

Revista Difusiones, ISSN 2314-1662, Vol. 16, N.º 1, enero-julio de 2026, pp. 22-46
Fecha de recepción: 26-05-2025. Fecha de aceptación: 06-05-2026

Modelos simplificados para el tiempo de residencia de reacciones fluido-sólido con tamaño no uniforme de partículas

Simplified models for the residence time of fluid-solid reactions with non-uniform particle size

Enrique Eduardo Tarifa¹, etarifa@fi.unju.edu.ar
ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3220-1440>
Universidad Nacional de Jujuy, Facultad de Ingeniería, Jujuy, Argentina
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Argentina

Sergio Luis Martínez², smartinez@fi.unju.edu.ar
ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3728-0029>
Universidad Nacional de Jujuy, Facultad de Ingeniería, Jujuy, Argentina

Samuel Franco Domínguez³, sfrancodominguez@fi.unju.edu.ar
ORCID: <https://orcid.org/0009-0006-9226-6747>
Universidad Nacional de Jujuy, Facultad de Ingeniería, Jujuy, Argentina

Álvaro Fabián Núñez⁴, afnunez@fi.unju.edu.ar
ORCID: <https://orcid.org/0009-0002-9472-2102>
Universidad Nacional de Jujuy, Facultad de Ingeniería, Jujuy, Argentina

¹ Doctor en Ingeniería Química, Ingeniero Químico, Especialista en Educación Superior. Profesor Titular en la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Jujuy, Investigador Independiente de CONICET.

² Magister en Ingeniería Electrónica, Ingeniero en Electrónica, Profesor de Enseñanza Superior, Especialista en Enseñanza de la Educación Superior. Profesor Adjunto en la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Jujuy.

³ Ingeniero Químico. Profesor Adjunto en la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Jujuy.

⁴ Ingeniero Químico. Jefe de Trabajos Prácticos en la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Jujuy.



Resumen

La estimación del tiempo de residencia requerido para lograr una conversión deseada en una reacción fluido-sólido demanda un gran esfuerzo computacional. Este esfuerzo es aún mayor cuando las partículas sólidas tienen tamaños diferentes. Por ese motivo, es de interés desarrollar modelos simplificados que permitan realizar dicha estimación con un menor esfuerzo. En este trabajo, se proponen modelos simplificados para el caso de reacciones heterogéneas que se pueden representar con el modelo de núcleo decreciente, con resistencia controlante en la transferencia de masa a través de la película, en la reacción química o en la difusión a través de la ceniza. Los modelos que se proponen se desarrollaron para reactores con flujo pistón y para reactores perfectamente mezclados continuos. Estos modelos son de dos tipos: correlaciones y redes neuronales artificiales. Para desarrollar las correlaciones, se seleccionaron funciones que cumplen con determinadas condiciones matemáticas. Estas funciones luego fueron ajustadas por regresión. Por otra parte, se probaron diferentes estructuras de redes neuronales artificiales hasta encontrar la que minimiza el error de prueba. Tanto para ajustar las correlaciones como para entrenar las redes neuronales, se emplearon datos obtenidos a partir de resolver el modelo de núcleo decreciente considerando distintas etapas controlantes.

Palabras clave

Correlaciones, núcleo decreciente, redes neuronales artificiales.

Abstract

The estimation of the residence time required to achieve a desired conversion in a fluid-solid reaction demands a great computational effort. This effort is even greater when the solid particles are of different sizes. For this reason, it is of interest to develop simplified models that allow such estimation with less effort. In this work, simplified models are proposed for the case of heterogeneous reactions that can be represented with the shrinking-core model, with controlling resistance in the mass transfer through the film, in the chemical reaction or in the diffusion through the ash. The proposed models were developed for plug flow reactors and for continuous perfectly mixed reactors. These models are of two types: correlations and artificial neural networks. To develop the correlations, functions that meet certain mathematical conditions were selected. These functions were then fitted by regression. In addition, different structures of artificial neural networks were tested until the one that minimizes the test error was found. Both to adjust the correlations and to train the neural networks, data obtained from solving the shrinking-core model considering different controlling stages were used.

Key Words

Artificial neural networks, correlations, shrinking core.

Introducción

Las reacciones entre fluidos y sólidos desempeñan un papel crucial en la industria química. Por esa razón, es de gran interés desarrollar modelos para ese tipo de reacciones. Uno de los primeros estudios sobre los aspectos generales de esas reacciones fue realizado por Wen (1968). En ese trabajo, se plantean tres tipos de sistemas: (i) un sistema con un frente de reacción definido y un núcleo sin reaccionar que se contrae, (ii) un sistema homogéneo sin gradientes, (iii) un sistema con gradiente en la concentración del fluido y en la del sólido.

El primero de esos casos se denomina modelo de núcleo decreciente, SCM por sus siglas en inglés (shrinking-core model). Ese modelo se aplica a una amplia variedad de reacciones que cumplen con una de las siguientes condiciones: (i) el sólido no es poroso, (ii) el sólido es poroso pero la resistencia de la reacción química es pequeña en comparación a la resistencia de la difusión del fluido. En el SCM, la reacción ocurre en la superficie del núcleo del reactivo que aún no reaccionó. Este núcleo se contrae a medida que avanza la reacción, dejando atrás una capa de ceniza. Entre las reacciones que pueden ser representadas con ese modelo, se encuentran la combustión del carbón, la tostación de blenda, reacciones líquido-sólido y reacciones gas-sólido (Yagi & Kunii, 1955).

El SCM se utiliza para determinar la conversión en función del tiempo de residencia, y viceversa. En ciertas situaciones, se puede obtener una solución analítica. Sin embargo, en la mayoría de los casos, es necesario emplear métodos numéricos, lo que conlleva una considerable carga computacional.

Lo expuesto llevó al desarrollo de correlaciones que permiten estimar las variables de interés sin la necesidad de utilizar métodos numéricos. Yagi y Kunii (1961a, 1961b) y Levenspiel (2019) presentaron correlaciones que son comúnmente utilizadas en el cálculo de reactores. No obstante, dichas correlaciones son aplicables solo cuando el tamaño de las partículas es uniforme. Cuando las partículas tienen diferentes tamaños, el modelo es más complejo, y tanto el cálculo de la conversión como el del tiempo de residencia son únicamente posibles en forma numérica. Sin embargo, es el cálculo del tiempo de residencia el que demanda un mayor esfuerzo computacional.

En el presente trabajo, para partículas de diferentes tamaños, se proponen modelos simplificados para reacciones heterogéneas representadas por el SCM, con resistencia controlante en la transferencia de masa a través de la película, en la reacción química o en la difusión a través de la ceniza. Los modelos que se proponen fueron desarrollados para reactores con flujo pistón, los PFR (plug flow reactors), y para reactores perfectamente mezclados, tales como los FBR (fluidized-bed reactors) y los CSTR (continuous stirred tank reactor). Los modelos desarrollados para estimar el tiempo de residencia requerido para alcanzar una conversión deseada son de dos tipos: correlaciones y RNA (redes neuronales artificiales). Tanto para ajustar las correlaciones como para entrenar las RNA, se emplearon datos obtenidos a partir de resolver el modelo de núcleo decreciente considerando distintas etapas controlantes.

