

Simulación de un reactor-cambiador

PARTE I

POR

ANTONIO LOPEZ CABANES

y

ANTONIO BODALO SANTOYO

RESUMEN

Continuando la línea de trabajo sobre simulación de reactores, iniciada por los autores con el estudio de sistemas homogéneos ideales, se aborda en este artículo el caso de un reactor catalítico en el que se produce una reacción endo o exotérmica y, por necesidades de control de temperatura, se ha de recurrir a la transferencia de calor con un medio externo, comportándose el sistema tanto como reactor, como cambiador de calor.

Se da una situación especial en el diseño de reactores catalíticos cuando, por las particularidades térmicas de la reacción, hay que transferir calor desde el interior del lecho catalítico hacia el exterior, «enfriamiento», o aportarlo en sentido inverso, «calentamiento». En estos casos, el diseñador se ve forzado a plantear el desarrollo del cálculo como un conjunto reactor-intercambiador.

Rase (1), Walas (2) y Smith (3), entre otros autores, indican en sus textos fórmulas y consideraciones a utilizar para la resolución de este tipo de reactores, pero sin aportar un proceso sistematizado y suficien-



temente concreto para el cálculo. Ahora se pretende, precisamente, realizar esta sistematización utilizando procesos de cálculo iterativos desarrollados por nosotros en otros trabajos (4, 5), simulando un reactor catalítico de lecho fijo que se comporte como un reactor tubular de flujo pistón, aproximación adecuada en tubos de pequeño diámetro (inferior a 20 cm.) en los que la presencia del catalizador atenúa los efectos de la difusión.

El reactor va a actuar como un cambiador, puesto que el calor de la reacción será transferido desde, o hacia, un medio externo. A los problemas clásicos que ocasiona el diseño de un reactor catalítico se van a adicionar los que reporta el diseño de un intercambiador de calor.

Como es de prever, el mayor problema de diseño se centra en la estimación de los términos del balance de calor. El balance de cantidad de movimiento también es crítico por el incremento en la pérdida de carga que provoca el relleno y que hay que controlar para un diseño óptimo. Por otra parte, no debe ofrecer gran dificultad la concreción del balance de materia por la restricción apuntada de flujo pistón.

La secuencia de cálculo será la siguiente:

1. Establecimiento de las ecuaciones de transferencia de materia.
2. Id., id. de transferencia de calor.
3. Id., id. de transferencia de cantidad de movimiento.

Estas tres relaciones dan como resultado el dimensionado del reactor.

4. Comprobación del coeficiente global de transferencia de calor, previamente estimado.

5. Caudal de fluido externo.

6. Disposición de los tubos, diámetros de la carcasa.

Como es lógico, será la economía quien diga cuál es la óptima entre las diversas posibilidades de diseño.

I. ECUACION DE TRANSFERENCIA DE MATERIA

Se va a considerar que en el reactor se está realizando la reacción general en fase gas:



para la que se define la velocidad de reacción como los kilos de reactante consumido por unidad de tiempo y unidad de peso del catalizador:

$$(I) \quad (-r_A) = -\frac{1}{W} \frac{dm_A}{dt}$$

Para un reactor tubular en flujo pistón, la ecuación de diseño (5) es:

$$(II) \quad \frac{W}{F_t} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

en la que se ha definido la conversión como los kilos de reactante A desaparecidos por reacción, divididos por los kilos totales alimentados (o bien expresados como caudales máxicos).

Como algunos autores prefieren trabajar con ecuaciones cinéticas referidas a volumen de reactor y no a peso de catalizador, se llegaría a una ecuación de diseño:

$$\frac{V_R}{F_t} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)_{V_R}}$$

donde $(-r_A)_{V_R}$ es la cantidad de A que desaparece por reacción por unidad de volumen y de tiempo, que se relaciona con $(-r_A)$ por medio de la densidad global del lecho:

$$\ell_b = \frac{W}{V_R} \quad \text{por tanto} \quad (-r_A)_{V_R} = (-r_A) \cdot \ell_b$$

Si en el reactor tienen lugar varias reacciones y ninguna puede despreciarse, hay que recurrir a definir selectividades o avances relativos de esas reacciones, lo que suele llevar a la necesidad de realizar una experimentación anterior.

