

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

Mathematical Model for a battery of five continuous reactors with agitation. Part 2

Dra. Dania del Toro Álvarez, MSc. Antonio Pons Hernández, Dr. René Viera Bertrán, Ing Zulai Emasabe Monier

Facultad de Ingeniería Química - Universidad de Oriente, Avenida "Las Américas" s/n. Santiago de Cuba, Cuba. daniadt@fiq.uo.edu.cu

RESUMEN

Este trabajo se ocupa del desarrollo de una segunda parte de las expresiones que conforman 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. Esta segunda parte consistió en la obtención de las expresiones de la fracción media no convertida promedio para partículas de tamaño i , de la fracción media no convertida promedio total de las partículas, así como las derivadas de esta última, las cuales se sumaron a las expresiones obtenidas en la primera parte de este artículo para conformar el modelo matemático y por último en establecer un algoritmo sobre la base del modelo matemático obtenido que permite simular la batería de los cinco reactores con agitación.

Palabras claves: neutralización, tiempo de residencia medio, tiempo de reacción completa.

ABSTRACT

This work is in charge of the development of a second part of the expressions that they conform 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. This second part consisted on the obtaining of the expressions of the half fraction converted average for size particles i , of the half fraction not converted total average of the particles, as well as those derived of this last one, which were added to the expressions obtained in the first part of this article to conform the mathematical pattern and lastly in establishing an algorithm on the base of the obtained mathematical pattern that it allows to simulate the battery of the five reactors with agitation.

Keywords: neutralization, time of residence means, 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 consiste en el desarrollo de las ecuaciones que unidas a las obtenidas en la primera parte de este artículo conforman el modelo matemático necesario 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.

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 fracción media no convertida promedio para partículas de tamaño i para una batería de cinco (5) reactores.
- Desarrollar las expresiones de la fracción media no convertida promedio total de las partículas, así como sus derivadas, ajustadas a una batería de cinco (5) reactores.
- Establecer un algoritmo de solución para determinar el tiempo de reacción completa de las partículas en cada reactor, confirmar el mecanismo que controla la reacción según los resultados que se alcancen y simular el comportamiento de la batería de cinco reactores.

FUNDAMENTO TEÓRICO

1. 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 [6] y [7].

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.

2. 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, [6] y [7]. A continuación, se presenta en la tabla 1 las expresiones del tiempo de reacción completa de las partículas (τ_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	$\tau_i = \frac{R_0 * \rho}{3 * Z * K_1 * CAS} \dots\dots\dots(1)$	$\tau_i = \frac{R_0^2 * \rho * y}{2 * Z * CAS * D} \dots\dots\dots(4)$
Difusión a través costra producto	$\tau_i = \frac{R_0^2 * \rho}{\delta * Z * CAS * D} \dots\dots\dots(2)$	No procede
Reacción Química	$\tau_i = \frac{R_0 * \rho}{Z * CAS * K_s} \dots\dots\dots(3)$	$\tau_i = \frac{R_0 * \rho}{Z * CAS * K_s} \dots\dots\dots(5)$

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.

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 (6):

$$\frac{\tau_i}{\tau_{on}} = \left(\frac{DP_i}{DP_b} \right)^{K_0} \quad \dots(6)$$

Donde:

τ_i : Tiempo de reacción completa de un determinado tamaño de partícula.

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

DP_i y DP_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 ($K_0=2$).

3. 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.

3.1 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/τ_1). Esta relación depende en gran medida del mecanismo controlante de la reacción como se muestra en la tabla 2, [2] y [7].

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

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

Donde:

t: Tiempo de reacción.

x: Conversión de la partícula sólida.

