

Evaluación técnico-económica de reactores químicos homogéneos usando la herramienta computacional Excel

VÁZQUEZ, Rubén*†, ARRIAGA, Ma. Juana, ALCÁNTARA, Ma. Del Consuelo' y MOZALVO, Filemón

Instituto Tecnológico de Pachuca, Felipe Angeles Km. 84.5, Venta Prieta, 42083 Pachuca de Soto, Hgo., México
'Instituto Tecnológico de Querétaro, Av. Tecnológico s/n, Centro, 76000 Santiago de Querétaro, Qro., México

Recibido Octubre 10, 2017; Aceptado Noviembre 17, 2017

Resumen

La facilidad en el uso y accesibilidad de la herramienta computacional Excel, posibilita ser empleada en diferentes campos de la ingeniería. En este trabajo se presenta el análisis de diferentes tipos de reactores químicos homogéneos mediante métodos numéricos, implementados en Excel, para comparar su desempeño tanto operativo como económico. Se estableció un caso de estudio para una reacción química, con sus características termodinámicas y cinéticas, llevando a cabo esta reacción en diferentes tipos de reactores químicos homogéneos. Se emplearon los métodos Runge-Kutta de cuarto orden y Euler para analizar el comportamiento molar, cinético y termodinámico de cada uno de los reactores químicos estudiados. Posteriormente, se evaluaron económicamente estos reactores implicando costos de inversión y de operación, con lo cual se hace el comparativo global. Con el uso de la herramienta Excel se analizaron diferentes variantes al caso base, fortaleciendo su versatilidad mediante diferentes escenarios de resultados. Diversas son las áreas del conocimiento que se aplican: cinética química, termodinámica, métodos numéricos, diseño de equipo y costos, incidiendo todas ellas en el razonamiento del comportamiento fenomenológico de los reactores químicos, contribuyendo con esto a que estudiantes y profesionales de ingeniería química refuercen su conocimiento sobre ingeniería de reactores

Abstract

The ease in using and accessibility of the computational tool Excel, allows it to be used in different engineering fields. In this work, it is presented the analysis of different types of homogeneous chemical reactors through the use of numerical methods implemented in Excel, to compare their performance both operative and economical. It was established a study case for a chemical reaction, with its thermodynamics and kinetics characteristics; it is carried out this reaction in different types of homogeneous chemical reactors. The Runge-Kutta fourth order and Euler methods were used to analyze the molar, kinetic and thermodynamic performance of each chemical reactor studied. Later, these reactors were evaluated economically, involving investment and operation costs, wherewith the global comparation is done. With the use of tool Excel, different variants to the base case are analyzed, strengthening its versatility through different results scenarios. Various areas of the knowledge are applied: chemical kinetic, thermodynamics, numerical methods, equipment design and costs, influencing all of them on the reasoning of the phenomenological behavior of the chemical reactors, contributing to students and chemical engineering professionals reinforce their knowledge about reactors engineering.

Reactor, homogeneous, kinetics, numerical methods

Reactor, homogéneo, cinética, métodos numéricos

Citación: VÁZQUEZ, Rubén, ARRIAGA, Ma. Juana, ALCÁNTARA, Ma. Del Consuelo' y MOZALVO, Filemón. Evaluación técnico-económica de reactores químicos homogéneos usando la herramienta computacional Excel. Revista de Sistemas Experimentales 2017, 4-13: 38-49

*Correspondencia al Autor (Correo electrónico: rvazquezz@itpachuca.edu.mx)

†Investigador contribuyendo como primer autor.

Introducción

Una reacción química es aquella operación unitaria que tiene por objeto distribuir de forma distinta los átomos de ciertas moléculas (reactantes) para formar otras nuevas (productos). El lugar físico donde se llevan a cabo las reacciones químicas se denomina reactor químico, Stephanopoulos (1984).

Los reactores químicos tienen como funciones principales: (1) asegurar el tipo de contacto o modo de fluir de los reactantes en el interior del tanque, para conseguir una mezcla deseada con los materiales reactantes, (2) proporcionar el tiempo suficiente de contacto entre las sustancias y el catalizador, para conseguir la extensión deseada de la reacción y (3) permitir condiciones de presión, temperatura y composición de modo que la reacción tenga lugar en el grado y a la velocidad deseada, atendiendo a los aspectos termodinámicos y cinéticos de la reacción, Peña *et al* (2008).

