

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA
ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA



**“MODELADO Y SIMULACIÓN DE LA SÍNTESIS DE
ACETATO DE BUTILO EN UN REACTOR
SEMICONTINUO ESFÉRICO”**

**TESIS PARA OPTAR EL TITULO PROFESIONAL DE
INGENIERO QUÍMICO**

Carlos Alberto, Duran Huamani

Christian Kenyi, Tamara Luna

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Carlos Alberto Duran Huamani', written over a horizontal line.

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Christian Kenyi', written over a horizontal line.

CALLAO, 2021

PERÚ

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Tamara Luna', written over a horizontal line.

PRÓLOGO DEL JURADO

La presente tesis fue sustentada por el señor bachiller **DURAN HUAMANI CARLOS ALBERTO** y el señor bachiller **TAMARA LUNA CHRISTIAN KENYI**, ante el **JURADO DE SUSTENTACIÓN DE TESIS** conformado por los siguientes Profesores Ordinarios:

ING° CARLOS ALEJANDRO ANCIETA DEXTRE	PRESIDENTE
LIC. SALVADOR APOLINAR TRUJILLO PÉREZ	SECRETARIO
ING° GLADIS ENITH REYNA MENDOZA	VOCAL
ING° CARLOS ERNESTO ANGELES QUEIROLO	ASESOR

Tal como está asentado en el Libro de Actas N° 008-2021-JS-FIQ de fecha **ONCE DE JULIO DE 2021**, para optar el Título Profesional de Ingeniero Químico en la Modalidad de Titulación de Tesis con Ciclo de Tesis, de conformidad establecido por el Reglamento de Grados y Títulos aprobado por Resolución N° 245-2018-CU de fecha 30 de octubre de 2018.

DEDICATORIA

Este trabajo es dedicado a nuestros padres quienes nos apoyaron de manera abnegada en nuestro camino de formación, Alberto Duran y Sabina Huamani, Alejandro Tamara y Marcelina Luna. A todos nuestros familiares y amigos de la universidad por su apoyo y motivación constante.

AGRADECIMIENTO

A nuestros profesores de la facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Callao, y de manera muy especial a los Ingenieros: Carlos Angeles Queirolo, Luis Carrasco Venegas y Bernardino Ramírez Durand, quienes nos apoyaron de manera voluntaria con su tiempo, conocimiento y consejos para culminar el presente trabajo.

ÍNDICE

TABLAS DE CONTENIDO	5
RESUMEN	9
ABSTRACT	10
INTRODUCCIÓN	11
I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	13
1.1 Descripción de la realidad problemática	13
1.2 Formulación del problema	14
1.2.1 Problema general	14
1.2.2 Problemas específicos	14
1.3 Objetivos de la investigación	14
1.3.1 Objetivo General	14
1.3.2 Objetivos Específicos	15
1.4 Limitantes de la investigación	15
1.4.1 Limitante Teórica	15
1.4.2 Limitante Temporal	15
1.4.3 Limitante Espacial	16
II. MARCO TEÓRICO	17
2.1 Antecedentes del estudio	17

2.1.1 Antecedentes Internacionales	17
2.1.2 Antecedentes nacionales	21
2.2 Bases Teóricas	25
2.2.1 Ácido Acético	25
2.2.2 n-Butanol	26
2.2.3 Acetato de Butilo	28
2.2.4 Resinas de intercambio iónico	30
2.2.5 Clasificación de los reactores	33
2.2.6 Reactores Semicontínuos	36
2.2.7 Etapas del proceso heterogéneo catalítico	39
2.2.8 Modelado y simulación de procesos químicos	41
2.3 Conceptual	45
2.4 Definición de términos básicos	47
III. HIPÓTESIS Y VARIABLES	49
3.1 Hipótesis	49
3.1.1 Hipótesis general	49
3.1.2 Hipótesis específicas	49
3.2 Definición conceptual de variables	50
3.2.1 Operacionalización de variables	50

IV. DISEÑO METODOLÓGICO	52
4.1 Tipo y diseño de investigación	52
4.1.1 Tipo de investigación	52
4.1.2 Diseño de investigación	52
4.2 Método de investigación	56
4.3 Población y muestra	56
4.3.1 Población	56
4.3.2 Muestra	56
4.4 Lugar de estudio y periodo desarrollado	57
4.5 Técnicas e instrumentos para la recolección de la información	57
4.5.1 Reactor Batch	57
4.5.2 Reactor Semicontinuo	61
4.5.3 Modelado y simulación	62
4.6 Análisis y procesamiento de datos	69
V. RESULTADOS	70
5.1 Resultados descriptivos	70
5.2 Resultados inferenciales	70
5.3 Otro tipo de resultados estadísticos, de acuerdo a la naturaleza del problema y la hipótesis	70

5.3.1 Síntesis de acetato de butilo en el Reactor batch	70
5.3.2 Síntesis de acetato de butilo en el Reactor semicontinuo esférico	85
5.3.3 Modelado y simulación	88
VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS	92
6.1 Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados	92
6.1.1 Respecto a las hipótesis específicas	92
6.1.2 Respecto a la hipótesis general	94
6.2 Contrastación de los resultados con otros estudios similares	95
6.3 Responsabilidad ética de acuerdo a los reglamentos vigentes	97
CONCLUSIONES	98
RECOMENDACIONES	99
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICA	100
ANEXOS	106

TABLAS DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1 Propiedades del ácido acético	26
Tabla 2 Propiedades del n-butanol	27
Tabla 3 Propiedades del acetato de butilo	28
Tabla 4 Principales características de la resina Amberlite IR120	33
Tabla 5 Clasificación de reactores	34
Tabla 6 Tipos de reactores químicos y su uso en la industria	35
Tabla 7 Operacionalización de variables	51
Tabla 8 Variables y niveles para el diseño experimental en reactor Batch	54
Tabla 9 Diseño experimental 3^1	55
Tabla 10 Gasto de NaOH a temperatura de 80 °C, 90 °C y 95 °C	71
Tabla 11 Matriz de datos experimentales en el reactor Batch	72
Tabla 12 Concentración de reactantes y productos con respecto al tiempo para cada temperatura de reacción	76
Tabla 13 Análisis estadístico a la temperatura de 80 °C	82
Tabla 14 Análisis estadístico a la temperatura de 90 °C	83
Tabla 15 Análisis estadístico a la temperatura de 95 °C	84
Tabla 16 Volumen y caudal de reactante con respecto al tiempo a la temperatura de 95 °C	86
Tabla 17 Grados de conversión en el reactor semicontinuo esférico a temperatura de 95°C	88

Tabla 18 Grados de conversión obtenidos por simulación en el programa Polymath

6.0 89

Tabla 19 Comparación de grados de conversión en el reactor semicontinuo esférico

a temperatura de 95°C 90

Tabla 20 Determinación de diferencias entre los datos de conversión simulada y la

conversión experimental 91

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 Síntesis de acetato de n-butilo	29
Figura 2 Mecanismo de reacción de esterificación	29
Figura 3 Tipos de configuraciones de trabajo de los reactores semicontinuos	37
Figura 4 Etapas del proceso heterogéneo catalítico	40
Figura 5 Diseño del reactor batch	58
Figura 6 Configuración del reactor semicontinuo esférico	61
Figura 7 Variación de moles de ácido acético y acetato de butilo a 80 °C	73
Figura 8 Variación de moles de ácido acético y acetato de butilo a 90 °C	74
Figura 9 Variación de moles de ácido acético y acetato de butilo a 95 °C	74
Figura 10 Conversión de acetato de butilo con respecto al tiempo a distintas temperaturas	75
Figura 11 Concentración de reactantes y productos vs tiempo a 80 °C	77
Figura 12 Concentración de reactantes y productos vs tiempo a 90 °C	78
Figura 13 Concentración de reactantes y productos vs tiempo a 95 °C	78
Figura 14 Ajuste no lineal de la disminución de la concentración de ácido acético con respecto al tiempo a temperatura de 80 °C	79
Figura 15 Ajuste no lineal de la disminución de la concentración de ácido acético con respecto al tiempo a temperatura de 90 °C	80
Figura 16 Ajuste no lineal de la disminución de la concentración de ácido acético con respecto al tiempo a temperatura de 95 °C	81

Figura 17 Volumen de ingreso de n-butanol al reactor respecto al tiempo a temperatura de 95 °C 85

Figura 18 Caudal de ingreso de n-butanol al reactor respecto al tiempo a temperatura de 95 °C 87

RESUMEN

En este trabajo de investigación se realizó el estudio del modelado y simulación de la síntesis del acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico, utilizando como catalizador la resina de intercambio catiónico Amberlite IR-120.

Se determinó experimentalmente en un reactor Batch, que la temperatura de 95°C era la más adecuada para la síntesis del acetato de butilo, obteniéndose un grado de conversión del 56.8%. Así mismo se determinaron las constantes de velocidad de la reacción k_1 igual a $5.5498E-06 \text{ (L/mol)s}^{-1}$ y k_2 igual a $2.32 E-06 \text{ (L/mol)s}^{-1}$; y la constante de equilibrio K_{eq} igual a 2.392.

Los ensayos en el reactor semicontinuo esférico a la temperatura de 95° C se realizaron a una relación molar de alimentación de 1/1 (ácido/alcohol) y a una velocidad de agitación de 450 rpm para asegurar la ausencia de la influencia de la difusividad externa sobre la velocidad de reacción; donde se obtuvo un tiempo de reacción de 5.6 horas.

El modelo matemático obtenido mediante ecuaciones de balance de materia y cinética química de la reacción permitió una simulación utilizando el programa Polymath 6.0. Los resultados de conversión obtenidos en la simulación, al ser comparados con los datos obtenidos experimentalmente nos permitió concluir que el modelo matemático obtenido permite hacer una adecuada simulación de la síntesis del acetato de butilo.

Palabras claves: Acetato de butilo, síntesis, modelado y simulación.

ABSTRACT

In this research work, the study of the modeling and simulation of the synthesis of butyl acetate was carried out in a spherical semi-continuous reactor, using the cation exchange resin Amberlite IR-120 as a catalyst.

It was determined experimentally in a Batch reactor, that the temperature of 95 ° C was the most suitable for the synthesis of butyl acetate, obtaining a degree of conversion of 56.8%. Likewise, the reaction rate constants k_1 equal to $5.5498 \times 10^{-6} \text{ (L/mol)s}^{-1}$ and k_2 equal to $2.32 \times 10^{-6} \text{ (L/mol)s}^{-1}$ were determined; and the equilibrium constant K_{eq} equal to 2.392.

The tests in the spherical semi-continuous reactor at a temperature of 95 ° C were carried out with a feed molar ratio of 1/1 (acid / alcohol) and at a stirring speed of 450 rpm to ensure the absence of the influence of external diffusivity on the reaction rate; where a reaction time of 5.6 hours was obtained.

The mathematical model obtained by means of mass balance equations and chemical kinetics of the reaction arrived at a simulation using the Polymath 6.0 program. The conversion results obtained in the simulation, when compared with the data obtained experimentally, we conclude that the mathematical model obtained allows an adequate simulation of the synthesis of butyl acetate.

Keywords: Butyl acetate, synthesis, modeling and simulation.

INTRODUCCIÓN

Actualmente se tiene muy pocos antecedentes de modelados matemáticos y simulaciones en reactores semicontinuos debido a la complejidad que se maneja en el análisis y desarrollo experimental en estos tipos de reactores, sin embargo, el uso de estos reactores es muy importante en la industria química ya que pueden obtenerse mejores resultados en cuanto a la conversión de productos. Unos de estos casos son en las reacciones de esterificación, por ende, en la presente investigación se trabaja con este tipo de reactores para la síntesis de acetato de butilo.

El uso del acetato de butilo en diversas industrias, tales como la Industria de pinturas, tintes y barnices, Industria farmacéutica, Industria alimentaria, industria de fabricación y transformación de cuero, etc. Brindan a este producto una destacada importancia.

La presente investigación tiene un nivel de interés tanto para estudiantes de ingeniería como base y fundamento teórico para posteriores estudios de similares procesos, así como para las industrias que requieran revisar estudios para realizarlo a mayor escala y optimizar procesos donde involucre un sistema semicontinuo.

Estos estudios a nivel industrial servirán para mejorar las condiciones de operación, logrando minimizar el desarrollo experimental, disminución de costos, equipos y reactivos.

Esta investigación del modelado y simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico está orientado a desarrollar un modelo matemático para su posterior simulación donde se pueda expresar el comportamiento de la reacción de la síntesis del acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico con una configuración específica. Para el modelado se usó ecuaciones diferenciales proveniente de los balances de materia, balance estequiométrico y cinética química, dichas ecuaciones fueron resueltas a través del programa computacional Polymath 6.0.

I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1 Descripción de la realidad problemática

Dentro de los insumos importados por el Perú encontramos al acetato de butilo, los gastos que se generan por la importación necesaria de este insumo elevan el costo del producto final. El obtener este producto a nivel local con una conversión adecuada y un bajo costo de producción, sería muy conveniente en estas circunstancias, ya que la demanda en el mercado es grande por su amplia aplicación.

El reactor semicontinuo es usado en una gran variedad de procesos ya que en este tipo de reactores se tiene un mejor control de las variables involucradas en las reacciones.

Actualmente se tiene una escasez de estudios de modelado y simulación de reactores semicontinuos, siendo estos sin lugar a dudas una de las premisas más importantes en la futura producción de este insumo a escala industrial, debido a que es de gran importancia tener una adecuada comprensión de las influencias de las variables y parámetros del proceso en cuestión.

El modelado matemático y simulación en un sistema semicontinuo sirve para minimizar el desarrollo experimental de diferentes variables antes de obtener los datos de diseño requeridos para realizarlo a mayor escala, optimizando así las condiciones de operación. Por todo ello, esta investigación busca desarrollar un modelo matemático que permita la correcta simulación de la síntesis de acetato de

butilo en un reactor semicontinuo esférico, así como también que sirva como base teórica para posteriores estudios de proceso similares.

1.2 Formulación del problema

1.2.1 Problema general

¿Cuál es el modelo matemático que permita simular la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico?

1.2.2 Problemas específicos

¿Cómo determinar experimentalmente las constantes cinéticas de la reacción?

¿Cuáles son las condiciones favorables de operación para la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico?

¿Cómo se desarrollará el modelo matemático que permita la simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico?

1.3 Objetivos de la investigación

1.3.1 Objetivo General

Definir el modelo matemático que permita la simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico.

1.3.2 Objetivos Específicos

- ✓ Determinar las constantes cinéticas de la reacción de esterificación.
- ✓ Determinar las condiciones favorables de operación para la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico.
- ✓ Desarrollar el modelo matemático que permita la simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico.

1.4 Limitantes de la investigación

1.4.1 Limitante Teórica

La información teórica necesaria que se requiere para la presente investigación son ecuaciones de transferencia de materia y cinética química, y los fundamentos del diseño de reactores semicontinuos.

También se utilizan los fundamentos de modelado matemático y simulación, y la aplicación del programa Polymath 6.0, así como también antecedentes de modelado y simulación de reactores semicontinuos, información que se encuentra escasa en los artículos científicos.

1.4.2 Limitante Temporal

El desarrollo de la presente investigación tuvo un periodo de 1 año, comprendiendo desde la revisión de la teoría de ecuaciones y modelos matemáticos vinculada a la investigación, la experimentación en el reactor Batch y en el reactor semicontinuo

esférico, hasta el desarrollo del modelo matemático y la posterior simulación del proceso.

1.4.3 Limitante Espacial

Los experimentos aplicados en esta investigación fueron desarrolladas a nivel de laboratorio utilizando un reactor esférico de 500 ml de volumen. Por lo tanto, este estudio y sus conclusiones se consideran para el nivel mencionado, a condiciones de 1 atmosfera de presión.

II. MARCO TEÓRICO

2.1 Antecedentes del estudio

Se han revisado referencias bibliográficas sobre la síntesis de acetato de butilo, y se ha considerado los estudios más importantes que nos ayudó como base teórica para nuestra investigación.

2.1.1 Antecedentes Internacionales

Dhanuka, Malshe y Chandalia (1977), en su investigación “Cinética de la esterificación en fase líquida de ácidos carboxílicos con alcoholes en presencia de catalizadores ácidos: reinterpretación de datos publicados”, analizaron los datos publicados sobre la cinética de esterificación en fase líquida de varios ácidos carboxílicos con diferentes alcoholes en presencia de ácido sulfúrico como catalizador han reinterpretado a partir del ácido alquilsulfúrico como catalizador. Las ecuaciones empíricas publicadas en la literatura asumen que la reacción es esencialmente irreversible y de segundo orden con respecto al ácido y de primer orden con respecto al alcohol. Los autores por reinterpretación, muestran que la reacción bien podría ser una reacción reversible, que es de primer orden con respecto al ácido y al alcohol en la dirección de avance y de primer orden con respecto al éster y al agua en sentido inverso. realizaron algunos experimentos típicos utilizando ácido butil sulfúrico como catalizador para el sistema butanol-ácido acético y los resultados obtenidos confirmaron la base de la reinterpretación.

Citak y Altiokka (2003), en su investigación “Estudio cinético de esterificación de ácido acético con isobutanol en presencia de catalizador de amberlita”, estudiaron la reacción de esterificación del ácido acético con isobutanol a partir de reacciones catalizadas heterogéneamente y sin catalizar utilizando un reactor discontinuo agitado en dioxano. Obtuvieron como resultado que la constante de equilibrio es cuatro y demostraron que la reacción no catalizada es reversible de segundo orden. Por otro lado, en presencia del catalizador, encontraron que la reacción ocurre entre una molécula de alcohol adsorbida y una molécula de ácido en el fluido a granel (modelo de Eley-Rideal). También determinaron que la velocidad de reacción inicial disminuye con las concentraciones de alcohol y agua y aumenta linealmente con la del ácido.

Orjuela, Leiva, Boyacá, Rodríguez, y Carballo (2005), en el trabajo “Estudio de la síntesis de acetato de butilo – 2. Análisis de las condiciones de equilibrio químico”, estudiaron la reacción de esterificación del ácido acético y n-butanol en fase líquida a la presión de 560 mm Hg, utilizando una resina de intercambio iónico (Lewatit K-2431) como catalizador. Respecto a la metodología, efectuaron ensayos para determinar la influencia de la carga del catalizador, la temperatura y la relación molar de alimentación (ácido/alcohol), sobre la constante de equilibrio químico. Como resultado pudieron reconocer el fenómeno de adsorción selectiva de los componentes sobre la matriz de la resina, y comprobaron su efecto sobre las condiciones de equilibrio químico, para diferentes relaciones iniciales de ácido y

alcohol. Utilizaron un modelo no ideal (UNIQUAC) para evaluar las actividades de los componentes, realizaron el cálculo de la energía libre y las entalpías estándares de la esterificación ($\Delta G^\circ = -1.874$ Kcal/mol, $\Delta H^\circ = -5.335$ Kcal/mol). Finalmente se concluye que obtuvieron una expresión que permite evaluar la constante de equilibrio químico, de carácter aparente, donde se toman en cuenta los efectos térmicos y los asociados al equilibrio de fases líquido-polímero.

Orjuela, Leiva, Boyacá, Rodríguez y Carballo (2006), en el trabajo “Estudio de la síntesis de acetato de butilo - 3. Análisis de adsorción sobre el catalizador” realizaron un estudio de la adsorción del sistema reactivo: ácido acético - n-butanol - acetato de butilo - agua, en fase líquida y presión de 0.76 Bar, sobre una resina de intercambio catiónico (Bayer® Lewatit K-2431). Respecto a su metodología verificaron la distribución de tamaño de partícula del sólido y observaron baja dispersión con un 86% de la masa entre mallas 20 y 30. El sólido seco presenta una distribución binodal con un 40% por encima de la malla 25 y un 45% entre las mallas 25 y 40. Desarrollaron pruebas de hinchamiento de la resina en los componentes puros y en mezclas binarias no reactivas, y observaron un aumento en el volumen de la matriz (2.2 a 3 veces mayor). Como resultado notaron una adsorción selectiva en el sistema reactivo en el orden: agua > n-butanol \approx ácido > acetato. Evaluaron dos modelos de tipo ideal y no-ideal para cuantificar la adsorción a través de una isoterma compuesta, demostrando la debilidad de los modelos teóricos para representar la adsorción en matrices poliméricas iónicas. Finalmente, desarrollaron ensayos de caracterización calorimétrica del catalizador hinchado, y se reconoció a través del

análisis del espectro IR un cambio en la estructura del sólido debido al tratamiento térmico.

Determinaron las limitantes del modelo de adsorción compuesta para ajustar los datos obtenidos experimentalmente en el sistema en estudio, lo que sugiere la imposibilidad de correlacionar el fenómeno de absorción en sistemas altamente no ideales, a través de modelos teóricos simples. La existencia de interacciones entre el sólido y los componentes adsorbidos, así como entre estos últimos, se demostraron a través de los ensayos de DSC, lo que confirma que buena parte de las suposiciones sobre las que se fundamentan los modelos teóricos no son válidas para sistemas como el estudiado. Finalmente, lograron demostrar la imposibilidad de obtener parámetros de adsorción a través de análisis calorimétrico, debido no solo a las interacciones fisicoquímicas en el medio, sino también a la inestabilidad térmica de la estructura polimérica (pérdida de grupos sulfónicos), reconocida a través del análisis infrarrojo del sólido.

Orjuela, Leiva, Boyacá, Rodríguez y Carballo (2006), en el trabajo “Estudio de la síntesis de acetato de butilo 4- cinética de reacción”, tuvieron como objetivo un estudio de la reacción de esterificación de ácido acético y n-butanol en fase líquida a la presión de 0,76 bar, utilizando unas resinas de intercambio catiónico (Lewatit K-2431) como catalizador. Respecto a la metodología establecieron la ausencia de efectos de transferencia de masa dentro y fuera de las partículas de catalizador en las condiciones estudiadas. Efectuaron ensayos para determinar la influencia de la carga del catalizador (0.5 %,1%,2% p/p), la temperatura (73°C, 80°C, 87°C) y la

relación molar de alimentación (ácido/alcohol 1:2, 1:1, 2:1) sobre la velocidad de reacción, y como resultado obtuvieron dos expresiones cinéticas de tipo LHHW y pseudo-homogéneo que representaron adecuadamente los datos experimentales, útil para su introducción en modelos computacionales dirigidos a la simulación de operaciones de destilación reactiva.

2.1.2 Antecedentes nacionales

Cajahuanca y LLacsa (2009) realizaron la investigación “Estudio de la influencia de la temperatura del reactor batch en la esterificación del acetato de etilo empleando el sistema de control secuencial en el laboratorio de operaciones y procesos unitarios”. Tuvieron como objetivo evaluar la influencia de la temperatura en la esterificación. El instrumento utilizado para la evaluación consistió en un sistema de control secuencial elaborado en el lenguaje LADDER PL7 MICRO que permitió un adecuado control de temperatura en el interior del reactor.

Respecto a la metodología, trabajaron con una relación $n_{\text{OH}}/n_{\text{ácido}}$ igual a 1.242, referida al número de moles de etanol y al número de moles del ácido acético; empleando ácido sulfúrico como catalizador al 0.05% del volumen total.

Como resultado en el análisis termodinámico encontraron que la reacción en estado líquido se hace endotérmica y espontánea entre los 52°C y 72°C, por eso para la comprobación experimental tomaron muestras a 60°C y 69°C. La constante de equilibrio obtenida fue de $K = 3.92$ a 60°C y $K = 10.34$ a 69°C, que indica que, para el rango de temperaturas estudiados en fase líquida, la reacción tiende en el sentido

directo favoreciendo a la formación de productos; y del análisis cinético determinaron que a las temperaturas de 60°C y 69°C se alcanza el equilibrio a los 52 min y 42 min respectivamente.

Concluyeron que las composiciones finales del acetato de etilo obtenidos en la teoría y en la práctica muestran una pequeña diferencia, demostrando que los cálculos teóricos y experimentales concuerdan y que la temperatura influye en la conversión del acetato de etilo ya que a mayor temperatura obtuvieron mayor conversión del acetato de etilo.

Ramírez (2011) , en su trabajo de investigación “Evaluación del Factor de Efectividad en el Proceso de Obtención de Lactato de Etilo Catalizado con Amberlite IR 120”, el autor tuvo como objetivo el estudio de la influencia del factor de efectividad sobre la reacción de esterificación de ácido láctico con etanol catalizado por la resina de intercambio iónico Amberlite IR 120. Respecto a la metodología empleada, el efecto del tipo de catalizador, la velocidad de agitación, el tamaño del catalizador, la proporción de reactante inicial y la temperatura de reacción fueron evaluadas, aproximando a una reacción pseudo-homogénea de primer orden.

Como resultado de la investigación determinó que el módulo de Thiele encontrado fue de 0,02 y el factor de efectividad igual a 1. El autor concluyó que este valor bajo de Thiele y un alto valor del factor de efectividad, indica que el efecto de la difusión externa en la velocidad de reacción puede ser ignorada razonablemente. Basada en esta discusión, los datos experimentales pueden considerarse para reflejar la

cinética intrínseca en la reacción de esterificación catalizada con resina de intercambio catiónico.

