

Congreso Latinoamericano de Ingeniería y Ciencias Aplicadas Clicap 2009

Mendoza 18,19 y 20 de marzo de 2009

“Cálculo del tiempo requerido para la variación de la temperatura interna del reactor, cuando se realiza un cambio de escala, utilizando un software”.

Autor: Ing. Juan Montesano

Universidad Tecnológica Nacional (UTN) Facultad Regional Avellaneda .

jmontesano@fra.utn.edu.ar

1. Resumen

Durante la investigación y el desarrollo de un proceso químico, uno de los puntos críticos es el cambio de escala o aumento de tamaño del reactor. Esto se debe a que una reacción química constituye uno de los procesos más complejos en el campo de la ingeniería, pues usualmente se encuentra asociada a fenómenos de transferencia de masa y calor, en los cuales el cambio de escala tiene una significación muy especial.

Para diseñar una unidad comercial no existe un camino predeterminado, es un proceso de adquisición de conocimientos continuo basado en la información experimental, donde constantemente es necesario escoger alternativas durante la búsqueda de soluciones prácticas a los problemas que se van generando en cada etapa del escalado.

En este trabajo se realiza un escalado desde planta piloto hasta escala final para un reactor batch. Se utilizan las fórmulas clásicas de termodinámica y de transferencia de calor, manteniendo la relación de diseño largo diámetro, en ambos modelos, para corregir los tiempos de reacción para cada ajuste de temperatura.

Con el fin de facilitar la tarea de cálculo se utiliza el software Mathcad.

2. Marco teórico

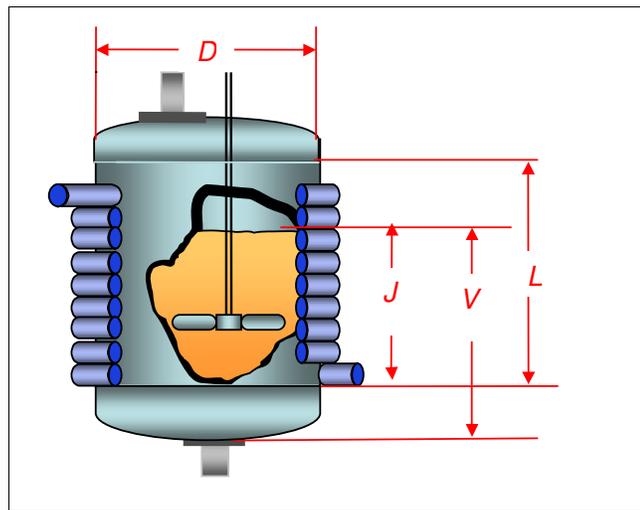


Figura 1: Dimensiones del batch

Nomenclatura: (ver Fig. 1)

V: Volumen de trabajo

J: Longitud cubierta por el volumen de trabajo

L: longitud del reactor

D: Diámetro del reactor

Considerando el reactor ; el volumen de trabajo (V), está dado por la siguiente expresión

$$V = F \left[aD^3 + \left(\frac{\pi}{4} \right) D^2 L \right] \quad (1)$$

Donde:

$F = 0,8$ fracción del volumen total ocupado por el volumen de trabajo

$a =$ factor para la determinación de la capacidad del casquete toriesférico = 0,081 por ASME Standard F& D.

La relación alto/diámetro del reactor, se define como:

$$R = \frac{D}{L} \quad (2)$$

$$\frac{\pi}{4} = d = 0,7854 \quad (3)$$

Sustituyendo d y R en la expresión (1)

$$V = F \left[aD^3 + dRD^3 \right] \quad (4)$$

Despejando de (4) el diámetro y reemplazando, queda:

$$D = \left[\frac{\left(\frac{V}{F} \right)}{(a + d.R)} \right]^{1/3} \quad (5)$$

La expresión del área donde se produce el intercambio de calor (ver figura 1) donde c es el factor establecido por ASME Standard F& D. para determinar el área del casquete toriesférico

$$A = c D^2 + \pi D J \quad (6)$$

También el volumen de trabajo en el reactor se puede poner, en función de la altura J , como:

$$V = F \left[a D^3 + d L D^2 \right] = a D^3 + d J D^2 \quad (7)$$

$$\text{Despejando } J \text{ de la igualdad (7)} \quad J = \left[\frac{a \cdot D \cdot (F - 1)}{d} \right] + F \cdot L \quad (8)$$

