

Propuesta de una secuencia para la modelación matemática con aplicaciones en fenómenos con variación continua típicos de ingeniería química

Introducción

Para representar la realidad, en muchas tareas se utilizan modelos que permiten describir fenómenos con diferentes niveles de detalle, cualitativo y cuantitativo. En los estudios donde la utilización de la modelación no es consciente parecería que no es necesaria (Ingham, Dunn, Heinzle, Prenosil, Snape, 2006). En las sociedades del conocimiento no sólo las actividades profesionales como la ingeniería requieren de modelación sino en varias otras ramas del conocimiento. E inclusive, para el desarrollo de actividades cotidianas, más allá de su utilización por intuición. Sin embargo, aún hoy en día, en actividades donde la modelación y simulación se utilizan de manera extensiva, debido a la división del trabajo matemático parecería que no existe la necesidad de dicha actividad (Romo, 2014).

Dentro de las diversas clases de modelos, los modelos matemáticos mecanicistas son los que se abordan en este estudio y a los cuales se hará referencia en adelante (Box, Hunter y Hunter, 1988). Los modelos son herramientas que permiten hacer inferencias acerca de la realidad (Box y col., 1988) y cuanto más robustos sean, mejores predicciones son capaces de realizar (Mederos, Elizalde, Ancheyta, 2009). Las ventajas que tienen los modelos sobre la ejecución física de experimentos es el poco gasto energético, económico y de emisiones de residuos, lo cual se enmarca dentro de estrategias de trabajo poco convencionales, pero con auge creciente en nuestros días como la sustentabilidad.

Generalmente la experimentación antecede a la modelación, pues para formular modelos matemáticos es necesario reconocer la interdependencia entre las diferentes variables de los procesos. Basados en experiencias acumuladas durante varios años y su estudio sistemático, así como otras estrategias para relacionar información tales como las analogías, se han construido propuestas que utilizan la modelación matemática, desde aplicaciones conocidas en ámbitos académicos específicos hasta en tareas recientes en varias áreas tales como los cálculos “*ab initio*” y que permiten predecir con cierto grado de certidumbre el comportamiento de ciertos sistemas sencillos. Los sistemas más complejos requieren no solo de modelación a priori sino de retroalimentación de experimentos para su validación.

Los modelos tienen asociadas suposiciones explícitas y debido a ello en varias discusiones prevalece la idea que esto los limita seriamente en comparación con la experimentación. Un análisis más profundo revela que no sólo los modelos determinísticos sino procesos con menos aplicaciones explícitas de las matemáticas requieren de una variedad de supuestos y utilización de modelos auxiliares para obtener e interpretar la información experimental.

Los modelos no siempre se utilizan en un sentido predictivo. En varios casos se utilizan para verificar la consistencia de resultados experimentales. Por citar un ejemplo, cuando se calculan las constantes cinéticas de rapidez de una reacción química en particular, es útil determinar la dependencia de dichas constantes de la temperatura por medio de la

expresión de Arrhenius. A partir de las desviaciones de dicho modelo es posible interpretar la información experimental en el sentido de su consistencia e incluso de algunos factores que intervienen en la reacción como la limitación de la rapidez de la reacción química debido al proceso de transporte de masa.

La construcción de modelos permite visualizar la realidad de una manera más completa y analítica bajo ciertos supuestos razonables, más allá de aproximaciones obtenidas solamente atendiendo a las observaciones empíricas. La tendencia en las ciencias e ingeniería es clara hacia la utilización de la modelación matemática en tareas cada vez más diversas.

En la literatura se han encontrado diversas secuencias tanto explícitas (Blomhol, 2008; Cruz, 2010) como implícitas (Levenspiel, 1987; Bird et al., 2001; Ingham et al., 2006) para la modelación determinística en ingenierías, sin embargo no hay una sola metodología que considere la variedad de casos que se presentan en el trabajo típico del ingeniero químico, por lo cual se presenta esta propuesta.

