

Simulación de un reactor-cambiador

PARTE II

POR

ANTONIO LOPEZ CABANES,
JORGE MOLERO FERNANDEZ,
JOSE A. HERRAIZ ZAMBUDIO,
GLORIA VILLORA CANO y
ANTONIO BODALO SANTOYO

Departamento de Química Técnica

RESUMEN

Como aplicación al tratamiento sobre simulación de un reactor-cambiador expuesto en la PARTE I, se realiza a continuación un ejemplo de diseño para un sistema de reacciones simultáneas altamente exotérmicas, empleando agua como agente de enfriamiento.

En base al tratamiento teórico expuesto en la PARTE I, como aplicación y comprobación de cuanto allí quedó discutido, se ha realizado el diseño de un reactor catalítico para la producción de óxido de etileno, diseño en el que han participado, durante el curso 1978-79, un grupo de alumnos (*) de la asignatura de Economía y Proyectos, cuya docencia imparte el Departamento de Química Técnica.

I. PLANTEAMIENTO

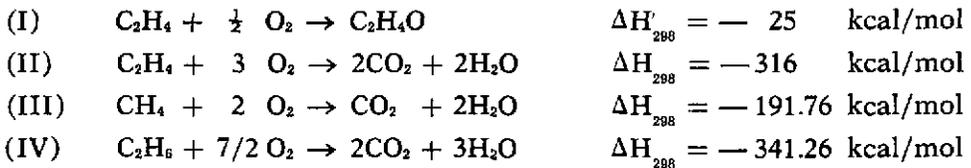
El reactor objeto del diseño pertenece a una planta cuya producción es de 40 Tm/día de óxido de etileno, obtenido por el método de oxidación directa con aire. Para este proceso se aconseja (13, 14) tra-

(*) Gloria Villora Cano (Departamento Química Técnica, Universidad de Murcia), Joaquín Juan Agüera (Departamento Investigación, ENPETROL, Cartagena), María Angeles Hernández Cutillas (Hernández Contreras, S. A., Molina de Segura, Murcia).



bajar en reactores multitubulares catalíticos de lecho fijo, aunque algunas plantas están trabajando con lechos fluidizados. La temperatura debe estar comprendida entre 220 y 350° C, siendo la óptima de 268° C, aumentando a medida que envejezca el catalizador. En cuanto a presión, se debe operar entre 5 y 25 atmósferas, con el fin de facilitar la absorción posterior del óxido de etileno en el agua.

La corriente que alimenta el reactor (14), de 2033.51 kmoles/hr, está formada por etileno (101.70), metano (0.61), etano (0.61), oxígeno (202.88), dióxido de carbono (116.10) y nitrógeno (1611.61), todas ellas en kmoles/hr. Según esta alimentación, las reacciones que se producen en el interior del reactor son:



de las cuales la (I) es la reacción principal, y las otras tres son combustiones. Se realizan completamente las (III) y (IV) y la (II) en la proporción que marca la selectividad, que en las condiciones normales de operación está comprendida entre un 60 y un 70 %.

II. BALANCES DE MATERIA Y CALOR

La ecuación cinética de la reacción principal es:

(V) $(-r_E) = k \cdot P_E^a \cdot P_O^b$ kmoles etileno/hr · kg catalizador en la que la constante cinética y los órdenes de reacción están relacionados con la temperatura por las siguientes funciones:

$$(VI) \quad k = 29540.77 \exp\left(-\frac{7734.92}{T}\right)$$

$$(VII) \quad a = 1.5952 - 0.0024 T$$

$$(VIII) \quad b = 0.4102 + 0.005 T$$

Con estas variables, la ecuación de diseño en forma incremental es:

$$(IX) \quad \Delta W = F_t \frac{\Delta X_E}{(-r_E)}$$

y el balance de calor, según la PARTE I ec. (VI), es:

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

La primera variable calculada ha sido la conversión, para la que se toma el valor de $X_E = 0.015$ (6). Con esta conversión, y teniendo en cuenta la selectividad de la reacción secundaria (se tomará el valor medio: $\Omega = 0.65$), se calculan las corrientes de entrada y salida en el reactor, que se muestran en la TABLA I.

