

# Facultad de Ingeniería

## Ingeniería Química

### *Performance de Procesos*

# 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.

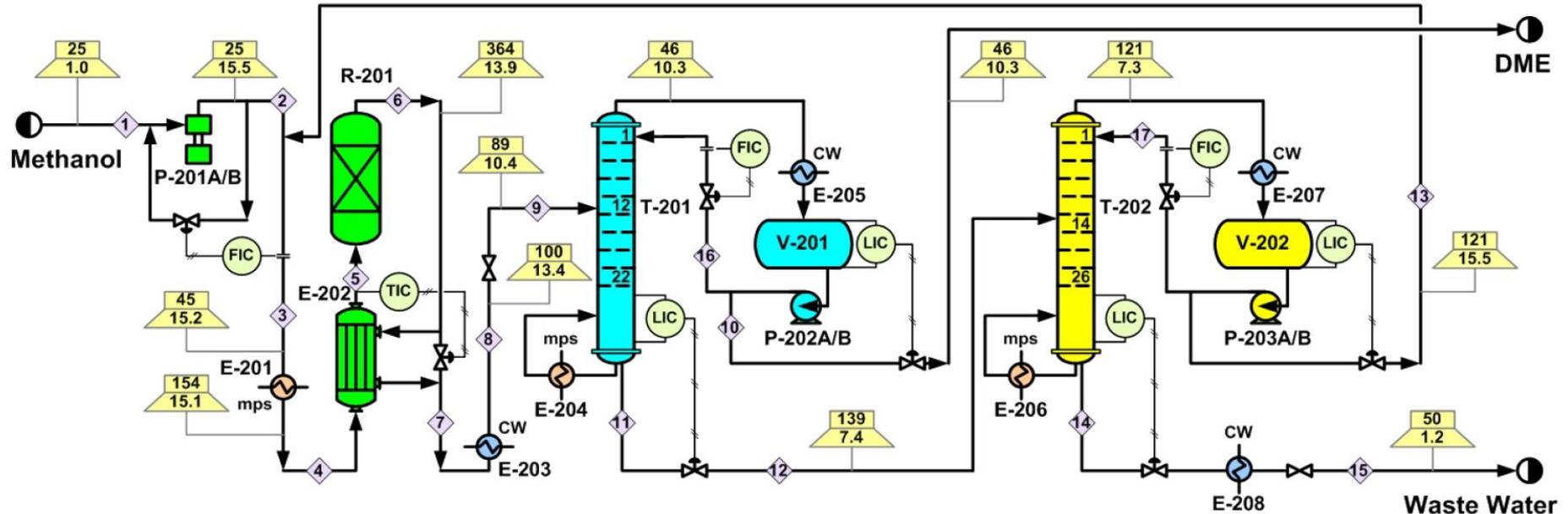
# DME

Deshidratación catalítica de methanol sobre catalysis de zeolita.



P-201A/B	E-201	R-201	E-202	E-203	T-201	E-204	E-205	V-201	P-202A/B	E-206	T-202	E-207	V-202	P-203A/B	E-208
Feed Pump	Methanol Pre-heater	Reactor	Reactor Cooler	DME Cooler	DME Tower	DME Reboiler	DME Condenser	DME Reflux Drum	DME Reflux Pumps	Methanol Reboiler	Methanol Tower	Methanol Condenser	Methanol Reflux Drum	Methanol Pumps	Waste Water Cooler

Temperature (°C)  
Pressure (bar)



Pressure (10.4 bar)	Flowrate (kmol/h)	Mole Fraction	Relative Volatility
DME	130.5	0.398	49.4
MeOH	64.9	0.197	2.2
Water	132.9	0.405	1.0

# Relaciones clásicas de performance

Situación	Ecuación	Tendencia	Comentario
Pérdida por fricción en flujo de fluidos	$\Delta P = \frac{2 \rho f L_{eq} u^2}{D}$	$ \Delta P  \propto u^2$ $ \Delta P  \propto D^{-5}$ $ \Delta P  \propto L$	Es para flujo turbulento totalmente desarrollado. Para flujo laminar es $\Delta P \propto D^{-4}$
Intercambiador de calor	$\left(\frac{hD}{k}\right) = c \left(\frac{Du\rho}{\mu}\right)^a \left(\frac{\mu C_p}{k}\right)^b$	$h_i \propto u^{0.8}$ $h_o \propto u^{0.6}$	La ecuación se utiliza cuando no hay cambio de fase.
Cinética	$r = k \prod C_i^{a_i}$ $k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}$	$\ln k$ vs. $1/T$ Es lineal	$T \uparrow, k \uparrow$ Para gas ideal $P \uparrow, c_i \uparrow$ y $r \uparrow$
Reactor mezclador perfecto	$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\tau}{C_{A0}} = \frac{x}{-r_A}$	$\tau \propto V$ $\tau \uparrow$ o $V \uparrow, x \uparrow$	Se supone flujo volumétrico constante.
Reactor tubular	$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\tau}{C_{A0}} = \int_0^x \frac{dx}{-r_A}$		
Destilación		Si la relación de reflujo $\uparrow$ , el grado de separación $\uparrow$ .	

# Análisis de performance de Sistema

Previamente estudiamos problemas asociados al diseño, síntesis y análisis de un proceso químico nuevo, donde hubo libertad para seleccionar equipo. Ahora estudiaremos problemas asociados con un proceso químico existente. El proceso ya está diseñado.

Los tres factores importantes que deben ser comprendidos en tratamiento de equipos existentes son:

- En el diseño del equipo, se conocen la entrada y la salida deseada, y el equipo está diseñado para garantizar que la salida se pueda obtener desde la entrada.
- En un problema de performance de equipo o sistema, se conocen las especificaciones de entrada y del equipo, y se calcula la salida. Por lo tanto, los cambios están limitados por el rendimiento del equipo existente.
- Cualquier cambio en la operación del proceso no pueden ser considerados aisladamente. El impacto en el proceso total siempre debe ser considerado.

# Análisis de Performance de sistemas

Después de 10 a 30 años o más que se espera que una planta opere, las operaciones de proceso pueden variar. **Una planta rara vez opera en las condiciones de proceso originales proporcionadas en el PFD de diseño.**

Esto se debe a lo siguiente:

- **Diseño / Construcción:** el equipo instalado es frecuentemente sobredimensionado. Esto reduce los riesgos resultantes de las aproximaciones en correlaciones de diseño, incertidumbre en las propiedades de los materiales, etc.
- **Efectos externos:** Alimentación de materiales, especificaciones de productos y flujos, regulaciones ambientales, y costos de materia prima y servicios que con cambiados durante la vida del proceso.

# Análisis de Performance de sistemas

- **Reemplazo de equipo:** nuevos y mejores equipos (catalíticos) pueden reemplazar unidades existentes en la planta.
- **Cambios en la *performance* del equipamiento:** en general la eficiencia disminuye con el tiempo. Por ejemplo, ensuciamiento de la superficie de calentamiento, desarrollo de canalizaciones en las torres empacadas, pérdida de actividad del catalizador, desgaste de los cojinetes de bombas y compresores, etc. Las plantas son paradas periódicamente para mantenimiento para restituir *performance* del equipamiento.

# Análisis de Performance de sistemas

Para ser competitivo, es necesario alterar las condiciones de proceso en respuesta a cambio de condiciones. Por lo tanto, es necesario comprender cómo se desempeña el equipo en su rango operativo completo para cuantificar los efectos de las condiciones cambiantes del proceso en el rendimiento del proceso. El desarrollo provisto trata sobre algunas categorías de problemas de performance.

- **Problemas de diseño:** se presenta el diseño de equipo típico de proceso químico, y se discuten las restricciones y limitaciones del equipo.
- **Problemas predictivos:** un examen de los cambios que tienen lugar para un cambio en la entrada de un proceso o equipo y / o un cambio en la eficiencia de equipo.
- **Problemas de diagnóstico / troubleshooting:** si se observa un cambio en la salidas de procesos (alteración del proceso, sintoma), se debe identificar la causa (cambio en la entrada, cambio en la *performance* del equipo).

# Análisis de Performance de sistemas

Para ser competitivo es necesario ser capaz de alterar las condiciones de proceso en respuesta a cambio de condiciones.

- **Problemas de sistemas de control:** si un cambio en la salida del proceso es indeseable o un cambio en la entrada del proceso es anticipada, debe identificarse una acción compensatoria que puede tomarse para mantener el rendimiento del proceso.
- **Problemas de debottlenecking:** frecuentemente, un cambio en el proceso es necesario o deseado, tal como un *scale-up* (incremento de la capacidad de producción) o permitir un cambio en especificaciones del producto o la materia prima. La identificación de un equipo que limita la capacidad para realizar el cambio deseado o restricciones de cambio es necesaria.

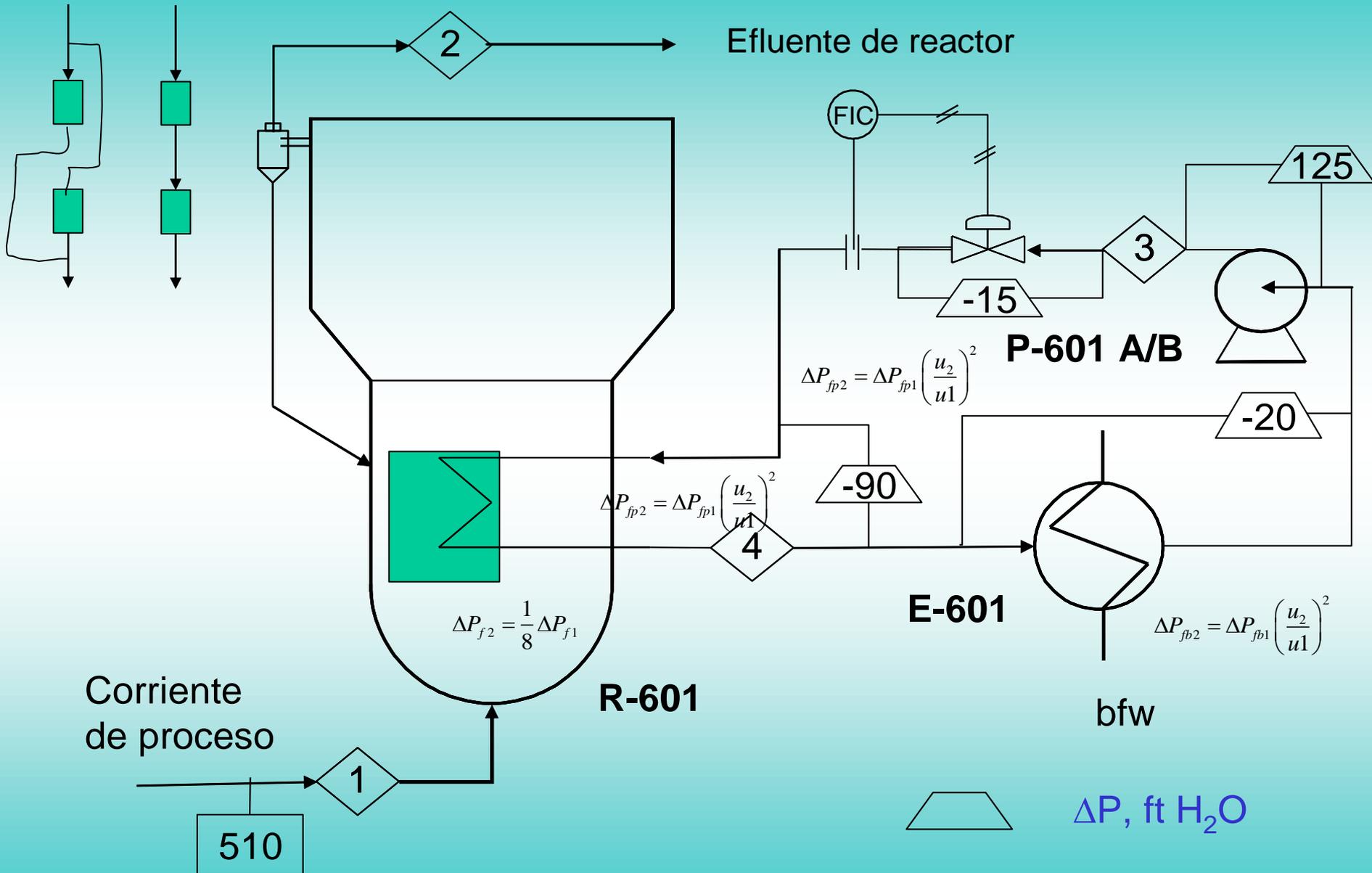
# Análisis de Performance de sistemas

Relación entre varios tipos de problemas

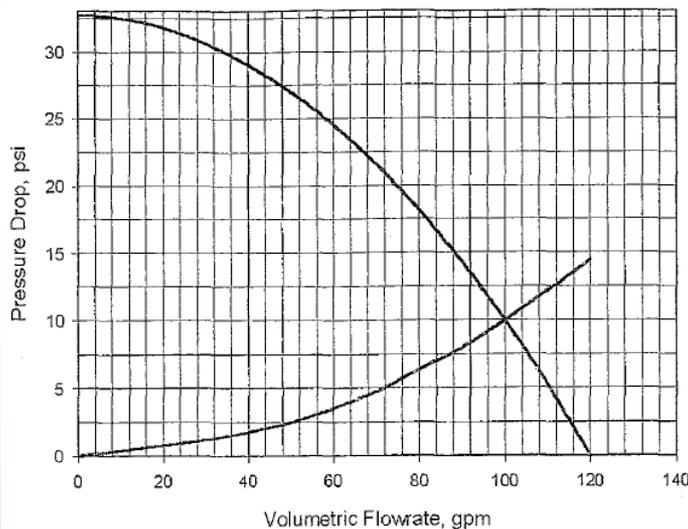
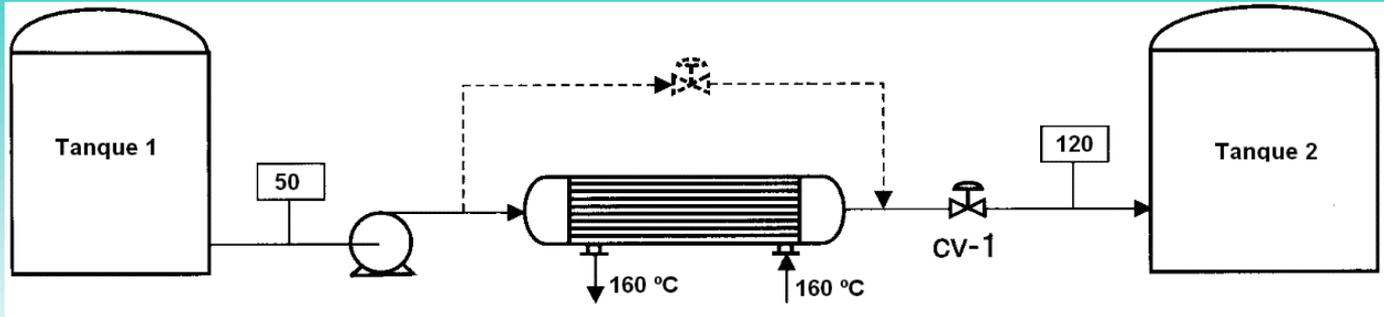


<b>Tipo de problema</b>	<b>Dato</b>	<b>Variable</b>
Diseño	Input y Output	Proceso
Performance	Input y proceso	Output
Troubleshooting	$\Delta$ Output observado	Causado por $\Delta$ Input y/o $\Delta$ output
debottlenecking	$\Delta$ Salida o $\Delta$ Input deseado	Porción que limita el cambio en el proceso

# Problemas de performance



# Problemas de performance



Actualmente, el sistema está operando con la válvula de control **CV-1** completamente abierta y el flujo medido a través de la bomba es de 100 gpm. La elevación y la presión en ambos tanques son iguales, y la caída de presión a través del intercambiador de calor es de 5 psi. La caída de presión en la tubería es de 5 psi. Se observa que la velocidad para el intercambiador de calor es muy alta y debe ser reducida a la mitad. Se propone agregar un by-pass, que se ajusta mediante una válvula para que el flujo por el intercambiador de calor sea del 50 % del actual. Para el cambio propuesto, encontrar:

