

REACTORES REALES

INDICE

1. Introducción
2. Funciones de distribución
3. Concepto de volumen muerto y canalización
4. Modelos combinados
5. Modelo de dispersión
6. Modelo de tanques en serie

APARTAMIENTOS DE LA IDEALIDAD

Factores que influyen (entre otros)

- ❖ Condiciones de operación
- ❖ Diseño geométrico del reactor
- ❖ Agitación
- ❖ Viscosidad del fluido
- ❖ Distribución del relleno en lechos empacados
- ❖ Caudal

Se constatan frecuentemente dos tipos de apartamiento

1. Canalizaciones: parte de los elementos de fluido pasan a través del recipiente más rápido que otros

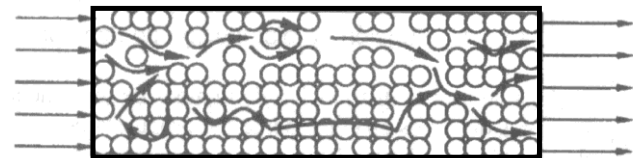


Figura 13-2 Reactor empacado.

Fogler, S. Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas. Cuarta Edición

2. Espacios muertos: determinadas zonas del reactor actúan como estancas disminuyendo el volumen útil del equipo.

Ej: base de tomas manométricas, esquinas rectas

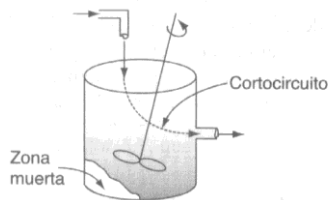


Figura 13-3 CSTR.

Fogler, S. Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas. Cuarta Edición

IDEAL vs REAL

Qué aspectos debemos tener en cuenta para predecir el comportamiento de un reactor homogéneo e isotérmico?

- ❖ Cinética de la reacción
- ❖ Comportamiento fluidodinámico del reactor (modelo de flujo)

Introducción- Funciones de distribución (1)

FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN

Si se repite una medida experimental un cierto número de veces, los datos obtenidos estarán dispersos alrededor del valor medio

x_i Valor de la medida

\bar{x} Valor medio de la variable

y_i Número de veces que se repite la diferencia

Se define: $y = f(x_i - \bar{x})$ Función de los valores medidos alrededor del valor medio

Introducción- Funciones de distribución (2)

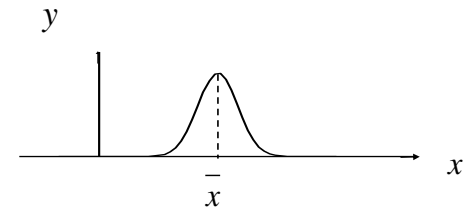
CURVA DE GAUSS

$$y = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\bar{x}}{\sigma}\right)^2}$$

σ Desviación estándar

σ^2 Varianza

y Función normal de distribución o Función de Gauss



Introducción- Funciones de distribución (3)

Momentos de distribución

Momento respecto al origen

$$M_0^k = \frac{\int_0^{\infty} x^k f(x) dx}{\int_0^{\infty} f(x) dx}$$

k: Cualquier valor entero (0, 1, 2 ...)

Si **k= 1:** Valor medio o centroide de la distribución

$$M_0^1 = \frac{\int_0^{\infty} x f(x) dx}{\int_0^{\infty} f(x) dx} = \bar{x}$$

**MOMENTO DE PRIMER ORDEN
RESPECTO AL ORIGEN**

Introducción- Funciones de distribución (4)

Momentos de distribución

Momento respecto al centroide

$$M_x^k = \frac{\int_0^{\infty} (x - \bar{x})^k f(x) dx}{\int_0^{\infty} f(x) dx}$$

k: Cualquier valor entero (0, 1, 2 ...)

Si **k= 2:** Varianza de la distribución

$$M_x^2 = \frac{\int_0^{\infty} (x - \bar{x})^2 f(x) dx}{\int_0^{\infty} f(x) dx} = \sigma^2$$

Momentos de distribución

También puede expresarse

$$\sigma^2 = \frac{\int_0^{\infty} x^2 f(x) dx}{\int_0^{\infty} f(x) dx} - \bar{x}^2$$

**MOMENTO DE SEGUNDO
ORDEN RESPECTO DEL VALOR
MEDIO**

FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN DE EDADES

DEFINICIONES

TIEMPO DE
RESIDENCIA DE UN
ELEMENTO DE FLUIDO

Es el tiempo que transcurre desde que el elemento entra en el recipiente hasta que lo abandona

EDAD DE UN
ELEMENTO DE FLUIDO
EN UN INSTANTE
DETERMINADO

Es el tiempo transcurrido entre la entrada del elemento al recipiente y el instante considerado

EDAD ≤ TIEMPO DE RESIDENCIA

Funciones de Distribución de Edades (2)

DEFINICIONES (2)

RECIPIENTE CERRADO	Existe flujo pistón a la entrada y a la salida del reactor (no hay dispersión).
RECIPIENTE ABIERTO	No se cumple la condición anterior ni a la entrada ni a la salida
RECIPIENTE SEMI - ABIERTO	Cerrado – Abierto o Abierto - Cerrado

De ahora en adelante se supondrá que el recipiente es **cerrado**.

Funciones de Distribución de Edades – Curva E (1)

**FUNCION DE DISTRIBUCIÓN DE TIEMPOS DE RESIDENCIA
FUNCIÓN E**

E(t) Frecuencia de distribución de edad de los elementos de fluido que abandonan un recipiente.

E(t)*dt Fracción de fluido en la corriente de salida que tiene tiempo de residencia comprendido entre t y t+dt.

NORMALIZACIÓN DE LA FUNCIÓN

Todas las fracciones de fluido de la corriente de salida tienen edad comprendida entre 0 e ∞

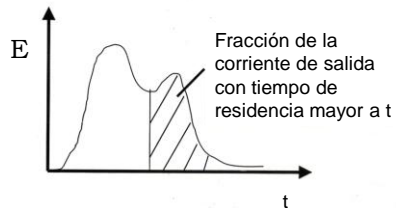
$$\int_0^{\infty} E dt = 1$$

Funciones de Distribución de Edades – Curva E (2)

Fracción de elementos de fluido con tiempo de residencia:

❖ menor que t será $\int_0^t E dt$

❖ mayor que t será $\int_t^\infty E dt = 1 - \int_0^t E dt$



Funciones de Distribución de Edades – Curva E (3)

CÁLCULO DE LOS CENTROIDES DE LA CURVA E (1)

Momento de Primer Orden: Tiempo medio de residencia

$$\bar{t}_E = \frac{\int_0^\infty t E(t) dt}{\int_0^\infty E(t) dt}$$

$$\bar{t}_E = \tau$$

Sólo en recipientes cerrados y sin volumen muerto.

Funciones de Distribución de Edades – Curva E (4)

CÁLCULO DE LOS CENTROIDES DE LA CURVA E (2)

Momento de Segundo Orden: Varianza

$$\sigma_t^2 = \frac{\int_0^{\infty} (t - \bar{t}_E)^2 E_t dt}{\int_0^{\infty} E_t dt}$$

$$\sigma_t^2 = \int_0^{\infty} (t - \bar{t}_E)^2 E_t dt$$

Funciones de Distribución de Edades – Curva I (1)

FUNCION DE DISTRIBUCIÓN DE EDADES INTERNA
FUNCIÓN I

I(t)

Frecuencia de distribución de edad de los elementos de fluido DENTRO del recipiente.

I(t)*dt

Fracción de fluido dentro del reactor que tiene edad comprendida entre t y t+dt.

NORMALIZACIÓN DE LA
FUNCIÓN

$$\int_0^{\infty} I dt = 1$$

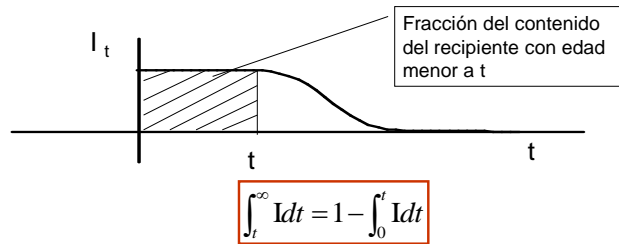
La suma de todas las fracciones de fluido dentro del reactor tiene edad comprendida entre 0 e ∞

Funciones de Distribución de Edades – Curva I (2)

Fracción del contenido del recipiente con edad

❖ menor que t $\int_0^t I dt$

❖ mayor que t $\int_t^\infty I dt$

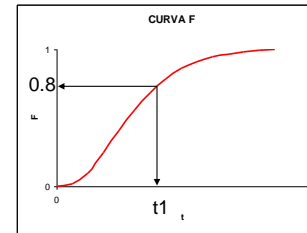


Funciones de Distribución de Edades – Curva F (1)

**FUNCION DE DISTRIBUCIÓN ACUMULATIVA DE EDADES
FUNCIÓN F**

$F_t = \int_0^t E_t dt$ Fracción de efluente que ha estado en el reactor un tiempo $< t$

$1 - F_t = \int_t^\infty E_t dt$ Fracción de efluente que ha estado en el reactor un tiempo $> t$



El 80% de las moléculas que salen del reactor tienen una edad $\leq t_1$

Funciones de Distribución de Edades – Curva F (2)

Cálculo de \bar{t}_E a partir de la curva F

$$\bar{t}_E = \int_0^{\infty} t E(t) dt$$

$$\frac{dF}{dt} = E \quad \longrightarrow \quad \boxed{\bar{t}_E = \int_0^1 t dF}$$

Funciones de Distribución de Edades – Variable θ (1)

FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN DE EDADES EN VARIABLE θ

Definición de la variable θ $\theta = \frac{t}{\tau}$

DISTRIBUCIÓN DE TIEMPOS DE RESIDENCIA (1)

E_t En función de la variable t

E_θ En función de la variable θ

$$\int_{\theta}^{\theta + \Delta\theta} E(\theta) d\theta = \int_t^{t + \Delta t} E(t) dt$$

Funciones de Distribución de Edades – Variable θ (2)

DISTRIBUCIÓN DE TIEMPOS DE RESIDENCIA (2)

Fracción de la corriente de salida con edad entre t y $t + \Delta t$

Por lo tanto debe cumplirse que: $E(\theta) d\theta = E(t) dt$

Fracción de la corriente de salida con edad entre θ y $\theta + \Delta\theta$

$$E_{\theta} \frac{d\theta}{\tau} = E_t dt \quad \longrightarrow \quad \boxed{E_{\theta} = \tau \cdot E_t}$$

Funciones de Distribución de Edades – Variable θ (3)

