

Título de la propuesta:

Modelamiento y animación del proceso de emulsión en un reactor semibatch de la polimerización de PVA.

Descripción general:

En la industria de polímeros es de gran importancia entender las reacciones de polimerización con el fin de lograr que las propiedades del producto final sean siempre las mismas, o se encuentren dentro de un intervalo determinado. Para este fin, se hace necesario el desarrollo de modelos matemáticos que describan los sistemas de reacción y de esta manera el proceso pueda ser modificado para nuevos desarrollos. El modelamiento matemático constituye una solución a largo plazo para el entendimiento de los procesos de polimerización, en contraste con los modelos basados en análisis estadísticos y datos históricos de planta. Aun cuando estos dos últimos consumen menos tiempo en su desarrollo, no proveen una visión global del proceso y por tanto no pueden ser empleados en diseño de nuevos procesos o productos.

El principal objetivo es comprender cuál es la relación existente entre la calidad del polímero y diferentes aspectos involucrados en su producción tales como: el mecanismo de reacción, los fenómenos de transporte, el mezclado, el tipo de reactor y las condiciones de operación. Adicionalmente, se hace necesaria la predicción de las propiedades moleculares y morfológicas del polímero en términos de la configuración del reactor, así como las condiciones de operación. De esta manera se tiene conocimiento acerca de la calidad del producto.

La disponibilidad de un modelo matemático que prediga las propiedades moleculares del polímero producido en un reactor tiene una gran importancia económica.

Los principales retos del modelamiento de procesos de polimerización son:

- El entendimiento de las reacciones de polimerización: Las cinéticas de polimerización son complejas debido al número de reacciones diferentes que ocurren y a que éstas son fuertemente influenciadas por cambios físicos en el sistema, como el incremento de la viscosidad. La difusión puede entonces determinar la velocidad de la reacción y se establece una relación directa entre la física de los polímeros y las cinéticas de polimerización.
- El comportamiento de las fases en los sistemas poliméricos es bastante complejo. Las reacciones de polimerización pueden ser multifase, con casos extremos como la polimerización en emulsión, la cual presenta 4 fases. La multiplicidad de fases generalmente hace que el sistema se comporte de formas muy complejas.
- La habilidad para medir y caracterizar todas las variables que influyen en la calidad del polímero.
- Las limitaciones de transporte: Los polímeros poseen bajos coeficientes de transferencia de calor y de masa, así como altas viscosidades. Esto hace que los sistemas poliméricos se encuentren bastante alejados de la idealidad y presenten problemas en transferencia de calor y masa, así como mezclado deficiente.

Por las razones descritas anteriormente, el modelamiento de reactores de polimerización se considera como un procedimiento iterativo. En la primera iteración se considera únicamente la cinética de la reacción, en la segunda se incluye el comportamiento de fases y las propiedades físicas y de transporte, junto con los balances de masa y energía. En la última iteración lo que se busca es predecir las propiedades finales del polímero en función de las condiciones de operación (Seavey & Liu, 2009).

En la literatura se encuentran reportados algunos trabajos sobre modelamiento de reactores para la producción de PVA en operación batch: (Aller et al., 2009), semibatch: (Araújo & Giudici, 2003; Arora et al., 2007; Hvala et al., 2011; Miteva & Hvala, 2008) y continua (Sayer et al., 2002). En estos trabajos se obtuvieron resultados satisfactorios en cuanto a la precisión del modelo desarrollado, el cual en algunos casos fue validado con datos reales de planta (Hvala et al., 2011).

Objetivos.

- Identificar las variables del proceso de polimerización por un sistema heterofásico (emulsión) que se llevan a cabo a nivel experimental.
- Comprender los diferentes intervalos que se presentan en los procesos de emulsión.
- Diseñar una animación del proceso del proceso de emulsión y presentar un modelaje matemático para tal fin que ilustren el comportamiento de la polimerización del PVA.

Plan de trabajo.

El perfil del estudiante debe ser de la licenciatura en química o ingeniería química, gusto por trabajar en laboratorio, gusto por aprender nuevas cosas, proactivo.

CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES DEL PROYECTO						
Actividad	Semana					
	1	2	3	4	5	6
1. Revisión bibliográfica	X	X	X	X	X	X
2. Análisis de la interacción de las variables del proceso heterofásico en la polimerización	X	X				
3. Entendimiento de los intervalos (etapas) que consiste el proceso de emulsión.		X	X			
4. Diseño de la animación del proceso y propuesta del modelamiento matemático.		X	X	X	X	X
5. Escritura de resultados					X	X
6. Presentación de resultados						X

Resultados esperados

- Seguir manteniendo a la UG en el área de la ciencia y tecnología de los materiales y nanomateriales.
- Identificar claramente por parte del estudiante que es un proceso de emulsión y las variables que lo influyen, optimizando los procesos de su obtención.
- Como interacciona esta propuesta con valores experimentales.
- Formar e incentivar futuros profesionistas en el área de los materiales y en la tecnología de los polímeros.
- Animación del proceso de emulsión del PVA.
- Memoria de cálculo del proceso de emulsión.
- Escritura de los resultados obtenidos.



Dr. David Contreras López
Departamento de Ingeniería Química
david.contreras@ugto.mx
Ext. 5433