

Ingeniería

Revista de la Universidad de Costa Rica
ENERO/DICIEMBRE 2000 - VOLUMEN 10 - Nº 1 y 2



MODELIZACIÓN DE UN REACTOR QUÍMICO

Gerardo Chacón V.¹

Resumen

Se desarrolla la metodología para el análisis y modelado de procesos termofluidicos, utilizando un reactor químico tipo tanque agitado, con reacción de primer orden como ejemplo.

Palabras claves: modelización, ingeniería química, reactor químico, metodología.

Summary

The análisis and modeling methodology for thermofluid proceses are developed on this document. An chemical stirred tank reactor with a first order reaction was used as example.

Key words: modeling, chemical engineering, chemical reactor, methodology.

1. INTRODUCCIÓN

La modelización es el conjunto de actividades que se realizan al describir, caracterizar, analizar y predecir fenómenos y procesos; se emplea en la evaluación, control y diseño de procesos, sistemas y productos, además en la resolución de problemas en general.

Las metas de esta reseña son:

1. Aplicar los conceptos de la disciplina de Ecuaciones Diferenciales al caso del modelado matemático de un reactor químico simple.
2. Proponer una secuencia de etapas para la formulación de modelos matemáticos de procesos, que involucran fenómenos físicos y químicos.

2. DEFINICIÓN DEL SISTEMA

La primera etapa de la modelización, consiste en distinguir el sistema al cual se refiere,

expresándolo en términos concretos y claros, así como los propósitos o resultados esperados.

Considérese el caso de una reacción irreversible de primer orden de un compuesto A, con una velocidad específica de $\kappa \text{ ks}^{-1}$, que se lleva cabo en un reactor continuo tipo tanque agitado (RCTA).

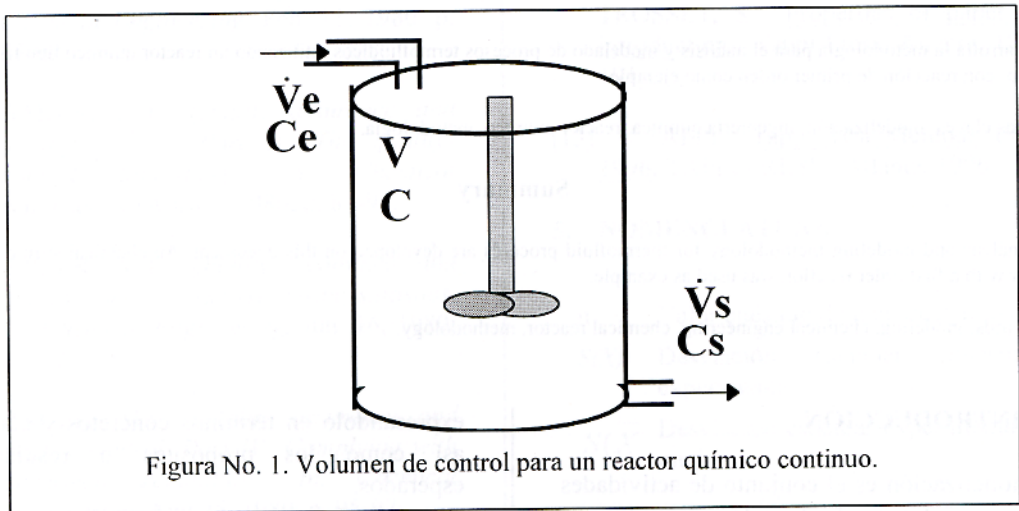
Determinar la variación de la concentración y el tiempo durante el arranque; esto es, el tiempo necesario para que se alcance el estado estacionario, considerando el siguiente procedimiento o protocolo:

1. El tanque, siempre, se encuentra lleno, con un volumen de $V \text{ m}^3$.
2. El flujo volumétrico, $\dot{V} \text{ m}^3/\text{ks}$, de entrada al recipiente, es igual al de la salida. También, igual al del estado estacionario.

