

Modelo matemático para una batería de cinco reactores continuos con agitación. Primera parte

Mathematical Model for a Battery of Five Continuous Reactors with Agitation. Part 1

Dra. Dania del-Toro-Álvarez, daniadt@fiq.uo.edu.cu, MSc. Antonio Pons-Hernández, apons@fiq.uo.edu.cu, Dr. René Viera-Bertrán, Ing. Zulai Emasabe-Monier

Facultad de Ingeniería Química, Universidad de Oriente, Santiago de Cuba, Cuba

Este trabajo se ocupa del desarrollo de un modelo matemático para la simulación de una batería de reactores capaz de reproducir el comportamiento de un sistema reaccionante fluido-sólido no catalítico, en una secuencia de cinco reactores continuos con agitación conectados en serie, donde la concentración del reactante en la fase líquida cambia de etapa en etapa, y el tiempo de residencia medio es igual en todas ellas. La primera etapa de este trabajo, consistió en la búsqueda sobre los elementos teóricos fundamentales de los sistemas reaccionantes fluido-sólido no catalíticos, de los cuales, se destacan la aplicación del modelo de centro sin reaccionar como el más idóneo para explicar el paso de reacción actuante y el efecto de la concentración sobre el tiempo de reacción completa de las partículas, independiente del paso que controle el proceso. Posteriormente, se desarrollaron las expresiones de la distribución de tiempos de residencias para una batería de cinco reactores, para los casos en que el tiempo de residencia medio es igual en las etapas y cuando es diferente en cada una de ellas. Luego, se demostró que la fracción no convertida promedio de un tamaño de partícula (\bar{I}_i) depende de la relación (τ_i / t_{pn}) y no de sus valores individuales, hecho que soluciona el empleo de dicha expresión, cuando la concentración del reactante en la fase líquida no es sea igual en todas las etapas.

Palabras clave: *neutralización, tiempo de residencia medio, tiempo de reacción completa.*

This work is in charge of the development of a mathematical model for the simulation of a battery of reactors able to reproduce the behavior of a reacting system non catalytic fluid-solid, in a sequence of five continuous reactors with agitation connected in series, where the concentration of the reactant in the liquid phase changes stage in stage, and the time of residence means is same in all them. The first stage of this work, consisted on the search on the fundamental theoretical elements of the systems non catalytic reacting fluid-solid, of those which, they stand out the application of the center pattern without reacting as the most suitable to explain the step of predominant reaction and the effect of the concentration on the time of complete reaction of the particles, independent of the step that controls the process. Later on, the expressions of the distribution of times of residences were developed for a battery of five reactors, for the cases in that the time of residence means is same in the stages and when it is different in each one of them. Then, it was demonstrated that the fraction not converted average of a particle size (\bar{I}_i) it depends on the relationship (τ_i / t_{pn}) and not of their individual values, fact that solves the employment of this expression, when the concentration of the reactant in the liquid phase is not it is same in all the stages.

Key words: *neutralization, residence time, time of complete reaction.*

Introducción

El estudio de los sistemas fluido-sólidos no catalíticos es muy complejo pues en la casi totalidad de los procesos se desconoce el modelo de reacción, el comportamiento de la velocidad de la reacción y de ahí los posibles pasos que controlan el proceso reaccionante, el comportamiento de las partículas si

son de tamaño fijo o decreciente y otros aspectos. Este desconocimiento trae consigo la necesidad de realizar un proceso iterativo para identificar el comportamiento real del proceso que se analice. Por otra parte, las ecuaciones a utilizar en todos los casos se plantean en la literatura de manera general, por lo que se necesita obtener las expresiones ajustadas al sistema que se estudia.

