

Facultad de Ingeniería

Ingeniería Química

Performance de Reactores

Introducción

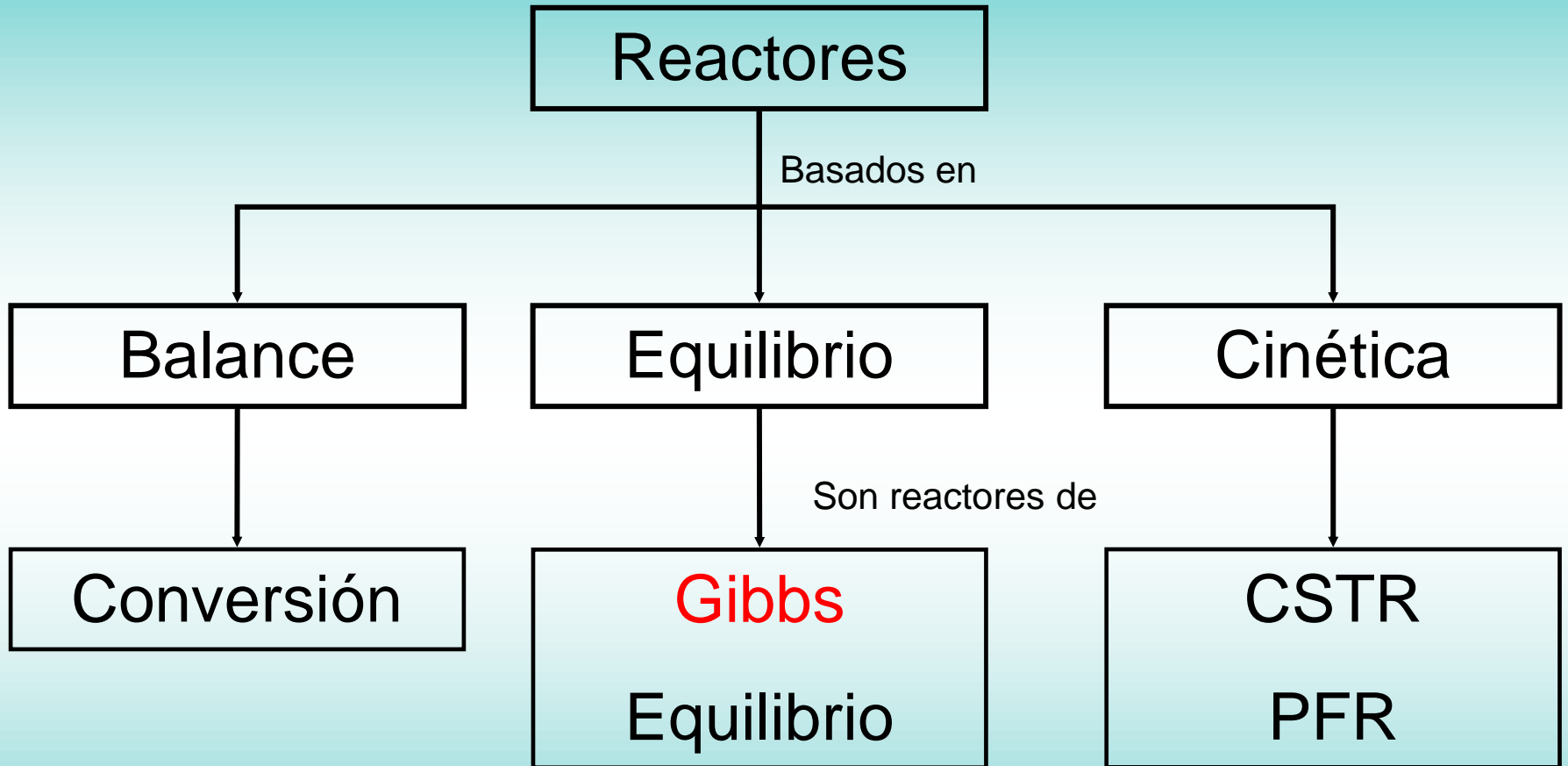
- **1. Herramientas de Evaluación de Performance.**
 - Relación caso base.
 - Análisis utilizando resistencias controlantes.
- **2. Modelos de Entrada Salida de Procesos.**
 - Análisis de los efectos de las entradas en las salidas.
- **3. Curvas de performance para operaciones unitarias.**
 - Aplicaciones a transferencia de calor, flujo de fluidos y problemas de separación.
- **4. Performance de Reactores.**
 - Transferencia de calor en un reactor. Estudios de casos.
- **5. Regulación de condiciones de procesos.**
 - Regulación de flujo y presión. Control de procesos. Controlabilidad. Lazos de control. Estudio de casos.
- **6. Performance de Múltiples Operaciones Unitarias.**
 - Análisis del reactor con transferencia de calor. Performance de la columna de destilación. Performance de un lazo de calentamiento. Performance de una sección de alimentación.
- **7. Análisis de Procesos de Troubleshooting y Debottlenecking.**
 - Troubleshooting de operaciones unitarias. Troubleshooting de Múltiples operaciones unitarias. Problemas de Debottlenecking.

Esquema general

Fenómenos que afectan el rendimiento del reactor

- La producción de producto deseado.
 - Conversión
 - Selectividad
 - Rendimiento
- Cinética de reacción y el equilibrio.
- Reactor químico (volumen, catalizador, modelo reactor, configuración de reactor, etc.)
- **Transferencia de Calor**

Modelos de reactores (HYSYS)



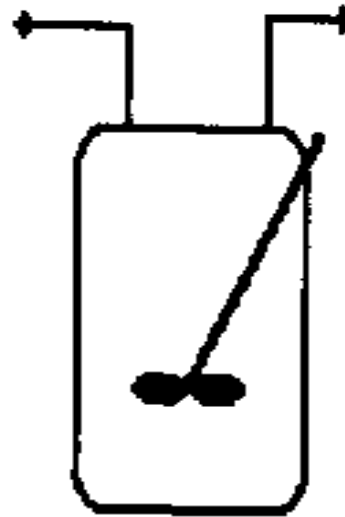
Definiciones de reactores

- **Lecho empacado catalítico:** los reactivos gaseoso o líquidos fluyen sobre el lecho fijo de catalizador.
- **Lecho Fluidizado catalítico:** El flujo de gas o la fase líquida mantienen en suspensión las partículas finas de catalizador.
- **El CSTR Gas-líquido:** el líquido y fase gaseosa están agitadas mecánicamente.