¹ Ing., M.Sc., Prof. Asociado, Esc. Ing. Química, Fac. Ing., Univ. de Costa Rica

3. La reacción da inicio en el momento en que A cae en el tanque.
4. El compuesto entra con una concentración C_e kmol de A/m^3 .
5. La concentración de A al inicio, en el tanque, es igual a la del flujo de entrada.

Volumen de control: es el sistema cuya delimitación se hace mediante el volumen fijo que ocupa una cantidad de materia dada, aunque está cambie durante el proceso.



3. DEFINICIÓN DE LAS VARIABLES DEL SISTEMA

Las variables del sistema, son las propiedades, características o atributos que definen únicamente un estado del sistema, que lo describe y rigen su comportamiento.

Variable independiente (causa o estímulo): es aquella variable que está determinada por el medio o alrededor y puede variar por las influencias del mismo. En este caso,

t : tiempo, ks

Variables dependientes (efecto o respuesta): son aquellas variables que están delimitadas por el proceso mismo o por el principio (o ley) de conservación. Este tipo de variable debe ser medible o evaluable por la cuenta o proporción de un atributo. Para el reactor son:

m_A : masa de A en el tanque, kmol de A.

C : concentración de A en el tanque, kmol de A/m^3 .

C_s : concentración de A en la salida del tanque, kmol de A/m^3 .

Variables fijas: son aquellas variables que se han definido como constantes, para realizar un análisis dado del sistema en cuestión.

V : volumen de la masa en el tanque, m^3 .

V_e : flujo de entrada, m^3/ks .

V_s : flujo de salida, m^3/ks .

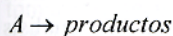
C_e : concentración de A en la entrada, kmol de A/m^3 .

4. RELACIONES CONSTITUTIVAS

En la formulación de un modelo se presentan términos de potenciales y de variables del sistema (algunas no medibles); por lo cual, se

deben establecer las relaciones constitutivas entre las variables de interés, que se requieran. Estas expresiones funcionales entre dos o más de las variables involucradas en el proceso, en donde al menos una de ellas es medible. Generalmente son modelos fenomenológicos, mecanistas o empíricos. Para el caso del reactor químico:

La reacción es del tipo irreversible y monomolecular



La masa del componente A

$$m_A = VC$$

La relación cinética es de primer orden

$$(-R_A) = \kappa C$$

El coeficiente κ depende de la temperatura

$$\kappa = \kappa(T)$$

La densidad es función de la temperatura y concentración

$$\rho = \rho(T, C)$$

La masa del total

$$m = V\rho$$

Parámetros: Son los factores o coeficientes que se encuentran en las relaciones constitutivas y que forman la función entre las variables. Los parámetros podrían ser afectados por las mismas variables o por otras causas externas al sistema, formando a su vez relaciones constitutivas.

κ : coeficiente (o "constante") de velocidad de reacción, ks^{-1} .

ρ : densidad de la solución, kg/m^3 .

5. FORMULACIÓN DEL MODELO O HIPÓTESIS

El análisis de un sistema definido, para un prototipo real, concluye con la descripción cuantitativa del comportamiento de las variables del fenómeno o proceso que se lleva a cabo en él, cuyas características se quieren conocer. Se consideran las que lo afectan más significativamente; así mismo, las relaciones y las interacciones entre ellas y con los insumos, los productos y el medio.

El modelo se expresa en forma de símbolos: verbales, escritos, imágenes, esquemas, relaciones funcionales matemáticas (gráficos, cuadros o ecuaciones) o un ente similar al prototipo, pero en otra escala o tamaño, denominado piloto. Como el modelo matemático tiene mucha importancia en la Ingeniería, es el objeto de este documento y se define como:

Modelo matemático: el modelo matemático lo conforma el grupo de ecuaciones, que bajo ciertas condiciones y para un propósito dado, provee una descripción adecuada de un sistema físico, para el producto o respuesta de interés.