Ramírez (2013), en su trabajo de investigación “Esterificación-Destilación de ácido Acético y metanol catalizado con resina de intercambio catiónico: Amberlyst 15”, tuvo como objetivo el estudio de manera comparativa la esterificación de ácido acético con metanol utilizando como catalizador la resina de intercambio catiónico el Amberlyst 15. En referencia a la metodología, el autor empleó un reactor batch de laboratorio operado de manera tradicional y un equipo de destilación-reactiva, en ambos casos realizó corridas experimentales a las mismas condiciones de operación. Trabajó a presión atmosférica y a la temperatura de reacción de 341.15 K en el reactor, con una relación molar de alimentación metanol a ácido acético igual a uno y con agitación magnética constante de 400 rpm. La cantidad de ácido acético en las muestras lo determinó por titulación con una solución estándar de hidróxido de sodio usando fenolftaleína como indicador. Como resultado la conversión experimental encontrada en el equilibrio en el reactor batch es de 0,6402 y por destilación reactiva es de 0,7204, y las constantes de equilibrio experimentales fueron de $3,1660 \text{ (L/mol)t}^{-1}$ y $7,6385 \text{ (L/mol)t}^{-1}$ respectivamente. Se concluyó en la investigación que el acetato de metilo producido por destilación reactiva es de alta pureza.

Chuquihamani y Tineo (2019), realizaron la investigación “Modelamiento y simulación del proceso de obtención de formiato de etilo en un reactor semicontinuo

de geometría esférica. Tuvieron como objetivo encontrar el modelo matemático que permita predecir el comportamiento de la reacción de esterificación del ácido fórmico y alcohol etílico para la obtención del formiato de etilo en un reactor semicontinuo de geometría esférica. En este trabajo de investigación se buscó ampliar y explorar sobre la obtención de un éster y la relación con las ecuaciones involucradas para el modelamiento matemático con la finalidad de analizar el grado de aceptabilidad del modelo. Se compararon los resultados de la simulación a través de un programa libre (Polymath), con la parte experimental del proceso. En la primera etapa, los autores realizaron la esterificación de ácido fórmico y alcohol etílico en un sistema batch para obtener formiato de etilo con temperaturas de 32, 40 y 50°C. En la segunda etapa, realizaron la esterificación en el mismo reactor de geometría esférica, pero en un sistema semicontinuo con temperaturas de 30 y 45 °C. En la tercera etapa, desarrollaron y simularon un modelo matemático a partir del balance de materia en el sistema semicontinuo de configuración específica, siendo capaz de describir el comportamiento del proceso de obtención del formiato de etilo con grado de precisión aceptable. Respecto a los resultados obtuvieron que la conversión en la simulación del modelo matemático en el proceso de obtención del formiato de etilo en un reactor semicontinuo esférico, fueron aceptables con respecto a los resultados experimentales.

Carrasco y Castañeda (2020), en el trabajo de investigación “Modelamiento y simulación del proceso de esterificación del ácido acético con metanol en una configuración compleja”. realizaron la investigación de la dinámica de la

esterificación del ácido acético con metanol para la obtención de acetato de metilo, considerando el flujo de ácido acético desde un tanque cónico y el de metanol desde un tanque cilíndrico. Los reactivos se descargan a un reactor esférico, donde se realiza la reacción de esterificación, y las condiciones de volumen, temperatura y concentración son dependientes del tiempo. La constante específica de velocidad de reacción y la constante de equilibrio en función a la temperatura, que usaron fueron datos reportados de literatura especializada. Establecieron los balances de masa global, balance de masa por cada componente y los balances de energía en cada uno de los tanques. Las ecuaciones diferenciales ordinarias fueron resueltas a través del software Polymath y se obtuvieron los perfiles de temperatura y concentración en cada uno de los tanques y el reactor. Asimismo determinaron la altura y volumen de fluido en cada uno de los tanques. concluyeron que los resultados dependen de las condiciones de alimentación de la mezcla reaccionante y de las condiciones mantenidas en el reactor.

2.2 Bases Teóricas

2.2.1 Ácido acético

El ácido acético, también llamado ácido metilcarboxílico o ácido etanoico, es una sustancia orgánica presente en la composición del vinagre, siendo responsable de su típico olor y sabor agrio. Es un ácido débil, resultado frecuente de diversos procesos de fermentación, como los que tienen lugar en el vino cuando se avinagra o en ciertas frutas. El ácido acético, de fórmula química semi desarrollada CH_3COOH ,

no es más que una molécula de metilo (CH_3) con un grupo carboxilo ($-\text{COOH}$) adherido al átomo de carbono por enlace simple. Sus propiedades se muestran en la tabla 1.

Tabla 1

Propiedades del ácido acético

Propiedades	
Estado de agregación	Líquido
Apariencia	Líquido incoloro o cristales
Densidad	1049 kg/m^3
Punto de fusión	289,9 K (16,7 °C)
Punto de ebullición	391,2 K (118, 1 °C)
Punto de descomposición	-273,15 °C
Temperatura crítica	-273,15 °C
Acidez (pKa)	4.76

Fuente: Perry (2001)

2.2.2 n-Butanol

El n-butanol, n-alcohol-butil o butanol normal, es un alcohol de fórmula química $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$. Los isómeros de este compuesto son el butan-2-ol, el metilpropan-1-ol y el metilpropan-2-ol.

El n-butanol es uno de los " alcoholes de fusel " (del alemán "licor malo"), que tienen más de dos átomos de carbono y tienen una solubilidad significativa en agua. Sus propiedades se presentan en la tabla 2.

Tabla 2

Propiedades del n-butanol

Propiedades	
Fórmula química	$C_4H_{10}O$
Masa molar	74.123 g · mol ⁻¹
Apariencia	Líquido refractario incoloro
Olor	tipo banana , áspero,
Densidad	0,81 g / cm ³
Punto de fusión	-89.8 ° C (-129.6 ° F; 183.3
Punto de ebullición	117.7 ° C (243.9 ° F; 390.8 K)
Solubilidad	73 g / L a 25 ° C
Solubilidad	muy soluble en acetona
Presión de vapor	6 mm Hg (20 ° C)
Viscosidad	2.573 mPa-s (a 25 ° C)

Fuente: Perry (2001)

El n- butanol ocurre naturalmente como un producto menor de la fermentación de azúcares y otros carbohidratos, y está presente en muchos alimentos y bebidas. También es un saborizante artificial permitido en los Estados Unidos, utilizado en mantequilla, crema, fruta, ron, whisky, helados y helados, dulces, productos horneados y cordiales. También se utiliza en una amplia gama de productos de

consumo. El mayor uso de n -butanol es como un intermedio industrial, particularmente para la fabricación de acetato de butilo (en sí mismo un saborizante artificial y disolvente industrial).

2.2.3 Acetato de butilo

El acetato de butilo se define como un compuesto orgánico en estado líquido, ligeramente soluble en agua y es conocido con los siguientes nombres: acetato de butilo, butil acetato, éster butílico o etanoato de butilo y se le identifica en la industria con las siglas BAC. Posee la siguiente fórmula molecular, $C_6 H_{12}O_2$ y sus propiedades físicas y químicas se muestran en la tabla 3.

Tabla 3

Propiedades del acetato de butilo

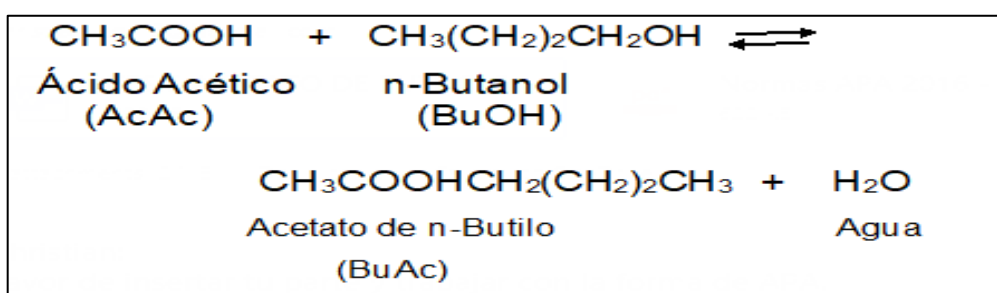
Propiedades	
Formula química:	$C_6 H_{12}O_2$
Peso molecular:	116.16 g/mol
Color	Líquido incoloro
Punto de fusión:	-76.3 °C
Punto de ebullición:	125 °C
Densidad (20°C):	0.882 g/cm ³

Fuente: Perry (2001)

La principal forma de sintetizar acetato de butilo es mediante la esterificación de Fischer, esterificación directa mediante ácido acético y butanol en presencia de un ácido fuerte, como el ácido sulfúrico. En las figuras 1 y 2 se muestran la síntesis de acetato de butilo y el mecanismo de reacción de la esterificación propuesta.

Figura 1

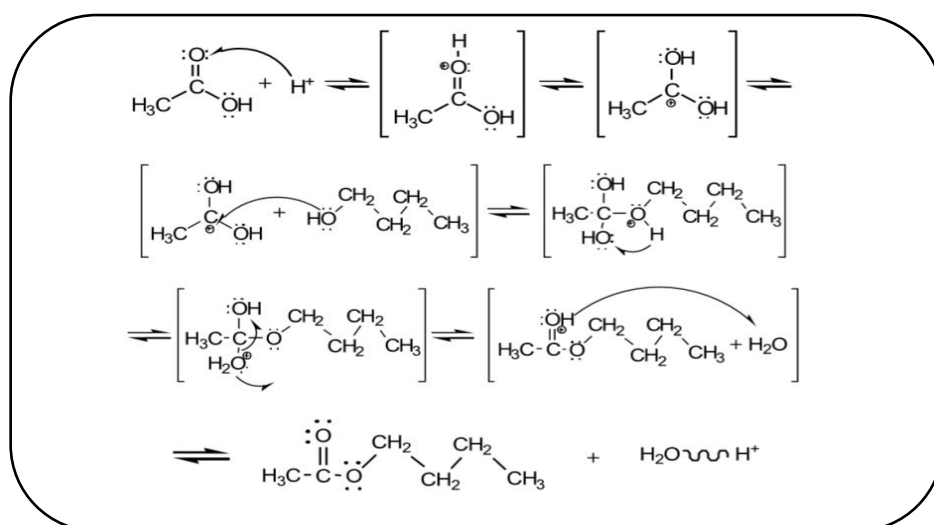
Síntesis de acetato de n-butilo



Fuente: Orjuela, A.; Leiva, F.; Boyacá, A.; Rodríguez, G. y Carballo, L. (2005)

Figura 2

Mecanismo de reacción de esterificación.



Fuente: Orjuela, A.; Leiva, F.; Boyacá, A.; Rodríguez, G. y Carballo, L. (2005)

Según la teoría, la esterificación es un proceso activado por la auto-protólisis del ácido carboxílico, esta reacción se caracteriza por ser del tipo reversible y de ser muy lenta. Es por ello que se debe promover la esterificación con el uso de catalizadores ácidos homogéneos como ácido sulfúrico, ácido clorhídrico, ácido p-tolueno- sulfónico. En estos últimos años, para este tipo de reacción, también se ha logrado promover con catalizadores heterogéneos; algunos de estos catalizadores son resinas de intercambio catiónico, zeolitas u óxidos metálicos. Para mejorar las limitaciones del equilibrio químico se recurre a modificar las variables de trabajo: exceso de reactantes, remoción selectiva de productos, aumento de la temperatura, etc. (Orjuela, A.; Leiva, F.; Boyacá, L.; Rodríguez, G. y Carballo, L.; 2006).

2.2.4 Resinas de intercambio iónico

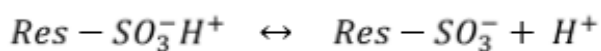
Las resinas de intercambio iónico son materiales sintéticos, normalmente esferas de 0,5-1 mm de diámetro, destinadas al tratamiento de aguas residuales industriales. Están formadas por una matriz polimérica a la que se le han unido una gran cantidad de radicales polares, ácidos o bases. Cuando el agua pasa a través de la resina, ésta toma iones del agua (sodio, cloruro, calcio, magnesio, etc.) y cede una cantidad equivalente en cuanto a carga de protones o de hidroxilos.

Las resinas de intercambio iónico pueden ser de los siguientes tipos:

- ✓ Resinas catiónicas de ácido fuerte: eliminan los cationes intercambiando sodios o protones.
- ✓ Resinas catiónicas de ácido débil: eliminan los cationes asociados con bicarbonatos.

- ✓ Resinas aniónicas de base fuerte: eliminan todos los aniones. Se utilizan para eliminar carbonatos y silicatos.
- ✓ Resinas aniónicas de base débil: eliminan con gran eficiencia los aniones de ácidos fuertes (sulfatos, nitratos y cloruros)

El fenómeno de reacción se lleva a cabo cuando los reactantes son transportados desde la fase fluida hasta el interior de la resina, donde se encuentran en contacto con los grupos catalíticamente activos de la resina. Cuando se emplea como catalizador, las resinas de intercambio fuertemente ácidas, el grupo iónico está unido a la matriz polimérica de divinilbenceno – estireno, de manera que el contraion (grupo intercambiable) es H^+ , que es el grupo móvil en el interior de la estructura de la resina y que actúa como catalizador para reacciones ácidas en las cuales se requiere de la presencia de iones H^+ para acelerar la reacción, por medio de la siguiente reacción de disociación.



Donde Res, representa la matriz polimérica. Esta disociación ocurre al interior de la resina y por consiguiente las moléculas de reactantes deben de transportarse hasta el interior de la estructura para que ocurra el encuentro con el grupo o sitio activo del catalizador) y generar así los productos de la reacción.

Las resinas pueden ser divididas en dos grupos teniendo las mayores diferencias estructurales: geles y resinas macro reticulares.

El transporte de la molécula de reactante desde el seno del fluido hasta el interior de la estructura de la resina porosa, se efectúa a través de una delgada capa de fluido que rodea la partícula de resina conocida como capa de Nernst; de manera que el transporte a través de esta película ocurre únicamente por difusión. Una vez atravesada la película, las moléculas de reactantes se difunden al interior de la resina, hinchada por la solución (H^+ , para resinas de intercambio catiónico) y ocurre entonces la reacción mediante un mecanismo análogo a la catálisis homogénea. Así el grado de entrecruzamiento hace que varíe inversamente el hinchamiento y con este la accesibilidad de las moléculas reactantes. Cuando se tienen grados de entrecruzamiento bajos, la matriz polimérica se hincha significativamente, permitiendo la rápida entrada de las moléculas de reactantes y difusión a través de la matriz (Ramírez, 2011).

A continuación se mencionan en la tabla 4, las principales características fisicoquímicas de la resina Amberlite IR 120, resina de intercambio catiónico utilizada en este trabajo de investigación como catalizador en la síntesis de acetato de butilo. El catalizador utilizado fue adquirida en su forma ácida, en caso sea adquirida en su forma sódica debe ser pasado a su forma ácida antes de su uso.

Tabla 4

Principales características de la resina Amberlite IR 120

Características	
Forma de grano	Esférico
Tamaño de grano, mm	0,3 - 1,5
Estructura	Macroreticular
Grupos activos	-SO ₃
Ion activo	H ⁺
Composición química	Copolímero: estireno + 8% DVB
Acidez (meq H ⁺ /g)	4,50±0,2
Área superficial (m ² /g)	49,1

Fuente: Ramírez, B. (2011)

2.2.5 Clasificación de los reactores

La clasificación de reactores está sujeta a diversos criterios, entre estos tenemos: modo de operación, sistema de fases en reacción, tipo de mezcla y calor de reacción, tal como se muestra en la tabla 5.

Tabla 5*Clasificación de reactores*

Criterios	Tipo de reactores
	Continuo (SCTR, PBR)
Modo de operación	Discontinuo (BATCH)
	Semi-continuo
Sistema de fases en reacción	Homogéneo
	Heterogéneo
Tipo de mezcla	Ideal
	Turbulenta
Tipo de calor en reacción	Endotérmica
	Exotérmica

En la Tabla 6 se presentan algunos tipos de reactores y su utilización en los procesos de síntesis.

Tabla 6*Tipos de reactores químicos y su uso en la industria*

Proceso	Reactor	Reacción química	Aspectos de diseño
Craqueo de nafta	Horno tubular en fase gas y homogéneo	Reacciones consecutivas endotérmicas	Rendimiento de producto, rápido calentamiento y enfriamiento.
Reformado de vapor	Lecho fijo, heterogéneo solido-gas	Reacciones reversibles endotérmicas	Balance de calor, flujo de calor, catalizador.
Producción de epoxi-resinas	Reactor tanque agitado en fase líquida	Reacción de polimerización exotérmica.	Eliminación de calor, control de la polimerización.
Hidrotratamiento	Lecho fijo, heterogéneo liquido-gas	Reacción exotérmica a elevada presión.	Consumo de hidrogeno, eliminación de calor, catalizador.
Craqueo catalítico	Lecho fluidizado continuo, heterogéneo liquido-gas-sólido	Reacciones consecutivas endotérmicas.	Distribución de producto, regeneración de catalizador en continuo.
Desulfuración de gas seco	Tanque de borboteo, heterogéneo liquido-gas-sólido	Reacción ácido-base.	Transferencia de materia y ahorro de energía.

Fuente: Tejero, J. (2010)

2.2.6 Reactores semi-continuos

Este tipo de reactor es una variación de un reactor discontinuo. En la industria existe una gran variedad de circunstancias en donde se puede observar su uso, las distintas configuraciones en que se puede montar el reactor radican en el modo de operación de los elementos de reacción, en donde estos pueden estar trabajando en forma continua o discontinua. Estos reactores trabajan en sistema homogéneo o heterogéneo, en pocas palabras, el reactor puede soportar las reacciones en una sola fase como multifásico.

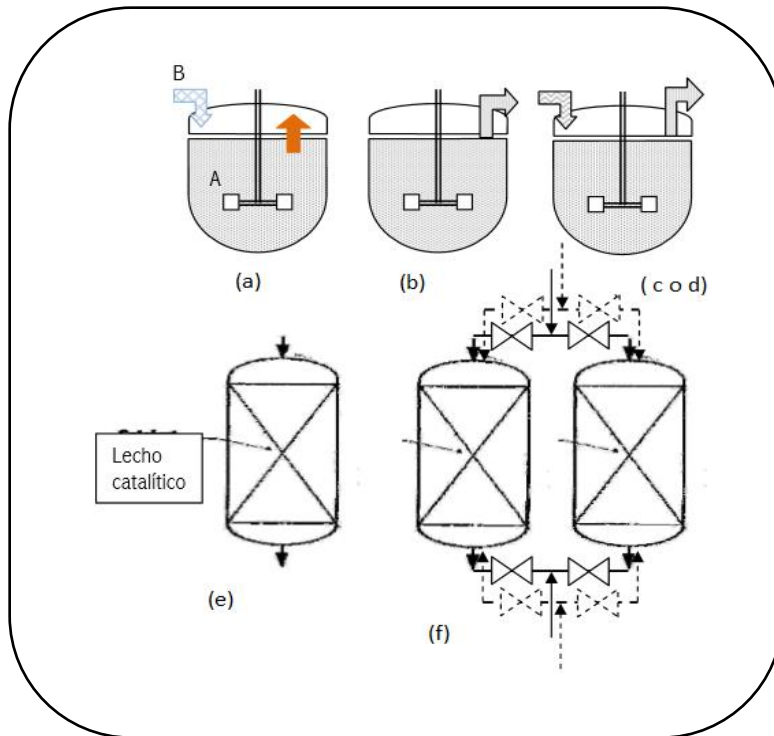
Algunos ejemplos en donde podamos observar su uso son: en un fermentador, para este proceso se carga un reactante que produce por reacción de dióxido de carbono el cual se retira continuamente; otros ejemplos son en las reacciones de cloración, reacción gas-líquido, en este caso el gas burbujea de manera continua sobre un líquido cargado.

Un reactor se considera semicontinuo en una gran diversidad de circunstancias, puede tener algunos elementos en continuo y otros en discontinuo. En este tipo de reactores un reactante se añade de forma intermitente o de forma continua, mientras que el otro se encuentra en el reactor, ya que este fue añadido en la carga inicial. Por esta diversidad de configuraciones, montajes, este reactor no puede tener una ecuación de diseño generalizada.

En la figura 3 se observa las distintas configuraciones en el que puede ser diseñado este reactor (Tejero, J. 2010).

Figura 3

Tipo de configuraciones de trabajo de los reactores semicontinuos



Fuente: Montserrat Iborra. (1998)

La configuración (a) muestra un reactor semidiscontinuo en el que se lleva a cabo una reacción homogénea del tipo $A+B \rightarrow \text{Productos}$. Inicialmente el reactante A se ha cargado en el reactor y el reactante B se añade con un caudal determinado. Pueden darse situaciones en las que se retire un producto y en las que no.

La configuración (b) muestra un reactor semidiscontinuo en el que se lleva a cabo una reacción heterogénea gas-líquido (G-L) en la que se forma un producto gaseoso que se retira a medida que la reacción evoluciona, un ejemplo es la eliminación del

vapor de agua en la reacción de esterificación. La configuración (c o d) muestra una combinación de los dos casos anteriores.

Corresponde a un reactor gas-líquido, como por ejemplo la fermentación anaeróbica en la que se alimenta O_2 o aire continuamente al substrato líquido (producción de penicilina).

La configuración (e) muestra un lecho fijo catalítico en el que el sólido catalítico opera en discontinuo mientras que la fase fluida lo hace en continuo.

La configuración (f) muestra dos lechos fijos en paralelo que operan de forma alternada combinando reacción y regeneración.

Un reactor se considera semicontinuo en una gran diversidad de circunstancias, puede tener algunos elementos en continuo y otros en discontinuo. En este tipo de reactores un reactante se añade de forma intermitente o de forma continua, mientras que el otro se encuentra en el reactor, ya que este fue añadido en la carga inicial. Por esta diversidad de configuraciones, montajes, este reactor no puede tener una ecuación de diseño generalizada.

Como se puede observar este tipo de reactores es muy utilizado en la industria química, los motivos por los que son recomendados, son los siguientes:

- ✓ Permiten controlar las concentraciones y con ello mejor la selectividad del sistema de reacciones.
- ✓ El control de la temperatura, sobre todo en reacciones exotérmicas.
- ✓ Evitar la toxicidad de sustratos para producir organismo o enzimas aislados.
- ✓ Eliminar el producto permite aumentar la conversión y la selectividad.
- ✓ Evitar la acumulación de reactantes propensos a la descomposición térmica.

- ✓ Simular la producción continua especialmente para pequeña escala.

Entre sus desventajas podemos señalar: la producción se ve limitada por la naturaleza cíclica., el costo de operación puede ser elevado y tanto el diseño como el análisis de operación es complicado por ser estado no estacionario.

A pesar de sus diversos usos en la industria, la descripción de la operación del reactor semicontinuo es la menos cubierta. La razón principal de esta falta de descripción es por la dificultad en obtener soluciones analíticas de las ecuaciones diferenciales que la describen, ya que en este reactor por trabajar en estado no estacionario los parámetros como: concentración, temperatura y volumen, que normalmente son variables en estos tipos de equipos. (Tejero, 2010).

2.2.7 Etapas del proceso heterogéneo catalítico

En una reacción catalítica heterogénea utilizando un catalizador sólido (Machaca, 2011), se presentan las siguientes etapas de análisis, las que son mostradas en la figura 4.

1° Etapa: Transporte del reactante A desde el seno del fluido hacia la superficie del catalizador.

2° Etapa: Transporte del reactante desde la superficie del catalizador hacia el interior del poro catalítico.

3° Etapa: Adsorción del reactante A en el sitio activo.

4° Etapa: Reacción química en el sitio activo.

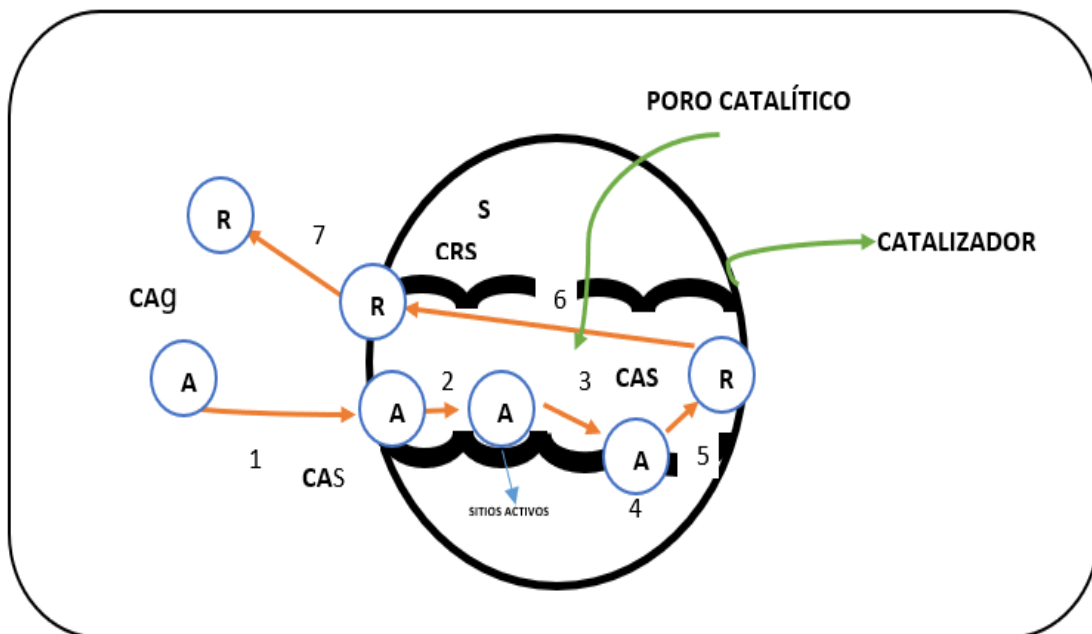
5° Etapa: Desorción de los productos del sitio activo.