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

3.2 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, [2] y [7]. 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: ver ecuación (12)

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

En términos matemáticos:

$$IM_i = \int_0^{\infty} I_i * E_N(t) dt \quad \dots(12)$$

Donde:

IM_i : Fracción no convertida promedio para partículas de tamaño i

$E_N(t)$: 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: ver ecuaciones (13) - (14)

$$E_1(t) = 1/tp_1 * e^{-t/tp_1} \quad \dots(13)$$

Donde:

$$tp_1 = V / q \quad \dots(14)$$

tp_1 : Tiempo de residencia promedio en el reactor.

V : Volumen del reactor.

q : Flujo volumétrico que atraviesa el reactor.

- 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 promedio de promedios, [2] y [6], como se muestra en la ecuación (15).

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

Matemáticamente esto puede expresarse como:

$$IMT = \sum_{i=1}^{NT} IM_i * F_i \quad \dots (15)$$

Donde:

IMT : Fracción no convertida promedio total.

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

NT : Número de tamaños de partículas

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El sistema que se estudia está formado por cinco (5) reactores continuos con agitación con las características siguientes: modelo de centro sin reaccionar, sistema fluido-sólido no catalítico, mezclado perfecto, difusión externa en la película como paso controlante, partículas de tamaño fijo, mezcla de partículas de diferentes tamaños, concentración de la fase fluida cambia de etapa a etapa y el tiempo de residencia medio es igual en cada una de ellas.

Para la conformación del modelo matemático es necesario:

1. Obtener las expresiones de la distribución de tiempos de residencias para un sistema de cinco RCCA, teniendo en cuenta que el tiempo de residencia medio es igual y distinto en cada una de las etapas.
2. Buscar solución al empleo de la ecuación de la fracción no convertida promedio para partículas de tamaño i , para el caso en que la concentración del reactante líquido cambia de etapa en etapa.
3. Obtener las expresiones de la fracción media no convertida promedio para partículas de tamaño i , para el caso en que la concentración del reactante líquido cambia de etapa en etapa, ajustadas a una batería de cinco (5) etapas.
4. Obtener las expresiones de la fracción media no convertida promedio total de las partículas, así como sus derivadas, ajustadas a una batería de cinco (5) etapas.
5. Establecer un algoritmo de solución para determinar el tiempo de reacción completa de las partículas en cada reactor y confirmar el mecanismo que controla la reacción según los resultados que se alcancen.

En [2] se resolvieron los dos primeros aspectos; por lo que en este artículo se presentará la solución de los tres últimos aspectos.

3. Expresiones de la fracción media no convertida promedio para partículas de tamaño i .

Para la obtención de estas expresiones se parte de la expresión general (12) y se sustituye en ella la expresión (7) y la correspondiente a la distribución de tiempos de residencias, considerando tiempo de residencia medio distintos en cada una de las etapas, para cumplir con lo demostrado en el segundo aspecto, y según el número de reactores que se trate, [2] y [4]. Teniendo en cuenta estos elementos las expresiones resultantes se muestran a continuación. Las expresiones de A21, A22, A31, A32, A33, A41, A42, A43, A44, A51, A52, A53, A54, y A55, se encuentran reportadas en las páginas de la 30-32 de [4].

- **Para una etapa N=1** (ver ecuaciones (16) - (17))

$$IM 1_i = \int_0^{\tau_i} \frac{(1 - t/\tau_i) e^{(-t/tp1)}}{tp1} dt \quad \dots(16)$$

$$IM 1_i = - \frac{\left(-e^{(\tau_i/tp1)} \tau_i + e^{(\tau_i/tp1)} tp1 - tp1 \right) e^{(-\tau_i/tp1)}}{\tau_i} \quad \dots(17)$$

- **Para dos etapas N=2** (ver ecuaciones (18) - (19))

$$IM 2_i = \int_0^{\tau_i} \left(1 - \frac{t}{\tau_i} \right) \left(A21 e^{(-t/tp1)} + A22 e^{(-t/tp2)} \right) dt \quad \dots(18)$$

$$IM 2_i = \frac{A21 tp1 \tau - A21 tp1^2 + A22 tp2 \tau - A22 tp2^2 + A22 tp2^2 e^{(-\frac{\tau_i}{tp2})} + A21 tp1^2 e^{(-\frac{\tau_i}{tp1})}}{\tau} \quad \dots(19)$$

