
3 MODELO DE SIMULACIÓN

3.1 NECESIDAD DE UN SIMULADOR DINÁMICO

Debido a las numerosas singularidades presentes en los procesos de oxidación en agua supercrítica, el modelado de estos sistemas se antoja una tarea difícil a la que no se puede hacer frente con los simuladores comerciales existentes, Aspen Plus, ProSim, etc. Hasta el momento, han sido muchos los investigadores que se han centrado en estudiar el comportamiento de diferentes tipos de residuos orgánicos en reactores de OASC, determinando los perfiles de temperaturas y de concentración que se obtienen en función del tipo de residuo alimentado y según las variables de operación, pero todos han sido realizados en condiciones de régimen estacionario. Sin embargo, es muy escasa la producción científica sobre el comportamiento de reactores de OASC en régimen transitorio, existiendo únicamente los trabajos llevados a cabo por *P. Dutournié* [93], [94] y [95].

En estos trabajos *P. Dutournié* estudia el comportamiento de un reactor tubular que trabaja con fluidos reactivos en condiciones cercanas al punto crítico, en régimen transitorio y estacionario. El modelo construido ha sido validado con pruebas experimentales en régimen estacionario y permite conocer el comportamiento térmico del reactor. Mediante la obtención de los perfiles de velocidad, temperaturas y concentraciones, identifica cuales las condiciones de operación estable y críticas para el funcionamiento del reactor. Además estudia el comportamiento del sistema frente a variaciones de parámetros de operación como el caudal alimentado, la temperatura de entrada o la concentración de residuo y llega a simular posibles situaciones de peligro en condiciones no estacionarias, como puede ser el mal funcionamiento de una bomba, la dilución del residuo alimentado o los procesos de arranque.

Ante esta situación, surge la necesidad de construir un simulador en estado transitorio para un reactor de OASC de tipo tubular, que nos permita llevar a cabo estudios más exhaustivos de su funcionamiento hasta llegar a condiciones estacionarias. Abriéndose un nuevo campo de posibilidades para el estudio de etapas del proceso dependientes del tiempo tales como los procesos de arranque, las inyecciones de agua de atemperación y la presencia de perturbaciones en el porcentaje de residuo inicial o la temperatura de entrada, etc.

En el presente capítulo, se explica detalladamente el planteamiento del simulador transitorio que se va a construir a partir de un modelo unidimensional cuyo comportamiento es descrito por las ecuaciones de flujo, en la que se tienen en cuenta una serie de hipótesis que serán justificadas adecuadamente. De esta forma, a continuación se exponen las propiedades de las mezclas supercríticas que se han usado, las ecuaciones de gobierno que rigen el comportamiento tanto de la dinámica de fluidos, como de la transferencia de calor a través de la tubería y el aislante, la ecuación de la cinética

química empleada y las correlaciones utilizadas en el cálculo del coeficiente de película interno en condiciones supercríticas.

Una vez descrito el modelo de simulación, en próximos capítulos se entra en explicar con mayor detalle la estrategia planteada para la obtención de una solución integrada, los pasos a seguir, los modelos que la conforman, etc. y finalmente, para mostrar las potencialidades y virtudes del modelo construido, se mostrarán algunas aplicaciones enfocadas al estudio de procesos dependientes del tiempo, como puede ser el arranque, el aumento repentino del porcentaje o la temperatura del residuo que se alimenta o las inyecciones de agua de atemperación.

3.2 MEZCLAS DE FLUIDOS EN CONDICIONES SUPERCRÍTICAS

Las propiedades de las sustancias puras presentes en el modelo se han tomado del software EES (Engineering Equation Solver), donde pueden ser evaluadas como gases ideales, obtenidas a partir de las tablas de referencia JANAF, o como gases reales, obteniéndose a partir de precisas ecuaciones de estado que suministran información en todas las condiciones, incluyendo el punto crítico y la región subenfriada

En este trabajo, debido a la elevada presión de operación, en torno a 250 bar, cada sustancia pura ha sido tratada como un fluido real, evaluada a una presión y temperatura. De esta forma, según las condiciones de operación en cada instante, se obtiene el valor de la propiedad para cada sustancia pura.

$$B_j = f(p, T) \quad (1)$$

Para obtener las propiedades de la mezcla, se ha tenido en cuenta que esta formada mayoritariamente por agua en un porcentaje en masa siempre mayor al 85%, calculando sus propiedades según la media de masas de las sustancias puras que la componen.

$$B_i(p, T) = \frac{\sum \dot{m}_j \cdot B_{ij}(p, T)}{\sum \dot{m}_j} \quad (2)$$

donde B_{ij} es la propiedad i de la especie pura j evaluada a una presión p y una temperatura T , y \dot{m}_j es el gasto másico de cada especie j .

