

ELABORACIÓN DE UNA HERRAMIENTA PARA LA SIMULACIÓN DE  
REACTORES BATCH EN ASPEN HYSYS

EDWIN JAVIER HERNANDEZ REAÑO  
LILIBETH MEJIA SANDOVAL

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTADER  
FACULTAD FISICOQUIMICAS  
INGENIERIA QUIMICA  
BUCARAMANGA, 2009

ELABORACIÓN DE UNA HERRAMIENTA PARA LA SIMULACIÓN DE  
REACTORES BATCH EN ASPEN HYSYS

EDWIN JAVIER HERNANDEZ REAÑO  
LILIBETH MEJIA SANDOVAL

Trabajo de Grado para obtener título de  
Ingeniero Químico

Magister  
CRISOSTOMO BARAJAS FERREIRA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTADER  
FACULTAD FISICOQUIMICAS  
INGENIERIA QUIMICA  
BUCARAMANGA, 2009

## TABLA DE CONTENIDO

	<b>Pág.</b>
<b>INTRODUCCION</b>	
<b>1. CONCEPTOS TEORICOS</b>	<b>2</b>
1.1 Reactor batch	2
1.2 Balance general	2
1.3 Ecuación de balance de energía	3
1.4 Cinéticas de reacción	4
<b>2. MODELOS DE REACCION QUE EMPLEAN PARAMETROS CINETICOS Y LAS FASES DE REACCION</b>	<b>5</b>
2.1 Modelos de la reacción que emplean parámetros cinéticos	5
2.1.1 Modelo de la reacción de velocidad simple	5
2.1.2 Modelo de la reacción tipo cinético	5
2.2 Fases de la reacción	6
<b>3. ESTRATEGIA DE SOLUCIÓN PARA EL MODELO DE REACTOR BATCH</b>	<b>7</b>
3.1 Grados de libertad del modelo de simulación del reactor batch	7
3.2 Método de Runge-Kutta	9
3.2.1 Fórmula de Runge-Kutta de cuarto orden	9
3.3 Algoritmo de Solución Reactor Batch	11
3.3.1 Limitaciones de la Extensión	13

<b>4. VALIDACION DE LA HERRAMIENTA Y ANALISIS DE RESULTADOS</b>	14
4.1 Producción de propilenglicol.	14
4.2 Esterificación de alcohol etílico.	17
<b>5. CONCLUSIONES</b>	20
<b>6. RECOMENDACIONES</b>	21
<b>BIBLIOGRAFIA</b>	22
<b>ANEXOS</b>	23

## LISTA DE TABLAS

	<b>Pág.</b>
<b>Tabla 1.</b> Parámetros, respuestas y número de variables de la extensión reactor batch	8
<b>Tabla 2.</b> Ecuaciones disponibles para la simulación del reactor batch	8
<b>Tabla 3.</b> Porcentajes de error de los métodos de simulación de Producción de propilenglicol	16
<b>Tabla 4.</b> Condiciones de la extensión para la Esterificación de alcohol etílico	18
<b>Tabla 5.</b> Porcentajes de error para la simulación de Esterificación de alcohol etílico	19
<b>Tabla 6.</b> Fracciones molares de los compuestos para la Esterificación de alcohol etílico	19

## LISTA DE FIGURAS

	<b>Pág.</b>
<b>Figura 1.</b> Esquema de un reactor batch.	8
<b>Figura 2.</b> Ingreso de la carga inicial.	11
<b>Figura 3.</b> Ingreso del volumen de reactor.	12
<b>Figura 4.</b> Ingreso del set de reacción.	12
<b>Figura 5.</b> Ingreso del criterio de parada e impresión final de la simulación.	13
<b>Figura 6.</b> Carga Molar vs Tiempo. Producción de propilenglicol.	15
<b>Figura 7.</b> Velocidad de conversión del reactivo límite y el producto. Producción de propilenglicol.	15
<b>Figura 8.</b> Temperatura obtenida por los métodos de simulación de Producción de propilenglicol.	15
<b>Figura 9.</b> Conversión obtenida por los métodos de simulación de Producción de propilenglicol.	16
<b>Figura 10.</b> Velocidad de conversión del reactivo límite y el producto. Esterificación de alcohol etílico.	18
<b>Figura 11.</b> Velocidad de conversión del reactivo límite y el producto. Esterificación de alcohol etílico.	19
<b>Figura 12.</b> Director de objetos de la extensión View Editor.	23
<b>Figura 13.</b> Director de vistas del Extensión View Editor.	24
<b>Figura 14.</b> Menú <i>Tools</i> del simulador Aspen Hysys 2006.	26
<b>Figura 15.</b> Preferencias de la sesión del simulador Aspen Hysys 2006.	27
<b>Figura 16.</b> Llamado de la extensión del reactor batch en Aspen Hysys.	28
<b>Figura 17.</b> Vista Diseño del reactor batch	30
<b>Figura 18.</b> Vista de <i>Define Initial Charge</i>	30
<b>Figura 19.</b> Vista cinéticas del reactor batch.	31
<b>Figura 20.</b> Vista de la geometría del reactor batch.	32
<b>Figura 21.</b> Vista de trabajo del reactor batch.	33
<b>Figura 22.</b> Vista de los resultados del reactor batch.	34

## LISTA DE ANEXOS

	<b>Pág.</b>
<b>Anexo A.</b> Interfaz de la extensión	23
<b>Anexo B.</b> Introducción a la extensión	26
<b>Anexo C.</b> Descripción de las pestañas y páginas de la herramienta	29

## RESUMEN

**Título:** Elaboración de una herramienta para la simulación de reactores batch en Aspen Hysys\*

**Autores:** Edwin Javier Hernández Reaño

Lilibeth Mejía Sandoval\*

**Palabras claves:** Simulación, reactor batch, Aspen Hysys, cinética

### **Descripción:**

El objetivo principal de este proyecto es implementar una herramienta que permita simular reactores batch y acoplarla a Aspen Hysys 2006, para lo cual se estableció el modelo de un reactor no isotérmico e isobárico para la simulación del reactor batch. Las reacciones en el modelo pueden ocurrir en cualquier fase válida de reacción que simule Aspen Hysys 2006, además se simula el cambio de fase ocurrido durante el tiempo de reacción; conjuntamente la herramienta implementada permite conocer las condiciones (temperatura, presión, calor intercambiado con el exterior, etc.) durante todo el proceso de reacción.

Después de esto se establece un algoritmo solución y se estipulan los grados de libertad del reactor, implementando el modelo fenomenológico en el lenguaje Visual Basic y conjuntamente con la ayuda del editor de Aspen Hysys View Editor se procede al acople del reactor batch en Aspen Hysys 2006.

Finalmente se comprobó el modelo con dos casos de estudio reportados en la literatura, el primero de producción de propilenglicol y el segundo de esterificación de etanol, encontrando algunas diferencias entre los resultados expuestos en la literatura y los encontrados por la simulación (cambio de fases) , para lo cual se trató de establecer las posibles causas de error.

---

\* Proyecto de Grado

\* Facultad de Ingenierías Físico-químicas. Escuela de Ingeniería Química. Magister Crisóstomo Barajas Ferreira. Ing. Iván Darío Ordoñez Sepúlveda

## Abstract

**Title:** Developing a tool for simulation of batch reactors in Aspen Hysys\*

**Authors:** Edwin Javier Hernández Reaño  
Lilibeth Mejía Sandoval\*

**Keywords:** Simulation, batch reactor, Aspen HYSYS, kinetic

### **Description:**

The main objective of this project is to implement a tool to simulate batch reactors and attach to Aspen Hysys 2006, for which established the model of a reactor for non-isothermal and isobaric batch reactor simulation. The model reactions can occur at any stage that simulates response validates Hysys Aspen, 2006, also simulates the phase change occurred during the reaction time; jointly implemented the tool allows to know the conditions (temperature, pressure, heat exchanged with the outside, etc.) throughout the reaction process.

After that imposing a solution algorithm and establishes the degrees of freedom of the reactor, the phenomenological model implemented in the Visual Basic language, and together with the help of the editor of Aspen Hysys View Editor is the coupling of the batch reactor in Aspen Hysys 2006 .

Finally found the model with two case studies reported in the literature, the first production of propylene glycol and the second by esterification of ethanol and found some differences between the results reported in the literature and those found by the simulation (phase change) , for which they try to establish possible sources of error.

---

\* Degree Project

\* Physical –chemical Engineerings Faculty. Chemical Engineering. Magister Crisóstomo Barajas Ferreira. Ing. Iván Darío Ordoñez Sepúlveda

## INTRODUCCION

La simulación es una parte fundamental en aquellos casos donde obtener la solución analítica es muy complicado o no existe, además puede ser usada en casos en el que el modelo a escala es muy costoso de implementar. Al pasar de los años se han logrado hacer software de simulación, que han facilitado la tarea de los ingenieros químicos. Una de las herramientas más usadas recientemente para simulación es el programa de computador Aspen Hysys, el cual permite al usuario la manipulación equipos tales como: intercambiadores de calor, columnas de destilación y los reactores teóricos con la excepción del reactor batch. También permite la creación de diversos anexos ó extensiones (paquetes de fluidos, cinéticas de reacciones y equipos), para adaptar al software a las necesidades del usuario. Las extensiones son implementadas por el usuario por medio del lenguaje de programación Visual Basic y un editor de extensiones que contiene Aspen Hysys llamado View Editor, el cual contiene las herramientas básicas para la creación y manipulación de un equipo que contenga Aspen Hysys.

Debido a que Aspen Hysys no contiene un reactor batch y es un software que brinda la posibilidad de acoplar los modelos a paquetes termodinámicos que mejoran su simulación, llegaría a ser de gran utilidad la implementación de la extensión que simule el reactor batch para flexibilizar la simulación de procesos realizados en la escuela de Ingeniería Química de la UIS.

