

TEMA 10:
**MODELADO CON ECUACIONES DIFERENCIALES EN
INGENIERÍA QUÍMICA: REACCIÓN QUÍMICA,
TRANSFERENCIA DE MATERIA, TRANSMISIÓN DE
CALOR.**

1. INTRODUCCIÓN
2. TRANSFERENCIA DE MATERIA
3. TRANSMISIÓN DE CALOR
4. CINÉTICA QUÍMICA
5. INGENIERÍA DE REACTORES
6. BIBLIOGRAFÍA SELECCIONADA

Asignatura:	Cálculo Avanzado de Procesos Químicos.
Titulación:	Ingeniería Química
Curso:	Cuarto
Cuatrimestre:	Primero

1. INTRODUCCIÓN

En los temas 1-9 de la asignatura se han clasificado diferentes tipos de ecuaciones diferenciales en base a sus características matemáticas y se han presentado los métodos numéricos aplicables a su resolución.

Desde el punto de vista de la Ingeniería Química puede parecer más adecuado presentarlas en base a los fenómenos que representan, estableciendo la relación entre el grado de simplificación de un modelo y el tipo de ecuación a la que da lugar.

Un determinado fenómeno o proceso puede representarse con diferentes ecuaciones diferenciales en función del grado de rigurosidad necesario en su modelo. La elección del modelo deberá llegar a un compromiso entre rigurosidad y dificultad de resolución que podemos abordar. La resolución de un modelo riguroso necesitará un método más complicado y de subrutinas de cálculo con mayor capacidad.

En este Tema se van presentar los tipos de ecuaciones diferenciales correspondientes al modelado de problemas en el área de:

1. **Transferencia de materia**
2. **Transmisión de calor.**
3. **Cinética química.**
4. **Ingeniería de reactores.**

2. TRANSFERENCIA DE MATERIA

Cuando una mezcla no uniforme se deja evolucionar por sí misma se transforma en una mezcla uniforme en mayor o menor tiempo debido a los movimientos moleculares y convectivos que se producen desde regiones de alta concentración hasta regiones de baja concentración. La velocidad de la difusión molecular aumenta con la diferencia de concentración entre dos puntos del sistema, pero en sentido absoluto, es siempre bastante lenta (del orden de 10 cm/min en gases, 0,05 cm/min en líquidos y 10^{-5} cm/min en sólidos). Cuantitativamente la difusión molecular se presenta mediante las leyes de Fick:

1º ley de Fick (en una dimensión):

$$N = -D * \frac{\partial C}{\partial x}$$

donde: N es el flujo del componente que se difunde ($\text{mol/m}^2 \text{ s}$)

D es el coeficiente de difusión o difusividad ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$)

C es la concentración del componente que se difunde (mol/m^3)

X es la distancia que recorre el componente que se difunde (m)

Aplicando las leyes de conservación se obtiene la segunda ley de Fick:

2º ley de Fick

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla(\nabla DC)$$

La expresión más general de la segunda ley de Fick (coordenadas rectangulares) es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \left(\frac{\partial D}{\partial x} C + \frac{\partial C}{\partial x} D \frac{\partial D}{\partial y} C + \frac{\partial C}{\partial y} D + \frac{\partial D}{\partial z} C + \frac{\partial C}{\partial z} D \right)$$

El coeficiente de difusión D puede considerarse constante si las propiedades del sistema no varían sustancialmente en el intervalo de aplicación de la ecuación. Existen casos como por ejemplo la difusión en un sólido cristalino (o fibras) anisótropo en el que las propiedades del sólido varían en cada dirección y por lo tanto las difusividades son diferentes.

La difusión de materia puede ocurrir como combinación de la **difusión molecular** y de la difusión de Eddy. Este proceso se denomina **dispersión** y se expresa así mismo mediante la ecuación de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

D_x se denomina coeficiente de dispersión y es numéricamente varios órdenes de magnitud mayor que la difusividad molecular.

En la práctica, los procesos de difusión están acoplados a otros procesos. En condensación de vapores en presencia de incondensables el calor transferido es la suma de calor sensible y calor latente debido a la difusión de materia por la película de líquido. Las velocidades de reacción química en sistemas heterogéneos se ven afectadas por limitaciones difusionales, la efectividad de un catalizador poroso depende de la velocidad de difusión de los reactantes en el interior de los poros, etc.

