

# DESARROLLO DE UN PROGRAMA DE SIMULACIÓN EN INGENIERÍA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS (ECM-035)

Judith Cuéllar, Miguel M. Pérez H.  
Escuela de Ingeniería Química, Universidad Metropolitana  
Apartado Postal 1070, Caracas, Venezuela.

**Resumen:** La globalización y el auge de las nuevas tecnologías de información y comunicación y el creciente valor que tiene el conocimiento en la sociedad actual, han impuesto la presencia cada vez mayor de herramientas instruccionales asociadas al uso de plataformas educativas que han generado grandes retos en la educación así como en el docente y el alumno. Debido a esto, disponer de herramientas de simulación de reacciones químicas permite al estudiante desarrollar y complementar su proceso de aprendizaje al adquirir habilidades que se requieren en su desempeño como futuro profesional. El programa “Diseño de Reactores Químicos” contempla el estudio de reactores ideales isotérmicos: Reactor por Lotes, Reactor de Mezcla Completa y Reactor de Flujo Pistón; y presenta una visualización gráfica del comportamiento de las diferentes variables características del proceso permitiéndole al alumno fijar sus conocimientos eficazmente y proporcionándole la capacidad teórica y práctica para analizar y resolver situaciones concernientes a la selección y estudio de equipos.

**Palabras clave:** programa de simulación, reactores químicos, ingeniería de las reacciones químicas.

## 1. INTRODUCCIÓN

El programa de simulación “Diseño de Reactores Químicos” es una herramienta de apoyo dirigida a estudiantes de la asignatura Reactores Químicos de la carrera Ingeniería Química en la Universidad Metropolitana, y es utilizada como una estrategia de enseñanza – aprendizaje con la que el estudiante se familiariza con los sistemas de simulación.

El objetivo de este programa es crear una forma alterna de aprendizaje, que facilite el estudio y comprensión de los reactores químicos y de las variables que influyen en su comportamiento.

## 2. FUNDAMENTO TEÓRICO

El estudio de reactores químicos está estrechamente relacionado con la cinética de las reacciones, puesto que es ésta quien define el comportamiento de las mismas. Depende de la reacción, el comportamiento en los reactantes y productos dentro del reactor. Las ecuaciones que definen la cinética de reacción y que son aplicables en el estudio de los reactores químicos son:

$$v = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN}{dt} \quad (1)$$

$$v_A = k \cdot C_A^n \quad (2)$$

Los reactores ideales pueden clasificarse en tres grupos, según el intercambio que ocurra entre la materia en el interior del reactor y el exterior; según la morfología del reactor; y según los cambios de temperatura de la reacción.

Para la obtención de las ecuaciones de funcionamiento de los reactores es necesario realizar un balance de materia, ya que a partir de ésta se deducen las ecuaciones correspondientes a cada una de las variables, tales como conversión, concentración, tiempo, volumen, entre otras; que influyen en el comportamiento de los mismos.

Para los reactores discontinuos o Reactor por Lotes, en los cuales se introducen los reactantes, se mezclan, se dejan que reaccionen un tiempo determinado y posteriormente se descarga la mezcla resultante, se tiene la siguiente ecuación de funcionamiento:

$$\text{Desaparece} = -\text{Acumula} \quad (1)$$

$$(-v_A) * V = -N_{A_o} * \frac{dX_A}{dt} \quad (2)$$

En reactores de flujo continuo (RMC, RFP y reactor de Reciclo) hay entrada, salida y desaparición de moles, mientras que la acumulación se hace cero. Para un RMC la ecuación de funcionamiento es:

$$\text{Entra} = \text{Sale} + \text{Desaparece} \quad (3)$$

$$F_{A_o} = F_{A_o} * (1 - X_A) + (-v_A) * V \quad (4)$$

Para un RFP o Reactor de Reciclo, la composición del fluido varía con la posición en la dirección del flujo. Es decir, los reactivos se consumen continuamente a medida que fluyen por el reactor. Debido a esto la velocidad de reacción también varía axialmente ya que es función de la concentración y la ecuación de funcionamiento se traduce a:

$$F_A = (F_A + dF_A) + (-v_A) * dV \quad (5)$$

En un Reactor de Reciclo, adicionalmente, debe tenerse en cuenta el balance de materia que ocurre en el punto de mezcla, en donde se mezclan la alimentación fresca con la corriente de recirculación:

$$F_A' = (R + 1) * F_{A_o} \quad (6)$$

Las ecuaciones anteriores son válidas para sistemas a volumen constante o volumen variable, pero para estos últimos debe tomarse en cuenta además que:

$$V = V_o * (1 + \varepsilon_A * X_A) \quad (7)$$

### 3. LENGUAJE DE PROGRAMACIÓN

Las características necesarias para escoger cuál lenguaje de programación utilizar para la elaboración de la aplicación se basó en verificar que éste debe ofrecer un lenguaje de codificación sencillo, capaz de ser entendido por personas con conocimientos muy básicos en la programación, debe ofrecer la posibilidad de simplificar la escritura del código para describir la apariencia de la interfaz, sustituyéndolo por objetos predeterminados, los cuales además tengan las características necesarias para que en conjunto creen una interfaz amigable para el usuario; también debe estar en capacidad de realizar cálculos matemáticos de cierta complejidad en forma rápida y precisa y por último ser funcional con diversas aplicaciones que existen en el mercado.

Hay diversidad de lenguajes de programación disponibles en el mercado, pero al analizar todos los requerimientos que debe cubrir la herramienta a escoger, resulta que Microsoft Visual Basic 6.0 satisface estas necesidades ya que es un lenguaje que posee gran cantidad de controles y objetos que simplifican el trabajo al programar así como también tiene la propiedad de facilitar su manejo para personas no especializadas en la programación.

### 4. DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

“Diseño de Reactores Químicos” contempla el estudio de reactores ideales que operan a temperatura constante. Específicamente trabaja con reactores discontinuos: Reactor por Lotes y con reactores de flujo continuo: Reactor de Mezcla Completa (RMC), Reactor de Flujo Pistón (RFP) y Reactor de Reciclo.

Para el reactor por Lotes, RMC y RFP el programa ofrece la opción de trabajar a volumen constante o a volumen variable. Dentro de la opción de volumen constante, pueden estudiarse los siguientes tipos de reacción: Irreversible, Irreversible en Paralelo, Irreversible en Serie y Reversible. Para los dos primeros tipos de reacción, es posible trabajar a orden uno y dos; mientras que para los dos últimos tipos de reacción sólo es posible hacerlo con orden 1. Dentro de la opción: volumen variable, el programa ofrece únicamente operar con reacciones Irreversibles tanto para orden uno como orden 2.

Para el Reactor de Reciclo sólo es posible operar a volumen constante, dentro del cual hay opción de escoger entre el orden uno o dos de reacciones Irreversibles.

La Fig. 1 muestra un diagrama que modela el funcionamiento del programa cuando la selección realizada es: Reactor por Lotes, RFP o RMC

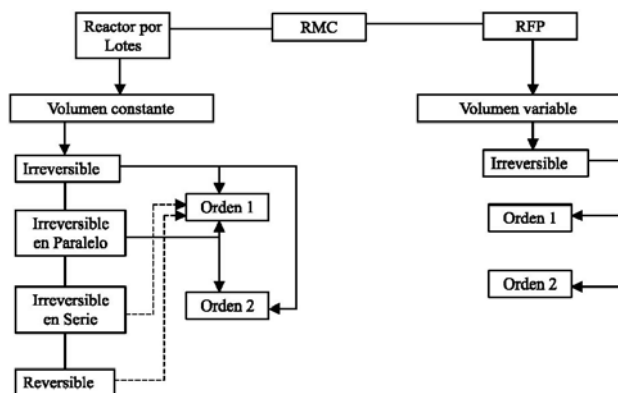


Figura 1. Diagrama del funcionamiento de “Diseño de Reactores Químicos” para Reactor por Lotes, RFP o RMC

Cuando la selección del tipo de reactor con el cual se desea trabajar es Reactor de Reciclo, el diagrama de funcionamiento del programa es el siguiente:

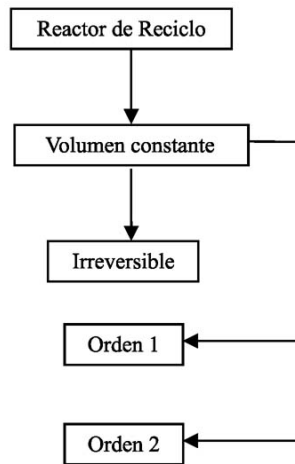


Figura 2. Diagrama del funcionamiento de “Diseño de Reactores Químicos” para Reactor de Reciclo

Desde el punto de vista de interfaces, el programa ofrece visualizaciones amenas y sencillas que permiten que el usuario se familiarice y adapte rápidamente.

En la ventana principal, se selecciona el tipo de reactor a trabajar (Ver Figura 3), aquí también hay dos botones: *Ayuda* que permite abrir el Manual del Usuario, y *Salir* permite cerrar programa.