6° Etapa: Transporte de los productos desde el interior del poro catalítico hacia la superficie del catalizador.

7° Etapa: Transporte de los productos desde la superficie del catalizador hacia el seno del fluido.

Figura 4

Etapas del proceso heterogéneo catalítico



Fuente: Machaca, L. (2011)

La velocidad total del proceso, r_{AT} , queda como sigue:

$$r_{AT} = r_{T Mreact} + r_{T Mprod} + r_{adsorción} + r_{rx} + r_{desorción}$$

En donde las velocidades se dividen en:

$r_{T Mreac} + r_{T Mprod}$: Etapa física

$r_{adsorción} + r_{rx} + r_{desorción}$: Etapa Química

En el análisis de estas velocidades se sabe que la velocidad predominante, y por la cual el proceso es controlado, será la velocidad más lenta.

2.2.8 Modelado y simulación de procesos químicos

Es sabido que el procedimiento metodológico fundamental para resolver un problema en ingeniería consiste en representarlo de una manera adecuada, de tal forma de lograr una sustitución del sistema real (equipo, proceso, etc.) por uno más adecuado para el tratamiento formal. Por lo general, las herramientas lógico matemáticas nos brindan un marco útil para representar mediante un sistema de símbolos y reglas, el comportamiento de los sistemas reales (Scenna, 2000).

2.2.8.1 Métodos numéricos como herramienta para modelado de procesos en Ingeniería Química

La simulación digital constituye una poderosa herramienta para la resolución de las ecuaciones que describen a los sistemas en ingeniería química. Las principales dificultades que se plantean son principalmente:

a) Encontrar la solución de un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales que usualmente se efectúa mediante un método iterativo.

b) Efectuar la integración numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales mediante ecuaciones discretizadas en diferencias finitas que aproximan a las soluciones de las ecuaciones diferenciales continuas.

Los métodos numéricos son una clase de algoritmos para resolver una amplia variedad de problemas matemáticos. Únicamente se emplean operaciones lógicas y aritméticas; por consiguiente, pueden implementarse fácilmente sobre computadoras digitales.

La combinación de métodos numéricos y computadoras digitales constituye una poderosa herramienta para el análisis matemático. Por ejemplo, los métodos numéricos son capaces de manejar no linealidades, modelos asociados a geometrías complejas y sistemas de ecuaciones acopladas que son necesarios para el modelado eficiente de muchos sistemas fisicoquímicos que se presentan en ingeniería.

Es sabido que, si un problema no puede resolverse analíticamente, lo mejor es programarlo en una computadora (mediante un algoritmo adecuado). Este punto de vista se debe, sin lugar a dudas, al enorme poder de cálculo de los métodos numéricos. Sin embargo, también es cierto que existen muchos problemas que son imposibles de resolver utilizando métodos numéricos. Para diversos problemas no se ha encontrado todavía un modelo matemático completo y seguro, de manera que resulta obvio que es imposible encontrarles una solución numérica. La dimensión de otros problemas es tan grande que su solución está más allá de los límites

prácticos en términos de la tecnología computacional disponible. Por ejemplo, en problemas fluido-dinámicos que involucran flujos turbulentos, en estimaciones meteorológicas o climáticas (campos de vientos, presiones, temperaturas, etc.), en diversos problemas que se plantean en el área de la ingeniería química, existen serias limitaciones en el área de diseño y de optimización en tiempo real, etc. En los últimos años se han desarrollado grandes programas computacionales comerciales para simular el comportamiento de sistemas de ingeniería de todo tipo. Usualmente, estos programas se diseñan para que sean utilizados por aquellos profesionales de la ingeniería sin un conocimiento intensivo de su funcionamiento interno (Scenna, 2000).

2.2.8.2 Simulación de procesos químicos

La simulación de procesos es definida como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos. La solución de estos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permite tener un mejor conocimiento del comportamiento de dicho proceso. La simulación de procesos químicos permite efectuar el análisis de plantas químicas en operación y llevar a cabo tareas que son comunes en la industria química:

- ✓ Detección de cuellos de botella en la producción.
- ✓ Predicción de los efectos de cambios en las condiciones 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 ingenieros de proceso.
- ✓ Investigación de la factibilidad de automatización de un proceso.

En principio, la simulación de procesos puede ser útil en todas las etapas del desarrollo de un producto industrial. En las diferentes etapas de un proyecto, puede haber necesidad de realizar simulaciones con diferentes niveles de sofisticación. La simulación de procesos puede usarse en las siguientes etapas de desarrollo de un proyecto industrial:

- ✓ Investigación y desarrollo. Una simulación sencilla se puede usar para probar la factibilidad técnica y económica del proyecto.
- ✓ Etapa crítica en la toma de decisiones. se prueban diferentes alternativas de proceso y condiciones de operación y se toman decisiones. Cuando un proceso es económicamente atractivo, se deben probar diferentes alternativas de

tamaño y localización de la planta y determinar condiciones de operación óptimas.

- ✓ Planta piloto. Simulación con modelos más sofisticados para obtener mejores estimaciones de las condiciones de operación a escala industrial.
- ✓ Diseño. La simulación proporciona todos los datos de proceso requeridos para el diseño detallado de los diferentes equipos.
- ✓ Simulación de plantas existentes. puede ser muy útil cuando es necesario cambiar las condiciones de operación, o cuando se quieren sustituir materias primas. (Martínez, 2000).

2.3 Conceptual

La simulación de procesos es definida por algunos autores como una técnica para evaluar de forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos. Estos modelos matemáticos son solucionados por medio de programas computacionales, los cuales facilitan el trabajo del investigador para la discretización o resoluciones de modelos matemáticos complejos.

El uso de los programas computacionales para la simulación de procesos hace esta tarea menos dificultosa, ya que es muy útil no solo para la solución de modelos matemáticos sino también permite estudiar los efectos interactivos de los componentes individuales en relación a variables determinadas.

La reacción de esterificación es una síntesis química en donde se hace reaccionar un ácido carboxílico con un alcohol dando como producto un éster y agua, esta

síntesis química es catalizada por medio de ácidos homogéneos como ácido sulfúrico, ácido clorhídrico o ácido p-tolueno-sulfónico.

Sin embargo, en los últimos años se han usado catalizadores heterogéneos como resinas de intercambio catiónico, las cuales mejoran el proceso en cuanto a la remoción de productos dentro del reactor y la reutilización de los mismos.

Esta síntesis química se puede llevar a cabo mediante reactores discontinuos y semicontinuos, estos últimos son preferidos en la industria por su amplia variedad de configuraciones de trabajo y por soportar reacciones monofásicas como multifásicas. Por su amplia variedad de configuraciones y la variación en el tiempo del flujo de reactantes hacen que la síntesis química en este tipo de reactores sea un tanto difícil de simular.

Si se conocen las propiedades fisicoquímicas del butanol, ácido acético, acetato de butilo y del catalizador que en este caso es la resina de intercambio iónico Amberlite IR 120, se pueden determinar los parámetros de trabajo de la esterificación del acetato de butilo, tales como el tiempo de reacción, la velocidad de agitación, el porcentaje en peso de resina catalizadora y las temperaturas de reacción.

Se puede utilizar un reactor semicontinuo esférico, el cual presenta una configuración específica de diseño, y donde un reactante es añadido de forma continua y el otro junto con el catalizador es añadido en la carga inicial.

Esta síntesis del acetato de butilo se puede modelar aplicando los balances de materia y la cinética química, lo cual permitirá una simulación mediante el desarrollo

de ecuaciones diferenciales que pueden ser solucionadas mediante un programa como Polymath 6.0.

2.4 Definición de términos básicos

Síntesis química: Es el proceso por el cual se producen compuestos químicos a partir de compuestos simples. Se genera una transformación de enlaces y estructura molecular de las sustancias implicadas en el proceso, llamadas reactantes, a productos. El objetivo principal de la síntesis química, además de producir nuevas sustancias químicas, es el desarrollo de métodos más económicos y eficientes para sintetizar sustancias naturales ya conocidas.

Esterificación: Se denomina esterificación al proceso por el cual se sintetiza un éster. Un éster es un compuesto derivado formalmente de la reacción química entre un ácido carboxílico y un alcohol.

Equilibrio químico: Es el estado en el que las actividades químicas o las concentraciones de los reactivos y los productos no tienen ningún cambio neto en el tiempo.

Reactor químico: Un reactor químico es un equipo en cuyo interior tiene lugar una reacción química, diseñado para maximizar la conversión y la selectividad de esa reacción con el menor coste posible.

Reactor semicontinuo: Es donde una fase del reactor se comporta de forma continua mientras que otra lo hace de forma discontinua., es decir inicialmente se realiza la carga de la mezcla reaccionante y se tiene un flujo continuo de entrada y/o de salida.

Resina sintética: Sustancia orgánica producida por la polimerización de monómeros no saturados y cuyas propiedades son semejantes a las de las resinas naturales.

Catalizadores: Es una clase de sustancia que, durante la catálisis, altera el desarrollo de una reacción. Los catalizadores que incrementan la velocidad de la reacción reciben el nombre de catalizador positivo, mientras que aquellos que ocasionan una disminución de la velocidad se califican como catalizadores negativos.

Simulación: Es aquella técnica para evaluar de forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos.

Modelado: Representación gráfica o esquemática de una realidad, la cual sirve para organizar y comunicar de forma clara los elementos involucrados en el fenómeno expuesto. Estos modelos utilizan las teorías científicas como herramienta principal en su desarrollo.

III. HIPÓTESIS Y VARIABLES

3.1 Hipótesis

3.1.1 Hipótesis general

El modelo matemático y simulación de la síntesis del acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico, depende de las ecuaciones de conservación de materia, cinética química y de las condiciones favorables de operación.

3.1.2 Hipótesis específicas

- a) Las constantes cinéticas de reacción se determinan experimentalmente, realizando la reacción de esterificación en un reactor del tipo Batch.
- b) El diseño experimental permite determinar las condiciones favorables de operación para el modelado y simulación de la síntesis del acetato de butilo.
- c) El fundamento de ecuaciones cinéticas de reacción y balance de materia, permite desarrollar el modelado y simulación de la síntesis del acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico.

3.2 Definición conceptual de variables

La definición conceptual de variables hace referencia a las variables independientes y a la variable dependiente.

Se han identificado las siguientes variables:

Variables independientes

X1: Constantes cinéticas de la reacción de la síntesis del acetato de butilo k_1 , k_2 y K_{eq} .

X2: Condiciones de operación: temperatura y tiempo de reacción.

X3: Modelado y simulación de la síntesis de acetato de butilo.

Variable dependiente

Y: Modelo matemático que permita la simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico

3.2.1 Operacionalización de variables

La operacionalización de variables se presenta en la tabla 7.

Tabla 7*Operacionalización de variables*

Variable dependiente	Dimensiones	Indicadores	Métodos
Y = Modelo matemático que permita la simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico	Y ₁ : velocidad de reacción de acetato de butilo Y ₂ : variación de la conversión con respecto al tiempo	mol/L*t X = conversión	Análisis numérico de datos por programa computacional
Variables independientes	Dimensiones	Indicadores	Métodos
X1= Constantes cinéticas de la reacción de la síntesis del acetato de butilo	X _{1.1} : constante de velocidad de reacción X _{1.2} : constante de equilibrio	k _i (L/mol*t) K _{eq} = (k ₁ /k ₂)	Método analítico, observacional y experimental por medio de un reactor Batch.
X2= Condiciones de operación: temperatura y tiempo de reacción	X _{2.1} : Temperatura del proceso X _{2.2} : Tiempo de reacción	°C s	Método analítico, observacional y experimental
X3= Modelado y simulación de la síntesis de acetato de butilo	X _{3.1} : Ecuaciones cinéticas de reacción y de balances de materia	N: Ecuaciones diferenciales necesarias para el modelado	Método teórico

IV. DISEÑO METODOLÓGICO

4.1 Tipo y diseño de investigación

4.1.1 Tipo de investigación

El presente trabajo de investigación tiene un enfoque cuantitativo, definiendo claramente por su naturaleza un alcance descriptivo en sus inicios de la investigación, y finaliza con un alcance correlacional, ya que se asocian conceptos y variables permitiendo el modelado y simulación de la síntesis de acetato de butilo en reactor semicontinuo esférico (Hernández, Fernandez, y Baptista, 2014).

La investigación desarrollada además es de tipo mixta (experimental y no experimental), y según la línea de investigación de la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Callao, se ubica en la línea de investigación modelado y simulación de procesos químicos industriales.

4.1.2 Diseño de investigación

La investigación se desarrolló en los laboratorios de Investigación, Desarrollo e Innovación de la Facultad de Ingeniería Química, en la Universidad Nacional del Callao. A continuación, se expone de manera breve las cuatro etapas de la investigación:

Etapa 1.

Esta etapa comprende la revisión de la teoría de ecuaciones vinculadas a las variables de investigación, de las cuales se definió de manera teórica el modelo matemático que permite la simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico. Además, en esta etapa se investigó y se determinó los parámetros de trabajo de la síntesis de esterificación en un reactor de tipo Batch.

Etapa 2.

Se realizó la experimentación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor tipo Batch de forma esférica. Al término de esta etapa se determinó las constantes de equilibrio químico y las constantes de velocidad de reacción.

Etapa 3.

En esta etapa se determinó la temperatura más adecuada de operación y se realizó la experimentación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico, el cual tiene una configuración específica.

Etapa 4.

En esta etapa se realizó la simulación en el programa Polymath 6.0, relacionando las ecuaciones de balance de materia y cinética química involucradas. Los datos resultantes de la simulación fueron comparados con los datos experimentales obtenidos de la experimentación en el reactor semicontinuo esférico a la misma temperatura de operación.

Por ser una investigación del tipo mixta, se usó metodologías experimentales y no experimentales, gracias a estas se obtuvo la relación entre las variables

independientes sobre la variable dependiente, todas estas variables son medidas por sus respectivos indicadores.

a). Para este trabajo todas las experiencias en reactor Batch se tomó el tiempo de 8 horas, quedando solo como variable independiente la temperatura de operación, por tanto, el diseño factorial queda de 3^1 con la variable independiente temperatura. Las variables y niveles para el diseño experimental en el reactor Batch son presentadas en la tabla 8, mientras que el diseño experimental donde se identifican los vectores de respuestas son presentados en la tabla 9.

Tabla 8

Variables y niveles para el diseño experimental en reactor Batch.

Variables	Niveles		
	-	0	+
Temperatura de operación, (°C)	80	90	95
Tiempo de reacción, (s)	28800	28800	28800

Tabla 9*Diseño experimental 3¹*

Número de Experiencias	Notación de variables	Vector de respuestas			
		N_A : moles finales de reactante	X: grado de conversión de la reacción	Keq: Constante de equilibrio	k1: constante cinética de reacción
1	-	$N_{A(1,1)}$	$X_{(1,2)}$	$Keq_{(1,3)}$	$k1_{(1,4)}$
2	0	$N_{A(2,1)}$	$X_{(2,2)}$	$Keq_{(2,3)}$	$k1_{(2,4)}$
3	+	$N_{A(3,1)}$	$X_{(3,2)}$	$Keq_{(3,3)}$	$k1_{(3,4)}$

b). Para la síntesis química en el reactor semicontinuo, se opera a la temperatura con la cual se obtuvo un mayor grado de conversión de producto, según las pruebas realizadas en el reactor Batch, y a un tiempo de operación determinado por la caída final del reactante n-butanol.

Se desarrollaron tres pruebas experimentales para evaluar el grado de conversión, utilizando iguales cantidades estequiométrica de reactantes, para obtener un valor promedio de la conversión.

c). Para el caso del modelado y simulación se utilizó metodologías no experimentales del tipo teórico el cual relaciona ecuaciones de conservación de materia, cinética química y caudal de ingreso del reactante.

Para el modelado de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico se usó el programa Polymath 6.0 para simular la reacción con los datos de las ecuaciones de modelado y los parámetros de trabajo seleccionados.

4.2 Método de investigación

La presente investigación se desarrolló bajo el método de modelación, observacional, experimental y analítico; debido a que la investigación se realiza mediante la búsqueda de ecuaciones teóricas involucradas en dicho caso de estudio, la experimentación, el registro y análisis de los datos y variables del proceso, así también la comprobación de los datos teóricos resultantes contra los datos experimentales.

4.3 Población y muestra

4.3.1 Población

El criterio población no es aplicable en el presente trabajo de investigación.

4.3.2 Muestra

Para la síntesis del éster, previamente el recipiente dosificador cilíndrico de vidrio, se cargó con un volumen de 96.6 ml. de butanol, el cual es dosificado hacia el

reactor esférico. En el interior del reactor esférico se colocó 60.4 ml. de ácido acético, más 3.5 g. de resina Amberlite IR 120. Para la evaluación del grado de conversión se tomaron alícuotas de 0.5 ml en función del tiempo de reacción para su análisis químico correspondiente.

4.4 Lugar de estudio y periodo desarrollado

Esta investigación se llevó acabo en el laboratorio de Investigación, Diseño e Innovación de la Facultad de Ingeniería Química, en la Universidad Nacional del Callao. Esta investigación fue desarrollada en un periodo de un año.

4.5 Técnicas e instrumentos para la recolección de la información

En este trabajo de investigación se presentan técnicas de recolección de datos de tipo teóricos, experimental, observacional y de análisis estadísticos.

4.5.1 Reactor Batch

En esta etapa se utiliza la técnica de recolección experimental y observacional. Se utiliza un reactor de tipo esférico de 500 ml de volumen, junto con un tubo condensador y un equipo calentador y agitador magnético.

Se hace tres corridas experimentales a temperaturas de 80, 90 y 95 grados Celsius de temperatura. Para las tres experiencias se trabaja a una relación molar de reactantes de 1/1, por lo cual se carga el reactor con: 60.4 ml de ácido acético, 96.6 ml de n-butanol y 3.5 gramos de resina Amberlite IR 120, la velocidad de agitación

se fijó en 450 rpm en todos los experimentos para asegurar la ausencia de la difusividad externa. La figura 5, muestra el reactor utilizado para esta etapa.

Figura 5

Diseño del reactor Batch



El muestreo de datos se hace de forma volumétrica, retirando alícuotas de 0.5 ml de la solución reaccionante en intervalos de tiempo que varían inicialmente entre 15 y 30 minutos, para luego variar cada 60 minutos de reacción hasta llegar a las 8 horas, tiempo en donde según teoría la reacción llega a su equilibrio. El objetivo del muestreo volumétrico es hallar el ácido acético residual de la solución reaccionante,

para este propósito se titula con una solución de 0.1 N de NaOH. El volumen de gasto resultante permite calcular las moles del ácido acético residual mediante la ecuación 1 y el grado de conversión mediante la ecuación 2.

$$N_A = \frac{V_{NaOH} (ml) * N_{NaOH} * V_{total} (l)}{V_{muestra} (ml)} \quad (1)$$

$$X = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}} \quad (2)$$

En donde N_A son las moles de ácido acético y X es el grado de conversión.

Mediante la estequiometria de la reacción, se obtuvieron los datos de concentración de reactantes y productos en los distintos tiempos de la reacción a cada temperatura.

$$C_A = \frac{V_{NaOH} (ml) * N_{NaOH}}{V_{muestra} (ml)} \quad (3)$$

$$C_B = C_{A0} \left(\frac{C_{B0}}{C_{A0}} - X \right) \quad (4)$$

$$C_C = C_{A0} (X) \quad (5)$$

$$C_D = C_C \quad (6)$$

Se encontró la función de concentración de ácido acético con respecto al tiempo para las distintas experiencias. Se utilizó el programa CurveExpert profesional para ajustar la gráfica no lineal, esta función es derivada para hallar la variación de la concentración. Con los datos de variación de la concentración en los distintos puntos muestreados y con la ecuación de velocidad de la reacción, se halla las constantes cinéticas k_1 , k_2 y K_{eq} para las distintas experiencias.

Equipos

- ✓ Agitador magnético y calentador (Marca: IKA-WERKE)
- ✓ Balanza (Marca: METLER TOLEDO / Precisión: 0.001)
- ✓ Reactor esférico (Material: Vidrio de Borosilicato)
- ✓ Columna de condensación (Material: Vidrio de Borosilicato)
- ✓ Dosificador cilíndrico de vidrio (Material: Vidrio de Borosilicato)

Materiales

- ✓ Pipeta (volumen 0.5ml y 2 ml)
- ✓ Bagueta
- ✓ Matraz (volumen 250 ml)
- ✓ Bureta (volumen 25 ml)
- ✓ Cronómetro
- ✓ Termómetro (Capacidad 110 °C)
- ✓ Soporte universal

4.5.2 Reactor Semicontinuo

En esta etapa se utiliza la técnica de recolección experimental y observacional. Se utiliza un reactor de tipo esférico de 500 ml de volumen, junto con un tubo condensador, un dosificador cilíndrico de 250 ml y un equipo calentador y agitador magnético (Figura 6)

Figura 6

Configuración del reactor semicontinuo esférico



Se cargó el reactor esférico de 60.4 ml de ácido acético, y 3.5 gramos de resina catalítica, este se elevó a la temperatura óptima de operación, según los resultados del grado de conversión y constante de equilibrio del proceso anterior. Se cargó

96.6 ml de n-butanol a la misma temperatura en el dosificador cilíndrico, el cual tiene una apertura de válvula para ser vertido en el reactor esférico, y así generar la síntesis química requerida.

Para esta etapa se tomaron muestras de 0.5 ml de la mezcla reaccionante, con estas muestras se obtuvieron los datos de volúmenes gastados de hidróxido de sodio a concentración 0.1 normal.

Con estos datos se pudo hallar los valores experimentales de N_A , moles finales de reactante, y el grado de conversión de la reacción, X , mediante las ecuaciones 1 y 2.

4.5.3 Modelado y simulación

Para el modelado de la reacción de esterificación en un reactor semicontinuo esférico se usó ecuaciones de conservación de materia, estequiometría de la reacción, variación de volumen en el tiempo y cinética química con respecto a su configuración específica, su temperatura óptima de operación y a su relación molar de sus reactivos.

Para los datos teóricos en el modelado se utilizaron técnicas que implican el análisis de ecuaciones de conservación de materia y cinética química que están relacionadas con el fenómeno en estudio. Los desarrollos de estas ecuaciones se presentan a continuación:

Balance de materia para todos los componentes en el reactor

En el reactor esférico se considera: el ingreso del flujo volumétrico del n-butanol (componente B) y la reacción química en su interior, ya que este es cargado al inicio con ácido acético y la resina catalítica.

Siendo la ecuación cinética siguiente:



Donde cada letra representan a los siguientes reactivos y productos:

A= ácido acético

B= butanol

C= acetato de butilo

D= agua

$$r_A = -k_1 C_A C_B + k_2 C_C C_D \quad (8)$$

Donde se tienen las siguientes velocidades de reacción:

$$-r_A = -r_B = r_C = r_D \quad (9)$$

Para el ácido acético componente (A), el cual se encuentra en el reactor esférico tenemos el balance de materia siguiente:

Balance de materia del material (A) en la esfera.

