



Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE QUÍMICA

**DETERMINACION DE COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA
DE CALOR EN REACTORES DE LEGNO FIJO**

T E S I S

Que para obtener el título de:

INGENIERO QUÍMICO

P r e s e n t a :

MARIA GUADALUPE OSORNO HERNANDEZ

México, D. F. **TESIS DONADA POR**
D. G. B. - UNAM

1001



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas

Tesis Digitales

Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©

PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

CAPITULOS

	pág.
I. INTRODUCCION	1
II. CONSIDERACIONES GENERALES	3
III. DESCRIPCION DEL METODO	35
IV. CALCULOS Y RESULTADOS OBTENIDOS	57
V. CONCLUSIONES	82

NOMENCLATURA

- a = Factor numérico el cual puede variar con la superficie activa del catalizador.
- A = Energía de activación/cte de los gases = E/R ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)
- C = Concentración del reactivo a cualquier distancia x del reactor (kmol/m^3)
- C_0 = Concentración en el equilibrio (kmol/m^3)
- C_0 = Concentración de la alimentación, es decir, en $x = 0$ (kmol/m^3)
- D_1 = Diámetro del reactor (m)
- e = Eñisividad
- ΔH = Calor de reacción por mol convertido (kcal/kmol)
- k_e = Conductividad térmica efectiva de la cama catalítica ($\text{kcal}/\text{m}^{\circ}\text{C h}$)
- k = Constante de velocidad de reacción
- J = Capacidad de calor volumétrica de los vapores a la temperatura T ($\text{kcal}/\text{h m}^2$ $^{\circ}\text{C}$).
- t = Tiempo (h)
- T = Temperatura a cualquier distancia x del reactor ($^{\circ}\text{C}$)
- T_m = Temperatura en el punto caliente o en el punto frío (máximo o mínimo) ($^{\circ}\text{C}$)
- T_0 = Temperatura de los alrededores del medio de transferencia de calor, normalmente también se toma como la temperatura de alimentación ($^{\circ}\text{C}$)
- C_p = Calor específico ($\text{Cal}/\text{g } ^{\circ}\text{C}$)

G = Masa velocidad (Kg/hr m²)

U = Coeficiente global de transferencia de calor del lecho - catalítico al medio externo de transferencia (referido a paredes tubulares) (Kcal/h m² C)

V = Velocidad lineal media de los vapores (m/h)

z = Distancia que existe desde el extremo de la alimentación del reactor a un punto considerado (m)

ϕ = Fracción de espacios huecos en el lecho catalítico

hw = Coeficiente de transferencia de calor en la pared (Kcal/h m² C)

r = Velocidad de reacción

kg = Conductividad térmica del fluido (Kcal/hr m °k)

ks = Conductividad térmica del sólido (Kcal/hr m °k)

I N T R O D U C C I O N

El extenso uso que se ha hecho y se hace de los reactores en los cuales un sistema de reacción se lleva a cabo, - hace necesario el conocimiento de la cinética de la reacción, - Si además, el calor de reacción es relativamente apreciable, - entonces el estudio de estos sistemas se complica ya que se re quiere además de la información cinética, información sobre la transferencia de calor.

Se ha observado en reactores tubulares que cuando una reacción se lleva a cabo (usualmente para tiempos relativamente cortos y condiciones de flujo continuo), acompañada de absorción o liberación de calor, se produce una variación longitudinal y radial de la temperatura con su correspondiente efecto - local o global sobre la amplitud y velocidad de la reacción, - Sin embargo a pesar de que para problemas de diseño los pará metros de transferencia de calor son necesarios, la información de que se dispone para su estimación es escasa e incierta.

El propósito del presente trabajo consiste en mostrar como puede evaluarse el coeficiente global de transferencia - de calor para reactores tubulares, así como también en tratar de establecer una correlación que permita predecir con cierta exactitud dichos coeficientes. Se propone un modelo unidimensional para tratar de describir adecuadamente el comportamiento

to de este tipo de reactores, teniendo en cuenta varias suposiciones, como por ejemplo, que el radio es lo suficientemente pequeño y por lo tanto no hay una variación apreciable en las condiciones del fluido en la dirección radial lo que permite evaluar el coeficiente global de transferencia de calor ("U") a partir de perfiles axiales de temperatura sin considerar las variaciones radiales.

El método que aquí se emplea para evaluar "U", basado en un balance de energía, se ejemplificará para un caso particular y puesto que un uso común para los reactores tubulares es en reacciones catalíticas en fase vapor, se estudiará la reacción de oxidación del benceno a anhídrido maléico catalizada con partículas esféricas de alúmina de baja área superficial de 3/16 de pulgada de diámetro e impregnadas de una mezcla de $\text{Mo}_3\text{V}_2\text{O}_5$ (1:3) y P_2O_5 (1:7). Se reportan los resultados para dos reactores de diámetros diferentes (una y dos pulgadas).

La presentación de este método es general y puede por lo tanto ser modificado de manera simple para cualquier tipo de reacción que se pretenda estudiar.

CONSIDERACIONES GENERALES

TRANSPORTE DE CALOR EN REACTORES EMPACADOS

Antes de tratar el fenómeno de transporte de calor en un reactor empacado es conveniente ubicarlo.

En general, los parámetros que dictan el comportamiento de un reactor en un sistema reacción-catalizador dado son:

- a.) Parámetros operacionales: Presión, temperatura, composición de la alimentación, etc.
- b.) Parámetros de transporte: Los varios coeficientes de transporte de masa y calor.
- c.) Parámetros cinéticos: Son los parámetros relacionados con la velocidad de reacción, p.ej. energía de activación, constante de velocidad de reacción, etc.

Los parámetros operacionales están bien definidos normalmente y además se pueden determinar experimentalmente con precisión. Sin embargo, los parámetros de transporte y cinéticos no se pueden evaluar tan fácilmente.

Debido a la dificultad para obtener parámetros cinéticos libres de la influencia de parámetros de transporte, sobre todo en un reactor no isotérmico de tamaño semicomercial, éstos deben determinarse independientemente en el laboratorio a las condiciones adecuadas (temperatura, presión, diámetro de partícula, flujo, etc.).

Idealmente, estudios de transferencia de masa y calor también deben llevarse a cabo para obtener los parámetros, pero si el sistema

es complejo (como lo es en el caso de reactores empacados) la determinación de los parámetros es muy inexacta. De tal manera que algunas consideraciones y simplificaciones tienen que hacerse, las cuales afectarán en distinto grado la solución final del problema.

Aquí se tratará el caso general de un sistema no isotérmico no adiabático donde ocurre una reacción exotérmica.

Se han propuesto hasta ahora dos modelos para resolver este problema:

- | | | |
|-----------------------|---|-------------------|
| a.) Modelos continuos | { | Pseudo-homogéneos |
| | | Heterogéneos |
| b.) Modelos de celdas | | |

Los modelos pseudo-homogéneos consideran que las variaciones de las propiedades del sistema son continuas, es decir, que no hay diferencias de concentración entre el fluido y la fase estacionaria o sólida. Los modelos heterogéneos sí distinguen entre las condiciones del fluido y las del sólido. Este es un enfoque más realista pero complica mucho más el modelo, debido a la necesidad de considerar procesos físicos (transferencia de masa y calor) entre las fases, incrementando el número de parámetros involucrados (coeficiente de transferencia de masa, densidad, porosidad y conductividad térmica del sólido, fracción de espacios huecos, diámetro de partícula, capacidad calorífica y difusividad del fluido, etc.).

Los modelos continuos permiten la aplicación de un balance diferencial en un elemento del reactor y se pueden por lo tanto expresar en forma de ecuaciones diferenciales. Los modelos de celdas, tra-

tan al sistema como un arreglo de tanques interconectados donde cada tanque se encuentra perfectamente mezclado.

Las ecuaciones a régimen permanente para cada etapa en el modelo de celdas son algebraicas, sin embargo, el tiempo de computación es mucho mas largo que para los modelos continuos, por lo que normalmente se han venido usando los modelos continuos para describir el comportamiento de los reactores y es el que se usará aquí.

1.a) Balance de Energía.

Los balances de energía son necesarios debido a que la velocidad de reacción es una función de la temperatura (ecuación de Arrhenius). El proposito del balance de energía es el de describir la temperatura en cada uno de los puntos de un reactor, de tal manera que a cada punto se la pueda asignar la velocidad apropiada.

Para un elemento de volumen ΔV y un periodo de tiempo Δt , la conservación de la energía requiere que:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Energía en las corrientes} \\ \text{alimentadas al elemento} \\ \text{de volumen } \Delta V \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{energía en las corrientes} \\ \text{que salen del elemento} \\ \text{de volumen } \Delta V \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{energía transferida desde} \\ \text{los alrededores al elemen-} \\ \text{to de volumen } \Delta V \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{acumulación de energía} \\ \text{en el elemento de} \\ \text{volumen } \Delta V \end{array} \right]$$

Para que el balance sea completo, los términos que se refieren a la energía de un fluido deben incluir todas las formas de energía potencial, interna cinética. Sin embargo, en los reactores químicos, solamente es importante la energía interna y, algunas veces, la energía en forma de trabajo mecánico. La diferencia entre el primero y el segundo término refleja los cambios de temperatura y los cambios de energía debidos a las diferencias de composición de las corrientes de entrada y salida (esto es, el calor de reacción). El tercer término representa los posibles intercambios de energía con los alrededores, que se originan en la transferencia térmica a través de las paredes del reactor. La solución de la ecuación de balance de energía da la temperatura en función de la posición.

En un lecho empacado a través del cual esta pasando un fluido reaccionante, el calor puede ser transferido en la dirección radial mediante varios tipos de mecanismos. Sin embargo, se ha hecho costumbre considerar que el lecho de partículas y el gas pueden remplazarse por un sólido hipotético en el cual el único mecanismo de transferencia de calor es la conducción. A la conductividad de dicho sólido se le ha llamado conductividad térmica efectiva, k_e . De acuerdo con esto, la temperatura T de cualquier punto del lecho puede relacionarse a k_e y a los parámetros de posición r y z (donde r y z son distancias a lo largo de los ejes radial y axial respectivamente) por medio de la ecuación diferencial

$$-r_p q_B \Delta H - G C_p \frac{\partial T}{\partial z} + \left[k_e \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) \right] = 0 \quad (2)$$

Si suponemos que la temperatura en la dirección radial es prácticamente constante y sustituimos la ecuación (2) en la (1)

$$\begin{array}{lcl} \text{Energía de la corriente} & = & \text{Energía de la corriente} + \Delta H' \\ \text{que entra} & & \text{que sale} \end{array}$$

donde $\Delta H'$ es el cambio de entalpía debido a la variación de la temperatura $C_p \Delta T$ y el cambio debido a la reacción $(\Delta H)r$, es decir:

$$\Delta H' = C_p \frac{dT}{dV} - (-\Delta H)r$$

$$\text{Energía transferida a los alrededores} = U(T_o - T) \frac{dA_h}{dV}$$

$$\text{Energía acumulada} = 0$$

por lo tanto:

$$C_p \frac{dT}{dV} = (-\Delta H) r + U(T_o - T) \frac{dA_h}{dV} \quad \text{-----}(3)$$

si $dV = A_h dz$, entonces $\frac{dA_h}{dz} = \frac{d(\pi D t z)}{dz} = \pi D t$ y la ecuación (3) puede escribirse como:

$$\frac{dT}{dz} = \frac{(-\Delta H)}{C_p} r + \frac{U}{C_p D t} (T_o - T) \quad \text{-----}(4)$$

La ecuación (4) describe el balance de energía para un reactor tubular no isotérmico no adiabático a régimen permanente.

1.b) Transferencia de Calor Radial.

La transferencia de calor en lechos empacados es mas complicada que la transferencia de masa, debido a la intervención del sólido y en un menor grado a los efectos de radiación, los cuales generalmente son significativos a temperaturas superiores a los 500°C

La disipación de calor en la dirección axial se ha encontrado despreciable excepto para lechos muy cortos y bajas velocidades de flujo por lo cual se enfocará esta discusión al transporte de calor radial.

De acuerdo con Yagi y Kunii (3), los varios mecanismos que contribuyen al flujo de calor en la dirección radial y por lo tanto al valor de la conductividad térmica efectiva son:

Mecanismos independientes del flujo

- (1) Conducción a través del sólido
- (2) Conducción a través de los puntos de contacto sólido-sólido
- (3) Radiación sólido-sólido
- (4) Radiación entre huecos adyacentes

Mecanismos dependientes del flujo

- (5) Conducción a través de la película cercana a la superficie
- (6) Convección sólido-fluido-sólido
- (7) Mezclado lateral del fluido

Yagi y Kunii (3) encontraron que el flujo tiene poco efecto en el mecanismo (5), debido a los finos intersticios cerca de la superficie de contacto que están empotrados en la capa fronteriza, excepto en el caso de Reynolds altos.

Cuando el número de Reynolds es pequeño, las capas fronterizas que rodean a los sólidos son espesas, por lo tanto los mecanismos 1,3,4 y 5 son predominantes.

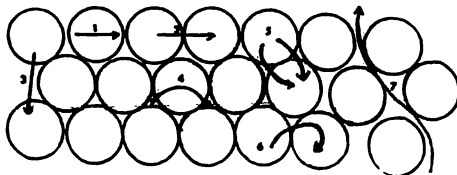


fig (1)

Sin embargo, en el caso de un número de Reynolds grande, el proceso (7) controla el flujo de calor en cualquier lecho empacado y por lo tanto el efecto del mecanismo (5) sobre la velocidad de flujo de calor es despreciable comparada con los demás. Las ecuaciones teóricas considerando el mecanismo (6) así como también los otros procesos, muestran que los efectos del mecanismo convección sólido-fluido-sólido son pequeños a cualquier número de Reynolds; los autores suponen por lo tanto que el mecanismo (5) es prácticamente independiente del flujo y -- que el (6) puede despreciarse.

Efecto del flujo:

La conductividad térmica efectiva causada por el mezclado lateral del fluido es presentada por Ranz (4) como:

$$(k_e)_f = \alpha C_p G / N \quad \text{-----(5)}$$

donde:

$$\alpha = \frac{\text{masa vel. del fluido en la dirección de la transferencia}}{\text{masa vel. del fluido en la dirección del flujo}}$$

N = Número de sólidos en una unidad de longitud de cama medidos en la dirección del flujo de calor

$$= 1/l_p$$

Si definimos β como la relación de la longitud promedio l_p entre centros de partículas al diámetro medio de la partícula D_p

$$= l_p / D_p$$

y

$$N = 1/D_p$$

sustituyendo β y N en la ecuación (5)

$$(k_e)_f = \alpha C_p G \beta D_p$$

multiplicando por γ/kg ambos lados de esta última ecuación se tiene:

$$\frac{(k_e)_c}{kg} = \alpha \beta \left[\frac{Gp}{kg} \right] \left[\frac{G Dp}{\gamma} \right]$$

$$\frac{(k_e)_c}{kg} = \alpha \beta Pr Re = \alpha \beta Pe \quad \text{-----(6)}$$

$$Pe = Dp G Cp / kg$$

La conductividad térmica efectiva causada por los mecanismos de transferencia (del 1 al 5 en la fig.(1)) en lechos catalíticos con fluido estático, está definido por ke^0 , un valor que de acuerdo a las suposiciones con respecto a los mecanismos (5) y (6) puede ser considerado constante y simultaneo con el mecanismo de mezclado lateral -- cuando el flujo fluye a través del lecho empacado. Por lo tanto, la conductividad térmica efectiva en el lecho es formulada como:

$$ke = ke^0 + (ke)_c \quad \text{-----(7)}$$

combinando las ecuaciones (6) y (7)

$$\frac{ke}{kg} = \frac{ke^0}{kg} + \alpha \beta (Pr) (Re)$$

A partir de datos experimentales Yagi y Kunii(3) obtuvieron valores para $(\alpha \beta)$ en función de la relación Dp/Dt (fig.2).

La conductividad térmica efectiva ke puede ser evaluada a Reynolds igual a cero, mediante una gráfica de ke vs Re , extrapolando el valor para Reynolds igual a cero.

