

SIMULADOR DINÁMICO DE REACTORES FLUJO TAPÓN

Daniel F. Rodríguez*, **Brenda M. Restrepo***, **Jorge A. Velásquez*** [†]

**Universidad Pontificia Bolivariana, Cq. 1 #70-01, of. 11-259, Medellín, Colombia,*

Recibido 26 Marzo 2009; aceptado 08 Abril 2009

Disponible en línea: 30 Junio 2009

Resumen: FLUJO PISTÓN es un simulador dinámico de reactores flujo tapón, el cual opera como complemento de Microsoft Excel®. Como modelo de simulación se utiliza la estrategia de segmentos finitos en serie. En la solución del sistema generado se emplea, el método de la homotopía en la solución de sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales y la ecuación cúbica de estado de Peng-Robinson, PR con reglas de mezcla de Van der Waals para los cálculos de propiedades termodinámicas de mezclas. Se comparo exitosamente los resultados obtenidos mediante la utilización del simulador, comparándolos con datos obtenidos del simulador comercial HYSYS. *Copyright © 2007 UPB.*

Abstract: FLUJO PISTON is a dynamic simulator of plug flow reactors which operates as a complement of Microsoft Excel. As a simulation model it is used the strategy of finite segments in series. In the solution of the system generated it was used, the homotopic method in solving systems of nonlinear algebraic equations and the cubic equation of state of Peng-Robinson, PR with mixing rules of van der Waals for the calculations of thermodynamic properties mixtures. Verification of the results obtained using the simulator was compared with data obtained from the commercial simulator HYSYS.

Keywords: Simulation, plug flow reactor, cubic equation of state, homotopy

1. INTRODUCCIÓN

La industria mundial de procesos invierte anualmente alrededor de medio billón de euros en diseño conceptual, ingeniería de proceso, ingeniería de detalle, construcción, puesta en marcha y operación y mantenimiento de plantas químicas. Para su ejecución es necesario que los ingenieros de procesos modelen y conozcan previamente las propiedades termodinámicas y el comportamiento de las fases de los sistemas químicos con los que

van a trabajar ([Feliu J. A., 2006](#)). La solución de estos modelos requiere de herramientas computacionales y simuladores que faciliten y optimicen dicha solución.

Con el desarrollo de los métodos matemáticos y el auxilio de la computación, la modelación matemática de los procesos adquiere gran importancia, ya que a través de ella se puede obtener información del comportamiento del

[†] Jorge Alberto velásquez

Tel. (+054) 4159020 ext. 9081, fax 4118779.

E-mail: jorge.velasquezj@upb.edu.co (Jorge Velásquez).

proceso sin necesidad de realizar experimentos, que podrían ser costosos y sujetos a errores experimentales difíciles de estimar ([Ribas M, et al., 2006](#)).

La simulación surge así como una necesidad de sintetizar procesos, logrando integrar balances de materia, energía, dimensiones y costos, y así lograr una evaluación económica preliminar, optimizando los mismos. En las aplicaciones efectuadas entre 1994 y 1996 en celanese Mexicana S.A. de C.V. (Celmex) se obtuvieron ahorros o utilidades adicionales de aproximadamente 3'800.000 dólares, relacionados directamente al uso de la simulación de procesos. Tomando en cuenta, que la licencia para usar un simulador de procesos es de aproximadamente 50.000 dólares por planta, se puede estimar que la utilidad lograda anualmente fue de aproximadamente 1'438.623 dólares ([Martínez, et al., 2000](#)).

Actualmente hay dos tipos de herramientas de software disponibles para el modelamiento de procesos. El primer grupo ofrece componentes de software modular para la solución de problemas de simulación específicos. Simuladores de diagramas de flujo comerciales, tales como: *HYSYSTM*, *ASPEN+TM*, *PROSIMTM*, *SIMULATION SCIENCESTM* y diversos códigos especializados para la dinámica de fluidos computacional CFD o sistemas de cinética de reacciones. La segunda categoría de herramientas de modelamiento avanzado son ambientes generales de sistemas de ecuaciones. Estos sistemas han sido desarrollados por investigadores en *Carnegie Mellon*, *Imperial College*, y *Massachusetts Institute of Technology*, entre otros ([AA. LINNINGER, et al., 2000](#)).

Como se mencionó anteriormente el costo de estas licencias es elevado, alrededor de 50.000 dólares, y muchas empresas no poseen los recursos necesarios para adquirir una licencia de este tipo. Según la *Chemical Engineering Education* existen numerosas empresas pequeñas que usan macros de Excel® desarrollados por sus empleados para resolver problemas que se pueden solucionar mediante el uso de simuladores comerciales de alto costo ([Builes y Calle, 2007](#)). Actualmente en Europa se está trabajando en el desarrollo de software, como lo es modelica. Modelica es un lenguaje de modelamiento libre orientado a objetos con una definición textual para describir sistemas físicos de manera conveniente por ecuaciones diferenciales algebraicas y discretas. El lenguaje de modelamiento de Modelica orientado a objetos está

diseñado para permitir la modelación de sistemas físicos complejos, como, mecánicos, eléctricos, electrónicos, hidráulicos, térmicos, control, potencia eléctrica o procesos orientados por subcomponentes. Las librerías libres de Modelica y las herramientas de simulación disponibles han sido utilizadas ampliamente en las exigentes aplicaciones industriales (www.modelica.org).

