# UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA



## "MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DEL PROCESO DE OBTENCIÓN DE ACETATO DE ETILO EN UN REACTOR SEMICONTINUO ESFÉRICO"

TESIS PARA OBTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE:

INGENIERO QUÍMICO

LUIS ANGEL AUQUILLA QUISPE

CALLAO, ENERO, 2017

PERÚ

#### PRÓLOGO DEL JURADO

El presente Informe fue Sustentado por el Bachiller AUQUILLA QUISPE LUIS ANGEL ante el JURADO DE SUSTENTACIÓN DE TESIS conformado por los siguientes Profesores Ordinarios:

INGº JULIO CÉSAR CALDERÓN CRUZ

PRESIDENTE

ING° CÉSAR GUTIERREZ CUBA

**SECRETARIO** 

ING° FABIO MANUEL RANGEL MORALES

VOCAL

INGº LUÍS AMÉRICO CARRASCVO VENEGAS

ASESOR

Tal como está asentado en el Libro de Actas Nº 2 de Tesis Folio Nº 87 y Acta Nº 270 de fecha **VEINTICUATRO DE MARZO DE 2017**, para optar el Título Profesional de Ingeniero Químico en la Modalidad de Titulación de Informe, de conformidad establecido por el Reglamento de Grados y Títulos aprobado por Resolución Nº 082-2011-CU de fecha 29 de abril de 2011 y Resolución Nº 221-2012-CU de fecha 19 de setiembre de 2012

### LIBRO 2 FOLIO No. 87 ACTA N° 270 DE SUSTENTACION DE TESIS SIN CICLO DE TESIS PARA LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO PROFESIONAL DE INGENIERO QUÍMICO

Ing. CALDERON CRUZ JULIO CESAR

: Presidente

Ing. GUTIERREZ CUBA CESAR

: Secretario

Ing. RANGEL MORALES FABIO MANUEL

: Vocal

Ing. CARRASCO VENEGAS LUIS AMÉRICO

: Asesor

Con el fin de dar inicio al acto de sustentación de tesis del Señor Bachiller AUQUILLA QUISPE LUIS ANGEL, quién habiendo cumplido con los requisitos para optar el Título Profesional de Ingeniero Químico, sustentan la tesis titulada "MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DEL PROCESO DE OBTENCIÓN DE ACETATO DE ETILO EN UN REACTOR SEMICONTINUO ESFÉRICO".

Con el quórum reglamentario de ley, se dio inicio a la exposición de conformidad con lo establecido por el Reglamento de Grados y Títulos vigente. Luego de la absolución de las preguntas formuladas por el Jurado y efectuadas las deliberaciones pertinentes, se acordó: Dar por aprobada con el calificativo may bueno al sustentante Señor Bachiller AUQUILLA QUISPE LUIS ANGEL.

Se dio por cerrada la Sesión a las 1210 p.m. horas del día veinticuatro del mes y año en curso.

Ing. CALDERON CRUZ JULIO CESAR

ng. GUTIERREZ CUBA CESAR Secretario

Ing. RANGEL MORALES FABIO MANUEL

Vocal

Ing. CARRASCO VENEGAS LUIS AMERICO

Asesor

#### **DEDICATORIA**

A mis padres por ser el pilar fundamental en todo lo que soy, en toda mi educación, tanto académica, como de la vida, por su incondicional apoyo perfectamente mantenido a través del tiempo, por comprensión, amor, ayuda en los momentos difíciles, y por ayudarme con los recursos necesarios para estudiar. Me han dado todo lo que soy como persona, mis valores, mis principios, mi carácter, mi empeño, mi perseverancia, mi coraje para conseguir mis objetivos.

#### **AGRADECIMIENTO**

Yo agradezco primeramente a mis padres que han dado todo el esfuerzo para que yo ahora este culminando esta etapa de mi vida y darles las gracias por apoyarme en todos los momentos difíciles de mi vida tales como la felicidad la tristeza pero ellos siempre han estado junto a mí y gracias a ellos soy lo que ahora soy y con el esfuerzo de ellos y mi esfuerzo ahora puedo ser un gran profesional y seré un gran orgullo para ellos y para todos los que confiaron en mí.

Al Ingeniero Luis Carrasco, asesor de tesis por su valiosa guía y toda la colaboración brindada durante la elaboración de este proyecto.

A mi querida universidad, porque en sus aulas he recibido las más gratas enseñanzas que me han formado profesionalmente.

Y por último a todas las personas que me ayudaron directa o indirectamente en la realización de este proyecto.

## ÍNDICE

| TABL  | AS DE CONTENIDO                                  | 4  |
|-------|--|----|
| RESU  | MEN  | 6  |
| ABST  | RACT   | 8  |
| CAPIT | TULO I   | 10 |
| PLAN  | TEAMIENTO DE LA INVESTIGACIÓN                    | 10 |
| 1.1.  | Identificación del problema                      | 10 |
| 1.2.  | Formulación de problemas                         | 11 |
| 1.3.  | Objetivos de la investigación                    | 12 |
| 1.4.  | Justificación                                    | 13 |
| 1.5.  | Importancia                                      | 14 |
| CAPIT | ULO II   | 15 |
| MARC  | O TEÓRICO  | 15 |
| 2.1.  | Antecedentes del Estudio                         | 15 |
| 2.2.  | Reacción química                                 | 18 |
| 2.3.  | Variables en las reacciones químicas             | 21 |
| 2.4.  | Reactor químico                                  | 22 |
| 2.5.  | Tipos de reactores químicos                      | 22 |
| 2.6.  | Cinética química                                 | 28 |
| 2.7.  | Acetato de etilo                                 | 29 |
| 2.8.  | Modelamiento matemático en la Ingeniería Química | 32 |
| 2.9.  | Simulación de procesos químicos                  | 34 |
| 2.10  | . Aplicaciones de la simulación de procesos      | 34 |
| CAPIT | ULO III  | 35 |
| VARIA | BLES E HIPÓTESIS                                 | 35 |
| 3.1.  | Variables de la investigación                    | 36 |
| 3.2.  | Operacionalización de variables                  | 36 |

|   | 3.3.           | Hipótesis general e Hipótesis específicas                                 | 37 |
|---|----------------|---|----|
| C | APITU          | JLO IV  | 40 |
| N | METOE          | DOLOGÍA   | 40 |
|   | 4.1.           | Tipo de Investigación   | 40 |
|   | 4.2.           | Diseño de la investigación  | 41 |
|   | 4.3.           | Determinación de los parámetros para la obtención de acetato              |    |
|   | etilo.         |   | 41 |
|   | 4.4.           | Determinación del catalizador   | 42 |
|   | 4.5.           | Determinación de la cantidad de catalizador                               | 44 |
|   | 4.6.           | Planteamiento de la configuración del sistema de reacción semicontinuo.   | 44 |
|   | 4.7.           | Diseño y construcción del reactor.  | 46 |
|   | 4.8.           | Modelamiento matemático en un sistema semicontinuo.                       | 47 |
|   | 4.9.           | Aprovisionamiento de ambientes de trabajo, reactivos y materiales.        | 57 |
|   | 4.10.          | Experimentación   | 58 |
|   | 4.11.          | Simulación del modelo matemático  | 63 |
|   | 4.12.          | Población y muestra   | 72 |
|   | 4.13.          | Técnica e instrumentos de recolección de datos                            | 72 |
|   | 4.14.          | Procedimiento de recolección de datos                                     | 73 |
|   | 4.15.          | Procesamiento estadístico y análisis de datos                             | 74 |
| C | APITU          | JLO V   | 75 |
| F | RESUL          | TADOS   | 75 |
|   | 5.1.           | Modelamiento matemático   | 75 |
|   | 5.2.           | Constantes cinéticas y de equilibrio                                      | 76 |
|   | 5.3.<br>sisten | Conversión del reactante determinado experimentalmente en na batch:       | 76 |
|   |                | Conversión del reactante determinado experimentalmente en na semicontinuo | 77 |
|   | 5.5.           | Simulación de proceso de reacción en un sistema semicontinue              | 0  |
|   |                |   | 78 |
| _ | ADITI          | II O VI   | 70 |

| DISCU                 | SION DE RESULTADOS  | 79 |
|-----------------------|---|----|
| 6.1.                  | Contrastación de la hipótesis con los resultados  | 79 |
| 6.2.                  | Contrastación de la hipótesis con otros estudios similares  | 79 |
| CAPIT                 | ULO VII   | 81 |
| CONC                  | LUSIONES  | 81 |
| CAPIT                 | ULO VIII  | 82 |
| RECO                  | MENDACIONES   | 82 |
| CAPIT                 | ULO IX  | 83 |
| REFE                  | RENCIAS BIBLIOGRAFICAS  | 83 |
| CAPIT                 | ULO X   | 85 |
| ANEX                  | os estados esta | 85 |
| 10.1 M                | ATRIZ DE CONSISTENCIA   | 86 |
| 10.1 T                | ABLAS Y GRÁFICOS  | 87 |
| 10.3 GALERIA DE FOTOS |   |    |

#### **TABLAS DE CONTENIDO**

| INIT | ICE | DE  | TA | 01 |            |
|------|-----|-----|----|----|------------|
| 1147 |     | 111 |    |    | $\Delta >$ |

| TABLA Nº 2.1 CLASIFICACIÓN DE LAS REACCIONES QUÍMICAS               | 20 |
|---|----|
| TABLA N° 3.1 OPERACIONALIZACIÓN DE LAS VARIABLES                    | 37 |
| TABLA Nº 4.1 CONCENTRACIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO VS TIEMPO               | 60 |
| TABLA N° 4.2 VOLUMEN DEL TANQUE DE ALIMENTACIÓN VS TIEMPO           | 61 |
| TABLA N° 4.3 CONCETRACIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO VS TIEMPO                | 62 |
| TABLA N° 5.1 CONSTANTES CINÉTICAS Y DE EQUILIBRIO                   | 76 |
| TABLA N °5.2 CONVERSIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO EN SISTEMA BATCH           | 77 |
| TABLA Nº 5.3 CONVERSIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO EN SISTEMA<br>SEMICONTINUO | 77 |
| TABLA Nº 5.4 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN DE LA EXPERIENCIA 1        | 78 |
| TABLA Nº 5.5 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN DE LA EXPERIENCIA 2        | 78 |
| TABLA N° 10.1 EXPERIENCIA 1 SISTEMA BATCH                           | 88 |
| TABLA N° 10.2 EXPERIENCIA 2 SISTEMA BATCH                           | 90 |
| TABLA N° 10.3 EXPERIENCIA 1 SISTEMA SEMICONTINUO                    | 92 |
| TABLA N° 10.4 EXPERIENCIA 2 SISTEMA SEMICONTINUO                    | 94 |
| TABLA Nº 10.5 EXPERIENCIA 1 SIMULACIÓN CON MATLAB                   | 97 |
| TABLA Nº 10.6 EXPERIENCIA 2 SIMULACIÓN CON MATLAB                   | 97 |
|   |    |
| NDICE DE FIGURAS  |    |
| FIGURA N° 2.1 MECANISMO DE ESTERIFICACIÓN DE FISCHER                | 31 |
| FIGURA N° 3.1 VARIABLES DE LA INVESTIGACIÓN                         | 36 |
| FIGURA N° 4.1 CONFIGURACIÓN ESPECÍFICA DEL SISTEMA<br>SEMICONTINUO  | 45 |
| GURA N° 4.2 GEOMETRÍA DEL TANQUE DE ALIMENTACIÓN                    | 50 |

La mejor condición para operar en un sistema semicontinuo es de 70°C ya que hay una mayor velocidad de reacción y mejor conversión. Se manejaron diferentes flujo de alimentación, alimentación rápida de 1200 segundos (20 minutos) y alimentación lenta de 14400 segundos (4 horas) obteniendo un rendimiento de 22.00 % y 70.19 % respectivamente.

Los resultados de la simulación con Matlab demuestran que el modelo matemático propuesto describe el comportamiento dinámico del proceso con un margen de error en sus resultados, para los ensayos realizados los valores fueron de 6.68% y 21.42% de error para un tiempo de 20 minutos y 4 horas respectivamente, sin embargo al aplicar un ajuste en la ecuación de flujo de alimentación, la simulación entrega resultados muchos más exactos, los valores fueron 4.49% y 3.96% de error. El ajuste se aplicó puesto que el planteamiento matemático del caudal de alimentación era muy distinto al registrado experimentalmente debido a diversos factores como presión interna del reactor y el radio muy pequeño

de salida del tanque de alimentación.

#### ABSTRACT

In this work one presents a methodology for the mathematical modeling of a semicontinuous process based on the laws of conservation of mass, this methodology was applied to describe the dynamics of the process of obtaining acetate of ethyl in a semicontinuous spherical reactor.

The study was carried out in the facilities of the Laboratory of Investigation "Mario Molina" of the Faculty of Chemical Engineering of the National University of the Callao. Tests were realized in a system batch in order to determine the constants of balance to different conditions of temperature, necessary to determine the kinetic constants. The reaction was in use for the above mentioned end of esterification of acetic acid with ethyl alcohol for happening acetate of ethyl, though it is true this reaction is not applied in a semicontinuous system but in constant system and / or batch, this reaction was chosen due to the viability of the process in the laboratory by his safety, the materials to using and the costs of the inputs.

Since results a value of 1.74 obtained to 50°C and one value of 2.54 to 70°C for the constants of balance The use of this one as any other definite well reaction is totally valid to demonstrate the correct functioning of the mathematical model.

The best condition to operate in a semiconstant system is of 70°C since it is a major speed of reaction and better conversion. They handled different flow of supply, rapid supply of 1200 seconds (20 minutes) and slow supply

of 14400 seconds (4 hours) obtaining a performance of 22.00 % and 70.19 % respectively.

The results of the simulation with Matlab demonstrate that the mathematical proposed model describes the dynamic behavior of the process with a margin of mistake in his results, for the realized tests the values were 6.68 % and 21.42 % were of mistake for a time 20 minutes and 4 hours respectively, Nevertheless on having applied an adjustment in the equation of flow of supply, the simulation delivers more exact great results, the values were 4.49 % and 3.96 % of mistake. The adjustment was applied since the mathematical exposition of the flow of supply was very different from the registered one experimentally due to diverse factors as internal pressure of the reactor and the very small radius of exit of the feed tank.

#### **CAPITULO I**

#### PLANTEAMIENTO DE LA INVESTIGACIÓN

#### 1.1. Identificación del problema

Actualmente es común encontrar ejemplos prácticos de modelamiento matemático en reactores por lotes o batch y reactores continuos en las distintas publicaciones científicas o en la literatura convencional de Ingeniería de las Reacciones Químicas, sin embargo no hay muchos antecedentes en sistemas semicontinuos debido a la complejidad de los casos, información que tanto estudiantes de Ingeniería lo necesitan para ampliar sus conocimientos de Ingeniería de la Reacciones Químicas como también para aquellas industrias que involucre un sistema semicontinuo y que necesitan una herramienta de control de proceso.