Desarrollo

La modelación involucra una serie de pasos que

para ejecutarlos se debe de contar no sólo con la habilidad de resolver ecuaciones o utilizar un software específico para hacerlo sino se debe de conocer la naturaleza del fenómeno en cuestión a modelar así como la habilidad para saber distinguir las variables más importantes y accesibles que debe de contener el modelo, de tal manera que la solución de las ecuaciones resultantes sea factible, que se disponga de la información experimental para su validación y que el tiempo de respuesta del modelo sea el adecuado para el fenómeno estudiado.

A continuación se presentan una secuencia para la modelación básica en la Figura 1, basada en la revisión de fuentes bibliográficas y en experiencia propia (Levenspiel, 1987; Bird et al., 2001; Ingham et al., 2006; Blomhol, 2008; Cruz, 2010).

Cada una de las etapas mencionadas en la Fig. 1 se describe a continuación:

- i. Planteamiento del problema. Es esencial identificar cuál es el problema específico a resolver. Se puede acompañar el planteamiento con la realización de un esquema para representar con cantidades geométricas o físicas el problema en cuestión.
- ii. Realización de suposiciones inherentes al

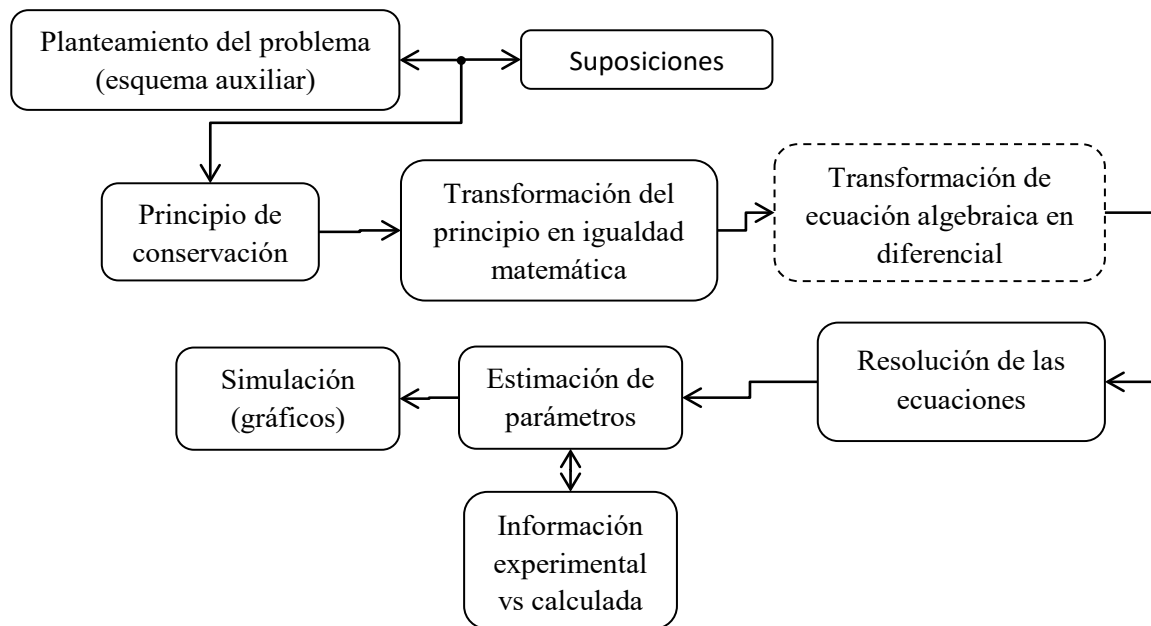


Figura 1. Secuencia de modelación propuesta.

fenómeno a estudiar. Dichas suposiciones permiten considerar las variables más relevantes que afectan en mayor medida el fenómeno observado. En todos los modelos existen las suposiciones y esto debe ser considerado cuando se evalúa la universalidad de los resultados de la modelación.