- **Para tres etapas N=3** (ver ecuaciones (20) - (21))

$$IM 3_i = \int_0^{\tau_i} \left(1 - \frac{t}{\tau_i} \right) \left(A31 e^{(-\frac{t}{tp1})} + A32 e^{(-\frac{t}{tp2})} + A33 e^{(-\frac{t}{tp3})} \right) dt \quad \dots(20)$$

$$IM 3_i = A31 tp1 - \frac{A33 tp3^2}{\tau_i} + A32 tp2 - \frac{A31 tp1^2}{\tau_i} + A33 tp3 - \frac{A32 tp2^2}{\tau_i} + \frac{A33 tp3^2}{\tau_i e^{(\frac{\tau_i}{tp3})}} + \frac{A32 tp2^2}{\tau_i e^{(\frac{\tau_i}{tp2})}} + \frac{A31 tp1^2}{\tau_i e^{(\frac{\tau_i}{tp1})}} \quad \dots(21)$$

- **Para cuatro etapas N=4** (ver ecuaciones (22) - (23))

$$IM4 = \int_0^{\tau_i} \left(1 - \frac{t}{\tau_i}\right) \left(A41e^{\left(\frac{-t}{tp1}\right)} + A42e^{\left(\frac{-t}{tp2}\right)} + A43e^{\left(\frac{-t}{tp3}\right)} + A44e^{\left(\frac{-t}{tp4}\right)} \right) dt \quad \dots(22)$$

$$IM4_i = \frac{\left[\begin{aligned} &A41tp1\tau_i - A44tp4^2 + A42tp2\tau_i - A43tp3^2 + A43tp3\tau_i - A41tp1^2 \\ &+ A44tp4\tau_i - A42tp2^2 + A42tp2^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp2}\right)} + A41tp1^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp1}\right)} \\ &+ A44tp4^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp4}\right)} + A43tp3^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp3}\right)} \end{aligned} \right]}{\tau_i} \quad \dots(23)$$

- **Para cinco etapas N=5** (ver ecuaciones (24) - (25))

$$IM5_i = \int_0^{\tau_i} \left(1 - \frac{t}{\tau_i}\right) \left(A51e^{\left(\frac{-t}{tp1}\right)} + A52e^{\left(\frac{-t}{tp2}\right)} + A53e^{\left(\frac{-t}{tp3}\right)} + A54e^{\left(\frac{-t}{tp4}\right)} + A55e^{\left(\frac{-t}{tp5}\right)} \right) dt \quad \dots(24)$$

$$IM5_i = \frac{\left(\begin{aligned} &A51tp1\tau_i - A52tp2^2 + A52tp2\tau_i - A54tp4^2 + A53tp3\tau_i - A53tp3^2 + A54tp4\tau_i \\ &- A51tp1^2 + A55tp5\tau_i - A55tp5^2 + A53tp3^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp3}\right)} + A52tp2^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp2}\right)} \\ &+ A55tp5^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp5}\right)} + A51tp1^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp1}\right)} + A54tp4^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp4}\right)} \end{aligned} \right)}{\tau_i} \quad \dots(25)$$

4. Expresiones de la fracción media no convertida promedio total de las partículas, y sus derivadas.

Para la obtención de estas expresiones se parten de la ecuación general (15) y se sustituyen las obtenidas 17, 19, 21, 23 y 25 resultando las expresiones siguientes.