La formulación de un modelo matemático de un sistema físico, consiste en el análisis del proceso por medio del Principio o Ley de conservación al sistema, expresado en forma de símbolos matemáticos. El principio de la conservación se relaciona con fenómenos de transferencia y de generación de masa, cantidad de movimiento, energía y calor, dinero, elementos y otras propiedades extensivas, físicas o no. Para la conservación de la masa del componente A , que está científicamente planteada en forma independiente del tiempo, se establece que:

$$\begin{array}{rcccl} \text{ACUMULACIÓN} & & \text{ENTRADA} & & \text{SALIDA} & & \text{CANTIDAD} & & \text{CANTIDAD} \\ \text{DE} & = & \text{DE} & - & \text{DE} & + & \text{PRODUCIDA} & - & \text{CONSUMIDA} \\ \text{MASA} & & \text{MASA} & & \text{MASA} & & \text{DE MATERIA} & & \text{DE MATERIA} \end{array} \quad (1)$$

por otro lado,

$$\begin{array}{rcccl} \text{ACUMULACIÓN} & & \text{CANTIDAD} & & \text{CANTIDAD} \\ \text{DE} & = & \text{ACTUAL DE} & - & \text{ANTERIOR DE} \\ \text{MASA} & & \text{MATERIA} & & \text{MATERIA} \end{array} \quad (2)$$

Para el sistema descrito, se formula la "historia" de la masa del componente A , dentro del volumen de control, al transcurrir un periodo δt . Para plantearlo se sigue alguna de las técnicas de análisis diferencial. Se escoge el método conocido como de *Euler* o riguroso, indicando la variable independiente, por ser este el más sencillo de interpretar.

Tiempo	t , anterior	$t + \delta t$, actual	Dimensiones
Masa dentro del sistema	$(VC)_t$	$(VC)_{t+\delta t}$	Kmol de A
Flujo de masa que entra	$\dot{V}_e C_e$	$\dot{V}_e C_e$	Kmol de A/ks
Flujo de masa que sale	$(\dot{V}_s C_s)_t$	$(\dot{V}_s C_s)_{t+\delta t}$	Kmol de A/ks
Producción de masa	No hay	No hay	No hay
Consumo de masa	$[(-R_A)V]_t$	$[(-R_A)V]_{t+\delta t}$	Kmol de A/ks

Aplicando la ley de conservación para la masa del componente A ,

$$(VC)_{t+\delta t} - (VC)_t = \dot{V}_e C_e \delta t - \left[(\dot{V}_s C_s)_t + (\dot{V}_s C_s)_{t+\delta t} \right] \delta t / 2 - \{ [(-R_A)V]_t + [(-R_A)V]_{t+\delta t} \} \delta t / 2$$

Efectuando las operaciones y dividiendo por δt

$$\frac{(VC)_{t+\delta t} - (VC)_t}{\delta t} = \dot{V}_e C_e - \frac{(\dot{V}_s C_s)_{t+\delta t} + (\dot{V}_s C_s)_t}{2} - \frac{[(-R_A)V]_{t+\delta t} - [(-R_A)V]_t}{2}$$

Calculado el límite cuando δt tiende a 0, se obtiene:

$$\frac{d(VC)}{dt} = \dot{V}_e C_e - \dot{V}_s C_s - (-R_A)V \quad (3)$$

6. CONDICIONES DEL MODELO

Se suelen escoger aquellas condiciones del sistema, en cada una de las etapas de su formulación, que ayuden a simplificar el modelo, su comunicación, su utilización y, en el caso de modelos matemáticos, que facilite la solución de la ecuación obtenida. Decidir en qué grado se satisface el modelo y su aptitud para el uso depende, como actividad propia del ejecutante, de los criterios que establezca para tomar sus decisiones. Para que un modelo sea útil debe de sopesarse:

1. El propósito u objetivo esperado.
2. El detalle requerido para la descripción o reproducibilidad del comportamiento del prototipo.
3. La sencillez, facilidad de empleo del modelo.
4. La disponibilidad de tiempo, de recursos para cálculos y de recursos económicos con que se cuente.
5. La conformidad y consistencia del modelo con el sistema.
6. El cumplimiento de las condiciones de contorno.
7. La exactitud y la precisión con que se desean los resultados.