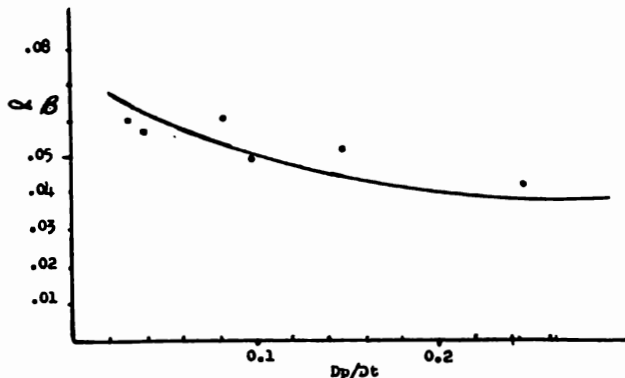


fig. (2)

Contribución estática a la conductividad térmica efectiva:

El modelo propuesto por Kunii y Smith (20) para evaluar el comportamiento estático de la conductividad térmica efectiva es:

Transferencia a través del fluido

- (1) Calor transferido a través del fluido en los espacios vacíos por conducción y radiación entre huecos adyacentes

Transferencia de calor a través del sólido

- (2) A través de los puntos de contacto sólido-sólido
- (3) A través del fluido estacionario (película) cerca de la superficie de contacto

- (4) Por radiación entre superficies de sólidos
- (5) Por conducción a través de la fase sólida

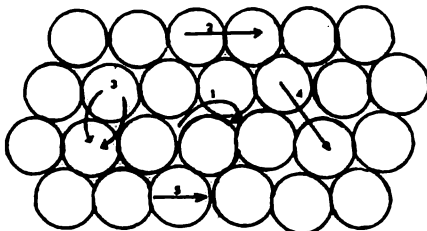


fig. (3)

Los mecanismos de transferencia de calor a través del sólido y a través del fluido (en huecos) se consideran que están en paralelo, es decir, que ocurren simultáneamente. El mecanismo (5) está en serie con el resultado combinado de los mecanismos en paralelo (2), (3) y (4). Este modelo es similar al propuesto por Yagi y Kunii (5). De acuerdo al modelo de la figura (3) la conductividad térmica efectiva está dada por:

$$- k_e \left(\frac{\Delta T}{\Delta L} \right) = \text{flux de calor en los espacios huecos} + \text{flux de calor a través de la fase sólida}$$

por lo tanto:

$$- k_e \frac{\Delta T}{\Delta L} = \underset{\text{mecanismo 1}}{q_{\text{huecos}}} + \underset{\text{mecanismo 2}}{q_{\text{sólidos}}}$$

$$- k_s' \frac{\Delta T}{\Delta L} = - \underset{\text{mecanismo 1}}{kg \beta T} + hrv (-\Delta T) + \underset{\text{mecanismo 2}}{.q_s}$$

Por otro lado, la caída de temperatura en la partícula = (caída de temperatura en la fase sólida) + (caída de temperatura cerca de la superficie de contacto), o sea

$$\Delta T = \Delta T_s + \Delta T_{gs}$$

donde las caídas de temperatura se pueden expresar en terminos del flujo de calor en la fase sólida;

$$\Delta T_s = \frac{q_s}{(kg/lv)} \frac{1}{(1-\beta)}$$

$$\Delta T_{gs} = \frac{q_s}{(kg/lv) + hp + hrs} \frac{1}{(1-\beta)}$$

En estas expresiones lv es el espesor de una porción de material sólido el cual ofrecería la misma resistencia a la transferencia de calor que una partícula de forma esférica; lv es el espesor de una porción de fluido estacionario el cual ofrecería la misma resistencia a la transferencia de calor de filamentos de fluido cerca de los puntos de contacto entre partículas.

Combinando estas cuatro últimas ecuaciones resulta la siguiente expresión para k_s' :

$$k_s' = (kg + hrv \cdot \Delta L) + \frac{(1-\beta) \Delta L}{\frac{1}{(kg/lv + hp + hrs)} + \frac{1}{ks}}$$

la cual puede ser escrita como:

$$\frac{k_s}{kg} = \beta \left[1 + \frac{hrs D_p}{kg} \right] + \frac{\beta (1 - \beta)}{\frac{1}{\theta} + \frac{D_p(hrs + hp)}{kg}} + \gamma \frac{kg}{ks}$$

Esta ecuación general puede ser simplificada en muchos casos. Por ejemplo, excepto a presiones muy bajas el término para la transferencia de calor a través de las superficies de contacto (mecanismo a) puede ser despreciado. Entonces

$$\frac{k_s}{kg} = \beta \left[1 + \frac{hrs D_p}{kg} \right] + \frac{\beta (1 - \beta)}{\frac{1}{\gamma \beta + D_p \cdot hrs/kg} + \gamma \frac{kg}{ks}} \quad (7)$$

donde β y γ son factores geométricos y θ es un espesor adimensional tal que:

$$\beta = \Delta L/D_p$$

$$\gamma = ls/D_p$$

$$\theta = lv/D_p$$

β = porosidad de la cama

hp = Coeficiente de transferencia de calor, representando la rapidez de la transferencia de calor a través de las superficies en contacto entre partículas sólidas del lecho.

hrs = Coeficiente de transferencia de calor por radiación térmica de sólido a sólido.

hrv = Coeficiente de transferencia de calor por radiación de hueso a hueso.

Esta ecuación se simplifica al eliminar los dos mecanismos que menos contribuyen que son, la transferencia a través de los puntos de contac

to y al efecto de radiación (a temperaturas menores de 00°C).

$$\frac{ke^e}{kg} = \beta + \frac{(1 - \beta)}{\beta + \frac{(kg/ks)}{1}}$$

En general:

$$0.9 < \beta < 1.0$$

$$\beta = 2/3$$

$$1s = 20p/3$$

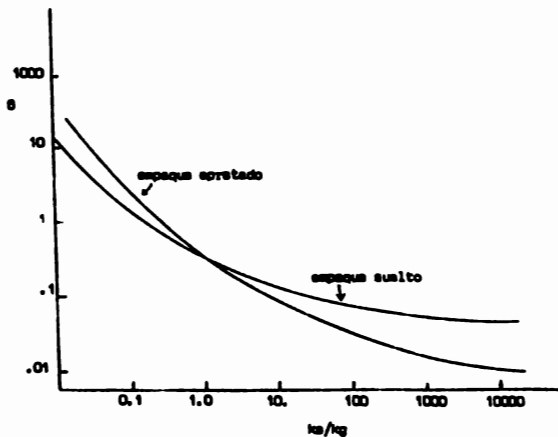
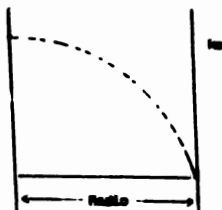


Fig. (4)

2.) COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN LA PARED

Se ha observado experimentalmente que la conductividad térmica efectiva a lo largo del radio de la cama catalítica decrece rápidamente en la vecindad de la pared, como si en este lugar hubiera una resistencia adicional.



Para explicar este fenómeno se ha postulado que la presencia de la pared interrumpe el empaque, produciendo una zona con mayores huecos y menos turbulencia.

En estas condiciones solamente hay dos posibilidades:

- Se toma un valor promedio de la conductividad térmica efectiva k_e en todo el radio
- Introducir un coeficiente de pared adicional para tomar en cuenta el efecto que se produce en la pared.

Este coeficiente de transferencia de calor en la pared se define como:

$$m_w (T_r - T_w) = -k_{er} \left[\frac{\partial T}{\partial r} \right]_R$$

donde k_{er} = Conductividad térmica efectiva en la dirección radial

Este coeficiente h_w cobra una mayor importancia a medida que el tamaño de la partícula es mas grande ($D_p > 0.1Dt$). h_w se expresa normalmente en términos del número de Nusselt y su estimación es mas incierta que la de h_e . Su estimación puede hacerse mediante la extrapolación del perfil de temperaturas a la pared, ó determinando la resistencia en la pared como la diferencia entre la resistencia total y la calculada para el interior del lecho catalítico.

Las correlaciones disponibles en la literatura para estimar h_w , tienen en general un error, en tanto que estan basadas en el concepto de Higbie (21) de renovamiento sistemático de fluido en la pared y solamente dan h_w como una función del Reynolds y del Prandtl del tipo:

$$h_w = F(Re^n, Pr^m)$$

donde n y m son exponentes a los cuales estan elevados el Re y el Pr respectivamente. Esto sería apropiado para el caso de transferencia de masa, pero no para el caso de calor, pues este tipo de correlaciones indican que para fluidos estáticos, esto es, para Reynolds igual a cero el valor de h_w es cero, lo cual implica una resistencia infinita y por lo tanto solamente pueden usarse para números de Reynolds altos, donde la convección domina el proceso.

2.a) Mecanismo de Transferencia de Calor en la Pared

Un mecanismo de transferencia de calor en la pared es el -- presentado por Yagi y Kunii (5), que es similar al de la conductividad térmica efectiva y considera los siguientes mecanismos que contribuyen al valor de h_w .

Transferencia de calor en la fase sólida

- (1) A través de los puntos de contacto
- (2) Radiación sólido-pared

Transferencia de calor en espacios vacíos

- (3) Conducción molecular
- (4) Radiación huesco-huesco

Transferencia de calor en espacios vacíos dependiente del flujo

- (5) Mezclado lateral del fluido
- (6) Transferencia de calor a través de la verdadera película en la pared

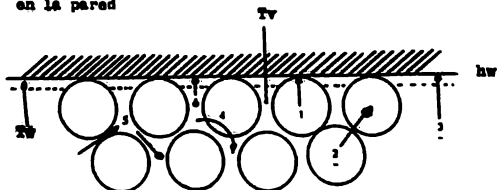


fig (5)

Como se muestra en la fig. (5) los mecanismos del 1 al 6 -- se pueden considerar que ocurren simultáneamente (en paralelo). El -- flujo de calor debido al mecanismo (5) conocido como mezclado lateral del flujo es definido aquí como :

$$Q = G C_p \alpha_w T_f - G C_p \alpha_w T_v = G C_p \alpha_w (T_f - T_v)$$

Por lo tanto el coeficiente de transferencia de calor por mezclado lateral puede ser calculado como:

$$(hw)_f = Q / (T_f - T_v) = \alpha_f D Cp$$

entonces:

$$\frac{(hw)_f Dp}{kg} = \alpha_f (Cp \text{ J/kg}) (Dp \text{ g/j})$$

$$= \alpha_f Pr Re \text{ -----(9)}$$

donde

$$\alpha_f = \frac{\text{Masa val. en la dirección de la transferencia (masa y calor)}}{\text{Masa val. del fluido en la dirección del flujo}}$$

$(hw)_f$ = Coeficiente de transferencia de calor causado por el mezclado lateral

Q = Flux de calor lateral por mezclado

T_v, T_f = Temperatura media del fluido en los huecos y cerca de la pared respectivamente

Los mecanismos del 1 al 4 pueden suponerse independientes del flujo, el término constante hw^0 presumiblemente derivado de estos dos mecanismos será la contribución debida al fluido estático. Por lo tanto, considerando los mecanismos antes mencionados, el coeficiente de transferencia de calor en la pared debido a las contribuciones que dependen del flujo y a las que no dependen, será:

$$hw = hw^0 + (hw)_f \text{ -----(10)}$$

multiplicando (10) por D_p/kg y sustituyendo (9)

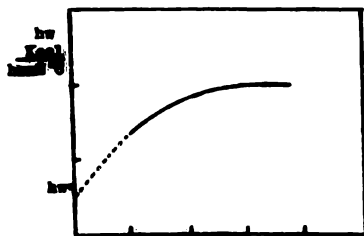
$$\frac{hw D_p}{kg} = \frac{hw^0 D_p}{kg} + \alpha_{Re} Fr \text{ -----(11)}$$

Puesto que no hay datos disponibles que puedan representar la relación correcta entre el coeficiente de transferencia hw y el número de Reynolds, una discusión exacta cuantitativa, aquí es imposible. Sin embargo, puede verse que muy probablemente el valor numérico de hw^0 predomina bajo condiciones de Reynolds bajos y que en regiones turbulentas $(hw)_f$ predomina.

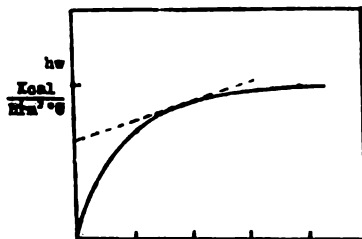
Los valores de α_{Re} comparados con los de α para la conductividad térmica efectiva, indican una relación de α_{Re}/α de casi 1/2, de donde puede deducirse que la magnitud del mezclado lateral cerca de la pared es de alrededor de 1/2 del mezclado lateral en el centro de la cama empacada.

Desafortunadamente no hay alguna correlación para estimar hw^0 , sin embargo, se puede obtener por medio de los siguientes métodos indirectos.

- (1) Extrapolando de la curva experimental hw vs Re el valor de hw a $Re = 0$ (fig.6)
- (2) Se sugiere para cuando no se cuenta con datos experimentales, que se trace una gráfica de hw vs Re evaluando los hw a partir de alguna de las correlaciones que la literatura proporciona en las que únicamente intervienen el Re y el Pr y trazar una pendiente a la curva donde ésta presente un punto de inflexión, una vez hecho esto se extrapola hasta $Re = 0$. (fig. 7)



$Re = D_p G / \eta$
fig. (6)



$Re = D_p G / \eta$
fig (7)

2.b) Correlaciones para hw .

Debido a las dificultades para la estimación del coeficiente de transferencia de calor en la pared hw , la concordancia encontrada entre las correlaciones disponibles es muy pobre. A continuación se muestran algunas de las correlaciones propuestas para hw .

b.1) Leva M.

Entre las correlaciones que han sido propuestas se incluyen las de Max Leva (12), para partículas esféricas

para $D_p/D_t < 0.35$

$$hw = 0.813 \frac{kg}{Dt} e^{-6D_p/D_t} \left[\frac{D_p G}{\mu} \right]^{0.9}$$

y para $0.35 < D_p/D_t < 0.6$

$$hw = 0.125 \frac{kg}{Dt} \left[\frac{D_p G}{\mu} \right]^{0.75}$$

b.2) Leva M., Weintraub M., Gruner M. y S.L. Clark (12)

Estos investigadores establecieron una correlación para el coeficiente de transferencia de calor en la pared para el enfriamiento de gases a través de tubos empacados. Las pruebas fueron hechas en tubos empacados de 2 y 3/4 de pulgada de diámetros. El material de empaque fueron esferas de baja conductividad. La relación de diámetro de partícula D_p a diámetro de tubo D_t varió desde 0.08 hasta 0.27. El rango de flujo se caracterizó por un número de Reynolds modificado de 250 a 3000.

$$hw = 3.50 \frac{kg}{Dt} e^{-4.6Dp/Dt} \left[\frac{Dp \cdot G}{\beta} \right]^{0.7}$$

esta ecuación puede ser simplificada para fines prácticos dando la siguiente correlación.

$$hw = 0.40 \frac{kg}{Dt} \left[\frac{Dp \cdot G}{\beta} \right]^{0.7}$$

Para valores de Dp/Dt entre 0.03 y 0.275, el error introducido al usar esta última correlación es menor al 10 %, con respecto a los resultados experimentales.

b.3) Thomas J. Hanratty.

Con respecto a los lechos empacados usuales, Hanratty (6) presentó la siguiente ecuación para empaques cilíndricos.

$$hw = C_1 \left[\frac{Dp \cdot G}{\beta} \right]^{0.5}$$

$$\text{para } 00.0 < \frac{Dp \cdot G}{\beta} < 500. \quad \text{y} \quad 0.95 \leq C_1 \leq 1.44$$

además graficó los resultados de Plutz (7) y Felix (8) para esferas de vidrio, obteniendo la siguiente relación

$$hw = 0.12 \left[\frac{Dp \cdot G}{\beta} \right]^{0.77}$$

Manratty (6) hizo notar las diferencias que ocurren entre los resultados para las partículas esféricas y las cilíndricas, y sugirió que los valores más grandes para las partículas cilíndricas, resultan de la obstrucción mayor al flujo en la pared.

b.4) Yagi y Wakao.