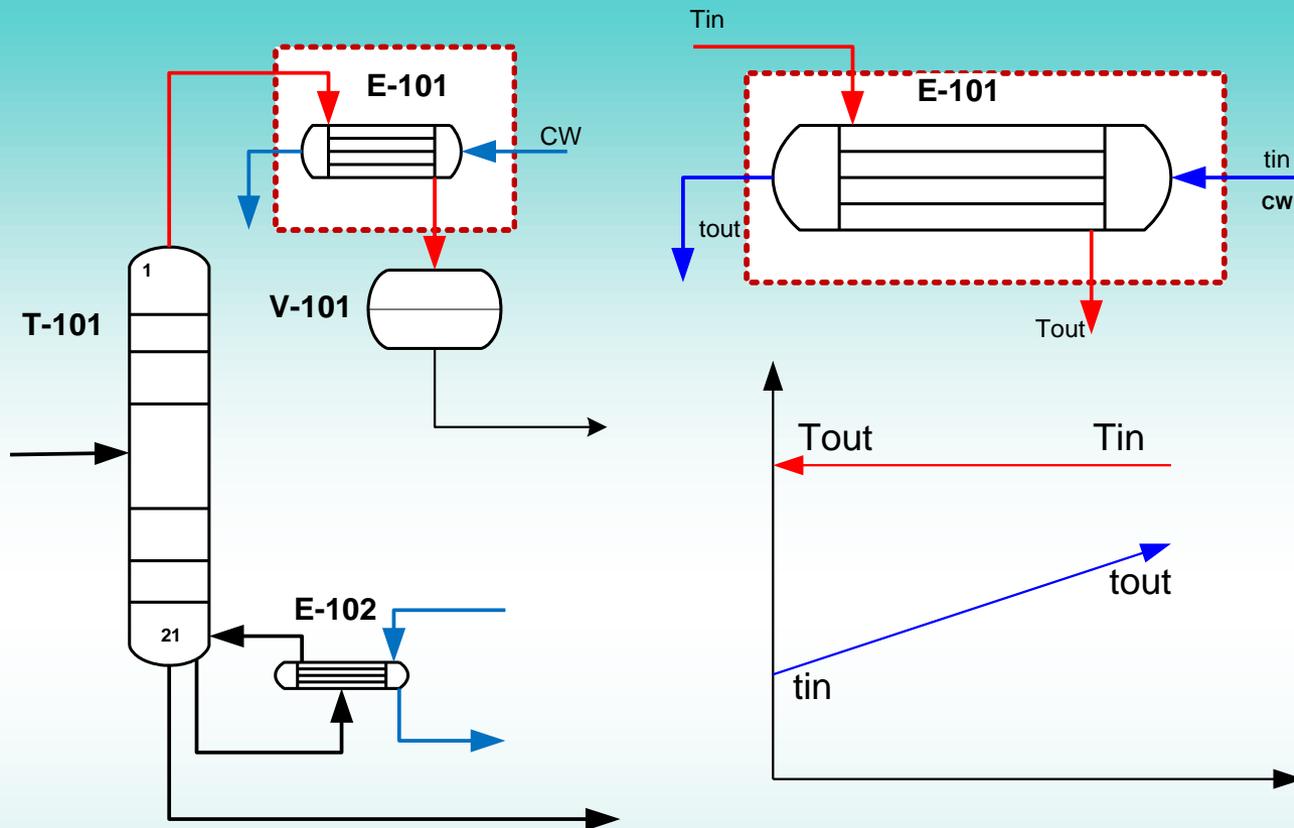
- La caída de presión a través del intercambiador de calor.
- El flujo total que pasa a través de la bomba.
- Suponiendo que toda la resistencia a la transferencia de calor está en el lado del fluido de proceso, determinar la temperatura del fluido que entra al tanque 2.

# Análisis de performance Múltiples OU

## Introducción

En un proceso químico, los equipos no operan en forma aislada. Al cambiar la entrada a un equipo cambia la salida, que puede ser la corriente de entrada a otra unidad del proceso.

Por ejemplo, una columna de destilación, tiene un *reboiler* y un condensador, y cualquier cambio en la columna o en los intercambiadores afecta a los dos equipos. Por lo tanto es necesario estudiar la interrelación entre la *performance* de múltiples unidades.



$$\Delta T_{ml}(t_{in}, t_{out}, T_{in}, T_{out}) := \frac{(T_{out} - t_{in}) - (T_{in} - t_{out})}{\ln\left(\frac{T_{out} - t_{in}}{T_{in} - t_{out}}\right)}$$

# Análisis de un reactor con IC

Cuando la **reacción es exotérmica**, es necesario remover calor, para la cual hay varias alternativas.

Según la magnitud del calor de reacción, se pueden utilizar los siguientes tipos de configuración de reactor:

- Para calores de reacción relativamente bajo, se pueden usar reactor con lecho empacado adiabáticos con interenfriamiento. Aquí, no se remueve calor en la sección de reacción. En lugar de eso, el fluido de proceso se calienta en el reactor y el calor es removido en intercambiadores de calor entre camas pequeñas de catalizador.

# Análisis de un reactor con IC

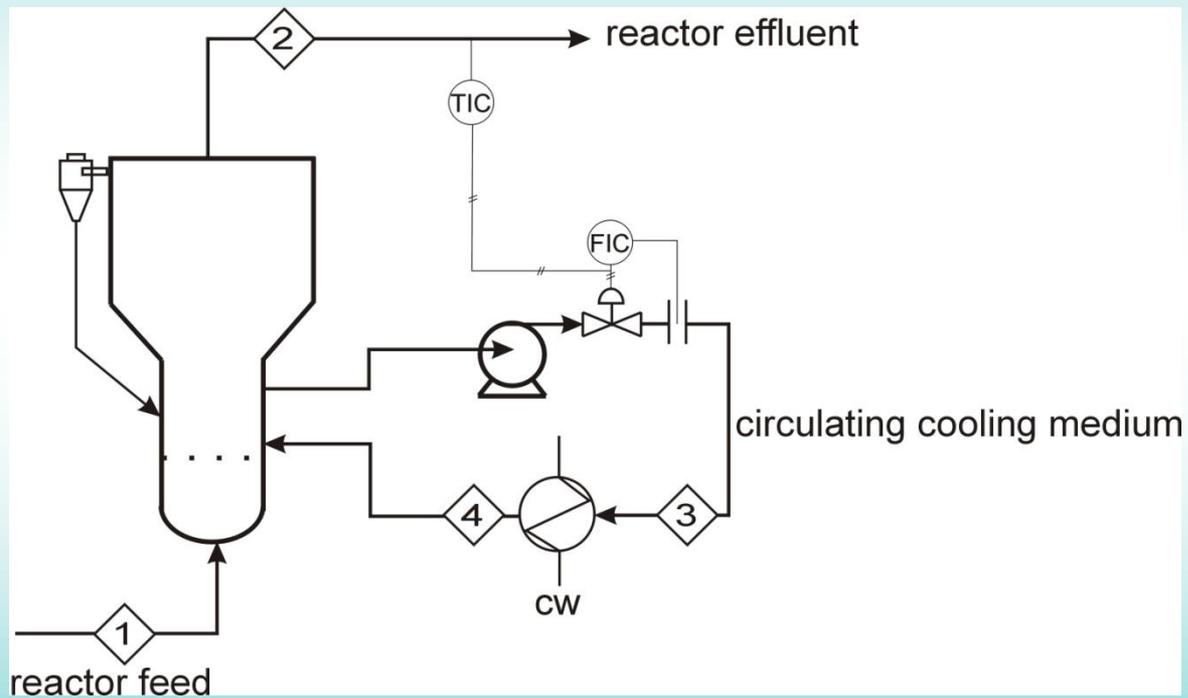
- Para **altos calores de reacción**, se puede usar un reactor con intercambiador de calor de coraza y tubo. La reacción ocurre en los tubos, que están empacados con catalizador. Dado que el calor de reacción aumenta, el diámetro del tubo disminuye para aumentar el área de transferencia de calor.

- Para **muy altos calores de reacción**, se usan lechos fluidizados con superficies interna de transferencia de calor, debido a la temperatura constante del fluido y la estabilidad relativa de tales reactores debido a la gran masa térmica de partículas sólidas bien mezcladas.

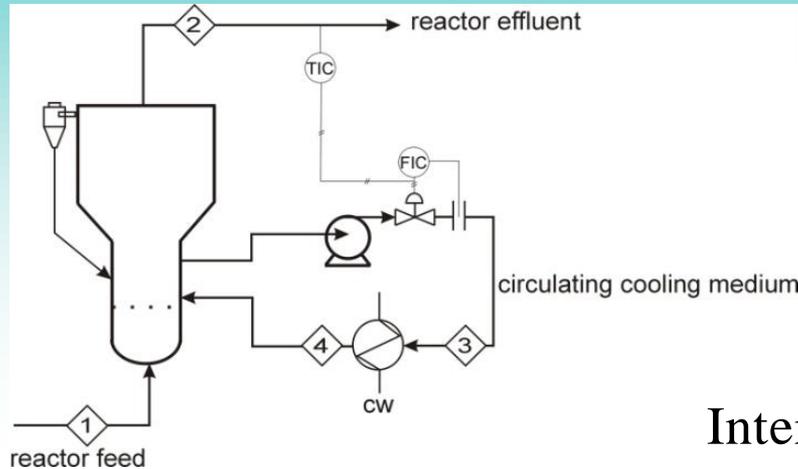
En los tres casos, la *performance* del reactor esta interrelacionada con los intercambiadores de calor.

# Ejemplos

- Hacer un *scale up* o *scale down*



# Ejemplo



reactor

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{\xi_2 \Delta H_{rxn,2}}{\xi_1 \Delta H_{rxn,1}}$$

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{\dot{m}_{D2} C_{p,D2} (T_{3,2} - T_{4,2})}{\dot{m}_{D1} C_{p,D1} (T_{3,1} - T_{4,1})} \leftarrow \text{Misma ecuación} \rightarrow$$

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{U_{rxr,2} A_{rxr,2} \Delta T_{lm,rxr,2}}{U_{rxr,1} A_{rxr,1} \Delta T_{lm,rxr,1}}$$

Intercambiador de calor

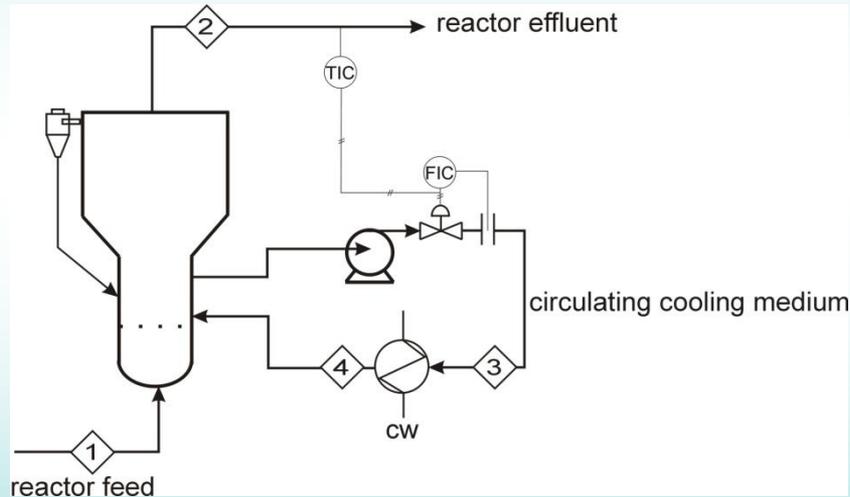
$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{\dot{m}_{cw,2} C_{p,cw,2} (T_{cw,out,2} - T_{cw,in,2})}{\dot{m}_{cw,1} C_{p,cw,1} (T_{cw,out,1} - T_{cw,in,1})}$$

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{\dot{m}_{D2} C_{p,D2} (T_{3,2} - T_{4,2})}{\dot{m}_{D1} C_{p,D1} (T_{3,1} - T_{4,1})}$$

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{U_{hx,2} A_{hx,2} \Delta T_{lm,hx,2}}{U_{hx,1} A_{hx,1} \Delta T_{lm,hx,1}}$$

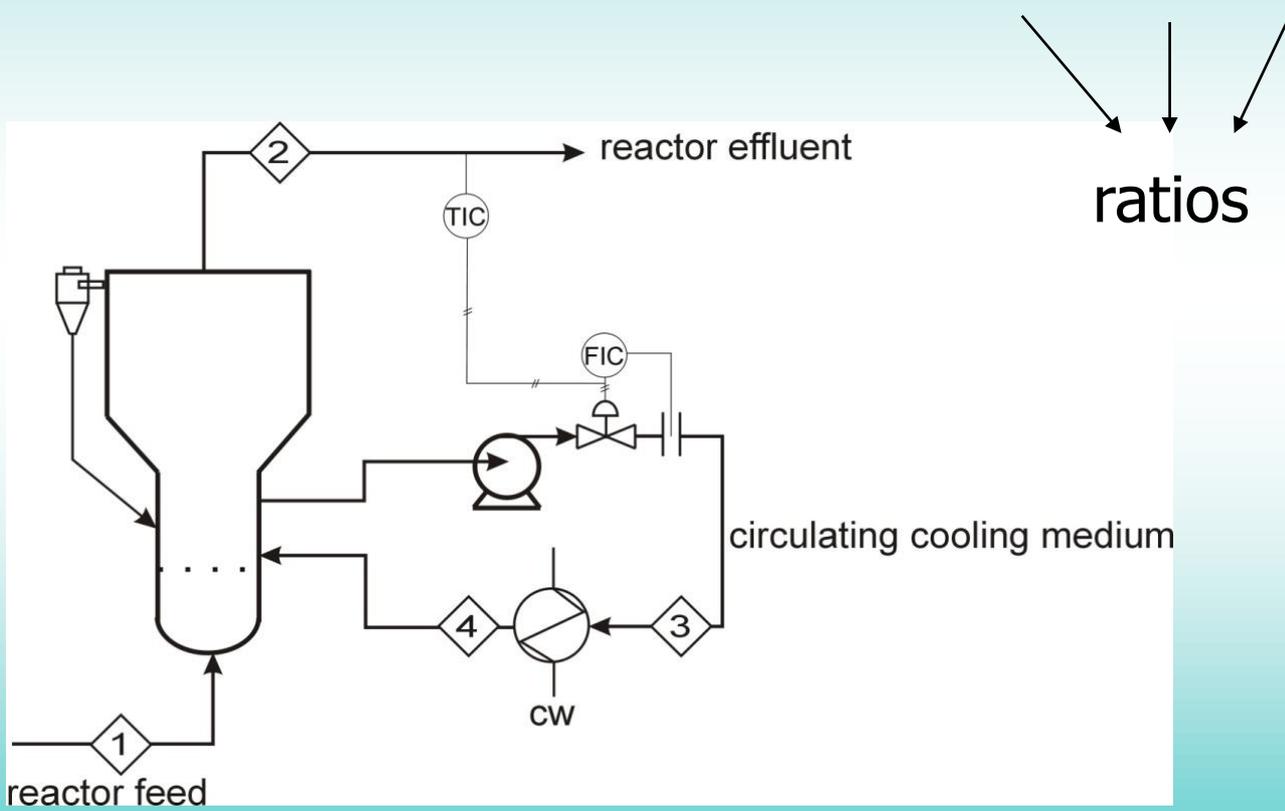
# Ejemplo

- El resultado son 5 ecuaciones
- Debe haber 5 incognitas



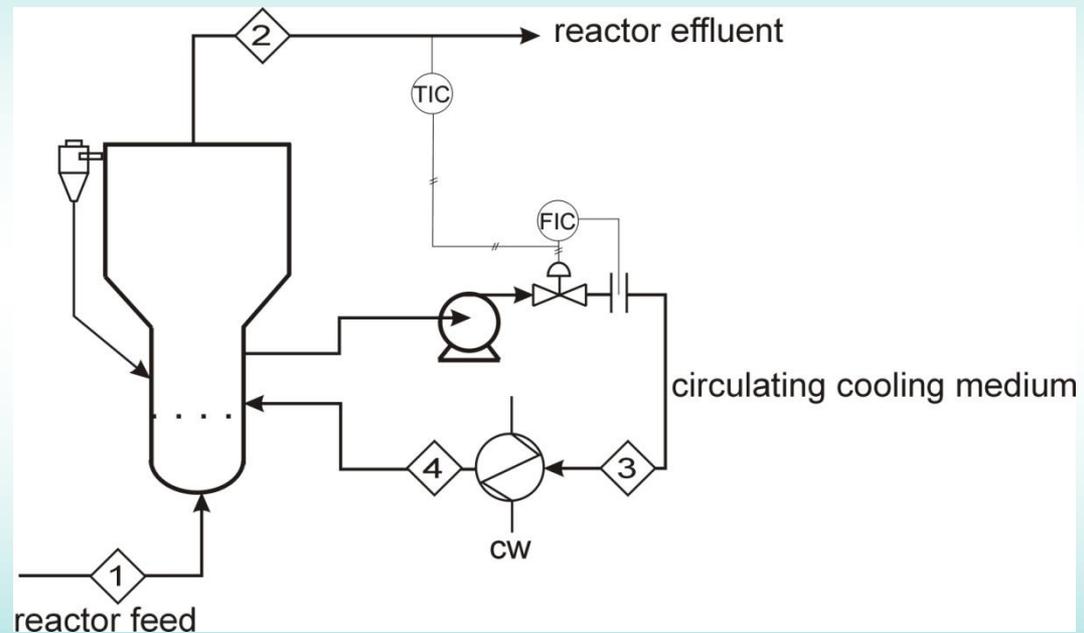
# Ejemplo

- 6 Incognitas:  $T_3$   $T_4$   $T_{cw,out}$   $Q$   $M_{cw}$   $M_D$



# Ejemplo

- Tener control de una variable
  - Requerido para mantener el control
  - De otra manera, solamente hay un conjunto posible de condiciones de operación
- Generalmente el caudal de CW
- Determinado por curva de bomba



