

EXPRESIONES PARA SISTEMAS FLUIDO-SÓLIDO CONTROLADOS POR LA DIFUSIÓN INTERNA EN PARTÍCULAS DE TAMAÑO FIJO. PARTE I

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

En este trabajo se obtiene un modelo tipo caja negra que establece una relación explícita entre la fracción de sólido no convertido (I), como una función del tiempo de reacción completa (t), del tamaño de partícula que se considere, para los casos de reacción controlada por la difusión interna en partícula de tamaño fijo, con lo cual se elimina la necesidad de utilizar procedimientos iterativos en situaciones de esta naturaleza, y el tratamiento de esta tipo de situación se reduce, prácticamente, al mismo grado de dificultad que el de los otros casos de pasos controlantes posibles: difusión externa, y reacción química. La ventaja proporcionada por el empleo de este modelo, resulta más significativa cuando se trata de calcular el comportamiento de sistemas formados por varias unidades conectadas en serie; donde el empleo de procedimientos iterativos constituye un grado de dificultad de magnitud considerable. Además, el procedimiento utilizado puede ser aplicado a otras situaciones donde la ausencia de relaciones explícitas entre variables determinantes de un proceso, da lugar a dificultades similares.

Palabras clave: paso controlante, difusión interna, fluido-sólido no catalítico.

In this work, you get a black box model which provides an explicit relationship between the fraction of unconverted solid (I) as a function of time of complete reaction (t), particle size is considered, thereby eliminating the need for iterative procedures in situations of this nature, and treatment of this type of situation is reduced practically to the same degree of difficulty than other cases of possible controlling steps: external diffusion and chemical reaction.

The advantage provided by the use of this model is more significant when it comes to calculating the behavior of systems consisting of several units connected in series, where the use of iterative procedures is a degree of difficulty of considerable magnitude. Moreover, the procedure used can be applied to other situations where the absence of explicit relationships among variables of a process leads to similar difficulties.

Key words: controlling step, internal diffusion, fluid-solid noncatalytic.

Introducción

Los procesos reaccionantes en sistemas fluido-sólido no catalíticos, con partículas de tamaño fijo y controlados por la difusión a través de las cenizas formada por la masa de sólido que ha reaccionado (costra); presentan el inconveniente de no disponer de una expresión explícita que relacione la fracción de sólido no convertido (I), como una función del tiempo de reacción completa (t); en consecuencia los cálculos necesariamente requieren de procedimientos iterativos, aun cuando el tiempo de reacción completa de la partícula sea conocido. La situación resulta más tediosa cuando además se trabaja con una masa de partículas de diferentes tamaños, donde cada tamaño exige el mismo procedimiento.

La situación resulta más crítica cuando se trata de varios reactores conectados en cascada, donde el comportamiento de cada unidad de la secuencia obliga a un procedimiento iterativo que escapa a evaluaciones rápidas.

Este trabajo presenta un procedimiento mediante el cual se identifica un modelo tipo caja negra (modelo de regresión), que establece una relación explícita entre la fracción de sólido no convertido y el tiempo de reacción completa del tamaño de partícula que se considere, lo cual sitúa los cálculos para este tipo de situación, en igualdad de condiciones en cuanto a dificultad de cálculos, con los otros casos posibles como pasos controlantes: difusión externa, y reacción química.

Fundamentación teórica

Para una reacción entre un fluido(A) y un sólido (B), según la estequiometría:



La fracción de sólido no convertido para partículas esféricas de tamaño (R_i), viene dada por la definición.

$$I_i = 1-X_B$$

donde:

I_i : fracción de sólido de tamaño (R_i) no convertido.
 X_B : conversión fraccional del sólido B.

En el caso de reactores el valor de I_i viene dado por la expresión.

$$I_i = \int_0^{\infty} I(t/\tau_i) \cdot E_t \cdot dt \quad (1)$$

donde:

$I(t/\tau_i)$: expresión de la fracción de sólido no convertido, como función del tiempo de permanencia de la partícula en la zona de reacción (t), y el tiempo de reacción completa que le corresponde por su tamaño (τ_i).

E_t : distribución de tiempos de residencia que corresponde al sistema de reactores que se utilice.

