

# ANÁLISIS DE LA TASA DE REACCIÓN EN SISTEMAS MULTICOMPONENTES REACTIVOS EN CINÉTICA QUÍMICA

V. M. ORTIZ, L. D. DONADO

Escuela de Ingeniería Civil,  
Universidad Industrial de Santander  
Bucaramanga  
ldonado@uis.edu.co

Fecha Recepción: 22 de Agosto de 2006  
Fecha Aceptación: 25 de Septiembre de 2006

## RESUMEN

Los procesos de transporte reactivo están definidos por dos procesos: el transporte hidrodinámico de solutos definido por el flujo advectivo y el flujo dispersivo, y por las reacciones químicas entre las especies involucradas. Cuando las reacciones presentes en los procesos de flujo de agua se analizan cinética química (reacciones lentas), la tasa de reacción que describe este fenómeno se puede modelar mediante una ecuación diferencial parcial no lineal y no homogénea que no tiene solución exacta debido a la complejidad de sus términos. Esta investigación presenta una aproximación numérica de dicha ecuación planteando un esquema explícito mediante el método de diferencias finitas, concluyendo que cuando los tiempos de reacción son mayores que los tiempos característicos de transporte, las reacciones químicas son mucho más representativas en el cambio de la concentración de las especies.

**Palabras Claves:** Mezcla de aguas, Reacciones cinéticas, Transporte reactivo multicomponente, Hidrogeología.

## INTRODUCCIÓN

El agua presente en los medios naturales reacciona químicamente produciendo soluciones acuosas de distintas calidades, dichas soluciones varían dependiendo de la composición del agua en la medida en que ésta es afectada por la concentración de sustancias producidas por procesos naturales y actividades humanas.

La variación de la calidad del agua no puede catalogarse de una manera negativa, sin hacer referencia al uso para el cual el agua sea destinada, ya que algunas de sus reacciones originan alteraciones negativas y otras pueden llegar a ser útiles en su consumo y aprovechamiento.

En medios porosos como los acuíferos, es muy importante conocer como evoluciona la calidad del agua en la medida en que el agua se mueve a través de los materiales térreos con los cuales interacciona. Los acuíferos en su fase natural presentan una gran variación tanto de sus propiedades físicas como químicas. Las primeras son fundamentales para determinar la hidrodinámica del agua<sup>[3]</sup> y las segundas proporcionan cambios importantes en la calidad. Así pues en conclusión el transporte de solutos en acuíferos está definido por una ecuación de balance de masas (ecuación de transporte) y por la ley de acción de masas de las reacciones químicas entre las especies involucradas.

Las reacciones químicas pueden ser clasificadas de acuerdo a su cinética, es decir analizando su tasa de reacción, como lentas o rápidas. En las reacciones rápidas (en equilibrio) la tasa de reacción es instantánea y es una función dependiente del tiempo y el espacio<sup>[2]</sup>, pero en las reacciones lentas (cinéticas) esa tasa de reacción adicionalmente es función de otras variables como las concentraciones de las especies, las componentes (que son combinaciones lineales de las concentraciones de las especies) y propiedades físicas como la temperatura, la salinidad y por lo tanto las constantes de equilibrio envueltas en el problema.

La tasa de reacción se aprecia como un término fuente/sumidero en las ecuaciones de balance de masa y su estudio es importante porque proporciona información fundamental acerca del transporte y control dinámico de la reacción global.

En sistemas de transporte reactivo en los que se tienen condiciones de no equilibrio, al analizar su tasa de reacción se observa un comportamiento no lineal, donde los fenómenos de advección y dispersión hidrodinámica deben ser tenidos en cuenta debido a su alta influencia en la reacción.

Es por esto que la ecuación que describe la tasa de reacción en un sistema multi-componente reactivo, presenta términos complejos los cuales deben ser solucionados utilizando métodos matemáticos.