# Ejemplo de análisis de un reactor con IC

• En un reactor de tubo y coraza, se produce la siguiente reacción química:



■ La cinética de la reacción química es la siguiente:

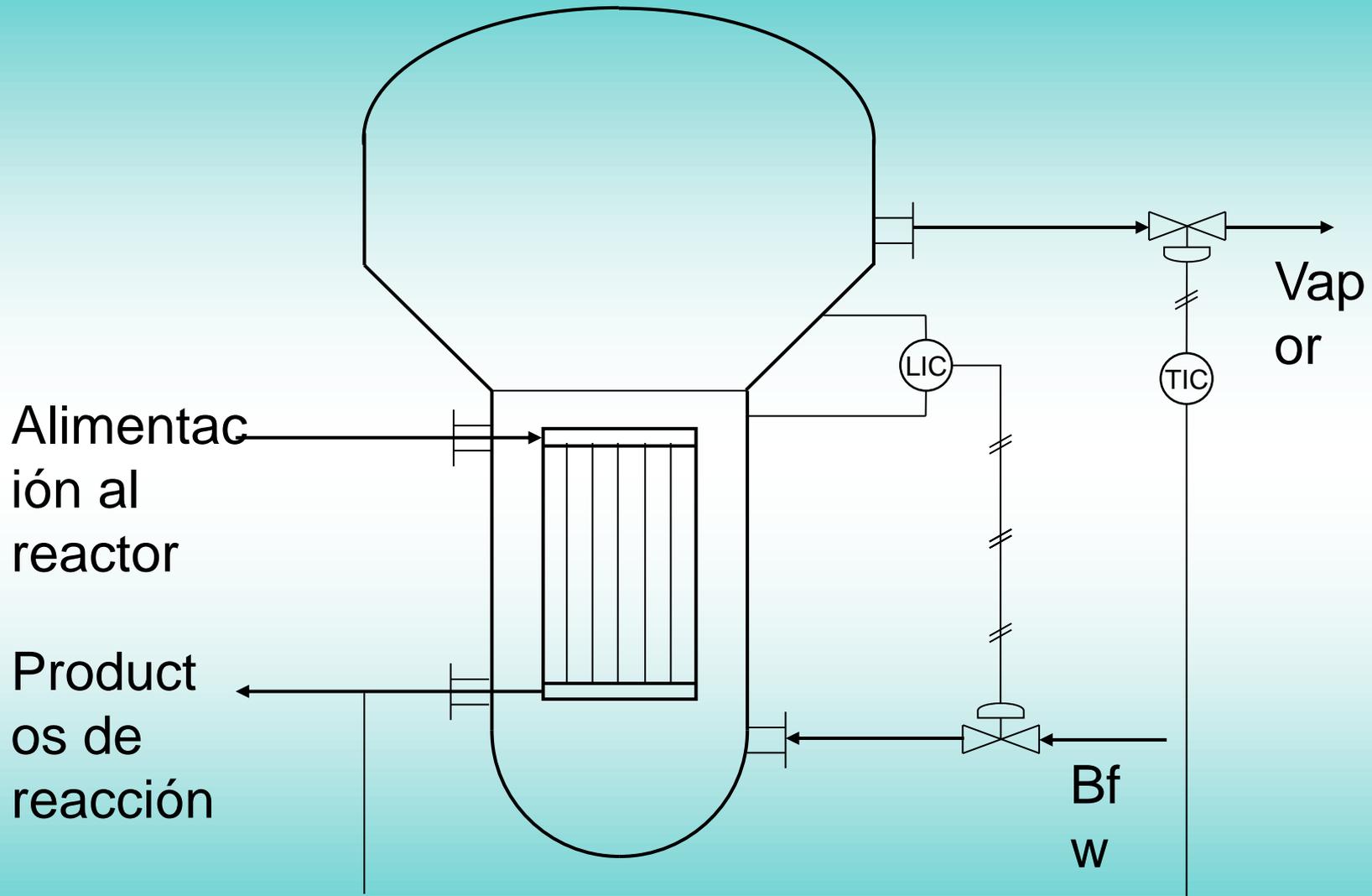
$$r = k C_b C_p \quad \frac{\text{mol}}{L s}$$

$$k = 3500 e^{-\frac{13.28 \left( \frac{\text{kcal}}{\text{mol}} \right)}{RT}}$$

# Ejemplo de análisis de un reactor con IC

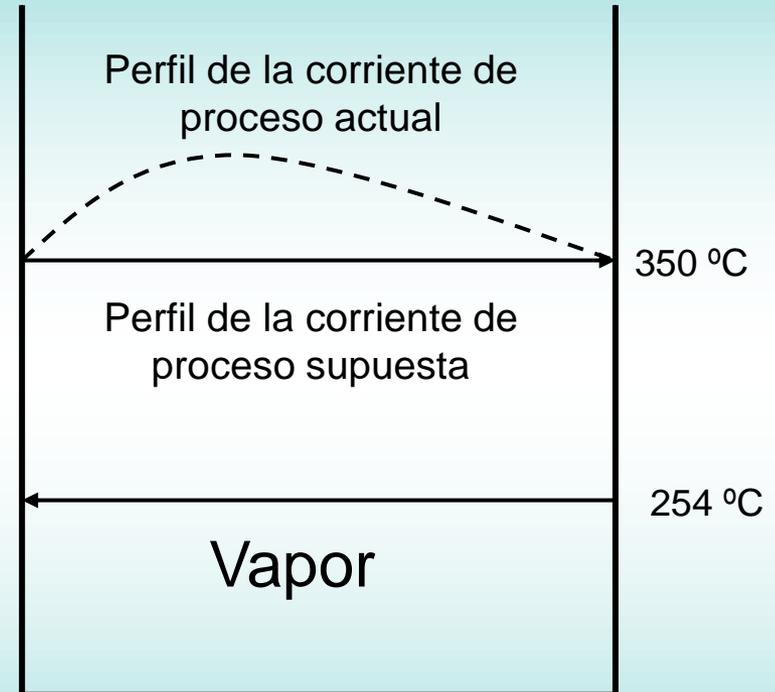
- Normalmente la reacción química ocurre a 350 °C y 3000 kPa. Se remueve calor produciendo vapor de alta presión a partir de agua líquida saturada en la coraza del reactor.
- El propileno es el reactivo limitante. La alimentación de propileno contiene 5 % de impureza de propano. La reducción de la concentración de la alimentación de propileno ocasiona una disminución de la producción de cumeno. Para mantener la producción deseada de cumeno, se sugiere aumentar la temperatura.

# Reactor de lecho empacada de coraza y tubo



# Suposiciones para resolver el problema

- La única impureza es el propano.
- La caída de presión en el reactor es despreciable.
- El **perfil de temperatura** en el reactor es plano (en la realidad puede haber sobrecalentamiento), la temperatura es de 350 °C.



# Análisis del reactor

Para mantener la producción deseada de cumeno al disminuir la concentración de propileno en la corriente de alimentación se propone aumentar la temperatura. Si el flujo de alimentación se mantiene constante al aumentar la concentración de impureza la concentración de propileno disminuye.

$$F_C = F_p X$$

$F_C$  = Flujo molar de cumeno

$F_p$  = Flujo molar de propileno alimentado.

$X$  = <sup>IP 2023</sup> conversión de propileno

# Análisis de Reactor – Aumento de T

A partir de la ecuación de *performance*, se pueden predecir una tendencia manteniendo constante la diferencia de temperatura.

$$\Delta T(\phi) = \frac{Q(\phi)}{U(\phi) A(\phi)}$$

Si la producción de cumeno se mantiene constante, Q en el reactor se mantiene constante.

El flujo no cambia, por lo tanto U permanece constante. El área también se mantiene constante, por lo tanto el  $\Delta T$  se mantiene constante.

# Análisis de Reactor – Aumento de T

Si  $\Delta T$  original se mantiene en 96 °C, a continuación se muestra la temperatura del lado del vapor, cuando se aumenta la temperatura de la corriente de proceso.

Incremento de temperatura (°C)	Temperatura del vapor (°C)	Presión de vapor (kPa)
0	254	4237
10	264	5002
20	274	5853

Para producir un vapor a alta temperatura, el agua y la presión del vapor deben aumentar en la coraza.

Para 10 °C de incremento en la temperatura, la presión en la coraza debe aumentar más del 20 % y para 20 °C de incremento, la presión aumenta cerca del 38 %.

# Análisis de Reactor – Aumento de P

Otra variable que se puede manejar para compensar la disminución de la concentración del reactivo limitante es aumentar la presión, sobre todo cuando se trata de reacciones en fase gaseosa. Para gas ideal

$$C_i = \frac{P_i}{RT}$$

Teniendo en cuenta la ecuación de diseño de un reactor tubular

$$\frac{\tau}{C_{A0}} = \int_0^X \frac{dX}{-r_A}$$

Dado que el flujo másico es:  $F_0 = \rho A v$

Un incremento en la presión aumenta la densidad, a flujo másico constante, velocidad disminuye. Por lo tanto el tiempo de residencia  $\tau$  en el reactor se incrementa, de donde resulta un incremento en la conversión y la producción de cumeno.

# Análisis de Reactor

Una variación de temperatura provoca una gran variación de la  $r$ , lo que produce más calor, produciendo un valor máximo en el perfil de temperatura, causando zonas calientes (*hot spot*). Este efecto puede dañar el catalizador o promover reacciones laterales indeseables.

En este caso la solución más probable es la que considera el aumento de la presión y la temperatura. Si esto no es suficiente, puede ser necesario incrementar el flujo de los reactivos. Esta última propuesta puede estar limitada por la performance del equipo de bombeo.

# Columna de destilación

## ¿Cómo elegir la presión de operación de una columna de destilación?

En general en base a:

- Temperatura de condensador
- Temperatura de fondo de la columna de destilación

### Algoritmo:

- (1). Si es posible – usar la corriente de enfriamiento de menor costo - agua de enfriamiento (o aire) en el condensador.
- (2). Si por la elección de (1) anterior, la temperatura del fondo de la columna es demasiado alta - reducir la presión de fondo de modo que sea aceptable y se puede elegir la corriente de enfriamiento (refrigerante) más conveniente.

# Presión de la columna de destilación

Un despropanizador es una columna que separa el propano de n-butano. ¿A qué presión se opera esta columna?

$$\log P^*(\text{mmHg}) = A - B/(C+T)$$

Propano  $A = 6.80398$   $B = 803.810$   $C = 246.990$

N-butano  $A = 6.80896$   $B = 935.860$   $C = 238.730$

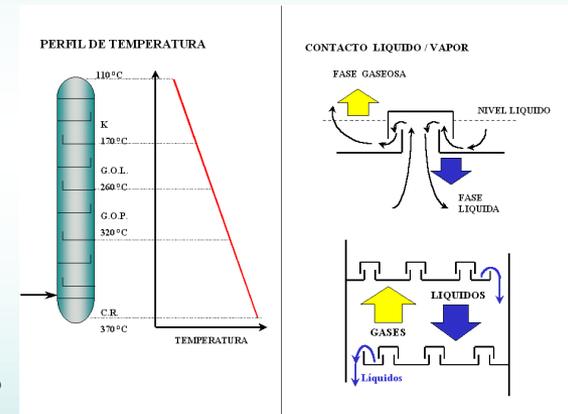
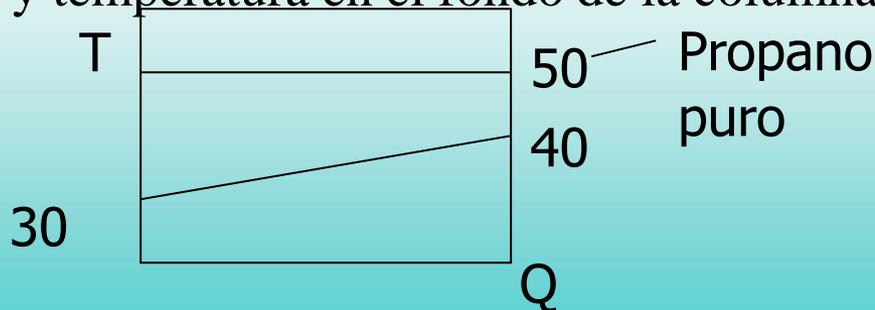
## Despropanizador – Condensador

### Propano

$$\begin{aligned} \log P^*(\text{mmHg}) &= 6.80398 - 803.810 / (246.990 + 50) \\ &= 4.0975 \end{aligned}$$

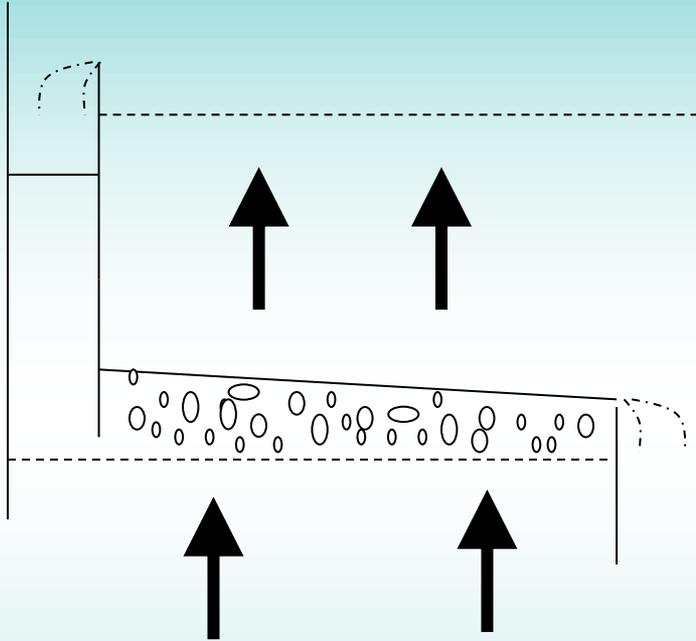
$$P^* = 12,516 \text{ mmHg} = 242 \text{ psia}$$

Cuál es la presión y temperatura en el fondo de la columna?



# Presión de la columna de destilación

De que depende la caída de presión  $\Delta p_{tray}$ ?