El objetivo de este trabajo es el desarrollo de parte de los elementos necesarios para la obtención de un modelo matemático para la simulación de una batería de reactores capaz de reproducir el comportamiento de un sistema reaccionante fluido-sólido no catalítico, en una secuencia de cinco reactores continuos con agitación conectados en serie, donde la concentración del reactante en la fase fluida cambia de etapa en etapa, y el tiempo de residencia medio es igual en todas ellas. Una situación similar a ésta se presenta en las plantas de neutralización y lixiviación del complejo Industrial "Comandante Pedro Sotto Alba" de Moa.

Fundamento teórico

Identificación del mecanismo global de las reacciones fluido-sólidos no catalíticos

Para los sistemas reaccionante líquido-sólidos no catalíticos se consideran dos modelos idealizados que se aproximan en mayor o menor grado, al comportamiento real de la mayoría de estos sistemas. Estos modelos son: modelo de reacción continua y modelo centro sin reaccionar, según /4 y 5/.

La experiencia demuestra que el modelo de reacción continua es aplicable a un menor número de casos que el modelo centro sin reaccionar, por lo que este último es el que se utiliza en el desarrollo de este trabajo. Según este modelo, el desarrollo de una reacción irreversible, donde los reactantes se encuentran en dos fases, supone para el proceso de reacción global sobre cada partícula, los mecanismos siguientes:

Partículas de tamaño fijo

- Difusión del reactivo líquido a través de la película líquida que rodea a la partícula.

- Difusión del reactivo líquido a través de la capa de sólidos productos formados durante la reacción.
- Reacción entre el reactivo líquido y el reactivo sólido, sobre la superficie del núcleo sin reaccionar.

Partículas de tamaño decreciente

Cuando la partícula cambia de tamaño durante el proceso reaccionante, no existe la formación de costra y en consecuencia, esta no ofrece resistencia a la reacción; por tanto se considerarán los mecanismos siguientes.

- Difusión del reactivo líquido a través de la película líquida que rodea a la partícula.
- Reacción entre el reactivo líquido y el reactivo sólido, sobre la superficie del núcleo sin reaccionar.

La velocidad global del proceso define la etapa controlante del sistema, sin embargo, estos mecanismos no se encuentran de forma aislada, por lo que, es más probable la contribución simultánea de la resistencia de cada una de ellas, en vez de controlar uno específicamente.

Expresiones del tiempo de reacción completa de las partículas

El tiempo de reacción de la partícula depende en gran medida del mecanismo controlante de la reacción. Una vez que la partícula se ha convertido completamente, ese tiempo se denomina tiempo de reacción completa, /4 y 5/. A continuación, se presenta en la tabla 1 las expresiones del tiempo de reacción completa de las partículas (t_i), correspondiente a cada mecanismo de control, considerando partículas de tamaño fijo y partículas de tamaño decreciente.

Tabla 1
Expresiones del tiempo de reacción completa
para partículas de tamaño fijo y partículas de tamaño decreciente

Mecanismo controlante	Partículas de tamaño fijo	Partículas de tamaño decreciente
	Tiempo de reacción completa	Tiempo de reacción completa
Difusión externa de la película líquida	$\tau_i = \frac{R_0 * \rho}{3 * Z * K_1 * CAS} \quad (1)$	$\tau_i = \frac{R_0^2 * \rho * y}{2 * Z * CAS * D} \quad (4)$
Difusión a través costra producto	$\tau_i = \frac{R_0^2 * \rho}{6 * Z * CAS * D} \quad (2)$	No procede
Reacción química	$\tau_i = \frac{R_0 * \rho}{Z * CAS * K_s} \quad (3)$	$\tau_i = \frac{R_0 * \rho}{Z * CAS * K_s} \quad (5)$

donde:

τ_i : tiempo de reacción completa de un determinado tamaño de partícula

R_0 : radio exterior inicial de la partícula sólida

ρ : densidad del sólido

Z : coeficiente estequiométrico del sólido

D : coeficiente de difusión molecular

CAS : concentración del reactivo líquido

y : fracción molar

K_s : constante de velocidad de reacción sobre la superficie del centro sin reaccionar