La mayoría de las industrias de procesos dentro de sus plantas poseen reactores químicos. Los reactores son el corazón de la planta, ya que en estos ocurren los principales procesos de transformación de la materia prima y por lo tanto, un funcionamiento óptimo y eficiente de éste garantiza en buena parte el éxito de un proceso.

Matemáticamente hablando, siempre, el estacionario es un caso particular del transitorio. Los modelos dinámicos revelan más información acerca del funcionamiento del reactor, y pueden ser empleados para simular la operación en estado estacionario. La necesidad de un modelo dinámico es especialmente fuerte en procesos de arranque, finalización ó cuando se simulan procesos con perturbaciones, también es importante en estudios de seguridad industrial y control de procesos ([Ville A. y Juhani, 2007](#)).

Se propone entonces el desarrollo de un programa para la simulación de reactores flujo tapón en estado transitorio. El modelo matemático obtenido a partir de las leyes de conservación de materia, energía y momentum lineal, pretende relacionar las variables y parámetros relacionados con el desempeño del reactor; como condiciones de alimentación, parámetros de diseño y parámetros ajustables del proceso ([Rodrigues y MINCEVA, 2007](#)), lo que da lugar a modelos de parámetro distribuido, donde las variables son influenciadas por el tiempo y la posición. La solución matemática de este tipo de modelos es compleja y puede ser particular para cada caso, por ello se requiere utilizar los métodos numéricos y la termodinámica de mezclas. En este trabajo se emplea el método de la homotopía en la solución de sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales y la ecuación cúbica de estado de Peng-Robinson, PR con reglas de mezcla de Van der Waals para los cálculos de propiedades termodinámicas de mezclas. Con lo dicho anteriormente se pretende comparar los resultados obtenidos mediante la utilización del simulador, comparándolos con datos obtenidos de simuladores comerciales.

NOTACION:

$N_{i[n]}^{(t)}$: Numero de moles de la especie i en el segmento n y el tiempo t.
 $N_{i[n]}^{(t-1)}$: Numero de moles de la especie i en el segmento n y el tiempo t-1.
 $F_{i[n]}^{(t)}$: Flujo molar de salida del segmento n de la especie i en el tiempo t.
 $F_{i[n-1]}^{(t)}$: Flujo molar de entrada del segmento n de la especie i en el tiempo t.
 ΔV : Volumen del reactor.
 a_{ij} : Coeficiente estequiométrico de la especie i en la reacción j.
 $r_{j[n]}^{(t)}$: Velocidad global de la reacción j en el segmento n y tiempo t.
 NR: Número de reacciones efectuadas en el reactor.
 NC: Número de especies presentes en el reactor.
 $U_{[n]}^{(t)}$: Energía interna acumulada del segmento n en el tiempo t.
 $U_{[n]}^{(t-1)}$: Energía interna acumulada del segmento n en el tiempo t-1.
 $h_{[n]}^{(t)}$: Entalpía que sale del segmento n en el tiempo t.
 $h_{[n-1]}^{(t)}$: Entalpía que entra al segmento n en el tiempo t.

\dot{Q}_n : Flujo de energía total que sale del segmento n en el tiempo t.
 \dot{Q}_n : Flujo de energía total que entra al segmento n en el tiempo t.
 $Q_{[n]}^{(t)}$: Flujo de calor neto intercambiado entre el reactor y los alrededores en el segmento n y el tiempo t.
 ΔP_n : Caída de presión en el segmento n.
 $\rho_{[n]}$: Densidad de la mezcla en el segmento n.
 $v_{[n]}$: Velocidad superficial de la mezcla en ausencia del lecho empacado en el segmento n.
 ϵ : Porosidad del lecho empacado.
 ϕ_p : Esfericidad de la partícula que compone el empaque.
 D_p : Diámetro de la partícula que compone el empaque.
 μ : Viscosidad de la mezcla.
 $x_{i[n]}$: Fracción molar de la especie i en el segmento n.
 $v_{[n]}$: Volumen molar del segmento n.
 M_i : Peso molecular de la especie i.
 $Re_{[n]}$: Número de Reynolds del segmento n
 L_R : Longitud total del reactor.
 V_R : Volumen total del reactor.
 N: Número total de segmentos.
 D_i : Diámetro interno del tubo.
 N_i : Numero de tubos utilizados para el empaque

2. MATERIALES Y METODOS

En el planteamiento del modelo se asumen como validas las leyes constitutivas de la naturaleza utilizadas en el ámbito científico, y se acepta su formulación, las cuales se ven manifestadas en las leyes de conservación de masa, energía y momentum.

En los reactores de flujo tapón los reactivos se consumen a medida que avanzan en la longitud. El esquema general de este tipo de reactores se muestra en la [Fig. 1](#).

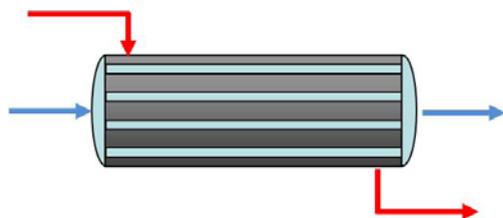


Fig. 1. Esquema general de un PFR empacado.

Al plantear las leyes de conservación en el reactor se origina un sistema de ecuaciones diferenciales parciales de compleja solución.