Previamente a establecer este criterio, se llevó a cabo un estudio comparativo para evaluar las propiedades de mezcla obtenidas de la forma anteriormente expuesta frente a las propiedades de mezcla resultantes de aplicar reglas de mezclado más precisas y acordes a las condiciones de trabajo del sistema. Para este último cálculo se hizo uso del software Simulis® Thermodynamics de ProSim que permite el cálculo de propiedades para mezclas multicomponente. La comparación se ha llevado a cabo para diferentes fracciones másicas de una mezcla agua-nitrógeno, que son los componentes mayoritarios de la mezcla objeto de estudio ya que representan más del 96% en masa.

En la **Fig. 34** se pueden observar la variación de la entalpía de la mezcla en función del porcentaje másico de agua presente, para una presión constante de 250bar. Como se observa, al

disminuir el porcentaje de agua en la mezcla y aumentar el del nitrógeno, la temperatura crítica también disminuye.

También se puede observar cómo la diferencia de magnitud entre la sustancia pura y la mezcla se incrementa notablemente en la zona supercrítica donde la entalpía de la mezcla agua-nitrógeno es un 14% menor que la del agua pura.

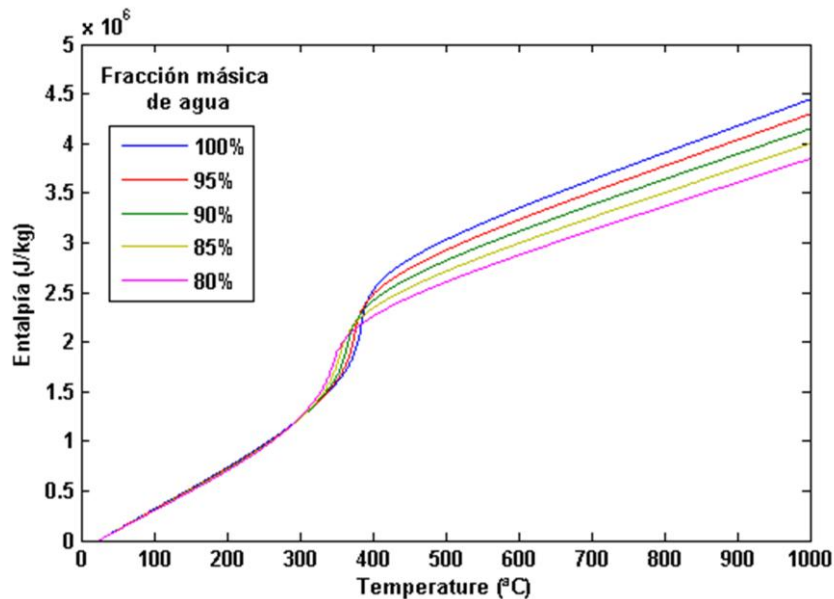


Fig. 34. Variación de la entalpía de mezcla según la fracción de agua.

Por tanto, de la figura anterior concluimos que cuando trabajamos en fase supercrítica, no es una buena aproximación equiparar las propiedades de una mezcla a las del agua pura a pesar de que sea el componente mayoritario. Pero sin embargo, si comparamos las propiedades de una mezcla obtenidas mediante su media de masas, con las obtenidas mediante reglas de mezclado más precisas para una mezcla agua-nitrógeno, resulta que las variaciones existentes entre ambas se reducen mucho. Siendo apreciable, como muestra la Fig. 35, una variación de propiedades en torno al 3% para la zona supercrítica y un desfase de unos 20°C en la zona de transición.