Simplificaciones a la expresión general:

1. Considerar el coeficiente de difusión constante:

Coordenadas rectangulares:
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$$

Coordenadas cilíndricas:
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$$

Coordenadas esféricas:
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial C}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 C}{\partial \phi^2} \right)$$

Las ecuaciones generadas son todas PDEs en tres direcciones espaciales.

Serán necesarias 6 condiciones de contorno y una condición inicial para resolver cada una de ellas.

2. En la mayoría de los procesos el fenómeno difusional no tiene la misma importancia en las tres direcciones espaciales por lo que se puede reducir la expresión a una sola dirección espacial:

Coordenadas rectangulares:
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Coordenadas cilíndricas:
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right)$$

Coordenadas esféricas:
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right)$$

Las ecuaciones generadas son todas PDEs en una dirección espacial.

Serán necesarias 2 condiciones de contorno y una condición inicial para resolver cada una de ellas.

3. Situación de estado estacionario

En el estudio de procesos en estado estacionario la derivada respecto al tiempo desaparece y la ecuación de difusión en una dirección se transforma en una ecuación diferencial ordinaria:

Coordenadas rectangulares:
$$0 = D \frac{d^2 C}{dx^2}$$

Coordenadas cilíndricas:
$$0 = D \left(\frac{d^2 C}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dC}{dr} \right)$$

Coordenadas esféricas:
$$0 = D \left(\frac{d^2 C}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dC}{dr} \right)$$

Las ecuaciones generadas son todas ODE -BVP (de segundo orden).

Serán necesarias 2 condiciones de contorno para resolver cada una de ellas.

Otras consideraciones:

1. Si no se puede reducir el problema a una sola dirección espacial el estado estacionario **no** nos lleva a una ecuación diferencial ordinaria:

e.e. dos coordenadas rectangulares (x, y):
$$0 = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}$$

e.e. dos coordenadas cilíndricas (r, z):
$$\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} = 0$$

$$\text{e.e. dos coordenadas esféricas } (r, \theta): r^2 \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial C}{\partial \theta} \right) = 0$$

Las ecuaciones generadas son todas PDEs elípticas en dos direcciones espaciales.

Serán necesarias 4 condiciones de contorno para resolver cada una de ellas.

2. Uno de los problemas más habituales en ingeniería química son los sistemas que engloban procesos de difusión y de reacción química. La inclusión del término de velocidad de reacción química no determina el carácter Ordinario o Parcial de la ecuación diferencial ya que no incluye derivadas de ningún tipo. La velocidad de reacción suele expresarse como el producto de una constante cinética por una expresión potencial de las concentraciones de reactivos y/o productos $(-r_a = k * C^n)$. **En este sentido la influencia del término de velocidad de reacción se refleja en el carácter lineal o no lineal de la ecuación diferencial.**

$$\text{Difusión + reacción de primer orden (e.e)} \quad D \frac{d^2 C}{dx^2} = k * C \quad (\text{ODE Lineal})$$

$$\text{Difusión + reacción de orden } n \neq 1 \text{ (e.e.)} \quad D \frac{d^2 C}{dx^2} = k * C^n \quad (\text{ODE NO Lineal})$$

Las ecuaciones siguen siendo ODEs BVP de segundo orden. Para resolverlas se necesitan dos condiciones frontera.

3. TRANSMISIÓN DE CALOR

La energía térmica puede ser transferida desde (o hacia) una región mediante los mecanismos de conducción, convección o radiación y puede estar acompañada de transferencia de materia.

La conducción es el mecanismo descrito mediante ecuaciones diferenciales, aunque las expresiones correspondientes a los mecanismos de convección y/o radiación son necesarias para determinar las condiciones frontera de cada sistema.

De forma similar a la primera ley de Fick en difusión de materia, la ley de Fourier cuantifica la cantidad de energía transmitida en un sistema: $Q = -k * A * (\nabla T)$. La expresión simplificada en una dirección es:

$$Q = -k * A * \frac{dT}{dx}$$

donde Q = caudal de transmisión de calor en la dirección x (J/s)

k = conductividad térmica (J/(smK))

A = área normal a la dirección de flujo (m^2)

dT/dx = gradiente de temperatura en la dirección x (K/m)

Aplicando los términos de la ley de conservación de la energía térmica a un elemento diferencial de volumen se obtiene la expresión general:

Coordenada rectangulares (x, y, z) :
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$

Coordenadas cilíndricas (z, r, θ) :
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$

Coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) :
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 T}{\partial \phi^2} \right)$$

Donde $\alpha = \frac{k}{\rho_s C_s}$ = difusividad térmica (m^2/s)

Las ecuaciones son PDE en tres dimensiones espaciales.