2.1. GENERACION DEL MODELO

En la generación del modelo se empleó la técnica de segmentos finitos, esta técnica se obtiene al dividir el reactor en una serie de segmentos interconectados y reemplazando las derivadas parciales por cambios finitos. Cada uno de los segmentos es un volumen de reacción finito y homogéneo en el cual es posible tener en cuenta el carácter no adiabático sin incluir los detalles relacionados con la transferencia de calor entre el medio de reacción y la corriente de fluido térmico ([Henao, 2006](#)).

El esquema general para un PFR no adiabático dividido en una serie de segmentos se muestra en la [Fig. 2](#).

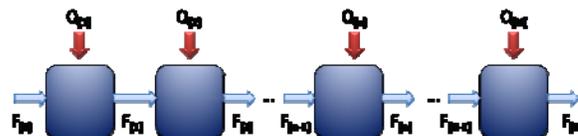


Fig. 2. Esquema de un PFR no adiabático constituido por una serie de segmentos finitos. Tomada de [Henao \(2006\)](#)

Teniendo en cuenta las consideraciones descritas anteriormente, los balances de materia, energía y momentum para el esquema mostrado en la figura 2, son:

Balance de materia por componente, con $i = 1, 2, \dots, NC$

$$N_{i[n]}^{[t]} - N_{i[n]}^{[t-1]} = \Delta t \left[F_{i[n]}^{[t]} - F_{i[n-1]}^{[t]} - \Delta V \sum_{j=1}^{NR} a_{ij} r_{j[n]}^{[t]} \right]$$

Balance de energía

$$U_{[n]}^{[t]} - U_{[n]}^{[t-1]} = \Delta t \left[F h_{[n]}^{[t]} - F h_{[n-1]}^{[t]} - Q_{[n]}^{[t]} \right]$$

Balance de momentum

La ecuación de Ergun ha sido aplicada con éxito para flujo de gases a través de lechos empacados usando la densidad del gas. (Bird, Stewart y Lightfoot, 2002)

$$\Delta P_{[n]} = -\Delta L \frac{1}{1000} \frac{\rho_{[n]} v_s^2 (1-\varepsilon)}{\phi_p D_p \varepsilon^3} \left(\frac{150(1-\varepsilon)}{Re_{p[n]}} + 1,75 \right)$$

Con el fin de relacionar las fracciones molares, los flujos molares y el flujo total se tienen las siguientes relaciones adicionales:

$$F_n = \sum_{i=1}^{NC} F_{i[n]}$$

$$X_{[n]} = \frac{F_{i[n]}}{F}$$

Las características geométricas se pueden relacionar mediante:

$$\Delta L_{[n]} = \frac{L_R}{N}$$

$$V_R = N_t \frac{\pi D_t}{4} L_R$$

$$A = N_t \frac{\pi D_t}{4}$$

La velocidad de reacción se puede expresar en términos de las concentraciones o presiones parciales de las especies presentes y la temperatura,

$$r_j = f(C_{1[n]}, C_{2[n]}, \dots, C_{NC[n]}, T_{[n]}, P_{i[n]})$$

2.2. CALCULO DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS

La representación de propiedades y del equilibrio líquido vapor de fluidos puros y sus mezclas, en

el dominio de densidades y temperaturas de interés práctico, es importante en varios procesos de ingeniería. En las últimas décadas se han propuesto muchas ecuaciones de estado (EoS) y métodos matemáticos para la descripción del cálculo de propiedades de fluidos. (Pérez C., 1987).

Actualmente la ecuación de estado de PR, es la ecuación de estado cúbica más utilizada en diversas áreas de la ingeniería, especialmente la petrolera y petroquímica (Henao, 2006).

$$P = \frac{R \cdot T}{v - b_m} - \frac{a_m}{v(v + b_m) + b_m(v - b_m)}$$

Los parámetros de la mezcla (a_m , b_m) pueden calcularse a partir de los parámetros (a_i , b_i) de cada una de las sustancias y de las reglas de mezclas de Van der Waals.

$$a_m = \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} (x_i \cdot x_j \cdot a_{ij}) \text{ con } a_{ij} = (a_i \cdot a_j)^{0.5} \cdot (1 - k_{ij})$$

Los parámetros de las sustancias puras se calculan a partir de la temperatura del sistema, sus propiedades críticas (T_{ci} , P_{ci}) y sus factores acéntricos (ω_i):

$$a_i = 0.457235528921 \cdot \frac{R^2 \cdot T_{ci}^2}{P_{ci}} \cdot \left(1 + m_i \cdot \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{ci}}} \right) \right)^2$$

$$b_i = 0.0777960739039 \cdot \frac{R \cdot T_{ci}}{P_{ci}}$$

$$m_i = 0.376464 + 1.54226 \cdot \omega_i - 0.26992 \cdot \omega_i^2$$

La termodinámica de mezclas permite calcular la entalpía molar de una mezcla a (T, P) mediante la siguiente expresión.

$$(h - h^{IG}) = P \cdot v - R \cdot T + \int_v^{00} \left[P - T \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v \right] dv$$

Donde h^{IG} es la entalpía molar de una mezcla de gases ideales a (T, P) con respecto al estado de referencia (T_0 , P_0).

$$h^{IG} = \sum_{i=1}^{NC} (x_i \cdot h_i^{IG}) = \sum_{i=1}^{NC} x_i \cdot \left(\Delta h_f^{IG}(T_0) + \int_{T_0}^T C_{p_i}^{IG} \cdot dT \right)$$

La capacidad calorífica a presión constante de gas ideal para cada sustancia se calcula mediante la ecuación de Bures:

$$Cp_i^{IG} = B_{1i} + B_{2i} \cdot \left(\frac{B_{3i}}{T}\right)^2 \cdot \frac{e^{\left(\frac{B_{3i}}{T}\right)}}{\left(1 - e^{\left(\frac{B_{2i}}{T}\right)}\right)^2}$$

Donde B_1 , B_2 y B_3 son constantes características de cada sustancia.