K_1 : coeficiente de transferencia de masa en la fase líquida

Si se tiene un sistema formado por un determinado número de partículas, donde se conoce el tamaño de cada una de ellas, y además se conoce al menos el tiempo de reacción completa de una de esas partículas, es posible determinar el valor del tiempo de reacción completa de las restantes partículas según la relación siguiente:

$$\frac{\tau_i}{\tau_{bn}} = \left(\frac{R_i}{R_b} \right)^{K_0} \quad (6)$$

donde:

t_i : tiempo de reacción completa de un determinado tamaño de partícula.

t_{bn} : tiempo de reacción completa del tamaño de partícula considerado como tamaño base.

R_i y R_b : tamaño determinado de partícula y tamaño considerado como tamaño base respectivamente.

K_0 : factor que depende del mecanismo controlante de la reacción

Si el mecanismo controlante es la reacción química, K_0 toma el valor de 1 ($K_0=1$); si es la difusión externa, K_0 toma el valor de 2 ($K_0=2$).

Modelos que describen el comportamiento de los reactores continuos con agitación (RCCA) en un sistema líquido – sólido no catalítico

El modelo matemático del comportamiento de una etapa de la batería de RCCA cualquiera, se basa en tres suposiciones básicas, /1 y 2/:

- 1 Las partículas se comportan como un macro fluido perfecto, es decir, cada partícula posee un comportamiento propio, dado por sus dimensiones y por la composición del medio.
- 2 Dentro de cada etapa existen condiciones de mezclado perfecto para la suspensión sólido-líquido, en consecuencia: dentro de la etapa y en la corriente de salida la distribución de tamaños de las partículas es la misma y la composición de la fase líquida, el pH, y el resto de las propiedades tienen el mismo valor.
- 3 Debido al carácter de macro fluido y a la condición de mezclado perfecto, las partículas de un mismo tamaño alcanzan diferentes grados de conversión, según su tiempo de residencia en el reactor.

Expresiones para el comportamiento de una partícula

En los sistemas líquido-sólidos no catalíticos, las partículas sólidas reaccionan con el reactante de la fase líquida alcanzándose un determinado grado de conversión en un tiempo dado. Cuando el tiempo de reacción alcanza el valor del tiempo de reacción completa, entonces

se puede decir que la partícula ha reaccionado completamente; por lo que se puede plantear de manera general que existe una relación funcional entre la fracción no convertida de la partícula sólida ($1-x$) y la relación tiempo de reacción y tiempo de reacción completa (t/t_i). Esta relación depende en gran medida del mecanismo controlante de la reacción como se muestra en la tabla 2.

Tabla 2
Relación entre la fracción no convertida (I) y la relación (t/t_i)

Etapa Controlante	Relación entre I y t/τ	
	Partículas de tamaño fijo	Partículas de tamaño decreciente
Difusión externa de la película líquida	$I_i = \left(1 - \frac{t}{\tau_i}\right)$ (7)	$I_i = \left(1 - \frac{t}{\tau_i}\right)^{\frac{3}{2}}$ (10)
Difusión a través costra producto	$\left(\frac{t}{\tau_i}\right) = 1 - 3(I_i)^{\frac{2}{3}} + 2(I_i)$ (8)	No procede
Reacción química	$I_i = \left(1 - \frac{t}{\tau_i}\right)^3$ (9)	$I_i = \left(1 - \frac{t}{\tau_i}\right)^3$ (11)

donde:

t : tiempo de reacción.

t_i : tiempo de reacción completa de un determinado tamaño de partícula.

x : conversión de la partícula sólida.

$I_i = (1-x)$: fracción no convertida de la partícula de tamaño i .