Desarrollo

En el caso que nos ocupa, la dificultad reside en no disponer de una expresión explícita para el término $I_i(t/\tau_i)$, luego el método utilizado se ajusta a esa finalidad, y puede ser descrito en los términos siguientes:

1. A partir de la definición de (t/t) como función de I_t , para un tamaño de partícula dado, construir una tabla de valores de: I_i vs. (t/t) .
2. Una vez construida la tabla anterior, mediante análisis de regresión identificar un modelo tipo caja negra que proporcione una reproducción satisfactoria de la relación entre I_t y (t/t) .

Para partículas esféricas de tamaño fijo, y proceso controlado por la difusión en la costra, la definición de (t/t) como función de I_t , viene dada por:

$$(t/t) = 1-3 \cdot I_t^{2/3} + 2 \cdot I_t \quad (2)$$

Los valores aludidos en el primer punto, se presentan en la tabla 1.

donde:

Y : valor de (t/t) definido por la ecuación (2).

Tabla 1
Relación entre la fracción de sólido no convertido (i_i), y la relación ($Y=t/t$)

	I_i	Y		I_i	Y
1	0	1	8	0,01	0,880 752 335
2	0,001	0,972	9	0,015	0,84 753 394
3	0,002	0,956 377 968	10	0,02	0,81 895 811
4	0,0025	0,949 739 528	11	0,025	0,793 503 608
5	0,003	0,943 597 485	12	0,03	0,770 353 185
6	0,004	0,932 404 737	13	0,035	0,749 003 756
7	0,005	0,922 279 468	14	0,04	0,729 117 871

Continuación de la tabla 1

	I _x	Y		I _x	Y
15	0,045	0,710 455 301	41	0,175	0,411 401 288
16	0,05	0,692 837 358	42	0,18	0,403 607 288
17	0,055	0,676 126 577	43	0,185	0,395 977 311
18	0,06	0,660 214 341	44	0,19	0,388 505 471
19	0,065	0,645 012 931	45	0,195	0,381 186 244
20	0,07	0,630 450 224	46	0,2	0,374 014 432
21	0,075	0,616 466 004	47	0,205	0,366 985 141
22	0,08	0,603 009 34	48	0,21	0,360 093 755
23	0,085	0,590 036 665	49	0,215	0,353 335 911
24	0,09	0,577 510 345	50	0,22	0,346 707 484
25	0,095	0,565 397 586	51	0,225	0,340 204 567
26	0,1	0,553 669 593	52	0,23	0,333 823 453
27	0,105	0,542 300 905	53	0,235	0,327 560 625
28	0,11	0,531 268 873	54	0,24	0,321 412 738
29	0,115	0,520 553 231	55	0,245	0,315 376 611
30	0,12	0,510 135 761	56	0,25	0,309 449 211
31	0,125	0,5	57	0,255	0,303 627 649
32	0,13	0,490 131 017	58	0,26	0,297 909 166
33	0,135	0,480 515 211	59	0,265	0,292 291 128
34	0,14	0,471 14 0 15	60	0,27	0,286 771 015
35	0,145	0,461 994 434	61	0,275	0,281 346 416
36	0,15	0,453 067 574	62	0,28	0,276 015 023
37	0,155	0,444 349 893	63	0,285	0,270 774 623
38	0,16	0,435 832 44	64	0,29	0,265 623 093
39	0,165	0,427 506 912	65	0,295	0,260 538 397
40	0,17	0,419 365 592	66	0,3	0,255 578 576

Continuación de la tabla 1

	I _x	Y		I _x	Y
67	0,305	0,250 680 175	93	0,435	0,147 679 017
68	0,31	0,245 866 11	94	0,44	0,144 506 31
69	0,315	0,241 129 914	95	0,445	0,141 383 406
70	0,32	0,236 471 486	96	0,45	0,138 309 561
71	0,325	0,231 889 208	97	0,455	0,135 284 05
72	0,33	0,227 381 523	98	0,46	0,132 306 165
73	0,335	0,222 946 928	99	0,465	0,129 375 217
74	0,34	0,218 583 972	100	0,47	0,126 490 535
75	0,345	0,214 291 253	101	0,475	0,123 651 463
76	0,35	0,210 067 417	102	0,48	0,120 857 362
77	0,355	0,205 911 156	103	0,485	0,118 107 61
78	0,36	0,201 821 202	104	0,49	0,115 401 596
79	0,365	0,197 796 332	105	0,495	0,112 738 728
80	0,37	0,193 835 358	106	0,5	0,110 118 425
81	0,375	0,189 937 133	107	0,505	0,107 540 121
82	0,38	0,186 100 542	108	0,51	0,105 003 261
83	0,385	0,182 324 507	109	0,515	0,102 507 305
84	0,39	0,178 607 982	110	0,52	0,100 051 725
85	0,395	0,174 949 952	111	0,525	0,097 636 0031
86	0,4	0,171 349 43	112	0,53	0,095 259 6346
87	0,405	0,167 805 461	113	0,535	0,092 922 1249
88	0,41	0,164 317 116	114	0,54	0,090 622 9907
89	0,415	0,160 883 492	115	0,545	0,088 361 7589
90	0,42	0,157 503 711	116	0,55	0,086 137 9666
91	0,425	0,154 176 921	117	0,555	0,083 951 1806
92	0,43	0,150 902 292	118	0,56	0,081 800 8973

