



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES  
"ZARAGOZA"**

**DESARROLLO DE UN PROGRAMA  
COMPUTACIONAL PARA LA SIMULACION  
DE UN REACTOR TUBULAR HOMOGÉNEO  
CON INSTRUMENTACION EN TIEMPO REAL**

**T E S I S**  
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:  
**INGENIERO QUIMICO**  
**P R E S E N T A :**  
**ANGELICA ALFARO ACEVEDO**

**DIRECTOR DE TESIS:  
ING. EDUARDO VAZQUEZ ZAMORA**



**LO HEREDADO ES  
DE NUESTRA DOPLACION**

**MEXICO, D. F.**

**1995**

**FALLA DE ORIGEN**



## **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 está 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.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS  
SUPERIORES "ZARAGOZA"

JEFATURA DE LA CARRERA  
DE INGENIERIA QUIMICA

OP/JU/17/95

SRITA. ANGELICA ALFARO ACEVEDO  
P R E S E N T E .

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado para el Examen Profesional, le comunico que la Jefatura a mi cargo - ha propuesto la siguiente designación:

PRESIDENTE:    ING. EDUARDO VASQUEZ ZAMORA  
VOCAL:            ING. RENE DE LA MORA MEDINA  
SECRETARIO:     ING. JOSE ANTONIO GONZALEZ HERNANDEZ  
SUPLENTE:        ING. JOSE BENJAMIN RANGEL GRANADOS  
SUPLENTE:        ING. ANDRES AQUINO CANCHOLA

A T E N T A M E N T E  
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"  
México, D.F., 26 de enero de 1995

  
ING. JOSE BENJAMIN RANGEL GRANADOS  
JEFE DE LA CARRERA DE  
INGENIERIA QUIMICA

Irre.

**Con especial agradecimiento**

**Al Ing. Eduardo Vázquez Zamora por su apoyo y dirección en la  
realización del presente trabajo.**

Dedico esta tesis:

A mi madre, por todo su amor, todo su cariño, toda su paciencia, apoyo y comprensión, por todas sus palabras de aliento, su ayuda incondicional, por sus desvelos junto a mi y por sobre todo por ser como es.

A mi padre por su cariño y confianza.

A mis hermanos Carlos, Jaime y Rocío por su confianza, comprensión y cariño.

A amigos y compañeros de todos estos años.

**INDICE**

**INDICE**

<b>INTRODUCCION.</b>	<b>1</b>
<b>CAPITULO 1 GENERALIDADES.</b>	<b>4</b>
<b>CAPITULO 2 CLASIFICACION DE REACTORES.</b>	
2.1 Sistemas de Reacción.	8
2.2 Tipos de Reactores.	9
2.3 Selección del Tipo de Reactor y Modo de Operación.	10
2.3.1 Seleccionando Condiciones de Operación Para Reacciones Simples.	12
2.3.2 Factores que Influyen en la Selección del Tipo de Reactor.	14
2.4 Reactor de Flujo Tubular.	15
<b>CAPITULO 3 CONTROLES REQUERIDOS POR UN REACTOR.</b>	
3.1 Introducción al Control de Procesos.	21
3.2 ¿Qué es el Control de Procesos yCuál es su Objetivo?.	23
3.3 Elementos Para el Diseño de un Sistema de Control.	26
3.3.1 Selección de Medidas.	26
3.3.2 Selección de Variables Manipulables.	27
3.3.3 Selección de la Configuración de Control.	27
3.3.4 Diseño del Controlador.	28
3.4 Elementos de un Sistema de Control.	28
3.5 Variables a Controlar en un Proceso Químico.	31
3.5.1 Flujo.	31
3.5.2 Temperatura.	31
3.5.3 Presión.	32
3.5.4 Nivel.	32
3.5.5 Otras Propiedades Controlables	32
3.6 Diagramas de Control.	33
3.7 Control Para un Reactor Químico.	35

3.7.1 Reactores Continuos.	36
<b>CAPITULO 4    MODELO DEL REACTOR TUBULAR HOMOGENEO.</b>	
4.1 Construcción de Modelos.	38
4.2 Ecuaciones del Modelo Para Reactores Tubulares.	41
4.3 Otros Modelos Para Reactores Tubulares.	48
4.3.1 Reactores Tubulares Autotérmicos.	48
4.3.2 Reactores Tubulares Enfriados y Calentados a Través de la Pared.	49
4.4 Ejemplos Prácticos del Uso de Reactores Tubulares.	49
4.4.1 "Cracking" Térmico de Etano, Propano y sus Mezclas.	50
4.4.2 "Cracking" de Iso-butano, n-butano, y Mezclas de Etano- propano-n-butano.	50
4.4.3 Propileno a Partir de Etileno y 2-buteno.	51
4.4.4 Hidrogenación de Butiraldehído a Butanol.	52
4.4.6 Producción de Estireno.	53
4.5. Modelo Para el Reactor Tubular Homogéneo.	53
4.5.1 Reactor de Deshidrogenación.	57
<b>CAPITULO 5    SIMULACION DEL REACTOR TUBULAR HOMOGENEO.</b>	
5.1 ¿Qué es la Simulación?.	60
5.2 Etapas Para la Realización de una Simulación.	63
5.3 Ventajas y Desventajas de la Simulación.	66
5.4 Tiempo Real	67
5.5 Desarrollo del Programa Para la Simulación del Reactor Tubular en lenguaje FORTRAN.	75
5.6 Listado de un Programa Para la Simulación de un Reactor Tubular en Lengyaje FORTRAN, y de la Interface Para la Instrumentación el Lenguaje "C".	77
<b>CAPITULO 6    PRESENTACION DE RESULTADOS.</b>	
6.1 Tablas de Resultados de la Simulación.	93
6.2 Gráficas en Tiempo Real.	94

6.3 Discusión de Resultados.	95
CAPITULO 7 CONCLUSIONES.	96
BIBLIOGRAFIA.	98
ANEXOS.	

## LISTA DE FIGURAS

- Figura 1.1 Representación Esquemática de un Proceso Químico.
- Figura 2.1 Sistemas de Reacción de Acuerdo al Número de Fases Presentes.
- Figura 2.2 Tipos de Reactores. (a) Intermitentes; (b) Continuo; (c) Semicontinuo.
- Figura 2.3 Diagrama Esquemático de un Reactor Tubular.
- Figura 2.4 Tabla de Tipos de Reactores Tubulares.
- Figura 2.5 Reactores Tubulares.
- Figura 2.6 Representación de un Elemento de Volumen A·AL en un Reactor de Flujo Continuo.
- Figura 4.1 Construcción del Modelo.
- Figura 4.2 Gradiente Múltiple, con Perfil de Velocidad y Dispersión Radial y Axial Variables Radialmente.
- Figura 4.3 Gradiente Múltiple, con Perfil de Velocidad y Coeficientes de Dispersión Radial y Axial Constantes.
- Figura 4.4 Gradiente Múltiple con Velocidad Constante.
- Figura 4.5 Gradiente Múltiple, Ignorando los Gradientes Radiales.
- Figura 4.6 Gradiente Máximo, Ignorando Cualquier Dispersión.
- Figura 4.7 Balances Macroscópicos de Materia y Energía Suponiendo que la Conversión es Conocida.
- Figura 4.8 Reactor de Oxidación.
- Figura 4.9 Esquemas de Refrigeración de un Reactor Tubular.
- Figura 4.10 Reactor Tubular Refrigerado en Contracorriente.
- Figura 4.11 Diagrama de Flujo del Proceso de Metatesis.
- Figura 4.12 Diagrama de Flujo Para un Sistema de Reacción de Hidrogenación en Fase Vapor.
- Figura 4.13 Diagrama del Proceso de estireno de la Monsanto/Lummus Crest.
- Figura 4.14 Deshidrogenación de Etilbenceno.

## RESUMEN

En el presente trabajo de tesis se ha aplicado la técnica de simulación a el diseño de un reactor tubular homogéneo con instrumentación en tiempo real. Para lo cual se hizo uso de diversas rutinas matemáticas, como el método de integración de Romberg, solución de polinomios, etc., y del paquete para tiempo real, Time-Real Graphics and Measurement/Control Tools for Microsoft C.

Mediante el uso de este paquete, que consta de gráficas, métodos numéricos, y funciones con el "ratón" para PC IBM, se aplicó el tiempo real en la implementación de mecanismos en la instrumentación y control del reactor tubular.

Asimismo, se presenta cuales son los tipos de reactores tubulares, cual su tipo de instrumentación y control, diversos procesos que utilizan reactores tubulares y en base a estos se eligió un proceso representativo para la realización de la simulación, el cual fue la producción de estireno.

Finalmente se proporcionan los resultados obtenidos de está mediante tablas y gráficas en tiempo real.

## INTRODUCCION

## INTRODUCCION

La unidad más importante dentro de un proceso químico es el reactor químico. En esta unidad se llevan a cabo la mayor parte de las reacciones que transforman a la materia prima en el producto deseado, además es de gran importancia para la ingeniería química, pues el diseño de éste es una actividad específica del ingeniero químico.

Debido a que el funcionamiento del reactor afecta en gran medida al diseño y operación del resto del proceso, el estudio de dicho funcionamiento es de vital importancia.

Por otra parte, existen diferentes tipos de reactores, dependiendo de su modo de operación existen los reactores intermitentes (por lotes) y los reactores continuos. Dependiendo de sus características de diseño hay reactores de tanque agitado y reactores de flujo tubular, finalmente dependiendo del número de fases presentes están los reactores homogéneos y los reactores heterogéneos.

El objetivo primordial del presente trabajo es el de desarrollar un programa de computadora que permita realizar la simulación de un reactor tubular homogéneo y presentar la instrumentación requerida mediante diagramas realizados en tiempo real.

Para poder llegar hasta este objetivo en el capítulo 1, se presentan los requisitos fundamentales para poder llevar a cabo el diseño de un reactor.

En el capítulo 2 se proporciona información acerca de los diferentes tipos de reactores existentes para poder hacer una comparación con un reactor tubular y poder ver así las ventajas

que proporciona su uso, además de su importancia dentro de la industria química.

El capítulo 3, se presenta una pequeña introducción al control de procesos, en ella se hace un esbozo sobre las principales variables a controlar dentro de un proceso químico (temperatura, presión, nivel y flujo), y se da información acerca de los principales tipos o configuraciones de control, haciendo énfasis en la información sobre el tipo de control que debe tener un reactor químico, un reactor que opera de manera continua y finalmente un reactor tubular.

En el capítulo 4 se describen diferentes procesos químicos que se llevan a cabo dentro de un reactor tubular, dichos procesos son: "cracking" térmico de etano, propano y sus mezclas, "cracking" de *iso*-butano, *n*-propano y mezclas de etano-propano-*n*-butano, obtención de propileno a partir de etileno y 2-buteno, hidrogenación de butiraldehído a butanol y producción de estireno. De estos procesos se hace la elección de uno para desarrollar un modelo matemático y en base a este realizar el programa para la simulación. El sistema de reacción elegido para este trabajo fue el de la producción de estireno, por ser este el proceso más completo en cuanto a información requerida.

El capítulo 5 es el capítulo más importante del presente trabajo, pues en el se desarrolla el programa computacional para la simulación de un reactor tubular homogéneo. Dicho programa ha sido realizado en lenguaje "FORTRAN". Este programa ha sido realizado para operar tanto a régimen permanente como a régimen dinámico. De él se obtienen parámetros tales como: temperatura, presión, flujo, composición, porcentaje de conversión, longitud y diámetro del reactor. Después, mediante la realización de una interfase lenguaje FORTRAN - lenguaje "C" se incorporan algoritmos para la implementación de la instrumentación en tiempo

real.

Después de haberse realizado el programa y de haberse incorporado los algoritmos para tiempo real, en el capítulo 6 se presentan los resultados obtenidos con la simulación y se presentan además las gráficas obtenidas con el paquete de tiempo real.

Finalmente, en el capítulo 7 se presentan las conclusiones del presente trabajo.

## **CAPITULO 1**

### **GENERALIDADES**

## CAPITULO 1.

### GENERALIDADES.

Los procesos químicos se proyectan para poder obtener un determinado producto, partiendo de diferentes materias primas, las cuales son sometidas a diferentes etapas de tratamiento (Figura 1.1). Estas materias primas se someten primeramente a una serie de etapas de tratamiento físico para después ser sometidas a una serie de etapas de procesos químicos, para a continuación pasar al reactor. Después de esto, los productos obtenidos han de someterse a nuevos tratamientos físicos para así poder obtener el producto deseado.

Por esta razón, se considera que dentro de una planta (química o petroquímica) la unidad más importante es el reactor químico, que aunque representa una pequeña parte de la inversión total de la instalación, su funcionamiento afecta mucho al diseño y operación del resto de la planta, por tal motivo el estudio del funcionamiento del reactor químico es de suma importancia.

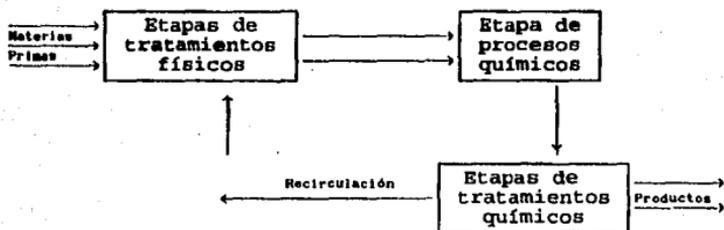


FIGURA.1.1 REPRESENTACION ESQUEMATICA DE UN PROCESO QUIMICO.

Para realizar el diseño de un reactor el ingeniero requiere de conocer las tasas de los procesos físicos y químicos, el tipo

y tamaño de equipo necesarios para lograr el grado de conversión de reacción deseado, las condiciones requeridas de temperatura, presión y flujo y los dispositivos de intercambio de energía.

El diseño y análisis de un reactor químico puede lograrse siguiendo dos criterios. El primero requiere del uso de técnicas y métodos de escalamiento, y el segundo requiere del uso de ecuaciones cinéticas de diseño. Estas ecuaciones pueden dividirse en dos componentes básicos:

1. Un modelo cinético.
2. Una ecuación de diseño del reactor.

El modelo cinético depende de los pasos controlantes del mecanismo de reacción. Si el paso controlante es la reacción química, el modelo cinético está determinado por la velocidad de reacción y, si el paso controlante es el transporte de masa, el modelo cinético está determinado por la velocidad de transferencia de masa. La ecuación de diseño del reactor depende de la geometría del sistema y se obtiene a partir de balances de masa y energía (este último será necesario si la temperatura del sistema reactivo no es constante).

El diseño de un reactor no es una cuestión rutinaria, pues para un mismo reactor pueden proponerse diferentes diseños. Un diseño óptimo no deberá basarse precisamente en el costo mínimo del reactor; pues puede hacerse un diseño con un bajo costo del reactor, pero los productos que salen de la instalación pueden estar en condiciones tales que su tratamiento posterior requiera un costo mucho más elevado que empleando otros diseños. Por lo tanto, debe considerarse la economía global del proceso.

Para la realización del diseño y/o análisis de un reactor químico, el ingeniero necesita tener información, conocimientos y experiencia en temas y áreas, tales como:

- Balance de Masa y Energía.
- Termodinámica.
- Fenómenos de Transporte.
- Cinética Química.
- Economía.
- Optimización.

El balance y la termodinámica nos proporcionan información sobre los diferentes cambios que pueden ocurrir dentro de un sistema. La cinética química y los fenómenos de transporte nos dicen que tan rápido ocurren dichos cambios. Por último, la economía y la optimización nos dicen si la operación del reactor es la óptima en términos económicos.

El balance de materia, junto con los balances de energía son de gran importancia, pues sobre ellos se asientan los diseños de la ingeniería química. La termodinámica es la ciencia que trata de la transformación de energía, y de las propiedades de los compuestos involucrados. La termodinámica interviene en todos los campos de la ingeniería.

El ingeniero químico debe conocer la cinética de la reacción para poder realizar un diseño satisfactorio del equipo en que ésta ha de llevarse a cabo. Si la reacción es lo suficientemente rápida para que el sistema esté prácticamente en equilibrio, el diseño es muy sencillo, ya que no es necesaria la información cinética y resulta suficiente la información termodinámica.

Por lo tanto, existe una estrecha relación entre la cinética química y la termodinámica, dado que estudian el efecto que sobre el sistema de reacción tienen factores tales como la temperatura, la presión y la composición de cada fase del sistema. Su diferencia básica es el factor tiempo, ya que mientras en un sistema que está en equilibrio termodinámico no hay cambio neto

con respecto al tiempo; en la cinética química, se estudia precisamente, el camino que el sistema tiene que seguir para llegar al equilibrio termodinámico.

Finalmente, diremos que también las leyes de difusión y de transferencia de calor son importantes dentro del diseño de reactores. Un ejemplo de estos se ve en un reactor heterogéneo, donde la transferencia de masa de una fase a la otra es tan importante (o puede ser tan importante) como la reacción química misma. De la misma forma, un factor importante en la selección de catalizadores sólidos para una reacción muy exotérmica es la transferencia de calor.

Por otra parte, en el presente trabajo no sólo se trata el diseño de un reactor, sino también la simulación de un reactor. Para poder llevar a cabo la simulación de un reactor, se necesita contar con conocimientos de programación y de matemáticas, además de los antes mencionados, ya que esta es una técnica para realizar experimentos en una computadora a partir de un modelo matemático. Sin embargo, las etapas para la realización de una simulación, así como sus ventajas y desventajas, serán tratados posteriormente.

Además, de lo ya mencionado, para poder realizar la simulación de un reactor, se necesita conocer el tipo de reactor que se requiere para determinado modo y condiciones de operación, y en que casos se recomienda el uso de un tipo específico de reactor. En el siguiente capítulo se hará una discusión acerca de estos puntos.

## CAPITULO 2

### CLASIFICACION DE REACTORES

**CLASIFICACION DE REACTORES.****2.1 Sistemas de Reacción.**

Los sistemas de reacción se encuentran, generalmente divididos en dos grandes grupos: los sistemas cerrados y los sistemas abiertos. Los sistemas cerrados son también conocidos como sistemas estáticos, siendo su principal característica la de no tener intercambio de materia con sus alrededores, aunque si pueden tener intercambio de calor con estos. Cuando esto último no ocurre, el sistema es conocido con el nombre de sistema cerrado adiabático. Por otra parte, los sistemas abiertos se conocen también con el nombre de sistemas dinámicos, y su principal característica es la de poder tener intercambio tanto de materia como de energía con sus alrededores.

Sin importar si el sistema es abierto o es cerrado, la cinética química tiene dos grandes modos de operación:

- Homogéneo.
- Heterogéneo.

El sistema heterogéneo, a diferencia del sistema homogéneo, presenta complicaciones tales como la transferencia de masa en las reacciones sólido-gas, lo que origina que su tratamiento sea más complejo y difícil. Estos sistemas son de gran importancia en el diseño, pues afectan al número de etapas de transferencia de masa y transferencia de energía que deben incluirse (Figura 2.1).

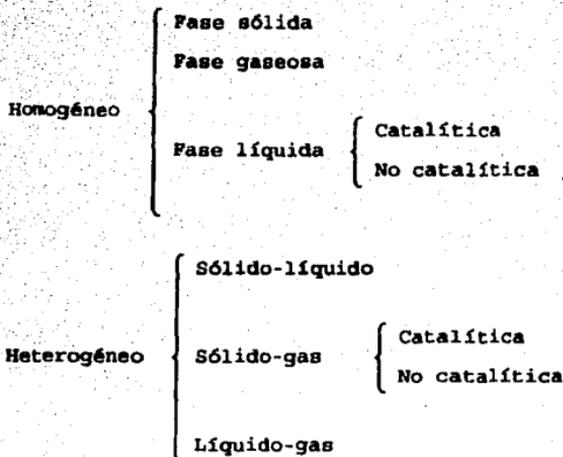


FIG. 2.1 SISTEMAS DE REACCION DE ACUERDO AL NUMERO DE FASES PRESENTES.

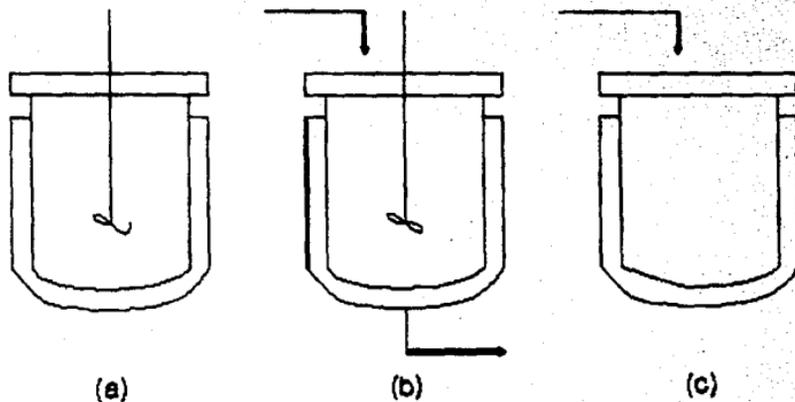
## 2.2 Tipos de Reactores.

El equipo en el cual se desarrollan las reacciones químicas puede variar desde un sencillo tanque abierto, hasta una complicada unidad con medios para la agitación, el contacto íntimo con el catalizador, condiciones de temperatura y presión poco comunes, la supresión de reacciones no deseables y la disipación del calor de reacción.

Estas características de diseño, junto con un amplio rango en las condiciones de operación, hacen difícil una generalización de los tipos de reactores. Sin embargo, pueden hacerse las dos siguientes clasificaciones:

1. De acuerdo a su modo de operación en:

- Reactor intermitente o por lotes (tipo "batch").



**Figura 2.2 Tipos de reactores. (a) Intermittente; (b) Continuo; (c) Semicontinuo**

- Reactor de flujo continuo.
  - 2. De acuerdo a sus características físicas, pueden ser:
    - Reactor de tanque con agitación o mezclado perfecto (RTA).
    - Reactor de flujo tubular o flujo tapón.
- Existen también reactores semicontinuos tipo tanque.

### **2.3 Selección del Tipo de Reactor y Modo de Operación.**

Al iniciar la tarea de diseño del reactor, el ingeniero químico deberá contar con la siguiente información:

1. Tipo de reacción (simple o compleja).
2. La necesidad de un catalizador.
3. Las fases comprendidas.
4. El modo de control de temperatura y presión (isotérmico, adiabático, isobárico, etc.).
5. La capacidad de producción.

Además, los datos básicos necesarios incluyen:

1. Las expresiones químicas de velocidad y la variación de parámetros de velocidad en función de la temperatura, la presión, etc.
2. Las características de transferencia de calor y masa.
3. Las propiedades físicas de todos los componentes que participan en la reacción.

Una vez obtenida toda esta información y los datos citados anteriormente, se procede a una selección preliminar del tipo de reactor.

El diseño y el tipo de reactor óptimo surge, por tanto, de un buen estudio de todas sus posibilidades, por lo cual el diseño del reactor procederá de la manera siguiente:

1. Considerar las características únicas del sistema de reacción. El diseñador deberá tener conocimientos de la

naturaleza del sistema de reacción.

**Química.** Estudia la teoría general y específicamente los mecanismos de las reacciones en cuestión. La química es invaluable para decisiones de diseño y operación.

**Termodinámica.** Calcula calores de reacción, conversiones adiabáticas y conversiones de equilibrio como una función de la temperatura y de la presión. Los datos termodinámicos son indispensables para prevenir riesgos de explosión en el proceso.

**Ecuación de velocidad o datos del modelo del reactor.** Estos datos son necesarios para cálculos de diseño, y a partir de ellos serán determinados y evaluados los peligros toxicológicos, etiológicos y ecológicos.

**Características del catalizador.** Sus características físicas y químicas son requeridas con referencia particular al uso de temperaturas límites, posibles envenenamientos y frecuencia de mantenimiento.

2. Basado en los factores del paso 1, seleccionar condiciones de operación ideales, favoreciendo tamaño mínimo del reactor y/o rendimiento máximo de los productos deseados. Los costos de separación y recuperación son a menudo factores importantes en la selección de niveles de conversión.

3. En base a los factores del paso número 1, seleccionar el tipo de reactor idealizado, procedimientos de alimentación para un costo de reactor mínimo y/o rendimiento máximo del producto deseado.

4. Basándose en los factores del paso 1, seleccionar el modo de transferencia de calor.

5. Eliminar algún tipo de reactor que pueda crear problemas

de seguridad.

6. Seleccionar o crear un reactor práctico que aproveche tan cercanamente como sea posible el tipo de reactor idealizado y las condiciones de operación. Los tipos de transporte serán también considerados en la selección de un diseño práctico.

7. Calcular tamaño y rendimiento del reactor, para las condiciones de diseño considerando simultáneamente, cuando sea necesario, los cambios físicos y químicos del proceso. Entonces, varias alternativas de diseño serán consideradas y evaluadas económicamente.

8. Buscar los sistemas de operación óptimos y considerar posibles cambios en la calidad y cantidad de la alimentación en el diseño elegido. La operabilidad de un diseño propuesto será evaluada con referencia a los errores conocidos en datos cinéticos y físicos.

### **2.3.1 Seleccionando Condiciones de Operación Para Reacciones Simples.**

Por medio de trabajos experimentales preliminares, a menudo se definen parámetros como temperatura, presión y concentración. Varios criterios para la selección de estos parámetros serán considerados por el diseñador definiendo los límites de su diseño en estudio. Estos criterios son resumidos a continuación.

#### **- Criterios de Selección de Condiciones de Operación (Reacciones Simples).**

##### **1. Temperatura y presión.**

a) Se recomienda operar abajo del punto de rocío para reacciones gaseosas y, entre la temperatura de

- solidificación y el punto de burbúja para reacciones líquidas.
- b) Operar dentro de un rango que favorezca la máxima conversión de equilibrio.
2. Temperatura.
- a) Seleccionar una temperatura de operación alta para reacciones endotérmicas y exotérmicas irreversibles consistentes, con temperaturas límites de recipientes y costo de operación, vida del catalizador y seguridad.
  - b) Todas las reacciones reversibles exotérmicas y algunas reacciones catalíticas irreversibles exhiben un máximo en la velocidad como una función de la temperatura y a veces de la concentración.
3. Presión
- a) Reacciones reversibles con aumento del número de moles son favorecidas por una presión baja, pero esto reduce la tasa de conversión.
  - b) Presiones elevadas aceleran la velocidad, afectan el equilibrio, y el efecto estérico en reacciones orgánicas complejas, pero más en reacciones industriales operadas abajo de 1000 atm.
  - c) Evitar rangos de presión que puedan causar cambios significativos en las reacciones.
4. Concentración y relación de concentración.
- a) Concentraciones altas en reacciones líquidas aceleran la velocidad, pero pueden causar aumentos de costos en recuperación y recirculación.
  - b) Reactivos diluidos con inertes pueden en algunos casos suprimir ciertas partes de reacciones y ayudar en la determinación de la temperatura.
  - c) El exceso de un reactivo en un sistema de dos reactivos es a veces la causa de mayores promedios de velocidad. Esto es especialmente útil para reacciones reversibles donde el reactivo en exceso garantiza una

alta velocidad neta continua. En sistemas gaseosos, el volumen específico es directamente proporcional al número de moles presentes.

d) En reacciones próximas al equilibrio el aumento de la conversión puede obtenerse por eliminación de uno de los productos, ya sea continuamente o por etapas. Si el producto es volátil o inmisible, esta técnica es bastante atractiva.