La conversión máxima vendrá fijada por condicionamientos económicos, pudiendo hacerse un estudio cinético previo (6) con el fin de determinar cómo varían los diferentes parámetros, cinéticos y de diseño, con la conversión, hasta llegar a acotar una zona de trabajo.

II. ECUACION DE TRANSFERENCIA DE CALOR

Partiendo de la hipótesis de flujo pistón, el balance de calor para un elemento incremental de reactor se realiza de modo similar a los reactores homogéneos (4, 5):

$$(III) \quad Q_{\text{acumulado}} + Q_{\text{reacción}} + Q_{\text{transferido}} = 0$$

dando valores:

$$(IV) \quad F_t \cdot \bar{C}_p(T_r - T_i) + F_t \cdot \Delta X_A \cdot \Delta H_T + U \cdot \Delta(\text{Area}) \left(\frac{T_i + T_r}{2} - T_s \right) = 0$$

El $\Delta(\text{Area})$ se puede relacionar con el volumen y con el peso de catalizador:

$$\Delta(\text{Area}) = \frac{\Pi \cdot D \cdot \Delta L}{\Pi \cdot D^2 \cdot \Delta L} \quad \Delta(\text{Area}) = \frac{4 \cdot \Delta V_R}{D} = \frac{4 \cdot \Delta W}{D \cdot \ell_b}$$

sustituyendo el valor que para ΔW da la ecuación de diseño (II):

$$(V) \quad \Delta(\text{Area}) = \frac{4 \cdot F_t}{D \cdot \ell_b} \frac{\Delta X_A}{(-r_A)}$$

llevando este valor a la ecuación de balance de calor (IV) y despejando T_r queda:

$$(VI) \quad T_r = \frac{Q_A \cdot T_i - Q_R - Q_S(T_i - 2 \cdot T_s)}{Q_A + Q_S}$$

ecuación que da la variación de temperatura en el interior del reactor en función del avance de la conversión, y en la que

$$\begin{aligned} Q_A &= \bar{C}_p \\ Q_R &= \frac{\Delta H_T \cdot \Delta X_A}{2 \cdot U} \\ Q_S &= \frac{X_A}{D \cdot \ell_b \cdot (-r_A)} \end{aligned}$$

A veces interesa conocer la variación de temperatura con la longitud, como puede ocurrir en aquellos reactores constituidos por un único lecho, o en los multitubulares en los que interese conocer la temperatura en diferentes puntos a lo largo de los tubos. En estos casos en la ecuación general de balance de calor (IV) se sustituiría:

$$\Delta(\text{Area}) = \pi \cdot D \cdot \Delta L$$

obteniendo una ecuación similar para T_r , en función de ΔX_A y de ΔL (5).

El problema principal que plantea la resolución de este balance es el desconocimiento del coeficiente global de transferencia de calor, U . Disponer de él a priori es siempre problemático, ya que su valor depende de los coeficientes de película interna y externa, difíciles de estimar, y de otras variables del sistema. Esto lleva, a su vez, a tener que suponer o estimar un primer valor que se comprobará una vez diseñado el reactor, obligando a repetir cálculos siempre que ese valor supuesto y el calculado no sean coincidentes (se suele exigir una aproximación del 2-3 %). Para estimar este primer valor de U se puede recurrir a Manuales de Ingeniería o revistas especializadas, que suelen traer tablas y gráficas de valores probables de U (7, 8, 9).

En cuanto al medio enfriador/calentador externo, puede ocurrir: que se trate de otro fluido de proceso, lo que no es normal en reactores, salvo que sea el propio fluido de alimentación al reactor; que se trate de un medio que aproveche el calor transferido para cambiar de estado (agua); o bien, que sea un medio que sólo experimente una variación en el calor sensible (aceites, sales fundidas, ...). En este trabajo se ha considerado que la temperatura del medio externo T_s no varía, bien porque se trate de un cambio de estado, bien porque se esté trabajando con un caudal elevado, o también, en el caso en que el medio externo tuviese un calor específico muy alto, casos en los que sería despreciable la variación de temperatura.