Yagi y Wakao (9) midieron los coeficientes para lechos con empaques esféricos y correlacionaron sus datos con los de Felix (7) y Flautz y Johnstone (10).

$$\frac{h_w D_p}{kg} = 0.18 \left[\frac{D_p G}{\mu} \right]^{0.8} \quad \text{para } 20 < \frac{D_p G}{\mu} < 2000$$

b.5) Yagi y Kmii (5).

Estos investigadores midieron los perfiles radiales de temperatura en lechos granulares para determinar la conductividad efectiva radial. Mediante la extrapolación de estos perfiles hasta la pared, valores de h_w fueron también determinados. Estos fueron correlacionados mediante una ecuación de la misma forma que la que fué usada para la conductividad efectiva.

$$Nu = \frac{h_w^* D_p}{kg} + \alpha Re Pr$$

Los valores de α fueron encontrados constantes, pero $\frac{h_w^* D_p}{kg}$ varía para diferentes materiales. Los datos de otros investigadores para partículas esféricas y cilíndricas en lechos tubulares pudieron también ser correlacionados por una ecuación de esta forma aunque los valores de las constantes fueron diferentes.

b.6) Beek.

J. Beek (13) ha sugerido que ecuaciones de forma similar a las propuestas por Thoenes y Kramers (14) para transferencia de masa del fluido a la partícula pueden ser usadas para representar satisfactoriamente datos de transferencia de calor en la pared. La ecuación para partículas cilíndricas fué:

$$Nu = 2.58 (Re_p Pr)^{0.33} + 0.094 Re_p^{0.8} Pr^{0.4}$$

Mientras que para esferas:

$$Nu = 0.203 (Re_p Pr)^{0.33} + 0.22 Re_p^{0.8} Pr^{0.4}$$

b.7) Jakob.

La relación obtenida por Jakob (15) para el coeficiente del calor es la siguiente:

$$\frac{hw}{kg} Dt = f Dt^{0.17} \left[\frac{Dp}{f} \right]^{0.83} \frac{Cp}{kg}$$

donde f es una función de Dp y Dt . (Fig. 8)

b.8) Geberly y Marshall.

La correlación reportada por Geberly y Marshall (16) es la siguiente:

$$hw = 2.95 G^{0.33}$$

b.9) Plautz y Johnstone.

Los estudios hechos por Plutz y Johnstone (10) condujeron a la siguiente correlación para h_w :

$$h_w = 0.09 G^{0.75}$$

b.10) Calderbank y Pogorski.

En base a datos experimentales para el sistema aire-aire y aire-celita, Calderbank y Pogorski (17) presentaron la siguiente correlación que puede ser usada para soportes catalíticos de conductividad térmica baja y para gases diferentes al aire.

$$\frac{h_w D_p}{k_g} = 3.0 \left[\frac{D_p G}{\mu} \right]^{0.365}$$

De las correlaciones mostradas puede verse que ninguna, (excepto la b.5) puede ser usada para condiciones de flujo tales que el número de Reynolds sea pequeño, ya que de acuerdo a lo que caen -- una de éstas establece, h_w tiende a cero si el Reynolds tiende a cero, lo cual no es cierto, ya que aún cuando el fluido esté estático, hay transferencia de calor.

Por otro lado, puede verse que la dependencia de h_w con el Re varía de correlación a correlación. En general:

$$h_w \propto Re^n$$

donde $n = 0.33, 0.47, 0.5, 0.77, 1.0$, etc.

Por lo tanto, es peligroso escoger una correlación para lo que sistema reactor-empaque fluido se extrae. Tanto la actividad efectiva k_a , como k_{eff} han sido estimados usando sistemas diferentes. En la figura (8) se muestra una gráfica con algunas correlaciones antes mencionadas.

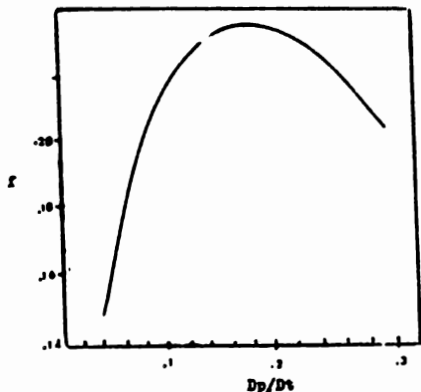


fig. (8)

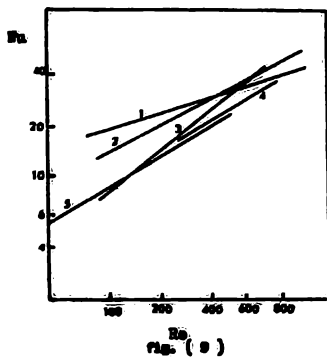


Fig. (9)

donde:

$$Re = \frac{D_p \cdot G}{\mu}$$

$$Fa = \frac{K \cdot D_p}{K_g}$$

- (1) Coberty y Marshall
- (2) Henratty (cilindros)
- (3) Henratty (esferas)
- (4) Yagi y Wakao
- (5) Yagi y Kuni

3.) COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE CALOR.

La situación considerada aquí, es el calentamiento o enfriamiento de un fluido fluyendo a través de un lecho empacado y el intercambio de calor con la pared. Este fenómeno puede ser descrito por un modelo continuo unidimensional, el cual considera que la temperatura del fluido es uniforme en una sección perpendicular al flujo. El cambio de calor con la pared se caracteriza por el llamado coeficiente global de transferencia de calor U .

La condición de uniformidad radial no siempre es satisfactoria, especialmente cuando los efectos de calor son importantes. En tales casos es importante tomar en cuenta el gradiente radial. Si la temperatura media predicha por un modelo unidimensional difiere significativamente de la media radial verdadera, entonces un modelo bidimensional debe ser usado. En estos modelos, la transferencia de calor en la dirección radial es considerada simultáneamente con la transferencia por convección en la dirección del flujo.

Varios mecanismos están involucrados en la transferencia de calor en la dirección radial. Para limitar la complejidad de los cálculos de diseño, el empaque y el fluido son tomados como un continuo y todo el calor transferido en la dirección radial se considera que ocurre por una "conducción" efectiva. Evidentemente, la conductividad caracterizando este modelo de transferencia de calor no es una conductividad en el sentido verdadero: Contiene contribuciones de conducción en ambas fases, sólida y fluida, convección en la dirección radial y radiación también en ambas fases.

Puesto que la conductividad efectiva es una función del radio y se ha encontrado que cerca de la pared disminuye fuertemente, -

al formular el modelo puede hacerse una de las siguientes consideraciones: tomar un valor promedio de la conductividad efectiva en todo el diámetro (modelo con un parámetro), o bien, además de la conductividad efectiva en el lecho introducir un coeficiente adicional que tome en cuenta el efecto en la pared. Desde este punto de vista, la transferencia de calor en la dirección radial es caracterizada por la conductividad térmica efectiva k_e y el coeficiente de transferencia de calor en la pared h_w (modelo con dos parámetros). De los modelos bidimensionales el de dos parámetros es más usado que el de uno.

En general, el coeficiente global de transferencia es una función tanto de k_e como de h_w , ésta es:

$$U = f(k_e, h_w)$$

Si se usa un modelo unidimensional para describir el comportamiento de un reactor tubular no isotérmico no adiabático, la ecuación de balance de calor será:

$$\begin{array}{lcl} \text{Calor tomado por} & = & \text{Calor generado por} - \text{Calor transferido} \\ \text{el fluido} & & \text{reacción química} \quad \text{a los alrededores} \end{array}$$

$$\frac{dT}{dx} = \frac{(-\Delta H)}{C_p} r(P, T) - \frac{U}{C_p} (T - T_o)$$

donde U es construida a partir de k_e y h_w .

3.a) Correlaciones para U

a.1) Proment y Wasch.

La transferencia de calor entre un fluido fluyendo a través de un lecho empacado y la pared, fué interpretada por Proment y -- Wasch (19) de acuerdo a un modelo unidimensional por la siguiente -- ecuación.

$$U = U^{\circ} + \frac{0.00059}{D_p} Re \quad \text{para } 30 < Re < 1000$$

o en forma adimensional

$$\frac{U D_p}{kg} = \frac{U^{\circ} D_p}{kg} + \frac{0.00059}{kg} Re$$

U° es función del diámetro del tubo y de la geometría y propiedades -- del catalizador.

a.2) Calderbank y Pogroski.

Calderbank y Pogroski (17) establecieron que si las características de transferencia de calor en lechos empacados son expresadas en términos de los coeficientes de transferencia de calor, -- entonces el coeficiente global de transferencia de calor U está dado por:

$$U = \frac{q}{A_t \Delta T_{ml}} = \frac{G C_p D_t}{4 L} \ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}$$

donde:

$$\frac{\Delta T_o}{\Delta T_i} = e^{-St} \frac{hL}{Uc} \quad \text{-----(12)}$$

donde los subíndices i y o se refieren a la entrada y a la salida respectivamente, y St es el número de Stanton

$$St = \frac{U}{Cp \cdot G}$$

Para partículas de baja conductividad térmica o cuando generalmente $\Delta T_o/\Delta T_i \ll 0.28$ tenemos que:

$$\frac{\Delta T_o}{\Delta T_i} = 0.629 e^{-23.14 \frac{LRe}{Cp \cdot G \cdot Dt^2}} \quad \text{-----(13)}$$

igualando las ecuaciones (12) y (13)

$$U = 5.79 \frac{kb}{Dt} + 0.092 \frac{Cp \cdot G \cdot Dt}{L} \quad \text{-----(14)}$$

y

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{hw} + \frac{1}{hb}$$

donde hb es el coeficiente de transferencia de calor en el lecho y puede ser calculado a partir de la siguiente ecuación.

$$hb = 5.79 \frac{kb}{Dt} + 0.092 \frac{Cp \cdot G \cdot Dt}{L}$$

donde kb = conductividad del lecho.

Proment (19) ha resuelto el caso (mas común) en que los --
perfiles radiales de temperatura en el reactor son parabólicos y lle-
ga a la expresión:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{hw} + \frac{1}{hke}$$

donde hw y ke se estiman de acuerdo a las correlaciones dadas anterior-
mente.

DESCRIPCION DEL METODO

1.) SUPOSICIONES

Las suposiciones más importantes que en este método se establecen son la siguientes:

a.) La ecuación de velocidad de reacción será de la forma;

$$- \frac{dC}{dt} = K_0 a_f(C) e^{F(T)}$$

Esto implica que el equilibrio se desplaza hacia la derecha hasta que la concentración de equilibrio $C_e = 0$, es decir, hasta conversión completa. Esto a menudo ocurre pero si no, entonces la -- función de la concentración $f(C)$ cambiará a una forma más compleja -- del tipo $f(C - C_e)$. La función de la temperatura $F(T)$ generalmente será de la forma $e^{-A/T}$.

El método presentado no está relacionado intrínsecamente con la forma de la ecuación de velocidad de reacción, pero la -- complejidad de los cálculos está fuertemente controlada por esta ecuación.

En muchos casos, cuando un reactivo está en exceso con respecto al otro, entonces solamente la concentración del reactivo deficiente necesita aparecer en la ecuación de velocidad.

b.) La temperatura es uniforme radialmente y cualquier variación está en o cerca de la pared del tubo. El coeficiente global de transferencia de calor "U" representa el coeficiente efectivo de trans--

ferencia de calor y no es por lo tanto un término simple.

c.) El reactor puede ser tratado como homogéneo a cualquier límite dimensional requerido. Por varias razones ésto puede no ser cierto, cuando las partículas catalíticas son muy grandes.

2.) DERIVACION DEL BALANCE DE CALOR

Si tomamos un elemento de volumen v de un reactor dado, la sección transversal en este elemento de volumen referida a los espacios vacíos o huecos será:

$$\frac{\pi D^2}{4} \phi = \text{Sección transversal referida a los vacíos o huecos}$$

y la velocidad de reacción en ese elemento de volumen

$$- dC/dt = K.a.f(C).F(T) \quad \text{-----(1)}$$

Por otro lado, el tiempo tomado por los vapores para atravesar el elemento Δz es $\Delta z/V$, siendo V la velocidad lineal. Teniendo en cuenta lo anterior, el calor debido a la reacción en el elemento Δv puede ser expresado como:

$$- \Delta H \frac{dC}{dt} \Delta v = \text{Calor debido a la reacción}$$

o aún:

$$- \Delta H \frac{dC}{dt} \frac{\Delta z}{V} \frac{\pi D^2}{4} \phi \Delta z = \text{Calor debido a la reacción}$$

El calor tomado por los vapores y el transferido a lo largo de la superficie $HD \Delta z$ son:

$$\rho \frac{HD^2}{4} \Delta z \frac{dT}{dz} \Delta z = \text{Calor tomado por los vapores}$$

$$U \frac{\Delta z}{V} HD \Delta z (T - T_0) = \text{Calor transferido a lo largo de la superficie}$$

La ecuación de balance de calor será entonces:

$$-\Delta H \frac{dC}{dt} \frac{\Delta z}{V} \frac{HD^2}{4} \rho \Delta z = \rho \frac{HD^2}{4} \frac{dT}{dz} \Delta z + U \frac{\Delta z}{V} HD \Delta z (T - T_0)$$

multiplicando ambos miembros de la igualdad por $4/(HD^2 \Delta z^2)$

$$-\Delta H \frac{dC}{dt} \rho = \frac{4U (T - T_0)}{V D} + \rho \frac{dT}{dz}$$

o reorganizando

$$-\frac{\Delta H}{kV} \frac{dU}{dt} = \frac{U(T - T_0)}{V\theta} - \frac{S}{4} \frac{dT}{dz} \quad \text{----- (2)}$$

despejando dU/dt de la ecuación (2)

$$- \frac{dU}{dt} = \frac{kU}{\Delta H\theta} (T - T_0) - \frac{S}{H} \frac{dT}{dz} \quad \text{----- (3)}$$

Esta es la forma mas simple de la ecuación de balance de calor y tomándola junto con la ecuación (1) normalmente incorporan suficiente información para la solución completa.

Otros efectos pueden ser permitidos, como a saber, conducción a lo largo del catalizador lo cual adicionaría a la ecuación de balance de calor el término:

$$\frac{k'}{\Delta H\theta} \frac{d^2 T}{dz^2}$$

y la radiación del cuerpo del catalizador hacia la pared del tubo puede ser agrupada en el término:

$$\frac{k_r'}{\Delta H\theta} \left[(T/100)^4 - (T_0/100)^4 \right]$$

El balance total de calor será el siguiente:

$$-\frac{dC}{dt} = \frac{kU}{\Delta H \delta} (T - T_0) + \frac{k_r}{\Delta H \delta} \left[(T/100)^4 - (T_0/100)^4 \right]$$

$$- \frac{S V}{\Delta H} \frac{dT}{dz} = \frac{k_r}{\Delta H \delta} \frac{dT^2}{dz^2} \quad \text{----- (4)}$$

El término de conductividad es muy pequeño, a menos que -- haya elevaciones bastante bruscas en la temperatura, y será visto -- mas tarde como el incluirlo aumenta considerablemente la dificultad -- de los cálculos. Sin embargo, en la práctica estas elevaciones brus-- cas en la temperatura usualmente son evitadas. El término de radiación es considerado principalmente, cuando hay que cubrir casos en los cua les existen diferencias de temperatura $(T - T_0)$ bastante grandes, e-- bién, en reactores tubulares estrechos con partículas de catalizador - relativamente grandes. En muchos casos es conveniente despreciar la radiación como tal o incluirla en el término "U".