DISTRIBUCIÓN INTERNA I

$$\boxed{I_{\theta} = \tau \cdot I_t}$$

CURVA F

De acuerdo a la definición de F : $\int_0^{\theta} E(\theta) d\theta = \int_0^t E(t) dt$

$$\boxed{F_{\theta} = F_t}$$

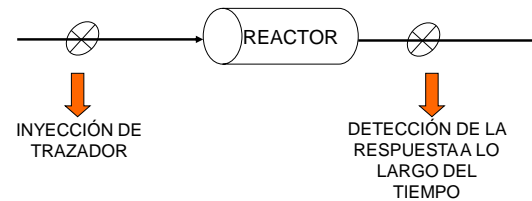
MOMENTOS CON VARIABLES REDUCIDAS

$$\bar{\theta}_E = \int_0^{\infty} \theta E_{\theta} d\theta = \frac{\bar{t}_E}{\tau}$$

$$\sigma_{\theta}^2 = \int_0^{\infty} (\theta - \bar{\theta})^2 E_{\theta} d\theta = \frac{\sigma_t^2}{\tau^2}$$

DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DE LAS FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN DE EDADES

Ensayos estímulo - respuesta



Funciones de Distribución de Edades – Ensayos est-resp (2)

CARACTERÍSTICAS DEL TRAZADOR

- ❖ Inerte
- ❖ De fácil detección
- ❖ Propiedades físicas similares a las de la mezcla
- ❖ Soluble en la mezcla
- ❖ No absorberse en ninguna superficie del reactor

ES NECESARIO QUE EL COMPORTAMIENTO DEL TRAZADOR REFLEJE EL DEL MATERIAL QUE FLUYE POR EL REACTOR

Métodos de inyección más empleados

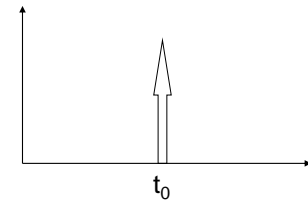
- ❖ Alimentación por pulso
- ❖ Alimentación por escalón

Funciones de Distribución de Edades – Ensayos est-resp (3)

RESPUESTA A UN PULSO – CURVA C

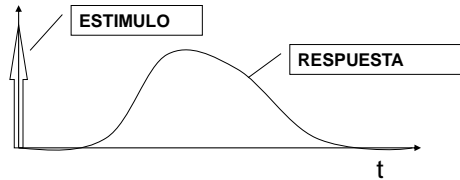
$$\left\{ \begin{array}{l} \delta(t-t_0) = \infty \quad \forall t=t_0 \\ \delta(t-t_0) = 0 \quad \forall t \neq t_0 \\ y \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t-t_0) dt = 1 \end{array} \right.$$

FUNCION PULSO: δ de Dirac



- ❖ Si se aplica en la entrada del reactor una función pulso o delta de Dirac, la curva **C** es la respuesta que se obtiene a la salida.
- ❖ La función pulso a la entrada puede obtenerse por un cambio en la concentración de un trazador.

Funciones de Distribución de Edades – Ensayos est-resp (4)



NORMALIZACIÓN DE LA RESPUESTA

$$c = C/Q \quad Q = \int_0^{\infty} C dt$$

$$\int_0^{\infty} C dt = 1 = \int_0^{\infty} \frac{C}{Q} dt$$

Funciones de Distribución de Edades – Ensayos est-resp (5)

Se puede determinar el área bajo la curva a partir de la masa de trazador inyectada y el caudal aplicado al reactor.

$$M = \int_{-\infty}^{+\infty} v C_e dt = \int_{-\infty}^{+\infty} v C_s dt = v Q$$

M: masa de trazador inyectada

$$\frac{M}{v} = Q \quad \frac{M}{V} \cdot \frac{V}{v} = Q \quad Q = C_0 \tau$$

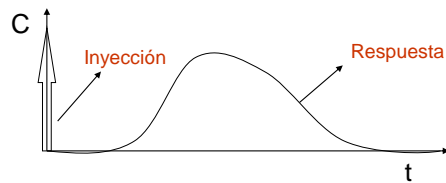
C_0 : como si la masa de trazador se hubiera distribuido uniformemente en el reactor de volumen V.

Funciones de Distribución de Edades – Ensayos est- resp (6)

RELACIÓN ENTRE C Y E

❖ Para relacionar C y E se debe tener en cuenta que en estado estacionario, la distribución de tiempos de residencia para el fluido que entra al recipiente, es igual a la del fluido que sale.

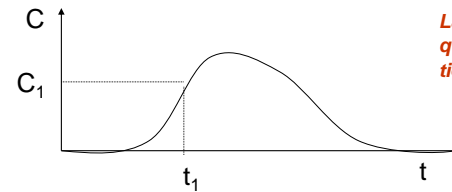
❖ Si se inyecta un pulso en un reactor en el tiempo cero y se mide la concentración de trazador a la salida en función del tiempo se tiene la curva C.



Funciones de Distribución de Edades – Ensayos est- resp (7)

RELACIÓN ENTRE C Y E

Si se toma $t = 0$ como el instante de la inyección de un pulso, todos los elementos de trazador tendrán el mismo tiempo de partida para sus edades.



Las partículas de trazador que salen a un tiempo t_1 tienen edad t_1 .

Funciones de Distribución de Edades – Ensayos est-resp (8)

RELACIÓN ENTRE C Y E

❖ La curva C es la distribución de edades del trazador que entró, por lo tanto es la distribución de edades del fluido que entra.

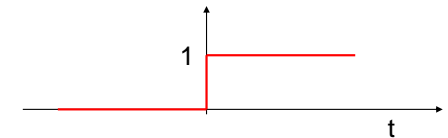
❖ Como en estado estacionario la distribución del fluido que entra es la misma que la del fluido que sale, entonces **C = E**

Funciones de Distribución de Edades – Ensayos est-resp (9)

RESPUESTA A UN ESCALÓN (1)

Función escalón $f(t) = U(t)$

$$U(t) \equiv \begin{cases} 1 & \forall t > 0 \\ 0 & \forall t < 0 \end{cases}$$



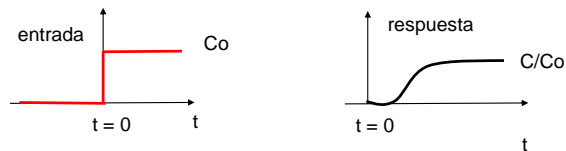
❖ El escalón en la entrada se puede producir mediante un salto (cambio abrupto y sostenido en la concentración de un trazador).

Funciones de Distribución de Edades – Ensayos est-resp (10)

RESPUESTA A UN ESCALÓN (2)

❖ Supongamos que estoy inyectando un fluido blanco y a $t=0$ cambio e inyecto un fluido rojo.

❖ Habré introducido una función escalón en la entrada



❖ Para un tiempo t posterior a la inyección de trazador, la fracción del segundo fluido a la salida será igual a la fracción de la corriente de salida con tiempo de residencia menor que t .

RESPUESTA A UN ESCALÓN ES LA CURVA F

Funciones de Distribución de Edades – Relaciones entre curvas (1)

RELACIONES ENTRE LAS CURVAS F e I, en recipiente cerrado.

RELACIÓN ENTRE I Y F

❖ Supongamos que se inyecta una función escalón a un recipiente (por ejemplo se inyecta un fluido blanco y a $t=0$ se cambia a fluido rojo)

❖ En cualquier momento posterior al tiempo de inyección, el balance en el recipiente será:

$$\begin{pmatrix} \text{vel. ingreso} \\ \text{de trazador} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{vel. de salida} \\ \text{de trazador} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{vel. de acumulación} \\ \text{de trazador} \end{pmatrix}$$

Funciones de Distribución de Edades – Relaciones entre curvas (2)

RELACIÓN ENTRE I Y F

$$\left(\begin{array}{l} \text{vel. ingreso} \\ \text{de trazador} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{vel. de salida} \\ \text{de trazador} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{l} \text{vel. de acumulación} \\ \text{de trazador} \end{array} \right)$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{vel. ingreso} \\ \text{de trazador} \end{array} \right) = \text{flujo de trazador a la entrada} = v$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{vel. salida} \\ \text{de trazador} \end{array} \right) = \text{flujo de trazador a la salida} = v \frac{C}{C_o} = v.F$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{vel. acumulación} \\ \text{de trazador} \end{array} \right) = V \frac{d \left[\int_0^t I dt \right]}{dt}$$

Funciones de Distribución de Edades – Relaciones entre curvas (3)

RELACIÓN ENTRE I Y F

$$\left(\begin{array}{l} \text{vel. ingreso} \\ \text{de trazador} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{vel. de salida} \\ \text{de trazador} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{l} \text{vel. de acumulación} \\ \text{de trazador} \end{array} \right)$$

$$v = vF + V \frac{\partial \int_0^t I dt}{dt}$$

$$1 = F + \tau \frac{\partial \int_0^t I dt}{dt}$$

$$1 = F + d(t)$$

Se introduce la variable de tiempo reducido θ

$$\theta = \frac{t}{\tau}$$

$$I_\theta = 1 - F_\theta$$

$$1 = F_\theta + I_\theta$$

RESUMEN - Funciones

Funciones de Distribución de Edades-Resumen (1)

CURVA E Función de distribución de edades del fluido que sale

$$\int_0^t E dt \quad \text{Fracción del fluido que sale con edad } < a \text{ t}$$

$$\int_t^\infty E dt \quad \text{Fracción del fluido que sale con edad } > a \text{ t}$$

CURVA I Función de distribución de edades del fluido dentro del reactor

$$\int_0^t I dt \quad \text{Fracción del fluido adentro del reactor con edad } < a \text{ t}$$

$$\int_t^\infty I dt \quad \text{Fracción del fluido adentro del reactor con edad } > a \text{ t}$$

CURVA F Función de distribución acumulativa de edades

$$F = \int_0^t E dt \quad \text{Fracción del fluido que sale con edad } < a \text{ t}$$

Funciones de Distribución de Edades (2)

RESUMEN - Relaciones

Relación Curva E y Curva F $F = \int_0^t E dt \quad \frac{dF}{dt} = E$

Relación Curva I y Curva F $1 = F + I(t)$

RESUMEN – Momentos Curva E

Momento de 1er orden $\bar{t}_E = \int_0^\infty t E(t) dt$

$$\bar{t}_E = \int_0^1 t dF$$

Momento de 2do orden $\sigma_t^2 = \int_0^\infty (t - \bar{t}_E)^2 E_t dt$

Funciones de Distribución de Edades (3)

RESUMEN – Expresiones en variable θ

$$E_{\theta} = \tau \cdot E_t$$

$$I_{\theta} = \tau \cdot I_t$$

$$F_{\theta} = F_t$$

$$\bar{\theta}_E = \frac{\bar{t}_E}{\tau}$$

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{\sigma_t^2}{\tau^2}$$

Concepto de Volumen Muerto y Canalización (1)

CONCEPTO DE VOLUMEN MUERTO (1)

❖ En un reactor real no existe verdaderamente un espacio muerto, ya que aún en una región completamente inmóvil existe transporte de masa por difusión molecular.