Las características de no linealidad que presenta el reactor químico, así como su elevado retardo e interacción entre sus entradas y salidas hacen complejo el diseño de su sistema de control. Los objetivos de control son: lograr una conversión adecuada del producto formado, y mantener al sistema operando alrededor de sus condiciones de estado estacionario. Estas condiciones de estado estacionario involucran distintas variables: concentraciones, nivel dentro del tanque, temperaturas, flujos. En este sentido, la conversión se ve reflejada en la concentración del producto, mientras que por otra parte es necesario asegurar, debido a la entrada continua de reactante al tanque, que no se produzca una acumulación tal que el nivel de la mezcla se desborde, Stephanopoulos (1984).

En la ingeniería de la reacción química, la necesidad de conocer el comportamiento de las variables en sistemas dinámicos continuos para su análisis, conduce al desarrollo de programas computacionales que simulen el comportamiento para establecer las condiciones óptimas que den funcionalidad al sistema bajo estudio, debido a que los modelos matemáticos resultantes son un conjunto de ecuaciones diferenciales que relacionan los cambios de variables dependientes con respecto al tiempo, es necesario hacer uso de diferentes métodos de integración numérica, como: Euler, Serie de Taylor, Euler-Gauss, Runge-Kutta de 2° hasta 6° orden, de acuerdo con Almanza *et al* (2016) el método de Runge-Kutta es el más viable de ser empleado por su mayor precisión y exactitud.

En el trabajo de Beltrán *et al* (2016), el modelo matemático se basa en los balances de continuidad, energía y momento del reactor, están en la capacidad de analizar cualquiera de las variables que afectan de manera directa el proceso como son: composición de alimentación, el flujo másico y presión, la temperatura de alimentación se rige por criterios de estabilidad del proceso real, dicho modelo se apoya en ecuaciones constitutivas que complementan de manera significativa el rendimiento del mismo y están provistos con una amplia gama de expresiones cinéticas y termodinámicas.

Indica también que la aplicación de métodos numéricos para la solución del modelo matemático, los cuales se basan en ecuaciones diferenciales, es clave importante, proponiendo al método Runge Kutta-Gill, y varias rutinas iterativas, como el método numérico que más se ajusta a los resultados esperados, implementados en Microsoft Excel como herramienta de programación y diseño.

Ahumada *et al* (2017), llevaron a cabo la comparación entre diferentes soluciones numéricas para un modelo matemático de combustión teórica y la variación de la conductividad del cuesco de palma en un reactor de lecho fijo descendente mediante combinaciones entre los esquemas compactos (EC) de diferencias finitas (DF) de orden 2, 4 y 6 y los métodos de integración de Runge-Kutta (RK) para $n=1,2$ y 4. Los resultados obtenidos mostraron que la aproximación obtenida bajo los EC y el método de integración RK, ambos de orden 4, fueron las más cercanas al punto de referencia analizado.

Builes, S., & Calle, F. mencionan que es posible encontrar en la literatura una gran cantidad de simulaciones hechas con reactores tipo tanque agitado, por ejemplo, el simulador ModelMaker de la empresa Cherwell Scientific Publishing Ltd que emplea un método de Runge Kutta de paso variable como opción predeterminada.

Este artículo presenta la metodología para realizar la evaluación técnica-económica de reactores homogéneos, con ayuda de la herramienta computacional Excel, con enfoque hacia la parte didáctica en esta área de estudio de la Ingeniería Química.

Se toma un caso base para el análisis, lo cual permite comparar el comportamiento de diversos reactores homogéneos.

El uso de la herramienta Excel posibilita el análisis de este tipo de reactores de una manera relativamente sencilla, con la ventaja que esta metodología pueda ser desarrollada y trabajada por los elementos relacionados con esta área del conocimiento.

Para el caso base se considera una reacción homogénea en fase líquida, con análisis en los reactores químicos: (i) Reactor de flujo pistón (PFR, por sus siglas en inglés) multitubular, y (ii) Reactor batch. Los métodos numéricos empleados son Runge-Kutta de cuarto orden (RK-4) y Euler.

