

Modelación y análisis de sistemas en ingeniería química

*Heberto Tapias G., Luz Amparo Palacio S. **

Resumen

En el análisis de sistemas y problemas en ingeniería química es posible utilizar la modelación matemática como una forma de descripción simbólica de los sistemas reales que permite, a través de su manipulación, interactuar virtualmente con los sistemas reales para comprender su comportamiento y obtener información de una manera económica y expedita. En este artículo se describe una estrategia de modelación matemática de sistemas fisicoquímicos como una etapa crucial del procedimiento general del análisis en ingeniería química. Adicionalmente se presenta un ejemplo en el que se ilustra la aplicación de la guía de modelación en la formulación de un modelo para un vaporizador de un líquido puro.

----- *Palabras clave:* modelación matemática, sistemas reales, sistemas fisicoquímicos, ingeniería química.

Abstract

In the analysis of systems and problems in Chemical Engineering it is possible to use mathematical modeling as a form of symbolic description of the real systems that allows, through its manipulation, virtual interaction with the real systems, in order to understand their behavior and to obtain information in an economic and expedite way. In this article a strategy of mathematical modeling of physical chemical systems is described as a crucial stage of the general procedure for analysis in chemical engineering. Additionally an example is presented in which one that the application of the modeling guide is illustrated in the formulation of a model for a vaporizer of a pure liquid.

----- *Key words:* mathematical modeling, real systems, physicochemical systems, chemical engineering

* Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Antioquia.

Análisis en ingeniería química

En la solución de problemas y el desarrollo de sistemas de procesos químicos o bioquímicos, el ingeniero químico se ve enfrentado a tener que realizar algún tipo de análisis para la formulación de alternativas y selección de alguna propuesta de solución. Para llevar a cabo estos análisis es necesario que formule correctamente el problema u objeto de análisis y lo interprete con la ayuda de los conocimientos disponibles: leyes, principios, teorías, paradigmas, etc. Es decir, necesita identificar inequívocamente los fenómenos y procesos presentes en el sistema objeto de análisis, y utilizar las herramientas disponibles para generar la información requerida y aproximaciones a la solución de los problemas enfrentados.

En el análisis moderno de los sistemas y procesos objetos de estudio de la ingeniería química generalmente se incluye algún modelo matemático. Esa modelación es posible en aquellos sistemas y procesos en los que se conocen los fenómenos que intervienen y para los cuales se han elaborado teorías y relaciones matemáticas que los describen. Una descripción matemática precisa de estos sistemas, normalmente conduce a un conjunto de ecuaciones difíciles de manejar (algebraicas, diferenciales u otras); y aunque el modelo matemático pueda resolverse, en algunos casos es recomendable el uso de juicios ingenieriles y aproximaciones razonables para reducir el modelo matemático a uno menos complejo, que suministre una solución de ingeniería dentro de la seguridad que proporcionan los datos básicos. Pero incluso después de reducir la complejidad del modelo, la solución del problema matemático puede enfrentarse a la ausencia de técnicas analíticas para la manipulación del modelo, lo que conduciría a recurrir a transformaciones del sistema de ecuaciones con el fin de ajustarlo a las formas estandarizadas, o utilizar las técnicas numéricas como métodos de aproximación a la solución rigurosa [1].

El análisis significa buscar una comprensión profunda de un proceso o sistema, más que la simple realización de una simulación o la solución de

un modelo matemático para un conjunto particular de parámetros y valores de variables de entrada. El interés se enfoca en la comprensión de cómo se comportan las variables de estado del sistema como: presión, temperatura, composición, etc., en relación con los parámetros y variables de entrada del sistema que son controlables. Pero también, más que obtener con las simulaciones la comprensión de los tipos posibles de comportamiento, variando parámetros y condiciones de entrada, interesa ese conocimiento para decidir sobre qué valores de los parámetros y de las variables de entrada se deben usar para diseñar un sistema o para determinar los cambios que deben introducirse en los sistemas existentes para obtener un comportamiento deseado.