Modelo de núcleo decreciente

En el SCM, la reacción ocurre inicialmente en la superficie de la partícula de radio

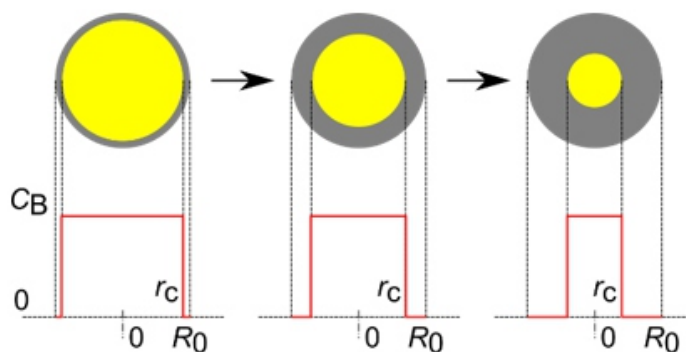


Figura 1: Concentración del sólido B en el SCM. Fuente: Elaboración propia.

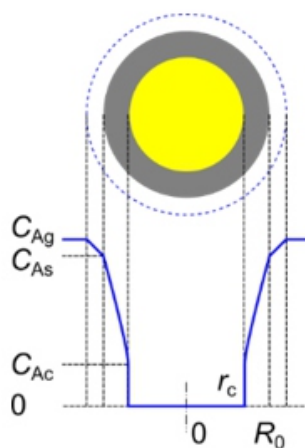


Figura 2: Concentración del fluido A en el SCM. Fuente: Elaboración propia.

Para una reacción $A_{(g)} + bB_{(s)} \rightarrow rR_{(g)} + pP_{(s)}$, el SCM considera las resistencias asociadas a las siguientes etapas: (i) difusión del gas A desde el entorno de la partícula a la superficie de esta a través de la película de gas que la rodea, (ii) difusión de A a través de la capa de ceniza hacia la zona de reacción, (iii) reacción química en la superficie del núcleo que queda sin reaccionar, (iv) difusión del producto gaseoso R de la reacción a través de la capa de ceniza hacia la superficie externa de la partícula, (v) difusión del producto gaseoso a través de la película de gas que rodea a la partícula hacia el entorno.

Las principales hipótesis del SCM son las siguientes: (a) el reactivo B no es poroso, (b) el producto P es poroso, (c) cada etapa de transferencia de materia y reacción es una resistencia en serie para la velocidad global de reacción, (d) la etapa más lenta es la

controlante, (e) el reactivo A está en exceso y su concentración en el entorno es constante, (f) las partículas son esféricas, (g) el proceso es isotérmico, (h) la densidad del sólido es constante, (i) la velocidad de contracción del núcleo que permanece sin reaccionar es mucho menor que la velocidad de difusión a través de la capa de ceniza.

En la bibliografía comúnmente empleada para el cálculo de reactores (Froment et al., 2011; Levenspiel, 2019), se presentan ecuaciones que permiten el cálculo de la velocidad global de reacción cuando alguna de las resistencias del modelo es la controlante. De ese modo, se tienen las correspondientes ecuaciones para película controlante, reacción controlante y ceniza controlante.

Partículas uniformes

Reactores con flujo pistón

El SCM fue aplicado en el estudio de partículas aisladas. Los resultados de ese estudio se pueden emplear en el diseño de PFR considerando que cada volumen diferencial contiene partículas con tamaño y tiempo de residencia uniforme. A continuación, se presentan las ecuaciones producidas por el SCM cuando se identifican distintas resistencias controlantes.

Película controlante

La Figura 3 muestra el perfil de concentración del fluido cuando la transferencia de masa a través de la película que rodea a la partícula es mucho más lenta que la difusión a través de la capa de ceniza y que la reacción química. Es decir, se tiene que la resistencia controlante es la correspondiente a la película.

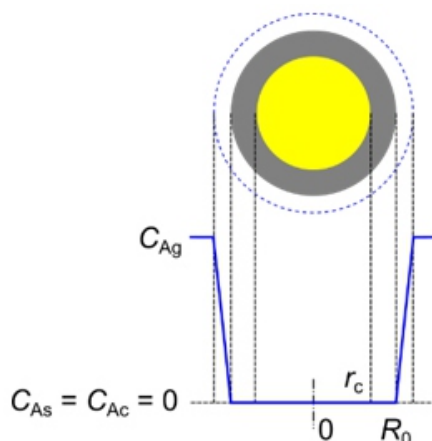


Figura 3: Concentración del fluido A para película controlante. Fuente: Elaboración propia.

En este caso, el SCM tiene solución analítica:

$$\frac{t}{\tau} = X_B \quad (1)$$

donde X_B es la conversión del sólido, t es el tiempo de reacción, y τ es el tiempo requerido para conversión completa del sólido.

Reacción controlante

La Figura 4 muestra el perfil de concentración del fluido cuando la reacción química es mucho más lenta que la transferencia de masa a través de la película que rodea a la partícula y que la difusión a través de la capa de ceniza. Es decir, se tiene que la resistencia controlante es la correspondiente a la reacción.

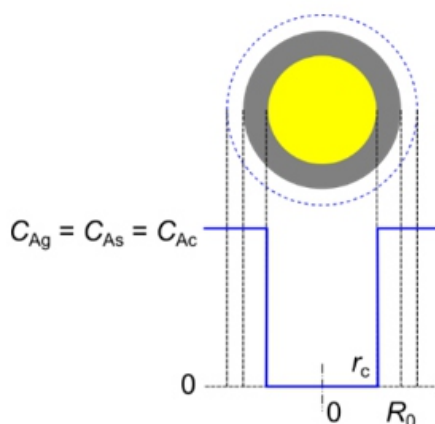


Figura 4: Concentración del fluido A para reacción controlante. Fuente: Elaboración propia.

En este caso, el SCM tiene solución analítica para el tiempo:

$$\frac{t}{\tau} = 1 - (1 - X_B)^{1/3} \quad (2)$$

Sin embargo, para obtener X_B , se deben obtener las tres soluciones de la ecuación anterior y evaluarlas para determinar cuál de ellas es la que tiene sentido físico.

Ceniza controlante

La Figura 5 muestra el perfil de concentración del fluido cuando la difusión a través de la capa de ceniza es mucho más lenta que la transferencia de masa a través de la película que rodea a la partícula y que la reacción química. Es decir, se tiene que la resistencia controlante es la correspondiente a la ceniza.

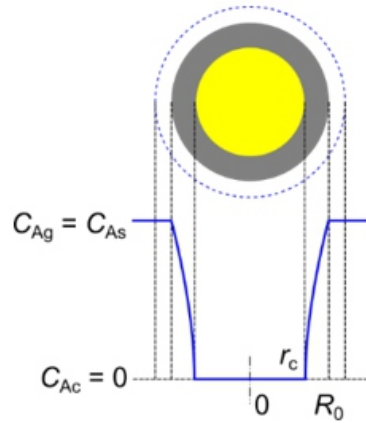


Figura 5: Concentración del fluido A para ceniza controlante. Fuente: Elaboración propia.

En este caso, el SCM tiene solución analítica para el tiempo:

$$\frac{t}{\tau} = 1 - 3(1 - X_B)^{2/3} + 2(1 - X_B) \quad (3)$$

No obstante, para obtener X_B , se debe resolver numéricamente la ecuación anterior.