Aquellos procesos químicos en los que involucran reacciones químicas exotérmicas muchas veces se procesan en sistemas semicontinuos a fin de poder controlar la temperatura durante el tiempo que dura la reacción. Sin embargo el trabajar con reacciones exotérmicas a pequeña escala con materiales de laboratorio es poco viable debido al riesgo de probables accidentes por explosión y quemaduras.

El modelamiento matemático en un sistema semicontinuo es útil para pronosticar el comportamiento de infinidad de reacciones con distintas

configuraciones utilizando como herramienta un software matemático como simulador.

Una de las reacciones con mayor información con respecto a su cinética, equilibrio y más fácil de proceder tanto por su seguridad como por el costo de sus insumos es el de esterificación de ácido acético con alcohol etílico para la formación de acetato de etilo. Si bien es cierto es una reacción endotérmica, es totalmente útil para desarrollar el modelamiento matemático.

Por lo expuesto anteriormente existe la necesidad de desarrollar un modelo matemático que describa el comportamiento de la reacción en un sistema semicontinuo tomando como base la reacción de esterificación del acetato de etilo.

#### 1.2. Formulación de problemas

#### Problema general

¿Cuál es el modelo matemático que me permite predecir el comportamiento de la reacción de esterificación de ácido acético y alcohol etílico para la producción de acetato de etilo en una configuración específica de un reactor semicontinuo esférico?

#### Problemas específicos

- a) ¿Cómo debe de ser la configuración específica del reactor semicontinuo para el modelamiento y simulación del proceso de obtención del acetato de etilo?
- b) ¿Cuáles son las ecuaciones que están involucradas en el modelamiento y simulación del proceso de obtención de acetato de etilo en un reactor semicontinuo esférico?
- c) ¿Cuáles son las variables del proceso importantes en la obtención de acetato de etilo?

#### 1.3. Objetivos de la investigación

#### **Objetivo General**

Modelar y simular el proceso de obtención de acetato de etilo en una configuración específica de un reactor semicontinuo esférico.

#### Objetivos Específicos

- a) Obtener una configuración específica de un reactor semicontinuo para el modelamiento y simulación del proceso de obtención de acetato de etilo.
- b) Determinar las ecuaciones necesarias involucradas en el proceso de modelamiento y simulación del proceso de obtención de acetato de etilo.

#### 1.5. Importancia

La investigación a realizar "Modelamiento y simulación del proceso de obtención de acetato de etilo en un reactor semicontinuo esférico", constituye un complemento con respecto a los conocimientos que se tiene sobre los modelamientos matemáticos en la Ingeniería de las Reacciones Químicas ya que permite estudiar la dinámica del proceso desde el punto experimental mediante el modelamiento y simulación, lo cual constituye un aporte importante para esta área, además también sirve para el control de procesos industriales de diversas reacciones en un sistema semicontinuo.

#### CAPITULO II

#### MARCO TEÓRICO

#### 2.1. Antecedentes del Estudio

- Dolors Grau (1999). "Estudio del comportamiento de reactores discontinuos y semicontinuos: modelización y comprobación experimental". Es este trabajo se desarrolla los modelos matemáticos para sistemas continuos y semicontinuos y comprándolos entre si y comprobándolo con la parte experimental, utiliza como herramienta de simulación el Matlab. Las reacciones utilizadas fueron la de saponificación de acetato de etilo y la oxidación del tiosulfato de sodio.
- Aida Pérez, Eliana Peña, Pascual Aljibes (2003). "Modelamiento, simulación y control de un reactor exotérmico por lote utilizando Matlab-Simulink". En este trabajo se describe el comportamiento dinámico del reactor estudiado y se seleccionan los parámetros que lo representan. Se utilizó la herramienta de programación Matlab-Simulink para construir el modelo no lineal del reactor por lotes y simular las etapas de operación: calentamiento, llenado y enfriamiento.
- Oscar Rey, Mabel Rey (2002). "Modelamiento matemático de una reacción de polimerización por etapas en un reactor discontinuo". En

este trabajo se modela la policondensación para obtener analíticamente distribuciones de fracción molar y másica del producto final. La solución numérica modela una policondensación específica, dado el valor de la constante cinética y se presentan las ecuaciones para la realización de un programa de computadora. El modelo está limitado a la polimerización de un monómero bifuncional y se presenta los resultados de distribución de tamaño molecular a diferentes tiempos de reacción.

- Mauricio Ribas, Rafael Hurtado, Norge Garrido, Fidel Domenech, Raul Sabadí (2011). "Metodología para la modelación matemática de procesos. Caso de estudio, la fermentación alcohólica". En este trabajo se presenta una metodología para la modelación matemática de procesos basada en los fenómenos de transporte, y las leyes de conservación de masa, energía y momentum. Esta metodología se utilizó para describir la dinámica del proceso de fermentación alcohólica. Se determinó el área de transferencia de calor necesaria para controlar la temperatura de fermentación en el entorno de 32 °C.
- Jiří Vojtěšek, Petr Dostál (2011). "Uso del entorno de Matlab para la simulación y control de un reactor de tanque agitado continuo". En este trabajo presenta la utilidad del software Matlab en el campo de la simulación del estado de equilibrio, el comportamiento dinamico y

control de un reactor de tanque agitado continuo. El metodo de iteración simple se utilizo para el análisis de estado estacionario del sistema, mientras que el análisis de por el metodo de Runge-Kutta se utilizo para la solución numérica del conjunto de ODA. El uso de matlab con interfaz gráfica permite al usuario la posibilidad de examinar simulaciones sin cambiar el código del programa.

Ahmed D. Wiheeb, Thaer A. Abdulla, Omar S. Lateef (2011). "Estudio de proceso de simulación de acetato de etilo en una columna de destilación reactiva simulador 3.2". por Hysys En este trabajo, la columna de destilación reactiva para la producción de acetato de etilo a partir de etanol y ácido acético se ha simulado por la herramienta del simulador de HYSYS. Esta destilación reactiva es una operación prometedora en donde la reacción y la separación tiene lugar dentro de una única columna de destilación. Las propiedades termodinámicas se calculan con la Wilson, NRTL y modelos UNIQUAC del paquete de la propiedad que están disponibles en el simulador HYSYS. Los efectos de contenido de agua en la alimentación, temperatura del fondo y la relación de reflujo en la parte superior la temperatura y la conversión de etanol se estudian utilizando los tres modelos termodinámicos y tres estados de alimentación (superiores, intermedios y vertidos).

#### 2.2. Reacción química

#### 2.2.1. Definición

Según M. D. Reboiras (2006), se conoce como reacción química al proceso en el cual las sustancias originales denominados reactivos, se transforman en otras nuevas los cuales se les denomina productos de reacción. Una reacción química se puede expresar siempre de forma abreviada de la siguiente manera:

#### $REACTIVOS \rightarrow PRODUCTOS$

Simbolizando con la flecha  $(\rightarrow)$  que los reactivos se transforman en productos.

El lugar físico donde se llevan a cabo las reacciones químicas se denominan reactor químico.

Según Fogler,S. (1992), los factores que hay que tener en cuenta a la hora de llevar a cabo o desarrollar una reacción química son:

- Condiciones de presión, temperatura, y composición necesarias para que los materiales entren en estado de reacción.
- Las características termodinámicas y cinéticas de la reácción
- Las fases (sólido, líquido, gaseoso) que se encuentran presentes en la reacción.

Formas de reacción química:

 Descomposición, consiste en que una molécula se divide en moléculas más pequeñas, átomos o radicales.

- Combinación, ésta se realiza cuando una molécula o átomo se une con otra especie para formar un compuesto nuevo.
- Isomerización, en este caso la molécula no efectúa ninguna descomposición externa o adición a otra, es simplemente un cambio de configuración estructural interna.

#### 2.2.2. Tipos de Reacciones Químicas.

Jose Felipe Izquierdo. (2004) nos indica que hay diferentes maneras de clasificar las reacciones químicas pero el esquema más útil es dividirlas en dos grandes grupos, de acuerdo con el número de fases implicadas: reacciones homogéneas y heterogéneas.

Una reacción es homogénea si se realiza en una sola fase y es heterogénea cuando se requiere por lo menos, la presencia de dos fases para que pueda llevarse a cabo. En esta clasificación se entiende por fase un sistema en el cual existe homogeneidad de temperatura, presión y composición.

También puede realizarse una subdivisión de los tipos de reacciones anteriores de manera que aparecen las reacciones catalizadas y las no catalizadas. Las primeras usan materiales denominados catalizadores que actual acelerando la reacción. Un catalizador es una sustancia que incrementa la velocidad a la que una reacción química se aproxima al equilibrio sin ser consumida en el proceso.

La tabla 2.1 muestra un esquema de la clasificación realizada así como unos ejemplos de los diferentes tipos de reacciones.

TABLA N° 2.1

CLASIFICACIÓN DE LAS REACCIONES

| REACCIONES   | No catalizadas   | Catalizadas  |
|--------------|--|--|
| Homogéneas   | La mayor parte de reacciones en fase gaseosa.  | La mayor parte de reacciones en fase líquida.  |
| Heterogéneas | Tostación de minerales. Combustión de sólidos. Reacciones de neutralización gassólido. Absorción gas-líquido con reacción química. | Síntesis de amoniaco (Fe, Cr). Craqueo de naftas (Alúm, Zeol). Oxidación SO <sub>2</sub> a SO <sub>3</sub> (V <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ). Síntesis de éteres a partir de alcoholes y olefinas (Resina int. Iónico). |

Fuente: Jose Felipe Izquierdo. Cinética de las reacciones químicas. 2004

Otra clasificación de las reacciones químicas es según la entalpía, como son las reacciones endotérmicas y reacciones exotérmicas.

Las reacciones endotérmicas son aquellas donde se absorbe calor, esto significa que la energía de las moléculas de las sustancias resultantes o productos es mayor que la energía de las moléculas de las sustancias reaccionantes. El medio donde ocurre este tipo de reacción se enfría.

Las reacciones exotérmicas son aquellas reacciones donde se libera calor, esto significa que la energía de las moléculas de las sustancias resultantes o productos es menor que la energía de las moléculas de las

#### 2.4. Reactor químico

John Happel, 1981. Un reactor químico es un aparato que proporciona un espacio, aislado de los alredores, donde la reacción química puede tener lugar en las condiciones deseadas de temperatura, presión y concentración.

Las reacciones químicas como se realizan en condiciones industriales son casi siempre complejas. En un sistema de reactor existirá la reacción principal o deseada junto con una o más reacciones secundarias. Las reacciones secundarias producen subproductos indeseables y reducen así el rendimiento de la reacción.

La corriente producto del reactor debe tratarse de modo que se separe y se verifique la materia prima que o ha reaccionado y el producto deseado.

La materia prima no reaccionada puede recircularse al reactor, el producto deseado se procesa posteriormente y el subproducto no deseado se recupera y se dispone del mismo de alguna manera.

#### 2.5. Tipos de reactores químicos

Existen varias formas de clasificar los reactores químicos, ya sea según su modo de operación, según su flujo interno y según las fases que albergan.

#### 2.5.1. Según su modo de operación

#### Reactores discontinuos o batch.

En un reactor discontinuo ideal no hay entrada ni salida de reactante. Se supone además que el reactor está perfectamente agitado, esto es, que la composición es la misma en todos los puntos del reactor para un instante de tiempo dado. Como la entrada y la salida son nulas el balance de materia queda

Dado que el reactor está perfectamente agitado, esto es, todos los puntos tienen la misma composición, el volumen de control para realizar el balance es todo el reactor. Evaluando los términos:

$$\Gamma_A V = -\frac{dN_A}{dt}$$

Y teniendo en cuenta que  $N_A = N_{Ao}(1 - XA)$ , resulta

$$\Gamma_A V = N_{Ao} \frac{dX_A}{dt}$$

Integrando se obtiene la ecuación de diseño para el reactor discontinuo:

$$t = N_{Ao} \int_{0}^{X_{A}} \frac{dX_{A}}{\Gamma_{A}.V}$$

Si el volumen de reacción permanece constante puede expresarse en función de la concentración de reactivo

$$C_A = N_A / V$$

$$t = C_{A0} \int_{0}^{X_{A}} \frac{dX_{A}}{\Gamma_{A}} = -C_{A0} \int_{C_{A0}}^{C_{A}} \frac{dC_{A}}{\Gamma_{A}}$$

#### B. Reactor continuo agitado (CSTR)

El reactor continuo agitado ideal (CSTR) por sus siglas en inglés o reactor de mezcla completa supone un flujo de alimentación y salida uniforme y una agitación perfecta, esto es, en todos los puntos del reactor la composición y propiedades físicas del fluido son iguales. Por esta misma razón la corriente de salida tiene la misma composición y propiedades que el fluido que se encuentra en el interior del reactor. La operación del CSTR se realiza en condiciones de estado estacionario, esto es, no hay acumulación dentro del reactor. En esas condiciones desaparece el término de dependencia con la variable tiempo. Lógicamente, en el arranque del reactor o cuando suceden perturbaciones que modifican las condiciones de trabajo, es necesario tener en cuenta ese término y entonces se habla de estado transitorio.

Como todos los puntos del reactor tienen igual composición y propiedades el volumen de control para realizar el balance de masa es todo el reactor; en estado estacionario queda entonces.

$$ENTRADA = SALIDA + DESAPARICIÓN POR REACCIÓN$$
 
$$F_{Ao} = F_A + \Gamma_A.V = F_{Ao}.(1 - X_A) + \Gamma_A.V$$
 
$$F_{Ao}.X_A = \Gamma_A.V$$

Si se trata de un fluido que no sufre expansión ni compresión  $F_A = V.C_A$  y puede sustituirse en la expresión anterior. Suele definirse además el parámetro  $\tau = V/\nu_0$ , a veces denominado tiempo espacial (y también

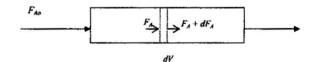
tiempo de residencia hidráulico), donde V es el volumen de reacción y v<sub>o</sub> el flujo volumétrico a la entrada, y que en los sistemas que estamos considerando coincide con el tiempo de residencia hidráulico. Por lo tanto la ecuación de diseño del CSTR puede escribirse como:

$$\tau = \frac{V}{v_0} = \frac{V.C_{A0}}{F_{A0}} = \frac{C_{A0} - C_A}{\Gamma_A} = \frac{C_{A0}.X_A}{\Gamma_A}$$

#### C. Reactor tubular flujo pistón (PFR)

El reactor tubular de flujo en pistón (PFR) se caracteriza porque el flujo de fluido a su través es ordenado, sin que ningún elemento del mismo sobrepase o se mezcle con cualquier otro elemento situado antes o después de aquel, esto es, no hay mezcla en la dirección de flujo (dirección axial). Como consecuencia, todos los elementos de fluido tienen el mismo tiempo de residencia dentro del reactor.