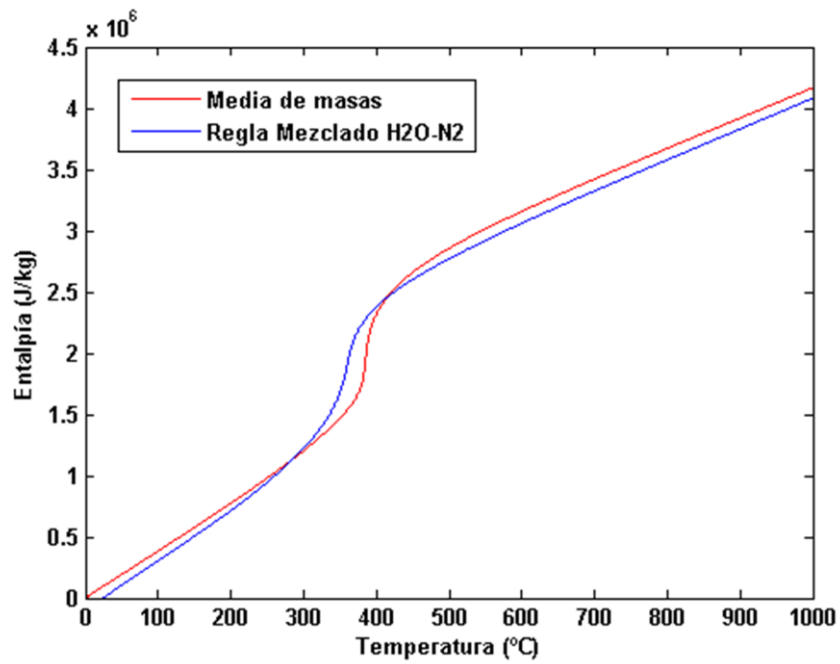


Fig. 35. Comparación entalpía obtenida mediante media de masas y reglas de mezclado para una mezcla H₂O-N₂.

De esta forma, y de acuerdo con los objetivos planteados en el presente proyecto, el uso de propiedades obtenidas a partir de la media de masas, no modifica las conclusiones finales a obtener, siendo perfectamente asumibles su utilización.

3.3 ECUACIONES DEL GOBIERNO

Como bien es sabido, los procesos de flujo de interés usualmente permiten la identificación de casi todas las superficies de control con superficies materiales reales. Sólo en las entradas y salidas es donde la superficie de control está sujeta a una posición arbitraria, y la práctica universal en este caso es colocarla perpendicularmente a la dirección de flujo. Esto permite la imposición de dos idealizaciones que facilitan la aplicación práctica de las ecuaciones de balance:

1. Se supone que el flujo es unidireccional en cualquier sección transversal de un conducto donde se asignan o evalúan las propiedades termodinámicas, cinéticas y dinámicas, esto es, en las entradas y salidas del volumen de control.
2. En una sección transversal, se supone que estas propiedades no cambian en dirección perpendicular a la del flujo. Por tanto, propiedades tales como la velocidad, la temperatura y la densidad, ya sea asignadas o evaluadas para la sección transversal, tienen valores que representan promedios apropiados sobre la sección transversal.

Estas idealizaciones tienen una naturaleza pragmática, y para muchos fines prácticos introducen un error despreciable frente a la realidad. De acuerdo con estos principios, a continuación pasamos a describir las ecuaciones que gobiernan los procesos que tiene lugar en el reactor de oxidación en agua supercrítica. Explicando detalladamente las ecuaciones del flujo de fluidos aplicadas a un volumen de control diferencial de reactor, dV , y simplificadas para el caso objeto de estudio. De la misma forma, también se detallará la ecuación que rige la cinética química y las ecuaciones de transferencia de calor utilizadas para el cálculo de las pérdidas de calor desde el interior del reactor al ambiente, a través del acero y el aislante.

3.1.1. CONSERVACIÓN DE LA MASA

De acuerdo al principio de conservación de la masa, en el balance general asociado a un volumen diferencial de reactor, tomado como volumen de control, se tiene que la variación que experimenta la masa de dicho volumen con el tiempo, es igual a la diferencia existente entre los gastos de entrada y salida.

$$\frac{\partial m_{vc}}{\partial t} + \Delta(\dot{m})_{sc} = 0 \quad (3)$$

donde m_{vc} es la masa del volumen de control en kg, t el tiempo en s y \dot{m} es el gasto en kg/s.

Procediendo de la misma forma y aplicando el balance de masa a cada una de las especies presentes en el sistema, tenemos que la variación de la masa de una especie i en un volumen diferencial de reactor es igual a la diferencia de gastos entre la entrada y la salida de dicha especie, menos la velocidad con la que es consumida o generada en la reacción.

$$\frac{\partial m_{i,vc}}{\partial t} + \Delta(\dot{m}_i)_{sc} + V \cdot r_i = 0 \quad (4)$$

donde m_i es la masa del componente i en el volumen de control en kg, t el tiempo en s, \dot{m}_i es el gasto del componente i en kg/s, V es el volumen del elemento diferencial en m^3 y r_i es la velocidad de reacción del componente i en kg/m^3s .

3.1.2. CONSERVACIÓN DE LA ENERGÍA

Al igual que ocurre con la masa, la energía de un determinado volumen de control también se conserva a lo largo del tiempo. En nuestro caso, la variación de energía con el tiempo en un volumen diferencial de reactor afecta mayoritariamente a su energía interna, siendo despreciable la tasa de cambio de la energía cinética y potencial. En el caso del término de transporte, que refleja los diversos modos en los que la energía puede cruzar la superficie de control, se puede subdividir en varios términos en virtud de su entalpía, su energía cinética y su energía potencial. Además también se tiene en cuenta el transporte de energía a través de la superficie de control como calor y trabajo.

