir físicamente el equipo.

El precio por metro lineal de tubería de acero al carbón sin costura, cédula 40 estándar, varía de acuerdo al diámetro nominal; mientras que el precio del catalizador con  $\rho_p = 1840 \text{ kg/m}^3$ , se mantiene en \$1.60 U.S. dls./lb durante Agosto de 1990. El costo asociado por concepto de tubería y cantidad de catalizador empleado, se detalla en la tabla 10 (26).

TABLA 10.

## INVERSION FIJA POR CONCEPTO DE TUBERIA Y VOL. DE CATALIZADOR.

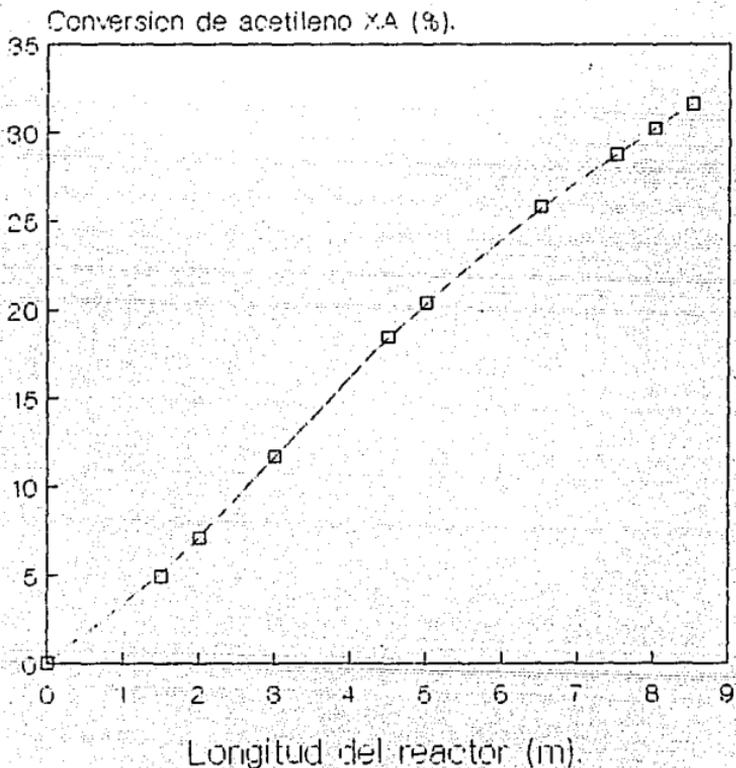
$nt \times d_t$	$l_T$	COSTO DE	VOLUMEN	COSTO DEL	INVERSION
	$nt \times Z_f$	TUBERIA	DE CAT.	CATALIZADOR	FIJA.
	(m)	( $\$$ )	( $m^3$ )	( $\$$ )	( $\$$ )
4x 5"	72	8'190,384	0. 0274	17'450,250	25'580,634
10x4"	145	10'201,055	1. 1871	22'948,968	32'640,323
15x3 $\frac{1}{2}$ "	217. 5	17'285,505	1. 3872	26'115,454	43'401,040
20x3"	340	16'043,000	1. 6214	30'524,508	47'468,408
20x3 $\frac{1}{2}$ "	170	13'510,580	1. 0843	20'419,053	33'029,633
25x2 $\frac{1}{2}$ "	612. 5	23'357,075	1. 8014	35'607,533	58'064,608
25x3"	312. 5	15'573,438	1. 4003	28'056,417	43'620,855
30x2 $\frac{1}{2}$ "	600	22'880,400	1. 8528	34'880,840	57'761,240
35x2"	010	23'417,030	1. 0002	37'072,108	60'489,228
35x2 $\frac{1}{2}$ "	577. 5	22'022,385	1. 7833	33'572,441	55'504,826
40x2"	880	22'645,040	1. 0476	36'655,556	59'310,596
40x2 $\frac{1}{2}$ "	560	21'355,040	1. 7203	32'555,836	53'910,876
45x2"	000	23'150,700	1. 0476	36'655,556	59'825,256
45x2 $\frac{1}{2}$ "	562. 5	21'450,375	1. 7370	32'700,706	54'151,171
50x2"	875	22'516,375	1. 8035	35'647,068	58'163,443

En todos los casos, se aprecia que el costo asociado a la cantidad de catalizador requerido, es mayor que el de la tubería y si se toma en cuenta el hecho de que se debe reemplazar periódicamente el catalizador, el costo de tubería pasa a un segundo plano.