La investigación y desarrollo de procesos, el diseño de procesos, y el mejoramiento y optimización de operaciones y de procesos, son áreas que ofrecen campos fértiles para estudios analíticos en ingeniería química; y en cualquiera de ellas, los problemas objeto de análisis generalmente involucran fenómenos de transferencia de cantidad de movimiento, transferencia de calor, transferencia de masa y cinética química [1]. Particularmente en el desarrollo y diseño de procesos, la evaluación de las alternativas y la toma de decisiones se realizan en forma sistemática, mediante un proceso lógico secuencial que involucra tres grandes fases: la síntesis del proceso, el análisis del proceso y la optimización [2]. En la primera fase, la síntesis del proceso, se genera una propuesta de proceso, su diagrama de flujo y el tipo de operaciones unitarias que lo conforman. El análisis del proceso se basa en esta configuración y en los cálculos de balance de masa y energía, la selección del equipo, y el dimensionamiento y el costeo de ellos. Finalmente se lleva a cabo la optimización para la decisión óptima sobre las condiciones de operación del proceso y las especificaciones de los equipos.

El análisis es un proceso sistemático que incluye la descripción matemática del sistema, la manipulación del modelo matemático para determinar su comportamiento, la comparación de los resultados del modelo con la situación real, el

estudio cuidadoso de las limitaciones del modelo y el uso éste para los propósitos del análisis [3]. Este procedimiento puede organizarse como una secuencia lógica de las siguientes etapas generales [1]:

1. Definición del problema
2. Teoría
3. Modelo matemático
4. Algoritmo
5. Soluciones
6. Análisis de la solución.

La primera etapa es una de las más importantes porque es la que define el objetivo del análisis. Normalmente este objetivo está asociado a un requerimiento de información sobre el comportamiento del sistema para efectos de su diseño o control, solución de un problema o cualquiera otra decisión o recomendación de su operación.

Son muchos los objetivos posibles del análisis, los cuales pueden estar asociados a problemas como [4]:

- ¿Cuál puede ser la disminución de la demanda de un producto si se aumenta el precio?
- ¿Cómo distribuir las materias primas entre plantas y qué productos elaborar en cada una de ellas, si se tienen varias fuentes de materia prima y varias plantas y productos?
- ¿Qué proceso en particular debe usarse para producir un producto químico específico?
- ¿Qué tipo de equipo y qué tamaño es necesario para una operación unitaria?
- ¿Cuáles son las condiciones de operación que maximizan la producción de un producto?
- ¿Cómo deben manipularse las variables de control de un proceso o equipo para mantenerlo en las condiciones de operación deseadas?
- ¿Cuánto tiempo tomará, en un suelo contaminado, la biodegradación de un desecho peligroso?
- ¿Cuáles son los factores que controlan la distribución de productos y rendimiento en un reactor?

En la solución de cualquiera de esos problemas señalados es conveniente especificar cuál es la información que se requiere sobre el sistema y para qué se requiere esta información.

La segunda etapa es una definición o búsqueda de la teoría que explica el fenómeno o conjunto de fenómenos presentes en el sistema bajo análisis. Generalmente esta teoría existe, pero en caso contrario, la solución del problema requiere inicialmente de una investigación, en la que deben formularse hipótesis o postularse una teoría y constatar su validez mediante la comparación de resultados experimentales con una solución obtenida con un modelo matemático construido con base en esta teoría [1]. En el desarrollo de esta etapa se requiere de habilidad especial para identificar los fenómenos presentes en el sistema objeto de análisis y la forma como interactúan, para comprender el comportamiento global del sistema y poderlo expresar en términos matemáticos. Esta es la etapa crucial en el análisis en ingeniería química.

Una vez conocida la teoría, el problema se convierte en un problema matemático mediante la definición de variables y parámetros y la construcción de un modelo matemático compuesto por el conjunto de relaciones o ecuaciones entre parámetros y variables asociadas a características del sistema objeto de análisis.

Las variables pueden ser de entrada al modelo y de salida. Las de entrada son aquellas que deben ser normalmente especificadas antes de que pueda resolverse el modelo u operarse el proceso o sistema real. Estas variables generalmente incluyen tasas de flujo de corrientes de entrada o salida del proceso, composiciones, temperaturas y presiones de estas corrientes. Las variables de salida son las variables realmente desconocidas –variables dependientes y parámetros– cuyos valores se obtienen como soluciones del modelo matemático.