De esta forma, la ecuación general de la conservación de la energía en un volumen de control queda de la siguiente forma.

$$\frac{\partial(mu)_{vc}}{\partial t} + \Delta \left[\left(h + \frac{1}{2}v^2 + zg \right) \cdot \dot{m} \right]_{sc} = \dot{Q} + \dot{W} \quad (5)$$

donde u es la energía interna en J/kg, m es la masa del volumen de control en kg, h es la entalpía en J/kg, v es la velocidad media de masa en m/s, z es cota de elevación sobre el suelo en m, g es la aceleración de la gravedad en m/s^2 , \dot{m} es el gasto en kg/s y Q y W es el flujo de calor y trabajo a través de las superficie de control en W.

En el caso objeto de estudio se ha demostrado que la energía cinética es despreciable frente a la entalpía, la energía potencial es nula puesto que el reactor está a la misma cota y no existe trabajo exterior aplicado al sistema. Con estas simplificaciones la ecuación de la conservación de la energía aplicable a nuestro sistema queda:

$$\frac{\partial (mu)_{vc}}{\partial t} + \Delta [(h) \cdot \dot{m}]_{sc} = \dot{Q} \quad (6)$$

3.1.3. CONSERVACIÓN DEL MOMENTO

Por la segunda ley de Newton, el cambio de momento debe ser igual a la suma de todas las fuerzas externas que actúan sobre el volumen de control, de esta forma se cumple que:

$$\frac{\partial (m \cdot v_{sistema})}{\partial t} = \rho \cdot g \cdot V + \iint -\vec{n} \cdot P dA + \iint \tau \cdot dA \quad (7)$$

donde m es la masa en kg, v la velocidad del fluido en kg/s, ρ la densidad en kg/m³, g la aceleración de la gravedad en m/s², V el volumen en m³, P la presión en Pa, dA el diferencial de área del volumen de control en m² y τ el esfuerzo cortante en Pa.

Para el caso objeto de estudio, teniendo en cuenta los objetivos y las aplicaciones prácticas a analizar, en la construcción del modelo estudiado no se ha considerado la variación del momento, despreciando las fuerzas que actúan sobre el fluido y por tanto sin tener en cuenta las pérdidas de carga que experimentaría el fluido en su paso por el reactor.

3.1.4. CINÉTICA QUÍMICA

La velocidad de reacción para la transformación de un compuesto orgánico en CO₂ y agua por medio de oxidación hidrotérmica se puede expresar en función de la variación de DQO en el sistema a través de la siguiente ecuación, donde el orden de reacción del agua se puede asumir igual a 0 por encontrarse presente en el medio en un porcentaje cercano al 90%.

$$r_{DQO} = - \frac{d[DQO]}{dt} = k \cdot [DQO]^\alpha \cdot [O_2]^\beta \quad (8)$$

donde r_{DQO} es la velocidad de consumo de DQO en mg/l/s, $[DQO]$ y $[O_2]$ son las concentraciones de DQO y Oxígeno en el sistema, ambas en mg/l, α y β son los ordenes de reacción para la materia orgánica y oxígeno respectivamente y k es la constante global de reacción en s/mg^{1- α - β} .

Además asumiendo que la dependencia de la constante de reacción con la temperatura viene dada por la Ley de Arrhenius podemos afirmar que:

$$k = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R \cdot T}\right) \quad (9)$$

donde k_0 es el factor pre-exponencial en $1/s \text{ mg}^{1-\alpha-\beta}$, E_a es la energía de activación de la reacción en J/mol, R es la constante universal de los gases cuyo valor es $8,314 \text{ J/molK}$ y T es la temperatura en K.

De esta forma, la ecuación que modela la desaparición de DQO mediante la oxidación de un compuesto orgánico en agua supercrítica se puede expresar como:

$$r_{DQO} = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \cdot [DQO]^\alpha \cdot [O_2]^\beta \quad (10)$$

La obtención de los valores de los órdenes de reacción, el factor pre-exponencial y la energía de activación se obtiene mediante experimentación a través de ensayos que se llevan a cabo a cabo a escala laboratorio y para un rango de temperaturas dado.

