

# DISEÑO OPTIMO DE REACTORES BIOQUIMICOS MEDIANTE EL METRO GRAFICO DIRECTO

Dr. Jorge Medina Valtierra

## RESUMEN

En este escrito, el método gráfico directo para el diseño de reactores químicos, fue adaptado para la optimización de reactores bioquímicos a partir de datos cinéticos, concentración-tiempo. Este método puede ser usado para comparar sistemas de reactores en serie, donde se demuestre sus ventajas con respecto al análisis matemático y otros métodos gráficos haciendo énfasis en su aplicación pedagógica.

## INTRODUCCION

La utilidad de los métodos gráficos ha sido probada en el diseño de reactores químicos de flujo continuo<sup>1-3</sup>, así mismo se han mostrado las ventajas que tienen sobre el análisis matemático. Un método indirecto es propuesto por Levenspiel<sup>1</sup>, donde hace énfasis en la optimización de algunos tipos de reactores o disposición de ellos. Recientemente, Lobo<sup>3</sup> propuso un método gráfico directo para el diseño de reactores ideales, su combinación y/o comparación de ellos, empleando datos cinéticos de concentración vs. tiempo, pero sin llegar a establecer un método de optimización.

El funcionamiento de un reactor bioquímico es análogo a un reactor químico homogéneo. Además el uso de flujo continuo en aquél, es una alternativa comercial muy atractiva, ya que la introducción continua de enzima fresca al sistema compensa la pérdida de actividad por el envejecimiento de esta especie bioquímica<sup>4</sup>.

En el presente escrito, se ejecuta el método gráfico directo para el diseño óptimo de reactores bioquímicos ideales, donde se hace uso de datos cinéticos concentración-tiempo obtenidos de una manera sencilla.

## ANALISIS TEORICO

Una de las características importantes de un reactor por lotes o tipo batch es la facilidad para evaluar la cinética de una reacción química o bioquímica, ya que, los datos concentración-tiempo son determinados de una manera directa y rápida. El equipo que compone el sistema de reacción para la obtención de los datos cinéticos puede ser

tan sencillo como un matraz de vidrio con mezcla líquida agitada.

Los datos que se generan son presentados como una dependencia de la concentración (C) con respecto al tiempo (t) obteniéndose en la mayoría de los casos curvas simétricas. En la figura 1 se muestra la curva cinética característica de algunas reacciones químicas, obtenida en un reactor discontinuo. Es sabido que la velocidad de la reacción depende de la concentración del reactivo y esta velocidad es una variable que cambia a lo largo de la curva cinética de tal manera que en cualquier punto de la curva, la velocidad de la reacción (-R) está dada por:

$$\frac{dC}{dt} = \tan \theta$$

Es decir, la pendiente de la curva es un punto (C,t) determina la velocidad de la reacción en ese momento.

## PROCEDIMIENTO

Tanto las reacciones enzimáticas como las fermentaciones de sustancias debido a la acción de microorganismos, presentan curvas cinéticas semejantes a la curva de trazo grueso en la figura (2). Este tipo de curvas están caracterizadas por un periodo de inducción donde se tienen velocidades bajas, este lapso es seguido de una curva monotónica. La curva total presenta un punto de inflexión donde la velocidad es máxima.

## REACTORES BIOQUIMICOS CON DIFERENTE GRADO DE CONVERSION

El método para determinar el volumen de un reactor tipo tanque agitado usando el método gráfico directo fue propuesto por Lobo<sup>3</sup>. En este caso, el volumen depende del nivel de conversión propuesto y se puede hacer una selección en base a los resultados con diferentes conversiones, sin embargo no es posible optimizar el uso de un solo reactor. El método es mostrado en la figura (2), donde se proponen tres diferentes concentraciones finales  $C_1$ ,  $C_2$  y  $C_3$ , y se evalúa la pendiente a cada conversión propuesta. Se traza una línea paralela desde  $C_0$ , hasta la intersección con la línea que marca el valor de la concentración  $C_1$ , se determina así el tiempo espacial para el reactor  $t_1$ ,  $t_2$ , o  $t_3$ , cuyo valor

determina la relación entre el volumen del reactor  $V_r$ , y el flujo volumétrico total  $F_v$ .

Este método se demuestra usando la ecuación de diseño para este tipo de reactores. Por ejemplo para la conversión señalada como  $C_3$ , la expresión que relaciona la velocidad y el tiempo espacial es:

$$R = \frac{C_3 - C_0}{t} = \tan C$$

El traslado de la pendiente del punto A hasta el punto B se realiza para involucrar en el diseño, la transformación del reactivo desde su concentración inicial hasta su concentración final.