Expresiones para el comportamiento de una masa de partículas, considerando un reactor continuo con mezclado perfecto

Un solo reactor, alimentado de partículas de tamaño único

La fracción sin convertir (I) en una partícula cualquiera de tamaño i , es función de su tiempo de permanencia en el ámbito de reacción y de su tiempo de reacción completa, como se muestra en la tabla 2. Por esta causa y dado el hecho de que en un reactor con mezclado perfecto las partículas tienen diferentes tiempos de residencia, aunque el alimentado conste de un tamaño único, las partículas en la corriente de salida presentarán grados de conversión diferentes. En relación con esto, la eficiencia del funcionamiento del reactor se debe expresar en términos de valores medios del índice de funcionamiento que se escoja (la conversión o la fracción sin convertir en la masa sólida alimentada); por ejemplo, para los sólidos que salen del reactor:

$$\left(\begin{array}{l} \text{Valor medio de la} \\ \text{fracción del reactante} \\ \text{sólido no convertida} \end{array} \right) = \sum \left(\begin{array}{l} \text{Fracción no convertida en} \\ \text{partículas que permanecie-} \\ \text{ron en el reactor tiempos} \\ \text{comprendidos entre} \\ t \text{ y } t + dt \end{array} \right) \left(\begin{array}{l} \text{Fracción del alimentado} \\ \text{que permanece en el reactor} \\ \text{tiempos comprendidos entre} \\ t \text{ y } t + dt \end{array} \right)$$

En términos matemáticos:

$$\bar{I}_i = \int_0^{\tau_i} I_i \left(\frac{t}{\tau_i} \right) \cdot E(t) dt \quad (12)$$

donde:

\bar{I}_i : Fracción no convertida promedio para partículas de tamaño i

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

$E(t)$: Distribución de tiempos de residencia.

La distribución de tiempos de residencia correspondiente al mezclado perfecto cuando se trabaja con una sola etapa o un solo reactor, viene dada por:

$$E(t) = 1 / \bar{t} * e \left(- t / \bar{t} \right) \quad (13)$$

donde:

$$\bar{t} = V / q \quad (14)$$

\bar{t} : tiempo de residencia promedio en el reactor.

V : volumen del reactor.

q : flujo volumétrico que atraviesa el reactor.

La expresión catarse se puede encontrar en cualquier bibliografía cuya temática se refiera al diseño de reactores; sin embargo, las expresiones resultantes de la integración de la expresión 13, para un sistema de reactores de dos o más etapas no aparece en ninguna bibliografía, constituyendo

esto un problema a resolver para la conformación del modelo matemático que se desea conformar. Por otra parte, la expresión resultante integrada depende si en el sistema, el tiempo de residencia medio cambia o no en de una etapa a la otra.

Cuando la composición de la fase líquida permanece constante, el comportamiento del sistema se puede determinar mediante una relación funcional de la forma: $I = j(t/t)$ y la ecuación (13), utilizando la expresión de $E(t)$ que corresponda según el número de etapas /3 y 5/.

Sin embargo, el empleo de una ecuación de la forma: $I = j(t/t)$ en un sistema de varias etapas, está restringido a los casos en que el tiempo de reacción completa de las partículas es el mismo para todas ellas, condición que requiere que la concentración del reactante de la fase líquida sea la misma en todo el sistema. En este trabajo, la concentración cambia de etapa en etapa; por lo que este hecho constituye otro problema a resolver para la conformación del modelo matemático.

- Un solo reactor, alimentado de partículas de tamaño diferente.

Si las partículas alimentadas al reactor son de diferentes tamaños, entonces la conversión final será un promedio que estará en función de la suma de las contribuciones que hagan todas las partículas de diferentes tamaños; obteniéndose de esta manera una conversión promedios de promedios, como se muestra a continuación:

$$\left(\begin{array}{l} \text{valor mediodela fracción} \\ \text{no convertida de la masa} \\ \text{de partículas a la salida} \\ \text{del reactor} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{valor mediodela fracción} \\ \text{no convertida en partículas} \\ \text{de tamaño } i \end{array} \right) \left(\begin{array}{l} \text{Fracción en el alimentado} \\ \text{de partículas de tamaño } i \end{array} \right)$$

Matemáticamente esto puede expresarse como:

$$\bar{I} = \sum_{i=1}^{NT} (\bar{I}_i) * F_i \quad (15)$$

donde:

\bar{I} : fracción no convertida promedio total.

