

ESTUDIO DE LA SECCION DE SINTESIS DE UNA
PLANTA DE HIDRODEALQUILACION

TESIS

Que para obtener el Título de

INGENIERO QUIMICO

Presenta

ARTURO ANTONIO RAMIREZ GALLEGOS

MEXICO, D.F.

1966



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.

A NIS PADRES

01887

02700

MI SINCERO AGRADECIMIENTO AL
SR. ING. RAUL MEYER S.

C A P I T U L O S .

- I. - INTRODUCCION.
- II. - INVESTIGACION BIBLIOGRAFICA.
- III. - CALCULOS EN LA SECCION DE SINTESIS.
- IV. - CONCLUSIONES.

BIBLIOGRAFIA.

CAPITULO I

INTRODUCCION

El desarrollo de la Industria Petroquímica ha necesitado de un número cada vez mayor de materias primas, así como de mayores cantidades de materiales básicos para su elaboración.

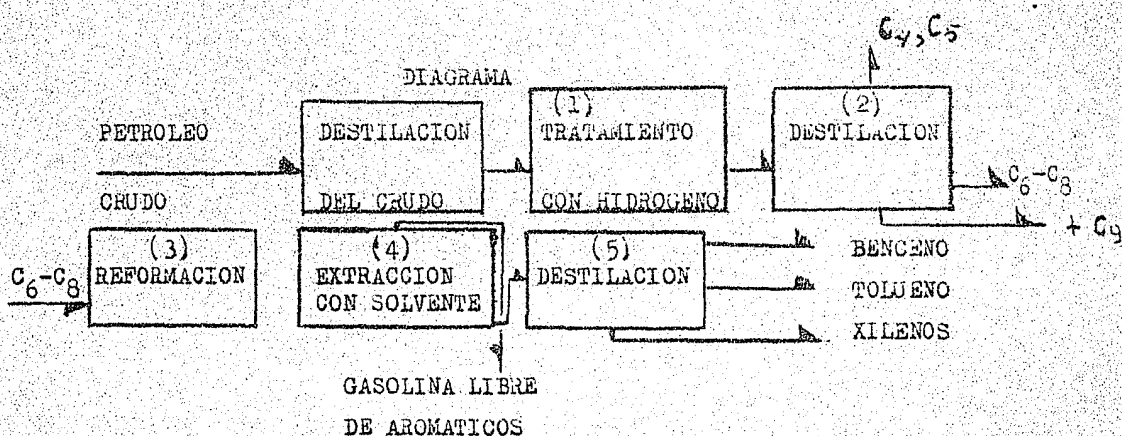
Uno de los materiales básicos, cuya producción es crítica en el desarrollo de la Petroquímica, es el Benceno, por la cantidad tan grande de materias primas que se derivan de él. Es por eso que se están estudiando nuevos procesos de producción.

Se puede observar en el Cuadro No. 1, algunas de las industrias nacionales que dependen del Benceno.

PRODUCCION DE BENCENO:

Existen tres fuentes principales de producción de Benceno:

- Destilación seca del Coke.
- De la refinación del petróleo se obtiene Benceno en la planta de reformación.



- ELIMINACION DEL AZUFRE CON H_2
- SEPARACION DE HIDROCARBUROS $C_6 - C_8$
- PRODUCCION DE AROMATICOS A PARTIR DE NAFTENOS
- SEPARACION DE AROMATICOS DE NAFTENOS Y PARAFINAS
- SEPARACION DE BENCENO, TOLUENO Y XILENOS

C U A D R O No. 1. (1)

BENCENO	ETIL BENCENO	{	ACIDO BENZOICO-BENZOATOS, PERFUMERIA, DENTRIFICOS	
			{	HULE ESTIRENO-BUTADIENO
				POLIESTIRENO-HULES SITENTICOS
				COPOLIMEROS DEL ESTIRENO BUTADIENO
	{	{	{	LLANTAS PARA AUTOMOVILES
				BANDAS, EMPAQUETADURAS
	{	{	{	PERFUMERIA
				COLORANTES
	NITRO BENCENO - ANILINA			
	CUMENO	{	FENOL-RESINAS: FENOL FORMALDEHIDO, ACIDO SALICILICO	
{			INDUSTRIA DE LA CELULOSA	
			REMOVEDOR DE PINTURAS Y BARNICES	
			ACIDO BENCEN SULFONICO - RESORCINOL, ADHESIVOS Y RESINAS	
ANHIDRIDO MALEICO	{	COPOLIMEROS DEL ACIDO MALEICO - ACONDICIONADOR DE TIERRAS		
		RESINAS POLIESTER-LACAS, BARNICES, RECUBRIMIENTOS		
CICLOHEXANO #				

NOTA: EL CICLOHEXANO ES A SU VEZ UN MATERIAL BASICO EN PETROQUIMICA

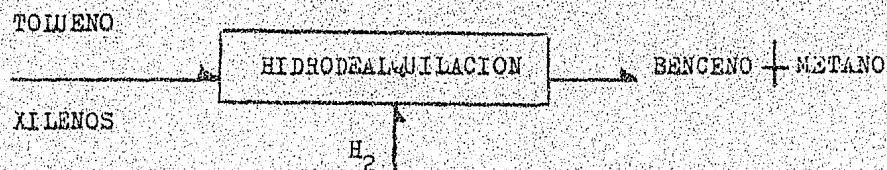
C U A D R O No. 2 (1).

TOLUENO	TRINITROTOLUENO - EXPLOSIVOS
	ACIDO BENZOICO - BENZOATOS, PLASTIFICANTES, COSMETICOS
	VINIL TOLUENO - COPOLIMEROS DE VINIL TOLUENO - SOLVENTES

C U A D R O N o. 3

XILENOS	C-XILENO - ANHIDRIDO FTALICO	FTALATO DIALKIDICO - PLASTIFICANTES
		ANTRAQUINONA- COLORANTES
	M-XILENO - ACIDO ISOFTALICO	POLIESTIRENO
	P-XILENO - ACIDO TEREF TALICO	RESINAS POLIURETANO
		TEREF TALATO DE POLIGLICOL
		FIBRAS
		PELICULAS

c) Por Hidrodealquilación



La Principal materia prima para este proceso es el Tolueno, por - ser los Xilenos materia prima mas solicitada (Ver cuadros No.s -- 2 y 3).

Los procesos de hidrodealquilación pueden ser catalíticos (fase - heterogenea) o no catalíticos (fase homogenea).

El presente trabajo, es un estudio de la Sección Síntesis de una - planta de hidrodealquilación de Tolueno en fase homogenea.

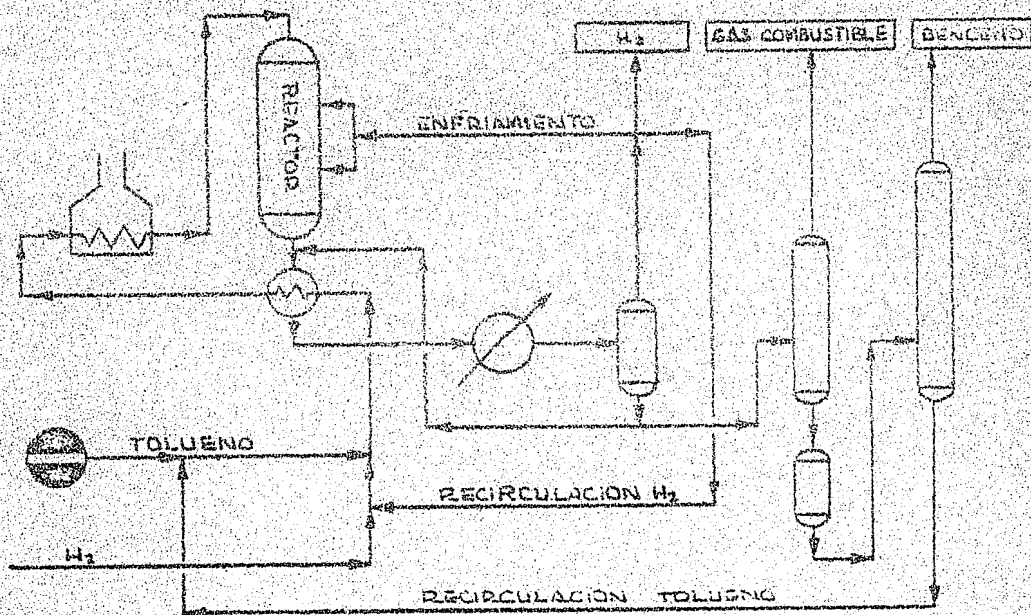
CAPITULO II.

INVESTIGACION BIBLIOGRAFICA

1).- REACCION



2.- DIAGRAMA DE FLUJO (2)



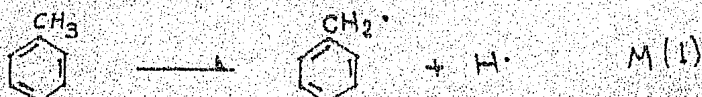
3.- EDUCACION CINETICA Y MECANISMO DE REACCION.

a).- En una serie de publicaciones Szwarc (4) cita el mecanismo de la "pirólisis" del tolueno en ausencia de hidrógeno en exceso a baja conversión para minimizar reacciones secundarias en el rango de 680 - 850°C a presiones subatmosféricas, él muestra que la descomposición del tolueno es una reacción unimolecular y de 1er. orden, cuya constante está dada por una energía de activación de - 77.5 kcal./gr mol. y un factor de frecuencia de $2 \times 10^{13} \text{ seg}^{-1}$

$$k = 2 \times 10^{13} e^{-\frac{77500}{RT}} \quad (1)$$

$$-\frac{dC_T}{dt} = kC_T$$

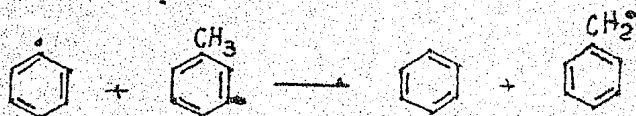
Los productos observados fueron 60% H_2 , 40% CH_4 , benceno y dibencilo equivalente a una mol por mol de gas. En base a estos hechos y consideraciones teóricas Szwarc dedujo que el paso inicial y el — que controla, es la ruptura de un enlace alquílico C-H.



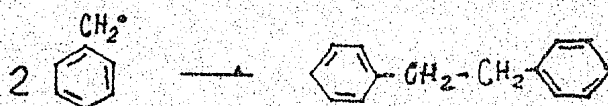
Esto es seguido por:



O por:



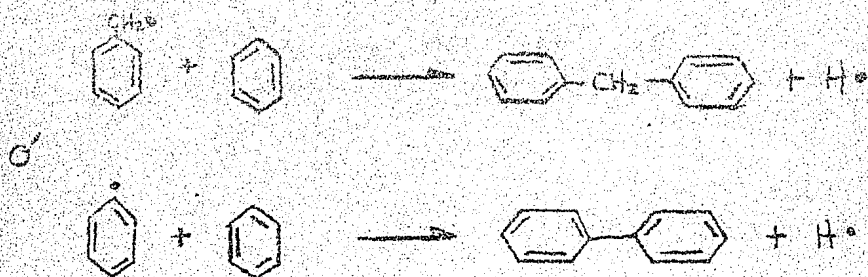
finalmente el radical bencilo es eliminado por dimerización



El propósito de la exposición anterior, es que ésta sirva como una base con la cual la información de la hidrodealquilación térmica — pueda ser comparada.

Una marcada similitud con respecto a la formación de dicíclicos — aromáticos será notada entre pirólisis hidrodealquilación, aún — cuando la presencia de grandes cantidades de H_2 y las altas conver- siones en la hidrodealquilación comercial, influenciarán en la na- turaleza de los compuestos aromáticos pesados que se formen.

B).— Silsby y Sawyer (5) trabajaron en dos tipos de con- diciones 1) $500 - 600^\circ K / 250 \text{ atm.}$, 2) $700 - 950^\circ K / 1 \text{ atm.}$ Obser- varon que la cinética de la descomposición de tolueno es relativa- mente simple a bajas conversiones y sin hidrógeno en exceso, si- guiendo el modelo propuesto por Szwarc; pero si es incrementada — la conversión sin hidrógeno en exceso, se producen reacciones se- cundarias tales como:



en presencia de excesos de hidrógeno (con relaciones de moles H_2 / moles de tolueno mayores de 3), las reacciones secundarias son — suprimidas casi en su totalidad. Bajo estas condiciones, la veloci- dad de la reacción principal:



puede ser representada por la ecuación cinética

$$-\frac{dC_T}{dt} = \frac{dC_B}{dt} = k C_T C_{H_2}^{1/2} \quad (3)$$

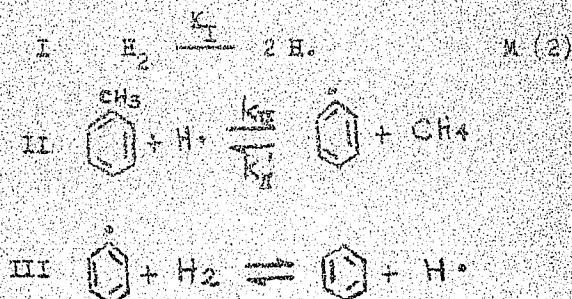
donde K está representada para todo el rango de experiencias como:

$$k = 10^{10.5 \pm 1} e^{-50 \pm 5 \times 10^3 / RT} \frac{\text{moles}}{\text{litro}}^{-1/2} \text{seg}^{-1} \quad (4)$$

y para un rango alrededor de 850° K, la K toma el valor de

$$k = 2 \times 10^{11} e^{-55000 / RT}$$

El mecanismo propuesto es el siguiente



El paso que controla es la reacción II

$$-\frac{dC_T}{dt} = k_{II} C_T C_H \cdot - k_{II}' C_B C_{H_4} \quad (6)$$

Las experiencias demostraron que la reacción reversible en el paso II, tiene poca influencia sobre los resultados. Esto está corroborado por los valores tan grandes de la constante de equilibrio (ver cuadro No, 5) por lo cual, al ser $k_{II} \gg k_{II}'$ la ecuación cinética se puede representar por:

$$-\frac{dC_T}{dt} = k_{II} C_T C_H \cdot \quad (7)$$

Al estar el paso I en equilibrio, tenemos

$$K_I = \frac{C_{H_2}^2}{C_{H_2}} \quad a(8)$$

$$C_{H_2}^2 = K_I C_{H_2} \quad a(9)$$

$$C_{H_2} = K_I^{1/2} C_{H_2}^{1/2} \quad a(10)$$

por lo cual podemos concluir

$$-\frac{dC_T}{dt} = K_{II} K_I^{1/2} C_T C_{H_2}^{1/2} \quad a(11)$$

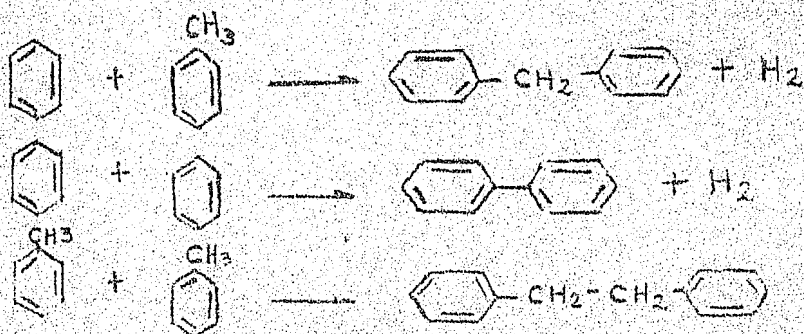
De esta ecuación observamos que el valor real de la constante de velocidad global de la reacción, es el producto de la constante de velocidad del paso II (paso que controla) por la raíz cuadrada de la constante de equilibrio de la disociación del hidrógeno.

C).- Trabajos posteriores, tales como los Matsui (6) y Tikunisa (7) coinciden en la suposición del orden de reacción igual a 1.5, aún cuando Matsui da nuevos valores a la constante de velocidad y Tokuhisa da un valor de energía de activación global de 54500 cal. (valor que se asemeja mucho al propuesto por Silsby y Szwayer) variando el factor de frecuencia.