2.3. MÉTODOS HOMOTÓPICOS DE CONTINUIDAD EN LA SOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES NO LINEALES.

Los métodos numéricos clásicos como el método de Newton y los métodos Quasi-Newton, se han empelado ampliamente en la solución de sistemas de ecuaciones algebraicas y trascendentes. Sin embargo, su principal limitación radica en que solo garantizan convergencia cuando los cálculos parten de valores iniciales lo suficientemente cercanos a la solución que se desea encontrar; característica por la cual reciben el nombre de métodos de convergencia local.

En la actualidad, los métodos homotópicos de continuidad se presentan como una alternativa con la que, al menos en teoría, es posible encontrar la solución de un sistema general de ecuaciones algebraicas y trascendentes a partir de casi cualquier conjunto de valores iniciales. Por esta característica, a estos métodos se les da el nombre métodos de convergencia global. Los métodos homotópicos de continuidad poseen gran potencial en la solución de los sistemas de ecuaciones altamente no lineales que surgen durante la simulación de procesos químicos.

La idea básica de los métodos de continuidad no es nueva y en realidad se remonta a trabajos realizados hace más de un siglo por autores como Poincaré y Klein. En principio, para encontrar la solución X_F de un sistema de ecuaciones algebraicas y trascendentes del tipo [\(Henao, 2006\)](#):

$$F(X) = 0$$

Se recurre a otro sistema de ecuaciones algebraicas y trascendentes con una solución X_G conocida o fácil de encontrar:

$$G(X) = 0$$

Para combinarlos en lo que se conoce como función homotópica $H(t, X)$ con parámetro de continuidad “ t ”.

$$H(t, X) = t \cdot F(X) + (1 - t) \cdot G(X)$$

A partir de la función homotópica se puede plantear una serie de “ $M+1$ ” sistemas de ecuaciones:

$$H_m(X) = 0 \text{ con } m = 0, 1, 2, \dots, M$$

Donde:

$$H_m(X) = t_m \cdot F(X) + (1 - t_m) \cdot G(X)$$

$$t_m = t_{m-1} + \frac{1}{M}, \quad t_0 = 0, \quad t_M = 1$$

En términos generales, si el número de sistemas “ M ” es muy grande, el valor de los parámetros de continuidad (t_m, t_{m-1}) de los sistemas adyacentes es muy similar, al igual que las funciones homotópicas ($H_m(X), H_{m-1}(X)$) que describen estos sistemas y sus soluciones ($X_{H_m}, X_{H_{m-1}}$).

La solución $X_{H_{m-1}}$ del sistema de ecuaciones $H_{m-1}(X)=0$ puede utilizarse como valor inicial para buscar la solución X_{H_m} del sistema de ecuaciones $H_m(X)=0$. Dado que $X_{H_m} \approx X_{H_{m-1}}$, esta inicialización incrementa las probabilidades de un método de convergencia local (Newton o Powell) durante la búsqueda de X_{H_m} .

Teniendo en cuenta la definición de la función homotópica, y como $t_0=0$, se deduce que $H_0(X)=G(X)$. Es decir, el primer sistema de ecuaciones de la serie es $G(X)=0$, cuya solución X_G se conoce o se puede encontrar fácilmente. X_G se emplea como valor inicial para encontrar X_{H1} (solución del sistema $H_1(X)=0$); este a su vez se emplea para encontrar X_{H2} (solución del sistema $H_2(X)=0$), y así sucesivamente hasta encontrar X_{HM} (solución del sistema $H_M(X)=0$). Dado que $t_m=1$, se deduce que $H_M(X)=F(X)$. Es decir, el último sistema de ecuaciones de la serie es el sistema que originalmente se quería resolver $F(X)=0$, y por tanto $X_{HM}=X_F$.

Con esta metodología, solucionar el sistema de (2.31) con garantía de convergencia a partir de valores iniciales X_G lejos de la solución real X_F , equivale a solucionar una serie de “M” ecuaciones en donde la solución de cada sistema sirve como valor inicial que garantiza convergencia durante la solución del sistema que le sigue.

3. SIMULADOR DÍNAMICO DE REACTORES FLUJO TAPÓN

3.1. CONTEXTUALIZACIÓN.

El resultado del modelamiento del reactor flujo tapón es un sistema de ecuaciones algebro-diferenciales parciales (EADP). Este tipo de modelos se encuentran comúnmente en aplicaciones de la ingeniería química como reactores catalíticos, torres de absorción, torres de extracción basadas en métodos de transferencia de masa, Ingeniería bioquímica, entre otros, en los cuales las propiedades exhiben variaciones temporales y espaciales. Estos modelos pueden verse como una combinación de sistemas de parámetro distribuido y de bulto, sujetos a condiciones iniciales y condiciones de frontera.

