



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE
SAN NICOLAS DE HIDALGO



FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA

COMPARACIÓN DEL GRADO DE CONVERSIÓN DE LA
SAPONIFICACIÓN DE ACETATO DE ETILO PARA
UN REACTOR CSTR Y UNA SERIE DE
REACTORES CSTR A NIVEL
PLANTA PILOTO

TESIS PRESENTADA POR:
MARCELA VILCHIS GARCIA

PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO

ASESOR:
M.C. JUAN RAMON ROMERO BUCIO

MORELIA, MICH.,

ENERO DEL 2007

RESUMEN

COMPARACIÓN DEL GRADO DE CONVERSIÓN DE LA SAPONIFICACIÓN DE ACETATO DE ETILO PARA UN REACTOR CSTR Y UNA SERIE DE REACTORES CSTR A NIVEL PLANTA PILOTO

POR:

MARCELA VILCHIS GARCÍA

ENERO DEL 2007

INGENIERO QUÍMICO

DIRIGIDA POR:

M. C. JUAN RAMÓN ROMERO BUCIO

El presente trabajo tiene como objetivo determinar el grado de conversión de la Saponificación de Acetato de Etilo de forma experimental para un reactor CSTR y una serie de reactores CSTR así como su dinámica de operación, mediante la construcción de un prototipo a nivel planta piloto en el Laboratorio Pesado de la Facultad de Ingeniería Química a fin de conocer el comportamiento de estos reactores.

El trabajo se desarrollará en cuatro etapas que son: Diseño, Construcción, Puesta en Marcha, Análisis y Discusión de los resultados.

En la etapa del Diseño se definirán las variables y condiciones a las que se trabajará el equipo, el material de construcción de los reactores y las tuberías, así como los accesorios y equipos de medición.

En base a la etapa anterior se llevará acabo la Construcción de los reactores equipándose adecuadamente y se procederá a la instalación de los mismos.

Puesta en Marcha, en esta etapa se verificará que funcionen correctamente tanto los reactores como los equipos de medición y los accesorios ya instalados. Después procederemos a realizar las corridas

necesarias para el experimento siendo este la determinación del grado de conversión de la Saponificación de Acetato de Etilo para un reactor CSTR y una serie de reactores CSTR.

En la etapa de análisis y discusión de los resultados se compararán los datos obtenidos experimentalmente contra los realizados analíticamente.

ABSTRACT

The finality present work is to determine the degree of conversion of the Saponification of Acetate of Ethyl of experimental form for a reactor CSTR and a series of reactors CSTR and the dynamics of operation, by means of the construction of a prototype to level pilot plant in the Heavy Laboratory of the Faculty of Chemical Engineering whit the finality to know the behavior of these reactors.

The work will develop in four stages that are: Design, Construction, Put in March, Analysis and Discussion of the results.

The variables, conditions of operation, the material of construction of the reactors, the pipelines, the accessories and equipments of measurement will be define in the stage of the design.

After of the stage of the design will be Construction the reactors, being equipped adequately and will proceed to the installation of the same ones.

Putting in March, in this stage will check that the reactors, the equipments measurement and the already installed accessories work correctly. After will proceed to realize the necessary test for the experiment being this the determination of the degree of conversion of the Saponification of Acetate of Ethyl for a reactor CSTR and a series of reactors CSTR.

In the stage of analysis and discussion of the results will be compared the results experimentally obtained whit the analytic results.

INDICE

	Pag
RESUMEN.....	iii
ABSTRAC.....	v
INDICE DE TABLAS.....	viii
INDICE DE FIGURAS.....	x
CAPITULO I.- INTRODUCCION.....	1
CAPITULO II.- OBJETIVOS.....	2
2.1.- JUSTIFICACION.....	2
2.2.- PORQUE ES NECESARIO E INTERESANTE REALIZAR EL ESTUDIO.....	2
2.3.- HIPOTESIS.....	3
CAPITULO III.- MARCO TEORICO.....	4
3.1.- Reactor químico.....	4
3.2.- Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR".....	9
3.3.- Los reactores CSTR y su aplicación en la industria.....	10
3.4.- arreglos de los reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".....	11
3.4.1.- Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR" en serie de igual volumen.....	11
3.4.2.- Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR" en serie de diferente volumen.....	11
3.4.3.- Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR" en paralelo.....	12
3.5.- Análisis de la estabilidad y conversión en los reactores CSTR.....	13
3.6.- Reacción Química.....	14
3.6.1.- Clases de reacciones químicas.....	15
3.7.- Reacción de saponificación de acetato de etilo.....	16
CAPITULO IV.- DESARROLLO EXPERIMENTAL.....	18
4.1.- El diseño del reactor.....	18
4.2.- Determinación analítica del grado de conversión.....	19
4.2.1.- Para el caso de un Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR".....	21
4.2.2.- Para el caso de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".....	25
4.3.- Diagrama de un reactor CSTR.....	28
4.4.- Diagrama de 3 reactores CSTR en serie.....	29
4.5.- Construcción.....	30
4.6.- Puesta en marcha.....	31
4.7.- Desarrollo experimental.....	32
4.7.1.- Para el caso de 1 Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR".....	33
4.7.2.- Para el caso de una serie de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".....	36
CAPITULO V.- ANALISIS Y DICUSION DE RESULTADOS.....	42