Para las aplicaciones a estudiar, el residuo seleccionado es un aceite de corte, que en la actualidad es un deshecho obtenido tras refrigerar y lubricar el corte de metales a nivel industrial y cuya eliminación necesita de un proceso complicado, ya que es considerado como residuo peligroso. La reacción de oxidación de este residuo viene dada por la siguiente ecuación:



Y los valores experimentales que se han utilizado para la definición de la cinética, han sido obtenidos de la bibliografía [96].

$$r_{DQO} = 35 \cdot \exp\left(-\frac{70000}{RT}\right) \cdot [DQO] \cdot [O_2]^{0,578} \quad (12)$$

3.1.5. TRANSFERENCIA DE CALOR

El reactor tubular a modelar esta constituido por una tubería de acero recubierta con fibra de vidrio que actúa como aislante. En este sistema la transferencia de calor se produce principalmente en dirección radial y de forma simétrica, desde el seno del fluido donde tiene lugar la reacción química, hasta el ambiente, transfiriéndose el flujo de calor a través del acero de la tubería y el aislante. Por ello, para el cálculo de las pérdidas de calor en el reactor se ha despreciado la transferencia de calor longitudinal frente a la radial.

Como se puede apreciar en la **Fig. 36** inicialmente el flujo de calor se transfiere desde el seno del fluido hasta la tubería de acero de forma convectiva.

$$q_{int} = h_{int} \cdot 2\pi r_{int,tubo} \Delta x \cdot (T_f - T_{int,tubo}) \quad (13)$$

donde q_{int} es el flujo de calor en W, h_{int} es el coeficiente de película interior en $W/m^2 \text{ } ^\circ C$, cuyas correlaciones de cálculo se muestran a continuación en el apartado 3.1.6, $r_{int,tubo}$ es el radio interior de la tubería de acero en m, Δx es la longitud del elemento diferencial de reactor en m y T_f y $T_{int,tubo}$ es la temperatura del fluido y de la pared interior respectivamente, en $^\circ C$.

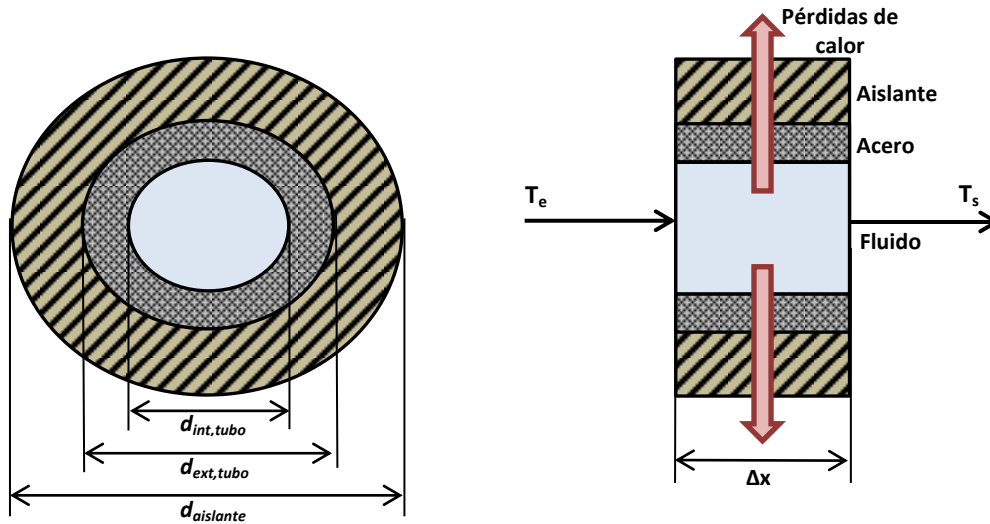


Fig. 36. Corte transversal y longitudinal de la tubería.

A través de la tubería y del aislante el mecanismo de transferencia de calor es la conducción, que en régimen transitorio y para coordenadas cilíndricas viene representada por la ecuación:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right) \right] \quad (14)$$

siendo α la difusividad térmica del tubo o el aislante según el caso en m/s^2 , t el tiempo en s, T la temperatura en $^\circ C$ y r el radio de la tubería en m.

Y por último, en la parte del aislante en contacto con el ambiente se produce el enfriamiento mediante convección,

$$q_{ext} = h_{ext} \cdot 2\pi r_{ext,tubo} \Delta x \cdot (T_{ext,tubo} - T_{amb}) \quad (15)$$

donde q_{ext} es el flujo de calor en W, h_{ext} es el coeficiente de película externo, cuyo valor se encuentra en torno a $6-10 W/m^2 \text{ } ^\circ C$, $r_{ext,tubo}$ es el radio exterior de la tubería de acero en m, Δx es la longitud del elemento diferencial de reactor en m y $T_{ext,tubo}$ y T_{amb} son las temperaturas de la pared exterior del aislante y el ambiente respectivamente, en $^\circ C$.