### **2.3.2 Factores que Influyen en la Selección del Tipo de Reactor.**

Cuando se lleva a cabo la selección preliminar del tipo de reactor, debe haberse establecido la cinética de la reacción y la forma en que se verá afectada por los parámetros clave del proceso, como también deben haberse determinado las condiciones óptimas de operación.

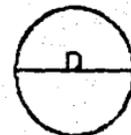
En el diseño de un reactor industrial, las consideraciones más importantes para elegir un tipo de reactor dado son, por lo general, el costo y el beneficio. Así pues, los criterios que se siguen para dicha selección deben ser tales que se reduzcan los costos a un mínimo y se aumenten los beneficios a un máximo. Estos criterios son determinados a través de factores que se clasifican en tres grupos diferentes: técnicos, económicos y sociales. Los factores técnicos se relacionan con los factores físicos y químicos del proceso que controlan el rendimiento y la calidad del producto, los factores químicos del proceso incluyen el tipo de reacción (simple o compleja), la tasa de reacción, la capacidad de producción y la necesidad de un catalizador, en esta clasificación se incluyen el modo de transferencia de calor (isotérmico, adiabático, u otro), el grado de retromezclado y la cantidad y clases de fases comprendidas. Estos factores están casi siempre tan íntimamente asociados con los factores químicos del proceso, que no siempre es posible separarlos, en tanto, que

los factores económicos incluyen la inversión de capital y los costos de operación, puesto que la complejidad del reactor no lleva necesariamente ninguna relación con la clase del mismo, es difícil establecer correlaciones exactas entre los costos y la clase de reactor. A pesar de esto, se presentan algunos lineamientos cualitativos respecto a los costos de capital y operación en conexión con los tipos de reactores comunes. Los factores sociales, por otra parte, comprenden aquello que no tiene valor monetario directo: por ejemplo, la seguridad y la satisfacción de los operadores y los efectos dañinos que pueda producir el reactor al medio ambiente.

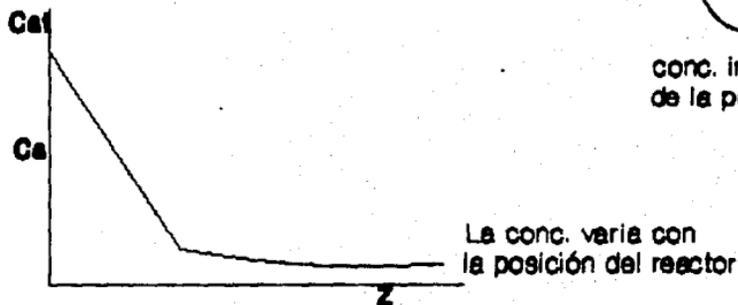
Puesto que la complejidad del reactor no lleva necesariamente ninguna relación con la clase del mismo, es difícil establecer correlaciones exactas entre los costos y la clase de reactor. A pesar de esto, se presentan algunos lineamientos cualitativos respecto a los costos de capital y operación en conexión con los tipos de reactores comunes. Los factores comprendidos en esta clasificación no se evalúan directamente en términos monetarios, pero sí pueden influir en la decisión del tipo de reactor que se diseñe o adquiera. Por ejemplo, una de las clases puede ser más segura en funcionamiento que otra. Es más, la característica del diseño de un reactor llega a facilitar la operación simplificando con ello la labor de los trabajadores. Algunas clases de reactores generan desechos que son difíciles de tratar y que tienden a contaminar el ambiente. Aunque los factores económicos no han merecido mucha atención, actualmente desempeñan un papel cada vez más importante en el diseño de una planta.

#### **2.4 Reactor de Flujo Tubular.**

Existen dos tipos de equipo de reacción que pueden ser utilizados como unidades de proceso continuo: el reactor tipo



conc. independiente  
de la posición radial



**Figura 2.3 Diagrama esquemático de un reactor tubular**

tanque agitado y el reactor de flujo tubular. A diferencia del comportamiento de un reactor de tanque agitado, los reactivos que pasan a través de un reactor tubular tienen que mezclarse lo menos posible. En el caso ideal, cada elemento de la mezcla reaccionante está sometido a un tiempo de reacción igual al tiempo de residencia del reactor. Por lo cual, es una manera conveniente de convertir un reactor discontinuo en uno continuo, pues al flujo a través del reactor tubular corresponde un tiempo de residencia en el reactor discontinuo.

Este tipo de reactor es conocido como reactor de flujo pistón o tapón (RFP). Para comprender mejor esta idealización puede considerarse que en el reactor de tanque agitado (RTA) los componentes están perfectamente mezclados, de tal manera que las propiedades del sistema reaccionante son uniformes en todas las partes del recipiente, y son las mismas que corresponden a la corriente de salida. Mientras, que en el reactor tubular la intención es que los elementos estén lo menos mezclados que sea posible, aún cuando exista un movimiento continuo del material de un extremo a otro del reactor.

El reactor tubular consiste básicamente de algún tipo de conducto en el cual el movimiento del fluido desde la entrada hasta la salida, transcurre sin que haya mezcla entre los componentes de dicho fluido. Generalmente, esto indica que el reactor tiene forma de tubo. La suposición de que no existe mezcla, es en muchos casos lo suficientemente exacta para asegurar que el comportamiento predicho es igual al medido en un sistema de reacción dado. En los casos en que la suposición no es lo suficientemente buena, el rendimiento predicho proporciona un primer cálculo aproximado que sirve para tomar una decisión respecto al diseño.

El sistema tubular puede ser visualizado como un tubo de

Tubo Vacío		Tubo Relleno			
Homogéneos o catalíticos homogéneos	Catalizados en la pared	Adiabático	Temperatura de pared uniforme	Uniforme seccionalmente.	Enfriados en: - Paralelo - Contra-corrientes
Adiabático	Temperatura de pared controlada				
Problemas de perfil de flujo y transferencia radial		Tipos combinados			
		Problemas de transferencia de calor y de transferencia de masa.			

**Fig. 2.4 Tabla de Tipos de Reactores Tubulares.**

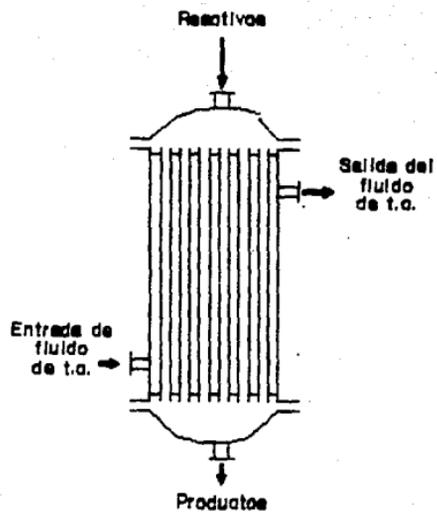
forma circular, de longitud  $L$  cuya área transversal es constante,  $A = \pi D^2/4$ . En la figura 2.3 se muestra un esquema de un reactor tubular.

Existe una gran variedad de tipos de reactores tubulares (Figuras 2.4 y 2.5). Sin embargo, primeramente se pueden dividir los reactores tubulares en aquellos diseñados para reacciones homogéneas, constituidos básicamente por un tubo vacío, y aquellos diseñados para una reacción catalizada heterogéneamente. Ambos tipos pueden operar adiabáticamente.

El uso más común de los reactores tubulares es para las reacciones homogéneas favorecidas por el flujo tapón, y para reacciones homogéneas que requieren una gran área superficial de transferencia de calor con diámetro de tubo pequeño. Los principales ejemplos son: hornos tubulares, metal fundido, tubular enchaquetado, tubos y coraza, tubería adiabática, torres adiabáticas, combinación de intercambiadores de calor con sistema adiabático, y reactores de flama.

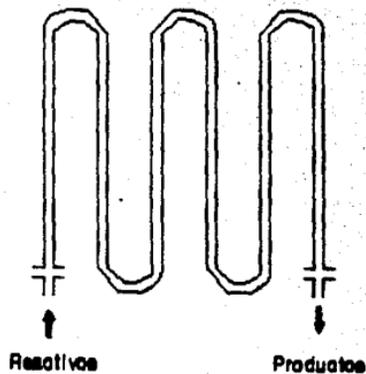
La suposición del flujo tapón generalmente es satisfactoria para todos estos tipos de reactores, excepto reactores de flama. La difusión axial será insignificante si la relación  $L/D > 50$  y si el flujo es turbulento. Los gradientes de velocidad sólo se consideran para casos de flujo laminar y temperatura radial; los gradientes de concentración son también necesarios en regímenes de flujo turbulento.

En un reactor tubular vacío puede haber variaciones en el valor del caudal a través del tubo. Por ejemplo, en un flujo laminar lento el fluido en el centro se mueve a una velocidad dos veces la velocidad media y si bien en un flujo turbulento la velocidad media es mucho más uniforme a través del tubo, es importante conocer cuánto puede afectar al funcionamiento del



(a)

Reactor Multitubular



(b)

Reactor Tubular de Serpentin Simple

**Figura 2.5 Reactores Tubulares**

reactor este alejamiento de las condiciones ideales.

Hasta cierto punto la mezcla radial impedirá la influencia de la no uniformidad del perfil de flujo, pero en el tubo vacío una buena difusión radial implicará que hay también difusión en la dirección del flujo. En el lecho de relleno el perfil de flujo y la difusión radial y longitudinal dependen del relleno.

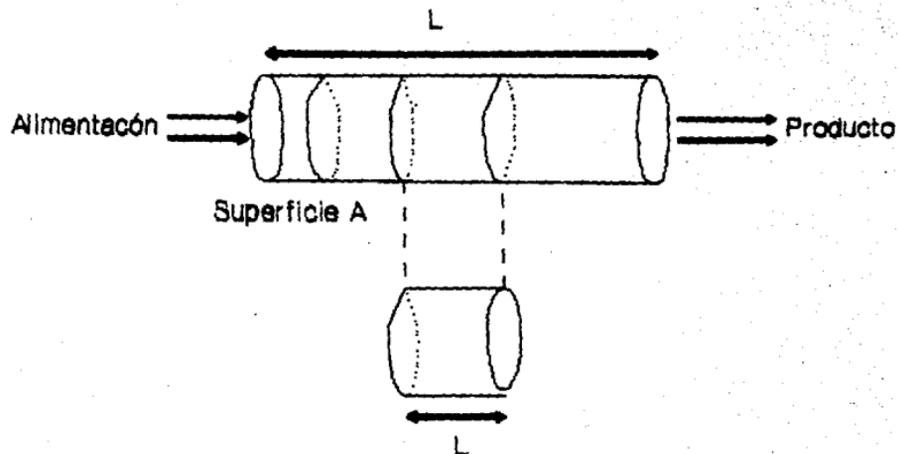
En todo caso para cualquier tipo de reactor, el proyecto correcto tiene que desarrollarse a partir de las ecuaciones de balance de materia, energía y cantidad de movimiento. A partir de éstas se procederá al problema de diseño, y de aquí a algunas consideraciones elementales de diseño óptimo.

Considerando la siguiente reacción:



La velocidad de flujo volumétrico total de entrada al reactor se designa como  $q$ , y se supone que el material que entra al reactor está formado por una mezcla de dos materias primas A y B cuyas concentraciones son  $C_{Af}$  y  $C_{Bf}$ .

Según se indica en la Figura 2.3, la suposición práctica fundamental en el reactor tubular es que, en cualquier posición axial ( $z$ ), se tendrá un área transversal del tubo donde los materiales estén perfectamente mezclados, pero no existirá mezcla posterior en la dirección axial entre áreas seccionales adyacentes. Este modelo ideal proporciona los medios para la utilización de un resultado previo con objeto de determinar el comportamiento en el reactor tubular en condiciones constantes. A medida que el flujo entra en el reactor, se desplaza hacia adelante, dentro del tubo sin perturbación. De esta manera, un elemento de fluido se convierte en un pequeño reactor intermitente que viaja a lo largo del tubo.



**Figura 2.6 Representación de un elemento de volumen  $A \cdot L$   
en un reactor tubular de flujo continuo**

Utilizando la ley de la conservación de la masa, se puede escribir el balance de materia para un reactivo clave que pasa a través de un reactor de flujo tubular como se muestra en la Figura 2.3. Para un elemento de tiempo  $t$  y  $A \cdot \Delta L$ , este balance toma la forma

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{masa del reactivo clave} \\ \text{que alimenta al} \\ \text{elemento de volumen} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{masa del reactivo} \\ \text{clave que deja al} \\ \text{elemento de volumen} \end{array} \right\} -$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{masa del reactivo clave} \\ \text{convertido en el} \\ \text{elemento de volumen} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{acumulación de reactivo} \\ \text{clave en el} \\ \text{elemento de volumen} \end{array} \right\}$$

Esta ecuación se aplica para un elemento de volumen  $A \cdot \Delta L$  que abarca toda la sección transversal del reactor, como se muestra en la Figura 2.6. Esto se debe a que no hay variación en la velocidad o en las propiedades en la dirección radial.

El uso de un reactor tubular es recomendado en los casos siguientes:

1. Cuando se trabaje con gases y vapores.
2. Se requiera de una gran producción en forma continua.
3. Se tengan reacciones endotérmicas o exotérmicas.
4. Sean empacados con catalizadores sólidos, y por tanto actúen como reactores catalíticos de lecho fijo.
5. Sean empacados con reactantes sólidos, y actúen por tanto, como reactores heterogéneos sólido-gas de lecho fijo.

Finalmente, si se hiciera una comparación entre un reactor de tanque agitado y uno tubular, se podría ver que el RTAC, no puede ser usado para requerimientos de temperatura mayores a los 500 °C. Por otra parte, se ha demostrado que dependiendo de la cinética y la naturaleza de las reacciones secuenciales y simultáneas, la selectividad que se obtiene en un RTAC puede ser

menor, igual o mayor que en un reactor de flujo tubular. En la Tabla 2.1 se dan ejemplos de selectividad en diferentes tipos de reacciones secuenciales y simultáneas, suponiéndose que el orden de reacción sigue la estequiometría de cada reacción.

Para su buen funcionamiento todo reactor requiere de un sistema de control adecuado, para lo cual es necesario tener conocimientos sobre lo que es el control de procesos, cuales son sus elementos y cuales las variables a controlar. El capítulo 3 del presente trabajo nos proporciona alguna de esta información.

## CAPITULO 3

### CONTROLES REQUERIDOS POR UN REACTOR

## CONTROLES REQUERIDOS POR UN REACTOR

**3.1 Introducción al Control de Procesos.**

Una planta química es un arreglo de unidades de proceso (reactores, intercambiadores de calor, bombas, columnas de destilación, absorbedores, evaporadores, tanques, etc.), integrados uno con otro de una manera sistemática y racional. El objetivo de toda planta química es la de convertir ciertas materias primas (alimentación) en los productos deseados usando las fuentes de energía disponibles, por el camino más económico. Durante su operación, una planta química satisficará varios requerimientos impuestos por sus diseñadores y la técnica general, economía y condiciones sociales en presencia de influencias externas (variaciones). Entre tales requerimientos se encuentran los siguientes:

1. *Seguridad.* La operación segura de un proceso químico es un requerimiento primario para el bienestar del personal de la planta y su contribución continua al desarrollo de la economía. De manera que las presiones de operación, temperaturas, concentraciones de reactivos, estarán siempre dentro de límites admisibles. Por ejemplo, si un reactor ha sido diseñado para operar a una sobrepresión de 100 psig, tendremos un sistema de control que mantenga la presión abajo de este valor.

2 *Especificaciones de producción.* Una planta deberá producir las cantidades y la calidad deseadas para los productos finales.

3 *Reglamentos ambientales.* En ellos se puede especificar que las temperaturas, concentraciones de los reactivos, y razones de flujo de los efluentes de una planta tengan ciertos límites. Tales reglamentos existen, por ejemplo, para las cantidades de

SO<sub>2</sub> que una planta puede expulsar a la atmósfera, y en la calidad del agua que se recicla a un río o lago.

4. *Fuerzas operacionales.* Los diversos tipos de equipos usados en una planta química, tendrán fuerzas inherentes a su operación. Tales fuerzas serán satisfechas durante toda la operación de la planta. Por ejemplo, las bombas mantendrán una cierta cabeza de succión neta positiva (NPSH); las columnas de destilación no tenderán a inundarse y la temperatura de un reactor catalítico no excederá un límite superior para evitar la destrucción del catalizador. Los sistemas de control son necesarios para satisfacer todas estas fuerzas operacionales.

5 *Economía.* La operación de una planta deberá ajustarse a las condiciones de mercado, esto es, la disponibilidad de las materias primas y la demanda de los productos finales. Además, será tan económico como sea posible en su utilización de materias primas, energía, capital, y labor humana. De manera, que se ha requerido que las condiciones de operación sean controladas para dar niveles óptimos de costo de operación, y ganancias máximas.

Todos los requerimientos arriba listados dictan las necesidades del control continuo de la operación de una planta química y la intervención externa (control), para garantizar la satisfacción de los objetivos operacionales. Esto se realiza a través de un arreglo racional del equipo (dispositivos de medición, controladores, computadores) e intervención humana (diseñadores de planta, operadores de planta), que constituyen el sistema de control.

Un sistema de control esta llamado a satisfacer las siguientes necesidades generales:

- Supresión de influencias de variaciones externas.
- Asegurar la estabilidad de una planta química.

- Optimizar el funcionamiento de un proceso químico.

El control automático a jugado un papel importante en el avance de la ingeniería y la ciencia. Además, de su gran importancia en vehículos espaciales, en la guía de proyectiles y en sistemas de pilotaje de aviones, etc.; el control automático se ha convertido en parte importante e integral de los procesos industriales modernos. Por ejemplo, el control automático resulta esencial en operaciones industriales como el control de presión, temperatura, humedad, viscosidad y flujo en industrias de proceso.

Como los avances en la teoría y práctica del control automático brindan medios para lograr el funcionamiento óptimo de sistemas dinámicos, mejorar la calidad y abaratar los costos de producción, expandir el ritmo de producción, librar de la complejidad de muchas rutinas de la tareas manuales repetitivas, etc.; la mayoría de los ingenieros y científicos han de tener buenos conocimientos en este campo.

El estudio del control automático es un tema complejo. Las soluciones exactas para problemas particulares de control requieren de conocimientos detallados del proceso, no sólo de las características físicas y químicas de los fluidos, sino también de los aspectos mecánicos del proceso - equipo (bombas, mezcladores, reactores, intercambiadores de calor, etc.), sistemas de tuberías y el ciclo de control mismo. Afortunadamente, en términos generales un buen control puede ser realizado con un limitado conocimiento de las condiciones físicas, químicas y mecánicas, y las aplicaciones de control son hechas rápidamente y económicamente con un alto grado de confianza en su operación.

### 3.2 ¿Qué es el control de procesos y cuál es su objetivo?

El control automático puede ser definido como una técnica de medición del valor de una variable, para mantenerla dentro de cierta condición deseada. Muchas otras definiciones igualmente satisfactorias podrán ser dadas, pero el control automático puede ser entendido mejor en términos de porqué es necesario, las ventajas ofrecidas y las formas de control de energía.

En base a lo anteriormente citado, el control automático tiene como finalidad mantener cierta variable o condición en cierto valor (fijo o variable como una función del tiempo). Este valor que se pretende es el valor deseado. Para alcanzar esta finalidad el sistema de control automático opera de la manera siguiente:

1. Medida del valor actual de la variable que se quiere regular
2. La comparación del valor actual con el valor deseado (siendo este último comunicado al sistema de control por el operador humano o una computadora). Determinación de la desviación.
3. Utilización de la desviación (o error) para generar una señal de corrección.
4. Aplicación de la señal de corrección al sistema a controlar de modo que sea eliminada la desviación, esto es, de manera que se pueda volver a llevar a la variable al valor deseado. La señal de corrección introduce variaciones de sentido contrario al error.

El control de cualquier proceso químico reduce al balance de materia y energía relacionado con el proceso. La suposición de condiciones de operación propias para sus requerimientos, tales como flujos de material, temperaturas corregidas, presión, niveles de fluido y composición de material, se encuentran en casi todos los procesos. Estas variables asociadas con un proceso

se dividen en dos grupos:

1. Variables de entrada.
2. Variables de salida.

Ahora es necesario definir algunos términos usados en el campo del control automático. El primer término es *variable controlada*, esta es la variable que será mantenida o controlada dentro de los valores deseados. Por ejemplo, en un intercambiador de calor, la temperatura de entrada al proceso es la variable controlada. El segundo término es el "*set point*", es el valor deseado de la variable controlada. La *variable manipulada*, es la variable usada para mantener a la variable controlada dentro de su "*set point*". Por ejemplo, en el caso del intercambiador de calor, el flujo de vapor es la variable manipulada. Finalmente, cualquier variable que pueda causar a la variable controlada desviaciones de su "*set point*", es definida como *variación o trastorno*. En muchos casos hay varios diferentes variaciones, por ejemplo en el intercambiador de calor las posibles variaciones son la temperatura de entrada al proceso, el flujo del proceso, la calidad del vapor, las condiciones ambientales, la composición del fluido de proceso, el ensuciamiento. La existencia de estos disturbios es lo que origina que en procesos industriales sea necesario el uso del control automático, pues si no hubiera variaciones, las condiciones de operación diseñadas prevalecerían y no sería necesaria una vigilancia continua del proceso.

Los siguientes términos extras son también importantes. Sistema de control de ciclo *abierto*, referido a la condición en que el controlador es desconectado del proceso, es decir que la salida no tiene efecto sobre la acción de control, esto es, en un sistema de control de ciclo abierto no se mide y no se realimenta para la comparación con la entrada. El sistema de control de *ciclo cerrado*, se refiere a la condición en que el controlador es

conectado al proceso, es decir la señal de salida tiene efecto sobre la acción de control, comparando el "set point" de la variable controlada y determinando correctamente la acción.

Con estos términos definidos, el objetivo del control de procesos puede ser definido como sigue:

El objetivo de un sistema de control automático del proceso es usar a la variable manipulada para mantener a la variable controlada dentro de su "set point", y evitar así las variaciones.

Según sus características, las variaciones son clasificadas dentro de dos categorías:

- Variaciones medibles, y
- Variaciones no medibles.

### **3.3 Elementos Para el Diseño de un Sistema de Control.**

Para el diseño de un sistema de control, primeramente se deben definir los objetivos de control, los cuales pueden ser: supresión de influencias de disturbios externos, optimizar el funcionamiento económico de una planta, asegurar la estabilidad del proceso químico, una combinación de estos.

#### **3.3.1 Selección de Medidas.**

Cualesquiera que sean nuestros objetivos de control, necesitamos algunos medios para controlar el proceso químico. Esto se hace midiendo ciertas variables del proceso (temperatura, presión, concentración, razón de flujo, etc.). Las variables que representan nuestro objetivo central, y que pueden ser controladas directamente reciben el nombre de medidas primarias.

A veces sucede que nuestro objetivo de control no son cantidades medibles, esto es, pertenecen a la clase de salidas no medibles. En estos casos mediremos otras variables que puedan ser medidas con facilidad y que sean seguras, estas variables mantenidas reciben el nombre de medidas secundarias. La relación matemática entre las salidas no medibles y las medidas secundarias es:

$$\text{Salidas no medibles} = f(\text{medidas secundarias})$$

que nos permite determinar los valores de las salidas no medibles (una vez que los valores de las medidas secundarias son válidos).

La tercera clase de medidas que podemos controlar en el funcionamiento de un proceso químico, incluyen mediciones directas de las variaciones externas. La medición de la variación antes de que entre al proceso puede ser altamente ventajoso, por que nos permite conocer a priori como será el comportamiento del proceso y así tomar una acción de control reparador para mitigar cualquier consecuencia indeseable.

### **3.3.2 Selección de Variables Manipulables.**

Una vez que se han especificado los objetivos de control y se han identificado las medidas, el siguiente paso es saber cuales son las variables manipulables que serán usadas en el control de un proceso químico. La selección de estas es algo muy importante, pues afectará la calidad de la acción de control que tomemos.

### **3.3.3 Selección de la Configuración de Control.**

Después de que se ha cumplido con los puntos anteriores, el problema final a ser solucionado es la definición de la configuración de control. Una configuración de control es la

información estructurada que es usada para conectar las medidas disponibles a las variables manipuladas disponibles. Se tienen diferentes configuraciones de control para un determinado proceso químico. Dependiendo de cuantas salidas controladas y entradas manipuladas se tengan en el proceso químico, se pueden distinguir las configuraciones de control como sistemas de control de entrada simple, salida simple (SISO) o entrada múltiple, salida múltiple (MIMO). En la industria química muchos de los sistemas de proceso son sistemas de entrada múltiple, salida múltiple.

Independientemente de estos los tres tipos generales de configuraciones de control son:

1. Configuración de control de realimentación ("feedback").
2. Configuración de control inferencial.
3. Configuración de control "feedforward".

#### **3.3.4 Diseño del Controlador.**

En toda configuración de control, el controlador es el elemento activo que recibe la información de la mediciones y toma las acciones apropiadas de control para ajustar los valores de las variables manipuladas. Para su diseño es necesario saber como es la información usada, tomada de las medidas, para ajustar los valores de las variables manipuladas.

#### **3.4 Elementos de un Sistema de Control.**

Independientemente del número de elementos usados, todo sistema de control cuenta con cuatro componentes básicos:

1. Detector, a menudo también llamado elemento primario.
2. Transmisor, también llamado elemento secundario.
3. Controlador, el "cerebro" del sistema de control.
4. Elemento final de control, a menudo una válvula de control, pero no siempre. Otros elementos finales de control son

bombas, conductores y motores eléctricos de velocidad variable.