	Pag.
5.1.- Comparación de datos de conversión obtenidos analítica y experimentalmente, en un Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR".....	42
5.1.1.- Primer experimento.....	42
5.1.2.- Segundo experimento.....	44
5.2.- Comparación de datos de conversión obtenidos analítica y experimentalmente, en una serie de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".....	46
5.2.1.- Primer experimento.....	46
5.2.2.- Segundo experimento.....	48
5.2.3.- Tercer experimento.....	50
5.3.- Comparación de datos de conversión obtenidos experimentalmente para 1 Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR" y una serie de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".....	52
CONCLUSIONES.....	53
SUGERENCIAS.....	53
BIBLIOGRAFIA.....	54
APENDICE A.- CONSTRUCCIÓN.....	55
APENDICE B.- PROPIEDADES DE LOS COMPONENTES.....	58
APENDICE C.- METODOS PARA PREPARAR SOLUCIONES.....	60

INDICE DE TABLAS

TABLA	TITULO	Pag.
Tabla 4.1	Cálculos de conversión a diferentes tiempos de residencia, obtenidos para un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR”.....	22
Tabla 4.2	Calculo del flujo a un volumen de 1 litro y diferentes tiempos de residencia.....	23
Tabla 4.3	Calculo del flujo a un volumen de 2 litros y diferentes tiempos de residencia.....	23
Tabla 4.4	Calculo del flujo a un volumen de 3 litros y diferentes tiempos de residencia.....	23
Tabla 4.5	Cálculos de conversión a diferentes tiempos de residencia, obtenidos para tres Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”.....	27
Tabla 4.6	Datos obtenidos de la titulación del primer experimento para un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR”.....	33
Tabla 4.7	Cálculos de conversión obtenidos del primer experimento para un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR”.....	34
Tabla 4.8	Datos obtenidos de la titulación del segundo experimento para un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR”.....	35
Tabla 4.9	Cálculos de conversión obtenidos del segundo experimento para un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR”.....	35
Tabla 4.10	Datos obtenidos de la titulación del primer experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”.....	36
Tabla 4.11	Cálculos de conversión obtenidos del Primer experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”...	37
Tabla 4.12	Datos obtenidos de la titulación del segundo experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”...	38
Tabla 4.13	Cálculos de conversión obtenidos del segundo experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”...	39
Tabla 4.14	Datos obtenidos de la titulación del tercer experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”.....	40
Tabla 4.15	Cálculos de conversión obtenidos del tercer experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”...	41

TABLA	TITULO	Pag.
Tabla 5.1	Comparación de la conversión para un “CSTR” (Primer experimento).....	42
Tabla 5.2	Comparación de la conversión para un “CSTR” (Segundo experimento).....	44
Tabla 5.3	Comparación de la conversión para 3 “CSTR” (Primer experimento).....	46
Tabla 5.4	Comparación de la conversión para 3 “CSTR” (Segundo experimento).....	48
Tabla 5.5	Comparación de la conversión para 3 “CSTR” (Tercer experimento).....	50
Tabla 5.6	Comparación de la conversión para 1 y 3 “CSTR”.....	52

INDICE DE FIGURAS

FIGURA	TITULO	Pag.
Fig. 3.1	Representación esquemática de un Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR"	9
Fig. 3.2	Representación de una Batería de n Reactores Continuo Tanque Agitado "CSTR"	11
Fig. 3.3	Representación de una Batería de 3 Reactores Continuo Tanque Agitado "CSTR" de diferente volumen y orden $n > 1$	11
Fig. 3.4	Representación de una Batería de 3 Reactores Continuo Tanque Agitado "CSTR" de diferente volumen y orden $n < 1$	12
Fig. 3.5	Representación de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR" en paralelo	12
Fig. 4.1	Representación esquemática de las variables de entrada y salida de un Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR"	18
Fig. 4.2	Diagrama de un reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR"	28
Fig. 4.3	Diagrama de tres Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR"	29
Fig. 5.1	Comparación de la conversión para un "CSTR" (Primer experimento)	42
Fig. 5.2	Comparación de la conversión para un "CSTR" (Segundo experimento)	45
Fig. 5.3	Comparación de la conversión para 3 "CSTR" (Primer experimento)	47
Fig. 5.4	Comparación de la conversión para 3 "CSTR" (Segundo experimento)	49
Fig. 5.5	Comparación de la conversión para 3 "CSTR" (Tercer experimento)	51
Fig. 5.6	Comparación de la conversión para 1 y 3 "CSTR"	52

NOMENCLATURA

n = Orden de reacción

C_{A0} = Concentración de "A" en la alimentación del reactor (mol).

$C_{A1}, C_{A2}, \dots, C_{AN}$ = Concentración de "A" a la salida del reactor (mol).

F_{A0} = Flujo de "A" en la alimentación del reactor.

$F_{A1}, F_{A2}, \dots, F_{AN}$ = Flujo de "A" en la salida del reactor.

x_A = Fracción de conversión de "A" (fracción mol).