Como en el caso anterior estudiaremos este reactor en estado estacionario, o sea que el término de acumulación desaparece en el balance. Como la composición del fluido varía a lo largo del reactor el balance de materia debe realizarse en un elemento diferencial de volumen transversal a la dirección de flujo.



ENTRADA = SALIDA + DESAPARICIÓN POR REACCIÓN

$$F_{Aa} = F_A + dF_A + \Gamma_A dV$$

Teniendo en cuenta que

$$dF_A = d[F_{Ao}(1 - X_A)] = -F_{Ao} dX_A$$

Por sustitución queda:

$$F_{Ao}dX_A = \Gamma_A dV$$

Que integrada queda:

$$\int_{0}^{V} \frac{dV}{F_{Aa}} = \int_{0}^{X_{Af}} \frac{dC_{A}}{\Gamma_{A}}$$

O bien

$$\tau = \frac{V}{v_0} = C_{A0} \int_{0}^{X_{Af}} \frac{dX_{A}}{\Gamma_{A}} = -\int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \frac{dC_{A}}{\Gamma_{A}}$$

#### D. Reactor semicontinuo

En la mayoría de reactores químicos, la velocidad de reacción presenta considerables inhomogeneidades con el espacio (reactor tubular) y con el tiempo (reactor discontinuo). La fuerza conductora de un proceso espontáneo disminuye exponencialmente con el tiempo. La capacidad de enfriamiento y calentamiento debe ser diseñada para el momento en que se dé la máxima producción de calor por la reacción, y por lo tanto es infrautilizada durante la mayor parte de tiempo de proceso. Esta utilización puede ser incrementada aplicando la técnica de un reactor semicontinuo, por ejemplo manteniendo la velocidad de reacción neta constante y manipulando la velocidad de adición de uno de los reactivos.

Este sistema permite operar con capacidades de enfriamiento y calentamiento máximas (manteniéndose en una zona segura) y por tanto, incrementar la productividad significativamente. Por este motivo esta técnica es ampliamente utilizada en diversas industrias químicas (principalmente reacciones de fermentación). Por otra parte la mayoría de reacciones industriales son exotérmicas, y por este motivo este sistema está limitado por la posibilidad de sobredosificación que podría provocar una reacción fuera de control. En este sentido, el proceso semicontinuo es más seguro que el discontinuo, puesto que en el reactor solamente se encuentra una pequeña cantidad de reactivo no reaccionado en cada instante. Las posibles consecuencias de una reacción fuera de control provocada por la pérdida de agitación o del control de la temperatura, son menos severas que las de un proceso discontinuo.

Cuanto más tiempo trabaja el reactor a la máxima velocidad de reacción, mayor es la productividad. El proceso semicontinuo permite operar más tiempo en estas condiciones, a la vez que disminuye el tiempo muerto de vaciado y llenado, respecto al proceso discontinuo, aproximándose por lo tanto a la productividad del proceso continuo.

#### 2.5.2. Según el tipo de flujo interno

#### A. Reactores ideales

Suelen ser descritos con ecuaciones ideales sencillas y no consideran efectos físicos más complejos o perturbaciones pequeñas.

#### B. Reactores no ideales

Consideran el patrón de flujo, la existencia de zonas muertas dentro del reactor donde el material no circula, además consideran una dinámica de fluidos más compleja, suelen describirse conociendo la cinética de las reacciones, la RTD (distribución de edad del fluido) del flujo, el tipo de mezclado pudiendo ser este tardío o inmediato, y conociendo si el tipo de fluido es micro o macro fluido.

#### 2.6. Cinética química

Reymond Chang, 2002. La cinética química es el área de la química que tiene relación con la rapidez o velocidad con que ocurre una reacción química. La palabra cinética sugiere movimiento o cambio, en este caso al cambio en la concentración de un reactivo o de un producto con respecto al tiempo (M/s).

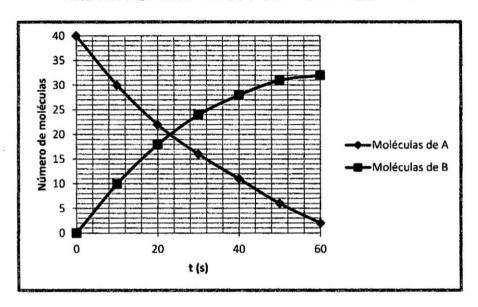
Hay muchas razones para estudiar la velocidad de una reacción. Para empezar existe una curiosidad intrínseca con respecto a la razón por las que las reacciones ocurren a diferentes velocidades.

Algunos procesos, como las etapas iniciales de visión, la fotosíntesis y las reacciones nucleares en cadena ocurren a una velocidad tan corta como de  $10^{-12}$  s o  $10^{-16}$  s. Otros como la restauración del cemento y la conversión del grafito en diamante necesita de millones de años para

completarse. En un nivel práctico el conocimiento de la velocidad de las reacciones es de gran utilidad para el diseño de fármacos, para el control de la contaminación y en el procesamiento de alimentos. Con frecuencia los químicos industriales ponen más énfasis en el aceleramiento de la velocidad de una reacción que en mejorar su rendimiento.

GRÁFICO N° 2.1

CINÉTICA QUÍMICA DE LOS COMPONENTES A Y B



FUENTE: Raymond Chang, 2002. Química. Velocidad de la reacción A B, representada como la disminución de las moléculas de A con el tiempo y como el aumento de las moléculas de B con el tiempo. Fuente: Raymond Chang. Química.

#### 2.7. Acetato de etilo

#### 2.7.1. Síntesis

La reacción de un ácido carboxílico con un alcohol para dar un éster más agua se conoce como reacción de esterificación de Fischer. Un ácido mineral, generalmente el ácido sulfúrico o el ácido clorhídrico, actúa como catalizador. Como la reacción es reversible, se puede aplicar la ley de acción de las masas. Esta ley dice que cuando se alcanza el equilibrio en una reacción reversible a temperatura constante, el producto de las concentraciones de las masas formadas dividido por el producto de las concentraciones de las sustancias reaccionantes, (estando elevada cada concentración (en mol/l) a una potencia cuyo exponente es el coeficiente de la sustancia en la ecuación química) es constante.

En la mayoría de las reacciones de Fischer, K tiene un valor de aproximadamente 4 (K=4). Por tanto, si se emplean concentraciones iguales para el alcohol y para el ácido carboxílico, el rendimiento en éster, cuando se alcanza el equilibrio es del 67% aproximadamente. Este rendimiento se puede aumentar empleando un exceso de una de las sustancias reaccionantes o eliminando el agua a medida que se forma.

De acuerdo al libro de Química Orgánica de Norman Allinger, el mecanismo de reacción implica numerosas etapas:

La reacción está catalizada por ácidos, siendo la misma misión del ácido fuerte el convertir el ácido carboxílico en su ácido conjugado. El grupo carbonilo de este experimenta un ataque nucleofilo por parte del oxígeno del alcohol, lo que produce la especie protonada indicada. La trasferencia

de protones entre átomos de oxígeno es muy rápida y la especie siguiente de las indicadas se forma por eliminación de un protón del oxígeno próximo a R' y por adición de otro protón al otro oxígeno. Los electrones pueden desplazarse como se ha indicado, expulsándose una molécula de agua y dando el ácido conjugado del éster, que pierde un protón para dar el éster.

FIGURA N° 2.1

MECANISMO DE ESTERIFICACIÓN DE FISCHER

Fuente: Norman Allinger. Química Orgánica

#### 2.7.2. Aplicaciones

Las aplicaciones del acetato de etilo más comunes en la industria química y general son las siguientes:

- Solvente para la producción de tintas en la industria gráfica.
- Solvente para pinturas de todo rubro.

- Insumo para pegamentos, adhesivos y colas industriales derivados de la celulosa.
- Insumo para la elaboración de esencias artificiales de frutas.
- Solvente para compuestos explosivos.
- Para el acondicionamiento de la lana en la industria textil para la preparación del teñido y en productos de limpieza textil.
- Insumo para elaboración de pigmentos.
- Fabricación de perfumes.
- Solventes de nitrocelulosa, barnices y lacas.

#### 2.8. Modelamiento matemático en la Ingeniería Química

El modelamiento matemático en la ingeniería química es una herramienta muy útil y conocida que por lo general se desarrolla en modelos en estado estacionario, sin embargo el uso de modelos dinámicos para las plantas químicas son desarrollos mucho más recientes, por ejemplo actualmente existe una variedad de software potentes de simulación de procesos químicos, que fueron apareciendo por la necesidad de utilizarlo como herramienta para describir, validar y controlar el proceso en distintas condiciones de operación.

Ingham et al. (1994) resumen en cuatro las características o principios del modelamiento matemático indicados por Kapur (1988):

- 1. El modelo matemático puede ser solo una aproximación del proceso real, a menudo extremadamente complejo y solo parcialmente comprendido. Naturalmente el objetivo del modelamiento es obtener una descripción lo más realística posible de los fenómenos del proceso. Pero hay que tener en cuenta que cuanto más real es el modelo implica una complejidad numérica adicional, y la necesidad de datos que pueden ser difíciles de obtener, con lo cual el tiempo necesario es mucho mayor.
- 2. El modelamiento es un proceso en continuo desarrollo, y por lo tanto, es aconsejable empezar con modelos simples para ir aumentado la complejidad. A menudo es posible considerar la planta como un sistema de módulos independientes, que se pueden modelar individualmente y combinar para formar el sistema completo.
- 3. El modelamiento es un arte, pero también un importante proceso de aprendizaje. Uno de los factores más importantes en el modelamiento es la comprensión de la secuencia causa efecto de los procesos individuales. El proceso de modelamiento, a menudo sugiere la necesidad de obtener nuevos datos o realizar nuevos experimentos para elucidar aspectos del comportamiento del proceso no bien conocidos.
- Los modelos deben ser realísticos pero también robustos. Un modelo que prediga efectos contrarios al sentido común o a la

Martínez V. 2000. La simulación de procesos químicos es una herramienta moderna que se ha hecho indispensable para la solución adecuada de los problemas de proceso. Permite efectuar el análisis de plantas químicas en operación y llevar a cabo las siguientes tareas:

- Detección de cuellos de botella en la producción.
- Predicción de los efectos de cambio de operación y capacidad de la planta.
- Optimización de las variables de operación.
- Optimización del proceso cuando cambian las características de los insumos y/o condiciones económicas del mercado.
- Análisis de nuevos procesos para nuevos productos.
- Evaluación de alternativas de proceso para reducir el consumo de energía.
- Análisis de condiciones críticas de operación.
- Transformación de un proceso para desarrollar otras materias primas.
- Análisis de factibilidad y viabilidad de nuevos procesos.
- Optimización del proceso para minimizar la producción de desechos y contaminantes.
- Entrenamiento de operadores e ingeneiros de proceso.
- Investigación de la factibilidad de automatización de un proceso.

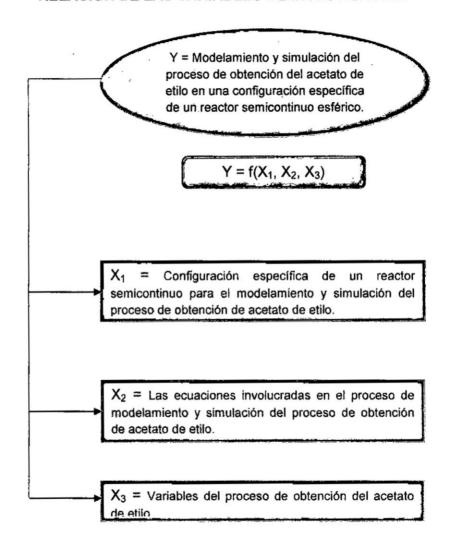
## CAPITULO III

#### **VARIABLES E HIPÓTESIS**

# 3.1. Variables de la investigación

FIGURA N° 3.1

RELACIÓN DE LAS VARIABLES DE INVESTIGACIÓN



# 3.2. Operacionalización de variables

### TABLA N° 3.1

# **OPERACIONALIZACIÓN DE LAS VARIABLES**

| VARIABLE DEPENDIENTE   | DIMENSIONES   | INDICADORES   | MÉTODO   |
|--|---|---|--|
| Y= Modelamiento y simulación del proceso de obtención del acetato de etilo en una configuración específica de un reactor semicontinuo esférico.      | <ul> <li>Variación de la<br/>conversión en<br/>función del<br/>tiempo.</li> </ul>   | Moles<br>convertidos de<br>reactivo<br>limitante por<br>mol<br>alimentado.  | Experimental y<br>lógico<br>deductivo                                |
| VARIABLES INDEPENDIENTES   | DIMENSIONES   | INDICADORES   | MÉTODO   |
| X <sub>1</sub> = Configuración específica de un reactor semicontinuo para el modelamiento y simulación del proceso de obtención de acetato de etilo. | <ul> <li>Geometría de los tanques de alimentación.</li> <li>Geometría del reactor.</li> </ul>   | Medidas del tanque.      Medidas y capacidad total del reactor.   | Observación directa.      Observación directa                        |
| X <sub>2</sub> = Las ecuaciones involucradas en el proceso de modelamiento y simulación del proceso de obtención de acetato de etilo.                | <ul> <li>Ecuación de la conservación de la materia global y de cada componente.</li> <li>Ecuación de balance de energía.</li> <li>Ecuación cinética de diseño.</li> </ul> | <ul> <li>Flujo de alimentación de cada componente.</li> <li>Temperatura del sistema.</li> <li>Constante de equilibrio químico.</li> </ul> | Lógico deductivo  Lógico deductivo  Experimental y Lógico deductivo. |
| X <sub>3</sub> = Variables del proceso de obtención del acetato de etilo.  | Parámetros fisicoquímicos del proceso.     Afinidad química del ácido acético y del etanol para producir acetato de etilo.     Flujo de alimentación de los reactantes.   | Temperatura de reacción. Constante de equilibrio químico. Relación molar de reactantes.   | Experimental.     Experimental.     Experimental.                    |

# 3.3. Hipótesis general e Hipótesis específicas

#### 3.1.1. Hipótesis General

El modelo matemático mediante el uso de un software permite predecir con un grado de precisión razonable el comportamiento de la reacción de esterificación de ácido acético y alcohol etílico para la producción de acetato de etilo en un reactor semicontinuo esférico.