- iii. Utilización de algún principio físico. Es frecuente recurrir a leyes como la conservación de la masa, energía, momentum, carga, etc. para formular el problema físico. Dado que es el punto de partida, se deben tener los antecedentes de estos principios para su correcta aplicación.
- iv. Transformación del principio en una igualdad matemática. Basándose en el principio de conservación correspondiente y utilizando apropiadamente las variables descritas en el esquema, se procede a transformar el principio en una igualdad matemática. Se debe cuidar bajo qué supuestos la función y el problema en cuestión son relaciones biunívocas.
- v. Transformación de la ecuación matemática a ecuación diferencial. En algunos casos la igualdad algebraica proveniente del principio físico escrita en términos de diferencias se transforma a una expresión en términos de tasas de variación y luego, mediante supuestos complementarios como la hipótesis del medio continuo, se reduce la expresión a una ecuación diferencial. Ello ocurre cuando se tienen variaciones continuas de la variable dependiente con los cambios de la variable independiente.
- vi. Resolución de las ecuaciones. Se procede a la solución de las ecuaciones considerando las restricciones de la misma, tales como su dominio, su valor inicial o de frontera o ambos. Un software puede contribuir significativamente en esta etapa de la modelación.
- vii. Estimación de parámetros. En varios casos, se desconocen los parámetros del modelo por lo cual es necesario realizar la estimación de los mismos. Lo anterior se lleva a cabo comparando los resultados experimentales con las simulaciones del modelo bajo ciertos valores

supuestos de los parámetros. Una vez que se minimizó la diferencia entre los valores de la información experimental y la calculada, se puede concluir que los parámetros hallados son los óptimos, y con ellos se pueden hacer simulaciones bajo otras condiciones.

- viii. Simulación con diferentes escenarios. Una vez construido el modelo, y hallados los parámetros del mismo, se puede utilizar dicho modelo para realizar simulaciones a otras condiciones de operación. Esto es esencialmente el trabajo del simulador.

Es importante remarcar que los modelos están limitados a ciertos intervalos de los parámetros por lo cual deben tomarse con precaución para no obtener valores absurdos de la variable dependiente. Como resultado de la simulación se pueden obtener gráficas que dan una idea del conjunto y así también permiten una explicación del fenómeno más intuitiva. En el caso de procesos productivos por ejemplo, esta forma de presentar la información la hace accesible a las personas que están a cargo de las operaciones y deben mantener las variables dentro de ciertos intervalos para asegurar la calidad de los productos y la seguridad de la operación, entre otros.

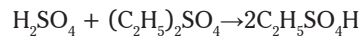
Las etapas de la secuencia propuesta pueden no estar presentes en su totalidad en problemas de modelación específicos o pueden estar ocultos o mezclados; asimismo en varios casos los modelos presentados en diferentes trabajos pueden partir ya de ecuaciones generalizadas reduciendo la secuencia presentada a una menor cantidad de etapas. Es importante a este respecto rastrear cuidadosamente estos modelos generalizados dado que en algunos casos las suposiciones para su deducción podrían no estar disponibles (Bird, 2004) y en algunas ocasiones dichos modelos estarían fuera de los límites de su aplicación.

Aplicaciones

Para ejemplificar el empleo de la secuencia propuesta, se detalla la solución del siguiente problema.

Ejemplo 1. En Levenspiel (1987) pág. 97 (Problema 3-13), se presenta el problema de hallar los parámetros de una expresión cinética de ley de potencias para la

reacción del ácido sulfúrico (AS) con sulfato de dietilo (SDE) en disolución acuosa:



Los datos de concentración de $\text{C}_2\text{H}_5\text{SO}_4\text{H}$ y tiempo se muestran en dicho texto.

Para hallar la solución se recorre la secuencia de modelación propuesta, como se describe a continuación.

Suposiciones:

- El reactor es un sistema cerrado; b) Agitación perfecta, por lo cual la composición dentro de cualquier punto del sistema es constante en un instante de tiempo; c) Temperatura constante. d) Volumen de la mezcla de reacción constante –fase líquida–; e) Variación continua de la función de rapidez de reacción con el tiempo.

Principio de conservación:

Entrada de A al elemento de volumen en un instante de tiempo = salida de A del elemento de volumen en el instante de tiempo + reacción de A en el elemento de volumen en un intervalo de tiempo + acumulación de A en elemento de volumen en el intervalo de tiempo

Debido a la primera suposición, se omiten los primeros dos términos.