La metodología para la realización de esta extensión se basó en una amplia revisión de la literatura para conocer los diferentes modelos usados en la simulación de reactores batch y así establecer el modelo mas adecuado para esta, posteriormente se construyó el modelo fenomenológico en lenguaje Visual Basic y respectivamente se desarrollo la extensión que fue acoplada Aspen Hysys 2006, la última etapa que se realizó fue la validación de la herramienta con ejemplos reportados en la literatura para verificar que los resultados de la extensión son correctos.

## CONCEPTOS TEORICOS

### 1.1 Reactor batch

Un reactor batch es básicamente un tanque agitado donde ocurre de una o varias reacciones por un tiempo determinado  $t$ . Al inicio del proceso se introduce los materiales, se lleva a las condiciones de presión y temperatura requeridas, se deja reaccionar por un tiempo preestablecido y finalmente se descargan los productos de la reacción junto con los reactantes no convertidos. En casi todos los reactores batch o por lotes cuanto más tiempo permanezca un reactivo en el reactor, más de él se convertirá en producto hasta que se llegue al equilibrio o bien se agote el reactivo<sup>1</sup>.

### 1.2 Ecuación general de balance de masa

Definimos como sistema de estudio el volumen de reacción dentro del tanque agitado. Aplicando un balance global molar a este sistema y asumiendo que el reactor trabaja con sus fases en equilibrio tenemos:

En general el balance de moles es:  $G_{i,j} = \frac{dN_{i,j}}{dt}$  **(1)**

Para el equilibrio de fases:  $N_{ij} = N_{ij} \pm P_{ij}$  **(2)**

Donde el subíndice  $j$  representa el estado o fase de la materia y el subíndice  $i$  representa cada compuesto.

$G_{ij}$  es la velocidad de generación de moles por reacción química dentro del sistema.

$P_{ij}$  representa la cantidad de moles que cambian de fase (evaporan y/o condensan)

---

<sup>1</sup> Elementos de ingeniería de las reacciones químicas, 3ed, H. Scott Fogler

$\frac{dN_{ij}}{dt}$  es la velocidad de acumulación molar dentro del sistema.

Si el volumen de reacción no varía con el tiempo y si la reacción es perfectamente homogénea de modo que no hay variación de la velocidad de reacción en todo el volumen del reactor entonces:

$$\frac{dN_{ij}}{dt} = r_{ij}V \quad (3)$$

Si ocurren q reacciones

$$r_{ij} = \sum_{k=1}^q r_{kj} \quad (4)$$

En los sistemas por lotes la conversión x de un componente j es función del tiempo que los reactivos permanecen en el reactor. Si  $N_{A0}$  es el número inicial de moles de un reactivo A,  $N_A$  el número de moles de A que quedan en el reactor después de un tiempo t, entonces:<sup>2</sup>

$$x = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}} \quad (5)$$

### 1.3 Ecuación de balance de energía

En general el balance de energía para un reactor no isotérmico es:

$$\dot{Q} = \frac{d\hat{E}_{sis}}{dt} \quad (6)$$

Donde la energía total del sistema ( $E_{sis}$ ) es la suma de la energía aportada por cada compuesto dentro del sistema,  $E_i$  de las diversas especies que están en el volumen del sistema, por el número de moles en el sistema;  $\dot{Q}$  es el flujo de calor intercambiado con el exterior.

$$\hat{E}_{sis} = \sum N_i E_i = \left[ \sum N_i (H_i - PV_i) \right]_{sis} \quad (7)$$

Reemplazando la ecuación 7 en la 6

---

<sup>2</sup> Elementos de ingeniería de las reacciones químicas, 3ed, H. Scott Fogler

$$Q = \sum N_i \frac{dH_i}{dt} + \sum H_i \frac{dN_i}{dt} - \frac{d(P \sum N_i V_i)}{dt} \quad (8)$$

Debido a que en el último término P y V son constantes este se hace cero

#### 1.4 Cinéticas de reacción

Para la reacción de la ecuación 9, si tomamos como base de cálculo la especie A que es uno de los reactivos, la velocidad de desaparición de A,  $-r_A$ , depende de la temperatura y la composición, y en el caso de muchas reacciones se puede escribir como el producto de una constante de velocidad  $k$  y una función de las concentraciones de las diversas especies que participan en la reacción:



La constante de velocidad no es verdaderamente una constante solo es independiente de las concentraciones y presenta una marcada dependencia de la temperatura; en reacciones en fase gaseosa también depende del catalizador y podría ser función de la presión total<sup>3</sup>. Para los fines de este trabajo se supondrá que solo depende de la temperatura.

La dependencia de la velocidad de reacción respecto a las concentraciones de las especies presentes,  $r_A$  se determina prácticamente en todos los casos de manera experimental. Aunque para esta dependencia generalmente es el producto de las concentraciones de las especies individuales que reaccionan, para la reacción de la ecuación 9, tenemos que la ley de velocidad para una reacción de orden global  $n$  es:

$$-r_A = K_A C_A^\alpha C_B^\beta \quad (11)$$

Donde  $n$  sería igual a la suma entre  $\alpha + \beta$

---

<sup>3</sup> Elementos de ingeniería de las reacciones químicas, 3ed, H. Scott Fogler

## 2. MODELOS DE REACCION QUE EMPLEAN PARAMETROS CINETICOS Y FASES DE REACCION

### 2.1 Modelos de reacción que emplean parámetros cinéticos:

Entre los modelos de reacción que se incluyen para la herramienta diseñada en este trabajo tenemos:

#### 2.1.1 Modelo de reacción de velocidad simple:

$$r_i = k \left( C_R - \frac{C_P}{k_p} \right) \quad (12)$$

Donde  $k$  es la constante de velocidad de reacción,  $C_R$  y  $C_P$  representa las concentraciones de los reactivos y productos,  $k_p$  es la constante de equilibrio de la reacción; a continuación se presentan algunas de las características de la reacción de velocidad simple:

- ✓ Es aplicable a casos en los que la cinética limita la velocidad de reacción.
- ✓ Puede ser empleado para caracterizar reacciones elementales o reacciones no elementales, reversibles o irreversibles, en donde los coeficientes estequiométricos usualmente coinciden con los órdenes cinéticos de reacción.
- ✓ Para especificarlo se requiere de la estequiometría de reacción, el factor de frecuencia y energía de activación de la constante de reacción directa, para el caso de reacciones reversibles, también se requiere de la constante de equilibrio en función de la temperatura.

#### 2.1.2 Modelo de reacción tipo cinético:

$$r_i = k C_R^{n_R} - k' C_P^{n_P} \quad (13)$$

Donde  $k$  y  $k'$  son las constantes de reacción de avance e inversa,  $C_R$  y  $C_P$  representa las concentraciones de los reactivos y productos,  $n_R$  y  $n_P$  son los órdenes de reacción ó Aspen Hysys toma los órdenes de reacción de acuerdo a

los coeficientes estequiométricos de cada reacción por defecto pero estos pueden ser cambiados por el usuario. A continuación se presentan algunas de las características de la reacción de tipo cinético:

- ✓ Es aplicable a casos en los que la cinética limita la velocidad de reacción.
- ✓ Puede ser empleado para caracterizar reacciones no elementales, reversibles e irreversibles, en donde los coeficientes estequiométricos coinciden o no con los órdenes cinéticos de reacción.
- ✓ Para especificarlo se requiere de la estequiometría de reacción, los órdenes de reacción directa e inversa de cada una de las sustancias en la reacción, así como el factor de frecuencia y energía de activación de las constantes de reacción directa e inversa. Si la reacción es irreversible se omiten los órdenes de reacción así como el factor de frecuencia y la energía de activación de la reacción inversa.

## 2.2 Fases de la reacción

La extensión del reactor batch tiene la disposición de reconocer todas las fases de reacción que se pueden simular en un reactor de Aspen Hysys 2006 y tener en cuenta la(s) reacción(es) en cada una de las fases que el usuario defina; estas se podrán seleccionar en el Basis de cada reacción, a continuación se menciona cada fase de reacción y se explica en qué fase ocurrirá está.

- ✓ **Vapour Phase:** La reacción ocurre en la fase de vapor.
- ✓ **Liquid Phase:** La reacción ocurre en la fase líquida ligera.
- ✓ **Aqueous Phase:** La reacción ocurre en la fase líquida pesada.
- ✓ **Combined Liquid:** La reacción ocurre en las dos fases líquidas.
- ✓ **Overall:** La reacción ocurre en todas las fases mencionadas.

### 3. ESTRATEGIA DE SOLUCIÓN PARA EL MODELO DE REACTOR BATCH

#### 3.1 Grados de libertad del modelo de simulación del reactor batch

Es necesario hacer un análisis de grados de libertad para conocer la cantidad de variables que deberán ser ingresadas (parámetros) al modelo de reactor batch para que este converja y así obtener la respectiva solución (respuesta).

En la figura 1 se muestra el esquema típico de un reactor batch con un volumen  $v$ , en el cual se le ingresan las concentraciones  $C_A, C_B, C_C, \dots, C_i$  de los  $n$  componentes, con su respectiva presión  $P_0$  y temperatura  $T_0$ , quienes reaccionan con una velocidad de reacción  $r(T, C)$  dentro del reactor por un tiempo  $t$  alcanzando un grado de conversión  $X$ .

Finalizando a las concentraciones  $C_A', C_B', C_C', \dots, C_i'$ .

Ahora bien con los modelos matemáticos expuestos en las secciones anteriores, tenemos:

✓ Ecuación general de balance de masa:  $G_{i,j} = \frac{dN_{i,j}}{dt} \quad (1)$

✓ Ecuación de definición de conversión:  $x = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}} \quad (5)$

✓ Ecuación general de balance de energía:  $\dot{Q} = \frac{d\hat{E}_{sis}}{dt} \quad (6)$

✓ Modelo de velocidad de reacción:  $r_i = k \left( {}_R C_R - \frac{p c_p}{k_p} \right) \quad (12) \quad \text{ó}$

$$r_i = k \quad {}_R C_R^{n_R} - k^l \quad {}_p C_p^{n_p} \quad (13)$$

✓ Paso del método de Runge Kutta para el avance de la variable independiente, el tiempo.