### DOS REACTORES EN SERIE

La figura 3 muestra el diseño gráfico para encontrar el volumen mínimo de dos reactores en serie, con concentraciones intermedia  $Ca_1$ , y final  $Ca_2$ . Se traza la pendiente en el punto A que corresponde a la intersección de  $Ca_1$  con la curva cinética; la línea paralela de la pendiente desde  $Ca_0$ , da el punto A y consecuentemente  $t_1$  en el primer reactor. Este procedimiento se repite para el valor de  $Ca_2$  que corresponde al segundo reactor. En este caso la línea paralela a la pendiente en B se traza desde A', (punto que denota las condiciones de salida del primer reactor). La línea de diseño para el reactor 2, A' - B' da  $t_2$ . Sin embargo, en la optimización de este sistema, se debe cumplir un requisito muy importante: Cuando se establece la conversión final  $Ca_2$ , se debe seleccionar un valor  $Ca_1$ , de tal manera que la línea que une los puntos A y B debe ser paralela a la línea que une  $Ca_0$  con B'.

### TRES REACTORES EN SERIE

El procedimiento de optimización para este sistema es similar al anterior, ya que se establece una concentración final que corresponde a la salida del tercer reactor  $Ca_3$ , y se seleccionan las concentraciones intermedias  $Ca_1$  y  $Ca_2$  de tal manera que la línea que une los puntos A y C en la figura 4, debe ser paralela a la línea que une  $Ca_0$  y C'; esta última línea es dependiente de los ángulos resultantes en las líneas de diseño para los tres reactores.

### n REACTORES EN SERIE

El análisis gráfico para n reactores es el mismo, sin embargo para un número de reactores mayor que tres, la diferencia en el valor de volumen total puede no ser muy notable como para justificar la compra de accesorios para equipar un cuarto reactor u otros reactores adicionales.

### EJEMPLO

Determinar el volumen total de reactor que sea mínimo para degradar una sustancia A presente en un agua residual. La transformación de esta sustancia indeseable en especies químicas no dañinas se realiza en presencia de una enzima apropiada que actúa como catalizador homogéneo.

A 30° C y una concentración dada de la enzima la degradación procede según los siguientes datos cinéticos:

$Ca$   $\mu$ mol/l 10 9.2 8.0 6.8 6.0 5.0 4.0 2.0 1.0

t, min 0 6.9 13.7 16.7 18.3 19.2 20.1 22.9 25.6

Datos Adicionales:

Flujo volumétrico,  $F_v = 10$  l/min que contiene la enzima y la sustancia A.

Concentración inicial de A,  $Ca_0 = 10$   $\mu$ mol/l

Conversión final de A,  $X_{af} = 90\%$ .

Solución:

Según los criterios manejados en el diseño gráfico, un mayor número de reactores determinan un menor volumen total. Sin embargo en este caso y con fines prácticos, se selecciona una batería de tres reactores en serie.

Según la gráfica del método directo:

$t_1 = 5$  min  
 $t_2 = 3.5$  min.  
 $t_3 = 5.5$  min.  
 y si  $t = V_r / F_v$   
 $V_{r1} = 50$  l  
 $V_{r2} = 35$  l  
 $V_{r3} = 55$  l

entonces; el volumen total es:  $V_t = 140$  l

Comprobación:

Según el método dado por O. Levenspiel<sup>6</sup>, se requiere encontrar los valores de  $-RA$  a lo largo de la curva cinética y graficar  $-1/Ra$  contra  $X_a$ .

De la gráfica que muestra este método indirecto se obtiene:

$t_1 = 4.8$  min  
 $t_2 = 3.7$  min.  
 $t_3 = 5.1$  min.  
 y así se determina que:  
 $V_1 = 48$  l  
 $V_2 = 37$  l  
 $V_3 = 51.1$  l  
 $V_t = 136$  l

Los resultados difieren por los errores inherentes en la graficación y además los datos usados en la curva del método indirecto no son exactamente los mismos que los datos del método directo.

NOTA 1: Para dos reactores en serie los resultados con el método directo son:

$V_1 = 54$  l y  $V_2 = 105$  l  
 $V_t = 159$  l

NOTA 2: Para un solo reactor se requiere un volumen total,  $V_t = 312 \text{ l}$ ; lo que significa que usar dos o más reactores en serie en lugar de uno solo, se justifica plenamente debido a la notablemente disminución del volumen total.