Para la estimación de las variables que afectan al flujo de calor, se ha tomado para el diámetro externo de los tubos el valor de 3/4 de pulgada (mínimo permitido). Como fluido externo de enfriamiento (las reacciones son exotérmicas) se usa agua en condiciones de evaporación de aproximadamente 20 kg/cm² de presión. En función de este dato, y teniendo en cuenta que la presión de diseño en el interior del reactor es de 17 atm. (media entre los valores aconsejados por la bibliografía), se fija el valor del espesor del tubo, encontrándose como más adecuada una BWG = 16 (8, 9), dado que la diferencia de presiones interior-exterior del tubo no es muy elevada. Para estas dimensiones de tubo corresponde un diámetro interior $D = 0.01575$ m., una secciones de 1.95×10^{-4} m² y un área interna de 4.95×10^{-2} m²/m.

TABLA I

FLUJOS MASICOS DE LAS SUSTANCIAS PRESENTES EN EL REACTOR

Producto	Caudal entrada kmoles/hr	Caudal salida kmoles/hr	Velocidad aparición kmoles/hr
C ₂ H ₄	101.70	54.76	- 46.94
CH ₄	0.61	0.00	- 0.61
C ₂ H ₆	0.61	0.00	- 0.61
O ₂	202.88	135.52	- 67.36
CO ₂	116.10	150.78	34.68
N ₂	1611.61	1611.61	0.00
C ₂ H ₄ O	0.00	30.51	30.51
H ₂ O	0.00	35.90	35.90
TOTAL	2033.51	2019.08	

De acuerdo con las características de las corrientes circulantes, se toma para el coeficiente de transferencia de calor un valor $U = 350$ (7). El lecho catalítico tiene una densidad $\rho_b = 1340$, formado por partículas de diámetro $d_p = 0.0013$ m., con una porosidad $\varepsilon = 0.57$ (14).

Una variable que hay que calcular primeramente es la entalpía de la reacción global, teniendo en cuenta las cuatro reacciones que se producen y su aportación relativa:

etileno consumido en la reacción principal:	30.51 kmol/hr
etileno consumido en la reacción secundaria:	16.43 kmol/hr
metano consumido en el reactor:	0.61 kmol/hr
etano consumido en el reactor:	0.61 kmol/hr

En función de estos valores y de las entalpías de las diferentes reacciones, la de la reacción global es:

$$(XI) \quad \Delta H_{298} = -25000 - 316000 \frac{16.43}{30.51} - 191760 \frac{0.61}{30.51} - 341260 \frac{0.61}{30.51}$$

$$\Delta H_{298} = -205767.60 \text{ kcal/mol etileno consumido en la reacción principal}$$

Este valor será actualizado para cualquier otra temperatura con la ecuación de Kirchoff:

$$(XII) \quad \Delta H_T = \Delta H_{298} + \int_{298}^T \Delta C_p \cdot dT$$

utilizando los datos incluidos en la TABLA 2.

TABLA 2

CAPACIDADES CALORIFICAS DE LAS SUSTANCIAS PRESENTES EN EL REACTOR

Producto	Capacidad calorífica kcal/kmol · grado
C ₂ H ₄	3.385 + 0.02355 T
CH ₄	4.685 + 0.01289 T
C ₂ H ₆	3.610 + 0.0301 T
O ₂	6.404 + 0.00205 T
CO ₂	6.235 + 0.00885 T
N ₂	6.797 + 0.000545 T
C ₂ H ₄ O	8.270 + 0.021677 T - 288990 T ⁻²
H ₂ O	7.445 + 0.00195 T

Finalmente, T_s y T₁^o serán las variables sobre las que se incidirá para ajustar el perfil de temperaturas, cuyos valores están íntimamente relacionados con la presión del vapor a obtener en la carcasa.