Condiciones del modelo: Las condiciones del modelo, son el conjunto de consideraciones y aproximaciones, que complementan y simplifican la definición del sistema, para facilitar la descripción del prototipo.

En el modelo del reactor, se proponen las siguientes condiciones:

1. Agitación perfecta. Se supone que la masa es uniforme.

$$C_s = C$$

Esto considera, como aproximación, que la concentración del componente A dentro del tanque es igual que la de su salida, en cualquier instante.

2. El volumen del tanque es mucho mayor que el flujo de masa.

$$V \gg V_e$$

Lo que supone que el tiempo de residencia, de una partícula en el tanque, es lo suficientemente largo para que se haya logrado la homogenización y que la masa salga con una concentración diferente a la que entró.

3. La densidad es constante y el coeficiente de reacción, no cambian con las variables del proceso. κ : se aproxima como constante. ρ : se aproxima como constante.

con lo que $V = V_{t=0} \cong \text{cte.}$ y $\dot{V}s \cong \text{cte.}$

Indica que las variaciones en la densidad debido a la concentración y la temperatura se pueden considerar despreciables para efectos de cálculo.

4. La reacción química es, aproximadamente, irreversible y de primer orden.

$$(-R_A) = \kappa C$$

5. El flujo de salida es constante y es igual al de entrada.

$$\dot{V}s = \dot{V}e = \text{cte.}$$

Lo que considera que el flujo de masa total está en estado estacionario

$$d(V\rho)/dt = 0,$$

que la densidad es constante y que el flujo no depende de la altura del líquido en el tanque.

6. Se cumple el procedimiento o protocolo de arranque establecido.

Entonces, la ecuación del modelo simplificada con estas condiciones es:

$$V \frac{dC}{dt} = C_e \dot{V}_e - (\dot{V}_e + \kappa V) C \quad (4)$$

7. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DIFERENCIAL

La solución de la ecuación diferencial, es la conclusión del procedimiento para establecer el modelo, como una ecuación operativa:

Agrupamiento de parámetros y constantes. Este rubro es la acción que se emplea para simplificar el tratamiento matemático.

Se debe tener el cuidado de que:

1. Los valores sean constantes durante el proceso, es decir, no dependan de las variables independientes, ni de las dependientes.

2. Que el grupo de constantes sea positivo.

$$\eta = 1 / \left(\dot{V}_e / V + \kappa \right) \text{ tiempo de retención, ks}$$

La presentación en forma gráfica es muy útil para analizar el modelo.

$$\tau = V / \dot{V}_e \quad \text{tiempo de residencia, ks}$$

La ecuación simplificada y arreglada queda,

$$\frac{dC}{dt} + \frac{C}{\eta} = \frac{C_e}{\tau} \quad (5)$$

Integrando por separación de variables o mediante la técnica para resolver una ecuación diferencial lineal, se tiene;

$$C \exp(t/\eta) = (C_e \eta / \tau) \exp(t/\eta) + C_{ic} \quad (6)$$

8. CONDICIONES DE CONTORNO

Para evaluar las constantes de integración, se utilizan condiciones físicas intuitivas del proceso mismo, llamadas condiciones de contorno, límites o cotas, en este caso, un valor o punto de una función,

Cuando $t = 0$ entonces $C = C_e$ con las que se evalúa la $C_{ic} = C_e - C_e \eta / \tau$ y se obtiene la relación operacional