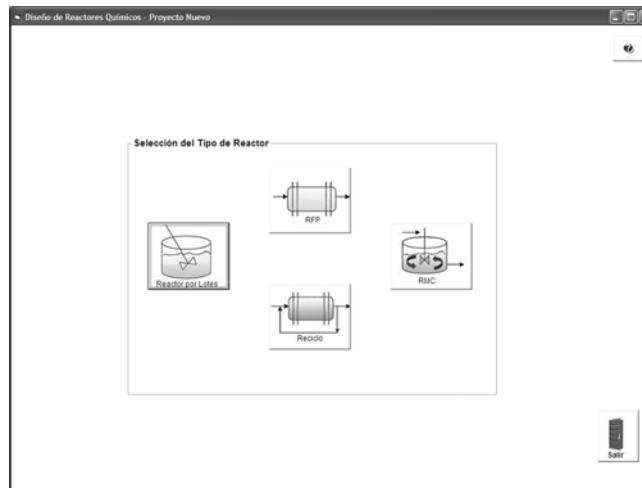


Figura 3. Ventana Principal de “Diseño de Reactores Químicos”

Una vez que se ha seleccionado el reactor con el cual se desea trabajar, se visualiza en la ventana, las condiciones de operación, tipo de reacción y orden al cual se desea tener acceso para realizar los cálculos. Si el reactor que se selecciona es por Lotes, RFP o RMC la ventana mostrará lo siguiente:



Figura 4. Ventana de selección de los casos a trabajar para un Reactor por Lotes, RMC o RFP

Si se escoge trabajar con el reactor de Reciclo la ventana mostrará:



Figura 5. Ventana de selección de los casos a trabajar para un Reactor de Reciclo

Finalmente, luego de especificar en las opciones aparece en la ventana la selección hecha en la cual se introducen los datos y se obtienen los resultados numéricos de las diferentes variables.

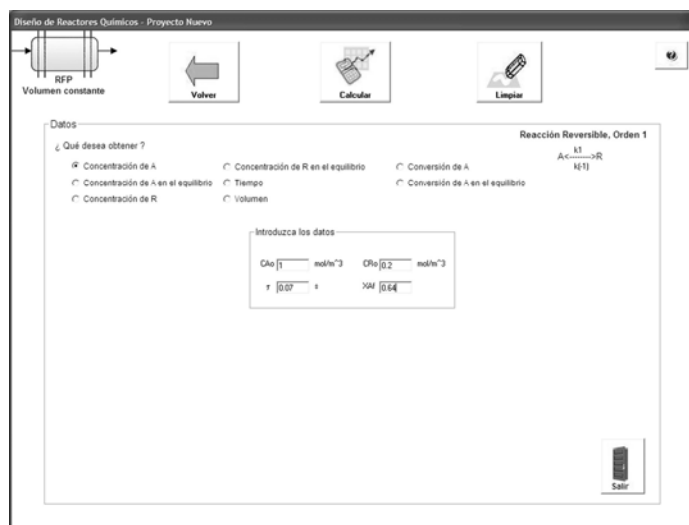


Figura 6. Ventana de introducción de datos y obtención de resultados

## 5. DISCUSION DE RESULTADOS

La aplicabilidad del programa “Diseño de Reactores Químicos” pudo validarse para una serie de ejemplos, los cuales fueron comparados con valores teóricos de las fuentes bibliográficas. El error relativo obtenido de esta comparación no fue mayor a 5 %, lo que indica que el programa es una herramienta confiable.

Debido a la complejidad de los sistemas de ecuaciones involucrados, el programa no trabaja con reacciones irreversibles en serie y reversibles, ambas de segundo orden y de sistemas que operan a volumen constante. Mientras que para volumen variable el programa está limitado a trabajar con reacciones irreversibles de primer o segundo orden.

## 6. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Con la elaboración de “Diseño de Reactores Químicos”, los estudiantes de Ingeniería Química de la Universidad Metropolitana cuentan con una herramienta que les ofrece la posibilidad de obtener resultados numéricos de las diferentes variables que intervienen en el comportamiento de reactores químicos ideales que operan isotérmicamente, los cuales forman parte del contenido programático de la asignatura Reactores Químicos.

Ya que el programa corresponde a un Trabajo de Grado presentado recientemente, este no ha sido probado en ningún curso, por lo cual actualmente no hay ninguna opinión estudiantil ni ningún resultado en los estudiantes.