Conviene analizar tres alternativas para el prediseño de la unidad escalada, éstas son: 1) el reactor dividido en 4 corrientes con tubos de 5" de diámetro nominal, 2) el reactor dividido en 10 corrientes con tubos de 4" y 3) el reactor de 20 corrientes con tubos de 3  $\frac{1}{2}$ ". Estos tres equipos cumplen con los criterios técnicos de los apartados anteriores y son aquellos que requieren una menor cantidad de catalizador para empacar la zona de reacción y por ende una menor inversión.

El tamaño final de la unidad escalada, también afecta la decisión de cuál alternativa es más viable para su construcción. Un equipo de 20 metros de longitud, podría resultar demasiado largo en comparación con uno de 10 metros, es decir que presentaría una mayor limitación física. Lo anterior indica que existe un compromiso entre las dimensiones finales del equipo y la inversión fija requerida, de aquí que se tome como mejor propuesta para el prediseño del reactor a escala planta piloto, el equipo constituido por 20 tubos de 3  $\frac{1}{2}$ " de diámetro nominal y 8.5 m de longitud. Los perfiles predichos para la conversión y la temperatura en la dirección longitudinal del reactor, se muestran en las figuras 9 y 10.

Figura 9.  
PERFIL DE CONVERSION DEL REACTOR  
MULTITUBULAR PROPUESTO.



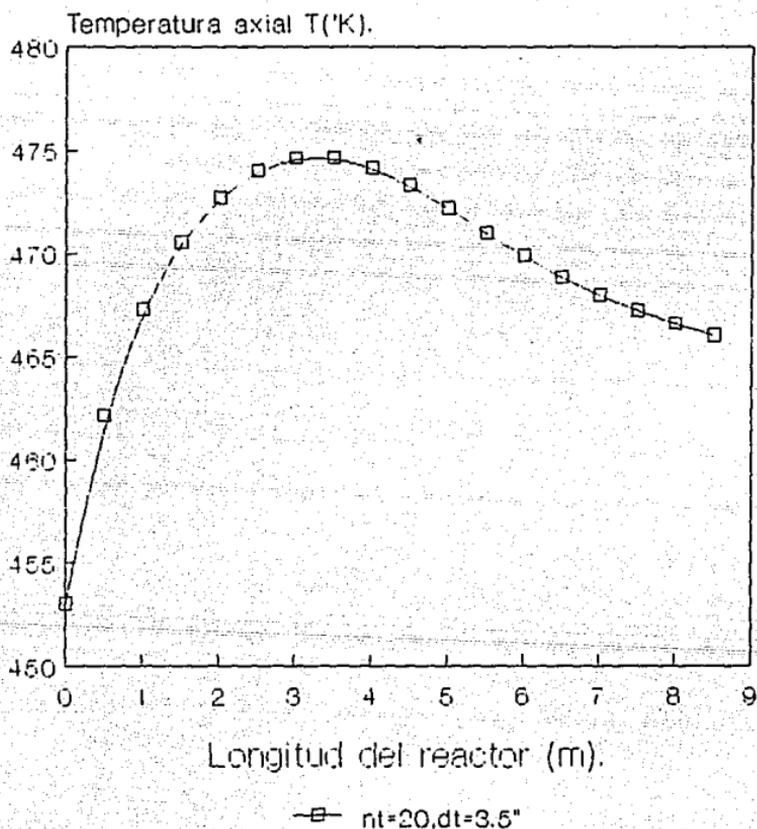
—□—  $n_t=20, d_t=3.5''$

20 corrientes.

$X_A=31.2\%$ ,  $n_A/n_B=2.5$

$T_0 = 453^\circ\text{K}$ ,  $P = 1 \text{ atm}$ .

Figura 10.  
PERFIL DE TEMPERATURA DEL REACTOR  
MULTITUBULAR PROPUESTO.



$n_A/n_B = 2.5$   
 $x_{A1} = 31.2\%$   
 $T_0 = 453\text{ K}, P = 1\text{ atm.}$

### 5.3. ESCALAMIENTO POR SIMILITUD.

#### 5.3.1 PROPUESTA BASADA EN EL SEGUNDO CASO DE SIMILITUD PARCIAL.

Al descartar la similitud hidrodinámica y considerar que se desprende la misma cantidad de calor en cualquier sección transversal del reactor en ambas escalas, surge el segundo caso de similitud parcial. Las condiciones para que éste caso se cumpla, han sido explicadas en el capítulo 3, donde se obtuvieron las expresiones (3.1-27) y (3.1-29), mismas que se utilizan a continuación.