❖ Sin embargo para fines prácticos pueden considerarse zonas muertas a aquellas donde el fluido se mueve con relativa lentitud comparado con el resto del fluido.

CONCEPTO DE VOLUMEN MUERTO (2)

❖ Estas zonas muertas tendrán asociado un volumen, V_m , y el resto del volumen del reactor será considerado como el volumen activo, V_a .

$$V - V_m = V_a$$

DETERMINACIÓN DEL VOLUMEN MUERTO (1)

❖ Puede calcularse un tiempo medio de residencia para la zona activa:

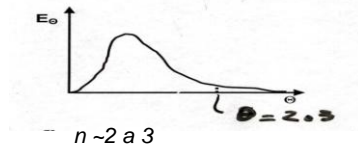
$$\bar{t} = \frac{V_a}{v} = \frac{V - V_m}{v} \quad 1 - \bar{\theta}_a = \frac{V_m}{V}$$
$$\bar{\theta}_a = \frac{\bar{t}_a}{\tau} = \frac{V_a}{V}$$

Determinando el tiempo medio de residencia para la curva E0 se puede obtener la fracción de volumen muerto del reactor.

DETERMINACIÓN DEL VOLUMEN MUERTO (2)

Datos a tiempos reducidos mayores a 2 o 3θ rara vez son lo suficientemente precisos.

$$\bar{\theta}_a = \int_0^n \theta E_\theta d\theta$$



$$1 = \bar{\theta} = \int_0^\infty \theta E_\theta d\theta = \int_0^n \theta E_\theta d\theta + \int_n^\infty \theta E_\theta d\theta$$

$$\bar{\theta} = \bar{\theta}_a + \int_n^\infty \theta E_\theta d\theta$$

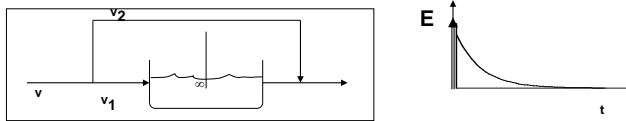
$$\bar{\theta}_a < 1$$

CONCEPTO DE CANALIZACIÓN

- ❖ Las fracciones de fluido que pasan rápidamente a través del recipiente se consideran como canalizaciones o by-pass y se les atribuye tiempo de residencia cero dentro del reactor.
- ❖ En un reactor real pueden existir fracciones de la corriente de entrada que permanecen un tiempo corto dentro del reactor comparado con el tiempo de residencia del resto del fluido.

Concepto de Volumen Muerto y Canalización (6)

CONCEPTO DE CANALIZACIÓN (2)



❖ Si no existe volumen muerto y solo se constata presencia de canalización, entonces:

$$\bar{t}_E = \tau \quad \bar{\theta} = 1$$

Curvas de distribución de los reactores ideales

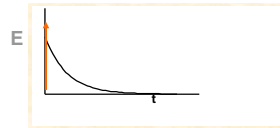
RCAI

$$vC_e(t) - vC(t) = V \frac{dC(t)}{dt}$$
$$C_e(t) - C(t) = \tau \frac{dC(t)}{dt}$$

Resolviendo la ecuación diferencial para diferentes curvas de entrada se tiene:

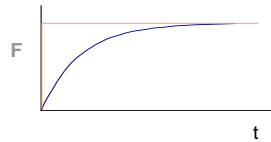
Respuesta a un pulso:

$$\mathbf{C}(t) = \mathbf{E}(t) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}$$



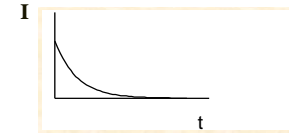
Respuesta a un escalón:

$$\mathbf{F}(t) = 1 - e^{-\frac{t}{\tau}}$$



Curva de distribución interna:

$$\mathbf{I}(t) = \mathbf{E}(t) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}$$



RTFP

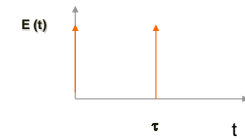
$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad C = C(z, t)$$

$$\text{para } z=0 \text{ y } t=t \quad C(0, t) = C_e(t)$$

Resolviendo la ecuación diferencial para diferentes curvas de entrada se tiene:

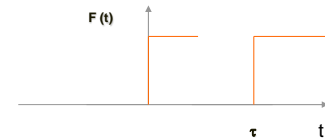
Respuesta a un pulso:

$$C(t) = E(t) = \delta(t - \tau)$$



Respuesta a un escalón:

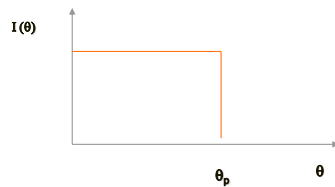
$$F(t) = U(t - \tau)$$



Curva de distribución interna:

$$\tau \mathbf{I}(t) = 1 - U(t - \tau)$$

$$\mathbf{I}(\theta) = 1 - U(\theta - \theta_p)$$



Transformada de Laplace

Definición: La transformación de Laplace de una función del tiempo $f(t)$ consiste en operar sobre la función multiplicándola por e^{-st} e integrar con respecto al tiempo t desde 0 a + infinito

$$L[f(t)] \equiv \left\{ \int_0^{+\infty} e^{-st} f(t) dt \right\} \equiv F(s)$$

De esta forma se elimina la variable tiempo y se obtiene una nueva expresión que es función de la variable s del dominio de Laplace

En el nuevo dominio cierto tipo de operaciones cambian a una forma más sencilla, por ejemplo una ecuación diferencial en el dominio real o temporal se transforma en una ecuación algebraica en el dominio de Laplace. Luego mediante una transformación inversa encontramos la solución en el tiempo real.

$$v\mathbf{C}e(t) - v\mathbf{C}(t) = V \frac{d\mathbf{C}(t)}{dt} \quad \text{RCAI}$$

$$\mathbf{C}e(t) - \mathbf{C}(t) = \tau \frac{d\mathbf{C}(t)}{dt}$$

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial z} = 0 \quad \mathbf{C} = \mathbf{C}(z, t) \quad \text{RTFP}$$

$$\text{para } z=0 \text{ y } t=t \quad \mathbf{C}(0, t) = \mathbf{C}e(t)$$

Transformada de Laplace

Anti-transformada

- Notación

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{F(s)\}(t)$$

$$\mathcal{L}^{-1}\{F(s)\} = f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} F(s) ds,$$

Transformada de Laplace

- Ejemplo

$$f(t) = 1$$

$$\begin{aligned} F(s) &= \int_0^{+\infty} e^{-st} dt = \lim_{z \rightarrow +\infty} \int_0^z e^{-st} dt = \lim_{z \rightarrow +\infty} \left. \frac{e^{-st}}{-s} \right|_0^z \\ &= \lim_{z \rightarrow +\infty} \frac{-e^{-sz}}{s} + \frac{1}{s} = \frac{1}{s} = F(s) \end{aligned}$$

Transformada de Laplace

- Notación

$$F(s) = L\{f(t)\}$$

$$L\{1\} = \frac{1}{s}$$

Transformada de Laplace

Función	Dominio en el tiempo $x(t) = \mathcal{L}^{-1}\{X(s)\}$	Dominio en la frecuencia $X(s) = \mathcal{L}\{x(t)\}$	Región de la convergencia para sistemas causales
retraso ideal	$\delta(t - \tau)$	$e^{-\tau s}$	
impulso unitario	$\delta(t)$	1	todo s
n-ésima potencia retrasada y con desplazamiento en la frecuencia	$\frac{(t - \tau)^n}{n!} e^{-\alpha(t - \tau)} \cdot u(t - \tau)$	$\frac{e^{-\tau s}}{(s + \alpha)^{n+1}}$	$s > -\alpha$
n-ésima potencia	$\frac{t^n}{n!} \cdot u(t)$	$\frac{1}{s^{n+1}}$	$s > 0$
q-ésima potencia	$\frac{t^q}{\Gamma(q + 1)} \cdot u(t)$	$\frac{1}{s^{q+1}}$	$s > 0$
escalón unitario	$u(t)$	$\frac{1}{s}$	$s > 0$
escalón unitario con retraso	$u(t - \tau)$	$\frac{e^{-\tau s}}{s}$	$s > 0$

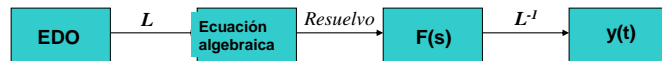
Transformada de Laplace

escalón unitario con retraso	$u(t - \tau)$	$\frac{e^{-\tau s}}{s}$	$s > 0$
Rampa	$t \cdot u(t)$	$\frac{1}{s^2}$	$s > 0$
potencia n-ésima con cambio de frecuencia	$\frac{t^n}{n!} e^{-\alpha t} \cdot u(t)$	$\frac{1}{(s + \alpha)^{n+1}}$	$s > -\alpha$
amortiguación exponencial	$e^{-\alpha t} \cdot u(t)$	$\frac{1}{s + \alpha}$	$s > -\alpha$
convergencia exponencial	$(1 - e^{-\alpha t}) \cdot u(t)$	$\frac{\alpha}{s(s + \alpha)}$	$s > 0$
seno	$\sin(\omega t) \cdot u(t)$	$\frac{\omega}{s^2 + \omega^2}$	$s > 0$
coseno	$\cos(\omega t) \cdot u(t)$	$\frac{s}{s^2 + \omega^2}$	$s > 0$
seno hiperbólico	$\sinh(\alpha t) \cdot u(t)$	$\frac{\alpha}{s^2 - \alpha^2}$	$s > \alpha $
coseno hiperbólico	$\cosh(\alpha t) \cdot u(t)$	$\frac{s}{s^2 - \alpha^2}$	$s > \alpha $

Transformada de Laplace

- Utilidad

La Transformada de Laplace consiste en un cambio de dominio y se emplea como herramienta en la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias, 'transformando' las mismas en ecuaciones algebraicas.