Frecuentemente este es el termino dominante  $\therefore \Delta P_{tray}$  no es función (condiciones de operación)

$$\Delta P_{tray} = \overbrace{\rho_l g (h_w + h_{cr})} + k \rho_g v_o^2$$

# Presión de la columna de destilación

Despropanizador:

Dado  $\Delta P_{col} = 5$  psi

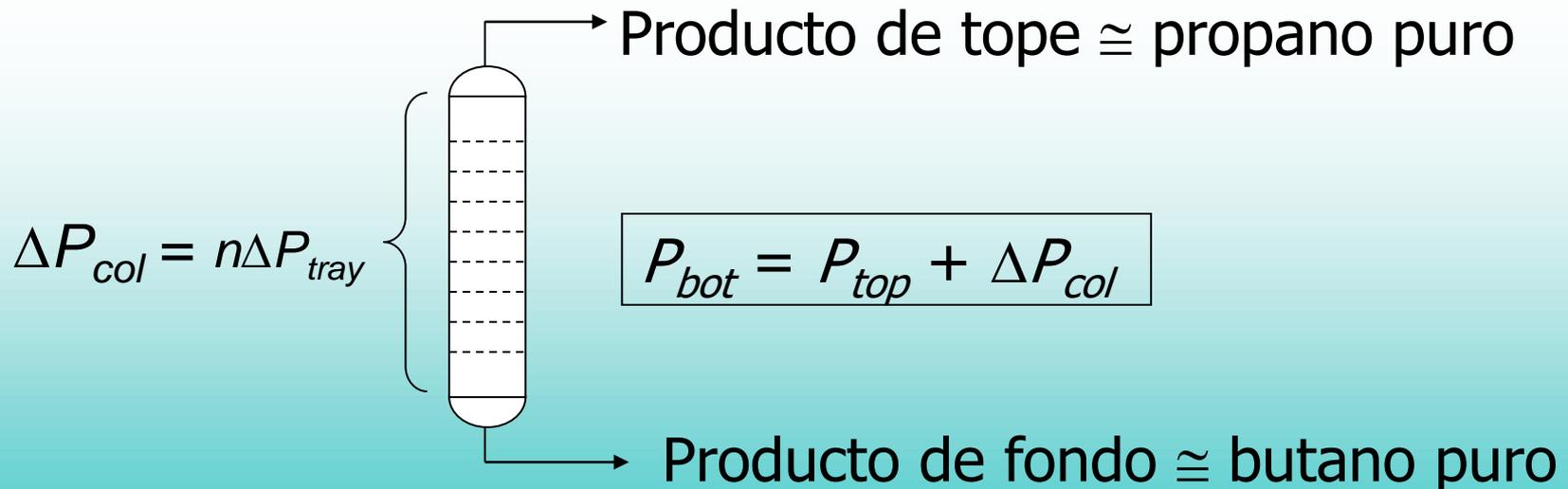
$$P_{bot} = 242 + 5 = \underline{247 \text{ psia}} = \underline{12,770 \text{ mmHg}}$$

Para el producto de fondo (butano)

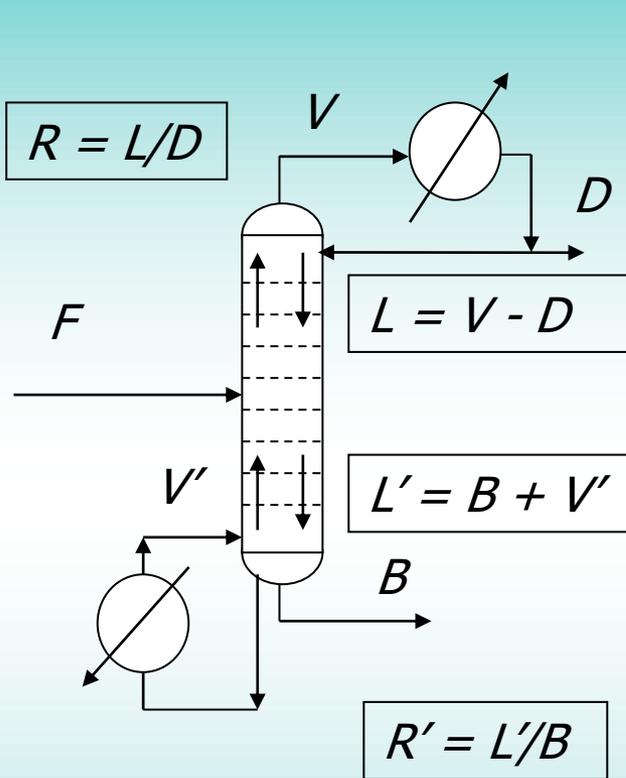
$$A - B/(C+T) = \log(12,770)$$

$$T = B/[A - \log(12,770)] - C = 935.860/[6.80896 - \log(12,770)] - 238.730$$

$$\underline{T = 107.5^\circ\text{C}}$$



# Scale up/Scale down de columna



¿Qué sucede si queremos cambiar la velocidad de alimentación a la columna?

Si queremos mantener la misma pureza entonces la relación de reflujo debe permanecer constante.

## Scale-down

¿Cómo ajustar el condensador y reboiler para mantener la relación de reflujo lo mismo? De esta manera se conservará la pureza del producto

## Tope columna

$$Q_D = V\lambda_D = D(1+R)\lambda_D$$

## Fondo de columna

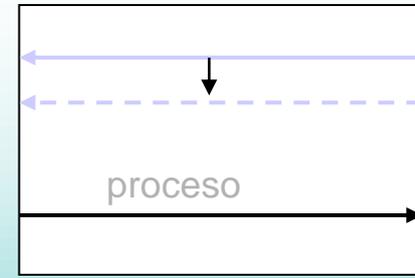
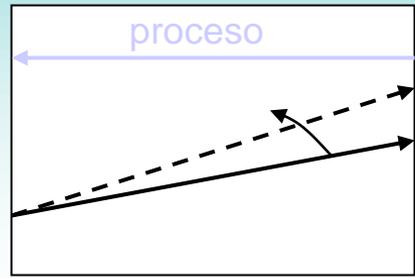
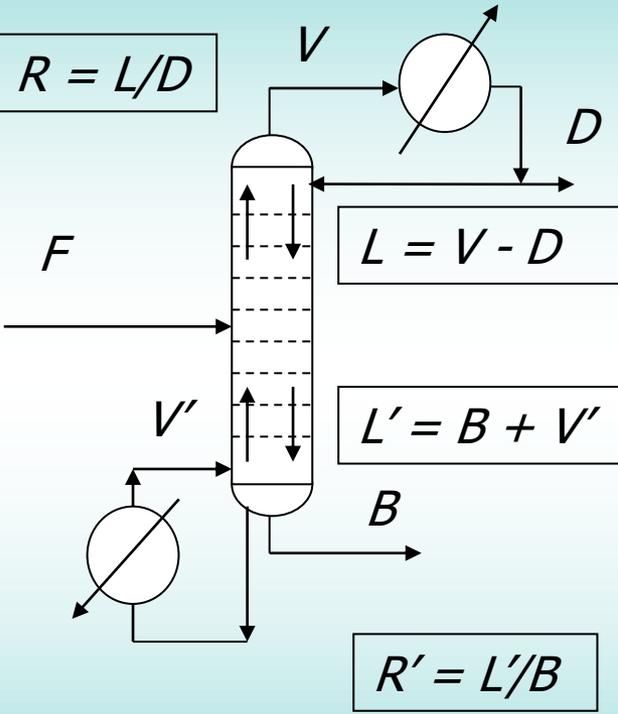
$$Q_B = V'\lambda_B = B(R'-1)\lambda_B$$

$$F = B + D$$

$$Fx_f = Bx_B + Dx_D$$

$Q_D$  y  $Q_B$  linealmente escalados con  $F$  si se mantiene la pureza.

# Scale up/Scale down de columna



$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{U_2 A_2 / \Delta T_{lm,2}}{U_1 A_1 / \Delta T_{lm,1}} = \frac{(\dot{m}c_p \Delta T)_{cw,2}}{(\dot{m}c_p \Delta T)_{cw,1}} = \frac{[D(1+R)M\lambda_D]_2}{[D(1+R)\lambda_D]_1}$$

$$\frac{U_2}{U_1} = \frac{\frac{1}{h_{i,1}} + \frac{1}{h_{o,1}}}{\frac{1}{h_{i,1}M_{cw}^{0.8}} + \frac{1}{h_{o,1}}}$$

$M = \frac{\dot{m}_{p,2}}{\dot{m}_{p,1}}$	$M_{cw} = \frac{\dot{m}_{cw,2}}{\dot{m}_{cw,1}}$
-------------------------------------------	--------------------------------------------------

Se reduce cw y la presión de vapor del reboiler.

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{U_2 A_2 / \Delta T_{lm,2}}{U_1 A_1 / \Delta T_{lm,1}} = \frac{(\dot{m}\lambda)_{steam,2}}{(\dot{m}\lambda)_{steam,1}} = \frac{[B(R'-1)M\lambda_B]_2}{[B(R'-1)\lambda_B]_1}$$

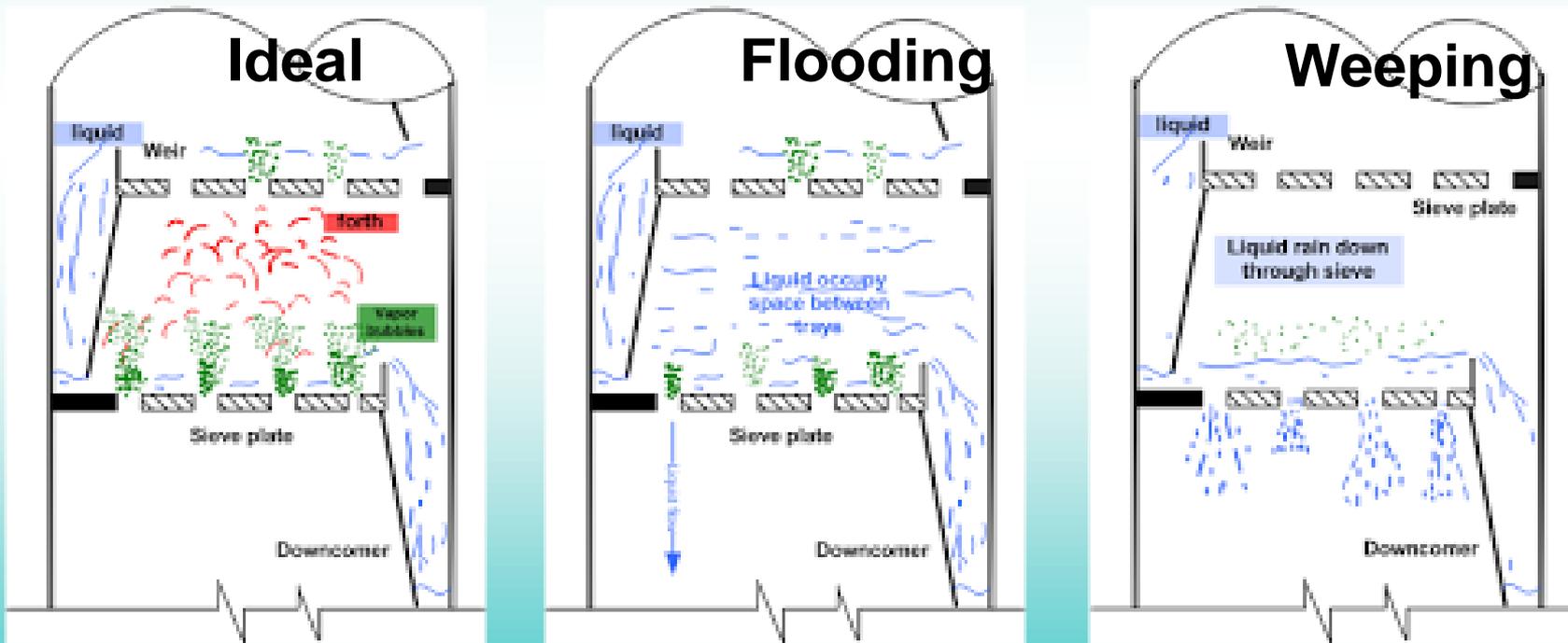
$$\frac{U_2}{U_1} = \frac{\frac{1}{h_{i,1}} + \frac{1}{h_{o,1}}}{\frac{1}{h_{i,1}} + \frac{1}{h_{o,1}}} = \text{constant}$$

# Scale up/Scale down de columna

¿Qué otros factores debemos considerar cuando es necesario cambiar la operación de una columna?

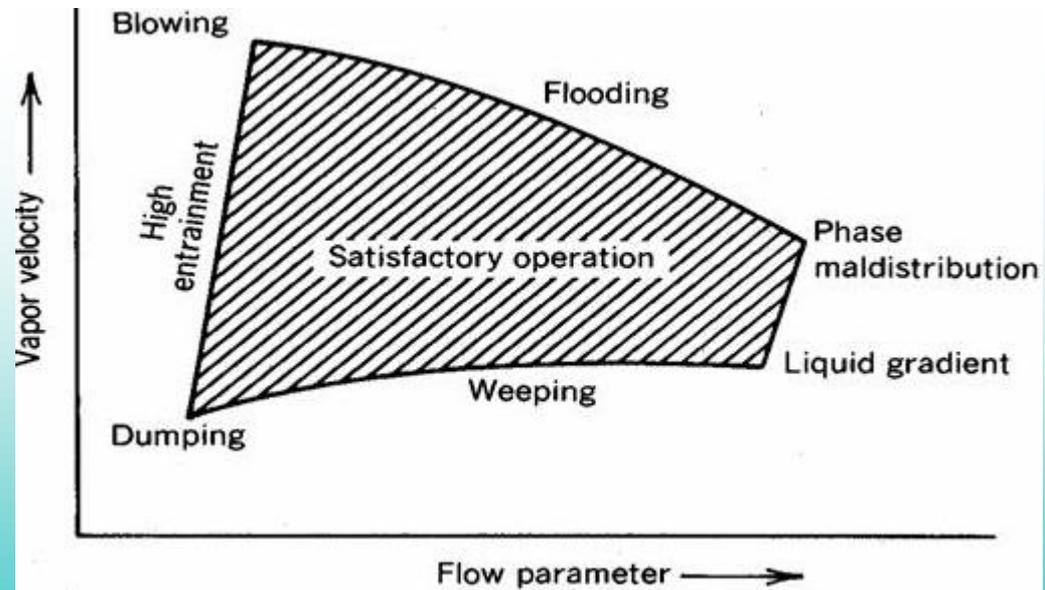
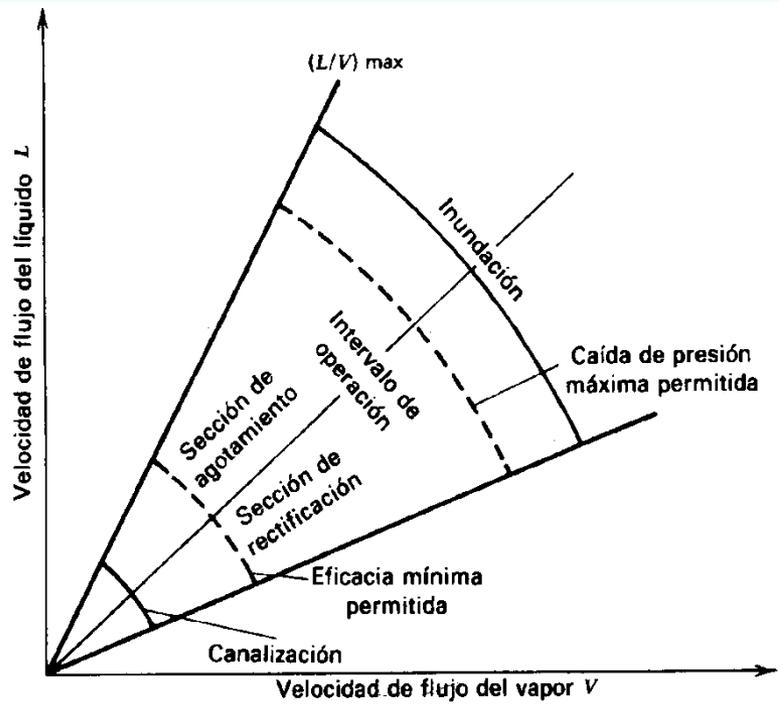
La capacidad de la columna de destilación de procesar más o menos material está limitada por:

