

Noemí Esteban Rodríguez

Instituto Tecnológico de Matemática Industrial, USC

Un proceso de identificación de modelos en dos etapas para reactores de tanque agitado (STR): métodos incremental e integral

El modelado matemático de procesos químicos está adquiriendo cada vez mayor importancia en la industria. Estos modelos quedan totalmente definidos cuando conocemos las reacciones que tienen lugar y sus cinéticas. Pero, conocer a priori estas últimas es una tarea difícil y normalmente es necesario plantear un problema inverso para ser capaces de identificarlas.

Entre los diferentes reactores químicos, una familia importante son los llamados reactores de tanque agitado (STR). Así que la metodología desarrollada está aplicada a ellos.

Para la solución de este problema inverso combinamos dos métodos en cascada: el método incremental y el método integral.

El método incremental para el STR se caracteriza por el desacoplamiento de las ecuaciones mediante técnicas algebraicas y la resolución directa de las ecuaciones transformadas. Por lo tanto, los modelos cinéticos y sus parámetros se pueden identificar independientemente para todas las reacciones.

A su vez, el método integral se basa en una comparación directa de las mediciones y las concentraciones calculadas, por lo que se basa en el modelo global del reactor. Las principales dificultades se encuentran en el gran número de parámetros, en la resolución del modelo, y en el cálculo de las derivadas con respecto a estos parámetros. La heurística propuesta está basada en “variable neighbourhood search” (VNS). Este método utiliza como valores iniciales de los parámetros los calculados previamente por el método incremental. La nueva solución se genera haciendo perturbaciones sucesivas tanto en la cinética y en los parámetros.

Fecha	Jueves, 28 de abril de 2016
Lugar	Aula Magna - Facultad de Matemáticas Se podrá seguir por videoconferencia desde el Campus de Lugo
Hora	12:00
Idioma	Castellano