

IDENTIFICACIÓN DEL PASO CONTROLANTE EN UN SISTEMA FLUIDO-SÓLIDO FORMADO POR PARTÍCULAS DE TAMAÑOS DIFERENTES

Dania Del Toro Álvarez, Antonio Pons Hernández, René Viera Bertrán
Facultad Ingeniería Química, Universidad de Oriente

Este trabajo se ocupa de la presentación de un procedimiento que permite identificar el mecanismo controlante de un sistema reaccionante fluido-sólido no catalítico, como uno de los elementos necesarios y componente de un modelo matemático de naturaleza fenomenológica. Para realizar el trabajo, se utilizaron los datos de operación de la planta de neutralización de la empresa “Comandante Pedro Sotto Alba” de Moa, lo cual permitió concluir que el mecanismo controlante de la reacción es la difusión externa en partículas tamaño fijo. El procedimiento utilizado en este trabajo es generalizable a otros sistemas de género similar, siempre que el sistema reaccionante sea del tipo tratado.

Palabras clave: control de fase, que fluye-sólido sistema no catalítico, reactor continuo con agitación.

A limitant question for the use of a mathematic model of phenomenological nature is based in the ignorance and difficulty for the estimate the value of the complete reaction time of the different sizes particles and their dependence with the operation variables. This problem includes the identification of the controler reaction mechanism and in second place the particles inicial size behaviour. The present work shows a method to determine the controler mechanism of a non catalitic fluid-solid system using the operation data of a comercial plant. Though the utiliced data come from the neutralization plant of the Pedro Sotto Alba fabric of Moa, the method is of general application to any reaccionant system of the same type treated in this work.

Key words: controlling stage, flowing-solid system non catalytic, continuous reactor with agitation.

Introducción

Uno de los puntos limitantes para el empleo de un modelo matemático de naturaleza fenomenológica descansa en el desconocimiento y dificultad de estimar el valor del tiempo de reacción completa de las partículas de diferentes tamaños, y su dependencia con las variables de operación. Este problema incluye, a su vez la identificación del mecanismo de reacción controlante, y en menor grado el comportamiento del tamaño inicial de las partículas.

El trabajo que se presenta se ocupa de mostrar un procedimiento para determinar el mecanismo controlante de un sistema reaccionante fluido-sólido no catalítico, haciendo uso de los datos de operación de una planta a escala comercial. Aunque los datos utilizados provienen de la planta de neutralización de la empresa “Comandante Pedro sotto Alba” de Moa, el procedimiento es de aplicación general a cualquier sistema reaccionante del tipo tratado.

Objetivos

1. Determinar los valores del tiempo de reacción completa de los distintos tamaños de partículas.
2. Determinar el mecanismo controlante del sistema reaccionante de la planta de neutralización.

Materiales y métodos

El equipamiento utilizado ha sido el correspondiente a la planta de neutralización y a los laboratorios de la Empresa Comandante Pedro Sotto Alba, y el procedimiento ha consistido en:

1. Realizar un proceso de muestreo sobre la primera etapa de la batería de reactores de la planta de neutralización, y realizar pruebas de tamizado a los sólidos de la pulpa de coral alimentada al reactor.
2. Considerar modelo centro sin reaccionar y mecanismos controlantes: reacción química, difusión externa en partículas de tamaño fijo y decreciente y difusión en la costra en partículas de tamaño fijo.

3. Determinar los valores de los tiempos de reacción completa de las partículas y el mecanismo controlante.

Procedimiento para la determinación del mecanismo controlante y del tiempo de reacción completa de las partículas, considerando modelo centro sin reaccionar

1. Se asume el mecanismo controlante de la reacción.
2. Se asume el tiempo de reacción completa del tamaño de partícula considerado como base (τ_{bn}).
3. Se calculan los tiempos de reacción completa correspondientes a los restantes tamaños de partículas, según la relación que corresponde al mecanismo controlante (τ_i).

$$\frac{\tau_i}{\tau_{bn}} = \left(\frac{R_i}{R_b} \right)^{K_0} \quad (1)$$

4. Se calculan las fracciones no convertidas promedio de cada tamaño de partícula (\bar{I}), por medio de la expresión resultante de la integración de la expresión que se muestra a continuación.