Hipótesis

El análisis técnico-económico permitirá determinar el tipo de reactor más conveniente a trabajar, para un caso base.

Metodología

En la primera sección se caracteriza el caso base, especificando completamente el tipo de reacción, las condiciones iniciales, la condición esperada al término de la operación, y las condiciones operacionales.

En la segunda sección se obtiene el modelo matemático para el análisis técnico, y se presentan los elementos para el análisis económico.

En la tercera sección se especifican las características del análisis técnico, empleando el método de Runge-Kutta de cuarto orden y el método de Euler, en la solución del modelo matemático.

En la cuarta sección se presentan los elementos para llevar a cabo el análisis económico, considerando tanto los costos de inversión, como los costos operacionales.

En la quinta sección se muestran los resultados, tanto del análisis técnico, como del análisis económico.

Finalmente, en la sexta sección se tienen las conclusiones derivadas del análisis técnico-económico.

Caso base

El caso consiste en una reacción homogénea en fase líquida de segundo orden con respecto a A, con las siguientes características:



Concentración inicial de los reactivos A y B, 1.65 mol/L y 5.5 mol/L, respectivamente

Temperatura de alimentación 315 K, para ambos reactivos

Flujo volumétrico total 14.4 L/min

Coefficiente cinético $k_A = 5.044 \times 10^9 e^{(-10,270/T)}$ L/mol•seg, con T en K

Calor de reacción $-\Delta H_{Rxn} = 36.35$ KJ/mol.

Capacidad calorífica de las especies A, B y C, en J/mol•K: 138.5, 117.5 y 95, respectivamente

Coefficiente global de transferencia de calor entre el sistema de reacción y el fluido de servicio: 32.3 Watts/m²•K

Temperatura promedio de los alrededores :K. Conversión esperada para el reactivo A 303 %70

Reactor multitubular de flujo pistón

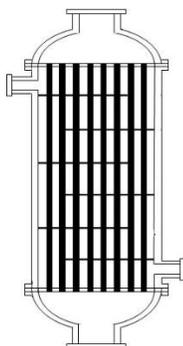


Figura 1 Reactor multitubular de flujo pistón

Configuración de tubos y coraza 1-1, con 274 tubos de tubería IPS de 1 ½ pulg., Ced. 40, en arreglo triangular con paso de 1 7/8 pulg.
Reactor batch



Figura 2 Reactor batch

Tanque de 0.78 m de diámetro y 2.39 m de altura, para la mezcla de reacción.

Modelamiento para los reactores

Se presenta el modelamiento de los tipos de reactores considerados, involucrando el balance molar, el balance de energía y el cálculo de costos.

Expresión de la velocidad de reacción con base en el reactivo A,

$$-r_A = k_A C_{A0}^2 (1 - X_A) \left(\frac{C_{B0}}{C_{A0}} - X_A \right) \quad (1)$$

Transferencia de calor entre el sistema de reacción y el sistema de enfriamiento (agua),

$$\dot{Q} = U A (T - T_a) \quad (2)$$

Modelamiento reactor multitubular de flujo pistón

El reactor de flujo pistón es un reactor continuo de geometría multitubular, en configuración de tubos y coraza 1-1, por el interior de los tubos circula la mezcla de reacción mientras que por el lado de la coraza circula el fluido de servicio.

Cada uno de los tubos es un reactor tubular.

El modelamiento para este tipo de reactor es el siguiente:

Balance molar,

$$\frac{dV}{dX_A} = \frac{v_0}{k_A C_{A0}(1-X_A) \left(\frac{C_{B0}}{C_{A0}} - X_A \right)} \quad (3)$$

Balance de energía,

$$\frac{dT}{dX_A} = \frac{U \left(\frac{4}{d} \right) (T_a - T) \frac{dV}{dX_A} + \left(-\Delta \hat{H}_{Rxn} \right) F_{A0}}{\sum_{j=1}^n F_j C_{p_j}} \quad (4)$$