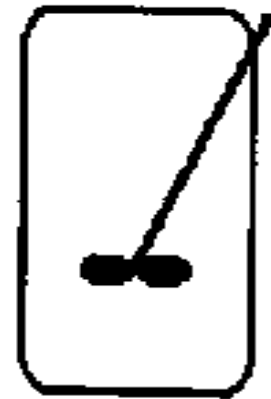
Reactores homogéneos



Plug Flow

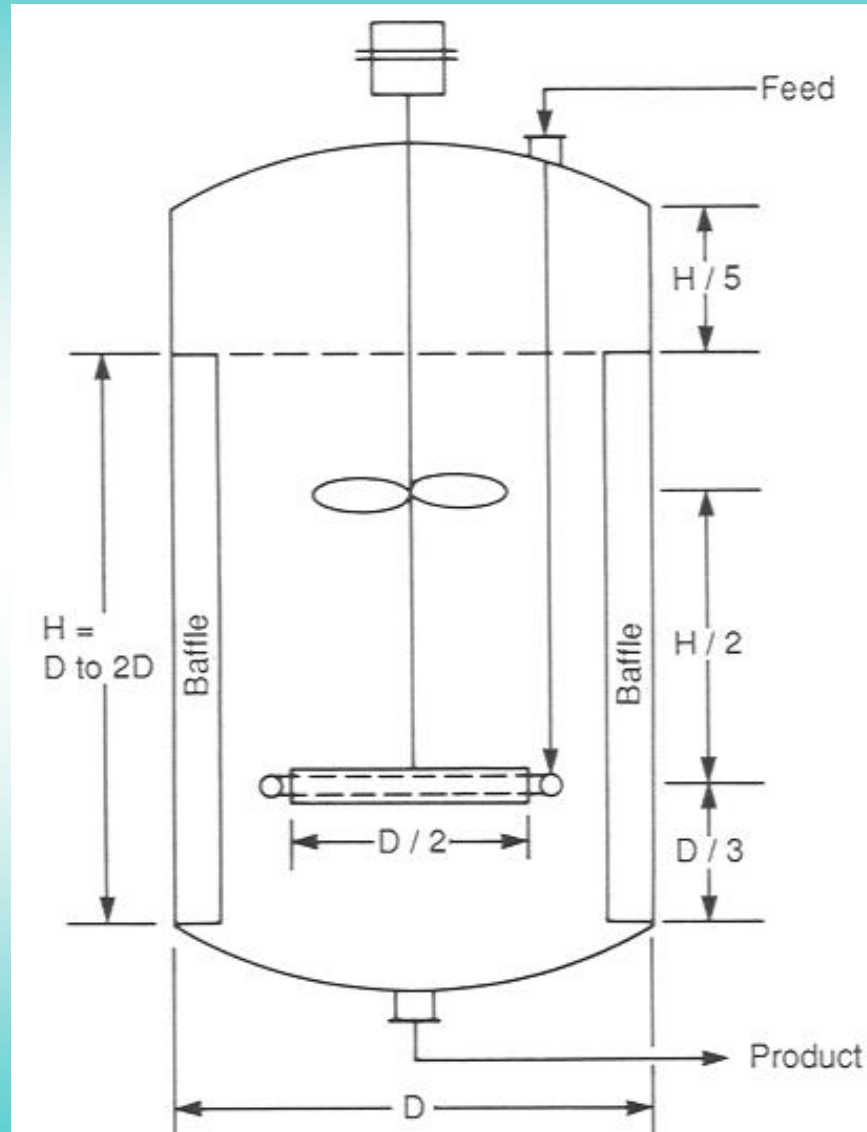


CSTR

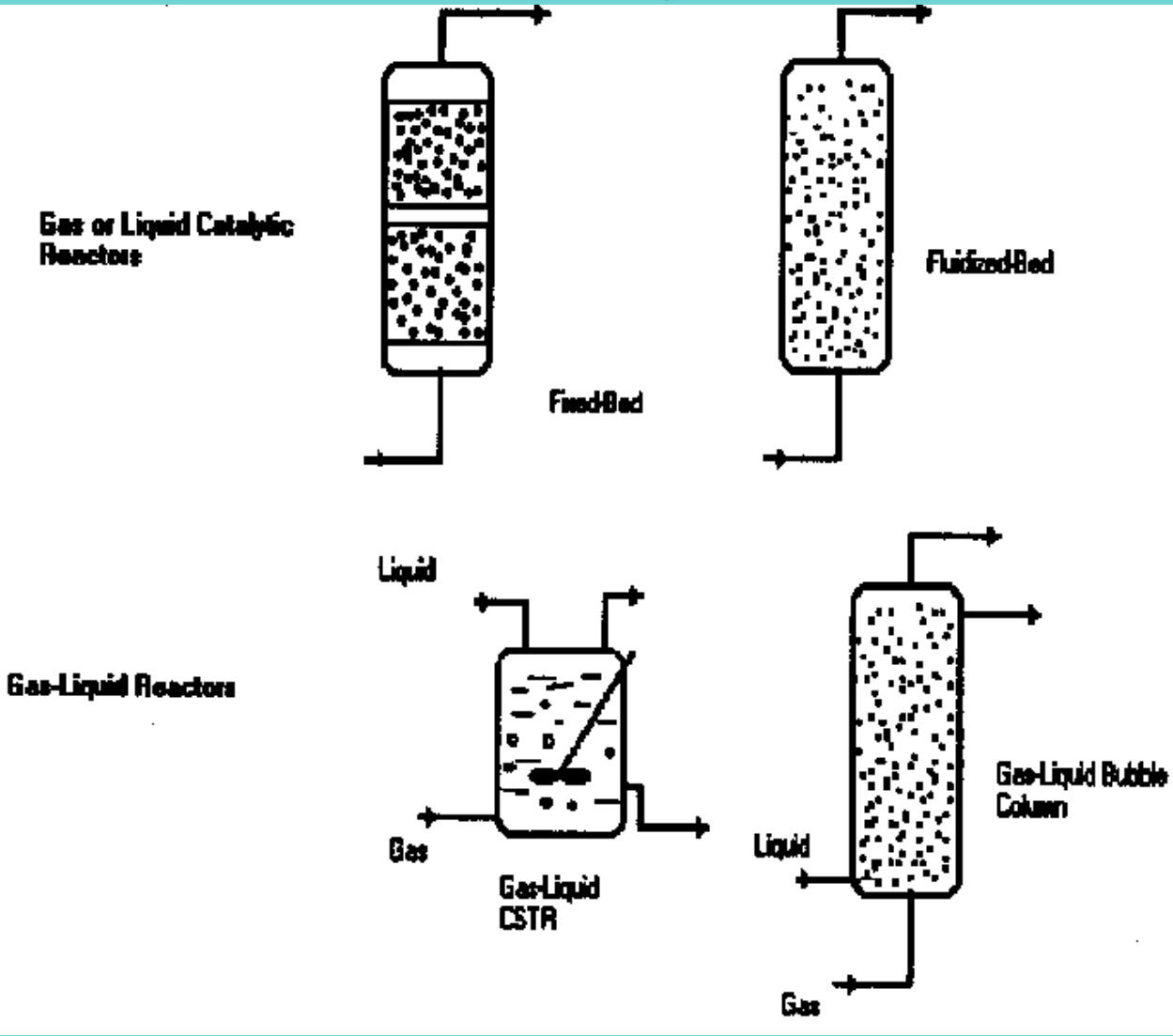


Batch

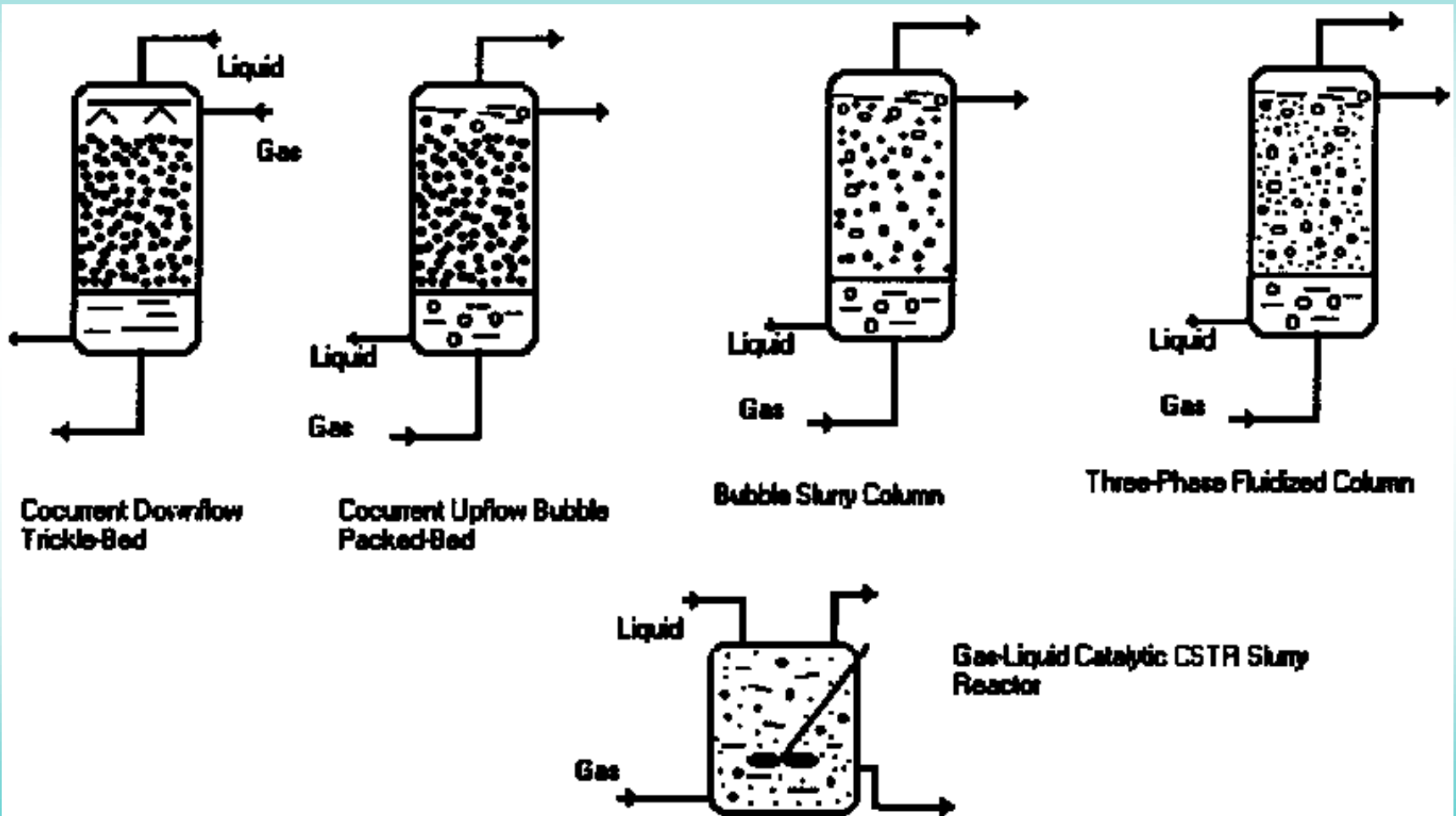
Proporciones de CSTR



Reactores heterogéneos (dos fases)



Reactores heterogéneos (tres fases)



Ejemplo de Reactores catalíticos de varias fases.




Reactor catalítico de lecho fluidizado Gas/ Líquido