Transformada de Laplace

- Utilidades

1. Función escalón

$$U(t-a) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \leq a \\ 1 & \text{si } t > a \end{cases}$$

$$L\{U(t-a)\}(s) = \frac{e^{-as}}{s}$$

Transformada de Laplace

- Utilidades

2. Delta de Dirac

$$\delta(t-a) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \neq a \\ +\infty & \text{si } t = a \end{cases} = \frac{dU(t-a)}{dt} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t-a) dt = 1$$

Propiedad de filtro

$$\int_0^{+\infty} f(t) \delta(t-t_0) dt = f(t_0) \Leftrightarrow t_0 > 0$$

$$\boxed{L\{\delta(t-a)\}(s) = e^{-as}}$$

Transformada de Laplace

- Utilidades

3. Función de transferencia

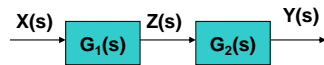
● Definición

Dado un sistema de ecuaciones diferenciales lineales a coeficientes constantes, la función de transferencia $G(s)$ se define como el cociente entre la transformada de la salida y de la entrada cuando todas las condiciones iniciales son iguales a cero.

$$\exists G(s) = \frac{L\{\text{salida}\}}{L\{\text{entrada}\}} \Leftrightarrow y^k(0^+) = 0 \quad \forall k$$

Transformada de Laplace

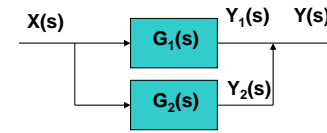
- Utilidades
- 3. Función de transferencia
 - Propiedades
 - Sistemas en serie



$$G_{serie}(s) = \prod_{i=1}^{i=n} G_i(s)$$

Transformada de Laplace

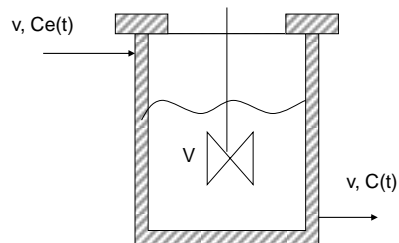
- Utilidades
- 3. Función de transferencia
 - Propiedades
 - Sistemas en paralelo



$$G_{paralelo}(s) = \sum_{i=1}^{i=n} G_i(s)$$

Transformada de Laplace

- Ejemplo
- 3. Sea un RCAI, hallar la función de transferencia así como la respuesta a un pulso y a un escalón.



Transformada de Laplace

$$v_e C_e(t) - v_s C(t) = V \frac{dC(t)}{dt} + C(t) \frac{dV}{dt},$$

Considerando que el volumen no varía en el tiempo, es decir $v_e = v_s = v$

$$v C_e(t) - v C(t) = V \frac{dC(t)}{dt} \Rightarrow C_e(t) - C(t) = \tau \frac{dC(t)}{dt}$$

Pasando al dominio de Laplace

$$\mathcal{L}\{C_e(t)\} = \mathcal{L}\{C(t)\} + \tau (s \mathcal{L}\{C(t)\} - C(t=0))$$

Transformada de Laplace

$$\mathcal{L}\{C_e(t)\} = \mathcal{L}\{C(t)\} * (1 + s\tau) \Rightarrow$$
$$\frac{\mathcal{L}\{C(t)\}}{\mathcal{L}\{C_e(t)\}} = \frac{1}{1 + s\tau} \Rightarrow$$

$$G_{RCAl}(s) = \frac{1}{s\tau + 1}$$

Transformada de Laplace

La función de transferencia para un RTFPI:

$$G(s) = e^{-\tau_p s}$$

Reactor tubular flujo pistón con dispersión

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

Donde D es el coeficiente de dispersión longitudinal.

$$Pe = \frac{uL}{D} \text{ número de Peclet}$$

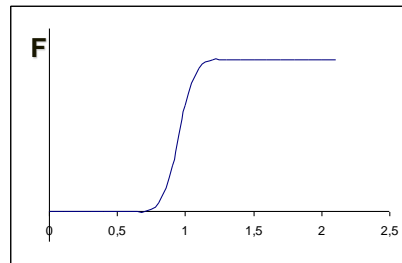
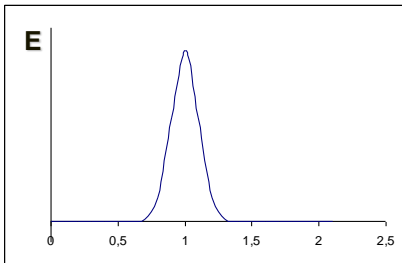
Si la dispersión es pequeña (Peclet grande), la curva de distribución de tiempos de residencia es una gaussiana.

Pequeña dispersión

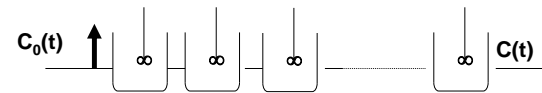
$$E_{\theta} = \frac{1}{2\sqrt{\pi(D/uL)}} \exp\left[-\frac{(1-\theta)^2}{4(D/uL)}\right]$$

Curva de distribución de tiempos de residencia a la salida expresada en variable reducida.

$$\bar{\theta} = \frac{\bar{t}}{\tau} = 1 \quad \sigma_{\theta}^2 = \frac{\sigma_t^2}{\tau^2} = 2\left(\frac{D}{uL}\right) = \frac{2}{Pe}$$



MODELO DE TANQUES EN SERIE



$$E_{\theta} = \frac{N^N \theta^{(N-1)} e^{-N\theta}}{(N-1)!}$$

$$\bar{\theta}_E = \int_0^{\infty} \theta \frac{N^N \theta^{(N-1)} e^{-N\theta}}{(N-1)!} d\theta = 1$$

$$\sigma_{\theta}^2 = \int_0^{\infty} \theta^2 \frac{N^N \theta^{(N-1)} e^{-N\theta}}{(N-1)!} d\theta - 1 = \frac{1}{N}$$

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{1}{N} \quad \sigma_{\theta}^2 = \frac{\sigma_t^2}{\tau^2}$$

$$\overline{\theta_E} = 1 \quad \overline{\theta_E} = \frac{\overline{t_E}}{\tau}$$

$$\mathbf{E}_{\theta} = \tau \mathbf{E}_t \quad \text{con } \tau = N\tau_i$$

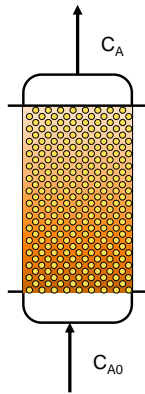
$$E_{\theta_i} = \tau_i E_t = \frac{\theta_i^{(N-1)} e^{-\theta_i}}{(N-1)!}$$

$$\tau_i \mathbf{E}_t = \left(\frac{t}{\tau_i} \right)^{(N-1)} \frac{e^{-t/\tau_i}}{(N-1)!}$$

Para reacción de 1^{er} orden:

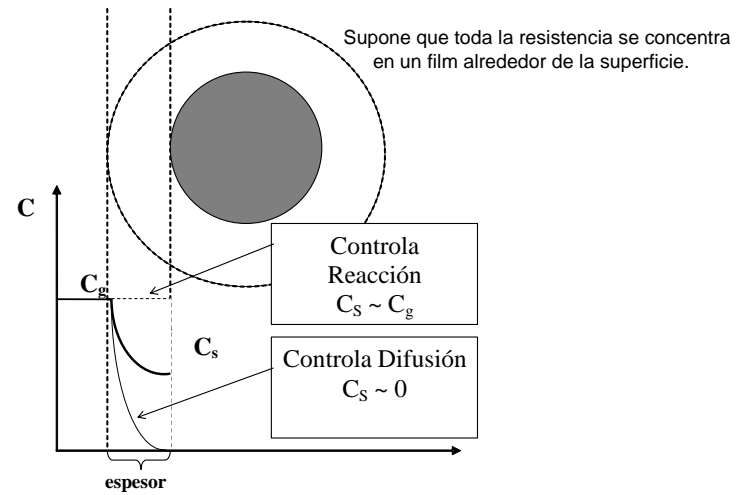
$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{1}{(1+k\tau_i)^N} = \frac{1}{\left(1 + \frac{k\tau}{N}\right)^N}$$

SISTEMAS HETEROGÉNEOS AGREGADOS DE PARTÍCULAS



Reactor de lecho fijo

Transferencia de masa
Modelo del FILM LAMINAR



Expresión de velocidad de reacción

$$r = kC_S^n$$

$$r = k_g a_m (C_g - C_S)$$

Donde:

kg- coeficiente de TM (L/t)

am- área externa de TM/masa de catalizador (L²/M)

ESFERA

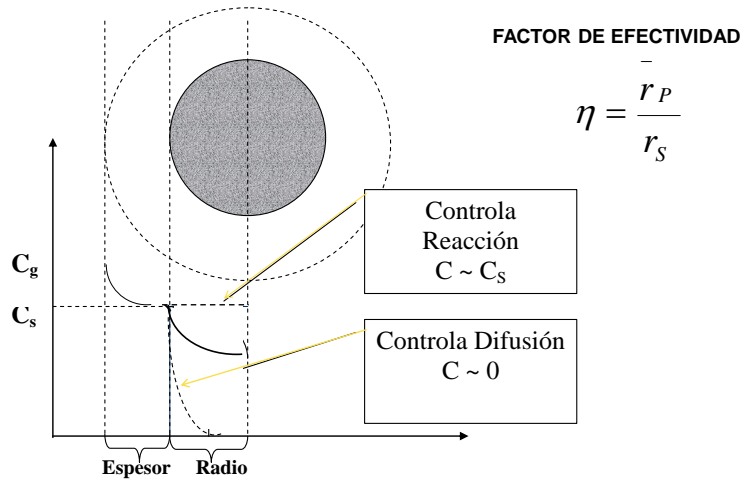
$$A = 4\pi R^2 \quad V = \frac{4\pi R^3}{3} \quad \Rightarrow \quad a_m = \frac{6}{\rho d_p}$$

para $n = 1$

$$r = \frac{1}{\frac{1}{k} + \frac{1}{k_g a_m}} C_g = k_0 C_g$$

$$1/k_0 = 1/k + 1/k_g a_m$$

TRANSFERENCIA DE MASA INTRAPORO



DIFUSIÓN EN MATERIALES POROSOS

1. Se debe corregir la difusividad en fase gaseosa teniendo en cuenta la reducción de área de difusión debido a los poros.
2. Ramificaciones de los poros.
3. Difusión molecular (molécula-molécula) + Difusión tipo Knudsen (molécula-pared).
4. Transporte por migración de reactivo adsorbido.