$$\bar{I}_i = \int_0^{\tau_i} I_i \left(\frac{t}{\tau_i} \right) \cdot E(t) \cdot dt \quad (3)$$

5. Se establece la función objetivo conociendo la expresión correspondiente a la fracción no convertida promedio y el valor de la fracción no convertida promedio total.

$$f \tau_{bn} = \sum_{i=1}^{NT} (\bar{I}_i) * F_i - \bar{I} \quad (4)$$

6. Se determina el valor del τ_{bn} aplicando el método de Newton–Raphson.

$$(\tau_b)_{n+1} = \tau_{bn} - \frac{f(\tau_{bn})}{f'(\tau_{bn})} \quad (5)$$

7. Se comprueba el criterio de convergencia

$$\left| \frac{(\tau_b)_{n+1} - \tau_{bn}}{\tau_{bn}} \right| \leq \xi \quad (6)$$

8. Si no se satisface el criterio de convergencia, se hace: $\tau_{bn} = (\tau_b)_{n+1}$, y se retorna al paso 3.

Una vez que se culmina con estos 8 pasos, se procede a correlacionar los valores del tiempo de reacción completa en función de las variables de operación utilizadas. Con los modelos obtenidos se analiza el comportamiento obtenido con el que debe mostrar según el mecanismo supuesto y se decide cuál de ellos es el predominante.

Nomenclatura del procedimiento descrito anteriormente

E(t): distribución de tiempos de residencia.

F_i: fracción de partículas de tamaño i en el alimentado.

$f(\tau_{bn}), f'(\tau_{bn})$: Función objetivo y su derivada para aplicar el método Newton–Raspón, respectivamente.

i: Distintos tamaños de partículas (i= 1, 2,....., NT).

I_i: Fracción no convertida de la partícula de tamaño i.

\bar{I} : Fracción no convertida promedio para partículas de tamaño i y promedio total respectivamente.

K₀: Factor que depende del mecanismo controlante de la reacción.

NT: Número de tamaños diferentes de partículas en el alimentado.

R_i y R_b: Radio de un determinado tamaño de partícula y de la considerada como tamaño base respectivamente.

t: Tiempo de reacción.

ξ: Error permisible

τ_{bn} : Tiempo de reacción completa del tamaño de partícula considerado como tamaño base.

τ_i : Tiempo de reacción completa de las partículas.

Resultados y discusión

Se realizó un proceso de muestreo en la primera etapa de la batería. Se tomaron 13 muestras a la entrada y salida del primer reactor y se sometieron a pruebas de tamizado para obtener la distribución

de tamaños de las partículas, además de tomar los datos de operación correspondientes a las mismas.

Se aplicó el procedimiento anteriormente descrito y empleando los datos de operación, se obtuvieron los diferentes valores de los tiempos de reacción completa de las partículas, los cuales se correlacionaron con la concentración de ácido a la salida del primer reactor y con la temperatura del sistema, obteniéndose un modelo para cada mecanismo.

Mecanismo controlante: Reacción química, partículas de tamaño fijo y decreciente

En este caso se observan cambios notables en los valores del tiempo de reacción completa, al cambiar la concentración. Sin embargo, se obtiene un efecto contradictorio respecto a los cambios de la temperatura. Por ejemplo, cuando $CAS = 0,24 \text{ mol/m}^3$ y $T = 320 \text{ K}$, el valor de $\tau = 24,263 \text{ min}$; si se deja constante la concentración y se varía la temperatura a un valor de 330 K , el valor de $\tau = 25,803 \text{ min}$. El hecho indica que este mecanismo no constituye una etapa que deba tenerse en consideración.

Mecanismo controlante: Difusión en la costra partículas de tamaño fijo

Cuando la difusión es uno de los mecanismos que se analiza, la concentración es una de las variables que ejerce mayor influencia en la respuesta. En este caso se observa cómo a medidas que aumenta la concentración, aumenta en igual sentido el tiempo de reacción completa, comportamiento que contradice lo teóricamente planteado. Este hecho descarta la posibilidad de que este mecanismo controle el proceso reaccionante.