Sustituyendo (8) la ecuación (6)

$$A = D^2 [c + 4 a (F - 1) + F \pi R] \quad (9)$$

Se define: la relación de escalado del volumen S_V , que relaciona el volumen del reactor piloto **1** con el reactor industria **2**.

$$S_V = \frac{\text{Volumen industria } 2}{\text{Volumen piloto } 1} \quad (10)$$

La relación de escalado del área de transferencia de calor

$$S_A = \frac{\text{Área de transferencia } 2}{\text{Área de transferencia } 1} \quad (11)$$

Si reemplaza (9) para cada modelo, en la (11) queda:

$$S_A = \frac{\text{Área de transferencia } 2}{\text{Área de transferencia } 1} = \frac{D_2^2 [c + 4 a (F - 1) + F \pi R_2]}{D_1^2 [c + 4 a (F - 1) + F \pi R_1]} \quad (12)$$

pero si R se mantiene constante en el cambio de escala la (12) queda:

$$S_A = \frac{D_2^2}{D_1^2} \text{ que está relacionada con la de volumen}$$

$$S_A = (S_V)^{2/3} \quad (13)$$

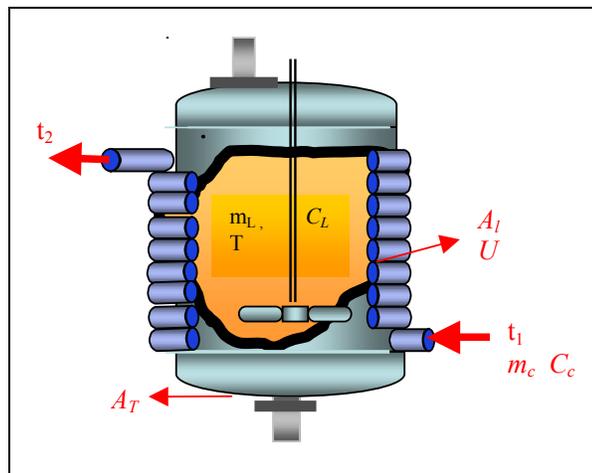


Figura 2: Batch para estudio energético

Nomenclatura (ver Fig. 2):

C_L y m_L : Calor específico y masa, respectivamente, del fluido del reactor.

T : Temperatura dentro del reactor.

U : coeficiente total de transferencia de calor

A_c : área lateral de intercambio y A_T : área de intercambio en la sección torisférica.

C_c y m_c : Calor específico y caudal másico, respectivamente, del fluido que circula por la camisa.

t_1 y t_2 : temperaturas de entrada y salida del fluido de la camisa.

Recordando conceptos de Termodinámica y Transferencia de Calor, para cuando por la camisa circula un fluido refrigerante.

$$-M_L C_L \frac{dT}{d\tau} = m_C C_C (t_2 - t_1) = U A \Delta T_{mL} \quad (14)$$

Pero, si es calefactor

$$M_L C_L \frac{dT}{d\tau} = m_C C_C (t_1 - t_2) = U A \Delta T_{mL} \quad (15)$$

Donde los ΔT_{mL} para enfriamiento y calentamiento son respectivamente:

$$\Delta T_{mL} = \frac{[(T - t_1) - (T - t_2)]}{\ln \left[\frac{(T - t_1)}{(T - t_2)} \right]} \quad \Delta T_{mL} = \frac{[(t_1 - T) - (t_2 - T)]}{\ln \left[\frac{(t_1 - T)}{(t_2 - T)} \right]} \quad (16)$$