#### 3.1.2. Hipótesis especificas

- a) Cuando el reactante "ácido acético" se encuentra dentro del reactor esférico y el reactante "etanol" se encuentra en un depósito cónico ubicado en la parte superior del reactor y se deja fluir por efecto de la gravedad, se produce un sistema de reacción semicontinuo para la producción de acetato de etilo, de la cual se recoge información necesaria para el modelamiento y su simulación industrial.
- b) Las ecuaciones a usar en el modelamiento y simulación del proceso de obtención de acetato de etilo son: las ecuaciones de conservación de materia, las ecuaciones de conservación de energía y las constantes de equilibrio químico.
- c) Las variables del proceso de obtención de acetato de etilo, determinan las condiciones de equilibrio y la cinética de la reacción que describen el sistema de producción.

 d) La variable más importante para la obtención de acetato de etilo es la temperatura que determinará la constante de equilibrio y la cinética de reacción.

### **CAPITULO IV**

#### **METODOLOGÍA**

## 4.1. Tipo de Investigación

El diseño de la presente investigación ha considerado seis momentos, los cuales son los siguientes.

A. Primera etapa de la investigación: Revisión bibliográfica.

En base a las referencias bibliográficas se pudo definir lo siguiente: Parámetros para la obtención de acetato de etilo y el tipo y cantidad de catalizador.

B. Segunda etapa de la investigación: Diseño del reactor.

Este momento de la investigación se subdivide en dos etapas: Planteamiento de la configuración del sistema de reacción semicontinuo y diseño del reactor.

- C. Tercera etapa de la investigación: Planteamiento del modelo matemático del sistema de reacción semicontinuo.
- D. Cuarta etapa de la investigación: Aprovisionamiento de materiales y reactivos.
- E. Quinta etapa de la investigación: Experimentación.

Este momento de la investigación se subdivide en dos etapas: Experimentación en un sistema Batch y en un sistema semicontinuo con la configuración específica planteada.

F. Sexta etapa de la investigación: Simulación y análisis de resultados.

## 4.2. Diseño de la investigación

La investigación que se realizó en el presente trabajo de tesis es:

- Aplicada por su Finalidad, puesto que sus resultados sirven para aplicarlos en la práctica.
- Experimental, por su diseño interpretativo porque en la investigación del trabajo de tesis, el estudio se realiza mediante la observación, registro y análisis de las variables intervinientes.
- Cuantitativo, por el énfasis de la naturaleza de los datos
   manejados porque las variables de la investigación son cuantitativas.

# 4.3. Determinación de los parámetros para la obtención de acetato de etilo.

Se investigó las condiciones de reacción como la temperatura, la cual las referencias bibliográficas indican que no se debe de trabajar por encima de la temperatura de ebullición (T°<sub>eb</sub>) de los reactantes, como antecedentes se tenían resultados de reacciones desde 45°C hasta 75°C

considerando que la temperatura de ebullición del etanol es 78.37°C, el del ácido acético es 118.1°C y el del acetato de etilo es 77.1°C. En base al rango mencionado se decidió trabajar con 2 temperaturas, 50°C y 70°C.

Las reacciones de esterificación de Fischer se llevan a cabo generalmente con una **relación molar** con exceso de alcohol, con la finalidad de asegurar una mayor conversión del ácido carboxílico. Referencias bibliográficas mencionan relaciones molares entre los reactantes de 1/1 hasta de 3/1 (alcohol/ácido). A fin de equiparar costos y cosumos de los reactivos se determinó usar una proporción de 4/3 (mol de alcohol/mol de ácido), manteniendo así un ligero exceso de alcohol.

#### 4.4. Determinación del catalizador

Otro parámetro importante de la reacción que afecta directamente a la cinética es el tipo de catalizador y la cantidad a usar. Las referencias bibliográficas indican que el catalizador comúnmente usado a nivel de laboratorio con fines académicos es el ácido sulfúrico, sin embargo a nivel industrial se usan resinas ácidas, por lo general tipo gel. Las resinas tienen como desventaja el mayor tiempo de reacción para llegar a una determinada conversión si lo comparamos con el ácido sulfúrico, por el contrario su principal ventaja es la facilidad de separación de esta con los insumos y productos de la reacción por lo que el uso de resinas es la mejor opción si se trata de producción industrial, otra ventaja de las resinas es que son más económicas ya que son regeneradas por una

gran cantidad de veces además que el impacto contaminante hacia el medio ambiente es mucho menor que si se usara el ácido sulfúrico.

Para nuestra investigación decidimos usar el catalizador *Ambedite IR120*  $H^{+}$  por las siguientes razones:

- Es de tipo gel microporosa, referencias bibliográficas indican que la resina Amberlite IR120 tiene comportamiento cuasihomogéneo, el efecto de difusión en la partícula es despreciable y la etapa controlante es la reacción química.
- Al ser un catalizador sólido su separación con los reactantes y productos es muy sencilla y facilita la lectura de la cinética de la reacción.
- Es una resina ácida protónica, característica fundamental para uso en esterificaciones. La resina adquirida se verificó experimentalmente determinando los equivalentes de H<sup>+</sup>/litro de la siguiente manera:
- a. Se agregó 1 gramo de resina dentro de una columna de vidrio sobre filtro de fibra de vidrio en la boquilla de descarga de la columna.
- b. Se agregó 25 ml de agua desionizada sobre la resina de modo que tanto la resina como el filtro este completamente humedecido y libre de burbujas.
- c. Se preparó 300 ml de sulfato de sodio 0.5 M y se agregó continuamente a la columna con un flujo de 2-3 ml/min de modo que siempre se mantenga un aproximado de 5 ml de solución de sulfato de sodio en la columna y así garantizar el correcto intercambio iónico.

- d. Cuando la solución de sulfato de sodio se haya agotado se agrega 50 ml de agua desionizada para limpiar los restos de sulfato de sodio sobrantes en la resina.
- e. El efluente depositado en un matraz se titula con NaOH 0.1M usando como indicador la fenolftaleína, se anota el volumen gastado y se calcula los eq/Litro de la siguiente manera.

$$Capacidad(eq/L) = \frac{mL_{NaOH} M_{NaOH}}{V_{mein q}}$$

El resultado obtenido fue 1.88 eq/L, demostrando así que la resina es tipo ácida protónica.

#### 4.5. Determinación de la cantidad de catalizador

Una vez ya definido el catalizador a usar se procede a determinar la cantidad, las referencias bibliográficas indican que la cantidad de catalizador es un parámetro importante para la cinética química y que las cantidades usadas están en el rango de 8% - 10% P/P, por lo que se consideró utilizar una cantidad única en todas nuestras experiencias de 10% P/P de resina.

# 4.6. Planteamiento de la configuración del sistema de reacción semicontinuo.

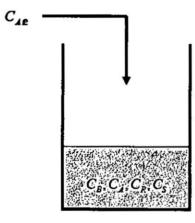
La reacción de obtención de acetato de etilo mediante la esterificación se lleva a cabo reaccionando ácido acético y alcohol etílico lo cual siempre hay un exceso de este último, por lo tanto para nuestro caso particular se optó por una alimentación continua del ácido acético y en el reactor estará el contenido en exceso de alcohol etílico.

No se consideró la opción de un flujo de salida ya que no sería conveniente por el tipo de reacción y las mediciones de concentraciones que se harían.

La configuración planteada tiene la siguiente forma:

FIGURA N° 4.1

CONFIGURACIÓN ESPECÍFICA DEL SISTEMA SEMICONTINUO



$$\begin{array}{ll} C_{E(t-0)} = C_{E0} & C_{E(t-\infty)} = C_{E-eq} \\ C_{A(t-0)} = 0 & C_{A(t-\infty)} = C_{A-eq} \\ C_{E(t-0)} = 0 & C_{E(t-\infty)} = C_{E-eq} \\ C_{S(t-0)} = 0 & C_{S(t-\infty)} = C_{S-eq} \end{array}$$

Fuente: Elaboración propia

### 4.7. Diseño y construcción del reactor.

# 4.7.1. Evaluación de materiales para la construcción del sistema de reacción

Se prefirió los materiales de vidrio por encima de los de aluminio por dos principales motivos: por su coste tanto de adquisición como de modificación y la ventaja de visibilidad del proceso de reacción, característica del vidrio transparente.

Se optó por usar como reactor un balón de 500 ml y se colocó 5 boquillas esmeriladas en su cima y una salida con válvula en la parte inferior para la toma de muestra. Para la alimentación se utilizó un embudo de vidrio, en la salida se colocó una válvula y una boquilla esmerilada.

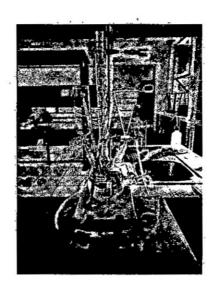
La reacción de esterificación necesita de un reflujo por lo que en una de las boquillas superiores se colocó un tubo refrigerante.

La reacción de esterificación se genera a una determinada temperatura (50°C-70°C) por lo que la transferencia de calor desde la fuente hacia el reactor tiene que ser lo más uniforme posible. Un balón más grande (1000 ml) que cubra el reactor otorga un espacio entre las superficies, ideal para el baño Maria y la uniformidad de la transferencia de calor.

#### 4.7.2. Construcción del reactor

De acuerdoa lo considerado en los puntos anteriormente mencionados se procedió a diseñar el reactor de la siguiente manera:

- Tanque esférico enchaquetado con baño de aceite.
- Tanque cónico de alimentación.
- Refrigerante



#### 4.8. Modelamiento matemático en un sistema semicontinuo.

Las referencias bibliográficas nos proveen una serie de ejemplos de modelamientos matemáticos en su mayoría en sistemas batch y continuos. Para nuestro fin es necesario conocer e interpretar las ecuaciones generales de balance de materia y energía para aplicarlo en la presente investigación con nuestra configuración específica.

# Balance de materia en el tanque de alimentación

Ecuación general de balance de materia:

FLUJO NETO DE ENTRADA + ACUMULACIÓN = 0

$$\oint \oint \rho_A \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint \rho_A \cdot dv = 0$$
(1)

- Desarrollando la primera integral

$$\oint \oint \rho_A \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA = -\iint_{Ae} \rho_A \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA + \iint_{As} \rho_A \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA \tag{2}$$

$$\oint \oint \rho_A \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA = -\rho_{Ae} \cdot \iint_{Ae} (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA + \rho_{As} \cdot \iint_{As} (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA$$
(3)

Debido a que la densidad se mantiene constante:

$$\rho_A = \rho_{Ae} = \rho_{As}$$

$$\oint \rho_{A} \cdot (\underline{V}.\underline{n}) dA = -\rho_{A} \cdot \iint_{Ae} (\underline{V}.\underline{n}) dA + \rho_{A} \cdot \iint_{As} (\underline{V}.\underline{n}) dA$$
(4)

$$\oint \rho_A \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA = -\rho_A \cdot Q_e + \rho_A \cdot Q_s$$
(5)

 Para nuestra configuración particular, el tanque está lleno con el insumo de alimentación (Ácido Acético) desde el tiempo cero, por lo que no hay un flujo de entrada en el tanque, solo flujo de salida.

$$Q_e = 0$$

$$\iint \rho_A \cdot (\underline{V} \cdot \overline{n}) dA = \rho_A \cdot Q_s \tag{6}$$

Desarrollando la segunda integral

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{v} \rho_{A} . dv = \rho_{A} . \frac{\partial v}{\partial t} + v . \frac{\partial \rho_{A}^{\prime 0}}{\partial t}$$
(7)

- Se elimina  $\frac{\partial \rho_h^{0}}{\partial t}$  debido a que la densidad se mantiene constante con el tiempo.

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{v} \rho_{A} . dv = \rho_{A} . \frac{\partial v}{\partial t}$$
(8)

 Por lo tanto el balance de materia en el tanque de alimentación está expresado de la siguiente manera:

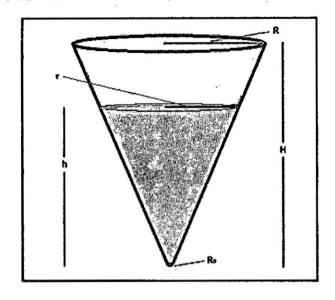
$$\oint \rho_A \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint \rho_A \cdot dv = \rho_A \cdot Q_s + \rho_A \cdot \frac{\partial v}{\partial t} = 0$$
(9)

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -Q_s \tag{10}$$

 El tanque de alimentación tiene forma cónica, por lo tanto su volumen está expresado de la siguiente forma:

FIGURA N° 4.2

# GEOMETRÍA DEL TANQUE DE ALIMENTACIÓN



Fuente: Elaboración propia

$$V_1 = \frac{1}{3}\pi . r^2 . h \tag{11}$$

- Ahora:

$$\frac{r}{R} = \frac{h}{H} \tag{12}$$

- Por lo tanto:

$$r = \frac{R.h}{H} \tag{13}$$

- Reemplazando:

$$V_1 = \frac{1}{3}\pi . \left(\frac{R}{H}\right)^2 . h^3$$
 (14)

Derivando el volumen con respecto al tiempo:

$$\frac{dV_1}{dt} = \pi \cdot \left(\frac{R}{H}\right)^2 \cdot \frac{dh}{dt} \tag{15}$$

Ahora, según Torricelli:

$$-Q_S = \pi . R_0^2 . \sqrt{2.g.h}$$
 (16)

$$\frac{dV_1}{dt} = \pi R_0^2 \sqrt{2.g.h} \tag{17}$$

- Igualando las ecuaciones

$$\frac{dh}{dt} = \frac{-H^2 \cdot R_0^2 \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot h}}{R^2 \cdot h^2}$$
 (18)

La ecuación 18 describe el comportamiento del fluido en el tanque en función del tiempo.

