

VERSIÓN ESTUDIANTE
**Aplicaciones biomedicas y químicas de ecuaciones
diferenciales**

Eric Stachura
Department of Mathematics
Kennesaw State University
Marietta, GA USA

Tamara Lozano
Yokogawa Corporation
Newnan, GA USA

LA PROBLEMA

Un *catalizador* es un material capaz de acelerar una reacción química sin ser consumido durante el proceso de reacción. Los catalizadores a menudo consisten en un material poroso con un área de superficie alta, en el cual las partículas de un metal precioso se han dispersado. Las partículas catalíticas a menudo se denominan gránulos. Alrededor de cada gránulo, hay una película fina de gas que contiene una mezcla de reactivos y productos; ver Figura 1 y Figure 2 para una versión 2D.

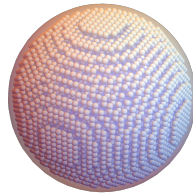


Fig. 1. Gránulo de catalizador con una fina película de gas que lo rodea.

Primero, ¿qué significa ser poroso? Intuitivamente, dicho medio tiene “poros”, o vacíos, que generalmente se llenan con un fluido. Los ejemplos incluyen esponjas, rocas, tierra, tejidos biológicas, etc. Puedes imaginar algo como en Figura 3.

de ser transferido a través de la película de gas. De manera similar, después de que la reacción tiene lugar y se forma el producto, ese producto debe transferirse del metal de regreso a la superficie del gránulo a través del poro, y luego salir al medio de reacción a través de la película de gas. Ver Figura 5.

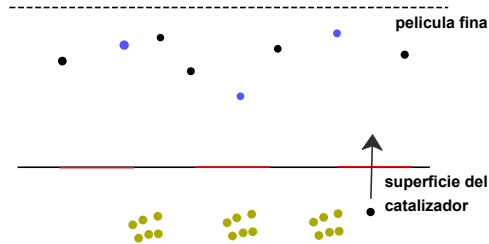


Fig. 5. Los productos deben transferirse de nuevo a la superficie a través del poro.

Un problema importante en la ingeniería química es predecir la difusión y reacción en un gránulo de catalizador poroso. El objetivo es predecir la velocidad de reacción global en la superficie del gránulo de catalizador [1].

La conservación de la masa es un principio científico que establece que en una reacción química, la materia no se puede crear ni destruir. Esto se puede expresar matemáticamente por c , la concentración de un producto químico dado, en un gránulo esférica con radio r_p por la siguiente ecuación diferencial de segundo orden:

$$D \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dc}{dr} \right) \right) = kR(c), \quad 0 < r < r_p \quad (1)$$

donde:

- D es la constante de difusividad, en unidades de cm^2/s ;
- k es la tasa constante;
- $R(c)$ es la función de velocidad de reacción (podría ser no lineal), en unidades de moles por volumen por tiempo ($mol/L/s$)

Las condiciones de contorno son

$$\frac{dc}{dr} = 0 \quad \text{a} \quad r = 0$$

y

$$c = c_0 \quad \text{a} \quad r = r_p \quad (\text{la concentración se fija en la superficie})$$

Tenga en cuenta que las unidades de k realmente dependen del orden de la reacción. Por ejemplo, en una reacción de primer orden, las unidades de k son $1/s$.

Ejercicio 1.

Definir el *factor de efectividad* E : la velocidad de reacción promedio en el gránulo dividida por la velocidad de reacción promedio en la superficie:

$$E := \frac{\int_0^{r_p} R(c(r))r^2 dr}{\int_0^{r_p} R(c_0)r^2 dr}.$$

Integre (1) para obtener una expresión para E en términos de r_p , D , $\frac{dc}{dr}$, k y $R(c_0)$.

Ejercicio 2.

Interpretar el significado de $E = 1$ y $E < 1$, y lo que esto significa en términos de la velocidad de reacción en el granulo.

Una reacción química catalítica muy útil es la deshidrogenación del ciclohexano. Ver Figura 6 para la estructura de Lewis del ciclohexano (¿recuerda su clase de química?). Este proceso industrial requiere el uso de γ -alúmina, un gránulo de catalizador poroso con forma esférica. En esta esfera, que tiene diámetro 5 mm, se han dispersado partículas de platino (un metal precioso y muy caro) para catalizar la reacción química. on.

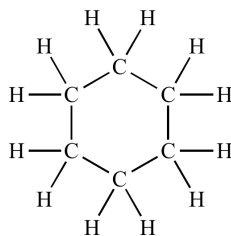


Fig. 6. Estructura Lewis de ciclohexano C_6H_{12} .