V_{RTotal} = Volumen del reactor total (Lt).

T_{A0} = Temperatura de "A" en la entrada del reactor ($^{\circ}C$).

T_{B0} = Temperatura de "B" en la entrada del reactor ($^{\circ}C$).

T_s = Temperatura de salida del reactor ($^{\circ}C$).

C_{B0} = Concentración de "B" en la alimentación del reactor (mol).

Q_A = Flujo de "A" (mol/Lt).

Q_B = Flujo de "B" (mol/Lt).

Q_S = Flujo de salida (mol/Lt).

P_A = presión de "A".

P_B = presión de "B".

P_S = presión de salida.

C_A = Concentración de "A" a la salida del reactor (mol).

C_B = Concentración de "B" a la salida del reactor (mol).

C_C = Concentración de "C" a la salida del reactor (mol).

C_D = Concentración de "D" a la salida del reactor (mol).

V = Volumen del reactor (Lt).

C = Numero de componentes.

r_A = Velocidad de reacción de "A".

A = Factor preexponencial.

E_a = Energía de Activación (Cal/mol K).

k = Constante específica de velocidad de reacción (Lt/molmin).

Q = Calor.

θ = Tiempo de residencia.

r_1 = Velocidad de reacción en el reactor uno.

r_2 = Velocidad de reacción en el reactor dos.

r_3 = Velocidad de reacción en el reactor tres.

V_{HCl} = Volumen del ácido clorhídrico (ml).

M_{eq} = Miliequivalentes.

PM = Peso Molecular.

gNaOH = Gramos de hidróxido de sodio (g).

N_{HCl} = Normalidad del ácido clorhídrico (N).

W = Peso (g).

V_{Muestra} = Volumen de la muestra (ml).

C_{NaOH} = Concentración del hidróxido de sodio (g/Lt).

ρ = Densidad (g/ml).

M = Molaridad (mol).

AGRADECIMIENTOS

A la gloriosa **UMSNH**

A la **Facultad de Ingeniería Química** por el apoyo económico para la realización de este proyecto.

A mi asesor de Tesis; **M. C. Juan Ramón Romero Bucio** por su colaboración y apoyo incondicional el desarrollo de este trabajo de tesis.

A mis revisores de tesis; **M. C. Salvador Pérez Díaz, Dra. Marisela Villicaña** les doy las gracias por sus atinadas observaciones.

A todos los maestros de la Facultad de Ingeniería Química, especialmente al **Dr. Horacio Gonzáles Rodríguez** por su colaboración en la realización de este trabajo de tesis y por ser un gran maestro.

Al personal técnico y administrativo, especialmente al técnico **Ricardo Raya** por su colaboración en la construcción del equipo.

A mis amigos y compañeros que me acompañaron durante mi carrera:

Perla Yunuen Gil Zarco, Marisol García Miranda, Cornelia Rojas Bravo, Gloria Lindero Emiliano, Martha Patricia Guijarro, Ma. Cindy Ramírez Gervasio, Águeda Ruiz Sánchez, Ma. Del Rosario López Castillo, Mario de la Vega Paredes, Mauricio Serna Ramírez, Eliseo Sánchez Ceja, Aarón Hernán Gallardo Alvarado, Edgar García Guerrero, Alejandro Zambrano Sánchez, Iván Alfaro Trujillo, Ecar Leana Morales, Manuel Robles Melgarejo, José Guadalupe Quezada, Israel Gómez, Sergio Alejandro García Flores, Eleazar Rodríguez Márquez, Raúl Meléndez Gómez.

Y sobre todo gracias a mi familia:

A mi padre **Manuel Vilchis**, a mi madre **Beatriz García**, a mis hermanos. **Fernando, Eduardo y Marco Antonio**, por el apoyo incondicional que me han brindado toda la vida.

A todos ellos mil gracias

CAPITULO I.- INTRODUCCION

La función fundamental del ingeniero químico en la sociedad es transformar la materia a gran escala. El ingeniero químico sabe de reactores y separadores esa es nuestra esencia.

Las materias que estudiamos durante nuestra carrera no forman para comprender como diseñar, operar controlar y optimizar plantas con equipos de separación y reactores químicos. Aun, los equipos para el cuidado ambiental caen en una o ambas de estas categorías.

Nuestro entorno civilizado esta lleno de materiales para los que se emplearon conocimientos de ingeniería química en su procesamiento, por mencionar algunos ejemplos: ropa, muebles, plásticos, aparatos electrónicos, eléctricos y mecánicos, pinturas, solventes y combustibles. Aun en la producción de gas y electricidad se involucran la ingeniería química. A grandes rasgos, los reactores son el corazón de una planta química mientras que el resto de los equipos son necesarios para separar los distintos productos y reactivos que salen del reactor o para acondicionar la alimentación a los reactores. La economía global de una planta depende fuertemente de la eficiencia con que operen los reactores.

La cinética química y el diseño de reactores son fundamentales para la producción de casi todas las sustancias químicas industriales. Son principalmente sus conocimientos de cinética química y diseño de reactores lo que distingue al ingeniero químico de otros ingenieros. La selección de un sistema de reacción que opere de la forma más segura y eficiente posible puede ser la clave del éxito o del fracaso económico de una planta química.