Posteriormente procedemos a calcular el valor de R<sub>0</sub>, de la siguiente manera:

Integrando para el vaciado total del tanque

$$\int_{h}^{0} h^{\frac{3}{2}} dh = \int_{0}^{t} \frac{-H^{2} \cdot R_{0}^{2} \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot h}}{R^{2} \cdot h^{2}} dt$$
(19)

Despejando el radio

$$R_0 = \sqrt{\frac{h^{5/2} \cdot R^2}{\sqrt{2 \cdot g} \, t \cdot H^2}} \tag{20}$$

## Balance de materia en el reactor

- De la ecuación 1. Balance de materia global

$$\oint \oint \rho_A \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint \rho_A \cdot dv = 0$$
(1)

 Procediendo de manera análoga a la resolución anterior, tenemos la ecuación 9.

$$-\rho_A \cdot Q_e + \rho_A \cdot \frac{\partial v}{\partial t} = 0 \tag{9}$$

En el reactor, el volumen está expresado como V<sub>2</sub>:

$$v = V_2$$

- Por lo tanto:

$$\frac{dV_2}{dt} = Q_e \tag{21}$$

 El flujo de salida del tanque de alimentación es el flujo de entrada al reactor, por lo tanto:

$$-Q_s = Q_e \tag{22}$$

Por lo tanto según ecuación 16:

$$Q_e = \pi . R_0^2 . \sqrt{2.g.h}$$
 (23)

Igualando las ecuaciones 21 y 23:

$$\frac{dV_2}{dt} = \pi . R_0^2 . \sqrt{2.g.h}$$
 (24)

# Balance de materia por componente:

La reacción química es la siguiente:

$$CH_3COOH + C_2H_5OH \rightleftharpoons CH_3COOC_2H_5 + H_2O$$

Para fines prácticos la reacción y los componentes se expresarán de la siguiente manera:

$$A+B \rightleftharpoons R+S$$

La velocidad de reacción del componente A (Ácido acético) es:

$$\Gamma_{A} = -K_{1}.C_{A}.C_{B} + K_{2}.C_{R}.C_{S}$$

Debido a que la relación estequiométrica entre productos y reactantes es la unidad:

$$-\frac{1}{1}\Gamma_A = -\frac{1}{1}\Gamma_B = \frac{1}{1}\Gamma_R = \frac{1}{1}\Gamma_S$$

# Balance de materia en el reactor con respecto al componente A

Ecuación general de balance de materia

$$\oint C_A \cdot (\underline{V}.\underline{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint C_A \cdot dv = \iiint \gamma_A \cdot dv$$
(25)

Desarrollando las integrales

$$-Q_{e}.C_{Ae} + \frac{\partial}{\partial t}(C_{A}.V_{2}) = \Gamma_{A}.V_{2}$$
(26)

$$-Q_{e}.C_{Ae} + V_{2}.\frac{\partial C_{A}}{\partial t} + C_{A}.\frac{\partial V_{2}}{\partial t} = \Gamma_{A}.V_{2}$$
(27)

- De la ecuación 21

$$\frac{dV_2}{dt} = Q_e \tag{21}$$

- Por lo tanto, remplazando

$$V_{2}dC_{A} = -C_{A}Q_{e} + C_{Ae}Q_{e} + \Gamma_{A}V_{2}$$
 (28)

Derivando la ecuación 28 con respecto al tiempo

$$\frac{dC_A}{dt} = -\frac{C_A \cdot Q_e}{V_2} + \frac{C_{Ae} \cdot Q_e}{V_2} + \Gamma_A \tag{29}$$

# Balance de materia en el reactor con respecto al componente B

$$\oint C_B \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint C_B \cdot dv = \iiint \gamma_B \cdot dv$$
(30)

- Desarrollando las integrales:

$$\frac{\partial}{\partial t}(C_B.V_2) = \Gamma_B.V_2 \tag{31}$$

$$V_2 \cdot \frac{\partial C_B}{\partial t} + C_B \cdot \frac{\partial V_2}{\partial t} = \Gamma_B \cdot V_2$$
(32)

- De la ecuación 21:

$$\frac{dV_2}{dt} = Q_e \tag{21}$$

- Por lo tanto, remplazando en la ecuación 26:

$$V_2 dC_B = -C_B \cdot Q_e + \Gamma_B \cdot V_2 \tag{33}$$

- Derivando la ecuación 33 con respecto al tiempo

$$\frac{dC_B}{dt} = -\frac{C_B \cdot Q_e}{V_2} + \Gamma_B \tag{34}$$

Balance de materia en el reactor con respecto al componente R

$$\oint C_R \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint C_R \cdot dv = \iiint \gamma_R \cdot dv$$
(35)

Desarrollando las integrales:

$$V_2.\frac{\partial C_R}{\partial t} + C_R.\frac{\partial V_2}{\partial t} = \Gamma_R.V_2$$
(36)

De la ecuación 21:

$$\frac{dV_2}{dt} = Q_e \tag{21}$$

Por lo tanto, remplazando en la ecuación 36:

$$V_2 dC_R = -C_R \cdot Q_e + \Gamma_R \cdot V_2 \tag{37}$$

Derivando la ecuación 37 con respecto al tiempo

$$\frac{dC_R}{dt} = -\frac{C_R \cdot Q_e}{V_2} + \Gamma_R \tag{38}$$

Balance de materia en el reactor con respecto al componente S

$$\oint C_{S} \cdot (\underline{V} \cdot \underline{n}) dA + \frac{\partial}{\partial t} \iiint C_{S} \cdot dv = \iiint \gamma_{S} \cdot dv$$
(39)

- Desarrollando las integrales:

$$V_2.\frac{\partial C_S}{\partial t} + C_S.\frac{\partial V_2}{\partial t} = \Gamma_S.V_2$$
 (40)

- De la ecuación 21:

$$\frac{dV_2}{dt} = Q_e \tag{21}$$

Por lo tanto, remplazando:

$$V_2 dC_S = -C_S \cdot Q_e + \Gamma_S \cdot V_2 \tag{41}$$

Derivando la ecuación 41 con respecto al tiempo

$$\frac{dC_S}{dt} = -\frac{C_S \cdot Q_e}{V_2} + \Gamma_S \tag{42}$$

# 4.9. Aprovisionamiento de ambientes de trabajo, reactivos y materiales.

Se solicitó el acceso al Laboratorio de Investigación de la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Callao al Decano y al Jefe de Laboratorio de Química de la Facultad de Ingeniería Química para que se ejecute las experiencias de la presente investigación, también se solicitó el uso de los materiales del Laboratorio de Investigación los cuales son los siguientes:

- Vasos precipitados
- o Buretas
- Matraces
- o Pipeta

- o Bagueta
- Soportes universales
- Agitador magnético con calentamiento
- Termómetro
- o Estufa
- o Balanza
- Fibra de vidrio

Los insumos y reactivos se adquirieron en distribuidores autorizados los cuales son los siguientes:

- Ácido acético glaciar
- Alcohol etílico 99.8 %
- Resina Amberlite IR 120<sup>+</sup>
- o Hidróxido de sodio (s)
- Biftalato de potasio
- Sulfato de sodio

# 4.10. Experimentación

# 6.10.1. Reacción en un sistema Batch

El objetivo de esta etapa de la investigación es determinar las constantes cinéticas K1 y K2, las cuales se obtienen experimentalmente cuando se

mide la cinética química de una reacción reversible desde el tiempo cero hasta que llegue al equilibrio. El procedimiento es el siguiente:

- Calentar los reactivos hasta la temperatura de reacción. En este caso se trabajó en dos condiciones, 50°C y 70°C.
- Llenar el baño maría con aceite de cocina hasta el tope y calentar la plancha magnética.
- Pesar la resina Amberlite IR120<sup>+</sup> en una relación de 1/10 con respecto al peso total de los reactivos.
- Adicionar los reactivos y el catalizador al reactor, tomar el tiempo en ese momento como t=0.
- Transcurridos 10 minutos tomar una muestra del reactor de 0.5 ml y titularla con hidróxido de sodio estandarizado. Repetir el procedimiento hasta que el volumen de hidróxido gastado sea constante.
- Elaborar una tabla Concentración de ácido acético VS tiempo y calcular su derivada en cada punto de la curva.

TABLA 4.1

CONCENTRACIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO VS TIEMPO

| TIEMPO, s | V (NaOH),<br>ml | C (Ac. Acético),<br>mol/ml | dC/dt |
|-----------|-----------------|----------------------------|-------|
| Tiempo 1  | Volumen 1       | Conc 1                     | D1    |
| Tiempo 2  | Volumen 2       | Conc 2                     | D2    |
| Tiempo 3  | Volumen 3       | Conc 3                     | ; D3  |
| Tiempo 4  | Volumen 4       | Conc 4                     | D4    |
| •••       | •••             |                            |       |
| Tiempo n  | Volumen n       | Conc n                     | Dn    |

Fuente: Elaboración propia

- Usando como herramienta el Minitab se calculas las constantes cinéticas mediante la regresión no lineal de dos variables.
- Una vez determinado las constantes cinéticas de 2 temperaturas distintas, se procede a calcular la energía de activación y el factor de frecuencia.

Para determinar la energía de activación se usa la siguiente ecuación:

$$\ln\left(\frac{k_1}{k_2}\right) = -\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$$

Para determinar el factor de frecuencia se usa la siguiente ecuación:

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{R.T}}$$

### 6.10.2. Reacción en un sistema semicontinuo

El procedimiento para un sistema semicontinuo es el siguiente:

- Agregar el alcohol etílico en exceso y la resina al 10% P/P en el reactor y calentarlo hasta la temperatura de reacción deseada.
- Calentar ácido acético hasta la temperatura de reacción y adicionarle al tanque cónico.
- Abrir la válvula del tanque de alimentación de ácido acético, tomar el tiempo en ese momento como t=0.
- Anotar el tiempo de caída cada 50 ml de ácido acético y elaborar una tabla de Volumen VS tiempo. Mediante una regresión no lineal se determina experimentalmente le expresión del flujo de alimentación.

TABLA 4.2

VOLUMEN DEL TANQUE DE ALIMENTACIÓN VS TIEMPO

| TIEMPO, s | VOLUMEN,<br>ml |  |
|-----------|----------------|--|
| Tiempo 1  | Volumen 1      |  |
| Tiempo 2  | Volumen 2      |  |
| Tiempo 3  | Volumen 3      |  |
| Tiempo 4  | Volumen 4      |  |
|           |                |  |
| Tiempo n  | Volumen n      |  |

Fuente: Elaboración propia

5. Simultáneamente al paso 4, tomar una muestra del reactor de 0.5 ml cada 10 minutos y titularla con hidróxido de sodio estandarizado. Repetir el procedimiento hasta que el volumen de ácido acético alimentado sea el necesario. En ese momento acaba la experiencia.

TABLA 4.3

CONCETRACIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO VS TIEMPO

| TIEMPO, s | V (NaOH),<br>ml | C (Ac. Acético),<br>mol/ml |
|-----------|-----------------|----------------------------|
| Tiempo 1  | Volumen 1       | Conc'1                     |
| Tiempo 2  | Volumen 2       | Conc 2                     |
| Tiempo 3  | Volumen 3       | Conc 3                     |
| Tiempo 4  | Volumen 4       | Conc 4                     |
|           |                 | •••                        |
| Tiempo n  | Volumen n       | Conc n                     |

Fuente: Elaboración propia

Se realizaron 2 experiencias con el fin de comprobar el modelo matemático con 2 flujos de alimentación distintos a las cuales se les denominó como Experiencia 1 y Experiencia 2.

# Experiencia 1:

Tiempo de operación: 14400 segundos

Tanque de alimentación

Volumen inicial: 200 mL

- Volumen alimentado al reactor: 127 ml

Concentración de A en la alimentación: 17.4592 Kmol/m³

### Reactor Esférico

Concentración de A en el inicio: 0 Kmol/m3

Concentración de B en el inicio: 16.9763 Kmol/m3

Concentración de R en el inicio: 0 Kmol/m3

- Concentración de S en el inicio: 0 Kmol/m3
- Altura inicial del reactivo B en el reactor esférico: 0.0434 m, equivalente a 200 mL.

# Experiencia 2:

Tiempo de operación: 1200 segundos

# Tanque de alimentación

- Volumen inicial: 200 mL
- Volumen alimentado al reactor: 150 ml
- Concentración de A en la alimentación: 17.4592 Kmol/m3

#### Reactor Esférico

- Concentración de A en el inicio: 0 Kmol/m3
- Concentración de B en el inicio: 16.9763 Kmol/m3
- Concentración de R en el inicio: 0 Kmol/m3
- Concentración de S en el inicio: 0 Kmol/m3
- Altura inicial del reactivo B en el reactor esférico: 0.0434 m, equivalente a 200 mL.

#### 4.11. Simulación del modelo matemático

## 4.11.1. Elección del software

Se investigó sobre los distintos software de simulación, entre ellos los Software específicos para determinado tipo de reacción o rubro de producción como el Aspen Plus, Pro II, Hysys, Speedup, Chemcad, cuya desventaja principal es que no permite introducir un modelo matemático propio para un sistema semicontinuo, en lugar de ello, el software viene precargado con distintas variables para sus propios procesos en sistemas batch y continuos.

Otro grupo de software son los de aplicación matemática como el Polymath y el Matlab. Estos softwares son los idóneos para nuestra investigación debido a que nos permite programar distintos tipos de ecuaciones de acuerdo a las condiciones elegidas para nuestra simulación. Se eligió usar el Matlab puesto que es un software mucho más completo y universalmente utilizado con una comunidad muy extendida como en industrias, universidades, centros de investigación y en medios virtuales como en foros y webs.

#### 4.11.2 Programación en Matlab:

## A. SISTEMA SEMICONTINUO (70°C). EXPERIENCIA 1.

```
function [ semc ] = semil( t,y )
%UNTITLED2 Summary of this function goes here
%    Detailed explanation goes here
pi= 3.1416;
Al=2.92305*10^-8;
```

```
Ea1=48.556337;
Rg=8.314;
T3=70+273.15;
K1=A1*2.71828183^(-Ea1/(Rg*T3));
A2=1.1441*10^-8;
Ea2=30.954975;
K2=A2*2.71828183^{-Ea2/(Rg*T3)};
h20= 0.091039251;
H20= 0.12738874;
g=9.81;
R20=H20/3.29;
tf = 14400;
R0=(0.4*(H20^2.5-
h20^2.5) *R20^2/((2*g) ^0.5*tf*H20^2)) ^0.5;
QS=pi*R0^2*(2*g*y(6))^0.5;
Ra = -K1*y(1)*y(2) + K2*y(3)*y(4);
Rb=Ra;
Rr=-Ra;
Rs=-Ra;
Cae = 17459.2;
R3=0.0492;
V3=pi*(R3*y(5)^2-(y(5)^3)/3);
semc(1) = -y(1) *QS/V3+QS*Cae/V3+Ra;
semc(2) = -y(2) *QS/V3+Rb;
```

```
semc(3) =-y(3)*QS/V3+Rr;
semc(4) =-y(4)*QS/V3+Rs;
semc(5) =QS/(2*pi*R3*y(5)-pi*y(5)^2);
semc(6) = -R0^2*3.29^2*((2*g*y(6))^0.5)/(y(6)^2)
semc=[semc(1) semc(2) semc(3) semc(4) semc(5)
semc(6)]';
end
tinic = 0;
tf = 14400;
intervalo=[tinic,tf];
cinic=[0 16976 0 0 0.0434 0.127388744];
[t y] = ode45('semil',intervalo,cinic);
plot(t,y)
```

# B. SISTEMA SEMICONTINUO (70°C). EXPERIENCIA 2.

```
function [ semc ] = semi2( t,y )
%UNTITLED2 Summary of this function goes here
%    Detailed explanation goes here
pi= 3.1416;
A1=2.92305*10^-8;
Ea1=48.556337;
Rg=8.314;
T3=70+273.15;
```

```
K1=A1*2.71828183^{-Ea1/(Rg*T3)};
A2=1.1441*10^-8;
Ea2=30.954975;
K2=A2*2.71828183^{(-Ea2/(Rg*T3))};
h20= 0.08024988;
H20= 0.12738874;
q=9.81;
R20=H20/3.29;
tf = 1200;
R0 = (0.4*(H20^2.5-
h20^2.5) *R20^2/((2*g) ^0.5*tf*H20^2)) ^0.5;
QS=pi*R0^2*(2*g*y(6))^0.5;
Ra=-K1*y(1)*y(2)+K2*y(3)*y(4);
Rb=Ra:
Rr=-Ra;
Rs=-Ra;
Cae = 17459.2;
R3=0.0492;
V3=pi*(R3*y(5)^2-(y(5)^3)/3);
semc(1) = -y(1) *QS/V3+QS*Cae/V3+Ra;
semc(2) = -y(2) *QS/V3+Rb;
semc(3) = -y(3) *QS/V3+Rr;
semc(4) = -y(4) *QS/V3+Rs;
semc(5) = QS/(2*pi*R3*y(5)-pi*y(5)^2);
```

Los resultados de la simulación no fueron muy exactos, esto debido que se estaba asumiendo que el flujo de entrada del componente A tenía un comportamiento ideal tal como se describe en el modelo matemático.