Para determinar la temperatura de salida de la camisa (en enfriamiento) se iguala la central de (15) con la correspondiente (16)

$$m_C C_C (t_2 - t_1) = U A \frac{[(T - t_1) - (T - t_2)]}{\ln \left[\frac{(T - t_1)}{(T - t_2)} \right]} \quad (17)$$

$$\ln \left[\frac{(T - t_1)}{(T - t_2)} \right] = \frac{U A}{m_C C_C} \Rightarrow \frac{(T - t_1)}{(T - t_2)} = \exp \left[\frac{U A}{m_C C_C} \right] = \exp X \quad (18)$$

Despejando

$$t_2 = [T(X-1) + t_1] / X = T + [(t_1 - T) / X] \quad \text{donde} \quad X = \exp (U A / m_C C_C) \quad (19)$$

Reemplazando en (19)

$$\begin{aligned} -M_L C_L \frac{dT}{d\tau} &= m_C C_C \left\{ T + \left[\frac{t_1 - T}{X} \right] - t_1 \right\} \\ \tau &= \left[\frac{M_L C_L}{m_C C_C} \right] \left[\frac{X}{X-1} \right] \ln \left[\frac{T_1 - t_1}{T_2 - t_1} \right] \Rightarrow \text{Enfriamiento} \\ \tau &= \left[\frac{M_L C_L}{m_C C_C} \right] \left[\frac{X}{X-1} \right] \ln \left[\frac{t_1 - T_1}{t_1 - T_2} \right] \Rightarrow \text{Calentamiento} \end{aligned} \quad (20)$$

Ejemplo 1

Un reactor de 17,5 m² de superficie lateral y 7m² de toro esférica se lo refrigera con un caudal de 3,6 kg/s de agua que ingresa a la camisa a 40°C. La temperatura del fluido dentro del reactor con mezclado perfecto es de 105°C. El coeficiente de transferencia total de calor es de

417,3 W/m² K. Se desea saber el tiempo necesario para que la temperatura dentro del reactor sea de 70°C

Área lateral de intercambio	$A_l := 17.5m^2$	
Área toro esférica	$A_c := 7m^2$	
Área total	$A_T := A_l + A_c$	$A_T = 24.5m^2$
Coefficiente total de transferencia de calor	$U := 417.3 \frac{W}{m^2 \cdot K}$	
Caudal del fluido refrigerante	$m_c := 3.6 \frac{kg}{s}$	
Masa dentro del reactor	$m_L := 13482.9kg$	
Calor específico del fluido refrigerante	$C_c := 4.18 \cdot 10^3 \frac{J}{kg \cdot K}$	
Calor específico del fluido refrigerante	$C_L := 2.15 \cdot 10^3 \frac{J}{kg \cdot K}$	
	$X := e^{\frac{U \cdot A_T}{m_c \cdot C_c}}$	$X = 1.973$
Tempratura en el reactor	$T_1 := 105C$	$T_2 := 70C$
Temperatura de entrada del fluido refrigerante	$t_1 := 40C$	
Temperatura a la salida inicial del fluido refrigerante	$t_2 := T_1 + \frac{t_1 - T_1}{X}$	$t_2 = 72.051C$
Temperatura a la salida final del fluido refrigerante	$t_{22} := T_2 + \frac{t_1 - T_2}{X}$	$t_{22} = 54.793C$
Tiempo requerido	$\tau := \frac{m_L \cdot C_L}{m_c \cdot C_c} \cdot \frac{X}{X - 1} \cdot \ln\left(\frac{T_1 - t_1}{T_2 - t_1}\right)$	$\tau = 3.021 \times 10^3 s$

Figura 3 : Programa en Mathcad 1

Respuesta $\tau = 3,021 \cdot 10^3 s = 0,84 h$

Si ahora se realiza un escalado bajo las siguientes condiciones (industria):

- $U_2 = U_1 = U$
- Utilizando el mismo refrigerante y a la misma temperatura de entrada
- El caudal del refrigerante es $m_{c2} = const \cdot m_{c1}$;

$$X_1 = e^{\frac{U A_1}{m_{c1} C_c}} \quad X_2 = e^{\frac{U A_2}{m_{c2} C_c}} \quad (21)$$

