



OBJETIVO

Familiarizarse el uso del reactor cinético para modelar reacciones controladas por la velocidad de reacción y/o múltiples reacciones.

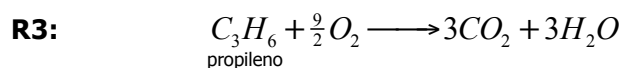
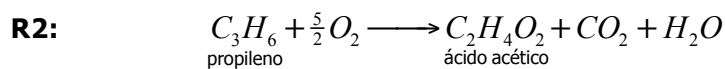
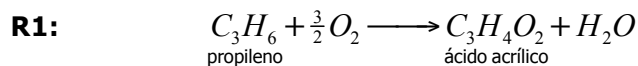
PRODUCCIÓN DE ÁCIDO ACRÍLICO POR OXIDACIÓN CATALÍTICA PARCIAL DE PROPILENO

El ácido acrílico (AA) se usa como precursor de una amplia variedad de químicos en la industria de los polímeros y en la industria textil. Hay varias rutas para producir AA, pero la más común es la oxidación parcial del propileno. El mecanismo usual para producir AA emplea un proceso en dos etapas en el cual el propileno es oxidado primero a acroleína y luego vuelto a oxidar para producir AA. Varias reacciones secundarias pueden ocurrir, principalmente oxidaciones de reactivos y productos, siendo ácido acético uno de los productos secundarios principales. Típicamente el proceso involucra un sistema de dos reactores cada uno conteniendo un catalizador diferente y operando en condiciones tales que se maximice la producción de AA.

Para el propósito de este ejercicio, asumiremos que se emplea un solo reactor catalítico de lecho fluidizado y no se analizará la parte de separación del efluente.

CINÉTICA Y CONFIGURACIÓN DEL REACTOR

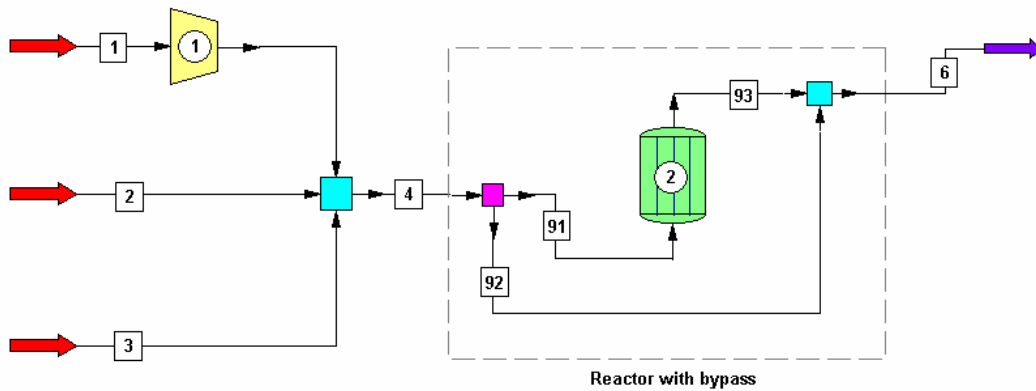
Las reacciones que ocurren en el sistema están controladas por la cinética química (es decir, están lejos del equilibrio). Las tres siguientes reacciones tienen lugar:



para las cuales la velocidad de reacción es $-r_i = k_{0,i} \exp\left[-\frac{E_i}{RT}\right] P_{C_3H_6} P_{O_2}$ con constantes:

	$k_{0,i}$ [kmol/m ³ ·h·(kPa) ²]	E_i [kcal/kmol]
Reacción 1	1.59×10^5	15,000
Reacción 2	8.83×10^5	20,000
Reacción 3	1.80×10^8	25,000

DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO



INFORMACIÓN SOBRE EL PROCESO

CORRIENTES DE ALIMENTACIÓN

	1 – Aire	2 – Vapor	3 – Propileno
Temperatura	25.0°C	159.0°C	25.0°C
Presión	1.0 bar	6.0 bar	11.5 bar
Propileno	—	—	127.0 kmol/h
Nitrógeno	1056.7 kmol/h	—	—
Oxígeno	280.9 kmol/h	—	—
Agua	25.3 kmol/h	992.3 kmol/h	—

El aire alimentado se comprime a 5 bar antes de ser mezclado con el vapor y el propileno. La presión de salida del mezclador se asume a 4.3 bar.

Las reacciones tienen lugar en un reactor catalítico de lecho fluidizado. Dependiendo de las condiciones de fluidización, los sistemas gas-sólido presentan formación de burbujas que ocasionan que no todo el gas entre en contacto con el catalizador sólido. CHEMCAD no tiene un método directo para modelar este tipo de reactores, por lo que se emplea un reactor de flujo tapón y la corriente de alimentación al reactor se separa para que una parte (10% en este caso) no pase por el reactor. De este modo, incluso si el volumen del reactor fuese infinito, la máxima conversión sería del 90%.

El reactor tiene un volumen de 100 m³ y opera isotérmicamente a 310°C y 3.5 bar.

Es importante señalar que al especificar los parámetros del reactor se puede (y generalmente se debe) especificar un conjunto diferente de unidades para las cantidades involucradas en la ecuación de velocidad, en particular si la ecuación está basada en concentración o en presión parcial.