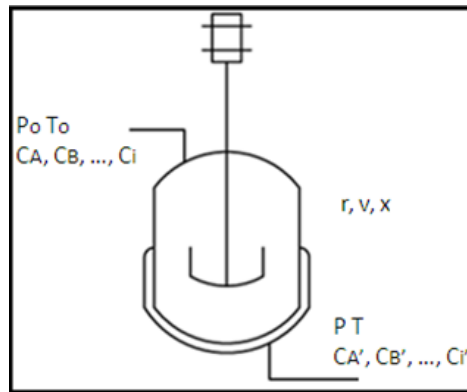


Figura 1. Esquema de un reactor batch

Variable	Parámetro	Respuesta	Numero de variables
Termodinámica Carga inicial	x		n+2
Carga molar o másica inicial	x		1
Calor intercambiado con el exterior ( $\dot{Q}$ )	x		1
Volumen ( $V_R$ )	x		1
Criterio de parada (SC)	x		1
Temperatura final ( $T_f$ )		x	1
Presión final ( $P_f$ )		x	1
Conversión final ( $X_A$ )		x	
Velocidad de reacción ( $r_{ij}$ )		x	
Fracciones molares finales ( $C_i'$ )		x	n
Tiempo de reacción (t)		x	1
Numero de variables totales	n+6	2 +n+3	9+2 +2n

Tabla 1. Parámetros, respuestas y número de variables de la extensión reactor batch

Ecuación	Numero de respuestas
Ecuaciones de balance de masa	N
Ecuaciones de balance de energía	1
Ecuación de conversión x	
Modelos de cinética de reacción	
Tiempo de residencia	1
Numero de variables totales	2 +n+3

Tabla 2. Ecuaciones disponibles para la simulación del reactor batch.

Como se muestra en la tabla 1 el número de respuestas o incógnitas es igual a  $2 + n + 3$ , como el reactor es isobárico se reduce el número de incógnitas a  $2 + n + 2$ , que es el igual al número de ecuaciones con las que se cuenta para resolver el sistema (tabla 2), así se completa los grados de libertad para la simulación del reactor batch.

Finalmente es de gran importancia establecer la manera correcta de converger la termodinámica de la carga inicial, la cual contiene las variables temperatura (T), presión (P), fracción de vapor (FV), entalpía molar (H) y entropía molar (S); la termodinámica de la carga inicial converge con cualquiera de las siguientes cinco combinaciones TP, TFV, PFV, PH y PS junto con las fracciones molares o másicas iniciales.

### 3.2 Método de Runge-Kutta

Es probable que uno de los procedimientos más difundidos y a la vez más exactos para obtener soluciones aproximadas al problema de valor inicial  $y' = f(x, y)$ ,  $y(x_0) = y_0$  sea el método de Runge-Kutta de cuarto orden. Como indica el nombre, el método de Runge-Kutta tiene distintos ordenes, los cuales se deducen a partir del desarrollo de  $y(x_n + h)$  en serie de Taylor con residuo:

$$y(x_n + h) = y(x_{n+1}) = y(x_n) + h y'(x_n + h) + \frac{h^2}{2!} y''(x_n + h) + \dots + \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} y^{(k+1)}(c) \quad (14)$$

En donde c es un número entre  $x_n$  y  $x_n + h^4$ .

#### 3.2.1 Fórmula de Runge-Kutta de cuarto orden

El procedimiento de Runge-Kutta de cuarto orden consiste en determinar las constantes adecuadas para la fórmula 14 conocida como un polinomio de Taylor de cuarto grado.

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + a k_1 + b k_2 + c k_3 + d k_4 \quad (15)$$

<sup>4</sup> Ecuaciones diferenciales con aplicaciones de modelado, 6ªed, Dennis G. Zill

El conjunto de valores de las constantes que más se usa produce el siguiente resultado<sup>5</sup>:

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad \mathbf{(16)}$$

Donde

$$\begin{aligned} k_1 &= h f(x_n, y_n) \\ k_2 &= h f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 &= h f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2\right) \\ k_4 &= h f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_3\right) \end{aligned}$$

Para las ecuaciones 3 y 6 se aplicara el método de Runge-Kutta de cuarto orden con lo cual tendríamos n ecuaciones diferenciales de balance de masa y una ecuación diferencial de balance de energía resueltas.

Para la ecuación de balance de energía como el flujo de calor es constante la ecuación de energía seria igual a:

$$\hat{E}_{sis\ t} = \hat{E}_{sis\ t-h} + h \dot{Q} \quad \mathbf{(17)}$$

Para la ecuación de balance molar

$$N_{ij\ t} = N_{ij\ t-h} + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad \mathbf{(18)}$$

Donde la función  $f(x_n, y_n)$  para las constantes  $k_1, k_2, k_3, k_4$  es igual a:

$$f(x_n, y_n) = V \sum_{k=1}^{\alpha} r_{kj} (T, (C_A, C_B, \dots)) \quad \mathbf{(19)}$$

---

<sup>5</sup> Ecuaciones diferenciales con aplicaciones de modelado, 6ªed, Dennis G. Zill

### 3.3 Algoritmo de Solución Reactor Batch

Se escogió el simulador Aspen Hysys 2006 para el desarrollo de la simulación porque este permite la construcción de anexos mediante programación, además es ampliamente difundido en la escuela de Ingeniería Química de la UIS y éste no posee reactores batch para la simulación. Asimismo se cuenta con la disponibilidad de los paquetes de propiedades presentes en Aspen Hysys y la amplia gama de opciones que tiene el simulador para el análisis de los procesos, como son los casos de estudio donde se pueda realizar un análisis detallado de las variables de cada equipo y del proceso, mostrando de una forma grafica la dependencia de las variables en cuestión; por otra parte es importante destacar que Aspen cuenta con un simulador de reactores batch llamado Aspen Batch, que esta orientado hacia el escalado de equipos y no a la simulación como tal.

A continuación se mostrara los pasos básicos del algoritmo solución:

- ✓ Se realiza la lectura de los datos de entrada verificando las condiciones de operación del reactor, se requiere la carga inicial totalmente convergida.

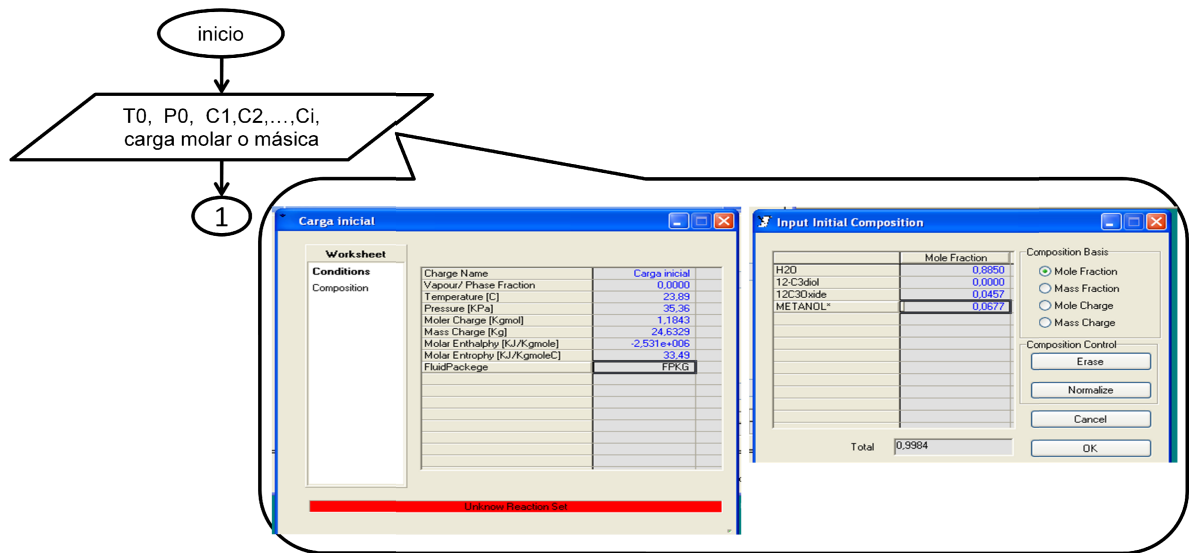


Figura 2. Ingreso de la carga inicial

- ✓ Ingresar el volumen del reactor, si el volumen del reactor es menor que el volumen de la carga convergida se despliega una advertencia, además la barra de estado tomara el color amarillo.

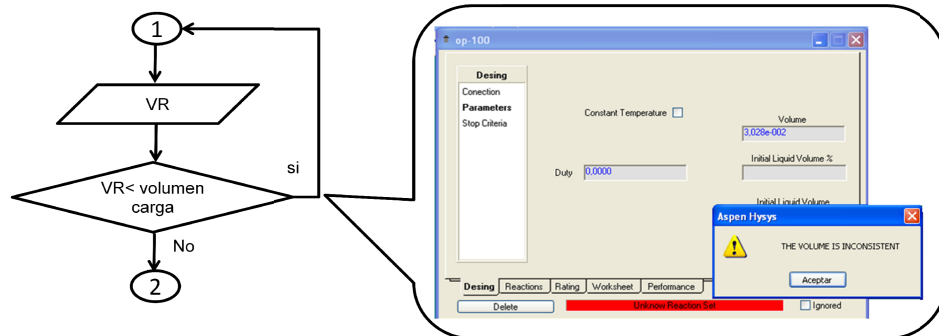


Figura 3. Ingreso del volumen de reactor

- ✓ Ingresar un set de reacciones, si el set de reacciones contiene reacciones no validas (equilibrio, conversión o heterogéneas) se despliega nuevamente una advertencia y no se realizara la simulación si este set continua seleccionado.