Una revisión preliminar en la validez de las ecuaciones -- puede llevarse a cabo. Combinando las ecuaciones (1) y (3) se tiene:

$$K + f(C) \cdot r(T) = \frac{kU}{\Delta H \delta} (T - T_0) + \frac{V S}{\Delta H} \frac{dT}{dz} \quad \text{---- (5)}$$

Cuando hay un máximo o un mínimo en la temperatura, dT/dz es cero y la ecuación (5) se transforma en:

$$r(T_m) = \frac{kU}{\Delta H \delta} (T - T_0) \frac{1}{K + f(C_m)} \quad \text{----- (6)}$$

Despejando dT/ds en la ecuación (5)

$$\frac{dT}{ds} = K.a.f(C).P(T).\frac{H}{VS} - \frac{hU}{hD\beta}(T-T_0)\frac{H}{VS}$$

Diferenciando esta ecuación:

$$\frac{d^2T}{ds^2} = \frac{KaH}{VS} \left[f(C) \frac{dP(T)}{dT} \frac{dT}{ds} + P(T) \frac{df(C)}{dC} \frac{dC}{ds} \right] - \frac{hU}{hD\beta} \frac{d(T-T_0)}{dT} \frac{dT}{ds}$$

y haciendo $dT/ds = 0$

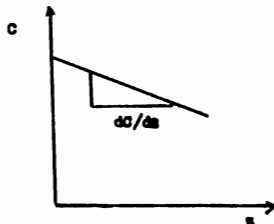
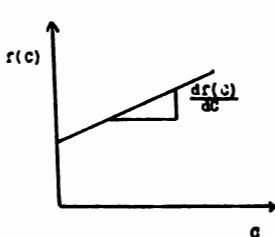
$$\frac{d^2T}{ds^2} = \frac{KaH}{VS} P(T) \frac{df(C)}{dC} \frac{dC}{ds} \text{ ----- (7)}$$

Puesto que en general $f(C)$ aumenta con C

$$df(C)/dC > 0$$

y por otro lado C disminuye con s

$$dC/ds < 0$$



Aplicando este criterio a la ecuación (7) se tiene que:

Para $H > 0$ (reacción endotérmica)	$\frac{d^2T}{ds^2} < 0$	mínimo de T (Punto frío)
--	-------------------------	-----------------------------

Para $H < 0$ (reacción exotérmica)	$\frac{d^2T}{ds^2} > 0$	máximo de T (Punto caliente)
---------------------------------------	-------------------------	---------------------------------

De acuerdo con lo anterior, la ecuación indica un máximo de temperatura (punto caliente) para una reacción exotérmica ($\Delta H < 0$) y un mínimo (punto frío) para reacciones endotérmicas ($\Delta H > 0$).

4.) CORRECCIONES POR EFECTOS DE TEMPERATURA EN LA CONCENTRACION Y LA VELOCIDAD LINEAL.

La forma presente de las ecuaciones 1 y 3 dan la velocidad de reacción en unidades de concentración por tiempo (mol/volumen tiempo). La cantidad observable experimentalmente es un cambio de concentración a una temperatura dada; pero un cambio de concentración

$$\left(\frac{dC}{dt} \right) dt$$

donde dC/dt , encontrada a partir de las ecuaciones 1 y 3 no tiene significado práctico, debido a que la serie de cambios dC con --

fren a diferentes temperaturas.

$$\left[- \frac{dG}{dT} \right]_T = \frac{hU}{HD\theta} (T-T_0) + \frac{VS}{H} \frac{dT}{dz} \quad \text{----- (8)}$$

para denotar que éste es específico a una temperatura T, el cambio en G sobre un intervalo pequeño dz es:

$$- \left[\frac{dG}{dT} \right] \frac{dz}{V} = - \left[\frac{dG}{dT} \right] \frac{dT}{dz} dz$$

o corrigiendo a T₀

$$\left[- \frac{dG}{dT} \right]_T \frac{dz}{V} \frac{T}{T_0} = \left[- \frac{dG}{dT} \right]_{T_0} \frac{dz}{V_0}$$

Si V₀ es la velocidad lineal a T₀ entonces V = V₀T/T₀ y el cambio de concentración a T₀ es

$$\left[- \frac{dG}{dT} \right]_T \frac{dz}{V_0} = \left[-\Delta G \right]_{T_0} \quad \text{----- (9)}$$

El producto VS es sustancialmente independiente de la temperatura y podemos escribirlo como V₀S₀. Entonces

$$\begin{aligned} -\Delta G_{T_0} &= - \frac{dG}{dT} \frac{dz}{V_0} \\ &= \left[\frac{hU}{HD\theta} (T-T_0) + \frac{V_0 S_0}{H} \frac{dT}{dz} \right] \frac{dz}{V_0} \quad \text{-- (9')} \end{aligned}$$

$$\left[-\Delta C \right]_{T_0} = K.A.f(C).F(T), \frac{x}{V_0} \text{ ----- (10)}$$

En calculos por etapas el método por lo tanto será calcular la concentración inicial y deducir a partir de ésta los valores $(C)_{T_0}$ -- dados por la ecuación (10), entendiéndose que C es el valor de la -concentración a la temperatura T.

5.) IMPLICACIONES GENERALES DERIVADAS DE LA ECUACION

Cierta información general se puede deducir inmediatamente de la forma de las ecuaciones 1 y 3. Por ejemplo de la ecuación 3: si la distribución de temperaturas esta fijada (T conocida como -- una función de x), dC/dt será en cualquier lugar menor a medida que D aumenta y la convección total será mas baja. Por lo tanto, para -- mantener la convección, a medida que D aumenta la temperatura debe- ser mas alta, aunque una alternativa es incrementar la velocidad li- neal a tiempo de contacto constante, esto es, incrementar la longi- tud del tubo y mantener el mismo espacio velocidad (el efecto ver- dadero es incrementar U).

En las ecuaciones 1 y 3, V aparece solamente como un coe- ficiente de dT/dx , esto sugiere que las coordenadas pueden cambiar- se a dT/dt , esto es , en lugar de la distancia establecer como coor- denada al tiempo y como una primera aproximación, las temperaturas- son independientes de la velocidad lineal. Esto no se cumple para - cambios grandes de V, tal que "U" pueda ser afectada, y puede no --

aplicarse para reacciones controladas por difusión, donde V puede - afectar a $f(C)$. De acuerdo a la ecuación (6) se puede apreciar que - a una temperatura máxima fija, una mayor proporción de la reacción - total ocurrirá antes del punto caliente, a medida que el calor de - reacción, actividad del catalizador y diámetro del tubo aumentan y - conforme " U " disminuye.

6.) DETERMINACION DE U A PARTIR DE UNA CURVA DADA DE TEMPERATURAS

Si la curva distancia-temperatura (s vs T) puede ser graficada para un reactor trabajando bajo condiciones definidas, entonces el valor efectivo de " U " puede ser determinado. Integrando la - ecuación (3').

$$\frac{1}{U} \left[-\Delta G \right]_{T_0} = \frac{H}{V \rho H \Delta T} \int_0^s (T - T_0) ds + \frac{S_0}{H} \int_0^s \frac{dT}{ds} ds \quad (11)$$

El primer término es una cantidad experimental, el segundo puede -- ser obtenido del área bajo la curva dada (s vs $(T - T_0)$) y la tercera - cantidad, calculando $S_0/H \cdot (T - T_0)$, donde T es la temperatura de salida (comumente T_0).

Refiriéndose a la ecuación (4), el término de radiación - puede ser encontrado gráficamente mediante la suposición de un valor de e' , por otro lado, el término conductividad vale

aplicarse para reacciones controladas por difusión, donde V puede - afectar a $f(C)$. De acuerdo a la ecuación (6) se puede apreciar que - a una temperatura máxima fija, una mayor proporción de la reacción - total ocurrirá antes del punto caliente, a medida que el calor de - reacción, actividad del catalizador y diámetro del tubo aumentan y - conforme " U " disminuye.

6.) DETERMINACION DE U A PARTIR DE UNA CURVA DADA DE TEMPERATURAS

Si la curva distancia-temperatura (s vs T) puede ser gra-
ficada para un reactor trabajando bajo condiciones definidas, enton-
ces el valor efectivo de " U " puede ser determinado. Integrando la -
ecuación (3').

$$e \left[-\Delta G \right]_{T_0} = \frac{hU}{VoHDe} \int_0^s (T - T_0) ds + \frac{So}{H} \int_0^s \frac{dT}{ds} ds \quad (11)$$

El primer término es una cantidad experimental, el segundo puede --
ser obtenido del área bajo la curva dada (s vs $(T - T_0)$) y la tercera-
cantidad, calculando $So/H \cdot (T - T_0)$, donde T es la temperatura de sa-
lida (comumente T_0).

Refiriendose a la ecuación (4), el término de radiación-
puede ser encontrado gráficamente mediante la suposición de un va-
lor de e' , por otro lado, el término conductividad vale

$$-\int_0^x \frac{k'}{H^2 V_0} \frac{d^2 x}{dx^2} dx = \frac{k'}{H^2 V_0} \left[\left[\frac{dx}{dt} \right] - \left[\frac{dx}{dt} \right]_0 \right]$$

el cual puede ser encontrado de la curva dada con un valor supuesto de k' .

SECURENCIA DE CALCULO

Como ya ha sido observado, una solución completa de las ecuaciones parece ser demasiado difícil para propósitos prácticos, sin embargo, la idea del cálculo numérico ha sido ya introducida y puede ser aplicado en la solución de estas ecuaciones para dar el grado de exactitud deseado.

Lo siguiente es un bosquejo del método, el cual está por supuesto, sujeto en sus aplicaciones a varias suposiciones.

Primero se tratará de evaluar la ecuación de velocidad de reacción con la ecuación (1). Esto preferiblemente será hecho por medio de la experimentación directa adecuada, es decir, mediante la determinación de los efectos de concentración y temperatura en la velocidad de reacción dentro de un corto lecho catalítico trabajando a velocidades lineales altas y temperatura sustancialmente uniforme. Para reacciones en fase líquida, resultados adecuados podrían probablemente ser obtenidos de pequeños tubos sellados. Esta aproximación

es casi esencial. Si hay mas de una reacción importante y tiene la ventaja de mostrar cualquier variación en la cinética como por ejemplo, concentración o vida del catalizador. Si no es conveniente usar el metodo directo, entonces la ecuación de velocidad para el caso de unicamente una reacción exo o endotérmica principal, puede ser derivada indirectamente mediante el analisis de una curva experimental de T vs z . Esto es inherentemente menos cierto, pero es sin embargo capaz de dar resultados útiles.

Datos Requeridos.

Valores de $\Delta H, S_0, V_0, S, D, T_0, C_0$ y una correcta curva experimental de T vs z para un reactor dado. La conversión será completa o la reacción podra ser suspendida en algun punto conocido.

a.) A partir de la curva experimental tabular valores de T para pequeños intervalos de z y así obtener una curva dT/dz vs z , también estimar a partir de dicha curva el valor de la integral

$$\int_0^z (T - T_0) dz$$

b.) De la ecuación (11) determinar el valor de "U" (despejandolo de esta ecuación), teniendo en cuenta la radiación y conducción si se desea(ver nota ii)

c.) Usando este valor de "U" y la curva de dT/dz vs z aplicar la ecuación (8)

$$-\left[\frac{dC}{dz}\right]_0 = \frac{hU}{\Delta H S_0} (T - T_0) + \frac{V_0 S_0}{N} \frac{dT}{dz}$$

permitirá una curva de velocidad de reacción dC/dt vs z para ser gra

ficada. Otra vez el término de conducción y radiación puede ser introducido si se desea.

d.) Mediante estimaciones de áreas bajo la curva de dC/dt a una T -- dada la correspondiente curva de $[O]_T$ puede ser graficada a partir de

$$[AO]_T = \int_0^t \left[\frac{dC}{dT} \right]_T \frac{ds}{V_0}$$

En particular estimar la convección total y checar con el valor experimental.

e.) Suponga por ejemplo que una forma correcta para la ecuación (1) es

$$- \left[\frac{dC}{dT} \right]_T = K_a \cdot C^b \cdot e^{-A/T} \quad \text{-----} (12)$$

donde b es una constante. Hay dos métodos principales para la evaluación de éste y probablemente métodos similares pueden ser recurridos para formas alternativas.

1º Método.

Para cualesquiera cuatro puntos las velocidades de reacción R están en las razones:

$$\begin{aligned} \left[\frac{R_1}{R_2} \right] &= \left[\frac{C_1}{C_2} \right]^b e^{-(A/T_1) - (A/T_2)} \\ \left[\frac{R_3}{R_4} \right] &= \left[\frac{C_3}{C_4} \right]^b e^{-(A/T_3) - (A/T_4)} \quad \text{-----} (13) \end{aligned}$$

y si los puntos son elegidos de tal manera que:

$$\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_3} - \frac{1}{T_4}$$

$$\frac{R_1 R_4}{R_2 R_3} = \left[\frac{C_1 C_4}{C_2 C_3} \right]^b \quad \text{----- (14)}$$

$$\frac{R_4}{R_2} = \left[\frac{C_1}{C_2} \right]^b \frac{e^{-A/T_2}}{e^{-A/T_1}} = \left[\frac{C_1}{C_2} \right]^b e^{-A/T_1 + A/T_2} = \left[\frac{C_1}{C_2} \right]^b e^{A(1/T_2 - 1/T_1)}$$

$$\frac{R_4}{R_2} = \frac{C_1^b}{C_2^b} \frac{e^{-A/T_2}}{e^{-A/T_1}} = \left[\frac{C_1}{C_2} \right]^b e^{-A(1/T_2 - 1/T_1)}$$

elegimos cuatro puntos tales y usamos las curvas previas de R y C -- estimamos b de la ecuación (14). Entonces A puede ser encontrado de la ecuación (13) y Ka de la ecuación (12).

Este método no sacará a la luz desviaciones de la ecuación (12) pero si hay tales desviaciones puede ser una manera conveniente de obtener una ecuación simple y bastante representativa.

2º Método.

Elegir de la curva experimental de T vs g pares de puntos s_1, s_2 correspondiendo a temperaturas iguales. De los otros datos disponibles graficar $\log(R_1/R_2)$ vs $\log(C_1/C_2)$. Si la forma de la ecuación (12) es correcta ésta dará una línea recta de pendiente b, tanto de logaritmos en la ecuación (12):

$$-\log \left[\frac{dC}{dT} \right]_T - \log C = \frac{-A}{T} \log e + \log K_A$$

Una gráfica de la función de la izquierda vs $1/T$ daría una línea recta de pendiente $-A \log e$ y ordenada al origen $\log K_A$. Si por otro lado una línea recta no es obtenida, ya sea que la forma de la ecuación -- (12) debe ser cambiada ó el primer método usado para dar un resultado mas o menos representativo. (ver nota iii)

f.) Como un chequeo parcial de los resultados aplicar la ecuación -- (6) .

$$F(T_m) = \frac{hU}{\Delta RDP} (T - T_o) \frac{1}{K_A \cdot f(C_m)}$$

para la temperatura experimental máxima o mínima.

g.) Ahora será posible usar los datos para determinar el comportamiento hipotético de un reactor.

Datos requeridos:

: Valores de $A, \beta, D, V_o, S_o, T_o, C_o$ y la forma completa de la ecuación de velocidad de reacción obtenida por cualesquiera de los -- métodos anteriores.

i.) Las corridas satisfactorias de una reacción sensitivamente térmica depende del trabajo, de tal manera, que el punto caliente o la -- temperatura de la pared no exceda de un cierto valor permitido y de tal manera que la conversión alcance el valor prescrito. Si esta temperatura máxima permitida es conocida es posible determinar (algunas veces por prueba y error) que otras condiciones son requeridas, es -- decir, valores de D, C_o , y longitud del tubo.

ii.) El valor inicial de dc/dt a una T dada puede ser calculado en el extremo de alimentación donde $C = C_0, T = T_0$ a partir de la forma de la ecuación (1).Entonces la elevación de la temperatura de la velocidad inicial puede ser encontrada a partir de la ecuación (10)- (donde inicialmente $T = T_0$).

$$\left[\frac{dT}{d\Delta} \right] = - \left[\frac{dC}{dT} \right]_T \frac{V_0 S_0}{\Delta H}$$

Usando este valor, ΔT puede ser calculado para pequeños intervalos $\Delta \Delta$. También $[dC]_{T_0}$ puede ser encontrado a partir de

$$[dC]_{T_0} = \left[\frac{dC}{dT} \right]_T \frac{\Delta \Delta}{V_0}$$

y esto da el nuevo valor de $[C]_{T_0}$ en el extremo del intervalo. Ver notas iv y i.

iii.) Convertir el valor encontrado de $[C]_{T_0}$ a la nueva temperatura $T_0 + \Delta T$, y determinar valores nuevos de $[dC/dt]_{T_0}$ y $dT/d\Delta$. Procesando el siguiente intervalo de la misma manera que antes.

iv.) Continuar de esta manera hasta que la conversión sea completa o a conversión para una longitud fija de reactor. La longitud del intervalo $\Delta \Delta$ dependerá de la tendencia de los resultados, es decir, si la temperatura se eleva bruscamente los intervalos serán reducidos. Normalmente en diseño será agregada una longitud extra al reactor.

h.) Notas. Son introducidas como una guía adicional de trabajo

1.) Los métodos de calculo (h) - (g) cubren únicamente una primera aproximación. Lo siguiente será relacionar cada una de las

dt/ds usando como T el primer valor medio encontrado. Una alternativa es reducir los intervalos si posterior exactitud es deseada y, esto es más directo.

ii.) Si se toman en cuenta la radiación y conducción entonces la ecuación (4) debe ser usada. Para conducción $\frac{2\pi}{4\pi^2}$ debe ser encontrada por una serie de cálculos por etapas. Actualmente poca o ninguna información sobre k' está disponible y es casi ciertamente razonable despreciar el efecto.