Igualdad matemática:

La acumulación (*acum*) de cantidad de sustancia (n_A) en un intervalo finito de tiempo (Δt) es:

$$Acum = n_A|_{t+\Delta t} - n_A|_t \quad (1)$$

El balance de materia para A en dicho intervalo de tiempo se puede efectuar en todo el volumen de la mezcla de reacción (V) ya que está perfectamente agitada (suposición b)):

$$0 = (-\overline{r_A})V\Delta t + n_A|_{t+\Delta t} - n_A|_t \quad (2)$$

La función de rapidez de reacción es un valor medio ($\bar{r}$) en el intervalo de tiempo considerado, ya que ésta varía en todo momento. Observar que esta expresión es precisamente la incógnita.

Reacomodando y dividiendo (2) por Δt :

$$-\frac{n_A|_{t+\Delta t} - n_A|_t}{\Delta t} = (-\overline{r_A})V \quad (3)$$

Transformación a ecuación diferencial.

Tomando el límite de la expresión (3) cuando Δt tiende a cero, con la finalidad de obtener una expresión analítica correcta:

$$-\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{n_A|_{t+\Delta t} - n_A|_t}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (-\overline{r_A})V \quad (4)$$

Lo cual es equivalente a:

$$-\frac{dn_A}{dt} = (-r_A)V \quad (5)$$

En términos de la concentración de A la ecuación (5) se puede escribir como:

$$-\frac{dC_A}{dt} = (-r_A) \quad (6)$$

Solución de la ecuación diferencial:

En este problema se puede emplear la ecuación diferencial tal y como está y hallar los parámetros cinéticos (método diferencial o alguno equivalente) o utilizar su forma integral, resolviendo la Exp. (6) como un problema de valor inicial, ya que, se tiene:

$$t_r = \int_{C_{Ar}}^{C_{A0}} \frac{dC_A}{(-r_A)} \quad (7)$$

Estimación de parámetros:

Se propuso una expresión del tipo y se resolvió la expresión (6) para cada conjunto de parámetros cinéticos propuesto. Se planteó el problema como una optimización no lineal –modelación inversa–. Los resultados se muestran en la Figura 2. En esta figura se muestra la simulación del proceso con los parámetros óptimos y las mismas condiciones de reacción experimentales.

Ejemplo 2. En Bird, Stewart, Lightfoot, (2002, pag. 48) se modela la distribución de esfuerzos y velocidades de un fluido newtoniano en un tubo. Se parte de un esquema, suposiciones y un elemento de control en el cual se aplica un balance de cantidad de movimiento. Después de escribir la ecuación algebraica del balance, ésta se pasa a ecuación diferencial –utilizando la hipótesis del medio continuo– y luego a su resolución para obtener la distribución de esfuerzos.

Posteriormente utilizando la ley de Newton de la viscosidad se obtiene la distribución de velocidades. No se presentan gráficos de la solución de manera separada del esquema del problema. Asimismo no hubo estimación de parámetros.

Ejemplo 3. Una secuencia aplicada a un problema de enfriamiento se presenta en la pág. 79 de Córdoba (2011). En ella se reconocen algunos elementos de la secuencia propuesta, sin embargo no están ordenados de manera comprensible; asimismo, durante la utilización de la secuencia de Córdoba, no se aprecia la utilización del principio de conservación de calor

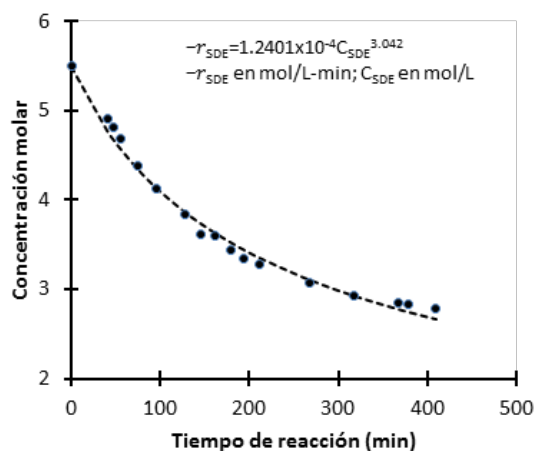


Figura. 2. Simulación del perfil de concentraciones en el reactor (línea) y su comparación con la información experimental (símbolos).

