

Análisis de la Sensibilidad Paramétrica en reactores de Lecho Fijo

Rangel Jara Hermes A.
Ingeniero Químico, M.Sc. I.Q. - Profesor Asociado, U.N.
Bogoya Maldonado Daniel
Ingeniero Químico, MSc. I.S. - Profesor Titular, U.N.

En la búsqueda de reactores de lecho fijo que ofrezcan una gran seguridad y permitan maximizar la conversión - para una determinada longitud del reactor - se analizan los tres arreglos más comunes (paralelo, contracorriente y temperatura constante), con respecto al medio de enfriamiento. Como casos de aplicación se estudiaron la oxidación parcial de O-xileno para producir anhídrido ftálico como producto único en el primer caso y teniendo en cuenta reacciones paralelas y consecutivas para el segundo caso. El sistema de ecuaciones variacionales originado a partir del sistema de ecuaciones diferenciales del modelo del reactor sirve para solucionar el problema de valores de frontera y adicionalmente la sensibilidad paramétrica de las diferentes variables. Mediante un análisis de la sensibilidad paramétrica y de otras ventajas resultantes el arreglo en paralelo puede considerarse como la alternativa más atractiva.

INTRODUCCION

Bilous y Amudson, (3), fueron los primeros en indicar que la máxima temperatura (hot point) en un reactor químico es muy sensible a cambios en las variables de operación. Este fenómeno es conocido como la sensibilidad paramétrica en el reactor (7), (8), (10), (20). Los reactores tubulares empacados-tubos y coraza - son comunmente usados para manejar reacciones altamente exotérmicas a escala industrial, debido a la gran área de transferencia de calor ofreci-

da por unidad de volumen, elevados coeficientes de película y como una forma conveniente de atenuar los gradientes de temperatura en el sentido radial (4). Por razones de seguridad en la operación, selectividad y actividad del catalizador el punto caliente debe mantenerse en ciertos límites permisibles.

En la práctica, para un proceso específico la variable que puede manipularse y controlarse es el medio de enfriamiento (fluido de enfriamiento, temperaturas de entrada y salida, flujo y dirección relativa). El esquema a contracorriente es el más frecuente en la

práctica industrial, probablemente se deba a que por extensión un reactor multitubular se asimila con un comportamiento análogo al de un intercambiador de tubos y coraza. Sin embargo, como señala Rase (18), la semejanza es solo remota.

Se han elaborado muchos estudios para analizar el fenómeno de la sensibilidad paramétrica y así poder establecer una ruta o zona de operación. Bilous y Amudson (3), Barkelaw (2), van Welsenaere y Froment (20), McGreavy y Adderley (12), Rajadhyaksha (17), Oroskar y Stern (15), Morbidelli y Varma (13). En los trabajos anteriores han asumido temperatura constante en la temperatura del medio refrigerante. Recientemente algunos trabajos consideran el cambio en la temperatura del refrigerante. Soria López (19) desarrolló para flujo en paralelo algunos criterios para la sensibilidad paramétrica y fue complementado por Hosten y Froment (11). El arreglo en contracorriente fue tratado por Akella y Lee (1), quienes propusieron la dilución del catalizador. Un trabajo muy importante de la sensibilidad paramétrica a cocorriente es el de Henning y Pérez (9), el cual mediante una técnica relativamente sencilla propone un criterio para detectar la zona de estabilidad, válido para reacciones sencillas y complejas. Finalmente, Borio y otros (4) presentan uno de los mejores y más recientes trabajos sobre la sensibilidad paramétrica y un análisis detallado de los diferentes esquemas de enfriamiento.

En este trabajo se presenta una simulación de la operación y con ayuda de algunos criterios desarrollados en trabajos anteriores se analizan los tres esquemas de enfriamiento (contracorriente, paralelo y temperatura constante del refrigerante) mediante sensibilidad paramétrica. Los resultados obtenidos muestran la ventaja del arreglo en paralelo y se plantea como la alternativa más atractiva por la seguridad y otras ventajas adicionales resultantes de la simulación del proceso.

METODOS NUMERICOS

El cálculo para el arreglo en paralelo y temperatura constante es un problema de integración numérica con valores iniciales, de las ecuaciones diferenciales del modelo del reactor y de las ecuaciones variacionales. Se utilizó un método de Runge Kutta (5) de cuarto orden y opcional un método de Euler. Para el esquema a contracorriente que origina un problema de valores de frontera se empleó un método de Newton, que lo convierte en un problema de valores iniciales y por medio de un sistema variacional de ecuaciones diferenciales permite la búsqueda de la solución a través de un proceso iterativo (6).

El algoritmo corresponde a los denominados "shooting" y generalizado a un sistema de n ecuaciones diferenciales

$$\frac{dy_i}{dx} = f(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \tag{1}$$

cuyas condiciones de frontera corresponden a valores de puntos iniciales y valores de puntos finales. Las primeras r ecuaciones tienen condiciones iniciales especificadas y las últimas n-r ecuaciones condiciones finales, así:

$$\begin{aligned} y_i(x_0) &= y_{i,0} & i &= 1, 2, \dots, r \\ y_j(x_f) &= y_{j,f} & j &= r + 1, \dots, n \end{aligned} \tag{2}$$

Para convertir el problema en uno de valores iniciales es necesario inicializar las variables.

$$y_j(x_0) = \sigma_j \quad j = r + 1, \dots, n \tag{3}$$

Las ecuaciones variacionales se originan al derivar parcialmente el sistema de ecuaciones diferenciales con respecto a cada una de las variables inicializadas, para obtener

$$\frac{d(\delta y_i / \delta \sigma_j)}{dx} = \sum_{k=i}^n \frac{\delta f_i}{\delta y_k} \left(\frac{\delta y_k}{\delta \sigma_j} \right) \quad \begin{aligned} i &= 1, 2, \dots, n \\ j &= r+1, \dots, n \end{aligned} \tag{4}$$

al denotar la sensibilidad como

$$S_{ij} = \delta y_i / \delta \sigma_j$$

las ecuaciones variacionales pueden expresarse como

$$\frac{dS_{ij}}{dx} = \sum_{k=1}^n \frac{\delta f_i}{\delta y_k} S_{kj} \quad \begin{aligned} i &= 1, 2, \dots, n \\ j &= r+1, \dots, n \end{aligned} \tag{5}$$

El conjunto forma un sistema de n (n-r) ecuaciones diferenciales ordinarias cuyas condiciones iniciales son dadas por

$$\begin{aligned} S_{ij}(x_0) &= 1 & i &= j & i &= 1, 2, \dots, n \\ S_{ij}(x_0) &= 0 & i &\neq j & j &= r+1, \dots, n \end{aligned} \tag{6}$$