TRANSPORTE EN POROS CILÍNDRICOS

Difusión molecular (Primera ley de Fick)

$$N_i = -D_{im} \frac{dC_i}{dx} = -(D_{im}) \frac{P_T}{RT} \frac{dy_i}{dx}$$

N_i – Flujo molar por área transversal

DIFUSIVIDAD EFECTIVA

- Difusividad molecular + Knudsen
- Factores geométricos: porosidad, tortuosidad y constricción

$$Def = D \frac{\varepsilon \sigma}{\delta}$$

ε – porosidad (reducción efectiva de superficie)

δ – tortuosidad > 1 , $X_L = \delta r$

σ – constricción (sección de poro variable)

TRANSFERENCIA DE MASA CON REACCIÓN

$$\eta = \frac{\bar{r}_P}{r_s} = \frac{\text{velocidad media en toda la pastilla}}{\text{velocidad en la superficie}}$$

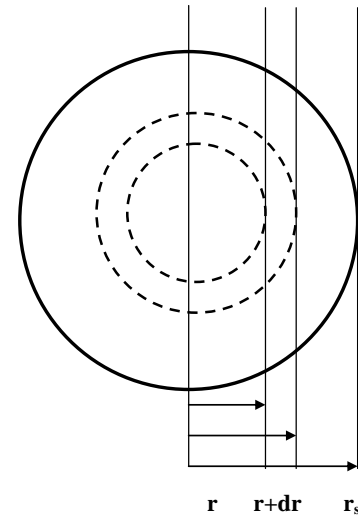
$$\eta = f(k_e, D_e, \text{constante cinética, geometría})$$

REACCIÓN IRREVERSIBLE DE 1er. ORDEN ISOTÉRMICA

$$A \rightarrow B \quad r_s = k_1 C_{AS} \quad \bar{r}_P = \eta r_s = \eta k_1 C_{AS}$$

$$\eta = \frac{\frac{1}{V_P} \int r_A(C) dV}{r_A(C_S)} = \frac{\frac{1}{V_P} \int C dV}{C_S}$$

BALANCE DE MASA Partículas esféricas



Balance de masa

(Entrada y Salida por difusión, reacción química)

$$-(4\pi r^2 D_e \frac{\partial C}{\partial r})_r + (4\pi r^2 D_e \frac{\partial C}{\partial r})_{r+\Delta r} = 4\pi r^2 \Delta r \rho_p k_1 C$$

$$k_1 - L^3 / TM$$

Si $D_e \neq f(C)$ y $\Delta r \rightarrow 0$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C}{\partial r} \right) = r^2 \frac{\rho_p k_1}{D_e} C$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} - C \frac{\rho_p k_1}{D_e} = 0$$

Condiciones de contorno

$$\text{centro, } r = 0 \quad \frac{\partial C}{\partial r} = 0 \quad \text{exterior, } r = r_s \quad C = C_s$$

$$\frac{C}{C_s} = \frac{r_s}{r} \frac{\sinh(3\phi_s r/r_s)}{\sinh 3\phi_s}$$

$$\phi_s = \frac{r_s}{3} \sqrt{\frac{k_1 \rho_p}{D_e}} \quad \text{MODULO DE THIELE}$$

$$\eta = \frac{1}{V_p} \int C dV = \frac{1}{C_s} \left[\frac{1}{\tanh 3\phi_s} - \frac{1}{3\phi_s} \right]$$

**ECUACIÓN DE VELOCIDAD GLOBAL
(TM interna y externa)**

$$r = \eta k C_S$$

$$r = k_g a_m (C_g - C_S)$$

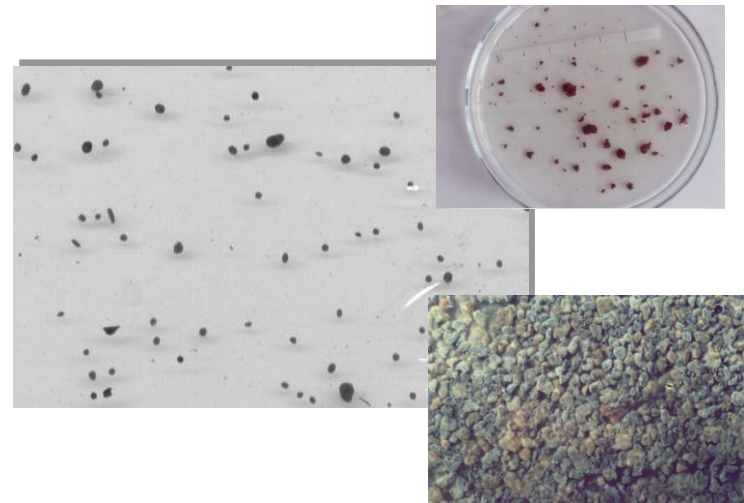
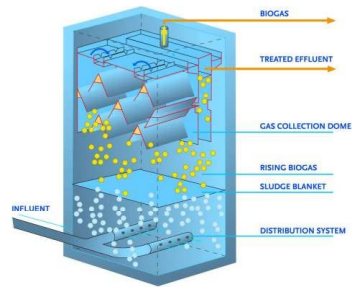
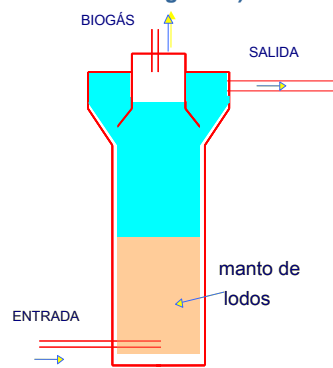
$$r = \frac{1}{\frac{1}{\eta k} + \frac{1}{k_g a_m}} C_g = k_0 C_g$$

$$1/k_0 = 1/\eta k + 1/k_g a_m$$

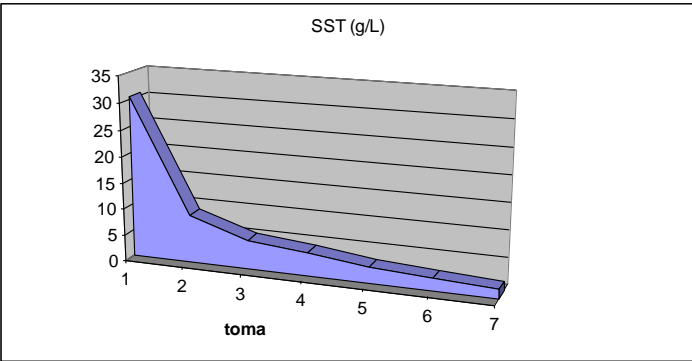
**APLICACIONES:
REACTORES DE MEZCLA
COMPLETA**

Reactores anaerobios con modelo de flujo de RCA

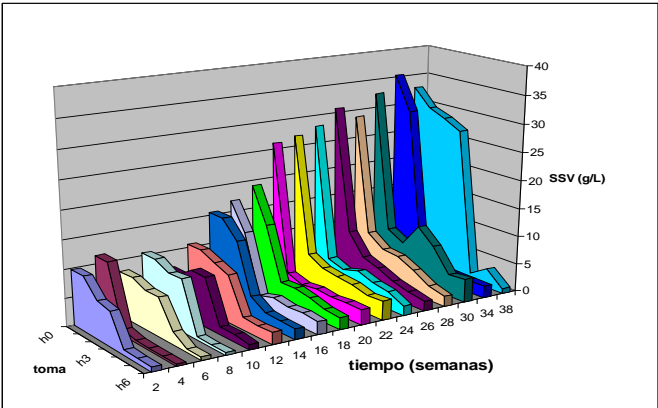
- Reactor UASB (Up-Flow Anaerobic Sludge Bed)

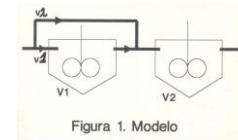
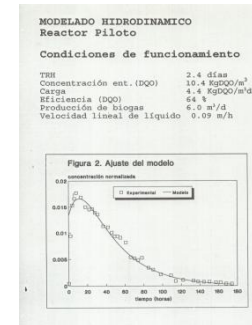
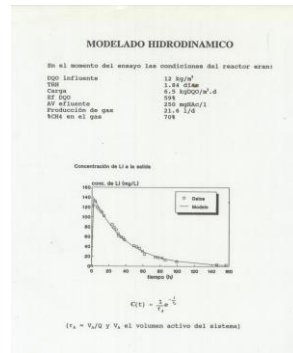


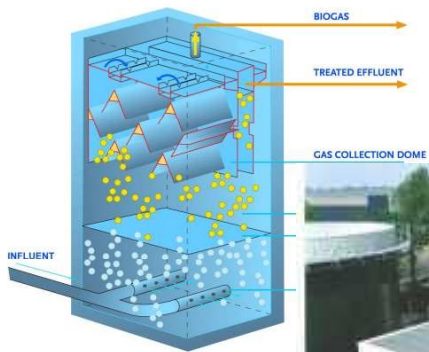
Ej.: perfil de sólidos



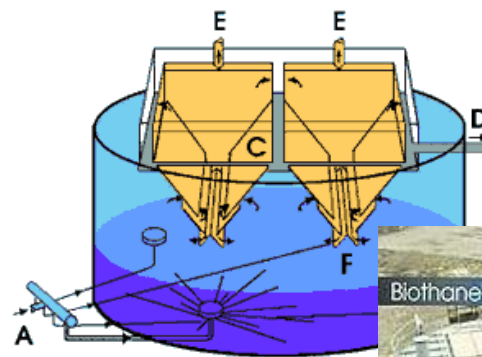
Perfil de lodos







UASB

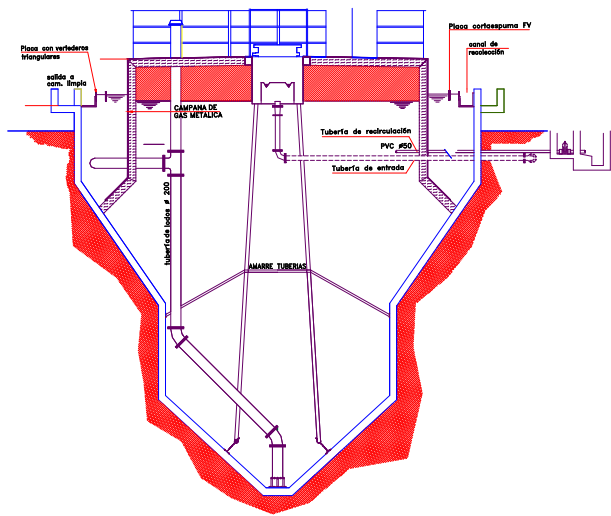


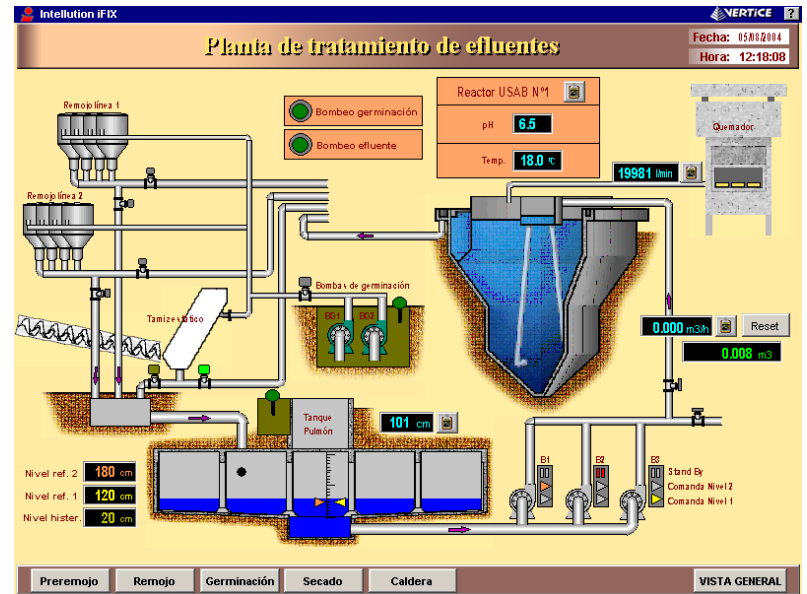
UASB



TRATAMIENTO DE EFLUENTE DE MALTERÍA UASB A ESCALA REAL







Resultados MOSA

- Caudal= 360m³/d
- TRH= 16hs
- DQO entrada = 2500 a 3300 mg/L
- Carga= 4 a 5 kgDQO/m³.d
- Eficiencia en DQO = 70%
- Producción de Biogás= 300m³/d (75%CH₄)