Finalmente para demostrar que realmente la transferencia de calor en dirección longitudinal se puede despreciar frente a la transferencia en dirección radial, se ha llevado a caso el análisis de un pequeño ejemplo que es representativo de las condiciones de trabajo del modelo a construir. Para ello, se ha utilizado el software COMSOL y se ha analizado un reactor formado por tres elementos diferenciales de 0,1 m de longitud compuestos por el acero de la tubería y el aislante que lo recubre. Tal y como se observa en la **Fig. 37**, en el elemento diferencial central se ha impuesto una temperatura de 550°C, mientras que el resto de elementos no se han impuesto ninguna condición.

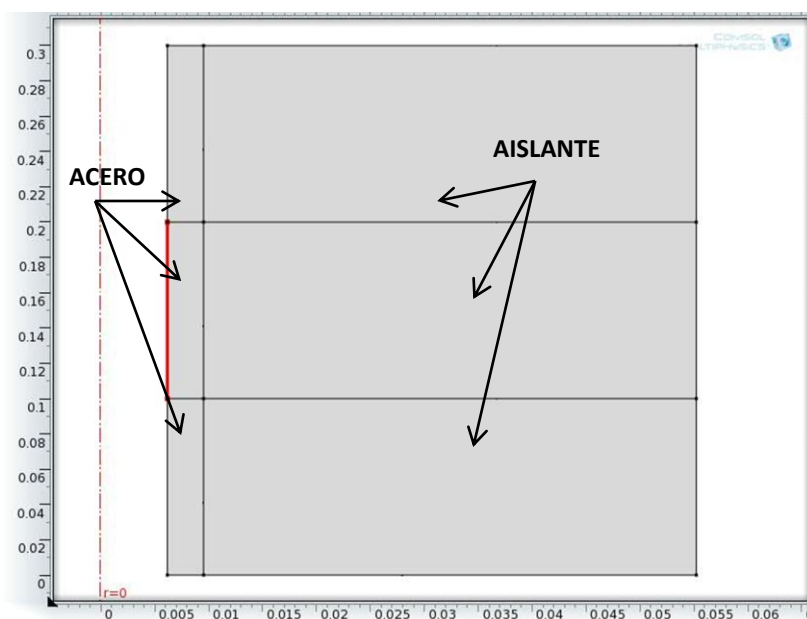


Fig. 37. Plano de corte longitudinal del reactor.

Resolviendo el caso propuesto, cuando se alcanza el régimen estacionario se puede observar cómo el gradiente de temperaturas que se genera en dirección radial es mucho mayor que longitudinalmente. En la **Fig. 38** se muestra el campo de temperaturas obtenido en el reactor, tanto en 3D como en un plano de corte longitudinal más detallado.

Por tanto, se comprueba que la simplificación realizada en la construcción del modelo se asemeja a la realidad a simular, intriduciendo un error cuya influencia en los resultados a obtener será prácticamente insignificante.

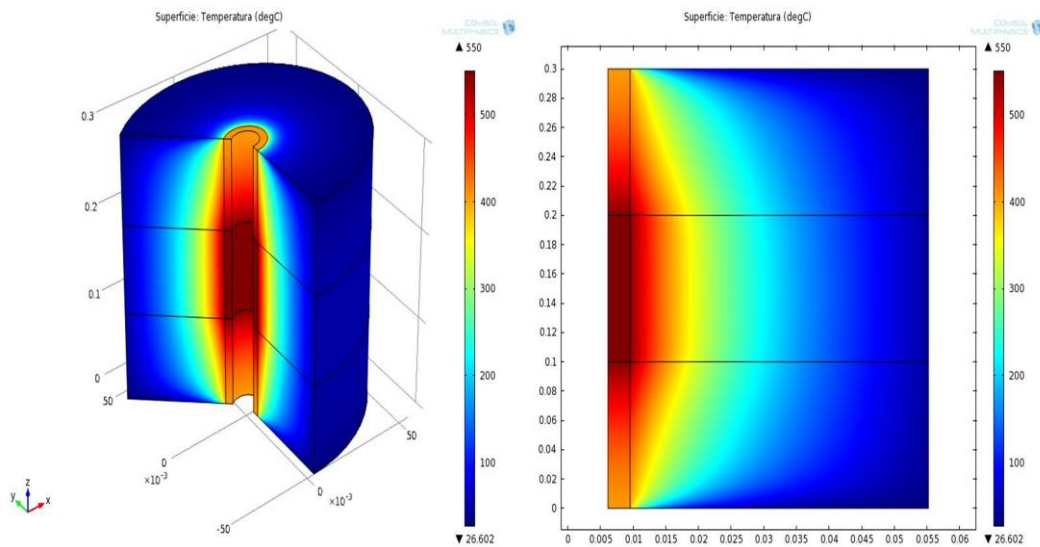


Fig. 38. Campo de temperaturas del reactor en 3D y de un plano de corte longitudinal.