La variable diámetro de tubos viene fijada, aparte de consideraciones económicas, por cuestiones mecánicas. En cualquier caso, siempre se elegirán los tubos con menor diámetro posible, con el fin de facilitar la transferencia de calor y proporcionar una mayor área superficial por unidad de volumen, teniendo en cuenta que los tubos de diámetro interior inferior a 0,5 pulgadas (12,7 mm.) no se pueden limpiar mecánicamente, con agua o a presión, lo que quiere decir que el mínimo diámetro externo de los tubos a emplear debe ser de 3/4". Es fácil encontrar tablas con las dimensiones de los tubos de hierro y acero más usuales (8, 9).

En cuanto al espesor del tubo, debe ser suficiente para permitir su mecanización, soportar las presiones interior y exterior en servicio, tensiones longitudinales y la corrosión. No obstante, el espesor requerido para soportar presiones y tensiones longitudinales de hasta 30 kg/cm^2 es pequeño comparado con el requerido por la corrosión. El espesor de los tubos se suele especificar en función del material y, en cualquier caso, los condicionamientos económicos siempre llevarán a utilizar el menor espesor posible.

III. SOLUCION DE LAS ECUACIONES DE TRANSFERENCIA DE MATERIA Y CALOR

En el caso estudiado y en función de las ecuaciones obtenidas, la secuencia de cálculos se refleja en el DIAGRAMA I. El proceso de solución consiste en dar incrementos a la conversión y encontrar los valores de las demás variables siguiendo un método iterativo con aquellas cuyo valor no sea en principio conocido.

El objetivo final es obtener una tabla de valores X_A , T , W en la que lo primero a observar será el camino que sigue la temperatura, que condicionará al resto de las variables de diseño.

Si el camino seguido por la temperatura parece aceptable (téngase en cuenta que no se están considerando condicionamientos económicos, sino sólo fisicoquímicos), se puede dar por terminada esta etapa, pero si no (si el reactor se «congela» o se «dispara») habrá que estudiar las variables que producen esta alteración en la temperatura. Fundamentalmente, y para alcanzar una conversión anteriormente fijada, se podrá actuar sobre dos variables, la temperatura de alimentación al reactor y la temperatura del medio externo.

La temperatura de alimentación suele venir fijada de antemano, o al menos situada dentro de un cierto rango. La temperatura del medio externo es más probable que pueda variar ampliamente, aunque siempre hay condicionamientos ajenos al reactor que la fijan. Por ejemplo, en el caso de agua de enfriamiento para producir vapor, se estará condicionado porque su presión esté entre ciertos límites, que fijarán la temperatura.

Una vez resueltos los balances de materia y calor se tendrá, por un lado, la variación de la temperatura en el interior del lecho con la conversión y el volumen de reactor y, por otro, se habrá fijado la temperatura de alimentación y la temperatura del medio externo de trans-

ferencia de calor, y se habrá estimado un valor de partida para el coeficiente global de transferencia de calor, U .

En cualquier caso, queda patente que habría que analizar varias posibilidades para que, finalmente, sea el óptimo económico el que decida la que se llevará a la práctica.

IV. ECUACION DE TRANSFERENCIA DE CANTIDAD DE MOVIMIENTO. DIMENSIONADO DEL REACTOR

Una vez calculado el volumen del reactor, o el peso de catalizador, hay que distribuirlo en un número de tubos:

$$(VII) \quad V_R = \frac{\Pi \cdot D^2}{4} L \cdot n_T$$

Se puede suponer un número de tubos y quedará calculada la longitud de cada uno. Hay que tener en cuenta que el peso de catalizador obtenido en el diseño se debe aumentar en un 10-20 % para compensar pérdidas por envejecimiento del catalizador y como margen de seguridad para cumplir las exigencias requeridas.