Continuación de la tabla 1

	I	Y		I	Y
119	0,565	0,079 686 742 3	146	0,7	0,034 879 451 1
120	0,57	0,077 608 270 1	147	0,705	0,033 630 337 6
121	0,575	0,075 565 064 1	148	0,71	0,032 407 786 6
122	0,58	0,073 556 715 9	149	0,715	0,031 211 549
123	0,585	0,071 582 825 4	150	0,72	0,030 041 379 7
124	0,59	0,069 643 000 4	151	0,725	0,028 897 037 6
125	0,595	0,067 736 856 7	152	0,73	0,027 778 285 5
126	0,6	0,065 864 017 3	153	0,735	0,026 684 89
127	0,605	0,064 024 112 7	154	0,74	0,025 616 621 3
128	0,61	0,062 216 7 80 4	155	0,745	0,024 573 253 2
129	0,615	0,060 441 665 1	156	0,75	0,023 554 563 3
130	0,62	0,058 698 417 8	157	0,755	0,022 560 332 4
131	0,625	0,056 986 696 3	158	0,76	0,021 590 344 8
132	0,63	0,055 306 165	159	0,765	0,020 644 38 8
133	0,635	0,053 656 494	160	0,77	0,019 722 252 8
134	0,64	0,052 037 359 9	161	0,775	0,018 823 733 3
135	0,645	0,050 448 444 9	162	0,78	0,017 948 626 4
136	0,65	0,048 889 437 1	163	0,785	0,017 096 732 3
137	0,655	0,047 360 030 2	164	0,79	0,016 267 854 1
138	0,66	0,045 859 923 3	165	0,795	0,015 461 797 7
139	0,665	0,044 388 820 7	166	0,8	0,014 678 372
140	0,67	0,042 946 432	167	0,805	0,013 917 388 5
141	0,675	0,041 532 472	168	0,81	0,013 178 661 6
142	0,68	0,040 146 660 1	169	0,815	0,012 462 008 3
143	0,685	0,038 788 720 7	170	0,82	0,011 767 248 2
144	0,69	0,037 458 382 9	171	0,825	0,011 094 203 5
145	0,695	0,036 155 380 3	172	0,83	0,010 442 698 8

Continuación de la tabla 1

	I _t	Y		I _t	Y
173	0,835	0,009 812 561 5	190	0,92	0,002 212 925 34
174	0,84	0,009 203 620 97	191	0,925	0,001 940 378 95
175	0,845	0,008 615 709 21	192	0,93	0,001 686 325 09
176	0,85	0,008 048 660 46	193	0,935	0,001 450 631 32
177	0,855	0,007 502 311 25	194	0,94	0,001 233 166 83
178	0,86	0,006 976 500 34	195	0,945	0,001 033 802 47
179	0,865	0,006 471 068 67	196	0,95	0,000 852 410 655
180	0,87	0,005 985 859 32	197	0,955	0,000 688 865 364
181	0,875	0,005 520 717 48	198	0,96	0,000 543 042 125
182	0,88	0,005 075 490 4	199	0,965	0,000 414 817 973
183	0,885	0,004 650 027 35	200	0,97	0,000 304 071 431
184	0,89	0,004 244 179 58	201	0,975	0,000 210 682 479
185	0,895	0,003 857 800 31	202	0,98	0,000 134 532 533
186	0,9	0,003 490 744 64	203	0,985	0,000 075 504 4192
187	0,905	0,003 142 869 58	204	0,99	0,000 033 482 3515
188	0,91	0,002 814 033 95	205	0,995	0,000 008 351 906 04
189	0,915	0,002 504 098 4	206	1	0

Resultados

Los datos de la tabla 1, fueron procesados me-

dante el Programa Profesional Statistica .6 con el módulo “nonlinear estimación”, como resultado se ajustó un modelo de la forma

$$I_t = A + A1*Y + A2*Y^2 + A3*Y^3 + A4*Y^4 + A5*exp. ^ (A6*Y)$$

donde:

A, A1, A2, A3, A4, A5, A6: constantes a determinar por el programa.