El diámetro del reactor resultante del escalamiento, para valores representativos del exponente  $m$  de 0.8 a 0.9, estará en el intervalo comprendido por lo siguientes valores:

$$d_{t(H)} = (0.05 \text{ m}) * (500)^{0.8/(2+2*0.8)} = 0.1989 \text{ m}$$

$$d_{t(H)} = (0.05 \text{ m}) * (500)^{0.9/(2+2*0.9)} = 0.2178 \text{ m}$$

y la longitud propuesta para el sistema escalado, adoptará cualquier valor dentro del intervalo:

$$37.9204 \text{ m} \leq l_{(H)} \leq 45.4768 \text{ m}$$

Sin embargo, ante la imposibilidad de manejar cualquier valor que no sea el del diámetro nominal, se toma un valor de 8" para el

diámetro del reactor escalado. De aquí que no sea necesario efectuar la simulación del reactor para posteriormente verificar los criterios de elección, pues éste equipo ya ha sido propuesto y descartado en la primera sección de éste capítulo. Cabe mencionar que los valores de longitud resultantes de ésta metodología, no concuerdan en ningún momento con los obtenidos vía modelación del reactor.

## CONCLUSIONES.

Con base en lo expuesto en éste trabajo, se puede concluir que:

- 1) Existen dos metodologías tendientes a resolver el problema del escalamiento de un reactor tubular de lecho fijo y son a saber: la basada en el principio de similitud y la que involucra la modelación del reactor.
- 2) La metodología con base en el principio de similitud, presenta serias limitaciones en su aplicación, por lo que no se recomienda su utilización cuando el factor de escalamiento adopte valores mayores a 5 veces la capacidad de la unidad original.
- 3) La metodología que involucra la modelación del reactor, puede manejarse como un proceso iterativo sujeto a ciertas condiciones, tales como las bases de diseño y criterios de elección. Esta metodología brindará resultados satisfactorios en la medida en que se utilicen un modelo y una expresión cinética que describan de manera adecuada el comportamiento del reactor en cuestión.
- 4) Debido a su mayor aplicación y flexibilidad, la metodología por modelación es superior a la que utiliza el principio de

similitud, pudiendo variar no sólo las dimensiones geométricas, sino el arreglo del reactor escalado y prediciendo el punto de disparo del reactor.

- 5) El modelo de orden reducido de Finlayson, utilizado en la metodología por modelación del reactor, evita la utilización de modelos más complejos al describir de manera aproximada el comportamiento del reactor tubular de lecho fijo, utilizado en la producción de acetato de vinilo, por lo que se le considera apto para fines de prediseño.
  
- 6) La mejor alternativa para el prediseño del reactor tubular de lecho fijo descrito en éste trabajo, se obtiene a partir de la metodología con base en la modelación del reactor y cumple con los criterios referentes al régimen hidrodinámico, transferencia de calor, caída de presión, limitaciones físicas y factores económicos, por lo que su construcción y operación segura son viables.

## RECOMENDACIONES.

Con la finalidad de extender los alcances de este trabajo, se recomienda:

- 1) Efectuar un estudio de sensibilidad paramétrica del sistema, para obtener un intervalo de condiciones de operación de la unidad escalada.
- 2) Comparar los resultados obtenidos al escalar el reactor utilizando el modelo de Finlayson, con los que se obtendrían al utilizar un modelo bidimensional más complejo.
- 3) Simular el perfil de temperatura del medio de enfriamiento del reactor, para obtener un criterio de elección de la mejor alternativa para el prediseño de la unidad escalada, a partir de la cantidad de refrigerante involucrada; aproximando el problema a la realidad.

## BIBLIOGRAFIA.

- (1) Beek, J.; Singer, E.  
"A Procedure for Scaling-up a catalytic reactor".  
Chemical Engineering Progress, 47 (10), (1951).
- (2) Bisio, A. et al.  
"Scale-up of Chemical Process".  
John Wiley & Sons, U. S. A. (1985).
- (3) Carberry, J. J.  
"Chemical and Catalytic Reaction Engineering".  
Mc Graw Hill Book Company, U. S. A. (1976).
- (4) Carberry, J. J.; White D.  
"On the role of transport limitations in experimental catalytic reactors".  
Industrial and Engineering Chemistry, 61 (7), (1969).
- (5) Damköhler, G.; Churchill, S. W. (editor).  
"Influence of diffusion, fluid flow, and heat transport on the yield in chemical reactors".  
International Chemical Engineering, 28 (1), (1988).
- (6) Doraiswamy L. K. et al.  
"Heterogeneous Reactions: Analysis, Examples and Reactor Design". Vol. I.  
John Wiley & Sons, U. S. A. (1984).