- **Para una etapa N=1** (ver ecuaciones (26) - (28))

$$IMT1 = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\left(-e^{\left(\frac{\tau_i}{tp1}\right)} \tau_i + e^{\left(\frac{\tau_i}{tp1}\right)} tp1 - tp1 \right) e^{-\left(\frac{\tau_i}{tp1}\right)} f1_i}{\tau_i} \right] \quad (26)$$

Posteriormente se deriva la expresión (26) y se obtiene

$$DIMT1 = \frac{\partial}{\partial tp1} IMT1 \quad (27)$$

$$DIMT1 = \sum_{i=1}^n \frac{\left(-1 + e^{\left(\frac{-k_i \tau}{tp1}\right)} + \frac{k_i \tau e^{\left(\frac{-k_i \tau}{tp1}\right)}}{tp1} \right) f1_i}{k_i \tau} \quad (28)$$

- **Para dos etapas N=2** (ver ecuaciones (29) - (31))

$$IMT2 = \sum_{i=1}^n \frac{\left[\begin{array}{l} A21tp1\tau_i - A21tp1^2 + A22tp2\tau_i - A22tp2^2 + A22tp2^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp2}\right)} \\ + A21tp1^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp1}\right)} \end{array} \right] f2_i}{\tau_i} \quad (29)$$

Posteriormente se deriva la expresión (29) y se obtiene.

$$DIMT2 = \frac{\partial}{\partial tp2} IMT2 \quad (30)$$

$$DIMT2 = \sum_{i=1}^n \frac{\left[\begin{array}{l} A22\tau_i - 2A22tp2 + 2A22tp2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp2}\right)} + A22\tau_i e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp2}\right)} \end{array} \right] f2_i}{\tau_i} \quad (31)$$

- **Para tres etapas N=3** (ver ecuaciones (32) - (34))

$$IMT3 = \sum_{i=1}^n \frac{\left[\begin{array}{l} A31tp1\tau_i - A33tp3^2 + A32tp2\tau_i - A31tp1^2 + A33tp3\tau_i - A32tp2^2 \\ + A33tp3^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp3}\right)} + A32tp2^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp2}\right)} + A31tp1^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp1}\right)} \end{array} \right] f3_i}{\tau_i} \quad (32)$$

Posteriormente se deriva la expresión (32) y se obtiene.

$$DIMT3 = \frac{\partial}{\partial tp3} IMT3 \quad (33)$$

$$DIMT3 = \sum_{i=1}^n \frac{\left[\begin{array}{l} -2A33tp3 + \tau_i A33 + 2A33tp3 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp3}\right)} + A33\tau_i e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp3}\right)} \end{array} \right] f3_i}{\tau_i} \quad (34)$$

- **Para cuatro etapas N=4** (ver ecuaciones (35) - (37))

$$IMT_4 = \sum_{i=1}^n \frac{\left(\begin{aligned} &A41tp1\tau_i - A44tp4^2 + A42tp2\tau_i - A43tp3^2 + A43tp3\tau_i - A41tp1^2 \\ &+ A44tp4\tau_i - A42tp2^2 + A42tp2^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp2}\right)} + A41tp1^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp1}\right)} \\ &+ A44tp4^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp4}\right)} + A43tp3^2 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp3}\right)} \end{aligned} \right) f_{4i}}{\tau_i} \quad (35)$$

Posteriormente se deriva la expresión (35) y se obtiene.

$$DIMT_4 = \frac{\partial}{\partial tp4} IMT_4 \quad (36)$$

$$DIMT_4 = \sum_{i=1}^n \frac{\left(-2A44tp4 + A44\tau_i + 2A44tp4 e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp4}\right)} + A44\tau_i e^{\left(\frac{-\tau_i}{tp4}\right)} \right) f_{4i}}{\tau_i} \quad (37)$$