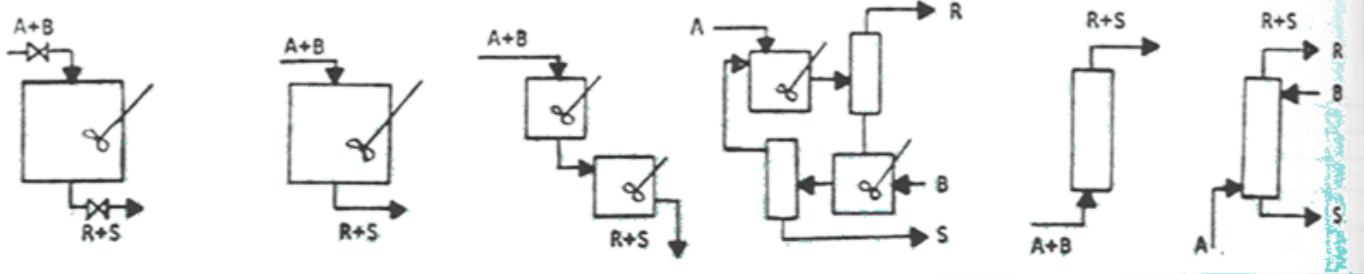
- Cracking catalítico
- Producción de cloruro de alilo.
- Producción de anhídrido ftálico.
- Producción de acrilonitrilo

Reactor catalítico de lecho fijo

- Oxidación parcial de o-xileno a anhídrido ftálico.
- Hidrogenación de hidrocarburos aromáticos y olefinas.
- Deshidrogenación de etilbenceno a estireno.

Clasificación de reactores según modo de operación y fases.