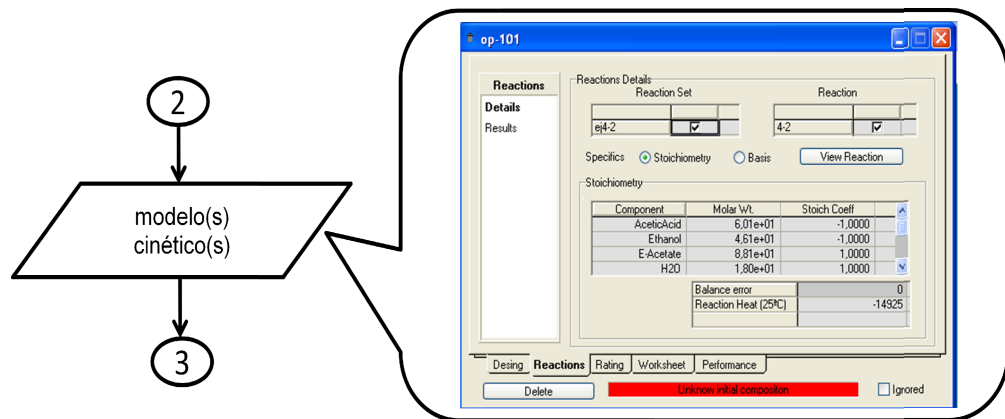


Figura 4. Ingreso del set de reacción

- ✓ Por último se ingresa un criterio de parada (SC) del modelo. El usuario puede escoger entre temperatura, tiempo, concentración de algún compuesto y conversión de alguna reacción. finalmente se realiza las iteraciones necesarias con el método de Runge-Kutta hasta llegar a la convergencia, para así imprimir los datos finales.

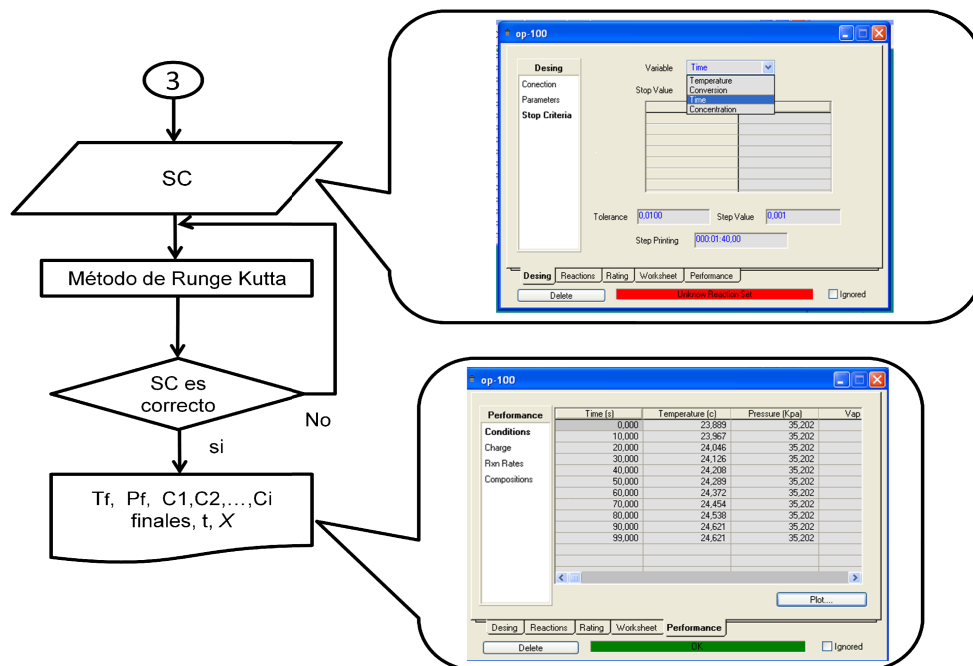


Figura 5. Ingreso del criterio de parada e impresión final de la simulación

### 3.3.1 Limitaciones de la Extensión.

Se simulara un reactor batch no isotérmico e isobárico, la cinética de la reacción solo se podrá simular en concentración molar, y solo es aplicable a los dos tipos de cinética de reacción mencionados en el capítulo 2.

#### 4. VALIDACION DE LA HERRAMIENTA Y ANALISIS DE RESULTADOS

Los casos de estudio usados para la validación de la herramienta, fueron el ejemplo de producción de propilenglicol del libro *“Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas, H. Scott Fogler”* y el ejemplo de esterificación de alcohol etílico del libro *“Ingeniería de la Cinética Química, Mac Graw Hill.”* La comprobación del modelo matemático y el acople del modulo propuesto en este trabajo al simulador Aspen Hysys 2006, fueron realizados con la aplicación de interacciones en el ambiente del simulador para el desarrollo de los ejemplos mencionados, de dos formas: la primera con el modelo propuesto en este trabajo y la segunda como se realiza cotidianamente (sin cambios de fase) pero con igual método numérico que el primer modelo.

##### 4.1 Producción de propilenglicol.

Se cuenta con un reactor de 10 gal con agitación, aislado y con instrumentos. Este reactor se carga con una mezcla de 1 gal de metanol, 1 gal óxido de propileno y 5 gal de agua que contiene 0.1% de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> por peso. La temperatura inicial de todos estos materiales es de 58°F y se lleva hasta 75°F. ¿Cuántos minutos deberá tardar la mezcla del interior del reactor en alcanzar una conversión de 51.5%?, ¿Cuál sería su temperatura?



En las figuras 6 y 7 se muestran las graficas arrojadas por la extensión, estas permiten corroborar que se consume el reactivo límite en el reactor con el tiempo, y presenta un comportamiento adecuado en la generación de producto de interés con respecto al reactivo límite y a la estequiometria con la cual se maneja la ecuación, para este ejemplo se debería reducir la cantidad de moles en el reactor de dos a uno (figura 6).

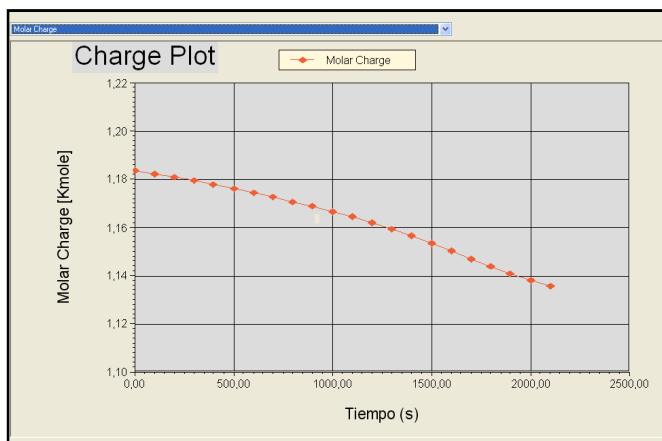


Figura 6. Carga Molar vs Tiempo. Producción de propilenglicol

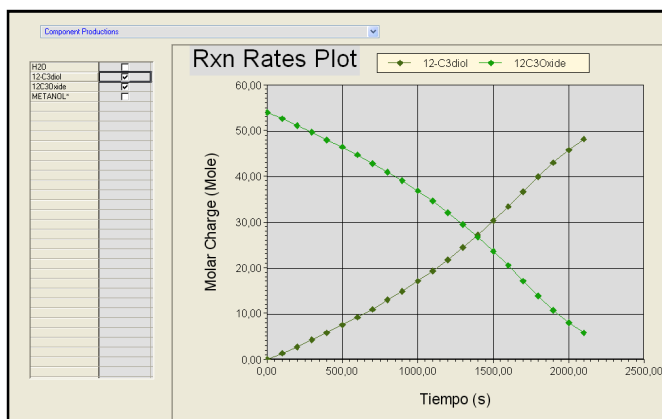


Figura 7. Velocidad de conversión del reactivo límite y el producto. Producción de propilenglicol

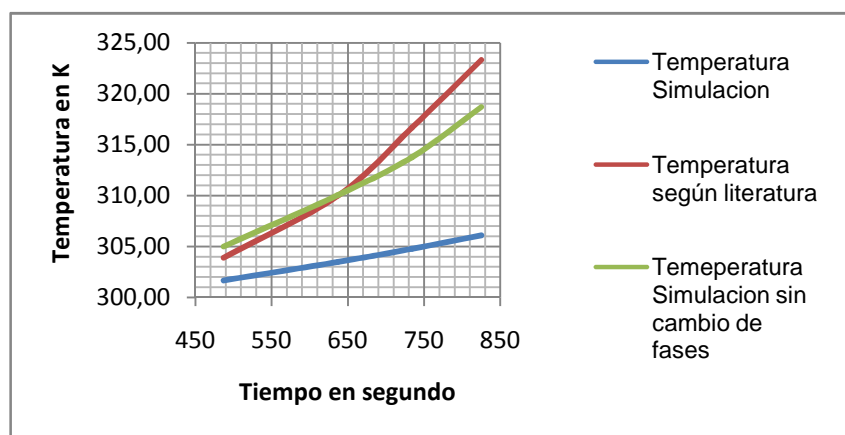
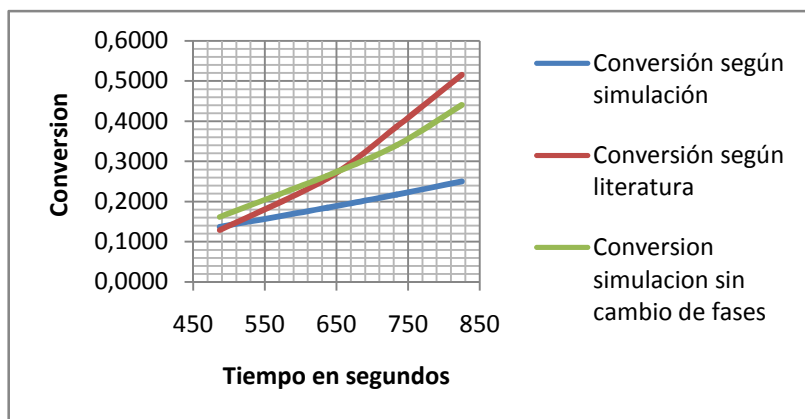


Figura 8. Temperatura obtenida por los métodos de simulación de Producción de propilenglicol



**Figura 9.** Conversión obtenida por los métodos de simulación de Producción de propilenglicol

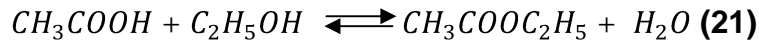
Las figuras 8 y 9 muestran las desviaciones de los dos métodos con respecto a las respuestas encontradas en la literatura citada, según lo encontrado en el ejemplo se obtiene una desviación menor para la conversión y la temperatura si no se simula ningún cambio de fase, esto hace suponer que el cambio de fase afecta directamente la respuesta final, además las diferencias aumentan a medida que pasa el tiempo; por otra parte cabe destacar la importancia de simular los cambios de fase de la materia lo que llevaría a simulaciones mas reales, pues el volumen y la masa de reacción variaría según el estado de la materia afectando así la respuesta encontrada en la simulación. En la tabla 3 se presentan de los porcentajes de error de los dos métodos de simulación respecto a la literatura citada.