Área de transferencia de calor,

$$A_{PFR} = N_t, A_{tubo} = N_t (\pi d_{tubo} L_{tubo}) = N_t \frac{4V_{tubo}}{d_{tubo}} \quad (5)$$

Modelamiento reactor batch

El modelamiento para este tipo de reactor es el siguiente:

Balance molar,

$$\frac{dt}{dX_A} = \frac{1}{k_A C_{A0}(1-X_A) \left(\frac{C_{B0}}{C_{A0}} - X_A \right)} \quad (6)$$

Balance de energía,

$$\frac{dT}{dX_A} = \frac{U A (T_a - T) \frac{dt}{dX_A} + \left(-\Delta \hat{H}_{Rxn} \right) N_{A0}}{\sum_{j=1}^n N_j C_{p_j}} \quad (7)$$

Área de transferencia de calor,

$$A_{Batch} = \pi d_{tqe} h_{tqe} \quad (8)$$

Volumen de la mezcla de reacción

$$V_{Batch} = \pi \frac{(d_{tqe})^2}{4} h_{tqe} \quad (9)$$

Métodos numéricos

Los métodos numéricos empleados son Runge-Kutta de cuarto orden y Euler (Constantinides, 1999), esto con el propósito de presentar el comparativo de los resultados obtenidos con estos métodos.

Es importante puntualizar que el sistema a resolver, por medio de métodos numéricos, es un sistema de ecuaciones diferenciales simultáneas. Para el reactor multitubular de flujo pistón, la variable independiente es la conversión del reactivo A y las variables dependientes son el volumen del reactor y la temperatura de la mezcla de reacción. Para el reactor batch, la variable independiente es la conversión del reactivo A y las variables dependientes son el tiempo de reacción y la temperatura de la mezcla de reacción. El paso de integración (h) empleado para la conversión de A (X_A) es 0.05

Método de Runge-Kutta de cuarto orden

El modelo matemático a ser resuelto es,

$$y_{i+1,j} = y_{ij} + \frac{1}{6} (k_{1j} + 2k_{2j} + 2k_{3j} + k_{4j}) \quad (10)$$

$$k_{1j} = h f_j (x_i, y_{i1}, y_{i2}) \quad (11)$$

$$k_{2j} = h f_j \left(x_i + \frac{h}{2}, y_{i1} + \frac{k_{11}}{2}, y_{i2} + \frac{k_{12}}{2} \right) \quad (12)$$

$$k_{3j} = h f_j \left(x_i + \frac{h}{2}, y_{i1} + \frac{k_{21}}{2}, y_{i2} + \frac{k_{22}}{2} \right) \quad (13)$$

$$k_{4j} = h f_j (x_i + h, y_{i1} + k_{31}, y_{i2} + k_{32}) \quad (14)$$

$$x_{i+1} = x_i + h \quad (15)$$

Método de Euler

El modelo matemático a ser resuelto es,

$$y_{i+1,j} = y_{ij} + h f_j (x_i, y_{i1}, y_{i2}) \quad (16)$$

$$x_{i+1} = x_i + h \quad (17)$$

Análisis económico

Los costos básicos de inversión consideran el costo del equipo (C_{LAB}) libre a bordo mientras que para los costos de operación sólo se consideran los costos del servicio de enfriamiento, empleando agua.

Para el reactor multitubular de flujo pistón, su C_{LAB} corresponde al de un intercambiador de calor de tubos y coraza, mientras que para el reactor batch sólo se considera un tanque de proceso.

Resultados

Los resultados obtenidos se presentan de forma tabular y de forma gráfica

Análisis técnico

Se presentan los resultados para el reactor multitubular de flujo pistón y para el reactor batch.

Reactor multitubular de flujo pistón

En la tabla 1 se presentan los resultados para cada uno de los tubos, obtenidos por medio del método de Runge-Kutta de cuarto orden, mientras que en la tabla 2 se presentan los resultados obtenidos por medio del método de Euler.