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint C_A dv_2 = - \oiint C_A (\underline{V} \cdot \underline{\bar{n}}) dA + \iiint r_A dv_2 \quad (10)$$

Para el sistema se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{d(C_A v_2)}{dt} = Q_{s2} C_{AE} - v_2 C_A + r_A v_2 \quad (11)$$

Como no existe caudal de ingreso del componente A desde el cilindro dosificador hasta el reactor esférico, se cancela este término en la ecuación, así también se cancela el término de flujo de salida del reactor esférico.

$$\frac{d(C_A v_2)}{dt} = \cancel{Q_{s2} C_{AE}} - \cancel{v_2 C_A} + r_A v_2 \quad (12)$$

Derivando la ecuación tenemos:

$$v_2 \frac{d(C_A)}{dt} + C_A \frac{dv_2}{dt} = r_A v_2 \quad (13)$$

Donde:

$$\frac{dv_2}{dt} = Q_{s1} \quad (14)$$

Se obtiene la siguiente ecuación diferencial:

$$v_2 \frac{dC_A}{dt} = r_A v_2 - C_A Q_{s1} \quad (15)$$

Reordenando la ecuación anterior se obtiene la ecuación final para la concentración del ácido acético

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{-C_A Q_{s1}}{v_2} + r_A \quad (16)$$

Para el componente (B), reactivo que se encuentra en el dosificador cilíndrico, y que lentamente ingresará al reactor esférico, tenemos el balance de materia:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint C_B dv_2 = - \oiint C_B (\underline{V} \cdot \underline{\bar{n}}) dA + \iiint r_B dv_2 \quad (17)$$

Para el sistema se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{d(C_B v_2)}{dt} = Q_{s1} C_{BE} - v_2 C_B + r_B v_2 \quad (18)$$

Se cancela el termino de flujo de salida del reactor esférico.

$$\frac{d(C_B v_2)}{dt} = Q_{s1} C_{BE} - \cancel{v_2 C_B} + r_B v_2 \quad (19)$$

Derivando la ecuación tenemos:

$$v_2 \frac{d(C_B)}{dt} + C_B \frac{dv_2}{dt} = Q_{s1} C_{BE} + r_B v_2 \quad (20)$$

Donde:

$$\frac{dv_2}{dt} = Q_{s1} \quad (21)$$

Realizando los respectivos reemplazos en la ecuación (20), se tiene:

$$v_2 \frac{dC_B}{dt} = r_B v_2 + C_{BE} Q_{S1} - C_B Q_{S1} \quad (22)$$

Factorizando Q_{S1} y dividiendo v_2 en la ecuación (22), tenemos:

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{Q_{S1}(C_{BE} - C_B)}{v_2} + r_B \quad (23)$$

Finalizamos con las ecuaciones de los productos, los cuales son semejantes al del ácido acético ya que no tienen caudal de entrada ni flujo de salida.

$$\frac{dC_C}{dt} = \frac{-C_C Q_{S1}}{v_2} + r_C \quad (24)$$

$$\frac{dC_D}{dt} = \frac{-C_D Q_{S1}}{v_2} + r_D \quad (25)$$

Modelado de la síntesis del acetato de butilo

Las ecuaciones propuestas para el modelado de la reacción del acetato de butilo en el presente trabajo son las ecuaciones de cinética química, las ecuaciones de conservación de materia y la ecuación diferencial de volumen con respecto al tiempo, siendo esta última ecuación obtenida de forma experimental de acuerdo al flujo de salida del reactante en el dosificador.

Según lo mencionado líneas arriba se presenta la ecuación de cinética química para esta reacción:

$$r_A = -k_1 \left(C_A C_B - \frac{1}{K_{eq}} C_C C_D \right) \quad (26)$$

Sabiendo que se tiene las siguientes igualdades para los demás componentes:

$$r_B = r_A \quad (27)$$

$$r_C = -r_A \quad (28)$$

$$r_D = -r_A \quad (29)$$

Las ecuaciones de transferencia de materia conllevan a las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{-C_A Q_{S1}}{v_2} + r_A \quad (30)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{Q_{S1}(C_{BE} - C_B)}{v_2} + r_B \quad (31)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = \frac{-C_C Q_{S1}}{v_2} + r_C \quad (32)$$

$$\frac{dC_D}{dt} = \frac{-C_D Q_{S1}}{v_2} + r_D \quad (33)$$

Para la simulación de la reacción de esterificación en un reactor semicontinuo se usó el programa Polymath 6.0 para simular la reacción con los datos de las ecuaciones de modelado y los parámetros de trabajo seleccionados. En este programa se ingresó las ecuaciones diferenciales de los flujos molares de los reactantes y productos de la reacción, la ecuación diferencial de la variación del volumen dentro del reactor esférico, la ecuación cinética de la reacción, junto con

las constantes cinéticas halladas en los ensayos con el reactor Batch a la temperatura más adecuada encontrada. Todas estas ecuaciones se relacionan gracias a la variable velocidad de reacción de los componentes.

Para poder ejecutar el programa se ingresaron los datos de temperatura, tiempo de reacción y moles iniciales de cada componente dentro del reactor esférico.

Una vez ingresado todos los datos necesarios para la correcta ejecución del programa, este nos proporcionó resultados de velocidad de reacción, conversión y concentración de los distintos componentes del sistema mediante gráficas y reporte de simulación.

Para hallar la ecuación diferencial de variación de volumen en el tiempo se utilizó el programa CurveExpert profesional.

Se determinó el error absoluto y relativo de la conversión simulada con respecto a la conversión experimental.

$$\text{Error absoluto} = | X_{(sim.)} - X_{(exp.)} | \quad (34)$$

$$\text{Error relativo} = \frac{| X_{(sim.)} - X_{(exp.)} | * 100}{X_{(exp.)}} \quad (35)$$

4.6 Análisis y procesamiento de datos

En las pruebas experimentales desarrolladas en el reactor Batch, los datos de concentración encontrados en las distintas experiencias fueron graficados y ajustados a una función no lineal; esta función fue derivada para hallar la velocidad de reacción ajustada o estimada.

Se utilizó la técnica de prueba para muestras dependientes. Para cada experiencia se aplicó un análisis de varianza, determinando el error estándar o desviación típica y su estadístico de prueba.

En las pruebas experimentales con el reactor semicontinuo se aplicó el programa CurveExpert profesional para ajustar las curvas de las ecuaciones no lineales, la cual una vez derivada permitió hallar la ecuación de variación de volumen con respecto al tiempo dentro del reactor.

Los valores experimentales resultantes de grado de conversión fueron comparados con los resultados de la simulación, se calculó el error absoluto y relativo, así como también se realizó su análisis de varianza, su error estándar o desviación típica y su estadístico de prueba.

En lo que respecta al modelado y simulación, las ecuaciones diferenciales se ingresaron al programa Polymath 6.0 para la solución numérica de estas ecuaciones utilizando el método Runge Kutta Felhberg.

El programa Polymath 6.0 también nos brinda resultados gráficos de todas las variables dependientes en relación con la variable independiente, el tiempo de reacción.

V. RESULTADOS

5.1 Resultados descriptivos

No es aplicable para este trabajo de investigación, puesto que los resultados descriptivos son aquellos resultados recopilados en unos valores numéricos al aplicar medidas de centralización, medidas de dispersión, medidas de forma y relación entre variables.

5.2 Resultados inferenciales

No es aplicable para este caso, debido a que el criterio de población no fue aplicado dentro del diseño metodológico para este trabajo de investigación.

5.3 Otro tipo de resultados de acuerdo a la naturaleza del problema y la hipótesis.

Los resultados del presente trabajo de investigación se han obtenido aplicando el procedimiento de la investigación experimental para las corridas en el reactor Batch, y del tipo observacional para el modelado y simulación en el reactor semicontinuo esférico.

5.3.1 Síntesis de acetato de butilo en el Reactor Batch

Los ensayos experimentales para la síntesis del acetato de butilo en el reactor Batch, permitieron evaluar la conversión midiendo el volumen de hidróxido de sodio

consumido en función al tiempo de reacción. Los ensayos se realizaron por duplicado. En la tabla 10 se presentan los resultados obtenidos del gasto de NaOH a temperaturas de 80 °C, 90 °C y 95 °C.

Tabla 10

Gasto de NaOH a temperatura de 80 °C, 90 °C y 95 °C.

Tiempo (s)	Temperatura 80°C			Temperatura 90°C			Temperatura 95°C		
	$V1_{NaOH}$ (ml)	$V2_{NaOH}$ (ml)	V_{prom} (ml)	$V1_{NaOH}$ (ml)	$V2_{NaOH}$ (ml)	V_{prom} (ml)	$V1_{NaOH}$ (ml)	$V2_{NaOH}$ (ml)	V_{prom} (ml)
0	33.9	34.1	34	32.9	33.3	33.1	32.9	33.3	34
1800	34	33.8	33.9	31.4	31.4	31.4	32.5	32.1	32.2
3600	33	32.8	32.9	29.4	29.6	29.5	31.4	31.4	30
7200	30.9	31.1	31	25.4	25.5	25.45	29.4	29.6	24.9
10800	28.1	27.9	28	21.4	21.6	21.5	25.4	25.5	20.7
14400	25.9	25.7	25.8	18.5	18.3	18.4	21.4	21.6	18.3
18000	22.3	22.3	22.3	17.2	17	17.1	18.5	18.3	16.7
21600	19.8	20.2	20	16	16	16	17.2	17	15.9
25200	19.6	19.4	19.5	15.5	15.4	15.4	16	16	15.3
28800	18.8	19.0	18.9	14.7	14.9	14.8	14.5	15.4	14.7

Los valores obtenidos de gasto de hidróxido de sodio han permitido determinar el grado de conversión del acetato de butilo.

En la tabla 11 se muestra los resultados obtenidos de Moles de ácido acético residual y la conversión del acetato de butilo a las temperaturas de 80, 90 y 95 °C.

Tabla 11

Matriz de datos experimentales en el reactor Batch.

Tiempo (s)	Temperatura 80°C			Temperatura 90°C			Temperatura 95°C		
	$V_{NaOH(ml)}$	N_A	X	$V_{NaOH(ml)}$	N_A	X	$V_{NaOH(ml)}$	N_A	X
0	34	1.084	0.00	33.1	1.055	0.00	34	1.084	0.00
1800	33.9	1.080	0.03	31.4	1.001	0.051	32.2	1.026	0.053
3600	32.9	1.049	0.032	29.5	0.940	0.109	30	0.956	0.118
7200	31	0.988	0.088	25.45	0.811	0.231	24.9	0.794	0.268
10800	28	0.892	0.176	21.5	0.685	0.350	20.7	0.660	0.391
14400	25.8	0.822	0.241	18.4	0.586	0.444	18.3	0.583	0.462
18000	22.3	0.711	0.344	17.1	0.545	0.483	16.7	0.532	0.509
21600	20	0.637	0.412	16	0.510	0.517	15.9	0.507	0.532
25200	19.5	0.621	0.426	15.4	0.491	0.535	15.3	0.488	0.550
28800	18.9	0.602	0.444	14.8	0.472	0.553	14.7	0.469	0.568

Las representaciones gráficas del consumo de ácido acético y de la conversión del acetato de butilo a diferentes temperaturas se presentan en las figuras 7, 8 y 9.

Figura 7

Variación de moles de ácido acético y acetato de butilo a 80 °C

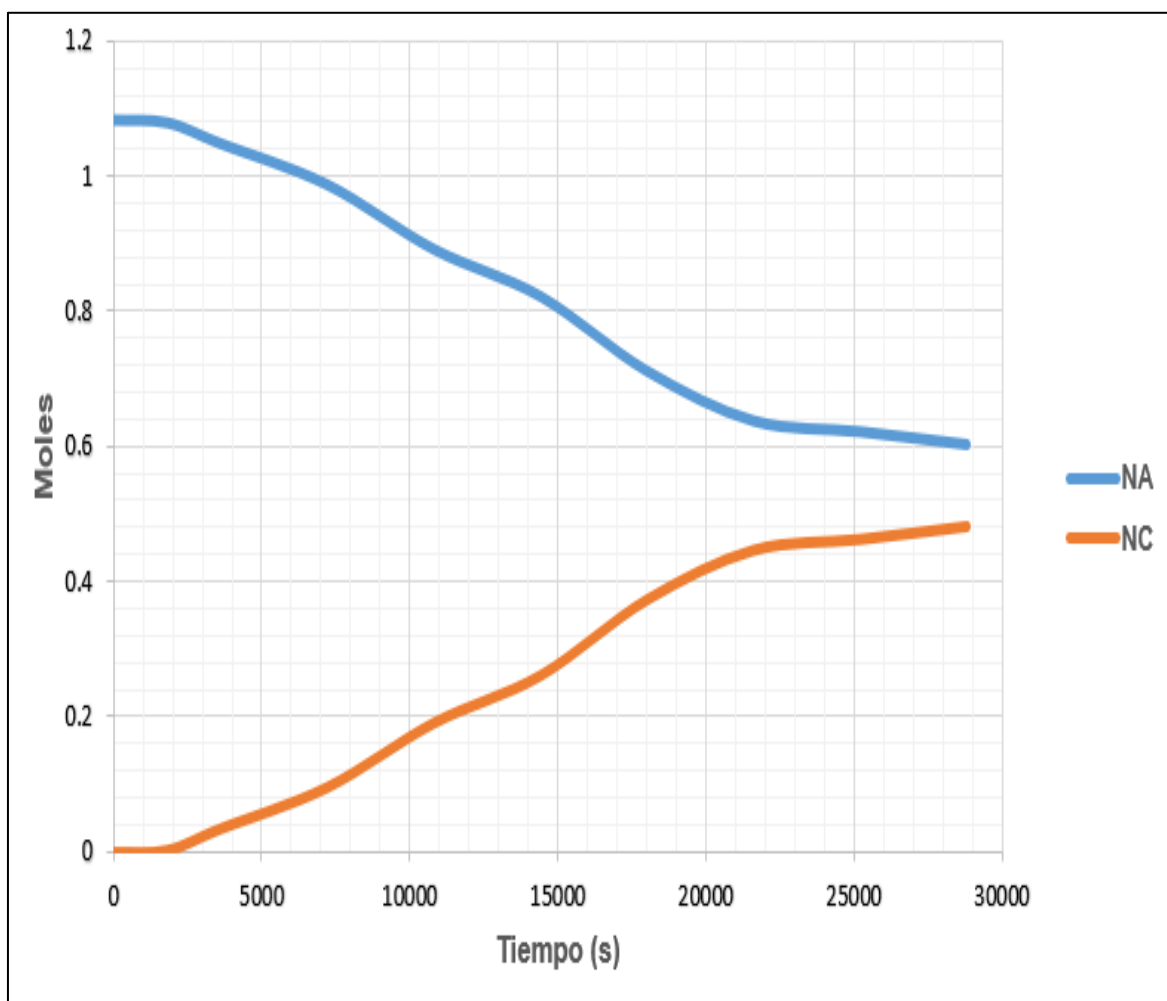


Figura 8

Variación de moles de ácido acético y acetato de butilo a 90 °C

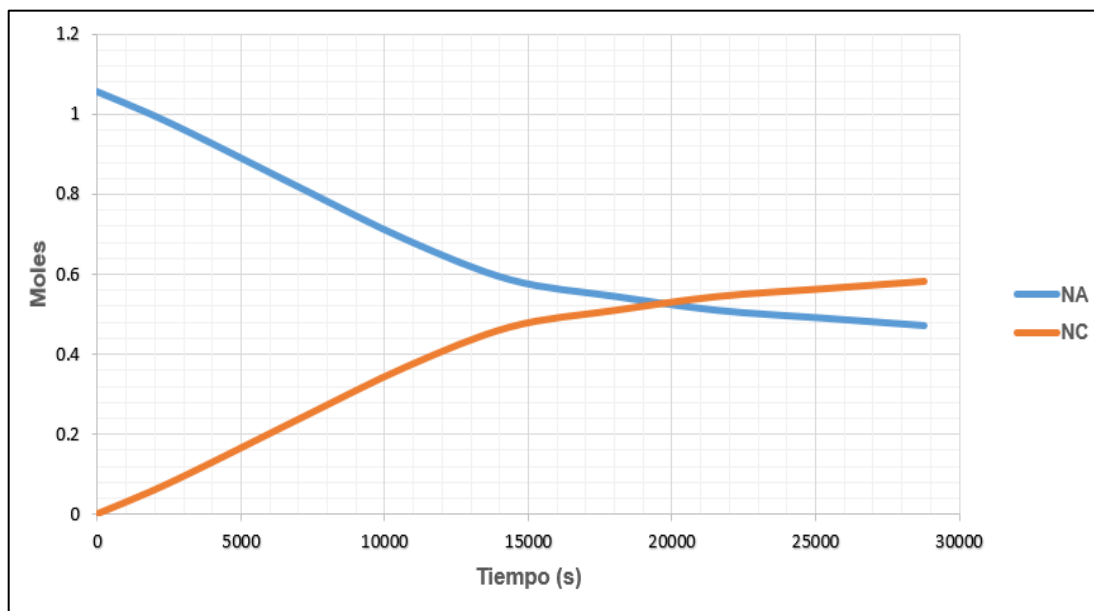
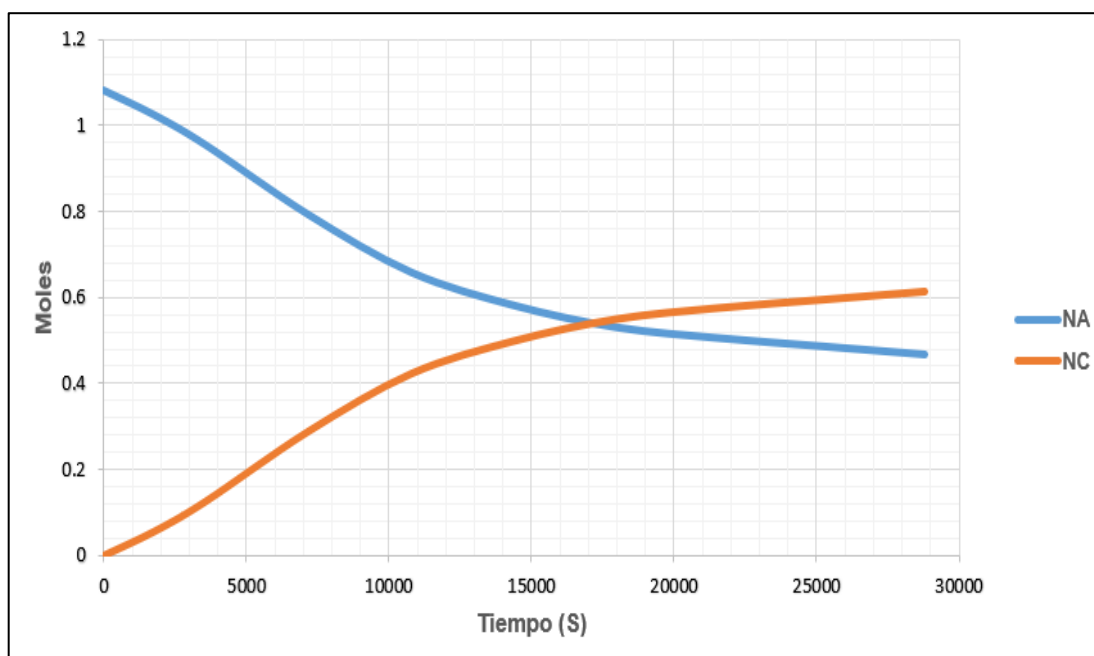


Figura 9

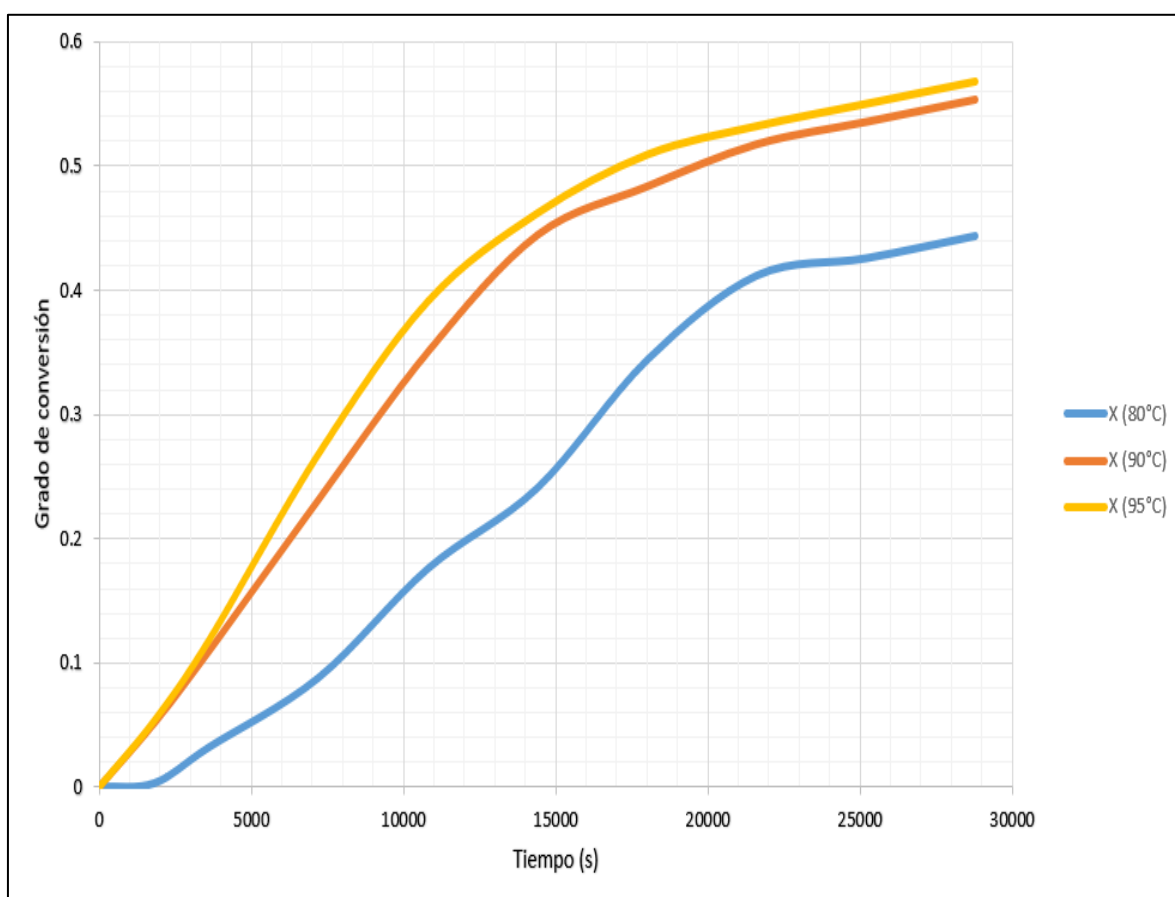
Variación de moles de ácido acético y acetato de butilo en el tiempo a 95 °C



En la figura 10, se presenta un consolidado del grado de conversión de acetato de butilo a las temperaturas de 80, 90 y 95 °C.

Figura 10

Conversión de acetato de butilo con respecto al tiempo a distintas temperaturas



Se muestra también las concentraciones de reactantes y productos con respecto al tiempo para las diferentes temperaturas de reacción. En la tabla 12 se puede apreciar los resultados de estos cálculos.

Tabla 12

Concentración de reactantes y productos con respecto al tiempo para cada temperatura de reacción.

Tiempo (s)	Temperatura (80°C)			Temperatura (90°C)			Temperatura (95°C)		
	C_A	C_B	C_C	C_A	C_B	C_C	C_A	C_B	C_C
0	6.902	6.720	0.000	6.719	6.720	0.000	6.902	6.720	0.000
1800	6.882	6.699	0.020	6.374	6.375	0.345	6.537	6.354	0.365
3600	6.679	6.496	0.223	5.989	5.989	0.731	6.090	5.908	0.812
7200	6.293	6.111	0.609	5.166	5.167	1.553	5.055	4.872	1.847
10800	5.684	5.502	1.218	4.365	4.365	2.355	4.202	4.020	2.700
14400	5.237	5.055	1.665	3.735	3.736	2.984	3.715	3.533	3.187
18000	4.527	4.345	2.375	3.471	3.472	3.248	3.390	3.208	3.512
21600	4.060	3.878	2.842	3.248	3.248	3.471	3.228	3.045	3.674
25200	3.959	3.776	2.944	3.126	3.127	3.593	3.106	2.924	3.796
28800	3.837	3.654	3.065	3.004	3.005	3.715	2.984	2.802	3.918

En las figuras 11, 12 y 13 se grafica las concentraciones de los reactantes y productos a diferentes temperaturas de reacción.