- (7) El-Sawi, M. et al.  
"A Study of the kinetics of Vinyl Acetate Synthesis".  
The Chemical Engineering Journal, 13 (3), (1977).
- (8) El-Sawi, M. et al.  
"Runaway of packed bed reactors".  
International Chemical Engineering, 18 (2), (1978).
- (9) Emig, G. et al.  
"Experimental studies on runaway of Catalytic Fixed-bed Reactors (Vinyl-acetate synthesis)".  
Chemical Engineering Science, 35 p.249, (1980).
- (10) Finlayson, B. A.  
"Packed bed reactor analysis by orthogonal collocation".  
Chemical Engineering Science, 26 (7), (1971).
- (11) Froment, G. F.  
"Fixed Bed Catalytic Reactors. Current Design Status".  
Industrial and Engineering Chemistry, 59 (2), (1967).
- (12) Froment, G. F.; Bischoff, K. B.  
"Chemical Reactor Analysis and Design".  
John Wiley & Sons, U. S. A. (1979).

- (13) Gygax, R. W.  
"Scale up Principles for Assessing Thermal Runaway Risks  
Chemical Engineering Progress, 86 (2), (1990).
- (14) Hagan, P. S.; Herskowitz, M.  
"Accurate One-Dimensional Fixed-Bed Reactor Model Based on  
Asymptotic Analysis".  
AIChE Journal, 34 (8), (1988).
- (15) Holton, R. D.  
"Mathematical Modeling of Heterogeneous-Homogeneous  
Reactions".  
Chemical Engineering Science, 31 (7), 1976.
- (16) Jodra, L. G. et al.  
"Diseño de reactores de Lecho Fijo. Modelo, Parámetros de  
Diseño, Estimación".  
Ingeniería Química, 11 (126), (1979).
- (17) Levenspiel, O.  
"Ingeniería de las Reacciones Químicas". 2a. Edición.  
Ediciones REPLA S. A. México, (1987).
- (18) Mears, D. E.  
"Tests for transport limitations in experimental catalytic  
reactors".  
Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 10 (4), (1971).

- (19) Mears, D. E.  
"Diagnostic Criteria for Heat Transport Limitations".  
Journal of Catalysis, 20 (127), (1971).
- (20) Rase, F. H.  
"Chemical Reactor Design for Process Plants". Vol. I.  
John Wiley & Sons, U. S. A. (1977).
- (21) Sandler, S. I.  
"Termodinámica en la Ingeniería Química".  
Editorial Interamericana, México (1981).
- (22) Smith J. M.  
"Chemical Engineering Kinetics". Third Edition.  
Mc Graw Hill Book Company, U. S. A. (1985).
- (23) Tarhan M. O.  
"Catalytic Reactor Design".  
Mc Graw Hill Book Company, U. S. A. (1983).
- (24) Trambouze, P.  
"Reactor Scale up Philosophy".  
Chemical Engineering, 86 (19), (1979).
- (25) Trambouze, P.  
"Reactor Scale up Methodology".  
Chemical Engineering Progress. 86 (2), (1990).

(26) Van, H. Editor in Chief.

"Chemical Prices".

Chemical Marketing Reporter. 238 (10), (1990).

APENDICE 1.

PROGRAMAS DE COMPUTO.