TRATAMIENTO DE EFLUENTES DE UNA INDUSTRIA LÁCTEA ESCALA REAL

Industria láctea; caso COLEME



Planta de tratamiento actual

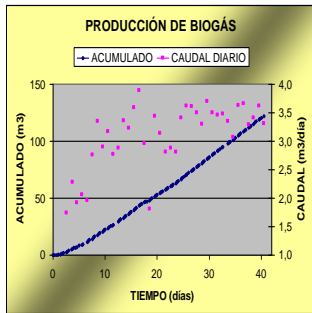


Resultados COLEME

- Caudal= 100 m³/d
- TRH= 19 hs
- DQO entrada = 2000 a 3500mg/L (40%grasa)
- Carga= 3 kgDQO/m³/d
- Eficiencia en DQO = 90%
- Producción de Biogás= 60m³/d (78%CH₄)

Digestión anaerobia de residuos agroindustriales





RESULTADOS

Estabilización del residuo:
42% de reducción de SV

Producción de biogás:
1.0m³/m³ de digester y por día con 70% de CH₄

Proyección sobre los volúmenes del Frigorífico Pul:

- Volumen del reactor: 800m³
- Producción de metano: 800 m³/día

**CONSIDERACIONES CINÉTICAS Y DE
DISEÑO DE REACTORES EN
SISTEMAS ANAEROBIOS**

Para poder utilizar las ecuaciones de diseño de reactores es necesario tener caracterizado el comportamiento fluidodinámico del reactor, los fenómenos de transporte en las distintas fases y la cinética.

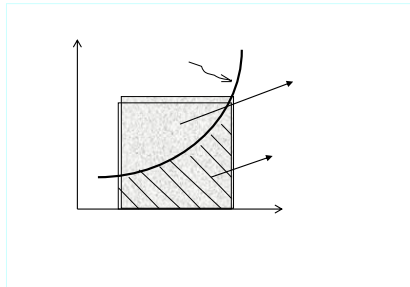
Los reactores pueden operar en discontinuo o en continuo y en este último caso identificamos como casos ideales el reactor de mezcla completa y el tubular flujo pistón

RCAI

$$\frac{\tau}{C_{S_0}} = \frac{\Delta X_S}{r_S}$$

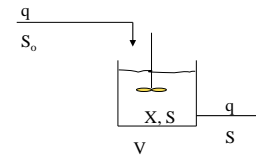
RTFP

$$\frac{\tau}{C_{S_0}} = \int_{x_{s0}}^{x_s} \frac{dX}{r_S}$$

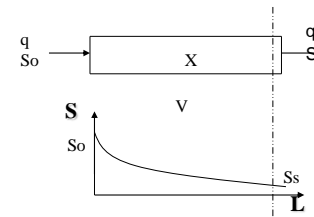


Cuando la curva $1/r_A$ es creciente el RTFP permite alcanzar la misma conversión con menor volumen. Por lo tanto para reacciones de orden mayor que cero el RTFP es el reactor que da menor volumen.

Si el modelo de flujo del reactor se asemeja a un RCAI la concentración en el reactor es igual a la de la salida.



Si el modelo de flujo se asemeja a un RTFPI la concentración cae con un perfil dado por la cinética a lo largo del volumen del reactor.



Para reacciones biológicas frecuentemente la ecuación que representa la cinética es la ecuación de Monod

$$(r_s) = \frac{k_m X S}{K_s + S}$$

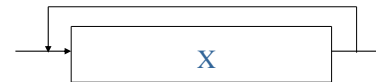
Para valores altos de concentración de sustrato respecto a K_s , la ecuación de Monod tiende a una cinética de orden 0.

Para valores bajos tiende a una cinética de orden 1.

Para las reacciones donde el rango de concentración en el que se trabaja haga de orden cero la cinética de Monod, es indistinto utilizar un RTFPI o un RCAI, el volumen necesario de reactor es el mismo.

Cuando el rango de concentración en el que se trabaja es lo suficiente baja como para que la cinética de Monod tienda a orden uno, sería más conveniente el RTFPI ya que se necesitará un volumen menor para obtener la misma conversión

Reactor RTFP con reciclo



El reciclo en el RTFP produce una disminución de la concentración en la entrada por lo que el perfil de concentración a lo largo del reactor varía menos. Si la recirculación es muy grande, el perfil es casi constante y desde ese punto de vista se asemeja al RCAI, no desde el punto de vista hidráulico, sino desde el punto de vista de la concentración.

En el caso de los reactores UASB la producción de gas normalmente es suficiente para que el comportamiento fluidodinámico de la fase líquida se acerque al comportamiento del RCAI.

Por lo tanto si se quiere que la concentración a la salida del sistema anaerobio sea lo más baja posible, dentro del reactor se tendrá una concentración baja lo que dependiendo de la K_s hará que la cinética se acerque a orden 1, perdiendo así capacidad de remoción debido a que se trabaja con una velocidad de reacción inferior a la máxima.

Por ejemplo si se tiene un efluente de 3000 mg DQO/L a ser tratado en un reactor UASB (suponemos comportamiento de RCAI) y se diseña para que la concentración de salida sea 300 mg/l, asumiendo una K_s de 200 mg/L, la velocidad a la que trabaja el reactor estará dada por:

$$r_s = \frac{kSX}{K_s + S}$$
$$r_s = \frac{kX300}{200 + 300} = kX0.6$$

Si se compara esta velocidad con la correspondiente a si se trabajara a una concentración más alta tal que el orden de reacción sea cero:

$$r_s = kX$$

En la situación donde se trabaja con 300mg/L a la salida la velocidad se reduce un 40% con respecto a la velocidad para orden cero.

Por lo tanto si se trabaja en dos etapas (dos RCAI en serie) diseñando para que la salida de la primera etapa sea 1500 mg DQO/L y una segunda etapa donde la salida sea 300mg/L en el primer reactor la reducción de velocidad será 12% y en el segundo 40%

$$r_s = \frac{kX1500}{200 + 1500}$$
$$r_s = kX0.88$$

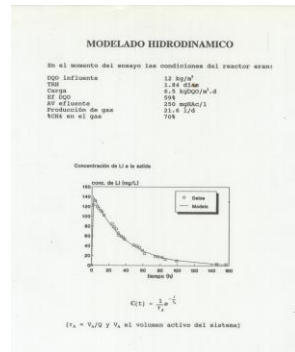
Por lo tanto para tener un volumen total menor podrían utilizarse reactores en serie de forma que los reactores trabajen a una velocidad promedio mayor que si se trabajara con un solo reactor RCAI.

Por supuesto que deberán realizarse otras consideraciones como por ejemplo: como afecta la variación de la flora trabajando en etapas, simplicidad de operación y costos constructivos.

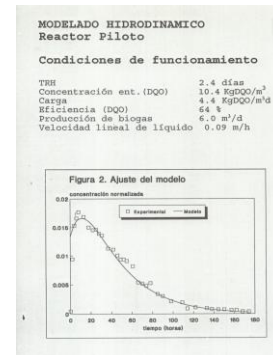
Estudios con trazador



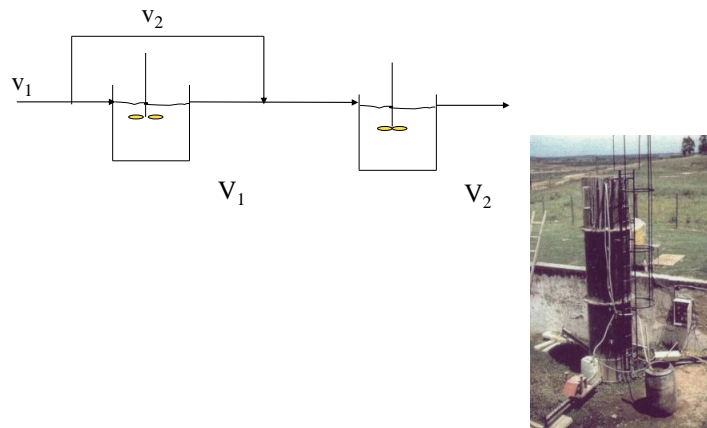
Curvas de distribución de tiempos de residencia



Estudios con trazador-Reactor Piloto

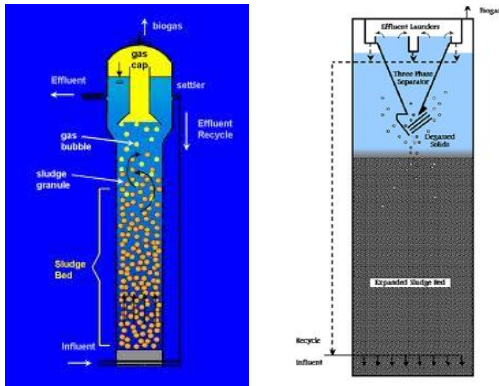


Modelo de flujo del reactor piloto



Reactor EGSB/IC

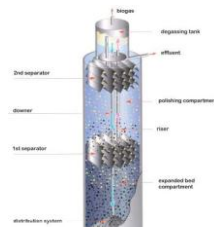
EGSB



EGSB

Expanded Granular Sludge Bed

IC

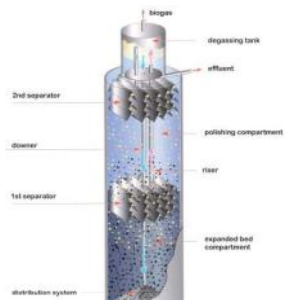


IC

Internal Circulation

	V_{asc}	H/D	carga
UASB	0.5-1 m/h	0.2-0.5	10-20 kgDQO/m ³ d
EGSB	10-15 m/h	4-5	20-40 kgDQO/m ³ d
IC	inf. 10-30 m/h sup. 4-8 m/h	3-6	20-40 kgDQO/m ³ d

- Reactor EGSB (Expanded Bed)
- Reactor IC (Internal Circulation)



REACTOR PILOTO



Small text box containing a disclaimer or copyright notice.