Las ecuaciones diferenciales parciales (EDP) y las EADP proveen un gran número de aplicaciones de modelamiento. Estos son difíciles de resolver debido a que los cambios en un parámetro o en una condición de frontera pueden llevar a cambios completamente diferentes. Así, aunque un método numérico sea conveniente para resolver con precisión un sistema EDP dado, otros métodos numéricos pueden ser incapaces de hacerlo. Al extender esto a sistemas EADP el problema se vuelve más complejo y pueden complicar el funcionamiento del método numérico. Para los no especialistas e incluso para los especialistas, solucionar sistemas EADP lo contemplan como una jungla numérica inextricable (Le Lann J.M et al., 1998). Por esta razón surge una carencia de métodos de solución aplicables universalmente como respuesta al esfuerzo actual.

La característica más interesante en la formulación de la estrategia de segmentos finitos es que la solución resultante asegura que se

conserven las cantidades involucradas tales como, masa, energía y momentum a lo largo de todo el tiempo de simulación. Por esta razón para la solución del modelo, se utilizó esta estrategia, discretizando la variable espacial y la variable temporal, dando como resultado un conjunto de ecuaciones algebraicas no lineales como se mencionó anteriormente.

3.2. ALGORITMO DE SOLUCIÓN.

En la solución del problema descrito anteriormente, se desarrolló un algoritmo que muestra a través de una sucesión de pasos el manejo de la información, de manera que se consiga una aproximación a la solución en cada segmento de tiempo y longitud.

El algoritmo mostrado a continuación permite modelar el comportamiento al interior del reactor con respecto a la temperatura o el calor, presión, flujos y composiciones.

a. Los valores que permanecen constantes a lo largo del proceso, se muestran en la tabla 1.

Tabla 1. Valores constantes a través del proceso

	Notación
$P_{Entrada}$	Presión a la entrada
$T_{Entrada}$	Temperatura a la entrada
$F_{Entrada}$	Flujo molar total a la entrada
F_{Salida}	Flujo molar total a la salida
Δt	Tamaño de paso

La geometría del reactor permanece constante a lo largo del proceso, Sin embargo el usuario debe ingresar tres de estas cuatro variables:

- Numero de tubos del reactor (N_t)
- Diámetro interno de los tubos (D_i)
- Volumen del reactor (V_R)
- Longitud del reactor (L_R)

b. Con los valores ingresados en el numeral a, se calculan las magnitudes que dependen de estos, en la tabla 2 se muestran estas magnitudes y su respectiva ecuación.

Tabla 2. Valores calculados para condiciones de entrada

$F_{Entrada} = \sum_{i=1}^{NC} F_{i,Entrada}$	Flujo molar de entrada, $i = 1,2,\dots, NC$
$X_{i,Entrada} = \frac{F_{i,Entrada}}{F_{Entrada}}$	Fracción molar por componente, $i = 1,2,\dots, NC$
$h_{Entrada} = f(T_{Ent}, P_{Ent}, \{x_{i,Ent}\})$	Entalpía molar a la entrada, $i = 1,2,\dots, NC$
$V_{Molaeent} = f(T_{Ent}, P_{Ent}, \{x_{i,Ent}\})$	Volumen molar a la entrada, $i = 1,2,\dots, NC$
$U = \frac{V_{rxn}}{V_{molarent}} (h - P.V_{molarent})$	Energía interna, $i = 1,2,\dots, NC$

c. En la tabla 3, se muestran los valores iniciales de las condiciones de salida en el tiempo inicial (t=1) y primer segmento (n=1), que son variables en el tiempo y longitud.

Tabla 3. Variables iniciales

Notación	
F_{Salida}	Flujos molares a la salida
T_{salida} o Q	Temperatura a la salida
P_{salida}	Presión a la salida

d. Con los datos detallados en los numerales a y c, se calculan los valores iniciales de las variables de salida en el primer tiempo y primer segmento de longitud, y posteriormente resolver los balances de masa, energía y momentum generados. En la tabla 4. Se muestran estas variables y su ecuación

Tabla 4. Valores calculados de variables de salida

$F_{Salida} = \sum_{i=1}^{NC} F_{i,Salida}$	Flujo molar de salida, $i = 1,2,\dots, NC$
$X_{i,Salida} = \frac{F_{i,Salida}}{F_{Salida}}$	Fracción molar por componente, $i = 1,2,\dots, NC$
$h_{Salida} = f(T_{Sal}, P_{Sal}, \{x_{i,Sal}\})$	Entalpía molar a la entrada, $i = 1,2,\dots, NC$
$V_{Molarsal} = f(T_{sal}, P_{sal}, \{x_{i,sal}\})$	Volumen molar a la entrada, $i = 1,2,\dots, NC$
$r_{(j)} = f(T_{sal}, P_{sal}, \{C_{i,sal}\})$	Velocidad molar de reacción, $i = 1,2,\dots, NC$

e. Luego de tener los valores de las variables calculadas, se resuelve el sistema de ecuaciones generado por los balances de materia, energía y momentum, este sistema de ecuaciones se resuelve mediante los métodos homotópicos expuestos en la sección 2.3, El sistema de ecuaciones se presenta en la tabla 5.