Figura 11

Concentración de reactantes y productos vs tiempo a 80 °C

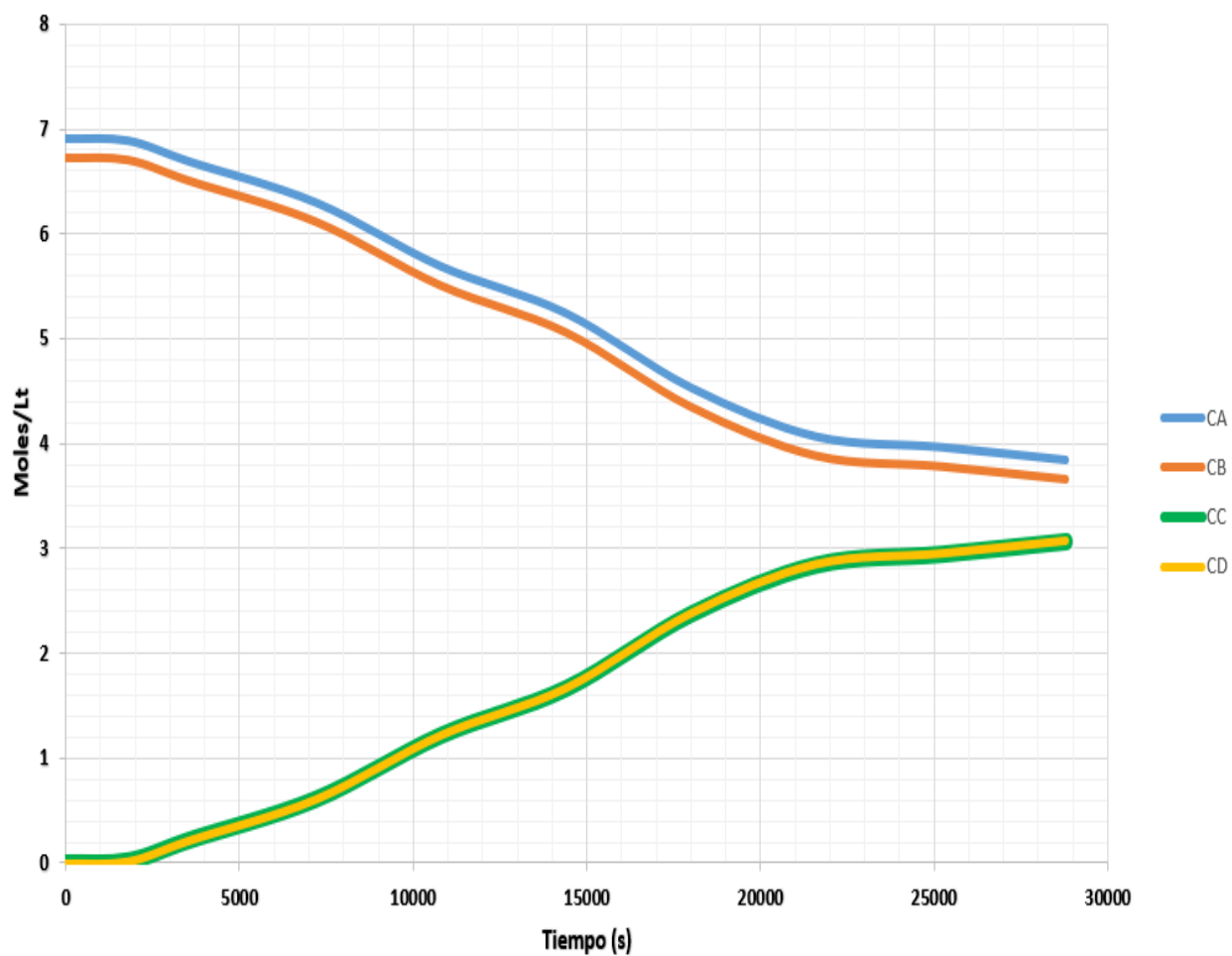


Figura 12

Concentración de reactantes y productos vs tiempo a 90 °C

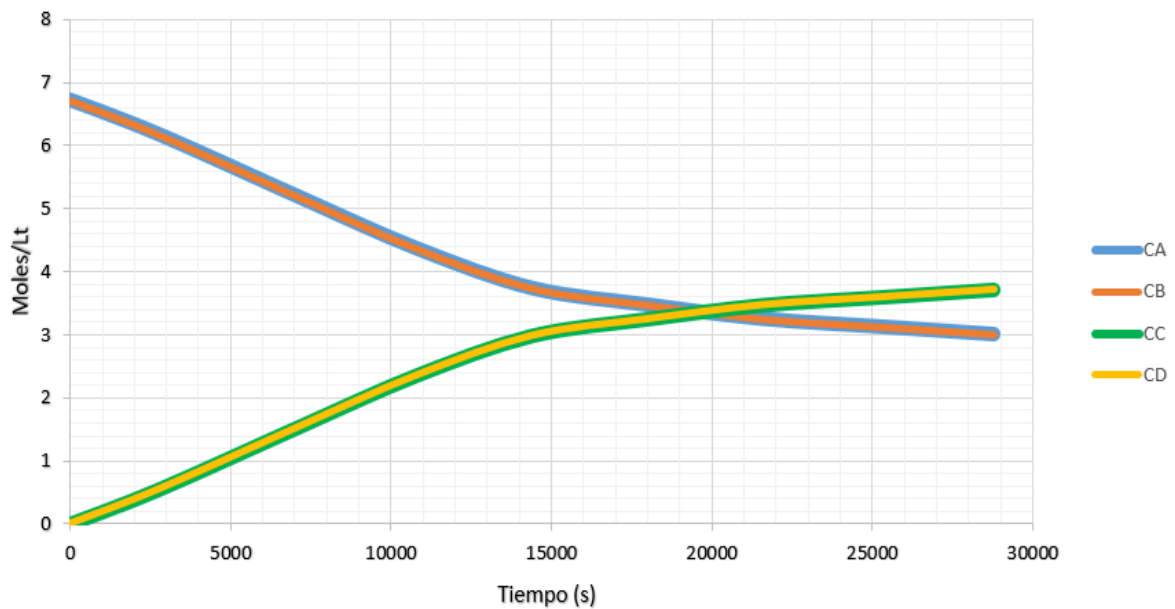
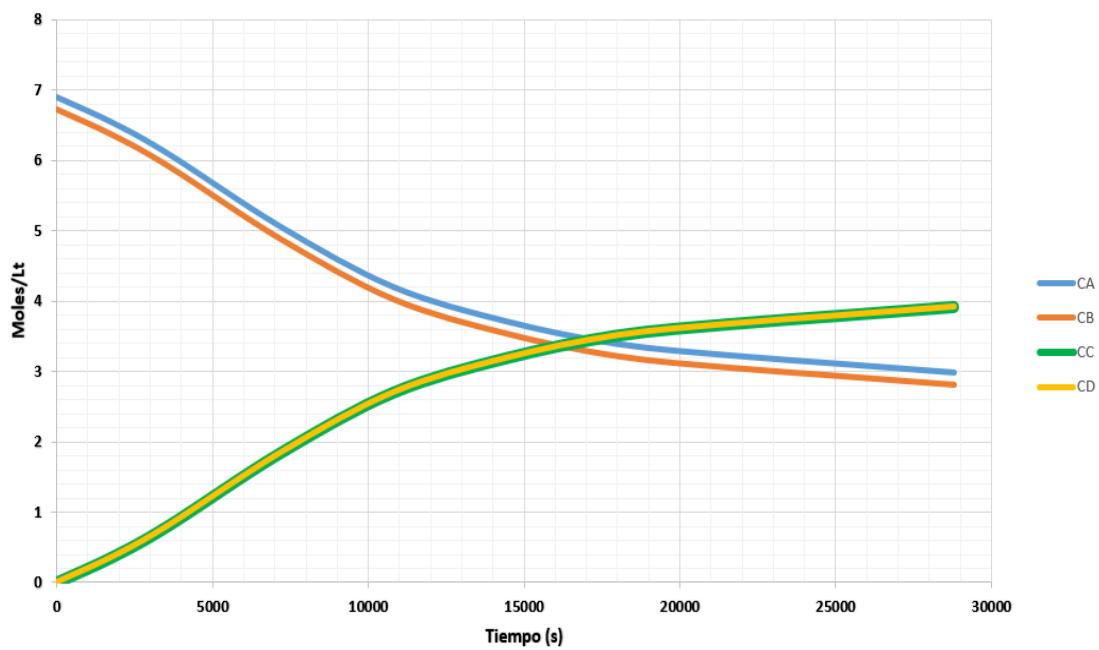


Figura 13

Concentración de reactantes y productos vs tiempo a 95 °C



En las figuras 14, 15 y 16 se grafica la disminución de la concentración de ácido acético con respecto al tiempo para cada experiencia de temperatura; de esta gráfica se obtiene la ecuación ajustada de concentración, quien es derivada para obtener la función de velocidad de reacción para cada experiencia.

Las ecuaciones ajustadas a distintas temperaturas se pueden observar en el anexo 2.

Figura 14

Ajuste no lineal de la disminución de la concentración de ácido acético con respecto al tiempo a temperatura de 80 °C

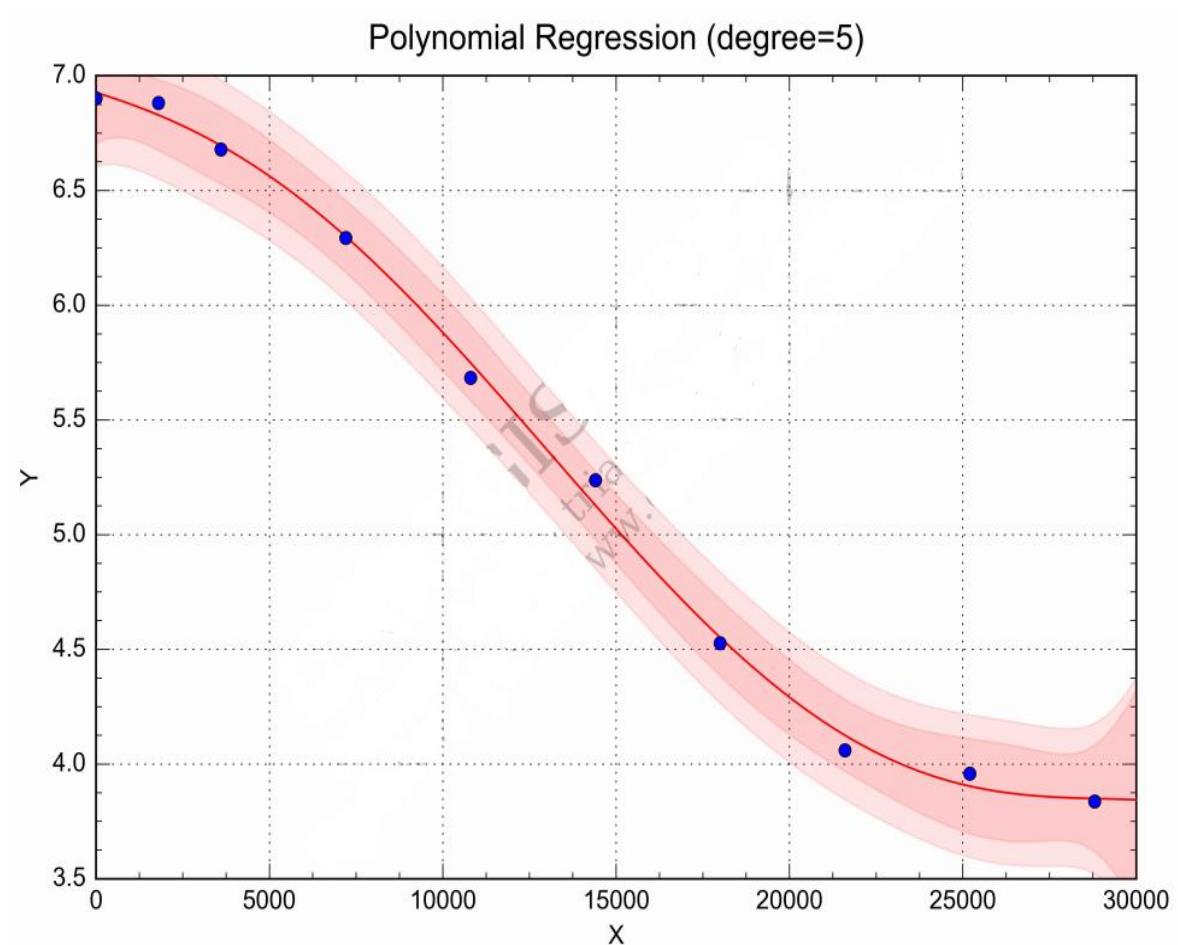


Figura 15

Ajuste no lineal de la disminución de la concentración de ácido acético con respecto al tiempo a temperatura de 90 °C

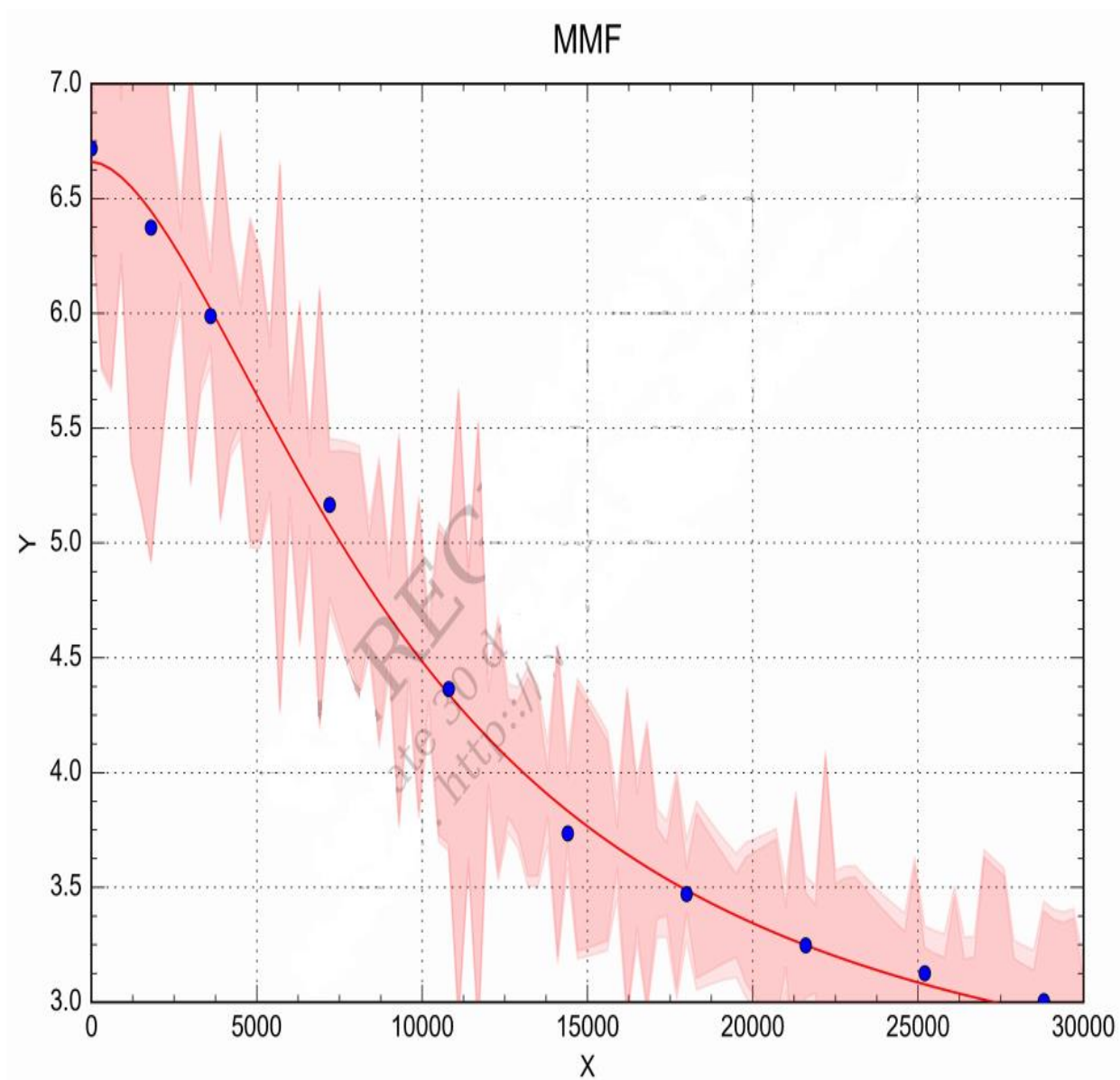
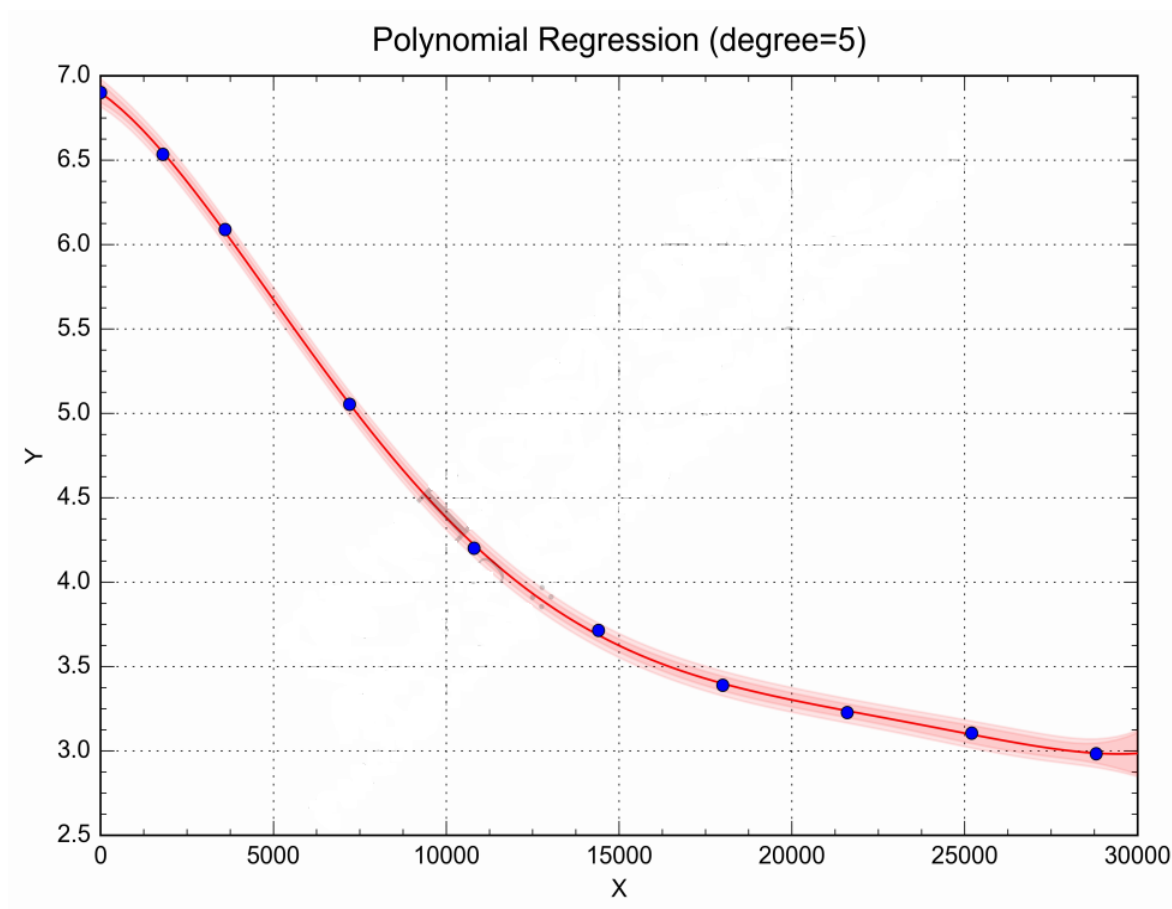


Figura 16

Ajuste no lineal de la disminución de la concentración de ácido acético con respecto al tiempo a temperatura de 95 °C



A continuación, se muestran las tablas 15, 16 y 17; en donde podemos observar los resultados del tratamiento estadístico de datos de velocidad de reacción a diferentes temperaturas. Este análisis nos permite hallar la ecuación que mejor se ajusta a nuestros datos experimentales; esta ecuación final nos permitió hallar las constantes de velocidad y por relación de estas la constante de equilibrio.

Tabla 13

Análisis estadístico a la temperatura de 80 °C.

t (s)	Y=dCA/dt	Y _{EST}	D = Y _{EST} - Y	(Y _{EST} - Y) ²
0	0	-0.00004757	-0.00004757	2.2629E-09
1800	-1.1278E-05	-6.308E-05	-5.18022E-05	2.68347E-09
3600	-1.1278E-04	-8.54157E-05	2.73621E-05	7.48684E-10
7200	-1.0714E-04	-0.000134067	-2.69281E-05	7.25121E-10
10800	-1.6917E-04	-0.000167663	1.50325E-06	2.25976E-12
14400	-1.2406E-04	-0.000171759	-4.77031E-05	2.27559E-09
18000	-1.9736E-04	-0.00014332	5.40407E-05	2.9204E-09
21600	-1.2969E-04	-9.07302E-05	3.89642E-05	1.51821E-09
25200	-2.8194E-05	-3.37837E-05	-5.58923E-06	3.12395E-11
28800	-3.3833E-05	-3.69043E-06	3.01429E-05	9.08594E-10
Sumatoria			-2.7579E-05	1.40765E-08

Estimación de la diferencia pareada

Media	Desv.Est.	Error estándar de la media	IC de 95% para la diferencia_μ
0.000003	0.000039	0.000012	(-0.000025;0.000031)

diferencia_μ: media de (Y=dCA/dt - Y_EST)

Prueba

Hipótesis nula H₀: diferencia_μ = 0
 Hipótesis alterna H₁: diferencia_μ ≠ 0

Valor T	Valor p
0.22	0.830

Por lo tanto, se obtiene las constantes cinéticas y de equilibrio siguientes:

$$k_1 = 7.6458E-06 \text{ (L/mol)s}^{-1} \qquad k_2 = 0.000009059 \text{ (L/mol)s}^{-1}$$

$$K_{eq} = k_1/k_2 = 0.844$$

Tabla 14

Análisis estadístico a la temperatura de 90 °C.

t (seg)	Y=dCA/dt	Y _{EST}	D = Y _{EST} - Y	(Y _{EST} - Y) ²
0	0	0	0	0
1800	-0.000191722	-0.000196945	-5.22309E-06	2.72807E-11
3600	-0.000214278	-0.000262306	-4.80277E-05	2.30666E-09
7200	-0.000228375	-0.000239898	-1.15233E-05	1.32786E-10
10800	-0.000222736	-0.000170499	5.22376E-05	2.72876E-09
14400	-0.000174806	-0.000115511	5.92942E-05	3.5158E-09
18000	-7.33056E-05	-7.90588E-05	-5.75325E-06	3.30999E-11
21600	-6.20278E-05	-5.55565E-05	6.47128E-06	4.18775E-11
25200	-3.38333E-05	-4.01926E-05	-6.35931E-06	4.04408E-11
28800	-3.38333E-05	-2.98857E-05	3.94759E-06	1.55835E-11
	Sumatoria		4.5064E-05	8.84229E-09

Estimación de la diferencia pareada

Media	Desv.Est.	Error estándar de la media	IC de 95% para la diferencia_μ
-0.000005	0.000031	0.000010	(-0.000027; 0.000018)

diferencia_μ: media de (Y=dCA/dt - Y_EST)

Prueba

Hipótesis nula H₀: diferencia_μ = 0

Hipótesis alterna H₁: diferencia_μ ≠ 0

Valor T	Valor p
-0.46	0.656

Por lo tanto, se obtiene las constantes cinéticas y de equilibrio siguientes:

$$k_1 = 0.000010326 \text{ (L/mol)s}^{-1}$$

$$k_2 = 4.48908E-06 \text{ (L/mol)s}^{-1}$$

$$K_{eq} = k_1/k_2 = 2.3$$

Tabla 15

Análisis estadístico a la temperatura de 95 °C.

t (seg)	Y=dCA/dt	Y _{EST}	D = Y _{EST} - Y	(Y _{EST} - Y) ²
0	0	-0.000144849	-0.000144849	2.09812E-08
1800	-0.000203	-0.000237613	-3.4613E-05	1.19806E-09
3600	-0.000248111	-0.000280617	-3.25062E-05	1.05665E-09
7200	-0.000287583	-0.000267767	1.98159E-05	3.92669E-10
10800	-0.000236833	-0.000191046	4.57869E-05	2.09644E-09
14400	-0.000135333	-0.000109451	2.58821E-05	6.69882E-10
18000	-9.02222E-05	-5.62287E-05	3.39935E-05	1.15556E-09
21600	-4.51111E-05	-3.88756E-05	6.23554E-06	3.8882E-11
25200	-3.38333E-05	-3.91384E-05	-5.30504E-06	2.81434E-11
28800	-3.38333E-05	-1.30136E-05	2.08197E-05	4.33462E-10
Sumatoria			-6.4740E-05	2.8051E-08

Estimación de la diferencia pareada

Media	Desv.Est.	Error estándar de la media	IC de 95% para la diferencia_μ
0.000006	0.000055	0.000018	(-0.000033; 0.000046)

diferencia_μ: media de (Y=dCA/dt - Y_EST)

Prueba

Hipótesis nula H₀: diferencia_μ = 0

Hipótesis alterna H₁: diferencia_μ ≠ 0

Valor T	Valor p
0.37	0.720

Por lo tanto, se obtiene las constantes cinéticas y de equilibrio siguientes:

$$k_1 = 5.5498E-06 \text{ (L/mol)}s^{-1}$$

$$k_2 = 0.00000232 \text{ (L/mol)}s^{-1}$$

$$K_{eq} = k_1/k_2 = 2.392$$

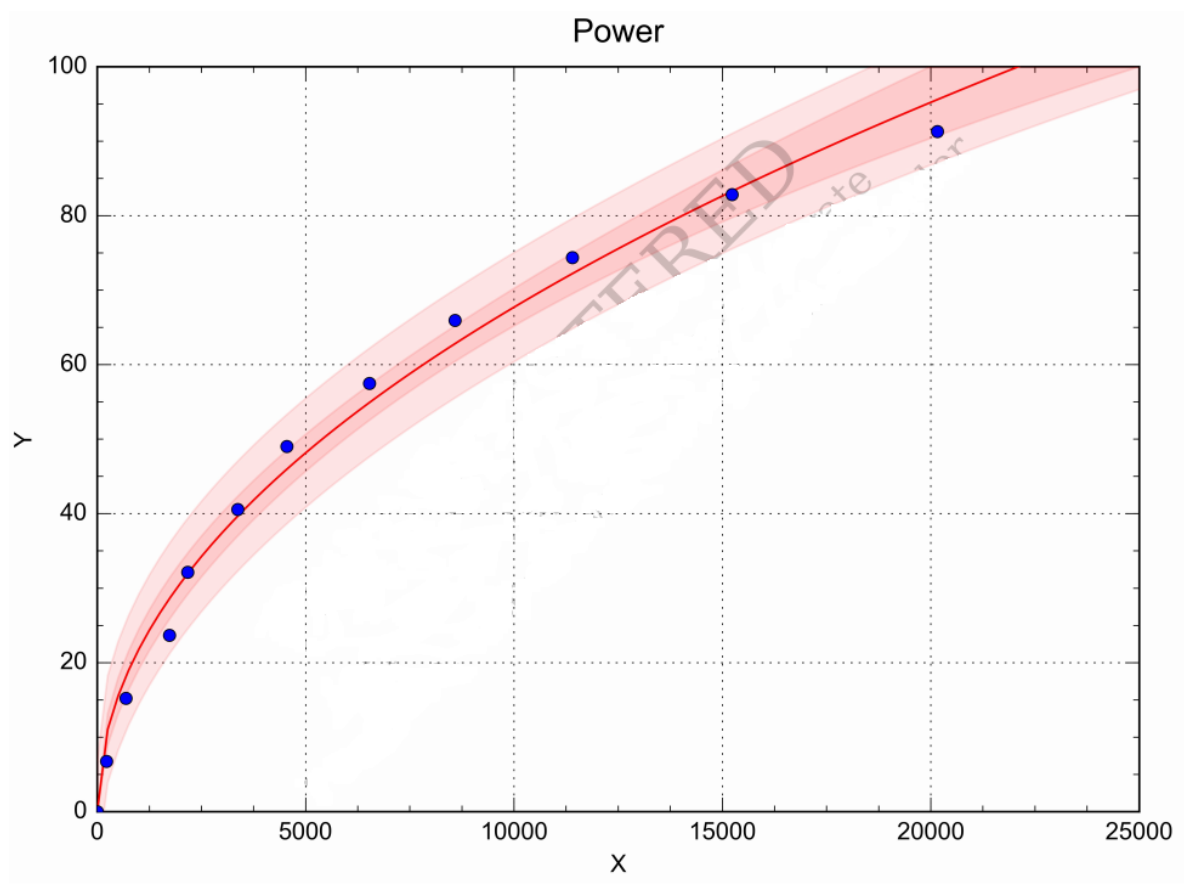
5.3.2 Síntesis de acetato de butilo en el Reactor semicontinuo esférico

Para esta etapa de la investigación se realizó ensayos a la temperatura de 95 °C. ya que a esta temperatura se reportaron los mayores resultados de grado de conversión dentro del reactor Batch.