D).- Existen otros trabajos (8,9, 10), en los cuales no se hace referencia al mecanismo de la reacción o a la ecuación cinética; pero todos ellos coinciden en hacer la hidrodealquilación de Tolueno, con relaciones molares de Hidrogeno/Tolueno de 4- aproximadamente y condiciones de operación de 100-600 libras, entre temperaturas que oscilan 600-900 °K. pulgada²

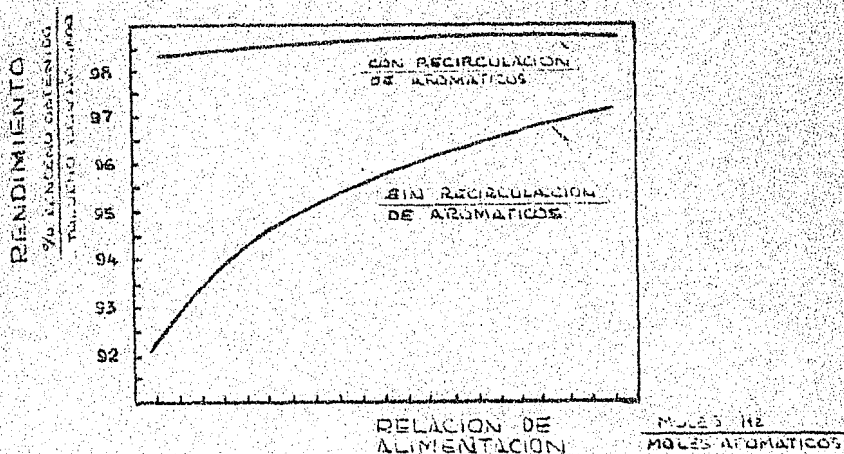
4) REACCIONES INDESEABLES:

a) Formación de aromáticos de alto punto de ebullición



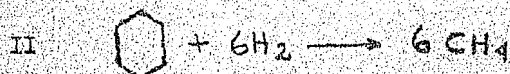
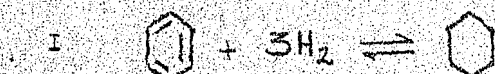
Estas reacciones han sido discutidas ya en la sección Ecuación Cinética y mecanismos de reacción (párrafos A y B) con los cuales se llegó a la conclusión, que estas reacciones se pueden eliminar casi totalmente a grandes presiones parciales de hidrógeno. Otro dato que confirma que la producción de estos aromáticos se puede eliminar al máximo, llegando a obtener rendimientos hasta de 98%; es la gráfica No.1 publicada por Feigelman (2).

GRAFICA No. 1



Es verdad que ésta gráfica no se puede tomar como un dato riguroso, pero muestra claramente el efecto tan grande que tiene la recirculación de dichos aromáticos.

B).-



Las reacciones anteriores se consideran simplemente como representativas de una clase de reacciones similares. En el cuadro No. 3 (II) se presentan datos de calores de reacción y constantes de equilibrio para estas reacciones dentro del rango de interés para hidrodealquilación.

CUADRO No. 3

Temp.	Calor de Reacción				Log de la constante de Equilibrio.			
$^{\circ}\text{K}$	700	800	900	1000	700	800	900	1000
Reacción								
I	- 52.63	- 52.70	-52.56	-52.23	-4.26	-6.32	-7.92	-9.19
II	- 85.82	- 87.75	-89.54	-91.17	25.02	21.65	18.96	16.76

Dentro de este rango la Hidrogenación de un anillo aromático a un cicloalcano como está representado por la reacción ^{#1}, el equilibrio es favorecido por bajas temperaturas y es reversible. Sin embargo la constante de equilibrio es considerablemente menor a la unidad.

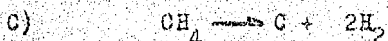
Una cantidad significativa de ciclohexano por ejemplo, podría ser formada a 700°K bajo las condiciones usuales de alta presión de hidrógeno requeridas para una hidrodealquilación efectiva, entonces podrían suceder dos cosas. Sobrevivir al reactor o sufrir un 'hidrocracking' para obtener fragmentos parafínicos ligeros como es explicado por la ecuación II.

En el primer caso la cantidad de Benceno obtenido disminuirá así como su pureza. En el último caso la reacción de hidrogenación sería guiada hacia una terminación, eliminando por medio de un hidrocracking al ciclohexano produciendo parafinas mas ligeras.

El hidrocracking de un hidrocarburo saturado procede mucho mas rápido que una hidrodealquilación aromática. En cualquier reactor en el cual ocurra una hidrogenación de aromáticos y en el cual también proporcionemos suficiente tiempo para efectuar un grado razonable de hidrodealquilación, nos encararemos con el problema de bajo rendimiento de aromáticos, alto consumo de hidrógeno y alto calor desprendido en el reactor.

La necesidad de eliminar la hidrogenación inicial de aromáticos es la principal razón de las altas temperaturas empleadas por todos los procesos comerciales incluyendo los catalíticos. Todos ellos aportan temperaturas de operación arriba de 300°K.

El uso exclusivamente de altas temperaturas podría llevar a rendimientos bajo debido a la ruptura de los anillos aromáticos, aparte de los aspectos prácticos de la construcción de la planta.



La Reacción anterior representa la descomposición de una parafina ligera a carbón e hidrógeno, lo cual es un resultado altamente indeseable.

CUADRO No. 4.

TEMP. °K	Calor de Reacción kcal/g. mol				Log de la Constante de Equilibrio			
	700	800	900	1000	700	800	900	1000
	20.40	20.82	21.17	21.43	-0.95	-0.15	0.49	1.01

En el cuadro No. 4 (11) se puede observar que las altas temperaturas favorecen el equilibrio, sin embargo para evitar este tipo de reacciones se puede trabajar a altas relaciones de $C_{H_2}^2 / C_{CH_4}$ para sobrepasar las constantes de equilibrio.

$$K = \frac{[H_2]^2}{[CH_4]}$$

5.- CALOR DE REACCION Y CONSTANTE DE EQUILIBRIO

Reacción:



CUADRO No. 5

Calor de Reacción (11)

°K	700	800	900	1000
kcal/g mol	-11.43	-11.71	-11.96	-12.18

Constante de Equilibrio (11)

°K	700	800	900	1000
Log. K	3.17	2.72	2.36	2.07

6.- CONDICIONES DE OPERACION

a).- Bethea (12) habla de una cierta facilidad para hidrodesalquilación térmica de tolueno a 923 - 973 °K y de 15 - 40 atm. con una relación de 4 moles de hidrógeno por mol de tolueno alimentado

b).- Asselín (11) considera como condiciones tipo para este proceso, temperaturas entre 873-1073 °K, presiones de hidrógeno de 18 atmósferas y 3 atmósferas como presión de tolueno.

7.- CONCLUSIONES

a).- Ecuación Cinética

$$-\frac{dC_T}{dt} = KC_T C_{H_2}^{1/2}$$

donde el valor de k, será propuesto por Silbsby y Sawyer (5)

$$k = 2 \times 10^{11} e^{-\frac{55000}{RT}} \frac{\text{moles}}{\text{litro}}^{-1/2} \text{seg}^{-1}$$

b).- Por la cantidad de trabajos en los cuales se utilizó la relación de 4 moles de hidrógeno/mol de tolueno, se consideró esta relación como la óptima para evitar la formación de aromáticos superiores, Otra medida que se debe tomar también es la de recircular de la torre de Separación de Benceno y Tolueno al reactor, los aromáticos superiores obtenidos.

c).- Para evitar la hidrogenación de nucleos aromáticos se debe trabajar arriba de 750 °K.

C A L C U L O S E N L A S E C C I O N D E S I N T E S I S

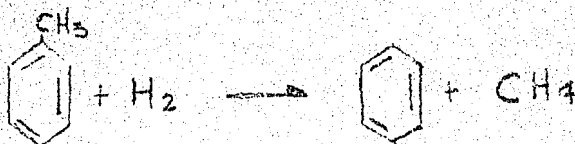
1).- METODO SEGUIDO.

En primer término, se hicieron cálculos para reactores tipo isotérmicos y adiabático, variando las condiciones de operación con el fin de establecer el tipo de reactor más apropiado y las condiciones aproximadas de operación. Se observó que el reactor tipo adiabático necesitaba para un cierto grado de conversión, volúmenes menores que aquellos necesitados por un reactor tipo isotérmico; presentando también el grave inconveniente de que la temperatura subía a niveles no deseables; por lo cual, posteriormente, se hicieron cálculos para un reactor tipo programado y, por último, se calcularon varios calentadores para establecer cuál de ellos cumplía con las condiciones deseadas.

2).- CONSIDERACIONES PARA EL CALCULO.

Los cálculos se efectuaron para una alimentación de tolueno igual a $235042 \pm 30\%$ g mol/hora, 940168 g mol H_2 /hora, (relación inicial de 4 g mol H_2 /g mol tolueno) y se tomó un valor de $18,078$ g mol de benceno /hora como un valor esperado de recirculación. Se supuso que la cantidad de aromáticos pesados que circulará junto con benceno y tolueno de la torre de destilación al reactor es tan pequeña que, si esta cantidad se considera dentro de la recirculación de benceno, no influirá en los resultados.

3).- BALANCE DE MATERIAL



n_{T0} = moles de tolueno, alimentadas

$n_{H_2}^0$ = moles de hidrogeno, alimentadas

n_{B0} = moles de benceno, alimentadas

X = $\frac{\text{moles de tolueno reaccionado}}{\text{moles de tolueno alimentado}}$

$$n_T = n_T^0 (1-X) \quad e (12)$$

$$n_B = n_B^0 + n_T^0 X \quad e (13)$$

$$n_{H_2} = n_{H_2}^0 - n_T^0 X \quad e (14)$$

$$n_M = n_T^0 X \quad e (15)$$

$$n_{Total} = n_T^0 + n_{H_2}^0 + n_B^0 \quad e (16)$$

Fracciones mol:

$$N_T = \frac{n_T^0 (1-X)}{n_{Total}} \quad e (17)$$

$$N_{H_2} = \frac{n_{H_2}^0 - n_T^0 (X)}{n_{Total}} \quad e (18)$$

$$N_B = \frac{n_B^0 + n_T^0 X}{n_{Total}} \quad e (19)$$

$$N_M = \frac{n_T^0 X}{n_{Total}} \quad e (20)$$

4).- CONVERSIONES EN EL EQUILIBRIO

A) Constante de Equilibrio

Del cuadro # 5 obtenemos los siguientes valores:

T °K	700	800	900	1000
log K	3.17	2.72	2.36	2.07
ln K	7.291	6.252	5.428	4.761

B) Ecuación para la constante de equilibrio

$$Y = \ln K \quad X = \frac{1}{T}$$

$$Y = m x + b$$

$$Y = 7.291 \quad 6.252 \quad 5.428 \quad 4.761$$

$$\frac{1}{T} \times 10^2 = X \times 10^2 = .143 \quad .125 \quad .111 \quad .1$$

$$m = \frac{Y_2 - Y_1}{X_2 - X_1}$$

$$X_1 = .001 \quad Y_1 = 4.761$$

$$X_2 = .00143 \quad Y_2 = 7.291$$

$$m = \frac{7.291 - 4.761}{.00143 - .001} = \frac{2.53}{.00043} \times 10^{-3} = 5.883 \times 10^3$$

$$Y = 5.883 \times 10^3 X + b$$

$$Y = 7.291$$

$$X = .00143$$

$$7.291 = 5.883 \times 10^3 \times 1.43 \times 10^{-3} + b$$

$$7.291 = 5.883 \times 1.43 + b$$

$$b = 7.291 - 8.412 = -1.121$$

$$Y = 5.883 \times 10^3 X - 1.121 \quad \text{e (21)}$$

$$Y = \ln K$$

$$X = \frac{1}{T} \quad T = ^\circ K$$

C) RESOLUCION DE ECUACIONES

$$K = \frac{C_B}{C_T} \frac{C_M}{C_{H_2}}$$

Del balance de material se obtiene

$$n_T = n_{T^0} (1-X)$$

$$n_B = n_{B^0} + n_{T^0} X$$

$$n_{H_2} = n_{H_2^0} - n_{T^0} X$$

$$n_M = n_{T^0} X$$

$$n_{Total} = n_{T^0} + n_{B^0} + n_{H_2^0}$$

$$C_T = \frac{n_T}{V} = \frac{p_T}{ZRT} \quad p_T = N_T \overline{\Pi}$$

$$C_T = \frac{n_{T^0} (1-X)}{n_{Total}} \frac{\overline{\Pi}}{Z_T RT} \quad \text{e (22)}$$

$$C_B = \frac{n_{B^0} + n_{T^0} X}{n_{Total}} \frac{\overline{\Pi}}{Z_B RT} \quad \text{e (23)}$$

$$C_{H_2} = \frac{n_{H_2}^0 - n_{H_2}^0 X}{n_{Total}} \frac{\pi}{Z_{H_2} RT} \quad (24)$$

$$C_M = \frac{n_T^0 X}{n_{Total}} \frac{\pi}{Z_M RT} \quad (25)$$

$$K = \frac{\left(\frac{n_B^0 + n_T^0 X}{Z_B} \right) \left(\frac{n_T^0 X}{Z_M} \right)}{\left(\frac{n_T^0 (1-X)}{Z_T} \right) \left(\frac{n_{H_2}^0 - n_T^0 X}{Z_{H_2}} \right)} \quad (26)$$

$$X = \frac{\left(n_B^0 + n_T^0 X \right) n_T^0 X}{\left(n_T^0 (1-X) \right) \left(n_{H_2}^0 - n_T^0 X \right)} \frac{Z_M Z_{H_2}}{Z_B Z_T}$$

$$K' = \frac{K}{K'} = \frac{(n_B^0 + n_T^0 X) n_T^0 X}{[n_T^0 (1-X)] [n_{H_2}^0 - n_T^0 X]}$$

$$K'' = \frac{n_B^0 n_T^0 X + n_T^0^2 X^2}{n_T^0 n_{H_2}^0 - n_T^0^2 X - n_T^0 n_{H_2}^0 X + n_T^0^2 X^2}$$

$$A = n_B^0 n_T^0$$

$$B = n_T^0^2$$

$$C = n_T^0 n_{H_2}^0$$

$$K'' = \frac{Ax + Bx^2}{C - Bx - Cx + Bx^2}$$

$$K'' = \frac{Ax + Bx^2}{C - (B+C)x + Bx^2}$$

$$K'' C - K'' (B+C)x + K'' Bx^2 = Ax + Bx^2$$

$$(K'' B - B) X^2 - (A + K'' (B + C)) X + K'' C = 0$$

$$a = (K'' B - B)$$

$$a = K'' n_T^{\circ 2} - n_T^{\circ 2}$$

$$a = n_T^{\circ 2} (K'' - 1) \quad e (27)$$

$$b = -(n_B^{\circ} n_T^{\circ} + K'' (n_T^{\circ 2} + n_{H_2}^{\circ} n_T^{\circ})) \quad e (28)$$

$$c = K'' n_T^{\circ} n_{H_2}^{\circ} \quad e (29)$$

$$X = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad e (30)$$

D) EJEMPLO DE SOLUCION NUMERICA

Alimentación:

$$n_T^{\circ} = 233,042 \text{ g mol}^{-1}$$

$$n_B^{\circ} = 10,005$$

$$n_{H_2}^{\circ} = 140,158$$

Condiciones de Operación:

$$T = 950 \text{ K}$$

$$P = 40.0 \text{ atm.}$$

Solución:

En la ecuación n.º 21 se sustituye el valor de la temperatura para encontrar el valor de la constante de equilibrio (K).

$$X = \frac{1}{T}$$

$$T = 950$$

$$\therefore X \frac{1}{950} = .001052$$

$$\ln K = 5.883 \times 10^{-3} + 1.052 \times 10^{-3} = 1.121$$

$$\ln K = 5.1889 - 1.121 = 5.0679$$

$$K = 159.43$$

Calculo de K

Tolueno:

$$PR = \frac{40.0}{41.5} = .963$$

$$TR = \frac{950}{594} = 1.6$$

$$ZT = .9256$$

Benceno

$$PR = \frac{40.0}{48.6} = .824$$

$$TR = \frac{950}{562.1} = 1.69$$

$$ZB = .949$$

Hidrógeno

$$PR = \frac{40.0}{12.8} = 3.12$$

$$TR = \frac{950}{33.3} = 28.58$$

$$Z_{H_2} = 1.025$$

Metano:

$$PR = \frac{40.0}{45.8} = .875$$

$$TR = \frac{950}{190.7} = 4.97$$

$$Z_M = 1.006$$

$$K' = \frac{.9256 \times 1.025}{1.006 \times .949} = .994$$

$$\therefore K'' = \frac{159.43}{.994} = 160.44$$

Cálculo de la conversión:

Sustituyendo los valores de la alimentación, en las ecuaciones 27, 28 y 29 se obtiene:

$$a = 235042^2 (160.44 - 1) = 880.827 \times 10^{10}$$

$$b = -(18078 \times 235042 + 160.44 (235042^2 + 235042 \times 940168)) = -443.218 \times 10^{11}$$

$$c = 160.44 \times 235042 \times 940168 = 354.54 \times 10^{11}$$

$$\lambda = \frac{+ 443.218 \times 10^{11} \pm \sqrt{443.218^2 \times 10^{22} - 4 \times 880.827 \times 10^{10} \times 354.540 \times 10^{11}}}{2 \times 880.827 \times 10^{10}}$$

$$X = \frac{+ 443.218 \times 10^{11} \pm \sqrt{7.15268 \times 10^{26}}}{1761.654 \times 10^{10}}$$