Tabla 5. Sistema de ecuaciones

$N_{i[n]}^{[r]} - N_{i[n]}^{[r-1]} = \Delta t \left[F_{i[n]}^{[r]} - F_{i[n-1]}^{[r]} - \Delta V \sum_{j=1}^{NR} a_{ij} r_{j[n]}^{[r]} \right]$	Balance de materia por componente
$U_{[n]}^{[r]} - U_{i[n]}^{[r-1]} = \Delta t \left[F h_{[n]}^{[r]} - F h_{[n-1]}^{[r]} - Q_{[n]}^{[r]} \right]$	Balance de energía
$\Delta P_{[n]} = -\Delta L \frac{1}{1000} \frac{\rho_{[n]} v S_{[n]}^2 (1-\varepsilon)}{\phi_p D_p \varepsilon^3} \left(\frac{150(1-\varepsilon)}{Re_{\rho[n]}} + 1,75 \right)$	Ecuación de Ergun

En la resolución de este sistema, se utilizo la estrategia numérica de segmentos finitos, discretizando la variable espacial y la variable temporal, dando como resultado un conjunto de ecuaciones algebraicas no lineales.

f. Los valores obtenidos en el numeral anterior son los valores del primer tiempo en el primer segmento de longitud, estos a su vez serán los valores iniciales para calcular las condiciones de salida para el siguiente tiempo en el mismo segmento de longitud. De esta manera se repite el algoritmo desde el numeral d, hasta calcular todas las variables en todo el segmento y tiempo deseado.

g. Los valores arrojados en el primer segmento a lo largo del tiempo, serán las condiciones de entrada para el segundo segmento en cada tiempo.

Este algoritmo se repite desde el numeral d, hasta el tiempo y número de segmentos deseados por el usuario.

Es posible que en algún paso del algoritmo anteriormente descrito se presenten valores negativos en unas de las variables, esto puede atribuirse en el caso de los flujos al consumo del reactivo límite. En cuanto a la presión y la temperatura, estas son cantidades absolutas, el calor es la única cantidad que puede presentar valores negativo, debido al planteamiento del

modelo, ya que este al liberarse tiene valor negativo.

4. RESULTADOS Y DISCUSION

Para comparar de los resultados obtenidos mediante la utilización del simulador FLUJO PISTÓN (FP), se simuló el proceso de hidrogenación de tolueno para la obtención de benceno (Fogler H., 2008). El proceso fue también simulado en el software comercial HYSYS de ASPENTECH, y posteriormente fueron comparados los resultados de ambos simuladores.

La estequiometría se describe en la ecuación (4.1)



Su mecanismo de reacción es tal, que su cinética se expresa de acuerdo al modelo de Langmuir-Hinshelwood cuya forma matemática es:

$$r = \frac{8.7 \times 10^{-4} \cdot e(-2500 / RT) \cdot P_{H_2} \cdot P_{C_7H_8}}{1 + 1.39 \cdot e(-1000 / RT) \cdot P_{C_6H_6} + 1.038 \cdot e(-5000 / RT) \cdot P_{C_7H_8}}$$

La reacción se lleva a cabo en un reactor tubular de 1.3 m³. El flujo molar total es de 3 Kgmol/h, a 640 °C, 4053 kPa. y composición de 30% mol de tolueno, 45% mol de hidrogeno y 25% mol de nitrógeno. El hidrogeno se alimenta en exceso para prevenir la reacción de coquización. La caída de presión a través del reactor es de 69 kPa y el número de segmentos en los que se dividió el reactor fue 10. Las condiciones de entrada y geometría fueron iguales en ambos simuladores.

Dado que HYSYS posee entre su base de datos, varios paquetes termodinámicos, la simulación se realizó empleando la ecuación cubica de estado de Peng Robinson, la cual es empleada en el simulador FLUJO PISTON, esto para garantizar igualdad de condiciones.

El proceso se simuló hasta llegar al estado estacionario para poder así comparar los resultados con respecto a los arrojados por HYSYS que opera bajo este régimen. El modelo de estado estacionario se presenta a continuación.

Balance por componente

$$F_{i[n]}^{[t]} - F_{i[n-1]}^{[t]} - \Delta V \sum_{j=1}^{NR} a_{ij} r_{j[n]}^{[t]} = 0$$

Balance de energía

$$F h_{[n]}^{[t]} - F h_{[n-1]}^{[t]} - Q_{[n]}^{[t]} = 0$$

Balance de momentum

Como se menciono anteriormente para predecir la caída de presión en el reactor se utilizó la ecuación de Ergun.

$$\Delta P_{[n]} = -\Delta L \frac{1}{1000} \frac{\rho_{[n]} v_s^2 (1-\epsilon)}{\phi_p D_p \epsilon^3} \left(\frac{150(1-\epsilon)}{Re_{p[n]}} + 1.75 \right)$$

Como se aprecia en las Fig 3 y 4, las curvas elaboradas mediante los datos arrojados por FP poseen buen nivel de ajuste a los datos obtenidos mediante HYSYS en toda la longitud del reactor.

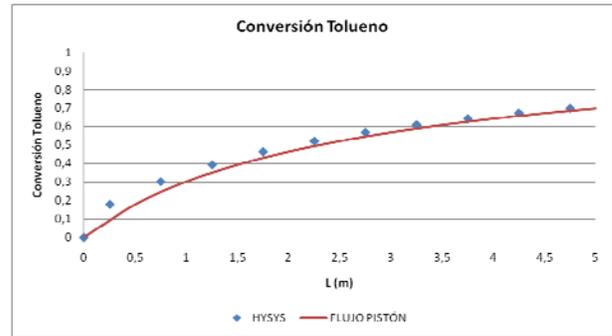


Fig. 3. Conversión de tolueno mediante HYSYS y FLUJO PISTÓN. En $t \rightarrow \infty$.