### COMENTARIOS

Este método, aunque es aproximado es muy útil en el diseño de reactores piloto y en el diseño preliminar de reactores comerciales. Su aplicación muestra una clara ventaja cuando se tienen los datos cinéticos de la reacción involucrada, ya que los métodos gráficos usados en los libros de texto están basados en la graficación de  $1/Ra$  vs.  $C^{1-3}$ , o  $Ra$  vs.  $X^7$ , donde es necesario calcular las velocidades de reacción o evaluar previamente la cinética de la reacción. Otra ventaja de este método es el aspecto pedagógico que presenta, puesto en evidencia en los ejemplos discutidos anteriormente, ya que a pesar de los errores inherentes al graficar las pendientes en los puntos seleccionados en la curva experimental, se evita el manejo de cinéticas complejas o la definición de modelos cinéticos desconocidos.

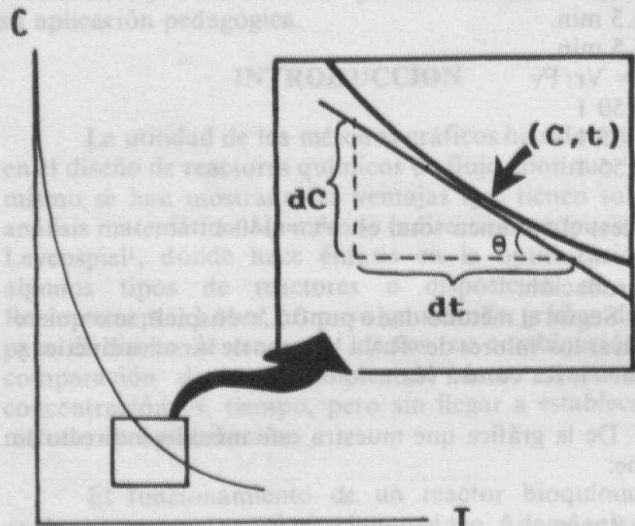


FIG. 1. CURVA CARACTERISTICA CONCENTRACION-TIEMPO DE ALGUNAS REACCIONES QUIMICAS.

### REFERENCIAS

1. O. Levenspiel, "Ingeniería de las reacciones químicas", Ed. Reverté Barcelona (1978).
2. C.G. Hill, "An Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reaction Design", John Wiley & Sons, New York (1977).
3. L.S. Lobo, The Can. J. Chem. Eng. vol. 68, 694-696 (1990).
4. J.Y. Lee, A. Velayudhan y M.R. Ladisch, The Chem. Eng. J. 45, B1-B4 (1990).
5. C. LaMarca, C. Libanati y M.T. Klein, Chem. Eng. Science, vol. 45, No. 8, 2059-2065 (1990).
6. O. Levenspiel, "The Chemical Reactor Omnibook", Oregon State University (1978).
7. R.W. Jones, Chem. Eng. Prog. 47, No. 1, 46-48 (1951).

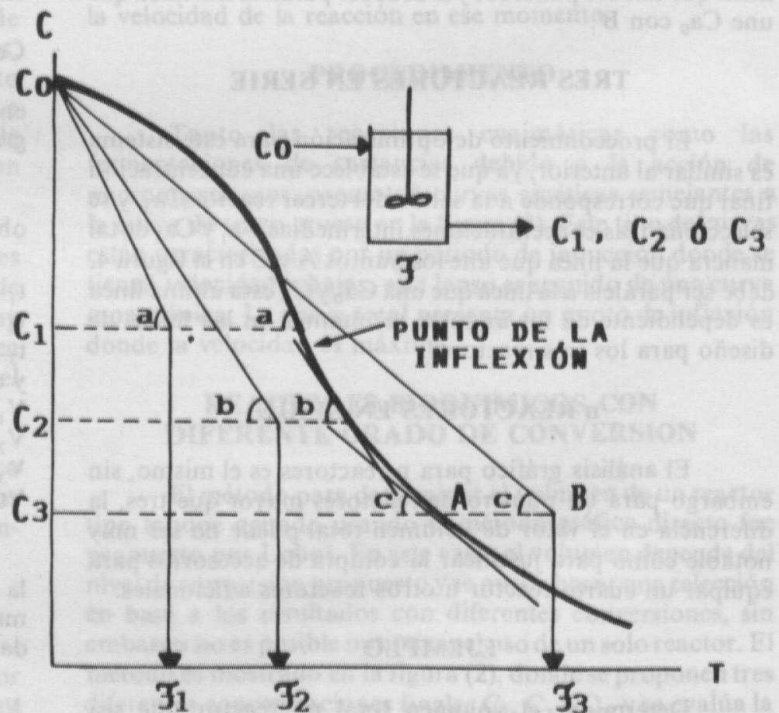


FIG. 2. METODO GRAFICO DIRECTO PARA EL DISEÑO DE REACTORES BIOQUIMICOS IDEALES.