Si X_1 es para planta piloto y X_2 industria

Reemplazando en la expresión X_2 la ec. 11 y 13 y teniendo en cuenta las condiciones anteriores

$$X_2 = \exp\left(\frac{U \cdot A_1 \cdot S_V^{2/3}}{\text{const.} \cdot m_{C1} \cdot C_C}\right) = \left(e^{NUT_1}\right)^b \quad (22)$$

Donde
$$NUT_1 = \frac{U \cdot A_1}{m_{C1} \cdot C_C} \quad \text{y} \quad b = \frac{S_V^{2/3}}{\text{const.}} \quad (23)$$

$$t_2 = T + \left[\frac{t_1 - T}{\left\{e^{NUT_1}\right\}^b} \right] \quad (24)$$

$$\tau = \left[\frac{S_V}{\text{const.}} \right] \left[\frac{m_L \cdot C_L}{m_C \cdot C_C} \right] \left[\frac{\left\{e^{NUT_1}\right\}^b}{\left\{e^{NUT_1}\right\}^b - 1} \right] \left[\ln \left[\frac{T_1 - t_1}{T_2 - t_1} \right] \right]$$

En las ec. 24 se obtiene el efecto de escalado en la temperatura t_2 de salida de la camisa y el tiempo τ requerido para completar la etapa de ajuste de la temperatura

Cambio de escala

Sv := 2
const := 1

$NUT_1 := \frac{U \cdot AT}{m_C \cdot C_C}$ NUT1 = 0.679

$b := \frac{S_V^{2/3}}{\text{const}}$ b = 1.587 $X_2 := \left(e^{NUT_1}\right)^b$ X2 = 2.94

Temperatura a la salida inicial del fluido refrigerante $t_{21} := T_1 + \frac{t_1 - T_1}{X_2}$ t21 = 82.893C

Temperatura a la salida final del fluido refrigerante $t_{221} := T_2 + \frac{t_1 - T_2}{X_2}$ t221 = 59.797C

Área reactor industrial $A_2 := S_a \cdot AT$ A2 = 38.891m²

$\tau := \frac{S_V}{\text{const}} \cdot \frac{m_L \cdot C_L}{m_C \cdot C_C} \cdot \left(\frac{X_2}{X_2 - 1}\right) \cdot \ln\left(\frac{T_1 - t_1}{T_2 - t_1}\right)$ $\tau = 4.514 \times 10^3 \text{ s}$

Figura 4 : Programa en Mathcad 2

3. Metodología :

Con el fin de simplificar los cálculos se generó un programa con el Mathcad. Lo que permite obtener los resultados para reactores que operen con diferentes datos en el marco de las condiciones establecidas.

Además sería posible también obtener la cantidad de calor disipado en el ajuste de tiempo aplicando los conceptos de entalpía.

4. Resultados:

Al duplicar el volumen del batch para adaptarlo a la industria, utilizando el mismo fluido refrigerante , la misma temperatura de entrada , con el mismo caudal de la planta piloto y manteniendo sin variar el coeficiente total de transferencia de calor se requiere para llevar la temperatura dentro del reactor de 104°C hasta 70°C un tiempo de $\tau = 4,514 \cdot 10^3 \text{s} = 1,25 \text{ h}$ lo que significa un aumento en un 48% en más que el tiempo de ajuste necesario en la planta piloto.

5. Conclusiones

Generalmente deben hacerse muchos ajustes de temperatura en el reactor y como consecuencia deben corregirse los tiempos de reacción para cada ajuste de temperatura ya que estos afectan la conversión por medio de la ecuación de diseño con la cinética de reacción; y por lo tanto la capacidad de producción de la planta.

6. Bibliografía

- Fogler H. S. (2001) Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas, Ed. 3ra México, Prentice Hall,
- Gerpen J.V.; Jürgen K., (2005).The Biodiesel Handbook , Ed. Champaign, Illinois,.AOCS Press,
- Holland F.A., (1980)Flujo de fluidos para ingenieros químicos, Ed..Bs.As, Geminis S.A.
- Nauman E. B. (2002)Chemical Reactor Desing, Optimization and Scaleup, Ed. New York, Mc Graw Hill.
- Vian A, Ocón J., (1970) Elementos de Ingeniería Química, Ed. Madrid, Aguilar S.A.,