Se necesitan 6 condiciones de contorno y una inicial para resolverlas.

Comentario: Una medida adimensional para la conducción, que tiene en cuenta el tiempo de enfriamiento y el tamaño del objeto, viene dada por el número de Fourier:

$$Fo = \frac{\alpha t}{L^2} = \frac{\alpha t}{(V/A)^2} = \frac{k}{\rho_s C_s} \frac{t}{(V/A)^2},$$

donde L es la longitud característica del objeto:

$$\left\{ \begin{array}{l} = \frac{\text{volumen}}{\text{superficie}} = \frac{V}{A} \text{ en general} \\ = \frac{\text{espesor}}{2} \text{ para una lámina} \\ = \frac{R}{2} \text{ para un cilindro} \\ = \frac{R}{3} \text{ para una esfera} \end{array} \right.$$

Hemos comentado que en los límites del cuerpo sólido la transferencia de energía con el exterior (gas o líquido) vendrá cuantificada por la convección. La importancia relativa de los términos de resistencia en la superficie y en el interior se miden mediante el número de Biot, un grupo adimensional definido por:

$$Bi = \left(\frac{\text{Resistencia interior}}{\text{Resistencia en la superficie}} \right) = \frac{h(V/A)}{k} = \frac{hL}{k}$$

Para un número de Biot pequeño la principal resistencia está en la película, para un número de Biot grande la principal resistencia es la conducción de calor. La figura 10.1 muestra la evolución temperatura – tiempo de un enfriamiento de una partícula para diferentes intervalos de Biot.

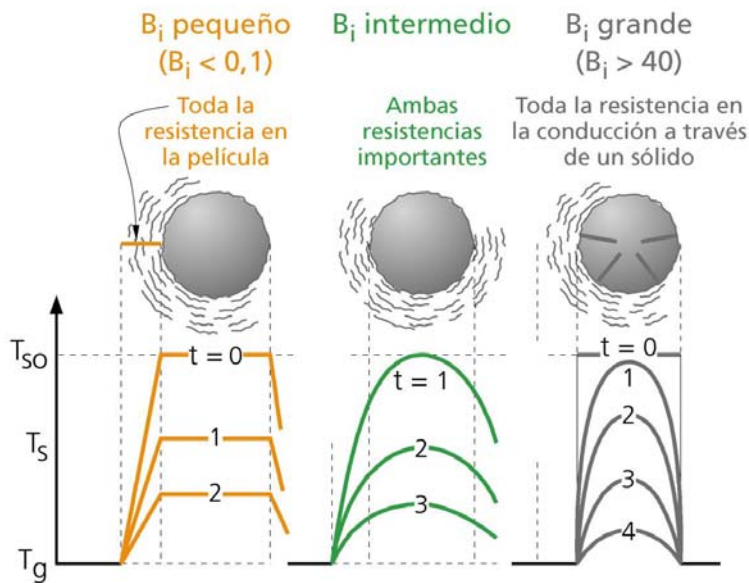


Fig 10.1. Evolución temperatura-tiempo en el enfriamiento de una partícula esférica para diferentes valores del número de Biot. [Reelaborado a partir de Levenspiel, 1996].

Simplificaciones a la ecuación general de transmisión de calor:

- a) Al igual que en los fenómenos de difusión de materia, la situación real más habitual es que en un sistema la conducción de calor sea cuantitativamente más importante en una dirección espacial que en las demás. Entonces la ecuación general puede simplificarse a la expresión:

Coordenadas rectangulares:
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Coordenadas cilíndricas:
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right)$$

Coordenadas esféricas:
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right)$$

Ecuaciones PDE parabólicas en una dirección espacial.

Dos condiciones de contorno y una inicial para resolverse numéricamente.

- b) Cuando no existe variación de la temperatura con el tiempo (estado estacionario) las ecuaciones anteriores se transforman en ecuaciones diferenciales ordinarias:

Coordenadas rectangulares:
$$0 = \alpha \frac{d^2 T}{dx^2}$$

Coordenadas cilíndricas:
$$0 = \alpha \left(\frac{d^2 T}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dT}{dr} \right)$$

Coordenadas esféricas:
$$0 = \alpha \left(\frac{d^2 T}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dT}{dr} \right)$$

Ecuaciones ODE BVP (2º orden).