- **Para cinco etapas N=5** (ver ecuaciones (38) - (42))

$$IMT_5 = \sum_{i=1}^n \frac{\left(\begin{aligned} &A51tp1\tau - A52tp2^2 + A52tp2\tau - A54tp4^2 + A53tp3\tau - A53tp3^2 \\ &+ A54tp4\tau - A51tp1^2 + A55tp5\tau - A55tp5^2 + A53tp3^2 e^{\left(\frac{-\tau}{tp3}\right)} \\ &+ A52tp2^2 e^{\left(\frac{-\tau}{tp2}\right)} + A55tp5 e^{\left(\frac{-\tau}{tp5}\right)} + A51tp1^2 e^{\left(\frac{-\tau}{tp1}\right)} + A54tp4^2 e^{\left(\frac{-\tau}{tp4}\right)} \end{aligned} \right) f_{5i}}{\tau} \quad (38)$$

Posteriormente se deriva la expresión (38) y se obtiene.

$$DIMT_5 = \frac{\partial}{\partial \tau} IMT_5 \quad (39)$$

$$DIMT_5 = \sum_{i=1}^n \frac{\left(\begin{aligned} &A51(-tp1^2 - tp1\tau - \tau^2 + k_i\tau^2) e^{\left(\frac{-\tau}{tp1}\right)} \\ &+ A52(k_i\tau^2 - \tau^2 - tp2\tau - tp2^2) e^{\left(\frac{-\tau}{tp2}\right)} \\ &+ A53(k_i\tau^2 - \tau^2 - tp3\tau - tp3^2) e^{\left(\frac{-\tau}{tp3}\right)} \\ &+ A54(k_i\tau^2 - \tau^2 - tp4\tau - tp4^2) e^{\left(\frac{-\tau}{tp4}\right)} \\ &+ A55(k_i\tau^2 - \tau^2 - tp5\tau - tp5^2) e^{\left(\frac{-\tau}{tp5}\right)} \\ &+ A51tp1^2 + A52tp2^2 + A53tp3^2 + A54tp4^2 + A55tp5^2 \end{aligned} \right) f_{5i}}{k_i\tau^2} \quad (40)$$

Donde:

$$k_i = \left(\frac{DP_i}{DP_b} \right)^{k_0} \quad (41)$$

$$\tau_i = k_i \cdot \tau \quad (42)$$

τ : Tiempo de reacción completa del tamaño de partícula considerado como tamaño base igual que τ_{0n} .

5. Algoritmo de solución

Las diferentes ecuaciones presentadas en [2] y las obtenidas en este artículo, conforman el modelo matemático, a partir del cual se confecciona un algoritmo de solución para determinar el tiempo de reacción completa en una batería de cinco reactores en serie, donde se conoce la concentración a la salida del sistema de reactores. Es necesario aclarar que aunque el sistema que se estudia se caracteriza porque el tiempo de residencia medio es igual en todas las etapas, en el proceso de cálculo se considera que este tiempo de residencia medio es diferente para dar solución al segundo aspecto planteado en [2].

1. Determinar la concentración previa a la entrada del reactor 1 mediante un balance de masa.
2. Se considera que el paso controlante, en este caso es la difusión externa en la película.
3. Suponer el valor del tiempo de reacción completa de la partícula considerada como tamaño base (τ_b), para la primera etapa (este valor se considera como el verdadero y constante para todas las etapas).
4. Calcular el tiempo de reacción completa de los demás tamaños de partículas por la ecuación $t_i = k_i \tau$.
5. Calcular el tiempo de residencia medio (t_p) del primer reactor, que es el mismo para todas las etapas de la batería, según expresión (14). Este es el valor real del tiempo de residencia medio.
6. Con el valor de (τ_b) supuesto y el valor de calculado se determina la fracción media no convertida de un tamaño de partícula ($IM1_i$) según la ecuación (17) y la fracción media no convertida total (IMT_1) según la ecuación (28).
7. Calcular la conversión y los flujos y concentración de las sustancias en la corriente de salida del primer reactor.
8. Se comienzan los cálculos en el segundo reactor; por lo que, se hace $\tau * CA_1 = k_0 t$, donde $k_0 t$ es una constante a utilizar en todos los reactores y CA_1 es la concentración del reactante en la fase fluida.
9. Se asume el tiempo de reacción completa real de la partícula considerada como tamaño base τ_{b2} que debe ser algo mayor que el valor de τ_b .