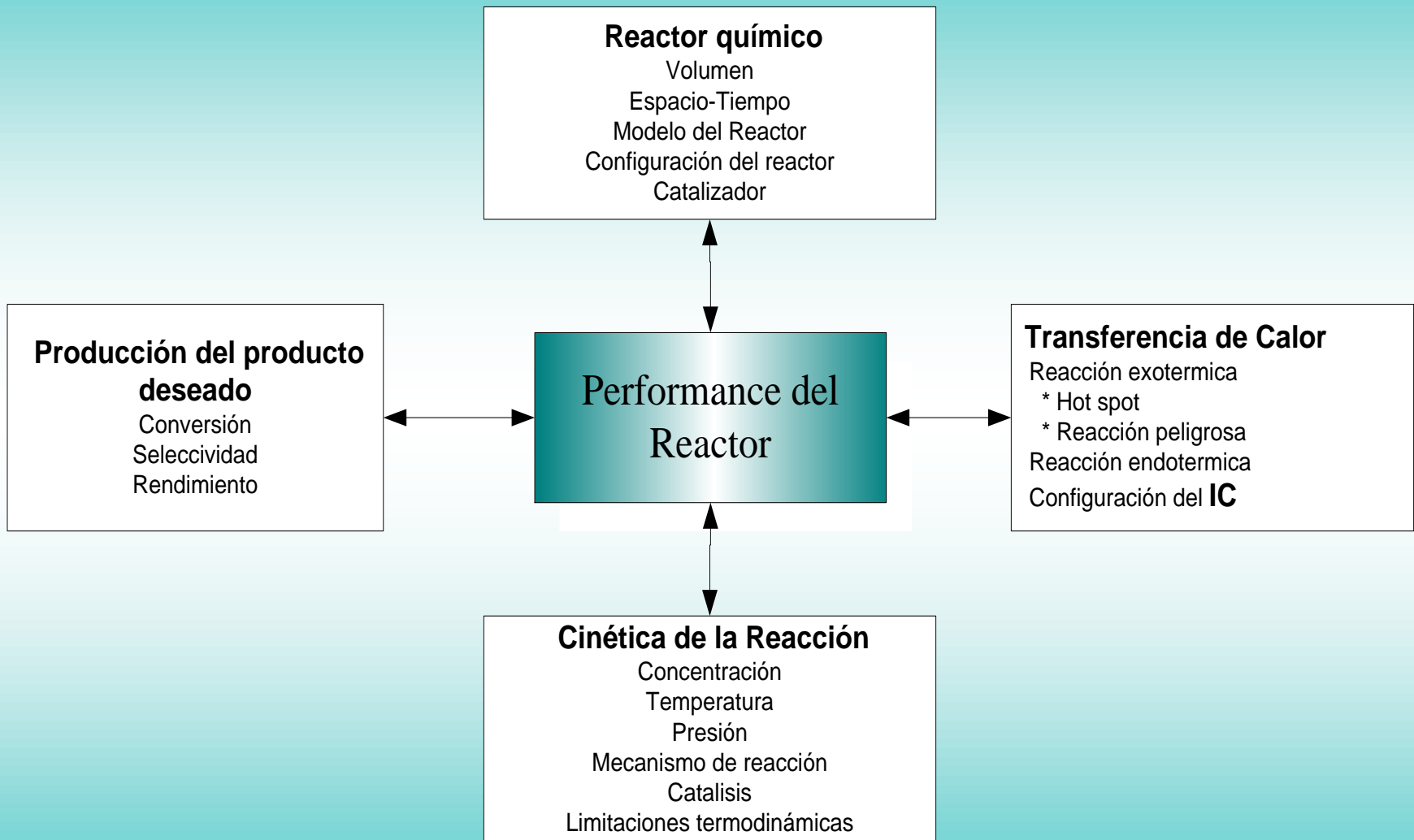
CODE:  Commonly used  Rarely used  Not feasible

MODE	BATCH		CONTINUOUS					
REACTOR TYPE	Tank		Tank	Tank battery		Tubular		
Flow type	Agitated		Agitated	Parallel	Counter	Parallel	Counter	
Phase								
Gaseous								
Liquid								
Gas-liquid	Gas continuous							
Liquid-liquid								
Gas-solid								
Liquid-solid								
Gas-liquid-solid								
Flowsketch for the reaction $A + B \rightleftharpoons R + S$								

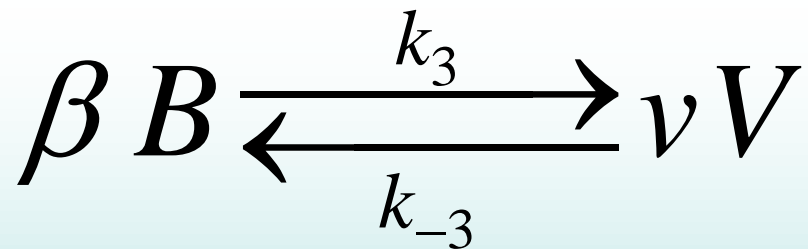
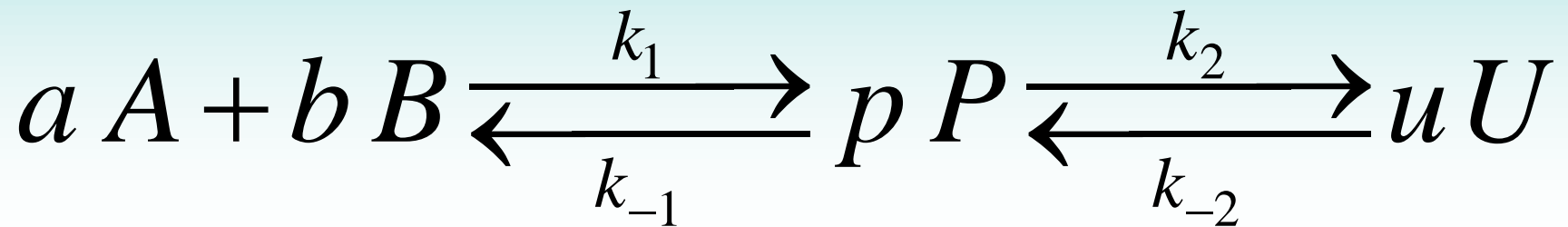
Performance del reactor

- Los reactores químicos se usan para producir productos de alto valor a partir de reactivos de menor valor.
- La ingeniería de las reacciones químicas es propia de los ingenieros químicos.
- La performance del reactor depende de interacciones complejas de cuatro efectos:
 - La producción de producto deseado
 - La cinética de la reacción y termodinámica
 - La configuración del reactor
 - Problema de diseño: Determinación del volumen
 - Problema de performance: Para un volumen fijo, la conversión es afectada por la temperatura, presión, catalizador, configuración de IC.
 - El intercambio de calor en el reactor

Factores que afectan la *performance* del reactor



Esquema de reacciones químicas



P: producto deseado

U y V: son biproductos.

Conversión

- *Es una medida de la cantidad de reactivo que reacciona.*

$$\text{Conversion por paso} = x_p = \frac{\text{Reactivo consumido en el reactor}}{\text{Reactivo alimentado al reactor}}$$

$$\text{Conversion Global} = x_g = \frac{\text{reactivo consumido en el proceso}}{\text{Reactivo alimentado al proceso}}$$

- Definido en término de reactivo limitante.
- En la mayoría de los procesos recupera y recicla el reactivo que no reacciona para obtener una conversión global alta.
- Las conversiones altas del reactor no son necesarias ni deseables para la performance óptima del reactor. Para conversiones bajas del reactor, pueden lograrse conversiones globales altas con aumentó reciclo.
- Para reactivos de alto costo, el reciclo puede ser próximo a 100 %.

Selectividad

- *La selectividad es una medida de la cantidad de reactivo convertida en el producto deseado.*

$$\text{Selectividad} = \eta = \frac{\text{Velocidad de producción de producto deseado}}{\text{Velocidad de producción de productos no deseados}}$$

$$\eta = \frac{r_d}{\sum_{u=0}^n r_u}$$

- Una selectividad alta siempre es deseable.

$$\eta_g = \frac{\text{Flujo molar de P}}{\text{Flujo molar de producto no deseado}}$$

Rendimiento

- *El rendimiento es la fracción de reactivo limitante convertido en producto deseado. Es un indicador de eficiencia del proceso.*

$$Y = \frac{\text{Moles de reactivo que produce P}}{\text{Moles de reactivo limitante reaccionado}}$$

Desde el punto de vista económico, interesa la selectividad y el rendimiento global para determinar las utilidades.