- ❖ Inundación (scale up)
- ❖ Weeping (scale down)



# Columna de destilación – Cuello de botella

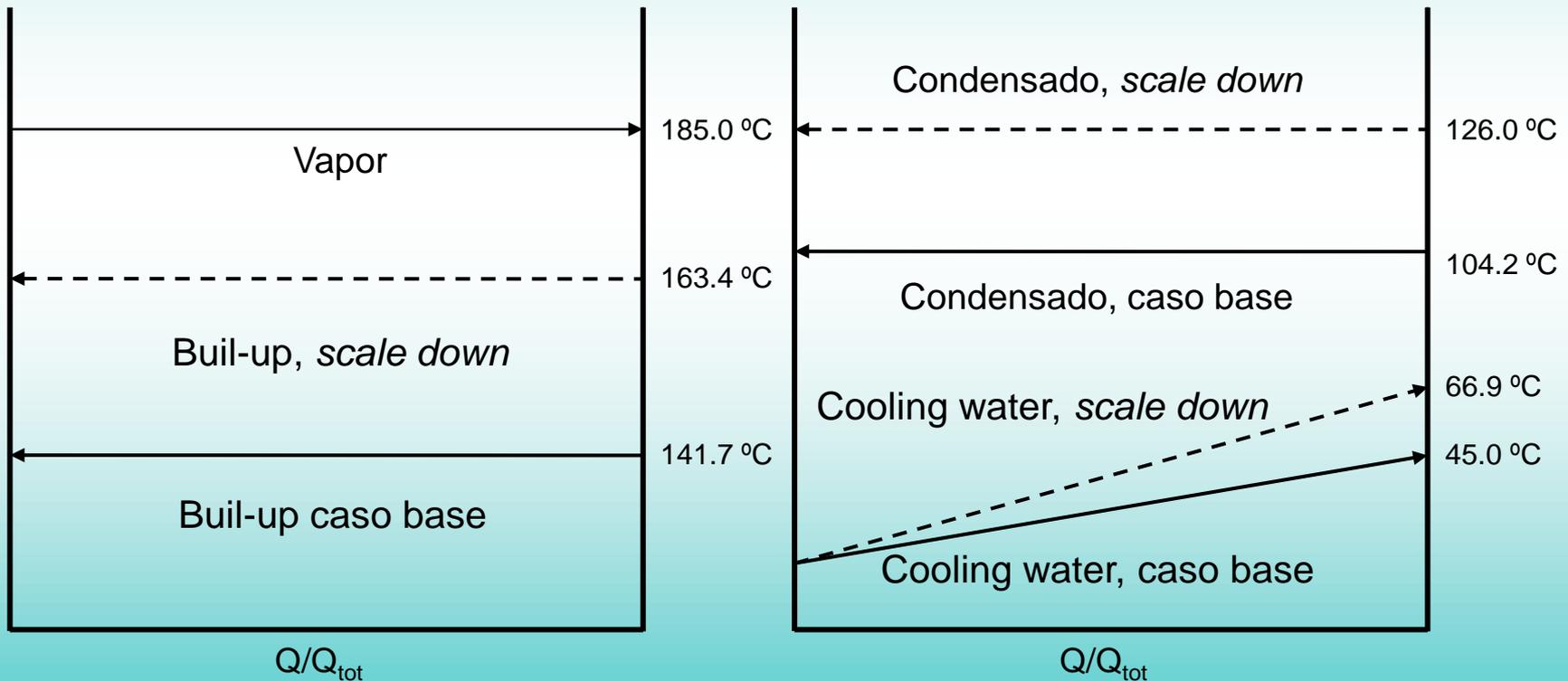
- El **reboiler** debe ser resuelto para poder realizar el scale down.
- El agua de enfriamiento retorna a una temperatura más alta que la permitida, la cual podría causar un ensuciamiento excesivo en un periodo corto de tiempo.
- Otros problemas están relacionados a la operación de la columna debido por ejemplo a la reducción de vapor.



# Columna de destilación

Para llevar a cabo un *scale down* en una columna de destilación, reduciendo un 50 % el flujo de proceso, se requiere una alta presión y el agua de enfriamiento se retorna a una temperatura más alta que antes del *scale down*.

•En el proceso de cambiar las condiciones de operación en la planta, se alcanza un punto a partir del cual no se puede aumentar o disminuir, cuello de botella. Este esta relacionado con un equipo que no puede manejar cambios adicionales.



# Estrategia de solución de problemas

1. Reemplazar el IC. Las ecuaciones de performance, muestran que un nuevo IC con la mitad del área original permite la operación a la temperatura y presión original. El área del transferencia del IC existente puede reducirse desconectando algunos tubos, pero esta modificación requiere una parada del proceso.

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{U_2 A \Delta T_2}{U_1 A \Delta T_1}$$

2. Mantener constante la velocidad del boil –up. La velocidad del vapor en la torre se mantiene. Si estamos operando cerca del límite de velocidad más bajo se inicia la inundación o la eficiencia de la torre es muy baja. El boil-up constante aumenta la separación en la torre.
3. Introducir la alimentación en un plato diferente. El plato debe ser seleccionado para disminuir la separación e incrementar la concentración en el fondo del componente menor volátil. Esto reduce la temperatura del proceso, incrementa el DT de transferencia de calor y el calor intercambiado en el reboiler.

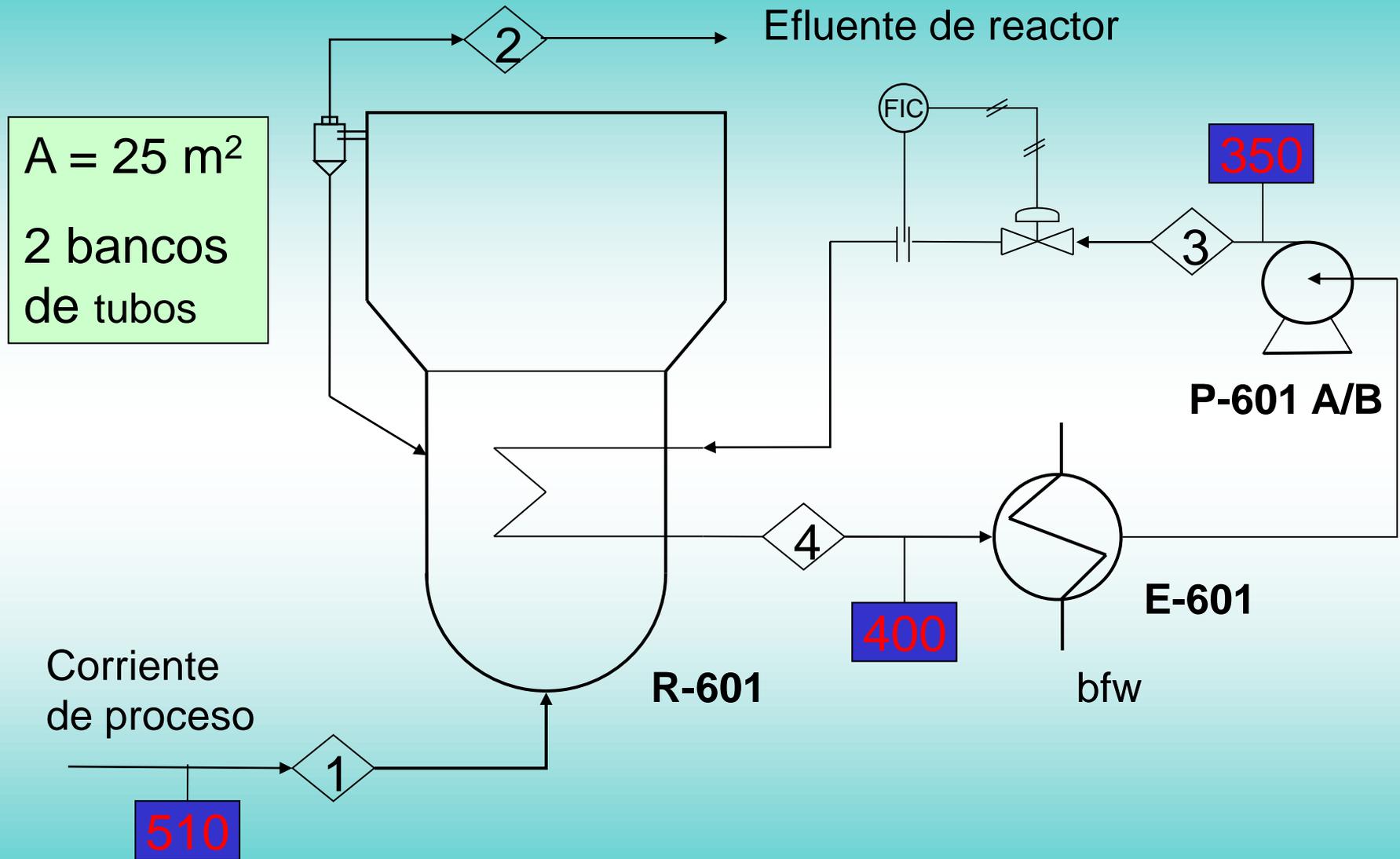
# *Performance* de un lazo de calentamiento

- Debido a una emergencia, es necesaria realizar una parada no programado en una planta de producción de cloruro de alilo. Determine el máximo *scale-up* posible para que el reactor pueda operar a una mayor velocidad cuando el mismo entre nuevamente en operación. El reactor funciona en  $510\text{ }^{\circ}\text{C}$ . El Dowtherm puede operar a una temperatura máxima de  $400\text{ }^{\circ}\text{C}$  y 138 psig. El reactor contiene dos intercambiadores de calor que pueden ser configurados en serie o paralelo. La resistencia de transferencia de calor del lado del reactor es cuatro veces que en el lado Dowtherm. Una bomba de repuesto está disponible. El agua de la caldera (fluido de intercambio) está disponible a  $90\text{ }^{\circ}\text{C}$  y 600 psig (la temperatura de vaporización es  $254\text{ }^{\circ}\text{C}$ ). Toda resistencia térmica en el intercambio del lazo de calentamiento está en el lado del Dowtherm. En las condiciones de operación normal (caso base), el flujo del Dowtherm es de 85 gpm.

# *Performance* de un lazo de calentamiento

- Para un caso en el cual el calor de reacción es muy elevado, es removido mediante la transferencia de calor a un fluido.
- El cuello de botella para el *scale-up* es la *performance* del lazo de remoción de calor.
- Las unidades deben ser analizadas simultáneamente.
- Se analizará el aumento de la producción de una planta de cloruro de alilo.
- El objetivo es determinar el máximo *scale up* posible.
- El reactor es de lecho fluidizado, que opera isotérmicamente a 510 °C. El reactor esta operando a dos veces la velocidad mínima de fluidización.
- Un incremento de la temperatura destruye el catalizador y si la temperatura disminuye la reacción es incompleta.
- Para remover el calor se usa DowTherm A, cuya temperatura máxima de operación es 400 °C. El caudal es de 85 gal/min.
- Hay dos IC en el reactor, y están operando en serie.
- La resistencia de transferencia de calor del lado del reactor es cuatro veces la resistencia del Dowtherm A.
- Se produce vapor de alta presión a partir del calor removido.

# Lazo de remoción de calor para máximo *scale-up*



# Balance de materia y energía

- Balance de energía sobre el fluido de proceso en el reactor

$$Q_R = F_{Cl} \Delta H_r$$

FCl es el flujo molar del cloro, reactivo limitante. Dado que el calor de reacción es constante durante el *scale up*, entonces la cantidad de calor removido aumenta con el *scale up*.

- Balance de energía para el lazo de remoción de calor

$$Q_R = F_D C_{pD} (T_4 - T_3)$$

El calor removido es proporcional al flujo y al incremento de temperatura.

# Flujo máximo de Dowtherm A

- Caso base: punto **a**.
- $\Delta P_v = 15 \text{ ft H}_2\text{O}$
- La caída de presión del sistema se puede obtener de la siguiente ecuación

$$\Delta P = \frac{2 f L_{eq} v^2}{D}$$

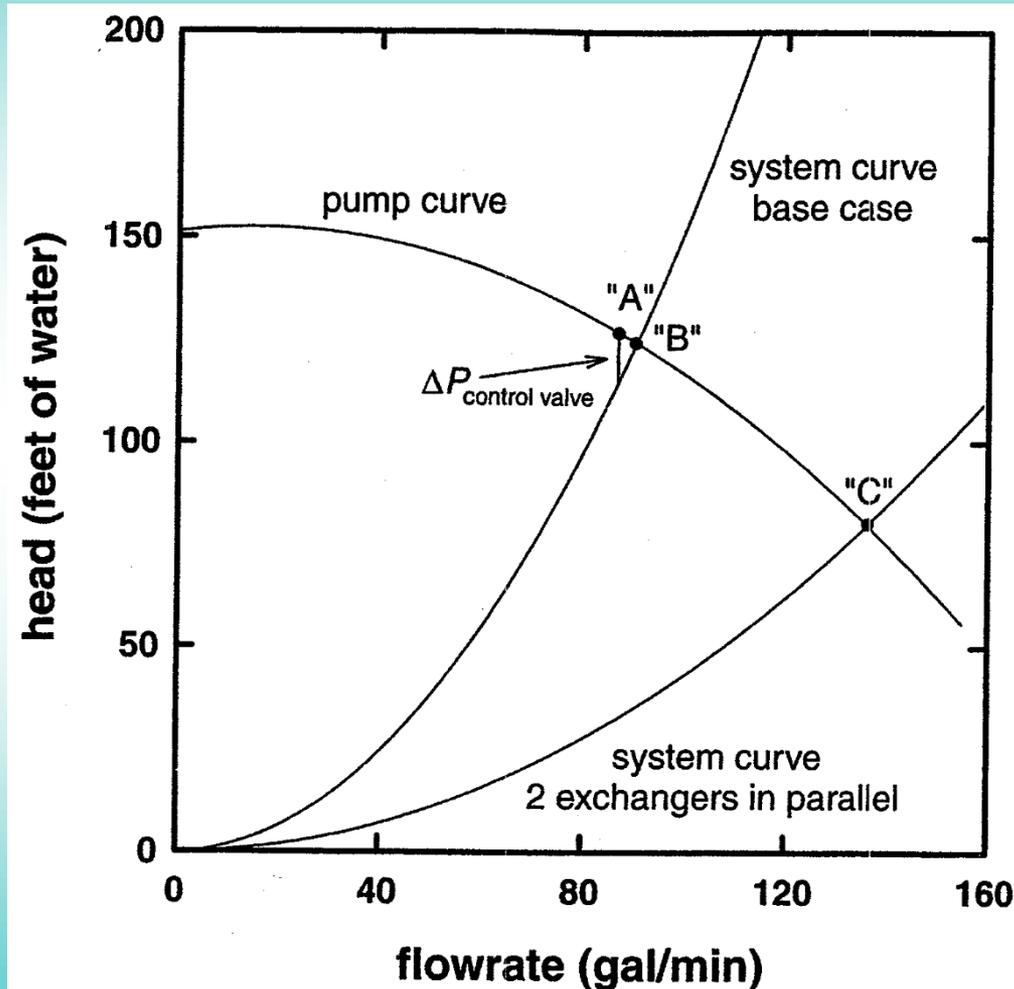
Para el *scale up*

$$\frac{\Delta P_2}{\Delta P_1} = \frac{v_2^2}{v_1^2} = \frac{F_2^2}{F_1^2} = M^2$$