III. EJECUCION DEL DISEÑO

En base a los valores anteriormente citados, y siguiendo el DIAGRAMA I de la PARTE I, se ha confeccionado un programa de ordenador que, con el nombre de OXETILEN, se ha ejecutado en el ordenador IBM del Centro de Proceso de Datos de la Universidad. Con dicho programa se han hecho pruebas de simulación con diversos valores de T_1 y T_2 con el fin de obtener un perfil de temperaturas-conversión adecuado a la operación.

Un resumen de los resultados de los diferentes ensayos, reordenados en bloques de T_1 crecientes, se muestra en la TABLA 3, en la que se han marcado (X) los que parecen más acertados, eligiendo para el diseño el ensayo número 31 (marcado como XX) por ser aquel que proporciona el menor volumen de reactor de todos los casos en los que la temperatura final es inferior a la inicial y la temperatura máxima se obtiene para un valor alto de la conversión. En la FIGURA I se muestra el perfil completo de temperaturas-conversión, y en la TABLA 4 se expone el listado del ordenador para el caso elegido.

El valor de $V_R = 1.14 \text{ m}^3$ indica que la cantidad de catalizador habrá de ser de $W = 1527.6 \text{ kg}$. Admitiendo un 20 % de exceso para compensar pérdidas por envejecimiento, se tendría un valor definitivo de $W = 1833.12 \text{ kg}$ ($V_R = 1.34 \text{ m}^3$).

Atendiendo a la geometría del reactor, como:

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

con los valores de V_R y D calculados, el producto $L \cdot n_T$ sería igual a 6877.87, con lo que al suponer un número de tubos automáticamente quedaría fijada la longitud de los mismos.

Para calcular la pérdida de carga se ha aplicado la ecuación de Ergun:

$$(XIV) \quad \frac{\Delta P}{L} = \left[\frac{150(1 - \epsilon)\mu}{d_p} + 1.75 G \right] \frac{1 - \epsilon}{\epsilon^3} \frac{G}{d_p \cdot g_c \cdot \ell}$$

que se ha resuelto siguiendo la secuencia de cálculos que corresponde al DIAGRAMA I. El procedimiento consiste en calcular valores de ΔP para diversos n_T , hasta encontrar un valor de ΔP inferior al 10 % de

la presión de partida (15 atm.). Los resultados se resumen en la TABLA 5, en la que se observa que entre 4500 y 5000 se llega a tener la pérdida de carga adecuada. Para su uso posterior se ha tomado el valor de $n_T = 4800$.

TABLA 3
RESUMEN DE RESULTADOS DE LOS DIFERENTES ENSAYOS

Ensayo	T_i	T_c	P_c	T_{max}	X_{Tmax}	T_f^o	V_R
1	523	489.23	22	629.9	0.003	629.9	0.86
2	523	484.38	20	524.8	0.00675	495.4	—
3	523	486.84	21	534.0	0.0105	501.4	2.15
4 X	523	488.04	21.5	544.9	0.0081	531.4	1.39
5	525	486.84	21	539.0	0.015	506.7	1.76
6	525	488.04	21.5	575.4	0.0108	575.4	1.06
7 X	525	487.44	21.25	546.3	0.0093	533.4	1.33
8 X	526	486.84	21	543.2	0.0117	519.2	1.47
9 X	527	486.84	21	550.4	0	544.3	1.21
10	528	479.14	18	528.0	0.015	487.4	—
11	528	486.84	21	572.7	0.0045	572.7	1.03
12	528	484.38	20	533.1	0.075	495.5	2.68
13	528	485.61	20.5	539.9	0.0102	502.0	1.81
14 X	528	486.23	20.75	546.9	0.0093	530.3	1.30
15 X	529	485.61	20.5	544.7	0.0063	517.4	1.42
16	530	484.38	20	538.7	0.015	496.4	2.14
17	530	486.84	21	637.2	0.0129	637.2	0.77
18 X	530	485.61	20.5	555.0	0.015	552.7	1.11
19	533	489.23	22	897.6	0.015	897.6	—
20	533	484.38	20	582.8	0.00075	582.8	0.91
21	533	479.14	18	533.2	0.00375	487.4	—
22	533	481.81	19	535.9	0.015	491.3	—
23 X	533	483.10	19.5	542.3	0.0072	495.2	1.93
24	535	480.48	18.5	538.0	0.0036	489.3	3.19
25 X	535	481.81	19	543.1	0.0066	492.2	2.08
26	535	483.10	19.5	579.2	0.015	579.2	0.90
27	538	489.23	22	764.2	0.015	764.2	—
28	538	484.38	20	715.1	0.015	715.1	—
29	538	481.81	19	640.1	0.015	640.1	0.67
30	538	479.14	18	542.5	0.0048	487.14	2.88
31 XX	538	480.48	18.5	552.5	0.0096	523.0	1.14