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

NT : número de tamaños.

Materiales y métodos

La metodología a seguir consistió en:

- Considerar modelo centro sin reaccionar, partículas de tamaño fijo y como paso controlante la difusión externa en la película líquida, sistema de cinco (5) reactores continuos con agitación, igual tiempo de residencia, pero concentración del reactante en la fase fluida distinta en cada uno de ellos.
- Desarrollar las expresiones de la distribución de tiempos de residencia para una batería de cinco (5) reactores, considerando: igual y distinto tiempo de residencia en cada una de las etapas.
- Estudiar una vía de solución al empleo de la expresión de la fracción no convertida promedio para partículas de tamaño i , ya que ella sólo se emplea cuando la concentración es la misma en cada reactor.

donde:

N : número de reactores en la secuencia

tpn : tiempo de residencia medio en cada etapa
Se obtienen las expresiones como se muestran a continuación:

Resultados y discusión

El sistema que se estudia presenta las siguientes características: es un sistema de cinco reactores continuos con agitación, donde la concentración del reactante en la fase fluida cambia de etapa en etapa, se consideran partículas de tamaño fijo y como paso controlante la difusión externa en la película líquida; por lo que los resultados de este trabajo se basan en la presentación parcial de las expresiones ajustadas al sistema objeto de estudio que se obtienen a partir de expresiones generales que se relacionan en las bibliografías consultadas:

- 1 Obtención de las expresiones de la distribución de los tiempos de residencia para un sistema donde el tiempo de residencia medio es:
 - a. Igual en cada una de las etapas.
 - b. Distinto en cada una de las etapas.
- 2 Solución al empleo de la ecuación de la fracción no convertida promedio para partículas de tamaño i .

Obtención de las expresiones de la distribución de tiempos de residencia en una batería de reactores continuos con agitación de cinco (5) etapas

- Tiempos de Residencia Medio iguales en todas las etapas.

Partiendo de la expresión general de la distribución de tiempos de residencias cuando el tiempo de residencia medios es igual en todas las etapas:

$$E_N(t) = \frac{1}{(N-1)!} * \frac{1}{tpn} * \left[\frac{t}{tpn} \right]^{N-1} * e^{-\left(\frac{t}{tpn} \right)} \quad (16)$$

- Para una etapa $N = 1$

$$E_{N=1}(t) = \frac{1}{tpn} * e^{-t/tpn} \quad (17)$$

- Para dos etapas N=2

$$E_{N=2}(t) = \frac{t}{t_{pn}^2} * e^{-t/t_{pn}} \quad (18)$$

- Para tres etapas N=3

$$E_{N=3}(t) = \frac{t^2}{2t_{pn}^3} * e^{-t/t_{pn}} \quad (19)$$

- Para cuatro etapas N=4

$$E_{N=4}(t) = \frac{t^3}{6t_{pn}^4} * e^{-t/t_{pn}} \quad (20)$$

- Para cinco etapas N=5

$$E_{N=5}(t) = \frac{t^4}{24t_{pn}^5} * e^{-t/t_{pn}} \quad (21)$$

Tiempos de residencia medio distintos en todas las etapas

Partiendo de la expresión general de la distribución de tiempos de residencias cuando los tiempos de residencia medios son distintos en todas las etapas:

- Para tres etapas N=3

$$E_3 = \frac{tp_1 e^{\left(-\frac{t}{tp_1}\right)}}{(tp_1 - tp_2)(tp_1 - tp_3)} + \frac{tp_2 e^{\left(-\frac{t}{tp_2}\right)}}{(tp_2 - tp_1)(tp_2 - tp_3)} + \frac{tp_3 e^{\left(-\frac{t}{tp_3}\right)}}{(tp_3 - tp_1)(tp_3 - tp_2)} \quad (25)$$