El sistema (1) con las condiciones iniciales conocidas y las inicializadas (3), junto con el sistema (5) de ecuaciones variacionales y sus condiciones iniciales (6) se integran hacia adelante, simultáneamente. En el terminal de la integración la matriz Jacobiana se determina de los valores de las sensibilidades en x_f

$$J(x_f, \sigma) = \begin{bmatrix} \frac{\delta y_{r+1}}{\delta \sigma_{r+1}} & \frac{\delta y_{r+1}}{\delta \sigma_{r+2}} & \dots & \frac{\delta y_{r+1}}{\delta \sigma_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\delta y_n}{\delta \sigma_{r+1}} & \frac{\delta y_n}{\delta \sigma_{r+2}} & \dots & \frac{\delta y_n}{\delta \sigma_n} \end{bmatrix} \quad (7)$$

Los valores mejorados se obtienen a partir de

$$\sigma_{nuevo} = \sigma_{viejo} + [J(x_f, \sigma)]^{-1} \delta y$$

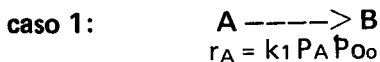
donde el vector δy es formado por las diferencias entre el valor final especificado en la frontera y el calculado al utilizar las condiciones inicializadas

$$\delta y = \begin{bmatrix} y_{r+1}(x_f, \sigma) - y_{r+1,f} \\ \dots \\ y_n(x_f, \sigma) - y_{n,f} \end{bmatrix} \quad (8)$$

De esta forma se sigue iterando hasta satisfacer cierto grado de precisión.

MODELO MATEMATICO DEL REACTOR

Se trabajó un modelo pseudohomogéneo unidimensional semejante al adoptado por Froment y Bischoff (8), lo mismo que las reacciones y cinéticas. El **caso 1** es la oxidación parcial de O-xileno para obtener anhídrido ftálico como producto único y en el **caso 2** se tiene en cuenta reacciones paralelas y consecutivas de formación de CO y CO₂



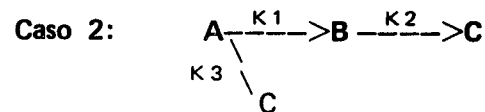
$$\frac{dP_A}{dx} = -A_1 P_A \exp(b_1 - a_1/T) \quad (9)$$

$$\frac{dT}{dx} = B_1 P_A \exp(b_1 - a_1/T) - C_1 (T - T_c) \quad (10)$$

$$\frac{dT_c}{dx} = D_1 (T - T_c) \quad (11)$$

Donde, $A_1 = \frac{d_b P M P_{O_2}}{G_g}$ $B_1 = \frac{d_b (-\Delta H_1) P_{O_2}}{G_g C_{p_g}}$

$$C_1 = \frac{4U}{G_g C_{p_g} dt} \quad D_1 = \frac{\pi dt t_n U}{W_c C_{p_c}}$$



$$r_A = (k_1 + k_3) P_A P_{O_2}$$

$$r_B = (k_1 P_A - k_2 P_B) P_{O_2}$$

$$r_C = (k_3 P_A + k_2 P_B) P_{O_2}$$

$$k_1 = \exp(b_1 - a_1/T)$$

$$k_2 = \exp(b_2 - a_2/T)$$

$$k_3 = \exp(b_3 - a_3/T)$$

$$\frac{dP_A}{dx} = -A_1 P_A (k_1 + k_3) \quad (12)$$

$$\frac{dP_B}{dx} = A_1 (k_1 P_A - k_2 P_B) \quad (13)$$

$$\frac{dP_C}{dx} = A_1 (k_3 P_A + k_2 P_B) \quad (14)$$

$$\frac{dT}{dx} = B_2 (k_1 P_A - k_2 P_B) + B_3 (k_3 P_A + k_2 P_B) - C_1 (T - T_c) \quad (15)$$

$$\frac{dT_c}{dx} = D_1 (T - T_c) \quad (16)$$

Donde, $B_2 = \frac{d_b (-\Delta H_1) P_{O_2}}{G_g C_{p_g}}$ $B_3 = \frac{d_b (-\Delta H_3) P_{O_2}}{G_g C_{p_g}}$

En la **Tabla 1** se presenta los valores de los parámetros Fisicoquímicos y geométricos utilizados en los cálculos. Para el cálculo de algunos parámetros fisicoquímicos fue consultado (7), (8), (9), (16) y para los datos geométricos del reactor (8), (9), (14), (19), (20).

TABLA 1

a ₁	E ₁ /R	13636 K ⁻¹
a ₂	E ₂ /R	15802 K ⁻¹
a ₃	E ₃ /R	14393 K ⁻¹
b ₁		19.837
b ₂		20.860
b ₃		18.970
C _{pc}	Calor específico medio del refrigerante	0.3108 Kcal/Kg ^o K
C _{pg}	Calor específico medio de la mezcla reaccionante	0.2498 Kcal/kg ^o K
d _b	Densidad del lecho catalítico	1300 Kg/mt ³
d _g	Densidad media de la mezcla reaccionante	1.293Kg/mt ³
d _c	Densidad media del refrigerante	874 Kg/mt ³
d _{int}	Diámetro interno de la coraza	1.9 mt
d _t	Diámetro interno del tubo	0.025 mt
d _{te}	Diámetro externo del tubo	0.03175 mt
G _g	Flujo másico	4.684 Kg/hr·mt ²
K _g	Conductividad térmica media de la mezcla reaccionante	0.0419 Kcal/hr·mt ^o K
K _c	Conductividad térmica media del refrigerante	65.71 Kcal/hr·mt ^o K
M	Peso molecular promedio de la mezcla reaccionante	29.48 Kg/Kmol
P	Presión total	1.0 Kg/atm
P _{o_o}	Presión parcial del oxígeno	0.208 atm
P _t	Espaciado de los tubos (arreglo cuadrado)	0.039 mt
t _n	Número total de tubos	3000
U	Coefficiente total de transferencia de calor	77.37 Kcal/hr·mt ² · ^o K
V _g	Velocidad media de la mezcla reaccionante	1.003 mt/seg
α _i	Coef. total de transf. de calor del lecho catalítico	77.365 Kcal/hr·mt ² · ^o K
α _s	Coeficiente de transf. de calor del lado de la coraza	22290 Kcal/hr·mt ² · ^o K
ΔH ₁	Calor medio de oxid. del 0-xiteno a anhídrico ftálico	-307000 Kcal/Kmol
ΔH ₃	Calor medio de oxidación de productos a CO-CO ₂	-1090000 Kcal/Kmol
μ _g	Viscosidad media de la mezcla reaccionante	0.1098 Kg/mt·hr
μ _c	Viscosidad media de refrigerante	1.175 Kg/mt·hr

Condiciones de frontera

CASO 1

CASO 2

Arreglo en paralelo:

$$\begin{array}{l}
 x=0 \quad \begin{cases} P_A = P_{A0} \\ T = T_0 \\ T_c = T_{c0} \end{cases} \\
 \quad \quad \begin{cases} P_A = P_{A0} \\ P_B = P_{B0} \\ P_c = P_{c0} \\ T = T_0 \\ T_c = T_{c0} \end{cases} \quad (17)
 \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 x = 0 \quad \begin{cases} P_A = P_{A0} \\ T = T_0 \\ \vdots \end{cases} \\
 \quad \quad \begin{cases} P_A = P_{A0} \\ P_B = P_{B0} \\ P_c = P_{c0} \\ T = T_0 \\ \vdots \end{cases}
 \end{array}$$

$$x=L \quad T_c = T_{cL} \quad T_c = T_{cL} \quad (18)$$

CASO DE TEMPERATURA CONSTANTE DEL REFRIGERANTE:

En general no cambian los modelos, excepto que $T_c = T_{c0} = T_{cL}$.