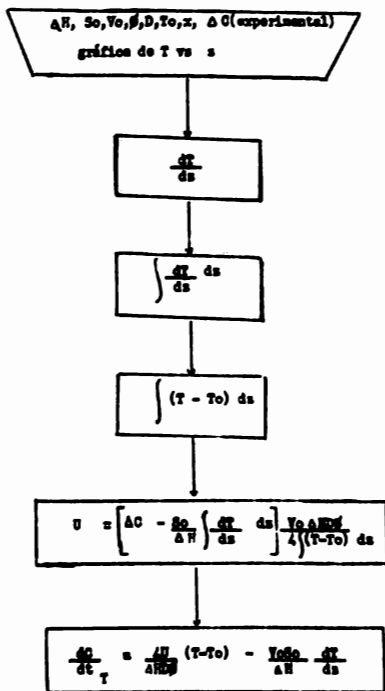
iii.) Si la ecuación de velocidad de reacción determinada no resulta satisfactoria (mediante la prueba de cálculos retroactivos-mostrada), entonces arbitrariamente la manipulación de constantes seguidas de ajustes es un remedio obvio. Por ejemplo con la forma particular de la ecuación (12).

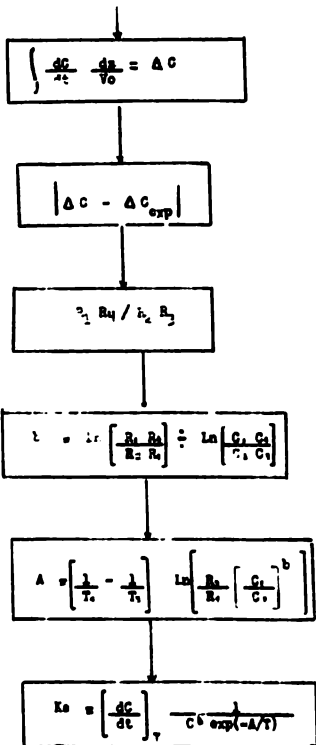
a.) Si T_m por cálculos es corta, pero η_m es demasiado grande, entonces incrementar b o viceversa.

b.) Si η_m es corta, pero T_m alta, entonces reducir A o viceversa.

iv.) Si el aire entra a una temperatura diferente de T_0 la base de cálculo es invariable, aunque debe tenerse en cuenta para la transferencia de calor.

DIAGRAMA DE FLUJO.





8.) VARIACION RADIAL DE TEMPERATURA.

Si las ecuaciones básicas estan dispuestas de manera tal - que la variación radial de la temperatura sea permitida, entonces, no un camente se hace imposible la solución directa sino que además el cálculo por etapas llega ha ser imposible. De la variacion radial, la- cual por razones prácticas usualmente será pequeña, existe el hecho - posterior de que la velocidad lineal no es uniforme, siendo mas alta (para valores pequeños) en las paredes del tubo. Esta puede ser la ra- sión por la cual Holman (22) refirió la transferencia de calor a las- paredes del tubo empacado: esto es, sugiere plenamente que el proceso - restrictivo ocurre cerca de la pared del tubo y mas o menos indepen- dientemente del cuerpo del empaque.

Suponiendo que hay variacion radial es de interes ver como muestra suposición impuesta de su ausencia afecta los resultados.

Sea T_r la temperatura a una distancia r desde el extremo - de alimentación y r a partir del eje del tubo. La expresión de balan- ce de calor llega a ser.

$$Q(T_r, r, z, ctas) = K a H . f(c) . \exp(-A/Tr) \text{-----(15)}$$

donde Q es alguna función compleja conteniendo diferenciales parcia- les. Suponga que la solución de ésta y la ecuación de velocidad

$$- \frac{dQ}{dt} = K a . f(c) . \exp(-A/Tr) \text{-----(16)}$$

no puede hacerse directamente para dar valores ciertos de Tr . Es toda vía posible por libre elección, decidir cómo los actuales resultados supuestamente inexactos estarán relacionados a los resultados verdaderos. Por ejemplo la relación dependerá de la manera en la cual nosotros seleccionemos Tr radialmente dependiente de x' para aplicarse a valores de U o contrariamente cómo habiendo fijado T como una función de Tr , nosotros elegimos " U ".

Una correlación ova es aquella en donde en cualquier punto x hubiera la misma pérdida de calor que la calculada por cualquiera de los dos métodos; esto es.

$$\int_0^{W_L} \frac{q(Tr, x, r, \text{constantes}) r dr}{\int_0^{W_L} r dr} = \frac{hU}{D\theta} (T - T_e) + VoSo \frac{dT}{dx} \quad (17)$$

(velocidad media de pérdidas de calor por cualquiera de los dos métodos)

Otro es, que en cualquier sección transversal hubiera la misma conversión. Esto da (suponiendo que no hay variación radial de concentración)

$$\frac{\int_0^{W_L} e^{-A/Tr} r dr}{\int_0^{W_L} r dr} = e^{-A/T} \quad \text{-----} (18)$$

esto es, que $e^{-A/T}$ sea el valor medio de $e^{-A/Tr}$. Las dos correlaciones no son únicamente consistentes, sino idénticas, como se -

sigue de las ecuaciones 1,3 y 15. Se desprende que la elección de la correlación no involucra en efecto una relación entre k' y U , y se sigue que si nuestro método actual de cálculo se encuentra que da -- valores correctos de conversión, entonces la ecuación (28) muestra como T está relacionada con la actual T_r y la ecuación (17) relaciona k' y U en todos los puntos. Por lo tanto la exactitud en la conversión estimada depende de la adecuada elección de U (la cual idealmente debería de variar a lo largo del tubo) y dada tal exactitud el significado de la T calculada usada en la ecuación (18).

En las circunstancias actuales U no es por lo tanto una -- simple constante (ecuaciones 17 y 18, sugieren que siempre depende de la constante de reacción) y si hay variación radial de T el valor efectivo de " U " no necesariamente será idéntico con métodos térmicos.

En la práctica sin embargo muy probablemente ese valor térmico de " U " dará suficiente exactitud, especialmente con tubos -- largos relativamente angostos, donde la variación radial es despreciable. Sin embargo, hay evidentemente buenas razones para dar preferencia a valores de " U " que hayan sido determinados tan cercanamente como sea posible bajo las condiciones para las cuales el pronóstico es requerido.

CALCULOS Y RESULTADOS

OBTENIDOS

DATOS.

Valores experimentales obtenidos en el reactor de 1" de diámetro.

Corrida	G (kg h ⁻¹ m ⁻²)	C_0 (% mol)	C_f (% mol)	T_0 (°C)
1	1831	1.05	0.417	470
2	3613	0.56	0.360	470
3	5603	0.32	0.235	470
4	5653	0.68	0.535	471
5	3356	1.00	0.615	471
6	2010	0.98	0.415	470
7	5070	0.90	0.660	471
8	3455	1.80	1.050	471
9	2708	1.90	0.900	470
10	2064	1.85	0.620	470

Longitud del lecho catalítico = 1 m

Fración de espacios vacíos en el lecho = 0.57

Valores experimentales obtenidos en el reactor de 2" de diámetro.

Corrída	G (kg h ⁻¹ m ⁻²)	O_2 (% mol)	CO (% mol)	T_0 (°C)
1	3789	0.975	0.735	414
2	2280	1.150	0.535	415
3	1138	1.020	0.215	415
4	4490	0.575	0.415	428
5	4530	0.850	0.640	426
6	3735	0.500	0.360	422
7	2244	0.550	0.310	420
8	2289	1.300	0.465	417

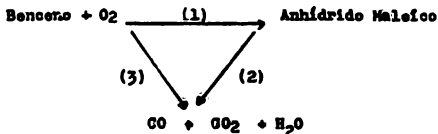
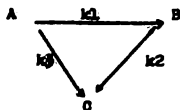
Longitud del lecho catalítico = 1 m

Fracción de espacios vacíos en el lecho = 0.57

Reacción:



La reacción es compleja del tipo:



Despejando "U" de la ecuación (11) se tiene:

$$U = \left[\Delta C - \frac{S_0(T_s - T_0)}{H} \right] \frac{V_0 H D \phi}{4 \int_0^L (T - T_0) dx}$$

Por estar el aire en exceso con respecto al benceno se puede considerar que a una temperatura dada, las propiedades físicas de la mezcla de alimentación benceno-aire son prácticamente iguales a las del aire. Con respecto a las propiedades termodinámicas se hará la misma consideración.

SECUENCIA DE CALCULO.

Calcular la densidad a T_o

$$\rho = \frac{\rho' (273)}{(T_o + 273)}$$

donde:

T_o = Temperatura de alimentación ($^{\circ}\text{C}$)

ρ' = Densidad del aire a 273°C

ρ = Densidad del aire a T_o (Kg/m^3)

Calcular la capacidad volumétrica de calor

$$S_o = C_p \times \rho$$

donde:

C_p = Capacidad de calor del aire a T_o ($\text{Kcal}/\text{Kg } ^{\circ}\text{C}$)

S_o = Capacidad volumétrica de calor del aire a T_o ($\text{Kcal}/\text{m}^3^{\circ}\text{C}$)

Calcular la velocidad lineal de los vapores

$$V_o = G/\rho$$

donde:

G = Masa velocidad ($\text{Kg}/\text{hr}-\text{m}^2$)

V_o = Velocidad lineal ($\text{m}/\text{l.r}$)

) Calcular el cambio de concentración

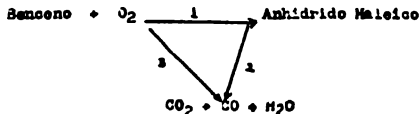
$$\Delta C = \frac{(Y_o - Y_f) \rho}{PM}$$

donde:

Y_o, Y_f = Fracciones mol a la entrada y a la salida del reactor

PM = Peso molecular del aire

5.) Calcular el calor de reacción



$$H = \sum X_i \Delta H_i$$

Las X_i se calculan a partir de las constantes de velocidad de reacción de la siguiente manera:

$$X_i = \frac{k_i}{k_1 + k_2}$$

Las constantes de velocidad de reacción k_i 's se evalúan a partir de la ecuación de Arrhenius

$$k_i = A_i e^{-E_i/RT}$$

Las X_i 's así obtenidas se normalizan para obtener un mejor valor, de tal manera que

$$X_i = \frac{X_i}{\sum X_i}$$

donde:

ΔH_i = Calor de reacción por mol convertido (cal/mol de benceno)

X_i = Fracción mol convertida

ΔH = Calor de reacción (Kcal)

A = Factor preexponencial

E = Energía de activación (cal/g mol)

R = Constante de los gases (cal/g mol °K)

6.) Calcular $\int (T - T_0) ds$

Se calcula integrando gráfica o numéricamente el área bajo la curva $(T - T_0)$ Vs s . Aquí se evaluará mediante una integración numérica de Simpson.

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 4f_{n-1} + f_n]$$

donde:

n = No de subintervalos

h = Longitud del intervalo

$f_j = f(x_j) = f(a + jh)$

$f_0 = f(a)$

$f_n = f(b)$

7.) Calcular U

A partir de la ecuación (11) se tiene que

$$U = \left[\Delta C - \frac{S_0}{\Delta H} (T_x - T_0) \right] \frac{V_0 \rho H D_g}{4 \int (T - T_0) ds}$$

8.) Calcular el número de Reynolds y el número de Nusselt

$$Re = \frac{D_p G}{\mu}$$

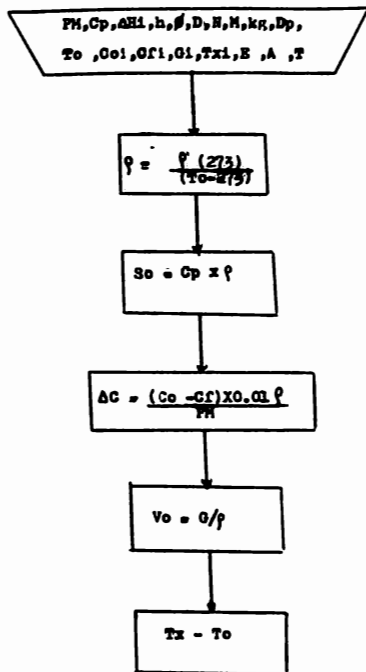
$$Nu = \frac{h D_p}{k_s}$$

donde:

D_p = Diámetro de partícula

μ = Viscosidad

DIAGRAMA DE FLUJO.



$$k_1 = A_1 e^{-E_1/RT}$$

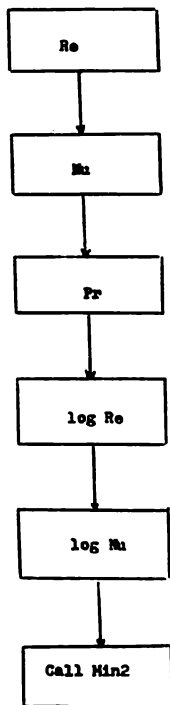
$$X'_1 = \frac{k_1}{(k_1 + k_2)}$$

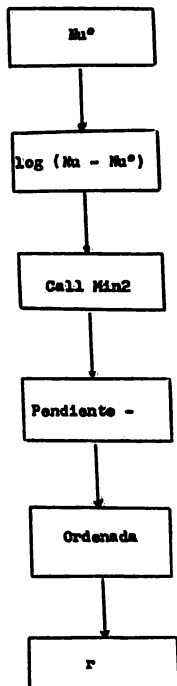
$$X_1 = X'_1 / gX_1$$

$$H = \sum X_1 \Delta H_1$$

$$\int_0^x (T - T_0) d\theta$$

$$U$$





LISTADO

DIMENSION DO(90),VO(90),DT(90),CP(90),CO(90),TX(90),K(90,90),G(90)
 1,FACP(90),XP(90,90),H(90),SUMXP(90),SUM1(90),T(90,90),SUM2(90),
 LAREA(90),U(90),X(90,90),ENQ(90),RO(90),TO(90),SO(90),ALU(90),
 LSUMX(90),PEX(90,90),XNU(90),RE(90),PR(90),P(90),ALRE(90),ALNU(90),
 LDHUS(90),C(90),ZD(90),TNU(90),UTEO(90),ERROR(90),ZRRMU(90)

C

C

C

LECTURA DE DATOS

1 READ/, G,DP,MU

READ/, (TO(I),I=1,N)

READ/, (CO(I),I=1,N)

READ/, (CP(I),I=1,N)

READ/, (G(I),I=1,N)

READ/, (TX(I),I=1,N)

READ/, (ENQ(J),J=1,MM)

READ/, (FACP(J),J=1,MM)

READ/, ((T(I,J),J=1,M),I=1,N)

C

C

NN=1

IF(D.EQ.0.0254) GO TO 15

WRITE(6,14)