10. Se estima la relación $\frac{\tau_{b2}}{t_p}$ (relación real del reactor 2) y se hace igual a la relación $\frac{\tau}{t_{p2(0)}}$, donde $t_{p2(0)}$ es el tiempo de residencia medio aparente necesario para que esta última relación sea igual a la relación de los valores reales. De aquí,

$$t_{p2(0)} = \frac{\tau}{\tau_{b2}} * t_p$$

que el tiempo de residencia medio aparente:

11. Calcular la fracción no convertida promedio total (IMT_2) por la expresión (29), se determina la concentración del reactante en la fase fluida (CA_2) del segundo reactor y se determina el valor de $\tau_{b2} * CA_2$. La diferencia

de $k_0 t - (\tau_{b2} * CA_2) = f(tp_{2(0)})$, se determina la derivada de esa función con respecto a tp_2 según la ecuación (31).

$$tp_{2(1)} = tp_{2(0)} - \frac{f(tp_{2(0)})}{f'(tp_{2(0)})}$$

12. Se estima el valor de

$$\frac{|tp_{2(1)} - tp_{2(0)}|}{tp_{2(0)}} \leq \xi$$

13. Se hace la prueba de convergencia en el que

14. Si no converge se sustituye $tp_{2(0)}$ por $tp_{2(1)}$.

$$\tau_{b2nuevo} = \frac{\tau_0 * tp}{tp_{2(1)}}$$

15. Se determina el τ_{b2} se hace que $\tau_{b2} = \tau_{b2nuevo}$ y se retorna al paso 11.

16. Si converge se pasa a los cálculos del tercer y cuarto reactor, en los cuales se aplican los mismos pasos desarrollados en el segundo reactor; es decir, desde el paso 8 hasta el 15, con la diferencia de que en el tercer y cuarto reactor se suponen los valores reales de tiempos de reacción completa τ_{b3} y τ_{b4} , recordando que estos valores aumentan al pasar de un reactor a otro, debido a que la concentración del reactante en la fase fluida disminuye en igual sentido. Además en cada reactor existe un tiempo de residencia medio aparente; es decir, se comienza para el proceso iterativo con el cálculo del $tp_{3(0)}$ y el $tp_{3(4)}$.

17. Se supone el tiempo de reacción completa real de la partícula considerada como tamaño base τ_{b5} que debe ser algo mayor que el valor de τ_{b4} .

18. Se estima la relación $\frac{\tau_{b5}}{tp}$ (relación real del reactor 5) y se hace igual a la

relación $\frac{\tau}{tp_{5(0)}}$, donde $tp_{5(0)}$ es el tiempo de residencia medio aparente necesario para que esta última relación se igual a la relación de los valores reales. De aquí,

$$tp_{5(0)} = \frac{\tau}{\tau_{b5}} * tp$$

que el tiempo de residencia medio aparente:

19. Calcular la fracción no convertida promedio total (IMT 5) según la expresión (38). En este caso, la concentración del reactante en la fase fluida (CA_{5D}), a la salida del quinto reactor se tiene como información; por tanto, la diferencia

$k_0 t - (\tau_{b5} * CA_{5D}) = f(\tau)$ y se determina la derivada de esa función con respecto a τ según la ecuación (40).

$$\tau_1 = \tau - \frac{f(\tau)}{f'(\tau)}$$

20. Se estima el valor de

$$\frac{|\tau_1 - \tau|}{\tau} \leq \xi$$

21. Se hace la prueba de convergencia .

22. Si no converge se sustituye τ por τ_1 y se retorna al primer reactor (punto 4) y se repiten todos los pasos descritos anteriormente, hasta lograr la convergencia.