1a raíz

$$x = \frac{4432.18 \times 10^{10} + 2674 \times 10^{10}}{1761.654 \times 10^{10}}$$

$$x = \frac{7106.18}{1761.654} = 4.034$$

2a raíz

$$x_2 = \frac{4432.18 \times 10^{10} - 2674 \times 10^{10}}{1761.654 \times 10^{10}}$$

$$x_2 = \frac{1758.18}{1761.65} = .997$$

Conversión = .997

E) RESULTADOS

Alimentación

$$E - \frac{4}{7}) \quad n_T^o = 235042 \text{ g mol}$$

$$n_B^o = 18078 \quad "$$

$$n_{H_2}^o = 940168 \quad "$$

TEMPERATURA °K	PRESSION Atmosferas	$K'' = \frac{K}{K'}$	CONVERSION
800.0	30.0	519.78	.99931
800.0	40.0	523.64	.99931
800.0	50.0	526.92	.99931
800.0	60.0	528.71	.99931
800.0	70.0	529.81	.99931
850.0	30.0	334.63	.99893
850.0	40.0	335.57	.99893
850.0	50.0	336.70	.99893
850.0	60.0	337.03	.99893
850.0	70.0	336.83	.99893
900.0	30.0	226.89	.99842
900.0	40.0	227.49	.99842
900.0	50.0	227.44	.99842
900.0	60.0	226.80	.99842
900.0	70.0	225.94	.99842
950.0	30.0	160.30	.99777
950.0	40.0	160.40	.99777
950.0	50.0	160.28	.99777
950.0	60.0	159.88	.99776
950.0	70.0	159.15	.99775
1000.0	30.0	117.12	.99695
1000.0	40.0	117.04	.99695
1000.0	50.0	116.78	.99694
1000.0	60.0	116.33	.99693
1000.0	70.0	115.76	.99692

E -2)

$$n_T^{\circ} = 235\ 042 \text{ g mol}$$

$$n_B^{\circ} = 50\ 000 \text{ "}$$

$$n_{H_2}^{\circ} = 940\ 168 \text{ "}$$

TEMPERATURA °K	PRESION atmosferas	$K^m = \frac{K}{K^0}$	CONVERSION
800.0	30.0	519.78	.99922
800.0	40.0	523.64	.99922
800.0	50.0	526.92	.99922
800.0	60.0	528.71	.99923
800.0	70.0	529.51	.99923
850.0	30.0	534.53	.99877
850.0	40.0	535.37	.99879
850.0	50.0	536.70	.99880
850.0	60.0	537.53	.99881
850.0	70.0	538.65	.99882
900.0	30.0	526.87	.99822
900.0	40.0	527.49	.99823
900.0	50.0	527.44	.99823
900.0	60.0	526.80	.99822
900.0	70.0	525.94	.99821
950.0	30.0	560.30	.99749
950.0	40.0	560.44	.99749
950.0	50.0	560.28	.99749
950.0	60.0	559.38	.99748
950.0	70.0	559.15	.99747
1000.0	30.0	517.12	.99657
1000.0	40.0	517.04	.99657
1000.0	50.0	516.78	.99656
1000.0	60.0	515.33	.99655
1000.0	70.0	515.76	.99653
1050.0	30.0	538.15	.99544
1050.0	40.0	538.05	.99544
1050.0	50.0	537.72	.99543
1050.0	60.0	537.27	.99541
1050.0	70.0	536.73	.99538

E -3)

$$\begin{aligned} n_T^{\circ} &= 235\,042 \text{ g} \cdot \text{mol} \\ n_B^{\circ} &= 18\,078 \text{ " } \\ n_{H_2}^{\circ} &= 1200\,000 \text{ " } \end{aligned}$$

TEMPERATURA °K	PRESION atmosferas	$K'' = \frac{K}{K'}$	CONVERSION
950.0	30.0	160.30	.99839
950.0	40.0	160.44	.99840
950.0	50.0	160.28	.99841
950.0	60.0	159.88	.99842
950.0	70.0	159.15	.99843
1000.0	30.0	117.12	.99780
1000.0	40.0	117.04	.99781
1000.0	50.0	116.78	.99782
1000.0	60.0	116.33	.99783
1000.0	70.0	115.76	.99784
1050.0	30.0	88.15	.99708
1050.0	40.0	88.03	.99710
1050.0	50.0	87.72	.99710
1050.0	60.0	87.27	.99711
1050.0	70.0	86.73	.99713

5) CALCULO DE EL REACTOR ISOTERMICO

A) Ecuación cinética (ecuaciones 1y5)

$$-\frac{dC_T}{dt} = k C_T C_{H_2}^{1/2}$$

$$k = 2 \times 10^{11} e^{-\frac{55000}{RT}} \frac{\text{moles}}{\text{litro}} \text{seg}^{-1} \quad -1/2$$

$$k = 3600 \times 2 \times 10^{11} e^{-\frac{55000}{RT}} \frac{\text{moles}}{\text{litro}} \text{hora}^{-1} \quad -1/2$$

B) Resolución de ecuaciones

De las ecuaciones 22 y 24 obtenemos

$$C_T = \frac{n_T^0 (1-x)}{n_{\text{Total}}} \frac{\pi}{Z_T RT}$$

$$C_{H_2} = \frac{n_{H_2}^0 - n_T^0 x}{n_{\text{Total}}} \frac{\pi}{Z_{H_2} RT}$$

$$-\frac{dC_T}{dt} = \frac{n_T^0}{n_{\text{Total}}} \frac{\pi}{Z_T RT} \frac{dx}{dt}$$

$$-\frac{dC_T}{dt} = \frac{n_T^0}{n_{\text{Total}}} \frac{\pi}{Z_T RT} \frac{dx}{dt} = k \left(\frac{n_T^0 (1-x)}{n_{\text{Total}} Z_T} \right) \left(\frac{n_{H_2}^0 - n_T^0 x}{n_{\text{Total}} Z_{H_2}} \right) \left(\frac{\pi}{RT} \right)^{1.5}$$

$$A = \frac{n_T^0}{n_{\text{Total}}} \frac{\pi}{Z_T RT}$$

$$B = \frac{n_T^0}{n_{\text{Total}} Z_T}$$

$$C = \frac{n_{H_2}^0}{n_{\text{Total}} Z_{H_2}}$$

$$C' = \frac{n_T^0}{n_{\text{Total}} Z_{H_2}}$$

$$D = \left(\frac{\eta}{RT} \right)^{1.5}$$

$$A \frac{dx}{dt} = k_B (1-x) (C-C'x)^{0.5} D$$

$$\frac{dx}{(1-x) (C-C'x)^{0.5}} = \frac{k_B D}{A} dt$$

$$dI = \frac{dx}{(1-x) (C-C'x)^{0.5}}$$

$$dI = \frac{dx}{(C-C'x)^{1/2} - x (C-C'x)^{1/2}}$$

$$U = C - C'x ; x = \frac{C-U}{C'}$$

$$\therefore dx = - \frac{1}{C'} dU$$

$$dI = - \frac{1}{C'} \frac{dU}{U^{1/2} - \frac{C-U}{C'} U^{1/2}}$$

$$dI = \frac{dU}{(C-U) U^{1/2} - C' U^{1/2}}$$

$$dI = \frac{dU}{(C-C') U^{1/2} - U^{3/2}}$$

$$E = C - C'$$

$$dI = \frac{dU}{E U^{1/2} - U^{3/2}}$$

$$Y = U^{1/2} ; U = Y^2 ; U^{3/2} = Y^3$$

$$\therefore dU = 2Y dY$$

$$dI = \frac{2 Y dY}{E Y - Y^3}$$

$$dI = \frac{2 dY}{E - Y^2} = - 2 \frac{dY}{Y^2 - E}$$

$$\int dI = -2 \int \frac{dY}{Y^2 - E} = I$$

$$I = -2 \frac{1}{2\sqrt{E}} \ln \frac{Y - \sqrt{E}}{Y + \sqrt{E}} + C$$

$$I = \frac{1}{\sqrt{E}} \ln \frac{Y + \sqrt{E}}{Y - \sqrt{E}} + C$$

$$I_x - I_0 = \left[\frac{1}{\sqrt{C - C'}} \ln \frac{(C - C'x)^{1/2} + (C - C')^{1/2}}{(C - C'x)^{1/2} - (C - C')^{1/2}} \right]_{x=0}^x$$

$$I_x - I_0 = \frac{1}{\sqrt{C - C'}} \ln \frac{\sqrt{C - C'}x + \sqrt{C - C'}}{\sqrt{C - C'}x - \sqrt{C - C'}} - \frac{1}{\sqrt{C - C'}} \ln \frac{\sqrt{C} + \sqrt{C - C'}}{\sqrt{C} - \sqrt{C - C'}}$$

$$I_x - I_0 = \frac{KBD}{A} \int dx$$

$$\frac{KBD}{A} x = \frac{1}{\sqrt{C - C'}} \ln \left[\frac{\sqrt{C - C'}x + \sqrt{C - C'}}{\sqrt{C - C'}x - \sqrt{C - C'}} \frac{\sqrt{C} - \sqrt{C - C'}}{\sqrt{C} + \sqrt{C - C'}} \right] \quad (31)$$

$$x = \frac{A}{KBD\sqrt{C - C'}} \ln \left[\frac{\sqrt{C - C'}x + \sqrt{C - C'}}{\sqrt{C - C'}x - \sqrt{C - C'}} \frac{\sqrt{C} - \sqrt{C - C'}}{\sqrt{C} + \sqrt{C - C'}} \right] \quad (32)$$

C) EJEMPLO DE SOLUCION NUMERICA

Alimentación $n_T^0 = 235.042 \text{ g mol/hr.}$

$n_B^0 = 18.078 \text{ "}$

$n_{H_2}^0 = 940.168 \text{ "}$

Condiciones de Operación

$T = 867.16 \text{ }^\circ\text{K}$ $P = 44.2 \text{ atm.}$

Resolución:

$n_{Total} = 1.193288 \text{ g mol/hr}$

Cálculo Z_T

$pr = \frac{44.2}{41.6} = 1.062$

$TR = \frac{867.16}{594.0} = 1.46$

$Z_{T0} = .8858$

Cálculo Z_{H_2}

$$PR = \frac{44.8}{12.8} = 3.453 \quad TR = \frac{867.16}{33.3} = 26.04$$

$$Z_{H_2} = 1.02$$

Cálculo k

$$k = 3600 \times 2 \times 10^{11} e^{-\frac{55000}{RT}}$$

$$RT = 1.987 \times 867.16 = 1723.04$$

$$\frac{55000}{RT} = \frac{55000}{1723.04} = 31.9$$

$$e^{31.9} = 71.5 \times 10^{12}$$

$$k = \frac{3600 \times 2 \times 10^{11}}{71.5 \times 10^{12}}$$

$$k = \frac{720 \times 10^{12}}{71.5 \times 10^{12}}$$

$$k = 10.1$$

$$A = \frac{235042 \times 44.2}{1193288 \times .8858 \times .082 \times 867.16} = .1382$$

$$B = \frac{235042}{1193288 \times .8858} = .2221$$

$$C = \frac{940168}{1193288 \times 1.02} = .773$$

$$D = \left(\frac{44.2}{0.082 \times 867.16} \right)^{1.5} = .59$$

$$C' = \frac{235042}{1193288} = .193$$

∴ Sustituyendo en la ecuación 32 tenemos:

$$t = \frac{.1382}{10.1 \times .2221 \times .703 \times \sqrt{.773 - .193}} \ln \frac{\sqrt{.773 - .193} + \sqrt{.773 - .193}}{\sqrt{.773 - .193} - \sqrt{.773 - .193}}$$

$$\frac{\sqrt{.773} - \sqrt{.773 - .193}}{\sqrt{.773} + \sqrt{.773 - .193}}$$

$$t = \frac{.1382}{10.1 \times .2221 \times .59 \times .7615} \ln \left| \frac{\sqrt{.773 - .193x} + .7615}{\sqrt{.773 - .193x} - .7615} \cdot \frac{.877 - .7615}{.877 + .7615} \right|$$

para $x = 0.1$

$$t = \frac{.1382}{10.1 \times .2221 \times .59 \times .7615} \ln \left| \frac{\sqrt{.773 - .193 \cdot .1} + .7615}{\sqrt{.773 - .193 \cdot .1} - .7615} \cdot \frac{.877 - .7615}{.877 + .7615} \right|$$

$$t = 0.015 \text{ horas.}$$

Cálculo del volumen necesario para una conversión = .1

Base = 1 hora

alimentación 1 193 288 $\frac{\text{g mol}}{\text{hora}}$

Volumen por gramo-mol a 44.2 atm. y 867.16 °K

$$V = \frac{RT}{P}$$

$$V = \frac{0.082 \times 867.16}{44.2}$$

$$V = 1.6 \text{ litros/g. mol.}$$

$$\text{Volumen alimentado} = 1.6 \frac{\text{litros}}{\text{g mol}} \times 1193 \text{ 288 } \frac{\text{g mol}}{\text{hora}} = 1 \text{ 909 260 } \frac{\text{litros}}{\text{hora}}$$

El volumen necesario para una conversión de .1 es igual a:

$$V = 1909260 \frac{\text{litros}}{\text{horas}} \times 0.015 = 28 \text{ 638.9 litros}$$

D) RESULTADOS

D-1) Para una alimentación de:

$$n_{T^{\circ}} = 235 \text{ 043 g mol/hora}$$

$$n_{B^{\circ}} = 18 \text{ 378 "}$$

$$n_{H_2^{\circ}} = 940 \text{ 168 "}$$

ver cuadro No. 6

D-2) Para una alimentación de:

$$n_T^o = 235043 \text{ g mol/hora}$$

$$n_B^o = 50 \text{ "}$$

$$n_{H_2}^o = 940168 \text{ "}$$

ver cuadro No. 7

D-3) Para una alimentación de:

$$n_T^o = 235043 \text{ g mol/hora}$$

$$n_B^o = 18078 \text{ "}$$

$$n_{H_2}^o = 1100000 \text{ "}$$

ver cuadro No. 8

CUADRO No. 6

TIEMPO (HORAS)

CONVERSION	PRESION = 30.0 atm			PRESION = 44.2 atm.			PRESION = 50.0 atm		
	Temperatura °K			Temperatura °K			Temperatura °K		
	867.16	967.16	1067.16	867.16	967.16	1067.16	867.16	967.16	1067.16
.05	.009	.000	.000	.008	.000	.000	.007	.000	.000
.10	.019	.001	.000	.015	.001	.000	.015	.001	.000
.15	.029	.001	.00	.024	.001	.000	.023	.001	.000
.20	.040	.002	.000	.033	.001	.000	.031	.001	.000
.25	.052	.002	.000	.043	.002	.000	.040	.002	.000
.30	.065	.003	.000	.053	.002	.000	.050	.002	.000
.35	.078	.003	.000	.064	.003	.000	.061	.002	.000
.40	.093	.004	.000	.077	.003	.000	.072	.003	.000
.45	.110	.004	.000	.090	.004	.000	.085	.003	.000
.50	.128	.005	.000	.105	.004	.000	.099	.004	.000
.55	.148	.006	.000	.122	.005	.000	.114	.004	.000
.60	.170	.007	.000	.140	.005	.000	.132	.005	.000
.65	.196	.008	.001	.161	.006	.000	.152	.006	.000
.70	.226	.009	.001	.186	.007	.001	.175	.007	.000
.75	.262	.010	.001	.216	.008	.001	.203	.008	.001
.80	.306	.012	.001	.252	.010	.001	.237	.009	.001
.85	.363	.014	.001	.299	.012	.001	.281	.011	.001
.90	.444	.017	.001	.366	.014	.001	.344	.013	.001
.95	.585	.023	.002	.482	.019	.001	.453	.018	.001
1.00	2.812	.109	.008	2.317	.090	.006	2.178	.085	.006

TIEMPO (HORAS)

CONVERSION	PRESION = 30 atm.			PRESION = 44.2 atm.			PRESION = 50 atm.		
	Temperatura °K			Temperatura °K			Temperatura °K		
	867.16	967.16	1067.16	867.16	967.16	1067.16	867.16	967.16	1067.16
.05	.009	.000	.000	.007	.000	.000	.007	.000	.000
.10	.019	.001	.000	.015	.001	.000	.014	.001	.000
.15	.029	.001	.000	.024	.001	.000	.022	.001	.000
.20	.040	.002	.000	.033	.001	.000	.031	.001	.000
.25	.051	.002	.000	.042	.002	.000	.040	.002	.000
.30	.064	.002	.000	.053	.002	.000	.050	.002	.000
.35	.078	.003	.000	.064	.002	.000	.060	.002	.000
.40	.092	.004	.000	.076	.003	.000	.072	.003	.000
.45	.109	.004	.000	.090	.003	.000	.084	.003	.000
.50	.127	.005	.000	.104	.004	.000	.098	.004	.000
.55	.146	.006	.000	.121	.005	.000	.113	.004	.000
.60	.169	.007	.000	.139	.005	.000	.131	.005	.000
.65	.194	.008	.001	.160	.006	.000	.151	.006	.000
.70	.224	.009	.001	.185	.007	.000	.174	.007	.000
.75	.260	.010	.001	.214	.008	.001	.201	.008	.001
.80	.303	.012	.001	.250	.010	.001	.235	.009	.001
.85	.360	.014	.001	.297	.012	.001	.279	.011	.001
.90	.441	.017	.001	.363	.014	.001	.342	.013	.001
.95	.580	.023	.002	.478	.019	.001	.450	.018	.001
1.00	2.792	.109	.008	2.309	.090	.006	2.163	.084	.006