REACTOR PILOTO



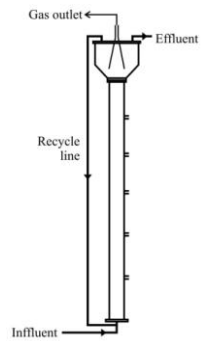
Las altas velocidades ascensionales se logran:

- Con la utilización de reciclo (externo o interno)
- Con la geometría del reactor (H/D)



Estas velocidades ascensionales mejoran la transferencia de masa externa al gránulo?



Reactor EGSB



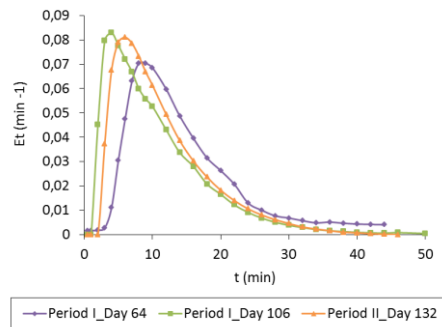
Condiciones experimentales

Descripción	Periodo I Día 64	Periodo II Día 102	Periodo II Día 132
Biomasa en el reactor (gSSV)	98	88	98
Sólidos suspendidos totales(gSST)	199	186	194
Características del lodo			
Volumen del reactor ocupado por el lodo	50%	100%	100%
Velocidad ascensional (m/h)	10	10	10
Producción de gas (L/d)	19	13	26

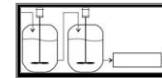
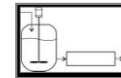
Estudios con trazador

Curvas de respuesta a la inyección de litio

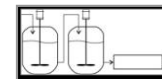
Se hicieron ensayos estímulo respuesta con distintas condiciones de operación del reactor



Curvas de distribución de tiempos de residencia



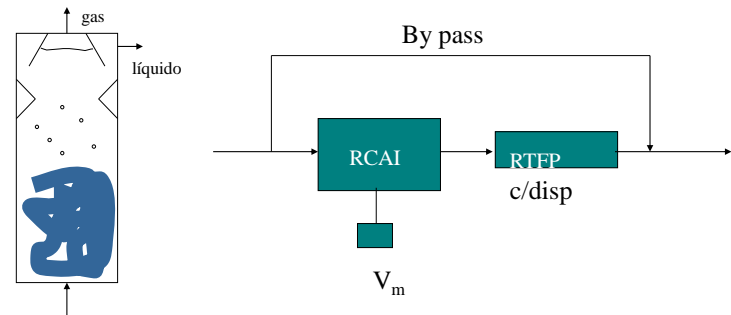
- El modelo que mejor ajusta es el de dos RCAI en serie con un RTFP



“Two starting up strategies and hydrodynamic behaviour of an EGSB treating sugar cane vinasse” XDAAL, Ouro Preto, 2011.

**MODELADO DE UN REACTOR UASB
TENIENDO EN CUENTA LA
FLUIDODINÁMICA Y EL CONSUMO DE
SUSTRATO**

MODELO FLUIDODINÁMICO



Wu y Hickey, 1997

Suposiciones del modelo

- La zona del manto de lodos puede asimilarse a un sistema con mezcla completa, en la medida que el gas generado produce una importante agitación
- La zona superior, que incluye el sedimentador, se asimila a un flujo en pistón con dispersión. En esta zona no hay reacción química ni producción de gas.
- Se asume cierto porcentaje del volumen total como volumen muerto; puede asimilarse al volumen ocupado por el sólido y/o a zonas estancas donde no hay actividad.
- Cierta porcentaje del líquido sigue recorridos que evitan las zonas anteriores, pudiendo asumirse una fracción de by-pass.

- RCAI en transitorio:

$$V_b \frac{dC}{dt} = V_b E(t) - (1 - \alpha) q C(t)$$

$$E(t) = \begin{cases} \frac{(1 - \alpha) M}{V_b T_{in}} & , \text{ si } 0 \leq t \leq T_{in} \\ 0 & , \text{ si } t \geq T_{in} \end{cases}$$

- TFP con dispersión en transitorio:

$$\frac{\partial C_p}{\partial t} = \frac{D_p}{L^2} \frac{\partial^2 C_p}{\partial Z^2} - \frac{u}{L} \frac{\partial C_p}{\partial Z}$$

$t > 0 \quad , \quad 0 < Z < 1$

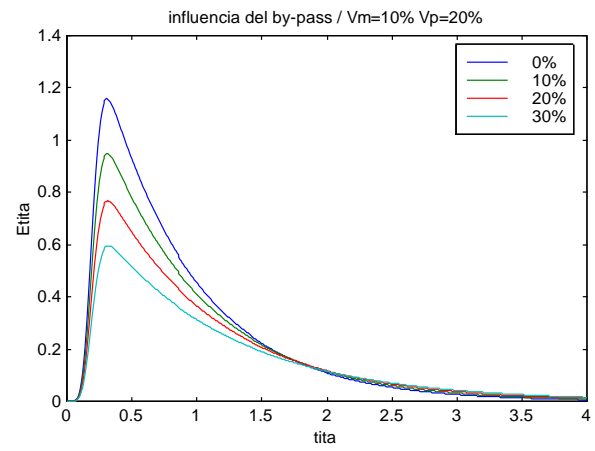
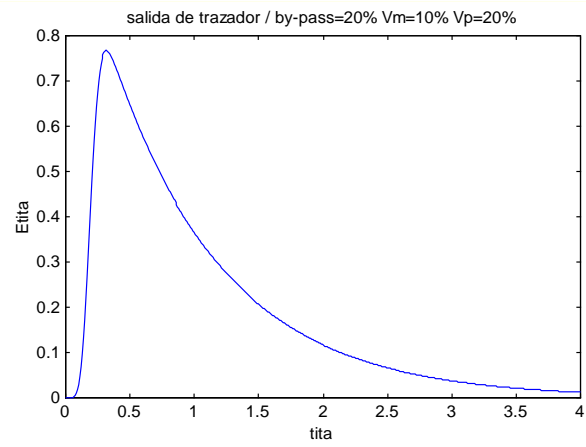
$$CB: C_p(0, t) = C(t)$$

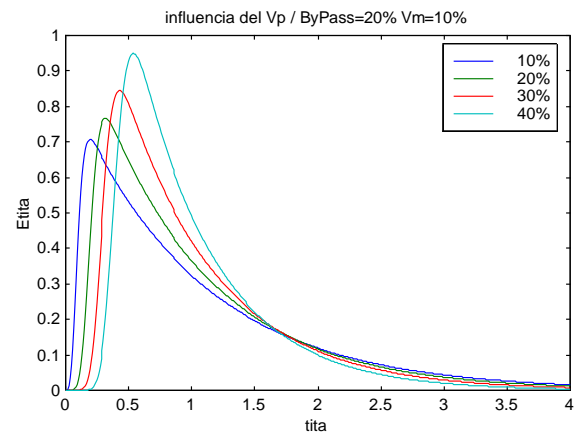
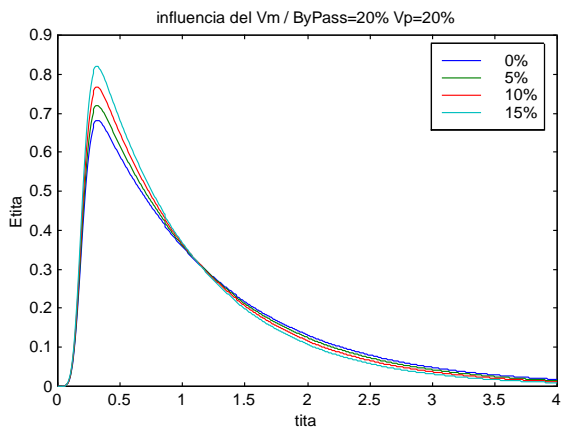
$$CI: C_p(Z, 0) = C_0$$

- Corriente de salida con el by-pass:

$$C_s = \alpha \frac{M}{q T_{in}} + (1 - \alpha) C_p \quad , \quad \text{si } 0 < t < T_{in}$$

$$C_s = (1 - \alpha) C_p \quad , \quad \text{si } t > T_{in}$$

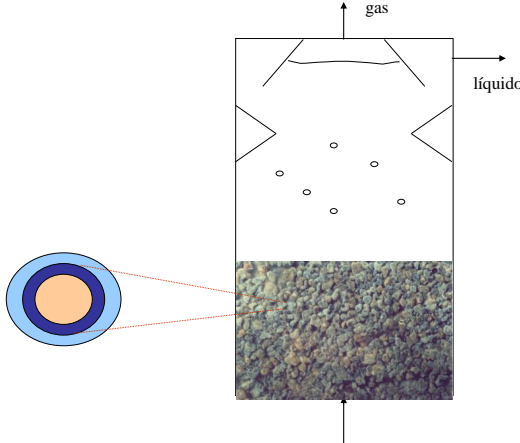
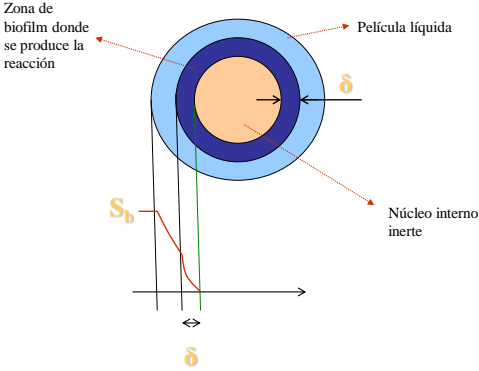




Suposiciones del modelo con reacción y resistencia a la transferencia de masa interna y externa

- Los gránulos se consideran esferas de $R=1.5\text{mm}$
 - El sustrato difunde en los gránulos penetrando una capa de espesor $\delta=0.1\text{mm}$; en el interior el gradiente de sustrato es cero
 - La degradación de sustrato sigue la cinética de Monod
 - Los consumidores de sustrato están distribuidos en forma homogénea en la capa activa
 - Se desprecia el crecimiento de microorganismos en los intervalos de tiempo considerados
 - Se verifica la continuidad de sustrato en todas las interfaces (seno del líquido/film líquido/superficie del gránulo
- El manto de lodos se considera en mezcla perfecta (concentración uniforme)
 - Se considera la existencia de by-pass y volumen muerto
 - No hay transferencia de sustrato hacia el volumen muerto
 - Se desprecia el consumo de sustrato en la zona del clarificador que se asume como un flujo pistón con dispersión
 - El reactor está en estado estacionario antes de realizar un pulso o escalón de sustrato

Perfiles de concentración debidos a la transferencia de masa externa e interna



Balance no estacionario en zona agitada del reactor

$$V_b \frac{dS_b}{dt} = V_b E(t) - q(1-\alpha)S_b(t) - K_L A_r [S_b(t) - S(R,t)]$$

$$CI: S_b(0) = S_{bo}$$

El valor de $S(R,t)$ se obtiene de las ecuaciones de los fenómenos que ocurren en el gránulo