23. Si converge, ya se tienen los valores reales del tiempo de reacción completa en cada reactor, así como los valores de conversiones, flujos y concentraciones de las sustancias que intervienen en el proceso de reacción.

Una vez obtenido los valores del tiempo de reacción completa de las partículas considerada base, se puede, a partir de esos valores, identificar un modelo matemático que pueda ser utilizado en el proceso de validación del programa que se confeccione.

El algoritmo que se ha descrito es válido para cualquier sistema fluido-sólido no catalítico con las características descritas en este trabajo y para cualquier paso controlante que se considere. La aplicación de este algoritmo para otros pasos controlantes, debe tener en cuenta que las expresiones a utilizar de la fracción media no convertida para un tamaño de partícula (IMi), de la fracción media no convertida total (IMT) y de las derivadas de esta última, son las correspondientes al paso controlante que se valore y ajustadas al número de reactores que se utilice.

CONCLUSIONES

1. Se obtuvieron las expresiones de la fracción media no convertida promedio para partículas de tamaño i, de la fracción media no convertida promedio total de las partículas, así como las derivadas de esta última.

2. Con las expresiones obtenidas quedó conformado el modelo matemático que permite simular la batería de los cinco reactores.

3. Se estableció un algoritmo sobre la base del modelo matemático obtenido que permite simular la batería de los cinco reactores con agitación.

NOMENCLATURA

CAS: Concentración del reactivo líquido.

D: Coeficiente de difusión molecular.

DPi y DPb: Tamaño determinado de partícula y considerado como tamaño base respectivamente.

EN (t) : Distribución de tiempos de residencia .

Fi : Fracción de partículas de tamaño i en el alimentado.

Ii = (1-x): Fracción no convertida de la partícula de tamaño i.

IMi: Fracción no convertida promedio para partículas de tamaño i

IMT : Fracción no convertida promedio total.

K₀: 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.

NT: Número de tamaños de partículas
q: Flujo volumétrico que atraviesa el reactor.
 R_0 : Radio exterior inicial de la partícula sólida.
t: Tiempo de reacción.
tp1: Tiempo de residencia promedio en el reactor.
V: Volumen del reactor.
x: Conversión de la partícula sólida.
y: Fracción molar.
Z: Coeficiente estequiométrico del sólido.
 ρ : Densidad del sólido.
 τ_1 : Tiempo de reacción completa de un determinado tamaño de partícula.
 τ_{bn} : Tiempo de reacción completa del tamaño de partícula considerado como tamaño base.

BIBLIOGRAFÍA

1. Del Toro Alvarez, 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. Del Toro Alvarez , Dania; Viera Bertrán, René y col "Modelo Matemático para una batería de cinco reactores continuos con agitación. primera parte". Tecnología Química. Vol. XXXIV, No 1, 2014.
3. Díaz C.A "Simulación de un reactor para la Neutralización de ácido sulfúrico", Trabajo de diploma, UO, 1999.
4. Emasabe Monier, Zulai; Del Toro Alvarez, Dania y Viera Bertrán, René "Análisis del comportamiento de un sistema reaccionante Fluido - Sólido no catalítico en una batería de reactores continuo con agitación para cualquier mecanismo controlante", Trabajo de diploma, UO, 2010.
5. Mason D.R. y col. "Continuous flow stirred tank reactor systems" Ind.Eng.Chem. Vol 42, No. 5, 1950.
6. Octave Levenspiel "Chemical Reaction Engineering. John Wiley, 1962.
7. Viera R. y S.Soler, "Diseño y Análisis de Reactores Químicos", ENPES, 1992.

Recibido: Diciembre 2013
Aprobado: Mayo 2014

Dra. Dania del Toro Álvarez. Facultad de Ingeniería Química - Universidad de Oriente, Avenida "Las Américas" s/n. Santiago de Cuba, Cuba.
daniadt@fiq.uo.edu.cu