En el caso en que el reactor no fuera multitubular, sino que fuese un único lecho, este problema de fijar dimensiones no existe, ya que

$$V_R = \frac{\Pi \cdot D^2}{4} L \text{ da directamente la longitud.}$$

Con esta longitud se pasa a calcular la pérdida de carga correspondiente, que será la variable que indique si esa longitud es acertada. Para su cálculo existen diversas ecuaciones (Ergun, Leva, Carman, ...), por ejemplo, Retoret (10) utiliza la ecuación de Ergun y aconseja que la pérdida de carga unitaria esté comprendida entre 0,069 y 0,231 kg/cm²/metro. Otros autores aconsejan referir la pérdida de carga máxima permitida a la presión de entrada, aconsejando que no debe exceder de un 10 % de ella. Walas (2) sugiere usar las ecuaciones de Leva y de Ergun, sin discernir cuál es la más adecuada para lechos fijos, y poder elegir el resultado de acuerdo con la mayor seguridad de funcionamiento.

Una vez calculada la pérdida de carga, se puede ir modificando la longitud (y por tanto el número de tubos) hasta que aquella quede dentro de los márgenes aconsejados.

En reactores multitubulares hay que comprobar, una vez construido el reactor, que la pérdida de carga por todos los tubos es la misma, pues si no daría lugar a preferencias en el flujo, lo que puede hacerse, por ejemplo, alimentando con aire a la presión de trabajo, permitiendo no más del ± 5 a ± 10 % de desviación de la media (2).

V. CALCULO DEL COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR

Hasta aquí se ha realizado el diseño del reactor partiendo de un valor estimado de U que ahora se va a comprobar. Una fórmula adecuada para el cálculo del verdadero valor de U en tubos metálicos de poco espesor es (1):

$$(VIII) \quad \frac{1}{U} = \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_o} + r_w$$

El coeficiente de película interior, h_i , se ve afectado por la presencia del catalizador y puede calcularse por análisis dimensional como en las fórmulas de Jakob y Leva (9), mientras que para el coeficiente de película exterior, h_o , se puede recurrir a diferentes fórmulas según los casos (8, 9). Cuando se trate de sales fundidas o agua en evaporación, los altos coeficientes de transferencia de calor que se obtienen permiten despreciar la resistencia de la pared externa de los tubos metálicos en comparación con la resistencia interna a la transferencia de calor.

En cuanto al factor de ensuciamiento, r_w , conocer su valor con certeza es problemático y desde el punto de vista de diseño se recurre a tablas (8, 9) que dan diferentes valores de r_w , según el fluido circulante.

VI. CAUDAL DE FLUIDO EXTERNO

Una vez calculadas, y confirmadas, todas las variables de diseño, queda por calcular la cantidad de fluido externo a utilizar. Se hace en función del calor transferido, que ya está calculado anteriormente en el balance de calor. Si el fluido sólo realiza un cambio de calor sensible, sería:

$$Q_{\text{transferido}} = m_s \cdot C_{ps}(T_{s2} - T_{s1})$$

donde m_s es la cantidad de fluido externo de capacidad calorífica C_{ps} que experimenta una variación de temperatura $T_{s2}-T_{s1}$, que anteriormente se había considerado despreciable.

Y si existe cambio de fase, entonces:

$$Q_{\text{transferido}} = m_s \cdot L_s$$

VII. DISPOSICION DE LOS TUBOS Y DIAMETRO DE CARCASA

Las disposiciones de tubos posibles son cuatro: triangular, triangular rotado, cuadrado y cuadrado rotado, y el mínimo paso entre tubos es de 1,25 veces el diámetro exterior de los mismos (11). Se observa que con el mismo diámetro y paso entre tubos, la disposición triangular da un 15 % aproximadamente más de área que la disposición cuadrada, para un diámetro de carcasa dado; de ahí que se prefiera la disposición triangular, salvo que las condiciones de pérdidas de carga y ensuciamiento sean más significativas que las de transferencia de calor.