CUADRO No. 8

TIEMPO (HORAS)

CONVERSION	PRESION = 30 atm.			PRESION = 44.2 atm.			PRESION = 50 atm.		
	Temperatura °K			Temperatura °K			Temperatura °K		
	867.16	967.16	1067.16	867.16	967.16	1067.16	867.16	967.16	1067.16
.05	.009	.000	.000	.007	.000	.000	.007	.000	.000
.10	.018	.001	.000	.015	.001	.000	.014	.001	.000
.15	.029	.001	.000	.024	.001	.000	.022	.001	.000
.20	.039	.002	.000	.032	.001	.000	.031	.001	.000
.25	.051	.002	.000	.042	.002	.000	.039	.002	.000
.30	.063	.002	.000	.052	.002	.000	.049	.002	.000
.35	.077	.003	.000	.063	.002	.000	.059	.002	.000
.40	.091	.004	.000	.075	.003	.000	.071	.003	.000
.45	.107	.004	.000	.088	.003	.000	.083	.003	.000
.50	.125	.005	.000	.103	.004	.000	.097	.004	.000
.55	.144	.006	.000	.119	.005	.000	.112	.004	.000
.60	.166	.006	.000	.137	.005	.000	.129	.005	.000
.65	.191	.007	.001	.158	.006	.000	.148	.006	.000
.70	.221	.009	.001	.182	.007	.001	.171	.007	.000
.75	.255	.010	.001	.210	.008	.001	.198	.008	.001
.80	.298	.012	.001	.245	.010	.001	.231	.009	.001
.85	.353	.014	.001	.291	.011	.001	.274	.011	.001
.90	.432	.017	.001	.356	.014	.001	.334	.013	.001
.95	.567	.022	.002	.467	.018	.001	.439	.017	.001
1.00	2.676	.104	.007	2.205	.086	.006	2.073	.081	.006

D-4) El volumen necesario para obtener una conversión de 95% a diferentes condiciones, se puede observar en el cuadro siguiente y en las gráficas Nos. 2, 3 y 4.

CUADRO No. 9
Volumen (Litros)
Conversión = .95

A L I M E N T A C I O N

TEMPERATURAS °K	1 PRESION (atm)			2 PRESION (atm)		
	30.0	44.2	50.0	30.0	44.2	50.0
867.16	1660000	925000	770000	1623000	900000	750000
967.16	72400	40600	34200	71500	38500	33410
1067.16	6960	2362	2090	6860	2325	2049

A L I M E N T A C I O N

TEMPERATURAS °K	3 PRESION (atm)		
	30.0	44.2	50.0
867.16	1820000	1060000	844000
967.16	78700	43600	36400
1067.16	7900	2680	2368

Alimentación:

- 1) $n_T^o = 235042$ g- mol/hora
- $n_B^o = 18078$ "
- $n_{H_2}^o = 940168$ "
- 2) $n_T^o = 235043$
- $n_B^o = 50$
- $n_{H_2}^o = 940168$

GRAFICA No 2

Varianza (LITROS)

TEMPERATURA = 367.16 °K

COMPRESION = .95

1700000

1700000

1500000

1300000

1100000

900000

700000

300

400

500

PRESTION (ATM)

1.0 (max. h. (5))

1.0 (max. h. (6))

1.0 (max. h. (7))

(2)

SEALICA No. 3

TEMPERATURE = 90.716 °K

CONCENTRATION = 1.9%

VOLUME (LITERS)

10000

8000

6000

4000

2000

300

400

500

PRESSURE (ATM)

abnormal (3)

abnormal (1)

abnormal (2)

GRAFICA No 5/1

VOLUMEN (LITROS)

TEMPERATURA $\pm 10 \pm 16^\circ \text{C}$

CONVERSION ± 95

8000

7000

6000

5000

4000

3000

2000

solubilidad (g)

solubilidad (g)

solubilidad (g)

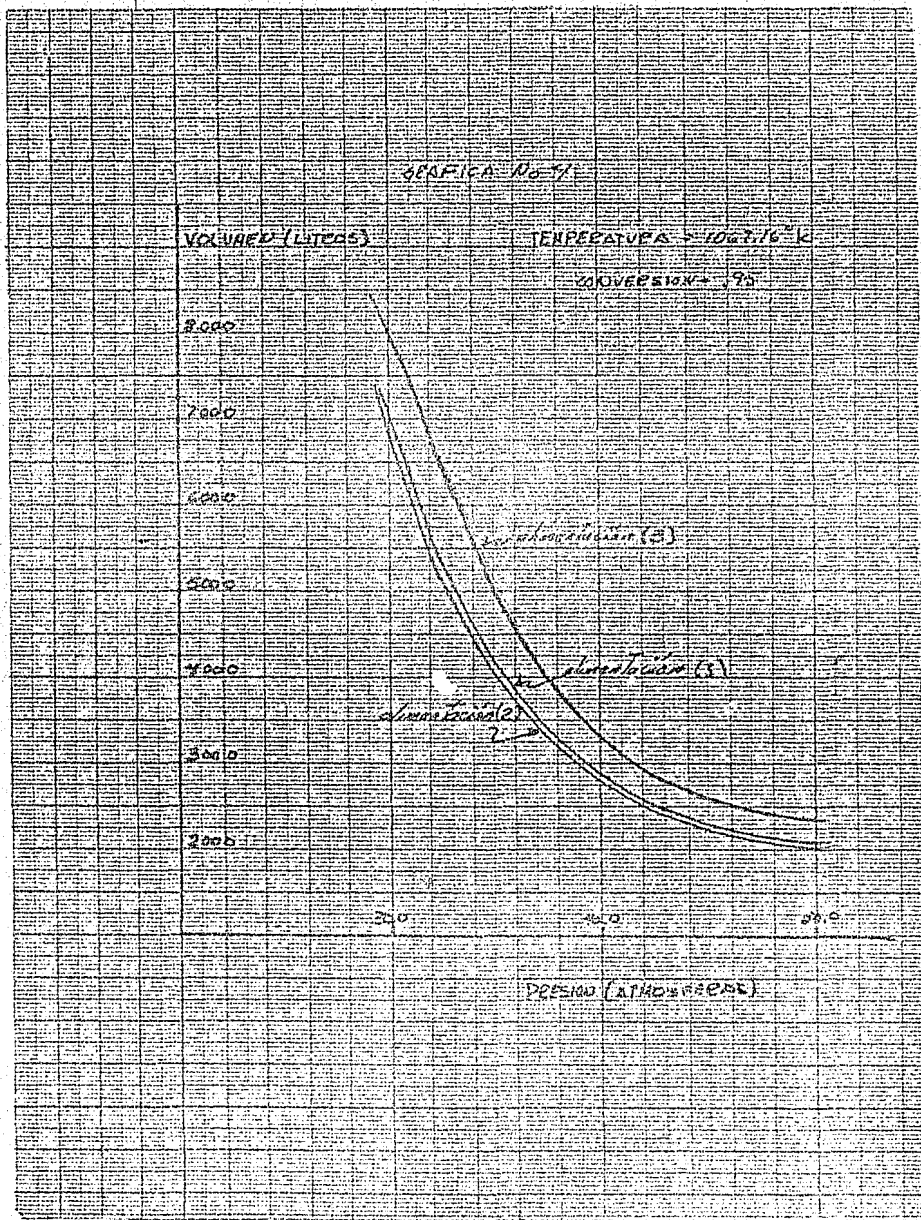
2.2

20

40

60

PRESION (ATMOSFERAS)



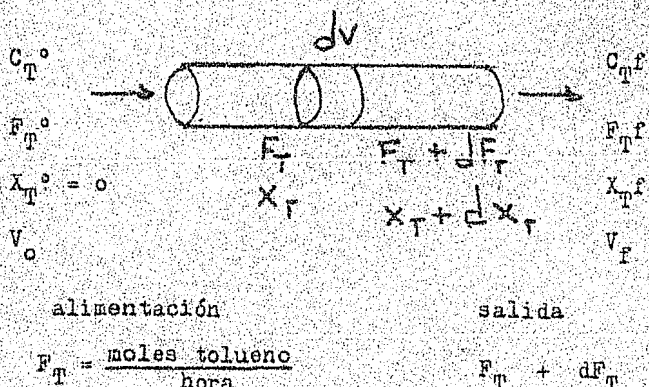
$$3) n_{T^{\circ}} = 235043$$

$$n_{B^{\circ}} = 18078$$

$$n_{H_2^{\circ}} = 1100000$$

6) CALCULO DE EL REACTOR ADIABATICO

A) Ecuación de Diseño



$$\text{Desaparición de Tolueno} = (V_T) (dV) = \left(\frac{\text{moles de Tolueno reaccionado}}{\text{hora litro}} \right) \left(\begin{array}{c} \text{volumen} \\ \text{del} \\ \text{Fluido} \end{array} \right)$$

$$F_T = (F_T + dF_T) + (V_T) dV$$

$$dF_T = d[F_T^o (1 - x_T)] = -F_T^o dx$$

$$dx_T F_T^o = (V_T) dV$$

$$d\left(\frac{V}{F_T^o}\right) = \frac{dx_T}{V_T}$$

$$\frac{dx_T}{d\left(\frac{V}{F_T^o}\right)} = k_{CT} C_{H_2}^{1/2}$$

$$C_T = \frac{n_T^o (1-x)}{n_{Total}} \frac{\pi}{Z_T RT}$$

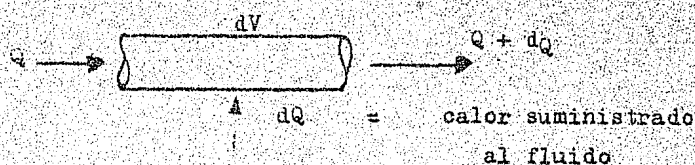
$$C_{H_2} = \frac{n_{H_2}^o - n_T^o x}{n_{Total}} \frac{\pi}{Z_{H_2} RT}$$

$$\frac{dx_T}{dV} = \frac{k}{F_T^o R^{1.5}} \left(\frac{\pi}{T} \right)^{1.5} \left(\frac{n_T^o (1-x)}{n_{Total} Z_T} \right) \left(\frac{n_{H_2}^o - n_T^o x}{n_{Total} Z_{H_2}} \right)^{1/2} \quad e(33)$$

$$dV = V dL$$

$$V = \frac{\text{Volumen litros}}{\text{unidad de longitud}}$$

B) BALANCE DE CALOR



$$\text{Calor Suministrado} = \text{Calor Salida} - \text{Calor Entrada}$$

$$(Q + dQ) - Q = dQ$$

		dV	
T ,	Q		Q + dQ , T + dT
		dQ	

Entrada:

$$n_T = n_T^o (1-x)$$

$$n_B = n_B^o + n_T^o x$$

$$n_{H_2} = n_{H_2}^o - n_T^o x$$

$$n_M = n_T^o x$$

Salida:

$$n_T = n_T^o [1 - (x+dx)]$$

$$n_B = n_B^o + n_T^o (x+dx)$$

$$n_{H_2} = n_{H_2}^o - n_T^o (x+dx)$$

$$n_M = n_T^o (x+dx)$$

Calor de Entrada

$$Q_E = \left[n_T^o (1-x) C_{P_T}^- + (n_B^o + n_T^o x) C_{P_B}^- + (n_{H_2}^o - n_T^o x) C_{P_{H_2}}^- + (n_T^o x) C_{P_M}^- \right] (T - T_b)$$

Calor de Salida

$$Q + dQ = \left[n_T^o [1 - (x+dx)] C_{P_T}^- + [n_B^o + n_T^o (x+dx)] C_{P_B}^- + [n_{H_2}^o - n_T^o (x+dx)] C_{P_{H_2}}^- + [n_T^o (x+dx)] C_{P_M}^- \right] (T+dT - T_b)$$

Rearreglando la ecuación tenemos:

$$Q + dQ = \left\{ \left[n_T^o (1-x) \right] C_{P_T}^- + (n_B^o + n_T^o x) C_{P_B}^- + (n_{H_2}^o - n_T^o x) C_{P_{H_2}}^- + (n_T^o x) C_{P_M}^- \right\} (T - T_b) + \left\{ -n_T^o dx C_{P_T}^- + n_T^o dx C_{P_B}^- - n_T^o dx C_{P_{H_2}}^- + n_T^o dx C_{P_M}^- \right\} (T - T_b) + \left\{ n_T^o (1-x) C_{P_T}^- + (n_B^o + n_T^o x) C_{P_B}^- + (n_{H_2}^o - n_T^o x) C_{P_{H_2}}^- + (n_T^o x) C_{P_M}^- \right\} dT$$

Calor suministrado al fluido

$$dQ = \left\{ -n_T^o dx C_{P_T}^- + n_T^o dx C_{P_B}^- - n_T^o dx C_{P_{H_2}}^- + n_T^o dx C_{P_M}^- \right\} (T - T_b) + \left\{ n_T^o C_{P_T}^- + n_B^o C_{P_B}^- + n_{H_2}^o C_{P_{H_2}}^- \right\} dT + \left\{ -n_T^o x C_{P_T}^- + n_T^o x C_{P_B}^- - n_T^o x C_{P_{H_2}}^- + n_T^o x C_{P_M}^- \right\} dT$$

Haciendo que $T \rightarrow T_b$

$$T - T_b \rightarrow 0$$

$$\therefore (T - T_b) \left[-n_T^o dx C_{P_T}^- + n_T^o dx C_{P_B}^- - n_T^o dx C_{P_{H_2}}^- + n_T^o dx C_{P_M}^- \right] \rightarrow 0$$

Teniendo Tambien:

$$C_P^- = \frac{\int_{T_b}^T C_P dT}{T - T_b}$$

$$\int_{T_b}^T C_p dT = a(T-T_b) + \frac{b}{2} (T^2 - T_b^2) + \frac{c}{3} (T^3 - T_b^3) + \frac{d}{4} (T^4 - T_b^4)$$

se:

$$T^2 - T_b^2 = (T - T_b) (T + T_b)$$

$$T^3 - T_b^3 = (T - T_b) (T^2 + T T_b + T_b^2)$$

$$T^4 - T_b^4 = (T^2 - T_b^2) (T^2 + T_b^2) \\ = (T - T_b) (T + T_b) (T^2 + T_b^2)$$

Tomemos

$$C_p^- = \frac{\int_{T_b}^T C_p dT}{T - T_b} = \frac{(T - T_b) \left[a + \frac{b}{2} (T + T_b) + \frac{c}{3} (T^2 + T T_b + T_b^2) + \frac{d}{4} (T + T_b) (T^2 + T_b^2) \right]}{(T - T_b)}$$

$$\therefore C_p^- = a + \frac{b}{2} (T + T_b) + \frac{c}{3} (T^2 + T T_b + T_b^2) + \frac{d}{4} (T + T_b) (T^2 + T_b^2)$$

$$\lim_{T \rightarrow T_b} C_p^- = a + \frac{b}{2} (2T) + \frac{c}{3} (3T^2) + \frac{d}{4} (4T^3)$$

$$\therefore \lim_{T \rightarrow T_b} C_p^- = a + bT + cT^2 + dT^3 = C_p$$

$$\therefore dQ = \left[n_T^\circ C_{P_T} + n_B^\circ C_{P_B} + n_{H_2}^\circ C_{P_{H_2}} \right] dT + n_T^\circ x \left[C_{P_B} + C_{P_H} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}} \right] dT \quad (34)$$

$$dQ = - \Delta H_r n_T^\circ dx$$

$$\frac{dQ}{dL} = - \Delta H_r n_T^\circ \frac{dx}{dL}$$

$$- \Delta H_r n_T^\circ \frac{dx}{dL} = \left[n_T^\circ C_{P_T} + n_B^\circ C_{P_B} + n_{H_2}^\circ C_{P_{H_2}} \right] \frac{dT}{dL} + n_T^\circ x \left[C_{P_B} + C_{P_H} - C_{P_{H_2}} - C_{P_T} \right] \frac{dT}{dL}$$

$$\frac{dT}{dL} = \frac{n_T^0 \Delta H_r \frac{dx}{dL}}{\left[C_{P_T} + \frac{n_B^0}{n_T^0} C_{P_B} + \frac{n_{H_2}^0}{n_T^0} C_{P_{H_2}} + x (C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}}) \right] n_T^0}$$

$$\frac{dT}{dL} = \frac{-\Delta H_r \frac{dx}{dL}}{C_{P_T} + \frac{n_B^0}{n_T^0} C_{P_B} + \frac{n_{H_2}^0}{n_T^0} C_{P_{H_2}} + x (C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}})} \quad (35)$$

c) Calor de reacción a la Temperatura de operación:

$$d \Delta H = \Delta C_{P_F} dT$$

$$\Delta C_P = C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}}$$

$$\Delta C_P = \Delta a + \Delta b T + \Delta c T^2$$

$$\Delta a = a_B + a_M - a_T - a_{H_2}$$

$$\Delta b = b_B + b_M - b_T - b_{H_2}$$

$$\Delta c = c_B + c_M - c_T - c_{H_2}$$

$$C_{P_T} = -8.213 + .13357T - 8.23 \times 10^{-5} x T^2 + 19.20 \times 10^{-9} x T^3$$

$$C_{P_B} = -8.650 + .11578T - 7.54 \times 10^{-5} x T^2 + 18.54 \times 10^{-9} x T^3$$

$$C_{P_{H_2}} = 6.952 - 0.04576 \times 10^{-2} x T + 0.09563 \times 10^{-5} x T^2 - 0.2079 \times 10^{-9} x T^3$$

$$C_{P_M} = 4.750 + 1.20 \times 10^{-2} x T + 0.303 \times 10^{-5} x T^2 - 2.63 \times 10^{-9} x T^3$$

$$\therefore \Delta a = -2.639$$

$$\Delta b = -.005334$$

$$\Delta c = .898$$

$$\Delta d = -3.0821$$

$$\int_{\Delta H_{rb}}^{\Delta H_r} d\Delta H_r = \int_{T_b}^T -2.693 dT - .005334 TdT + .898T^2dT - 3.0821T^3dT$$

$$\Delta H_r - \Delta H_{rb} = -2.693 (T - T_b) - .002667 (T^2 - T_b^2) + .2993 \times 10^{-5} (T^3 - T_b^3) - .7705 \times 10^{-9} (T^4 - T_b^4)$$