CAPITULO II.- OBJETIVO

OBJETIVO PRINCIPAL

Comprobar el grado de conversión alcanzado al operar un Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR" en contraste a operar 3 Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR" en serie, a las mismas condiciones.

OBJETIVOS PARTICULARES

Determinar el grado de conversión de la Saponificación de Acetato de Etilo de forma experimental para un reactor CSTR y una serie de reactores CSTR.

Construcción de un prototipo de reactor a nivel planta piloto en el Laboratorio Pesado de la Facultad de Ingeniería Química.

2.1.- JUSTIFICACION

Dado la importancia de estos equipos en la industria y a su comportamiento complejo en determinadas condiciones, es necesario estudiar el nivel de conversión que se logra al trabajar en un solo reactor CSTR y una serie de reactores CSTR, así como su dinámica de operación.

2.2.- PORQUE ES NECESARIO E INTERESANTE REALIZAR EL ESTUDIO.

Porque los reactores químicos son los equipos industriales más importantes para el Ingeniero Químico y dada su complejidad en su operación es necesario conocerlos con mayor amplitud y más aún cuando el trabajo se va a desarrollar a nivel planta piloto, el cual es un paso intermedio a nivel Laboratorio y nivel Industrial.

Otro punto importante es que nuestra institución no cuenta con este tipo de sistemas piloto y creemos que será muy valioso contar con ellos tanto para la investigación como para la enseñanza.

2.3.- HIPOTESIS

De acuerdo a los datos reportados en cálculos analíticos acerca del grado de conversión alcanzado para un reactor CSTR, es menor comparado con n reactores CSTR en serie, operados a las mismas condiciones. Por lo que en este trabajo se plantea hacerlo de forma experimental a fin de comprobar esta aseveración.

CAPITULO III.- MARCO TEORICO

3.1.- REACTOR QUÍMICO.

Un reactor químico es una unidad procesadora diseñada para que en su interior se lleve a cabo una o varias reacciones químicas. Dicha unidad procesadora esta constituida por un recipiente cerrado, el cual cuenta con líneas de entrada y salida para sustancias químicas.

Los reactores químicos tienen como funciones principales:

- Asegurar el tipo de contacto o modo de fluir de los reactantes en el interior del tanque, para conseguir una mezcla deseada con los materiales reactantes.
- Proporcionar el tiempo suficiente de contacto entre las sustancias y con el catalizador, para conseguir la extensión deseada de la reacción.
- Permitir condiciones de presión, temperatura y composición de modo que la reacción tenga lugar en el grado y a la velocidad deseada, atendiendo a los aspectos termodinámicos y cinéticos de la reacción.

Ecuación de Rendimiento. Es aquella expresión matemática que relaciona la salida con la entrada en un reactor químico, para diversas cinéticas y diferentes modelos de contacto.

Modelo de Contacto: Está referido a como los materiales circulan a través del reactor y se contactan unos con otros dentro de este, además del tiempo que necesitan para mezclarse, y las condiciones y características de la incorporación de material.

Cinética: Está referido a cuan rápido ocurren las reacciones, el equilibrio dentro del reactor, y la velocidad de la reacción química; estos factores están condicionados por la transferencia (balance) de materia y energía.

El balance de masas esta dado por la relación:

$$\text{ENTRA} - \text{SALE} \pm \text{GENERA} \pm \text{DESAPARECE} = \text{ACUMULA}$$

El balance de energía esta dado por la relación:

$$\text{ENTRA} - \text{SALE} \pm \text{GENERA} \pm \text{TRANSMITE} = \text{ACUMULA}$$

3.1.1.- TIPOS DE REACTORES QUÍMICOS

Los reactores químicos pueden tener una gran variedad de tamaños, formas y condiciones de operación. Uno de los más comunes es el pequeño matraz o vaso que se usa en el laboratorio químico para las reacciones en fase líquida. El otro extremo en cuanto al tamaño, lo constituyen los grandes recipientes cilíndricos empleados en la industria del petróleo.

Existen infinidad de tipos de reactores químicos, y cada uno responde a las necesidades de una situación en particular, entre los tipos más importantes, más conocidos, y mayormente utilizados en la industria se puede mencionar los siguientes:

REACTOR DISCONTINUO O TIPO BATCH.- Todos los reactantes se cargan inicialmente en el reactor, y una vez puesto en marcha, la concentración de los reactantes varia con el tiempo, pero en cualquier momento esta puede considerarse uniforme para todo el sistema.

Los tanques discontinuos son tanques que normalmente van provistos de sistemas de agitación y sistemas de intercambio de calor para mantener la temperatura de reacción dentro del intervalo deseable.

Estos reactores son recomendables para reacciones relativamente lentas de varias horas de duración.

REACTOR SEMICONTINUO.- Algunos de los reactantes se alimentan inicialmente al reactor y los demás se van alimentando gradualmente al mismo, a medida que va teniendo lugar la reacción.