Para comprobar la veracidad del modelo matemático general se procedió a determinar la expresión matemática de cada experiencia que describa el flujo de alimentación del componente A determinado con valores experimentales.

Para ello se grafica un diagrama volumen vs tiempo del tanque de alimentación a partir de los datos de la tabla 4.3, se determina la expresión matemática y se reemplaza en el balance de materia del tanque cónico.

# C. SISTEMA SEMICONTINUO (70°C). EXPERIENCIA 1. MODIFICADO

```
function [ semc ] = semilmod( t,y )
%UNTITLED2 Summary of this function goes here
    Detailed explanation goes here
pi = 3.1416;
A1=2.92305*10^-8;
Ea1=48.556337;
Rg=8.314;
T3=70+273.15;
K1=A1*2.71828183^{(-Ea1/(Rg*T3))};
A2=1.1441*10^-8;
Ea2=30.954975;
K2=A2*2.71828183^{(-Ea2/(Rg*T3))};
QS=0.1686/((1193.14+t)^2);
Ra = -K1*y(1)*y(2) + K2*y(3)*y(4);
Rb=Ra;
Rr=-Ra;
Rs = -Ra;
Cae = 17459.2;
R3=0.0492;
V3=pi*(R3*y(5)^2-(y(5)^3)/3);
semc(1) = -y(1) *QS/V3+QS*Cae/V3+Ra;
semc(2) = -y(2) *QS/V3+Rb;
```

```
semc(3) =-y(3) *QS/V3+Rr;
semc(4) =-y(4) *QS/V3+Rs;
semc(5) =QS/(2*pi*R3*y(5)-pi*y(5)^2);
semc(6) = 0.1686/((1193.14+t)^2);
semc=[semc(1) semc(2) semc(3) semc(4) semc(5)
semc(6)]';
end
tinic = 0;
tf = 14400;
intervalo=[tinic,tf];
cinic=[0 16976 0 0 0.0434 0];
[t y] = ode45('semilmod',intervalo,cinic);
plot(t,y)
```

# D. SISTEMA SEMICONTINUO (70°C). EXPERIENCIA 2. MODIFICADO

```
function [ semc ] = semi2mod( t,y )
%UNTITLED2 Summary of this function goes here
%    Detailed explanation goes here
pi= 3.1416;
A1=2.92305*10^-8;
Ea1=48.556337;
Rg=8.314;
T3=70+273.15;
```

```
K1=A1*2.71828183^{-1}(Rg*T3);
A2=1.1441*10^-8;
Ea2=30.954975;
K2=A2*2.71828183^{-Ea2/(Rq*T3)};
QS=-1*(-1.747E-07 + 2.138E-11*t + 7.722E-14*t^2);
Ra = -K1*y(1)*y(2)+K2*y(3)*y(4);
Rb=Ra;
Rr=-Ra:
Rs = -Ra;
Cae = 17459.2;
R3=0.0492;
V3=pi*(R3*y(5)^2-(y(5)^3)/3);
semc(1) = -y(1) *QS/V3 + QS*Cae/V3 + Ra;
semc(2) = -y(2) *QS/V3+Rb;
semc(3) = -y(3) *QS/V3 + Rr;
semc(4) = -y(4) *QS/V3+Rs;
semc(5) = QS/(2*pi*R3*y(5)-pi*y(5)^2);
semc(6) = -1.747E-07 + 2.138E-11*t + 7.722E-14*t^2;
semc=[semc(1) semc(2) semc(3) semc(4) semc(5)]
semc(6)]';
end
tinic = 0;
tf = 1200;
intervalo=[tinic,tf];
```

```
cinic=[0 16976 0 0 0.0434 0.0002];
[t y]= ode45('semi2mod',intervalo,cinic);
plot(t,y)
```

#### 4.12. Población y muestra

La investigación empleó como población el contenido de la reacción de esterificación del pacido acético y el alcohol etílico en el balón de 500 mL.

Se tomó como muestra alícuotas de 0.5 mL cada determinado tiempo para su respectivo análisis cuantificación de la conversión instantánea.

#### 4.13. Técnica e instrumentos de recolección de datos

#### A) Técnicas

- Análisis de documentos.
- Observación directa.
- Medición de los parámetros del proceso.

#### **B) Instrumentos**

- Referencias bibliográficas.
- Materiales de medición de parámetros fisicoquímicos.
  - o Termómetro.
  - o Cronómetro.

- Indicadores de PH (Fenolftaleína).
- o Hidróxido de sodio estandarizado
- o Bureta
- Matraz

#### 4.14. Procedimiento de recolección de datos

4.14.1. Determinación de constante de equilibrio y constantes cinéticas.

Esta información se obtuvo experimentalmente reaccionando ácido acético con alcohol etílico en el reactor bajo condiciones estacionarias o batch.

Esta experiencia tuvo como objetivo calcular la conversión por cada intervalo de tiempo hasta que la conversión sea constante, con esta información se obtenía la constante de equilibrio y las constantes de velocidad.

4.14.2. Determinación del flujo de alimentación en régimen semicontinuo.

Esta información se obtuvo elaborando una curva de Volumen de caída versus Tiempo por cada experiencia.

Se graduó el tanque cónico cada 50 ml, durante la experiencia se anotó el tiempo cada vez que el nivel del líquido alimentado llegaba a la marca llenando así la tabla antes mencionada.

### 4.15. Procesamiento estadístico y análisis de datos

Para el análisis estadístico de datos se empleará:

- Gráficas y tablas de la concentración vs tiempo.
- Gráficas y tablas de flujo de alimentación vs tiempo

#### **CAPITULO V**

#### **RESULTADOS**

#### 5.1. Modelamiento matemático

El modelo matemático para un sistema semicontinuo para la obtención de acetato de etilo en un reactor esférico es el siguiente:

- Expresión para el balance de materia del tanque de alimentación:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{-H^2 \cdot R_0^2 \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot h}}{R^2 h^2}$$

$$\frac{dV_1}{dt} = \pi . R_0^2 . \sqrt{2.g.h}$$

Relación de velocidades cinéticas por componente:

$$-\frac{1}{1}\Gamma_{A} = -\frac{1}{1}\Gamma_{B} = \frac{1}{1}\Gamma_{R} = \frac{1}{1}\Gamma_{S}$$

- Expresión para el balance de materia en el reactor:

$$\frac{dV_2}{dt} = \pi . R_0^2 . \sqrt{2.g.h}$$

- Expresión para el balance de materia en el reactor por componente:

$$\frac{dC_A}{dt} = -\frac{C_A \cdot Q_e}{V_2} + \frac{C_{Ae} \cdot Q_e}{V_2} + \Gamma_A$$

$$\frac{dC_B}{dt} = -\frac{C_B.Q_e}{V_2} + \Gamma_B$$

$$\frac{dC_R}{dt} = -\frac{C_R.Q_e}{V_2} + \Gamma_R$$

$$\frac{dC_s}{dt} = -\frac{C_s \cdot Q_e}{V_2} + \Gamma_s$$

#### 5.2. Constantes cinéticas y de equilibrio

Se realizó experiencias para 50°C y 70°C, las constantes fueron las siguientes:

TABLA N°5.1

CONSTANTES CINÉTICAS Y DE EQUILIBRIO

| k1  | 1.00E-08              |  |  |
|-----|-----------------------|--|--|
| k2  | 5.77E-09              |  |  |
| Keq | 1.7338                |  |  |
| k1  | 2.87E-08              |  |  |
| k2  | 1.13E-08              |  |  |
| Keq | 2.5365                |  |  |
|     | k2<br>Keq<br>k1<br>k2 |  |  |

Fuente: Elaboración propia

## 5.3. Conversión del reactante determinado experimentalmente en sistema batch:

$$X_A = \frac{(moles iniciales de A - moles en equilibrio de A)}{moles iniciales de A}$$

TABLA N°5.2

#### CONVERSIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO EN SISTEMA BATCH

| Temperatura | Conversión<br>(moles convertidos/moles iniciales) | Porcentaje |
|-------------|---|------------|
| 50°C        | 0.6475  | 64.7%      |
| 70°C        | 0.698   | 69.8%      |

Fuente: Elaboración propia

## 5.4. Conversión del reactante determinado experimentalmente en sistema semicontinuo:

TABLA N°5.3

#### CONVERSIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO EN SISTEMA SEMICONTINUO

| Experiencia | tiempo, segundos | Concentración<br>final de Ácido<br>Acético Kmol/m3 |       | Conversión<br>(%) |  |
|-------------|------------------|--|-------|-------------------|--|
| E1          | 14400            | 2.02147  | 0.702 | 70.19%            |  |
| E2          | 1200             | 5.74333  | 0.220 | 22.00%            |  |

## 5.5. Simulación de proceso de reacción en un sistema semicontinuo:

TABLA N° 5.4

RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN DE LA EXPERIENCIA 1

| Experiencia 1   | tiempo,<br>segundos | Concentración<br>final de Ácido<br>Acético Kmol/m3 | Conversión<br>(moles<br>convertidos/moles<br>alimentados) | % de Error |
|---|---------------------|--|---|------------|
| RESULTADO<br>EXPERIMENTAL                               | 14400               | 2.02147  | 0.702   | -          |
| SIMULACION<br>CON EL MODELO<br>MATEMÁTICO               | 14400               | 2.454467   | 0.638   | 21.42%     |
| SIMULACION<br>CON EL MODELO<br>MATEMÁTICO<br>MODIFICADO | 14400               | 1.941477   | 0.714   | 3.96%      |

Fuente: Elaboración propia

TABLA N° 5.5

RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN DE LA EXPERIENCIA 2

| Experiencia 2   | tiempo,<br>segundos | Concentración<br>final de Ácido<br>Acético Kmol/m3 | Conversión<br>(moles<br>convertidos/moles<br>alimentados) | % de Error |
|---|---------------------|--|---|------------|
| RESULTADO EXPERIMENTAL                                  | 1200                | 5.74333  | 0.220   | ,          |
| SIMULACION<br>CON EL MODELO<br>MATEMÁTICO               | 1200                | 6.127261   | 0.168   | 6.68%      |
| SIMULACION<br>CON EL MODELO<br>MATEMÁTICO<br>MODIFICADO | 1200                | 6.001198   | 0.185   | 4.49%      |

#### **CAPITULO VI**

#### **DISCUSION DE RESULTADOS**

#### 6.1. Contrastación de la hipótesis con los resultados

#### Respecto a hipótesis general:

De acuerdo a los resultados se cumple con la hipótesis general ya que se logró demostrar que el modelo matemático describe satisfactoriamente el comportamiento del sistema de reacción semicontinuo para la obtención de acetato de etilo.

#### Respecto a las hipótesis específicas:

De acuerdo a los resultados la ecuación general de balance de materia es la base para el desarrollo del modelo matemático, así como la configuración del sistema planteado nos brinda información fundamental que complementa la ecuación general de balance de materia.

Según los valores obtenidos el control de las variables del proceso determinaron correctamente la cinética de la reacción, además se demostró que la temperatura es la variable más importante en una reacción de esterificación ya que de ella depende la conversión final.

#### 6.2. Contrastación de la hipótesis con otros estudios similares

De acuerdo a la investigación realizada por Dolors Grau Vilalta denominada "Estudio del comportamiento de reactores discontinuos y

semicontinuos" los resultados de la simulación fueron acordes con los observados experimentalmente, en el caso de la presente investigación se concluyó de igual manera corroborando así el funcionamiento del modelo matemático planteado.

#### **CAPITULO VII**

#### CONCLUSIONES

- a. El modelo matemático planteado nos describe de manera óptima el comportamiento de la reacción en un sistema semicontinuo para un reactor esférico.
- b. Las dimensiones del tanque de alimentación son muy pequeñas por lo que el flujo de salida tiene un comportamiento muy distante a su simulación con el modelo planteado.
- c. Es necesario describir exactamente el flujo de alimentación para que los resultados finales de la simulación sean acordes a lo evidenciado experimentalmente.
- d. Teniendo la información completa de una reacción se puede demostrar el planteamiento de un modelo matemático de un determinado sistema de reacción.

#### **CAPITULO VIII**

#### **RECOMENDACIONES**

- a. Utilizar un tanque de alimentación de mayor capacidad y por ende el orificio de salida de mayor radio para que el comportamiento del flujo de salida se asemeje al modelo desarrollado.
- b. Desarrollar el modelo matemático con configuraciones distintas y/o reacciones distintas para sistemas semicontinuos y así generar un mayor historial en la Facultad de Ingeniería Química para sus alumnos de pregrado y público en general.
- c. Utilizar otro software matemático como herramienta de simulación y compararlo con el Matlab.

#### **CAPITULO IX**

#### REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- IZQUIERDO, JOSE FELIPE. Cinética de las reacciones químicas.
   España. Edicions Universitat Barcelona. 2004.
- DOMINGUEZ REBOIRAS, MIGUEL ANGEL. Química, la ciencia básica. España. Editorial Paraninfo. Primera Edición. 2008.
- HAPPEL, JOHN & DONALD, JORDAN. Economía de los procesos químicos. New York. Editorial Reverté. S.A. Segunda Edición. 1981.
- OLIVER SMITH, L & STANLEY J. CRISTOL. Química Orgánica. New York.
   Editorial Reverté S.A. 1972.
- MARTINEZ SIFUENTES, VICTOR HUGO & OTROS. Simulación de Procesos en Ingeniería Química. México. Plaza Valdéz. S.A. 2003.
- CARRASCO VENEGAS, LUIS. Fenómenos de Transporte. Perú.
   Alfaomega Grupo Perú Editor.
- AIDA PÉREZ, ELIANA PEÑA, PASCUAL ALJIBES. Modelamiento, simulación y control de un reactor exotérmico por lote utilizando Matlab-Simulink. Venezuela. Revista Ingeniería UC. Vol. 10, No 2. 2003.
- OSCAR REY, MABEL REY. Modelamiento matemático de una reacción de polimerización por etapas en un reactor discontinuo.
   Bucaramanga. Tesis de pregrado. Universidad Industrial de Santander. 2009.