El algoritmo de solución o procedimiento de solución del problema matemático está constituido por el conjunto de etapas secuenciales de operación sobre el modelo para obtener los valores de las variables desconocidas. La ejecución de las operaciones específicas y detalladas en el algoritmo proporciona una solución del problema, la cual se puede obtener mediante técnicas analíticas, cuando existen estos procedimientos y los modelos no son muy extensos ni complejos, o con métodos numéricos para modelos extensos y complejos o para los cuales no existen las técnicas analíticas de solución. Ambos procedimientos se pueden desarrollar manualmente, pero hoy es posible generar la solución del problema matemático con el uso del computador como herramienta y con aplicaciones como MATLAB, POLYMATH o mediante la traducción del algoritmo en un programa utilizando un lenguaje específico de programación como FORTRAN, PASCAL, BASIC, C++ u otro. Aunque en algunos casos, por la simplicidad del modelo matemático, no es necesario el desarrollo de estas etapas, ya que una simple inspección del modelo y el sentido común permiten obtener una aproximación de la solución [1]. En otros casos, la solución se obtiene directamente, sin necesidad de la elaboración del modelo matemático, recurriendo a simuladores comerciales como: UNIOPT, CHEMCAD, SUPERPRO DESIGNER, etc.

Modelación de procesos y sistemas

El análisis teórico y la elaboración del modelo matemático constituyen el núcleo del análisis en ingeniería química. El modelo matemático como representación simbólica del sistema real permite, a través de su manipulación, interactuar virtualmente con el sistema real para comprender y predecir su comportamiento. Ellos no sólo se utilizan para el diseño, operación y control de procesos y equipos, sino que también se usan en el análisis de problemas y fallas, en la optimización de sistemas y equipos, y en el entrenamiento de personal de operación cuando se incorporan en simuladores.

Los modelos matemáticos permiten describir el comportamiento de los sistemas en estado estacionario o en su dinámica, y sólo aquellos sistemas que puedan ser analizados teóricamente y modelados matemáticamente son susceptibles de aproximaciones analíticas y racionales para obtener información de una manera expedita y económica. Esta es la ventaja y el poder del análisis en ingeniería química. Aquellos sistemas que no puedan ser objeto de estas aproximaciones deben estudiarse con modelos reales en el laboratorio o la planta piloto, ya sea para construir alguna teoría sobre su comportamiento o para obtener suficiente información experimental que permita simular su comportamiento con herramientas como las redes neuronales, que no requieren de una comprensión de los fenómenos o procesos que subyacen en el comportamiento de los sistemas reales.

Para el desarrollo del modelo matemático puede seguirse un procedimiento general constituido por las etapas secuenciales que se muestran en el diagrama de flujo de la figura 1 [1].

Representación esquemática

La representación esquemática del sistema en un modelo gráfico se usa para mostrar los elementos constitutivos del sistema real, su estructura, las interrelaciones de dichos elementos y las relaciones o conexiones del sistema con su entorno. En esta representación las corrientes de entrada y salida de masa y energía al sistema suelen representarse con flechas, acompañadas de los símbolos que identificarán estas corrientes y las correspondientes variables de caracterización de la corriente (presión, temperatura y composición). Cuando el sistema objeto de análisis es un proceso químico o bioquímico, el sistema se representa mediante diagramas de bloques, o diagramas de flujo de proceso con símbolos convencionales para los equipos. En el caso de equipos u otro tipo de sistema, la representación debe ser lo más ilustrativa posible de la configuración real del sistema.