3.1.6. COEFICIENTES DE PELÍCULA INTERNO

Existen muchas correlaciones para calcular el coeficiente de película interno en régimen turbulento, por ello en el presente modelo se han implementado varias de ellas con el objetivo de comparar los resultados y utilizar la que mejor se ajuste a las condiciones de operación.

La mayoría de las correlaciones existentes son empíricas y están expresadas en términos del número de Nusselt, generalmente evaluado como función del número de Reynolds y de Prandtl. A partir del número de Nusselt se puede obtener fácilmente el coeficiente de película que buscamos:

$$Nu = \frac{hL}{k} \quad (16)$$

donde Nu es el número de Nusselt, h es el coeficiente de película en W/m^2K , L es la longitud característica en m y k la conductividad térmica del fluido en W/mK .

A continuación se describen los diferentes tipos de correlaciones que se van a comparar, estas son, la correlación de DittusBoelter cuyo uso esta muy extendido, correlaciones buscadas en la literatura para coeficientes de película calculados en el entorno de la fase supercrítica y finalmente también se ha utilizado una de las librería de calculo para flujo interno presentes en el programa EES (Engineering Equation Solver).

Correlación de Dittus&Boelter

Es una de las correlaciones empíricas más empleadas en la práctica, se puede utilizar en cálculos en condiciones de temperatura de pared y flujo de calor constantes y los rangos de aplicación son $0,7 < Pr < 160$, $Re > 10000$ y $L/D > 10$.

$$Nu = 0.023 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^n \quad (17)$$

donde Re es el número de Reynolds, Pr es el número de Prandtl y $n=0,3$ cuando el fluido se enfría y $n=0,4$ cuando el fluido se calienta.

Correlaciones de la literatura

En el caso objeto de estudio al encontrarnos en condiciones entorno al punto supercrítico es necesario utilizar correlaciones obtenidas en dichas condiciones de flujo.

La mayoría de las correlaciones empíricas obtenidas en fase supercrítica mantienen la estructura de la correlación de Dittus&Boelter añadiendo algún factor de corrección.

$$Nu = C \cdot Re^a \cdot Pr^b \cdot F \quad (18)$$

De los numerosos esfuerzos realizados en los últimos años para lograr predecir la transferencia de calor en fluidos supercríticos, especialmente en el campo de la energía nuclear aplicado a los reactores nucleares enfriados por agua supercrítica (SCWR), se deduce que una de sus principales características, en la que la mayoría de los investigadores coinciden, es su fuerte dependencia del flujo de calor existente, especialmente en las proximidades del punto crítico. Cuando el flujo de calor existente es bajo, cercanos a cero, el coeficiente de película se predice bien mediante la ecuación convencional de Dittus&Boelter, sin embargo, cuando este aumenta, el máximo valor del coeficiente de película se obtiene para valores de temperaturas sensiblemente menores a la crítica. Por ello, en el entorno al punto crítico los valores que se obtienen para el coeficiente de película son menores al aumentar el flujo de calor transferido.

Teniendo en cuenta estas consideraciones, numerosas correlaciones empíricas han sido propuestas, a continuación se exponen algunas de ellas.

Cheng, 2009. [97]

$$Nu = 0,023 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^n \cdot F \quad (19)$$

$$F = \min(F_1, F_2) \quad (20)$$

$$F_1 = 0,85 + 0,776 \cdot (\pi_{a,T} \cdot 10^3)^{2,4} \quad (21)$$

$$F_2 = \frac{0,48}{(\pi_{a,pc} \cdot 10^3)^{1,55}} + 1,21 \cdot \left(1 - \frac{\pi_{a,T}}{\pi_{a,pc}}\right) \quad (22)$$

$$\pi_a = \frac{\beta}{C_p} \cdot \frac{q}{G} \quad (23)$$

donde $\pi_{a,T}$ y $\pi_{a,pc}$ representa el efecto de la aceleración evaluado a la temperatura media de masas y a la temperatura crítica respectivamente, β es el coeficiente de expansión térmica en 1/K, C_p es la capacidad calorífica en KJ/kgK, q es el flujo de calor en W/m² y G es el flujo másico en kg/m²s.

Mokry, 2011. [98]

$$Nu = 0,0061 \cdot Re^{0,904} \cdot Pr^{0,684} \cdot F \quad (24)$$

$$F = \left(\frac{\rho_w}{\rho_b}\right)^{0,564} \quad (25)$$

donde ρ_w y ρ_b representan la densidad obtenida a la temperatura de la pared y a la temperatura media de masas del fluido respectivamente.