## 7. EJEMPLO DE CALCULO

Reactor por Lotes, Reacción Reversible a volumen constante de Orden 1.

Datos:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= 0.2 \text{ s}^{-1} \\
 k_{-1} &= 0.09 \text{ s}^{-1} \\
 N_{A_0} &= 7.21 \text{ mol/s} \\
 C_{A_0} &= 35 \text{ mol/m}^3 \\
 C_{R_0} &= 47 \text{ mol/m}^3 \\
 t &= 5 \text{ s} \\
 X_{A_e} &= 0.719
 \end{aligned}$$

Hallar:  $C_{Af}$ ,  $C_{Ae}$ ,  $C_{Rf}$ ,  $C_{Re}$ ,  $V$ ,  $X_A$

Concentración de A:

$$C_{A_f} = C_{A_e} + \frac{C_{A_0} - C_{A_e}}{\exp\left(t \cdot k_1 \cdot \frac{\left(\frac{C_{R_0}}{1 + \frac{C_{R_0}}{C_{A_0}}}\right)}{\left(\frac{C_{R_0} + X_{A_e}}{C_{A_0}}\right)}\right)} = 32.4742 + \frac{35 - 32.4742}{\exp\left(5 \cdot 0.2 \cdot \frac{\left(\frac{47}{35 + 0.719}\right)}{\left(\frac{47}{35}\right)}\right)} = 33.2850 \text{ mol/m}^3$$

Concentración de A en el equilibrio:

$$C_{A_e} = \frac{(C_{R_0} + C_{A_0} \cdot X_{A_e}) \cdot k_2}{k_1} = \frac{(47 + 35 \cdot 0.719) \cdot 0.09}{0.2} = 32.4742 \text{ mol/m}^3$$

Concentración de R:

$$C_R = C_{R_0} + C_{A_0} \cdot X_{A_e} \left( 1 - \frac{1}{\exp\left(t \cdot k_1 \cdot \frac{\left(\frac{C_{R_0} + 1}{C_{A_0}}\right)}{\left(\frac{X_{A_e} + C_{R_0}}{C_{A_0}}\right)}\right)} \right) = 47 + 35 \cdot 0.719 \cdot \left( 1 - \frac{1}{\exp\left(5 \cdot 0.2 \cdot \frac{\left(\frac{47 + 1}{35}\right)}{\left(\frac{0.719 + 47}{35}\right)}\right)} \right)$$

$$C_R = 64.0867 \text{ mol/m}^3$$

Concentración de R en el equilibrio:

$$C_{R_e} = \frac{k_1 \cdot C_{A_o} \cdot (1 - X_{A_e})}{k_2} = \frac{0.1 * 35 * (1 - 0.719)}{0.09} = 21.8555 \text{ mol} / \text{m}^3$$

Volumen:

$$V = \frac{N_{A_o}}{t \cdot k_1} \cdot \left( \frac{\frac{C_{R_o}}{C_{A_o}} + X_{A_e}}{1 + \frac{C_{R_o}}{C_{A_o}}} \right) \cdot \text{Ln} \left( \frac{X_{A_e}}{X_{A_e} - X_{A_f}} \right) = \frac{7.21}{5 * 0.2} * \left( \frac{\frac{47}{35} + 0.719}{1 + \frac{47}{35}} \right) \cdot \text{Ln} \left( \frac{0.719}{0.719 - 0.488} \right)$$

$$V = 7.2049 \text{ m}^3$$

Conversión de A:

$$X_{A_f} = X_{A_e} \cdot \left( 1 - \left( \frac{C_{A_f} - C_{A_e}}{C_{A_o} - C_{A_e}} \right) \right) = 0.719 \cdot \left( 1 - \left( \frac{32.2850 - 32.4742}{35 - 32.4742} \right) \right) = 0.488$$

## 8. REFERENCIAS

- Blanco A.,J y Linarte L., R. (1978) “Diseño de reactores químicos”. México: Editorial Trillas.
- Felder R. y Rousseau R. (1999) « Principios Elementales de los Procesos Químicos”. (2ª ed.) México: Addison Wesley Iberoamericana.
- Levenspiel, Octave. (1995) “Ingeniería de las Reacciones Químicas” (2ª ed.) México: Editorial Revertè.
- Rose,L. (1981) “Chemical Reactor Design in Practice”. New York : Elsevier Science Publishing Company.
- Scott F., H (2001) “Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas”. (3ªed.) México: Prentice Hall.
- “Microsoft ® Visual Basic 6.0 Manual del Programador” (1998) Madrid: Mc Graw Hill.