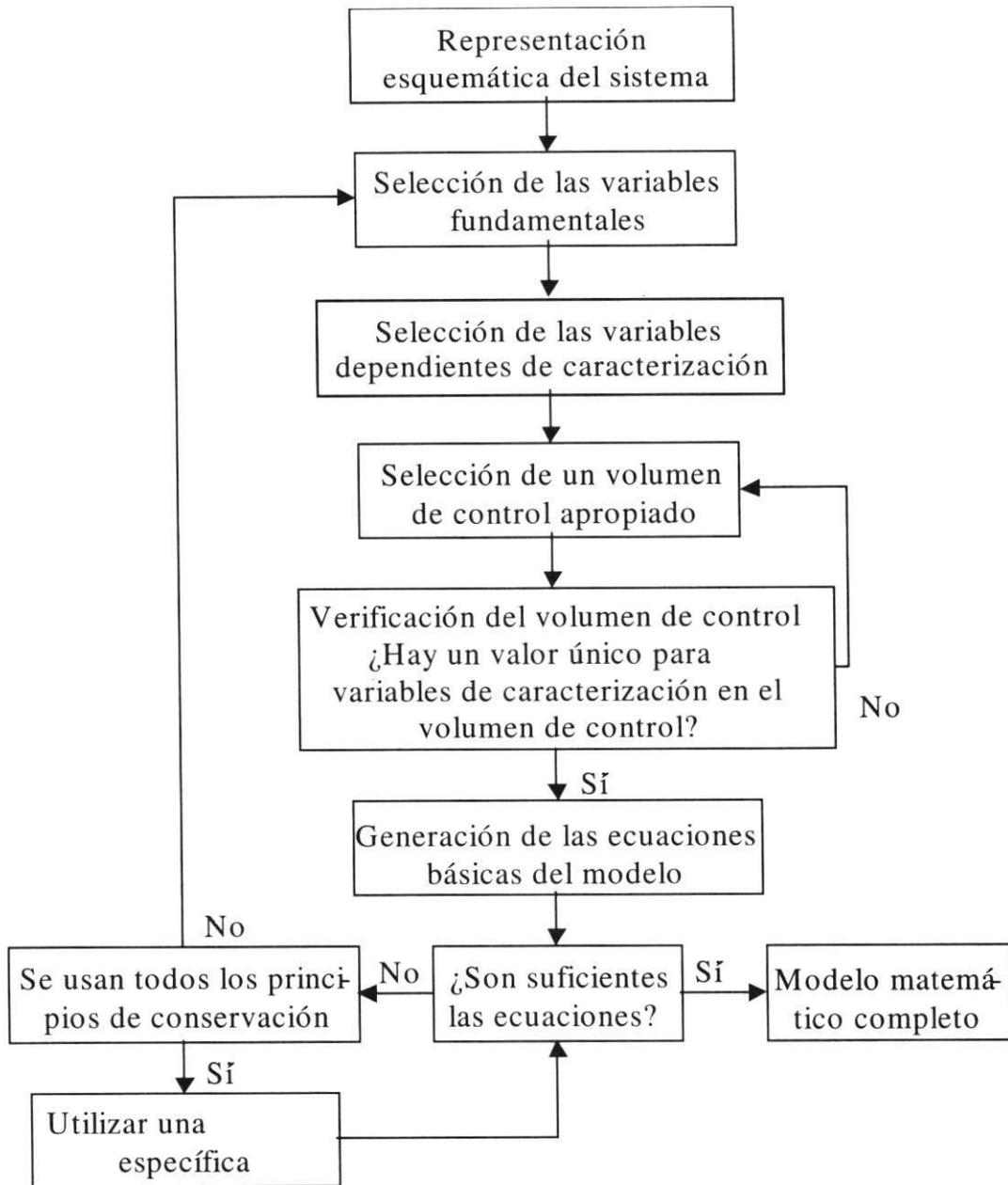


Figura 1 Etapas secuenciales para el desarrollo del modelo matemático

Variables fundamentales

Las variables fundamentales son los atributos más generales de la materia, que sufren cambios dentro del sistema, para los cuales existen principios de conservación [3]. Los sistemas objeto de estudio de la ingeniería química incluyen procesos en los que la materia sufre transformaciones fi-

sicas, químicas o bioquímicas para modificar su naturaleza, o contenido energético. Por tanto, los atributos que se usan como variables fundamentales para estos sistemas son la masa, la energía y la cantidad de movimiento, ya que los cambios de estas variables son los que informan sobre su comportamiento. Estos atributos generales per-

miten caracterizar los sistemas o informar sobre su estado y su trayectoria evolutiva en el comportamiento.

En un sistema en particular se utilizará una variable fundamental para su descripción matemática, si ese atributo o característica sufre cambio o transformación en los procesos que se presentan en el sistema, y si interesa conocer el comportamiento específico de esta variable o de una de sus variables características asociadas.

Variables características

Normalmente los valores de las variables fundamentales no se pueden medir o conocer directamente sino indirectamente a través de otras variables. Son estas otras variables las que aparecerán en las ecuaciones y relaciones que conformarán el modelo matemático. Las variables características son las que realmente pueden medirse y agruparse para determinar el valor de las variables fundamentales [3].