Mecanismo controlante: Difusión externa, partículas de tamaño fijo y decreciente

En los casos en que se considera difusión externa en partículas de tamaño fijo y partículas de tamaño decreciente, se obtienen dos modelos aceptables, tanto por los altos coeficientes de regresión (99,45 %) y (98,37 %) alcanzados, respectivamente, como por la correspondencia del comportamiento, con lo que atendiendo a los fenómenos actuantes cabe esperar, el tiempo de reacción completa disminuye al aumentar la concentración.

Los resultados obtenidos en cuanto al coeficiente de regresión, no permiten definir cuál de ellos controla el proceso de neutralización. En

este caso, los datos procedentes de las condiciones de trabajo corresponden a conversiones fraccionales entre 0,7- 0,85, y en esta zona, el modelo de difusión externa para partículas de tamaño fijo o partículas de tamaño decreciente no conducen a resultados con diferencias superiores a los que pueda atribuirse a la dispersión propia de los datos observados en la misma realidad. Para definir esta situación, se procedió a realizar pruebas de tamizado a las partículas que entran y salen del reactor. El análisis de tamizado entre la entrada y la salida indica el comportamiento de tamaño fijo de las partículas. Teniendo en cuenta este elemento, se puede concluir que la difusión externa en partículas de tamaño fijo es el mecanismo que controla el proceso reaccionante de la planta de neutralización.

Conclusiones

Se identifica como mecanismo controlante del sistema reaccionante correspondiente a la planta de neutralización a la difusión externa, cuando las partículas son de tamaño fijo. Al discriminar entre diferentes modelos posibles para un proceso determinado, es conveniente escoger una zona experimental en la que los mismos conduzcan a resultados con notable diferencias entre sí, de manera que la discriminación resulte fácil y concluyente. En este caso, los datos procedentes de las condiciones de trabajo corresponden a conversiones fraccionales entre 0,7- 0,85; y en esta zona, el modelo de difusión externa para partículas de tamaño fijo o partículas de tamaño decreciente (el modelo teórico) no conducen a resultados con diferencias superiores a los que pueda atribuirse a la dispersión propia de los datos observados en la misma realidad; en consecuencia, hubo que recurrir a pruebas de tamizado para discriminar a cuál de los dos tipos posibles podría atribuirse el comportamiento de las partículas. El análisis de tamizado entre la entrada y la salida indica el comportamiento de tamaño fijo de las partículas.

Bibliografía

- Fogler, H. S.: *Elements of Chemical Reaction Engineering*, Prentice Hall, 2001.
- García, T.: "Estudio y aplicación de modelos acoplados de flujo", *Revista de Ciencia, Tecnología y Medio Ambiente*, Volumen I, año 2004, Separata. <http://www.uax.es/publicaciones/archivos/TECEOCO4>.
- Revisión de Internet, Reactores de mezcla perfecta, 2004, <http://www.sc.ehu.es/iawfemaf/archivos/materia/00533>.



Normas de presentación de originales

Los originales deberán presentarse a:

Consejo de Redacción de la Revista Tecnología Química
Avenida de Las Américas y Calle L
Apartado Postal 4041, Santiago de Cuba.

Los trabajos se presentarán en original y copia, redactados adecuadamente y mecanografiados a dos espacios en hojas de papel blanco de 210 x 297 mm (formato A4), con márgenes de 3 cm, sin tachaduras ni enmiendas y con las páginas foliadas consecutivamente. Éstos vendrán acompañados de una copia en soporte magnético, el cual se devolverá al autor una vez terminado el trabajo editorial. Las figuras deben incluirse en el disquete, editadas preferentemente en el programa EXCEL o algún otro programa sobre Windows. Los trabajos podrán ser enviados a través del correo electrónico a la siguiente dirección: **romelia@fiq.uo.edu.cu**

Los trabajos constarán, según el requerimiento del trabajo o materia de que se trate, de:

0. Introducción.

1. Fundamentación teórica.

2. Métodos utilizados y condiciones experimentales.

3. Resultados y su discusión.

4. Conclusiones.

5. Bibliografía consultada.

Los originales se aceptarán sólo cuando se entreguen completos con texto, ilustraciones, glosarios, bibliografía, lista de pies de grabados de las ilustraciones, resumen de no más de 250 palabras en español e inglés, con palabras claves en los dos idiomas, lista con la nominación de los símbolos y letras griegas utilizados.