En la figura 17 se grafica el volumen de ingreso del n-butanol al reactor con a la variable independiente tiempo.

Figura 17

Volumen de ingreso de n-butanol al reactor respecto al tiempo a temperatura de 95 °C



Esta ecuación no lineal es derivada para hallar la ecuación de caudal de ingreso.

$$\frac{dV_{n-Butanol}}{dt} = 0.3594 X^{(-0.5083)} \quad (34)$$

En la tabla 16, se muestra el volumen y caudal de ingreso del reactante n-butanol al reactor esférico con respecto al tiempo.

Tabla 16

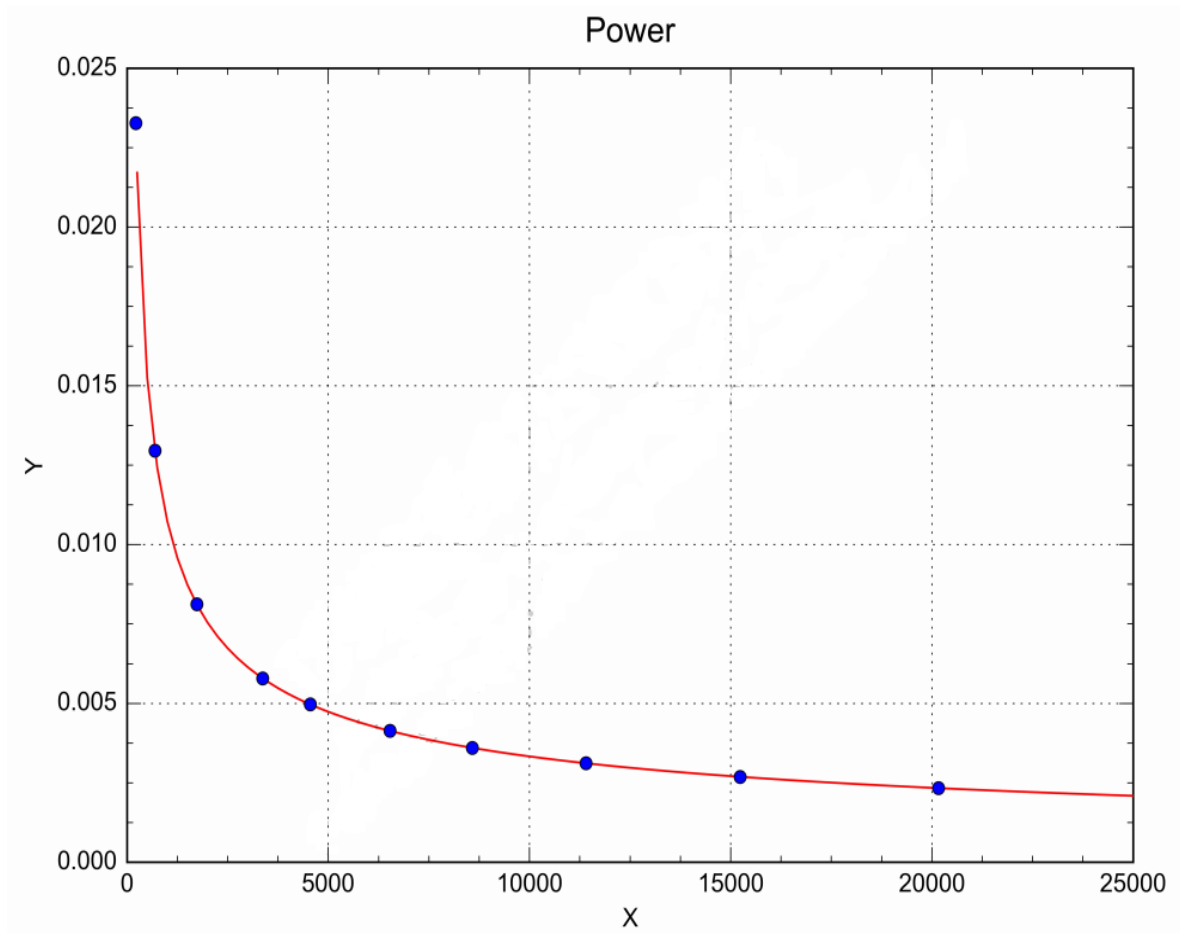
Volumen y caudal de reactante con respecto al tiempo a la temperatura de 95 °C.

t (seg)	V(ml)	dV/dt (ml/s)
0	0	0
218	6.76352384	0.023277731
690	15.21792864	0.012959585
1730	23.67233344	0.008122304
3370	40.58114304	0.005787404
4550	49.03554784	0.004968335
6530	57.48995264	0.00413483
8580	65.94435744	0.003599038
11400	74.39876224	0.003114966
15230	82.85316704	0.00268851
20160	91.30757184	0.00233134

La figura 18 muestra el caudal de ingreso del n-butanol con respecto al tiempo.

Figura 18

Caudal de ingreso de n-butanol al reactor respecto al tiempo a temperatura de 95 °C



En la tabla 17 se observan los resultados experimentales para la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico.

Tabla 17

Grados de conversión en el reactor semicontinuo esférico a temperatura de 95°C

t (s)	V_{NaOH} (ml)	$N_{A(exp.)}$	$X_{(exp.)}$
0	80.5	1.05607	0
900	59.7	1.04546	0.01004
3600	46	1.00789	0.04562
7200	37	0.94443	0.10572
10800	31	0.87687	0.16969
12600	28.2	0.83159	0.21256
14400	26.5	0.81109	0.23197
16200	25.1	0.79458	0.24761
18000	21.3	0.69540	0.34152
20160	20.5	0.69235	0.34441

5.3.3 Modelado y simulación

Según las ecuaciones de modelado, ecuaciones de transferencias de materia, velocidad de reacción y caudal de ingreso de reactante n-butanol. Se muestran los resultados de moles de ácido acético residual y grado de conversión de la simulación ejecutada en el programa Polymath 6.0.

La tabla 18 muestra los resultados obtenidos en el programa computacional.

Tabla 18

Grados de conversión obtenidos por simulación en el programa Polymath 6.0

Tiempo (s)	Temperatura 95 °C	
	$N_{A(sim.)}$	$X_{(sim.)}$
0	1.056	0
900	1.04622	0.00815
3600	0.99535	0.05585
7200	0.91983	0.12736
10800	0.84783	0.19566
12600	0.81402	0.22775
14400	0.78697	0.25342
16200	0.75158	0.28702
18000	0.72273	0.31441
20160	0.69028	0.34597

Los resultados experimentales y simulados son comparados mediante error absoluto y relativo. En la tabla 19 se muestran los valores de estos errores a diferentes intervalos de tiempo.

Tabla 19

Comparación de grados de conversión en el reactor semicontinuo esférico a temperatura de 95°C

t (s)	$X_{(sim.)}$	$X_{(exp.)}$	Error absoluto	%Error relativo
900	0.00815	0.01004	0.00189	18.83711
3600	0.05585	0.04562	0.01023	22.41791
7200	0.12736	0.10572	0.02165	20.47629
10800	0.19566	0.16969	0.02597	15.30731
12600	0.22775	0.21256	0.01518	7.14335
14400	0.25342	0.23197	0.02145	9.24713
16200	0.28702	0.24761	0.03941	15.91772
18000	0.31441	0.34152	0.02711	7.93781
20160	0.34597	0.34441	0.00156	0.45415

En la tabla 20 se muestran los resultados del análisis de varianza entre los resultados de grados de conversión experimentales y simulados.

Tabla 20

Determinación de diferencias entre los datos de conversión simulada y la conversión experimental

t (s)	$X_{(sim.)}$	$X_{(exp.)}$	$X_{(sim.)} - X_{(exp.)}$	$(X_{(sim.)} - X_{(exp.)})^2$
900	0.00815	0.01004	-0.00189	0.0000036
3600	0.05585	0.04562	0.01023	0.0001046
7200	0.12736	0.10572	0.02165	0.0004686
10800	0.19566	0.16969	0.02597	0.0006747
12600	0.22775	0.21256	0.01518	0.0002306
14400	0.25342	0.23197	0.02145	0.0004601
16200	0.28702	0.24761	0.03941	0.0015534
18000	0.31441	0.34152	-0.02711	0.0007349
20160	0.34597	0.34441	0.00156	0.0000024
	Sumatoria		0.10646	0.0042329

Estimación de la diferencia pareada

Media	Desv.Est.	Error estándar de la media	IC de 95% para la diferencia_μ
0.01183	0.01928	0.00643	(-0.00299; 0.02665)

diferencia_μ: media de $(X_{(sim.)} - X_{(exp.)})$

Prueba

Hipótesis nula $H_0: \text{diferencia}_\mu = 0$

Hipótesis alterna $H_1: \text{diferencia}_\mu \neq 0$

Valor T	Valor p
1.84	0.103

VI. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

6.1 Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados

6.1.1 Respecto a las hipótesis específicas

- ✓ Los ensayos experimentales en el reactor Batch permitieron encontrar las constantes cinéticas y de equilibrio a distintas temperaturas, considerando que la reacción química se llevó a cabo en fase homogénea. Bajo esta consideración no se tomó en cuenta la naturaleza del catalizador y solamente se realizó la evaluación en la fase líquida.

Se realizó un ajuste no lineal a las velocidades de reacción experimentales en el reactor Batch, para las temperaturas de 80°C, 90°C y 95°C, mediante el programa CurveExpert Professional 2.6.5. Estas ecuaciones de ajuste fueron evaluadas mediante la estadística de comparación de medias de dos tratamientos para muestras dependientes en el programa Minitab 19, obteniéndose los valores **p** iguales a 0.83, 0.656 y 0.72 para los ajustes de ecuaciones no lineales, a las temperaturas de 80, 90 y 95 °C respectivamente. Los modelos obtenidos por ese ajuste son aceptables en todas las distintas experimentaciones a diferentes temperaturas, con un nivel de significancia de 5%.

Se seleccionó la temperatura de 95 °C como la más adecuada para llevar a cabo la reacción, ya que a esta temperatura se logró alcanzar un mayor grado de conversión.

Los valores de las constantes cinéticas $k_1 = 5.5498 \times 10^{-6} \text{ (L/mol)s}^{-1}$, $k_2 = 2.32 \times 10^{-6} \text{ (L/mol)s}^{-1}$) y de equilibrio $K_{eq} = 2.392$ a la temperatura de $95 \text{ }^\circ\text{C}$ fueron utilizadas en el modelo desarrollado para la simulación de la síntesis.

Aceptándose por lo tanto la hipótesis nula, H_0 : Se podría llegar a la conclusión de que no existe una diferencia significativa entre los datos experimentales de velocidad de reacción y la ecuación ajustada.

- ✓ El diseño experimental permitió determinar las condiciones favorables en cuanto a la temperatura y tiempo de reacción de la síntesis del acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico. Para la temperatura de $95 \text{ }^\circ\text{C}$ se obtuvo un mayor grado de conversión (56.8%) en comparación con las otras temperaturas evaluadas, $80 \text{ }^\circ\text{C}$ (44.4%) y $90 \text{ }^\circ\text{C}$ (55.3%).

La variable tiempo de reacción se obtuvo mediante la medición de la dosificación del reactante n-butanol hasta lograr el ingreso total del reactante al reactor esférico, resultando un valor de 5.6 horas. La variable velocidad de agitación se fijó a 450 rpm en todos los experimentos para asegurar la ausencia de resistencia de la transferencia de masa externa.

Se pudo hallar la ecuación de flujo de ingreso del reactante mediante la medición de volumen de caída del reactante a distintos tiempos, estos datos fueron tratados en el programa CurveExpert Professional 2.6.5, el cual nos dio una ecuación no lineal que permitió calcular el flujo, que se utilizó en el modelado de la síntesis del acetato de butilo.

- ✓ La aplicación de las ecuaciones cinéticas de reacción conjuntamente con los balances de materia permitió desarrollar el modelo a utilizar en la simulación de la síntesis del acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico. Se utilizaron las ecuaciones cinéticas considerando una reacción homogénea en fase líquida sobre el catalizador Amberlite IR-120 y los balances de materia para cada uno de sus componentes.

Para la simulación de la síntesis en base al modelo desarrollado se utilizó el programa Polymath 6.0 aplicando el modelo Runge Kutta Fehlberg para la obtención de los grados de conversión.

6.1.2 Respecto a la hipótesis general

Mediante el modelado matemático se ha podido hacer la simulación de la síntesis del acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico, utilizando las ecuaciones de conservación de materia y las leyes de la cinética química.

Los resultados obtenidos en la simulación referidos al grado de conversión, al ser comparados con los datos obtenidos experimentalmente, muestran un porcentaje de error absoluto y relativo bajo. Esta comparación nos permite inferir que el modelo matemático obtenido permite hacer una adecuada simulación de la síntesis del acetato de butilo.

En ese sentido, el modelo obtenido simula adecuadamente la síntesis estudiada, ya que se obtuvieron valores pequeños de errores en cada intervalo de tiempo, los cuales fueron disminuyendo hasta el tiempo final de la reacción, alcanzándose un 0.45% de error.

Esto pudo ser demostrado también con un análisis estadístico, que consistió en la aplicación de la prueba estadística de comparación de medias de dos tratamientos en el programa Minitab 19. Se obtuvieron los siguientes parámetros estadísticos: una media aritmética igual a 0.01183 y una desviación estándar de 0.01928 para un intervalo de confianza de (-0.0029; 0.02665) a un 95%, un valor probabilidad (**p**) igual a 0.103 y un valor **T** de prueba estadística igual a 1.84, que indica que la hipótesis nula planteada se encuentra dentro de la zona de aceptación.

Esta prueba indica que los valores de grado de conversión del acetato de butilo reportados por el programa Polymath 6.0 y la parte experimental de la síntesis de esterificación tienen una similitud aceptable con un nivel de significancia de 5%.

En consecuencia, se acepta la hipótesis nula, **H₀** : Se podría llegar a la conclusión de que no existe una diferencia significativa entre los valores de conversión simulada y experimental.

Por lo tanto, existe una dependencia de la simulación de la síntesis del acetato de butilo con respecto a las ecuaciones de conservación de materia, cinética química y las condiciones de operación.

6.2 Contrastación de los resultados con otros estudios similares

Los resultados obtenidos de las constantes de velocidad de reacción y de equilibrio, asumiendo una reacción química homogénea en el reactor Batch, es similar a los resultados obtenidos por Dhanuka (1976). en donde se reportan valores de 2.7- 2.87 para la constante de equilibrio en presencia de catalizadores ácidos a la temperatura

de 100 °C. Estos valores son concordantes con los obtenidos en el presente trabajo de investigación donde la constante de equilibrio K_{eq} es igual a 2.392.

Los resultados obtenidos para el grado de conversión en el presente estudio son comparados a los resultados de otros autores.

Citak, A y Altiokka, M. (2003), en su estudio de la cinética de esterificación de ácido acético con isobutanol en presencia del catalizador Amberlite utilizando un reactor discontinuo agitado en dioxano, obtuvo un grado de conversión de aproximadamente 44% en condiciones de 45 °C a 75 °C de temperatura, 600 rpm de velocidad de agitación, relación molar de 1/1. Este resultado se asemeja con los obtenidos en este trabajo de investigación en el cual se obtuvo una conversión 44.4% a similares condiciones, temperatura de 80 °C, 450 rpm de velocidad de agitación y relación molar de 1/1. Mientras que en las otras temperaturas evaluadas por ser mayores se obtienen un mayor grado de conversión.

Orjuela, Leiva, Boyacá, Rodríguez, y Carballo (2005), en su estudio sobre el análisis de las condiciones de equilibrio de la síntesis de acetato de butilo en un reactor Batch, obtiene un valor aproximado entre 60%-63% de conversión, obtuvo una conversión mayor a nuestro trabajo debido que en este estudio el catalizador usado es la resina Lewatit K-2431 a diferentes cantidades (0.5%, 1%, 2% p/p), 800 rpm de velocidad de agitación, condiciones de operación de (73°C, 80°C, 87°C) de temperatura y relación molar de alimentación (ácido/alcohol 1:2, 1:1, 2:1,). Además, uso destilación reactiva o catalítica (DR), tecnología que reúne simultáneamente y

en una sola unidad, la reacción química y la separación, por lo cual obtiene conversiones muy superiores a las del equilibrio.

6.3 Responsabilidad ética

Los autores de la investigación se responsabilizan por la información emitida en el presente informe final de investigación, de acuerdo al Reglamento del Código de Ética de la investigación de la UNAC, Resolución del consejo Universitario N° 260-2019-CU.

CONCLUSIONES

- ✓ Se determinó experimentalmente en un reactor Batch, que la temperatura de 95°C era la más adecuada para la síntesis del acetato de butilo obteniéndose un grado de conversión del 56.8%. Así mismo se determinaron las constantes de velocidad de la reacción k_1 igual a $5.5498\text{E-}06$ $(\text{L/mol})\text{s}^{-1}$ y k_2 igual a $2.32\text{E-}06$ $(\text{L/mol})\text{s}^{-1}$; y la constante de equilibrio K_{eq} igual a 2.392.
- ✓ Se pudo determinar en el reactor semicontinuo esférico experimental, que utilizando cantidades estequiométricas de los reactantes se alcanzó una conversión de 34% en un tiempo de 5.6 horas.
- ✓ El modelo matemático desarrollado para la síntesis del acetato de butilo permitió una simulación adecuada de la reacción, lo que se verifica mediante la prueba de comparación de medias con un resultado de (T) igual a 1.84, y con una probabilidad igual a 0.103; indicativo de que los grados de conversión comparados son similares para un nivel de significancia del 5%.

RECOMENDACIONES

- ✓ Ampliar el estudio de la síntesis del acetato de butilo, utilizando los reactantes en diferentes relaciones molares, para un análisis de la eficiencia de reacción en este tipo de reactores.
- ✓ Realizar estudios de la esterificación con diferentes tipos de catalizadores de intercambio catiónico para determinar su influencia en la reacción.
- ✓ Realizar estudios con diferentes configuraciones de dosificado de reactantes, para evaluar su eficiencia de la síntesis en los distintos casos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Altiokka, M. y Citak, A. (2003), Kinetics study of esterification of acetic acid with isobutanol in the presence of amberlite catalyst. *Applied Catalysis A: General*, 239 (1-2),141-148.

[https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(02\)00381-2](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(02)00381-2).

Altiokka, M. y Akbay, E. (2011). Kinetics of esterification of acetic acid with n-amyl alcohol in the presence of Amberlyst-36. *Applied Catalysis A: General*, 396 (1-2),14-19.

<https://doi.org/10.1016/j.apcata.2011.01.013>.

Bernal, C.(2010). *Metodología de la investigación*. Pearson.

<https://abacoenred.com/wp-content/uploads/2019/02/EI-proyecto-de-investigaci%C3%B3n-F.G.-Arias-2012-pdf.pdf>.

Cajahuanca, J., y LLacsa, I. (2009). *Estudio de la influencia de la temperatura del reactor batch en la esterificación del acetato de etilo empleando el sistema de control secuencial en el laboratorio de operaciones y procesos unitarios*. tesis profesional, Universidad Nacional del Centro del Perú.

http://repositorio.uncp.edu.pe/bitstream/handle/UNCP/240/T09_8.pdf?sequence=1&isAllowed=y

Carrasco, L. y Castañeda, L. (2020). Modelamiento y simulación del proceso de esterificación del ácido acético con metanol en una configuración compleja. *Revista científica tecnologica campus*, 25(29),67-85.
<https://www.usmp.edu.pe/campus/pdf/revista29/articulo5.pdf>

Carrasco, L. (2011). *Fenómenos de transporte - Aplicación con métodos numéricos*. Perú Alfaomega Grupo Perú Editor.

Carrasco, L. (2019). *Modelamiento y simulación de los procesos en reactores químicos semicontinuos*. Informe final de investigación, Unidad de investigación de la facultad de Ingeniería Química UNAC.
<http://repositorio.unac.edu.pe/handle/UNAC/4024>

Chen, X., Feng, J. y Fei, Z. (2016). Synthesis of tert-butyl acetate via eco-friendly additive reaction over mesoporous silica catalysts with balanced Brønsted and Lewis acid sites. *Journal of Porous Materials*, 23(1), 255-262.
<https://doi.org/10.1007/s10934-015-0077-8>

Chuquihuamani, C. y Tineo, H. (2019). *Modelamiento y simulación del proceso de obtención de formiato de etilo en un reactor semicontinuo de geometría esférica*. tesis profesional, Universidad Nacional del Callao.
<http://repositorio.unac.edu.pe/handle/UNAC/4078>

Dhanuka, V., Malshe, V. y Chandalia, S. (1977). Kinetics of the liquid phase esterification of carboxylic acids with alcohols in the presence of acid catalysts: re-interpretation of published data. *Chemical Engineering Science*, 32(5), 551-556.

[https://doi.org/10.1016/0009-2509\(77\)87013-9](https://doi.org/10.1016/0009-2509(77)87013-9)

Fogler, H. (2016). *Essentials of Chemical Reaction Engineering*. Boston: Pearson.

<http://umich.edu/~elements/5e/>

Grau, M. (1999). *Estudio del comportamiento de reactores discontinuos y Semicontinuos: modelización y comprobación experimental*. Tesis profesional, Universitat Politècnica de Catalunya.

<http://hdl.handle.net/10803/6463>.

Hernández, R., Fernandez, C., y Baptista, P. (2014). *Metodología de la investigación*. mcgraw-hill / interamericana editores, s.a.

<https://www.uca.ac.cr/wp-content/uploads/2017/10/Investigacion.pdf>.

Levenspiel, O. (1987). *Ingeniería de las reacciones Químicas*. Editorial Reverté S.A.

<https://reaccionesunefm.files.wordpress.com/2009/02/levenspiel-o-partei.pdf>.