TABLA 4

LISTADO DE RESULTADOS, PROGRAMA OXETILEN

Conversión	Temperatura	Veloc. reac.	Vol. retor.	Q. transf.
0.0000	538.000	0.2030E — 01	0.0000	0.0
0.0003	538.623	0.2050E — 01	0.0223	0.1157E + 06
0.0006	539.240	0.2070E — 01	0.0444	0.2315E + 06
0.0009	539.853	0.2090E — 01	0.0663	0.3474E + 06
0.0012	540.459	0.2110E — 01	0.0880	0.4633E + 06
0.0015	541.060	0.2129E — 01	0.1095	0.5794E + 06
0.0018	541.654	0.2148E — 01	0.1307	0.6955E + 06
0.0021	542.243	0.2167E — 01	0.1518	0.8118E + 06
0.0024	542.824	0.2185E — 01	0.1728	0.9281E + 06
0.0027	543.399	0.2202E — 01	0.1935	0.1045E + 06
0.0030	543.966	0.2220E — 01	0.2141	0.1161E + 07
0.0033	544.525	0.2237E — 01	0.2345	0.1278E + 07
0.0036	545.075	0.2253E — 01	0.2548	0.1395E + 07
0.0039	545.617	0.2268E — 01	0.2750	0.1512E + 07
0.0042	546.148	0.2283E — 01	0.2950	0.1629E + 07
0.0045	546.667	0.2297E — 01	0.3149	0.1746E + 07
0.0048	547.175	0.2311E — 01	0.3346	0.1864E + 07
0.0051	547.670	0.2323E — 01	0.3543	0.1981E + 07
0.0054	548.150	0.2334E — 01	0.3738	0.2099E + 07
0.0057	548.615	0.2345E — 01	0.3933	0.2217E + 07
0.0060	549.062	0.2354E — 01	0.4127	0.2336E + 07
0.0063	549.489	0.2361E — 01	0.4320	0.2455E + 07
0.0066	549.896	0.2368E — 01	0.4512	0.2575E + 07
0.0069	550.279	0.2372E — 01	0.4704	0.2693E + 07
0.0072	550.636	0.2375E — 01	0.4896	0.2813E + 07
0.0075	550.965	0.2375E — 01	0.5088	0.2933E + 07
0.0078	551.262	0.2374E — 01	0.5280	0.3054E + 07
0.0081	551.524	0.2370E — 01	0.5471	0.3176E + 07
0.0084	551.746	0.2363E — 01	0.5664	0.3298E + 07
0.0087	551.926	0.2354E — 01	0.5857	0.3421E + 07
0.0090	552.057	0.2341E — 01	0.6051	0.3544E + 07
0.0093	552.135	0.2325E — 01	0.6246	0.3668E + 07
0.0096	552.152	0.2305E — 01	0.6443	0.3794E + 07
0.0099	552.102	0.2280E — 01	0.6641	0.3920E + 07
0.0102	551.979	0.2252E — 01	0.6842	0.4048E + 07
0.0105	551.771	0.2218E — 01	0.7046	0.4177E + 07
0.0108	551.471	0.2179E — 01	0.7253	0.4307E + 07
0.0111	551.065	0.2135E — 01	0.7464	0.4439E + 07
0.0114	550.543	0.2084E — 01	0.7680	0.4573E + 07
0.0117	549.887	0.2027E — 01	0.7901	0.4709E + 07
0.0120	549.083	0.1963E — 01	0.8130	0.4848E + 07
0.0123	548.111	0.1891E — 01	0.8366	0.4989E + 07
0.0126	546.812	0.1806E — 01	0.8612	0.5135E + 07
0.0129	545.253	0.1711E — 01	0.8871	0.5286E + 07
0.0132	543.393	0.1607E — 01	0.9145	0.5441E + 07
0.0135	541.185	0.1493E — 01	0.9439	0.5602E + 07
0.0138	538.578	0.1371E — 01	0.9757	0.5769E + 07
0.0141	535.511	0.1241E — 01	1.0106	0.5944E + 07
0.0144	531.925	0.1104E — 01	1.0494	0.6127E + 07
0.0147	527.763	0.9645E — 02	1.0934	0.6318E + 07
0.0150	522.991	0.8250E — 02	1.1443	0.6520E + 07