1) PROGRAMA DE OBTENCION DE PARAMETROS INVOLUCRADOS EN EL MODELO DE ORDEN REDUCIDO DE FINLAYSON.

```

5  CLS
10 PRINT "          PROGRAMA PARA EL CALCULO DE PARAMETROS UTILIZADOS"
20 PRINT "          EN LA SIMULACION DE UN REACTOR DE LECHO FIJO.  "
30 DP=.004:MU=.000014:RO=.00056279
40 REM DP=m; MU=kg/ms; RO=gmol/cm3h
50 INPUT "NUMERO DE CORRIENTES ?";NNT
60 FT=4.94803/NNT:GV=FT*37.1460:FA=FT*.71429
70 REM FT=kgmol/h; GV=m3/h; FA=kgmolA/h
80 INPUT "DIAMETRO DEL REACTOR, DR(m) ?";DR
90 A=PI/4*DR2:US=GV/(A*3600):G=FT*35.7141/(A*3600)
100 PRINT "GASTO VOLUMETRICO, GV(m3/h)=";GV
110 PRINT "AREA DE FLUJO, A(m2)=";A
120 PRINT "VELOCIDAD SUPERFICIAL, Us(m/s)=";US
130 PRINT "MASA VELOCIDAD TOTAL, G(kg/m3s)=";G
140 REP=DP*G/MU:PRINT "NUMERO DE REYNOLDS DE PARTICULA, REP=";REP
150 INPUT "LONGITUD DIMENSIONAL (m) PARA UN INTERVALO DADO?";L
160 GA=FA*0.1/A:PRINT "FLUX DEL COMPONENTE A, GA(gmol/cm3h)=";GA
170 BETA=RO*L/GA*100:LAMBDA=3.6053E-6*REP+.00044567
180 ALFAW=8.7585E-4*REP+0.342
190 ALFA=L*LAMBDA/((D/2)2*G*1.7):BIOT=ALFAW*R/LAMBDA
200 BETAP=BETA*2.75296
210 PRINT "CONDUCTIVIDAD RADIAL EFECTIVA, LAMBDA(KJ/m2s2K)=";LAMBDA
220 PRINT "COEF. DE TRANSF. EN LA PARED, ALFAW(KJ/m2s2K)="ALFAW
230 PRINT "PARAMETRO ALFA'=";ALFA
240 PRINT "NUMERO DE BIOT, Bi=";BIOT
250 PRINT "NUMERO DE DAMKOLHER I, BETA'=";BETA
260 PRINT "NUMERO DE DAMKOLHER II, BETA'=";BETAP
270 PA=6*BIOT*ALFA/(BIOT+3)
280 PRINT "6BiALFA'/(Bi+3)=";PA
999 END

```

2) PROGRAMA PARA LA SOLUCION DE UN SISTEMA DE DOS E. D. O. POR EL METODO DE RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN.

```

5 CLS
10 PRINT "METODO DE RUNGE KUTTA DE CUARTO ORDEN PARA SISTEMAS DE"
20 PRINT "          ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS          "
30 REM VARIABLE INDEPENDIENTE {LONGITUD ADIMENSIONAL = Z} = A
40 INPUT "INCREMENTO DE LA VAR. INDEPENDIENTE (PASO INTEGRAC.)";H
50 INPUT "LIMITE INFERIOR Zi";A
60 INPUT "LIMITE SUPERIOR Zf";LS
70 M=(LS-A)/H:PRINT "TOTAL DE SUBINTERVALOS DE INTEGRACION=";N
80 INPUT "NUMERO DE SUBINTERVALOS AGRUPADOS PARA IMPRESION=";NI
90 INPUT "PARAMETRO BETA EN dx/dZ (F1)"; BETA
100 INPUT "PARAMETRO BIALFA'/(Bi+3) EN dt/dZ (F2)";PA
110 NP=N/NI
120 REM VARIABLES DEPENDIENTES (1)CONVERSION X=B; (2)TEMP. T=C
130 PRINT "VARIABLES DEPENDIENTES:"
140 INPUT "VALOR INICIAL XO";B
150 INPUT "VALOR INICIAL TO";C
160 X=A:Y=B:Z=C
170 PRINT:PRINT TAB(8)"LONGITUD";TAB(33)"CONVERSION";TAB(56)"TEMP"
180 FOR I=1 TO NP
190 FOR J=1 TO NI
200 GOSUB 100
210 K11=F1:K21=F2
220 X=A+(H/2):Y=B+K11*(H/2):Z=C+K22*(H/2)
230 GOSUB 1000
240 K12=F1:K22=F2
250 X=A+(H/2):Y=B+K12*(H/2):Z=C+K22*(H/2)
260 GOSUB 1000
270 K13=F1:K23=F2
280 X=A+H:Y=B+K13*H:Z=C+K23*H
290 GOSUB 1000
300 K14=F1:K24=F2
310 B=B+(H/6)*(K11+2*(K12+K13)+K14)
320 C=C+(H/6)*(K21+2*(K22+K23)+K24)
330 A=A+H
340 NEXT J
350 PRINT TAB((7) A;TAB(32) B;TAB(57) C*453
360 NEXT I
999 END
1000 REM *****SUBROUTINA DE EVALUACION DE LAS FUNCIONES*****
1010 REM CAMBIO DE VARIABLE PARA CONVERSION=Y, TEMPERATURA=Z
1020 REM SE CONSIDERA UN CAMBIO EN EL NUMERO DE MOLES PARA UNA
1030 REM RELACION MOLAR nA/nB=2.5
1040 F1=BETA*(1-Y)/(1-.28571*Y)*EXP(20.22-20.22/Z)
1050 F2=F1*2.75296-PA*(Z-1)
1060 RETURN