- MAURICIO RIBAS & OTROS. Metodología para la modelación matemática de procesos. Caso de estudio, la fermentación alcohólica. Cuba. Instituto Cubano de Investigaciones de los Derivados de la Caña de Azúcar. Volumen 45. 2011.
- 10. JIŘÍ VOJTĚŠEK, PETR DOSTÁL. Use of MATLAB Environment for Simulation and Control of CSTR. USA. International Journal of Mathematics and Computers in Simulation. Issue 6, Volumen 5. 2011.
- 11.AHMED D. WIHEEB, THAER A. ABDULLA, OMAR S. LATEEF.

  Process simulation study of ethyl acetate reactive distillation

  column by hysys® 3.2 simulator. IRAQ. Diyala Journal of

  Engineering Sciences. Volumen 4, 2011.

# CAPITULO X ANEXOS

#### 10.1 TABLAS Y GRÁFICOS

TABLA N° 10.1

EXPERIENCIA 1 SISTEMA BATCH

|           |                |       |            |            | EXPERIEN   | ICIA 1-SISTEMA | BATCH -50°C |             |             |  |                             |
|-----------|----------------|-------|------------|------------|------------|----------------|-------------|-------------|-------------|--|-----------------------------|
| tiempo, s | Tiempo,<br>min | VNaOH | CAt        | CBt        | CRt        | CSt            | Xt          | Cat*CBt     | CRTCSt      | dCA/dt (con<br>regresión no<br>lineal) | dCA/dt (con ec<br>cinética) |
| 0         | 0              |       | 7362.84443 | 9817.12591 | 0          | 0              | 0           | 72281970.78 | 0.00000     | -0.60285                               | -0.72372                    |
| 1200      | 20             | 34.7  | 6823.45591 | 9277.73739 | 539.388519 | 539.388519     | 0.07325817  | 63306232,01 | 290939.97   | -0.54106                               | -0.63217                    |
| 1800      | 30             | 31.2  | 6135.21108 | 8589.49255 | 1227.63335 | 1227.63335     | 0.16673357  | 52698349.87 | 1507083.64  | -0.51142                               | -0.51893                    |
| 2400      | 40             | 29.2  | 5741.92832 | 8196.20979 | 1620.91611 | 1620.91611     | 0.22014809  | 47062049.10 | 2627369.04  | -0.48262                               | -0.45603                    |
| 3000      | 50             | 27.6  | 5427.30211 | 7881.58358 | 1935.54232 | 1935.54232     | 0.2628797   | 42775735.19 | 3746324.08  | -0.45464                               | -0.40665                    |
| 3600      | 60             | 26.6  | 5230.66073 | 7684.9422  | 2132.1837  | 2132.1837      | 0.28958696  | 40197325.37 | 4546207.34  | -0.42751                               | -0.37622                    |
| 4800      | 80             | 24.2  | 4758.72141 | 7213.00289 | 2604.12302 | 2604,12302     | 0.35368437  | 34324671,30 | 6781456.68  | -0.37574                               | -0.30451                    |
| 6000      | 100            | 21.9  | 4306.44624 | 6760.72771 | 3056,39819 | 3056.39819     | 0.41511106  | 29114710.42 | 9341569.91  | -0.32731                               | -0.23756                    |
| 7200      | 120            | 20    | 3932.82761 | 6387.10909 | 3430.01681 | 3430.01681     | 0.46585485  | 25119399.00 | 11765015.35 | -0.28222                               | -0.18356                    |
| 8400      | 140            | 18.1  | 3559.20899 | 6013.49047 | 3803.63544 | 3803.63544     | 0.51659864  | 21403269.34 | 14467642.55 | -0.24047                               | -0.13075                    |
| 9600      | 160            | 17.6  | 3460.8883  | 5915.16978 | 3901.95613 | 3901.95613     | 0.52995227  | 20471741.87 | 15225261.63 | -0.20206                               | -0.11705                    |
| 10800     | 180            | 16.5  | 3244.58278 | 5698.86426 | 4118.26165 | 4118.26165     | 0.55933025  | 18490436.85 | 16960079.00 | -0.16700                               | -0.08719                    |
| 12600     | 210            | 15.8  | 3106.93382 | 5561,21529 | 4255.91061 | 4255,91061     | 0.57802533  | 17278327.84 | 18112775.15 | -0.12065                               | -0.06840                    |
| 14400     | 240            | 15.2  | 2988.94899 | 5443.23046 | 4373.89544 | 4373.89544     | 0.59404969  | 16269538.18 | 19130961.34 | -0.08183                               | -0.05242                    |
| 16200     | 270            | 14.8  | 2910.29243 | 5364.57391 | 4452.55199 | 4452.55199     | 0.60473259  | 15612478.87 | 19825219.26 | -0.05052                               | -0.04183                    |
| 18000     | 300            | 13.5  | 2654.65864 | 5108.94012 | 4708.18579 | 4708.18579     | 0.63945203  | 13562492.02 | 22167013.43 | -0.02672                               | -0.00778                    |
| 19800     | 330            | 13.3  | 2615,33036 | 5069.61184 | 4747.51407 | 4747.51407     | 0.64479348  | 13258709.77 | 22538889.80 | -0.01044                               | -0,00259                    |
| 21600     | 360            | 13.2  | 2595.66623 | 5049.9477  | 4767.1782  | 4767.1782      | 0.6474642   | 13107978.69 | 22725988.03 | -0.00167                               | 0.00000                     |
| 22800     | 380            | 13.2  | 2595.66623 | 5049.9477  | 4767.1782  | 4767.1782      | 0.6474642   | 13107978.7  | 22725988.03 | o                                      | o                           |

GRÁFICO Nº 10.1

EXPERIENCIA 1 SISTEMA BATCH

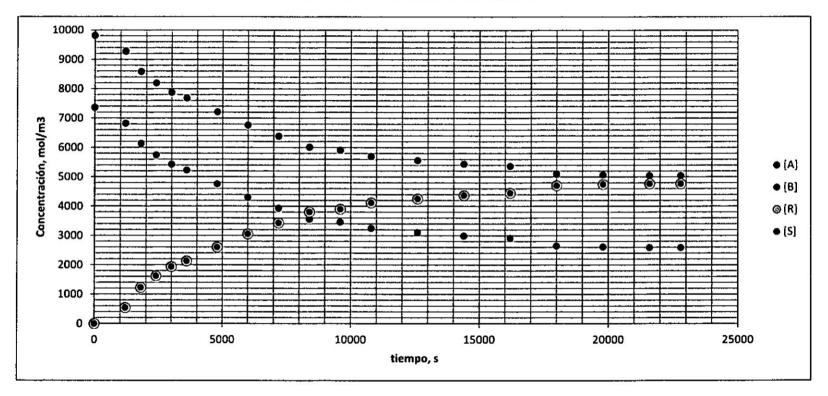


TABLA N° 10.2

EXPERIENCIA 2 SISTEMA BATCH

|              |                |       |            |            | EXPERIENC  | IA 2- SISTEM | A BATCH -70° | C           |             |  |                             |
|--------------|----------------|-------|------------|------------|------------|--------------|--------------|-------------|-------------|--|-----------------------------|
| Tiempo,<br>s | Tiempo,<br>min | VNaOH | CAt        | CBt        | CRt        | CSt          | Xt           | Cat*CBt     | CRt*CSt     | dCA/dt (con<br>regresión no<br>lineal) | dCA/dt (con<br>ec cinética) |
| 0            | 0              |       | 7362.84443 | 9817.12591 | 0          | 0            | 0            | 72281970.78 | 0.00000     | -1.82958                               | -2.07498                    |
| 1200         | 20             | 24.9  | 5035.69799 | 7489.97947 | 2327.14644 | 2327.14644   | 0.31606622   | 37717274.57 | 5415610.54  | -1.28497                               | -1.02145                    |
| 2400         | 40             | 19.4  | 3923.39522 | 6377.6767  | 3439.44921 | 3439.44921   | 0.46713593   | 25022146.29 | 11829810.84 | -0.86083                               | -0.58442                    |
| 3600         | 60             | 15.7  | 3175.11881 | 5629.40029 | 4187.72561 | 4187.72561   | 0.56876465   | 17874014.77 | 17537045.83 | -0.54210                               | -0.31463                    |
| 5400         | 90             | 13.6  | 2750.42139 | 5204.70287 | 4612.42304 | 4612.42304   | 0.62644581   | 14315126.12 | 21274446.26 | -0.22870                               | -0.17017                    |
| 7200         | 120            | 12.2  | 2467.28978 | 4921.57126 | 4895.55465 | 4895.55465   | 0.66489992   | 12142942.46 | 23966455.33 | -0.06776                               | -0.07734                    |
| 7800         | 130            | 11.9  | 2406.61872 | 4860.9002  | 4956.22571 | 4956.22571   | 0.67314008   | 11698333.40 | 24564173.29 | -0.03921                               | -0.05782                    |
| 9000         | 150            | 11.5  | 2325.72397 | 4780.00545 | 5037.12046 | 5037.12046   | 0.68412697   | 11116973.26 | 25372582.50 | -0.00847                               | -0.03198                    |
| 9600         | 160            | 11.3  | 2285.2766  | 4739.55808 | 5077.56783 | 5077.56783   | 0.68962041   | 10831201.16 | 25781695.07 | -0.00251                               | -0.01914                    |
| 10200        | 170            | 11.2  | 2265.05291 | 4719.33439 | 5097.79152 | 5097.79152   | 0.69236714   | 10689542.10 | 25987478.35 | -0.00031                               | -0.01275                    |
| 10800        | 180            | 11    | 2224.60554 | 4678.88701 | 5138.23889 | 5138.23889   | 0.69786058   | 10408677.97 | 26401498.90 | 0.00000                                | 0.00000                     |

GRÁFICO Nº 10.2 EXPERIENCIA 2 SISTEMA BATCH

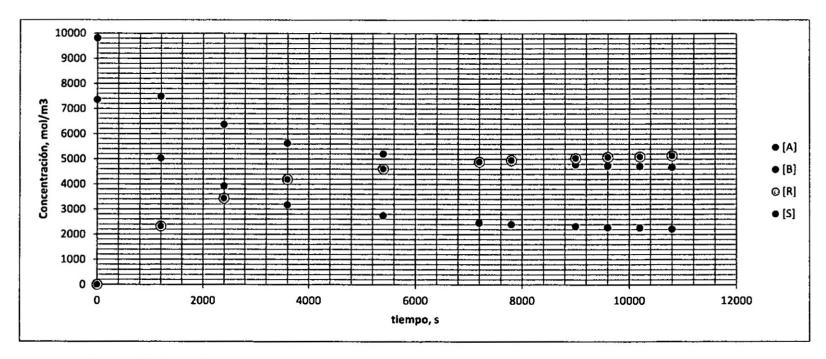


TABLA N° 10.3

EXPERIENCIA 1 SISTEMA SEMICONTINUO

| 0       0       0       0.00000000       0.00000000       0.0000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.000000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.00000000       0.0000000000       0.000000000       0.000000000       0.000000000       0.000000000       0.000000000       0.000000000       0.000000000000       0.0000000000       0.00000000000       0.00000000000       0.0000000000       0.00000000000       0.00000000000       0.00000000000       0.000000000000000       0.0000000000000       0.0000000000000       0.00000000000000       0.000000000000000       0.000000000000000       0.00000000000000000000000        0.000000000000000000000000000000       0.00000000000000000000000000000000000 |                          |       |           |                      |       |           |              |       |           |                   |
|--|--------------------------|-------|-----------|----------------------|-------|-----------|--------------|-------|-----------|-------------------|
| Tiempo,min   | Tiempo, s                | V1 ml | V1 m3     | CA1 (mol/m3)         | V2 ml | ≥V2 m3    | CA2 (mol/m3) | V3 ml | V3 m3     | CA3 (mol/m3)      |
| 0  | <b>3.</b> 0 <b>3.</b> 3. | 0.0   | 0.0000000 | 0.00                 | 0.0   | 0.0000000 |              | 0.0   | 0.0000000 | (8%) 0.00         |
| 10   |                          | 14.9  | 0.0000149 | \$ 72924.26 <b>3</b> | 14.4  | 0.0000144 | 2826:13      | 14.4  | 0.0000144 | %¥2826:13 €       |
| 20   | 1200                     | 15.9  | 0.0000159 | 3120.52              | 16.1  | 0.0000161 | 3159.77      | 1.    |           | <b>经验经济分析</b>     |
| . 30   | 1800                     | 16.0  | 0.0000160 | 3140 14              | 15.5  | 0.0000155 | 3042.01      | 17.2  | 0.0000172 | 3375.65           |
| 40   | 2400                     | 15.5  | 0.0000155 | 3042.01              | 16.2  | 0.0000162 | 3179.39      | 15.6  | 0.0000156 | 3061.64           |
| 50 .   | 3000                     | 16.1  | 0.0000161 | ₩ 3159.77 <b>₩</b>   | 15.4  | 0.0000154 | 3022.39      | 15.3  | 0.0000153 | 3002.76           |
| 100  | 6000                     | 15.5  | 0.0000155 | 3042.01              | 16.1  | 0.0000161 | 3159.77      |       |           | (C) (C) (S) (A)   |
| 140  | 8400                     |       |           |                      |       |           |              | 14.5  | 0.0000145 | £ 2845.75         |
| 160  | 259600 ⅓                 | 14.0  | 0.0000140 | <b>2747.63</b> 🙀     | 13.8  | 0.0000138 | 2708:37      | 14.5  | 0.0000145 | <b>₩ 2845</b> 75₩ |
| 180  | 10800                    | 11.2  | 0.0000112 | 2198-10              | 11.6  | 0.0000116 | 2276.60      | 11.0  | 0.0000110 | 2158.85           |
| 220,   | 13200                    | 11.1  | 0.0000111 | 2178.47              | 11.0  | 0.0000110 | 2158.85e     | 11.5  | 0.0000115 | %2256.98 <b>3</b> |
| 240  | <b>14400</b>             | 10.2  | 0.0000102 | ÷2001 84             | 10.4  | 0.0000104 | 2041.09      | 10.3  | 0.0000103 | 2021.47           |