Si $T_b = 700^\circ K$

del cuadro No. 5 obtenemos

$$\Delta H_{rb} = -11430 \text{ cal.}$$

sustituyendo estos valores, se obtiene:

$$e(36) \Delta H_r = -11430 + \left[-2.693 (T - 700) - .002667 (T^2 - 49 \times 10^4) + .2993 \times 10^{-5} (T^3 - 343 \times 10^6) - .7705 \times 10^{-9} (T^4 - 2401 \times 10^8) \right]$$

D) Como ejemplo de la resolución numérica de este tipo de reactor, se pueden observar, en la resolución del reactor, programado los cálculos efectuados en la sección anterior a la entrada del Tolueno de enfriamiento.

E) RESULTADOS:

Los siguientes resultados, fueron obtenidos por un reactor -- de 2 metros de diámetro; por lo cual se tenían 314.16 litros/dm. -- de longitud.

Alimentación

$$\begin{aligned} E-1) \quad n_T^\circ &= 235 \ 043 \\ n_B^\circ &= 18 \ 078 \\ n_{H_2}^\circ &= 940 \ 168 \end{aligned}$$

TEMPERATURA INICIAL (°K)	PRESTION (ATM)	TEMPERATURA FINAL (°K)	CONVERSION <u>Tolueno reaccionado</u> Tolueno alimentado	LONGITUD DEL REACTOR (METROS)	VOLUMEN (LITROS)
967.16	30.0	1089.99	.9524	3.4	10681
967.16	44.2	1090.41	.9556	1.9	5969
967.16	50.0	1091.06	.9607	1.6	5026
867.16	30.0	992.0	.9505	53.9	169000
867.16	44.2	991.9	.9496	29.3	92048
867.16	50.0	991.9	.9494	24.1	76000

E-2) $n_T^{\circ} = 235043$, $n_B^{\circ} = 18078$, $n_{H_2}^{\circ} = 1\ 100\ 000$

967.16	44.2	1083.55	.9489	2.2	6911
867.16	50.0	985.78	.9504	28.7	90163

GRÁFICA No. 5

Volumen
(LITROS)

TEMPERATURA = 96.7 °C

CONVERSION % = 95

9.000

8.000

7.000

6.000

5.000

absoluta (1)

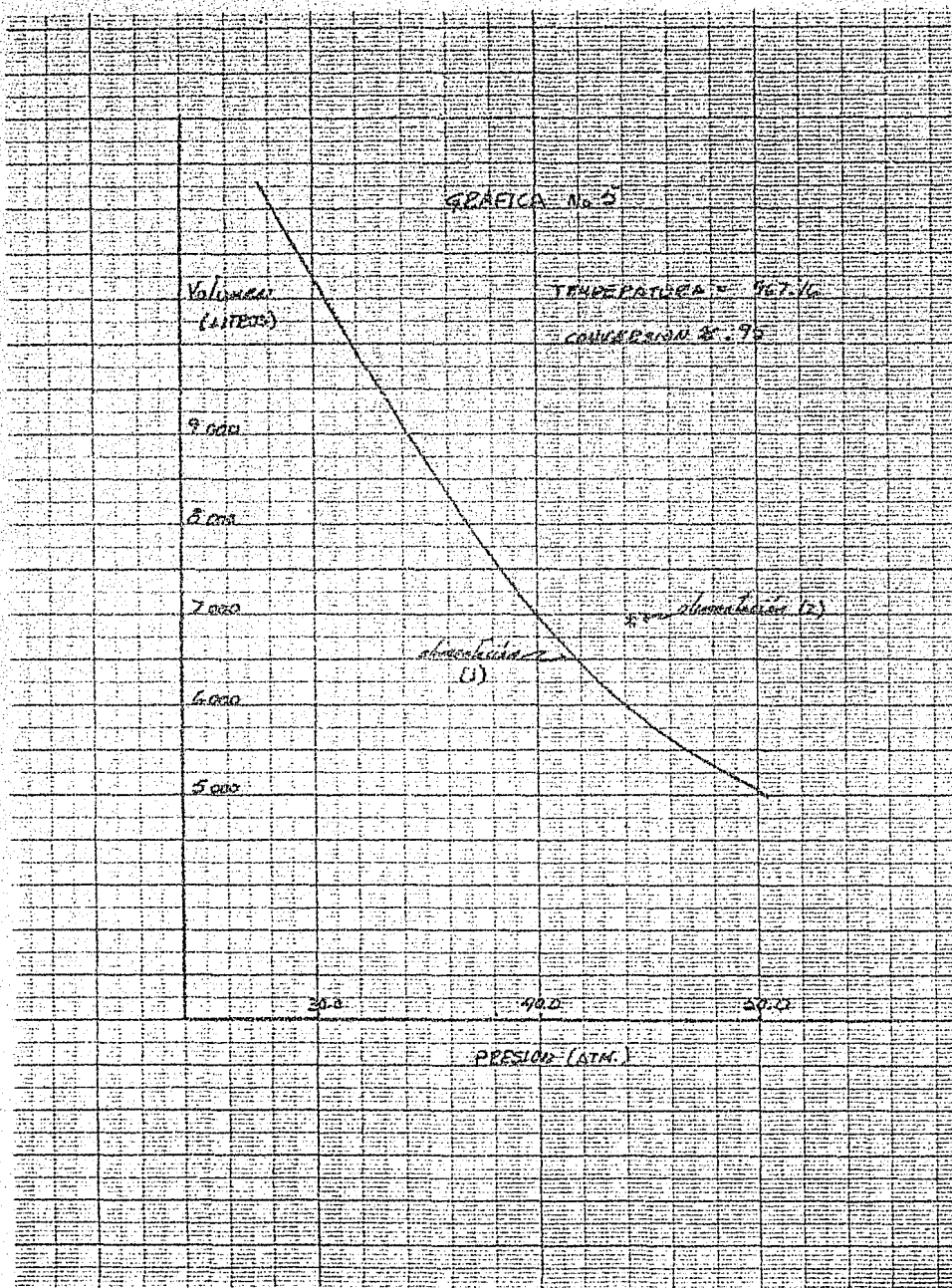
absoluta (2)

30.0

40.0

50.0

PRESIÓN (ATM.)



VOLUMEN
(LITROS)

160000

150000

140000

130000

120000

110000

100000

90000

80000

70000

GRAFICA No 6

TEMPERATURA = 36.16 °K

CONVERSION 2.75

temperatura 1 = 2

temperatura 2

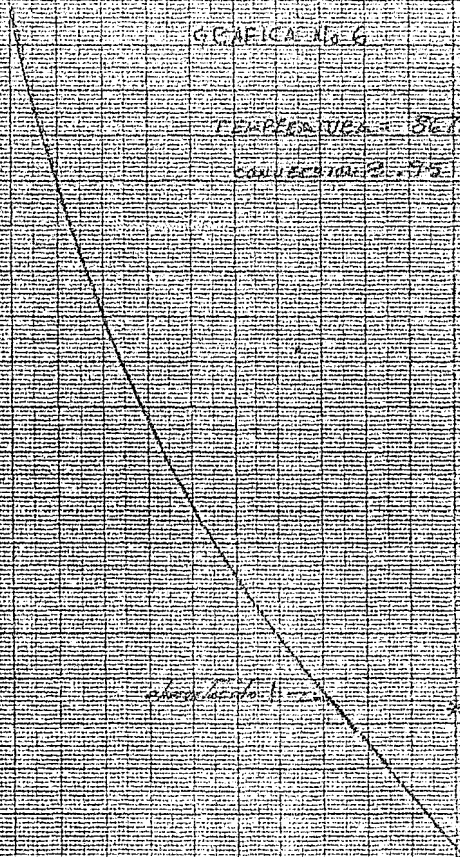
* x 5

30.0

35.0

40.0

PRESION (ATM)



7) CALCULO DE EL REACTOR PROGRAMADO

A) Antecedentes

Se puede observar, de los resultados obtenidos, para los reactores a diabático e isotérmico que; cuando la reacción se efectúa a niveles de temperatura de 1050°K aproximadamente, la reacción es muy rápida y por lo exotérmica de la misma, hay peligro de formación de puntos calientes y como consecuencia explosiones.

B) Tipo de Programación

La programación consistirá en no permitir que en el reactor, las temperaturas excedan de un nivel de 1050°K; llevándose a cabo el enfriamiento con tolueno en cantidad tal, que la temperatura disminuya 25°K

C) Ecuación de diseño

En la ecuación 33 - obtenida anteriormente se puede sustituir el valor de

$$dV = V' dL$$

obteniendo:

$$\frac{dx_T}{dL} = \frac{k V'}{F_T^0 R^{1.5}} \left(\frac{\pi}{T} \right)^{1.5} \left(\frac{n_T^0 (1-x)}{n_{Total} Z_t} \right) \left(\frac{n_{H_2}^0 n_T^0 x}{n_{Total} 2H_2} \right)^{1/2}$$

D) Balance de calor

En este tipo de reactor programado, se deben efectuar dos tipos de balance de calor.

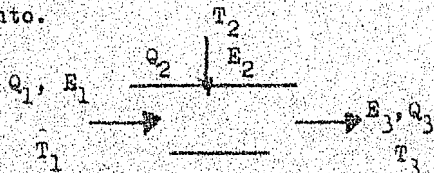
El primero se efectúa en la sección de reactor donde no hay alimentación de Tolueno de enfriamiento. Comportándose como un reactor adiabático, la ecuación de balance de calor es representada por ecuación 35 - :

$$\frac{dT}{dL} = \frac{-\Delta H_r \frac{dx}{dL}}{C_{P_T} + \frac{n_B^0}{n_T^0} C_{P_B} + \frac{n_{H_2}^0}{n_T^0} C_{P_{H_2}} + X (C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}})}$$

donde

$$\Delta H_F = -11430 + \left[-2.693 (T-700) - .002667 (T^2 - 49 \times 10^4) + .2993 \times 10^{-5} (T^3 - 343 \times 10^6) - .7705 \times 10^{-9} (T^4 - 2401 \times 10^8) \right]$$

El segundo balance, se efectua en la alimentación de Tolueno para enfriamiento.



Calor cedido por el fluido al tolueno de enfriamiento

$$Q = n_{Total} (E_1 - E_3)$$

$$\therefore Q = (C_{P_T}^- n_T + C_{P_B}^- n_B + C_{P_{H_2}}^- n_{H_2} + C_{P_M}^- n_M) (T_1 - T_3)$$

Calor absorbido por el tolueno de enfriamiento

$$Q_a = n_{T_e} (C_{P_T}^-) (T_3 - T_2)$$

$$\therefore n_{T_e} = \frac{(C_{P_T}^- n_T + C_{P_B}^- n_B + C_{P_{H_2}}^- n_{H_2} + C_{P_M}^- n_M) (T_1 - T_3)}{C_{P_T}^- (T_3 - T_2)} \quad a(37)$$

E) Metodo de Integración:

Se utilizó el método de integración numérica de Euler

$$Y = Y^0 \quad x = x^0$$

$$Y_n^1 = f(x_n, Y_n)$$

$$\bar{Y}_{n+1} = f(x_n, Y_n) h + Y_n$$

$$Y_{n+1} = Y_n + \frac{h}{2} \left[f(x_{n+1}, \bar{Y}_{n+1}) + f(x_n, Y_n) \right]$$

F) Ejemplo de solución numérica:

Condiciones:

$$T = 960.0 \text{ }^{\circ}\text{K}$$

$$P = 42.94 \text{ atmósferas}$$

$$X = .052$$

Alimentación

$$n_{T^{\circ}} = 235 \text{ 043 g mol/hora}$$

$$n_{B^{\circ}} = 18 \text{ 078 "}$$

$$n_{H_2^{\circ}} = 940 \text{ 168}$$

Ecuaciones

$$k = 3600 \times 2 \times 10^{11} e^{-\frac{55000}{RT}}$$

$$\frac{dx_T}{dL} = \frac{kV^1}{F_{T^{\circ}} R^{1.5} (T)^{1.5}} \left(\frac{n_{T^{\circ}} (1-x)}{n_{Total} Z_T} \right) \left(\frac{n_{H_2^{\circ}} - n_{T^{\circ}} x}{n_{Total} Z_{H_2}} \right)^{1/2}$$

$$\frac{dT}{dL} = \frac{-\Delta H_r \frac{dx}{dL}}{C_{P_T} + \frac{n_{B^{\circ}}}{n_{T^{\circ}}} C_{P_B} + \frac{n_{H_2^{\circ}}}{n_{T^{\circ}}} C_{P_{H_2}} + x (C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}})}$$

$$\Delta H_r = -11430 + \left(-2.693 (T-700) - .002667 (T^2 - 49 \times 10^4) + .2993 \times 10^{-5} (T^3 - 343 \times 10^6) - .7705 \times 10^{-9} (T^4 - 2401 \times 10^8) \right)$$

$$n_{T_e} = \frac{(C_{P_T} n_t + C_{P_B} n_B + C_{P_{H_2}} n_{H_2} + C_{P_M} n_M) (T_1 - T_3)}{C_{P_T} (T_3 - T_2)}$$

Base de cálculo = 1 hora

$$F_{T^{\circ}} = n_{T^{\circ}}$$

$$n_{Total} = 1193288 \text{ g mol}$$

La integración se hizo con incrementos de longitud de .1 metros

$$\therefore V^1 = 340.17 \frac{\text{litros}}{\text{decimetro}} \text{ para un diametro de reactor} = 2.0812 \text{ metros}$$

$$T^{\circ} = 960. \quad P^{\circ} = 42.94 \quad X^{\circ} = .052 \quad \text{Longitud} = 0$$

Calculo de Z.

