

PRÁCTICA 3: Simulación de reactores

Se desea simular la síntesis de benceno a partir de tolueno. Las estequiometría de las dos reacciones que ocurren son



La corriente de alimentación está definida en la siguiente tabla:

T(°F)	P(psia)	H ₂ (lbmol/hr)	CH ₄ (lbmol/hr)	C ₆ H ₆ (lbmol/hr)	C ₇ H ₈ (lbmol/hr)	C ₁₂ H ₁₀ (lbmol/hr)	Total (lbmol/hr)
1200	494	2045,9	3020,8	46,2	362,0	1,0	5475,9

El reactor es un tubo de acero de 4 ft³ con una relación de aspecto de 6 (longitud/diámetro). El reactor está bien aislado y la pérdida de carga es 5 psi. El método termodinámico a utilizar es el Peng-Robinson.

Se plantean calcular la corriente de salida con los 4 modelos de reactores: RSTOIC, RGIBBS, REQUIL, RPLUG y RCSTR:

Para simular el RSTOIC la conversión del tolueno en la reacción principal se asume 75%. La conversión del benceno (total=en la corriente y el que se crea mediante la reacción principal) =2%.

Para simular RPLUG y RCSTR se aplica la cinética siguiente para la reacción principal (se desprecia la cinética de la reacción lateral al no conocerse la cinética):

$$\frac{dc_{tol}}{dt} = 6,3 \times 10^{10} \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) c_{tol} c_{H_2}^{1/2}; \quad \text{con } E=217,36 \text{ kJ/mol. } c \text{ (kmol/m}^3\text{), } t \text{ (s)}$$

Se pide:

Estudiar los resultados de cada reactor (utilice la tabla que se adjunta abajo), comparando unos con otro e intentando extraer las ventajas e inconvenientes de cada uno de ellos. Valore la predicción de los reactores RSTOIC, REQUIL y RGIBSS comparando los resultados con los reactores cinéticos.

Corriente	T (°F)	P (psia)	H ₂ (lbmol/hr)	CH ₄ (lbmol/hr)	C ₆ H ₆ (lbmol/hr)	C ₇ H ₈ (lbmol/hr)	C ₁₂ H ₁₀ (lbmol/hr)	Total (lbmol/hr)	Conversión Tolueno
Alimen	1200	494	2045,9	3020,8	46,2	362,0	1,0	5475,9	
Prod_STOIC		494					4,177		
Prod_REQUIL		494							
Prod_RGIBBS		494							
Prod_RPLUG		494							
Prod_RCSTR		494							