En la primera página se consignarán: el título del trabajo en español e inglés, los nombres y apellidos completos de los autores, sus títulos y cargos, la fecha en que el trabajo ha sido enviado, el departamento o institución donde fuera realizado el mismo o al que pertenece el autor, la dirección postal, teléfono y dirección electrónica.

Todas las hojas del original estarán firmadas por el autor, quien por este medio indicará que el trabajo ha sido revisado cuidadosamente por él y no contiene errores, omisiones o deficiencias de cualquier tipo. Las referencias de la bibliografía en el texto se indicarán entre rayuelas ej. /1/. La lista de bibliografía se entregará en hoja aparte con un orden numérico.

Para revistas

- a) Apellidos y nombre (s) del autor (es)
- b) Título del artículo, discurso, entrevistas y otros en redonda (sin subrayar), entre comillas
- c) Nombre de la publicación, en redonda (sin subrayar), con iniciales mayúsculas, precedido de la palabra *en*
- ch) Serie
- d) Lugar de edición
- e) Número (abreviado núm.) de la edición, tomo o volumen
- f) Año de edición
- g) Página o páginas citadas
- h) Notas
- i) ISSN

Ejemplo: Aguilera, J.; Guerrero, J. R., "Estimación de tablas termodinámicas de compuestos puros", en Tecnología Química, Universidad de Oriente, Ediciones ISPJAM, vol. XVII, núm. 2, 1997, págs. 6-17, ISSN 0041-8420.

Para libros y folletos

- a) Apellidos y nombre(s) del autor(es) en altas y bajas. Si una obra tiene dos o más autores, el apellido y el nombre del primero se separan con punto y coma (;) de los del segundo, y así sucesivamente. El número máximo de autores que se relaciona es cuatro. Cuando son más de cuatro se pone "y otros" a continuación de los apellidos y el nombre del primero, si la obra está en español, y *et al.*, si esta en otro idioma, seguido de una coma
- b) Título de la obra (en cursivas).
- c) Si se trata de una traducción, y se requiere mencionar el autor de ésta, se anota el dato, entre paréntesis y después del título
- ch) Edición (edic.)
- d) Tomo (t.), en numeración romana
- e) Colección (col.)
- f) Lugar de la publicación
- g) Nombre de la editorial (Editorial)
- h) Año de la publicación
- i) Páginas (pág. o págs.)
- j) Notas
- k) ISBN

Si una obra tiene dos o más autores, el apellido y el nombre del primero se separan con punto y coma (;) de los del segundo, y así sucesivamente. Entre el nombre del (de los) autor (es) y el título se emplea coma (,). El resto de los elementos se separan por medio de la coma. Después del último elemento descrito, se utiliza punto.

Ejemplo: Ragon, Michel, *Los pañuelos rojos del chalet* (trad. de Jaime Vélez), 1a. edic., t. II, México, 1990, pág. 287.

En el texto se indicará la ubicación de las ilustraciones sin necesidad de dejar el espacio correspondiente. Las fórmulas y expresiones matemáticas deben ser mecanografiadas siempre que sea posible, y en su defecto, escritas con símbolos nítidos en tinta china; se enumerarán consecutivamente al extremo del margen derecho y entre paréntesis (). Los símbolos de los alfabetos griego, cirílico, técnico y matemático deben dibujarse en hoja adicional al trabajo, poniendo su nombre correcto.

Ejemplo:

<i>Omega</i>	ω
<i>Omega mayúscula</i>	Ω
<i>Ny</i>	ν
<i>Derivada</i>	∂

Se indicará claramente cuando un signo es exponente o subíndice, es decir, el subíndice se encerrará en un círculo y el exponente en un cuadrado. Las tablas llevarán una numeración indoarábiga y podrán ser incluidas en el texto o en hoja aparte, indicándose la ubicación que deben llevar. Los números decimales irán alineados por la coma.

La extensión máxima de los artículos será de 15 cuartillas.

Los autores respetarán las normas internacionales relativas a las abreviaturas de los artículos de las publicaciones, símbolos y unidades de medidas, las cuales especificarán con claridad.

El editor se reserva el derecho de hacer las modificaciones de estilo correspondientes.