Para el desarrollo del trabajo se atribuyó un signo al valor del flujo másico del refrigerante. Así, $W_c > 0$ al esquema en paralelo y $W_c < 0$ al esquema en contracorriente, permite la simulación de diferentes condiciones de refrigeración. Para valores muy grandes positivos o negativos de W_c ($W_c \rightarrow \infty$) permite representar el caso de temperatura constante del refrigerante. Convencionalmente corresponde al modelo del reactor con temperatura de pared constante y es propio del uso de un fluido en ebullición ó de un fluido con flujo tendiendo a infinito (4), (7), (8).

SISTEMA DE ECUACIONES VARIACIONALES

Al desarrollar las sensibilidades paramétricas del modelo del reactor se obtiene:

Caso 1:

$$\frac{dS_1}{dx} = -A_1 \exp(b_1 - a_1/T) \left(S_1 + \frac{a_1 P_A}{T^2} S_2 \right) \quad (19)$$

$$\frac{dS_2}{dx} = B_1 \exp(b_1 - a_1/T) \left(S_1 + \frac{a_1 P_A}{T^2} S_2 \right) - C_1 (S_2 - S_3) \quad (20)$$

$$\frac{dS_3}{dx} = C_1 (S_2 - S_3) \quad (21)$$

Caso 2:

$$\frac{dS_1}{dx} = - \left\{ A_1 \left[\exp(b_1 - a_1/T) \left[S_1 + \frac{a_1 P_A}{T^2} S_4 \right] + \dots \dots \exp(b_3 - a_3/T) \left[S_1 + \frac{a_3 P_A}{T^2} S_4 \right] \right\} \quad (22)$$

$$\frac{dS_2}{dx} = A_1 \left\{ \exp(b_1 - a_1/T) \left[S_1 + \frac{a_1 P_A}{T^2} S_4 \right] - \dots \dots \exp(b_2 - a_2/T) \left[S_2 + \frac{a_2 P_B}{T^2} S_4 \right] \right\}$$

$$\frac{dS_3}{dx} = A_1 \left\{ \exp(b_3 - a_3/T) \left[S_1 + \frac{a_3 P_A}{T^2} S_4 \right] + \dots \dots \dots \exp(b_2 - a_2/T) \left[S_2 + \frac{a_2 P_B}{T^2} S_4 \right] \right\} \quad (23)$$

$$\frac{dS_4}{dx} = B_2 \left\{ \exp(b_1/T) \left[S_1 + \frac{a_1 P_A}{T^2} S_4 \right] - \dots \dots \dots \exp(b_2 - a_2/T) \left[S_2 + \frac{a_2 P_B}{T^2} S_4 \right] \right\} + B_3 \left\{ \dots \dots \dots \exp(b_3 - a_3/T) \left[S_1 + \frac{a_3 P_A}{T^2} S_4 \right] + \dots \dots \dots \exp(b_2 - a_2/T) \left[S_2 + \frac{a_2 P_B}{T^2} S_4 \right] \right\} - C_1 (S_4 - S_5) \quad (24)$$

$$\dots \dots \dots \exp(b_2 - a_2/T) \left[S_2 + \frac{a_2 P_B}{T^2} S_4 \right] \right\} + B_3 \left\{ \dots \dots \dots \exp(b_3 - a_3/T) \left[S_1 + \frac{a_3 P_A}{T^2} S_4 \right] + \dots \dots \dots \exp(b_2 - a_2/T) \left[S_2 + \frac{a_2 P_B}{T^2} S_4 \right] \right\} - C_1 (S_4 - S_5) \quad (25)$$

$$\frac{dS_5}{dx} = D_1 (S_4 - S_5) \quad (26)$$

CONDICIONES DE FRONTERA:

Para la solución del modelo del reactor en el esquema a contracorriente y utilizando el método de Newton (6),

Caso 1

Caso 2

$$x = 0 \quad S_1 = S_2 = 0 \quad S_3 = 1 \quad S_1 = S_2 = S_3 = S_4 = 0 \quad S_5 = 1$$

Las condiciones de frontera para el sistema de ecuaciones variacionales, una vez solucionado el modelo del reactor, serán diferentes dependiendo el criterio a utilizar para el análisis de la sensibilidad paramétrica.

Las condiciones de frontera en el caso 1 para las sensibilidades en el criterio de Soria López, (19), y Henning-Pérez (9), $S_1 = 0, S_2 = 1, S_3 = 0$, Para el criterio propuesto por Borio y otros (4), $S_1 = 0, S_2 = S_3$. Con $S_3 = 1$ en $x=0$ para arreglo en paralelo y $S_3 = 1$ en $x = L$ para el esquema a contracorriente.

La diferencia en la inicialización entre los dos criterios radica en la variable operativa en consideración para el análisis de la sensibilidad. El primer criterio utiliza la temperatura de ingreso de la mezcla reaccionante y el segundo la temperatura de entrada del refrigerante.

En el caso 2, $S_1 = S_2 = S_3 = S_5 = 0, S_4 = 1$, para el primer criterio; y $S_1 = S_2 = S_3 = 0, S_4 = S_5 = 1$ en $x=0$ para paralelo y $S_4 = S_5 = 1$ en $x=L$ a contracorriente, en el segundo criterio.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Para el Caso 1 en la Figura 1 se presentan curvas de T_{co} en función de T_{cL} para diferentes valores del flujo del refrigerante W_c , los cuales cubren las tres configuraciones de flujo a estudiar. Con $T_o = T_{co}$, igual P_{Ao} y el mismo flujo de entrada de mezcla reaccionante, para un reactor de 2 metros de longitud. La línea recta de pendiente unitaria que corresponde al caso de temperatura constante del refrigerante ($W_c \rightarrow \infty$), divide el plano en dos regiones. La región inferior corresponde a la operación en paralelo, donde $W_c > 0$ y $T_{co} < T_{cL}$, mientras que la zona superior donde siempre $T_{co} > T_{cL}$, corresponde al esquema a contracorriente.

En la región de operación a contracorriente se en-

cuentran curvas en forma de **S** que denotan soluciones múltiples. Para cada valor de T_{cL} son posibles, en principio, hasta tres estados estacionarios. El fenómeno de multiplicidad tiene su origen en el transporte de calor que realiza el refrigerante hacia la mezcla reaccionante en la zona de entrada. La multiplicidad aumenta con la disminución del flujo másico de refrigerante y tiende a desaparecer para altos valores de W_c . Una de las características en la **zona de arreglo en paralelo es la unicidad de estado estacionario** en todas las condiciones, ya que las curvas son monótonamente crecientes.