$$\text{Tolueno} \quad TR = \frac{960}{594.0} = 1.616, \quad PR = \frac{42.94}{41.6} = 1.032, \quad Z_T = .9238$$

$$\text{Hidrógeno} \quad TR = \frac{960}{33.3} = 2888, \quad PR = \frac{42.94}{12.8} = 3.355, \quad Z_{H_2} = 1.0277$$

$$k = 3600 \times 2 \times 10^{11} \cdot e^{-\frac{55000}{1.98 \times 960}} = 216.37$$

$$\left(\frac{dx_T}{dL} \right)^1 = \frac{216.37 \times 340.17}{1193288 \times 0.082^{1.5}} \left(\frac{42.94}{960} \right)^{1.5} \left(\frac{235043 (1 - .032)}{1193288 \times .9238} \right)$$

$$\left(\frac{940168 - 12210}{1193288 \times 1.0277} \right)^{1.5}$$

$$\therefore \left(\frac{dx_T}{dL} \right)^1 = 0.022$$

$$C_{P_T} = -8.213 + .13357 \times 960 - 8.23 \times 10^{-5} \times 960^2 + 19.20 \times 10^{-9} \times 960^3$$

$$\therefore C_{P_T} = 61.153$$

$$C_{P_B} = -8.650 + .11578 \times 960 - 7.54 \times 10^{-5} \times 960^2 + 18.54 \times 10^{-9} \times 960^3$$

$$\therefore C_{P_B} = 49.41$$

$$C_{P_{H_2}} = 6.952 - 0.04576 \times 10^2 \times 960 + 0.09563 \times 10^{-5} \times 960^2 - 0.02079 \times 10^{-8} \times 960^3$$

$$\therefore C_{P_{H_2}} = 7.21$$

$$C_{P_M} = 4.750 + 1.20 \times 10^{-2} \times 960 + 0.303 \times 10^{-5} \times 960^2 - 2.63 \times 10^{-9} \times 960^3$$

$$\therefore C_{P_M} = 16.736$$

$$\Delta H_F = -11430 + \left\{ -2.693 (960-700) - .002667 (960^2 - 49 \times 10^4) + .2993 \right. \\ \left. \times 10^{-5} (960^3 - 343 \times 10^6) - .7705 \times 10^{-9} (960^4 - 2401 \times 10^8) \right\}$$

$$\Delta H_F = -11430 - 685.225$$

$$\Delta H_F = -12115.225$$

$$\left(\frac{dT}{dL} \right)^1 = \frac{12115.225 \times 0.022}{61.153 + \frac{18078}{235043} \times 49.41 + \frac{940168}{235043} \times 7.21 + .052 (49.41 + 7.21 - 61.15 + 16.7)}$$

$$\left(\frac{dT}{dL} \right)^1 = 2.8755$$

$$\therefore \bar{X} = x^0 + \frac{dx}{dL}^1$$

$$\bar{X} = .052 + 0.022$$

$$\bar{X} = .074$$

$$\bar{T} = T^0 + \frac{dT}{dL}$$

$$\bar{T} = 960. + 2.8755$$

$$\bar{T} = 962.875$$

$$\text{calculo } \left(\frac{dx}{dL} \right)^2$$

$$Z_T = .9247 \quad \text{para } PR = 1.032 \quad \text{y } TR = 1.621$$

$$Z_B = 1.0277 \quad PR = 3.355 \quad \text{y } TR = 28.8$$

$$k = 3600 \times 2 \times 10^{11} e^{-\frac{55000}{1.98 \times 962.87}}$$

$$k = 235.83$$

$$\left(\frac{dx}{dL} \right)^2 = \frac{235.83 \times 340.17}{1193288 \times 0.082^{1.5} \left(\frac{42.94}{962.87} \right)^{1.5} \left(\frac{235043 (1 - .074)}{1193288 \times .9247} \right)}$$

$$\left(\frac{940168 \pm 235043 (.074)}{1193288 \times 1.0277} \right)^{1.5}$$

$$\left(\frac{dx_T}{dL} \right)^2 = 0.023$$

Para $T = 962.87$

$$C_{P_T} = 61.21$$

$$C_{P_B} = 49.477$$

$$C_{P_{H_2}} = 7.212$$

$$C_{P_M} = 16.766$$

$$\Delta H_r = -11430 + \left[-2.693 (962.87 - 700) - .002667 (962.87^2 - 49 \times 10^4) \right. \\ \left. + .2993 \times 10^{-5} (962.87^3 - 343 \times 10^6) - .7705 \times 10^{-9} (960^4 - 2401 \times 10^8) \right]$$

$$\Delta H_r = -11430 - 691.57$$

$$\Delta H_r = -12121.57$$

$$\left(\frac{dT}{dL} \right)^2 = \frac{12121.57 \times 0.023}{61.21 + \frac{18078}{235043} \times 49.477 + \frac{940168}{235043} \times 7.212 + .074 (16.7 + 49.47 - 7.212 - 61.21)}$$

$$\therefore \left(\frac{dT}{dL} \right)^2 = 3.036$$

por lo cual

$$X_1 = 0.52 + \frac{1}{2} (0.022 + 0.023)$$

$$T_1 = 960. + \frac{1}{2} (2.8755 + 3.036)$$

$$\therefore X_1 = .0728$$

$$T_1 = 962.95$$

LONGITUD = .1 metros

Si guiendo el mismo método se obtiene

Temperatura	Conversión	Longitud
966.08	0.097	0.2
969.39	0.122	0.3
972.92	0.149	0.4
976.67	0.178	0.5
980.68	0.209	0.6
984.95	0.242	0.7
989.53	0.278	0.8
994.45	0.316	0.9
999.71	0.357	1.0
1005.35	0.400	1.1
1011.39	0.447	1.2
1017.82	0.497	1.3
1024.62	0.549	1.4
1031.72	0.604	1.5
1039.00	0.661	1.6
1046.27	0.717	1.7
1053.28	0.771	1.8

a la distancia de 1.8 metros, hay una alimentación de tolueno a 600 °K

Calculo de la cantidad de tolueno alimentado para enfriamiento

$$n_{T_e} = \frac{(\bar{C}_{P_T} n_T + \bar{C}_{P_B} n_B + \bar{C}_{P_{H_2}} n_{H_2} + \bar{C}_{P_M} n_M) (T_1 - T_3)}{\bar{C}_{P_T} (T_3 - T_2)}$$

$$T_1 = 1053.28 \text{ °K}$$

$$T_3 = 1053.28 - 25 = 1028.28 \text{ °K}$$

$$T_2 = 600 \text{ °K}$$

$$\bar{C}_{P_T} \left| \begin{array}{l} 1053.28 \\ 1028.28 \end{array} \right| = 63.297$$

$$\left. \begin{array}{l} 1053.28 \\ C_{P_B}^- \\ 1028.28 \end{array} \right\} = 51.075$$

$$\left. \begin{array}{l} 1053.28 \\ C_{P_{H_2}}^- \\ 1028.28 \end{array} \right\} = 7.277$$

$$\left. \begin{array}{l} 1053.28 \\ C_{P_M}^- \\ 1028.28 \end{array} \right\} = 17.556$$

$$\left. \begin{array}{l} 1028.28 \\ C_{P_T}^{-1} \\ 600^\circ \end{array} \right\} = 54.718$$

$$n_{T_e} = \frac{(63.297 n_T + 51.075 n_B + 7.277 n_{H_2} + 17.556 n_M) 25}{54.718 (428.28)}$$

$$n_T = 235043 (1-.771) = 53728.2$$

$$n_{H_2} = 940168 - 235043 (.771) = 758854$$

$$n_B = 18078 + 235043 (.771) = 199392$$

$$n_M = 235043 (.771) = 181314$$

Sustituyendo

$$n_{T_e} = \frac{(63.297 \times 53728.2 + 51.075 \times 199392 + 7.277 \times 758854 + 17.556 \times 181314) 25}{54.718 \times 428.28}$$

$$n_{T_e} = \frac{55726 \times 10^4}{234.34 \times 10^2}$$

$$n_{T_e} = 23779 \quad \frac{\text{g mol}}{\text{hora}}$$

Nuevo valor para n_T°

$$n_T^\circ = 235043 + 23779 = 258822$$

y el valor de la Conversión :

$$\text{Conversión} = \frac{\text{Tolueno reaccionado}}{\text{Tolueno alimentado}} = \frac{131314}{258822} = .7004$$

pudiendo continuar

Temperatura	Conversion	Longitud	n° Total
1028.28	.7004	1.8	258822
1033.17	.7370	1.9	"
1037.93	.7726	2.0	"
1042.47	.8065	2.1	"
1046.70	.8381	2.2	"
1050.52	.8667	2.3	"

aumento de Tolueno = 25451

1025.52	.7991	2.3	284273
1028.62	.8115	2.4	"
1031.57	.8329	2.5	"
1034.36	.8530	2.6	"
1036.95	.8717	2.7	"
1039.33	.8890	2.8	"
1041.49	.9046	2.9	"
1043.42	.9186	3.0	"
1045.13	.9310	3.1	"
1046.63	.9418	3.2	"
1047.93	.9512	3.3	"
1049.05	.9593	3.4	"

Resultado Final

$$\text{Conversión} = .9593$$

$$\text{Benceno producido} = 272902 \frac{\text{g mol}}{\text{hora}}$$

$$\text{Volumen} = 3.4 \times 10 \times 340.17 = 11565 \text{ litros}$$

G) RESULTADOS

G-1) Temperatura del tolueno de enfriamiento = 967.16 °K.

Condiciones: $T^{\circ} = 967.16 \text{ }^{\circ}\text{K}$ $P = 30.0 \text{ atm.}$

$V^1 = 314.16 \text{ litros/dm de longitud}$

Alimentación: $n_T^{\circ} = 235043 \frac{\text{moles}}{\text{hora}}$

$n_B^{\circ} = 18078 \quad "$

$n_{H_2}^{\circ} = 940160 \quad "$

Temperatura	Conversión	Distancia	Volumen	n°Total
978.01	.0847	.5	1570.8	235043
991.45	.1883	1.0	3141.6	"
1008.50	.3204	1.5	4712.4	"
1030.31	.4894	2.0	6283.2	"
1051.01	.6500	2.4	7539.8	"
aumento de tolueno = 152614 g mol/hora				
1031.07	.4280	2.5	7854.0	387657
1054.21	.5832	2.9	9110.6	"
aumento de tolueno = 206511				
1033.89	.4092	3.0	9424.8	594167
1055.23	.5404	3.4	10681.4	"
aumento de tolueno = 285373				
1033.97	.3868	3.5	10995.6	879540

Se puede observar que el valor de la conversión va disminuyendo por la cantidad tan grande de tolueno que se deba alimentar; además estas cantidades tan grandes de tolueno disminuyen notablemente la relación moles H_2 /moles tolueno

G-2) Temperatura del tolueno de enfriamiento = 600 °K

$V^1 = 340.17 \text{ litros/dm de longitud}$

Condiciones Iniciales

$T = 900^{\circ}\text{K}$ $P = 20.0 \text{ atm.}$

alimentación $n_{\text{T}}^{\circ} = 235043 \text{ g mol/hora}$

$n_{\text{B}}^{\circ} = 18078$

$n_{\text{H}_2}^{\circ} = 940168$

Temperatura	Conversion	Longitud	Volumen	n_{T}° Total
900.77	0.005	.5	1700.85	235043
901.56	0.012	1.0	3417.00	"
902.37	0.018	1.5	5102.55	"
903.19	0.024	2.0	6803.40	"
904.03	0.030	2.5	8504.25	"
904.89	0.037	3.0	10205.10	"
906.65	0.050	4.0	13606.80	"
907.56	0.057	4.5	15307.65	"
908.48	0.065	5.0	17008.50	"
909.43	0.072	5.5	18709.25	"
910.40	0.079	6.0	20410.20	"
912.40	0.095	7.0	23811.90	"

G-3) Temperatura del tolueno de enfriamiento = 600°K

$V^1 = 340.17 \text{ litros/dm de longitud del reactor.}$

Condiciones Iniciales

$T = 900^{\circ}\text{K}$ $P = 30.0 \text{ atm.}$

alimentación

$n_{\text{T}}^{\circ} = 235043 \text{ g mol/hora}$

$n_{\text{B}}^{\circ} = 18078$ "

$n_{\text{H}_2}^{\circ} = 940168$ "

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T° Total
901.46	0.011	0.5	1700.85	235043
902.99	0.022	1.0	3417.00	"
904.56	0.034	1.5	5102.55	"
906.20	0.047	2.0	6803.40	"
907.90	0.060	2.5	8504.25	"
909.67	0.074	3.0	10205.10	"
911.51	0.088	3.5	11905.95	"
913.43	0.102	4.0	13606.80	"
915.43	0.118	4.5	15307.65	"
917.52	0.134	5.0	17008.50	"
919.71	0.150	5.5	18709.25	"
922.00	0.168	6.0	20410.20	"
924.41	0.186	6.5	22111.05	"
926.94	0.206	7.0	23811.90	"

Q-4)

$v^1 = 340.17$ litros/dm de longitud del reactor

Condiciones Iniciales

$T = 900$ °K

$P = 40.0$ atm.

Alimentación

$n_T^{\circ} = 235043$ g mol/hora

$n_B^{\circ} = 18078$ "

$n_{H_2}^{\circ} = 940168$ "

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T° Total
902.33	0.017	0.5	1700.85	235043
904.79	0.036	1.0	3417.00	"
907.41	0.056	1.5	5102.55	"
910.19	0.078	2.0	6803.40	"
913.14	0.100	2.5	8504.25	"
916.30	0.124	3.0	10205.10	"
919.69	0.150	3.5	11905.95	"
923.34	0.178	4.0	13606.80	"
927.27	0.208	4.5	15307.65	"

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T^o Total
931.53	0.241	5.0	17008.50	235043
936.15	0.276	5.5	18709.25	"
941.20	0.315	6.0	20410.20	"
946.72	0.357	6.5	22111.05	"
952.78	0.404	7.0	23811.90	"

G-5)

$V^1 = 340.17$ litros/dm de longitud del reactor

Condiciones Iniciales

$T = 900$ °K

$P = 50.0$ atm.

Alimentación

$n_T^o = 235043$ g mol/hora

$n_B^o = 18073$

$n_{H_2}^o = 940168$

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T^o Total
903.36	0.025	0.5	1700.85	235043
907.00	0.053	1.0	3417.00	"
910.96	0.083	1.5	5102.55	"
915.30	0.117	2.0	6803.40	"
920.09	0.153	2.5	8504.25	"
925.39	0.194	3.0	10205.10	"
931.31	0.239	3.5	11905.95	"
937.98	0.290	4.0	13606.80	"
945.52	0.348	4.5	15307.65	"
954.11	0.414	5.0	17008.50	"
963.88	0.489	5.5	18709.25	"
974.91	0.573	6.0	20410.20	"
986.99	0.666	6.5	22111.05	"
999.36	0.760	7.0	23811.90	"

G-6)

$V^1 = 340.17$ litros/dm de longitud del reactor

Condiciones iniciales

$T = 950$ °K

$P = 20$ atm.

Alimentación $n_T^o = 235043$ g mol/hora

$n_B^o = 18078$ "

$n_{H_2}^o = 940168$ "

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T^o Total
953.64	0.028	0.5	1700.85	235043
957.58	0.058	1.0	3417.00	"
961.83	0.091	1.5	5102.55	"
966.48	0.127	2.0	6803.40	"
971.50	0.165	2.5	8504.25	"
977.03	0.206	3.0	10205.10	"
983.12	0.255	3.5	11905.95	"
989.84	0.307	4.0	13606.80	"
997.27	0.365	4.5	15307.65	"
1005.50	0.428	5.0	17008.50	"
1014.54	0.498	5.5	18709.25	"
1024.36	0.574	6.0	20410.20	"
1034.71	0.654	6.5	22111.05	"
1045.12	0.735	7.0	23811.90	"

G-7) Temperatura del tolueno de enfriamiento = 600 °K

$V^1 = 340.17$ litros/dm de longitud del reactor.

Condiciones iniciales

$T = 950$ °K $P = 30.0$ atm.