FORMAT("1",6(/),40X,"RESULTADOS PARA EL REACTOR DE DOS PULGADAS DE
 1DIAMETRO",///)

```
GO TO 17

15 WRITE(6,11)

11 FORMAT("1",6(/),40X,"RESULTADOS PARA EL REACTOR DE UNA PULCADA DE
1DIAMETRO",////)

17 CONTINUE

C
C  CALCULO DE LAS DENSIDADES
DO 9 I=1,N
RO(I)=1.2928*(273./(TO(I)+273.))
9 CONTINUE

C
C
C  CALCULO DE LA CAPACIDAD DE CALOR VOLUMETRICA
DO 10 I=1,N
SO(I)=CF*RO(I)

C
C  CALCULO DEL CAMBIO DE CONCENTRACION
DC(I)=(CO(I)-CF(I))*RO(I)*0.01/MH

C
C
C  CALCULO DE LA VELOCIDAD DE LOS VAPORES
VO(I)=Q(I)/RO(I)

C
C
C  CALCULO DE LA DIFERENCIA DE TEMPERATURAS
DT(I)=TX(I)-TO(I)

10 CONTINUE
```

```

C
O
C   CALCULO DE LAS CONSTANTES DE VELOCIDAD DE REACCION
      DO 6 I=1,N
      DO 5 J=1,MH
      PEX(I,J)= -E03(J)/(R*(T0(I) + 273.))
5    CONTINUE
6    CONTINUE
      DO 30 I=1,N
      DO 20 J=1,MH
      K(I,J)=FA0F(J)*EXP(PEX(I,J))
20   CONTINUE
30   CONTINUE
C
C
C   CALCULO DE LAS FRACCIONES MOL
      DO 50 I=1,N
      DO 40 J=1,MH
      XP(I,J)=n(I,J)/(K(I,1)+K(I,3))
40   CONTINUE
50   CONTINUE
      DO 70 I=1,N
      SUMXP(I)=XP(I,1) + XP(I,2) + XP(I,3)
70   CONTINUE
      DO 90 I=1,N
      DO 80 J=1,MH
      X(I,J)=XP(I,J)/SUMXP(I)

```

```
80 CONTINUE
90 CONTINUE

C
C
C   CALCULO DEL CALOR DE REACCION
DO 100 I=1,N
  SUMX(I)=X(I,1)*X(I,2)+X(I,3)
  H(I)=X(I,1)*DH1+X(I,2)*DH2+X(I,3)*DH3
100 CONTINUE

C
C
C   CALCULO DEL AREA BAJO LA CURVA T-TO VS X
C   INTEGRACION NUMERICA METODO DE SIMPSON
DO 130 I=1,N
  DO 120 J=1,M
    T(I,J)=T(I,J)-TO(I)
120 CONTINUE
130 CONTINUE
  DO 140 I=1,N
    SUM1(I)=0.0
140 CONTINUE
    L=M-1
    DO 160 I=1,N
      DO 150 J=1,L,2
        SUM1(I)=SUM1(I) + T(I,J)
150 CONTINUE
```

```

160 CONTINUE
    DO 170 I=1,N
        SUM2(I)=0.0
170 CONTINUE
    L=M-2
    DO 190 I=1,N
        DO 180 J=2,L,2
            SUM2(I)=SUM2(I)+T(I,J)
180 CONTINUE
190 CONTINUE
    DO 200 I=1,N
        AREA(I)=(B/5.)*(SUM1(I)+4.*SUM2(I)+2.*T(I,N))*0.01
C
C
C   CALCULO DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR U
    U(I)=(CD(I)-SO(I)+DT(I)/h(I))+VO(I)+H(I)+D*FI/(4.*AREA(I))
200 CONTINUE
C
C
C   IMPRINTA LOS DATOS
    WRITE(6,301)
301 FORMAT(4(/),"RUN",          GASTO,          CONC INC,          CONC FINAL,
           1,          U,"/,"I",10X,"KG/HRM2 ","5X," "% MOL ","5X," "% MOL
           2",5X," KCAL/HRM2 C ")
    DO 210 I=1,N
        WRITE(6,302) (I,O(I),CO(I),CP(I),U(I))
210 CONTINUE

```

302 FORMAT(5X,I3,8X,F9.4,2(5X,F9.7),6X,F12.8)

REPORTAR REYNOLDS Y NUSSULT

WRITE(6,309)

309 FORMAT(5X,4(/),"CORRIDA REYNOLDS NUSSULT

1 PRANDT LOG RE LOG MU")

DO 305 I=1,N

XNU(I)=U(I)*D/KO

RE(I)=G(I)*DP/(MU*PI*3.6)

PR(I)=CP*MU*3.6/KO

ALRE(I)=ALOOIO(RE(I))

ALNU(I)=ALOOIO(XNU(I))

WRITE(6,311)(I,RE(I),XNU(I),PR(I),ALRE(I),ALNU(I))

311 FORMAT(5X,I3,3(5X,F13.8),2(5X,F13.9))

305 CONTINUE

C

C

C MINIMOS CUADRADOS PARA ENCONTRAR MU A RE CERO

CALL MIN2(ALNU,ALRE,N,I,SUMX,SUMY,SUMXY,SUMX2,SUMX2,XMED,YMED,

ISOMAX2,SOMAX2,SLOPE,R,XINT)

WRITE(6,312)

312 FORMAT(6(/),5X,"MINIMOS CUADRADOS PARA ENCONTRAR MU A RE=0",5X,
1"PROPORCIONES RECTANGULARES Y LA ECUACION EN FORMA LINEAL FUE",
2,"//,45X,"LOG(MU) = LOG(CTZ) + BETA*LOG(RE)"

WRITE(6,322) XINT,SLOPE,R

322 FORMAT(2(/),10X,"INTERC=LOG(CTZ)=",F9.5,10X,"SLOPE=BETA=",F9.5,20X

```

1,"COEFICIENTE DE CORRELACION-",P9,8)
XNUO=10.0**XINT
WRITE(6,323) XNUO
323 FORMAT(2(/),9X,"NUSELT A REYNOLDS CERO= NUO =",P15,10)
DO 350 I=1,N
ED(I)=ALOG(RE(I))
DNUS(I)=XNU(I)-XNUO
C(I)=ALOG(DNUS(I))
P(I)=ALOG(PR(I))
350 CONTINUE
CALL MIN2(C,ED,N,I,SUMEX,SUMY,SU.X1,SUMY2,SU.X2,XMED,YMED,SOMAX2,
18SOMAX2,SLOP2,R,XINT)
WRITE(6,505)
505 FORMAT(6(/),5X,"CALCULO DE LA CORRELACION")
C
C
C   CALCULO DE LA CORRELACION
WRITE(6,332)
332 FORMAT(6(/),5X,"MINIMOS CUADRADOS PARA ENCONTRAR NUSELT A RE DIFE
1RENTE DE CERO",//,5X,"PROPONEMOS MU=NUO+ALFA*(PR**1/3)+ (RE**BETA)
2-NUO-CTE+RE**BETA",//,5X,"DE DONDE CTE=ALFA*(PR**1/3)",//,5X,"LA EC
3UACION EN FORMA LINEAL QUEDA",//,30X,"LN(MU-NUO)=LN(CTE)+BETA*LN(R
4E)",//)
WRITE(6,322) XINT,SLOPE,R
PRN=CP*NU**3.6/KO
CTE=EXP(XINT)
ALFA=CTE/(PRN**0.333)

```

```

WRITE(6,333) CTE,ALFA,SLOPE
333  FORMAT(2(/),10X,"CTE=",F10.5,5X,"ALFA=",F10.5,5X,"BETA=",F10.5)
SER2=0.0
SERNU2=0.0
WRITE(6,525)
525  FORMAT(6(/),5X,"COMPARACION ENTRE LOS VALORES CALCULADOS Y LOS VAL
LORES EXPERIMENTALES",//,5X,"RUN          NU TEORICO          NU EXPERIMEN
TAL          U TEORICO          U EXPERIMENTAL          ERROR NU          ERROR U"
3,//)
DO 500 I=1,N
TNU(I)=XNUO-CTE+RE(I)*SLOPE
UTEO(I)=TNU(I)-ND/D
ERROR(I)=U(I)-UTEO(I)
ERRNU(I)=XNU(I)-TNU(I)
SER2=SER2+ERROR(I)**2.
SERNU2=SERNU2+ERRNU(I)**2.
ERRNU(I)=ABS(ERRNU(I)/TNU(I))
ERROR(I)=ABS(ERROR(I)/UTEO(I))
WRITE(6,510) I,TNU(I),XNU(I),UTEO(I),U(I),ERRNU(I),ERROR(I)
510  FORMAT(2(/),5X,I3,4(5X,F13.8),2(6X,F10.6))
500  CONTINUE
ERSTNU=(SERNU2/N)**0.5
ERSTU=(SER2/N)**0.5
WRITE(6,511) ERSTNU,ERSTU
511  FORMAT(3(/),5X,"DESVIACION STANDAR DEL NU= ",F10.6,//,5X,"DESVIACI
LON STANDAR DE U = ",F10.6)
WRITE(6,515) ALFA,SLOPE,ERSTNU

```



```

515 FORMAT(4(/),5X,"MU - MU0 = ",F8.6," (PR .33) RE ",F8.6,"-/-",
1F8.8,////)
NN=NN+1
IF(NN.GT.2) GO TO 400
GO TO 1
STOP
END

```

```

SUBROUTINE MI N2(Y,EX,N,I,SUMEX,SUNY,SUNXY,SUMY2,SUMX2,XMED,YMED,
18CHAY2,8CHAX2,SLOPE,R,XINT)
DIMENSION Y(90),EX(90)
SUMEX=0.0
SUNY=0.0
SUMX1=0.0
SUMX2=0.0
SUMY2=0.0
DO 510 I=1,N
SUMEX=SUMEX+EX(I)
SUNY=SUNY+Y(I)
SUMXY=SUMXY + EX(I)*Y(I)
SUMX2=SUMX2 + EX(I)**2.
SUMY2=SUMY2 + Y(I)**2.
510 CONTINUE
XMED=SUMEX/N
YMED=SUNY/N
8CHAY2=SUMY2/N - YMED**2.

```

```
80MAX2=(80MX2/N) - XME*2.  
SLOPE=(SUMCX/N - XME*YME)/80MAX2  
R= SLOPE*80MAX2**0.5/80MAX2**0.5  
XINT = YME - SLOPE*XME  
RETURN  
END
```

RESULTADOS OBTENIDOS PARA EL REACTOR DE UNA PULGADA DE DIAMETRO

Corriente	Q (Kg h ⁻¹ m ⁻²)	U (Kcal/h m ² °C)	Reynolds	Nusselt
1	1831.0	60.731460	123.17622	31.40120
2	3613.0	89.824529	243.05608	46.56210
3	5603.0	152.184749	376.92865	78.88760
4	5653.0	68.753594	380.29229	35.63961
5	3356.0	60.909908	225.76701	31.36636
6	2010.0	48.246458	135.21802	25.00938
7	5070.0	94.856786	311.07233	49.00478
8	3455.0	54.458826	232.42700	28.22967
9	2708.0	48.203723	182.17433	24.98723
10	2064.0	50.951149	138.85075	26.41141

Al graficar U vs Q y Nu vs Re se ve que existe una tendencia -- general en donde al aumentar el gasto Q, el coeficiente de transferencia -- de calor U aumenta, por lo tanto, al aumentar el número de Reynolds el Nu -- selt aumenta.

El ajuste de estos datos mediante mínimos cuadrados da los si -- guientes valores de las constantes de la correlación propuesta

$$Nu = Nu^0 \cdot a Re^a$$

Con todos los datos

$$Nu = 1.1442 + 0.97552 Re^{0.6416}$$

$$\text{Error máximo} = 59.06 \%$$

Sin las corridas 3 y 4

$$Nu = 1.04157 + 1.4788 Re^{0.57208}$$

$$\text{Error máximo} = 28.90 \%$$

Sin las corridas 1 y 4

$$Nu = 0.1854 + 0.1773 Re^{0.7713}$$

$$\text{Error máximo} = 31.2 \%$$

Sin la corrida 4

$$Nu = 0.50539 + 0.47152 Re^{0.806}$$

$$\text{Error máximo} = 39.04 \%$$

Sin la corrida 3

$$Nu = 3.41540 + 2.36027 Re^{0.46047}$$

Error máximo = 35.5 %

RESULTADOS OBTENIDOS PARA EL REACTOR DE DOS FULGADAS DE DIAMETRO

Temperatura	Q (Kcal h ⁻¹ m ²)	U (Kcal/h m ² °C)	Reynolds	Nusselt
1	3789.0	28.86172309	258.644543	22.54841
2	2280.0	18.85548796	155.637254	20.37997
3	1138.0	20.19419834	77.682103	21.82692
4	4490.0	34.78160616	306.496173	37.59373
5	4530.0	27.46483393	309.226651	29.68539
6	3735.0	28.79294633	254.958397	31.12088
7	2244.0	28.94538924	153.179824	22.63884
8	2289.0	18.70340008	156.251612	20.21558

El ajuste de estos datos da las siguientes correlaciones:

Con todos los datos

$$Nu = 4.18612 + 2.47416 Re^{0.40553}$$

Error máximo = 27.75 %

Sin la corrida 3

$$Nu = 0.9659 - 0.81756 Re^{0.63248}$$

$$\text{Error máximo} = 20.75 \%$$

Sin la corrida 4

$$Nu = 6.7466 + 3.05452 Re^{0.3370}$$

$$\text{Error máximo} = 28.39 \%$$

De los ajustes probados se ve que para el reactor de una pulgada de diámetro el ajuste que predice los coeficientes de calor con un menor error es el segundo, por lo tanto se escogió esta correlación, es decir

$$Nu = 1.34187 + 1.4788 Re^{0.57208}$$

La cual establece que para fluidos que no están en movimiento el Nusselt tiene un valor igual a 1.8417. Si se toma en cuenta que la literatura reporta un Nusselt igual a 2 para fluidos estáticos, el valor predicho por la correlación obtenida es muy cercano al reportado. Por otro lado establece que n es proporcional a $Re^{0.57208}$. Para el reactor de dos pulgadas de diámetro se escogió la segunda correlación, la cual predice el coeficiente de transferencia de calor con error máximo del 20.75 %. En esta correlación el Nusselt a Reynolds cero es de 0.9659 y la dependencia del Nusselt con Reynolds es de $Re^{0.63248}$.

Si comparamos estas dos correlaciones con las obtenidas por -- diferentes autores tenemos por ejemplo, que la ecuación obtenida por Jakob para el coeficiente de pared es

$$\frac{hD_p}{k} = f D_t^{0.17} \left[\frac{D_p G}{\gamma} \right]^{0.83} \frac{C_p \gamma}{k}$$

donde se tiene que $h \sim Re^{0.83}$, y la obtenida por Calderbank y Fogorski

$$\frac{h D_p}{k} = 3.6 \left[\frac{D_p G}{\gamma} \right]^{0.34}$$

correlación que nos da un coeficiente de transferencia de calor h que -- depende del Reynolds en $Re^{0.365}$. La dependencia de h con el Re para los -- dos reactores tiene por lo tanto un valor intermedio entre estas dos -- últimas correlaciones.

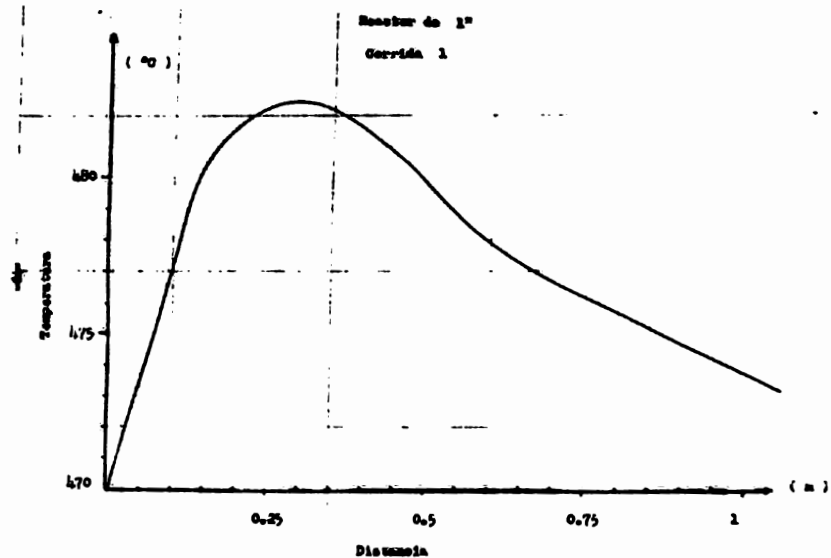
CONCLUSIONES

- 1.) A partir de los datos obtenidos se puede concluir que en general U es proporcional al Reynolds.
- 2.) Al aumentar el diametro del reactor la dependencia de h con el Re es ligeramente mayor.
- 3.) Entre un rango de $300 > Re > 100$ la correlación para el reactor de una pulgada de diametro predice los coeficientes de transferencia de calor con un error máximo del 28.98 % .
- 4.) Al aumentar el diametro del reactor, el error con el cual la correlación predice los valores de h es menor. (20.75 %)
- 5.) La correlación de los datos fue poca y el error obtenido fue relativamente alto.