Para el **Caso 1** en la **Figura 2**, para una misma temperatura de entrada del refrigerante ($T_{co}=T_{cL}$), igual P_{Ao} y el mismo flujo de entrada de mezcla reaccionante, puede verse que el perfil de temperatura de la mezcla reaccionante alcanza valores extremadamente elevados y se presentaría lo que algunos autores denominan condición de "escape en el reactor". Para el caso de arreglo en contracorriente, con $T_{cL} = 625$ °K y $W_c = 50$ Kg/seg, la temperatura de salida del refrigerante es de 642.98 °K. El desarrollo de temperaturas mayores por parte del refrigerante que la temperatura de la mezcla reaccionante es la causa de estados estacionarios múltiples presentándose un fenómeno de retroalimentación de calor. El "escape en el reactor" puede visualizarse en la **Figura 2**. La longitud del

reactor para los datos de la **Figura 2** fué de 1.5 metros.

Para efectuar un análisis comparativo entre los diferentes arreglos del refrigerante es necesario hacerlo sobre una misma base común de referencia. Una elección razonable es mantener igual la conversión en el reactor, lo mismo que P_{Ao} y G_g . La simulación numérica permite ajustar las condiciones de entrada del refrigerante para obtener la misma conversión y teniendo en cuenta el criterio de Borio (4) $T_o = T_{co}$, implícito en las condiciones de frontera de las ecuaciones diferenciales. Para una conversión del 54% con: $P_{Ao} = 0.014$ atm., $G_g = 4684$ Kg/hr- m^2 y $W_c = 50$ Kg/seg se originó la **Figura 3**. De los perfiles de temperatura de la mezcla reaccionante puede notarse que la menor temperatura máxima (**punto caliente**) corresponde al esquema en paralelo. Utilizando el criterio de Borio (4) puede compararse la sensibilidad paramétrica de cada uno de los esquemas de enfriamiento. En la **Figura 4** se presentan los perfiles axiales de sensibilidad $S_2(x)$, correspondientes a las condiciones de la **Figura 3**, respectivamente. Se observa que el máximo de los perfiles $S_2(x)$ se localiza en una cota axial muy próxima a la del punto caliente. Por lo tanto, el valor máximo del perfil se presenta como un indicador de la sensibilidad paramétrica de la operación. Los menores valores para la sensibilidad paramétrica se encuentran bajo un esquema en paralelo.

FIGURA 1. Curvas de T_{co} vs. T_{cL} para los distintos esquemas de enfriamiento. $P_{Ao}=0.014$ atm., $G_g=4684$ Kg/hr- m^2 , $L=2$ mts.

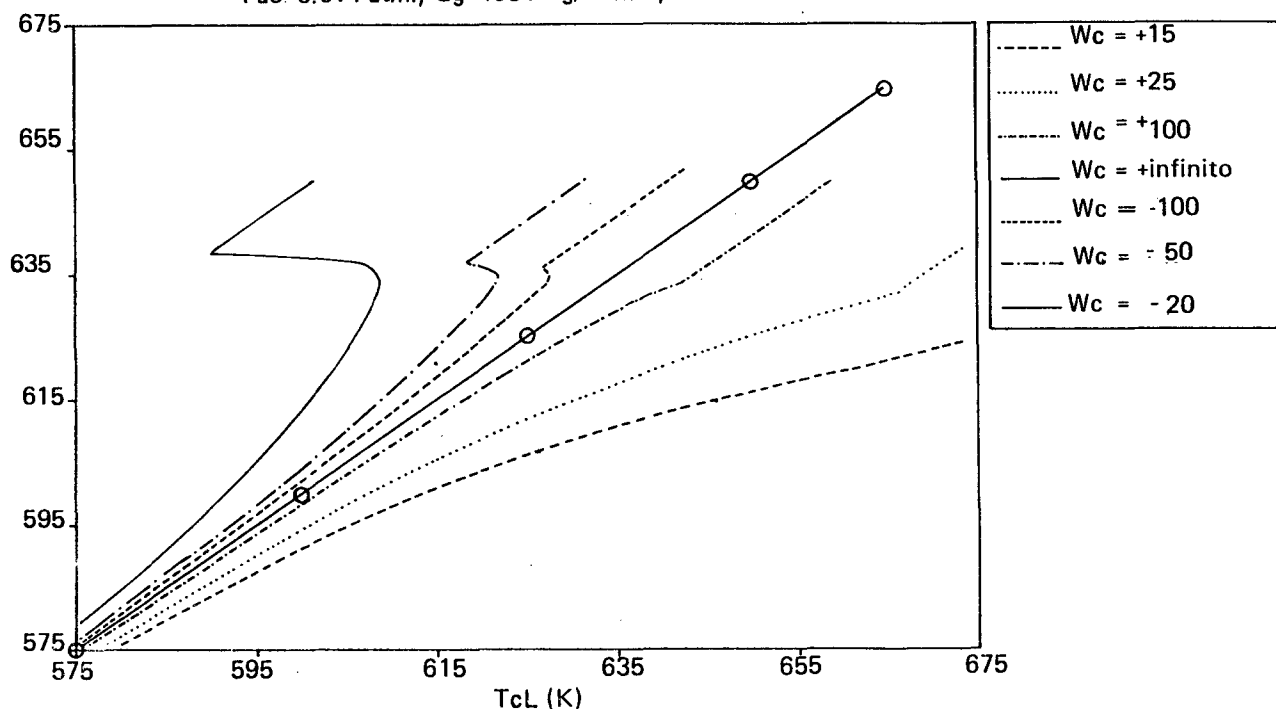


FIGURA 2. Perfil de temperatura para los diferentes esquemas de enfriamiento.
 $W_c = 50 \text{ Kg/seg.}$