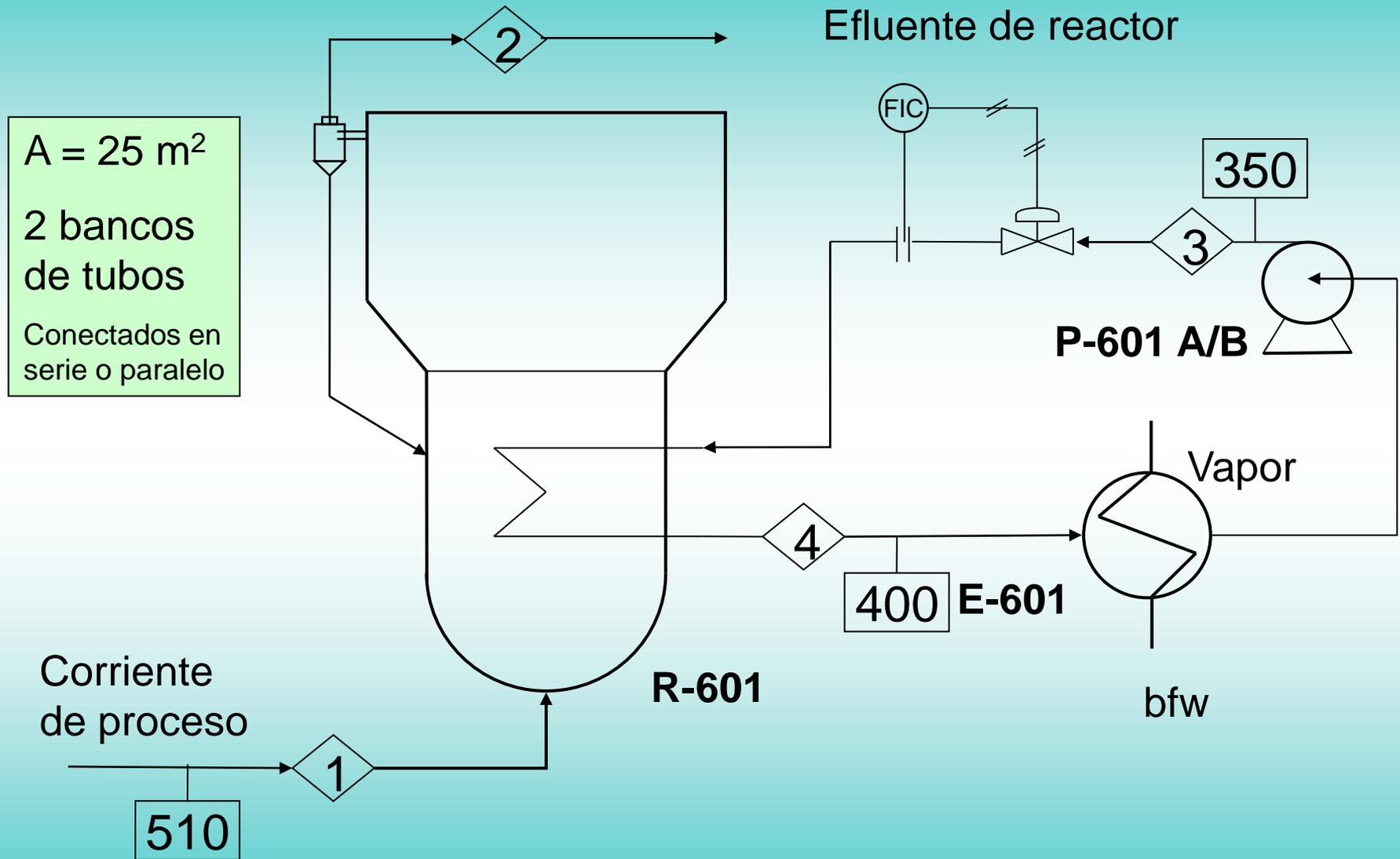
**M: factor de *scale up***  
**Máximo cuando la válvula está totalmente abierta**

# Lazo de remoción de calor

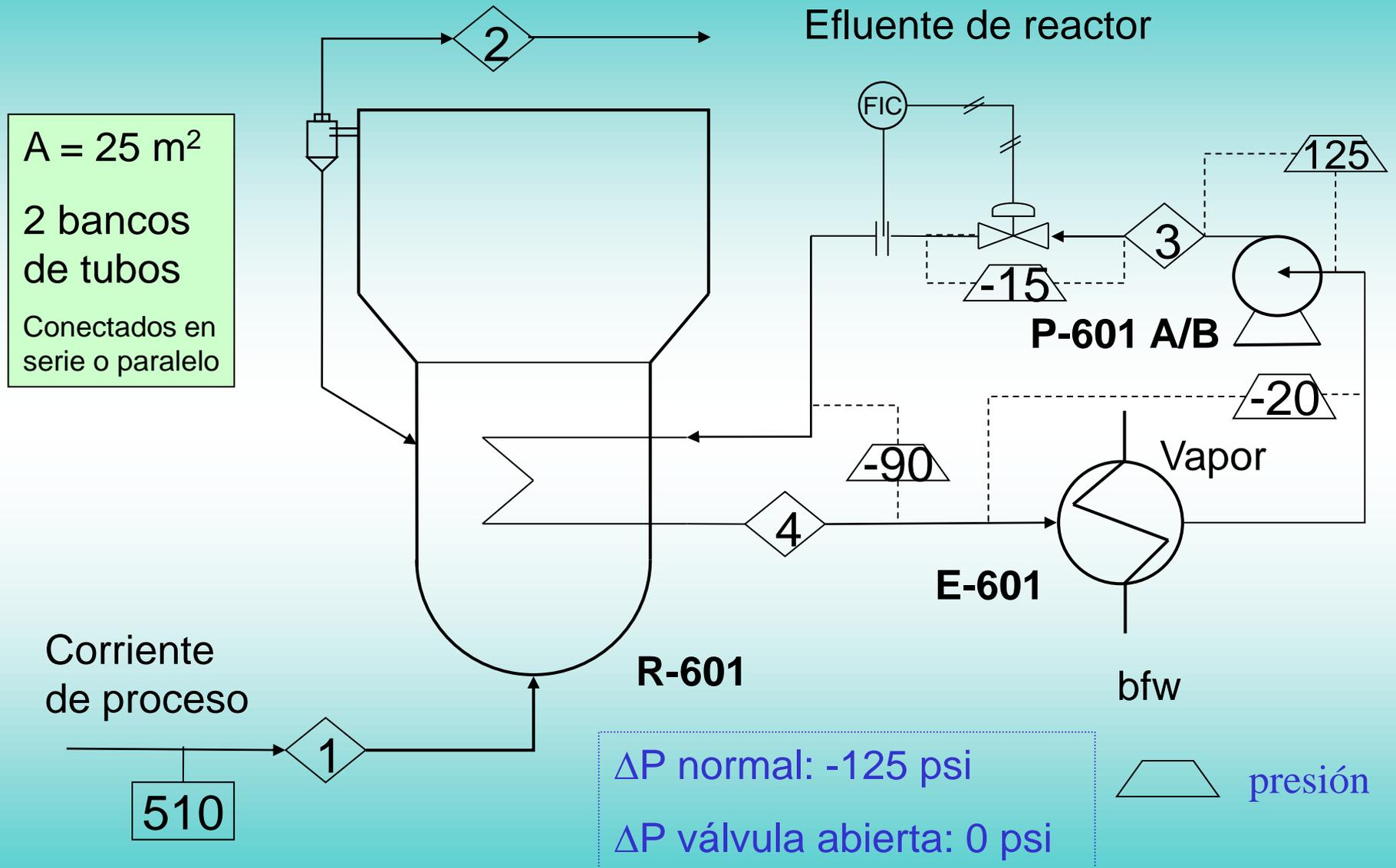
- Aumento del flujo de Dowtherm A (fluido térmico).



# Lazo de remoción de calor



# Lazo de remoción de calor. Caída de presión



# *Scale up* - Alternativas

El máximo scale up está limitado a un aumento del 5 % de flujo de Dowtherm A (fluido térmico) en el lazo de remoción de calor.

Para superar este cuello de botella, las siguientes alternativas son posibles:

- Operar el reactor con los intercambiador de calor en paralelo, con una bomba.
- Usar las dos bombas en paralelo con los IC del reactor en serie.
- Conectar las bombas en serie con los intercambiadores de calor en serie.
- Conectar las bombas (serie o paralelo) y operar los IC en paralelo.

# Performance de la bomba P-601 A/B

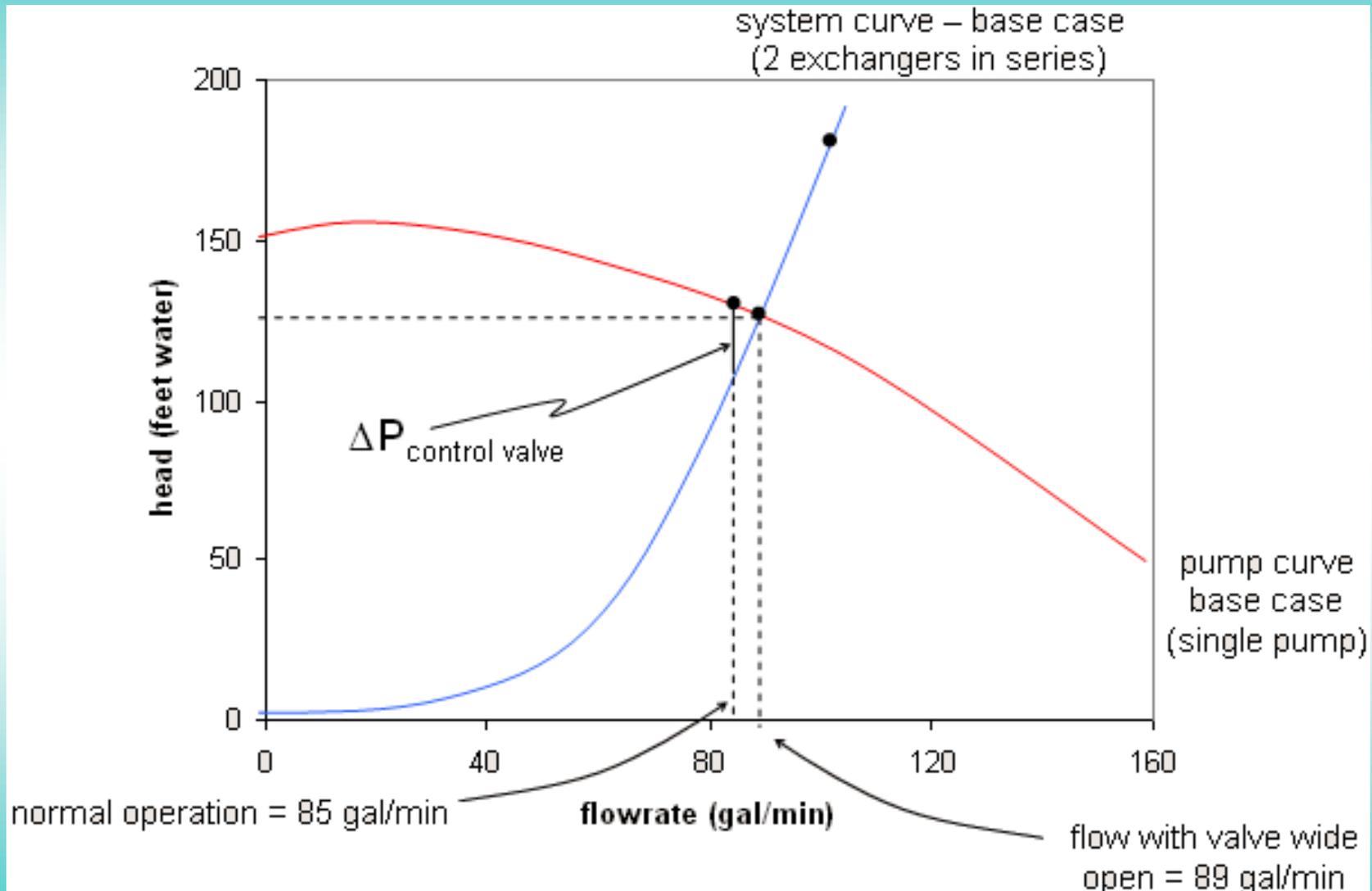
- La cantidad de flujo debido a la bomba P-601 A/B puede determinarse en relación al caso base.

$$\Delta P = \frac{2 f L_{eq} v^2}{D}$$

$$\frac{\Delta P_2}{\Delta P_1} = \frac{\Delta P_2}{110} = \frac{v_2^2}{v_1^2} = \left( \frac{F_2}{F_1} \right)^2 = M^2$$

- “M” es el factor de *scale-up*.

# Performance de la bomba P-601 A/B



# Performance de la bomba P601-A/B

- ❑ El **caso base** involucra IC conectados en serie.
- ❑ Cuando los IC están conectados en paralelo con una bomba,  $L_{eq}$  es reducida a la mitad.
- ❑ El flujo se divide en dos por los IC, esto implica que la velocidad de Dowtherm A circula a la mitad de la velocidad en cada tubo. Esto implica que la velocidad se reduce en 4 veces.
- ❑ En relación al caso base, la caída de presión en el reactor (IC) cambia en un factor de 8 veces, llega a ser 11.25 ft H<sub>2</sub>O.

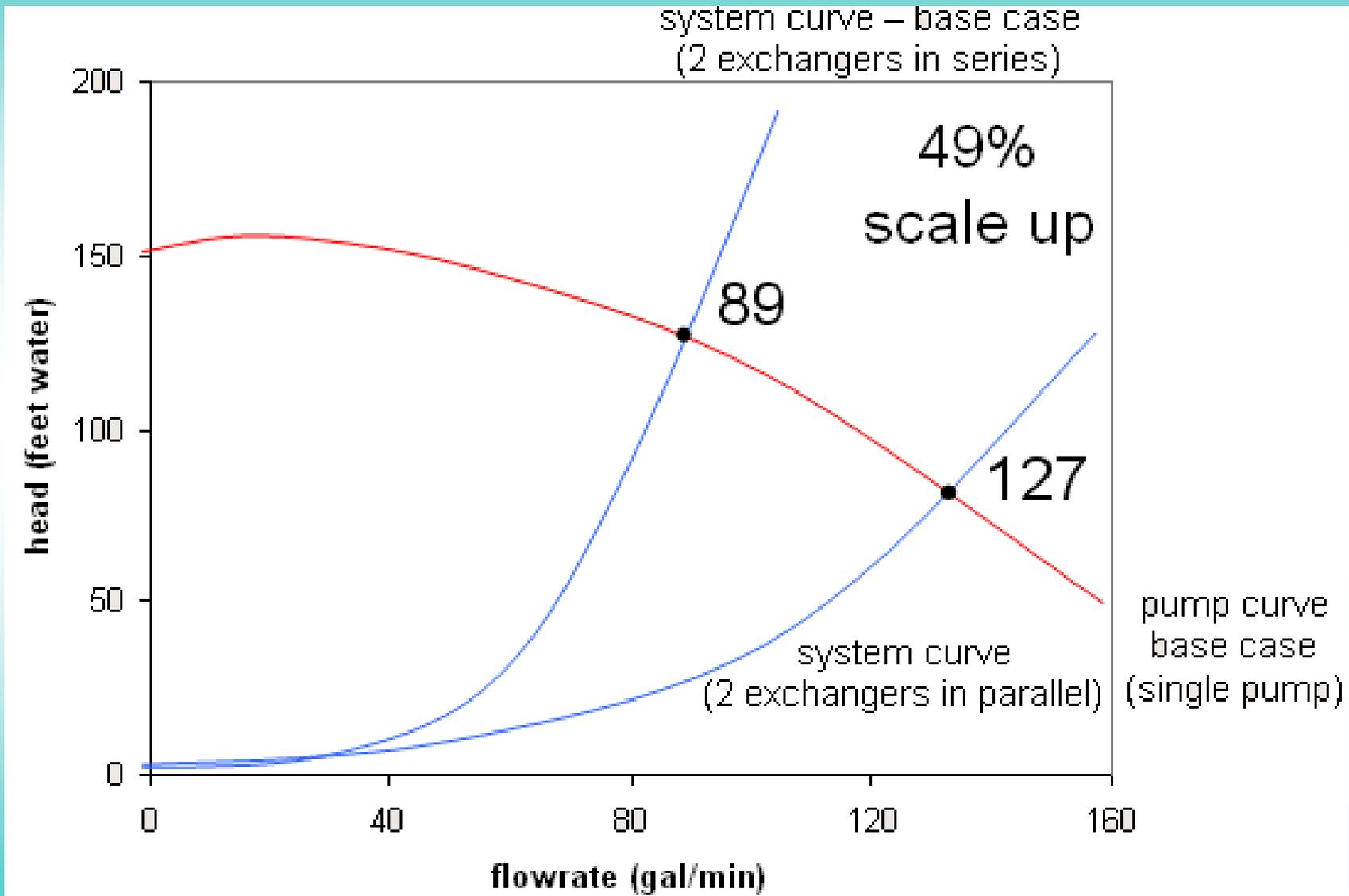
La caída de presión en el caso base es de 31.25 ft H<sub>2</sub>O.