- Para cuatro etapas N=4

$$E_4 = A_{41} e^{\left(-\frac{t}{tp_1}\right)} + A_{42} e^{\left(-\frac{t}{tp_2}\right)} + A_{43} e^{\left(-\frac{t}{tp_3}\right)} + A_{44} e^{\left(-\frac{t}{tp_4}\right)} \quad (26)$$

donde los coeficientes: A41, A42, A43, A44; vienen dados por;

$$A_{41} = \frac{tp_1^2}{(tp_1 - tp_2)(tp_1 - tp_3)(tp_1 - tp_4)} \quad (27)$$

$$A_{42} = \frac{tp_2^2}{(tp_2 - tp_1)(tp_2 - tp_3)(tp_2 - tp_4)} \quad (28)$$

$$E_N(t) = \prod_{m=1}^N \left(1/t_{pm}\right) \left[\sum_{n=1}^n \frac{e^{(-t/t_{pm})}}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq m}}^N \left(\frac{1}{t_{pj}} - \frac{1}{t_{pm}}\right)} \right] \quad (22)$$

donde:

N: número de reactores en la secuencia

m: número de una etapa particular

j: número de una etapa particular

tpm: tiempo medio de residencia de la etapa m

tpj: Tiempo medio de residencia de la etapa j

Se obtienen las expresiones como se muestran a continuación:

- Para una etapa N=1

$$E_1 = \frac{e^{\left(-\frac{t}{tp_1}\right)}}{tp_1} \quad (23)$$

- Para dos etapas N=2

$$E_2 = \frac{e^{\left(-\frac{t}{tp_1}\right)}}{tp_1 - tp_2} + \frac{e^{\left(-\frac{t}{tp_2}\right)}}{tp_2 - tp_1} \quad (24)$$

$$A_{43} = \frac{tp_3^3}{(tp_3 - tp_1)(tp_3 - tp_2)(tp_3 - tp_4)} \quad (29)$$

$$A_{44} = \frac{tp_4^2}{(tp_4 - tp_1)(tp_4 - tp_2)(tp_4 - tp_3)} \quad (30)$$

- Para cuatro etapas N=5

$$E_5 = A_{51}e\left(\frac{-t}{tp_1}\right) + A_{52}e\left(\frac{-t}{tp_2}\right) + A_{53}e\left(\frac{-t}{tp_3}\right) + A_{54}e\left(\frac{-t}{tp_4}\right) + A_{55}e\left(\frac{-t}{tp_5}\right) \quad (31)$$

Donde los coeficientes: A51, A52, A53, A54, A55; vienen dados por;

$$A_{51} = \frac{tp_1^3}{(tp_1 - tp_2)(tp_1 - tp_3)(tp_1 - tp_4)(tp_1 - tp_5)} \quad (32)$$

$$A_{52} = \frac{tp_2^3}{(tp_2 - tp_1)(tp_2 - tp_3)(tp_2 - tp_4)(tp_2 - tp_5)} \quad (33)$$

$$A_{53} = \frac{tp_3^3}{(tp_3 - tp_1)(tp_3 - tp_2)(tp_3 - tp_4)(tp_3 - tp_5)} \quad (34)$$

$$A_{54} = \frac{tp_4^3}{(tp_4 - tp_1)(tp_4 - tp_2)(tp_4 - tp_3)(tp_4 - tp_5)} \quad (35)$$

$$A_{55} = \frac{tp_5^3}{(tp_5 - tp_1)(tp_5 - tp_2)(tp_5 - tp_3)(tp_5 - tp_4)} \quad (36)$$

Solución al empleo de la ecuación de la fracción no convertida promedio para partículas de tamaño i

La fracción no convertida promedio de un tamaño de partícula depende del paso que controle la reacción; por lo que a continuación se demostrará la dependencia funcional entre la fracción no convertida promedio de un tamaño de partícula (\bar{I}_i) y la relación (t_i/tp_n), considerando

que controla la difusión externa en la película líquida y que las partículas son de tamaño fijo.