La importancia de estos componentes es que ellos realizan las tres operaciones básicas que estarán presentes en todo sistema de control. Estas operaciones son:

1. Medición (M): La medición de la variable a ser controlada es hecha generalmente por la combinación de un detector y un transmisor.
2. Decisión (D): Basada en la medición, el controlador tendrá que decidir como mantener la variable dentro de su valor deseado.
3. Acción (A): Como resultado de la decisión del controlador el sistema tendrá que tomar una acción. Esto generalmente es realizado por el elemento final de control.

En toda configuración de control se distinguen los siguientes elementos:

1. El proceso químico. Es el equipo junto con las operaciones físicas o químicas que ahí ocurren.
2. Instrumentos de medición o detectores. Tales instrumentos son usados para medir las variaciones, las variables de salida controladas, o las variables de salida secundarias, y son fuente principal de información sobre el progreso del proceso. Algunos ejemplos característicos son:

- Termopares o termómetros de resistencia, para medición de temperatura.
- Medidores Venturi, para medir la razón de flujo.
- Cromatógrafos de gas, para medir la composición de una corriente.

Un termómetro de mercurio no es un buen dispositivo de medición para ser usado como control. Por otro lado, un termopar es aceptable porque se desarrolla un voltaje eléctrico que puede ser realmente transmitido. Por eso la transmisión es un factor muy importante en la selección de dispositivos de medida. Para hacer una buena medida es

crucial un buen control.

3. Transductores. Muchas medidas que no pueden ser usadas para control, son convertidas a cantidades físicas (tales como voltaje eléctrico o corriente, o una señal neumática) que pueden transmitirse fácilmente. Para este propósito son usados los transductores. Por ejemplo, pueden ser usados para convertir una señal neumática a eléctrica.

4. Líneas de transmisión. Son usadas para llevar las señales de medida del dispositivo de medición al controlador. En el pasado eran líneas neumáticas (aire comprimido o líquidos comprimidos), pero con el avance de los computadores digitales analógicos y especialmente la expansión del uso de computadoras digitales para control, las líneas de transmisión llevan señales eléctricas. En muchas ocasiones la señal de medida llegada de un dispositivo de medida es muy débil y no puede ser transmitida a una gran distancia. En estos casos las líneas de transmisión son equipadas con amplificadores que elevan el nivel de la señal.

5. El controlador. Este es el elemento que tiene la inteligencia. En él se recibe la información del dispositivo de medición y se decide que acción tendrá que tomarse.

6. Elemento final de control. Este es el elemento que implementa la decisión real tomada por el controlador. La válvula de control es el elemento final de control usado con más frecuencia, pero no es el único. Otros elementos finales de control típicos para un proceso químico son:

- Interruptores de relevo.
- Bombas de velocidad variable.
- Compresores de velocidad variable.

7. Elementos registradores. Son utilizados para suministrar una demostración visual de como se comporta el proceso químico. Generalmente, las variables que son registradas son las variables que son medidas directamente como parte del sistema de control. Varios tipos de registradores

(Temperatura, presión, concentración, razón de flujo, etc.) pueden ser vistos en el cuarto de control de la planta, controlando continuamente el comportamiento del proceso.

### **3.5 Variables a Controlar en un Proceso Químico.**

Las variables más importantes que se controlan en un proceso químico son:

#### **3.5.1 Flujo**

Cualquier proceso químico continuo requiere de un control de flujo de material. Los tipos de control de flujo son más comunes que cualquier otra variable de proceso sencilla. El control de otras variables generalmente depende de la regulación del flujo para conseguir estabilidad.

Muchos procesos químicos son sensitivos a la relación de reactivos propios de la reacción, y casi todos ellos requieren proporciones correctas de material para conseguir calidad en los productos. Las propiedades del producto son afectadas por la variación de la proporción de materias primas y las razones de producción con el uso de un catalizador; así, si el fluido es líquido, gas o sólido, un control de flujo preciso es casi siempre esencial.

#### **3.5.2 Temperatura.**

La energía en forma de calor es otra variable importante que es controlada en muchas reacciones químicas. En reacciones donde el calor no es controlado, será no obstante eliminado en alguna etapa del proceso. Los rendimientos máximos, complementos de reacción y características del proceso deseado, son todas funciones de la temperatura en muchos procesos. Algunos procesos

operan cerca de su temperatura crítica. Cuando se excede la temperatura crítica, el proceso llega a un estado no estable. Una buena técnica de control automático generalmente previene este suceso y por tanto es considerado económicamente necesario. Aunque muchos procesos tienen más ciclos de flujo que de temperatura, es necesario un buen control de temperatura.

### **3.5.3 Presión.**

El control de presión es necesario en todos los procesos químicos. Muchas reacciones son función tanto de la presión (positiva o de vacío) como de la temperatura. Además, su control obtiene la condición deseada para la reacción, la presión es también necesaria para la distribución de los flujos de materia a través de equipo y sistemas de tuberías.

### **3.5.4 Nivel.**

Otra importante función en el control de procesos continuos es el control de nivel. Es usado: (a) para obtener balances de materia de proceso cuando ocurren variaciones en el flujo de materias primas, (b) para el funcionamiento propio de torres de fraccionamiento, tanques fijos, reactores y otros equipos, y (c) para regular el flujo de productos intermedios y finales y para facilitar el almacenamiento. Así como el control de temperatura, el control de nivel a menudo está asociado con el control de flujo.

### **3.5.5 Otras Propiedades Controlables.**

Las cuatro variables antes mencionadas comprenden un alto porcentaje de los ciclos de control de muchos procesos. Algunos estarán claramente definidos como una forma de control de energía, otros realmente no caeran dentro de esta definición.

Otras variables medidas y controladas son las siguientes:

1. **Análisis de componentes.** Hay varios tipos de mecanismos analíticos usados para la medición de los componentes de una corriente de proceso o de una mezcla. A veces la necesidad es la que determina y mantiene la presencia o ausencia, con límites prescritos, de uno o más componentes. Estos análisis son hechos con cromatografías u otros mecanismos analíticos especiales.
2. **Propiedades físicas.** Las propiedades físicas que con frecuencia son controladas incluyen a la viscosidad, la densidad relativa, punto de fusión, neblina, punto de ebullición inicial y final y color. Algunas de estas propiedades son características de sólo algunos procesos, y algunas son función de otras variables.
3. **Propiedades químicas.** En muchos procesos, las propiedades químicas que necesitan ser controladas, incluyen pH, y conductividad.
4. **Varias formas de energía.** Otras variables que en ciertas ocasiones son controladas son: frecuencia, potencia, voltaje y corriente.

### **3.6 Diagramas de Control.**

En el estudio de sistemas de control, es conveniente que se haga uso de diagramas convencionales para ilustrar la interrelación de los componentes del sistema. En un diagrama usado para ingeniería química, el medio descrito es el flujo de materia y/o energía; en el diagrama de control el primer interés es la transmisión de información en el sistema como una función de la variable independiente tiempo. Estas últimas consideraciones están más generalizadas con el concepto de una señal. Cuando un termómetro es usado para medir temperatura, la información producida es transmitida como una señal a la siguiente etapa, que puede ser un indicador o la unidad de

generación de error de un controlador. Para el propósito de la generalización no es necesario especificar la naturaleza física de la señal, si es un movimiento de un punto, una presión de aire o voltaje, etc., y no es esencial conocer como es transmitida la señal. Lo que es necesario conocer es como la señal es afectada en calidad y tiempo. Cualquier variable medible en un proceso es información que puede ser considerada como una señal, y cualquier efecto que afecte a la señal en tiempo y magnitud, es un transductor que opera y transmite la señal.

En un diagrama de bloques convencional es posible mostrar el punto de incidencia de cualquier variable y sus efectos en el sistema. Cada transductor de información es representado por un simple bloque rectangular, con la señal de entrada por un lado y la señal de salida por el otro. El bloque se hace lo suficientemente grande para poder escribir en él una expresión, para mostrar el efecto en la señal que pasa a través del transductor particular. También pueden combinarse dos señales a una tercera por suma o resta, y esto es mostrado, en el diagrama por un círculo con dos líneas de entrada y una de salida. El círculo representa la operación de combinación de las señales, y el uso de signos positivos o negativos indica la combinación aritmética particular. También es posible dividir la señal en dos o más caminos simultáneos.

En la actualidad, son tres los tipos de señales usadas en los procesos industriales. La señal neumática, o presión de aire, con rangos normalmente entre 3 y 15 psig. Con menos frecuencia son usadas señales de 6 a 30 psig o de 3 a 27 psig. Su representación normal dentro de un diagrama es - - - - - . La señal eléctrica o electrónica, cuyos rangos se encuentran normalmente entre 4 y 20 mA. Menos comunes son las de 10 a 50 mA, 1 a 5 V ó 0 a 10 V. La representación de esta señal es - - - - - . El tercer tipo de señal, que es la más usada, es la señal digital, o señal

discreta.

Algunos símbolos que pueden ser usados para variables particulares y funciones de transferencia en un sistema de control son identificados en la Tabla 3.1.

Variables	Funciones de transferencia
$u$ = valor deseado	$A$ = elemento de entrada
$r$ = señal entrada	$G_c$ = elementos controladores
$e$ = señal error	$G_r$ = válvula de control
$p$ = controlador salida	$G_p$ = elementos de proceso
$m$ = variable manipulada	$H$ = elementos "feedback"
$c$ = variable controlada	$N$ = elementos de carga
$b$ = variable feedback	
$u$ = variable de carga	
$y$ = salida	
$d$ = disturbio	

TABLA 3.1 VARIABLES Y FUNCIONES DE TRANSFERENCIA EN UN SISTEMA DE CONTROL.

En base a todo lo dicho anteriormente se deduce que un sistema de control del proceso es necesario debido a que:

1. Proporciona menores costos de mano de obra.
2. Elimina o reduce los errores humanos.
3. Disminuye la horas-hombre para una misma producción.
4. Mejora la calidad del proceso.
5. Origina una reducción del tamaño de equipo y aumenta por lo tanto el espacio requerido.
6. Proporciona mayor seguridad en la operación.
7. Minimiza el consumo de energía.
8. Mejora el aprovechamiento de las materias primas.
9. En resúmen: aumenta la productividad, desde un ligero porcentaje hasta valores muy altos.

### 3.7 Control Para un Reactor Químico.

Como se dijo en el capítulo 2, un reactor es un equipo donde

se llevan a cabo reacciones químicas. Para lograr una operación óptima del reactor es necesario determinar la instrumentación y los métodos de control, así en general, un reactor debe estar acondicionado para recibir y mezclar reactivos, para eliminar o agregar calor, para controlar la presión y temperatura en la operación de arranque y paro, y para darle mantenimiento.

### **3.7.1 Reactores Continuos.**

Los reactores continuos son diseñados para operar bajo condiciones de razón de alimentación constante, salida de productos constante, y eliminación o suministro de calor. Aunque bien controladas, son generalmente constantes; la distribución de composición y temperatura son constantes con respecto al tiempo y espacio. A menudo, se presenta degradación gradual del catalizador (en caso de que sea usado), ensuciamiento de la superficie de transferencia de calor, etc., pero su escala de tiempo esta fuera del control del espectro. Por lo tanto, el objetivo del sistema de control es el de asegurar que las condiciones de operación permanezcan constantes para las especificaciones de diseño, aunque minimizando las pérdidas de reactivos y productos.

Cada tipo de reactor continuo, sea de tanque agitado o de flujo tubular tiene sus propias características de control. Dentro de los reactores de flujo tubular, dependiendo de cual sea su modo de operación y sus condiciones de diseño, también habrá una instrumentación y un control particular para cada caso. Independientemente de esto, lo reactores tubulares contarán siempre con los instrumentos necesarios para el control de la temperatura de reacción, debido a que parámetros como velocidad de reacción, distribución de productos y distribución de pesos moleculares, son función de la temperatura. También, podrán contar con algún tipo de control de presión. Generalmente se usa

en las reacciones de oxidación e hidrogenación, en las que la concentración de oxígeno e hidrógeno en los reactivos líquidos y consecuentemente la velocidad de reacción son función de la presión. La velocidad de reacción es también función de la presión en las reacciones en fase gas. Finalmente para alimentar los reactivos al reactor se requiere de un control de flujo.

A partir de la información proporcionada en el presente capítulo y en los precedentes, puede pasarse a la realización del modelo que regira la simulación, lo cual se trata en el capítulo siguiente.

## CAPITULO 4

### MODELO DEL REACTOR TUBULAR HOMOGENEO

## MODELO DEL REACTOR TUBULAR HOMOGENEO

## 4.1. Construcción de Modelos.

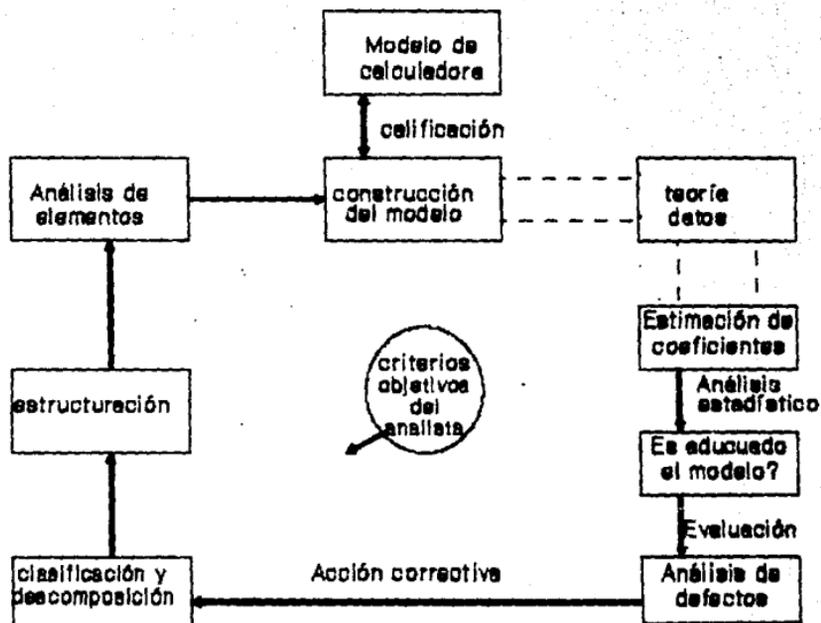
Para planificar los procesos de la moderna tecnología es preciso conocer los factores fundamentales que influyen en el funcionamiento del proceso. Una forma de conseguir esto consiste en la construcción de una replica real a pequeña escala del proceso y efectuar cambios en las variables de entrada, mientras se observa el comportamiento del proceso. Una técnica de este tipo no sólo lleva tiempo y resulta cara sino que además puede resultar imposible de llevar a cabo en la práctica. Con frecuencia resulta mucho más económico emplear (hasta donde sea posible) un método de representaciones conceptuales del proceso. Este hecho recibe el nombre de <<construcción del modelo>>.

La construcción de modelos complicados de procesos reales y la manipulación de dichos modelos mediante computadoras es cada vez de uso más frecuente para los ingenieros. Para la realización de un modelo se requiere de:

1. La especificación del problema para la situación física dada.
2. Un análisis detallado para obtener el modelo matemático.
3. La síntesis y presentación de resultados para asegurar la comprensión total.

La estrategia general del análisis de procesos complejos sigue un camino relativamente definido, el cual consta de los siguientes pasos:

1. Formulación del problema y establecimiento de los objetivos y criterios, así como delineación de las necesidades de operación.



**Figura 4.1 Construcción del Modelo**

2. Inspección preliminar y clasificación del proceso con el fin de descomponerlo en subsistemas (elementos).

3. Determinación preliminar de las relaciones entre los subsistemas.

4. Análisis de las variables y relaciones para obtener un conjunto tan sencillo y consistente como sea posible.

5. Establecimiento de un modelo matemático (en los casos en que sea aplicable) de las relaciones en función de las variables y parámetros; descripción de los elementos que solamente se pueden representar en forma incompleta mediante modelos matemáticos.

6. Validación del modelo.

7. Evaluación de la forma en la que el modelo se presenta al proceso real, usando el juicio crítico personal para acoplar las representaciones matemáticas con las no matemáticas.

8. Aplicación del modelo; interpretación y comprensión de los datos.

Estas etapas están concebidas para desarrollar un método de estructuración y análisis de proceso, siempre que sea posible, por medio de los modelos matemáticos. Este método permite un análisis más riguroso y tiende a que los criterios subjetivos (cuando son precisos) sean más metódicos y completos. La Figura 4.1 indica la naturaleza crítica de estas etapas.

El proceso representa una serie real de operaciones o de tratamiento de materiales, y el modelo representa la descripción matemática del proceso real. El uso de los modelos se ha extendido a campos tan diversos como: biología, fisiología, ingeniería, química, física y economía, razón por la cual son de gran importancia.

Los modelos pueden definirse dentro de cualquiera de las siguientes concepciones:

1. *Modelos físicos.* (modelos de barcos, maquetas de plantas piloto y de edificios).
2. *Modelos analógicos.* (Eléctricos, electrónicos, mecánicos).
3. *Teorías provisionales.* (Modelo de la gota de líquido para la nucleación).
4. *Gráficas y mapas.*
5. *Enunciados matemáticos y modelos en forma de símbolos.*

Para nuestros propósitos resulta más conveniente la concepción del modelo correspondiente al punto 5, pudiendo prepararse tres tipos de modelos y combinaciones:

*Modelos de fenómenos de transporte.* Utilización de principios físicos y químicos. (Ecuaciones fenomenológicas de variación, es decir, las ecuaciones de conservación de la masa, cantidad de movimiento y energía).

*Modelos de balance de población.* Se utilizan balances de población. La distribución de tiempos de residencia y otras distribuciones temporales son ejemplos de este tipo de modelos, aunque también se cumple en los modelos de fenómenos de transporte.

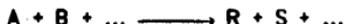
*Modelos empíricos.* Utilización de datos empíricos ajustados a polinomios por el método de mínimos cuadrados.

Después de que se ha implementado un modelo, es necesario una evaluación del mismo, para comprobar su confiabilidad, exactitud, reproducibilidad, complejidad, capacidad y posibilidad de aplicación. Esta evaluación puede hacerse, mediante la recopilación de datos para ajustarlos de acuerdo a las predicciones del modelo, para lo cual se han desarrollado métodos estadísticos. La exactitud de los datos obtenidos y la confianza

en el modelo, aumentan si se cuenta con dos series de datos (una del proceso real y otra del modelo).

#### 4.2. Ecuaciones del Modelo Para Reactores Tubulares.

Consideremos el caso general de un reactor tubular que opera en condiciones de régimen permanente con flujo turbulento. Supongamos que la reacción que tiene lugar es la siguiente:



Tomemos como punto de partida las siguientes ecuaciones de gradiente múltiple:

**Balance de masa para la especie  $\alpha$**

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r C_\alpha) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (u_\theta C_\alpha) + \frac{\partial}{\partial z} (u_z C_\alpha)$$

acumulación      Transporte a través de la superficie debido al flujo global.

$$= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ \rho \bar{D}_{\alpha r} r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{C_\alpha}{\rho} \right) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ \rho \bar{D}_{\alpha \theta} r \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{C_\alpha}{\rho} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \rho \bar{D}_{\alpha z} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{C_\alpha}{\rho} \right) \right] + R_\alpha \quad (1)$$

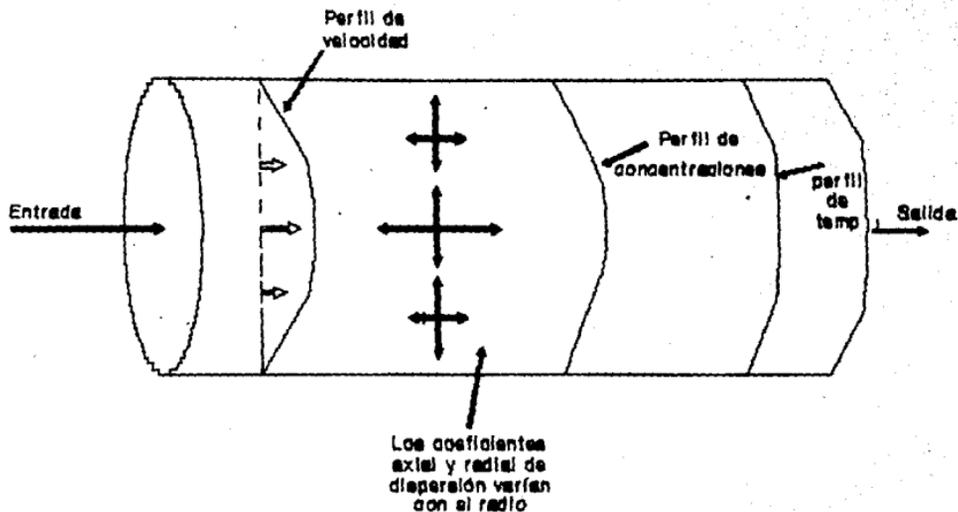
Transporte a través de la superficie por dispersión.      Generación

**Balance de cantidad de movimiento (dirección  $z$ )**

$$\rho \left[ \frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] = - \frac{\partial p}{\partial z} + \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\mu}_{zr} r \frac{\partial u_z}{\partial r}) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} (\bar{\mu}_{z\theta} r \frac{\partial u_z}{\partial \theta}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\mu}_{zz} \frac{\partial u_z}{\partial z}) + \rho g \quad (2)$$

**Balance de Energía**

$$\rho C_p \left[ \frac{\partial T}{\partial t} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{k}_R r \frac{\partial T}{\partial r}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\bar{k}_\theta \frac{\partial T}{\partial \theta}) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{k}_z \frac{\partial T}{\partial z}) + S_R \quad (3)$$



**Figura 4.2 Gradiente Múltiple, con Perfil de Velocidad y Dispersión Radial y Axial Variables Radialmente**

con las siguientes simplificaciones:

1. Debido a la condición de régimen permanente, todas las derivadas con respecto al tiempo son cero.

2. Se supone que el flujo global sólo tiene lugar en la dirección axial; en consecuencia, todos los términos de velocidad, a excepción de  $u_z$ , son cero.

3. También se supone que los fluidos no son compresibles.

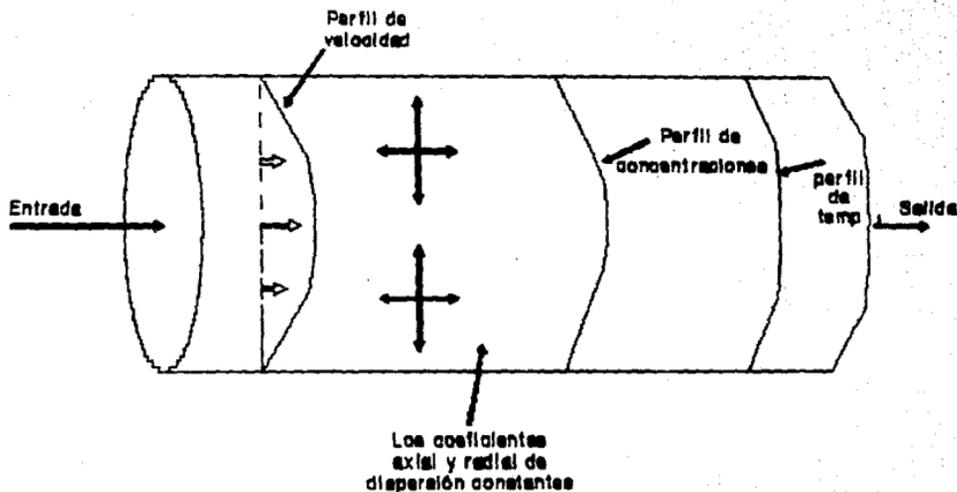
Después de introducir las anteriores simplificaciones, se encuentra que los balances de masa y energía, en coordenadas cilíndricas simétricas, corresponden a las dos siguientes ecuaciones:

$$u_z(r) \frac{\partial C_i}{\partial z} = \bar{D}_z(r) \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \left( \frac{\partial}{\partial r} r \bar{D}(r) \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) + R_i \quad (4)$$

$$\rho C_p \left( u_z(r) \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k_z(r) \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \left( \frac{\partial}{\partial r} r k_r(r) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \Delta H_r R_A \quad (5)$$

Este modelo es con gradiente múltiple, con perfil de velocidad y dispersión radial y axial: Con las siguientes condiciones límite consideradas en la Tabla 4.1.

Las Figuras 4.2 a 4.7 ilustran el comportamiento físico que se ha supuesto para este modelo y los cinco siguientes. Estas ecuaciones son relativamente generales y toman en cuenta las variaciones radiales de velocidad, los coeficientes efectivos de dispersión y las conductividades caloríficas efectivas. En la mayor parte de las aplicaciones químicas se supone que se conoce el perfil de velocidad puesto que las ecuaciones del balance de cantidad de movimiento resultan de una resolución matemática difícil. Por lo tanto, únicamente se escriben los balances de materia y energía y se supone que  $u_z(r)$  se conoce a partir de



**Figura 4.3 Gradiente Múltiple, con Perfil de Velocidad y Coeficientes de Dispersión Radial y Axial Constantes**

medidas experimentales. Las ecuaciones de este punto, tal como están, sólo se pueden resolver por métodos numéricos, y aún estas técnicas resultan bastante complejas. Sin embargo, no siempre se requiere un conocimiento tan detallado y, con frecuencia, se pueden hacer más simplificaciones en el modelo.