Para la estimación del diámetro de carcasa existen muchos datos publicados sobre tabulación de diámetros en función del número de tubos, disposición y paso entre ellos (8, 9, 12).

También habría que calcular la pérdida de carga por la carcasa, por los métodos convencionales, aunque su valor no suele tener mucha influencia.

Otro factor a tener en cuenta en el diseño de la carcasa es si interesa colocar deflectores o aletas para aumentar la eficacia en el intercambio de calor. En cualquier caso, para el correspondiente diseño mecánico de la carcasa habrá que tener en cuenta las normas del código ASTM sobre diseño de recipientes a presión.

NOTACION:

A, B, R, S	reactantes y productos
b, r, s	coeficientes estequiométricos
Area	área de transferencia de calor, m ²
C _p	capacidad calorífica media, kcal/kg · °K
C _{ps}	capacidad calorífica fluido externo, kcal/kg · °K
D	diámetro interior del reactor, m
F _t	velocidad total de alimentación, kg/hr
h _i	coeficiente de película en el interior de los tubos, kcal/hr · m ² · °K
h _o	coeficiente de película en el exterior de los tubos, kcal/hr · m ² · °K
L	longitud del reactor, m
L _s	calor de cambio de estado, kcal/kg
m _A	cantidad de A alimentada, kg
m _s	caudal de fluido externo, kg/hr
n _T	número de tubos
(-r _A)	velocidad de reacción, kgA/hr · kg catalizador
(-r _A) _{v_r}	velocidad de reacción, kgA/hr · m ³ reactor
r _w	coeficiente de ensuciamiento, hr · m ² · °K/kcal
T _i	temperatura inicial del intervalo, °K
T _f	temperatura final del intervalo, °K
T _i ^o	temperatura de alimentación al reactor, °K
T _f ^o	temperatura de salida del reactor, °K
T _s	temperatura del medio externo, °K
U	coeficiente global de transferencia de calor, kcal/hr · m ² · °K
V _R	volumen de reactor, m ³
W	peso de catalizador, kg
X _A	conversión, kgA reaccionados/kg totales alimentados
ℓ _b	densidad global del lecho, kg catlz./m ³ reactor
ΔH _T	entalpía de reacción a la temperatura T, kcal/kgA

BIBLIOGRAFIA

1. HOWARD F. RASE, *Chemical Reactor, Design for process plants*, vols. I y II, John Wiley & Sons, New York, 1977.
2. S. M. WALAS, *Cinética de Reacciones Químicas*, Ed. Aguilar, Madrid, 1965.
3. J. M. SMITH, *Ingeniería de la Cinética Química*, 2.ª ed., CECSA, México, 1977.
4. LÓPEZ CABANES, BÓDALO SANTOYO, GÓMEZ GÓMEZ, «Simulación digital generalizada del diseño de reactores químicos» (Parte I), *Ingeniería Química*, septiembre 1978.
5. LÓPEZ CABANES, BÓDALO SANTOYO, «Simulación digital generalizada del diseño de reactores químicos» (Parte II: «Reactor tubular en flujo pistón»), *Ingeniería Química*, octubre 1978.
6. LÓPEZ CABANES, «Acotación de conversiones en estudios cinéticos», en fase de redacción.
7. A. CHAUVEL y col., *Manuel d'Evaluation Economique des Procédés*, Editions Technip, Paris, 1976.
8. DONALD Q. KERN, *Procesos de transferencia de calor*, 1.ª ed., CECSA, México, 1965.
9. ROBERT H. PERRY, CECIL H. CHILTON, *Chemical Engineers Handbook*, Mc Graw Hill, 5th edition, New York, 1973.
10. J. P. RETORET, «Reactores de lecho fijo», Parte I, *Ingeniería Química*, septiembre 1976.
11. SARMIENTO GARCÍA, RUIZ PUEYO, *Comunicación del Curso de intercambiadores de calor*, Instituto de Petroquímica Aplicada de la Universidad Politécnica de Barcelona, 1977.
12. «Heat Exchanger Tube Count Tables», *Petro/Chem. Engineer*, May 1968.