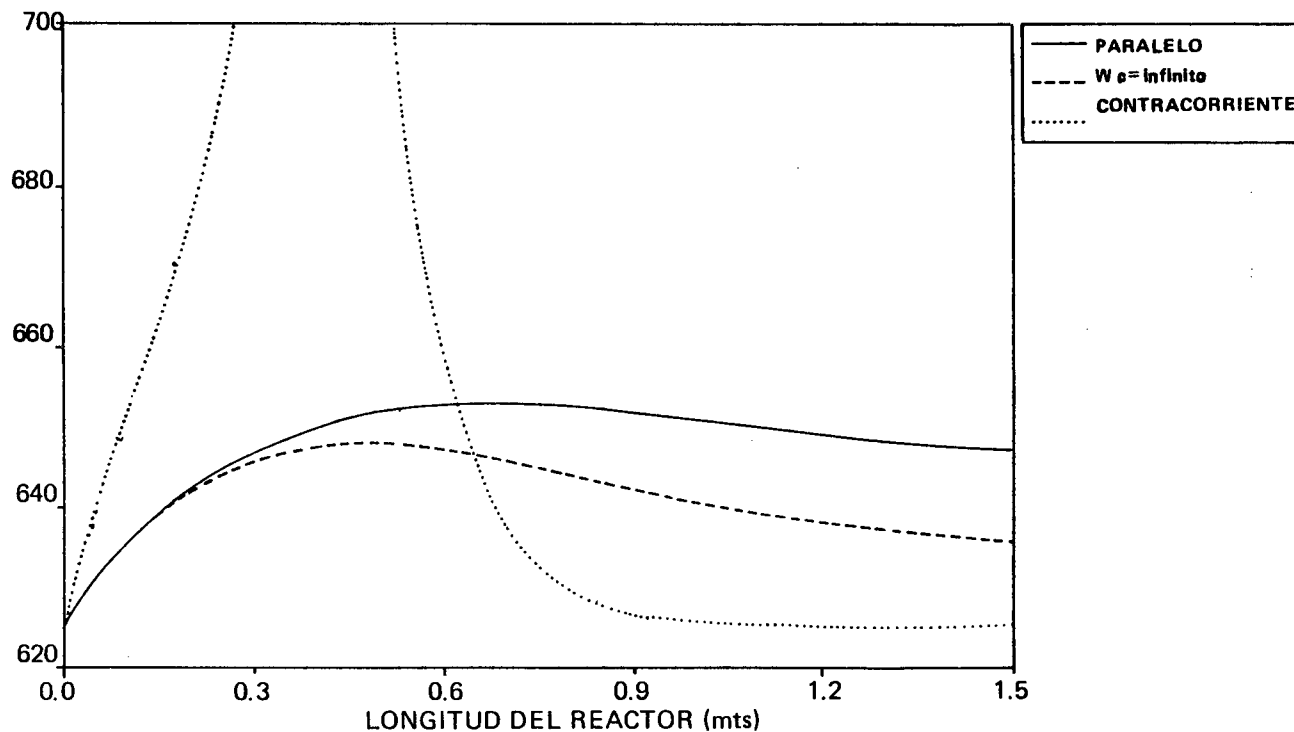


FIGURA 3. Perfiles de temperatura en condiciones de igual conversión y $T_o = T_{co}$.
 54% de conv., $P_{ao} = 0.014 \text{ atm}$, $G_g = 4684 \text{ Kg/hrmt}^2$

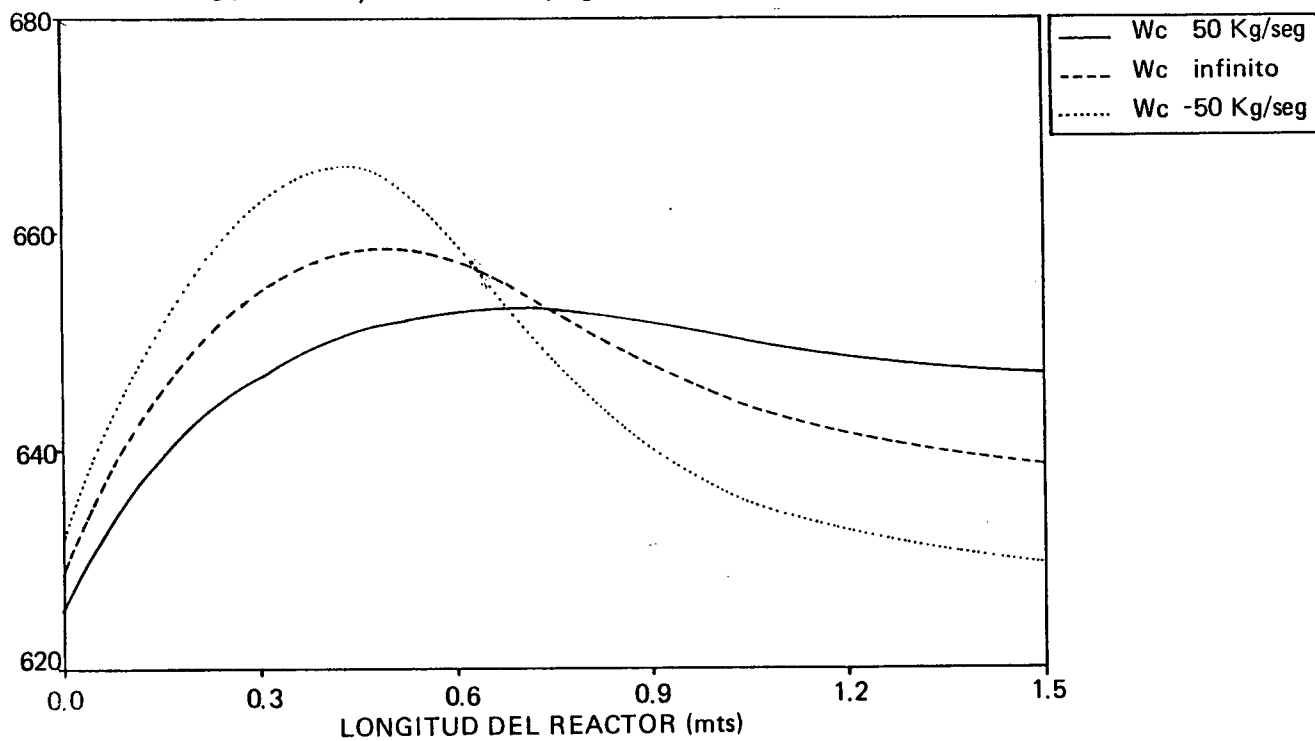
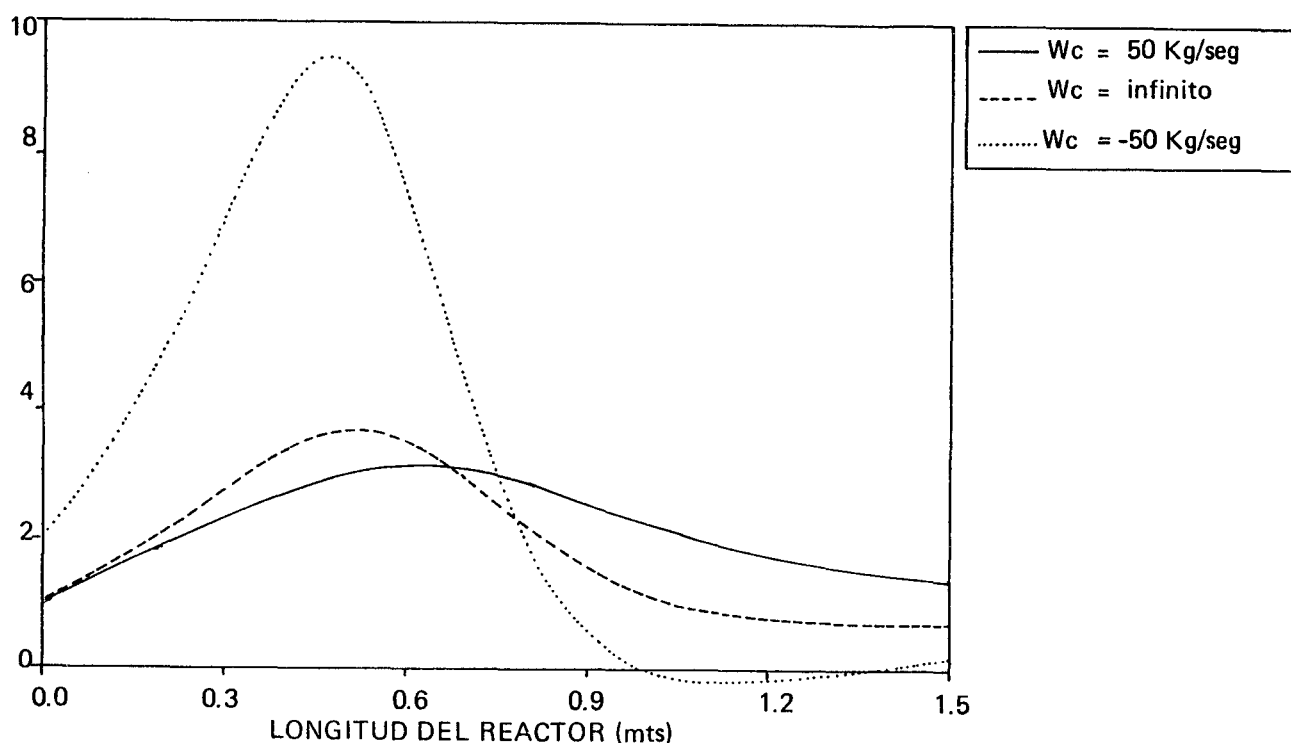