Reactores perfectamente mezclados

Para reactores perfectamente mezclados continuos, FBR o CSTR, el tiempo promedio de residencia es $\bar{t} = V/F_0$, donde V es el volumen del reactor, y F_0 es el caudal de alimentación de sólidos. Por otra parte, la conversión promedio $\bar{X}_B$ se obtiene al resolver las siguientes ecuaciones:

$$\bar{X}_B = \int_0^{\tau} X_B(t) E(t) dt \quad (4)$$

$$E(t) = \frac{e^{-t/\bar{t}}}{\bar{t}} \quad (5)$$

donde $E(t)$ es la distribución de tiempos de residencia de las partículas en el reactor.

A continuación, se presentan las soluciones analíticas para la conversión considerando las distintas resistencias controlantes. En el caso de ceniza controlante, no es posible obtener la solución analítica. Tampoco es posible obtener la solución analítica para el tiempo en ninguno de los casos.

Película controlante:

$$\bar{X}_B = \frac{\bar{t}}{\tau} (1 - e^{-\tau/\bar{t}}) \quad (6)$$

Reacción controlante:

$$\bar{X}_B = 3\frac{\bar{t}}{\tau} - 6\left(\frac{\bar{t}}{\tau}\right)^2 + 6\left(\frac{\bar{t}}{\tau}\right)^3 (1 - e^{-\tau/\bar{t}}) \quad (7)$$

Partículas no uniformes

Cuando las partículas alimentadas al reactor no tienen un tamaño uniforme, la distribución de tamaños puede ser representada por una distribución discreta provista por un sistema de tamizado, tal como la que se muestra en la Figura 6. En el histograma de esa figura, $F(R_i)$ es el caudal de alimentación de sólidos correspondiente a la clase de partículas con radio medio R_i . Por lo tanto, se tiene:

$$F_0 = \sum_{i=1}^m F_0(R_{0i}) \quad (8)$$

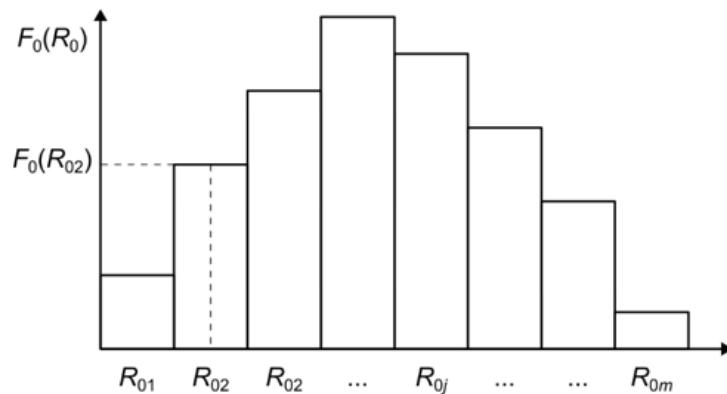


Figura 6: Histograma de radios de partículas. Fuente: Elaboración propia.

En este caso, la conversión media para un PFR puede calcularse con la siguiente ecuación:

$$\hat{X}_B = \sum_{i=1}^m X_B(R_{0i}) F_0(R_{0i}) / F_0 \quad (9)$$

En cambio, la conversión media para un FBR o un CSTR es:

$$\hat{X}_B = \sum_{i=1}^m \bar{X}_B(R_{0i}) F_0(R_{0i}) / F_0 \quad (10)$$

Nuevamente, las expresiones obtenidas para la conversión media son bastante complejas, y el cálculo del tiempo de reacción requiere el empleo de métodos numéricos.

Método

Cálculo de la conversión promedio

En esta sección, se explica el método empleado para el caso de un reactor perfectamente mezclado continuo. El mismo método fue aplicado a un PFR, pero usando X_B y t en lugar de $\bar{X}_B$ y $\bar{t}$, respectivamente.

Se asumió que la función de masa de probabilidad pmf de los tamaños de partículas (probability mass function) era conocida. De esa manera, se contó con c pares ordenados (R_{0i}, p_i) , donde p_i es la probabilidad de que una partícula pertenezca a la clase con radio medio R_{0i} . Esta probabilidad es igual a la fracción másica o volumétrica de las partículas pertenecientes a la clase considerada.

Los τ_i fueron calculados considerando la resistencia controlante (Levenspiel, 2019).

Película controlante:

$$\tau = \alpha R_0^{1.5-2} \quad (11)$$

para el caso de estudio, se adoptó el valor 2 para el exponente.

Reacción controlante:

$$\tau = \alpha R_0 \quad (12)$$

Ceniza controlante:

$$\tau = \alpha R_0^2 \quad (13)$$

La conversión media $\hat{X}_B$ para un dado tiempo de residencia promedio $\bar{t}$ fue calculada considerando la distribución de tamaños de partículas y la solución correspondiente a la resistencia controlante (Levenspiel, 2019):

$$\hat{X}_B = \sum_{i=1}^c \bar{X}_B \left(\frac{\bar{t}}{\tau_i} \right) p_i = \sum_{i=1}^c \bar{X}_B \left(\frac{\bar{t}}{\alpha R_{0,i}^\beta} \right) p_i \quad (14)$$

Luego, se definió el tiempo adimensional medio $\hat{t}_d$ como:

$$\hat{t}_d = \frac{\bar{t}}{\hat{t}} \quad (15)$$

$$\hat{t} = \prod_{i=1}^c \tau_i^{p_i} \quad (16)$$

Con este tiempo adimensional, la conversión media puede calcularse como sigue:

$$\hat{X}_B = \sum_{i=1}^c \bar{X}_B \left(\frac{\hat{t}_d}{\alpha R_{0,i}^\beta} \right) p_i \quad (17)$$

El valor de α puede ser calculado o medido. En este trabajo, se le asignó el valor 1; por lo tanto, puede recuperarse el verdadero $\bar{\epsilon}$ multiplicando por α al valor reportado para $\hat{\epsilon}_d$ por los modelos simplificados.

Por último, para cada caso estudiado, se evaluó la correspondiente solución numérica de $\hat{X}_B$ ec. (17), para generar una tabla de valores de $\hat{X}_B$ vs. $\hat{\epsilon}_d$ en función de $\hat{X}_B$

Regresión

Para llevar a cabo la regresión de las correlaciones que se desarrollaron en este trabajo, se empleó el lenguaje de programación Python 3.10.4 junto a la librería `scipy.optimize`. Esa librería contiene la función `curve fit`, la cual adopta el criterio de mínimos cuadrados para llevar a cabo el ajuste de las funciones suministradas.

Se probaron una variedad de funciones que fueron evaluadas con el AIC (Akaike's Information Criterion). La función con el menor valor de AIC es la mejor. Ese criterio favorece a las funciones más simples sobre aquellas con más parámetros (Akaike, 1974). Las funciones probadas fueron escogidas observando el cumplimiento de las siguientes condiciones matemáticas: $\hat{\epsilon}_d$ es siempre creciente con $\hat{X}_B$, $\hat{\epsilon}_d \in [0, \infty)$,

$$\lim_{\hat{X}_B \rightarrow 0^+} \hat{\epsilon}_d = 0 \text{ y } \lim_{\hat{X}_B \rightarrow 1} \hat{\epsilon}_d = \infty.$$

Los coeficientes de las funciones seleccionadas fueron redondeados considerando el error asociado a ellos. Para evaluar el ajuste, se empleó el coeficiente de determinación r^2 .