Alimentación $n_T^o = 235043$

$n_B^o = 18078$

$n_{H_2}^o = 940168$

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T^o Total
958.56	0.054	0.5	1700.85	235043
965.17	0.117	1.0	3417.00	"
974.72	0.191	1.5	5102.55	"

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T^o Total
986.09	0.278	2.0	6803.40	235043
999.77	0.384	2.5	8504.25	"
1016.18	0.511	3.0	10205.10	"
1034.99	0.656	3.5	11905.95	"
1050.20	0.774	3.9	13266.63	"

aumento de tolueno = 23941

1027.31	0.722	4.0	13606.80	258984
1040.21	0.814	4.5	15307.65	258984
1050.32	0.890	5.0	17008.50	"

aumento de tolueno = 25460

1026.92	0.8223	5.1	17348.57	284444
1032.85	0.8651	5.5	18709.25	"
1038.94	0.909	6.0	20410.20	"
1043.46	0.941	6.5	22111.05	"
1046.54	0.964	7.0	23811.90	"

G-8) Temperatura del tolueno de enfriamiento = 600 °K

$V^1 = 340.17$ litros /dm de longitud

T = 950 °K

P = 40.0 atm.

alimentación

$n_T^o = 235043$

$n_B^o = 18078$

$n_{H_2}^o = 940168$

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T^o Total
961.45	0.038	0.5	1700.85	235043
976.01	0.201	1.0	3417.00	"
995.13	0.348	1.5	5102.55	"
1020.46	0.544	2.0	6803.40	"
1050.00	0.773	2.5	8504.25	"

aumento de tolueno = 23953

1029.05	0.731	2.6	8844.42	258996
1043.95	0.842	3.0	10205.10	"
1052.48	0.906	3.3	11225.61	"

aumento de tolueno 25330

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T^o Total
1029.86	0.843	3.4	11565.78	284 326
1042.54	0.934	4.1	13946.97	"
1046.59	0.964	4.5	15307.65	"

G-9) Temperatura del tolueno de enfriamiento = 600°K

$$V^1 = 340.17 \text{ litros/dm de longitud del reactor}$$

Condiciones iniciales

$$T = 950 \text{ } ^\circ\text{K}$$

$$P = 50.0 \text{ atm.}$$

Alimentación

$$n_T^o = 235043$$

$$n_B^o = 18078$$

$$n_{H_2}^o = 940168$$

Temperatura	Longitud	Conversión	Volumen	n_T^o Total
967.075	0.5	0.131	1700.85	235043
991.499	1.0	0.320	3417.00	"
1027.50	1.5	0.598	5102.55	"
1052.34	1.8	0.791	6123.06	"

aumento de tolueno = 23819

1032.97	1.9	0.760	6463.23	258862
1051.58	2.3	0.899	7823.91	"

aumento de tolueno = 25376

1029.96	2.4	0.843	8164.08	284238
1044.32	3.0	0.947	10205.10	"
1045.70	3.1	0.957	10545.27	"

G-10) Temperatura del tolueno de enfriamiento = 600°K

$$V^1 = 340.17 \text{ litros/dm de longitud}$$

Condiciones iniciales

$$T = 1000 \text{ } ^\circ\text{K}$$

$$P = 20 \text{ atm.}$$

Alimentación

$$n_T^o = 235043$$

$$n_B^o = 18078$$

$$n_{H_2}^o = 940168$$

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T° Total
1015.62	0.121	0.5	1700.85	235043
1036.14	0.281	1.0	3417.00	"
1051.61	0.402	1.3	4422.21	"
aumento de tolueno		24048		
1029.95	0.389	1.4	4762.38	259091
1052.59	0.560	2.0	6803.40	"
aumento de tolueno =		25517		
1030.30	0.528	2.1	7143.57	284609
1040.76	0.605	2.5	8504.25	"
1051.86	0.686	2.9	9364.93	"
aumento de tolueno =		27182		
1028.68	0.639	3.0	10205.10	311790
1037.91	0.704	3.5	11905.95	"
1047.00	0.769	4.0	13606.80	"
1050.49	0.793	4.2	14287.14	"
aumento de tolueno =		29003		
1026.72	0.734	4.3	14627.31	340793
1029.17	0.751	4.5	15307.65	"
1035.14	0.792	5.0	17008.50	"
1040.74	0.831	5.5	18709.25	"
1045.82	0.866	6.0	20410.20	"
1050.24	0.896	6.5	22111.05	"
aumento de tolueno =		30868		
1025.99	0.827	6.6	22451.22	371662
1028.90	0.846	7.0	23811.90	"

G-11) Temperatura del tolueno de enfriamiento = 600 °K

$$V^1 = 340.17 \text{ litros/dm}$$

Condiciones iniciales

$$T = 1000 \text{ °K} \quad P = 30 \text{ atm}$$

Alimentación

$$n_T^{\circ} = 235043$$

$$n_B^{\circ} = 18078$$

$$n_{H_2}^{\circ} = 940168$$

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T° Total
1032.79	0.255	0.5	1700.85	235043
1051.47	0.4011	0.7	2381.19	"
aumento de tolueno = 24056				
1032.75	0.411	0.8	2721.36	259099
1054.10	0.571	1.1	3741.87	"
aumento de tolueno = 25425				
1033.91	0.555	1.2	4082.04	284525
1054.29	0.703	1.6	5442.72	"
aumento de tolueno = 27020				
1032.71	0.667	1.7	5782.89	311545
1052.76	0.808	2.3	7823.91	"
aumento de tolueno = 28830.98				
1030.04	0.7559	2.4	8164.08	340376
1042.78	0.843	3.0	10205.10	"
1051.28	0.902	3.5	11905.95	"
aumento de tolueno = 30766				
1027.66	0.8365	3.6	12246.12	371142
1032.80	0.871	4.0	13606.80	"
1042.52	0.936	5.0	17008.50	"
1045.11	0.953	5.4	18390.00	"

G-12) Temperatura del tolueno de enfriamiento = 600 °K

$$V^1 = 340.17 \text{ litros/dm de longitud}$$

Condiciones iniciales

$$T = 1000 \text{ °K} \quad P = 40 \text{ atm}$$

Alimentación

$$n_T^{\circ} = 235043 \text{ g mol/hora}$$

$$n_B^{\circ} = 18078 \quad "$$

$$n_{H_2}^{\circ} = 940168 \quad "$$

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T° Total
1059.59	0.464	0.5	1700.85	235043

aumento de tolueno = 23595

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T° Total
1045.43	0.503	0.6	2041.02	258638
1057.18	0.592	0.7	2381.19	"
aumento de tolueno = 25211				
1039.94	0.596	0.8	2721.36	283849
1056.07	0.713	1.0	3401.70	"
aumento de tolueno = 26864				
1036.47	0.690	1.1	3741.87	310714
1052.21	0.801	1.4	4762.38	"
aumento de tolueno = 28816				
1030.80	0.758	1.5	5102.55	339530
1051.90	0.903	2.2	7483.74	"
aumento de tolueno = 30667				
1029.04	0.842	2.3	7823.91	370199.0
1041.14	0.924	3.0	10205.10	"
1045.53	0.953	3.4	11565.78	"

G-13) Temperatura del tolueno de enfriamiento = 600 °K

$$V^1 = 340.17 \text{ litros/dm de longitud}$$

Condiciones iniciales

$$T = 1000 \text{ °K} \quad P = 50 \text{ atm}$$

Alimentación $n_T^{\circ} = 235043$

$$n_B^{\circ} = 18078$$

$$n_{H_2}^{\circ} = 940168$$

Temperatura	Conversión	Longitud	Volumen	n_T° Total
1012.39	0.096	0.1	340.17	235043
1027.70	0.215	0.2	680.34	"
1046.92	0.365	0.3	1020.51	"
1070.54	0.54	0.4	1360.68	"
aumento de tolueno = 23000				
1062.35	0.627	0.5	1700.85	258043

G-14) Cuadro comparativo de los resultados

Temperatura inicial °K	Presión atm	Conversión	Volumen (litros)	Benceno
		<u>Tolueno reaccionado</u> Tolueno alimentado		Producido g mol/hora
900.0	20.0	0.095	23811	22300
900.0	30.0	0.206	23811	48500
900.0	40.0	0.404	23811	95000
900.0	50.0	0.760	23811	178500
950.0	20.0	0.735	23811	173000
950.0	30.0	0.964	23811	226100
950.0	40.0	0.964	15307	274000
950.0	50.0	0.957	10545	272100
1000.0	20.0	0.846	23811	314000
1000.0	30.0	0.953	18390	353600
1000.0	40.0	0.953	11565	353000
1000.0	50.0*			

* Por los resultados obtenidos, para estas condiciones se observa que sería casi imposible controlar la temperatura.

8) CALCULO DE EL CALENTADOR

A) Ecuación de diseño (ecuación 33)

$$\frac{dx_T}{dL} = \frac{kV^1}{F_T^0 R^{1.5} \left(\frac{T}{T^0}\right)^{1.5}} \left(\frac{n_T^0 (1-x)}{n_{Total} Z_T} \right) \left(\frac{n_{H_2}^0 - n_{H_2}^0 x}{n_{Total} Z_{H_2}} \right)^{1/2}$$

B) Balance de calor

Si de la ecuación 34:

$$dQ = \left[n_T^0 C_{P_T} + n_B^0 C_{P_B} + n_{H_2}^0 C_{P_{H_2}} \right] dT + n_T^0 x \left[C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}} \right] dT$$

se sustituye

$$dQ = dq_1 - dq_2$$

$\therefore dq_1$ = calor suministrado al fluido por el calentador

dq_2 = calor suministrado al fluido por la reacción

$$\frac{dQ}{dL} = \frac{dq_1}{dL} - \frac{dq_2}{dL}$$

$$q_2 = \Delta H_r n_T^0 x$$

$$\frac{dq_2}{dL} = n_T^0 \Delta H_r \frac{dx}{dL}$$

$$\frac{dq_1}{dL} + n_T^0 \Delta H_r \frac{dx}{dL} = \left[n_T^0 C_{P_T} + n_B^0 C_{P_B} + n_{H_2}^0 C_{P_{H_2}} \right] \frac{dT}{dL} + n_T^0 x$$

$$\left[C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}} \right] \frac{dT}{dL}$$

$$\frac{dT}{dL} = \frac{\frac{dq_1}{dL} - n_T^0 \Delta H_r \frac{dx}{dL}}{n_T^0 C_{P_T} + n_B^0 C_{P_B} + n_{H_2}^0 C_{P_{H_2}} + n_T^0 x \left[C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}} \right]}$$

dividiendo ambos miembros entre n_T^0 obtenemos

$$\frac{dT}{dL} = \frac{\frac{1}{n_T^0} \frac{dq_1}{dL} - \frac{n_T^0}{n_T^0} \frac{\Delta H_r}{dL} \frac{dx}{dL}}{\frac{n_T^0}{n_T^0} C_{P_T} + \frac{n_B^0}{n_T^0} C_{P_B} + \frac{n_{H_2}^0}{n_T^0} C_{P_{H_2}} + \frac{n_T^0}{n_T^0} \times \left[C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}} \right]}$$

$$\frac{dT}{dL} = \frac{\frac{1}{n_T^0} \frac{dq_1}{dL} - \frac{\Delta H_r^0}{dL} \frac{dx}{dL}}{C_{P_T} + \frac{n_B^0}{n_T^0} C_{P_B} + \frac{n_{H_2}^0}{n_T^0} C_{P_{H_2}} + \times \left[C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_T} - C_{P_{H_2}} \right]}$$

C) BALANCE MECANICO

$$\frac{dT}{dL} = \frac{0.0235}{1 \cdot 4.8} \left(\frac{W}{1000} \right)^{1.3} \frac{L^{0.2}}{P}$$

T = libras/pulgadas²

L = pies

d = diametro interno en pulgadas

W = velocidad de flujo en libras/hora

μ = viscosidad en micropoiseas

ρ = densidad libras/pie³

D) METODO DE INTEGRACION

RUNGE KUTTA

4° orden.

$$k_1 = f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h f \left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2} \right)$$

$$k_3 = h f \left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2} \right)$$

$$k_4 = h f (x_n + h, y_n + k_3)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

E). RESOLUCION

BASE = 1 Hora

Alimentación

$$n_T^o = 235\ 042$$

$$n_B^o = 18\ 078$$

$$n_{H_2}^o = 940\ 168$$

$$T^o = 810.16\ ^\circ K \quad P = 44.2\ atm.$$

Considerando un calentador de dos corrientes paralelas tenemos:

$$n_T^o = \frac{235042}{2} = 117521 \quad \frac{g\ mol}{hora\ por\ corriente}$$

$$n_B^o = \frac{18078}{2} = 9039 \quad "$$

$$n_{H_2}^o = \frac{940168}{2} = 470\ 084 \quad "$$

$$n_{Total} = 596644 \quad "$$

Sustituyendo valores en la ecuación de diseño obtenemos:

$$\frac{dx_T}{dL} = \frac{k\ V^1}{117,521x.082^{1.5}} \left(\frac{\pi}{T} \right)^{1.5} \left(\frac{117521(1-x)}{596644\ Z_T} \right) \left(\frac{470084-117521x}{596644\ Z_{H_2}} \right)^{1/2}$$

$$\left(\frac{1}{.082} \right)^{1.5} = 42.51$$

$$\frac{117521}{596644} = .197$$

$$\frac{470084}{596644} = .7878$$

$$\therefore \frac{dx_T}{dL} = \frac{k V^1}{117,521} \times 42.51 \left(\frac{\pi}{T} \right)^{1.5} \left(\frac{.197(1-x)}{Z_T} \right) \left(\frac{.7878 - .197(x)}{Z_{H_2}} \right)$$

V^1 = litros/unidad de longitud

π = atmosferas

T = °K

$$k = 3600 \times 2 \times 10^{11} \text{ s}^{-1} = \frac{550000}{1.987 T} \left(\frac{\text{g mol}}{\text{litro}} \right)^{-1/2} \text{ hora}^{-1}$$

Corrección a la ecuación de balance mecánico

$$\frac{d\pi}{dL} = - \frac{0.0235}{4.8} \left(\frac{V_T}{1000} \right)^{1.8} \frac{1}{5} \frac{0.2}{5}$$

$$W = \frac{lb}{hr} = 117521 \frac{\text{g mol tolueno}}{\text{hora}} \times \frac{92}{453.6} + 9034 \frac{\text{g mol benceno}}{\text{hora}}$$

$$x = \frac{78}{453.6} + 470084 \frac{\text{g mol H}_2}{\text{hora}} \times \frac{2}{453.6} = 27465.5 \frac{\text{libras}}{\text{hora}}$$

$$\frac{W}{1000} = 27.4655$$

$$\log \frac{W}{1000} = 1.8$$

$$\therefore \frac{W}{1000}^{1.8} = 3.832 \times 10^2$$

$$P = \frac{\pi \text{ (PM) prom}}{ZRT}$$

$$PM \text{ promedio} = \frac{54931 \frac{\text{libras}}{\text{hr}} \times 453.6 \frac{\text{gramos}}{\text{libra}}}{1193288 \text{ g mol}} = \frac{24916701}{1,193288} = 20.86$$

$$P_{it} = \frac{20.80 \pi}{RT}$$

$$\frac{\text{libras}}{\text{pies}^3} = \frac{\text{gramos}}{\text{litro}} \left(\frac{1 \text{ libra}}{453.6 \text{ gramos}} \right) \left(\frac{28.32 \text{ libras}}{\text{pie}^3} \right)$$

$$P \frac{\text{libras}}{\text{pie}^3} = \frac{28.32}{453.6} \times \frac{20.88}{.082} \frac{T}{T}$$

$$P = 15.8834 \frac{T}{T}$$

$$\frac{d\bar{T}^1}{dL} = - \frac{0.0235 \times 388.2 T^{0.2}}{d^{4.8} 15.8834 \bar{T}}$$

$$\bar{T}^1 = \text{libras/pulgada}^2$$

$$\bar{T} = \text{atmosferas}$$

$$\frac{d\bar{T}^1}{dL} = - \frac{2.0227}{d^{4.8}} \frac{T^{0.2}}{15.8834}$$

$$\frac{d\bar{T}^1}{dL} = - \frac{5682 T^{0.2}}{d^{4.8}}$$

$$\frac{d\bar{T}^1}{dL} = \frac{1}{14.7} \frac{d\bar{T}^1}{dL}$$

$$\frac{d\bar{T}^1}{dL} = - \frac{1}{14.7} \times \frac{5682 T^{0.2}}{d^{4.8} \bar{T}}$$

$$\frac{d\bar{T}^1}{dL} = - \frac{.039}{d^{4.8}} \frac{T^{0.2}}{\bar{T}} \quad e (38)$$

$$\frac{d\bar{T}^1}{dL} = \frac{\text{atmosferas}}{\text{pie}}$$

d = pulgadas

T = °K

$\bar{T}$ = atmosferas

Cálculo del diametro interno de la tuberia del calentador

Supóngase un diametro nominal de 5 pulgadas

$$tm = \frac{PD}{2S + 2yP} + C \quad e (39)$$

- (13) $\therefore$ t_m = mínimo espesor pulgadas
 P = presión máximo libras/pulgada²
 D = diametro externo pulgadas
 S = esfuerzo permitido libras/pulgada²
 C = factor de corrosión pulgada
 Y = coeficiente para aceros austénicos

$C = .065$ pulgadas para tubos planos no roscados

pag 46 Craker Sabin (13)

$Y = .75$ " " "

$$\therefore t_m = \frac{PD}{2S + 1.4P} + 0.65$$

$$\text{Presión máxima} = 44.2 \text{ atm} = 44.2 \text{ atm} \times 14.7 \frac{\text{libras/pulgada}^2}{\text{atm}}$$

$$= 650 \text{ libras/pulgada}^2$$

$$\therefore P = 650 \times 14.7 = 9525 \text{ libras/pulgada}^2$$

$$D \text{ externo} = 5.563 \text{ pulgadas}$$

$$T_{\text{Max}} = 950 \text{ }^\circ\text{K} = 1300 \text{ }^\circ\text{F}$$

$$S_{T_{\text{Max}=1300^\circ\text{F}}} = 2700 \text{ libras/pulgada}^2 \text{ para tubo ASTM-A-376}$$

GRADO - 347

$$t_m = \frac{635.3 \times 5.563}{5400 + 1.4 \times 635.3} + .065$$

$$t_m = .56 + .065 = .625 \text{ pulgadas de espesor}$$

Esta característica la tiene el tubo 5 pulgadas Sch 160 el cual tiene

Diametro externo = 5.563 pulgadas

espesor = .625 pulgadas

Diametro interno = 4.313 pulgadas

Area externa = 1.456 pie²/pie

Area interna = 1.129 " "

Seccion interna = 14.61 pulgadas²

Cálculos:

Longitud del tubo = 30 pies

Longitud del recodo = 1 pie

Cálculo de V^{11} litros por pie de longitud

Sección interna = 14.61 pulgadas²

$$V^{11} = \frac{14.61}{144} \frac{\text{pulgadas}^2}{\text{pulgadas}^2/\text{pie}} \times 28.32 \frac{\text{litros}}{\text{pies}} = 2.873 \frac{\text{litros}}{\text{pie longitud}}$$

Suponiendo una absorción de calor de

$$9000 \frac{\text{BTU}}{R_r \text{ pie}^2} \quad (\text{valor típico para este tipo de calentador})$$

$$\frac{1}{n_T} \frac{dq_1}{dL} = \frac{1}{117521} \times 9000 \frac{\text{BTU}}{R_r \text{ pie}^2} \times 252 \frac{\text{cal}}{\text{BTU}} \times 1.129 \frac{\text{pie}^2}{\text{pie}}$$

$$\frac{1}{n_T} \frac{dq_1}{dL} = 21.787 \frac{\text{Calorias}}{\text{hora pie } n_T}$$

∴ Ecuaciones finales

$$\frac{dx_T}{dL} = \frac{k \times 2.873 \times 42.51}{117521} \left[\frac{T}{T} \right]^{1.5} \left[\frac{.197 (1-X)}{Z_T} \right] \left[\frac{.7878 - .197 (x)}{Z_{H_2}} \right]^{1/2}$$

$$\frac{dx_T}{dL} = 1.039 \times 10^{-3} \times k \left[\frac{T}{T} \right]^{1.5} \left[\frac{.197 (1-X)}{Z_T} \right] \left[\frac{.7878 - .197 (x)}{Z_{H_2}} \right]^{1/2}$$

$$k = 3600 \times 2 \times 10^{11} e^{-\frac{55000}{1.987 T}}$$

$$PR_T = \frac{PT}{41.6}$$

$$TR = \frac{T}{594.0}$$

$$PR_{H_2} = \frac{PT}{12.8}$$

$$TR = \frac{T}{33.3}$$

$$\frac{dT}{dL} = \frac{21.787 - AH_r \frac{dx}{dL}}{C_{P_T} + \frac{n_B}{n_T} C_{P_B} + \frac{n_{H_2}}{n_T} C_{P_{H_2}} + X [C_{P_B} + C_{P_M} - C_{P_{H_2}} - C_{P_T}]}$$

$$\Delta H_T = -11430 + \left[-2.693 (T-700) - .002667 (T^2 - 49 \times 10^4) + .2993 \right. \\ \left. \times 10^{-5} (T^3 - 343 \times 10^6) - .7705 \times 10^{-9} (T^4 - 2401 \times 10^8) \right]$$

$$C_{P_T} = -8.213 + .1335 T - 8.23 \times 10^{-5} T^2 + 19.20 \times 10^{-9} T^3$$

$$C_{P_B} = -8.650 + .11578 T - 7.54 \times 10^{-5} T^2 + 18.54 \times 10^{-9} T^3$$

$$C_{P_{H_2}} = 6.952 - 0.04576 \times 10^{-2} T + 0.09563 \times 10^{-5} T^2 - 0.2079 \times 10^{-9} T^3$$

$$C_{P_M} = 4.750 + 1.20 \times 10^{-2} T + 0.303 \times 10^{-5} T^2 - 2.63 \times 10^{-9} T^3$$

$$\frac{dT}{dL} = -\frac{.039}{d^{4.8}} - \frac{.11}{d^{1.2}}$$

FRACCIONES MOL.

$$n_T = .197 (1-x)$$

$$n_{H_2} = .7878 - .197 x$$

$$n_B = .01514 + .197 x$$

$$n_M = .197 x$$

Propiedades Seudocríticas

$$T_{SC} = 594 N_T + 33.3 N_{H_2} + 562.1 N_B + 190.7 N_M$$

$$P_{SC} = 41.6 N_T + 12.8 N_{H_2} + 48.6 N_B + 45.8 N_M$$

$$U_{SC} = 306 N_T + 34.7 N_{H_2} + 312 N_B + 159 N_M$$

F) RESULTADOS

Diametro nominal = 5

Diametro interno = 4.313 pulgadas

Tubo N. 1

T_o = 810.16

P_o = 44.2 atm

X = 0

$$PR_T = 1.062$$

$$TR_T = 1.364$$

$$Z_T = 0.8527$$

$$PR_{H_2} = 3.45$$

$$TR_{H_2} = 24.32$$

$$Z_{H_2} = 1.020$$

$$K = 3600 \times 2 \times 10^{11} \cdot e^{-\frac{55000}{1.98 \times 810.16}} = 1.045$$

$$\left(\frac{dx_T}{dL}\right)_0 = 1.039 \times 10^{-3} \times 1.045 \left(\frac{44.2}{810.16}\right)^{1.5} \left(\frac{.197}{.8527}\right) \left(\frac{.7878}{1.02}\right)^{1/2}$$

$$\left(\frac{dx}{dL}\right)_C = 0.000$$

$$C_{P_T} = 56.19$$

$$C_{P_B} = 45.52$$

$$C_{P_{H_2}} = 7.098$$

$$C_{P_M} = 15.06$$

$$\Delta H_T = -11430 + \left[-2.693 (810.16 - 700) - .002667 (810.16^2 - 49 \times 10^4) \right. \\ \left. + .2993 \times 10^{-5} (810.16^3 - 343 \times 10^6) - .7705 (810.16^4 - 2401 \times 10^8) \right. \\ \left. \times 10^{-9} \right]$$

$$\Delta H_T = -11430 - 316.38 = -11746.38$$

$$\left(\frac{dT}{dL}\right)_C = \frac{21.78 + 11746.38 \times 0.000}{56.19 + .076 \times 45.52 + 4 \times 7.098}$$

$$\left(\frac{dT}{dL}\right)_C = 0.248$$

$$N_T = 0.197 (1 - 0.000) = .197$$

$$N_B = 0.015 + .197 \times 0.000 = 0.015$$

$$N_{H_2} = 0.788 - .197 \times 0.000 = 0.788$$

$$N_M = 0.000$$

$$T_{SC} = 151.76$$

$$P_{SC} = 19.01$$

$$\mu_{SC} = 92.34$$

$$T'_{SR} = 5.33$$

$$P'_{SR} = 2.325$$

$$\mu'_{R} = 1.741$$

$$\mu = 1.741 \times 92.34 = 160.74$$

$$\left(\frac{dT}{dL}\right)_0 = \frac{-0.039 \times 160.74^{0.2}}{4.313^{4.3} \times 44.2} = -0.002$$

$$\text{Pend } x \ 1 = \left(\frac{dx}{dL}\right)_0 \times 6$$

h = 6 pies de longitud

$$\text{Pend } x \ 1 = 0$$

$$\text{Pend } T \ 1 = \left(\frac{dT}{dL}\right)_0 \times 6$$

$$\text{Pend } T \ 1 = 0.248 \times 6 = 1.4862$$

$$\text{Pend } P \ 1 = \left(\frac{dP}{dL}\right)_0 \times 6$$

$$\text{Pend } P \ 1 = -0.002 \times 6 = -0.012$$

$$X = 0.000$$

$$T = 810.16 + \frac{\text{Pend } T \ 1}{2}$$

$$T = 810.16 + .743 = 810.903$$

$$P = 44.2 + \frac{\text{Pend } 1}{2}$$

$$P = 44.2 + \left(\frac{-0.012}{2}\right)$$

$$P = 44.194$$

$$\therefore \text{ Conversión} = 0.000 \quad \text{Temperatura} = 810.16 \quad \text{Presión} = 44.194$$

$\therefore$ Sustituyendo estos valores nuevamente en las ecuaciones, se encuentra que:

$$\left(\frac{dx}{dL}\right)_1 = 0.000$$

$$\left(\frac{dT}{dL}\right)_1 = 0.248$$

$$\left(\frac{dP}{dL}\right)_1 = -0.002$$

$$\text{Pend } x \ 2 = \left(\frac{dx}{dL}\right)_1 \times 6$$

$$\text{Pend } x \ 2 = 0.000$$

$$\text{Pend } T \ 2 = \left(\frac{dT}{dL}\right)_1 \times 6$$

$$\text{Pend T } 2 = 1.48$$

$$\text{Pend P } 2 = \left(\frac{dP}{dL} \right)_2 \times 6$$

$$\text{Pend P } 2 = -0.012$$

$$X = 0$$

$$T = 810.16 + \frac{\text{Pend T}_2}{2}$$

$$T = 810.16 + .74$$

$$T = 810.90$$

$$P = 44.2 + \frac{(-0.012)}{2}$$

$$P = 44.194$$

$$\therefore \text{ Conversi3n } = 0.000 \quad \text{Temperatura} = 810.90 \quad \text{Presi3n} = 44.194$$

Sustituyendo nuevamente estos valores obtenemos:

$$\left(\frac{dx}{dL} \right)_2 = 0.000 \quad \text{Pend } x_3 = 0.000$$

$$\left(\frac{dT}{dL} \right)_2 = 0.248 \quad \text{Pend T}_3 = 1.4858$$

$$\left(\frac{dP}{dL} \right)_2 = -0.002 \quad \text{Pend P}_3 = -0.0128$$

$$X = 0 \quad T = 810.16 + \text{Pend T}_3$$

$$\therefore T = 811.646$$

$$P = 44.2 + \text{Pend P}_3$$

$$\therefore P = 44.189$$

Sustituyendo estos valores encontramos la cuarta pendiente del m3todo de Runge-Kutta

$$\left(\frac{dx}{dL} \right)_3 = 0.000$$

$$\left(\frac{dT}{dL} \right)_3 = 0.248$$

$$\left(\frac{dP}{dL} \right)_3 = -0.002$$

$$\text{Pend } x_4 = \left(\frac{dx}{dL} \right)_3 \times 6$$

$$\text{Pend } x_4 = 0.000$$

$$\text{Pend } T_4 = \left(\frac{dT}{dL} \right)_3 \times 6$$

$$\text{Pend } T_4 = 1.485$$

$$\text{Pend } T_4 = \left(\frac{dT}{dL} \right)_3 \times 6$$

$$\text{Pend } P_4 = -0.0128$$

$$\therefore h \frac{dx}{dL} = \frac{1}{6} (\text{Pend } X_1 + 2 \times \text{Pend } X_2 + 2 \times \text{Pend } X_3 + \text{Pend } X_4)$$

$$h \frac{dx}{dL} = 0.000$$

$$X = X_0 + \frac{dx}{dL} h$$

$$X = 0.000$$

$$h \frac{dT}{dL} = \frac{1}{6} (1.4862 + 2 \times 1.485 + 2 \times 1.48858 + 1.485)$$

$$h \frac{dT}{dL} = 1.4854$$

$$h \frac{dP}{dL} = \frac{1}{6} (-0.012 + 2 \times (-0.012) + 2 \times (-0.0128) + 0.0128)$$

$$h \frac{dP}{dL} = -0.0124$$

$$T = 810.16 + 1.4854 = 811.6454 \text{ } ^\circ\text{K}$$

$$P = 44.2 - 0.0124 = 44.1876$$

Tubo No. 1

Longitud = 6 pies

$$X = 0.000$$

$$T = 811.6454 \text{ } ^\circ\text{K}$$

$$P = 44.1276 \text{ atm}$$

Si guiendo el mismo metodo se obtuvieron los siguientes resultados

Tubo No.	Longitud	Conversion	Temperatura	Presión
1	6 pies	0.000	811.645 °K	44.187 atm.
1	12	0.000	813.130	44.178
1	18	0.000	814.614	44.167
1	24	0.000	816.097	44.157
1	30	0.000	817.579	44.146
1	31	0.000	817.580	44.144
2	31	0.000	824.977	44.0869
3	"	0.000	832.355	44.0293
4	"	0.000	839.715	43.9711
5	"	0.000	847.060	43.9123
6	"	0.001	854.392	43.8528
7	"	0.001	861.717	43.7927
8	"	0.002	869.038	43.7319
9	31 ft	.003	876.360	43.670
10	"	.004	883.691	43.608
11	"	.005	891.039	43.545
12	"	.007	898.414	43.482
13	"	.009	905.828	43.417
14	"	.012	913.295	43.353
15	"	.016	920.835	43.287
16	"	0.20	928.468	43.221
17	"	.025	936.223	43.154
18	"	.032	944.135	43.086
19	"	.041	952.245	43.018
20	"	0.52	960.608	42.948

Diametro nominal = 3.5 pulgadas

Diametro interno = 3.062 "

T° = 810.16 °K

P = 44.2 atm

Tubo	Conversion	Temperatura	Presión
1	0.000	815.43	43.90
2	0.000	820.68	43.61
3	0.000	825.93	43.31
4	0.000	831.17	43.01
5	0.000	836.39	42.70
6	0.000	841.61	42.38
7	0.000	846.81	42.07
8	0.000	852.01	41.75
9	0.001	857.20	41.42
10	0.001	862.32	41.09
11	0.001	867.56	40.75
12	0.001	872.74	40.41
13	0.002	877.10	40.07
14	0.002	883.078	39.72
15	0.003	888.247	39.36

Diametro nominal = 4 pulgadas

Diametro interno = 3.438 "

$T^{\circ} = 810.16$

$P^{\circ} = 44.2 \text{ atm}$

1	0.000	816.074	44.03
2	0.000	821.974	43.86
3	0.000	827.859	43.69
4	0.000	833.731	43.52
5	0.000	839.591	43.34
6	0.000	845.441	43.16
7	0.000	851.280	42.98
8	0.001	857.111	42.80
9	0.001	862.935	42.62
10	0.001	868.754	42.43
11	0.002	874.569	42.25
12	0.003	880.385	42.06
13	0.003	886.202	41.86
14	0.004	892.025	41.67

Tubo	Conversión	Temperatura	Presión
15	0.005	897.856	41.47
16	0.006	903.701	41.27
17	0.008	909.564	41.07
18	0.010	915.451	40.87
19	0.012	921.369	40.66
20	0.014	927.325	40.45

CAPITULO IV.

CONCLUSIONES.

CONVERSION:

Por los valores tan grandes de la constante de equilibrio y por la relación molar de hidrógeno/tolueno, se pueden alcanzar conversiones hasta de 99%; siendo la conversión comercial más apropiada de 95 a 96%.

TIPO DE REACTOR

Por los resultados obtenidos, se juzgó que el reactor tipo — programado enfriado con tolueno a 500 °K era el más conveniente.

CONDICIONES DE OPERACION:

Las condiciones de operación para este proceso están claramente definidas : la temperatura debe estar entre el rango de 900-1050 °K y la presión variará entre 30-50 atmósferas.

Las condiciones óptimas de operación deberán establecerse haciendo un análisis económico.

CALENTADOR:

El diámetro de la tubería, más apropiado, dependerá de la capacidad de la planta.

Para una alimentación de 235042 g mol de tolueno/hora

18078 g mol de benceno/hora.

940168 g mol de hidrógeno/hora.

dividida en dos corrientes, se observó que la tubería de 5 pulgadas de diámetro nos ofrecía la capacidad de calentamiento deseada y caídas de presión aceptables.

BIBLIOGRAFIA

- 1).- Cuadro obtenido del esquema "Petroquímica en México", publicado por Petroquímica Nacional, S.A.
- 2).- Feigelman S.
Hidrocarbon Processing
Vol. 45 No. 5
Mayo 1966.
Pag. 140-144.
- 3).- Tzuchiya, A., A. Hashimoto, H. Tominaga y S. Masamune
Bull. Japan Petrol. Inst.
Vol I, No. 73.
1959.
- 4).- Szwarc, M.
J. Chem. Phys.
1948 No. 16 Pag. 128
1949 No. 17 " 431.
1950 No. 18 " 1142.
1952 No. 20 " 403
1952 No. 20 " 844.
- 5).- Silsby, R. I. y E. W. Sawyer.
J. Appl. Chem.
No. 6
Agosto 1966.
Pags. 347-356
- 6).- Matsui H., A. Amano y H. Tokuhisa.
Bull Japan Petro. Inst.
Vol. I No. 67
1959
- 7).- Tokuhisa, H. A. Amano y Matsui.
11. avo. Annual Meeting Japan Chem. Soc.
Tokyo.
Abril 1958.

- 8).- Chemicals Abstracts 1955, P14028.
- 9).- Chemicals Abstracts 1955, P2062.
- 10).- Gonikberg, Dorogochinskii.
Neftakhimiya I, No. 1
1961.
46-53.
- 11).- Asselin, G. F.
Advances in Petroleum Chemistry and Refining
V-Ix.
Págs. 47-97
- 12).- Bethea S.R., R. L. Heinrich
Ind. Eng. Chem.
Vol. 50, 1245.
1958°
- 13).- Crocker Sabin
Piping Handbook
Mc Graw Hill
4/a. Edición
1945 New York
Pág. 45.
- 14).- Hougen, Watson
Chemical Process Principles
Tomo III
J. Wiley
1962.