

Modelo Matemático para un Reactor Tubular Continuo comparado con una serie de Reactores Continuos Agitados

Con la colaboración de:

Jesús López, Ma. Elena García, Ma. Lourdes Velasco, Evelyn Alvarez,
Guilmer Gonzáles
Universidad Nacional Autónoma de México

Rodolfo Suárez
Universidad nacional Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Jesús Marroquín
Instituto Mexicano del Petróleo

Fernando Zaldo, Salvador Padilla
Centro de Investigación en Polímeros

1 Introducción

Reactores continuos para polimerización en emulsión a escala industrial han recibido mucha atención en los últimos años. Esto debido básicamente a las ventajas inherentes para poder atacar grandes mercados, aunque de ninguna manera es el único factor que inclina la balanza hacia este tipo de sistemas. Existen también, ventajas operativas, es decir: menor mantenimiento, operación simplificada y control de la misma, mejor transferencia de calor, reducción de tiempos muertos y capacidad de enfriamiento disponible, menores costos de inversión y un producto más consistente en calidad, aunque cabe mencionar que las propiedades finales de una polimerización por lotes son diferentes a las obtenidas en sistemas continuos. Adicionalmente a esta característica, los reactores de polimerización en emulsión presentan operación periódica. Existen diferentes tipos de sistemas continuos: reactores continuos agitados (RCA), serie de reactores continuos agitados (SRCA) y reactores continuos tubulares con recirculación (RCTR).

A pesar de que la familia de reactores continuos agitados de polimerización en emulsión presenta interés industrial, en este sentido poco ha sido publicado al respecto comparando con los reactores por lotes, siendo que la mayor parte

de las publicaciones están relacionadas con RCA pero prácticamente nada se ha hecho para comparar reactores RCA y RCTR.

Mientras que los reactores tipo RCA pueden ser modelados con un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales, la descripción de sistemas RCTR requiere de un modelado más complicado, un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales. El problema es entonces, bajo que condiciones puede RCTR ser descrito por una serie de RCA con recirculación?

2 Solución

Supóngase que una transformación química tiene lugar en un líquido fluyendo a través del reactor tubular mostrado en la Figura 1. La posición de un elemento de volumen del fluido reaccionante en el reactor puede ser identificada por medio de su distancia z desde la entrada al tubular. Considerando un elemento del fluido de volumen ΔV , delimitado por dos secciones transversales del tubo, a una distancia z y $z + \Delta z$ respectivamente desde la entrada al tubo ($z = 0$).

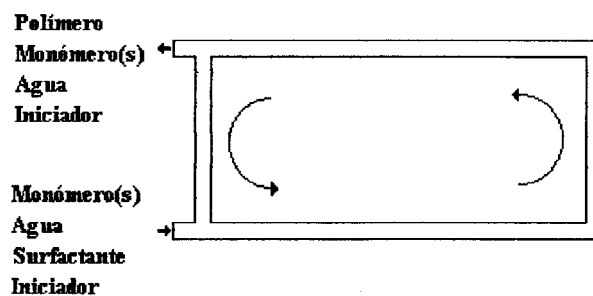


Figura 1. Reactor Tubular Continuo.

Un balance molar alrededor de este elemento de volumen puede ser escrito de la siguiente manera:

$$\{q_i C_i\}_z - D_i S \left\{ \frac{\partial C_i}{\partial z} \right\}_z - r S \Delta z = \{q_i C_i\}_{z+\Delta z} - D_i S \left\{ \frac{\partial C_i}{\partial z} \right\}_{z+\Delta z} + S \Delta z \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (1)$$

Dividiendo por $S \Delta z$ y tomando el límite cuando Δz tiende a cero, la ecuación anterior se convierte en:

$$-\frac{q_i}{S} \frac{\partial C_i}{\partial z} + D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} - r = \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (2)$$

Por lo tanto, el balance molar para un componente i en un RCTR, suponiendo que la difusión axial es despreciable, está dado por:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\frac{q_i}{S} \frac{\partial C_i}{\partial z} - r \quad (3)$$

donde:

C_i : concentración molar del componente i en el reactor, mol/m³

q_i : flujo volumétrico en el tubo, m³/s.

S : área de la sección transversal del tubo, m².

z : distancia axial del reactor, m

r : velocidad de consumo de la especie i , mol/m³s

mientras que el balance molar para el mismo componente i en el n -ésimo reactor de una serie de reactores continuos de tanque agitado acoplados es:

$$\frac{dC_{n_i}}{dt} = -\frac{q_{n_i}}{V_n} (C_{n_i} - C_{n-1_i}) - r \quad (4)$$

donde:

C_{n_i} : concentración molar del componente i en el n -ésimo reactor, mol/m³

V_n : volumen del n -ésimo reactor, m³

Nótese que la suposición al escribir la ec. (4) es que $q_{n_i} = q_{(n-1)_i}$, lo cual es una muy buena aproximación si el volumen de cada elemento es lo suficientemente pequeño de tal suerte que no haya un cambio apreciable en la densidad de la emulsión, lo que es normalmente el caso en sistemas industriales.

El sistema de ecuaciones diferenciales parciales (3) puede ser aproximado por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias por discretización de la variable z (método de líneas), esto es,

$$\frac{dC_{m_i}}{dt} = -\frac{q_{m_i}}{S} \frac{C_{m_i} - C_{m_i i}}{\Delta z} - r \quad (5)$$

La ec. (5) de hecho es igual a la ec. (4) si $S\Delta z = V_m$, el volumen del n -ésimo elemento del reactor tubular, y se considera equivalente al volumen V_n de uno de los n -reactores continuos de tanque agitado. En otras palabras la equivalencia se conserva siempre y cuando los tiempos de residencia de un elemento de volumen del reactor tubular y el correspondiente de un reactor de la serie de reactores continuos agitados conectados en serie sean iguales.

3 Conclusiones

1) Un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales que describe el comportamiento de un reactor tubular continuo con recirculación puede ser aproximado por un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias correspondiendo cada una

a un reactor de un tren de reactores continuos agitados interconectados.

2) La mayor parte de la teoría de control geométrico no lineal se ha desarrollado para sistemas descritos por sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales, por lo que es muy útil tener la posibilidad de transformar un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales a uno de ecuaciones diferenciales ordinarias para analizar el comportamiento dinámico y el control del RCTR en términos de un sistema de reactores continuos agitados acoplados.

3) Se desarrolló un programa para simular la polimerización en emulsión del estireno en un RCTR empleando la ecuaciones discretizadas y se encontró que las predicciones de este modelo son muy similares a las que se obtendrían si se resolviera el sistema de ecuaciones diferenciales parciales empleando el método de Crank Nicholson.