

## **SIMULACIÓN FLUIDODINÁMICA DE REACCIONES COMPLEJAS**

*M. R. Sad, S. R. de Miguel y A. A. Castro*

Departamento de Ingeniería de las Reacciones Químicas  
Facultad de Ingeniería Química - Universidad Nacional del Litoral  
Santiago del Estero 2654 - 3000 Santa Fe – Argentina

### **RESUMEN**

El estudio de sistemas reaccionantes complejos (reacciones en serie, paralelo y combinaciones de las mismas) brinda al alumno que estudia el análisis y diseño de reactores químicos la posibilidad de integrar y reafirmar conocimientos previamente adquiridos acerca de la cinética de las reacciones químicas y del modelado de reactores a través del análisis de sistemas complejos.

Los símiles hidráulicos de reacciones químicas permiten estudiar el comportamiento de distintas reacciones complejas (en serie, paralelo o combinación de las mismas) a nivel de laboratorio, utilizando elementos simples tales como buretas y tubos capilares. Mediante estas experiencias prácticas de sencilla realización el alumno puede no sólo verificar cualitativamente los principales aspectos de los sistemas reaccionantes complejos (presencia de máximos en concentraciones de intermediarios, interrelación entre cinética y equilibrio, estequiometría, etc.), sino que los datos obtenidos pueden ser sujetos a tratamientos (correlación y discriminación de modelos) similares a los utilizados en la interpretación de datos cinéticos de reacciones reales.

El principio fluidodinámico en que se basa la simulación es el de la descarga de un líquido contenido en un recipiente a través de un tubo capilar horizontal en régimen laminar (flujo Poiseuille). La ecuación básica que describe la variación de la altura del nivel del líquido es matemáticamente equivalente a la correspondiente a la variación de la concentración con el tiempo para una reacción irreversible de primer orden y por lo tanto la altura del líquido en el recipiente evoluciona temporalmente de idéntica forma a la concentración de reactivo para este tipo de ley cinética, siendo la inversa de la resistencia al flujo del capilar equivalente a la constante cinética  $k$ .

La analogía entre el fenómeno de descarga capilar y la cinética química puede extenderse aún más. Utilizando recipientes de sección variable pueden simularse reacciones de órdenes distintos de 1. También pueden simularse reacciones reversibles interconectando mediante capilares recipientes ubicados a una altura relativa similar. También, y teniendo en cuenta la proporcionalidad inversa de la constante  $\kappa$  con la sección del recipiente, pueden simularse reacciones en las cuales los coeficientes estequiométricos no son iguales.

Mediante este sencillo principio pueden simularse entonces sistemas complejos de reacción mediante una adecuada disposición de recipientes y tubos capilares. En este trabajo se discute exhaustivamente los alcances y limitaciones de la analogía física empleada, así como la posibilidad de utilizar otros fenómenos físicos para la simulación de reacciones complejas. También se describe la implementación práctica de las técnicas descritas y los resultados obtenidos.