Tiempo (seg)	Valor reportado en la literatura		Simulación sin cambio de fase		Simulación con cambio de fase	
	Temperatura	Conversión	Temperatura	Conversión	Temperatura	Conversión
487	303,89	0,1288	0,3692	17,5	0,73	6,23
637	310,00	0,2575	0,0237	2,8	2,10	28,33
734	316,67	0,3863	0,9135	12,0	3,75	43,73
825	323,33	0,5150	1,4332	14,4	5,33	51,49

**Tabla 3.** Porcentajes de error de los métodos de simulación de Producción de propilenglicol

## 4.2 Esterificación de alcohol etílico.

En presencia de agua y ácido clorhídrico (como catalizador), la velocidad de esterificación (gramo mole por litro por minuto) de ácido acético y alcohol etílico a 100 °C, está dada por las ecuaciones:



$$r_2 = k C_H C_{OH} \quad k = 4.76 \cdot 10^{-4} L/(min)(gmol) \quad (22)$$

La velocidad de la reacción contraria, o sea, la hidrólisis del éster con la misma concentración de catalizador, es:

$$r_2 = k C_H C_{OH} - k^l C_E C_W \quad k^l = 1.63 \cdot 10^{-4} L/(min)(gmol) \quad (23)$$

Un reactor se carga con 100 gal de una solución acuosa que contiene 200 lb de ácido acético, 400 lb de alcohol etílico. ¿Cuál será la conversión de ácido acético a éster después de 120 min de tiempo de reacción? La densidad puede suponerse constante e igual a 8.7 lb/gal. Desprecie el agua vaporizada en el reactor.

Para la simulación con cambios de fase se debió tomar un volumen reactor mayor al planteado en la literatura citada, debido a que por la termodinámica que presenta Aspen Hysys la cantidad de volumen ocupado por la carga era aproximadamente de 122 galones.

Nuevamente se revisa que la variación de las condiciones sea correcta, para el caso se presentan en la tabla 4, en la cual se ve que la variación de la entropía aumenta, la entalpia cambia con el tiempo y el calor varia con el tiempo por el consumo de los reactivos, el consumo de reactivo limite y generación de producto de interés se presenta en la figura 10.

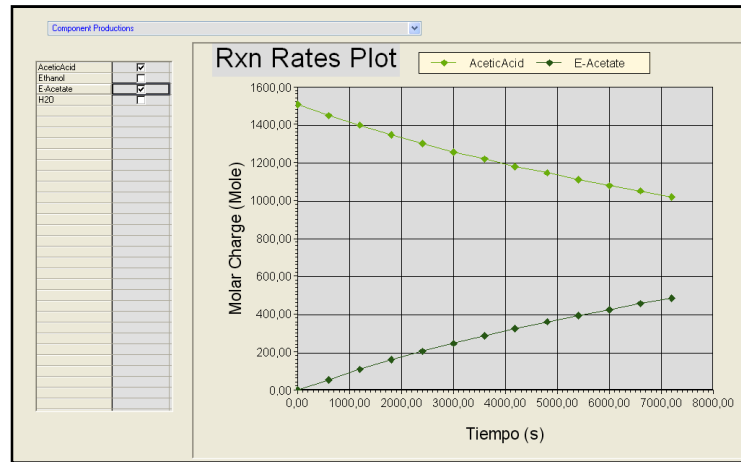


Figura 10. Velocidad de conversión del reactivo límite y el producto. Esterificación de alcohol etílico

PERFORMANCE CONDITIONS						
tiempo [s]	Temperatura [°C]	Presión [Kpa]	V frac	Duty [Kj/S]	Entalpia [Kj/Kgmole]	Entropía [kj/kgmole]
0	100	177,07	0,0000	----	-296479,74	65,84
600	100	177,07	0,0582	349,31	-294429,19	72,28
1200	100	177,07	0,1014	270,97	-292931,60	77,10
1800	100	177,07	0,1365	223,07	-291731,77	81,05
2400	100	177,07	0,1662	190,00	-290725,95	84,42
3000	100	177,07	0,1920	165,48	-289859,09	87,36
3600	100	177,07	0,2148	146,44	-289097,79	89,97
4200	100	177,07	0,2353	131,14	-288419,92	92,33
4800	100	177,07	0,2538	118,54	-287809,93	94,47
5400	100	177,07	0,2707	107,96	-287256,39	96,42
6000	100	177,07	0,2862	98,94	-286750,64	98,22
6600	100	177,07	0,3004	91,15	-286285,89	99,89
7200	100	177,07	0,3137	84,35	-285856,75	101,44

Tabla 4. Condiciones de la extensión para la Esterificación de alcohol etílico

En la figura 10 se presenta la forma en que la extensión muestra los datos de conversión, como se observa se conservó la forma usual de presentar los resultados por Aspen Hysys; En la tabla 5 se muestra el valor entregado por la literatura en la que se desprecia la vaporización y los obtenidos por las simulaciones propuestas en la tesis.

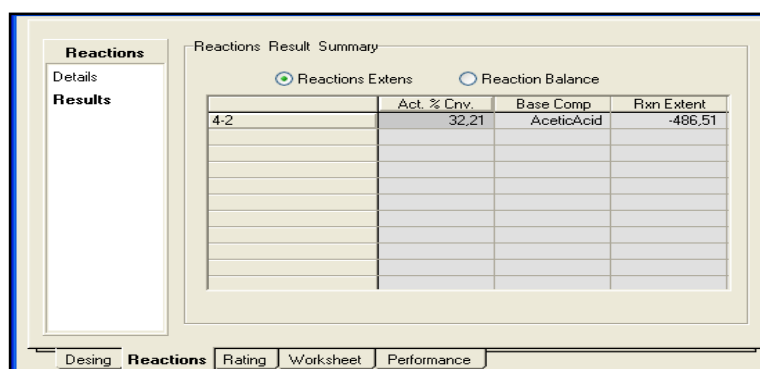
Conversión obtenida en un tiempo de reacción de 120 min			
	Literatura	Simulación sin cambio de fase	Simulación con cambio de fase
<b>Conversión</b>	0,365	0,366	0,322
<b>% error</b>	-----	0,231	11,75

**Tabla 5.** Porcentajes de error para la simulación de Esterificación de alcohol etílico

Fracciones molares de los compuestos				
	carga inicial	Vapor final	Líquido final	carga final
<b>AceticAcid</b>	0,230	0,019	0,113	0,084
<b>Ethanol</b>	0,460	0,438	0,211	0,282
<b>E-Acetate</b>	0,000	0,088	0,018	0,039
<b>H2O</b>	0,310	0,456	0,658	0,595

**Tabla 6.** Fracciones molares de los compuestos para la Esterificación de alcohol etílico

Por último podemos llegar a concluir que los cambios de fase si afectan los resultados finales, pero se debe hacer un análisis más exhaustivo debido a que la fracción de vapor es igual al número de moles que se encuentran en fracción de vapor, y estas podrían ser de algún compuesto que no afecte a la cinética de la reacción, como en este caso no se afecto en gran medida la cinética de la reacción de avance, el resultado no es tan distante al encontrado en la literatura. Por otra parte al cambiar la temperatura la respuesta final se hace más sensible y se pueden encontrar diferencias mas grandes como lo fue en el caso de producción de propilenglicol.



**Figura 11.** Velocidad de conversión del reactivo límite y el producto. Esterificación de alcohol etílico

## 5. CONCLUSIONES

- ✓ Se implementó una herramienta para la simulación de un reactor Batch en Aspen Hysys 2006, que permitió el diseño de procesos químicos como aporte a la formación de un Ingeniero Químico.
- ✓ Se validó el modelo con dos ejemplos de la literatura y los resultados de esta herramienta ofrecen un interesante aporte ya que brinda un modelo más exacto debido a que tiene en cuenta el cambio de fases.

## 6. RECOMENDACIONES

- ✓ Mejorar el aspecto visual de la herramienta reactor batch en Aspen Hysys 2006, lo que permita ver el reactor batch como una imagen que lo distinga; así como las demás herramientas que ofrece el simulador.
- ✓ Continuar con este tipo de proyectos que permitan complementar el reactor batch con baterías de reactores de este tipo.
- ✓ Plantear un reactor batch en Aspen Hysys 2006 que sea no isobárico.
- ✓ Proponer el trabajo del reactor batch con cinética heterogénea.

## BIBLIOGRAFIA

1. **H, SCOTT FOGLER.** Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas. Tercera Edición. P. 34-37, 444-446, 538-541.
2. **OCTAVE LEVENSPIEL.** Ingeniería de las Reacciones Químicas. Tercera Edición. P. 83-88.
3. **DENNIS G. ZILL.** Ecuaciones Diferenciales con aplicaciones de modelado. Sexta Edición. P. 414-416.
4. **SCENNA NICOLÁS J.** Modelado, simulación y optimización de Procesos químicos. P. 542-547
5. **GILBERT F. FROMENT, KENNETH B. BISCHOFF.** Chemical Reactor Analysis and Design. P.362-391
6. **J.M. SMITH.** Ingeniería de la Cinética Química, McGRAW HILL, Sexta Edición. P. 169-171.