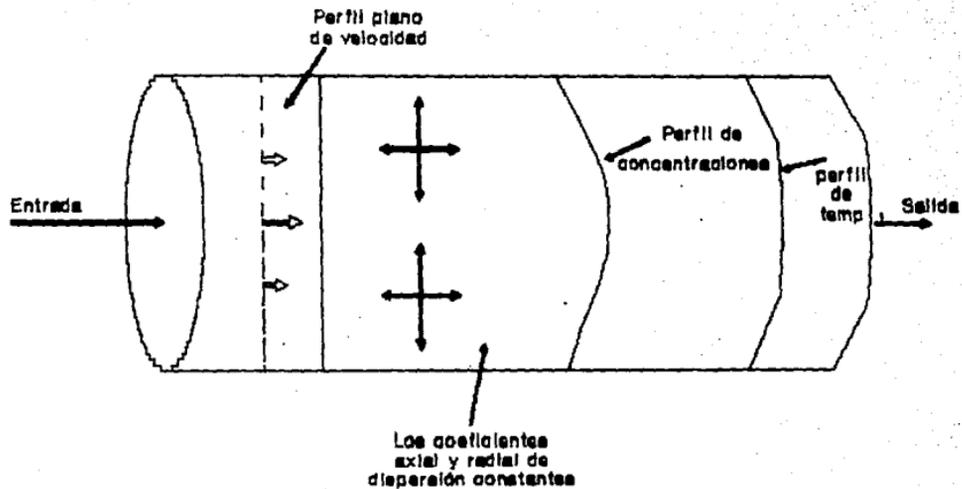
ecuación 4	ecuación 5
$u_z(r)C_0 = u_z(r)C_1(0, r)$	$u_z(r)T_0 = u_z(r)T(0, r)$
$- \bar{D}_z(r) \frac{\partial C_1(0, r)}{\partial z}$	$- \frac{\bar{K}_z(r)}{\rho C_p} \frac{\partial T(0, r)}{\partial z}$
$\frac{\partial C_1}{\partial z}(L, r) = 0$	$\frac{\partial T}{\partial z}(L, r) = 0$
$\frac{\partial C_1}{\partial r}(z, 0) = 0$	$\frac{\partial T}{\partial r}(z, 0) = 0$
$\frac{\partial C_1}{\partial r}(z, R) = 0$	$\frac{\partial T}{\partial r}(z, R) = \frac{U}{K_R} [T_S - T(z, R)]$

TABLA 4.1 CONDICIONES LIMITE PARA LAS ECUACIONES. 4 Y 5.

Un segundo modelo está basado en el hecho experimental de que la dispersión efectiva axial y radial, así como los coeficientes efectivos de conductividad, pueden a veces tomarse como aproximadamente constantes para toda la sección transversal del tubo. Aun así estas ecuaciones resultan difíciles de resolver. Las ecuaciones correspondientes al modelo del gradiente múltiple, con perfil de velocidad y coeficientes de dispersión radial y axial constantes son:

$$u_z(r) \frac{\partial C_1}{\partial z} = \bar{D}_z \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2} + \frac{D_R}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C_1}{\partial r} \right) + R_1 \quad (6)$$

$$\rho C_p \left[ u_z(r) \frac{\partial T}{\partial z} \right] = K \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{K_R}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \Delta H_r R_A \quad (7)$$



**Figura 4.4 Gradiente Múltiple, con Velocidad Constante.**

Para este modelo las condiciones límite tienen la misma forma que las del modelo 1, con :

$$\bar{D}_z(r) \rightarrow \bar{D}_z \text{ para la ecuación 6 y,}$$

$$\bar{k}_z(r) \rightarrow \bar{k}_z, \text{ para la ecuación 7.}$$

Para obtener ecuaciones diferenciales con coeficientes constantes se admite que el perfil de velocidad  $u_z(r)$  sea plano. De esta forma se combinan los efectos de mezclado axial con los demás efectos de dispersión axial en los que puede denominarse coeficiente global de dispersión axial,  $\bar{D}_L$ , y la conductividad global,  $\bar{k}_L$ . Las ecuaciones en derivadas parciales, con coeficientes constantes, que así se forman en un tercer modelo, (gradiente múltiple, con velocidad constante), permiten el tratamiento matemático del modelo de una forma algo más sencilla que para el punto 2, ecuaciones 8 y 9.

$$u_z \frac{\partial C_1}{\partial z} = \bar{D}_L \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2} + \frac{\bar{D}_R}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial C_1}{\partial r}) + R_1 \quad (8)$$

$$\rho C_p \left[ u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \bar{k}_L \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{\bar{k}_R}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial T}{\partial r}) + \Delta H_r R_A \quad (9)$$

Las condiciones límites son las mismas que en el segundo modelo, con:

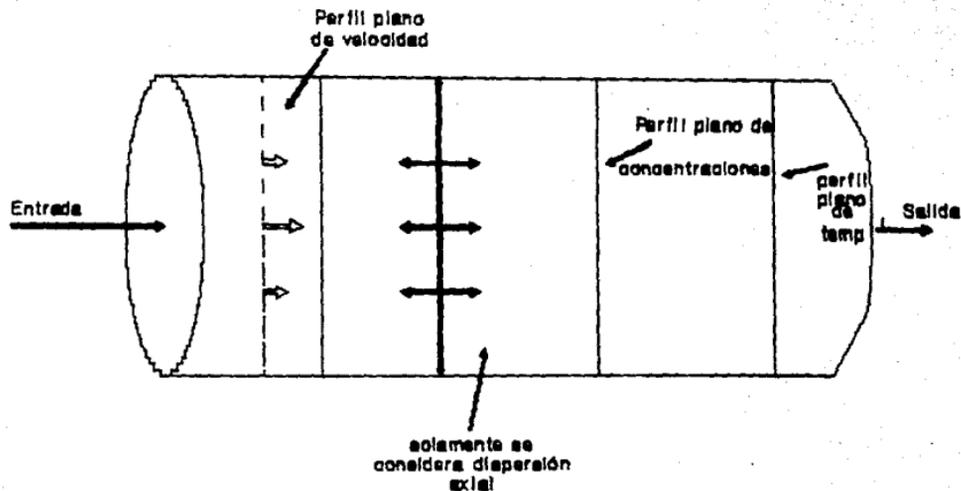
$$u_z(r) \rightarrow u_z$$

$$\bar{D}_z \rightarrow \bar{D}_L$$

$$\bar{k}_z \rightarrow \bar{k}_L$$

Todos los modelos considerados hasta ahora son de parámetro distribuido, estado estacionario, y usan ecuaciones con derivadas parciales.

Cada uno de los modelos considerados anteriormente toman en cuenta gradientes de concentración tanto en la dirección radial



**Figura 4.5 Gradiente Múltiple, ignorando los Gradientes Radiales.**

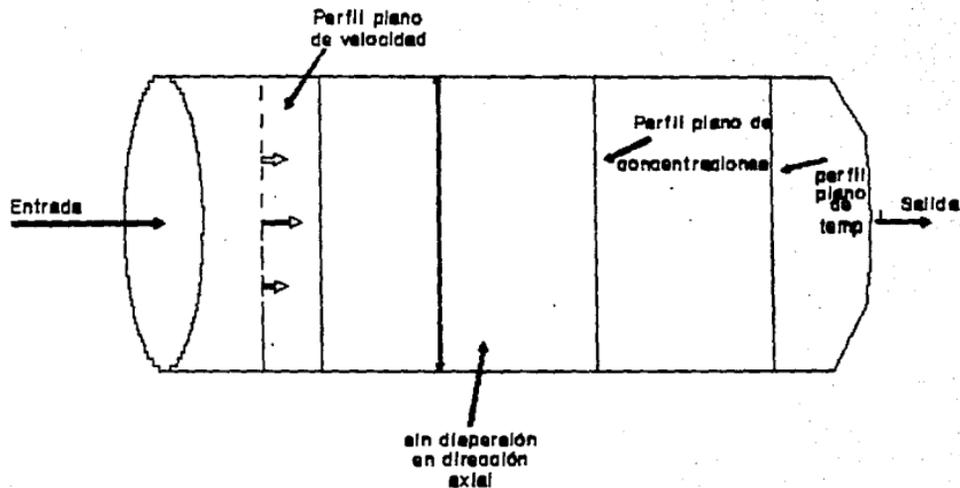
como en la axial, de forma tal que intervienen dos variables independientes,  $\varphi$  y  $r$ . Una suposición extra que reduce considerablemente la complejidad de las ecuaciones consiste en ignorar todos los gradientes radiales. Esto nos lleva a una única variable independiente,  $\varphi$ , y reduce la descripción matemática a ecuaciones diferenciales ordinarias. Generalmente, estas ecuaciones son más fáciles de resolver, tanto analítica como numéricamente, que las ecuaciones con derivadas parciales. El balance de energía correspondiente al modelo 4, y todos los modelos subsiguientes, contienen un término extra:

$$U \frac{P}{S} (T_s - T) = U \frac{2}{R} (T_s - T) \quad (10)$$

que es preciso añadir para tener en cuenta la energía transmitida a través de la paredes del reactor. En los modelos en que intervienen gradientes radiales, la transferencia a través de los límites se ha tomado en cuenta mediante la condición límite radial para la pared. Cuando se suprime la variable  $r$ , también existe transferencia de energía desde la pared del tubo del reactor y es preciso incluirla en el análisis. La única forma de considerar esta entrada es incluirla en la ecuación diferencial misma.

La siguiente suposición que puede hacerse es ignorar todos los efectos de mezclado y dispersión axial,  $\bar{D}_L = \bar{K}_L = 0$ , esto indica que se desprecian todos los flujos a excepción del término de flujo global.

El modelo del punto 5 es el más sencillo que puede ser usado para predecir la conversión en el reactor. Cada uno de estos modelos deben resolverse numéricamente debido a la complicación de los términos no lineales correspondientes a la velocidad de reacción y la generación de energía. Utilizando la ecuación de Arrhenius para la variación de la constante de velocidad de



**Figura 4.8 Gradiente Máximo, Ignorando Cualquier Dispersión**

reacción con la temperatura

$$R_1 = [k_0 e^{(-E/RT)}] f_1(C_A, C_B, \dots) \quad (11)$$

se observa que el modelo es altamente no lineal. Por lo tanto, para los modelos de los puntos 4 y 5 solamente se pueden obtener soluciones analíticas en ciertos casos especiales, tales como energía de activación cero,  $\Delta E = 0$ , o para reacciones isotérmicas con  $f_1(C_A, C_B, \dots)$  lineal con respecto a la concentración

$$f_1(C_A, C_B, \dots) = \alpha C_A + \beta C_B + \dots \quad (12)$$

La última simplificación que se puede hacer conduce al modelo macroscópico del punto 6, que se obtiene integrando el modelo del punto 5 para toda la longitud del reactor.

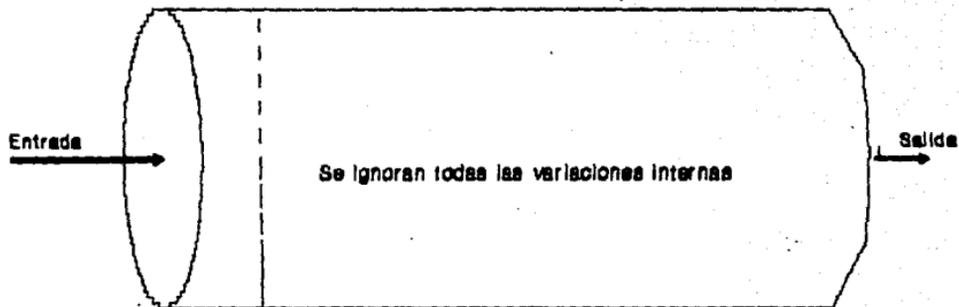
Las ecuaciones de este modelo son en esencia balances totales de masa y energía aplicados a todo el reactor. Estas ecuaciones no se pueden emplear para predecir conversiones puesto que no hay forma de predecir  $R_{1,med}$ . Sin embargo, este modelo está expresado en función de ecuaciones algebraicas que resultan de resolución relativamente sencilla. Las ecuaciones correspondientes a estos modelos se describen en los siguientes párrafos:

Modelo 4, modelo del gradiente múltiple, ignorando los gradientes radiales.

$$u_z \frac{dC_1}{dz} = \beta \frac{d^2 C_1}{dz^2} + R_1 \quad (13)$$

$$\rho C_p \left[ u_z \frac{dT}{dz} \right] = K_1 \frac{d^2 T}{dz^2} + \Delta H_1 R_1 + U \frac{P}{S} (T_n - T) \quad (14)$$

Sus condiciones límite son las siguientes:



**Figura 4.7 Balances Macroscópicos de Materia y Energía  
Suponiendo que la Conversión es Conocida.**

Ecuación 13	Ecuación 14
$u_z C_o = u_z C_1(0)$	$u_z T_o = u_z T(0)$
$- D_L \frac{dC_1(0)}{dz}$	$- \frac{k_L}{\rho C_p} \frac{dT(T)}{dz}$
$\frac{dC_1}{dz}(L) = 0$	$\frac{dT(L)}{dz} = 0$

El modelo 5, del gradiente múltiple ignorando cualquier dispersión, tiene las ecuaciones siguientes.

$$u_z \frac{dC_1}{dz} = R_1 \quad (15)$$

$$\rho C_p \left[ u_z \frac{dT}{dz} \right] = + \Delta H_r R_1 + U \frac{P}{S} (T_s - T) \quad (16)$$

cuyas condiciones límite son  $C_{1,0} = C_1(0)$  y  $T_0 = T(0)$  respectivamente.

Por último el sexto modelo para balances macroscópicos de masa y valor suponiendo que la conversión es conocida, esta representado por las ecuaciones 17 y 18, y no poseen condiciones límite.

$$\Delta(C_1 u_z S) = R_1 a_0 V_{tot} \quad (17)$$

$$\Delta(\rho C_p T u_z S) = + \Delta H_r R_1 a_0 V_{tot} + U A_{tot} (T_s - T) \quad (18)$$

Algunos símbolos especiales son:

U = coeficiente global de transferencia de calor en la pared

$\frac{P}{S}$  =  $\frac{\text{perímetro del reactor}}{\text{área de la sección transversal}}$

$V_{tot}$  = Volumen total del reactor

$A_{tot}$  = área total de superficie del reactor.

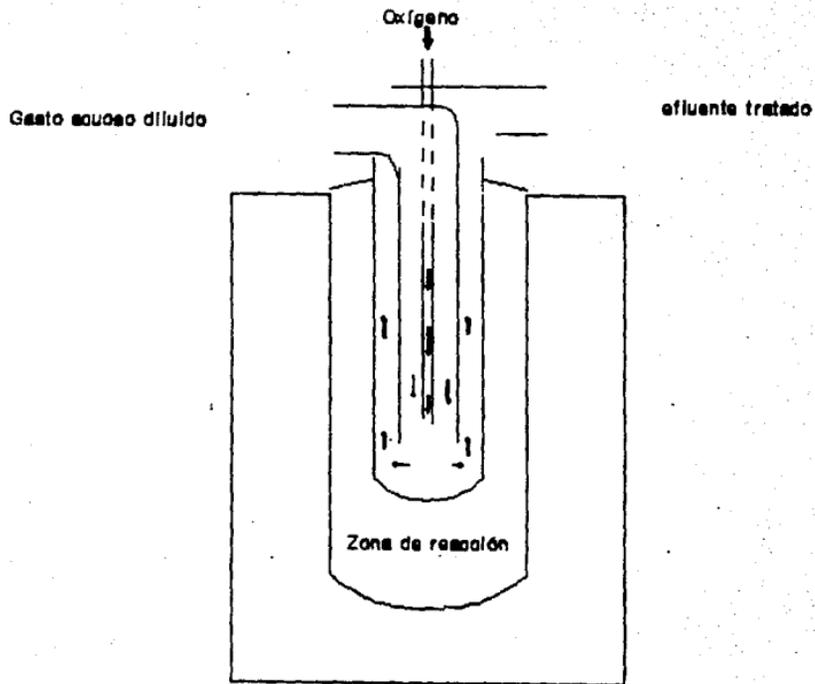
#### **4.3. Otros Modelos para Reactores Tubulares.**

Los modelos para reactores tubulares descritos en el punto 4.2, sólo son algunos ejemplos de modelos, ya que existen muchos más tipos de reactores tubulares, que operan a muy diferentes condiciones, y que por tanto, poseen su propio modelo. Algunos otros modelos para reactores tubulares son los siguientes:

1. Reactores tubulares autotérmicos no adiabáticos.
2. Reactores tubulares autotérmicos adiabáticos.
  - 2.1. Reactor tubular con intercambio de calor interno.
  - 2.2. Reactor tubular con intercambio de calor externo.
3. Reactores tubulares enfriados y calentados a través de la pared.
  - 3.1 Reactores con temperatura de pared constante.
  - 3.2 Reactores tubulares enfriados en paralelo y en contracorriente.

##### **4.3.1 Reactores Tubulares Autotérmicos.**

Los reactores tubulares con intercambio de calor interno son parte de una clase de reactores que operan autotérmicamente. Estos procesos autotérmicos incluyen una realimentación de calor que acarrea la presencia de múltiples estados estables. Esto es muy importante en la operación de reactores tubulares autotérmicos. Además, generalmente este tipo de reactores operan en el régimen permanente; los procesos autotérmicos permiten que el calor de reacción utilizado mantenga una temperatura bastante alta para que la reacción ocurra. En muchos casos, estos reactores operan no-adiabáticamente. Un ejemplo de este tipo de operación es el reactor de oxidación usado para oxidar gases acuosos diluidos (Figura 4.8).



**Figura 4.8 Reactor de Oxidación**

#### **4.3.2 Reactores Tubulares Enfriados y Calentados a Través de la Pared.**

El reactor isotérmico es el más sencillo de los reactores, pero implica que no hay efectos importantes de temperatura o que pueden ser controlados por un control de temperatura. El reactor con un perfil óptimo de temperatura es claramente el más deseable, sin embargo, esto significa que la velocidad de intercambio de calor puede ser regulada con precisión en cada punto. Entre estos extremos existe una gran variedad de posibles diseños.

Existen, por tanto, reactores con temperatura de pared constante, un ejemplo de estos son los que realizan una reacción de "cracking" endotérmica, y por otra parte reactores enfriados en paralelo y en contracorriente (Figuras 4.9 y 4.10), como en el caso del reactor de síntesis de amoníaco.

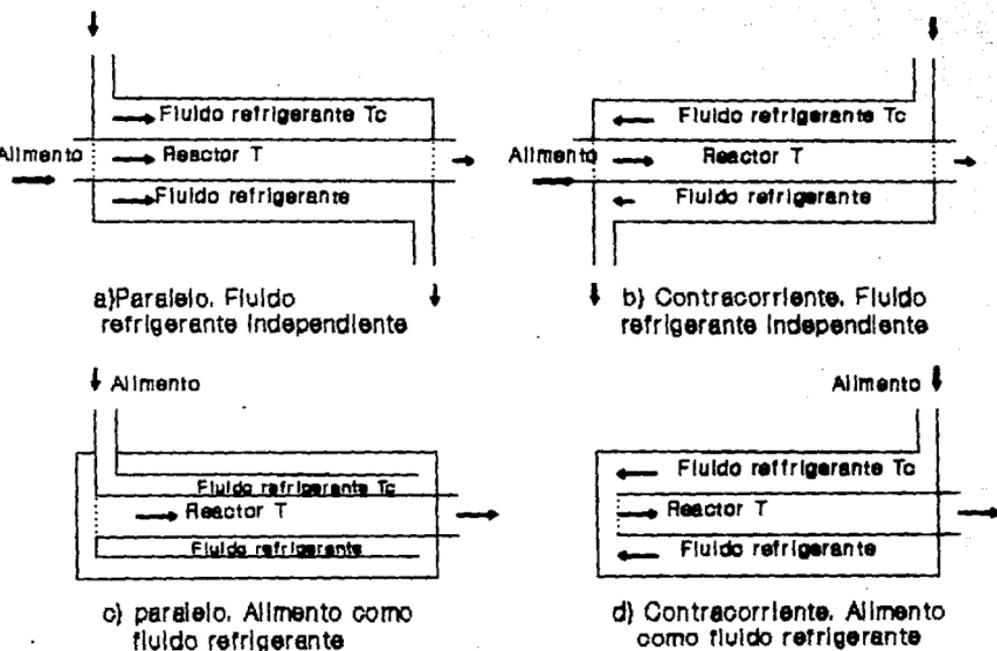
#### **4.4 Ejemplos Prácticos del Uso de Reactores Tubulares**

Como se dijo en la sección 2.4 es recomendable el uso de reactores tubulares en los casos en que:

1. Se trabaje con gases y vapores.
2. Se requiera de una producción grande en forma continua.
3. Se tengan reacciones endotérmicas o exotérmicas.
4. Sean empacados con catalizadores sólidos, y por tanto actúen como reactores catalíticos de lecho fijo.
5. Sean empacados con un reactante sólido, y actúen por tanto, como reactores heterogéneos sólido-gas de lecho fijo.

Algunos ejemplos importantes del uso de reactores tubulares son los siguientes:

1. Se usan en el "cracking" térmico de etano, propano y sus mezclas.



**Figura 4.9 Esquemas de Refrigeración de un Reactor tubular**

2 En el "cracking" de *iso*-butano, de *n*-butano y de mezclas de etano-propano-*n*-butano.

3. En la obtención de propileno, a partir del etileno y 2-buteno.

4. En la hidrogenación del butiraldehído a butanol.

5. En la producción de estireno.

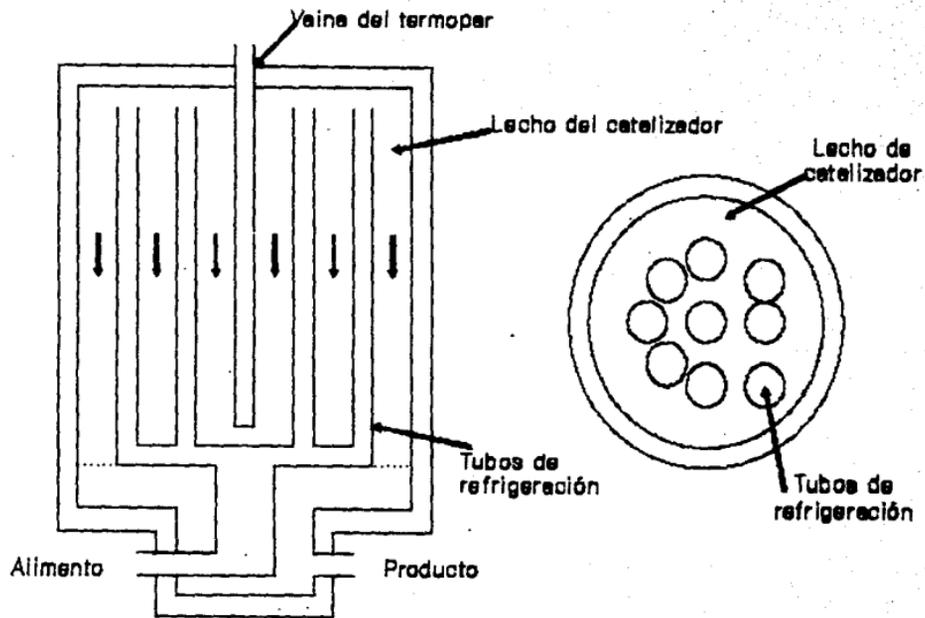
#### **4.4.1 "Cracking" Térmico de Etano, Propano y sus Mezclas.**

La pirolisis de hidrocarburos es la mayor fuente de etileno, propileno, butadieno y aromáticos, y principal abastecedora de la industria petroquímica. El etano y el propano son hidrocarburos ligeros obtenidos del fraccionamiento de gas natural, son usados principalmente en síntesis orgánicas, como refrigerantes y en la producción de etileno y propileno.

Para el diseño del serpentín en que se lleva a cabo el "cracking", generalmente no es suficiente con la ecuación cinética global de la desaparición de la alimentación, pues otro aspecto importante a ser considerado en el diseño es la predicción de la distribución del producto. Para esto se requiere de un conjunto de ecuaciones cinéticas para el conjunto de producción de productos de interés. Para el "cracking" del etano y propano deben de proponerse varios esquemas de reacción. Estos esquemas contienen muchos parámetros cinéticos que son obtenidos por procedimientos de prueba y error. Aunque en otras áreas como en catalisis heterogénea los parámetros cinéticos se obtienen por caminos más sistemáticos y rigurosos como la estimación por mínimos cuadrados.

#### **4.4.2 "Cracking" de *iso*-butano, *n*-butano, y mezclas de etano-propano-*n*-butano.**

Además del hidrógeno el efluente de un reactor tubular para



**Figura 4.10 Reactor Tubular Refrigerado en Contracorriente**

el "cracking" térmico de hidrocarburos generalmente contiene una amplia cadena de hidrocarburos, principalmente olefinas y aromáticos del metano y desde  $C_6$  y mayores, dependiendo de la alimentación. El iso-butano y el n-butano son hidrocarburos, que al igual que el etano y el propano se obtienen a partir del gas natural, son usados principalmente en síntesis orgánicas, como refrigerantes, para la elaboración de caucho sintético y como combustibles de alto octanaje. Para la predicción de estas composiciones se requiere de un conjunto de reacciones que reflejen el "cracking" además de las correspondientes ecuaciones cinéticas. Estos esquemas de reacción son generalmente de naturaleza molecular, más bien que radical, para evitar los problemas asociados con la integración de un conjunto de ecuaciones diferenciales, y los parámetros cinéticos son determinados por prueba y error.

#### **4.4.3 Propileno a Partir de Etileno y 2-buteno.**

El etileno es un gas incoloro con sabor y olor dulce, que se obtiene del "cracking" térmico del etano, propano, butano y gases malolientes de refinarias. Es un producto de gran importancia pues es usado para la elaboración de alcohol etílico, etilenglicol, dicloruro de etileno, cloruro de etilo, óxido de etilo, estireno, acetaldehído, poliestireno, polietileno, cloruro de polivinilo, para refrigeración criogénica y como anestésico, y por supuesto para la obtención de propileno.

El propileno es un gas incoloro que se obtiene principalmente del "cracking" catalítico y térmico de hidrocarburos, como coproducto con el etileno. Es usado para la producción de alcohol isopropílico, glicerol sintético, acrilonitrilo, cumeno. También, para ácido acrílico y resinas vinílicas.