TABLA 5

VALORES DE PERDIDA DE CARGA CORRESPONDIENTES
A DIFERENTES NUMERO DE TUBOS

n_T	S	L	G	$\Delta P/l$	ΔP
3000	0.585	2.29	101882.56	2.57	5.89
4000	0.780	1.72	76411.92	1.46	2.51
5000	0.975	1.37	61129.54	0.94	1.29 < 1.5
4500	0.878	1.53	67921.71	1.16	1.77 > 1.5
4750	0.926	1.45	64343.41	1.04	1.51
4800	0.936	1.43	63676.60	1.02	1.46

A la vista de estos valores tan altos de n_T , aunque en estos reactores el número de tubos suele serlo, cabe pensar en ofrecer, no sólo la posibilidad de colocar un reactor de 4800 tubos, sino que habría que pensar en usar dos reactores iguales en paralelo, cuyo número de tubos fuese la mitad (2400), en aumentar el valor del diámetro interior del tubo, o en revisar el planteamiento general del proyecto para usar como agente oxidante aire enriquecido u oxígeno solo en vez de aire, con lo que los caudales serían mucho menos. De estas posibilidades, un estudio económico elegiría la más acertada.

A efectos de continuar con el diseño, se ha elegido la segunda posibilidad, de uso de dos reactores iguales en paralelo.

IV. CALCULO DEL COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR

El valor de U se ha calculado a partir de la ecuación (VIII) de la PARTE I de este trabajo, en la que se ha despreciado la resistencia debida a la película externa, ya que en el caso de evaporación de agua, los valores que la bibliografía cita para h_o son muy altos (8).

Para el cálculo del coeficiente de película interno, se ha recurrido a la fórmula de Leva, que para un sistema enfriador es:

$$(XV) \quad h_i = \frac{k_g}{D} 3.50 \left(\frac{G \cdot d_p}{\mu} \right)^{0.7} \exp(-4.6 d_p/D)$$

El valor que ha resultado para h_i ha sido de 609.20 kcal/hr · m² · °K.

Para el factor de obstrucción, la bibliografía consultada (8, 9, 11) siempre da ciertos márgenes de valores posibles. Por esta razón, en vez de proceder a su estimación para calcular U , lo que se ha hecho es, con el h_1 calculado y con el U supuesto inicialmente, calcular el valor de r_w . El resultado ha sido $r_w = 0.0012$, valor que está dentro de los márgenes permitidos. Si no fuese así, habría que estimar un nuevo valor de U y repetir otra vez los cálculos.