## ANEXO A. INTERFAZ DE LA EXTENSION

**Interfaz de la extensión (EDF).** La interfaz de la extensión que el usuario puede observar en HYSYS es creada a través del Extensión View Editor, una herramienta incluida en el software comercial. Esta herramienta permite declarar y almacenar variables en el archivo EDF, éste es el conector entre el código elaborado en Visual Basic para la operación (DLL) y el entorno de trabajo en Aspen Hysys 2006.

La construcción de la interfaz involucra dos aspectos importantes: el desarrollo de las presentaciones de los equipos y la conexión al archivo de código, así como la definición de las variables que están asociadas a la extensión. Esto se realiza a través del Objects Manager y el Views Manager explicados a continuación.

**Objects Manager (Director de objetos).** En esta vista se ingresa información para el correcto funcionamiento de la extensión. Esta información es usada para registrar la extensión apropiadamente y para declarar variables y objetos utilizados por la extensión.

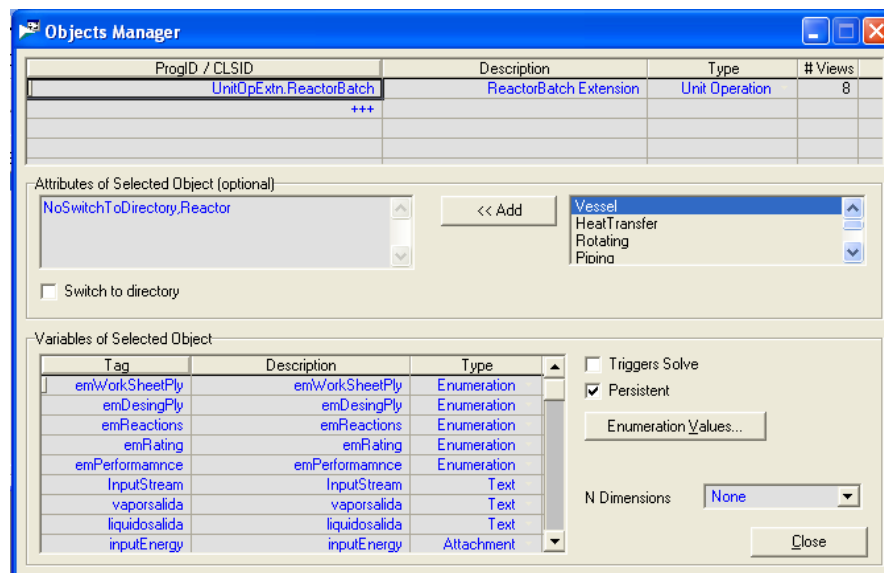


Figura 12. Director de objetos de la extensión View Editor.

El Objects Manager consta de dos secciones importantes para el desarrollo de las extensiones:

- La definición del objeto.
- Las variables del objeto.

**Views Manager (Director de vistas).** En esta parte se realiza la creación de las vistas asociadas con la extensión, el entorno de trabajo es similar al entorno de Visual Basic y en esta parte se vinculan las variables con los elementos de cada vista para establecer la conexión entre Aspen Hysys 2006 y el código de la extensión.

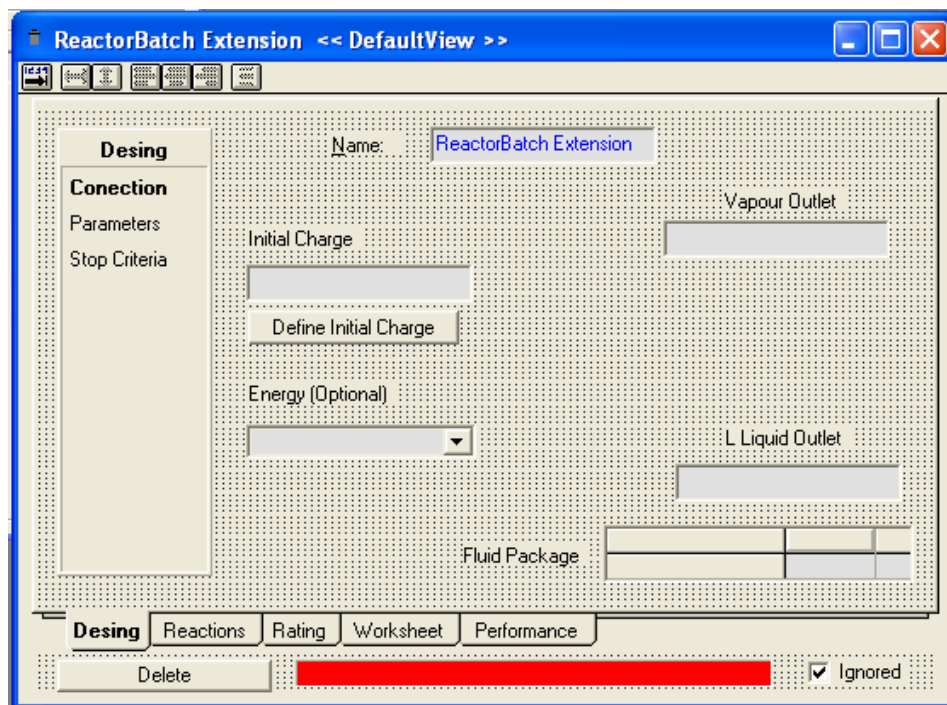


Figura 13. Director de vistas del Extensión View Editor.

### **Definición del objeto**

Para la definición del objeto se debe establecer la conexión de la interfaz con el archivo de código, esto se realiza declarando el nombre del archivo DLL vinculada a este objeto con el mismo nombre que el de registro.

De igual manera se debe especificar el tipo de extensión que se está llevando a cabo, para nuestro caso la extensión es de tipo “*unit operation*”.

### **Variables del objeto**

En esta zona se pueden crear variables que se relacionan con el archivo DLL especificado en la definición del objeto, esto es, variables que van suministrar información entre el archivo de código y el simulador Aspen Hysys 2006. Además estas variables se pueden vincular a los objetos sobre las vistas del equipo.

#### *Declaración de variables*

La declaración de las variables se asemeja a cualquier otro software de programación, estableciendo un nombre para la variable y seleccionando el tipo de variable que se esta definiendo, para esto el Extensión View Editor las clasifica en cinco tipos:

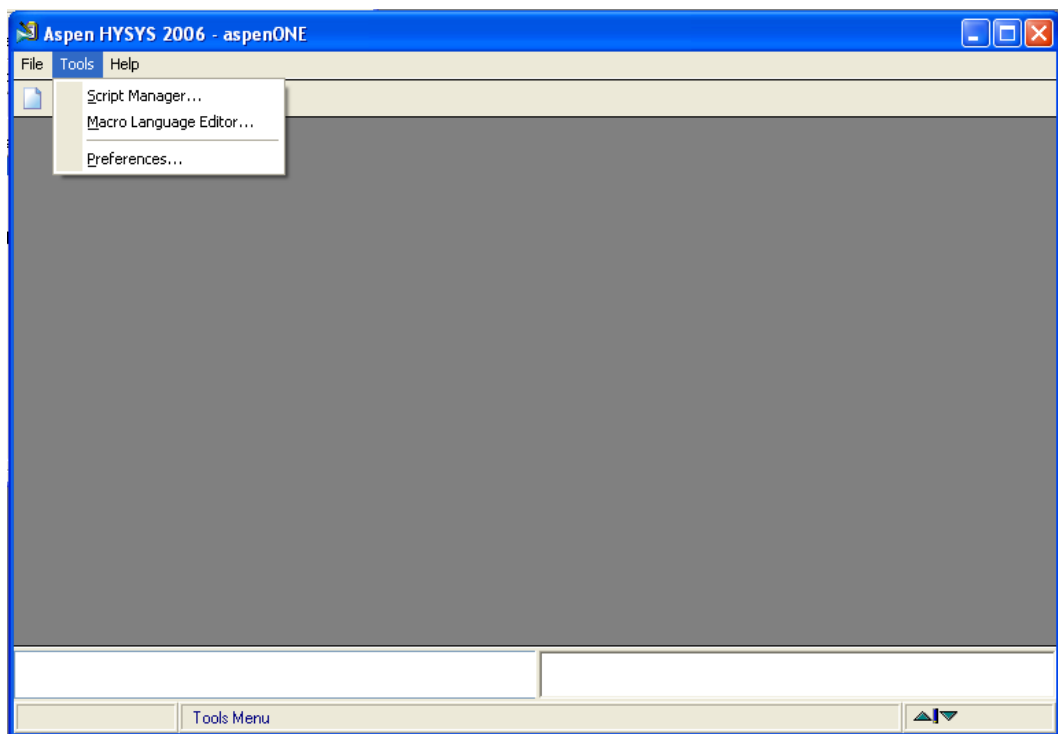
- *Real number*
- *Enumeration*
- *Text*
- *Message*
- *Attachment*

## ANEXO B. INTRODUCCIÓN A LA EXTENSION

La extensión se comporta en el ambiente de Aspen Hysys 2006 como cualquier otra operación presente, pero antes de poder usar el equipo en el simulador se debe registrar el archivo sobre el cual se creó la extensión.