FIGURA 4. Perfiles axiales de la sensibilidad para las condiciones de la figura 3.



El mismo resultado fue obtenido para diferentes grados de conversión y diferentes W_c . La longitud del reactor para los datos anteriores se adoptó de 1.5 metros.

En general el arreglo en paralelo para el fluido refrigerante presenta unicidad de estado estacionario, una menor sensibilidad paramétrica con respecto a los otros esquemas, bajo una referencia común de comparación. Adicionalmente, para una temperatura máxima permitida de operación en el reactor origina las ventajas anotadas anteriormente y una mayor conversión que los otros arreglos, para una determinada longitud del reactor. Esto será motivo de un mayor análisis en un próximo trabajo.

Seleccionado el arreglo en paralelo como la alternativa más atractiva para el sistema de enfriamiento se pretende presentar y aplicar un criterio, para el esquema en paralelo, basado en la sensibilidad paramétrica a lo largo del reactor. El criterio es de Henning y Pérez (9) y puede ser utilizado cuando se tiene en cuenta el cambio en la temperatura del refrigerante y no es restringido a cinéticas sencillas. Para la aplicación del criterio cambian las condiciones iniciales de las sensibilidades paramétricas, y éstas fueron presentadas en el desarrollo de las condiciones de frontera. La sensi-

bilidades se originan con respecto a la temperatura de entrada de la mezcla reaccionante.

En la Figura 5 se presentan los perfiles de temperatura con W_c diferentes del refrigerante con arreglo en paralelo y para el Caso 1. Con $T_o = 625 \text{ }^\circ\text{K}$ y $T_{co} = 620 \text{ }^\circ\text{K}$, y los valores de $P_{ao} = 0.014 \text{ atm.}$, $G_g = 4684 \text{ Kg/hr-mt}^2$. La Figura 6 corresponde a los perfiles de ST_{T_o-z} de las trayectorias de la temperatura de la mezcla reaccionante de la Figura 5. Una inspección de los perfiles ST_{T_o-z} muestra que una condición de operación segura puede caracterizarse cuando estos perfiles son monótonamente decrecientes. Además, la frontera entre regiones de estabilidad e inestabilidad es establecida por una curva que presenta un punto mínimo. Esto coincide con el criterio de Hlavacek (10), quien dice que si en el intervalo estudiado $ST_{T_o} < 1$ es válido, entonces el caso de análisis es insensible paraméricamente. Las curvas críticas de ST_{T_o-z} tienen una zona donde la derivada de ST_{T_o} con respecto a z es positiva.

El método anterior fue aplicado al Caso 2 y se adoptó para la circunstancia $T_o = T_{co} = 625 \text{ }^\circ\text{K}$, para compararlo con el trabajo de Lasa, mencionado por (9). La zona de operación recomendada es muy similar a la

FIGURA 5. Perfil de temperatura para diferentes flujos de enfriamiento. Flujo paralelo y caso 1. $T_o=625$, $T_{co}=620K$