La nueva curva del sistema para el nuevo caso esta dada por la siguiente expresión:

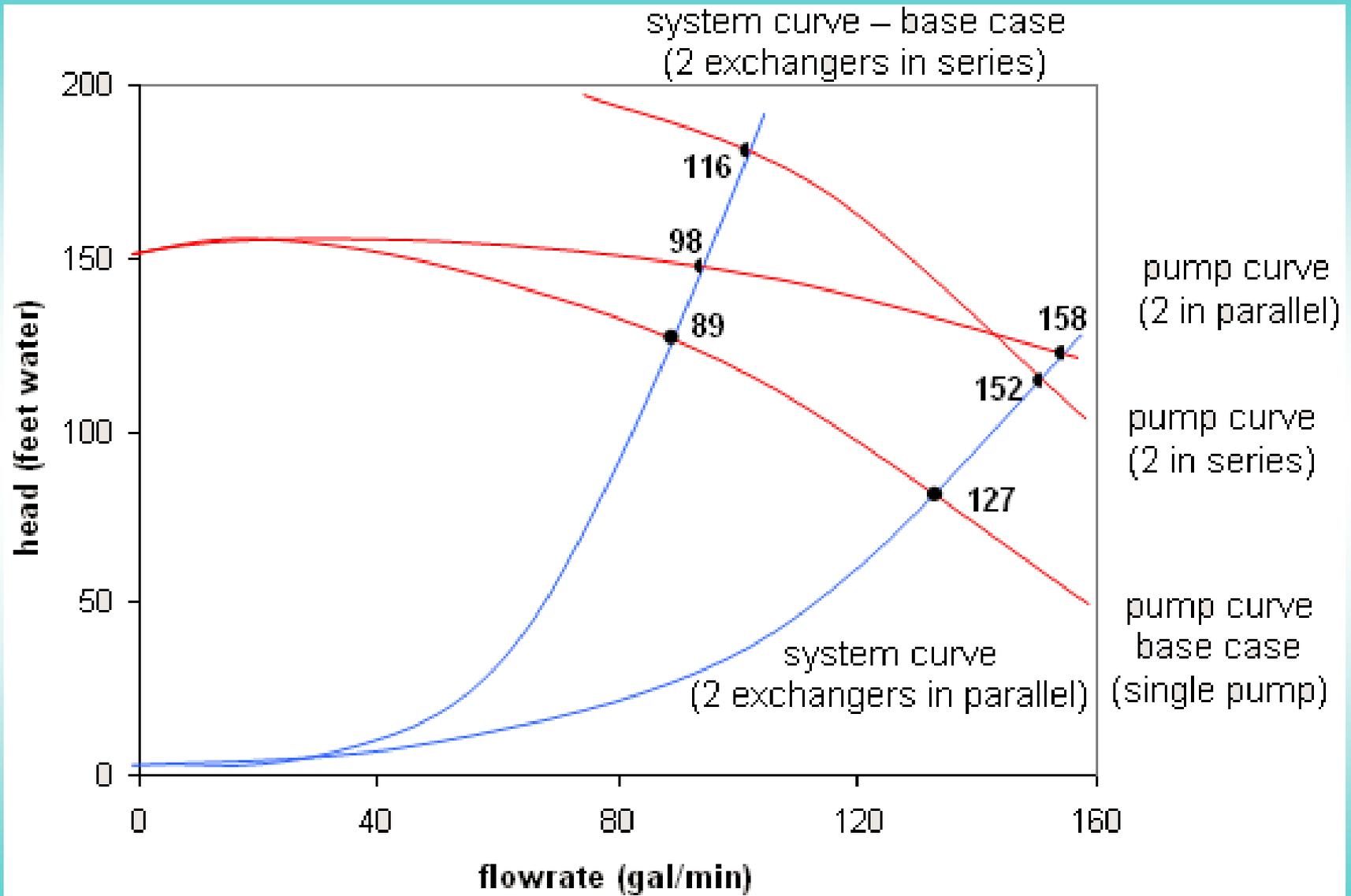
$$\Delta P_2 = 31.25 M^2$$

- ❑ El flujo de Dowtherm A es de 127 gal/min. Representa un *scale up* de 49.4 %

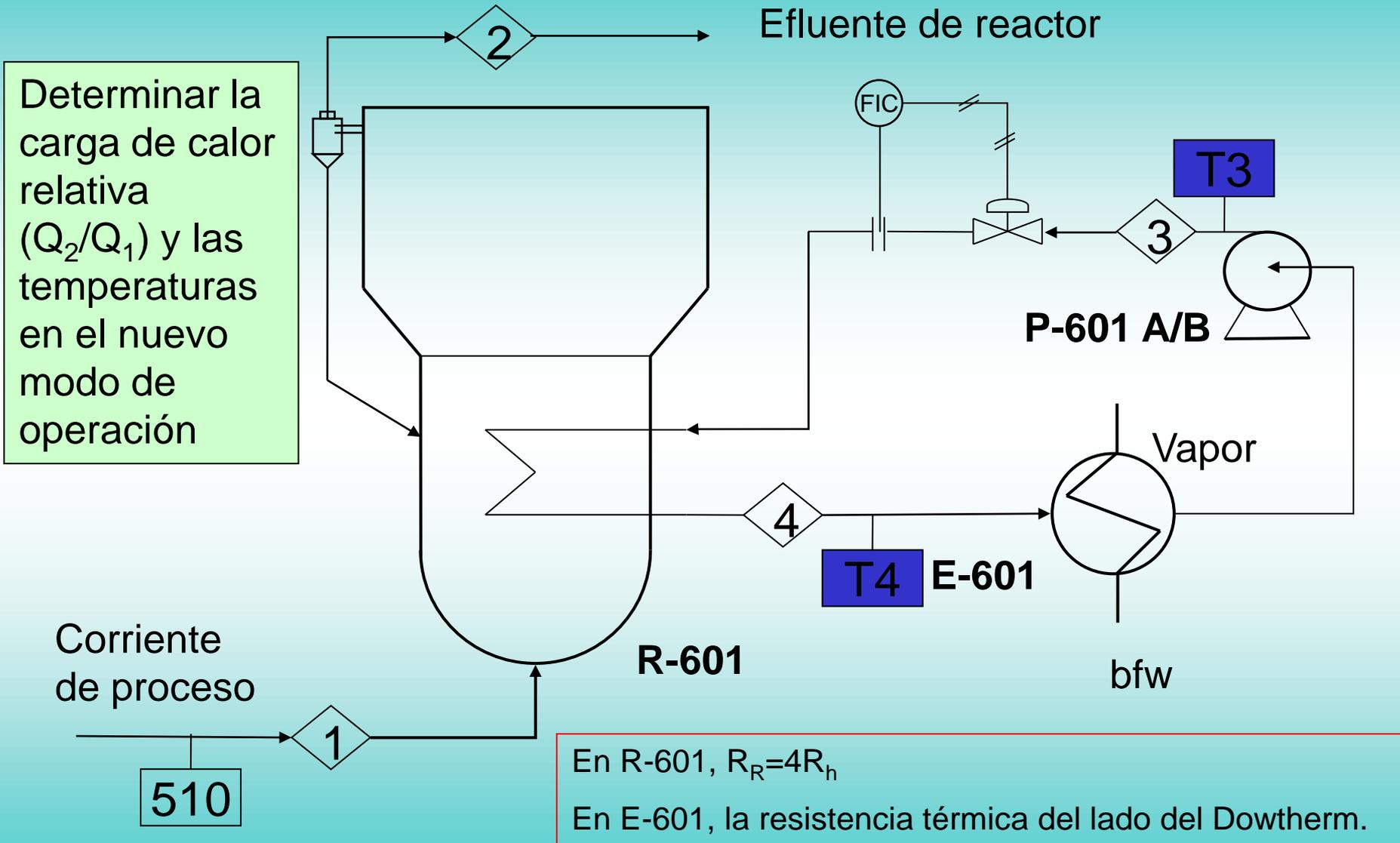
# Performance de la bomba P601-A/B



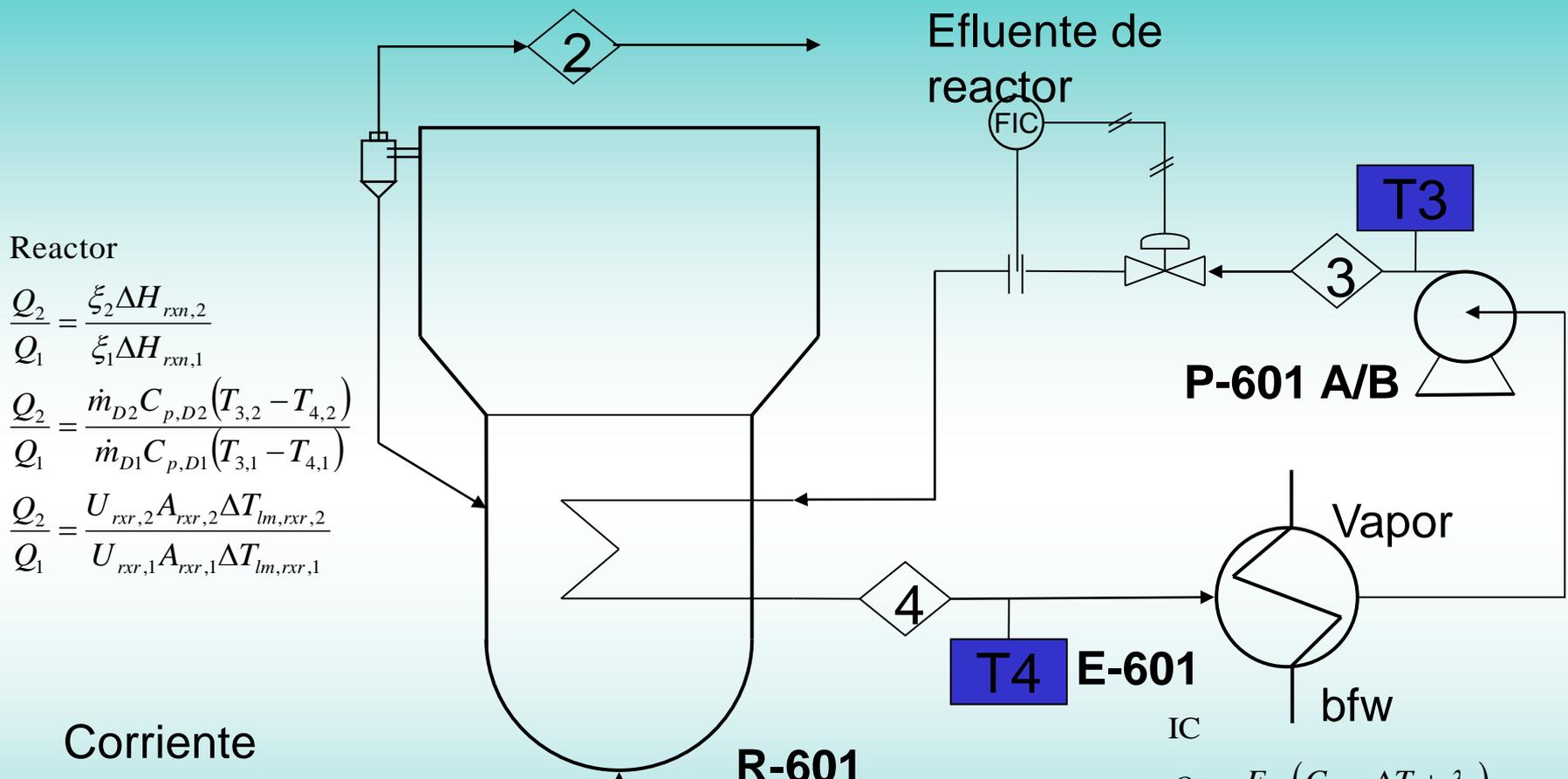
# Performance de la bomba P601-A/B



# Performance del lazo de calentamiento



# Performance del lazo de calentamiento



Reactor

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{\xi_2 \Delta H_{rxn,2}}{\xi_1 \Delta H_{rxn,1}}$$

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{\dot{m}_{D2} C_{p,D2} (T_{3,2} - T_{4,2})}{\dot{m}_{D1} C_{p,D1} (T_{3,1} - T_{4,1})}$$

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{U_{rxr,2} A_{rxr,2} \Delta T_{lm,rxr,2}}{U_{rxr,1} A_{rxr,1} \Delta T_{lm,rxr,1}}$$

Corriente de proceso

510

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{F_{S2} (C_{p,bfw} \Delta T + \lambda_2)}{F_{S1} (C_{p,bfw} \Delta T + \lambda_1)}$$

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{\dot{m}_{D2} C_{p,D2} (T_{3,2} - T_{4,2})}{\dot{m}_{D1} C_{p,D1} (T_{3,1} - T_{4,1})}$$

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{U_{hx,2} A_{hx,2} \Delta T_{lm,hx,2}}{U_{hx,1} A_{hx,1} \Delta T_{lm,hx,1}}$$

# Scale up de lazo de remoción de calor

- El hecho de que el *scale up* de la velocidad de *DowTherm A* sea del 50 %, no implica que la remoción de calor sea *scale up* en el mismo orden.
- Para el reactor R-601 el balance de energía está dado por:

$$Q_R = F_{Cl} \Delta H_r \quad Q_R = F_D C_{pD} (T_4 - T_3)$$

- La ecuación de performance para el IC E-601 es:

$$Q_R = U_R A_R \Delta T_{ml}$$

- La producción de vapor está dado por:

$$Q_h = F_S (C_{p,bfw} \Delta T + \lambda) \quad Q_h = U_h A_h \Delta T_{ml}$$

- Suponiendo operación adiabática:  $Q_R = Q_h$

- Se resuelven simultáneamente para un valor dado de FD:

# Performance del Intercambio de calor

□ Usando el **método del caso base** teniendo en cuenta el balance de energía para el *Dowtherm* intercambiado en el reactor.

$$\frac{Q_{R2}}{Q_{R1}} = \frac{F_{D2} C_{pD} (T_{4,2} - T_{3,2})}{F_{D1} C_{pD} (T_{4,1} - T_{3,1})}$$

$$\frac{Q_{R2}}{Q_{R1}} = \frac{F_{D2} C_{pD} (T_4 - T_3)}{F_{D1} C_{pD} (400 - 300)} \Rightarrow \frac{Q_{R2}}{Q_{R1}} = M \frac{(T_4 - T_3)}{50}$$

$$M = \frac{F_2}{F_1}$$

# Performance del Intercambio de calor

□ Usando el **método del caso base** teniendo en cuenta la ecuación de performance para el reactor.

$$\frac{Q_{R2}}{Q_{R1}} = \frac{U_{R2} A_R \Delta T_{ml2}}{U_{R1} A_R \Delta T_{ml1}} \Rightarrow \frac{Q_{R2}}{Q_{R1}} = \frac{U_{R2}}{U_{R1}} \frac{\frac{T_4 - T_3}{\ln\left(\frac{510 - T_3}{510 - T_4}\right)}}{\frac{400 - 350}{\ln\left(\frac{510 - 350}{510 - 400}\right)}} = \frac{U_2}{U_1} \frac{\frac{T_4 - T_3}{\ln\left(\frac{510 - T_3}{510 - T_4}\right)}}{133.44^\circ C}$$

# Scale-up con IC en serie

- Al variar el flujo de *Dowtherm A*, varía el flujo. Este se puede estimar considerando  $h_i = 4 h_o$

$$\frac{1}{U_1} = \frac{5}{h_{i1}} \quad , \quad h_{i2} = h_{i1} M^{0.8} \quad , \quad \frac{1}{U_2} = \frac{1}{h_{i1}} \left( 4 + \frac{1}{M^{0.8}} \right) \quad , \quad \frac{U_2}{U_1} = \frac{5}{4 + \frac{1}{M^{0.8}}}$$