Redes neuronales artificiales

La modelización matemática de fenómenos físicos y procesos industriales frecuentemente emplea RNA debido a su capacidad intrínseca para actuar como aproximadores universales de funciones. En ese ámbito, uno de los problemas más comunes es el ajuste de un modelo predictivo a una tabla de datos que comprende variables reales de entrada y variables reales de salida. Kopal et al. (2018) desarrollaron un modelo de red neuronal feedforward backpropagation multicapa para predecir la respuesta mecánica de mezclas de caucho natural vulcanizado con diferentes concentraciones de negro de humo.

Liu et al. (2023) emplean la RNA para la calibración de alta precisión de sensores de temperatura Pt100. La calibración de sensores es una tarea de regresión, donde una medición potencialmente sesgada se mapea a un valor de referencia exacto. El estudio recolectó múltiples conjuntos de datos de temperatura experimentales en diversos entornos para entrenar un modelo de red neuronal feedforward. Daş (2023) predijo las primeras diez frecuencias naturales de vigas de aluminio y acero con diferentes espesores y condiciones de contorno.

El problema se planteó como un ajuste de una tabla de datos donde las propiedades geométricas y estructurales de las vigas fueron las variables de entrada, y la frecuencia de

vibración fue la variable de salida. El modelo empleado fue un Perceptrón Multicapa. Immordino et al. (2025) modelaron la aerodinámica transónica inestable mediante la combinación de series de Volterra y RNA. El objetivo principal fue ajustar un modelo para interpolar los coeficientes de los núcleos de Volterra dentro de un espacio paramétrico definido por el número de Mach y el ángulo de ataque. La RNA recibe las condiciones de vuelo como entrada y predice los núcleos de primer y segundo orden, los cuales se utilizan posteriormente para reconstruir la respuesta aerodinámica completa (como el coeficiente de sustentación).

La estructura básica de una RNA consiste en unidades de procesamiento —las neuronas artificiales— configuradas como un modelo simplificado de las neuronas biológicas. Las neuronas están interconectadas y organizadas en capas, donde se pueden reconocer los siguientes elementos básicos:

- Un conjunto de datos de entrada ($x_1 \dots x_n$) provenientes del exterior de la RNA o de otras neuronas internas.
- Un conjunto de coeficientes, denominados pesos ($w_1 \dots w_n$), que multiplican a sus respectivas entradas y determinan el comportamiento de cada neurona.
- Una entrada especial —el bias— que recibe un valor fijo (± 1). Este parámetro tiene asociado un coeficiente de peso w_0 .
- Una función de entrada $f(x_i, w_i)$ —la función de excitación— que combina linealmente a las entradas moduladas por los pesos.
- Una función de salida $g(f)$ —identificada como función de activación— que procesa el resultado de la función de excitación para producir el resultado que se asigna a la variable de salida y de la neurona.

De acuerdo con el formato de agrupamiento de las neuronas, el tipo de interconexión entre ellas y el método de aprendizaje, se obtienen diferentes arquitecturas de redes, con diferentes capacidades operativas.

Las RNA son modelos empíricos, por lo cual sus parámetros (pesos y bias) son ajustados empleando un conjunto de datos provenientes del sistema que se quiere modelar. Esto se realiza en la etapa de entrenamiento. Además de los parámetros, también se pueden modificar los hiperparámetros —la estructura (cantidad de nodos y capas) y las funciones de excitación y activación— para mejorar el desempeño de la red. Todas estas posibilidades dotan de una gran flexibilidad a las RNA, por lo cual pueden ajustarse para emular (mapear) cualquier relación que exista entre las entradas y las salidas del sistema analizado. Sin embargo, como todo modelo empírico, se debe considerar el riesgo de que el modelo se sobreajuste a los datos empleados y, de ese modo, pierda capacidad de generalización o predicción.

En la etapa de entrenamiento, los datos disponibles se dividen en tres subconjuntos: el de entrenamiento, el de validación y el de prueba. Con los primeros se ajustan los parámetros

de la red, con los segundos se evalúa la capacidad de generalización de la red para el ajuste realizado, y con el tercero se evalúa la red ya entrenada.

Para validar el modelo, se empleó una variante del método de la validación cruzada (Devijver & Kittler, 1982). La validación cruzada o cross-validation es una técnica utilizada para evaluar los resultados de un análisis estadístico y para garantizar que son independientes de la partición entre datos de entrenamiento y validación.

Si bien el entrenamiento de una RNA demanda tiempo y esfuerzo, una vez que está entrenada, se la puede usar sin necesidad de repetirlo. En la etapa de producción, la RNA muestra una de sus grandes ventajas: la velocidad de respuesta. En efecto, mientras que la resolución de los modelos matemáticos tradicionales demanda un tiempo considerable de cálculo, la RNA solo tiene que ser evaluada, lo que produce un resultado inmediato.

Las RNA de tipo feedforward, configuradas con funciones internas de tipo sigmoide, pueden aproximar funciones reales y continuas si son estructuradas con la suficiente cantidad de unidades neuronales internas y una capa oculta como mínimo. Tal afirmación se sustenta en base al Teorema de Aproximación Universal dado por Cybenko (1989).

En este trabajo, se empleó MATLAB con el fin de configurar diferentes tipos de RNA para ajustar a las tablas de valores de $\hat{t}_d$ vs. $\hat{X}_B$ obtenidos por simulación. Los tipos de RNA y las funciones de activación empleados fueron la red feedforward backpropagation, con funciones sigmoideas en las capas ocultas, la red feedforward cascade, la cual incorpora conexiones adicionales de cada capa a las subsiguientes, y la red RBF (radial basis function), la cual utiliza funciones radiales de tipo gaussianas en la capa oculta. Todas las redes empleadas se diseñaron con una función de activación lineal en la única neurona de la capa de salida. Estas redes se consideran aproximadores universales clásicos (Beale et al., 2018).

Resultados

Caso de estudio

En esta sección, se presentan los resultados obtenidos al aplicar los modelos simplificados propuestos. Para ello, se tomó como caso de estudio a las distribuciones de tamaño experimentales reportadas por Lu et al. (2015). Dichas distribuciones tienen un diámetro medio de partícula en el intervalo [18 mm, 224 mm]. Dos de las distribuciones seleccionadas, la a y la g, corresponden a los tamaños extremos de partículas; la tercera, la e, corresponde a tamaños intermedios. De la Tabla 1 a la Tabla 3, se presentan las distribuciones seleccionadas. Los 3 histogramas considerados tienen 5 clases. Para cada clase, se indican el radio medio R_0 y la probabilidad P (igual a la fracción volumétrica de la clase).

Tabla 1. Distribución “a” empleada como caso de estudio (Lu et al., 2015)

i	R_0 (μm)	p
1	4.64	0.3565
2	13.61	0.3735
3	22.58	0.1878
4	31.55	0.0715
5	40.52	0.0107

Tabla 2. Distribución “e” empleada como caso de estudio (Lu et al., 2015)

i	R_0 (μm)	p
1	15.18	0.1039
2	45.14	0.3637
3	75.10	0.3227
4	105.06	0.1679
5	135.02	0.0418

Tabla 3. Distribución “g” empleada como caso de estudio (Lu et al., 2015)

i	R_0 (μm)	p
1	50.18	0.2039
2	150.14	0.3706
3	250.10	0.2801
4	350.06	0.1241
5	450.02	0.0213

Regresión

Reactores con flujo pistón

Para los PFR, la siguiente función fue la que produjo el mejor ajuste a los resultados de las simulaciones:

$$\hat{t}_d = a\hat{X}_B + b\hat{X}_B(1 - \hat{X}_B^c)^d \quad (18)$$

Los coeficientes de la ecuación anterior, obtenidos por regresión para los diferentes casos, se reportan desde la Tabla 4 a la Tabla 12. Esos coeficientes fueron redondeados considerando el error asociado a ellos. El ajuste fue casi perfecto de acuerdo con los valores del coeficiente r^2 .