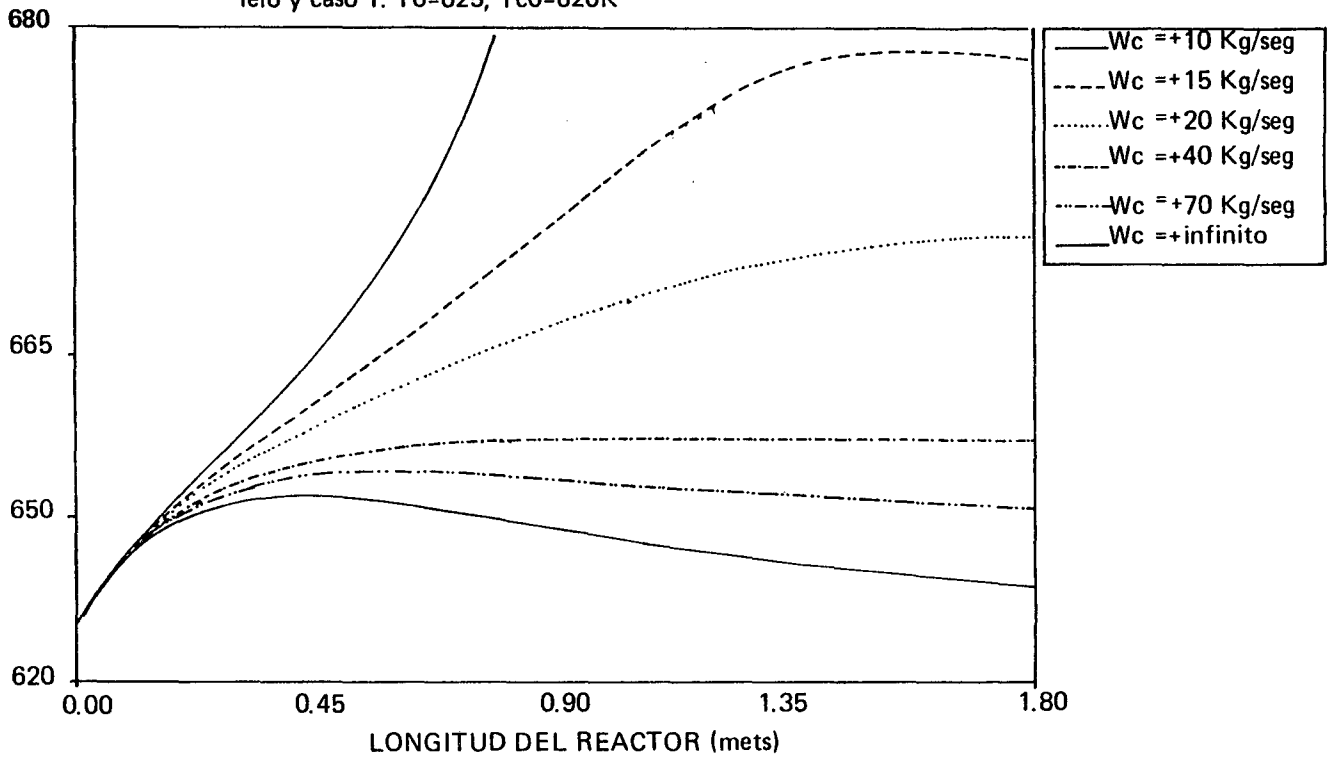
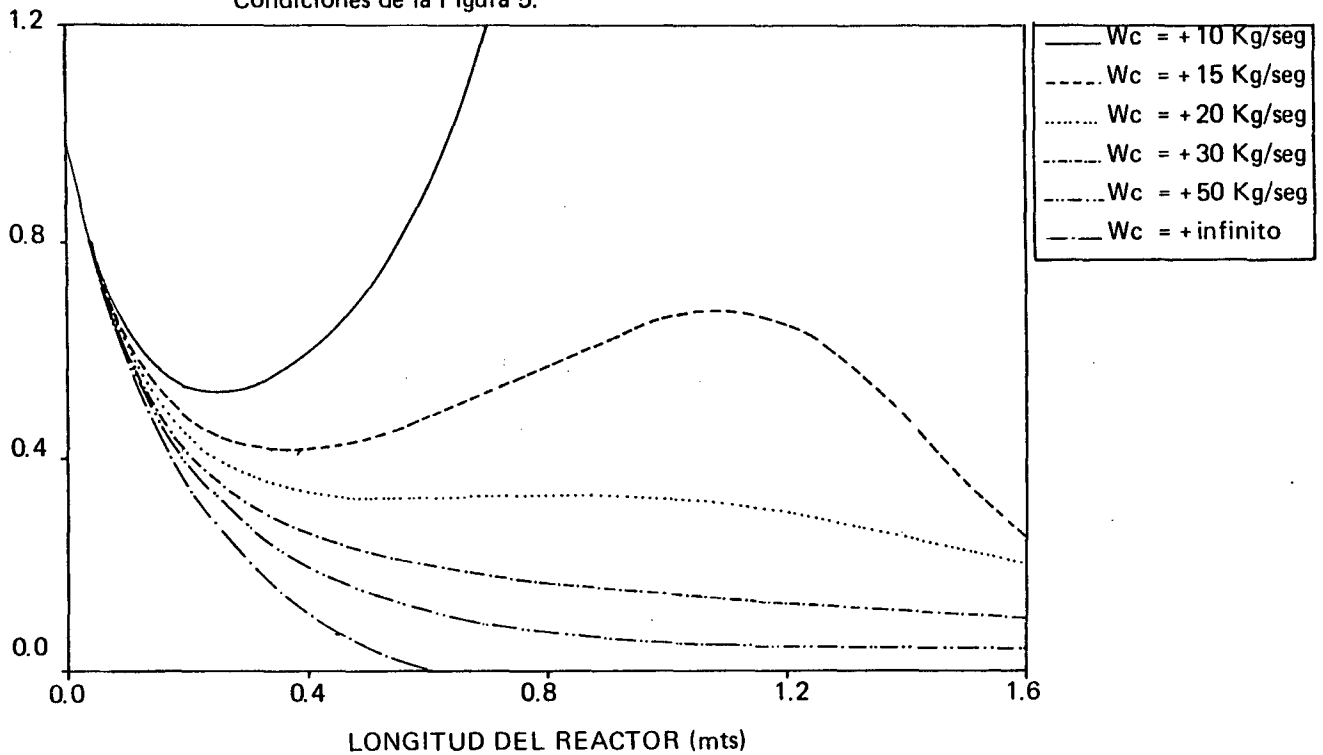


FIGURA 6. Perfil axial de la sensibilidad para diferentes flujos de enfriamiento. Condiciones de la Figura 5.



obtenida en la presente simulación, utilizando el criterio de Henning-Pérez. En las Figuras 7 y 8 se muestran los perfiles de temperatura de la mezcla reaccionante y los respectivos de STT_0-z . Tanto en la Figura 5 como en la Figura 7 puede verse la circunstancia de una operación pseudoadiabática anotada por Soria López (19), donde el perfil de temperatura aumenta monótonamente y la temperatura máxima en una cota axial infinita.

La simulación de la operación permite ver la multiplicidad estacionaria del arreglo a contracorriente, la mayor sensibilidad paramétrica de los esquemas en contracorriente y temperatura de refrigerante constante. Permite concluir que el arreglo en paralelo es la alternativa más atractiva, en cuanto a la seguridad de la operación y la conversión en el reactor.

Seleccionado el esquema en paralelo se aplicó el criterio de Henning y Pérez (9) que permitió establecer la frontera entre regiones de sensibilidad e insensibilidad paramétrica de la operación y su fácil adaptación a cualquier cinética. La flexibilidad del criterio permite que a la entrada del reactor las temperaturas de la mezcla reaccionante y la del refrigerante puedan ser

iguales o diferentes. Finalmente, el tiempo de cómputo es muy bajo convirtiéndose en una vía expedita de análisis.

BIBLIOGRAFIA

1. Akella, L.M., Lee, H.H. A design approach bases on phase plane analysis: countercurrent reactor/heat exchanger with parametric sensitivity. *AIChEJ.* 29(1), 87, 1983.
2. Barkelew, C.H. Stability of chemical reactors. *Chem. Eng. Prog. Symp. Serv.* 55(25), 37, 1959.
3. Bilouš, O., Amudson, N.R. Chemical reactor stability and sensitivity II. Effects of parameters on sensitivity of empty tubular reactors. *AIChEJ.* 2(1), 117, 1956.
4. Borio, D.O., Gatica, J.A., Porras, J.E. Wall cooled fixed bed reactors: parametric sensitivity as a design criterion. *AIChEJ.* 35(2), 1989.
5. Carnahan, B., Luther, A. Cálculo numérico. Métodos, aplicaciones. Ed. Rueda, Madrid, 1979.
6. Constantinides, A. Applied numerical methods with personal computers. McGraw-Hill Book Co, 1988.
7. Doraswamy, L., Sharma, M. Heterogeneous reactions: Analysis, examples and reactor design. John Wiley & Sons, 1984.

