

MODELAJE Y SIMULACION DE REACTORES QUIMICOS

Carlos Zerpa
Jean Louis Salager
Escuela Ingeniería Química
Universidad de Los Andes
Mérida - Venezuela

Mediante estudios analíticos y de simulación digital sobre la computadora IBM 360/40 de la ULA, se estudió la respuesta de varios modelos combinados de reactores químicos. Para dar cuenta de los fenómenos de corto circuito y de zona estagnante se propuso un modelo compuesto de 2 ramas en paralelo conteniendo cada una un reactor pistón (retrazo) y una cascada de reactores perfectamente agitados iguales. Este modelo con 4 parámetros (retrazo introducido por los reactores pistones, números de reactores agitados en cada serie, volúmenes relativos o fracción de caudal) se estudió profundamente dando una función de distribución de tiempos de residencia, cuya forma es muy variable con el valor de los parámetros.

A partir de una curva de distribución de tiempos de residencia obtenida experimentalmente se diseñó un método para hallar los valores de los parámetros de una expresión analítica del tipo:

$$y = A_1 t^{B_1} \exp(-C_1 t) + A_2 t^{B_2} \exp(-C_2 t)$$

Separando el efecto de corto circuito del efecto de zona estagnante.

Luego se diseñó un método para relacionar los valores de los A, B y C con los valores de los parámetros del modelo. Básicamente se resolvió el sistema altamente no-lineal, por un método de minimización no-lineal (Powell) de la suma de los cuadrados

de las ecuaciones homogéneas. Se estudió un método de obtención de la distribución de tiempos de Residencia a partir de una señal aleatoria y de las correlaciones directas y cruzadas señal-respuesta.