Este tipo de reactores se utiliza normalmente cuando se trata de un gas de solubilidad limitada que puede alimentarse al reactor gradualmente.

Los reactores discontinuos y semicontinuos son muy utilizados debido a su flexibilidad con respecto al tiempo de reacción, a los tipos de reacciones y al número de reacciones que son capaces de procesar.

REACTOR CONTINUO.- En este tipo de reactores se alimenta el material reactante continuamente y se retiran ininterrumpidamente los productos de la reacción.

Dentro de los reactores continuos tenemos:

REACTOR TUBULAR PFR.- Consiste en uno o más tubos en paralelo

Se utiliza para reacciones en fase gas, que precisan una producción en continuidad. También son muy utilizados para reacciones en fase líquida, con tiempos de reacción generalmente cortos para las cual facilita emplear temperaturas elevadas.

Se usan generalmente para condiciones de operación a gran escala como es el caso del craqueo de petróleo.

REACTOR CONTINUO TANQUE AGITADO "CSTR".- Consiste en un tanque al que continuamente fluye el alimento y descarga productos a flujos volumétricos tales que el volumen de reacción permanece constante. Esta provisto de facilidades para transferencia de calor y para agitación. En condiciones ideales la mezcla es homogénea.

REACTOR DE LECHO FLUIDIZADO. Se utiliza para reacciones donde intervengan un sólido y un fluido (generalmente un gas). En estos reactores la corriente de gas se hace pasar a través de las partículas sólidas, a una velocidad suficiente para suspenderlas, con el movimiento rápido de partículas se obtiene un alto grado de uniformidad en la temperatura evitando la formación de zonas calientes.

REACTOR DE LECHO FIJO. Los reactores de lecho fijo consisten en uno o más tubos empacados con partículas de catalizador, que operan en posición vertical. Las partículas catalíticas pueden variar de tamaño y forma: granulares, cilíndricas,

esféricas, etc. En algunos casos, especialmente con catalizadores metálicos como el platino, no se emplean partículas de metal, sino que éste se presenta en forma de mallas de alambre. El lecho está constituido por un conjunto de capas de este material. Estas mallas catalíticas se emplean en procesos comerciales como por ejemplo para la oxidación de amoníaco y para la oxidación del acetaldehídico a ácido acético.

REACTOR DE LECHO CON ESCURRIMIENTO. En estos reactores el catalizador sólido está presente como en el lecho fijo. Los reactivos se hacen pasar en corrientes paralelas o a contracorriente a través del lecho.

REACTOR DE LECHO DE CARGA MÓVIL. Una fase fluida pasa hacia arriba a través de un lecho formado por sólidos. El sólido se alimenta por la parte superior del lecho, se mueve hacia debajo de la columna y se saca por la parte inferior.

REACTOR DE BURBUJAS. Permiten hacer burbujear un reactivo gaseoso a través de un líquido con el que puede reaccionar, porque el líquido contiene un catalizador disuelto, no volátil u otro reactivo. El producto se puede sacar del reactor en la corriente gaseosa.

REACTOR CON COMBUSTIBLE EN SUSPENSIÓN. Son similares a los reactores de burbujeo, pero la fase "líquida" esta formada por una suspensión de líquidos y partículas finas del catalizador sólido.

REACTOR DE MEZCLA PERFECTA. En este reactor las propiedades no se modifican ni con el tiempo ni con la posición, ya que suponemos que estamos trabajando en estado de flujo estacionario y la mezcla de reacción es completamente uniforme. El tiempo de mezcla tiene que ser muy pequeño en comparación con el tiempo de permanencia en el reactor. En la práctica se puede llevar a cabo siempre que la mezcla fluida sea poco viscosa y esté bien agitada

REACTORES DE RECIRCULACIÓN. Pueden ser **CON DISPOSITIVO SEPARADOR**, cuando se toma parte de la corriente de salida y se llevan directamente a la entrada del reactor. **SIN DISPOSITIVO SEPARADOR**, cuando en la salida del reactor colocamos un dispositivo separador que hace que se

separen reactivos y productos, luego los reactivos se recirculan de nuevo al reactor.

REACTORES DE MEMBRANA. Son aquellos que combinan la reacción y la separación en una sola unidad; la membrana selectivamente remueve una (o más) de las especies reactantes o productos. Estos reactores han sido comúnmente usados para aplicaciones en las cuales los rendimientos de la reacción están limitados por el equilibrio. También han sido propuestos y usados para otras aplicaciones; para incrementar el rendimiento y la selectividad de reacciones enzimáticas y catalíticas influyendo a través de la membrana sobre la concentración de una (o más) especies intermedias, removiéndolas selectivamente (o ayudando a mantenerlas en una concentración baja), evitando la posibilidad de que dichos compuestos envenenen o desactiven el catalizador y para proveer una interfase controlada entre dos o más reactantes.

FERMENTADORES. Este tipo de reactores utilizan hongos, los cuales forman un cultivo, el cual a su vez se transforma en una “sopa” espesa que contiene crecimientos filamentosos. Un ejemplo se encuentra en la fabricación de antibióticos como la penicilina.