Londoño, Á. O., Lenis, F., Boyaca, L., Rodriguez, G. y Carballo, L. (2005). Estudio de la síntesis de acetato de butilo 2 - Analisis de las condiciones de equilibrio químico. *Revista ingeniería e investigación*,25(3),13–21.

<https://www.redalyc.org/pdf/643/64325302.pdf>.

Londoño, Á. O., Lenis, F., Boyaca, L., Rodriguez, G. y Carballo, L. (2006). Estudio de la síntesis de acetato de butilo 4 - Cinética de reacción. *Revista de Ingeniería e Investigación*,26(2),28–36.

<https://www.redalyc.org/pdf/643/64326205.pdf>

Londoño, Á. O., Lenis, F., Boyaca, L., Rodriguez, G. y Carballo, L. (2006). Estudio de la síntesis de acetato de butilo 3 - Analisis de adsorción sobre el catalizador. *Revista de Ingeniería e Investigación*,26(1),25–24.

<https://www.redalyc.org/pdf/643/64326101.pdf>

Machaca, L. (2011). *Ingeniería de Las Reacciones Químicas II (catalíticas y no catalíticas)*. Informe final de investigación, Instituto de investigación de la Facultad de Ingeniería Química UNAC.

https://unac.edu.pe/documentos/organizacion/vri/cdcitra/Informes_Finales_Investigacion/Setiembre_2011/IF_MACHACA%20GONZALES_FIQ/TEXTO.pdf

Martínez, V. y otros (2003). *Simulación de Procesos en Ingeniería Química*. Plaza y Valdéz editores.

<https://books.google.co.cr/books?id=yqCcMOy81JEC&printsec=frontcover#v=onepage&q&f=false>

Ramírez, B. (2011). *Evaluación del Factor de Efectividad en el Proceso de Obtención de Lactato de Etilo Catalizado con Amberlite IR 120*. Informe final de investigación, Unidad de investigación de la facultad de Ingeniería Química UNAC.

http://www.unac.edu.pe/documentos/organizacion/vri/cdcitra/Informes_Final_es_Investigacion/Setiembre_2011/IF_RAMIREZ%20DURAND_FIQ.pdf.

Scenna, N. (1999). *Modelado, simulación y optimización de procesos químicos*. Universidad Tecnológica Nacional, ISBN 978-950-42-0022-2 en la Agencia Argentina de ISBN Cámara Argentina del Libro.

<http://www.edutecne.utn.edu.ar/modelado-proc-quim/modelado-proc-quim.pdf>

Tejero, J., Cunill, F. y Iborra, M. (2010). *Reactores Químicos Apuntes*. Universitat de Barcelona.

<http://diposit.ub.edu/dspace/bitstream/2445/12703/1/APUNTS%20DE%20REACTORS%20QU%C3%8DMICS.pdf>

veritrade. (2018). *importaciones 291533: acetato de n-butilo*. recuperado el 16 de junio del 2021, de <https://www.veritradecorp.com/es/peru/importaciones-y-exportaciones/acetato-de-nbutilo/291533#>

ANEXO 1

Matriz de consistencia

Modelado y simulación de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico

PROBLEMA GENERAL	OBJETIVO GENERAL	HIPÓTESIS GENERAL	VARIABLE DEPENDIENTE	DIMENSIONES	INDICADOR	MÉTODO
<p>¿Cuál es el modelo matemático que permita simular la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico?</p>	<p>Definir el modelo matemático que permita la simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico.</p>	<p>El modelo matemático y simulación de la síntesis de Acetato de Butilo en un reactor semicontinuo esférico, depende de las ecuaciones de conservación de materia, cinética química y de las condiciones favorables de operación.</p>	<p>Y: Modelo matemático que permita la simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico.</p>	<p>Y1: velocidad de reacción del acetato de butilo</p> <p>Y2: variación de la conversión con respecto al tiempo</p>	<p>mol/L*t</p> <p>X = conversión</p>	<p>-Análisis numérico de datos por programa computacional.</p>
PROBLEMAS ESPECIFICOS	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	HIPÓTESIS ESPECIFICA	VARIABLE INDEPENDIENTE	DIMENSIONES	INDICADOR	MÉTODO
<p>a) ¿Cómo determinar experimentalmente las constantes cinéticas de la reacción?</p>	<p>Determinar las constantes cinéticas de la reacción de esterificación.</p>	<p>- Las constantes cinéticas de reacción se determinan experimentalmente, realizando la reacción de esterificación en un reactor del tipo Batch.</p>	<p>X₁: Constantes cinéticas de reacción de la síntesis de acetato de butilo k_1, k_2 y K_{eq}.</p>	<p>X1.1: constante de velocidad de reacción</p> <p>X1.2: constante de equilibrio</p>	<p>k_i (L/mol*t)</p> <p>$Keq = (k_1/k_2)$</p>	<p>-Método analítico, observacional y experimental por medio de un reactor Batch.</p>

PROBLEMAS ESPECIFICOS	OBJETIVOS ESPECIFICOS	HIPÓTESIS ESPECIFICA	VARIABLE INDEPENDIENTE	DIMENSIONES	INDICADOR	MÉTODO
b) ¿Cuáles son las condiciones favorables de operación para la síntesis de Acetato de Butilo en un reactor semicontinuo esférico?	Determinar las condiciones favorables de operación para la síntesis de Acetato de Butilo en un reactor semicontinuo esférico.	El diseño experimental permite determinar las condiciones favorables de operación para el modelado y simulación de la síntesis de acetato de butilo.	X ₂ : Condiciones de operación: temperatura y tiempo de reacción	X2.1: Temperatura del proceso X2.2: Tiempo de reacción.	°C S	Método analítico, observacional y experimental.
c) ¿Cómo se desarrollará el modelo matemático que permita la simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico?	Desarrollar el modelo matemático que permita la simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico.	-El fundamento de ecuaciones cinéticas de reacción y balance de materia, permite desarrollar el modelado y simulación de la síntesis de acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico.	X ₃ : modelado y simulación de la síntesis de acetato de butilo.	X3.1: Ecuaciones cinéticas de reacción y balances de materia	N: Ecuaciones diferenciales necesarias para el modelado	-Método teórico.

ANEXO 2

Ecuaciones de ajuste no lineal para la velocidad de reacción a distintas temperaturas

Ecuación ajustada de velocidad de reacción a 80 °C

Ecuación ajustada de velocidad de reacción a 90 °C

Overview		
Name	Polynomial Regression (degree=5)	
Kind	Regression	
Family	Linear Regressions	
Equation	$y = a + b*x + c*x^2 + \dots$	
# of Indep. Vars	1	
Weighting	Default	
Standard Error	0.083658886339	
Correlation Coeff. (r)	999.004680E-03	
Coeff. of Determination (r ²)	0.998010351294	
DOF	4	
AICC	-33.783060E+00	
Parameters		
Value	Std Err	Range (95% confidence)
a 6.926990E+00	80.326052E-03	6.703969E+00 to 7.150011E+00
b -47.574043E-06	69.962108E-06	-241.819996E-06 to 146.671909E-06
c -2.912420E-09	17.042424E-09	-50.229773E-09 to 44.404934E-09
d -606.080881E-15	1.597047E-12	-5.040193E-12 to 3.828031E-12
e 38.385276E-18	62.941530E-18	-136.368426E-18 to 213.138979E-18
f -566.347882E-24	877.655004E-24	-3.003109E-21 to 1.870413E-21

Overview		
Name	Polynomial Regression (degree=5)	
Kind	Regression	
Family	Linear Regressions	
Equation	$y = a + b*x + c*x^2 + \dots$	
# of Indep. Vars	1	
Weighting	Default	
Standard Error	0.0214829879139	
Correlation Coeff. (r)	999.955074E-03	
Coeff. of Determination (r ²)	0.99991014928	
DOF	4	
AICC	-60.972786E+00	
Parameters		
Value	Std Err	Range (95% confidence)
a 6.900261E+00	20.627140E-03	6.842990E+00 to 6.957531E+00
b -144.849229E-06	17.965756E-06	-194.730164E-06 to -94.968295E-06
c -33.995265E-09	4.376369E-09	-46.146014E-09 to -21.844516E-09
d 3.304650E-12	410.109819E-15	2.166002E-12 to 4.443297E-12
e -110.178815E-18	16.162923E-18	-155.054283E-18 to -65.303347E-18
f 1.277579E-21	225.375363E-24	651.837085E-24 to 1.903322E-21

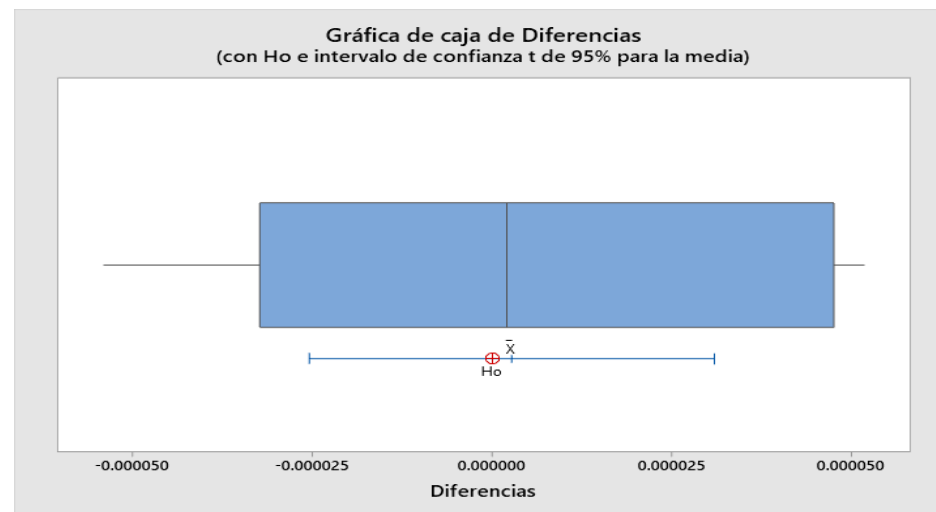
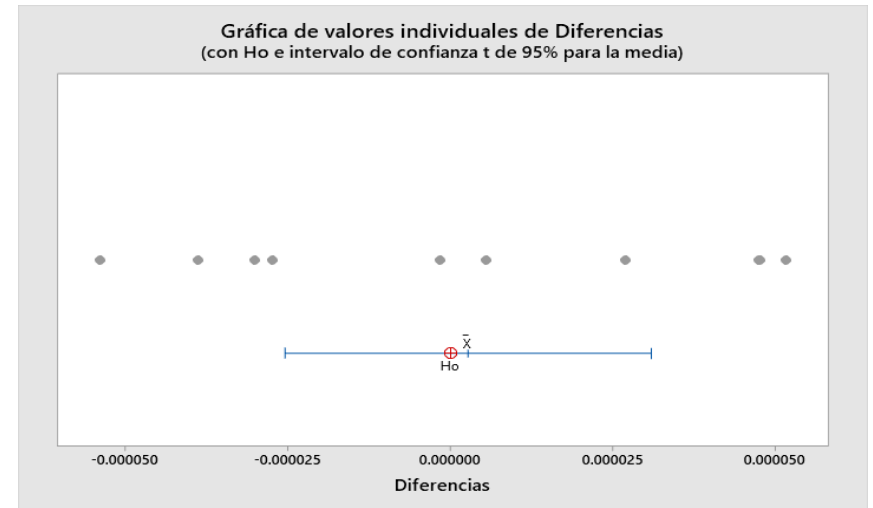
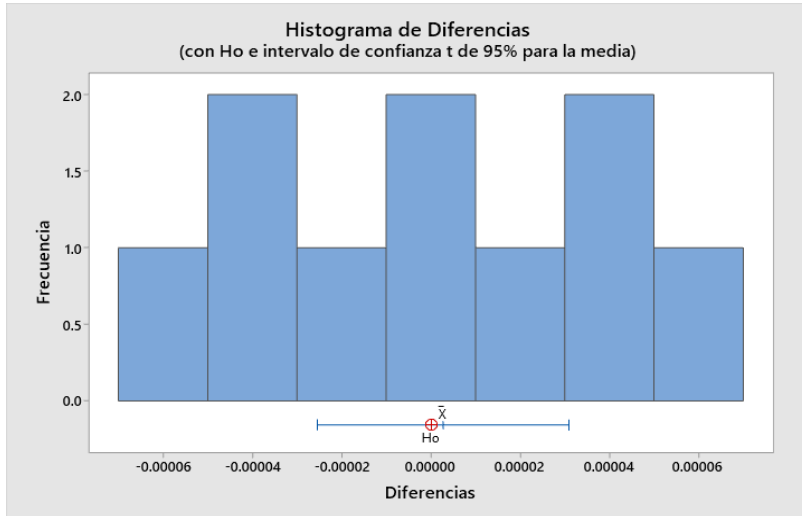
Ecuación ajustada de velocidad de reacción a la temperatura de 95 °C

Overview			
Name	Polynomial Regression (degree=5)		
Kind	Regression		
Family	Linear Regressions		
Equation	$y = a + b*x + c*x^2 + \dots$		
# of Indep. Vars	1		
Weighting	Default		
Standard Error	0.0214829879139		
Correlation Coeff. (r)	999.955074E-03		
Coeff. of Determination (r^2)	0.99991014928		
DOF	4		
AICC	-60.972786E+00		
Parameters			
	Value	Std Err	Range (95% confidence)
a	6.900261E+00	20.627140E-03	6.842990E+00 to 6.957531E+00
b	-144.849229E-06	17.965756E-06	-194.730164E-06 to -94.968295E-06
c	-33.995265E-09	4.376369E-09	-46.146014E-09 to -21.844516E-09
d	3.304650E-12	410.109819E-15	2.166002E-12 to 4.443297E-12
e	-110.178815E-18	16.162923E-18	-155.054283E-18 to -65.303347E-18
f	1.277579E-21	225.375363E-24	651.837085E-24 to 1.903322E-21

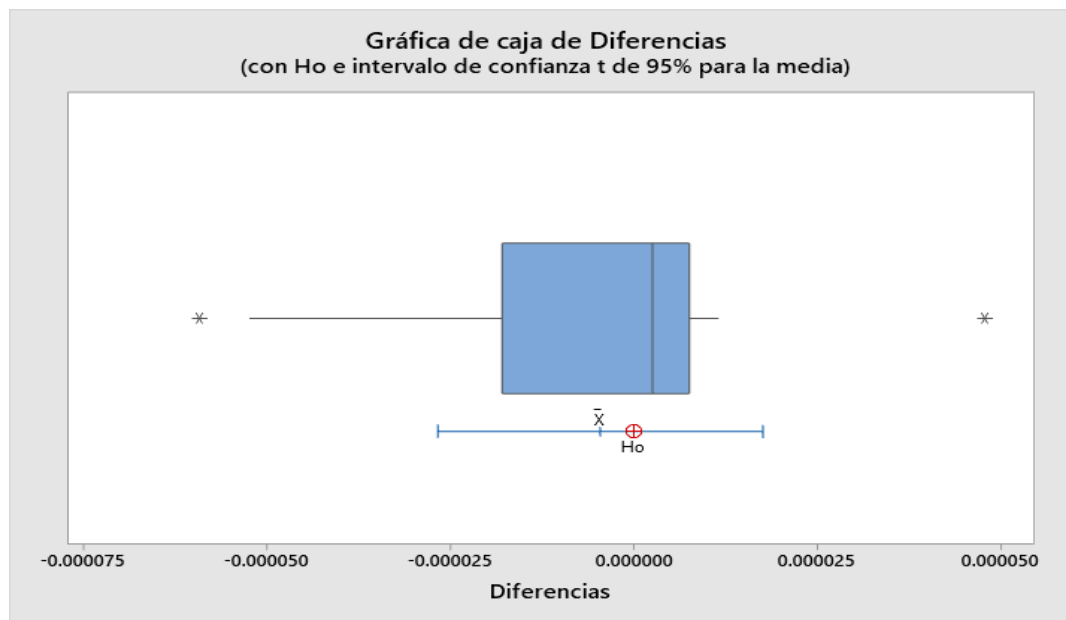
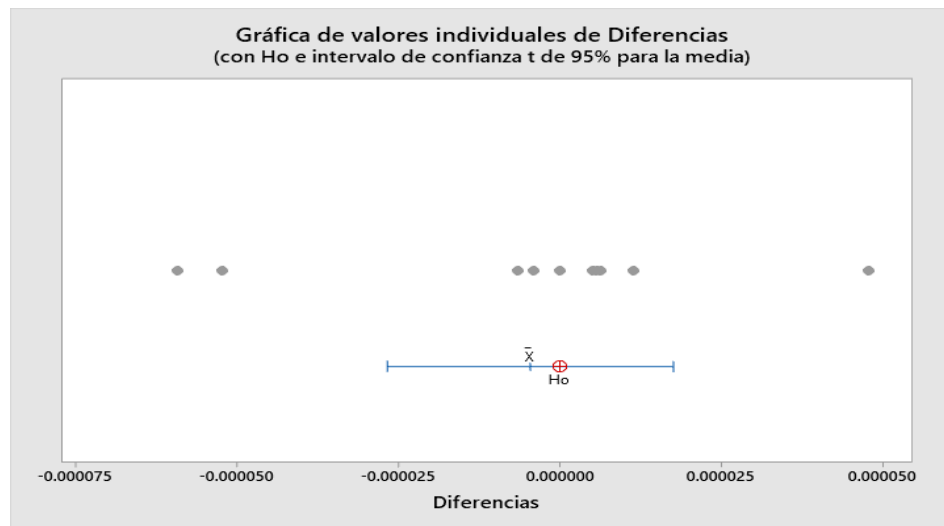
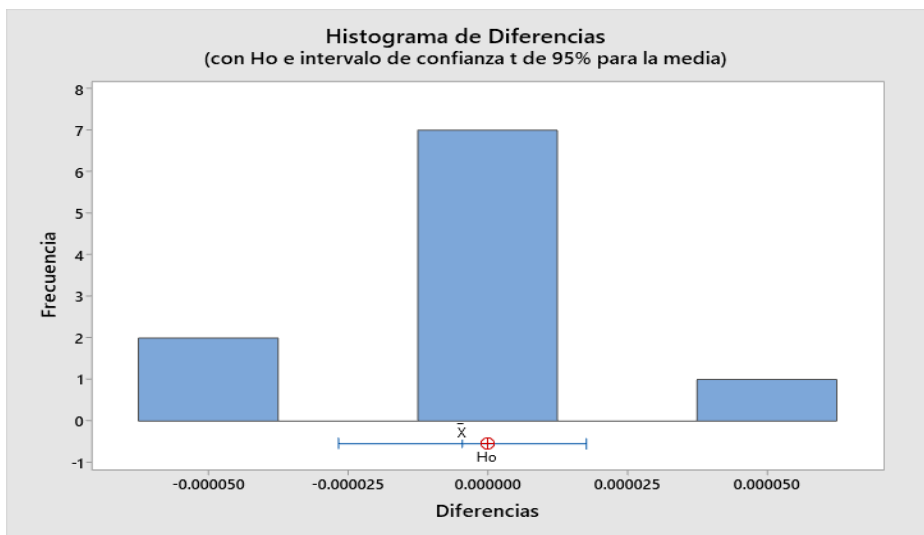
ANEXO 3

Comparación de medias de dos tratamientos para muestras dependientes a las distintas temperaturas de reacción operada en el reactor Batch.

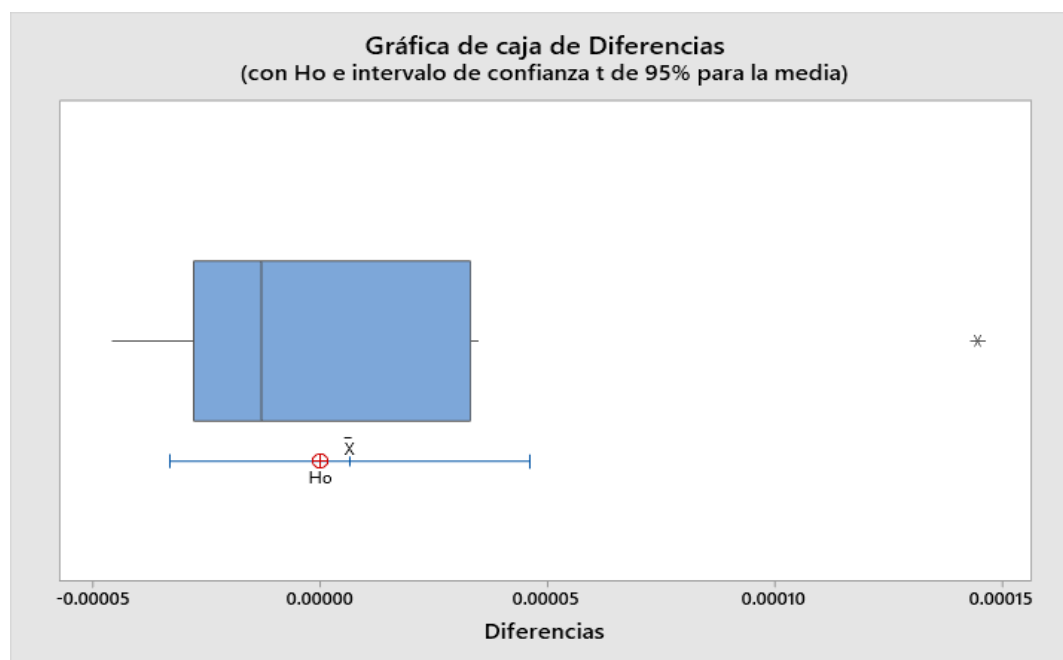
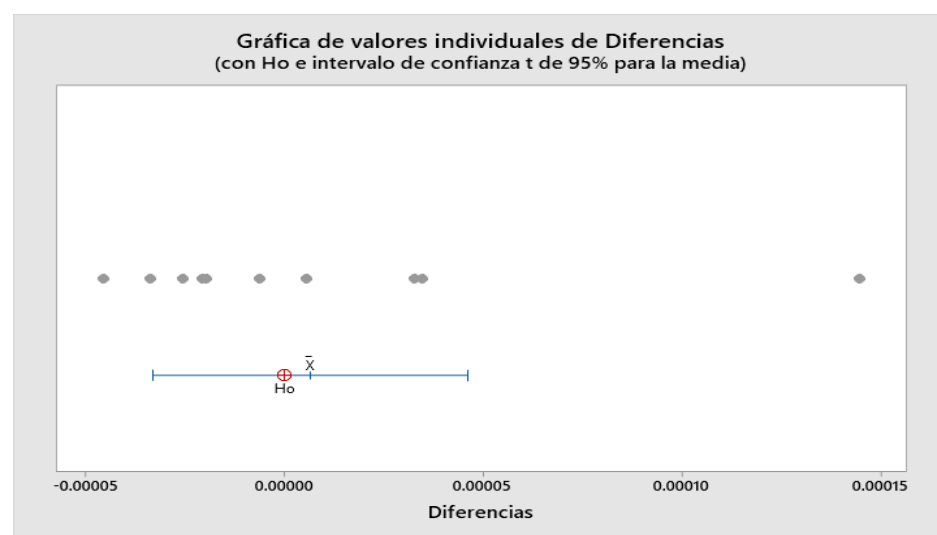
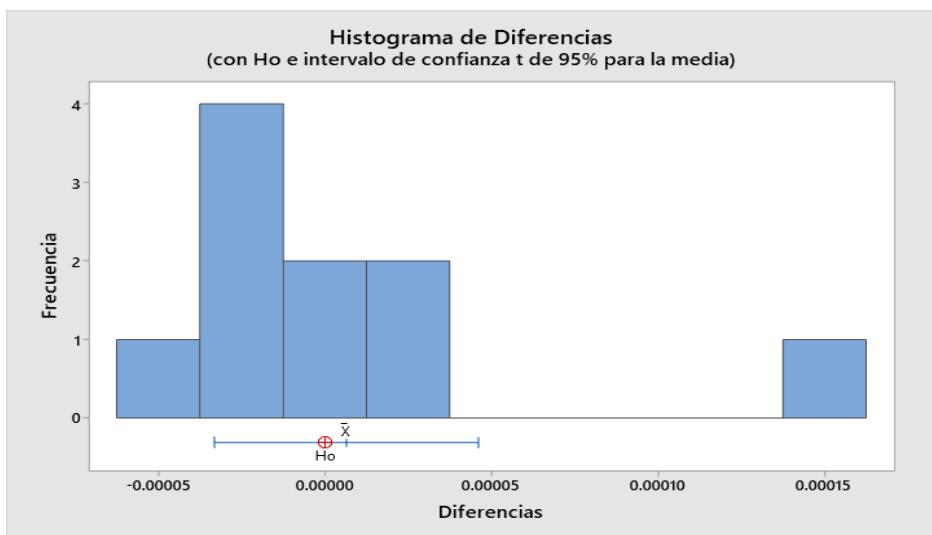
Histograma de diferencias de las ecuaciones de velocidades de reacción experimental y ajustada a la temperatura de 80 °C



Histograma de diferencias de las ecuaciones de velocidades de reacción experimental y ajustada a la temperatura de 90 °C



Histograma de diferencias de las ecuaciones de velocidades de reacción experimental y ajustada a la temperatura de 95 °C



ANEXO 4

Programación del modelo para la síntesis de acetato de butilo en Polymath 6.0

Ecuaciones de modelado para la síntesis del acetato de butilo en un reactor semicontinuo esférico ingresadas en el programa para su simulación a una temperatura de 95 °C.