- Por lo tanto la ecuación resulta

$$\frac{Q_{R2}}{Q_{R1}} = \frac{U_{R2} A \Delta T_{ml2}}{U_{R1} A \Delta T_{ml1}} \quad \Rightarrow \quad \frac{Q_{R2}}{Q_{R1}} = \frac{U_{R2}}{U_{R1}} \frac{\frac{T_4 - T_3}{\ln\left(\frac{510 - T_3}{510 - T_4}\right)}}{\frac{400 - 350}{\ln\left(\frac{510 - 350}{510 - 400}\right)}} = \left( \frac{5}{4 + \frac{1}{M^{0.8}}} \right) \frac{\frac{T_4 - T_3}{\ln\left(\frac{510 - T_3}{510 - T_4}\right)}}{133.44^\circ C}$$

# Scale-up con IC en serie

- Al variar el flujo de *Dowtherm A*, teniendo en cuenta las condiciones de intercambio se puede considerar despreciable la resistencia del lado del cambio de fase.

$$\frac{1}{U_1} = \frac{1}{h_{i1}} \quad , \quad h_{i1} = k v_i^{0.8} \quad , \quad h_{i2} = h_{i1} M^{0.8} \quad , \quad \frac{U_2}{U_1} = M^{0.8}$$

3. Calor transferido en el IC para producir vapor.

$$\frac{Q_{h2}}{Q_{h1}} = \frac{U_2 A \Delta T_{ml2}}{U_1 A \Delta T_{ml1}} \Rightarrow \frac{Q_{h2}}{Q_{h1}} = \frac{U_2}{U_1} \frac{\frac{T_4 - T_3}{\ln\left(\frac{T_4 - 254}{T_3 - 254}\right)}}{400 - 350} = M^{0.8} \frac{\frac{T_4 - T_3}{\ln\left(\frac{T_4 - 254}{T_3 - 254}\right)}}{119.26^\circ C}$$

# Performance del IC

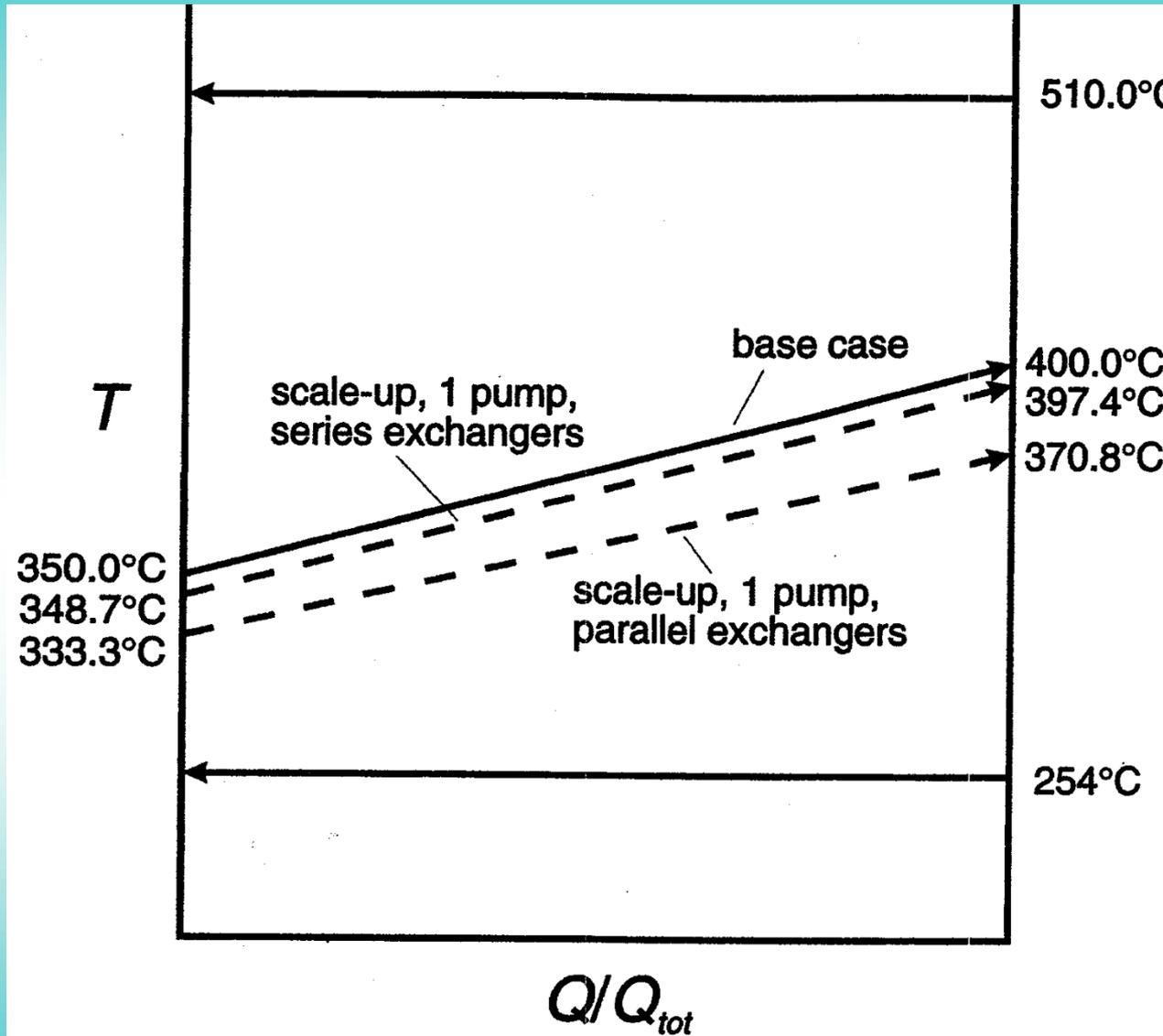
- De las ecuaciones resultantes:

$$\frac{Q_{R2}}{Q_{R1}} = M \frac{(T_4 - T_3)}{50}$$

$$\frac{Q_{R2}}{Q_{R1}} = \left( \frac{5}{4 + \frac{1}{M^{0.8}}} \right) \frac{\frac{T_4 - T_3}{\ln\left(\frac{510 - T_3}{510 - T_4}\right)}}{133.44^\circ C}$$

$$\frac{Q_{h2}}{Q_{h1}} = M^{0.8} \frac{\frac{T_4 - T_3}{\ln\left(\frac{T_4 - 254}{T_3 - 254}\right)}}{119.26^\circ C}$$

# Perfiles de temperatura en el lazo de Dowtherm A



# Resolución

- Al resolver simultáneamente las ecuaciones para un scale-up del 5% ( $M = 1.05$ ) se obtienen los siguientes valores de temperatura:
  1.  $T_3 = 349 \text{ }^\circ\text{C}$
  2.  $T_4 = 399.1 \text{ }^\circ\text{C}$
  3.  $Q_2/Q_1 = 1.04$
- Teniendo en cuenta que el calor de reacción es constante, el flujo de proceso aumenta un 4 %, por lo tanto solo es posible un *scale up* del 4 %.

# Scale-up con IC en paralelo

- Al estar conectado en paralelo el flujo de cada intercambiador de calor es la mitad del flujo total.

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{U_2}{U_1} \frac{\frac{T_4 - T_3}{\ln\left(\frac{510 - T_3}{510 - T_4}\right)}}{400 - 350} = \left( \frac{5}{4 + \left(\frac{2}{M}\right)^{0.8}} \right) \frac{\frac{T_4 - T_3}{\ln\left(\frac{510 - T_3}{510 - T_4}\right)}}{133.44^\circ C}$$

- Las demás ecuaciones son las mismas. Para un *scale up* del 49.4 % ( $M=1.494$ ) se obtienen los siguientes resultados.
  1.  $T_3 = 334.4^\circ C$
  2.  $T_4 = 372.4^\circ C$
  3.  $Q_2/Q_1 = 1.13$  Por lo tanto el *scale up* máximo 13 %

# Dowtherm A

Es un fluido de transferencia de calor compuesto por una mezcla eutéctica de un difenol ( $C_{12}H_{10}$ ) y un óxido de difenol ( $C_{12}H_{10}O$ ).

El rango de temperatura de uso es:

- Líquido: 15 a 400 °C
- Gas: 257 a 400 °C

## Propiedades

- Punto de fusión: 12.0°C
- Punto de ebullición: 257.1°C
- Densidad (25 °C): 1056 kg/m
- Peso molecular estimado: 166
- Calor de combustión: 36,053 kJ/kg

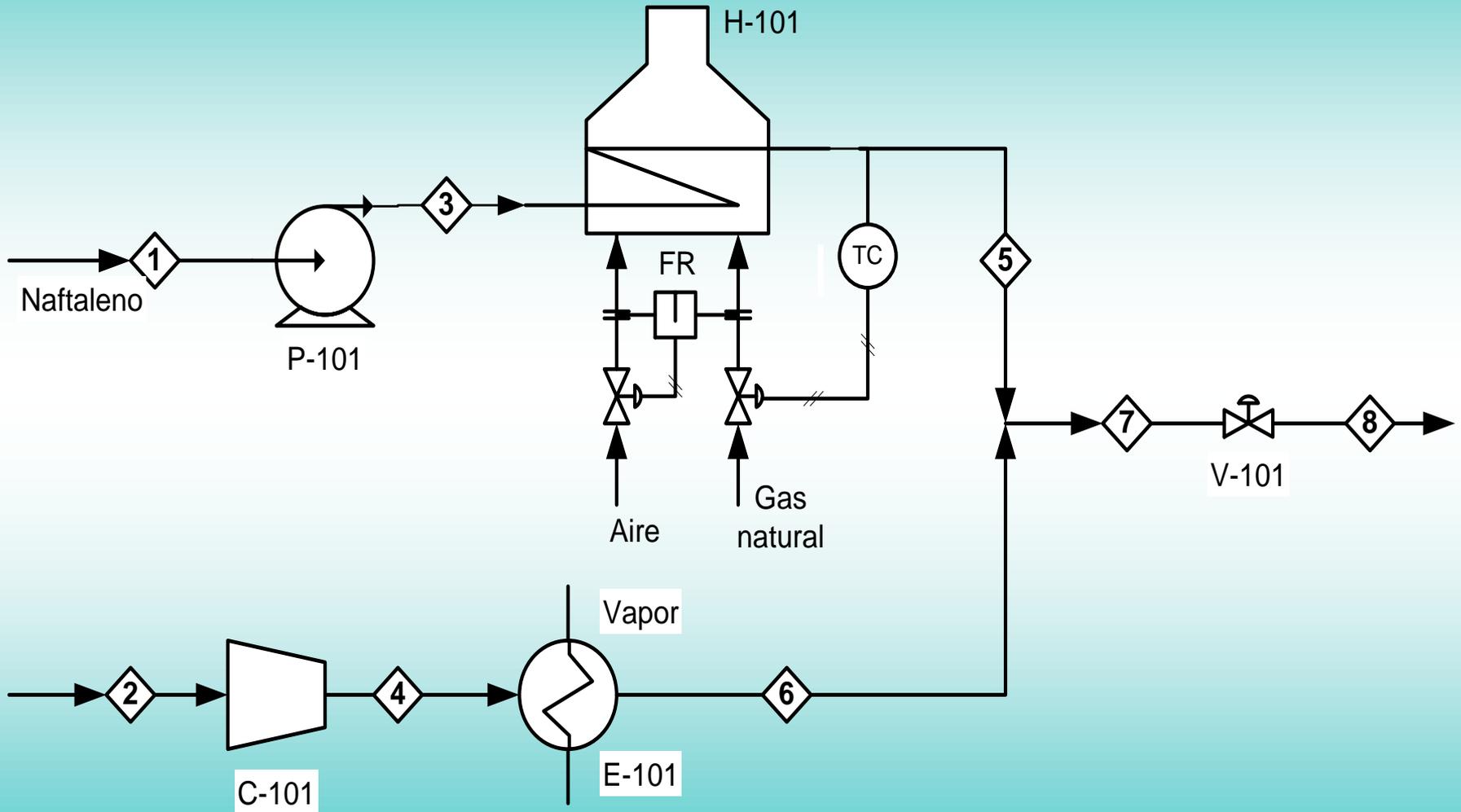
# Performance del sistema

bomba	Simple	Simple	Paralelo	Paralelo	Serie	Serie
IC	Serie	Paralelo	Serie	Paralelo	Serie	Paralelo
$T_3$ (°C)	350	334.4	347.2	328.6	342.4	329.7
$T_4$ (°C)	400	372.4	394.1	362.0	385.0	363.9
Max flow (gal/min)	85	89	98	158	116	152
Flow % scaleup	0	5	15.3	85.9	36.5	78.8
M	1	1.05	1.15	1.86	1.37	1.79
$Q_2/Q_1$	1	1.13	1.08	1.24	1.17	1.22

# Performance de la sección de alimentación

- Un paso previo a la reacción es la preparación de las corrientes de entrada al reactor; esto implica proveer de la presión, la temperatura, la composición requerida, etc.
- Por ejemplo, el anhídrido ftálico se produce por reacción entre el naftaleno y el  $O_2$  en un reactor de lecho fluidizado que opera 5 veces la velocidad de mínima de fluidización.
- Se analizará el caso de un *scale down* del 50 % en la producción.
- Para el 50 % de *scale down* se debe determinar como se debe llevar a cabo y determinar los nuevos flujos y presiones.

# Flowsheet de la sección de alimentación



# Datos de la sección de alimentación

•Corrientes	1	2	3	4	5	6	7	8
P (kPa)	80.00	101.33	343.00	268.00	243.00	243.00	243.00	200.00
Fase	L	V	L	V	V	V	V	V
Naftaleno (Mg/h)	12.82		12.82		12.82		12.82	12.82
Aire (Mg/h)		151.47		151.47		151.47	151.47	151.47

## •Curva de bomba y compresor

$$\Delta P (kPa) = 500 + 4.663 F_1 - 1.805 F_1^2 \quad F_1 \leq 16.00 \frac{Mg}{h}$$

$$\frac{P_{out}}{P_{in}} = 5.201 + 2.662 \cdot 10^{-3} F_2 - 1.358 \cdot 10^{-4} F_2^2 + 4.506 \cdot 10^{-8} F_2^3 \quad F_2 \leq 200.00 \frac{Mg}{h}$$

Dado que tiene una válvula, para un 50 % de *scale down*, hay que reducir reducir la alimentación en 50 %.

# Calculo de presión y flujos de alimentación

## •Calculo de flujo y la presión del compresor

$$\frac{P_{out}}{101.3 \text{ kPa}} = 5.201 + 2.662 \cdot 10^{-3} F_2 - 1.358 \cdot 10^{-4} F_2^2 + 4.506 \cdot 10^{-8} F_2^3$$

Hay dos incógnitas. Se puede plantear la siguiente ecuación:

$$\frac{P_4 - 510.73 \text{ kPa}}{(268 - 243) \text{ kPa}} = \left( \frac{F_2}{151.47} \right)^2$$

$$P_4 = 512.84 \text{ kPa} \quad \text{y} \quad F_2 = 43.80$$

Mg/h  
Corrientes

	1	2	3	4	5	6	7	8
P (kPa)	80.00	101.33	535.73	268.00	510.73	510.73	510.73	200.00
Fase	L	V	L	V	V	V	V	V
Naftaleno (Mg/h)	6.41		6.41		6.41		6.41	6.41
Aire (Mg/h)		43.80		43.80		43.80	43.80	43.80

# Análisis de la sección de alimentación

- Con el *scale down* el flujo de aire se reduce más del 50 %.
- El flujo total de la corriente 8 es 50.21 Mg/h, es un 30.6 % del valor original.
- Dado que el reactor puede operar a 5 veces la velocidad mínima de fluidización, la disminución del flujo total puede hacer que no haya fluidización.
- La reacción implicada es muy exotérmica, y la remoción de calor se ve afectada por la pérdida de fluidización, y la reacción se puede hacer incontrolable.

**No es recomendable operar con este *scale down*.**

- Se puede mantener la relación de naftaleno a aire para un *scale down* del 50 %, mediante la adición de válvulas.
- Con válvulas en las corrientes de alimentación, los flujos de cada corriente pueden ser controlados independientemente.

# Nuevo Flowsheet de la sección de alimentación