Y: valor de (t/t) definido por la ecuación (2).

Los resultados del proceso de cálculo se resumen a continuación;

$$A = 0,794 473 \quad A1 = -3,280 73, \quad A2 = 6,948 109 991 0 \quad A3 = -7,77422593 \quad A4 = 3,369 598 102 \quad A5 = 0,176 034 943 \quad A6 = -90,200 319 05$$

Coefficiente de regresión: R = .999736313

Los residuales presentan el comportamiento siguiente:

Tabla 2
Comportamiento de los residuales

	Residuales
MEDIA	-0,000 492 202 394
MEDIANA	-0,000 648 447 187
DESVIACIÓN ESTÁNDAR	0,006 627 086 84
Mayor residual negativo	-0,012 945 442 2
Mayor residual positivo	0,029 492 056 7

La figura 1 muestra el gráfico correspondiente al modelo ajustado; en el cual se observa la estrecha

correspondencia entre los valores predichos y los observados.

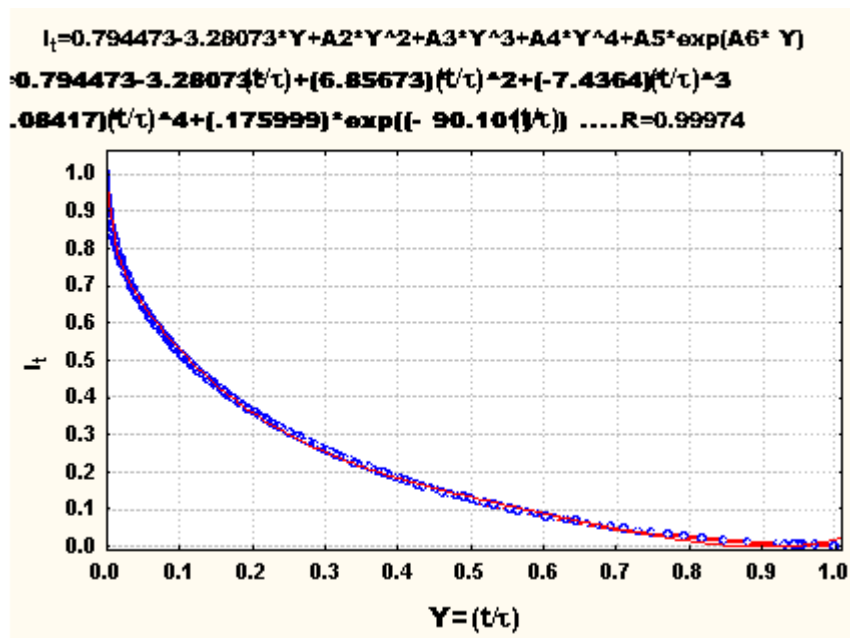


Fig. 1 Relación entre la fracción de sólido no convertida (i) y la relación (t/τ)

La relación obtenida crea las condiciones para obtener un conjunto de resultados que de otra forma requerirían una labor tediosa. Algunas de las aplicaciones posibles se presentan a continuación.

1. Comportamiento de sistemas reaccionantes

fluido-sólido no catalíticos bajo las condiciones siguientes:

1.1. Flujo en pistón de sólidos, partículas con un solo tamaño fijo.

Para este caso, la fracción de sólido no convertido viene dada por

$$I_t = 0,794 473 - 3,280 73 \cdot (t/\tau) + (6,948 11) \cdot (t/\tau)^2 + (-7,774 2) \cdot (t/\tau)^3 + (3,369 6) \cdot (t/\tau)^4 + 1760 \cdot \exp. ((-90,201) \cdot (t/\tau))$$

donde:

I_t : fracción del reactante sólido no convertido