Dos condiciones de contorno para resolverse numéricamente.

Otras consideraciones:

1. Si no se puede reducir el problema a una sola dirección espacial, el estado estacionario **no** nos lleva a una ecuación diferencial ordinaria (Ecuación de Laplace):

e.e. dos coordenadas rectangulares (x, y): $0 = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$

e.e. dos coordenadas cilíndricas (r, z): $\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} = 0$

e.e. dos coordenadas esféricas (r, θ): $r^2 \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) = 0$

Ecuaciones PDE elípticas en dos direcciones espaciales

Cuatro condiciones de contorno para resolverse numéricamente.

2. En muchos sistemas el balance térmico no incluye solamente términos de entrada y salida de calor sino que además considera focos de generación de calor o sumideros de calor. La inclusión del término de generación de energía no determina el carácter ordinario o parcial de la ecuación diferencial ya que no incluye derivadas de ningún tipo. **En este sentido la influencia del término de generación de energía se refleja en el carácter lineal o no lineal de la ecuación diferencial.**

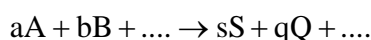
Conducción más generación de calor por radiación: $k \frac{d^2 T}{dx^2} + \sigma T^4 = \frac{\partial T}{\partial t}$ (PDE NO LINEAL)

Conducción más generación interna de calor: $\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} = 0$ (PDE LINEAL, E. Poisson)

4. CINÉTICA QUÍMICA.

La cinética química se ocupa del estudio de la velocidad a la que transcurren las reacciones químicas, teniendo como objetivo fundamental la obtención de la ecuación cinética que permita relacionar la velocidad de reacción con las condiciones de trabajo y la composición del medio.

De forma general las reacciones químicas se expresan mediante ecuaciones del tipo:



que indican que “a” moles del reactivo A reaccionan con “b” moles del reactivo B para dar “s” moles del producto S y “q” moles del producto Q.

La velocidad de reacción se define como

a) el número de moles de reactivo que desaparecen por unidad de tiempo y por unidad de volumen:

$$-r_a = -\frac{1}{v} \frac{dN_a}{dt}, \quad -r_b = -\frac{1}{v} \frac{dN_b}{dt} \quad (\text{mol/m}^3 \text{ s})$$

b) el número de moles de producto que se forman por unidad de tiempo y por unidad de volumen:

$$r_s = \frac{1}{v} \frac{dN_s}{dt}, \quad r_q = \frac{1}{v} \frac{dN_q}{dt} \quad (\text{mol/m}^3 \text{ s})$$

para muchas reacciones esta velocidad puede escribirse como el producto de una constante de velocidad k y una función de las concentraciones que intervienen en la reacción:

$$-\frac{1}{v} \frac{dN_a}{dt} = [k(T)] * [f(C_a, C_b, \dots)]$$

CASO I:

La expresión de velocidad queda definida con una función de la concentración de 1 reactivo:

$$\text{CASO 1.A (orden de reacción } n=1): \quad -\frac{1}{v} \frac{dN_a}{dt} = -\frac{dC_a}{dt} = k * C_a \Rightarrow 1 \text{ ODE LINEAL IVP}$$

CASO 1.B (orden de reacción $n \neq 1$): $-\frac{dC_a}{dt} = k * Ca^n \Rightarrow 1$ ODE NO LINEAL IVP

CASO II:

La expresión de velocidad debe ser resuelta simultáneamente para un conjunto de reactivos:

$$\frac{dC_a}{dt} = -k_1 * Ca^n - k_2 C_b^m + k_3 C_p$$

$$\frac{dC_b}{dt} = k_1 * Ca^n + k_2 C_b^m - k_3 C_p \Rightarrow \text{Sistema de ODE-IVP Acoplado lineal o no lineal IVP}$$

$$\frac{dC_c}{dt} = k_1 * Ca^n - k_2 C_b^m$$

CASO III:

La constante cinética es una función dependiente de la temperatura. Cuando existe variación de temperatura en el transcurso de una reacción deben resolverse de forma acoplada las expresiones de velocidad de reacción y de variación de temperatura:

$$\frac{dC_a}{dt} = -k_0 * \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) * Ca^n$$

$$\frac{dT}{dt} = -k_0 \left(\frac{-\Delta H}{\rho C_p}\right) * \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) * Ca^n \Rightarrow \text{Sistema de ODE-IVP Acoplado lineal o no lineal IVP}$$