Como su nombre indica, la deshidrogenación implica la eliminación de átomos de hidrógeno, un proceso que generalmente requiere altas temperaturas. El catalizador γ -alúmina es una opción popular de catalizador para esta reacción debido a sus propiedades químicas, que lo hacen resistente a las condiciones de reacción extremas. La figura 7 proporciona una descripción de este proceso de reacción química. Es un proceso de 3 etapas, y en cada etapa se libera una molécula de hidrógeno.

Supongamos que a 700 K, la constante de velocidad para esta reacción es $k = 4 \text{ s}^{-1}$ y la difusividad $D = 5 \times 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$. **Su objetivo es calcular el perfil de concentración de ciclohexano dentro del sedimento, así como el factor de efectividad.**

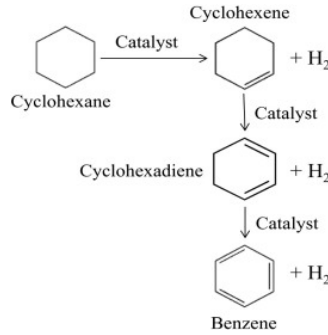


Fig. 7. Proceso de deshidrogenación.

La cantidad de interés a calcular es el perfil de concentración de ciclohexano, que definimos como

$$C := \frac{\text{concentración de ciclohexano dentro del gránulo}}{\text{concentración de ciclohexano en la superficie del gránulo}}$$

La conservación de masa del ciclohexano proporciona el siguiente modelo (consulte [4, Capítulo 12] para obtener una derivación completa):

$$\frac{d^2C}{dR^2} + \frac{2}{R} \frac{dC}{dR} = \Phi^2 \frac{R(c)}{c_0}, \quad 0 < R < 1 \quad (2)$$

donde R es la coordenada radial reescalada, es decir $R = r/r_p$. La constante Φ se llama *Thiele modulus* y viene dada por

$$\Phi = r_p \sqrt{\frac{k}{D}}.$$

Esta cantidad fue introducida por E. W. Thiele en [5], y llegó a describir la relación entre las velocidades de difusión y reacción en gránulos de catalizador porosos.

Las condiciones de contorno son similares a las indicadas anteriormente, excepto que se ajustan adecuadamente:

$$\frac{dC}{dR} = 0 \quad \text{at} \quad R = 0$$

y

$$C = 1 \quad \text{at} \quad R = 1 \quad (\text{esto es por definición, tomamos } c_0 = 1)$$

Ejercicio 3.

Supongamos que $R(c) = kc$. Use las condiciones de contorno para resolver y proporcionar una solución explícita de (2). HINT: Primero, haz la sustitución $z = CR$ y resolver la ecuación satisfecha por z .

Ejercicio 4.

Usa tu respuesta de la pregunta anterior, escribe E solo en términos de Φ . Mira Ejercicio 1.

Ejercicio 5.

Analiza el límite $\lim_{R \rightarrow 0} C(R)$. Interprete el límite en términos de la reacción en el centro del gránulo. Con el valor de E que calculó en la última pregunta, ¿qué puede decir sobre la velocidad de reacción promedio en el gránulo?

Ejercicio 6.

Supongamos que tiene una velocidad de reacción no lineal ahora, de modo que $R(c) = kc^2$. ¿Cómo podría calcular el perfil de concentración de ciclohexano y calcular el factor de efectividad en este caso?

Ejercicio 7.

Explore el Catalyst Analysis módulo, adaptado de [3]. Verá la relación entre la concentración del reactivo dentro del gránulo y el radio del gránulo. ¿Qué sucede a medida que disminuye el radio del gránulo? ¿Qué sucede si disminuye la tasa constante? ¿Por qué crees que es?

BIBLIOGRAFÍA

- [1] M. E. Davis, *Numerical Methods and modeling for chemical engineers*. Mineola, New York: Courier Corporation, 2013.
- [2] J. J. Carberry, *Chemical and catalytic reaction engineering*. Mineola, New York: Courier Corporation, 2001.
- [3] R. L. Baumann, *Diffusion and Reaction in a Catalyst Pellet*. Wolfram Demonstrations Project, <http://demonstrations.wolfram.com/DiffusionAndReactionInACatalystPellet/>. Published October 31, 2017.
- [4] H. Scott Fogler, *Elements of Chemical Reaction Engineering*. Westford, Massachusetts: Pearson Education, 2010.
- [5] E. W. Thiele, *Relation between catalytic activity and size of particle*. *Industrial and Engineering Chemistry*, 31, 916–920, 1939.