```

3) PROGRAMA PARA EL CALCULO DE LA CAIDA DE PRESION A TRAVES DE REACTORES TUBULARES DE LECHO FIJO.

```
5 CLS
10 PRINT "CALCULO DE LA CAIDA DE PRESION EN UN REACTOR TUBULAR DE
20 PRINT " LECHO FIJO, UTILIZANDO LA CORRELACION DE MAX LEVA."
30 PRINT: INPUT "LONGITUD DEL REACTOR, L(m)";L
40 INPUT "MASA VELOCIDAD SUPERFICIAL, G(kg/m2s)";GS
50 DP=0.004:MU=1.4E-5:RO=1.1056:K=0.4:G=9.81
60 REM DP=m, MU=kg/ms, RO=kg/m3, G=m/s2
70 REP= DP*GS/MU:PRINT " NUMERO DE REYNOLDS DE PARTICULA =";REP
80 GH=GS*3600:PRINT" MASA VELOCIDAD SUPERFICIAL G(kg/m2h) =";GH
90 INPUT "FACTOR DE FRICION MODIFICADO, fm";FM
100 INPUT "VALOR DEL EXPONENTE, n";N
110 DELTAP=2*L*FM*GH2*(1-E)(3-N)/(DP*G*36002*K3*RO)*.0001
120 PRINT:PRINT" CAIDA DE PRESION, DELTA P (kg/cm2)=";DELTAP
130 DELPSI=DELTAP*14.21057
140 PRINT "CAIDA DE PRESION, DELTA P (psi)=";DELPSI
```

## APENDICE 2.

### METODO DE RUNGE-KUTTA DE CUARTO ORDEN PARA LA INTEGRACION DE SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS.

La integración numérica de sistemas de  $n$  ecuaciones diferenciales ordinarias (E. D. O.) de primer orden, puede llevarse a cabo fácilmente cuando tienen la forma:

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dx} &= f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \frac{dy_2}{dx} &= f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ &\vdots \\ \frac{dy_n}{dx} &= f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{aligned} \tag{A.2-1}$$

Si se cuenta con las condiciones iniciales en un punto común

$$\begin{aligned} x_0: \quad y_1(x_0) &= y_{1,0} \\ y_2(x_0) &= y_{2,0} \\ y_n(x_0) &= y_{n,0} \end{aligned} \tag{A.2-2}$$

entonces, las soluciones al sistema de E. D. O. tienen la forma:

$$\begin{aligned} y_1 &= F_1(x) \\ y_2 &= F_2(x) \\ &\vdots \\ y_n &= F_n(x) \end{aligned} \tag{A.2-3}$$

La fórmula de recurrencia para la integración del sistema (A.2-1) es:

$$y_{i+1} = y_i + w_1 k_{i1} + w_2 k_{i2} + w_3 k_{i3} + \dots + w_m k_{im} \quad (\text{A.2-4})$$

que de manera expandida para un Runge-Kutta de cuarto orden se convierte en:

$$y_{i+1,j} = y_{ij} + \frac{1}{\sigma} (k_{1j} + 2k_{2j} + 2k_{3j} + k_{4j}) \quad j=1,2,\dots,n \quad (\text{A.2-5})$$

donde cada una de las trayectorias  $k_i$  se evalúa por medio de:

$$k_{1j} = h f_j(x_i, y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{in})$$

$$k_{2j} = h f_j\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{i1} + \frac{k_{11}}{2}, y_{i2} + \frac{k_{12}}{2}, \dots, y_{in} + \frac{k_{1n}}{2}\right)$$

$$k_{3j} = h f_j\left(x_i + \frac{h}{2}, y_{i1} + \frac{k_{21}}{2}, y_{i2} + \frac{k_{22}}{2}, \dots, y_{in} + \frac{k_{2n}}{2}\right)$$

$$k_{4j} = h f_j\left(x_i + h, y_{i1} + k_{31}, y_{i2} + k_{32}, \dots, y_{in} + k_{3n}\right) \quad j=1,2,\dots,n \quad (\text{A.2-6})$$