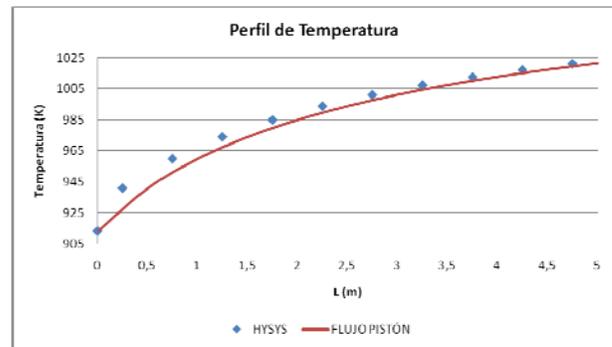


Fig. 4. Perfil de temperatura mediante HYSYS y FLUJO PISTÓN. En $t \rightarrow \infty$.

En la tabla 6 y 7 se evidencia que el mayor % de discrepancia obtenido para la conversión de

tolueno y la temperatura a lo largo de la longitud es 0.086% y 11.195% respectivamente, lo cual confirma la idea de que FLUJO PISTÓN posee buena capacidad predictiva y permite emular sistemas reactivos, incluso con leyes de velocidad complejas, como las catalíticas heterogéneas catalizadas por sólidos. La discrepancia obtenida con respecto a HYSYS se puede presentar debido a que la división de segmentos realizada por este varía un poco con respecto a la realizada por FLUJO PISTÓN

Tabla 6 .Discrepancia de la conversion de tolueno en $t \rightarrow \infty$

L (m)	X _{TOL HYSYS}	X _{TOL FP}	%Discrepancia	% Error _{Conv}
0.5	0.1793	0.1793	0.0000	3.03E-04
1	0.3021	0.3021	0.0000	3.34E-05
1.5	0.3931	0.3931	0.0000	6.38E-04
2	0.4642	0.4641	0.0010	2.30E-03
2.5	0.5215	0.5215	0.0030	5.95E-03
3	0.5689	0.5689	0.0080	1.31E-02
3.5	0.6089	0.6088	0.0160	2.58E-02
4	0.6432	0.6429	0.0300	4.64E-02
4.5	0.6729	0.6724	0.0520	7.78E-02
5	0.6989	0.6981	0.0860	1.23E-01

Tabla 7 .Discrepancia de la temperatura en $t \rightarrow \infty$

L (m)	T _{HYSYS} (K)	T _{FP} (K)	%Discrepancia	% Error _{Temp}
0.5	9.408.814	9.408.321	49.240	5.23E-03
1	9.598.472	9.597.870	60.230	6.27E-03
1.5	9.739.140	9.738.572	56.790	5.83E-03
2	9.848.831	9.848.360	47.020	4.77E-03
2.5	9.937.283	9.937.007	27.590	2.78E-03
3	10.010.514	10.010.403	11.120	1.11E-03
3.5	10.072.271	10.072.367	0.9570	9.50E-04
4	10.125.171	10.125.509	33.820	3.34E-03
4.5	10.171.034	10.171.700	66.540	6.54E-03
5	10.211.204	10.212.323	111.950	1.10E-02

Así mismo en las Fig. 5 y 6 se presentan la variación de la conversión de tolueno y la temperatura a la salida del reactor con respecto al tiempo. Es evidente como a partir de los 20 minutos la variación de la conversión es despreciable, evidenciando así el alcance del

estado estacionario en el proceso. Esto corrobora la capacidad de predecir el comportamiento dinámico de las propiedades que posee FLUJO PISTÓN.

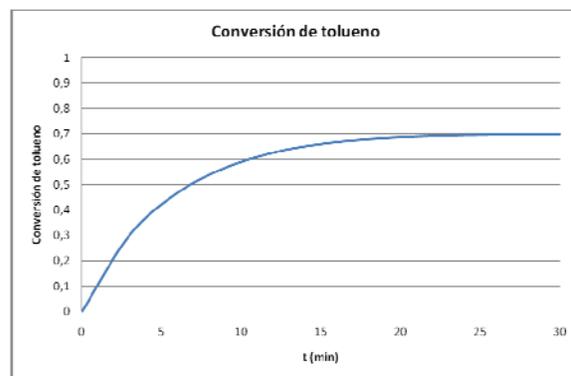


Fig. 5. Conversión del tolueno en el tiempo simulado por FP a la salida del reactor.

De igual manera se aprecia como a partir de los 20 minutos la temperatura a la salida del reactor es prácticamente invariable. A diferencia de la conversión, la temperatura posee un comportamiento oscilatorio, presentando un máximo en un tiempo de aproximadamente 4 minutos. Este tipo de comportamiento es común en los reactores flujo tapón (Kayode, 2000) y se demuestra entonces, como FLUJO PISTÓN es apto para predecir el comportamiento de este tipo de sistemas, que como se expuso en el capítulo 3 son de difícil convergencia matemática.