Tabla 4. Coeficientes para PFR con película controlante. Distribución “a”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	0.9965
Coeficientes redondeados	
a	-1.33
b	0.9973
c	0.214
d	-0.414

□

Tabla 5. Coeficientes para PFR con reacción controlante. Distribución “a”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	0.9994
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	-0.616
<i>b</i>	0.836
<i>c</i>	1
<i>d</i>	-0.25

Tabla 6. Coeficientes para PFR con ceniza controlante. Distribución “a”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	0.9996
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	-1.233
<i>b</i>	0.9974
<i>c</i>	0.83
<i>d</i>	-0.3914

Tabla 7. Coeficientes para PFR con película controlante. Distribución “e”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	0.9609
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	-2.8
<i>b</i>	1
<i>c</i>	0.0001
<i>d</i>	-0.14

Tabla 8. Coeficientes para PFR con reacción controlante. Distribución “e”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	0.9996
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	-1.679
<i>b</i>	1
<i>c</i>	0.0002
<i>d</i>	-0.0816

Tabla 9. Coeficientes para PFR con ceniza controlante. Distribución “e”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	0.9995
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	-21.3
<i>b</i>	21.4
<i>c</i>	2.99
<i>d</i>	-0.0317

Tabla 10. Coeficientes para PFR con película controlante. Distribución “g”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	0.9948
Coeficientes redondeados	
a	-33
b	33
c	1
d	-0.031

□

Tabla 11. Coeficientes para PFR con reacción controlante. Distribución “g”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	0.9999
Coeficientes redondeados	
a	-11.9
b	12.1
c	1
d	-0.0199

Tabla 12. Coeficientes para PFR con ceniza controlante. Distribución “g”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	0.9993
Coeficientes redondeados	
a	-2.162
b	2.003
c	1
d	-0.2234

De la Figura 7 a la Figura 9, se comparan las predicciones realizadas por las correlaciones (líneas) con los resultados de las simulaciones (círculos). Se consideraron las tres posibles resistencias controlantes: película (azul), reacción (verde) y ceniza (rojo). Las correlaciones tienen un error menor que el 10 % para conversiones mayores que 0.5.

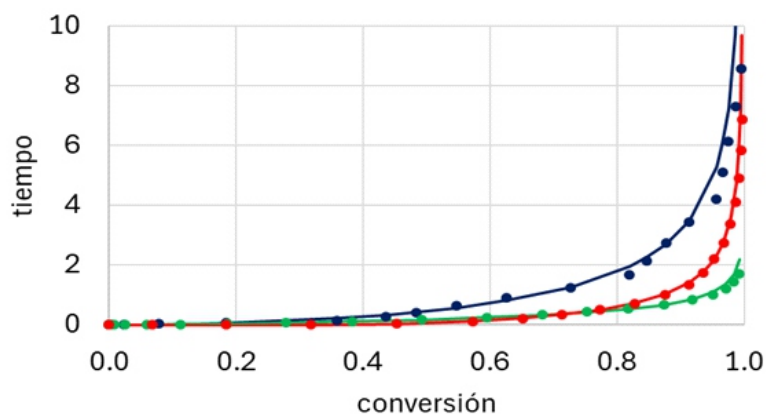


Figura 7: Evaluación para PFR. Distribución “a”. Fuente: Elaboración propia.

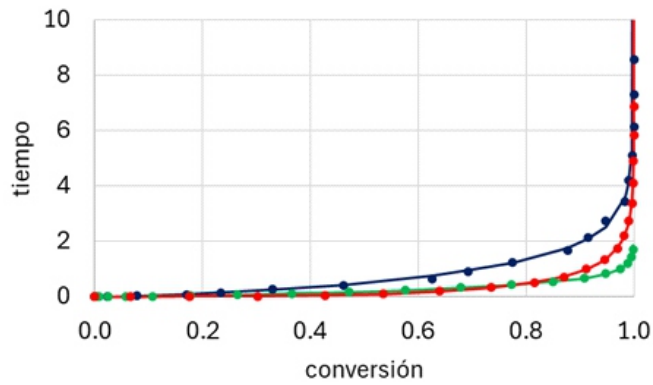


Figura 8: Evaluación para PFR. Distribución "e". Fuente: Elaboración propia.

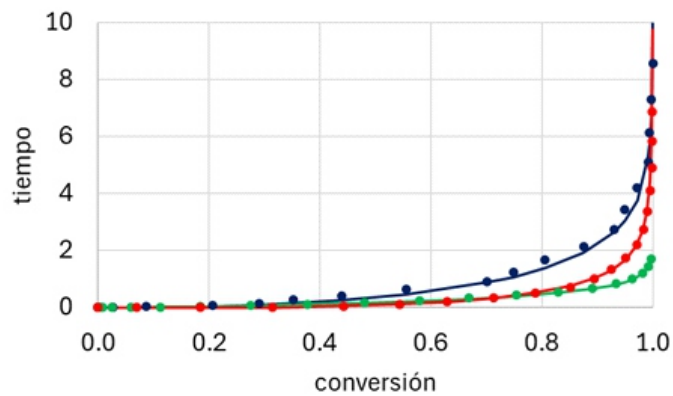


Figura 9: Evaluación para PFR. Distribución "g". Fuente: Elaboración propia.

Reactores perfectamente mezclados

Para los FBR y CSTR, la siguiente función fue la que produjo el mejor ajuste a los resultados de las simulaciones:

$$\hat{t}_d = a\hat{X}_B + b\hat{X}_B(1 - \hat{X}_B^c)^d \quad (19)$$

Los coeficientes de la ecuación anterior, obtenidos por regresión para los diferentes casos, se reportan desde la Tabla 13 a la Tabla 21. Esos coeficientes fueron redondeados considerando el error asociado a ellos. El ajuste fue casi perfecto de acuerdo con los valores del coeficiente r^2 .