Reaction Engineering Units

Concentration option

1 partial pressure

Partial pressure: 6 kPa

Molar flow: 1 K-moles

Mass flow: 1. kg

Activation energy: 7 KCal

Volume: 1 Cubic meters

Time: 0 Hours

CINÉTICA DE REACCIÓN EN CHEMCAD

CHEMCAD calcula la velocidad de reacción de cada componente involucrado en base a la siguiente ecuación cinética general:

$$r_i = \left(\sum_{j=1}^{nrx} N_{ij} A_j e^{-(E_j/RT)} * \prod_{k=1}^n (C_k)^{\alpha_{kj}} \right) \left(1 + \sum_{k=1}^n \phi_{kj} e^{-(E_{kj}/RT)} * (C_k)^{b_{kj}} \right)^{-\beta_j}$$

En la mayoría de los casos, no se necesitarán los términos del segundo paréntesis, que representan efectos de adsorción en catálisis heterogénea. Al ignorar esos términos, la ecuación regresa a la forma estequiométrica tradicional dependiente de la concentración con dependencia en la temperatura en forma de la ecuación de Arrhenius:

$$r_i = \left(\sum_{j=1}^{nrx} N_{ij} A_j e^{-(E_j/RT)} * \prod_{k=1}^n (C_k)^{\alpha_{kj}} \right)$$

Notación usada en la ecuación de velocidad:

r_i	Velocidad de formación del componente i
i	Subíndice para componente i
j	Subíndice para reacción j
k	Subíndice para reactivo k
N_{ij}	Coefficiente estequiométrico para componente i en reacción j (STOICHIOMETRIC COEFFICIENT)
A_j	Factor de frecuencia (factor preexponencial) en la reacción j (FREQUENCY FACTOR)
E_j	Energía de activación en la reacción j (ACTIVATION ENERGY)
R	Constante universal de los gases
T	Temperatura absoluta
C_k	Concentración (mol/volumen) o presión parcial del reactivo k
α_{kj}	Exponente de la concentración del reactivo k en la reacción j (EXPONENTIAL FACTOR)
n	Número de reactivos
nrx	Número de reacciones
ϕ_{kj}	Factor de frecuencia de adsorción para el componente k (ADSORPTION FACTOR)
E_{kj}	Factor de energía de adsorción para el componente k en la reacción j (ADSORPTION ENERGY)
b_{kj}	Exponente de la concentración en adsorción del reactivo k en la reacción j (ADSORPTION EXPONENT)
β_j	Exponente del término de sitios de adsorción para reacción j (BETA FACTOR)

VENTANA PARA ESPECIFICAR LA VELOCIDAD DE REACCIÓN

Kinetic Data -

Reaction Number: 1

Frequency factor: 159000 Beta factor: Specified heat of reaction is: Ideal gas state

Activation energy: 15000 Heat of reaction:

Component	Stoichiometric coefficient	Exponential factor	Adsorption factor	Adsorption energy	Adsorption exponent
1 Propylene	-1	1			
3 Oxygen	-1.5	1			
7 Acrylic Acid	1				
5 Water	1				
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					

Edit next reaction
 Edit specified rxn
 Exit reactions

Help Rxn #: Cancel OK

En esta ventana se define la estequiometría y cinética de una reacción. Dependiendo del número de reacciones que se haya especificado, será el número de ventanas de este tipo que aparezcan, una a la vez. Cuando se termina de proporcionar la información y se cierra esta ventana, la siguiente aparece automáticamente hasta que todas las reacciones han sido especificadas. Los campos que aparecen en esta ventana son:

- Factor de frecuencia (A_j): Para reacciones isotérmicas, este valor es la constante de velocidad. Las unidades de A_j dependen del orden de la reacción.
- Energía de activación (E_j): Tiene unidades de energía/mol.
- Exponente beta (β_j): Exponente adimensional para los términos de adsorción.
- Calor de reacción: A la temperatura y presión del sistema, que puede ser especificado por el usuario. Si no se proporciona, CHEMCAD lo estima a partir del calor de formación de los reactivos y productos. Un valor negativo indica reacción exotérmica, y un valor positivo indica reacción endotérmica.

Para cada componente que participe en la reacción se necesita también especificar:

- Componente: Seleccionar el componente de la lista. Proporcionar la información disponible para cada componente en el renglón que le corresponde.
- Coeficiente estequiométrico (N_{ij}): Negativo para reactivos, positivo para productos.
- Exponente (factor exponencial, α_{kj}): Éste es el orden de la reacción con respecto a este componente. Si no se especifica para un reactivo, CHEMCAD lo asume igual al valor absoluto del coeficiente estequiométrico. Si no se especifica para un producto, CHEMCAD lo asume cero.
- Factor de adsorción (ϕ_{kj}): Factor de frecuencia para adsorción de Langmuir-Hinshelwood. Si no se proporciona, CHEMCAD lo asume igual a cero y no se incluye resistencia por adsorción en la ecuación de velocidad.
- Energía de adsorción (E_{kj}): Energía de adsorción de Langmuir-Hinshelwood. Si no se proporciona, CHEMCAD asume cero.
- Exponente de adsorción (β_j): Exponente de adsorción de Langmuir-Hinshelwood. Si no se especifica CHEMCAD asume cero.