El procedimiento a seguir para demostrar la dependencia de estos dos parámetros es bastante extenso, por lo que a continuación se mostrarán las expresiones integradas de la fracción no convertida cuando se trabaja con un reactor y con dos conectados en serie.

- Expresiones integradas para un solo reactor.

$$IM_{i1} = \int_0^1 (1 - m)^* y_1 * e^{(-y_1 * m)} dm \quad (37)$$

$$IM_{i1} = \frac{e^{(-y_1)} + y_1 - 1}{y_1}$$

- Expresiones integradas para dos reactores conectados en serie.

Para dos reactores en serie con τ_{pn} diferentes. τ_{p1} , y τ_{p2} .

$$IM_{i,2} = \int_0^1 (1-m) \left(\frac{y_1 y_2 e^{(-y_1 m)}}{y_2 - y_1} + \frac{y_1 y_2 e^{(-y_2 m)}}{y_1 - y_2} \right) dm \quad (38)$$

$$IM_{i,2} = \frac{-y_1^2 e^{(-y_2)} + y_2^2 e^{(-y_1)} + y_2^2 y_1 - y_2^2 - y_1^2 y_2 + y_1^2}{(y_1 - y_2) y_1 y_2} \quad (39)$$

Las expresiones (37 y 39) demuestran que la fracción no convertida promedio para un tamaño de partícula sólo depende de \underline{y} ; es decir, depende de la relación entre los parámetros (τ_i / τ_{pn}) y no de sus valores individuales. El resultado de este análisis es válido para cualquier paso controlante.

Las variables y_1 , y_2 y y_3 se refieren a las relaciones entre él t_i y el τ_{pn} del reactor que se analice, y m es la relación entre t_i y t .

El sistema que se estudia tiene la dificultad que la concentración cambia de etapa en etapa y por ello, el tiempo de reacción completa de una misma partícula cambia también; por lo que el empleo de una ecuación de la forma: $I_i = \phi(t / t_i)$ no es posible. Si se tiene en cuenta que la solución de la ecuación (12) sólo depende del valor de la relación entre las variables y no del valor individual de las mismas; es decir, es una función de la forma: $IM_i = \psi(\tau_i / \tau_{pn})$, como se demostró anteriormente; entonces se puede plantear que el comportamiento de un sistema real con tiempos de reacción completa diferentes en sus etapas, pero con tiempos de residencia medios iguales será idéntico al de otro sistema con tiempos de reacción completa iguales en sus etapas, pero con tiempos de residencia medios diferentes, siempre que, en cada etapa, la relación entre los valores aparentes de estas variables, tenga el mismo valor que la relación entre los valores del sistema real.

Es decir, siempre que se cumpla que:

$$(\tau_i / \tau_{pn})_a = (\tau_i / \tau_{pn})_r \quad (40)$$

$(t_i / \tau_{pn})_r$: valor obtenido con los valores de t_i y τ_{pn} reales de cada etapa.

$(t_i / \tau_{pn})_a$: valor obtenido con el valor de t_i a considerar constante y válido para todas las etapas, y con los valores de τ_{pn} (valores aparentes), que garanticen el cumplimiento de la ecuación (40) en cada etapa.

En estas circunstancias, la expresión de la distribución de tiempos de residencia a utilizar en la ecuación (12), es la correspondiente a la ecuación (22), ajustada al número de etapas que se utilice.

Situados en esta perspectiva, la corrección a realizar se reduce a determinar qué valor utilizar para el tiempo de reacción completa como constante y válido para todas las etapas, y qué valores utilizar (uno para cada etapa), para el tiempo de residencia medio, de manera que en todas se satisfaga la condición establecida por la ecuación (40).