CASO IV:

En aquellos casos en que la reacción química depende de otros factores como una etapa de difusión previa (reacciones catalíticas heterogéneas, etc.) la expresión cinética incluye un término referente a la difusión, transformando el tipo de ecuación diferencial a resolver:

Ejemplo:

Un gas que reacciona dentro de una partícula de catalizador esférica tiene una velocidad de reacción dada por la ecuación

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{D_e}{RT} \frac{dp_a}{dr} \right) = \rho [-r_a(p_a, T)] \Rightarrow \text{ODE BVP}$$

$$r = R \Rightarrow p_a = p_{as}$$

que debe ser resuelta con las condiciones frontera

$$r = 0 \Rightarrow \frac{dp_a}{dr} = 0$$

5. INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS.

La ingeniería de las reacciones químicas tiene por objeto el dominio de las conversiones químicas a escala industrial, lo que conducirá en definitiva al diseño adecuado de reactores (Primer simposium sobre Ingeniería de las Reacciones Químicas, 1957).

Reactores tubulares:

CASO I:

Reactores tubulares con flujo ideal: En este caso la ecuación de continuidad del reactor indicará que existe variación de la concentración de reactivo respecto a la longitud axial del reactor debido a su flujo (convección) y a su desaparición por reacción:

$$\frac{\partial C_a}{\partial z} + (-r_a) \frac{L}{u} = \frac{\partial C_a}{\partial t}; \text{ estado no estacionario: PDE parabólica de primer orden}$$

$$\frac{dC_a}{dz} + (-r_a) \frac{L}{u} = 0; \text{ estado estacionario: ODE IVP}$$

CASO II:

Reactores tubulares con flujo no ideal. Es necesario introducir el término correspondiente a la dispersión axial (habitualmente más importante que la dispersión radial):

$$D_e \frac{\partial^2 C_a}{\partial z^2} - \frac{\partial C_a}{\partial z} - (-r_a) \frac{L}{u} = \frac{\partial C_a}{\partial t}; \text{ estado no estacionario: PDE parabólica de segundo orden}$$

$$D_e \frac{d^2 C_a}{dz^2} - \frac{dC_a}{dz} - (-r_a) \frac{L}{u} = 0; \text{ estado estacionario: ODE-BVP}$$

CASO III:

Cuando en cualquiera de los casos anteriores el reactor no es isoterma debe tenerse en cuenta el balance de energía acoplado al de materia así como la variación de la constante cinética con la temperatura.

Reactores de lecho fijo:

CASO I: modelo pseudo-homogéneo ideal

Este modelo asume que no existen gradientes entre la fase sólida y la fluida ($C=C_s$ y $T=T_s$) y además que el flujo es ideal, es decir, no existe dispersión axial ni radial Si consideramos que el reactor es adiabático el sistema de ecuaciones que lo modelan en estado estacionario será de la forma:

$$-\frac{d(uC_a)}{dz} = r_a \rho_b$$

$$u \rho_g C_p \frac{dT}{dz} = (-\Delta H) r_a \rho_b - 4 \frac{U}{dt} (T - T_r)$$

Sistema ODE-IVP

A este sistema se puede añadir el balance de cantidad de movimiento de la forma:

$$-\frac{dP_t}{dz} = f \frac{\rho_g u^2}{d_p}$$

donde f = factor de fricción

d_p = diámetro de partícula.

CASO II: Modelo pseudo homogéneo con dispersión axial:

$$\varepsilon D \frac{d^2 C_a}{dz^2} - \frac{d(uC_a)}{dz} - r_a \rho_b = 0$$

$$\lambda \frac{d^2 T}{dz^2} - u \rho_g C_p \frac{dT}{dz} + (-\Delta H) r_a \rho_b - 4 \frac{U}{dt} (T - T_r) = 0$$

Sistema de ODEs 2º orden -BVP

donde λ = conductividad térmica

En muchos reactores reales la dispersión axial en el balance de materia es significativa pero no así la dispersión en el balance energético por lo que el sistema anterior se transforma en un sistema de ODEs donde una ecuación es de 1º orden y la otra es de 2º orden.