X_A	Volumen L	Temperatura K	Flujo de calor J/seg
0.0	0.0	315.00	
0.05	0.2	315.5	7.64
0.10	0.5	315.8	8.04
0.15	0.7	315.9	8.51
0.20	1.0	315.7	9.07
0.25	1.3	315.2	9.75
0.30	1.6	314.2	10.53
0.35	2.1	312.7	11.34
0.40	2.6	310.7	11.87
0.45	3.5	308.3	11.60
0.50	4.6	306.4	10.43
0.55	6.1	305.3	9.41
0.60	8.0	304.7	8.98
0.65	10.3	304.4	8.86
0.70	13.1	304.2	9.25

Tabla 1 Resultados para el reactor multitubular de flujo pistón, obtenidos por medio del método Runge-Kutta de cuarto orden.

De acuerdo con los resultados obtenidos,

$$A_{PFR, RK4} = 274 \text{ tubos} \frac{4 (0.0483 \text{ m}) \left(\frac{13.1 \text{ L/tubo}}{1,000 \text{ L/m}^3} \right)}{(0.0409 \text{ m})^2} = 415 \text{ m}^2$$

X_A	Volumen L	Temperatura K	Flujo de calor J/seg
0.0	0.0	315.0	
0.05	0.2	315.5	7.64
0.10	0.4	316.0	7.95
0.15	0.7	316.2	8.31
0.20	0.9	316.2	8.73
0.25	1.2	315.9	9.22
0.30	1.5	315.3	9.77
0.35	1.9	314.2	10.33
0.40	2.3	312.4	10.75
0.45	2.8	310.0	10.56
0.50	3.6	307.1	8.92
0.55	4.9	304.8	6.22
0.60	6.7	304.7	8.44
0.65	8.7	304.2	7.04
0.70	11.3	304.3	8.98

Tabla 2 Resultados para el reactor multitubular de flujo pistón, obtenidos por medio del método Euler.

De acuerdo con los resultados obtenidos,

$$A_{PFR,Euler} = 274 \text{ tubos} \frac{4 (0.0483 \text{ m}) \left(\frac{11.29 \text{ L/tubo}}{1,000 \text{ L/m}^3} \right)}{(0.0409 \text{ m})^2} = 358 \text{ m}^2$$

De manera complementaria, en el gráfico 1 se presenta el comportamiento del volumen del reactor con respecto a la conversión del reactivo A, con resultados obtenidos por medio de los métodos Runge-Kutta de cuarto orden y Euler. Mientras que en el gráfico 2 se presenta el comportamiento de la temperatura de la mezcla de reacción con respecto a la conversión del reactivo A, con resultados obtenidos por medio de los métodos Runge-Kutta de cuarto orden y Euler.

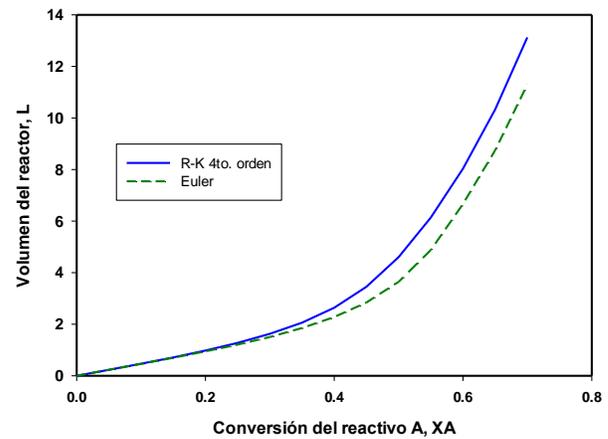


Gráfico 1 Volumen del reactor multitubular de flujo pistón como función de la conversión del reactivo A

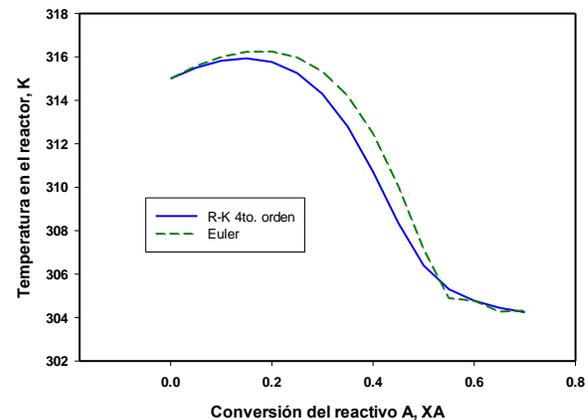


Gráfico 2 Temperatura de la mezcla de reacción en el reactor multitubular de flujo pistón como función de la conversión del reactivo A