Balance no estacionario en zona tipo pistón (sedimentador) del reactor

$$\frac{\partial S_d}{\partial t} = \frac{D_p}{L^2} \frac{\partial^2 S_d}{\partial Z^2} - \frac{u}{L} \frac{\partial S_d}{\partial Z}$$

$$CB: S_d(0,t) = S_b(t)$$

$$CI: S_d(Z,0) = S_{bo}$$

Perfil de concentración en el gránulo en transitorio:

$$D_e \frac{\partial^2 S}{\partial r^2} + \frac{2D_e}{r} \frac{\partial S}{\partial r} - \frac{k_m X S}{K_s + S} = \frac{\partial S}{\partial t}$$

$$CB: (i) D_e \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right) + K_L S = K_L S_b \text{ en } r = R$$

$$CB: (ii) \frac{\partial S}{\partial r} = 0, \text{ } r = R - \delta$$

$$CI: (ii) S(r,0) = S_s(r) \text{ } r \in (R - \delta, R)$$

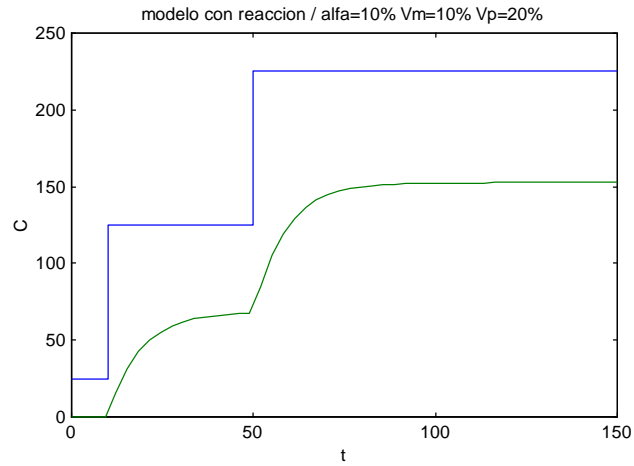
Para tener las condiciones iniciales se necesita resolver el balance en estado estacionario:

$$D_e \frac{\partial^2 S_s}{\partial r^2} + \frac{2D_e}{r} \frac{\partial S_s}{\partial r} = \frac{k_m X S_s}{K_s + S_s}$$

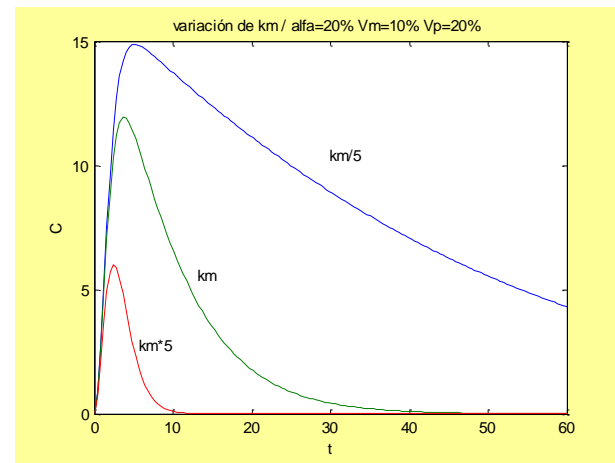
$$CB: (i) D_e \frac{\partial S_s}{\partial r} + K_L S_s = K_L S_{bo} \text{ en } r = R$$

$$CB: (ii) \frac{\partial S_s}{\partial r} = 0, \text{ } r = R - \delta$$

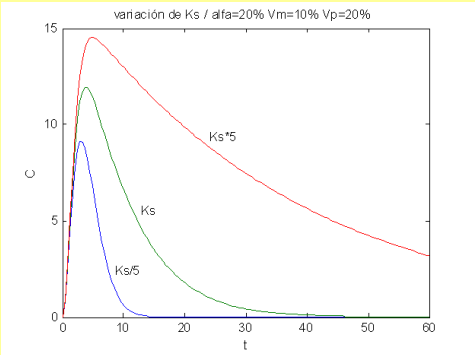
Modelo con reacción: dos escalones de sustrato en la entrada



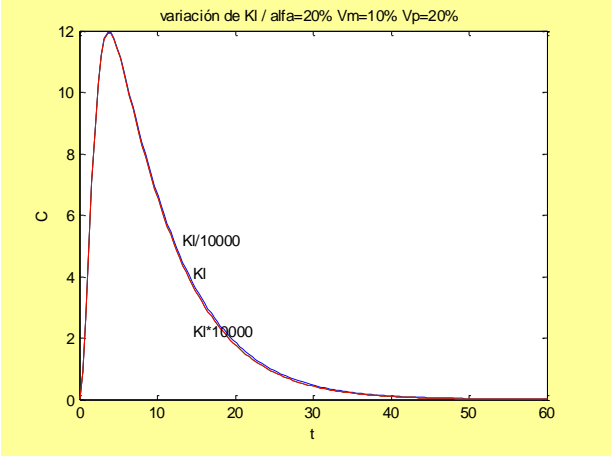
Impulso de sustrato



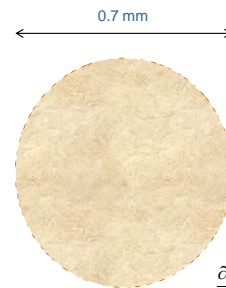
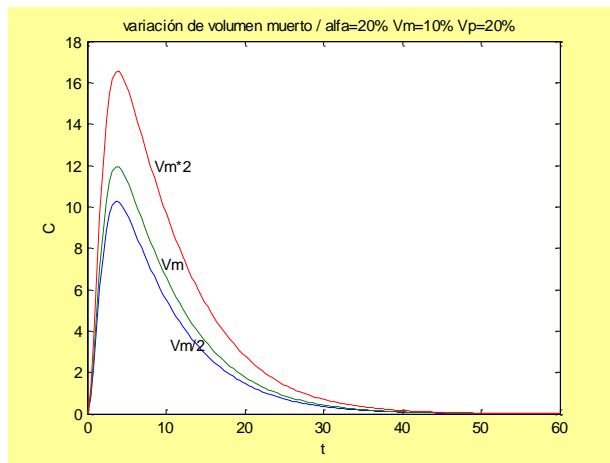
Impulso de sustrato



Impulso de sustrato



Impulso de sustrato



$$\frac{\partial S_1}{\partial t} = D_e \left[\frac{\partial^2 S_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial S_1}{\partial r} \right] - k_1 X_1 \frac{S_1}{K_a + S_1}$$

Condiciones de borde:

$$\frac{\partial S_1}{\partial r} = 0 \quad \text{en } r = 0$$

$$D_e \frac{\partial S_1}{\partial r} = k_{L1} (S_{1b} - S_1) \quad \text{en } r = R$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = D_e \left[\frac{\partial^2 S_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial S_2}{\partial r} \right] + Y_{12} k_1 X_1 \frac{S_1}{K_a + S_1} - k_2 X_2 \frac{S_2}{K_m + S_2 + S_2^2 / K_i}$$

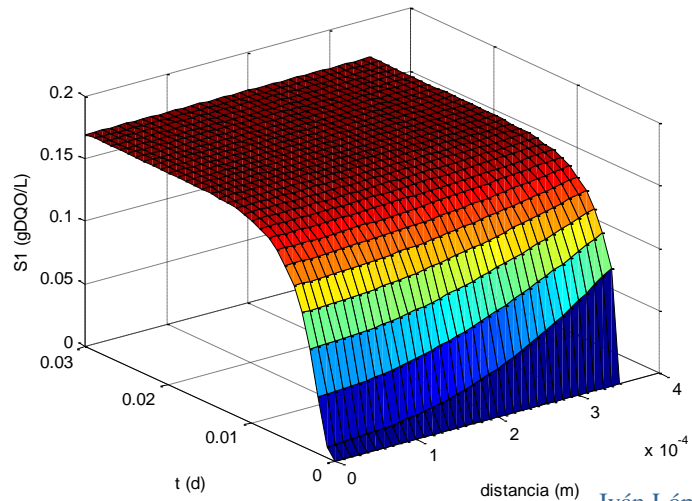
Condiciones de borde:

$$\frac{\partial S_2}{\partial r} = 0 \quad \text{en } r = 0$$

$$D_e \frac{\partial S_2}{\partial r} = k_{L2} (S_{2b} - S_2) \quad \text{en } r = R$$

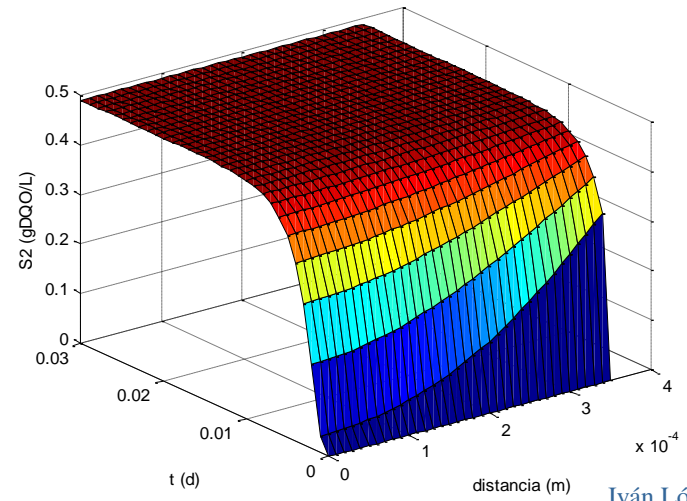
Iván López

Perfiles de concentración de S_1 dentro del gránulo

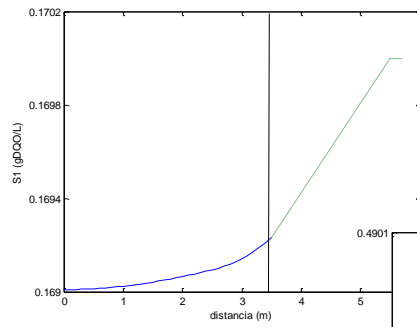


Iván López

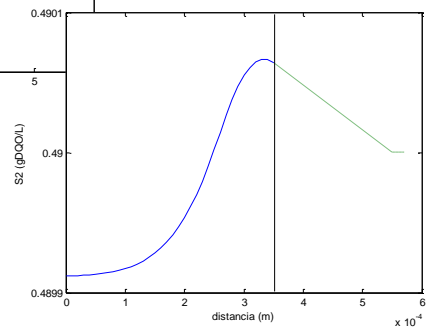
Perfiles de concentración de S_2 dentro del gránulo



Iván López



Perfiles en estado estacionario



Iván López