Tabla 13. Coeficientes para FBR y CSTR con película controlante. Distribución "a". Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	1
Coeficientes redondeados	
a	-0.1566
b	0.039
c	0.036
d	-1

Tabla 14. Coeficientes para FBR y CSTR con reacción controlante. Distribución “a”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	1
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	0.0307
<i>b</i>	0.1715
<i>c</i>	0.55
<i>d</i>	-1

Tabla 15. Coeficientes para FBR y CSTR con ceniza controlante. Distribución “a”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	1
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	-6.429
<i>b</i>	7.025
<i>c</i>	8.93
<i>d</i>	-0.706

Tabla 16. Coeficientes para FBR y CSTR con película controlante. Distribución “e”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	1
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	0.2561
<i>b</i>	0.0404
<i>c</i>	0.051
<i>d</i>	-1

Tabla 17. Coeficientes para FBR y CSTR con reacción controlante. Distribución “e”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	1
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	0.0399
<i>b</i>	0.22464
<i>c</i>	0.7862
<i>d</i>	-1

Tabla 18. Coeficientes para FBR y CSTR con ceniza controlante. Distribución “e”. Fuente: Elaboración propia

Bondad de ajuste	
r^2	1
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	-4.359
<i>b</i>	4.926
<i>c</i>	8.24
<i>d</i>	-0.682

Tabla 19. Coeficientes para FBR y CSTR con película controlante. Distribución “g”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	1
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	0.1607
<i>b</i>	0.0286
<i>c</i>	0.0308
<i>d</i>	-1

Tabla 20. Coeficientes para FBR y CSTR con reacción controlante. Distribución “g”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	1
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	0.0716
<i>b</i>	0.1391
<i>c</i>	0.4636
<i>d</i>	-1

Tabla 21. Coeficientes para FBR y CSTR con ceniza controlante. Distribución “g”. Fuente: Elaboración propia.

Bondad de ajuste	
r^2	1
Coeficientes redondeados	
<i>a</i>	-5.143
<i>b</i>	5.72
<i>c</i>	8.25
<i>d</i>	-0.6905

De la Figura 10 a la Figura 12, se comparan las predicciones realizadas por las correlaciones (líneas) con los resultados de las simulaciones (círculos). Se consideraron las tres posibles resistencias controlantes: película (azul), reacción (verde) y ceniza (rojo). Como puede apreciarse en esas figuras, el tiempo es poco sensible a bajas conversiones; pero altamente sensible a conversiones superiores a 0.8. Las correlaciones tienen un error menor que el 10 % para conversiones mayores que 0.5.

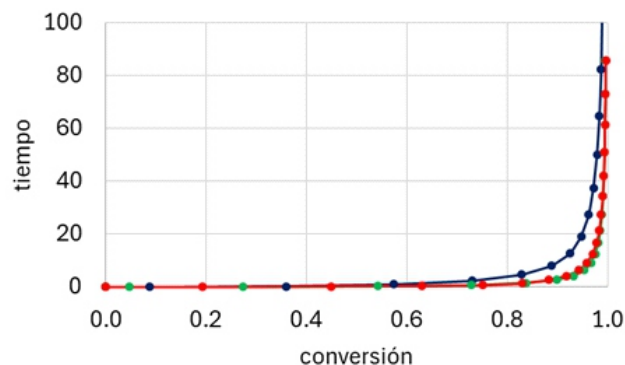


Figura 10: Evaluación para PBR y CSTR. Distribución “a”. Fuente: Elaboración propia.

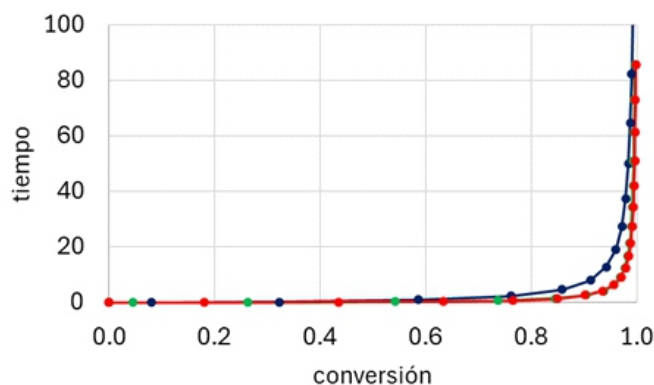


Figura 11: Evaluación para PBR y CSTR. Distribución "e". Fuente: Elaboración propia.

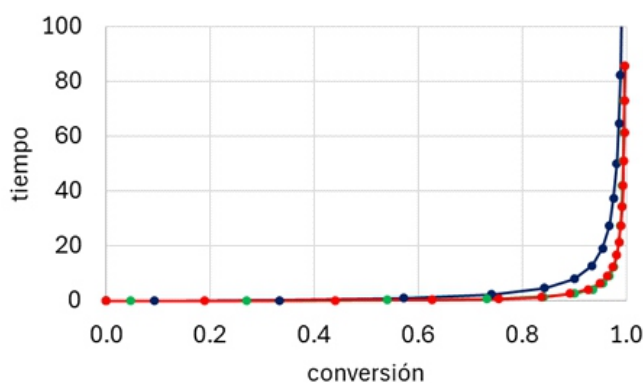


Figura 12: Evaluación para PBR y CSTR. Distribución "g". Fuente: Elaboración propia.

Redes neuronales artificiales

De todas las estructuras probadas para la RNA, la feedforward backpropagation fue la que tuvo el menor error de prueba, con un error cuadrático medio del orden de 10^{-6} . Esto ocurrió cuando la red fue configurada con una capa de entrada con una neurona, 3 capas ocultas con 10 neuronas cada una, y una capa de salida con una neurona. La función de activación empleada en las neuronas de la capa oculta fue la tangente-sigmoide. En cambio, se empleó la función lineal en la única neurona de la capa de salida.

Para cada RNA, el tamaño del conjunto de entrenamiento fue de 700 datos; el de validación, de 150 datos; y el de prueba, 150 datos. El equipo utilizado fue una notebook Intel® Core™ i7-2620M CPU @2.70 GHz, 8 GB con Windows 10. Dado el tamaño pequeño de los conjuntos y la simplicidad de cada RNA, el tiempo de entrenamiento no superó los 5 min con MATLAB.

Reactores con flujo pistón

Para los PFR, de la Figura 13 a la Figura 15, se comparan las predicciones realizadas por las

RNA (líneas) con los resultados de las simulaciones (círculos). Se consideraron las tres posibles resistencias controlantes: película (azul), reacción (verde) y ceniza (rojo). El ajuste fue casi perfecto, con errores menores que el 5 % para conversiones mayores que 0.1. En el caso de la Figura 13, el aspecto segmentado se debe a la poca cantidad de clases del histograma, $c = 5$. Sin embargo, ese comportamiento solo se presenta cuando se tiene película controlante. Para los restantes casos, el aspecto de las curvas no se modifica con $c \geq 5$.

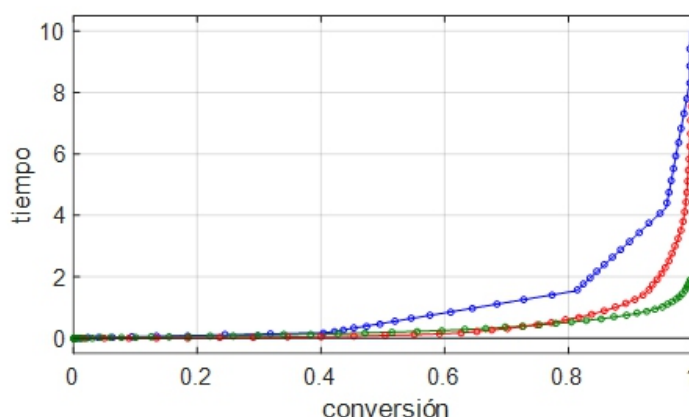


Figura 13: Evaluación para PFR. Distribución "a". Fuente: Elaboración propia.