.

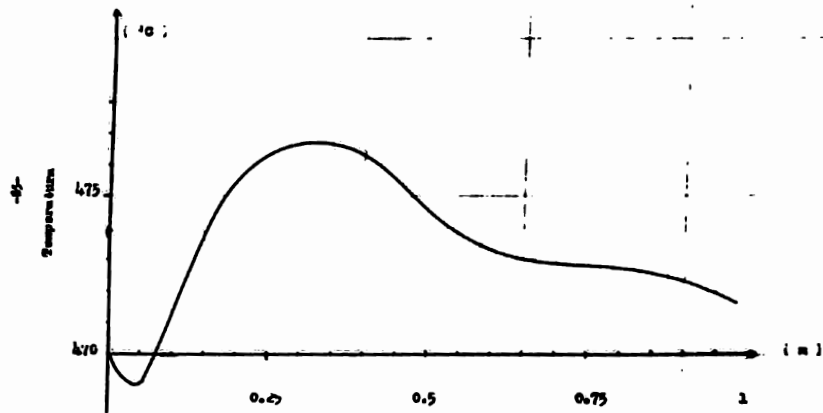
PERFILES AXIALES DE

TEMPERATURA



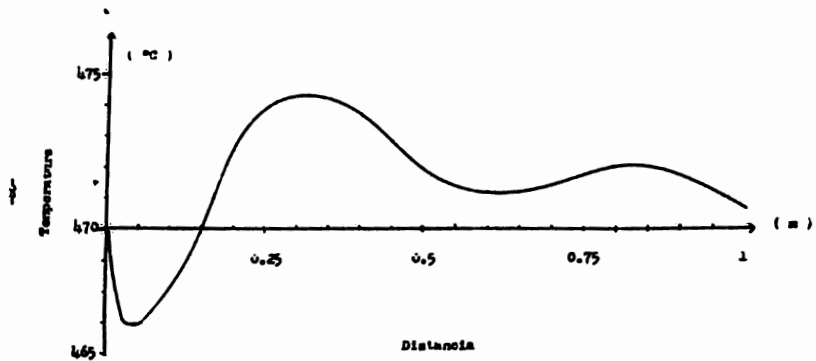
Resposta de 1ª

Corrida 2



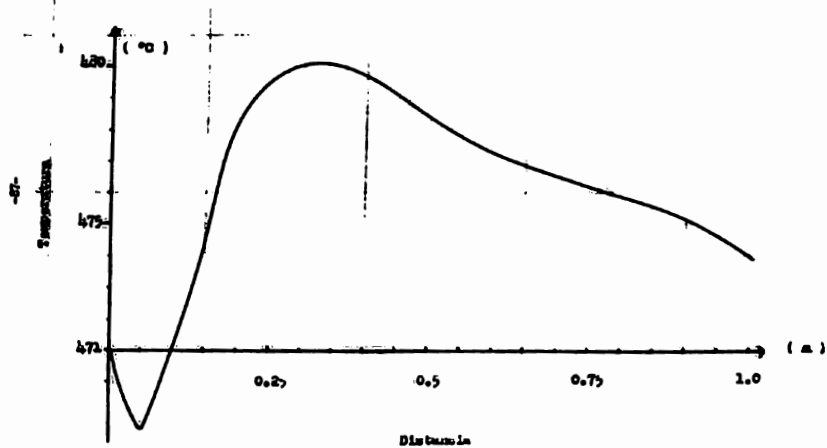
Monitor de 1"

Corrida 5



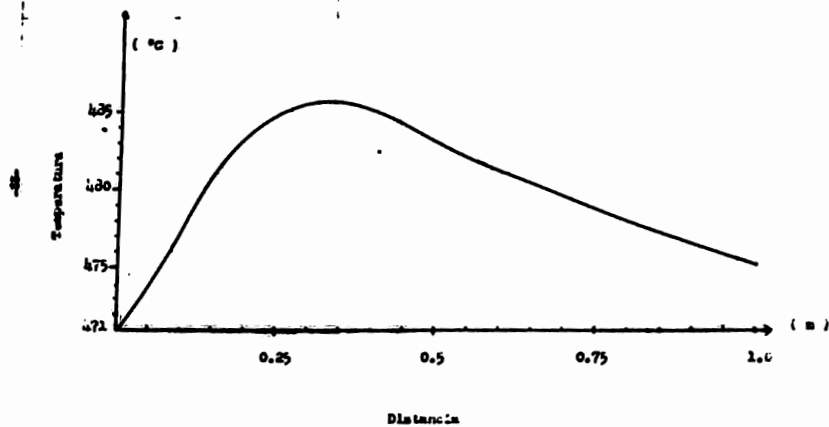
Reactor de 1^a

Corrida 4

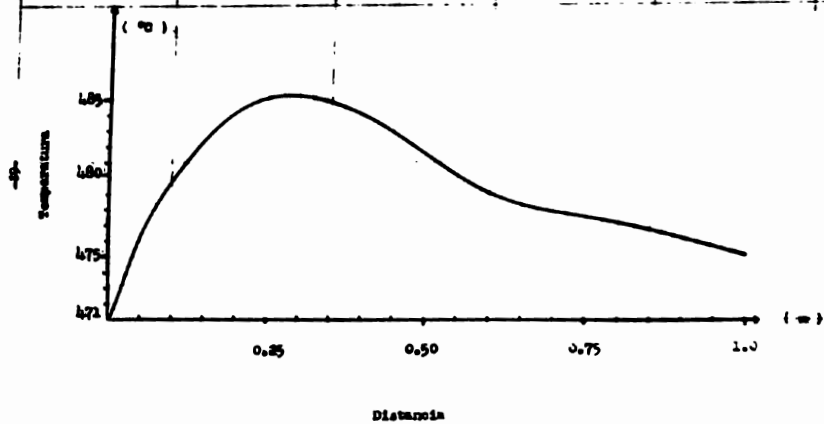


Reactor de 1"

Corrida 5

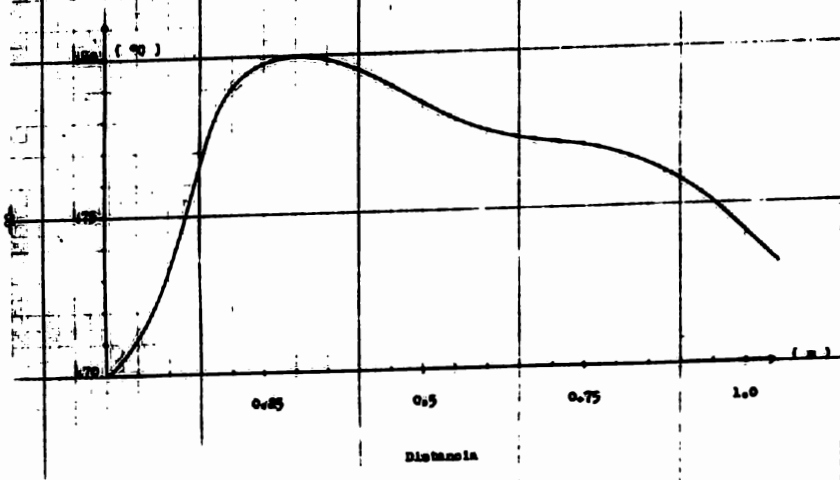


Senador do 1º
Corrida 6



Exatador de 1^a

Cavidade 7



Distancia

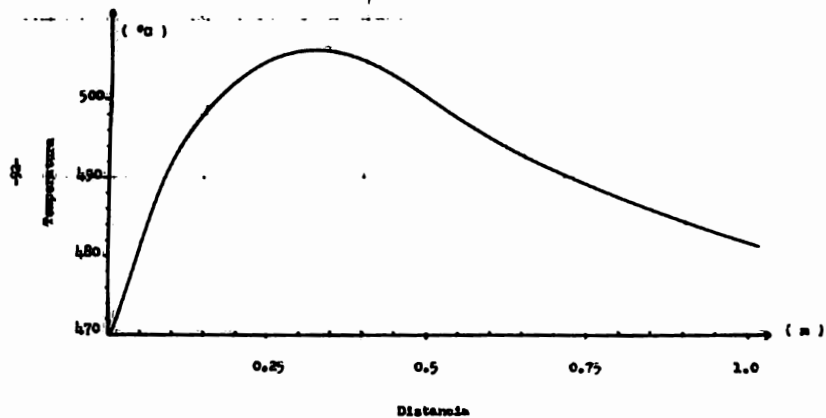
Receptor de 1°

Curva 8



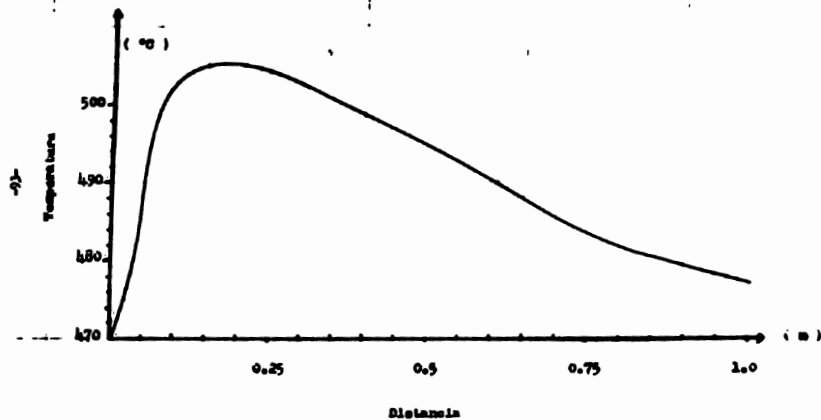
Receptor de 1"

Corrída 9



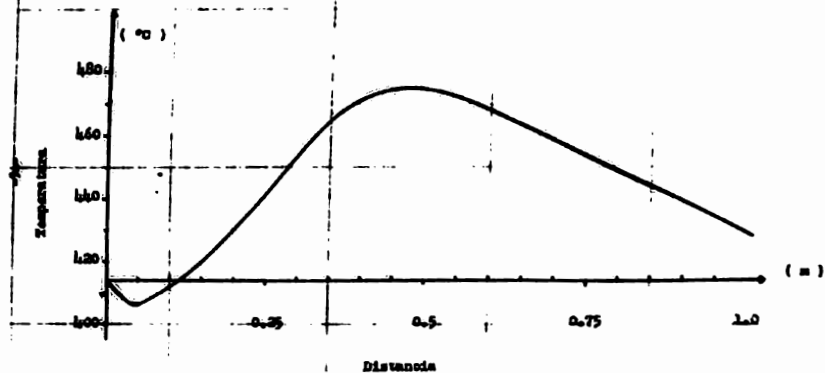
Resistor de 1°

Corrida 10



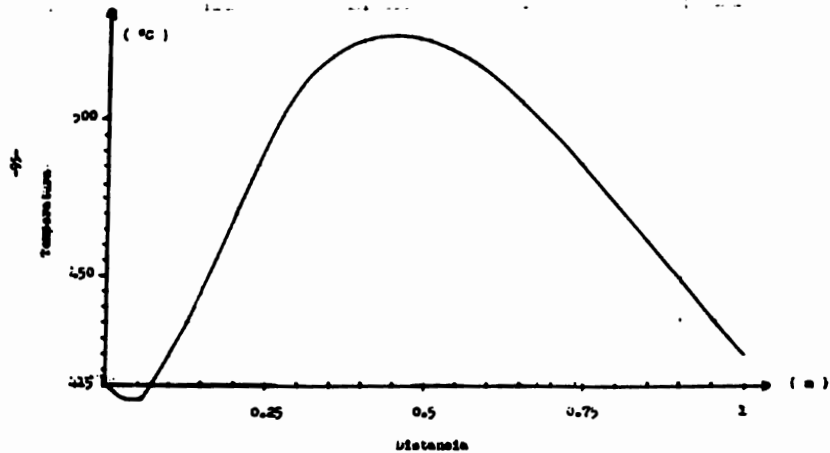
Receptor de 2"