La selectividad y el rendimiento local ayudan a seleccionar reacciones y esquemas de reactores que maximicen las utilidades.

El rendimiento es una medida directa de la eficiencia del proceso.

Producción del producto deseado

Al considerar las condiciones del proceso, es importante considerar qué variables manipular para mejorar la selectividad, el rendimiento y, la conversión global.

En general, tenemos la capacidad para controlar la temperatura, la presión y el grado de mezcla en el reactor. ¿Cómo afecta cada una de estas variables la cinética de las reacciones químicas?.

Regla 1: Para niveles de temperatura y velocidad relativa de reacción.

- Alto T favorece la reacción con mayor energía de activación.
- Baja T favorece la reacción con menor energía de activación

T no tiene ningún efecto en la velocidad de reacción si la energía de activación son las mismas.

$$k_1 = k_0 e^{-E_1 / RT}$$

Producción del producto deseado

Regla 2: Para nivel de concentración y velocidad relativa de reacción.

- Alta CA favorece la reacción que tengan el mayor orden de reacción con CA
- Baja CA favorece la reacción que tengan la menor orden reacción con CA
- CA no tiene ningún efecto en la velocidad relativa de reacción si el orden reacción en CA son los mismos.

Regla 3: En la maximización de un intermediario de reacción R en $A \rightarrow R \rightarrow S$

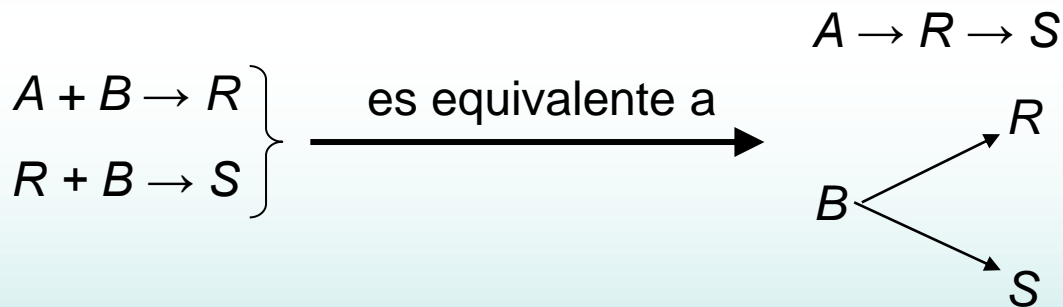
- Para obtener el mayor valor de CR, no permitir mezclar los fluidos de distintas relaciones de A a R.
- Esto implica que reactor de flujo pistón es siempre mejor que el de flujo mixto para reacciones en serie.
- Generalmente operan a bajas conversiones.

Producción del producto deseado

Regla 4: Para reacciones combinadas

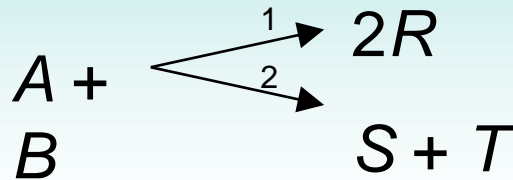
Tratar de analizar en términos de sus constituyentes en reacciones en serie y en reacciones en paralelo

Por ejemplo:



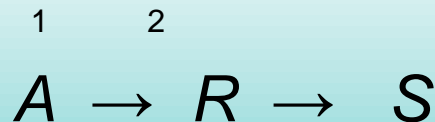
Producción del producto deseado

Ejemplo 1 – ¿Qué condiciones favorecen la formación de máximo R? (suponer reacción de fase gaseosa)



$$\left\{ \begin{array}{l} r_1 = k_{10} e^{-80.000/RT} C_A C_B^{0,3} \\ r_2 = k_{20} e^{-60.000/RT} C_A^{0,5} C_B^{1,8} \end{array} \right.$$

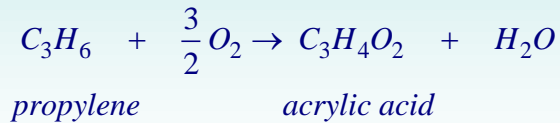
Ejemplo 2 – ¿Qué tipo de reactor y las condiciones favorecen la formación de máximo R? (suponer reacción de fase gaseosa)



$$\left\{ \begin{array}{l} r_1 = k_{10} e^{-60.000/RT} C_A \\ r_2 = k_{20} e^{-60.000/RT} C_R^2 \end{array} \right.$$

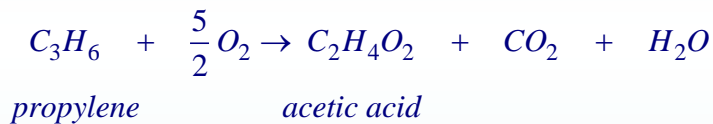
Producción del producto deseado

Ejemplo 3 – Considerar un proceso de producción de ácido acrílico

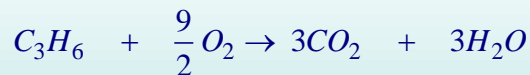


1 La cinética de la reacción son de la forma:

$$-r_i = k_i \exp\left[-\frac{E_i}{RT}\right] P_{propylene} P_{oxygen}$$



2 Dónde i es el número de reacción:



3

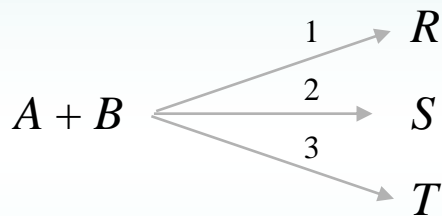
<i>i</i>	<i>E_i</i> kcal/kmol	<i>k_i</i> kmol/m ³ reactor h (kPa) ²
1	15,000	1.59×10 ⁵
2	25,000	1.81×10 ⁸
3	20,000	8.83×10 ⁵

Qué condiciones maximizan la producción de ácido acrílico?

Producción del producto deseado

Ejemplo 3 – Considerar un proceso de producción de ácido acrílico

A = propylene, B = oxygen, R = acrylic acid,
 S = acetic acid, T = combustion products



La cinética de la reacción son de la forma:

$$-r_i = k_i \exp\left[-\frac{E_i}{RT}\right] P_{propylene} P_{oxygen}$$

Dónde i es el número de reacción:

i	E_i kcal/kmol	k_i kmol/m ³ reactor h (kPa) ²
1	15,000	1.59×10^5
2	25,000	1.81×10^8
3	20,000	8.83×10^5

Qué condiciones maximizan la producción de ácido acrílico?