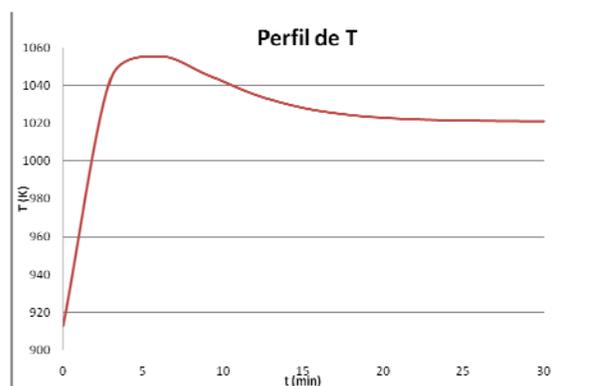


Fig. 6. Comportamiento de la Temperatura en el tiempo simulado por PF a la salida del reactor.

5. CONCLUSIONES

La simulación de procesos se ha convertido en una herramienta imprescindible para los ingenieros de procesos, ya que por medio de esta es posible integrar balances de materia, energía, dimensiones y costos, y así lograr una evaluación económica preliminar, optimizando los mismos. Por ello se hace necesario que cada vez se desarrollen modelos más rigurosos que representen de manera adecuada la fenomenología del proceso.

Las pruebas mediante las cuales se compararon los resultados obtenidos por FLUJO PISTÓN con datos obtenidos de *HYSYS*, demuestran la capacidad que posee el simulador para predecir el comportamiento de las variables en los reactores flujo tapón de manera precisa.

El simulador FLUJO PISTÓN desarrollado en este trabajo presenta las siguientes ventajas y características:

- Su modelo posee pocas suposiciones lo cual lo hace riguroso garantizando una buena aproximación a la realidad.
- Permite el ingreso de la información en forma clara y concisa, además de permitir simular sistemas reactivos en general con “n” número de sustancias y reacciones.
- Posibilita el ingreso de velocidades de reacción de estructura matemática compleja, incluso teniendo en cuenta la variación de la constante de equilibrio con la temperatura
- Calcula de manera precisa la caída de presión a lo largo de la longitud del reactor mediante la ecuación de Ergun.
- Presenta de manera clara la variación de las propiedades en la longitud y el tiempo, exportándolas a una hoja de Excel, donde fácilmente el usuario puede graficarlos y analizarlos.

AGRADECIMIENTO

Los autores agradecen los aportes realizados por todos los miembros del Grupo de Investigaciones Pulpa y Papel de la UPB.

REFERENCIAS

- AA. Linninger, et al., (2000): A system approach to mathematical modeling of industrial processes. *Revista Computer and chemical engineering*, 24: 591-598.
- Bird Byron, Stewart Warren, Lightfoot Edwin. (2002). *Transport Phenomena*. Segunda edición, John Wiley & Sons, New York.
- Builes T, Santiago, Calle V, Federico. (2007): *Simulador dinámico de reactores de tanque agitado*. Universidad Pontificia Bolivariana. Escuela de Ingenierías. Facultad de ingeniería química. p. 30
- Feliu J. A. (2006): Importancia de la termodinámica en la simulación de procesos. *Revista Ingeniería Química*, 438:111-117.
- Fogler H. Scott (2008). *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. Tercera Edición, P.1., Pearson Educación, México.
- Henao., Carlos Andrés (2006). *Simulación y Evaluación de los procesos químicos*, Editorial Universidad Bolivariana. Medellín.
- Kayode A. Coker. (2000) *Modeling of Chemical Kinetics and Reactor Design*. Editorial Gulf Publishing Company. Estados Unidos de America. p. 226
- Le Lann J.M et al *Dynamic simulation of partial differential algebraic systems: Application to some chemical engineering problems*. En línea [http://www.prosim.net/PDF/pubs/13_ICL_1998_Dynamicsimulationofpartialdifferentialalgebraicssystems.pdf], consultado en 2009-02-03.
- Martínez S. Víctor, et al. (2000): *Simulación de procesos en ingeniería química*. Primera Edición, P. 38. Editorial Plaza y Valdés. S.A. de C.V. México.
- Modelica. En línea, [www.modelica.org]. Consultado 2009-13-04.
- Pérez C., Jose M. (1987) *La ecuación de estado de Peng-Robinson en la industria petroquímica*. *Revista Ingeniería Química*. Vol. 19, 223:461-462.
- Ribas M., Hurtado R, et al. (2006): *Modelación matemática y simulación de procesos fermentativos: Presentación de nuevas herramienta de software*. *Revista Ingeniería Química*, 438:118-125.
- Rodrigues Alirio E., Mirjana Minceva (2007): *Modelling and simulation in chemical engineering: Tools for process innovation*. *Computer and chemical engineering*; p. 1167-1183.

Ville A., Helena Laavi and Juhani, Aittamaa (2007): A dynamic model for plug flow reactor state profiles. Revista Computers and Chemical Engineering, p.13

SOBRE LOS AUTORES

Daniel Felipe Rodríguez Vallejo

Estudiante de la facultad de Ingeniería Química de la Universidad Pontificia Bolivariana. Áreas de interés investigativo: Diseño y simulación de procesos químicos, energía renovable.

Brenda Magaly Restrepo Plazas

Estudiante de la facultad de Ingeniería Química de la Universidad Pontificia Bolivariana. Áreas de interés investigativo: Simulación de procesos químicos.

Jorge Alberto Velásquez Jiménez

Profesor titular de la facultad de Ingeniería Química de la Universidad Pontificia Bolivariana. Ingeniero químico de la universidad pontificia bolivariana, maestro en ciencias forestales, graduado de la universidad de Guadalajara. Doctor en ingeniería química de la Universitat Rovira i Virgili. Áreas de interés investigativo: Pulpa y papel, simulación de procesos químicos.