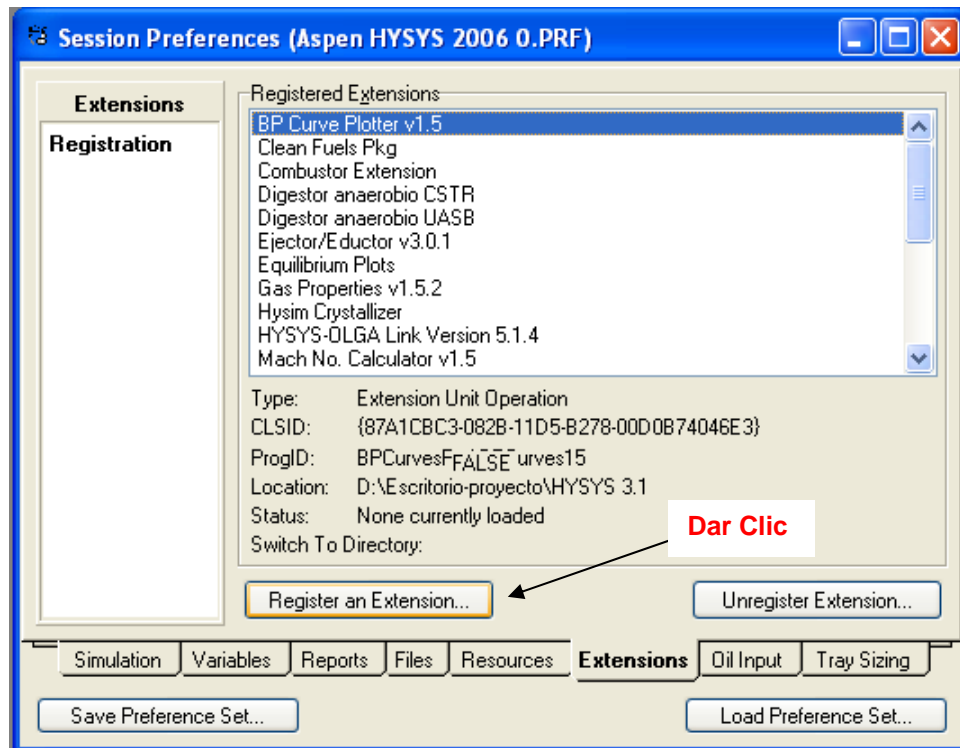
### Registro de la herramienta

La construcción del código creado en Visual Basic para la herramienta a la par con su archivo de integración al ambiente del simulador deben ser registrados a través del menú herramientas (*Tools*) y luego en las preferencias (*Preferences*) de la sesión.



**Figura 14.** Menú *Tools* del simulador Aspen Hysys 2006.

Una vez ubicados en este cuadro de diálogo, se busca la pestaña extensiones donde se realiza el registro del archivo DLL el cual debe estar ubicado en la misma carpeta con el archivo EDF.



**Figura 15.** Preferencias de la sesión del simulador Aspen Hysys 2006.

### **Llamado de los equipos al entorno de HYSYS**

El equipo al ser creado como una extensión no se encuentran en la paleta normal de Aspen Hysys 2006 a diferencia de los equipos que el simulador trae por defecto. Por esta razón su inclusión al PFD, debe realizarse a través del Flowsheet y el comando “add operation” o a través de la tecla de ingreso rápido F12, al ingresar en este campo aparece una ventana que muestra todas las operaciones unitarias que se pueden usar en el caso, para integrar nuestro equipo nos ubicamos en la opción extensiones y seleccionamos el nombre de la extensión para continuar con su carga al caso de simulación. Una vez realizada la

carga de la extensión se puede iniciar el trabajo con esta como con cualquier otra operación existente en HYSYS (ver fig.12)

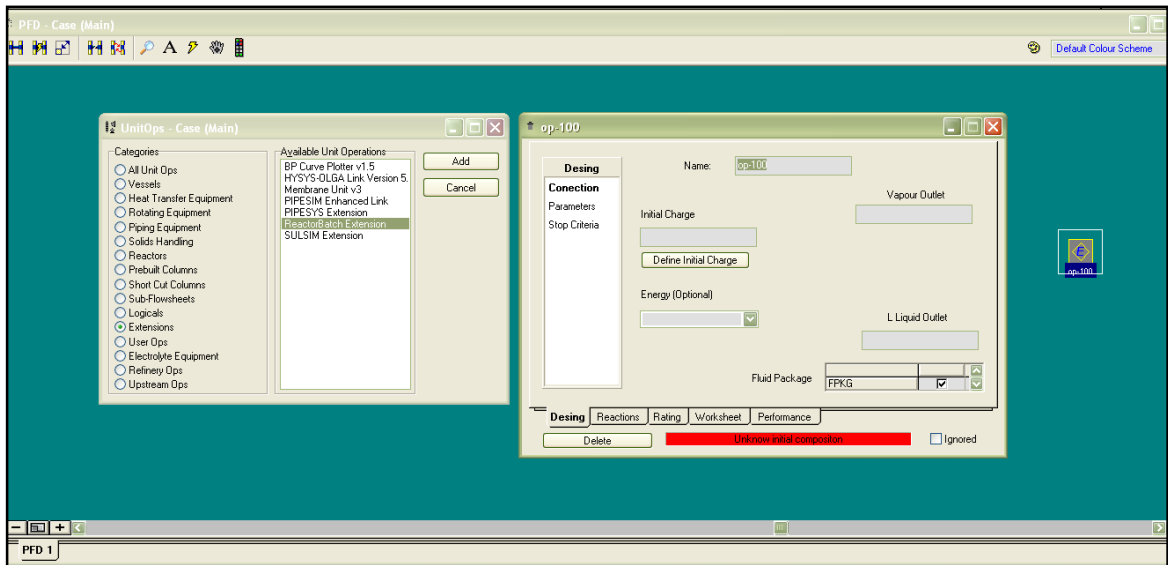


Figura 16. Llamado de la extensión del reactor batch en Aspen Hysys.

## ANEXO C. DESCRIPCION DE LAS PESTAÑAS Y PÁGINAS DE LA HERRAMIENTA

El equipo que se vinculará al simulador Aspen Hysys 2006 a través del modulo desarrollado que tendrá la siguiente estructura.

La extensión cuenta con cinco paletas de selección:

- *Design.*
- *Reactions.*
- *Rating.*
- *Worksheet.*
- *Performance.*

En estas paletas se define información para la operación o se muestran los resultados de la operación como se especificara a continuación.

### 1. **DESIGN**

La paleta *Design* es utilizada para la entrada de datos necesarios para la operación, y posee un submenú especificado por las etiquetas:

- *Connections*
- *Parameters*
- *Stop Criteria*

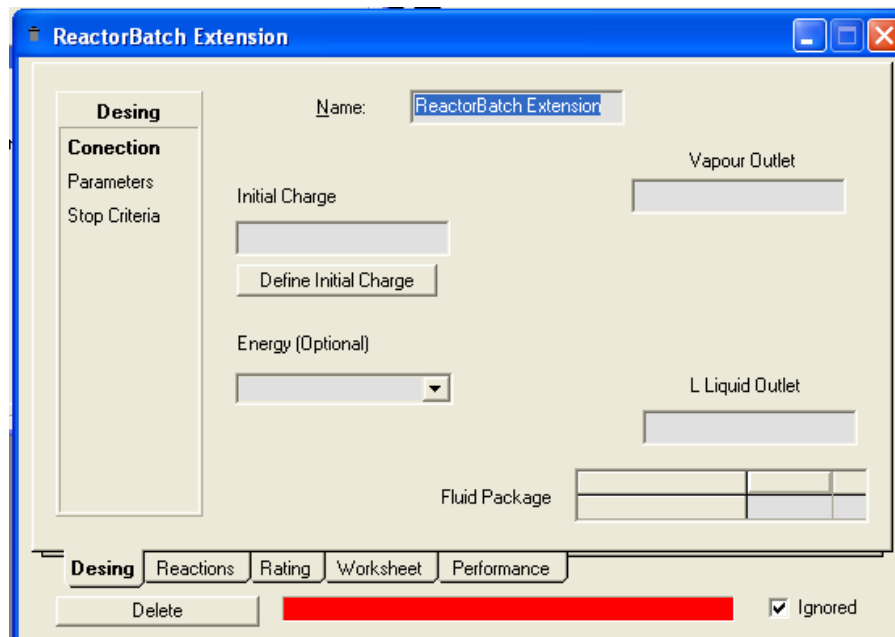


Figura 17. Vista Diseño del reactor batch

**Connections:** En esta etiqueta se especifican las cargas iniciales que se conectan al equipo; una carga inicial la cual a través del botón “*Define Initial Charge*” se puede establecer su composición y dos cargas de salida una de gas y otra de líquido “*Vapour*” y “*Liquid Outlet*” respectivamente, además se presenta el nombre del equipo “Reactor Batch Extensión” (ver fig. 14).

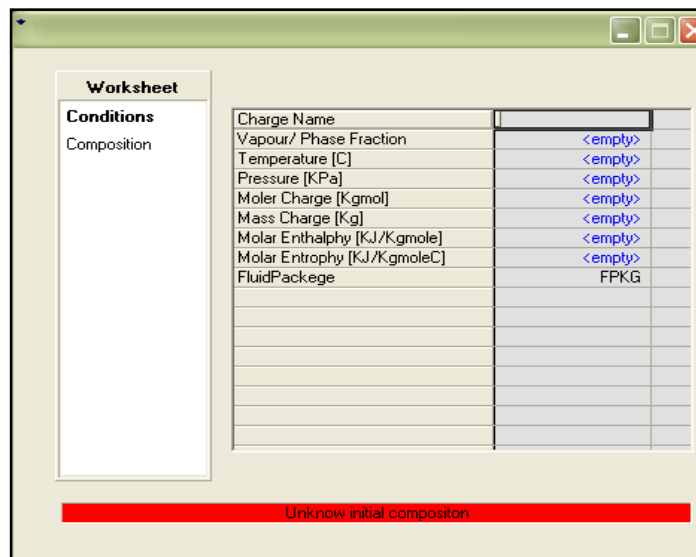


Figura 18. Vista de *Define Initial Charge*

**Parameters:** Esta etiqueta se refiere a parámetros del reactor y condiciones de operación, entre los cuales se encuentran, el volumen del reactor, la temperatura si es constante, y la corriente de energía.

**Stop Criteria:** Esta etiqueta presenta los criterios de parada del reactor, los cuales son tiempo, concentración, temperatura y conversión. Además la tolerancia del método y el paso de impresión de éste. Al asignarse los criterios de parada concentración o conversión automáticamente aparecerán los diferentes compuestos declarados con el paquete de fluidos y las reacciones a tener en cuenta del set de reacciones escogidos.