Cinética de la reacción

- Velocidad de reacción para una fase. Es una propiedad intensiva, depende de las variables de estado como T, P y concentración, pero no de la masa total.

$$r_i = \frac{1}{V} \frac{dN_i}{dt} = \frac{\text{moles de } i \text{ formado}}{(\text{volumen de reactor})(\text{tiempo})}$$

- La proporción de la reacción para el sólido catalizó las reacciones

$$r_i = \frac{1}{V} \frac{dN_i}{dt} = \frac{1}{W} \frac{dN_i}{dt} \rho_b = \frac{\text{moles de } i \text{ formado}}{(\text{volumen de reactor})(\text{tiempo})}$$

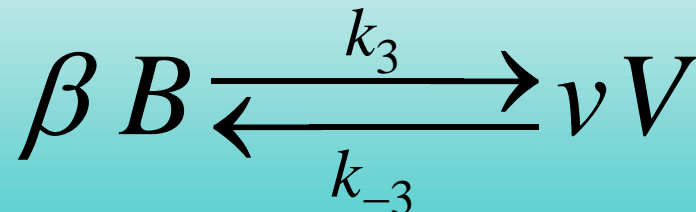
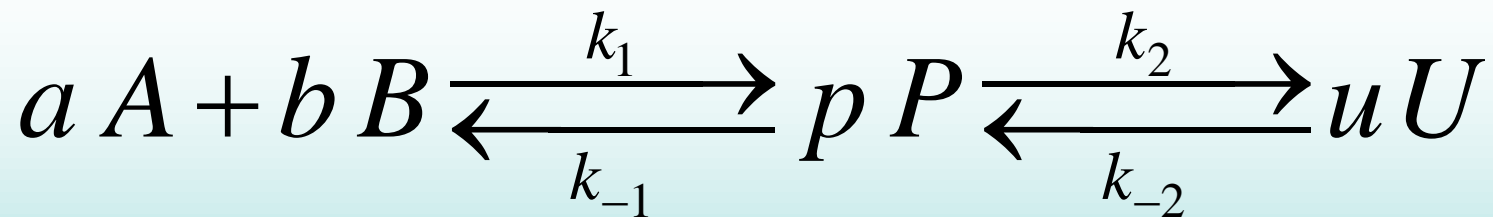
$$\rho_b = (1 - \varepsilon) \rho_{cat}$$

- Para los sistemas del catalizador sólidos, la performance del reactor se controla normalmente por las resistencias a la transferencia de masa.

Cinética de Reacción elemental

- Si la reacción es un paso elemental, la ecuación cinética puede obtenerse directamente de la estequiometría de la reacción.
- Por ejemplo, si la primera reacción en la red de la reacción genérica en diapositiva 4 es elemental e irreversible, la ecuación cinética es lo siguiente.

$$-r_i = k_1 c_A^a c_B^b$$



Cinética de Reacción No elemental

- La mayoría de las reacciones son no elementales, especialmente las reacciones catalíticas.
- La ecuación cinética es empírica.
- Una ecuación cinética genérica tiene la forma de cinética de Langmuir-Hinshelwood.

$$r_i = \frac{k_1 \prod_{i=1}^n c_i^{\alpha_i}}{\left[1 + \sum_{j=1}^m K_j c_j \right]^\gamma}$$

- La velocidad de reacción en cada caso debe realizarse en el laboratorio, para determinar los coeficientes en la ecuación anterior.

Dependencia de temperatura

- Para un incremento de temperatura, la velocidad de la reacción siempre aumenta, y normalmente significativamente.
- La dependencia de temperatura sigue la ecuación de Arrhenius.

$$k_i = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$$

- ¿Cuál es la mayor preocupación con respecto a la dependencia de temperatura de reacción?
- La velocidad de reacciones en fase gaseosa depende en la presión.

$$c_i = \frac{p_i}{RT}$$

- ¿Cómo se ve afectada la velocidad de reacción con el cambio de la presión y la temperatura?

Limitaciones termodinámicas

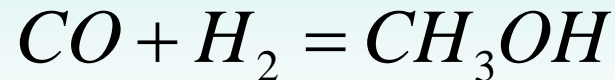
- La Termodinámica fija los límites de las posibles conversiones en un sistema reaccionante.
- El equilibrio de la reacción depende de la energía libre de Gibbs.

$$\prod_i (\hat{a}_i)^{\nu_i} = \exp \frac{-\sum_i \nu_i G_i^\circ}{RT} = K_{eq}$$

- ¿Cómo las velocidad de la reacción y conversión de equilibrio se tienen en cuenta en la evaluación del proceso y el diseño?

Ejemplo de Limitación Termodinámica

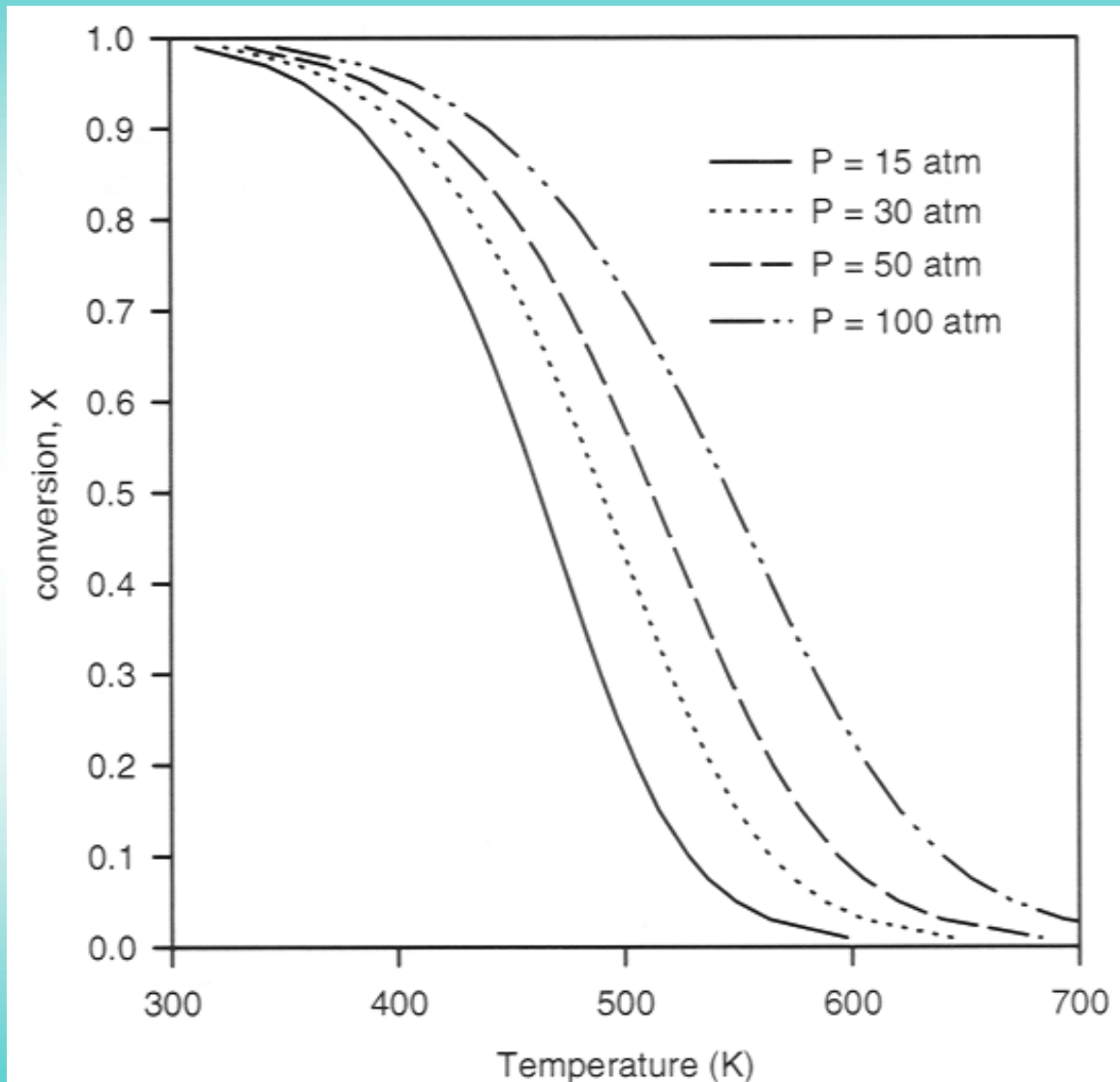
- Considerar la síntesis de metanol en fase gaseosa a partir del gas de síntesis.