Reactor Batch

El área para transferencia de calor es,

$$A_{Batch} = \pi (0.55 \text{ m})(1.65 \text{ m}) = 3.37 \text{ m}^2$$

El volumen de la mezcla de reacción es,

$$V_{Batch} = \pi \frac{(0.55 \text{ m})^2}{4} (1.65 \text{ m}) = 0.39 \text{ m}^3$$

En la tabla 3 se presentan los resultados obtenidos por medio del método de Runge-Kutta de cuarto orden, mientras que en la tabla 4 se presentan los resultados obtenidos por medio del método de Euler.

X_A	Tiempo seg	Temperatura K	Flujo de calor J/seg
0.0	0	315.0	
0.05	232	317.9	2,788.07
0.10	418	320.8	3,336.29
0.15	566	323.8	3,899.37
0.20	685	326.9	4,479.42
0.25	780	330.0	5,077.73
0.30	856	333.3	5,695.07
0.35	917	336.7	6,331.81
0.40	966	340.2	6,988.03
0.45	1,005.5	343.8	7,663.65
0.50	1,037.5	347.5	8,358.46
0.55	1,063.7	351.3	9,072.22
0.60	1,085.4	355.2	9,804.65
0.65	1,103.5	359.2	10,555.45
0.70	1,118.9	363.3	11,324.32

Tabla 3 Resultados para el reactor batch, obtenidos por medio del método Runge-Kutta de cuarto orden

X_A	Tiempo seg	Temperatura K	Flujo de calor J/seg
0.0	0	315.0	
0.05	260.1	317.8	2,783.61
0.10	468.0	320.7	3,325.25
0.15	634.5	323.7	3,880.20
0.20	768.2	326.7	4,450.97
0.25	875.6	329.9	5,039.19
0.30	961.9	333.1	5,645.88
0.35	1,031.5	336.4	6,271.62
0.40	1,087.5	339.9	6,916.66
0.45	1,132.9	343.4	7,581.03
0.50	1,169.8	347.0	8,264.62
0.55	1,199.9	350.8	8,967.23
0.60	1,224.8	354.6	9,688.63
0.65	1,245.5	358.6	10,428.53
0.70	1,263.1	362.6	11,186.65

Tabla 4 Resultados para el reactor batch, obtenidos por medio del método Euler

Igualmente, en el gráfico 3 se presenta el comportamiento del tiempo de reacción con respecto a la conversión del reactivo A, con resultados obtenidos por medio de los métodos Runge-Kutta de cuarto orden y Euler.

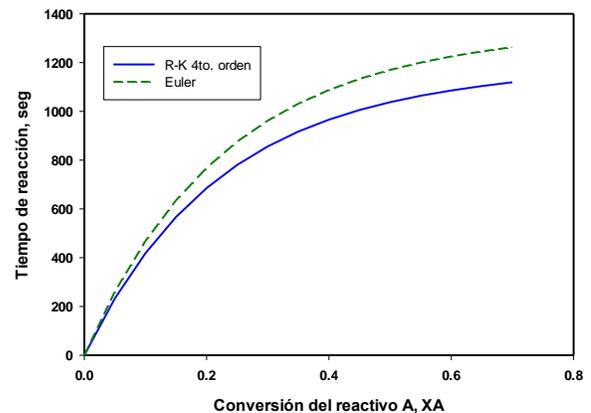


Gráfico 3 Tiempo de reacción en el reactor batch como función de la conversión del reactivo A

Adicionalmente, en el gráfico 4 se presenta el comportamiento de la temperatura de la mezcla de reacción con respecto a la conversión del reactivo A, con resultados obtenidos por medio de los métodos Runge-Kutta de cuarto orden y Euler.