GRÁFICO Nº 10.3

EXPERIENCIA 1 SISTEMA SEMICONTINUO

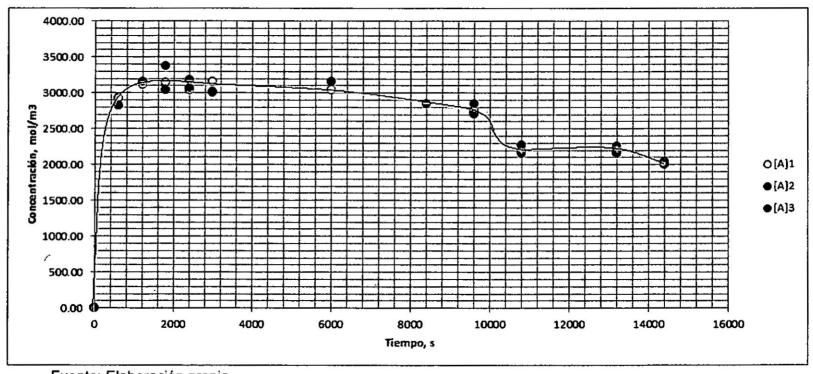


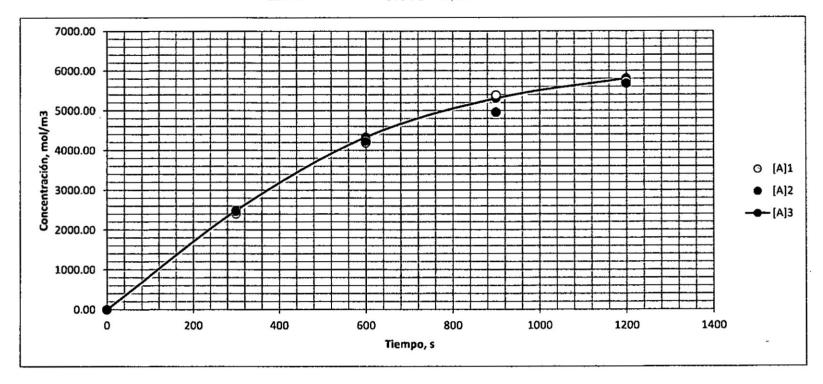
TABLA N° 10.4

EXPERIENCIA 2 SISTEMA SEMICONTINUO

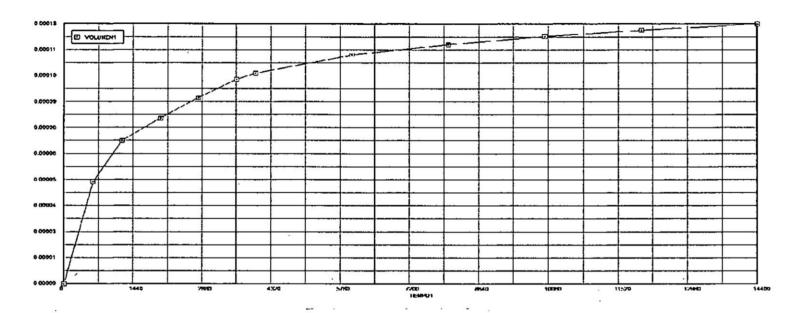
|            | •         |       | EX        | PERIENCIA 2- SI | STEMA | SEMICONTI | NUO-70°C     |       |           |              |
|------------|-----------|-------|-----------|-----------------|-------|-----------|--------------|-------|-----------|--------------|
| Tiempo,min | Tiempo, s | V1 ml | V1 m3     | CA1 (mol/m3)    | V2 ml | V2 m3     | CA2 (mol/m3) | V3 ml | V3 m3     | CA3 (mol/m3) |
| 0          | O         | 0.0   | 0.0000000 | 0.00            | 0.0   | 0.0000000 | 0.00         | 0.0   | 0.0000000 | 0.00         |
| 5          | 300       | 11.6  | 0.0000116 | 2405.15         | 11.9  | 0.0000119 | 2467.35      | 12.0  | 0.0000120 | (2488.09)    |
| 10         | 600       | 20.2  | 0.0000202 | 4188.28         | 20.4  | 0.0000204 | 4229.75      | 20.9  | 0.0000209 | 4333:42      |
| 15         | 900       | 26.0  | 0.0000260 | 5390:86         | 23.9  | 0:0000239 | 4955.44      | 25.6  | 0.0000256 | 5307.92      |
| 20         | 1200      | 27.7  | 0.0000277 | 5743:33         | 27.4  | 0.0000274 | ., 5681:13   | 28.0  | 0.0000280 | 5805.54      |

GRÁFICO Nº 10.4

EXPERIENCIA 2 SISTEMA SEMICONTINUO



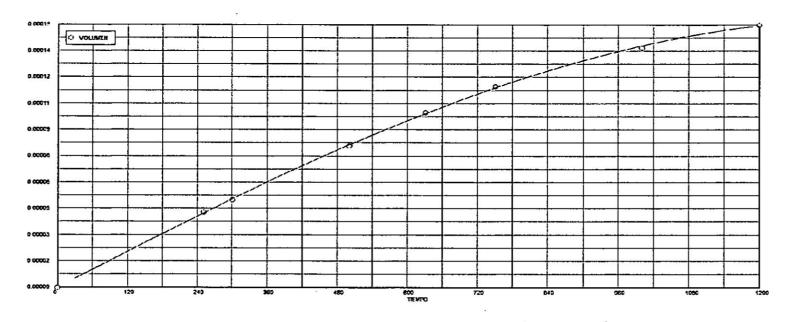
## GRÁFICO Nº 10.5 EXPERIENCIA 1 FLUJO DE ALIMENTACIÓN



VOLUMEN m3 = 0.000134818 \* TIEMPO / (1193.14 + TIEMPO)

 $d(V) / d(t) = 0.1686/((1193.14+t)^2)$ 

### GRÁFICO Nº 10.6 EXPERIENCIA 2 FLUJO DE ALIMENTACIÓN



VOLUMEN = a0 + a1\*TIEMPO + a2\*TIEMPO^2 + a3\*TIEMPO^3

 $d(V) / d(t) = -7.698E-14*x^2 - 2.256E-11*x + 0.0000001752$ 

TABLA N° 10.5

EXPERIENCIA 1 SIMULACIÓN CON MATLAB

|             |   | SIMULACIÓ   | N CON MODELO MATE | MÁTICO      |   | SIMULACIÓN CON MODELO MATEMÁTICO MODI |               |             |  |  |  |
|-------------|---|-------------|-------------------|-------------|---|---------------------------------------|---------------|-------------|--|--|--|
| -           |   | Variable    | Valor inicial     | Valor final |   | Variable                              | Valor inicial | Valor final |  |  |  |
| S           | 1 | Tiempo, s   | 0.00000           | 14400.00    | 1 | Tiempo, s                             | 0.00000       | 14400.00    |  |  |  |
| S           | 2 | [A] Kmol/m3 | 0.00000           | 2.454467    | 2 | [A] Kmol/m3                           | 0.00000       | 1.941477    |  |  |  |
| EXPERIENCIA | 3 | [B] Kmol/m3 | 16.97634          | 6.279182    | 3 | [B] Kmol/m3                           | 16.97634      | 5.544814    |  |  |  |
| ᄍ           | 4 | [R] Kmol/m3 | 0.00000           | 4.213552    | 4 | [R] Kmol/m3                           | 0.00000       | 4.838784    |  |  |  |
|             | 5 | [S] Kmol/m3 | 0.00000           | 4.213552    | 5 | [S] Kmol/m3                           | 0.00000       | 4.838784    |  |  |  |

TABLA N° 10.6

EXPERIENCIA 2 SIMULACIÓN CON MATLAB

|          |   | SIMULACIÓ   | N CON MODELO MATE | MÁTICO      |   | SIMULACIÓN CON MODELO MATEMÁTICO M |               |             |  |  |  |
|----------|---|-------------|-------------------|-------------|---|------------------------------------|---------------|-------------|--|--|--|
| 7        | П | Variable /  | Valor inicial     | Valor final |   | Variable                           | Valor inicial | Valor final |  |  |  |
| S        | 1 | Tiempo, s   | 0.00000           | 1200.00     | 1 | Tiempo, s                          | 0.00000       | 1200.00     |  |  |  |
| E        | 2 | [A] Kmol/m3 | 0.00000           | 6.127261    | 2 | [A] Kmol/m3                        | 0.00000       | 6.001198    |  |  |  |
| PER      | 3 | [B] Kmol/m3 | 16.97634          | 8.575076    | 3 | [B] Kmol/m3                        | 16.97634      | 8.462047    |  |  |  |
| <b>~</b> | 4 | [R] Kmol/m3 | 0.00000           | 1.238862    | 4 | [R] Kmol/m3                        | 0.00000       | 1.358317    |  |  |  |
|          | 5 | [S] Kmol/m3 | 0.00000           | 1.238862    | 5 | [S] Kmol/m3                        | 0.00000       | 1.358317    |  |  |  |

GRÁFICO N° 10.7

EXPERIENCIA 1 SIMULACIÓN CON MODELO MATEMÁTICO

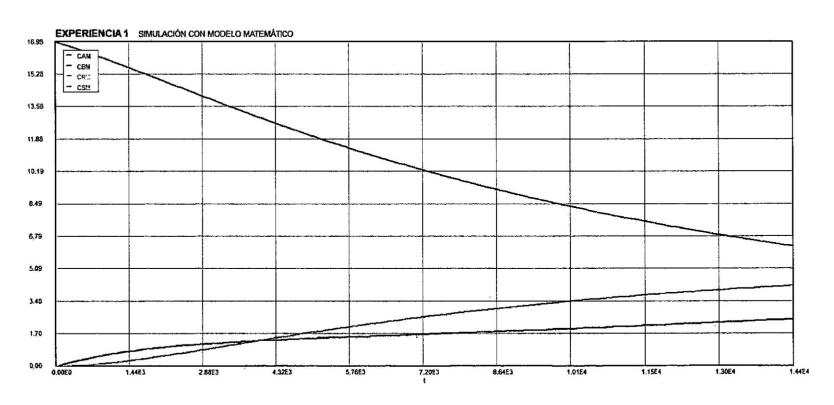


GRÁFICO Nº 10.8

EXPERIENCIA 1 SIMULACIÓN CON MODELO MATEMÁTICO MODIFICADO

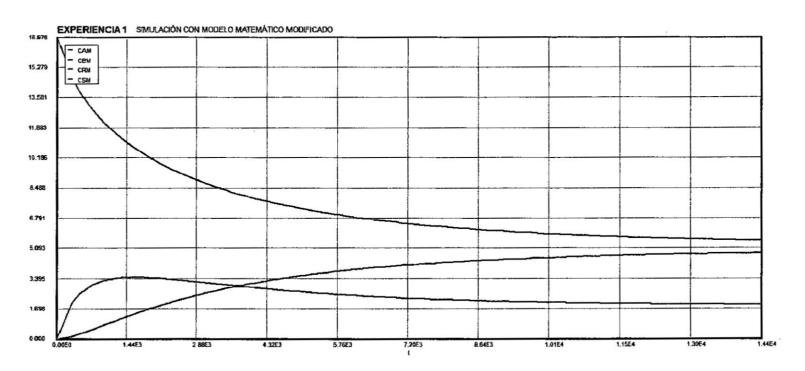


GRÁFICO Nº 10.9

EXPERIENCIA 2 SIMULACIÓN CON MODELO MATEMÁTICO

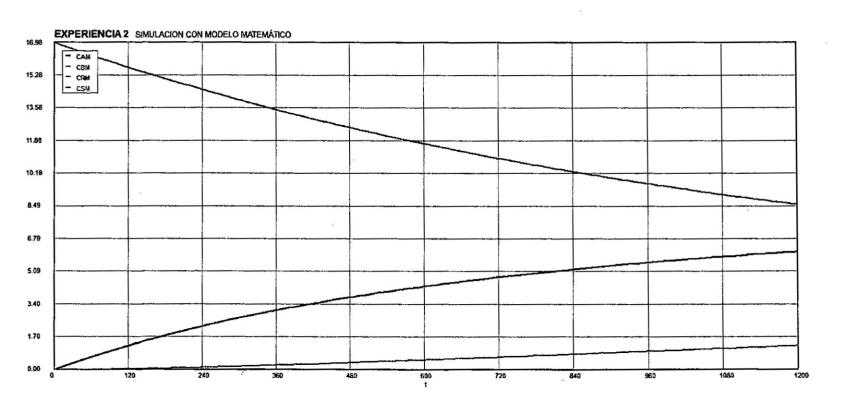
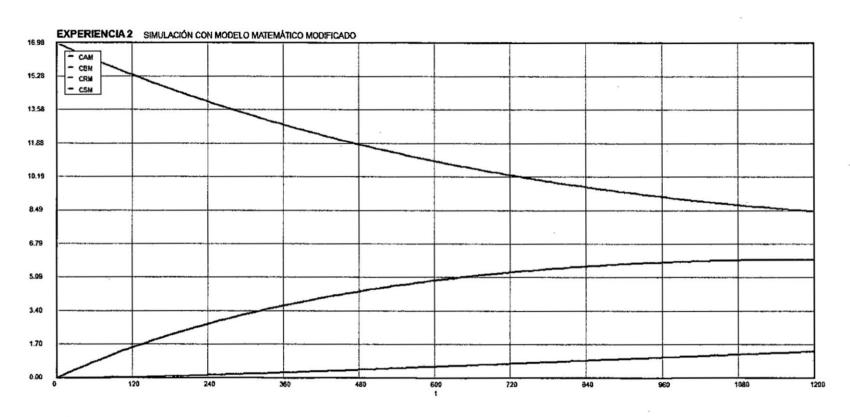


GRÁFICO Nº 10.10

EXPERIENCIA 2 SIMULACIÓN CON MODELO MATEMÁTICO MODIFICADO



#### **10.3 GALERIA DE FOTOS**

FOTO N° 1

### REACTOR ESFÉRICO EN UN SISTEMA DE REACCIÓN SEMICONTINUO

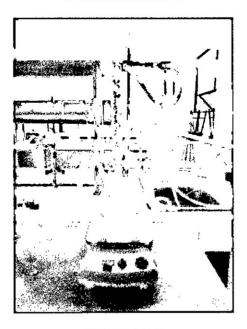


FOTO N° 2

REACTOR ESFÉRICO CON TANQUE DE ALIMENTACIÓN CÓNICO

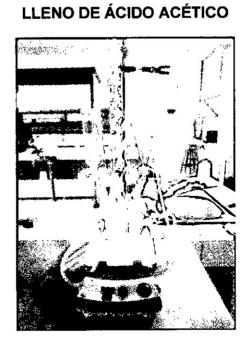


FOTO N° 3

PROCESO DE REACCIÓN DE ESTERIFICACIÓN

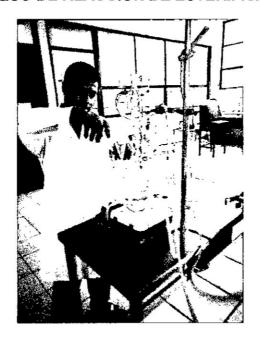


FOTO N° 4

RECEPCIÓN DE MUESTRA Y RETORNO AL REACTOR



# FOTO N° 5 TITULACIÓN DE LA MUESTRA PARA DETERMINAR CONCENTRACIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO