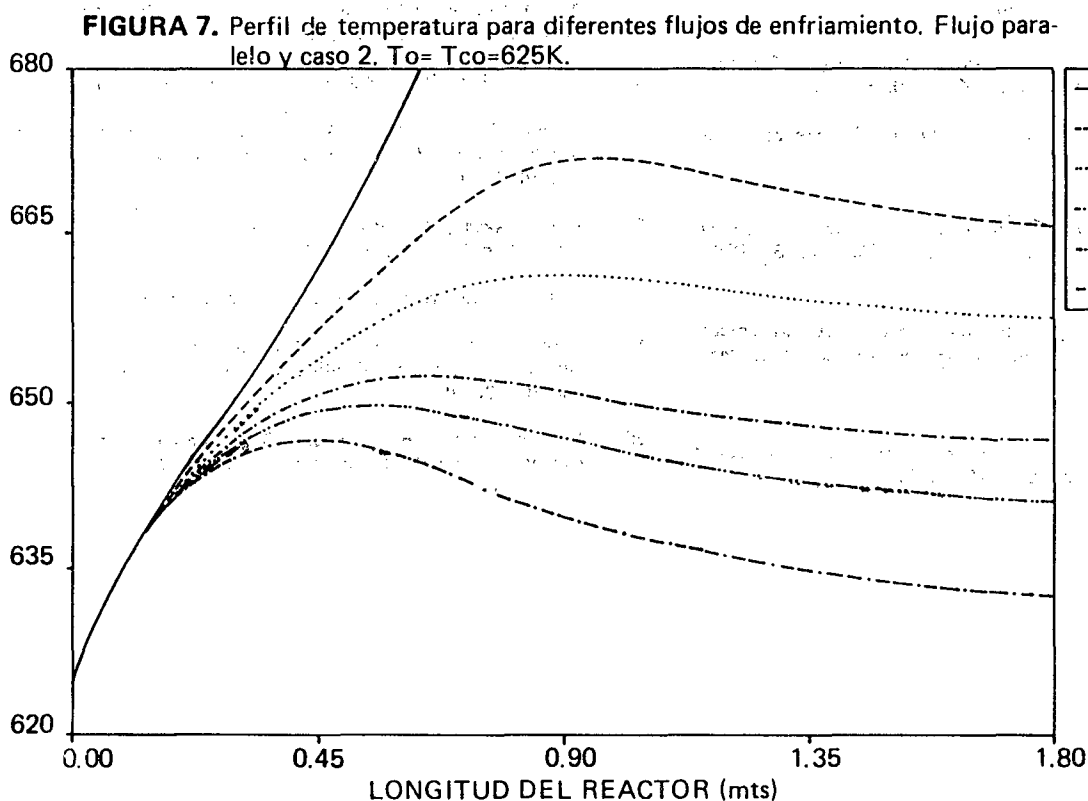
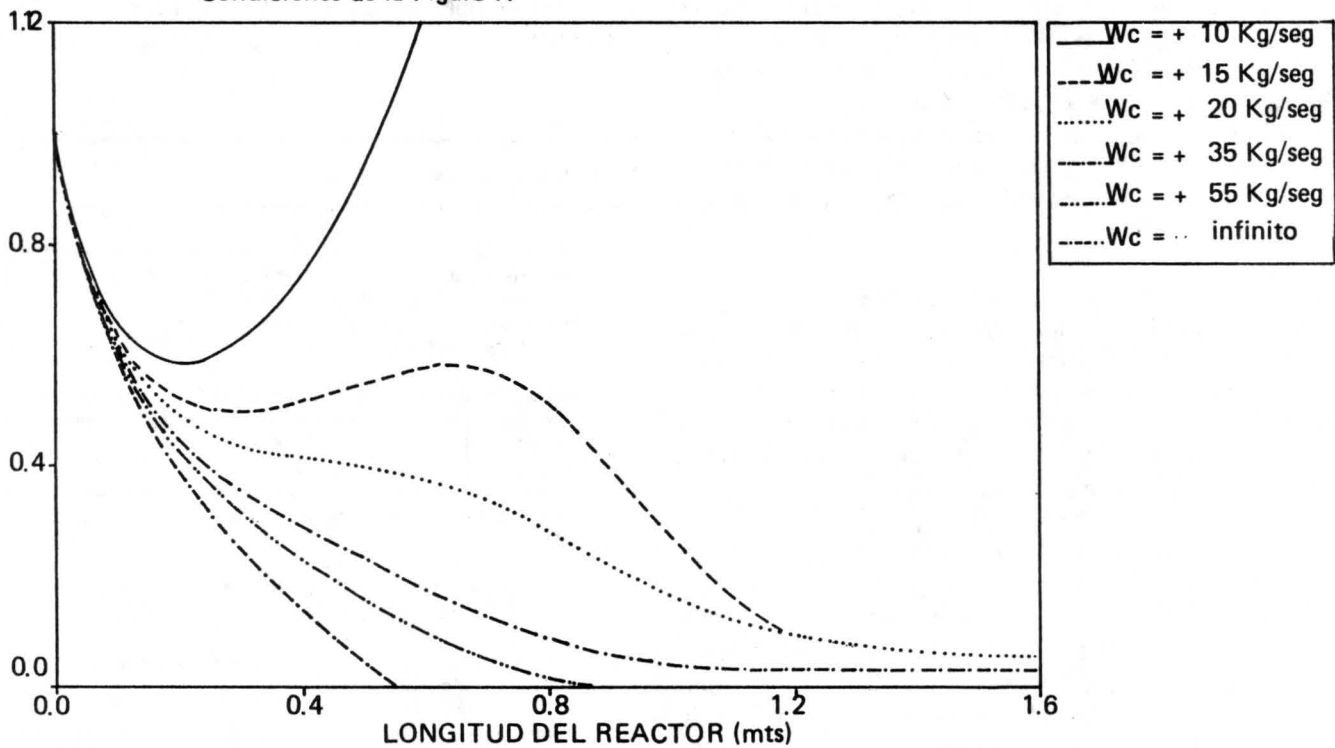


FIGURA 8. Perfil axial de la sensibilidad para diferentes flujos de enfriamiento. Condiciones de la Figura 7.



8. Froment, G.F., Bischoff, K. Chemicals reactors analysis and design. John Wiley & Sons, 1979.
9. Henning, L.H., Pérez, G.A. Parametric sensitivity in fixed bed catalytic reactors. Chem. Eng. Sci. **41**, 1, 1986.
10. Hlavacek, V. Aspects in design of packed catalytic reactors. Ind. Eng. Chem., **62**(7), 1970.
11. Hosten, L.H., Froment, G.F. Parametric sensitivity in cocurrently cooled tubular reactors. Chem. Eng. Sci. **41**, 4, 1073, 1986.
12. McGreavy, C., Adderley, C.I. Parametric sensitivity and temperature runaway in heterogeneous fixed bed reactors. Adv. Chem. Ser., **133**, 519, 1974.
13. Morbidelli, M., Varma, A. Parametric sensitivity and runaway in tubular reactors. AIChEJ. **28**(5), 705, 1982.
14. Oliveros, M.A. Simulación y análisis del intercambio de calor en un reactor multitubular de lecho fijo. Proyecto de grado. Depto de Ing. Química., 1990.
15. Oroskar, R.A., Stern, S.A. Stability in chemical reactors. AIChEJ.
16. Pereira, S.I., Feretti, O.A. A heterogeneous one dimensional model for non-adiabatic fixed bed catalytic reactors. Chem. Eng. Sci. **39**, 6, 1984.
17. Rajadhyaksha, R.A. Parametric sensitivity in fixed bed reactors. Chem. Eng. Sci. **30**, 285, 1975.
18. Rase, H.F. Chemical reactors design for process plants.
19. Soria López, A.H., de Lasa, H. Parametric sensitivity of a fixed bed catalytic reactor. Cooling fluid flow influence. Chem. Eng. Sci. **36**, 185, 1981.
20. Van Welsenaere, R., Froment, G.F. Parametric sensitivity and runaway in fixed bed catalytic reactors. Chem. Eng. Sci. **25**, 1503, 1970.

INGENIERIA E INVESTIGACION