V. DISPOSICION DE LOS TUBOS Y DIAMETRO DE LA CARCASA Y FLUIDO EXTERNO

Por permitir una mejor limpieza mecánica, se ha tomado como disposición de los tubos, la cuadrado rotado; para 2400 tubos de 3/4", con 1" de paso entre tubos, el diámetro de carcasa correspondiente es de 56.62" (12).

Según el programa de diseño para la simulación del equipo, el valor del calor transferido desde el reactor al medio enfriador es de 6.52×10^6 kcal/hr. Como el calor de evaporación del agua a 18.5 kg/cm² es de 456 kcal/kg, la velocidad de alimentación de agua al reactor ha de ser de $m_a = 14298.25$ kg/hr.

En la hoja de especificación se resumen las variables de diseño.

Como final puede resaltarse que la contribución al diseño de reactores-cambiadores que se ha expuesto en estos trabajos, aun con las incertidumbres en la estimación de algunas variables, puede considerarse trascendente tanto en el orden de haber ofrecido una herramienta de cálculo rápido en el ordenador como en la sistematización de los cálculos de este tipo de reactores que no ofrecen los textos al uso.

NOTACION:

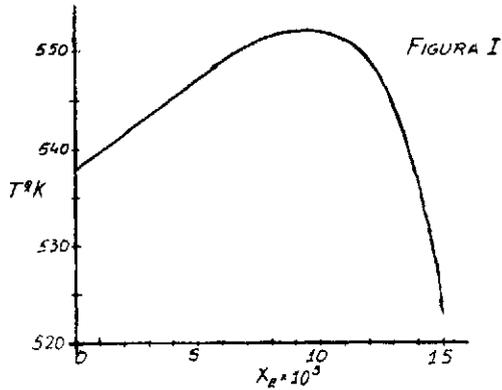
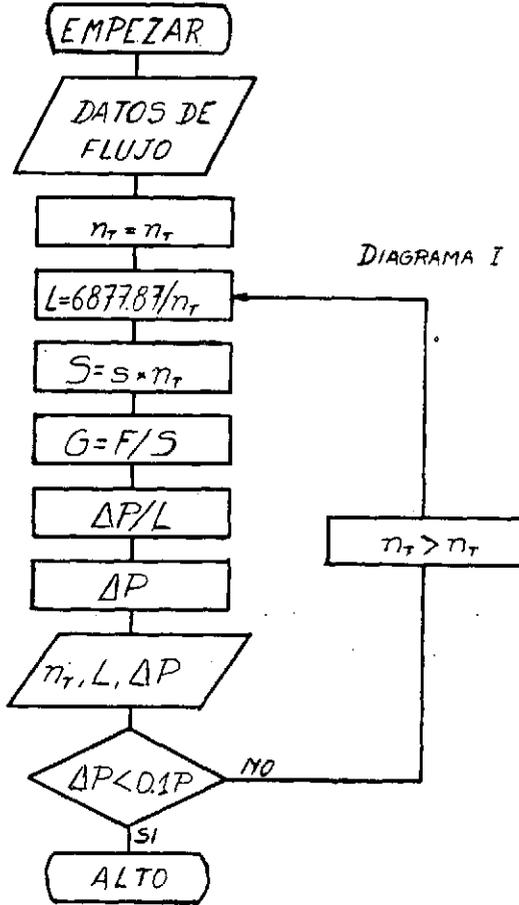
a, b	órdenes de reacción
C_p	capacidad calorífica molar, kcal/kmol · °K
D	diámetro interior de los tubos, m
d_p	diámetro de partícula, m
F	flujo másico, kg/hr
F_t	alimentación al reactor, kmoles/hr
$G = F/S$	flujo másico por unidad de área, kg/hr · m ²
k	constante cinética
k_g	conductividad calorífica del gas, kcal/hr · m · °K
P_E, P_O	presiones parciales (atm.) de etileno y oxígeno
$(-r_E)$	velocidad de reacción, kmoles etileno/hr · kg catlz.
s	superficie interior de los tubos, m ²
S	área total de paso, m ²
X_E	conversión, kmoles C ₂ H ₄ consumidos en la reacción principal/kmoles totales alimentados
ΔH_{298}	calor de reacción medido a 298 °K
ΔP	pérdida de carga, kg/cm ²
ϵ	porosidad
ρ	densidad del fluido, kg/m ³
μ	viscosidad del fluido, kg/hr · m