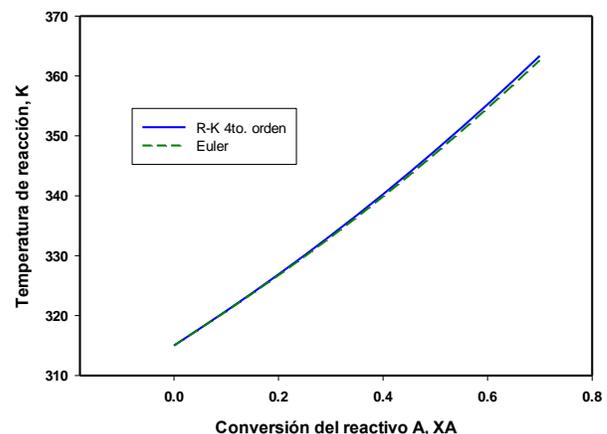


Gráfico 4 Temperatura de la mezcla de reacción en el reactor batch como función de la conversión del reactivo A

Análisis económico

El costo del equipo libre a bordo se calcula mediante (Turton *et al*, 2007),

$$\log_{10} C_{LAB} = K_1 + K_2 \log_{10}(P_C) + K_3 [\log_{10}(P_C)]^2 \quad (18)$$

Los parámetros presentados corresponden a costos para el año 2001 con índice de costo 394.3

Los parámetros y costos de inversión para los dos tipos de reactores son,

Reactor multitubular

El parámetro de diseño (parámetro de capacidad) para el costo de equipo libre a bordo es el área de transferencia de calor.

Costo de equipo

$K_1 = 2.7652$ / $K_2 = 0.7282$ / $K_3 = 0.0783$
 $P_C = 354 \text{ m}^2$ (empleando el método de Runge-Kutta de cuarto orden)

$$C_{LAB,2001} = \$ 161,564.00$$

$P_C = 305 \text{ m}^2$ (empleando el método de Euler)

$$C_{LAB,2001} = \$ 136,658.00$$

Reactor batch

El parámetro de diseño (parámetro de capacidad) para el costo de equipo libre a bordo es el volumen del equipo.

$K_1 = 3.4974$ / $K_2 = 0.4485$ / $K_3 = 0.1074$

$$P_C = 1.13 \text{ m}^3$$

$$C_{LAB,2001} = \$ 3,323.00 \text{ (Batch)}$$

Costo por servicio de enfriamiento

Para el costo por servicio anual por servicio de enfriamiento, se emplean los datos reportados (Turton *et al*, 2007), considerando 8,120 horas de operación al año.

El costo del servicio de enfriamiento es 0.354 \$/GJ.

Reactor multitubular de flujo pistón

Considerando los valores de flujo de calor intercambiado mostrados en las tablas 1 y 2, se calcula el costo anual.

Método de Runge-Kutta de cuarto orden

Costo de servicio = \$ 384.00/año

Método de Euler

Costo de servicio = \$ 349.00/año

Reactor Batch

Considerando los valores de flujo de calor intercambiado mostrados en las tablas 3 y 4, se calcula el costo anual.

Método de Runge-Kutta de cuarto orden

Costo de servicio = \$ 987.00/año

Método de Euler

Costo de servicio = \$ 978.00/año

Costo total anual

Para el costo anual se considera el costo anual del equipo, considerando una vida útil de 10 años para el equipo, más el costo anual de servicios, por medio de,

$$\text{Costo anual} = \frac{\text{Costo de equipo}}{\text{Vida útil}} + \text{Costo de servicios} \quad (19)$$

El ajuste de los costos del año 2001 al año 2016 se realiza por medio de los Índices de costos para estos años, por medio de,

$$\text{Costo anual}_{2016} = \text{Costo anual}_{2001} \left(\frac{I_{2016}}{I_{2001}} \right) \quad (20)$$

Los índices de costos son: $I_{2001} = 394.3$; $I_{2016} = 541.7$ (Economic Indicators, 2017)