El valor de todas las variables características en cualquier momento y en cualquier punto del sistema determinan el estado del sistema, y por tanto, se les conoce también como variables de estado. La masa, la energía y la cantidad de movimiento pueden cuantificarse o caracterizarse con variables como: densidad, concentración, presión, temperatura, velocidad, etc. En la selección de las variables de caracterización, que se van a utilizar para la formulación del modelo, conviene especificar cuáles se usarán para cuantificar cada una de las variables fundamentales seleccionadas en la descripción matemática del sistema.

Volumen de control

El volumen de control es una región del sistema que se elige para hacer la cuantificación de las variables fundamentales mediante los principios de conservación para generar así las ecuaciones básicas del modelo.

El volumen de control apropiado *puede* ser todo el volumen del sistema, independientemente de las fases que lo integren y de los cambios de las va-

riables características con la posición. Estos macro volúmenes se usan normalmente para establecer relaciones entre las entradas y salidas del sistema en estado estacionario. El volumen de control apropiado puede ser también una parte del sistema, o el volumen de una fase o una región finita o infinitesimal de ella, cuando se requiere obtener más ecuaciones básicas del modelo.

Para efectos de la selección del volumen de control apropiado en una fase, es conveniente especificar cuál variable de caracterización —íntimamente asociada a cada variable fundamental— se va a usar para verificar si el volumen de control elegido es apropiado o no para efectos de la aplicación de los principios de conservación. Esta especificación se hace teniendo en cuenta que a cada variable fundamental está íntimamente ligada una variable o unas variables de caracterización. A la masa están íntimamente asociadas medidas de concentración como las fracciones molares o másicas, las concentraciones absolutas molares o másicas; a la energía, la temperatura, la presión, la velocidad; y a la cantidad de movimiento, la velocidad.

Un volumen de control apropiado en una fase puede elegirse por ensayo y error, cuando no se tiene experiencia en el proceso de modelación matemática. Se considera apropiado un volumen de control elegido, comprobando que efectivamente las variables características especificadas para esta verificación tengan, en un instante dado, el mismo valor en cualquier punto dentro del volumen de control. Cuando alguna de esas variables características no cumpla esta condición en el volumen de control, debe elegirse otro, hasta que se cumpla la condición de constancia en sus valores.

En la búsqueda de un volumen de control apropiado es conveniente iniciar con un volumen de control finito, el cual puede coincidir con el volumen total de la fase, continuar luego con volúmenes semifinitos, luego infinitesimales, y por último con un punto como opción final. Este procedimiento es aplicable en sistemas sólidos y fluidos en reposo o con flujo en régimen laminar. Un caso especial lo constituyen aquellos sistemas en los que se

presenta flujo turbulento. En estos sistemas no se pueden usar volúmenes infinitesimales, sino semifinitos a lo sumo, puesto de que no es posible conocer valores puntuales de las variables características, por las fluctuaciones que tienen con el tiempo, y la cuantificación de la masa, de la energía y de la cantidad de movimiento se realizan con valores promedios de las variables características asignados a regiones del sistema.

En la elección del volumen de control apropiado debe tenerse en cuenta también que las superficies de control del volumen sean normales a las líneas de flujo de las entidades que fluyen hacia o desde el volumen de control.

Son volúmenes de control apropiados, por ejemplo, el volumen de la masa reaccionante en un reactor de tanque agitado perfectamente mezclado; un disco de espesor diferencial y el mismo diámetro del reactor en un reactor tubular con flujo turbulento; y un anillo coaxial con el reactor, de espesor y altura infinitesimal, en un reactor tubular real con flujo laminar.

Ecuaciones básicas

Una vez se tenga un volumen de control apropiado se pueden escribir las ecuaciones básicas del modelo. Ellas son relaciones que involucran las variables características y parámetros con las variables independientes que denotan tiempo y posición espacial en el sistema.

Las ecuaciones básicas resultan de la aplicación de los principios de conservación de masa, conservación de energía y de conservación de cantidad de movimiento. Esta contabilidad podrá hacerse para todas las variables fundamentales que se usarán en la descripción del sistema y en todos los volúmenes de control que puedan elegirse. En principio, pueden elegirse tantos volúmenes de control como fases haya presentes en el sistema.

Relaciones específicas o constitutivas

Si las ecuaciones básicas no son suficientes para completar el modelo matemático, porque existen

más variables dependientes y parámetros desconocidos que ecuaciones, entonces se recurre a las relaciones específicas, o relaciones constitutivas para completar el modelo.