Para la producción del propileno a partir del etileno y el

2-buteno o por una combinación de estos dos, el Instituto Francés del Petróleo (IFP) y la Corporación China del Petróleo (CPC), han desarrollado conjuntamente el proceso de metatesis. El cual consiste en una reacción equilibrada ligeramente exotérmica (0.4 Kcal/mol), y cuya reacción es la siguiente:



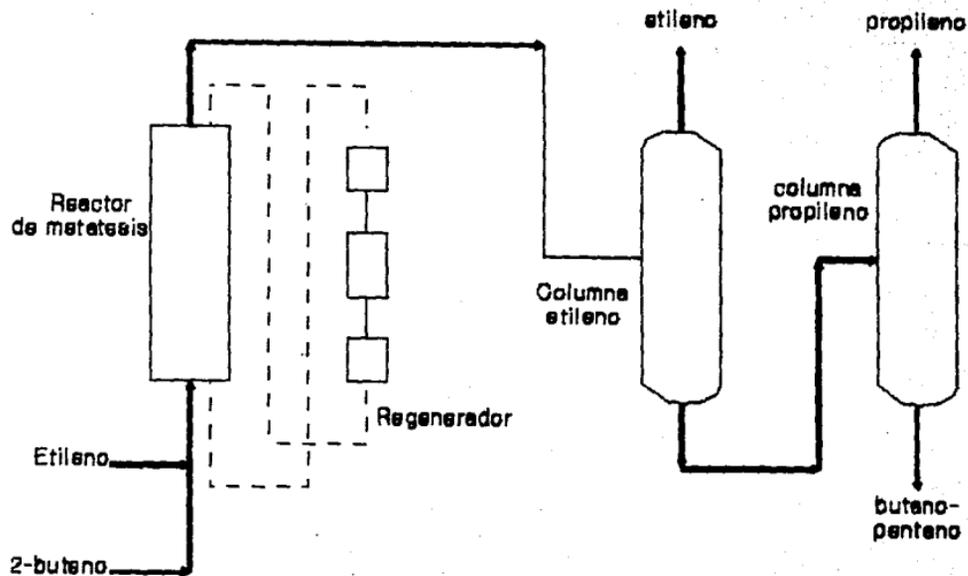
La conversión de equilibrio se encuentra en un rango de 55 a 65% dependiendo de la temperatura. La reacción de metatesis<sup>(27)</sup> ocurre a alta temperatura en fase gaseosa (150 a 350°C) con Molibdeno como catalizador, o a baja temperatura (150°C) con Renio como catalizador trabajando en fase gas o fase líquida. El proceso de metatesis se caracteriza por:

- Una baja temperatura de operación, generalmente 35°C
- Una presión de operación suficiente para mantener los componentes de la reacción en la fase líquida a la temperatura de reacción.
- No requerir de solventes.
- Una regeneración semicontinua del catalizador.

En la Figura 4.11 se muestra el diagrama de flujo de este proceso.

#### 4.4.4 Hidrogenación de Butiraldehído a Butanol.

A partir del proceso de hidrogenación (Figura 4.12) del butiraldehído se obtiene un butanol de alta pureza<sup>(22)</sup>. Este proceso se lleva a cabo en un reactor de tubos y coraza empacado con un catalizador, por el pasa la fase vapor, el catalizador usado es Rodio. El butiraldehído se obtiene a partir de la reacción de propileno con monóxido de carbono e hidrógeno en presencia de catalizador de Cobalto, o bien, por deshidrogenación de vapores de butano sobre catalizador. Se usa como intermedio.



**Figura 4.11 Diagrama de flujo del proceso de metatesis.**

#### **4.4.5 Producción de Estireno.**

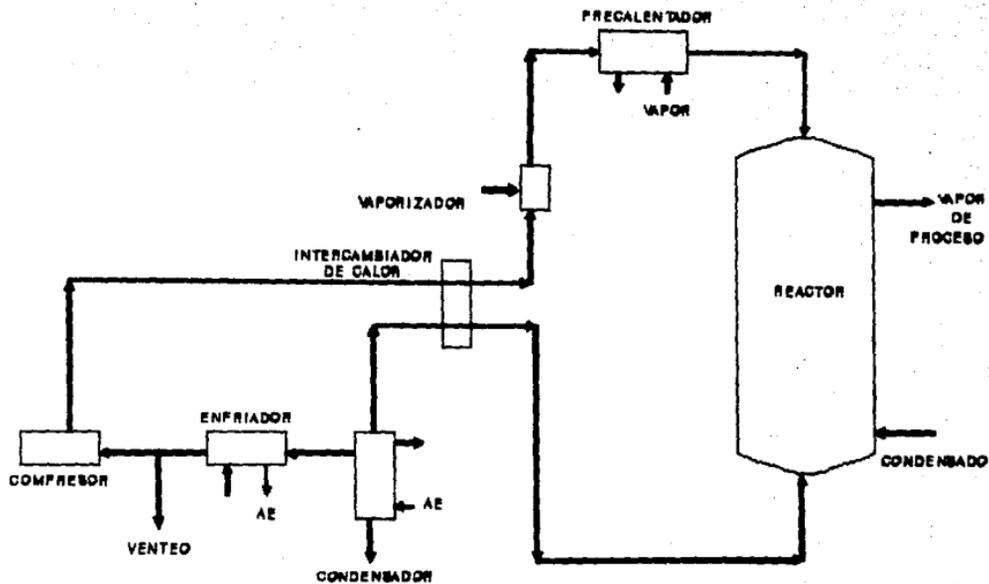
El estireno es un monómero que se obtiene a partir de etileno y benceno en presencia de cloruro de aluminio dando etilbenceno (Figura 4.13). El etilbenceno es un líquido incoloro aromático, más pesado que el aire, con punto ebullición a 136.187°C, el cual se deshidrogena catalíticamente a 630°C dando lugar al estireno.

El estireno es muy usado en el mundo principalmente por la gran demanda que existe de poliestireno, además de que es usado para la producción de resinas de ABS, SB latex, SBR, UPE (Tabla 4.5), revestimientos protectores (látex de estireno-butadieno, productos alquídicos), resinas copoliméricas, poliésteres estirenados.

#### **4.5 Modelo Para el Reactor Tubular Homogéneo.**

Por lo mencionado en los cinco puntos anteriores se ha determinado que el ejemplo más completo es el de la producción de estireno, puesto que este monómero es de gran importancia en la industria y por tanto de gran demanda.

En la simulación de una planta de estireno, el modelo matemático del reactor consiste de las ecuaciones de balance de masa para cada componente químico, las ecuaciones de balance de calor y balance de masa (Tabla 4.2). Tanto las reacciones homogéneas como las heterogéneas son incluidas en el modelo. Aunque todo el equipo es incluido en la sección de recuperación, las suposiciones razonables llevan a la simplificación del modelo de recuperación, el cual tiene la exactitud de un modelo complejo y reduce el tiempo de computación. Las ecuaciones del modelo son solucionadas numéricamente. La función del objetivo global considera tanto fijos como variables los costos de producción. La



**Figura 4.12 Diagrama de Flujo Para un Sistema de Reacción de Hidrogenación en Fase Vapor**

optimización se realiza usando un algoritmo de búsqueda directa considerando toda la planta.

Con la ventaja de las computadoras, muchos modelos complejos proporcionan predicciones exactas del desarrollo de varios equipos de proceso. El uso de tales modelos está además limitado a algunos grupos especializados.

La mayoría del estireno en el mundo es producido por deshidrogenación de etilbenceno sobre un catalizador. El proceso generalmente incluye los siguientes equipos:

- Reactor de deshidrogenación.
- Supercalentador de vapor.
- Intercambiador de calor.
- Compresor de gas.
- Columnas Etilbenceno/estireno.

De todas estas unidades el reactor es la más importante<sup>(26)</sup>.

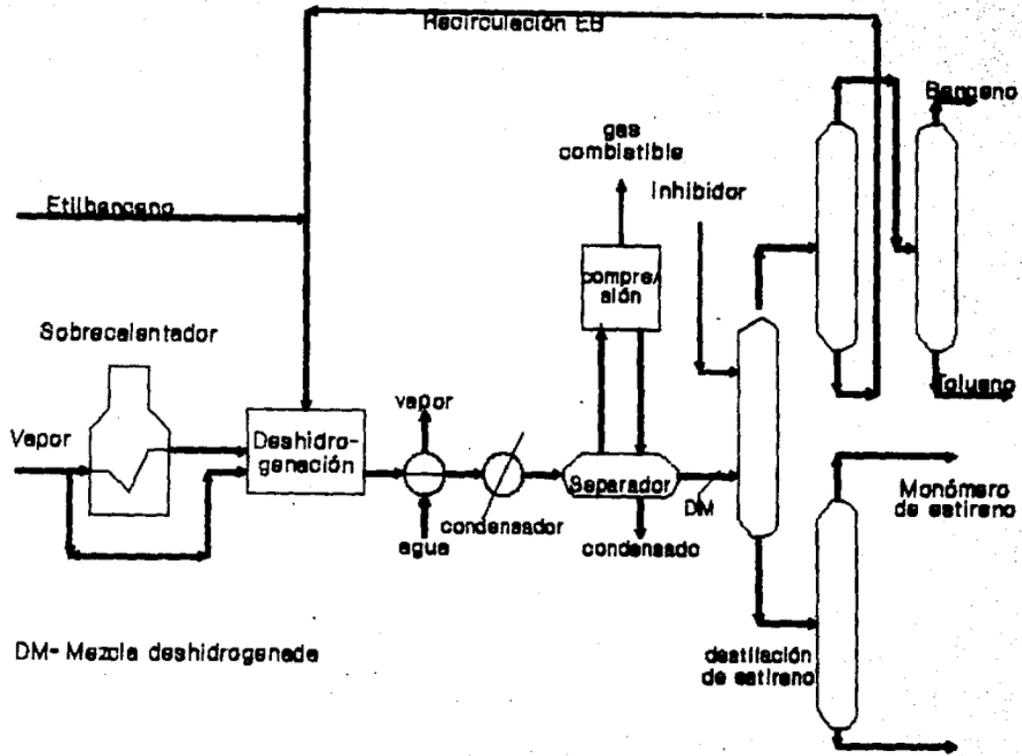
Aunque todos los procesos tienen en común la deshidrogenación catalítica del etilbenceno a estireno en presencia de vapor, hay dos propuestas distintas para el diseño de la sección de reacción: el proceso adiabático y el proceso isotérmico. Como la reacción de deshidrogenación es endotérmica, se requiere suministrar calor y etilbenceno convertido a 25°C (540-570 Btu/lb). En el proceso adiabático, el vapor sobrecalentado a 800-950°C es mezclado con la alimentación de etilbenceno precalentado antes de exponerlo a catalisis. El proceso isotérmico tiene lugar en un reactor tubular y el calor de reacción es suministrado indirectamente por un intercambiador de calor entre el fluido de proceso y un medio conveniente de transferencia de calor, como gas combustible (tecnología BASF).

Para una determinada deshidrogenación catalítica, la vida del catalizador, la conversión molar de etilbenceno (moles de

etilbenceno convertidos a través del reactor divididos por los moles de etilbenceno de entrada al reactor), y la selectividad molar de etilbenceno a estireno (moles de estireno producido a través del reactor divididos por los moles de etilbenceno convertidos a través del reactor), son afectados por la presión de operación del reactor, la razón molar vapor a hidrocarburo, la temperatura de operación del reactor y la velocidad específica horaria del líquido (LHSV, volumen de líquido de hidrocarburo alimentado por hora dividido por el volumen total de deshidrogenación catalítica). Para toda catalisis hay un arreglo entre actividad, conversión del etilbenceno, y selectividad de estireno.

La reacción de deshidrogenación produce dos moles de producto, estireno e hidrógeno, por mol de etilbenceno alimentado, el curso de la reacción deseada puede ser favorecido al agregar vapor al sistema de reacción para reducir la presión parcial del estireno y/o por reducción de la presión de operación del reactor<sup>(19,26)</sup>. Ambas acciones favorecen el avance de reacción y aumentan la conversión molar de etilbenceno. La presión de operación adiabática generalmente es de alrededor de 138 KPa (20 psi), con razones molares vapor a hidrocarburo de 14:1. Para diseños de reactores isotérmicos, donde es usado calor indirecto para satisfacer las necesidades endotérmicas, las razones molares vapor a hidrocarburo son de 6-8:1, y la presión de operación es similar a la del proceso adiabático.

La conversión molar de EB es también una función de la temperatura, una temperatura alta produce altas conversiones de una manera casi lineal, un aumento en la conversión puede obtenerse por aumento de la temperatura del reactor. Sin embargo, hay un límite superior para la temperatura del reactor, cuando las temperaturas son elevadas a cerca de 610°C ocurre "cracking" térmico de EB y estireno. En el proceso isotérmico, el



**Figura 4.13 Diagrama del Proceso de Estireno de la Monsanto/Lummus Crest**

calentamiento indirecto en un reactor tubular proporciona el calor de reacción, por lo que el reactor puede mantenerse a una temperatura de 580-610°C a través del lecho catalítico. Si se mantiene este rango de temperaturas, las reacciones de "cracking" térmico son minimizadas.

En cuanto al (LHSV) la conversión molar de EB es una función inversa de este parámetro. Un reactor es diseñado para LHSV's de 0.4-0.6 m<sup>3</sup>/h de EB por m<sup>3</sup> de catalizador. Dentro de este rango por deshidrogenación catalítica se obtiene de 60-70% de conversión molar de EB y un 90-95% de selectividad molar de EB. Con el proceso isotérmico se obtiene resultados similares.

La principal diferencia entre los procesos isotérmico y adiabático está en el modo en el que es suministrado el calor de reacción endotérmico. En principio, el reactor isotérmico es diseñado como un intercambiador de tubos y coraza. En el lado del tubo está el lecho fijo para la deshidrogenación catalítica y el gas reactante, y en el lado de la coraza un medio conveniente de transferencia de calor. El catalizador es soportado por una rejilla en el fondo del tubo. Los diámetros de los tubos del reactor son de 10-20 cm y las longitudes de 2.4 a 3.7 m.

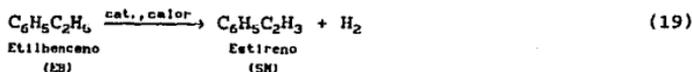
El reactor isotérmico ofrece sobre el reactor adiabático las siguientes ventajas: reduce requerimientos de dilución de vapor y reduce el "cracking" térmico del etilbenceno y del estireno.

El factor más importante en la estabilidad económica del proceso de deshidrogenación catalítica es el catalizador, el rendimiento del catalizador determina la relación de conversión de EB/selectividad de estireno, la razón molar vapor a hidrocarburo, el LHSV apropiado, y el ciclo de vida factible. Todos los catalizadores comerciales son formulados alrededor de una base de óxido férrico (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). Inherente a este compuesto

férrico esta la reducción a óxidos menores a las temperaturas de reacción de deshidrogenación, la presencia de estos aumenta la formación/deposición de coque en el catalizador y subsecuentemente su desactivación, por lo que para su formulación es esencial el uso de estabilizadores y retardadores de coque. Los aditivos más usados son óxido de cromo ( $Cr_2O_3$ ) como estabilizador y óxido de potasio (como  $K_2CO_3$ ) como el retardador de coque. Además, vapor, en suficiente cantidad, retarda la depositación de coque como consecuencia de la reacción de cambio agua-gas: el coque y el vapor reaccionan para formar dióxido de carbono y agua.

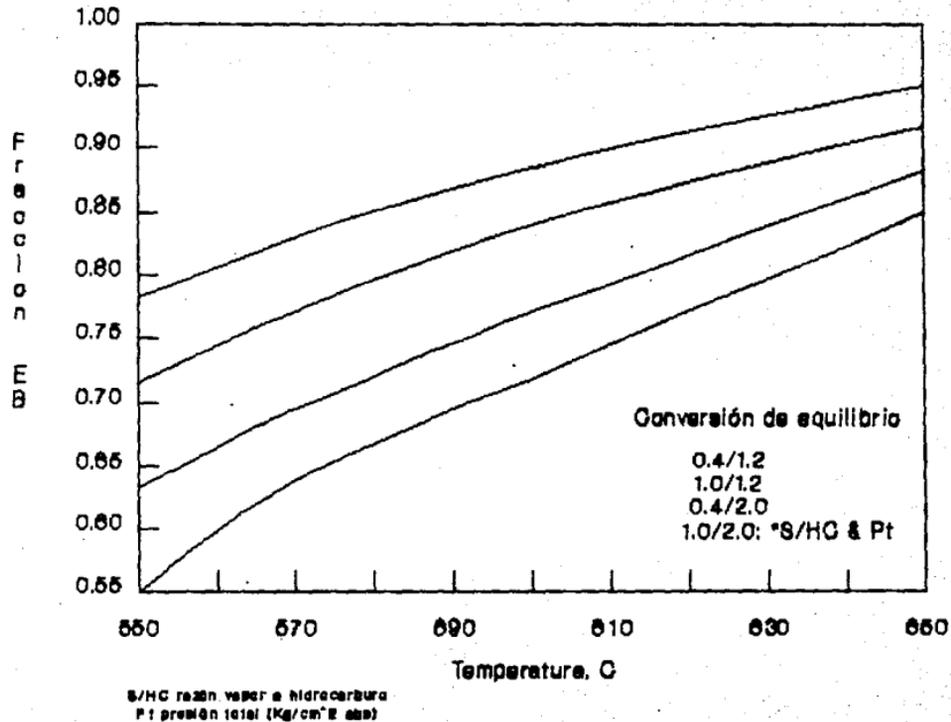
#### 4.5.1 Reactor de Deshidrogenación.

La alimentación de hidrocarburos al reactor es de etilbenceno fresco mezclado con etilbenceno reciclado, el cual es mezclado con vapor sobrecalentado el cual no sólo sirve como medio de calentamiento, sino también como diluyente. La reacción de etilbenceno a estireno es endotérmica y es llevada a cabo en reactores multitubulares con lechos empacados con catalizador. La reacción más importante que ocurre es:



Para minimizar la conversión de equilibrio termodinámico el reactor es operado a bajo vacío. La conversión de equilibrio termodinámico es de 100% bajo condiciones normales de operación. Los efectos de vapor de Etilbenceno (EB), temperatura y presión son mostrados en la Figura 4.14. Las energías libres del gas son usadas para calcular la constante de equilibrio. La conversión de equilibrio basada en la reacción de la ecuación 19 es:

$$K_p = X^2 P_t / (1-X) (1+X+D) \quad (20)$$



**Figura 4.14 Deshidrogenación de Etilbenceno**

donde D es la velocidad de dilución molar (moles de vapor/moles de EB alimentado). En aplicaciones comerciales la conversión de equilibrio raramente excede del 85%. La selección de temperatura, presión y flujo de vapor de EB es crítica para la economía de la planta. Además, si la temperatura de entrada es alta, también se presenta algún "cracking" térmico. Las reacciones térmicas y catalíticas son resumidas en la Tabla 4.3. Todas las reacciones térmicas y catalíticas son consideradas en un modelo real.

Las ecuaciones gobernantes son no lineales y son integradas numéricamente. Para las simulaciones de todo reactor comercial se emplea la presión de succión al compresor y es especificada la presión de salida del reactor. El sistema constituye un problema de valores a la frontera, el cual puede ser solucionado utilizando un sistema iterativo y la convergencia generalmente se alcanza en dos o tres iteraciones.

**Actividad Catalítica.** Como son muchos los catalizadores comerciales utilizados en varios procesos, la deshidrogenación catalítica disminuye la actividad. La disminución de la actividad catalítica se atribuye a la depositación del catalizador. En la producción de estireno, la experiencia muestra que además de la depositación, la disminución de actividad del material contribuye significativamente a la disminución de la actividad. Para incorporar este efecto debe usarse una ecuación empírica<sup>(26)</sup>.

$$a = f(x, T, c, t) \quad (21)$$

La ecuación 21 es el producto de dos términos, uno para la depositación y otro para la disminución de la actividad del componente. Es raro que un reactor sea operado a condiciones constantes para un ciclo completo.

En las Tablas 4.2 y 4.4 se proporcionan las ecuaciones para

los balances de masa y energía y para el modelo cinético correspondientes a la reacción de deshidrogenación del estilbenceno para la formación de estireno, estas ecuaciones son empleadas en el programa de simulación para obtener datos como longitud del reactor, diámetro del reactor, composiciones de productos y reactivos y conversión de reactivos a productos, así como para crear un perfil de temperatura.

Debido a que el reactor trabaja de manera continua, y que por tanto hay una alimentación de reactivos y salida de productos constante, el sistema de control tendrá que asegurar que las condiciones de operación permanezcan constantes para poder satisfacer las necesidades de producción, por lo tanto nuestro sistema de control deberá contar como mínimo con un medidor de flujo a la entrada y la salida del reactor, con un medidor de presión para poder controlar la caída de presión a lo largo del tubo y un elemento medidor de temperatura ya que esta debe variar muy poco a lo largo del tubo.

Después de haber creado el modelo y de haber cubierto los requerimientos necesarios para esto, el siguiente paso es la simulación de dicho modelo, lo cual se hará en el capítulo siguiente, mediante la creación de un programa computacional.

TABLA 4.2 ECUACIONES PARA EL MODELO DEL REACTOR TUBULAR HOMOGENEO.

ECUACION GENERAL PARA EL BALANCE DE MASA DEL REACTOR ISOTERMICO

$$\frac{\rho u dX_1}{dL} = \sum r_1 \rho_c$$

BALANCE DE MASA EN TERMINOS DE FLUJO Y AVANCE DE REACCION

$$F_E = F_{E0} + c$$

$$F_{SM} = c$$

$$F_M = c$$

$$F_T = F_{E0} + 3c$$

$$\frac{dc}{dL} = A_T + \rho_c(1 - c) + k_1$$

ECUACION GENERAL PARA EL BALANCE DE ENERGIA DEL REACTOR ISOTERMICO (TUBULAR)

$$\frac{dT}{dL} = -\Delta H_r + r + 454 + \rho_c + A_T - \pi + U + D(T - T_w)$$

ECUACION GENERAL PARA EL BALANCE DE ENERGIA DEL REACTOR ADIABATICO (TANQUE AGITADO)

$$u_s \rho_s C_p \frac{dT}{dL} = \sum (-\Delta H_i + r_i) \rho_c$$

ECUACION PARA LA CAIDA DE PRESTION

$$\Delta P = \Delta P(\text{TUBO}) + \Delta P(\text{LECHO})$$

$$\frac{\Delta P(\text{LECHO})}{\Delta Y} = -f \frac{G^2}{g \rho_c d_p}$$

CONDICIONES A LA FRONTERA

$$\text{A } L = 0, X_1 = X_{10}, T = T_0$$

$$Y = L$$

**TABLA 4.3 REACCIONES TÍPICAS CATALÍTICAS Y TÉRMICAS EN LA PRODUCCIÓN DE ESTIRENO.**

	Energía de Activación cal/mol	
	Térmica	Catalítica
1. $C_8H_{10} \rightleftharpoons C_8H_8 + H_2$	29,340	17,930
2. $C_8H_{10} + 2H_2O \longrightarrow C_7H_8 + CO_2 + 3H_2$	32,950	30,000
3. $C_8H_{10} + 2H_2O \longrightarrow C_6H_6 + 2H_2 + CO_2 + CO_2 + CH_4$	30,000	22,350

Velocidad de reacción catalítica

$$r_1 = k_1 (P_{EB} - P_{SH} P_{H_2} / K_p) / (K_A + K_B P_{EB} + K_C P_{SH})^n$$

TABLA 4.4 ECUACIONES PARA EL MODELO CINETICO.

$$R_1 = k_1 C_{EB}$$

$$R_2 = k_2 C_{SN} C_H$$

$$\frac{dC_{EB}}{dt} = -k_1 C_{EB} + k_2 C_{SN} C_H$$

$$\frac{dC_{SN}}{dt} = k_1 C_{EB} - k_2 C_{SN} C_H$$

$$\frac{dC_{SN}}{dt} = k_1 C_{EB} - k_2 C_{SN} C_H$$

$$k_1 = 650 * \exp(-19100/1.987 * T)$$

	1955	1960	1970	1980	1990
PS	44	46	61	62	63
ABS		2	7	8	9
SAN		1	1	2	1
SBL	8	8	6	7	7
Copolimeros de estireno con más de 50% de estireno	6	4	5	2	3
SBR	40	35	14	11	9
UPE	2	4	5	7	6
Polímeros con menos del 50% de estireno	0	0	1	1	2

**Tabla 4.5 Distribución de Estireno en el Mundo**

## CAPITULO 5

### SIMULACION DEL REACTOR TUBULAR HOMOGENEO

## SIMULACION DE UN REACTOR TUBULAR HOMOGENEO.

## 5.1 ¿Qué es la simulación?

Con el surgimiento de las computadoras, una de las herramientas más importantes para analizar el diseño y operación de sistemas o procesos complejos es la simulación. Aunque la construcción de modelos inicia desde el Renacimiento, el uso moderno de la palabra simulación data de 1940, cuando unos científicos trabajaban en un proyecto, durante la Segunda Guerra Mundial, resolvieron parcialmente problemas de reacciones nucleares cuyo solución experimental, hubiera sido muy cara y el análisis matemático demasiado complicado. Con el uso de la computadora en los experimentos de simulación surgieron incontables aplicaciones y con ello, una mayor cantidad de soluciones a problemas teóricos y prácticos.

La simulación de procesos dinámicos es una aplicación muy importante de las computadoras analógicas. En particular, la computadora analógica es muy útil para determinar los efectos de variaciones de parámetros en el funcionamiento de circuitos. La simulación dinámica de una planta química es importante por varias razones. Primero que todo, cada planta opera sólo en ambiente dinámico o transitorio, porque una operación verdaderamente a régimen estable no puede llevarse a la práctica. Las operaciones de arranque y paro de una planta son operaciones en estado inestable, y se toman en cuenta para la seguridad de la planta.

El sistema de control automático es una parte integral de cualquier planta. Los modelos dinámicos son necesarios en el diseño y prueba de estrategias de control y la simulación

dinámica es requerida en la evaluación efectiva del propósito del sistema de control. Los modelos de simulación son también usados en el estudio de procesos de interacción, estudios de seguridad y veracidad, e identificación del proceso usando técnicas transientes de respuesta.

Existen diferentes definiciones aceptadas para la palabra simulación, algunas de ellas son las siguientes:

- Simulación es una técnica para conducir experimentos en una computadora digital. Estos experimentos hacen uso de ciertos tipos de relaciones matemáticas y lógicas, las cuales son necesarias para describir el comportamiento y la estructura de sistemas complejos del mundo real a través del tiempo.

- Simulación es una técnica numérica para realizar experimentos en una computadora digital. Estos experimentos involucran ciertos tipos de modelos matemáticos y lógicos que describen el comportamiento de sistemas de negocios, económicos, sociales, biológicos, físicos o químicos a través de largos períodos de tiempo.

- Simulación es el proceso de diseñar y desarrollar un modelo computarizado de un sistema o proceso y conducir experimentos con este modelo, con el propósito de entender el comportamiento del sistema o evaluar varias estrategias con las cuales se puede operar el sistemas.

En base a las anteriores definiciones, una definición más sencilla, sería la siguiente:

Simulación es el estudio de un sistema o sus partes mediante la manipulación de su representación matemática o de su modelo físico.

Cuando se dispone de un modelo para un componente o un sistema, puede utilizarse un computador para investigar el comportamiento del sistema. Un modelo del sistema en una forma matemática es adecuado para demostrar el funcionamiento de este y puede ser utilizado para investigar diversos diseños de este sin construirlo realmente. En la simulación se emplean las condiciones reales del sistema, así como las condiciones de entrada a las cuales estará sujeto el sistema.