## 2. REACTIONS

En la paleta *Reactions* se encuentra detalles de la reacción, las especificaciones estequiométricas, y el set de reacciones; el submenú está compuesto por:

- *Details*
- *Results*

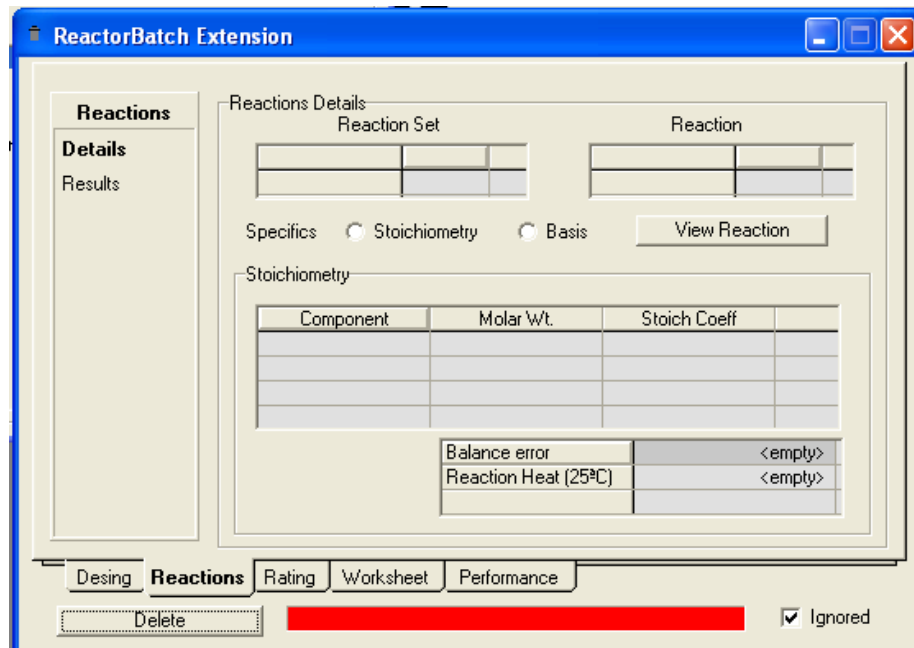


Figura 19. Vista cinéticas del reactor batch.

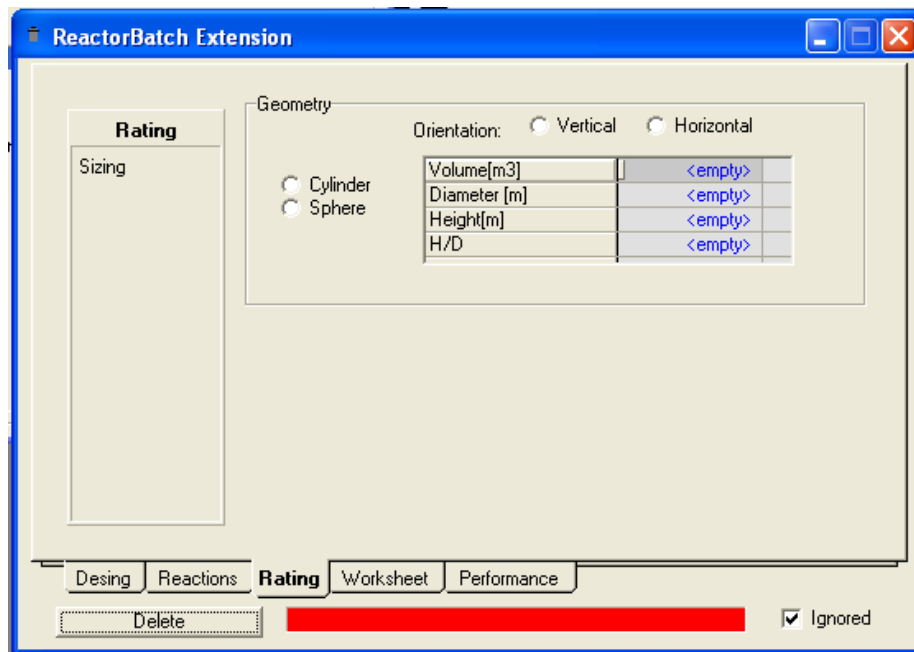
**Details:** Esta etiqueta presenta la estequiometría de la reacción, el *basis* de la reacción en el cual se encuentran registrados las propiedades de cada reacción, y el calor de reacción “*Reaction Heat*”

**Results:** Esta etiqueta presenta el avance de la reacción, el balance molar del reactor y la conversión de cada reacción.

### 3. RATING

En esta paleta se define la geometría y dimensiones de nuestro reactor. El menú de *Rating* es:

➤ *Sizing*



**Figura 20.** Vista de la geometría del reactor batch.

**Sizing:** En esta paleta encontramos los parámetros físicos que tendrán el reactor, la orientación y geometría.

#### 4. WORKSHEET

En esta paleta se registra información sobre las corrientes de entrada y salida de los equipos, el submenú está compuesto por:

- *Conditions*
- *Properties*
- *Composition*

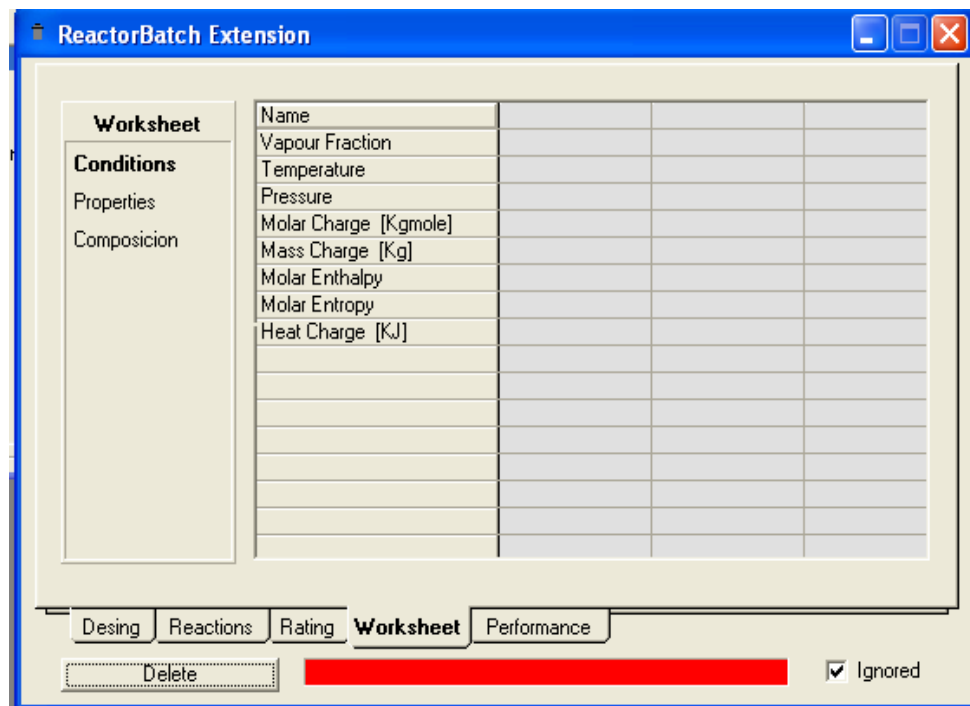


Figura 21. Vista de trabajo del reactor batch.

**Conditions:** Esta página despliega las condiciones de temperatura, presión, composición y demás propiedades de operación de las corrientes conectadas al equipo.

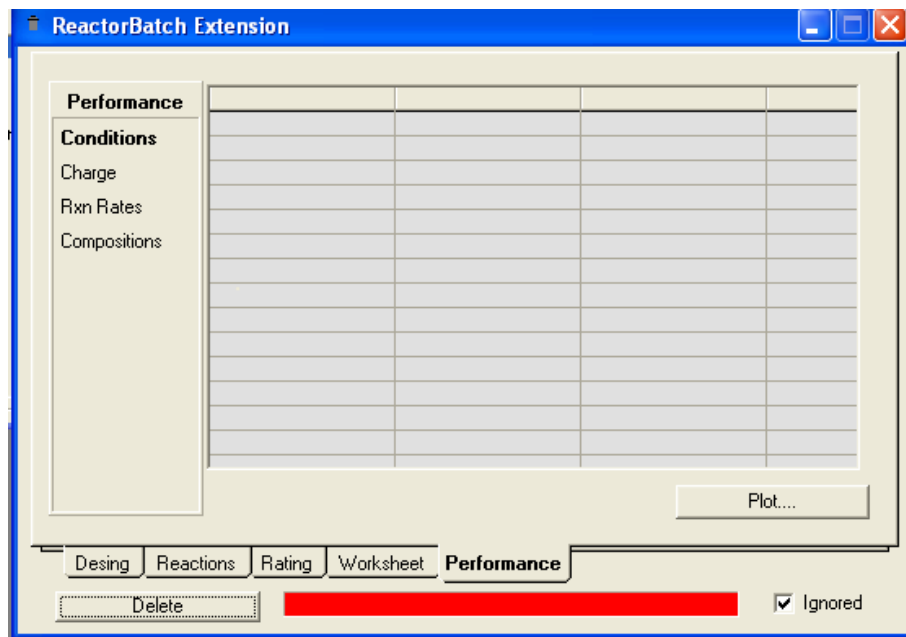
**Properties:** las propiedades de la carga inicial y de las cargas de salida del reactor, tales como el volumen actual, el flujo de calor y la entropía másica.

**Compositions:** La etiqueta *compositions* muestra las composiciones molares tanto de la carga inicial como de las dos corrientes de salida.

## 5. PERFORMANCE

En esta paleta se presenta todos los resultados de las iteraciones de acuerdo al tiempo de impresión que el usuario haya determinado en el stop criteria. El menú correspondiente es:

- *Conditions*
- *Charge*
- *Rxn Rates*
- *Compositions*



**Figura 22.** Vista de los resultados del reactor batch

**Conditions:** En esta sesión están las condiciones del reactor: temperatura, presión, fracción de vapor, entalpia y entropía molar.

**Charge:** En esta sesión se encuentra las variaciones de las cargas molares y másicas del reactor.

**Reactions Rates:** En esta sesión se determina todo lo relacionado con los componentes de la reacción.

**Compositions:** Se encuentra la composición en fracción molar de los componentes de la reacción.