Las relaciones específicas o constitutivas son ecuaciones empíricas que relacionan variables características, o ecuaciones derivadas de teorías o leyes aplicables a los fenómenos que se presentan en el sistema.

Pueden tener una forma sugerida por una teoría, pero también tendrán parámetros experimentales. Se pueden obtener totalmente sobre bases teóricas, por ejemplo, aplicando las leyes de la conservación a nivel molecular y utilizando la mecánica cuántica y la estadística. O bien, obtenerse por una combinación lógica de cualquiera de los métodos anteriores [3].

Estas relaciones son específicas para los sistemas. Entre estas relaciones se tienen, por ejemplo, una ecuación de estado, relaciones termodinámicas, una ecuación que relaciona una propiedad como la conductividad térmica o la viscosidad con variables características como la concentración y la temperatura, una ecuación de tasa de reacción, o ecuaciones para la densidad de transferencia de masa, de transferencia de energía en forma de calor, o de transferencia de cantidad de movimiento.

Variables dependientes y parámetros

Para la cuantificación de las variables en el modelo matemático deben diferenciarse las variables independientes de las variables dependientes y de los parámetros del sistema. Para determinar si el modelo está completo, sólo se tiene en cuenta el número de variables dependientes y los parámetros que sean dependientes.

El tiempo y las variables que denotan posición en el espacio, constituyen las *variables independientes* del modelo. Los flujos de masa, de energía y de cantidad de movimiento, las medidas de concentración, las temperaturas, las presiones y las velocidades, son *variables dependientes*. Mientras que aquellas variables físicas o fisicoquímicas que informan sobre propiedades de la materia o características de las configuracio-

nes geométricas de los sistemas, son denominadas *parámetros* en el modelo matemático.

Algunos parámetros están predeterminados por la naturaleza química del sistema y por otras condiciones de los procesos como el régimen de flujo y la geometría. Son parámetros: las constantes de tasa de reacción, los coeficientes de transferencia de masa y calor, los factores de fricción, la conductividad térmica, la viscosidad, la difusividad, los calores de vaporización y otras propiedades fisicoquímicas. Unos son geométricos como una longitud, una área o un volumen y otros son parámetros empíricos que aparecen en relaciones específicas que describen el comportamiento de dispositivos, de componentes de los sistemas o equipos como los coeficientes de una válvula, la altura equivalente de plato teórico, la eficiencia de plato, la relación de reflujo mínimo o el número mínimo de etapas de separación.

Ilustración

Formule un modelo matemático para un vaporizador de un líquido puro.

Representación esquemática y condiciones de operación

En la figura 2 se ilustra un sistema vaporizador de forma cilíndrica. El calentamiento se hace con vapor de H₂O saturado a la presión P_s. El recipiente tiene volumen total V₀ y diámetro D.

Se asumirá que el líquido y el vapor se mantienen en equilibrio y que el calentamiento se hace esencialmente a través de la fase líquida

Variables dependientes fundamentales

Las variables fundamentales para la descripción del comportamiento del sistema son la masa y la energía en virtud de que se presentan fenómenos de transferencia de masa y de calor.

Especificación de las variables características

Para la masa las variables características son los flujos másicos, la densidad del líquido y la

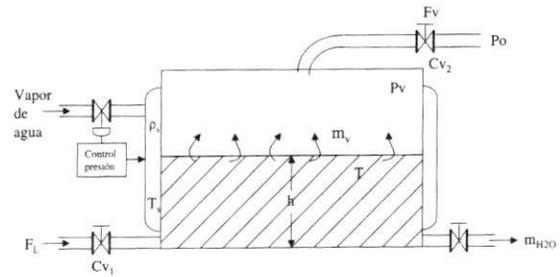


Figura 2 Vaporizador

Donde:

C_{V1} , C_{V2} : Coeficientes de las válvulas de entrada del líquido y de salida del vapor del líquido

F_L : Flujo másico de entrada del líquido

F_V : Flujo másico de salida de vapor

h : Altura del nivel del líquido

m_{H_2O} : Tasa de condensado en la chaqueta

m_v : Tasa másica de vaporización

P_o : Presión en la descarga del vapor

P_v : Presión en la fase de vapor

T : temperatura

T_s : Temperatura en la chaqueta

P_s : Presión en la chaqueta de calentamiento

densidad del vapor; y para la energía la presión y, la temperatura, el nivel del líquido.

