

Título de la Tesis: "Operabilidad y optimización de reactores catalíticos tubulares"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Bucalá, Verónica

Director: Ing. José Porras

### Resumen

Los reactores de lecho fijo no-isotérmicos no-adiabáticos suelen ser considerados equipos de alto riesgo, puesto que bajo los diseños convencionales de refrigeración a menudo presentan elevados puntos calientes y una extrema sensibilidad ante las perturbaciones o cambios en las variables operativas. Estas características críticas determinaron que estos equipos hayan sido extensamente estudiados en los últimos años, principalmente con el objeto de estimar condiciones operativas límites que eviten ingresar a la zona de alta sensibilidad paramétrica. La mayoría de esos estudios se refirieron por razones de simplicidad a reactores donde se llevan a cabo reacciones únicas. Es sabido sin embargo que las reacciones de interés en la práctica industrial, como por ejemplo oxidaciones parciales de hidrocarburos, suelen responder a esquemas cinéticos más complejos. Estos esquemas pueden en muchos casos ser representados por sistemas en paralelo, serie o como una combinación de ambos. Ya que en general las reacciones secundarias son las que desprenden mayor calor (vg. combustión total), resulta imprescindible tomar en cuenta los valores que adopta la selectividad de la reacción.

Título de la Tesis: "Operabilidad y optimización de reactores catalíticos tubulares"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Bucalá, Verónica

Director: Ing. José Porras

Por todo lo expuesto, en esta Tesis esencialmente se analiza el comportamiento operativo de reactores multitubulares de lecho fijo a escala industrial, cuando en ellos tienen lugar reacciones múltiples. En particular, se seleccionaron las dos cinéticas complejas básicas: reacciones en paralelo y en serie. Se propone simultáneamente una modificación sencilla en el diseño que podría incorporarse con facilidad a reactores existentes, y que exhibe una gran flexibilidad que resulta de sumo interés para optimizar la operación.

En el Capítulo 1, que es introductorio, se describen las características principales del equipo convencional y del diseño propuesto. Se señalan allí los problemas de operación más comunes que se encuentran en la actualidad, y se presenta una revisión de los trabajos más importantes realizados en el tema.

En el Capítulo 2 se desarrollan los modelos matemáticos del reactor industrial para ambos diseños. Como se verá, además de las ecuaciones de conservación para los casos de reacciones en paralelo y en serie, se incluye el modelo matemático para reacciones únicas. Esto se debe a que los resultados obtenidos con la cinética más sencilla facilitan la interpretación de los fenómenos que tienen lugar cuando las reacciones son múltiples. También se describe el método a usar para evaluar la sensibilidad paramétrica y las expresiones de rendimiento y selectividad en los casos de cinética compleja.

Título de la Tesis: "Operabilidad y optimización de reactores catalíticos tubulares"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Bucalá, Verónica

Director: Ing. José Porras

En el Capítulo 3 se discuten los resultados obtenidos mediante la simulación del reactor convencional para los esquemas múltiples y para distintas alternativas de refrigeración. Se analizan los beneficios de usar diseños a co- o contracorriente, demostrando las ventajas del primero en todos los casos.

En el Capítulo 4, se presentan los perfiles térmicos axiales que podrían desarrollarse dentro del reactor, con el diseño flexible, para el esquema de refrigeración a cocorriente. En los distintos casos de reacción única, en paralelo o en serie, se desarrollan criterios a utilizar para predecir a priori el tipo de operación a encontrar dadas las características del reactor, de la reacción y de las condiciones de entrada.

Es sabido que tanto la conversión como la distribución de productos a la salida del reactor para una dada reacción son una consecuencia, fundamentalmente, de la progresión de la temperatura. Por ello, en el Capítulo 5 se plantea el problema de maximizar el rendimiento del producto deseado a la salida, en el caso teórico en que fuera posible fijar la temperatura en cada punto a lo largo del reactor. Para atacar este tema se recurre al Principio del Máximo de Pontryagin, el que aplicado al problema enunciado permite maximizar la función objetivo indicada. Se obtiene como solución la trayectoria (perfil

Título de la Tesis: "Operabilidad y optimización de reactores catalíticos tubulares"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Bucalá, Verónica

Director: Ing. José Porras

longitudinal) de temperatura correspondiente, que por lo tanto resulta ser la óptima para ese caso. Vale la pena recalcar que los perfiles de temperatura así obtenidos son sólo óptimos teóricos, dado que para lograrlos en la práctica debería ser posible que en cada punto del reactor el refrigerante posea la capacidad de extraer la cantidad de calor necesaria. Por esa razón, y salvo excepciones, los perfiles óptimos teóricos no podrán ser reproducidos en el equipo industrial.

Debido a esto, en el Capítulo 6 se analiza el problema de la obtención de los perfiles térmicos realizables más cercanos a los óptimos teóricos. Para ello, a partir de las características de las trayectorias óptimas obtenidas en el Capítulo 5, se estudia entre todos los perfiles reales posibles (descritos en el Capítulo 4) cuáles resultarán más convenientes a fin de minimizar la diferencia con los óptimos teóricos. Se hacen evidente en este Capítulo las ventajas a obtener del diseño flexible propuesto, que hace posibles perfiles de temperatura de distintas formas, en algunos casos muy diferentes a los que se obtienen con el diseño convencional (perfiles con punto caliente).

Por último, en el Capítulo 7 se presenta una síntesis de las conclusiones más importantes que pueden extraerse de los estudios realizados en esta Tesis.