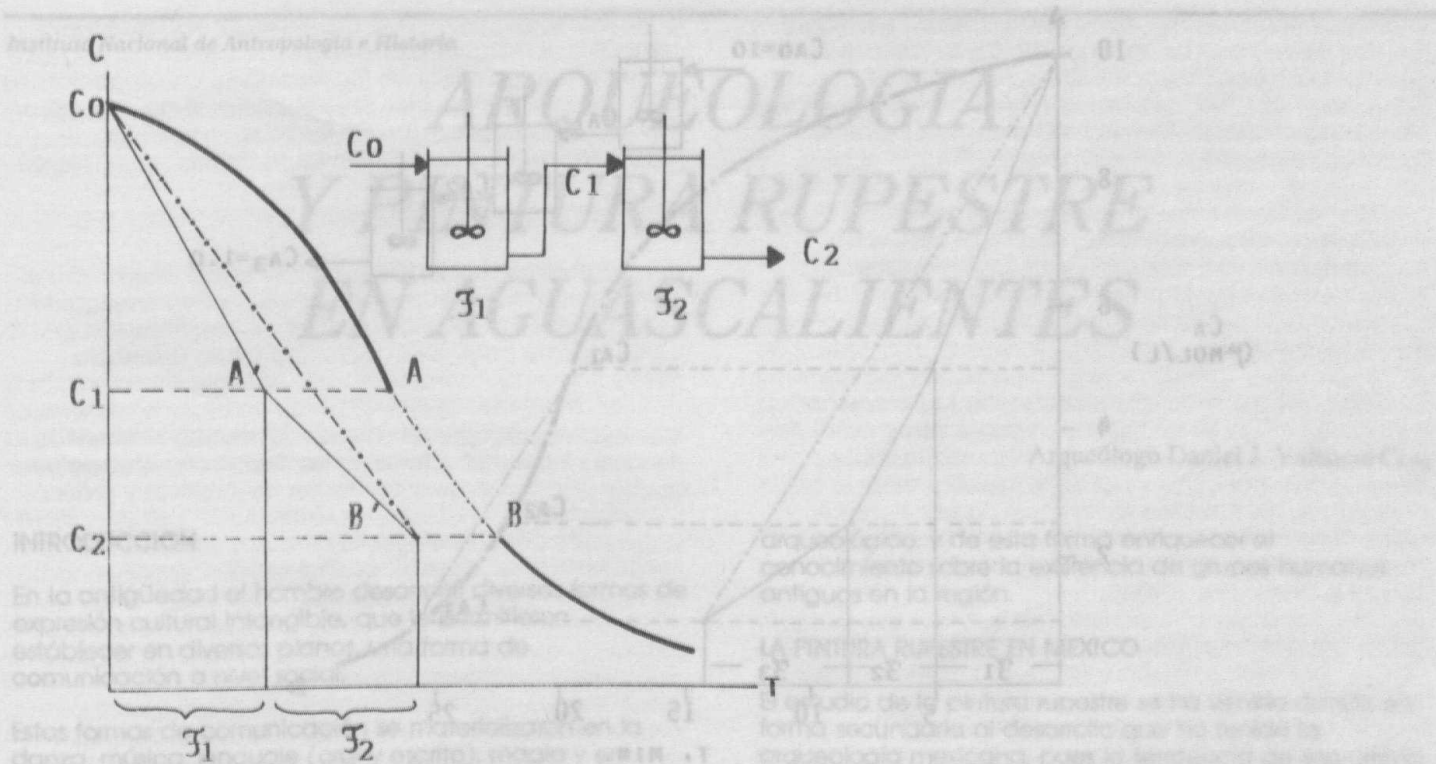


FIG. 3. OPTIMIZACION DE DOS REACTORES EN SERIE.