De acuerdo con esto, los valores a utilizar en la ecuación (22) para los tiempos de residencia medio de las etapas, serán valores aparentes calculados según

$$(\tau_{pn})_a = \tau_{pn}(\tau_a / \tau_i) \quad (41)$$

donde:

$(\tau_{pn})_a$: tiempo de residencia medio aparente de la etapa n .

τ_a : tiempo de reacción completa constante a utilizar en todas las etapas.

La solución de la expresión (12) consiste en integrar la misma teniendo en cuenta a su vez la expresión correspondiente al paso que controle la velocidad de la reacción. Por otra parte, la determinación del tiempo de reacción completa de una batería de reactores exige de la realización de un proceso iterativo, en el cual se necesita las derivadas de la fracción media no convertida total

en cada reactor, expresión (15); por lo que, para culminar la conformación del modelo matemático es necesario obtener:

- 1 Las expresiones de la fracción media no convertida ajustadas a una batería de cinco (5) etapas.
- 2 Las expresiones de las derivadas de la fracción media no convertida total en cada reactor.

Una vez culminada estas dos etapas entonces se estará en condiciones de presentar el algoritmo a seguir para determinar el tiempo de reacción completa de las partículas a la salida de cada reactor y con ello la simulación de la batería de reactores.

Conclusiones

- 1 Se obtuvieron las expresiones a utilizar de la distribución del tiempos de residencia para una batería de cinco reactores, considerando en primer lugar, igual tiempo de residencia en cada etapa y en segundo lugar, tiempo de residencia distinto en cada etapa.
- 2 Se demostró que la fracción no convertida promedio de un tamaño de partícula (\bar{I}_i) depende de la relación (t_i/t_{pn}) y no de sus valores individuales.
- 3 Para la conformación final del modelo matemático se necesita la obtención de otras expresiones ajustadas a la situación de interés; por lo que, este elemento se presentará en una publicación que será la segunda parte.

Nomenclatura

CAS: concentración del reactivo líquido.

D: coeficiente de difusión molecular.

E (t): distribución de tiempos de residencia .

$I_i = (1-x)$: fracción no convertida de la partícula de tamaño i.

\bar{I}_i : fracción no convertida promedio para partículas de tamaño i

j: número de una etapa particular

K_0 : factor que depende del mecanismo controlante de la reacción.

Kl: coeficiente de transferencia de masa en la fase líquida.

Ks: constante de velocidad de reacción sobre la superficie del centro sin reaccionar.

m: número de una etapa particular

q: flujo volumétrico que atraviesa el reactor.

R0: radio exterior inicial de la partícula sólida.

Ri y R_p : tamaños determinado de partícula y tamaño considerado como tamaño base respectivamente

t: tiempo de reacción

\bar{t}_i : tiempo de residencia promedio en el reactor

tpj: tiempo medio de residencia de la etapa j

tpm: tiempo medio de residencia de la etapa m

tpn: tiempo de residencia medio en cada etapa

V: volumen del reactor

x: conversión de la partícula sólida

y: fracción mol

Z: coeficiente estequiométrico del sólido

r: densidad del sólido

t_{bn} : tiempo de reacción completa del tamaño de partícula considerado como tamaño base

τ_i : tiempo de reacción completa de un determinado tamaño de partícula

Bibliografía

- 1 DEL TORO ÁLVAREZ, Dania; VIERA BERTRÁN, René y col. "Identificación básica del modelo y el paso controlante del proceso de neutralización". Tecnología Química. Vol. XXIX, No. 2. 2009.
- 2 DÍAZ C.A. "Simulación de un reactor para la Neutralización de ácido sulfúrico". Trabajo de diploma, U. O. 1999.
- 3 MASON D. R. y col. "Continuous flow stirred tank reactor systems". Ind.Eng.Chem. Vol 42, No. 5, 1950
- 4 OCTAVE LEVENSPIEL «Chemical Reaction Engineering. John Wiley, 1962
- 5 VIERA R. y S. SOLER. "Diseño y Análisis de Reactores Químicos". ENPES. 1992.