REACTOR TRICKLE BED. Este tipo de reactor supone la existencia de un flujo continuo de gas y otro de líquido hacia abajo sobre un lecho fijo de partículas sólidas catalíticas, las características de las partículas sólidas y de su empaquetamiento, junto con los caudales y propiedades de las dos corrientes de fluidos determinarán el régimen de flujo del reactor y también sus propiedades fluido-dinámicas.

También se pueden mencionar los reactores **ISOTÉRMICOS**, que son aquellos que trabajan u operan a una misma *temperatura constante*; y también los reactores **ISOBÁRICOS**, que son aquellos que trabajan u operan a una misma *presión constante*. [3]

3.2.- REACTOR CONTINUO TANQUE AGITADO “CSTR”.

La figura 3.1 representa a un reactor continuo de tanque agitado. Este reactor se emplea comúnmente en fase líquida por su versatilidad y facilidad de control. El reactor representado en la figura 3.1 presenta un serpentín para controlar la temperatura de la mezcla reaccionante. Existen muchas configuraciones por ejemplo, se pueden optar por chaquetas de enfriamiento. Para lograr un mejor mezclado se emplean distintos tipos de agitadores y deflectores. El volumen de reactor para el reactor esquematizado en la figura 3.11 no debe considerarse que incluye el volumen de la turbina ni de los tubos de calentamiento. También debe tomarse en cuenta que puede existir un volumen sin llenar por encima del nivel del líquido y que el volumen del reactor no incluye dicho volumen. Esto es el volumen del reactor se refiere exclusivamente al volumen del líquido que se mantiene dentro del reactor.

La manera más sencilla para controlar el nivel de un reactor es mediante “rebosamiento” o derrame. Para evitar que exista canalización o que los reactivos tomen un “atajo”, es conveniente situar la salida en el extremo opuesto a la entrada. Por ejemplo si alimentamos en la parte superior podemos extraer el producto en la parte inferior o viceversa. Esto se ilustra en la figura 3.1.

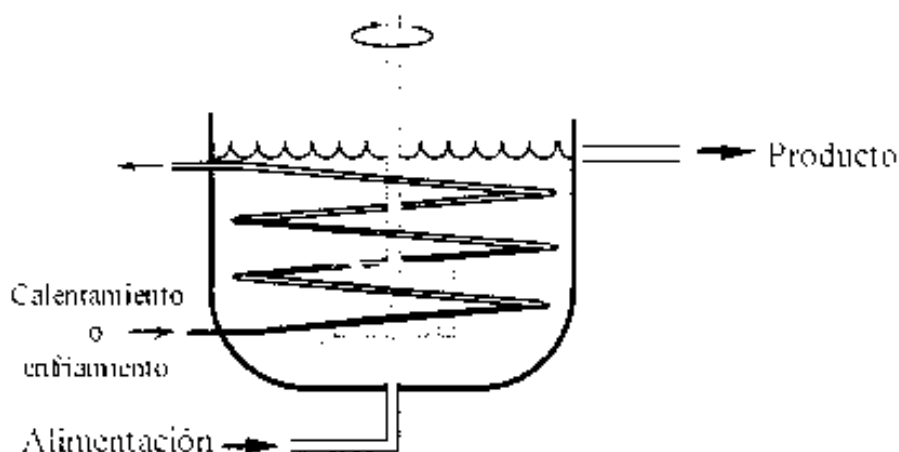


Fig.3.1: Representación esquemática de un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR”.

“El modelo ideal de un reactor continuo de tanque agitado supone que el mezclado provocado por el agitador es suficiente para que todo el contenido del reactor tenga temperatura y concentraciones uniformes”. [2]

3.3.- LOS REACTORES CSTR Y SU APLICACIÓN EN LA INDUSTRIA.

Un reactor químico industrial es un dispositivo complejo en el que la transmisión de calor, la transferencia de materia, la difusión y la fricción pueden tener lugar conjuntamente con la reacción

Un tipo de reactor de uso muy común en procesos industriales es un tanque con agitación que opera continuamente, que se conoce como reactor de tanque con agitación continua (CSTR, *continuous-stirred tank reactor*) o reactor de retromezcla. El CSTR normalmente se opera en estado estacionario y de modo que este muy bien mezclado. Como resultado de esto ultimo, el CSTR generalmente se modela sin variaciones espaciales en la concentración, temperatura o velocidad de reacción en todos los puntos del recipiente. Puesto que la temperatura y la concentración son idénticas en todo el interior del recipiente de reacción, son también las mismas en el punto de salida. Así pues, la temperatura y la concentración en el flujo de salida se modelan como iguales a las que imperan en el interior del reactor los sistemas en los que el mezclado se alejan mucho de lo ideal, el modelo bien mezclado no es apropiado y hay que recurrir a otras técnicas de modelado, como distribuciones de tiempo de residencia, para obtener resultados significativos.