Correlaciones del EES (Engineering Equation Solver)

Otra vía para la determinación del coeficiente interno de película ha sido implementar una de las librerías presentes en el software EES para el cálculo de flujo de fluido en conductos. Dicha librería calcula las correlaciones empíricas y el factor de fricción necesario de acuerdo a la sección 5.2.3 del libro Heat Transfer cuyos autores son Nellis and Klein [99].

En la **Fig. 39** se pueden observar las diferencias existentes en el coeficiente de película calculado usando cada una de las correlaciones anteriores. En el caso de la correlación de Dittus&Boelter y la librería de flujo interno del EES, las diferencias son mínimas en todo el rango de temperaturas, excepto en la transición a la fase supercrítica donde incrementan. Pero sin embargo, comparando las dos correlaciones obtenidas de la literatura, existen diferencias apreciables en la fase subcrítica, aumentándose estas notablemente en el cambio de fase, donde en el caso de la correlación de Cheng, los valores obtenidos son inferiores a los que predice la correlación de Dittus&Boelter, mientras que por el contrario, los valores de la correlación de Morky son sensiblemente mayores.

En vista a los resultados obtenidos y teniendo en cuenta la influencia existente entre el cálculo del coeficiente de película y el flujo de calor existente, que a su vez influye en la temperatura del fluido y finalmente en el devenir de la reacción química, lo más razonable es simular cada caso objeto de estudio utilizando ambas correlaciones, lo que establecerá los límites inferiores y superiores de la temperatura

del fluido calculadas. Pero en vista del gran tiempo de cálculo necesario para resolver cada caso y sabiendo que las pérdidas de calor reales en el reactor son muy importantes, se ha optado por utilizar la correlación de Mokry, que predecirá valores mayores a los de las ecuaciones convencionales ajustándose mejor a las condiciones reales del reactor a modelar.

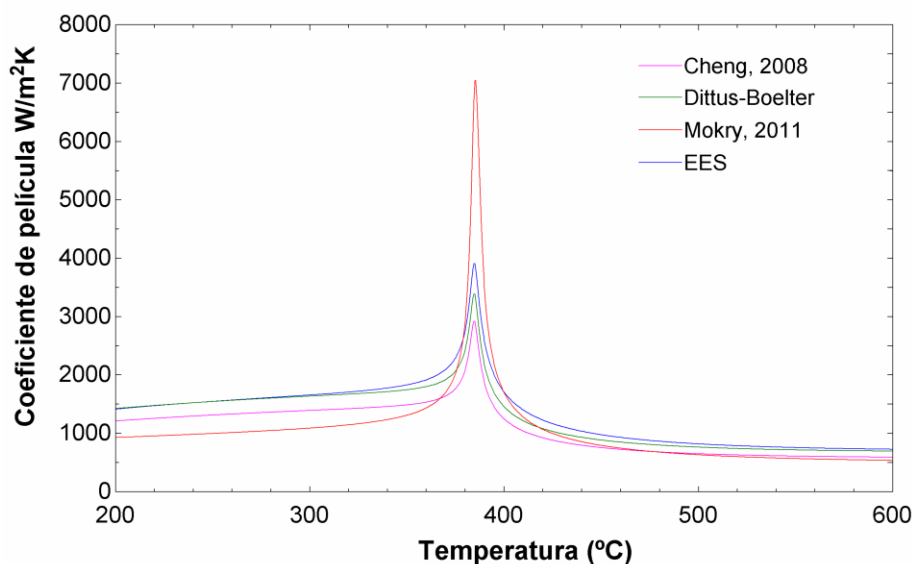


Fig. 39. Comparación de los coeficientes de película obtenidos mediante varias correlaciones.

3.1.7. CÁLCULO DE TENSIONES

Para obtener las tensiones generadas en la tubería de acero que conforma el reactor, se ha construido un modelo de diferencias finitas en régimen estacionario.

En la construcción de este modelo, se ha utilizado la malla impuesta en el modelo de transferencia de calor, que se explicará en el apartado 4.3.2, con el objetivo de obtener la misma distribución nodal y poder aplicar los campos de temperatura resultantes.

De esta forma, a partir de la evolución temporal de los perfiles de temperaturas en el acero de la tubería obtenidos del modelo de transferencia de calor, se determinará el instante de tiempo con mayor gradiente de temperaturas, utilizando el perfil en ese justo momento como entrada al modelo para el cálculo de tensiones, obteniendo así la situación más desfavorable mecánicamente.

Así, se consigue obtener un campo de tensiones en la tubería en régimen estacionario, a partir de la situación más desfavorable que se da durante un proceso transitorio. Estos datos serán utilizados para comprobar si en el momento donde los gradientes térmicos son mayores, las tensiones que se generan superan la resistencia de los materiales.