$$K_{eq} = \frac{X(3-X)^2}{4(1-X)^3 P^2} = 4.8 \times 10^{-13} \exp(11,458/T)$$

- Analizar el gráfico siguiente en el que se representa la conversión vs. temperatura, con la presión como un parámetro.

Síntesis de metanol



Modelos de reactores

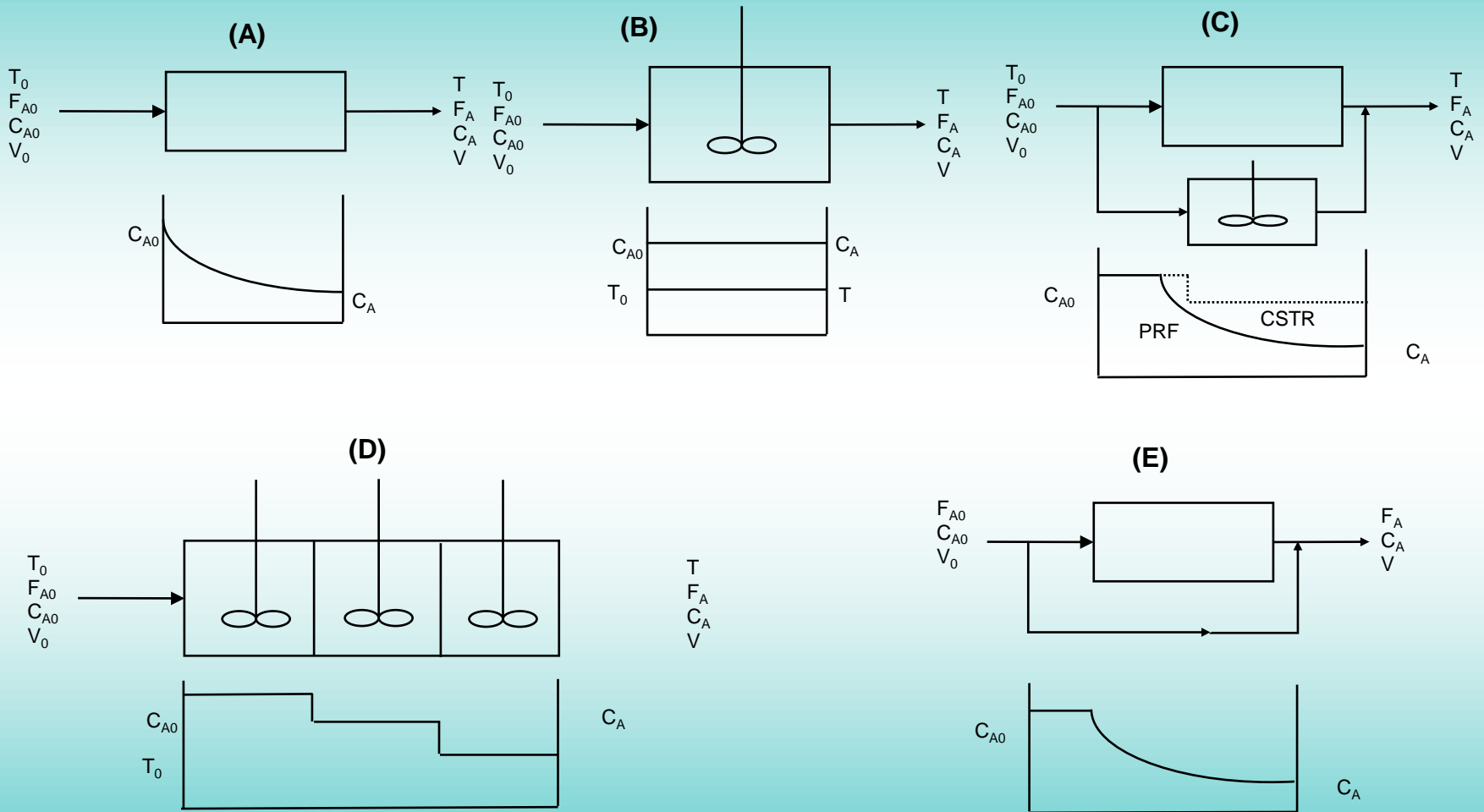
- CSTR

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\tau}{C_{A0}} = \frac{x_A}{-r_A}$$