Tomando en cuenta los valores de los costos calculados se tiene,

Reactor multitubular de flujo pistón

Método de Runge-Kutta de cuarto orden

$$\text{Costo anual}_{2001} = \$ 16,541.00$$

$$\text{Costo anual}_{2016} = \$ 22,725.00$$

Método de Euler

$$\text{Costo anual}_{2001} = \$ 14,015.00$$

$$\text{Costo anual}_{2016} = \$ 19,254.00$$

Reactor Batch

Método de Runge-Kutta de cuarto orden

$$\text{Costo anual}_{2001} = \$ 1,320.00$$

$$\text{Costo anual}_{2016} = \$ 1,813.00$$

Método de Euler

$$\text{Costo anual}_{2001} = \$ 1,311.00$$

$$\text{Costo anual}_{2016} = \$ 1,801.00$$

Nomenclatura

A	Área de transferencia de calor
C_{A0}	Concentración inicial del reactivo A
C_{B0}	Concentración inicial del reactivo B
C_{LAB}	Costo del equipo libre a bordo
C_p	Capacidad calorífica
d	Diámetro
d_o	Diámetro exterior
F_{A0}	Flujo molar inicial de A
F_j	Flujo molar de la especie j
h	Paso de integración
h	Altura
I	Índice de costos
k_A	Coefficiente cinético para A
k_{ij}	Constante para el método Runge Kutta de cuarto orden
L	Longitud
N_{A0}	Número de moles iniciales de A
N_j	Número de moles de la especie j
N_t	Número de tubos
P_C	Parámetro de capacidad
Q	Flujo de calor
$-r_A$	velocidad de reacción con respecto al reactivo A

t	Tiempo
T	Temperatura
T_a	Temperatura de los alrededores
U	Coefficiente global de transferencia de calor
V	Volumen
X_A	Conversión del reactivo A
y_{ij}	Variable dependiente para los métodos Runge Kutta de cuarto orden y Euler
<i>Letras griegas</i>	
ΔH	Calor de reacción
v	Flujo volumétrico

Subíndices

R_{xn} Reacción

h_{qe} Tanque

Conclusiones

Dos son los aspectos generales que enfatizar, de acuerdo con los resultados obtenidos.

Con respecto al análisis técnico, para el reactor multitubular de flujo pistón, el % de error relativo en los parámetros calculados por medio del método de Euler con respecto al método RK-4 es: para el volumen del reactor 13.75% y para la temperatura 0.03%. Para el reactor batch el % de error relativo es: para el tiempo de reacción 12.9% y para la temperatura 0.19%.

Con respecto al análisis económico, el costo anual del reactor multitubular de tipo flujo pistón es poco mas de 12.5 veces mayor que el costo del reactor batch.

Considerando los aspectos anteriores, se concluye que el reactor batch es el reactor más conveniente para este sistema de reacción.

Referencias

Ahumada, L. M., Audivet, C. P., Bula, A. J., & Sanjuan, M. E. (2017). Comparación entre Soluciones Numéricas de un Modelo Matemático de Combustión Teórica y Variación de la Conductividad del Cuesco de Palma en un Reactor de Lecho Fijo. *Información tecnológica*, 28(3), pp. 171-184.

Almanza Villanueva, J., Aragón Sibaja, M., Caro González, F., Segoviano Aguilar, M., & Solís Rosales, J. (2016). Desarrollo de un programa para la simulación de sistemas dinámicos continuos. Recuperado de <http://tesis.ipn.mx:8080/xmlui/handle/123456789/16256>

Beltrán Ramírez, M. F., Gutiérrez Castro, I. D. C., & Martínez Villa, A. J. (2016). Modelamiento matemático y simulación de un reactor de lecho fijo para la síntesis de amoniaco. Builes, S., & Calle, F. *Retromezcla: Simulador Dinámico de Reactores de Tanque Agitado*

Constantinides, A. & Mostoufi, N. (1999). *Numerical Methods for Cheical Enginners with MATLAB Applications*. New Jersey. Prentice-Hall.

Economic Indicators. *Chemical Engineering J.*, p66, August 2017.

Peña, E., Pérez, A., Miranda, A., & Sánchez, J. (2008, diciembre). Modelado de un reactor químico tipo CSTR y evaluación del control predictivo aplicando Matlab-Simulink. *INGENIERÍA UC*, 15(3), pp. 97-115.

Stephanopoulos, George (1984). *Chemical Process Control (An Introduction to Theory and Practice)*. New Jersey, U.S.A. Prentice Hall.

Turton, R., Bailie, R. C., Whiting, W. B. & Shaeiwitz, J. A. (2007). Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes. 2nd. Edition. New Jersey. Prentice-Hall.