Los reactores CSTR se utilizan en la fabricación de diferentes productos como son:

- Para la producción comercial de nitrobenzeno. En 1995 se produjeron 1650 millones de libras de nitrobenzeno para lo cual utilizaron una batería de 4 CSTR. [4]
- Para la producción comercial de Etilenglicol. En 1995 se produjeron 5200 millones de libras de etilenglicol en un CSTR. [4]
- Para la producción de propilenglicol. En 1997 se produjeron más de 800 millones de libras de propilenglicol en un CSTR adiabático. [4]

3.4.- ARREGLOS DE LOS REACTORES CONTINUOS TANQUE AGITADO “CSTR”.

El Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR” se puede usar solo o formando parte de una serie o batería de CSTR. Es relativamente fácil mantener un buen control de la temperatura con un CSTR. [4]

3.4.1.-REACTOR CONTINUO TANQUE AGITADO “CSTR” EN SERIE DE IGUAL VOLUMEN.

Para una reacción de orden $n=1$ los reactores deben de ser elegidos del mismo tamaño para minimizar el volumen total del sistema. [5]

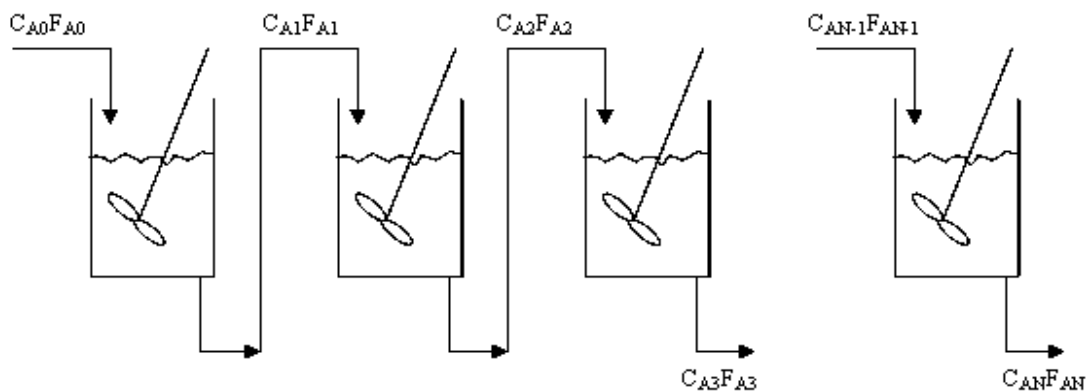


Fig. 3.2: Representación de una Batería de n Reactores Continuo Tanque Agitado “CSTR”.

3.4.2.-Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR” en Serie de diferente volumen.

Para reacciones de orden $n>1$, los reactores de menor volumen deben ubicarse primero, para maximizar la conversión de reactivos ya que esta se favorece con concentraciones relativamente altas de reactivo. [5]

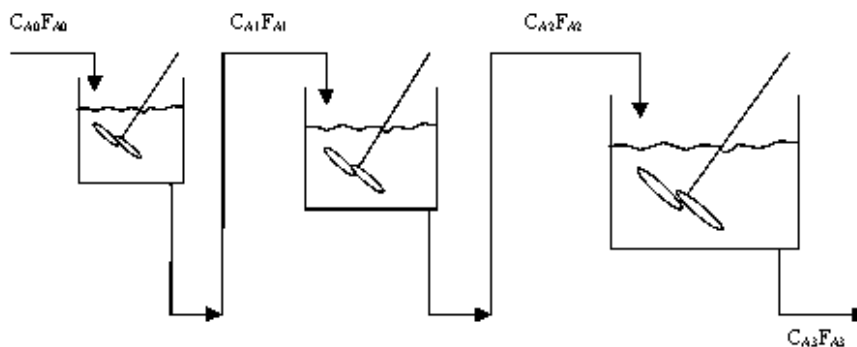


Fig. 3.3: Representación de una Batería de 3 Reactores Continuo Tanque Agitado “CSTR” de diferente volumen y orden $n>1$.

Para reacciones de orden $n < 1$, los reactores de mayor volumen deben ubicarse primero, para maximizar la conversión de reactivos ya que esta se favorece a concentraciones relativamente bajas de reactivo. [5]

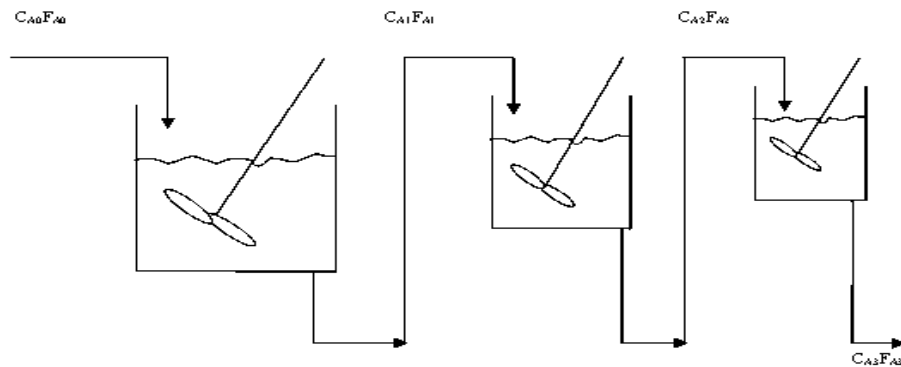


Fig. 3.4: Representación de una Batería de 3 Reactores Continuo Tanque Agitado “CSTR” de diferente volumen y orden $n < 1$.