BIBLIOGRAFIA

13. P. LEPRINCE y col., *Procédés de Pétrochimie*, Editions Technip, París, 1971.
14. Proyecto curso 1978-79, Departamento de Química Técnica, Universidad de Murcia.

NOTA.—El resto de notación y bibliografía son los indicados en la PARTE I.





Dpto QUIMICA TECNICA UNIVERSIDAD MURCIA	DISEÑO DEL REACTOR DE <i>Oxido de Etileno..</i>	Diseñado por: <i>[Signature]</i>	
CONDICIONES DE OPERACION			
Tipo operación: <i>Reactor - Cambiador</i> $T_1^0 = 538 \text{ }^\circ\text{K}$, $T_2^0 = 552.99 \text{ }^\circ\text{K}$			
$T_{\text{max}} = 552.15 \text{ }^\circ\text{K}$, $P_1 = 15 \text{ kg/cm}^2$, $P_2 = \text{ kg/cm}^2$, $\Delta P = 1.46 \text{ kg/cm}^2$			
Conversión final $x_p = 0.015 \text{ kmol C}_2\text{H}_4 / \text{kmol aliment.}$, $x_{T_{\text{max}}} = 0.0096$			
D I M E N S I O N E S			
Nº reactores: 2, Nº tubos= 2400, L= 1.43 m, D= 3/4" N, BWG=16			
$V_R = 1.34 \text{ m}^3$, D carcasa= 56.62", Disposición tubos= \diamond , Paso= 1"			
M E D I O E X T E R N O			
Misión: enfriar ^{calentar} Tipo: <i>Agua - Vapor</i> , Caudal= 14298.25 kg/hr, P= kg/cm ²			
$Q_{\text{transferido}} = 6.52 \times 10^6 \text{ kcal/hr}$, $T_{\text{el}} = \text{ }^\circ\text{K}$, $T_{\text{sf}} = \text{ }^\circ\text{K}$			
C A T A L I Z A D O R			
Tipo: , W= 1833.12 kg, $d_p = 0.0013 \text{ m}$			
$\epsilon = 0.57$, $\rho_b = 1340 \text{ kg/m}^3$			
ALIMENTACION	<i>kmol/hr</i>	EFLUENTES	<i>kmol/hr</i>
C_2H_4	101.70	C_2H_4	54.76
CH_4	0.61	O_2	135.52
C_2H_6	0.61	CO_2	150.78
O_2	202.88	N_2	1611.61
CO_2	116.10	$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$	30.51
N_2	1611.61	H_2O	35.90
	\		\
TOTAL	2033.51	TOTAL	2019.08
REACCIONES:			
$\text{C}_2\text{H}_4 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{O}$ $\Delta H_{298}^\circ = -25 \text{ kcal/mol}$			
$\text{C}_2\text{H}_4 + 3 \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$ $\Delta H_{298}^\circ = -316 \text{ "}$			
$\text{CH}_4 + 2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2 \text{H}_2\text{O}$ $\Delta H_{298}^\circ = -191.76 \text{ "}$			
$\text{C}_2\text{H}_6 + \frac{7}{2} \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{CO}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$ $\Delta H_{298}^\circ = -341.26 \text{ "}$			
OBSERVACIONES:			
Diseño realizado para: <i>Publicación Anales Univ. Murcia</i>			