o energía ya que se toma directamente la ley de enfriamiento de Newton para describir las variaciones de temperatura con el tiempo de la sustancia sometida a enfriamiento. Aun así hay coincidencias como lo que respecta a la estimación de parámetros y la simulación del proceso en cuanto al procedimiento que siguieron y la secuencia propuesta en este estudio.

En Elizalde (2016) págs. 97-102 se presenta una secuencia para la modelación de una aleta que transfiere calor a los alrededores. Se recorren todos los pasos de la secuencia hasta la formulación de la función objetivo, la cual es minimizar el error entre la información experimental y la calculada. En la misma contribución, pág. 85 se aplica la modelación inversa para hallar el coeficiente de transferencia de calor "h". Se presenta en la misma contribución no sólo el resultado del problema sino la simulación del fenómeno de pérdida de calor en la aleta a las

condiciones que se efectuó la experimentación (último paso de la secuencia).

Conclusiones

Se propuso una secuencia de modelación matemática que incluye fenómenos que varían continuamente con el cambio de alguna variable independiente como el tiempo y la distancia. La secuencia mostró su utilidad mediante su aplicación a la estimación de parámetros cinético-químicos de un problema de literatura, así como a balances de cantidad de movimiento y procesos de transferencia de calor. Se observó que algunas etapas de la secuencia propuesta en cada uno de los problemas analizados no están explícitas sino mezcladas con otras e inclusive ausentes y esto último es debido a que se partió de problemas simplificados o que no requieren alguna de las etapas de la modelación inversa. Esta secuencia puede utilizarse como guía para resolver problemas de modelación matemática en diferentes áreas de la ingeniería química.

Bibliografía

- Bird R. B. (2004). Five decades of transport phenomena. *AIChE J*, 50(2): 273-287.
- Bird R. B., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N. (2002). *Transport phenomena*. New York: John Wiley.
- Blomhol M. (2008) Different perspectives in research on the teaching and learning mathematical modelling. *Proc Int Congress Math Educ. Mexico*, Julio 6-13.
- Box G, Hunter W, Hunter J. (1988). *Estadística para investigadores*. México: Reverté.
- Córdoba F.J. (2011) *La modelación en matemática educativa: una práctica para el trabajo de aula en ingeniería*. [Tesis de maestría no publicada]. México, D.F.: Instituto Politécnico Nacional.
- Cruz C. (2010). La enseñanza de la modelación matemática en ingeniería. *Rev Fac Ing UCV* 25(3) 39-46
- Elizalde, I. (2016). *Modelación directa e inversa como medio de integración de los conocimientos matemáticos y extramatemáticos del ingeniero químico*. [Tesis de maestría no publicada]. México, D.F.: Instituto Politécnico Nacional. Disponible en: <http://tesis.ipn.mx/bitstream/handle/123456789/18010/Ignacio%20Elizalde%20>

Martinez.pdf?sequence=1&isAllowed=y
Ingham I, Dunn I, Heinzle E, Prenosil J, Snape J. (2006).
Chemical engineering dynamics. Verlag: Wiley.
Levenspiel O. (1987). Ingeniería de las reacciones
químicas. México: Reverté.
Mederos F. S., Elizalde I., Ancheyta J. (2009). Steady-state
and dynamic reactor models for hydrotreatment
of oil fractions: A review. Catalysis Reviews, 51(4):
485-607.
Romo A. (2014). La modelización matemática en la
formación de ingenieros. Educación Matemática,
314-338. México, D.F.: Santillana.

Dr. Ignacio Elizalde Martínez^{1*}

Dr. Fabián S. Mederos Nieto¹

¹Instituto Politécnico Nacional

^{*}ielizaldem@gmail.com, ielizaldem@ipn.mx