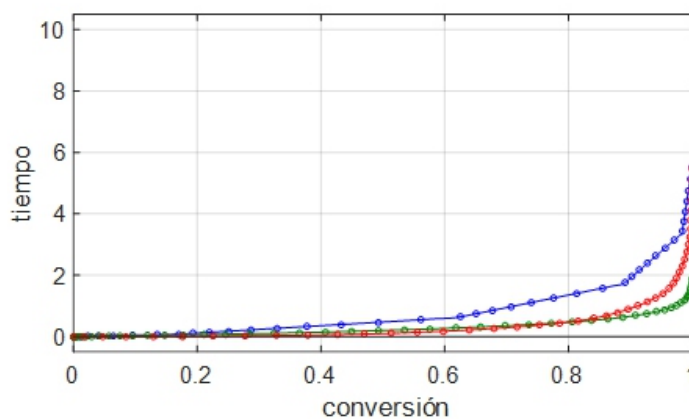


Figura 14: Evaluación para PFR. Distribución "e". Fuente: Elaboración propia.

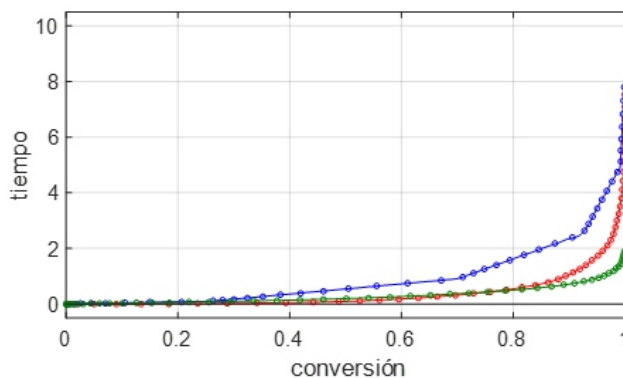


Figura 15: Evaluación para PFR. Distribución "g". Fuente: Elaboración propia.

Reactores perfectamente mezclados

Para los FBR y CSTR, de la Figura 16 a la Figura 18, se comparan las predicciones realizadas por las RNA (líneas) con los resultados de las simulaciones (círculos). Se consideraron las tres posibles resistencias controlantes: película (azul), reacción (verde) y ceniza (rojo). Como puede apreciarse en esas figuras, el tiempo es poco sensible a bajas conversiones; pero altamente sensible a conversiones mayores que 0.98. El ajuste fue casi perfecto, con errores menores que el 5 % para conversiones mayores que 0.1.

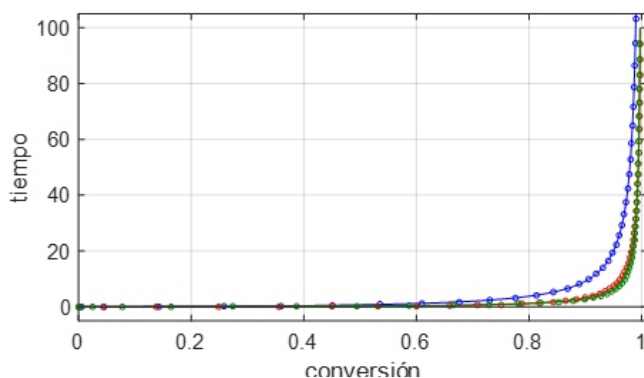


Figura 16: Evaluación para PBR y CSTR. Distribución "a". Fuente: Elaboración propia.

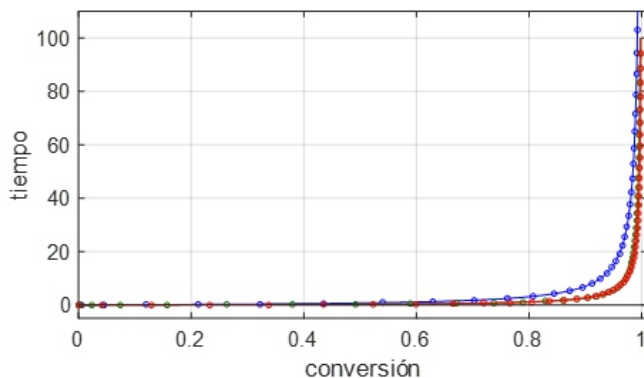


Figura 17: Evaluación para PBR y CSTR. Distribución "e". Fuente: Elaboración propia.

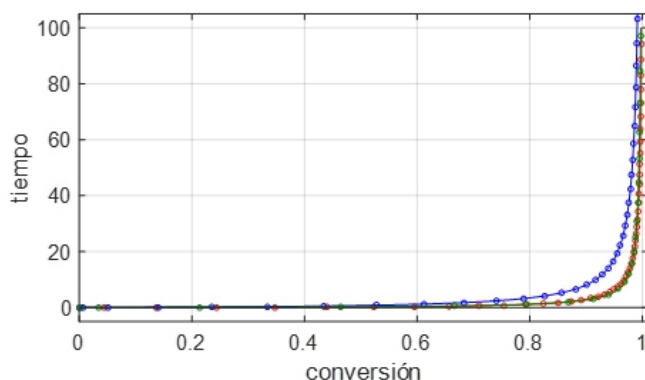


Figura 18: Evaluación para PBR y CSTR. Distribución "g". Fuente: Elaboración propia.

Análisis de resultados

Con el objetivo de cuantificar el ahorro computacional que se logra con el empleo de los modelos simplificados propuestos en este trabajo, se realizó un experimento numérico en MATLAB. El equipo utilizado fue una notebook Intel® Core™ i7-2620M CPU @2.70 GHz, 8 GB con Windows 10. En este experimento, se comparó el tiempo de procesamiento requerido por el método tradicional con el requerido por las correlaciones propuestas para un reactor tipo PFR para la distribución “e” (Tabla 2). Se eligió ese tipo de reactor porque es el caso más simple; por lo tanto, el ahorro computacional que se logre es la cota mínima para los otros tipos de reactores. La distribución “e” se escogió porque es la que tiene tamaños intermedios de las tres distribuciones consideradas.

En el método tradicional, el tiempo adimensional $\hat{t}_d$ se obtiene resolviendo una ecuación implícita, la ec. (17), mediante un algoritmo iterativo (en este caso, fzero). Este procedimiento requiere múltiples evaluaciones de esa ecuación, cada una de las cuales implica una sumatoria sobre todas las clases c de tamaño de partícula. En cambio, las correlaciones propuestas permiten calcular el tiempo mediante una única evaluación de una expresión explícita.

La resolución numérica, además de requerir múltiples evaluaciones, necesita ser inicializada. De esa inicialización depende la cantidad de iteraciones que se realizarán; más aún, de ella depende si el método convergerá. Asimismo, cabe destacar que el método numérico presenta una variabilidad en el tiempo de cálculo, especialmente para valores de conversión cercanos a la unidad, donde la función se vuelve altamente no lineal (como se observa en las Figs. 7–12).

Como se adelantó, el experimento se realizó para un reactor tipo PFR con la distribución de tamaño “e” (Tabla 2). Se evaluó un conjunto de valores de conversión en el intervalo $0.1 \leq \hat{X}_B \leq 0.95$. La Tabla 22 presenta los resultados obtenidos. Los tiempos de CPU promedio indican que las correlaciones propuestas producen una aceleración de por lo menos 590x. El gran valor que toma la aceleración para el caso de ceniza controlante se debe a que, a la resolución numérica de la ec. (17), se agrega la resolución numérica de la ec. (3) para obtener la conversión de una partícula en función del tiempo.