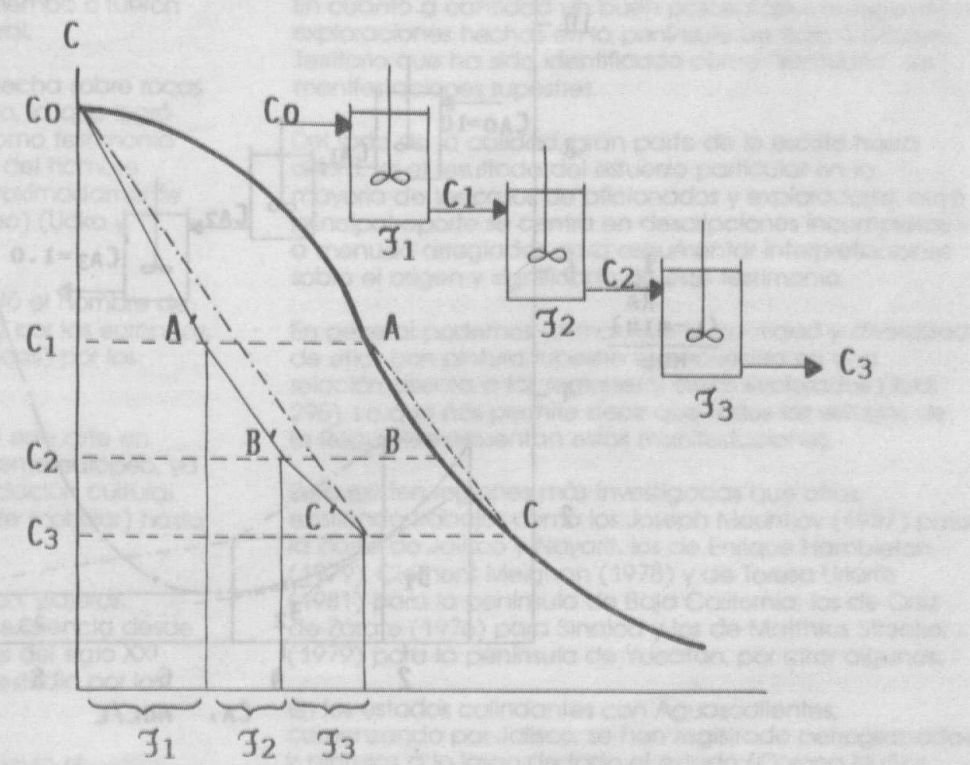


FIG. 4. OPTIMIZACION DE TRES REACTORES EN SERIE.

NOTA 2: Para un solo reactor se puede usar un volumen  $V_1 = 312$  l; lo que significa que si se usan dos o más reactores en serie en lugar de uno solo, se justifica plenamente el uso de la notablemente disminuida del volumen total.

Este método, aunque es aproximado y muy útil para el diseño de reactores piloto y el diseño preliminar de reactores comerciales. Su aplicación muestra una clara ventaja cuando se trata de datos cinéticos de una reacción involucrada, ya que los métodos gráficos basados en los libros de texto están basados en la graficación de  $1/R$  vs.  $C_A$  o  $R$  vs.  $X$ , donde es necesario calcular las velocidades de reacción o evaluar previamente la cinética de la reacción. Otra ventaja de este método es el aspecto pedagógico que presenta, puesto en evidencia los errores inherentes al graficar las pendientes en los puntos seleccionados en la curva experimental; se evita así la definición desconocida.