CASO III: Modelo pseudo homogéneo en dos dimensiones (dispersión radial):

En muchos casos prácticos la reacción catalítica da lugar a efectos térmicos tan importantes que no es posible considerar que la temperatura es homogénea para todo el radio del reactor; aparecen así gradientes radiales de temperatura que dan lugar a gradientes de concentración. Las ecuaciones de continuidad sufren una importante transformación desde el punto de vista matemático ya que ahora contiene derivadas parciales en vez de totales:

$$D_r \left(\frac{\partial^2 C_a}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_a}{\partial r} \right) - \frac{\partial(uC_a)}{\partial z} - r_a \rho_b = 0$$

$$\lambda_r \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) - u \rho_g C_p \frac{\partial T}{\partial z} + (-\Delta H) r_a \rho_b - 4 \frac{U}{dt} (T - T_r) = 0$$

Sistema PDE

sujeto a las condiciones de integración:

$$\left. \begin{array}{l} C = C_0 \\ T = T_0 \end{array} \right\} \text{ en } z=0 \text{ y } 0 \leq r \leq R$$

$$\frac{\partial C}{\partial r} = 0 \quad \text{en } r=0 \text{ y } r=R$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{en } r=0 \text{ para todo } z$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{\alpha_w}{\lambda_r} (T_r - T_w) \text{ para } r=R$$

donde λ_r es el coeficiente de dispersión térmica en la dirección radial (kJ/m s)

α_w es el coeficiente de transmisión de calor en la pared (kJ/m² s K)

D_r es el coeficiente de dispersión de materia en la dirección radial (m³/m_rs)

Modelos heterogéneos:

Los modelos heterogéneos distinguen entre las concentraciones y temperaturas de la fase fluida y las que presentan la fase sólida, bien en su superficie o en el interior. Al igual que en los modelos pseudo-homogéneos pueden considerarse ciertas simplificaciones que conducen a modelos con diferente rigor y dificultad.

En todos los modelos heterogéneos se considera que las propiedades en la fase fluida y en la fase sólida son diferentes:

$\left. \begin{array}{l} T \neq T_s \\ C \neq C_s \end{array} \right\}$ es necesario plantear balances en la fase fluida y en la sólida.

CASO IV: Modelo heterogéneo de una dimensión con gradientes interfaciales:

B.M. en la fase fluida:
$$-u \frac{dC}{dz} = k_g a_v (C - C_s)$$

B.M. al sólido:
$$\rho_b r_a = a_v (C - C_s)$$

B.E. en la fase fluida:
$$u \rho_g C_p \frac{dT}{dz} = h_f a_v (T_s^s - T) - 4 \frac{U}{dt} (T - T_r)$$

B.E. en el sólido:
$$(-\Delta H) \rho_b r_a = h_f a_v (T_s^s - T)$$

Con las condiciones de contorno:

$C = C_0$ en $z = 0$

$T = T_0$ en $z = 0$

donde: a_v es la superficie externa de las partículas por unidad de volumen de reactor.

h_f = coeficiente de transferencia de calor en la superficie de la partícula

K_g = coeficiente de transferencia de materia en la interfase S-G

T_s^s = temperatura en la superficie del sólido.

La aparición de las ecuaciones algebraicas implica una dificultad adicional a los sistemas vistos hasta ahora pues hay que resolver **un sistema de ecuaciones diferenciales y algebraicas acopladas**.

Existen modelos más rigurosos que no se comentarán aquí.

COMENTARIO:

El área de dinámica y control de procesos químicos utiliza habitualmente ecuaciones diferenciales para la resolución de los problemas. No se ha considerado en este tema (ni a lo largo de la asignatura) debido a que se tratan en la asignatura Dinámica y Control de Procesos Químicos de 4º curso de la titulación de Ingeniería Química.

6. BIBLIOGRAFÍA SELECCIONADA

Froment, G. F, Bischoff K. B.; Chemical Reactor Analysis and Design. (2º edición). John Wiley & Sons, New York. 1990.

Levenspiel, O.; Flujo de Fluidos e Intercambio de calor. Editorial Reverté S.A., Barcelona. 1996.

Perry, R. H., Green, D.W. (Eds); Perry's Chemical Engineers' Handbook. (7ªEdición). Ed. Mc Graw Hill. 1997.

Velasco, J.R., González, J.A., González, Mª P., Gutiérrez, J.I.; Gutiérrez, M.A.; Cinética Química Aplicada. Editorial Síntesis, Madrid. 1999.

Walas, S. M.; Modeling with Differential Equations in Chemical Engineering. Ed Butterworth-Heinemann, Stoneham, MA, USA. 1991.