Tabla 22. Tiempo promedio de CPU y factor de aceleración para las correlaciones

Resistencia controlante	Método numérico (s)	Correlación (s)	Aceleración
Película	8.4×10^{-3}	1.4×10^{-5}	~590x
Reacción	7.3×10^{-3}	1.6×10^{-5}	~470x
Ceniza	1.7×10^{-1}	1.5×10^{-5}	~11100x

En cuanto a las RNA, la arquitectura seleccionada en este trabajo corresponde a una red feedforward con una sola capa oculta de 10 neuronas y una neurona de salida. La evaluación de esta red implica una única pasada hacia adelante, lo cual involucra un

número fijo de operaciones aritméticas (productos, sumas y evaluación de funciones de activación). Por el contrario, el método tradicional requiere resolver una ecuación implícita mediante un procedimiento iterativo cuya convergencia depende de la función y de la elección de valores iniciales.

Si bien el número de operaciones requeridas por una RNA es mayor que el de las correlaciones explícitas (debido al cálculo de las combinaciones lineales y funciones de activación en las neuronas), su costo sigue siendo bajo en términos absolutos. En consecuencia, se espera que el tiempo de evaluación de las RNA sea mayor que el de las correlaciones por un factor moderado; pero igualmente menor que el requerido por el método tradicional. El razonamiento planteado se confirma parcialmente con los resultados que se presentan en la Tabla 23. Para el caso de la película y reacción controlante, las RNA no aportan ninguna aceleración. Sin embargo, para el caso de ceniza controlante, la aceleración es de un orden de magnitud.

Tabla 23. Tiempo promedio de CPU y factor de aceleración para las RNA

Resistencia controlante	Método numérico (s)	RNA (s)	Aceleración
Película	7.5×10^{-3}	5.1×10^{-3}	$\sim 1.5 \times$
Reacción	5.6×10^{-3}	5.2×10^{-3}	$\sim 1 \times$
Ceniza	1.6×10^{-1}	5.2×10^{-3}	$\sim 30 \times$

La aceleración conseguida con los modelos simplificados con respecto al método tradicional es consistente con la diferencia estructural que existe entre ambos enfoques: mientras que el método tradicional requiere un procedimiento iterativo cuya convergencia depende de la elección de condiciones iniciales y del comportamiento de la función, las correlaciones y las RNA se evalúan de forma directa con un costo computacional constante.

Conclusiones

En este trabajo, se propusieron modelos simplificados, consistentes en correlaciones y RNA, para estimar el tiempo de residencia en función de la conversión para sistemas con partículas de diferentes tamaños donde el modelo de núcleo decreciente es aplicable. Se consideraron distintas resistencias controlantes para reactores con flujo pistón y para reactores perfectamente mezclados continuos.

Se propuso una forma general para las correlaciones, la cual fue evaluada para partículas con tres distribuciones de tamaño diferentes obtenidas experimentalmente. Para esas distribuciones, las correlaciones propuestas tienen un error menor que el 10 % para conversiones superiores a 0.5, lo que es suficiente para un diseño rápido o para los primeros pasos de una optimización. La aceleración lograda frente al método tradicional fue de por lo menos dos órdenes de magnitud.

Además, se desarrollaron tres RNA, una para cada distribución de tamaño experimental empleada para evaluar las correlaciones. Se probaron tres tipos distintos de RNA, de los cuales, el feed-forward backpropagation logró el mejor ajuste, con errores menores que el 5 % para conversiones mayores que 0.1. Si bien el desempeño de las RNA es superior al desempeño de las correlaciones propuestas, no se puede garantizar el cumplimiento de las condiciones matemáticas que se plantearon como deseables para las correlaciones; por lo tanto, no se puede asegurar que todas las predicciones tengan sentido físico (tiempo no negativo y tiempo creciente con la conversión). Además, solo en el caso de ceniza controlante aportaron una aceleración significativa frente al método tradicional de un orden de magnitud.

Los modelos simplificados desarrollados en el presente trabajo fueron ajustados para distribuciones de tamaño particulares; por lo tanto, no pueden aplicarse a otras distribuciones de tamaño. Sin embargo, la función empleada para las correlaciones y la estructura usada para las RNA son un buen punto de partida para desarrollar modelos simplificados para esos nuevos casos.

Referencias

- Akaike, H. (1974). A new look at the statistical model identification. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 19(6), 716-723. <https://doi.org/10.1109/TAC.1974.1100705>
- Beale, M. H., Hagan, M. T., & Demuth, H. B. (2018). *Neural Network Toolbox™ User's Guide*. The MathWorks Inc.
- Cybenko, G. (1989). Approximation by superpositions of a sigmoidal function. *Mathematics of Control, Signals, and Systems*, 2(4), 303-314. <https://doi.org/10.1007/BF02551274>
- Daş, O. (2023). Prediction of the natural frequencies of various beams using regression machine learning models. *Sigma Journal of Engineering and Natural Sciences – Sigma Mühendislik ve Fen Bilimleri Dergisi*. <https://doi.org/10.14744/sigma.2023.00040>
- Devijver, P. A., & Kittler, J. (1982). *Pattern recognition: A statistical approach*. Prentice/Hall International.
- Froment, G. F., De Wilde, J., & Bischoff, K. B. (2011). *Chemical reactor analysis and design* (3rd ed). Wiley.
- Immordino, G., Da Ronch, A., & Righi, M. (2025). Parametric Nonlinear Volterra Series via Machine Learning: Transonic Aerodynamics. *Journal of Aircraft*, 62(6), 1504-1521. <https://doi.org/10.2514/1.C038288>
- Kopal, I., Labaj, I., Harničárová, M., Valíček, J., & Hrubý, D. (2018). Prediction of the Tensile Response of Carbon Black Filled Rubber Blends by Artificial Neural Network. *Polymers*, 10(6), 644. <https://doi.org/10.3390/polym10060644>
- Levenspiel, O. (2019). *Chemical reaction engineering* (3rd ed). Wiley.
- Liu, C., Zhao, C., Wang, Y., & Wang, H. (2023). Machine-Learning-Based Calibration of

- Temperature Sensors. *Sensors*, 23(17), 7347. <https://doi.org/10.3390/s23177347>
- Lu, H., Guo, X., Liu, Y., & Gong, X. (2015). Effect of Particle Size on Flow Mode and Flow Characteristics of Pulverized Coal. *KONA Powder and Particle Journal*, 32(0), 143-153. <https://doi.org/10.14356/kona.2015002>
- Wen, C. Y. (1968). Noncatalytic heterogeneous solid-fluid reaction models. *Industrial & Engineering Chemistry*, 60(9), 34-54. <https://doi.org/10.1021/ie50705a007>
- Yagi, S., & Kunii, D. (1955). Studies on combustion of carbon particles in flames and fluidized beds. *Symposium (International) on Combustion*, 5(1), 231-244. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(55\)80033-1](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(55)80033-1)
- Yagi, S., & Kunii, D. (1961a). Fluidized-solids reactors with continuous solids feed—I: Residence time of particles in fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 16(3-4), 364-371. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(61\)80043-2](https://doi.org/10.1016/0009-2509(61)80043-2)
- Yagi, S., & Kunii, D. (1961b). Fluidized-solids reactors with continuous solids feed—II. *Chemical Engineering Science*, 16(3-4), 372-379. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(61\)80044-4](https://doi.org/10.1016/0009-2509(61)80044-4)