- PFR

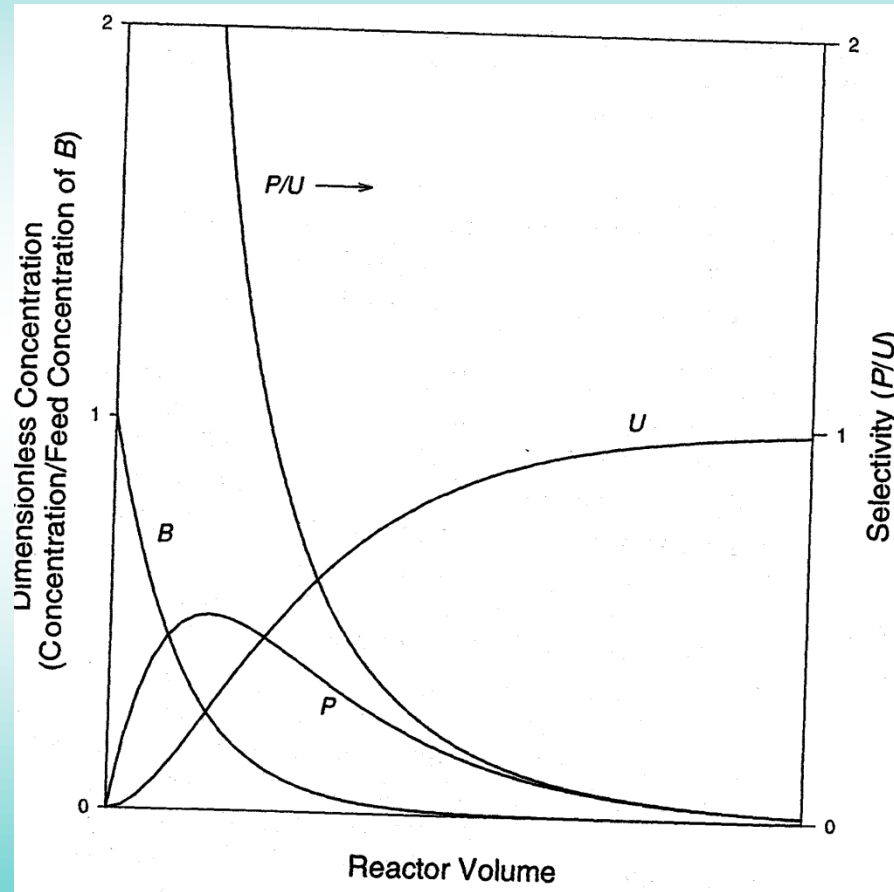
$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\tau}{C_{A0}} = \int_0^x \frac{dx_A}{-r_A}$$

Representación de Modelos de reactores

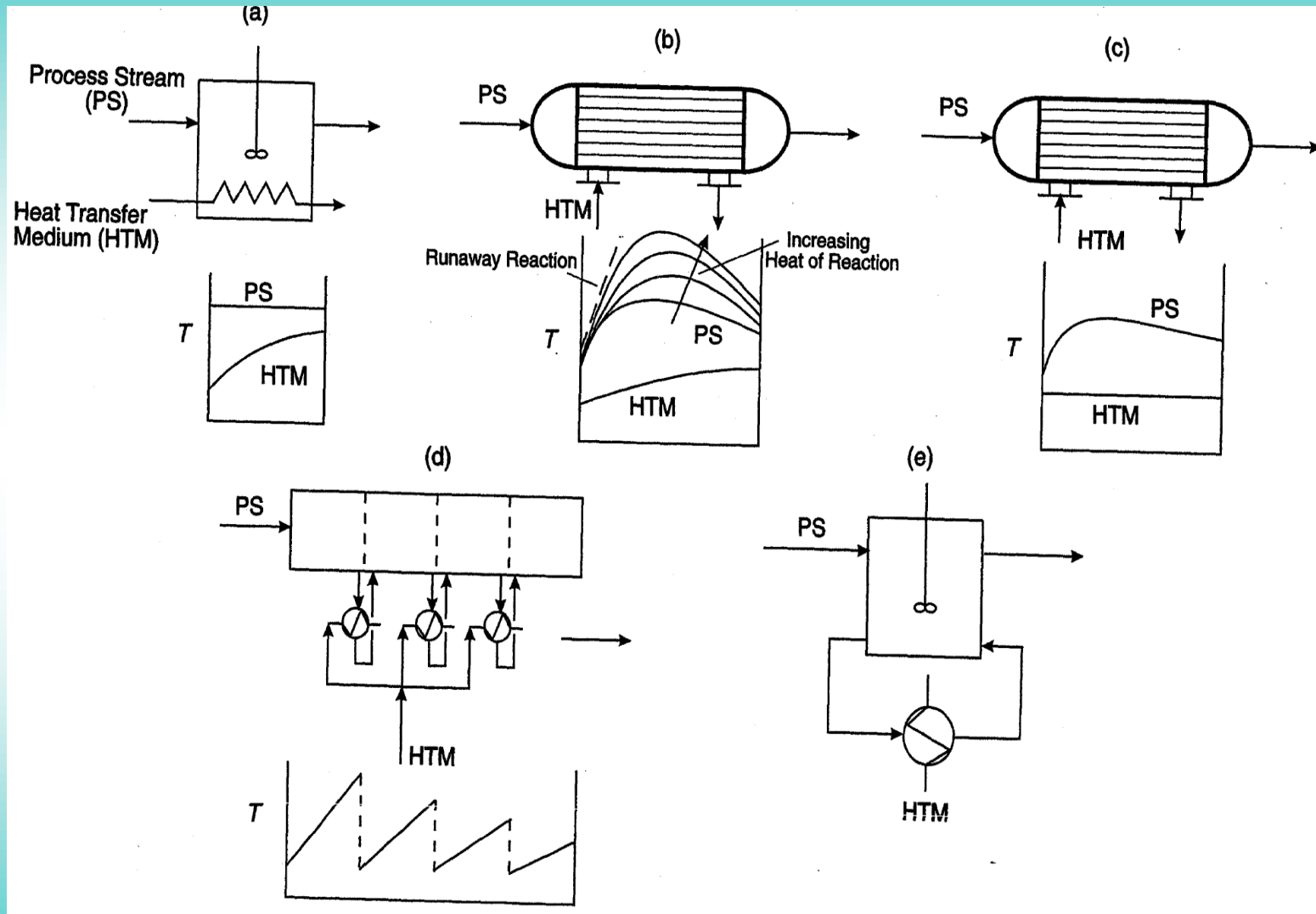


Perfil de concentración en un PFR

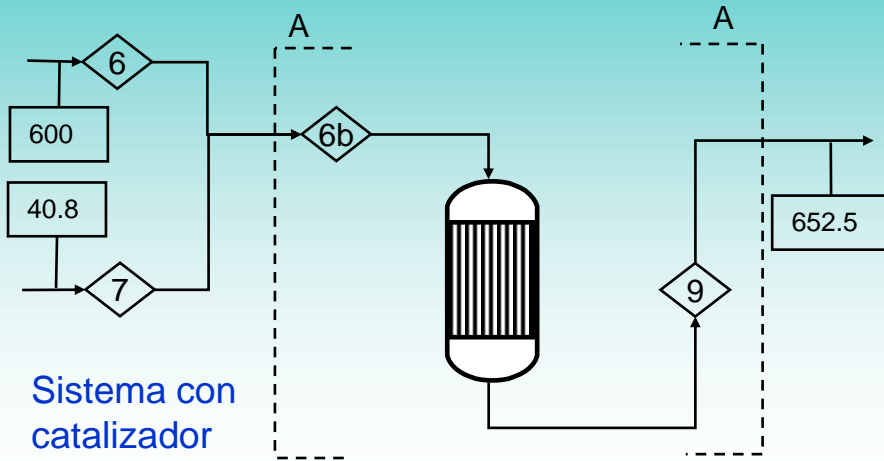
Reacción en serie



Transferencia de calor en el Reactor



Reactor con y sin catalizador



Flowrate (kmol/h)		
Stream	6b, b	9, d
Hidrógeno	760.6	652.6
Metano	334.3	442.3
Benceno	8.0	116.0
Tolueno	114.0	36.0

