

Diseño y estudio de reactores para la alquilación sólida
Integrantes: Alejandro Briceño, Michael Blanco, Herdy Ortiz
Prof. Jaime Riera
Departamento de Termodinámica y Fenómenos de Transferencia - USB

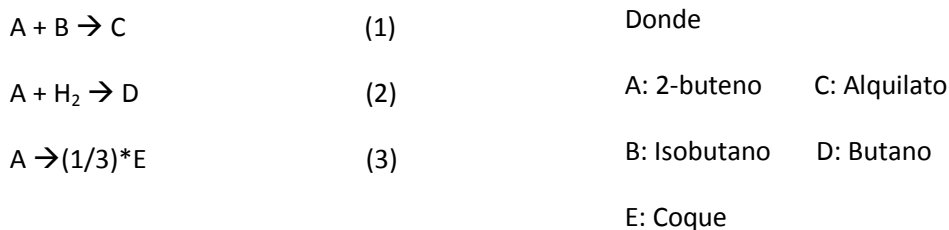
I.- Introducción

El diseño de reactores en la industria resulta ser un pilar fundamental para el desarrollo de la economía. Para el ingeniero no sólo las variables operacionales (temperatura, presión, volumen) deben ser controladas para alcanzar con éxito la producción de determinado producto. Es necesario también prestar atención en el consumo de reaccionantes pues usualmente existirán sub-productos que no se deseen, y que quizás no puedan venderse, por lo que esto puede constituir un gasto que puede afectar directamente a los costes de operación del proceso.

Para la evaluación preliminar del proyecto de diseño es necesario tomar en cuenta principalmente la cinética y desde luego los balances de materia y energía que correspondan. Así por ejemplo, en el caso de la alquilación sólida basando los balances de materia en un modelo publicado por Nieto et al. (2007) se pretende diseñar reactores que den las condiciones óptimas de operación para el proceso. En ese sentido se presenta a continuación los balances de materia que darán pie al posterior diseño, basando el estudio preliminarmente para un tanque de agitación continua y luego en un reactor de flujo pistón. Posteriormente se presenta el estudio de selectividad local que permitirá saber cuáles podrían ser factores manipulables para el caso específico de dicha alquilación.

II.- Balances de Masa

El proceso de alquilación sólida se presenta de forma esquematizada:



Es necesario destacar que el número de especies es superior al número de reacciones por lo tanto, basando en el estudio de reactores, definiremos los balances en términos de conversión. Para ellos tomando como referencia el flujo de entrada de B, se define la conversión.

Por lo tanto:

$$F_A = FB_0(M_A - X_1 - X_2 - 3 * X_3)$$

$$F_b = FB_0(1 - X_1)$$

$$F_C = FB_0(X_1)$$

$$F_D = FB_0(X_2)$$

$$F_{H2} = FB_0(M_H - X_2)$$

$$F_E = FB_0\left(\frac{1}{3}\right) * X_3$$

Para un Tanque de Agitación en Estado Estacionario

Balance de masa para B

$$0 = FB * X_1 - 0,8 * K_{A1} * C_a * \left(\frac{0,1 - C_e}{0,1}\right) * Vtac$$

Balance de masa para D

$$0 = -FB_0 * X_2 - 0,92 * K_{A2} * C_A * C_{H2}^{0,3} * \left(\frac{0,1 - C_e}{0,1}\right) * Vtac$$

Balance de masa para E

$$0 = \frac{-FB_0 * X_3}{3} + \frac{1}{3} * \frac{K_{A3} * C_A^{1,5}}{1 + 4 * C_{H2}} * Vtac$$

Donde ahora es necesario sustituir en los balances, las concentraciones en términos de flujos de forma tal que la expresión sea similar a la siguiente:

$$C_i = \frac{F_i}{F_{to}}$$

Donde F_i es el flujo del componente deseado, y F_{to} es el flujo total. De esa forma tenemos que nuestras concentraciones deben estar escritas de la siguiente forma, por ejemplo en el caso de A, H_2 , y E quedarían de esta forma en Mathcad.

$$CA(x) := \frac{[FB0 \cdot Ct0 \cdot (MA - x_0 - x_1 - x_2)]}{FB0 \cdot \left(1 + MA + MH - x_0 - x_1 - \frac{2}{3} \cdot x_2\right)}$$

$$CH(x) := \frac{[FB0 \cdot Ct0 \cdot (MH - x_1)]}{FB0 \cdot \left(1 + MA + MH - x_0 - x_1 - \frac{2}{3} \cdot x_2\right)}$$

$$CE(x) := \frac{\left(FB0 \cdot Ct0 \cdot \frac{1}{3} \cdot x_2\right)}{FB0 \cdot \left(1 + MA + MH - x_0 - x_1 - \frac{2}{3} \cdot x_2\right)}$$

En el caso del reactor flujo pistón los balances se realizan nuevamente en términos de conversión:

Balance de masa en C

$$\frac{dX_1}{dV} = \frac{0,8 * K_{A1} * Ca * \left(\frac{0,1 - Ce}{0,1}\right)}{FB0}$$

Balance de masa en D

$$\frac{dX_2}{dV} = \frac{0,92 * K_{A2} * C_A * C_{H2}^{0,3} * \left(\frac{0,1 - Ce}{0,1}\right)}{FB0}$$

Balance de masa en E

$$\frac{dX_3}{dV} = \frac{K_{A3} * C_A^{1,5}}{FB0 * (1 + 4 * C_{H2})}$$

Una vez con los respectivos balances aplicaremos los métodos numéricos necesarios para la obtención de las conversiones, y el volumen necesario para operar. La idea es poder obtener una mayor conversión en la primera reacción ya que esta da el producto deseado "alquilato" en este sentido si variamos el volumen y se grafica: conversión vs volumen, podemos obtener cual sería la conversión más adecuada. Con este valor y graficando el conversión vs flujo de entrada vemos entonces la relación de entrada necesaria para alcanzar dicha conversión.

Este preámbulo da entonces como necesidad hablar de la selectividad, que nos permitirá relacionar como es la relación entre lo que deseo y lo que no deseo obtener.

III.- Estudio y análisis de la selectividad