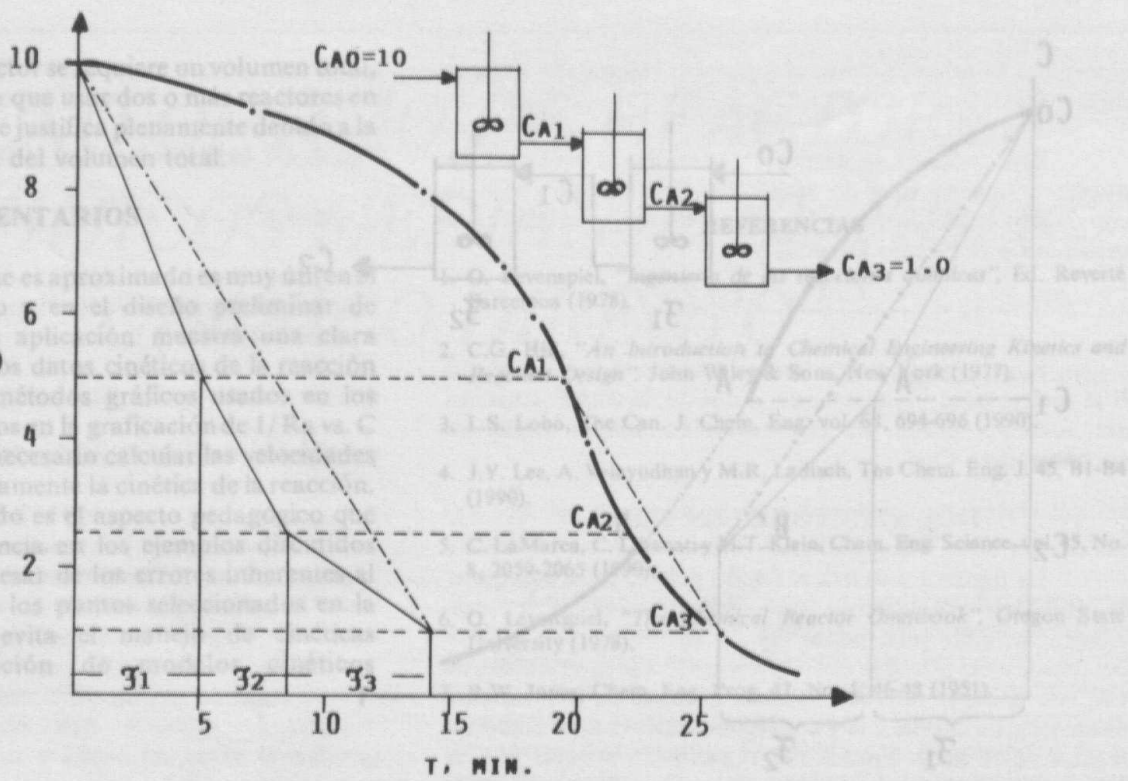


FIG. 5. DETERMINACION DEL VOLUMEN TOTAL PARA TRES REACTORES EN SERIE USANDO EL METODO GRAFICO DIRECTO.

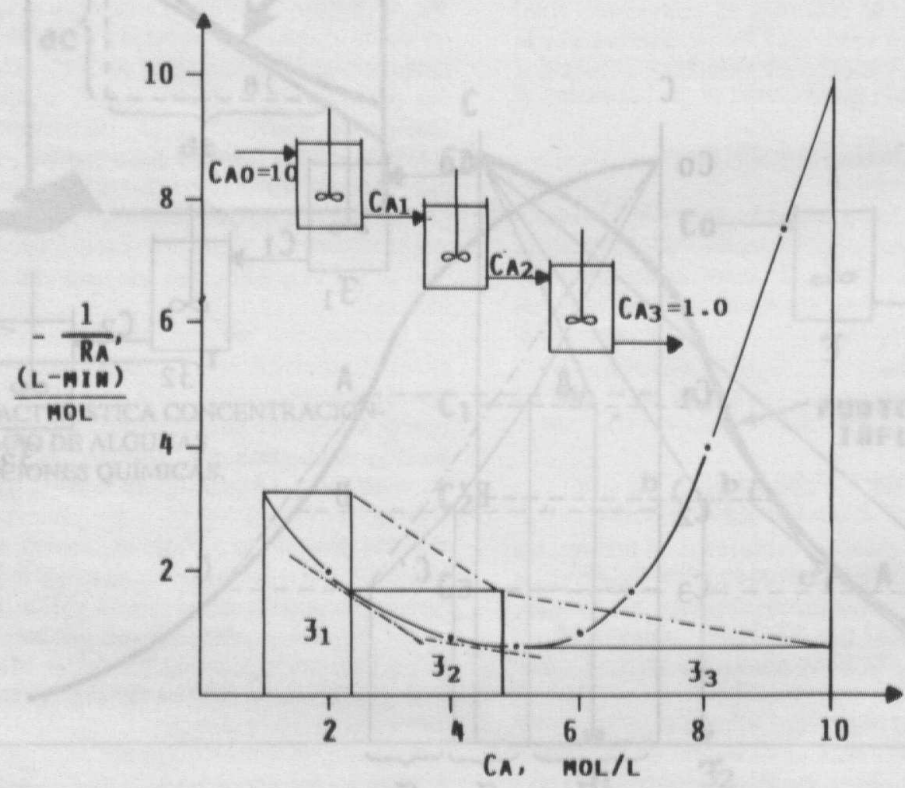


FIG. 6. DETERMINACION DEL VOLUMEN TOTAL PARA TRES REACTORES EN SERIE USANDO UN METODO GRAFICO INDIRECTO.