$$\frac{C/C_e - \eta/\tau}{1 - \eta/\tau} = \exp(-t/\eta) \quad (7)$$

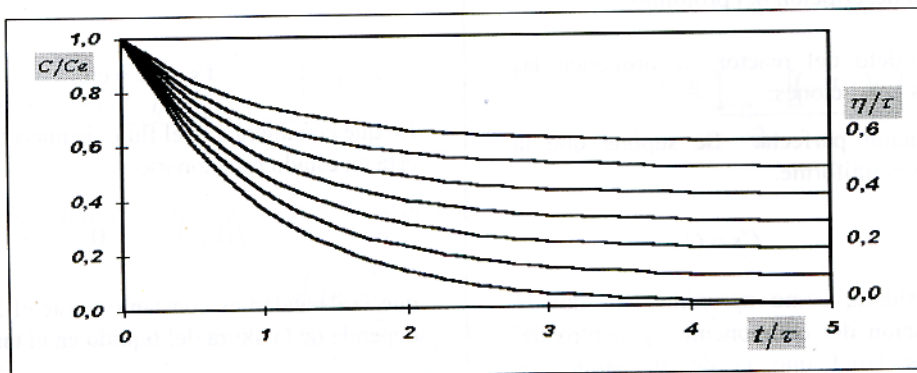


Figura No. 2. Modelo de una reacción de primer orden en un reactor continuo tipo tanque agitado.

9. OTRAS ACTIVIDADES

Una vez obtenido el modelo se procede a su **verificación**, que consiste en analizar, que el modelo represente adecuadamente el sistema y sus condiciones límites, tenga sentido físico y sea dimensionalmente consistente. Luego, a su **estandarización**, esto es, el resultado debe ser propuesto agrupando sus variables en adimensionales o normalizadas, de tal forma que se pueda generalizar por medio de ecuaciones algebraicas, gráficos o tablas. Consecuentemente, se realiza la **comprobación**, utilizando datos obtenidos en el prototipo real o en uno piloto, para evaluar su reproducibilidad y compararlo con los objetivos propuestos.

10. CONCLUSIÓN

La modelización o formulación generalizada de una realidad física es una percepción humana desarrollada a partir de hechos imaginarios, conceptos, definiciones y procedimientos abstractos; la cual, no es exactamente una réplica de esa realidad, por lo que, es un proceso continuo de prueba, comparación, verificación y refinamiento del modelo, en forma sistemática, hasta alcanzar la satisfacción proyectada.

11. BIBLIOGRAFÍA

- [1]. Aris, R., Mathematical Modelling Technique. Research Notes in Mathematics. Pittman, Londres, 1978.
- [2]. Baird, D. C., Experimentación. Prentice Hall Hispanoamericana. México, 1988. Capítulo 4.
- [3]. Chen, N. H., New Mathematics for Chemical Engineering. Hoover Book Company Ltd, Taiwan, 1977.

- [4]. Franks, R. G. E., Modeling and Simulation in Chemical Engineering. Wiley Interscience, New York, 1972.
- [5]. Haberman, Ch. M., Engineering System Analysis. Charles E. Merrill, Columbus, 1965.
- [6]. Himmelblau, D. M. and Bischoff, K. B., Process Analysis and Simulation (Deterministic System). Wiley, New York, 1968.
- [7]. Himmelblau, D. M., Principios básicos y cálculos en Ingeniería Química. Prentice Hall Hispanoamericana., México, 1997. Capítulo 2.
- [8]. Jenson, V. G. y Jeffreys, G. V., Métodos matemáticos en Ingeniería Química. Alahambra, Madrid, 1969.
- [9]. Jones, J. B y Dugan, R. E., Ingeniería Termodinámica. Prentice Hall Hispanoamericana., México, 1997. Capítulo B.
- [10]. Kume, H., Herramientas Estadísticas básicas para el mejoramiento de la calidad. Norma, Bogotá, 1992. Capítulo 10.
- [11]. Mickley, H.S. et al., Applied Mathematics in Chemical Engineering. McGraw-Hill, Tokyo, 1957.
- [12]. Russell, T. W. F y Denn, M. M. C., Introducción al análisis en Ingeniería Química. Limusa, México, 1976. Capítulo 2.

12. ACERCA DEL AUTOR

Gerardo Chacón Valle
Áreas de interés: Modelización y control estadístico de procesos-calidad, Operaciones unitarias para productos de origen biológico.