Un sistema puede simularse empleando computadoras digitales o analógicas. Un computador electrónico se emplea para establecer un modelo del sistema, generalmente dispone de funciones matemáticas de integración, multiplicación por una constante, multiplicación por dos variables y suma de varias variables, además de otras funciones. Estas funciones son generalmente suficientes para desarrollar un modelo de simulación.

En la práctica, la simulación dinámica puede dividirse en dos categorías, una con cambios discretos y otra con cambios continuos. Estos cambios pertenecen al modelo y no al sistema presentando ambos un cambio discreto y un cambio continuo. El tiempo es la principal variable independiente, y otras variables que son funciones del tiempo son variables dependientes. El comportamiento de las variables dependientes se refiere en términos discretos y continuos.

La simulación discreta ocurre cuando las variables dependientes del modelo cambian discretamente en puntos especificados en el tiempo. La variable dependiente puede ser discreta o continua dependiendo de si los cambios discretos pueden ocurrir en cualquier punto en el tiempo o sólo en puntos específicos.

En la simulación continua, las variables dependientes

cambian continuamente en el tiempo de simulación. La variable tiempo puede ser continua o discreta, dependiendo de si los valores de las variables dependientes son variables en cualquier punto en el tiempo o sólo en tiempos específicos.

## 5.2. Etapas Para la Realización de una Simulación.

Para poder llevar a cabo una simulación son necesarios los siguientes pasos:

1. Definir el sistema.
2. Formular el modelo. Desarrollar el modelo matemático del proceso y su control.
3. Colección de datos (datos que requiere el modelo).
4. Implementación del modelo en la computadora. Definir si se utilizará un lenguaje como FORTRAN, Basic, Algol, etc., o algún paquete computacional, para procesarlo en la computadora.
5. Validación. Una de las etapas principales en un estudio de simulación es la de validación del modelo. Por medio de esta etapa es posible encontrar deficiencias en la formulación del modelo o en los datos alimentados a éste. La formas comunes de validación de un modelo son:
  - La opinión de expertos acerca de los resultados de la simulación.
  - La exactitud con la que se predicen datos históricos.
  - La comprobación de fallas del modelo de simulación al utilizar datos que hacen fallar al modelo real.
  - Aceptación y confianza en el modelo por parte de la persona que utilizará los resultados que el experimento de simulación reporte.
6. Experimentación. Solución de las ecuaciones del modelo. Esto puede hacerse mediante el uso de algún método de integración numérica para solución de ecuaciones, el uso de una subrutina general que tenga como propósito la solución de ecuaciones diferenciales, o por el uso de un lenguaje de simulación para la

simulación de sistemas continuos.

7. Interpretación. Análisis de resultados. Los resultados de la simulación dinámica son generalmente el tiempo de repuesta de las variables del modelo. Estos resultados pueden ser presentados en forma tabular o gráfica.

8. Documentación. Se requieren dos tipos de documentación para poder hacer uso del modelo de simulación. La primera se refiere a la documentación de tipo técnico. La segunda se refiere al manual del usuario, con el cual se facilita la interacción y el uso del modelo desarrollado.

Además, de lo antes mencionado, es necesario que se definan perfectamente las condiciones iniciales de nuestro sistema. Esto se debe a que la mayoría de los modelos de simulación se corren para estudiar el sistema a régimen permanente. Sin embargo, la mayoría de dichos modelos presentan en su etapa inicial estados transitorios, los cuales no son típicos del régimen permanente. Por lo tanto, es necesario establecer claramente las alternativas que existen para resolver este problema. Algunas formas de atacar el problema son:

- Usar un tiempo de corrida lo suficientemente grande de modo que los períodos transitorios sean relativamente insignificantes con respecto a la condición de régimen permanente.
- Excluir una parte apropiada de la parte inicial de la corrida.
- Utilizar simulación regenerativa.

Esta última alternativa es la que presenta menos desventajas, pues las otras dos son excesivamente caras.

Las primeras etapas de un sistema de simulación se refieren a la definición del sistema a ser modelado y a la descripción del

sistema en términos de relaciones lógicas de sus variables y diagramas de flujo. Sin embargo, llega el momento de describir el modelado con un lenguaje que sea aceptado por la computadora que se va a usar. En esta etapa se tienen dos cursos a seguir:

1. Desarrollar el "software" requerido para estudios de simulación.
2. Comprar algún paquete de simulación.

Desafortunadamente, para la segunda alternativa existe una gran cantidad de programas de aplicación (lenguajes de programación de propósito especial) de tal manera que resulta extremadamente difícil decidir cual paquete se ajusta mejor a una situación determinada. Esta situación origina que la mayoría de las veces, la selección del programa dependa de si el analista lo conoce, lo entiende y lo sabe aplicar. No obstante, estas dos alternativas deben evaluarse en término económicos antes de tomar una decisión.

En general, los lenguajes de simulación ofrecen las siguientes ventajas:

1. Requieren menos tiempo de programación.
2. Proporcionan una mayor detección del error.
3. Actúan como vehículos que expresan los conceptos surgidos en el estudio de la simulación.
4. Poseen habilidad para manejar subrutinas como parte de cualquier rutina de simulación.
5. Automáticamente generan ciertos datos necesarios en corridas para simulación.
6. Facilitan el despliegue de los datos generados.

Por otro lado, sufren de estas desventajas: 1) se adhiere a los requerimientos de salida del lenguaje, 2) su flexibilidad es reducida en modelos, y 3) el tiempo de corrida aumenta.

### **5.3. Ventajas y Desventajas de la Simulación.**

En la actualidad la técnica de simulación es una de las herramientas más usadas en el análisis de sistemas, debido en gran parte en la gran disponibilidad de "software" en el mercado. Suponiendo que un modelo y la simulación son de precisión confiable, las ventajas de la simulación son las siguientes:

1. A través de ella pueden estudiarse los cambios internos y externos de un sistema. El funcionamiento del sistema puede observarse bajo todas las condiciones posibles.
2. La observación detallada del sistema puede conducir a un mejor entendimiento de este y por tanto sugerir estrategias que mejoren la operación y eficiencia del mismo.
3. Los resultados del funcionamiento del sistema pueden extrapolarse con un modelo de simulación para fines de predicción.
5. Puede emplearse como instrumento pedagógico.
4. Se puede experimentar con nuevas situaciones sobre las que se tiene poca o ninguna información. Pueden examinarse las decisiones concernientes a sistemas futuros, actualmente en etapa conceptual.
5. Pueden efectuarse pruebas de sistemas bajo exámen en periodos mucho más reducidos.
6. Los resultados de la simulación pueden obtenerse a un costo menor que el de la aproximación real.
7. Puede realizarse el estudio de situaciones hipotéticas aún cuando dichas situaciones no sean posibles en la vida real y en el tiempo presente.
8. El modelado y simulación es con frecuencia la única técnica posible o segura para analizar o evaluar sistemas.
9. Puede ser utilizada para entrenamiento de personal.

No obstante, a pesar de tener muchas otras ventajas y aplicaciones aparte de las arriba mencionadas, la técnica de

### 5.3. Ventajas y Desventajas de la Simulación.

En la actualidad la técnica de simulación es una de las herramientas más usadas en el análisis de sistemas, debido en gran parte en la gran disponibilidad de "software" en el mercado. Suponiendo que un modelo y la simulación son de precisión confiable, las ventajas de la simulación son las siguientes:

1. A través de ella pueden estudiarse los cambios internos y externos de un sistema. El funcionamiento del sistema puede observarse bajo todas las condiciones posibles.
2. La observación detallada del sistema puede conducir a un mejor entendimiento de este y por tanto sugerir estrategias que mejoren la operación y eficiencia del mismo.
3. Los resultados del funcionamiento del sistema pueden extrapolarse con un modelo de simulación para fines de predicción.
5. Puede emplearse como instrumento pedagógico.
4. Se puede experimentar con nuevas situaciones sobre las que se tiene poca o ninguna información. Pueden examinarse las decisiones concernientes a sistemas futuros, actualmente en etapa conceptual.
5. Pueden efectuarse pruebas de sistemas bajo exámen en periodos mucho más reducidos.
6. Los resultados de la simulación pueden obtenerse a un costo menor que el de la aproximación real.
7. Puede realizarse el estudio de situaciones hipotéticas aún cuando dichas situaciones no sean posibles en la vida real y en el tiempo presente.
8. El modelado y simulación es con frecuencia la única técnica posible o segura para analizar o evaluar sistemas.
9. Puede ser utilizada para entrenamiento de personal.

No obstante, a pesar de tener muchas otras ventajas y aplicaciones aparte de las arriba mencionadas, la técnica de

simulación presenta el problema de requerir equipo computacional y recursos humanos costosos. Además, por lo general requiere bastante tiempo para que el modelo de simulación desarrollado sea perfeccionado.

En resumen, la simulación es una técnica muy valiosa para el desarrollo y diseño de modelos de un sistema o proceso, ya que esto nos proporciona un estudio más detallado del mismo y nos permite un mejor entendimiento del comportamiento de éste.

#### **5.4 Tiempo Real.**

Por definición un sistema operado por computación digital proporciona al usuario dispositivos para el desarrollo de "software" y registros para la ejecución de programas. De esta manera, un operador de sistemas usa comandos (edit, file, transferencia, transferencia de datos, programa ejecutivo, etc.), y maneja recursos para sistemas de computación (CPU, memoria y periféricos). El que un sistema pueda ejecutar todas estas funciones depende de su diseño y ambiente de operación.

Un sistema operado en tiempo real por definición tiene en un proceso ciertas tareas que realizar dentro de un intervalo de tiempo específico. Algunos ejemplos son adquisición de bases de datos, como en controladores de vuelo y aplicaciones al control de procesos. En contraste, un sistema en tiempo no real tiene como objetivo principal realizar tareas de una manera eficiente (tiempo y espacio) sin considerar la realizada en un tiempo preciso.

Observando y analizando varios sistemas computarizados en un sistema dado, muchos dispositivos periféricos, incluyendo memoria, pueden operar (trabajar) en paralelo (operación concurrente). Este tipo de sistema intenta optimizar la

utilización concurrente de estos recursos. En muchos casos, los programas de tiempo real y sus tareas asociadas pueden no operar concurrentemente debido a la relación de tareas y a la organización interna de la computadora.

Uno de los principales problemas en el control digital de sistemas en tiempo real es el diseño en tareas de interacción. Algunas tareas en tiempo real serán ejecutadas en una manera secuencial, otras podrán ser ejecutadas concurrentemente pero serán completadas antes que el proceso global. Esta situación lleva al requerimiento de comunicación o sincronización entre las tareas a través del uso de banderas de condición (pedazos de información), o de estructuras de datos equivalentes. Este requerimiento resulta crítico en un distribuidor multicomputador para el sistema de control, tal como el encontrado en plantas industriales y de vehículos contemporáneos.

Un sistema de operación general consta de programadores, administradores de recursos, editores, traductores de lenguajes de programación (compiladores, ensambladores, intérpretes), y utilerías (programas de diagnóstico, manejadores de archivos de discos, programas generales de entrada-salida).

Un sistema operado en tiempo real, proporciona coordinación entre los programas o tareas en tiempo real, el sistema de computación, y los archivos de datos asociados (generalmente, en discos). Los requerimientos generales son los siguientes:

1. Manejo de recursos para computadoras: CPU, memoria, periféricos (A/D, D/A, discos, interruptores, etc.).
2. Programar tareas periódicas.
3. Coordinar la comunicación entre tareas.
4. Control de sistemas de integración (detención de errores, protección, etc.).

El que estas funciones puedan ser realizadas en "software" y "hardware" depende de las aplicaciones dadas. Note que el tiempo real tiene una gran variedad de tareas que son diferentes de los programas de aplicación de tiempo real en el sentido de dirección (controlador) interna. El sistema de la computadora debe estar disponible para ejecutar todas las tareas internas o externas efectiva y eficientemente.

La complejidad del sistema operando en tiempo real depende de la cantidad y el nivel de recursos de computación que sean controlados y del número de programas en tiempo real y sus interrelaciones.

Hay varios sistemas en tiempo real sofisticados y complejos que estan disponibles comercialmente y pueden ejecutar una gran variedad de programas y tareas. Como siempre, una selección en particular depende del ambiente y de la naturaleza de la aplicación. Por supuesto, el ingeniero de "software" puede generar un único sistema de operación en tiempo real si sus requerimientos de ejecución requieren minimización absoluta.

El programador ejecutable de tareas proporciona una serie de operaciones definidas para lo siguiente:

- Crear un programa de trabajo.
- Mantener prioridad y condiciones de tareas.
- Iniciar ejecución de tareas.
- Suspender la ejecución de tareas
- Completar ejecución de tareas.
- Cancelar la ejecución de la tarea programada.
- Mantener el estado de cada tarea.

Para poder operar un sistema en tiempo real, primero se debe disponer de una computadora compatible con este. Segundo, se debe de disponer de un "software" para poder llevar a cabo las tareas

deseadas y poder presentar los datos en forma correcta. Finalmente, se requiere de un sistema de comunicaciones que permita la comunicación veraz entre computadora y sistema.

En muchos programas en tiempo real en los que se emplea una interface no se permite tapar o cerrar un controlador. Algunos ejemplos incluyen plantas químicas, naves espaciales, y procesos generales de control ambiental. En estos ambitos, generalmente se efectuan cambios de parámetros. Al hacer cambios, los objetivos útiles se encontrarán en el diseño global del sistema:

1. El usuario deberá estar listo para modificar (agregar, borrar, cambiar) sistemas de control, mediante la introducción de datos (coeficientes, declaración de variables, etc.) dentro del objeto o de tablas.
2. La comprobación de errores se hará en toda la información que entra a estas tablas, por conformidad del valor de intervalo y otros límites apropiados.
3. La nueva información se comprobará mediante corridas en una simulación. La simulación puede no formar parte del "software" de tiempo real.
4. Al crear el nuevo sistema, el sistema suministrará por movimiento de la nueva tabla los datos de la corriente en una lista. El proceso catálogado para los nuevos datos será controlado de manera manual o automática. La integración permitirá una integración paso a paso.
5. Se suministrara una fácil interacción. Note que también puede ser usado por el documento del proceso actualizado.

La interface mencionada requiere de "software" de rutinas extensas y complejas. Tales rutinas son por lo general únicas en su aplicación, porque con coacción en tiempo real se desarrolla "software" de control de este tipo que es empleado en ingeniería.

El objetivo de este capítulo es el de proporcionar una idea de la estructura de un sistema operado en tiempo real relacionado con sistemas de control digital y presentar los resultados obtenidos al trabajar con un paquete de tiempo real.

Un sistema operado en tiempo real por definición tiene en un proceso ciertas tareas que realizar dentro de un intervalo de tiempo específico. Algunos ejemplos son adquisición de sistemas de datos, controladores de vuelo y aplicaciones al control de procesos. En contraste, un sistema en tiempo no real tiene como objetivo principal realizar tareas de una manera eficiente (tiempo y espacio) sin considerar la realizada en un tiempo preciso.

Observando y analizando varios sistemas computarizados en un sistema dado, muchos dispositivos periféricos, incluyendo memoria, pueden operar (trabajar) en paralelo (operación concurrente). Este tipo de sistema intenta optimizar el uso concurrente de estos recursos. En muchos casos, los programas de tiempo real y sus tareas asociadas pueden no operar concurrentemente debido a la relación de tareas y a la organización interna de la computadora.

Uno de los principales problemas en el control digital de sistemas en tiempo real es el diseño en tareas de interacción. Algunas tareas en tiempo real serán ejecutadas en una manera secuencial, otras podrán ser ejecutadas concurrentemente pero serán completadas antes que el proceso global. Esta situación lleva al requerimiento de comunicación o sincronización entre las tareas a través del uso de banderas de condición (pedazos de información), o de estructuras de datos equivalentes. Este requerimiento resulta crítico en un distribuidor multicomputador para el sistema de control, tal como el encontrado en plantas industriales y de vehículos contemporáneos.

Un sistema de operación general consta de programadores, administradores de recursos, editores, traductores de lenguajes de programación (compiladores, ensambladores, intérpretes), y utilerías (programas de diagnóstico, manejadores de archivos de discos, programas generales de entrada-salida).

Un sistema operado en tiempo real, proporciona coordinación entre los programas o tareas en tiempo real, el sistema de computación, y los archivos de datos asociados (generalmente en discos). Los requerimientos generales son los siguientes:

1. Manejo de recursos para computadoras: CPU, memoria, periféricos (A/D, D/A, discos, interruptores, etc.)
2. Programar tareas periódicas
3. Coordinar la comunicación entre tareas.
4. Control de sistemas de integración (detección de errores, protección, etc.)

El que estas funciones puedan ser realizadas en "software" y "hardware" depende de las aplicaciones dadas. Note que el tiempo real tiene una gran variedad de tareas que son diferentes de los programas de aplicación de tiempo real en el sentido de dirección (controlador) interna. El sistema de la computadora debe estar disponible para ejecutar todas las tareas internas o externas efectiva y eficientemente.

La complejidad del sistema operando en tiempo real depende de la cantidad y el nivel de recursos de computación que sean controlados y del número de programas en tiempo real y sus interrelaciones.

Hay varios sistemas en tiempo real sofisticados y complejos que están disponibles comercialmente y pueden ejecutar una gran variedad de programas y tareas. Como siempre, una selección en particular depende del ambiente y de la naturaleza de la

aplicación. Por supuesto, el ingeniero de "software" puede generar un único sistema de operación en tiempo real si sus requerimientos de ejecución requieren minimización absoluta.

El programador ejecutable de tareas proporciona una serie de operaciones definidas para los siguiente:

- Crear un programa de trabajo.
- Mantener prioridad y condiciones de tareas.
- Iniciar ejecución de tareas.
- Suspender la ejecución de tareas
- Completar ejecución de tareas.
- Cancelar la ejecución de la tarea programada.
- Mantener el estado de cada tarea.

Para poder operar un sistema en tiempo real, primero se debe disponer de una computadora compatible con éste. Segundo, se debe de disponer de un "software" para poder llevar a cabo las tareas deseadas y poder presentar los datos en forma correcta. Finalmente, se requiere de un sistema de comunicaciones que permita la comunicación veráz entre computadora y sistema.

En muchos programas en tiempo real en los que se emplea una interface no se permite tapar o cerrar un controlador. Algunos ejemplos incluyen plantas químicas, naves espaciales, y procesos generales de control ambiental. En estos ambitos, generalmente se efectuan cambios de parámetros. Al hacer cambios, los objetivos útiles se encontrarán en el diseño global del sistema:

1. El usuario deberá estar listo para modificar (agregar, borrar, cambiar) sistemas de control, mediante la introducción de datos (coeficientes, declaración de variables, etc.) dentro del objeto o de tablas.
2. La comprobación de errores se hará en toda la información que entra a estas tablas, por conformidad del valor de intervalo y otros límites apropiados.

3. La nueva información se comprobará mediante corridas en una simulación. La simulación puede no formar parte del "software" de tiempo real.

4. Al crear el nuevo sistema, el sistema suministrará por movimiento de la nueva tabla, los datos de la corriente en una lista. El proceso catalogado para los nuevos datos será controlado de manera manual o automática. La integración permitirá una integración paso a paso.

5. Se suministrará una fácil interacción. Note que también puede ser usado por el documento del proceso actualizado.

La interface mencionada requiere de "software" de rutinas extensas y complejas. Tales rutinas son por lo general únicas en su aplicación, porque con coacción en tiempo real se desarrollan "software" de control de este tipo que son empleados en ingeniería.

En el presente trabajo se emplea para la implementación de la instrumentación y de los controles al reactor tubular el programa de tiempo real. Este programa, Real-Time Graphics Measurement/Control Tools, es una colección de gráficas, métodos numéricos, linearización de termopares funciones con el "ratón" para IBM PC, XT, AT, y más IBM compatibles.

La parte de gráficas de este paquete esta orientada a la aplicación del tiempo real, incluyendo listas de gráficas, gráficas de barra y contadores. Las funciones se encuentran divididas en quince diferentes archivos, dependiendo del tipo de aplicación. Entre las gráficas en tiempo real se encuentran: gráficas con barras horizontales y verticales, medidores de arco, relojes, anunciadores y textos. Estas, son de fácil uso, ya que solamente llaman a una función la cual es suficiente para crear una ventana en tiempo real.

### **5.5 Desarrollo del Programa Computacional Para la Simulación del Reactor Tubular.**

El programa para la simulación del reactor tubular, fué realizado en lenguaje FORTRAN, tratando de que este no sólo aplique al modelo generado en el capítulo 4, sino a cualquier otro tipo de modelo que se genera y para el cual sea conveniente el uso de reactores tubulares. Este programa analiza el comportamiento de un reactor y con ayuda del paquete de tiempo real arriba mencionado se logra la simulación, através de la realización de una interfase entre el lenguaje FORTRAN y el lenguaje C.

Los pasos seguidos para la realización de este programa son los siguientes:

1. Se crea una base de datos, que proporcione las propiedades termodinámicas de los compuestos.
2. Se proporciona el nombre y los coeficientes estequiométricos de los compuestos que intervienen en la(s) reacción(es) química(s).
3. Se introduce el valor de la temperatura de proceso en grados Kelvin y de la presión de proceso en psia.
4. Se calcula la temperatura de reacción estándar.
5. Se calcula la capacidad calorífica de la mezcla.
6. Se calcula la entalpía ideal a la temperatura de proceso, en base al método de integración de Romberg.
7. Se calcula la entalpía residual, mediante una ecuación de estado.
8. Se calcula la entalpía real, mediante la suma de la entalpía ideal y la real.
9. Se calcula la velocidad de reacción y la composición final de los compuestos que conforman la reacción, utilizando el método de solución de ecuaciones diferenciales de Runge-Kutta de cuarto orden.

10. Obtenidos estos datos se resuelve el balance de masa y energía, usando el método de Euler, a partir de esto se obtiene la longitud de reactor y la conversión alcanzada por los reactivos.

11. Se realiza una interfase FORTRAN - C para la inclusión de rutinas en tiempo real que simulen el control del reactor.

Para la comprobación del programa se simularon varios casos, sin embargo en el presente trabajo sólo se incluye la simulación del reactor de deshidrogenación de estireno descrito en las secciones 4.5 y 4.5.1. En la siguiente sección se incluye el diagrama de flujo así como el listado del programa de computadora, para que después en el siguiente capítulo se puedan presentar los resultados obtenidos mediante el uso de éste.

5.6 LISTADO DEL PROGRAMA PARA LA SIMULACION DE UN REACTOR TUBULAR  
 \*EN LENGUAJE FORTRAN, Y DE LA INTERFACE PARA LA INSTRUMENTACION EN  
 \*LENGUAJE "C".

\*\*\*\*\*  
 PROGRAMA PRINCIPAL PARA LA "SIMULACION DE UN REACTOR TUBULAR  
 HOMOGENEO CON INSTRUMENTACION EN TIEMPO REAL"  
 \*\*\*\*\*

```
DIMENSION INDICE(18), INDICEP(18), INDICER(18), COMP(18), PV(18)
REAL NP(18), NR(18), NE(18), Y(N), DY(N), W(N,4), V(N)
CHARACTER SUSTAN(18)*20, FORMUL(18)*12, ARCHRES*20
COMMON /DATOS/SUSTAN, FORMUL
COMMON /DATOS1/PM(18), TEB(18), TC(18), PC(18), VC(18), W(18), DENS(18),
*CPVA(18), CPVB(18), CPVC(18), CPVD(18), DHF(18), DGF(18), ANTA(18), ANTB
*(18), ANTC(18)
COMMON /SUMAS/SUMA, SUMB, SUNC, SUMD
```

```
WRITE(*,200)
WRITE(*,150)
READ(*,'(a)') ARCHRES
```

```
OPEN(1, FILE=ARCHRES, ACCESS='SEQUENTIAL', STATUS='NEW')
```

```
WRITE(*,*) 'CUANTOS COMPONENTES:'
READ(*,*) NCOM
WRITE(*,*) 'DAME LOS INDICES DEL BANCO DE DATOS:'
READ(*,*) (INDICE(I), I=1, NCOM)
```

```
WRITE(*,*) 'DAME COMPOSICIONES:'
DO I=1, NCOM
WRITE(*,*) 'COMPONENTE', I, SUSTAN(INDICE(I))
READ(*,*) COMP(I)
END DO
```

```
WRITE(*,*) 'DAME LOS COEF. ESTEQUIOMETRICOS DE LOS COMPONENTES:'
DO I=1, NCOM
WRITE(*,*) 'COMPONENTE', I, SUSTAN(INDICE(I))
READ(*,*) NE(I)
END DO
```

```
WRITE(*,*) 'CUANTOS COMPONENTES SON PRODUCTOS:'
READ(*,*) NCOMP
WRITE(*,*) 'DAME LOS INDICES DE PRODUCTOS:'
READ(*,*) (INDICEP(I), I=1, NCOMP)
```

```
WRITE(*,*) 'CUANTOS COMPONENTES SON REACTIVOS:'
READ(*,*) NCOMR
WRITE(*,*) 'DAME LOS INDICES DE REACTIVOS:'
READ(*,*) (INDICER(I), I=1, NCOMR)
```

```
WRITE(*,*) 'DAME LOS COEF. ESTEQUIOMETRICOS DE PRODUCTOS:'
```

**TESIS SIN PAGINACION**

**COMPLETA LA INFORMACION**

DO I=1,NCOMP  
WRITE(\*,\*) 'COMPONENTE', I, SUSTAN(INDICEP(I))  
READ(\*,\*) NP(I)  
END DO

WRITE(\*,\*) 'DAME LOS COEF. ESTEQUIOMETRICOS DE REACTIVOS:'  
DO I=1,NCOMR  
WRITE(\*,\*) 'COMPONENTE', I, SUSTAN(INDICER(I))  
READ(\*,\*) NR(I)  
END DO

WRITE(\*,\*) 'CUAL ES LA TEMPERATURA DE PROCESO:'  
READ(\*,\*) T  
WRITE(\*,\*) 'CUAL ES LA PRESION DE PROCESO:'  
READ(\*,\*) PRE

.....  
CALCULO DE LA ENTALPIA DE REACCION ESTANDAR  
.....

SUMP=0.0  
DO J=1,NCOMP  
I=INDICEP(J)  
SUMP=SUMP+NP(I)\*DHF(I)  
END DO  
write(\*,\*) 'suma de p:', sump  
SUMR=0.0  
DO J=1,NCOMR  
I=INDICER(J)  
SUMR=SUMR+NR(I)\*DHF(I)  
END DO  
write(\*,\*) 'suma de reactivos:', sumr  
DHRE=SUMP-SUMR  
write(\*,\*) 'entalpia estandar:', dhre

.....  
CALCULO DEL CP DE LA MEZCLA  
.....