Volúmenes de control

Los volúmenes de control apropiado son tres (tantos como fases haya presentes en el sistema): el volumen de la fase líquida, el volumen de la fase de vapor del líquido y el volumen del vapor en la chaqueta de calentamiento. En los tres volúmenes de control se cumple la constancia de las variables características, densidad y temperatura; solo la presión tiene variación en la fase líquida, pero se considerará despreciable esta variación para efectos de la selección del volumen de control.

Ecuaciones básicas del modelo

Aplicando los principios de conservación de masa y de energía en los tres volúmenes de control se obtienen las siguientes ecuaciones básicas.

- Conservación de masa

$$F_L = m_v + \frac{d}{dt} \left[\frac{\pi D^2}{4} h \rho_l \right] \quad \text{Fase líquida (1)}$$

Donde:

F_L : Flujo másico de entrada del líquido

m_v : Tasa másica de vaporización

h : Altura del nivel del líquido

D : Diámetro del tanque

$$m_v = F_v + \frac{d}{dt} [m_G] \quad \text{Fase gaseosa (2)}$$

Donde:

m_v : Tasa másica de vaporización

F_v : Flujo másico de salida de vapor

m_G : Masa de vapor en la fase gaseosa

- Conservación de energía

$$q + F_L H_{L_0} = m_v H_v + \frac{d}{dt} \left[\frac{\pi D^2}{4} h \rho_l H_L \right] \quad \text{Fase líquida (3)}$$

Donde:

F_L : Flujo másico de entrada del líquido

h : Altura del nivel del líquido

H_L : Entalpía del líquido en el recipiente a T

H_{L_0} : Entalpía del líquido de entrada a T_0

H_v : Entalpía del vapor del líquido a T

ρ_l : Densidad del del líquido a T

m_v : Tasa másica de vaporización

q : Tasa de transferencia de calor

D : Diámetro del tanque

$$q = m_{H_2O} \lambda_{H_2O} \quad \text{Chaqueta (4)}$$

Donde:

m_{H_2O} : Tasa de condensado en la chaqueta

λ_{H_2O} : Calor de vaporización del agua a T_s

q : Tasa de transferencia de calor

Ecuaciones específicas o constitutivas

Como existen doce variables dependientes en las ecuaciones básicas y solo cuatro ecuaciones, el modelo debe completarse con ecuaciones específicas para el sistema:

$$P_v V_G = \frac{m_G RT}{M} \quad (5)$$

Donde:

M : Peso molecular de la sustancia que se está vaporizando

m_G : Masa de vapor en la fase gaseosa

P_v : Presión en la fase de vapor

R : Constante de los gases

T : Temperatura

V_G : Volumen de la fase gaseosa

$$V_G = V_0 - \frac{\pi D^2}{4} h \quad (6)$$

Donde:

h : Altura del nivel del líquido

V_G : Volumen de la fase gaseosa

V_0 : Volumen total del recipiente

D : Diámetro del tanque

$$F_L = C_{v1} \sqrt{P_1 - P} \quad (7)$$

Donde:

C_{v1} : Coeficiente de la válvula de entrada del líquido

F_L : Flujo másico de entrada del líquido

P : Presión en el fondo del tanque

P_1 : Presión del líquido de alimentación

$$F_v = C_{v2} \sqrt{P_v - P_0} \quad (8)$$

Donde:

C_{v2} : Coeficientes de la válvula de salida del vapor del líquido

F_v : Flujo másico de salida de vapor

P_0 : Presión en la descarga del vapor

P_v : Presión en la fase de vapor

$$P = P_v + \rho_l gh \quad (9)$$

Donde:

h : Altura del nivel del líquido

P : Presión en el fondo del tanque

ρ_l : Densidad del líquido a T

P_v : Presión en la fase de vapor

g : Constante gravitacional

$$H_L = C_{pL} (T - T_0) \quad (10)$$

Donde:

C_{pL} : Capacidad calórica del líquido

H_L : Entalpía del líquido en el recipiente a T

T : Temperatura

T_0 : Temperatura de referencia

$$H_v = C_{pL} (T - T_0) + \lambda_v \quad (11)$$

Donde:

C_{pL} : Capacidad calórica del líquido

H_v : Entalpía del vapor del líquido a T

T : Temperatura

T_0 : Temperatura de referencia

λ_v : Calor de vaporización del líquido a T

$$q = UA_T (T_s - T) \quad (12)$$

Donde:

A_T : Área de transferencia de calor

q : Tasa de transferencia de calor

U : Coeficiente de transferencia de calor

T : Temperatura

T_s : Temperatura en la chaqueta

$$A_T = \pi Dh \quad (13)$$

Donde:

A_T : Área de transferencia de calor

h : Altura del nivel del líquido

D : Diámetro del tanque

$$\ln P_s = A_0 - \frac{B_0}{T_s + C_0} \quad (14)$$

Donde:

A_0, B_0, C_0 : Parámetros de la ecuación de Antoine

P_s : Presión en la chaqueta de calentamiento

T_s : Temperatura en la chaqueta

$$\ln P_v = A - \frac{B}{T + C} \quad (15)$$

Donde:

A, B, C : Parámetros de la ecuación de Antoine

P_v : Presión en la fase de vapor

T : Temperatura

$$H_{L_0} = C_{pL_0} (T_1 - T_0) \quad (16)$$

Donde:

C_{pL_0} : Capacidad calórica del líquido alimentado

H_{L_0} : Entalpía del líquido de entrada a T_0

T_0 : Temperatura de referencia

T_1 : Temperatura del líquido de alimentación

$$C_{pL} = a + bT \quad (17)$$

Donde:

a, b : Parámetros de la ecuación para cálculo de la capacidad calórica

C_{pL} : Capacidad calórica del líquido a T

T : Temperatura

$$C_{p_v} = a_0 + b_0 T + c_0 T^2 \quad (18)$$

Donde:

a_0, b_0, c_0 : Parámetros de la ecuación para cálculo de la capacidad calórica

C_{p_v} : Capacidad calórica del vapor del líquido

T : Temperatura

$$C_{p_{L_0}} = a + bT_0 \quad (19)$$

Donde:

a, b : Parámetros de la ecuación para cálculo de la capacidad calórica

$C_{p_{L_0}}$: Capacidad calórica del líquido alimentado

T_0 : Temperatura de referencia

$$\lambda_v = k \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{0.38} \quad (20)$$

Donde:

T_c : Temperatura crítica del líquido

k : Parámetro en la ecuación para el estimado del calor de vaporización del líquido

λ_v : Calor de vaporización del líquido a T

T : Temperatura

$$\lambda_{H_2O} = k_{H_2O} \left(1 - \frac{T_s}{T_{c_{H_2O}}} \right)^{0.38} \quad (21)$$

Donde:

$T_{c_{H_2O}}$: Temperatura crítica del agua

k_{H_2O} : Parámetro en la ecuación para el estimado del calor de vaporización del agua.

λ_{H_2O} : Calor de vaporización del agua a T_s

T_s : Temperatura en la chaqueta

Conclusiones

La modelación matemática constituye una herramienta poderosa para el análisis, investigación, desarrollo, simulación, diseño, operación y control de los sistemas objeto de estudio de la ingeniería química. Ellos permiten describir el comportamiento de los sistemas en estado estacionario o en su dinámica, y generar aproximaciones ana-

líticas y racionales para obtener información de una manera expedita y económica.

La formulación de un modelo matemático de un sistema fisicoquímico se logra mediante un proceso sistemático que invariablemente requiere de un pleno conocimiento de los fenómenos presentes en el sistema y de una teoría que permita traducir el comportamiento del sistema en un conjunto de ecuaciones utilizando principios de conservación y relaciones específicas o constitutivas.

No existe modelo único para un sistema, sino modelos más completos o más predictivos, dependiendo de qué tan precisa sea la descripción o qué aproximaciones, teorías o datos hayan sido utilizados en su construcción. La utilización de uno u otro modelo dependerá de los objetivos del modelo, la disponibilidad de información y de herramientas para su manipulación y solución.

Referencias

1. Franks, R. *Modeling and simulation in Chemical Engineering*. John Wiley & Sons. New York, 1972.
2. Husain, A. *Chemical process simulation*. John Wiley & Sons. New York, 1986.
3. Russell, T.W., Denn, M.M. *Introducción al análisis en ingeniería química*. Editorial Limusa. México, 1976.
4. Bequette, B. W. *Process dynamics: modeling, analysis and simulation*. Prentice Hall. New Jersey, 1998.