Corrida 1



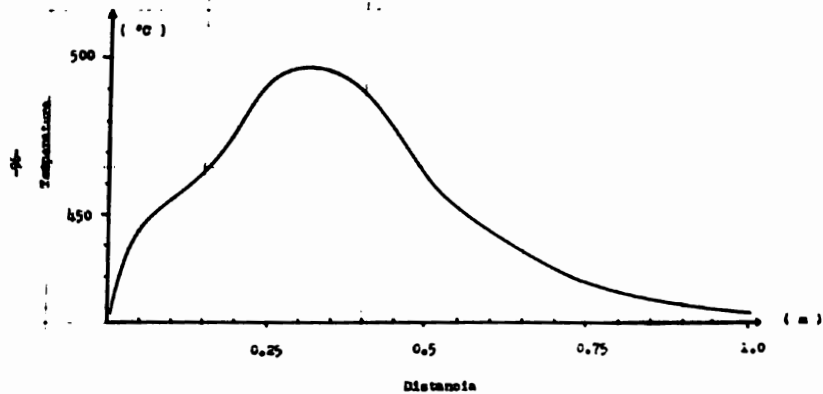
Reator de 2^a

Corrida 2



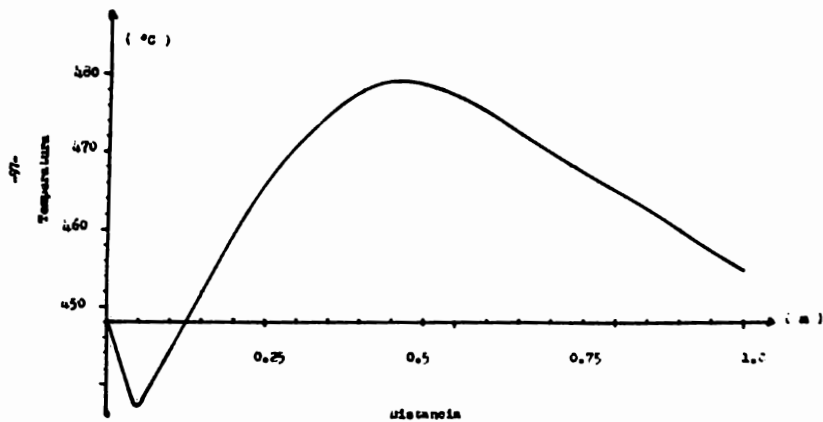
Reactor de 2^o

Corrída 3



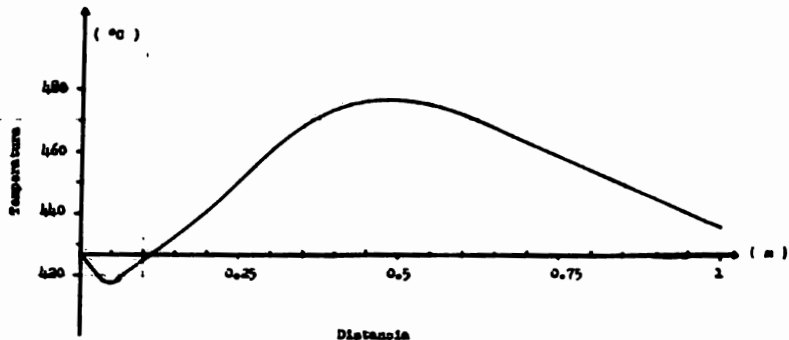
Reomotor de 2°

Corrida 4



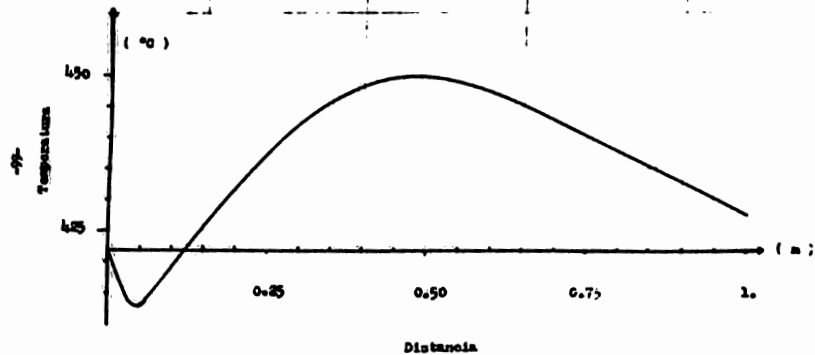
Reactor de 2^o

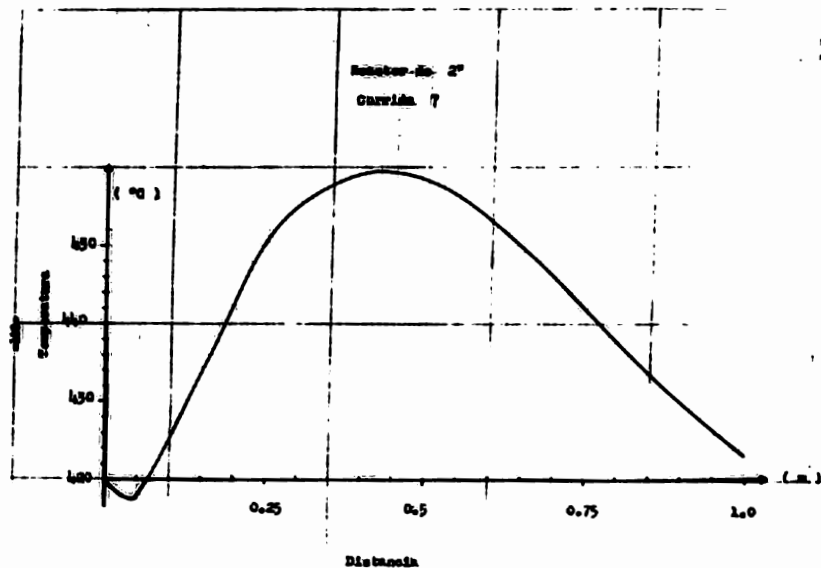
Carrida 5

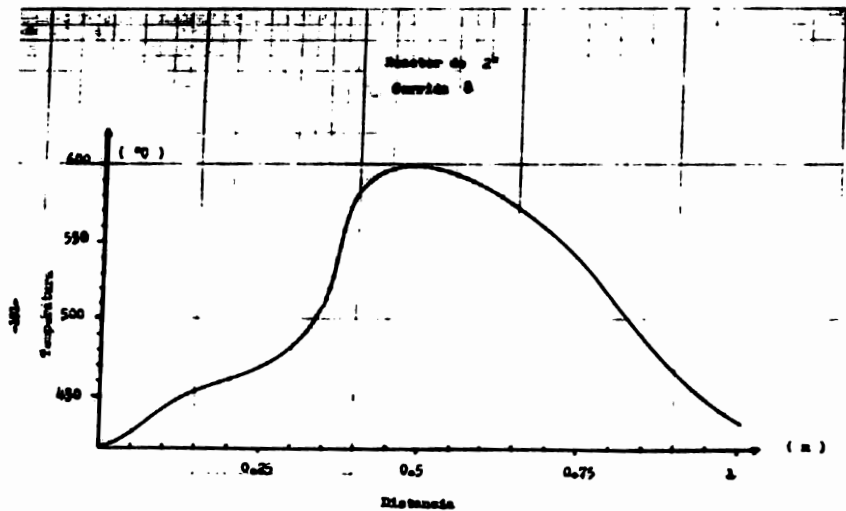


Receptor de 2°

Córrida 6







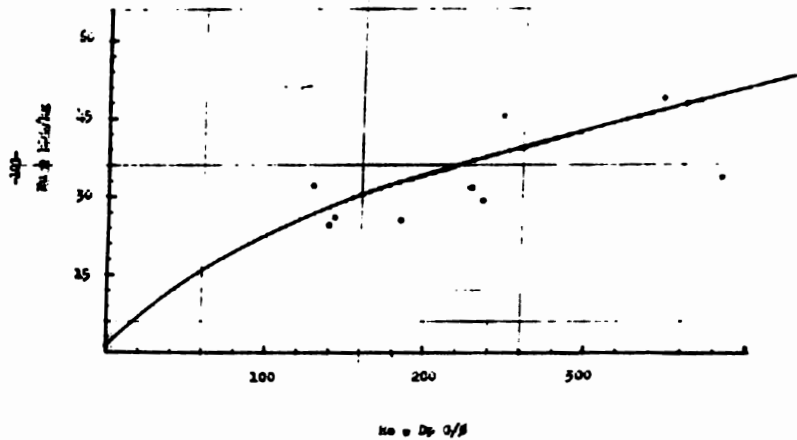
GRAFICAS DE NUMERO DE NUSSELT

CONTRA NUMERO DE REYNOLDS

Reactor de 2"

Error mínimo = 59.6%

$r = 0.7296$

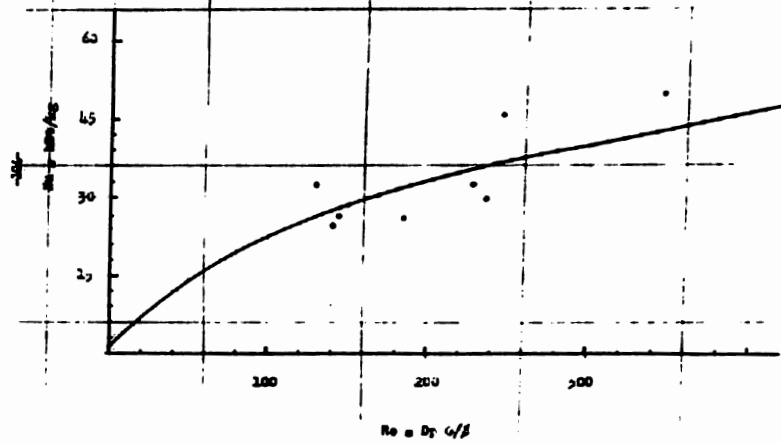


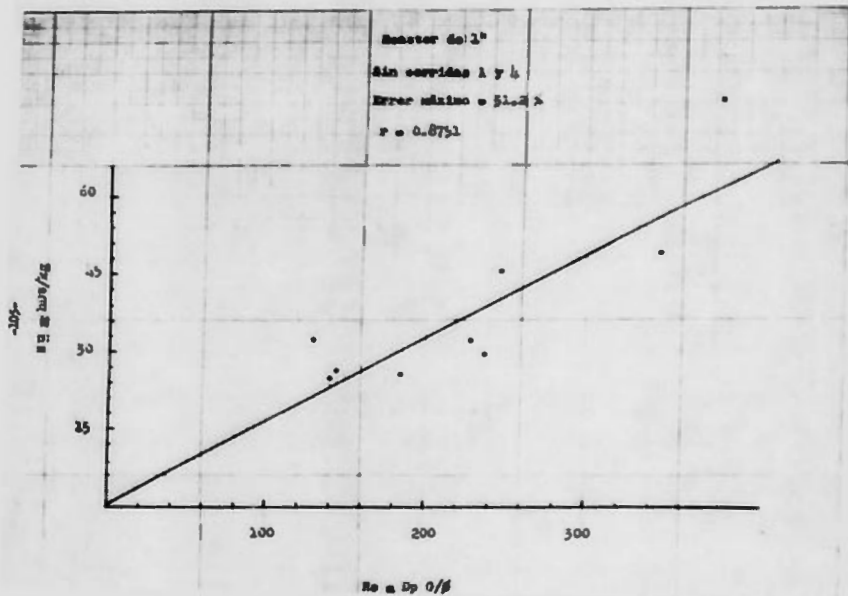
Resistor de 1"

sin corriente 3 y 4

Error máximo = 25 %

$r = 0.7185$



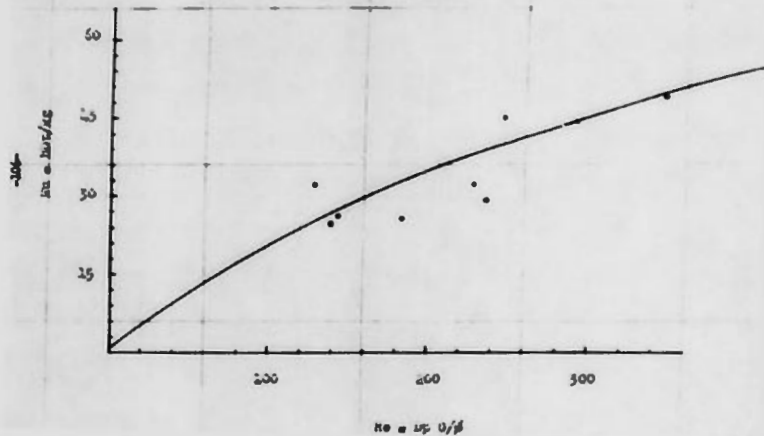


Modelo de 1"

Sin corrección

error máximo = 3,0%

$n = 20$

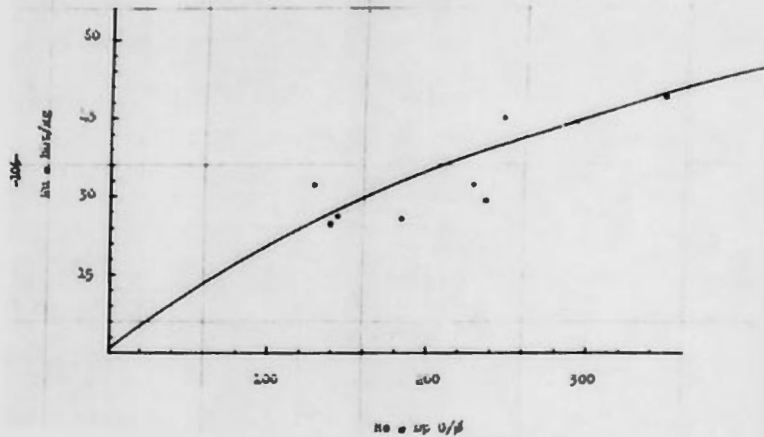


Modelo de 1"

Em escala 1/4

errores máximos = 35.4%

$r = 0.925$

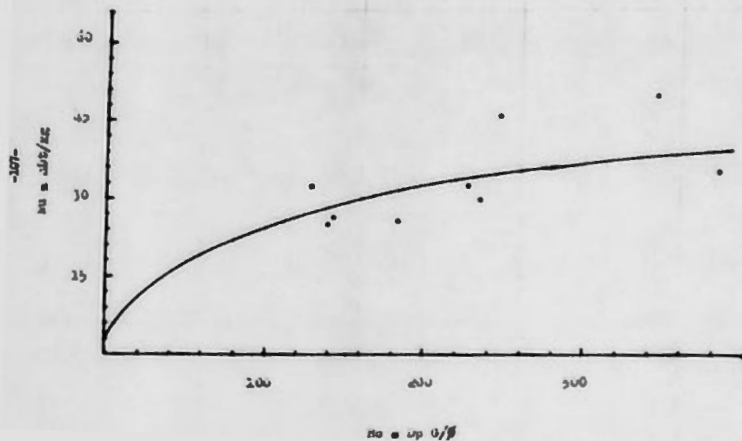


Reactor de 1"

Sin corrida 3

Error máximo = 35.3 %

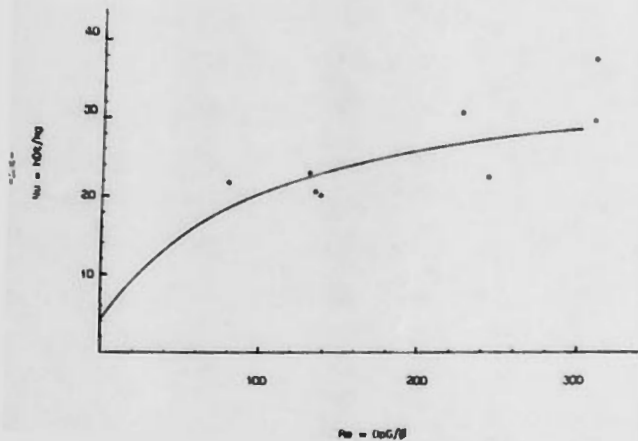
$r = 0.6722$



Reactor de 2^o

Error máximo = 37,75 %

$r = 0,7037$

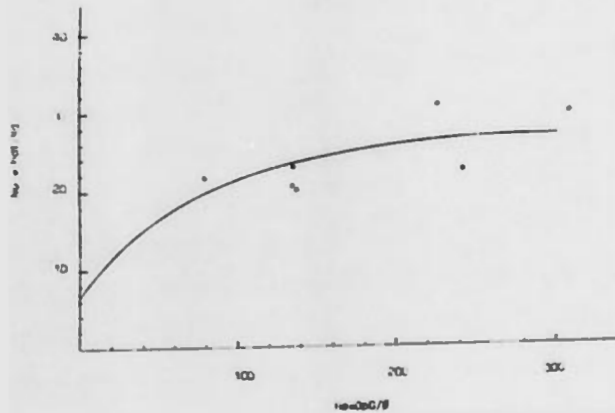


Reactor 20

Error estimate = 25.39 %

$r = 0.9999$

Run carries 4

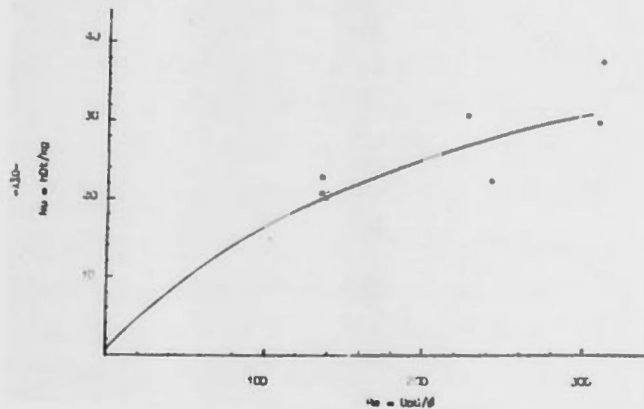


Reactor de 2^o

21- curtid

Error máximo = 26.75 %

$r = 0.6282$



B I B L I O G R A F I A.

1. K.B. Wilson, Trans. Inst. Chem. Eng., 24(1964) 77.
2. J.F. Ramirez y P.H. Calderbank, Chemical Engineering Journal., 14(1977)49-58.
3. S. Yagi y D. Kuni, A. I. Ch.E. Journal, 3(1957) 373-381.
4. Ranz, W.E., Chem. Eng. Progr., 48, 247(1952).
5. S. Yagi y D. Kuni, A.I.Ch.E. Journal., 6(1960) 97-104.
6. Hanratty T.J., Chem. Eng. Progr., 48, 247(1958).
7. Felix J.R., Ph D. Thesis University of Wisconsin, June 1951.
8. Plautz D., Ph. D. Thesis University of Illinois Nov. 1953.
9. Yagi S. y Wakao N., A.I.Ch. E. Journal, 5, 79 (1959)
10. Plautz D. y H.F. Johnston, A. I. Ch. E. Journal, 1, 193 (1955).
11. Leva M., Ind. Eng. Chem., 39, 857(1947), 40415(1948).
12. Leva M., Weintraub M., Grusser M. y E. L. Clark, Ind. Eng. Chem., 40, 747 (1948).
13. Beek J., Advances in Chemical Engineering, 3, 229 (1962)
14. Thoenes, D. Jr. y Kramers, H. Chem. Engng Sci., 8, 271 (1958)

15. R.H. Perry y C.H. Chilton, Chemical Engineer's Handbook.
16. Coberly, C. A. y Marshall, W. R., Chem. Engng Progr., 47, 141 (1951)
17. Calderbank P.H. y Fogoraki L.A., Instn. Chem. Engrs., 35, 195 (1957)
18. Agnew J.B , Potter O.E., Trans. Instn. Chem. Engrs., 45, T15 (1970)
19. Wasch A.P y Froment O.F., Chemical Engineering Science, 27, 567 (1972)
20. Kunii D. y Smith J. M., A.I.Ch.E. Journal, 6, 72, (1960)