Reactor semicontinuo

$$d(\text{NA})/d(t) = r_A * V$$

$$d(\text{NB})/d(t) = r_B * V + \text{FBE}$$

$$d(\text{ND})/d(t) = r_D * V$$

$$d(\text{NC})/d(t) = r_C * V$$

$$d(V)/d(t) = Q_B$$

$$V(0) = 0.0604 \text{ \# L, Volumen inicial de ácido acético en el reactor}$$

$$V0_I = \text{NA0} * 60.05 / 1050 \text{ \# L, Volumen inicial de ácido acético en el reactor}$$

$$\text{NA0} = 1.056 \text{ \# mol-g, moles iniciales del ácido acético en el reactor}$$

$$k1 = 5.5498 * 1\text{E-}6 \text{ \# Constante de velocidad de reacción}$$

$$K_{eq} = 2.392 \text{ \# Constante de equilibrio}$$

$$r_A = -k1 * ((C_A * C_B) - ((C_C * C_D) / K_{eq})) \text{ \# Velocidad de reacción referido al ácido acético}$$

$$r_B = r_A$$

$$r_C = -r_A$$

$$r_D = -r_A$$

$$FBE = CBE * QB$$

$CBE = 10.92 \text{ \# mol/L}$, concentración inicial de n-butanol en el tanque dosificador

$QB = (0.3594 * t^{(-0.5083)}) * 1E-3 \text{ \# L/s}$, Caudal de ingreso del reactante n-butanol

$$CA = NA / V$$

$$CB = NB / V$$

$$CC = NC / V$$

$$CD = ND / V$$

$$NT = NA + NB + NC + ND$$

$$YA = NA / NT$$

$$YB = NB / NT$$

$$YC = NC / NT$$

$$YD = ND / NT$$

$$X = (NA0 - NA) / NA0$$

$$NB(0) = 0$$

$NA(0) = 1.056 \text{ \# mol-g}$, moles iniciales de ácido acético en el reactor

$$NC(0) = 0$$

$$ND(0) = 0$$

$t(0) = 1 \text{ \# s}$, tiempo inicial

$t(f) = 20160 \text{ \# s}$, tiempo final

ANEXO 5

Resultados de las variables dependientes del programa Polymath 6.0 para la síntesis del acetato de butilo en un reactor semicontinuo a 95 °C.

Tiempo (s)	NA	NB	ND	NC	V (ml)	CD	CA	CB	CC	FBE	X
1	1.056	0	0	0	0.0604	0	17.48344	0	0	0.0039246	0
421.3696	1.052667	0.1445139	0.0033331	0.0033331	0.0739391	0.0398209	14.36487	1.88314	0.0398209	0.0001905	0.0027644
621.8388	1.050185	0.1748944	0.0058152	0.0058152	0.0769485	0.0669224	13.79546	2.194759	0.0669224	0.0001564	0.0048276
917.9995	1.045961	0.2105028	0.0100386	0.0100386	0.0805961	0.1109035	13.1436	2.530451	0.1109035	0.0001283	0.0083672
1079.272	1.043451	0.2269208	0.0125494	0.0125494	0.0823295	0.1384255	12.82172	2.686783	0.1384255	0.0001173	0.0106809
1240.544	1.040821	0.2418293	0.015179	0.015179	0.0839356	0.166589	12.53386	2.820829	0.166589	0.0001087	0.0131168
1563.088	1.035271	0.2681698	0.0207292	0.0207292	0.086856	0.2241257	12.03256	3.040458	0.2241257	9.59E-05	0.018286
1724.36	1.032375	0.2799597	0.0236248	0.0236248	0.0882008	0.2532482	11.81026	3.131996	0.2532482	9.10E-05	0.0209929
1885.632	1.029413	0.2909995	0.0265874	0.0265874	0.0894831	0.2824856	11.60282	3.214059	0.2824856	8.68E-05	0.0237676
2046.904	1.026391	0.3013839	0.0296089	0.0296089	0.0907107	0.3117705	11.40812	3.288095	0.3117705	8.31E-05	0.0266018
2369.448	1.020198	0.320479	0.0358017	0.0358017	0.0930264	0.3702754	11.05047	3.416433	0.3702754	7.69E-05	0.0324213
2530.72	1.017038	0.3293057	0.0389617	0.0389617	0.0941241	0.3994148	10.88506	3.472403	0.3994148	7.43E-05	0.0353951
2691.992	1.013842	0.3377141	0.0421577	0.0421577	0.0951868	0.4284368	10.72732	3.523777	0.4284368	7.20E-05	0.038405

Tiempo (s)	NA	NB	ND	NC	V (ml)	CD	CA	CB	CC	FBE	X
2853.264	1.010615	0.3457425	0.0453853	0.0453853	0.0962176	0.4573165	10.57648	3.571077	0.4573165	6.98E-05	0.0414469
3175.808	1.004079	0.3607869	0.0519214	0.0519214	0.0981938	0.5145697	10.29296	3.655148	0.5145697	6.60E-05	0.0476122
3337.08	1.000777	0.3678569	0.0552234	0.0552234	0.0991436	0.5429114	10.15925	3.692619	0.5429114	6.43E-05	0.0507292
3498.352	0.9974556	0.3746562	0.0585444	0.0585444	0.1000704	0.5710463	10.03032	3.727435	0.5710463	6.28E-05	0.0538653
3659.624	0.9941182	0.3812046	0.0618818	0.0618818	0.1009757	0.5989644	9.90582	3.759843	0.5989644	6.13E-05	0.0570182
3982.168	0.9874029	0.3936175	0.0685971	0.0685971	0.1027273	0.6541179	9.668826	3.818265	0.6541179	5.87E-05	0.0633654
4143.44	0.984029	0.3995123	0.071971	0.071971	0.1035761	0.6813407	9.555793	3.844639	0.6813407	5.75E-05	0.0665558
4304.712	0.9806466	0.4052169	0.0753534	0.0753534	0.1044083	0.7083211	9.44609	3.869326	0.7083211	5.63E-05	0.069755
4465.984	0.9772573	0.4107431	0.0787427	0.0787427	0.1052247	0.7350554	9.339512	3.892461	0.7350554	5.53E-05	0.0729615
4788.528	0.9704639	0.4213026	0.0855361	0.0855361	0.1068138	0.7877745	9.135008	3.934546	0.7877745	5.33E-05	0.0793905
4949.8	0.9670624	0.4263547	0.0889376	0.0889376	0.1075879	0.8137555	9.036761	3.953701	0.8137555	5.24E-05	0.0826104
5111.072	0.9636592	0.4312663	0.0923408	0.0923408	0.1083494	0.8394825	8.940994	3.971721	0.8394825	5.16E-05	0.0858325
5272.344	0.9602555	0.436045	0.0957445	0.0957445	0.1090987	0.8649549	8.847579	3.988685	0.8649549	5.07E-05	0.0890555
5594.888	0.9534505	0.4452316	0.1025495	0.1025495	0.1105631	0.9151349	8.667346	4.019735	0.9151349	4.92E-05	0.0955008
5756.16	0.9500509	0.449652	0.1059491	0.1059491	0.1112792	0.9398431	8.580321	4.033949	0.9398431	4.85E-05	0.0987213
5917.432	0.9466543	0.4539649	0.1093457	0.1093457	0.1119852	0.9642975	8.495232	4.047367	0.9642975	4.78E-05	0.1019393
6078.704	0.9432616	0.4581756	0.1127384	0.1127384	0.1126815	0.988499	8.411993	4.060039	0.988499	4.72E-05	0.105154
6401.248	0.9364903	0.4663094	0.1195097	0.1195097	0.1140464	1.036148	8.250753	4.083338	1.036148	4.59E-05	0.1115709
6723.792	0.929742	0.4740891	0.126258	0.126258	0.1153768	1.082801	8.09603	4.104185	1.082801	4.48E-05	0.1179672

Tiempo (s)	NA	NB	ND	NC	V (ml)	CD	CA	CB	CC	FBE	X
6885.064	0.9263779	0.4778562	0.1296221	0.1296221	0.1160299	1.105757	8.020953	4.113782	1.105757	4.42E-05	0.1211562
7207.608	0.9196722	0.4851625	0.1363278	0.1363278	0.117313	1.150941	7.875085	4.131486	1.150941	4.32E-05	0.1275136
7368.88	0.9163315	0.4887082	0.1396685	0.1396685	0.1179437	1.173171	7.80419	4.139651	1.173171	4.27E-05	0.130681
7530.152	0.9129995	0.4921864	0.1430005	0.1430005	0.1185673	1.195163	7.734591	4.147394	1.195163	4.22E-05	0.1338405
7691.424	0.9096765	0.4955999	0.1463235	0.1463235	0.1191842	1.216919	7.666244	4.154738	1.216919	4.18E-05	0.1369916
8013.968	0.9030589	0.5022433	0.1529411	0.1529411	0.1203986	1.259731	7.533136	4.168324	1.259731	4.09E-05	0.1432674
8175.24	0.899765	0.5054781	0.156235	0.156235	0.1209964	1.280792	7.468299	4.174606	1.280792	4.05E-05	0.1463914
8336.512	0.8964814	0.5086581	0.1595186	0.1595186	0.1215883	1.301625	7.404557	4.180573	1.301625	4.01E-05	0.1495058
8497.784	0.8932083	0.5117854	0.1627917	0.1627917	0.1221745	1.322233	7.341877	4.186243	1.322233	3.97E-05	0.1526103
8820.328	0.8866949	0.51789	0.1693051	0.1693051	0.12333	1.362782	7.219575	4.196756	1.362782	3.89E-05	0.1587888
8981.6	0.8834549	0.5208711	0.1725451	0.1725451	0.1238997	1.382728	7.159893	4.201629	1.382728	3.86E-05	0.1618623
9142.872	0.8802264	0.5238072	0.1757736	0.1757736	0.1244642	1.402458	7.101152	4.206265	1.402458	3.82E-05	0.164925
9304.144	0.8770096	0.5266999	0.1789904	0.1789904	0.1250237	1.421974	7.043327	4.210676	1.421974	3.79E-05	0.1679767
9626.688	0.8706116	0.5323615	0.1853884	0.1853884	0.126128	1.460373	6.930321	4.218875	1.460373	3.72E-05	0.1740468
9787.96	0.8674307	0.5351334	0.1885693	0.1885693	0.1266731	1.479262	6.875092	4.222685	1.479262	3.69E-05	0.1770648
9949.232	0.8642621	0.5378679	0.1917379	0.1917379	0.1272137	1.497945	6.820684	4.226315	1.497945	3.66E-05	0.1800712
1.01E+04	0.8611059	0.5405664	0.1948941	0.1948941	0.1277499	1.516426	6.767074	4.229775	1.516426	3.63E-05	0.1830659
1.06E+04	0.8517127	0.5484582	0.2042873	0.2042873	0.1293327	1.570677	6.610834	4.239225	1.570677	3.54E-05	0.1919789
1.08E+04	0.8486072	0.5510247	0.2073928	0.2073928	0.1298522	1.588371	6.560221	4.242093	1.588371	3.52E-05	0.1949258

Tiempo (s)	NA	NB	ND	NC	V (ml)	CD	CA	CB	CC	FBE	X
1.09E+04	0.8455146	0.5535611	0.2104854	0.2104854	0.1303676	1.605873	6.510313	4.244831	1.605873	3.49E-05	0.1978605
1.12E+04	0.8393683	0.5585475	0.2166317	0.2166317	0.1313871	1.640311	6.412542	4.24995	1.640311	3.44E-05	0.2036932
1.14E+04	0.8363148	0.5609995	0.2196852	0.2196852	0.1318913	1.657252	6.364647	4.252342	1.657252	3.41E-05	0.206591
1.16E+04	0.8332745	0.5634251	0.2227255	0.2227255	0.1323918	1.67401	6.317394	4.254632	1.67401	3.39E-05	0.2094763
1.17E+04	0.8302473	0.5658254	0.2257527	0.2257527	0.1328888	1.690587	6.270767	4.256824	1.690587	3.37E-05	0.2123492
1.21E+04	0.8242329	0.5705529	0.2317671	0.2317671	0.1338725	1.723207	6.179336	4.260937	1.723207	3.32E-05	0.2180573
1.22E+04	0.8212456	0.5728819	0.2347544	0.2347544	0.1343594	1.739254	6.134506	4.262867	1.739254	3.30E-05	0.2208924
1.24E+04	0.8182717	0.5751886	0.2377283	0.2377283	0.1348429	1.755128	6.090249	4.26472	1.755128	3.27E-05	0.223715
1.25E+04	0.8153112	0.5774738	0.2406888	0.2406888	0.1353233	1.770832	6.046554	4.2665	1.770832	3.25E-05	0.2265248
1.29E+04	0.8094304	0.5819825	0.2465696	0.2465696	0.1362747	1.801735	5.960801	4.269856	1.801735	3.21E-05	0.2321065
1.30E+04	0.8065101	0.5842072	0.2494899	0.2494899	0.1367459	1.816938	5.91872	4.27144	1.816938	3.19E-05	0.2348783
1.32E+04	0.8036032	0.5864131	0.2523968	0.2523968	0.1372141	1.831978	5.877156	4.272967	1.831978	3.17E-05	0.2376373
1.33E+04	0.8007098	0.5886007	0.2552902	0.2552902	0.1376794	1.846857	5.836099	4.274439	1.846857	3.15E-05	0.2403837
1.37E+04	0.7949633	0.5929234	0.2610367	0.2610367	0.1386015	1.876139	5.755463	4.277232	1.876139	3.11E-05	0.2458382
1.38E+04	0.7921102	0.5950595	0.2638898	0.2638898	0.1390584	1.890546	5.715865	4.278559	1.890546	3.09E-05	0.2485463
1.40E+04	0.7892705	0.5971796	0.2667295	0.2667295	0.1395126	1.904798	5.676736	4.279845	1.904798	3.08E-05	0.2512418
1.45E+04	0.7808318	0.6034482	0.2751682	0.2751682	0.1408594	1.94665	5.562068	4.283472	1.94665	3.02E-05	0.259252
1.46E+04	0.7780456	0.6055087	0.2779544	0.2779544	0.1413032	1.960305	5.524725	4.284614	1.960305	3.01E-05	0.2618968
1.48E+04	0.7752728	0.6075555	0.2807272	0.2807272	0.1417446	1.973814	5.487807	4.285725	1.973814	2.99E-05	0.2645289

Tiempo (s)	NA	NB	ND	NC	V (ml)	CD	CA	CB	CC	FBE	X
1.50E+04	0.7725133	0.609589	0.2834867	0.2834867	0.1421835	1.98718	5.451308	4.286808	1.98718	2.97E-05	0.2671483
1.53E+04	0.7670341	0.6136175	0.2889659	0.2889659	0.1430542	2.013486	5.379537	4.288899	2.013486	2.94E-05	0.2723495
1.54E+04	0.7643144	0.6156134	0.2916856	0.2916856	0.143486	2.02643	5.34425	4.28991	2.02643	2.92E-05	0.2749313
1.56E+04	0.7616078	0.6175974	0.2943922	0.2943922	0.1439155	2.039237	5.309352	4.2909	2.039237	2.91E-05	0.2775005
1.58E+04	0.7589145	0.6195701	0.2970855	0.2970855	0.1443428	2.051909	5.274838	4.291872	2.051909	2.89E-05	0.2800573
1.61E+04	0.7535671	0.6234825	0.3024329	0.3024329	0.1451908	2.07685	5.206933	4.293765	2.07685	2.86E-05	0.2851335
1.62E+04	0.7509131	0.6254229	0.3050869	0.3050869	0.1456115	2.089123	5.173529	4.29469	2.089123	2.85E-05	0.287653
1.64E+04	0.748272	0.6273532	0.307728	0.307728	0.1460301	2.101267	5.140483	4.295601	2.101267	2.84E-05	0.2901601
1.66E+04	0.745644	0.6292737	0.310356	0.310356	0.1464467	2.113282	5.10779	4.296502	2.113282	2.82E-05	0.2926549
1.69E+04	0.7404267	0.6330865	0.3155733	0.3155733	0.1472736	2.136934	5.043436	4.298272	2.136934	2.79E-05	0.2976078
1.71E+04	0.7378374	0.6349793	0.3181626	0.3181626	0.1476841	2.148573	5.011765	4.299145	2.148573	2.78E-05	0.3000658
1.72E+04	0.7352609	0.6368634	0.3207391	0.3207391	0.1480925	2.160089	4.980424	4.300011	2.160089	2.77E-05	0.3025118
1.74E+04	0.7326972	0.6387391	0.3233028	0.3233028	0.1484991	2.171484	4.949407	4.300872	2.171484	2.75E-05	0.3049456
1.77E+04	0.7276079	0.6424662	0.3283921	0.3283921	0.1493064	2.193916	4.888327	4.302579	2.193916	2.73E-05	0.309777
1.79E+04	0.7250822	0.6443181	0.3309178	0.3309178	0.1497073	2.204956	4.858254	4.303428	2.204956	2.71E-05	0.3121747
1.82E+04	0.7200686	0.6479997	0.3359314	0.3359314	0.1505036	2.226687	4.799018	4.305121	2.226687	2.69E-05	0.3169344
1.85E+04	0.715105	0.6516533	0.340895	0.340895	0.1512927	2.247966	4.740965	4.306812	2.247966	2.67E-05	0.3216466
1.87E+04	0.7126418	0.65347	0.3433582	0.3433582	0.1516846	2.258437	4.712371	4.307659	2.258437	2.65E-05	0.323985
1.88E+04	0.7101909	0.6552803	0.3458091	0.3458091	0.1520749	2.2688	4.68406	4.308508	2.2688	2.64E-05	0.3263117

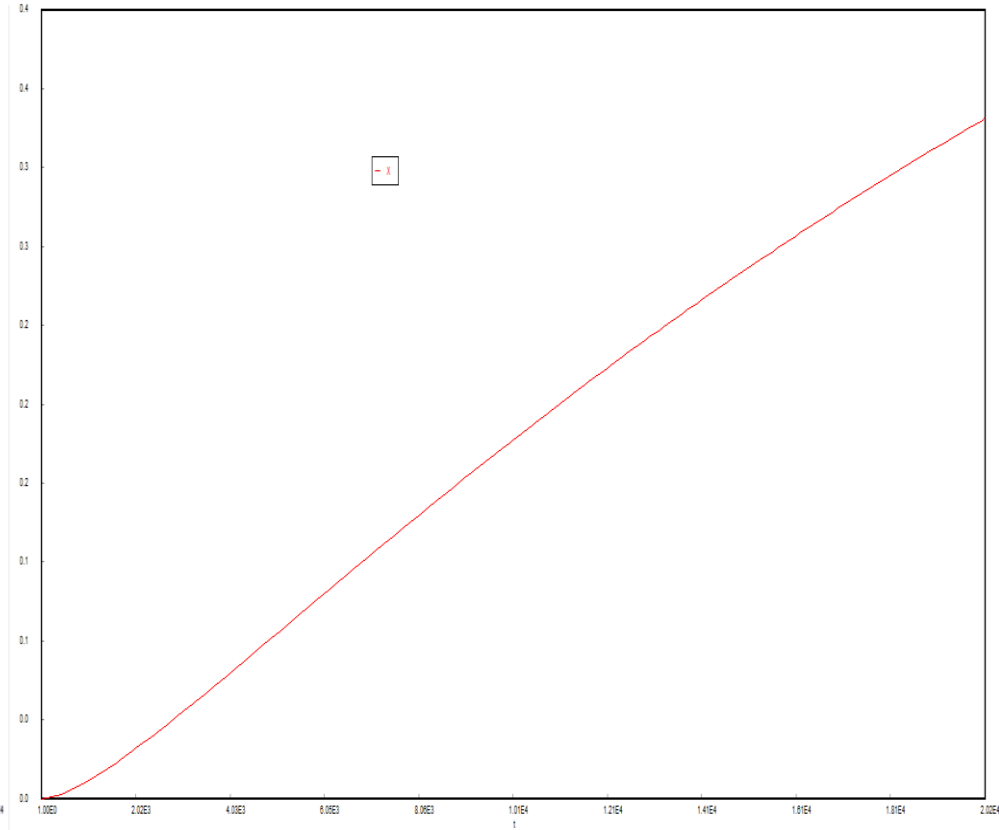
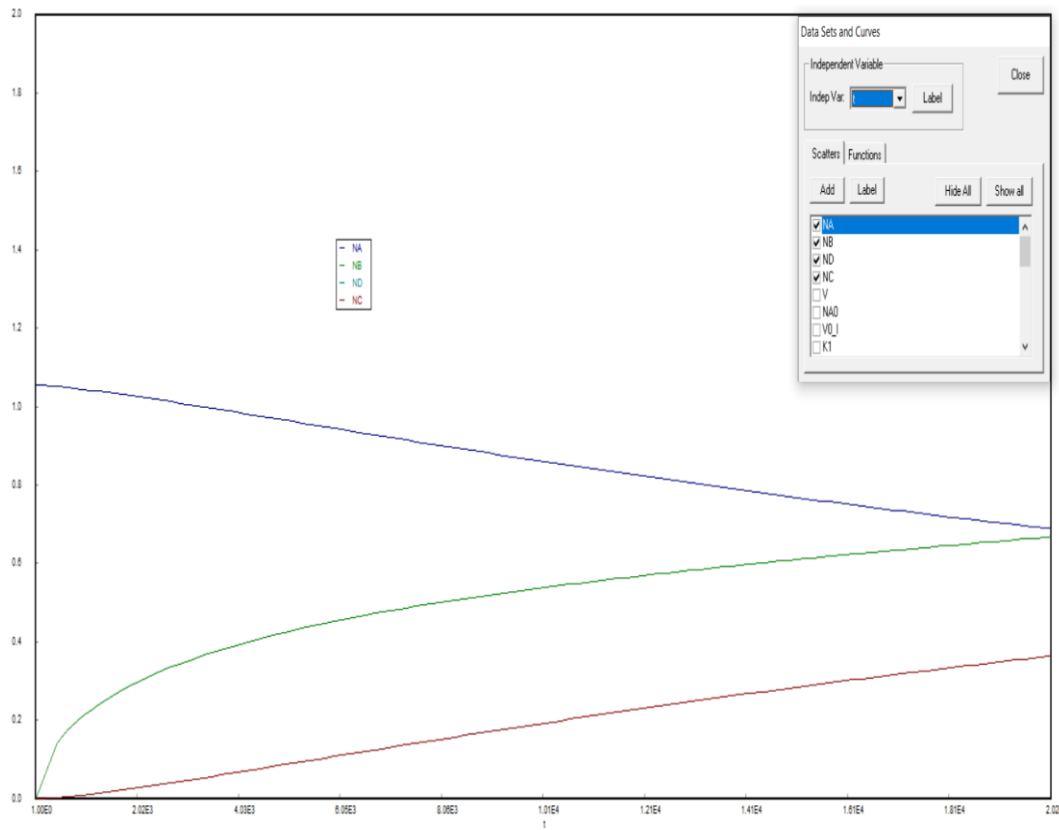
Tiempo (s)	NA	NB	ND	NC	V (ml)	CD	CA	CB	CC	FBE	X
1.90E+04	0.7077524	0.6570844	0.3482476	0.3482476	0.1524634	2.279053	4.656027	4.309359	2.279053	2.63E-05	0.3286268
1.93E+04	0.7029119	0.6606746	0.3530881	0.3530881	0.1532354	2.299239	4.600781	4.311071	2.299239	2.61E-05	0.3332221
1.95E+04	0.7005099	0.6624611	0.3554901	0.3554901	0.153619	2.309174	4.57356	4.311933	2.309174	2.60E-05	0.3355025
1.96E+04	0.69812	0.6642421	0.35788	0.35788	0.1540009	2.319005	4.546602	4.312799	2.319005	2.59E-05	0.3377713
1.98E+04	0.6957421	0.6660178	0.3602579	0.3602579	0.1543813	2.328733	4.519902	4.313671	2.328733	2.58E-05	0.3400288
2.01E+04	0.6910223	0.6695536	0.3649777	0.3649777	0.1551373	2.347885	4.467266	4.315433	2.347885	2.55E-05	0.3445097
2.02E+04	0.6902857	0.6701068	0.3657143	0.3657143	0.1552554	2.354089	4.450193	4.316018	2.354089	2.55E-05	0.3459717

ANEXO 6

Resultados Gráficos de la simulación en el reactor semicontinuo.

Gráfica de concentración molar de reactantes y productos respecto al tiempo de reacción, en el reactor semicontinuo a 95 °C

Gráfica de conversión respecto al tiempo de reacción en el reactor semicontinuo



ANEXO 7

Evaluación estadística de comparación de medias de dos tratamientos entre los grados de conversión simulada y experimental a distintos tiempos.