SUMA=0.0  
SUMB=0.0  
SUMC=0.0  
SUMD=0.0  
DO J=1,NCOM  
I=INDICER(J)  
SUMA=SUMA+NE(I)\*CPVA(I)  
SUMB=SUMB+NE(I)\*CPVB(I)  
SUMC=SUMC+NE(I)\*CPVC(I)  
SUMD=SUMD+NE(I)\*CPVD(I)  
END DO  
write(\*,\*) 'suma de cpva:', suma  
write(\*,\*) 'suma de cpvb:', sumb  
write(\*,\*) 'suma de cpvc:', sumc  
write(\*,\*) 'suma de cpvd:', sumd

.....  
CALCULO DE LA ENTALPIA IDEAL A DIFERENTES TEMPERATURAS  
.....

WRITE(\*,\*)'CUAL ES EL VALOR DE E:'  
READ(\*,\*) E  
WRITE(\*,\*)'CUAL ES LE VALOR DE F:'  
READ(\*,\*) F  
WRITE(\*,\*)'CUAL ES EL VALOR DE N:'  
READ(\*,\*) N

CALL ROMB(E,F,NI,DHRT)

write(\*,\*)'entalpia a dif. t:',dhrt  
DHRI=DHRE+DHRT  
write(\*,\*)'entalpia ideal:',dhri  
.....

.....  
CALCULO DE LA ENTALPIA RESIDUAL  
.....

CALL PR(DHMR)

.....  
CALCULO DE LA ENTALPIA REAL  
.....

DHR=DHMR+DHRI  
write(\*,\*)'entalpia real:',dhr  
.....

.....  
CALCULO DE LA VELOCIDAD DE REACCION  
.....

\*RESUELVE LAS ECUACIONES DIFERENCIALES PARA EL MODELO DE UN REAC-  
\*TOR.

IMPLICIT REAL\*8 (A-M,O-Z)  
DIMENSION T1,T2,EPS,TF,DH,DIN,NIT,MIT  
NIT=1999  
MIT=1  
N=3

DIN=1.27  
Y(2)=1.0  
DH=15.0  
TF=900.0  
Y(1)=0.0  
T2=0.50\*(TF+Y(2))  
WRITE(6,100)

100 FORMAT(2X,45HLAS CONDICIONES INICIALES Y DEL REACTOR SON: ./)

WRITE(6,101) Y(2), Y(3), DY, TF

101 FORMAT(2X,5H TEM., 2X, F7.3, 2X, 7H PRESION, 2X, F6.3, 3X,

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

```

*7HALIMEN., 2X, F7.3, 3X, 7HT. HDRNU, 2X, F7.2./)
WRITE(6,102)
102 FORMAT(5X, 7H LONGT., 5X., 7HCONVERT., 5X, 9HTEMP.GAS.,
*5X, 7HPRESION, 4X, 8HT.PRD.1, 3X, 8HT.PRD.E.,/)
WRITE(6,103)
103 FORMAT)1X, 6F12.5

```

```

X=0.0
DO 1 J=1, N
ERROR(J)=0.0
1 YMAX(J)=1.0
ICON=0
H=0.001
HMN=1.0D-6
EPS=1.0D-5
INIC1.0
3 CONTINUE
CALL DIFRUK(N, X, Y, DY, H, HMN, EPS, YMAX, ERROR, IBAM, INIC)
WRITE(6,103) X, Y(1), Y(2), Y(3), T1, T2
NIT=160
ICON=ICON+1
IF(MIT.LT.1) GO TO 5
IF(Y(1).GT.90) GO TO 2
IF(Y(3).LT..0.30) GO TO 2
IF(IBAM.EQ.1) GO TO 3
2 WRITE(6,104) ICON
104* FORMAT(3X, 1 GHN. DE LLAMADAS= ,J6)
GO TO 6
5 WRITE(6,105)
105 FORMAT(6X, 9HNO NEWTON)
6 CONTINUE
STOP
END
SUBROUTINE DIFFUN(X, Y, DY)
IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
DIMENSION Y(10), DY(10)
COMMON T1, T2, EPS, TF, DM, DIN, NIT, MIT
DK=-25470.558/Y(2)
DC=48.214*(10.0**17)*(1.0/DM)
DY(1)=DC*DEXP(DK)*((1.0-Y(1))/(1.0+Y(1)))*(Y(3)/Y(2))
A=0.09630342+0.17779094*(10**(-3))*Y(2)-0.10667456*10.0**(-6)*
*(Y(2)**2)
B=0.13724345-0.03708748*(1)**(-3))*Y(2)+0.06024421*(10.0**(-6))*
*(Y(2)**2)
CPM=(1.0/1.0+Y(1))*(A+Y(1)*3)
FNU=1618.725*CPM*(DH**0.8)*(DIN**(-0.2))
LIT=1
DLA=536368.43
GO TO 2
1 CONTINUE
2 CONTINUE
F1=22.3817*(10.0**(-7))*(TF**4-T2**4)
FHI=F1*DLA*(T2-(FNU*Y(2)+DLA*T2)/(FNU(DLA)))
FS2=536368.43*(1.0/(FNU+536368.43)-1.0)
FHIP=-89.5266*(10.0)**(-7)*(T2**3)+FS2
T2NEW=T2+(FHI/FHIP)
ER=DABS(T2NEW-T2)
LIT=LIT+1
IF(LIT.GT.NIT) GO TO 3
T2=T2NEW

```

```
IF(ERR.GT.EPS) GO TO 1
T1=(FNU+Y(2)+DLA*TE)/(FNU+DLA)
GO TO 4
```

```
3 MIT=-1
4 Q2=FNU*(T1-Y(2))
DHR=-110850.9+2.695*Y(2)-0.0073755*(Y(2)**2)+3.777333*(10.0(-6)*
*(Y(2)**3))
DN1=13.0+0-024*Y(2)-0.0000144*(Y(2)**2)
DN2=Y(1)*(2.695-0.014751*Y(2)+0.000011332**Y(2)**2)
DY2=(0.13499*Q2/DM*DY(1)*DHR)-(DN1+DN2)
DNU3=(1.0+Y(1))*(DM**2)Y(3)
DY(3)=-897525*(10.0**(-7))*(DNU3-DENOM3)
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE DIFRLK (N,T,Y,DY,H,HMIN,EPS,YMAX,ERROR,KFLAG,JSTART)
IMPLICIT REAL*8(A-I,O-Z)
```

```
LOS PARAMETROS DE ESTA SUBROUTINA DE INTEGRACION TIENEN LOS
```

```
*SIGUIENTES SIGNIFICADOS.
```

```
  N  NUMERO DE ECUACIONES DEL SISTEMA POR INTEGRAR
```

```
  T  VARIABLE INDEPENDIENTE
```

```
  Y  VECTOR QUE CONTIENE A LAS VARIABLES DEPENDIENTES EN UN MA-
XIMO DE 10.
```

```
  DY VECTOR QUE CONTIENE LOS VALORES DE LAS DERIVADAS AL INICIO
DEL INTERVALO.
```

```
  H  TAMAÑO DE PASO.
```

```
  HMIN TAMAÑO MINIMO DE PASO.
```

```
  EPS  CONSTANTE DE ERROR.
```

```
  YMAX VECTOR QUE CONTIENE LOS VALORES MAXIMOS DE LAS VARIABLES
DEPENDIENTES.
```

```
  KFLAG BANDERA CON LOS SIGUIENTES SIGNIFICADOS:
```

```
  * -1 EL PASO SE TOMO COMO H-HMIN PERO EL ERROR NO SE LOGRO.
```

```
  * +1 EL PASO SE COMPLETO CO EXITO.
```

```
  ERROR VECTOR QUE CONTIENE EL ERROR ESTIMADO PARA CADA COMPONENTE.
```

```
  JSRART INICIADOR CON LOS SIGUIENTES SIGNIFICADOS:
```

```
  * -1 REPETIR EL ULTIMO PAS, RESTAURANDO LOS VALOS DE Y, YMAX
QUE FUERON USADOS LA ULTIMA VEZ.
```

```
  * +1 TOMAR UN NUEVO PASO.
```

```
  DIMENSION Y(10),DY(10),YMAX(10),YSAVE(10),Y1(10),Y2(10),Y3(10),
```

```
  *ERROR(10),DYN(10),YMAXSV(10)
```

```
  IF(JSTART.LQ.0) GO TO 2
```

```
  *SE GUARDAN LOS VALORES DE Y, YMAX EN CASO DE REINICIO
```

```
  *SEA NECESARIO
```

```
  DO 1 I=1,N
```

```
  YSAVE(I)=Y(I)
```

```
1 YMAXSV(I)=YMAX(I)
```

```
2 *CALCULA LAS DERIVADAS INICIALES
```

```
  CALL DIFFUN(T,Y,DYN)
```

```
  GO TO 4
```

```
3 RESTAURA LOS VALORES DE "Y" Y "YMAX" PARA UN REINICIO
```

```
  DO 3 I=1,N
```

```
  Y(I)=YSAVE(I)
```

```
3 YMAX(I)=YMAXSV(I)
```

```
4 KFLAG=1
```

```
  GUARDA EL VALOR FINAL DE T Y CALCULA EL PASO MEDIO
```

```
5 A=H*T
```

```
  HHALF=H + 0.5
```

```
  REALIZA UN PASO DE RUNGE KUTTA COMPLETO
```

```
  CALL RK1(N,T,YSAVE,DYN,H,Y1)
```

```
  REALIZA AHORA DOS PASOS DE R-K CON MEDIO INTERVALO
```

```
  CALL RK1(N,T,YSAVE,DYN,HHALF,Y2)
```

```

THALF=T+HHALF
CALL DIFFUN(THALF, Y2, DY)
CALL RK1(N, THALF, Y2, DY, HHALF, Y3)
ERRMAX=0.00
C CALCULA LOS NUEVOS MAXIMOS DEL VECTOR YMAX, LOS ERRORES Y LOS
  ERRORES RELATIVOS
DO 6 I=1, N
YMAX(I)=DMAX1(YMAX(I), DABS(Y1(I)), DABS(Y2(I)), DABS(Y3(I)))
ERROR(I)=DABS((Y3(I)-Y1(I))-15.0)
ERRMAX=DMAX1(ERRMAX-ERROR(I)/(EPSYMAX(I)))
C CALCULA LOS VALORES MEJORADOS DE Y ELIMINANDO EL ERROR ESTIMADO
Y(I)=(16.0*Y3(I)-Y1(I))/15.0
6 CONTINUE
IF(ERRMAX.EQ.0.0) H=H*2.0
IF(ERRMAX.GT.0.0) H=H*ERRMAX**(-0.2)*0.99
IF(ERRMAX.QT.1.0) GO TO 8
7 T=A
RETURN
8 IF(H.GT.HMTN) GO TO 5
IF(KT.AG.LT.0) GO TO 7
H=HMTN
KFLAG=1
GO TO 5
RETURN
END
C LA SIGUIENTE SUBROUTINA REALIZA UN PASO CON EL METODO DE R-K DE
C CUARTO ORDEN. LOS ARGUMENTOS SON:
C N NUMERO DE ECUACIONES
C T VALOR INICIAL VARIABLE INDEPENDIENTE
C Y VALOR INICIAL VARIABLES DEPENDIENTES
C DY VALOR INICIAL DE DERIVADAS
C H TAMAÑO DE PASO
C Y1 LOS VALORES NUEVOS DE LAS VARIABLES DEPENDIENTES REGRESAN EN
C
SUBROUTINE RK1(N, T, Y, DY, H, Y1)
IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)
DIMENSION Y(10), DY(10), Y1(10), Y2(10), Y3(10), DY1(10)
HHALF=H*0.5
DO 1 I=1, N
1 Y2(I)=Y(I)+HHALF*DY(I)
CALL DIFFUN(T, HHALF, Y2, DY(I))
DO 2 I=1, N
Y3(I)=Y(I)+HHALF*DY1(I)
2 Y2(I)=Y2(I)+2.0*Y3(I)
CALL DIFFUN(T, HHALF, Y3, DY1)
DO 3 I=1, N
Y3(I)=Y(I)+H*DY1(I)
3 Y2(I)=Y2(I)+Y3(I)
CALL DIFFUN(TAH, Y3, DY1)
DO 4 I=1, N
4 Y1(I)=(Y2(I)-Y(I)+HHALF*DY1(I))/3.0
RETURN
END
C
C
INTERFACE TO SUBROUTINE SCROLL(C) (SAMPLE, SPNT)
REAL*8 SAMPLE[VALUE]
REAL*8 SPNT[VALUE]
END

```

```
INTERFACE TO SUBROUTINE AMETER(C) (NUM,RADIO, START)
INTEGER*2 NUM(VALUE)
INTEGER*2 STRAT(VALUE)
REAL*8 RADIO(VALUE)
END
```

```
INTERFACE TO SUBROUTINE NMETER(C) (NUM,RADIO, START)
INTEGER*2 NUM(VALUE)
INTEGER*2 START(VALUE)
REAL*8 RADIO(VALUE)
END
```

```
INTERFACE TO SUBROUTINE PMATER(C) (NUM,RADIO, START)
INTEGER*2 NUM(VALUE)
INTEGER*2 START(VALUE)
REAL*8 RADIO(VALUE)
END
```

```
INTERFACE TO SUBROUTINE REACTOR(C) ()
END
```

```
REAL*8 RADIO
INTEGER*2 NUM, START
CALL ERASE
WRITE(*,*) 'QUE DESEAS SCROLL O MEDIDOR'
WRITE(*,*) ' (1) SCROLL'
WRITE(*,*) ' (2) MEDIDOR'
WRITE(*,*) ' (3) MEDIDOR DE PIE'
WRITE(*,*) ' (4) REACTOR'
WRITE(*,*)
WRITE(*,*) 'OPCION : '
READ(*,*)NOPCION
SELECT CASE (NOPCION)
CASE (1)
WRITE(*,*) 'DAME EL VALOR DE SAMPLE'
WRITE(*,*) 'PERIODO DE MUESTRA ENTRE PUNTOS ADYACENTES'
READ(*,*)SAMPLE
WRITE(*,*) 'DAME EL VALOR DE SPNT'
WRITE(*,*) 'VALOR DEL PUNTO DE AJUSTE'
READ(*,*)SPNT
WRITE(*,*) 'LLAMANDO A LA SUBROUTINE SCROLL'
CALL SCROLL(SAMPLE, SPNT)
CASE (2)
WRITE(*,*) 'MEDIDOR'
WRITE(*,*) 'DAME EL NUMERO DE SEGUNDOS'
READ(*,*)NUM
WRITE(*,*) 'DAME EL RADIO DEL MEDIDOR'
READ(*,*)RADIO
WRITE(*,*) 'INICIO DEL ARCO 0-180'
READ(*,*)START
CALL NMETER(NUM, RADIO, START)
CASE (3)
WRITE(*,*) 'MEDIDOR DE PIE'
WRITE(*,*) 'NUMERO DE SEGUNDOS'
READ(*,*)NUM
WRITE(*,*) 'RADIO DEL MEDIDOR'
READ(*,*)RADIO
WRITE(*,*) 'INICIO DEL ARCO 0-180'
READ(*,*)START
CALL PMETER(NUM, RADIO, START)
```

```
CASE (4)
CALL REACTOR()
END SELECT
END
```

```
/*SCROLL*/
#include <CONIO.H>
#include <MATH.H>
#include <STRING.H>
#include <GRAPH.H>
#include <DOS.H>
#include <STDLIB.H>
```

```
#include "RTSTDMDR.H"
#include "RTGSUBS.H"
#include "RTGRAPH.H"
```

```
RTSTATPTR RTSTART[1];
UNSIGNED INT INDEX;
realttype ydata[100], yvalues[2], ydata2[100]
realttype timeint, sampleint, miny, maxy, rt, lalarm, halarm, stp
int i, lc[2], lf[2], nt, grid, ratchf, xdecs, ydecs;
tagtype tags[2];
char title[40], units[20];
```

```
void scrol (sampleint, stpnt)
double sampleint, stpnt;
```

```
{
  for (i = 0; i <1000; i++)
  {
    ydata[i] = sin(M PI*i/(realtyp) (1025-i)) ;
    ydata2[i] = sin(M PI*/52.0) * (rand()/32767.0) *1.1;
  }
/
```

## CAPITULO 6

### PRESENTACION DE RESULTADOS

**PRESENTACION DE RESULTADOS.****6.1 Tablas de Resultados de la Simulación.**

En esta sección se presentan los resultados obtenidos en la simulación, mediante tablas las cuales contienen los datos de longitud del reactor en pies, temperatura del reactor en grados Kelvin y porcentaje de conversión, para diferentes condiciones de operación. Por otra parte, nos proporcionan las condiciones de operación del reactor, tales condiciones son temperatura de entrada al reactor, presión de operación en psia, alimentación en lb/hr, diámetro interno del reactor en pulgadas, la conversión deseada y finalmente el tamaño de paso deseado para la integración.

Además, de lo antes mencionado en esta sección se proporcionan algunas gráficas del comportamiento del reactor, éstas son: longitud vs. temperatura, longitud vs. conversión y temperatura vs. conversión.

## IMPRESION DE RESULTADOS

Condiciones de Operaci"n al Reactor  
Temperatura de Entrada = 865.3723 Grados Kelvin  
Presi"n de Operaci"n = 20.0000 Psia  
Alimentaci"n = 1800.0000 lb/hr  
Diametro interno = 7.5000 in.  
Conversi"n = .7500  
Tamafio de paso = .0500 ft.  
Intervalo de Imopresi"n = 100

### Resultados de la Simulaci"n

Longitud	Temperatura K	Conversi"n
.000	865.372	.000
1.500	859.197	.044
3.000	858.912	.084
4.500	858.923	.124
6.000	858.950	.163
7.500	858.975	.203
9.000	858.999	.243
10.500	859.021	.282
12.000	859.042	.322
13.500	859.062	.361
15.000	859.082	.401
16.500	859.099	.441
18.000	859.116	.480
19.500	859.131	.520
21.000	859.146	.559
22.500	859.160	.599
24.000	859.173	.639
25.500	859.187	.678
27.000	859.200	.718
28.230	859.210	.750

### IMPRESION DE RESULTADOS

Condiciones de Operaci"n al Reactor  
Temperatura de Entrada = 865.3723 Grados Kelvin  
Presi"n de Operaci"n = 20.0000 Psia  
Alimentaci"n = 1800.0000 lb/hr  
Diametro interno = 7.5000 in.  
Conversi"n = .7500  
Tama"o de paso = .0250 ft.  
Intervalo de Impresi"n = 100

### Resultados de la Simulaci"n

Longitud	Temperatura K	Conversi"n
.000	865.372	.000
2.000	863.533	.042
4.000	863.470	.083
6.000	863.504	.123
8.000	863.541	.164
10.000	863.575	.205
12.000	863.609	.245
14.000	863.638	.286
16.000	863.666	.327
18.000	863.693	.367
20.000	863.719	.408
22.000	863.742	.449
24.000	863.764	.489
26.000	863.784	.530
28.000	863.805	.571
30.000	863.825	.611
32.001	863.842	.652
34.001	863.859	.693
36.001	863.875	.733
36.841	863.881	.750

### IMPRESION DE RESULTADOS

Condiciones de Operaci"n al Reactor  
Temperatura de Entrada = 865.3723 Grados Kelvin  
Presi"n de Operaci"n = 20.0000 Psia  
Alimentaci"n = 1800.0000 lb/hr  
Diametro interno = 4.0260 in.  
Convers."n = .7500  
Tama#o de paso = .0300 ft.  
Intervalo de Impresi"n =100

### Resultados de la Simulaci"n

Longitud	Temperatura K	Conversi"n
.000	865.372	.000
3.000	869.459	.039
6.000	869.786	.082
9.000	869.862	.124
12.000	869.920	.166
15.000	869.973	.209
18.000	870.021	.251
21.000	870.068	.294
24.000	870.109	.336
27.000	870.150	.379
30.000	870.187	.421
33.000	870.222	.464
36.000	870.255	.506
39.000	870.287	.549
42.000	870.315	.591
45.000	870.343	.634
48.000	870.370	.676
51.000	870.396	.719
53.219	870.413	.750

### IMPRESION DE RESULTADOS

Condiciones de Operaci3n al Reactor  
Temperatura de Entrada = 865.3723 Grados Kelvin  
Presi3n de Operaci3n = 20.0000 Psia  
Alimentaci3n = 2500.0000 lb/hr  
Diametro interno = 7.5000 in.  
Conversi3n = .7500  
Tama3o de paso = .0250 ft.  
Intervalo de Impresi3n = 100

### Resultados de la Simulaci3n

Longitud	Temperatura K	Conversi3n
.000	865.372	.000
2.100	859.041	.045
4.200	858.761	.085
6.300	858.783	.125
8.400	858.821	.165
10.500	858.957	.205
12.600	858.891	.245
14.700	858.923	.285
16.800	858.952	.324
18.900	858.980	.364
21.000	859.007	.404
23.100	859.032	.444
25.200	859.055	.484
27.300	859.077	.524
29.400	859.097	.564
31.500	859.118	.604
33.600	859.138	.644
35.700	859.153	.684
37.800	859.172	.724
39.207	859.183	.750

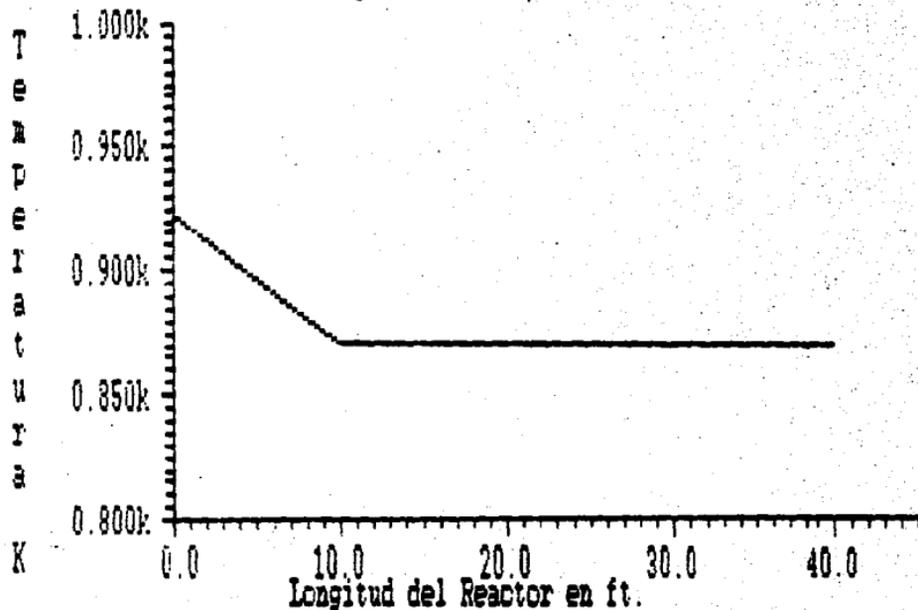
## IMPRESION DE RESULTADOS

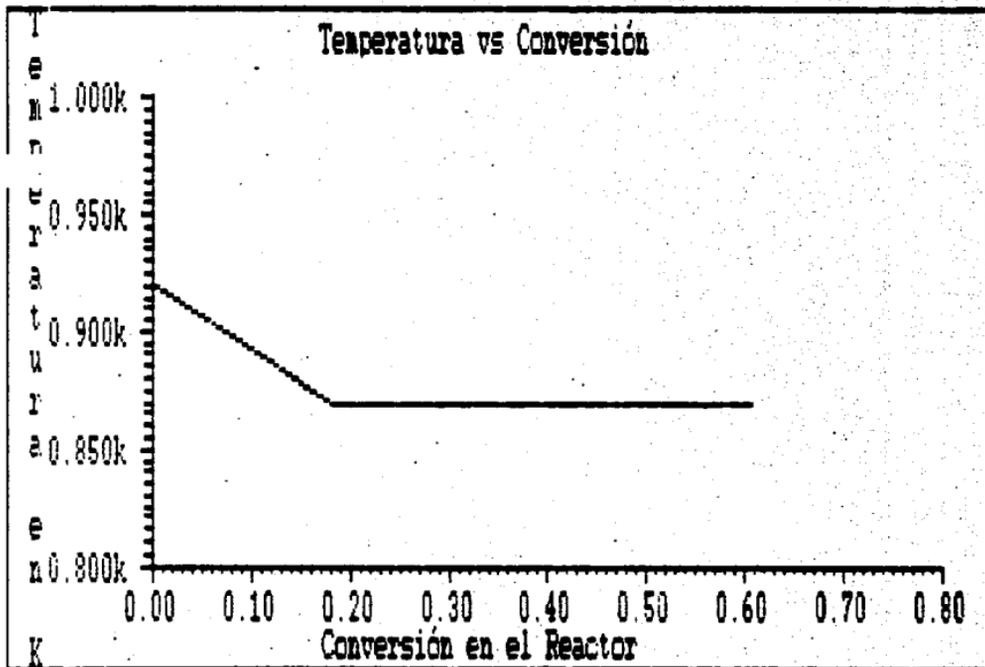
Condiciones de Operaci"n al Reactor  
Temperatura de Entrada = 865.3723 Grados Kelvin  
Presi"n de Operaci"n = 20.0000 Psia  
Alimentaci"n = 2500.0000 lb/hr  
Diametro interno = 5.7760 in.  
Conversi"n = .7500  
Tama#o de paso = .0275 ft.  
Intervalo de Impresi"n =100

### Resultados de la Simulaci"n

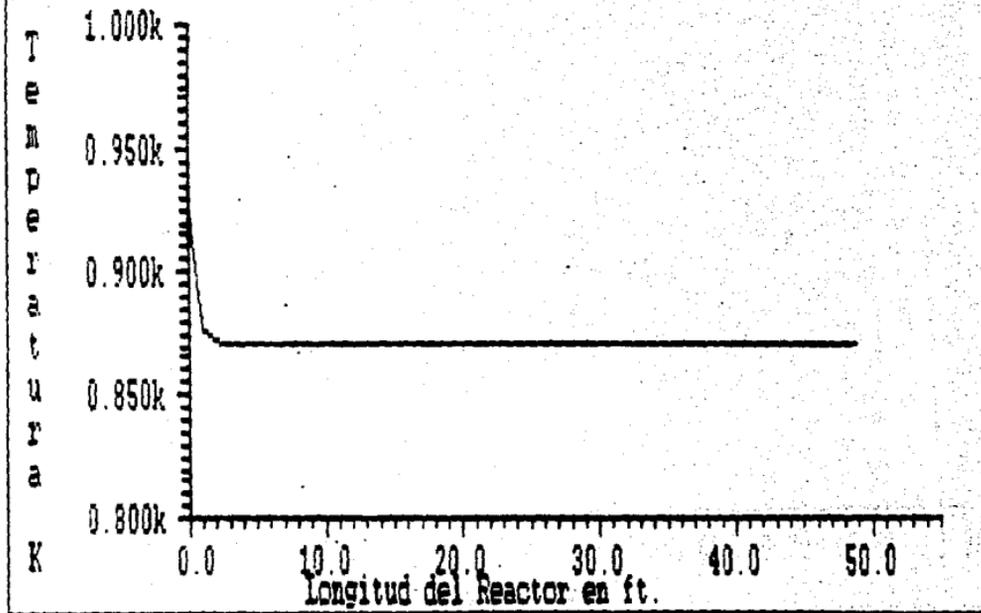
Longitud	Temperatura K	Conversi"n
.000	865.372	.000
2.750	863.336	.042
5.500	863.271	.082
8.250	863.319	.122
11.000	863.370	.163
13.750	863.418	.203
16.500	863.463	.243
19.250	863.505	.283
22.000	863.545	.324
24.750	863.582	.364
27.500	863.616	.404
30.250	863.650	.444
33.000	863.680	.484
35.750	863.709	.525
38.500	863.736	.565
41.250	863.763	.605
44.000	863.789	.645
46.750	863.812	.686
49.500	863.834	.726
51.150	863.847	.750

Longitud vs. Temperatura

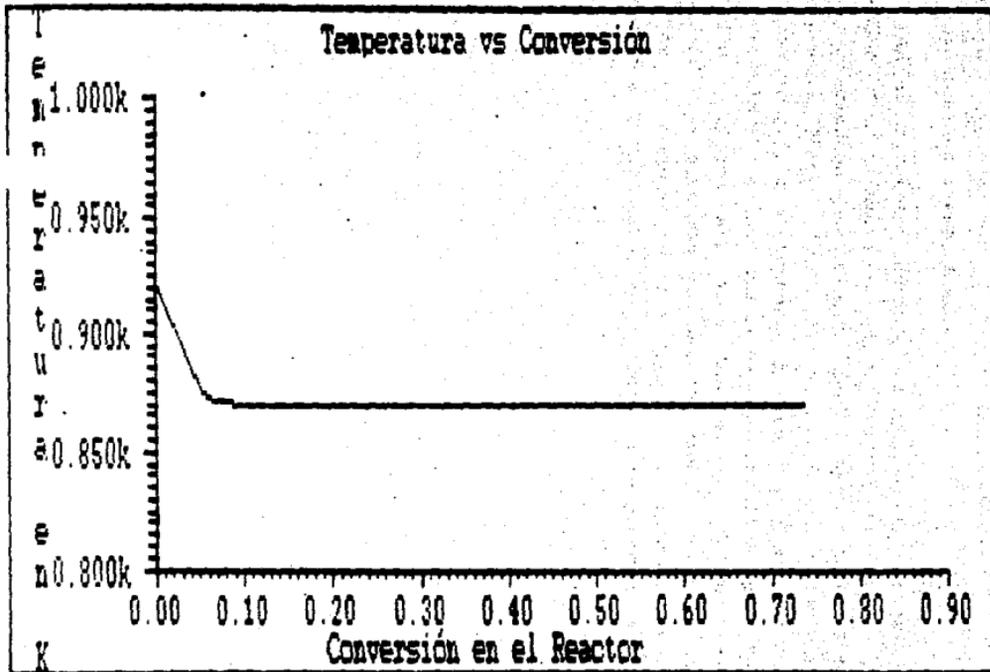




Longitud vs. Temperatura

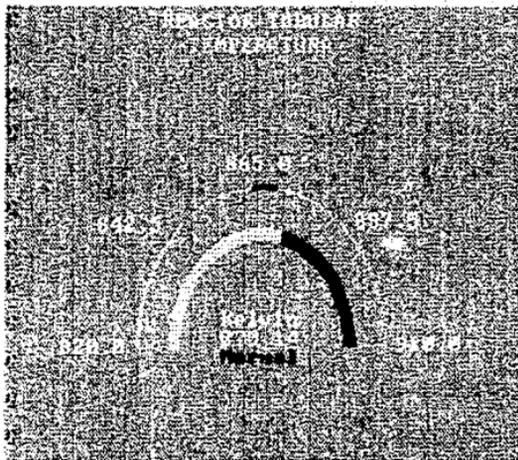


Temperatura vs Conversión

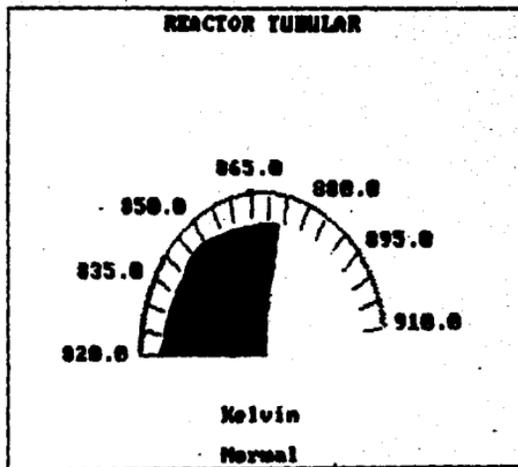


## 6.2 Gráficas en Tiempo Real.

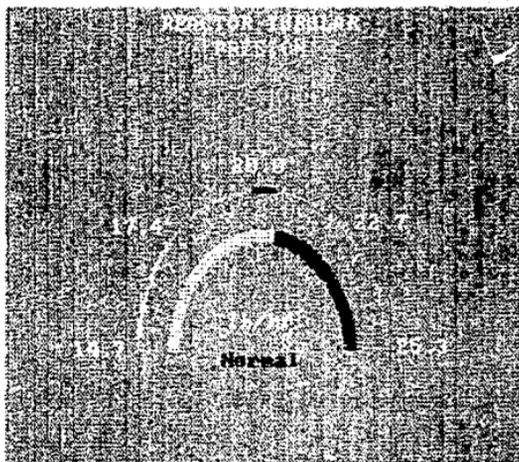
En la presente sección, se presentan las gráficas de la simulación en tiempo real, obtenidas mediante el uso del paquete de herramientas en tiempo real, "Real Time Graphics and Measurement/Control Tools for Microsoft C, IPC-MC-025, Versión 2.0. Estas gráficas presentan de manera esquemática como se está comportando al reactor con el uso de controles, para temperatura, presión y flujo. Así mismo por el uso de este paquete, se presentan las gráficas que nos describen como se comporta en el reactor la temperatura con respecto al tiempo, la temperatura respecto a la conversión y la longitud respecto a la conversión.



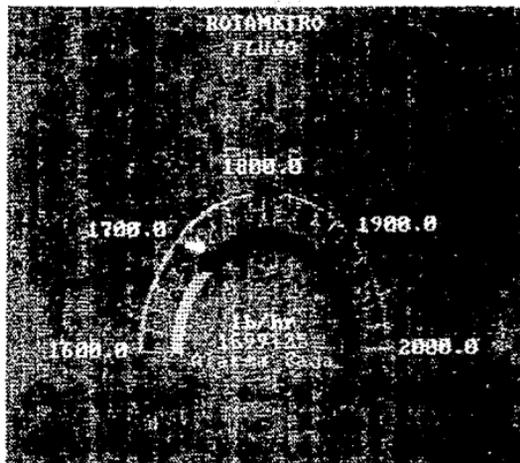
MEDIDOR DE BARRA PARA TEMPERATURA  
CONDICIONES NORMALES



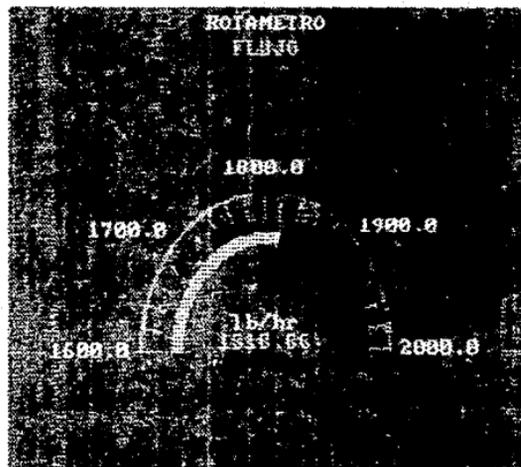
**MEDIDOR DE PIE PARA TEMPERATURA  
CONDICIONES NORMALES**



MEDIDOR DE BARRA PARA PRESION  
CONDICIONES NORMALES

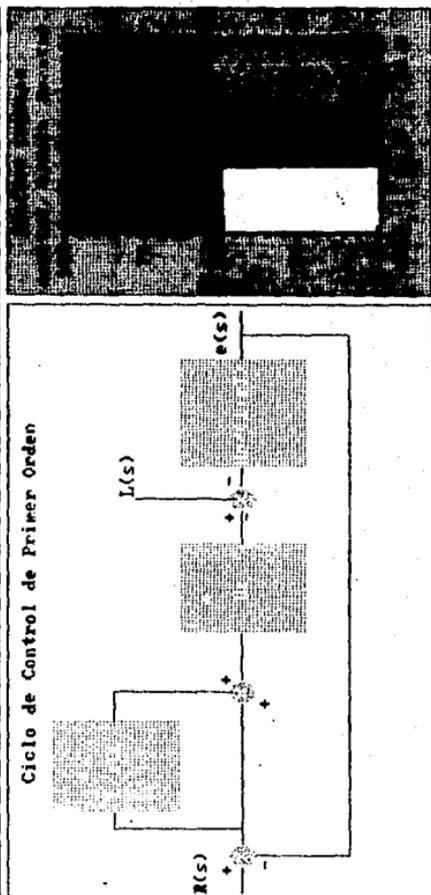
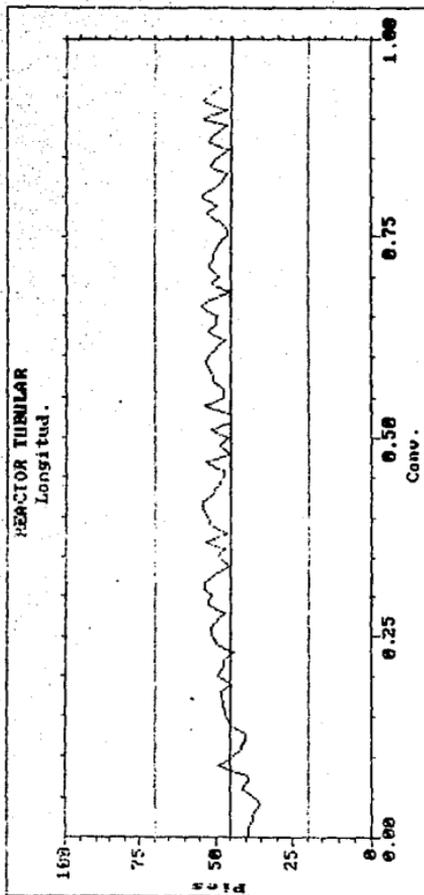


MEDIDOR DE BARRA PARA FLUJO  
ALARMA BAJA

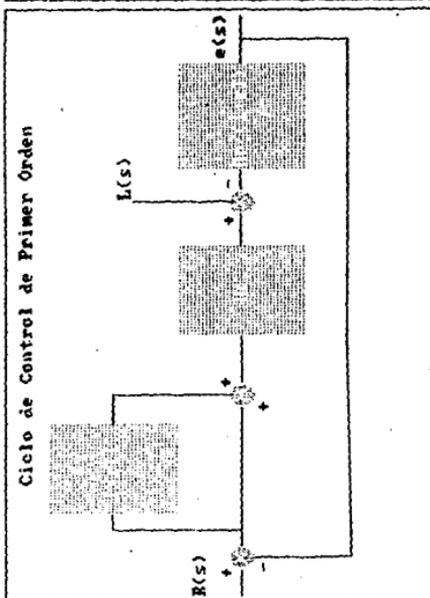
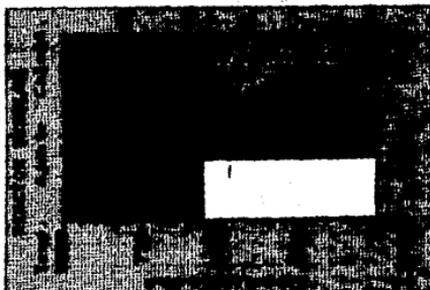
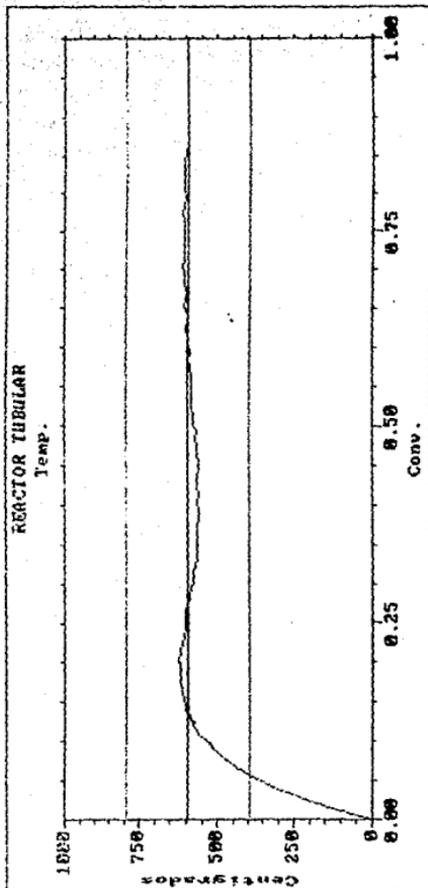


MEDIDOR DE BARRA PARA FLUJO  
CONDICIONES NORMALES

VISUALIZACION EN PANTALLA DEL COMPORTAMIENTO DE LA  
LONGITUD CON RESPECTO DE LA CONVERSION PARA UN  
REACTOR TUBULAR



VISUALIZACION EN PANTALLA DEL COMPORTAMIENTO DE LA TEMPERATURA CON RESPECTO DE LA CONVERSION EN UN REACTOR TUBULAR



### 6.3 Discusión de resultados.

Los resultados obtenidos en el presente trabajo, nos proporcionan información acerca de como se puede comportar un reactor en condiciones reales de operación, y nos permiten ver de que manera se podría modificar éste, de tal manera que se obtengan las mejores condiciones para que el reactor trabaje a una máxima eficiencia y nos proporcione un producto de buena calidad con un costo menor.

#### Información de la literatura.

Conv.	°C	°K
0.0	597	870.15
0.10	595	868.15
0.20	592	865.15
0.30	590	863.15
0.40	588.5	861.65
0.50	587	860.15
0.60	586	859.15

#### Información obtenida.

Conv.	°K
0.0	863.372
0.123	863.470
0.205	863.575
0.327	863.666
0.449	863.742
0.530	863.784
0.611	863.825

Por medio de la anterior información se demuestra que el modelo planteado es correcto, ya que los datos obtenidos para el reactor de estireno son similares a los reportados en la literatura para un caso real.

Por lo antes dicho, con algunas modificaciones el programa para la simulación de un reactor tubular homogéneo desarrollado en el presente trabajo, puede ser aplicado para otros tipos de reacciones que cumplan con las características que debe tener un reactor tubular.

## CONCLUSIONES

## CONCLUSIONES

Al término del presente trabajo se simulación y en base a los resultados obtenidos con el programa de computo realizado, se puede llegar a las siguientes conclusiones:

La simulación es una técnica muy valiosa para estudiar el comportamiento de diversos sistemas, pues nos permite obtener resultados con una gran eficiencia y en un tiempo menor que al hacerlo de manera manual.

Otra conclusión es que los sistemas operados en tiempo real permiten al trabajador un mayor entendimiento de los mismos y facilitan su labor ya que nos permiten ver como se comporta el sistema dentro de un cierto intervalo de tiempo. Esto permite realizar cambios al notar fallas que ocurren dentro del proceso de acuerdo al modelo propuesto, sin necesidad de ver el proceso real.

Al hacer estos cambios se puede llegar a tener un proceso que trabaje en mejores condiciones, con mayor eficiencia y precisión, lo cual facilita el trabajo del personal que esta operando dicho proceso.

Al llevar a cabo la simulación del reactor, conforme al modelo elegido, se puede ver que tratándolo como un simple tubo la longitud del mismo tiende a ser algo grande, en comparación con los datos reportados en la literatura, dependiendo también del diámetro del tubo y de la alimentación. Sin embargo, haciendo algunas modificaciones al programa para la simulación, se puede obtener un reactor de tubos múltiples lo cual hace que disminuya la longitud del mismo.

Pese a esto el comportamiento general del reactor en cuanto

a temperatura y conversión de la reacción es lo esperado, tratándose de un reactor isotérmico. De este hecho se deriva el control y la instrumentación que presenta dicho reactor, el cual casi en su totalidad corresponde a la temperatura del mismo, ya que esta debe permanecer casi constante para no afectar a la distribución de productos y velocidad de reacción.

Finalmente, el programa realizado en este trabajo es aplicable para cualquier tipo de reacción que presente las características que requiere un reactor tubular, puesto que los datos obtenidos son bastante confiables al compararlos con los reportados en la literatura.

## BIBLIOGRAFIA

## BIBLIOGRAFIA.

1. Rase, Horward F.. "Chemical Reactor Design for Process Plants", Volumen 1 -Principles and Techniques-. Jonh Wiley & Sons. Inc., USA, 1977.
2. Smith, J. M. "Chemical Engineering Kinetics". McGraw-Hill Book Company. 3a. USA, 1981.
- 3.4. Froment, G.F., Bischoff, K.B. "Chemical Reactor Analysis and Design". John Wiley & Sons. USA, 1979.
4. Fogler, H. Scott. "Elementals of Chemical Kinetics and Reactor Calculations". (A Self-Paced Approach). Prentice-Hall Inc., USA, 1974.
5. Perry and Chilton "Chemical Engineers Handbook". Sección 5a. ed. Mc-Graw Hill.
6. Tarhan, M Orhan. "Catalytic Reactor Design". McGraw-Hill Book Company, USA, 1983.
7. Reklaitis, G.V. "Introduction to Material and Energy Balances". John Wiley & Sons. USA. 1983.
8. Himmenblau, D.M.; Bischoff, K. B., "Análisis y Simulación de Procesos". Reverté S.A., España, 1976.
9. Luyben, W.L., "Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers". McGraw-Hill, USA, 1973.
10. Katsuhiko Ogata. "Ingeniería de Control Moderna". Prentice Hall Hispanoamericana S.A., México, 1988.
11. Smith, C.A.; Corripio, A.B., "Principles and Practice of

- Automatic Process Control". John Wiley & Sons. USA, 1985.
12. Palm III, William J., "Modeling, Analysis and Control of Dynamic Systems". John Wiley & Sons. USA, 1983.
  13. Husain, Asghar. "Chemical Process Simulation". Wiley Eastern Limited. India, 1986.
  14. Najim Kaddour. "Process Modeling and Control in Chemical Engineering". Marcer Dekker Inc., USA, 1989.
  15. Shinskey, F.G., "Process Control Systems Application, Design and Tuning". Mcgraw-Hill, USA, 1988.
  16. Andrew, W.G.: Williams, H.B.. "Applied Instrumentation in the Process Industries". Vol I. Gulf Publishing Company Book Division, USA, 1977.
  17. Johnson, Curtis D., "Process Control Instrumentation Technology". 2a. John Wiley & Sons., USA, 1982.
  18. Dorf, Richard C.; "Sistemas Modernos de Control, Teoría y Práctica". 2a. ed. Adisson-Weslwy Iberoamericana, México. 1989.
  19. Kirt, Raymond Eller, "Emcyclopedia of Chemical Technology". Vol. 18. USA.
  20. Carnahan, B.; "Applied Numerical Methods". John Wiley & Sons. USA.
  21. Nauman E.B. and Mallikarjun R., "Optimization in Tubular Reactor Systems". Chemical Catalytic Reactor Modeling. American Chemical Society, USA, 1984.
  22. Cropley J.B., Burges L.M. and Loke R.A., "The Optimal Design

of a Reactor for the Hydrogenation of Butyraldehyde to Butanol". Chemical and Catalytic Reactor Modeling, American Chemical Society, USA, 1984.

23. Lovo Marianne and Balakotaiah Vemuri. "Multiplicity features of Adiabatic Autothermal Reactor". AICHEJ, 38(1), 101-115 (1992).

24. Lovo M. and Balakotaiah V., "Multiplicity Features of Nonadiabatic, Autothermal Tubular Reactor". AICHEJ, 38(1), 116-127 (1992).

25. Kapila A.K and Poore A.B., "The Steady Response of a Nonadiabatic Tubular Reactor". Chem. Eng. Sci., 37(1), 57-68 (1982).

26. Sundaram A.K., Sardina H., Fernández-Baujin J.M. and Hildreth J.M., "Styrene Plant Simulation and Optimization". Hydrocarbon Processing, 72(1), 93 (1991).

27. Amigues R., Chauvin Y. and Commereuc D., "Hydrocarbon Processing, 69(10), 79 (1990).

28. Dixon A.G. and Cresswell D.L., "Theoretical Prediction of Effective Heat Transfer Parameters in Packed Beds", AICHEJ, 25(4), 663 (1979).

29. Ampaya J.P. and Rinker R.G. "Autothermal Reactor With Internal Heat Exchanger-I (Numerical and experimental studies in the multiple steady-state region)". chem. Eng. Sci., 37(11), 1327-1338 (1977).

30. Sundaram K.M. and Froment G.F. "Modeling of Thermal Cracking Kinetics-I (Thermal cracking of ethene, propene and their

mixtures)". Chem. Eng. Sci., 12(6), 601-608 (1977).

31. Sundaram, K.M. and Froment G.F. "Modeling of Thermal Cracking Kinetics-II (Cracking of iso-butane, of n-butane and mixtures ethane-propane-n-butane)". Chem. Eng. Sci., 12(6), 609-617 (1977).

32. Adomaitis R.A. and Cinar A. "The Bifurcation Behavior of an Autothermal Packed Bed Tubular Reactor". Chem. Eng. Sci., 11(4), 887-898 (1988).

33. Sundaram, K. M. and Froment, G. F. Chem. Eng. Sci., 12, 601, 1977.

**ANEXOS**

DESARROLLO DEL PROGRAMA PARA LA SIMULACION DE UN REACTOR TUBULAR  
HOMOGENEO CON INSTRUMENTACION EN TIEMPO REAL.

CALCULO DE LA ENTALPIA REAL DE UNA REACCION

1. Cálculo de la entalpía de reacción estándar.

Se requiere para su cálculo de los coeficientes estequiométricos de reactivos y productos, y de las entalpías de formación de los mismos.

2. Cálculo de la capacidad calorífica de la mezcla.

Se requiere de las capacidades caloríficas y de los coeficientes estequiométricos de los componentes de la reacción.

3. Cálculo de la entalpía a diferentes temperaturas.

Para calcular la entalpía ideal a diferentes temperaturas, se utiliza el método de integración de Romberg, el cual se trabaja mediante la subrutina ROMB.

Los parámetros que se alimentan a esta subrutina son los siguientes:

E - límite inferior de integración.

F - límite superior de integración.

NI - número de pasos de integración.

4. Cálculo de la entalpía ideal.

Realizados los cálculos de entalpía de reacción estándar y entalpía ideal a diferentes temperaturas se obtiene la entalpía ideal.

5. Cálculo de la entalpía residual.

La entalpía residual de la reacción se obtiene a través de la ecuación de Peng Robinson, mediante la subrutina PR, la cual requiere a su vez de la solución de raíces polinomiales mediante la subrutina PROD, la cual proporciona el factor de compresibilidad

Para poder trabajar la subrutina PR se requieren los siguientes datos:

- T - Temperatura de proceso.
- P - Presión de proceso.
- NCOM - Número de componentes.
- COMP - Composiciones de los componentes.
- Tc - Temperatura crítica.
- Pc - Presión crítica.
- w - Factor acéntrico.

#### 6. Cálculo de la entalpía real.

En base a los valores de entalpía ideal y entalpía residual, se calcula la entalpía real.

#### CALCULO DE LA VELOCIDAD DE REACCION.

##### 1. Escribir las ecuaciones del modelo cinético.

Para poder resolver el modelo cinético se hace uso de la subrutina KUTMER, para la solución de ecuaciones simultáneas.

Para su aplicación la subrutina KUTMER requiere de la siguiente información.

- Condiciones iniciales.
- Tamaño de paso.

Proporcionándonos las condiciones finales.

#### CALCULO DE LOS BALANCES DE MASA Y ENERGIA.

##### 1. Indicar el tipo de reacción que se efectua (catalítica o no

catalítica)

2. Escribir las ecuaciones de los balances de masa y energía.  
Estos se resuelven mediante la subrutina KUTMER.

#### IMPRESION DE RESULTADOS.

Se imprimen los siguientes parámetros.

1. Temperatura del reactor.
2. Longitud del reactor.
3. Conversión en el reactor.

#### ANEXO B

#### MANUAL DEL USUARIO.

Para poder hacer uso de este programa el usuario debe de seguir las siguientes indicaciones:

1. Escribir la reacción.
2. Proporcionar las condiciones iniciales de la reacción.
3. Dar el número que corresponde a los componentes de la reacción dentro del banco de datos.
4. Escribir los coeficientes estequiométricos de los componentes.
5. Introducir la temperatura de reacción, en grados Kelvin.
6. Introducir la Presión de reacción, en psia.
7. Dar los límites de integración, para el cálculo de la entalpía ideal.
8. Proporcionar los parámetros de mezcla, para la solución de la ecuación de estado.
9. Introducir el valor de la alimentación al reactor, en lb/hr.
10. Proporcionar el diámetro del reactor, en pulgadas.

11. Proporcionar la conversión deseada.
12. Proporcionar el tamaño de paso de integración.
13. Dar el intervalo de impresión.
14. Escribir las ecuaciones cinéticas, correspondientes al modelo.
15. Proporcionar la densidad del catalizador, en caso de que la reacción se lleve a cabo en presencia de un catalizador.
16. Escribir las ecuaciones para el balance de masa y energía.
17. Finalmente, la simulación le proporcionará datos de temperatura, conversión y longitud de reactor.