3.4.3- Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR” en Paralelo

Este arreglo consiste en reactores de igual tamaño colocados en paralelo y la alimentación se distribuye equitativamente entre todos los reactores, como se puede observar en la figura 3.5. Puesto que todos los reactores tienen el mismo tamaño operan a la misma temperatura y tienen velocidades de alimentación idénticas, la conversión será la misma en todas las reacciones.

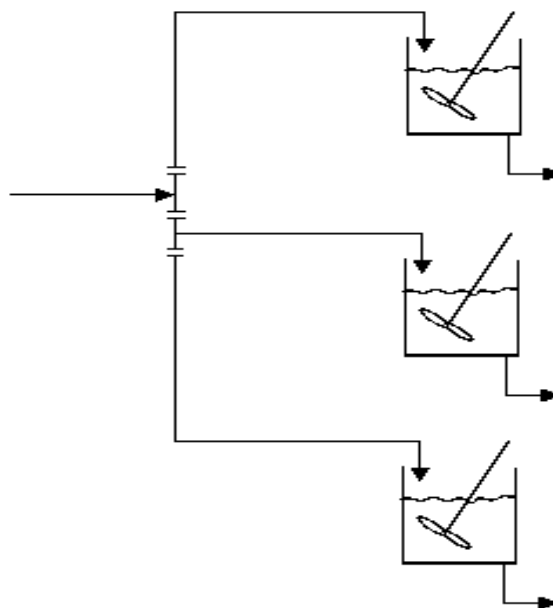


Fig. 3.5: Representación de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR” en paralelo. La conversión para reactores en serie es mayor que en paralelo en CSTRs. [4]

3.5.- ANÁLISIS DE LA ESTABILIDAD Y CONVERSIÓN EN LOS REACTORES CSTR.

En las reacciones simples interesa conocer el grado de conversión y la estabilidad del reactor, y no se presentan los problemas de la distribución de productos, como ocurre en el caso de reacciones múltiples.

La termodinámica suministra dos tipos importantes de información relacionados con la conversión y con la estabilidad del reactor:

1. Calor desprendido o absorbido para una determinada extensión de la reacción.
2. Conversión máxima que puede alcanzarse.

Es común que para conocer los múltiples estados estables en este tipo de reactores se grafica el calor de reacción y el calor de eliminación en función de la temperatura. [6]

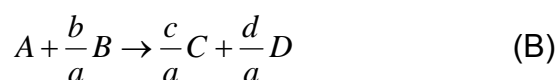
Definición de Conversión

Para definir conversión, escogemos uno de los reactivos como base de cálculo luego relacionamos con esta base las demás especies que intervienen en la reacción. En general lo mejor es seleccionar el reactivo limitante como base de cálculo.

Desarrollaremos las relaciones estequiométricas y las ecuaciones de diseño considerando la reacción general.



Las letras mayúsculas representan especies químicas, y las minúsculas, coeficientes estequiométricos. Si tomamos la especie A como base de cálculo, dividimos la expresión de la reacción entre el coeficiente estequiométrico de la especie A, para acomodar la expresión de la reacción en la forma:



Y expresar todas las cantidades “por mol de A”.

La conversión representa la fracción de un reactivo en la alimentación que ha reaccionado. Este concepto es esencial para los reactores en los cuales deseamos transformar materia prima en productos de mayor valor agregado o útiles como productos intermedios para otros procesos. La fracción de conversión se define como:

$$X_A = \frac{\text{moles.de.A.que.reaccionaron}}{\text{moles.de.A.alimentados}} \quad (C)$$

La conversión puede estar en fracción mol o % mol. [4]

La conversión, a través de los balances estequiométricos, puede ser relacionada con otras variables de un sistema. Así para el caso de gases puede relacionarse con presión total o con presiones parciales, con volumen para sistemas de volumen variable y en general con otras medidas de composición, lo cual resulta de gran valor en la planeación de experimentos para el estudio de sistemas que involucran reacciones químicas, ya que se puede pensar en una propiedad que se manifieste mucho durante la realización del fenómeno y que sea fácil de medir con respecto a otras y entonces, utilizar esta variable como una medida indirecta de la conversión y de esta manera estudiar el comportamiento de la reacción.

Cuando se tienen varios reactores en serie de tanque agitado, dependiendo de la cinética, su desempeño puede depender del orden en que se acomoden. Sin embargo, para cinéticas de orden positivo, la conversión que se alcanza con n reactores de tamaño $\frac{V_{RTotal}}{n}$ es considerablemente superior a aquella que se lograría con un solo reactor de tanque agitado de mayor tamaño y volumen de reactor igual a V_{RTotal} de los reactores en serie. [2]

3.6.- REACCIÓN QUÍMICA.

Es el proceso en el que una o más sustancias se transforman en otras diferentes

Las reacciones químicas ocurren continuamente en la naturaleza y también pueden reproducirse en el laboratorio de forma controlada. Ello nos ha permitido estudiar como y porque se producen, y extraer provecho de ellas.

Los factores que hay que tener en cuenta a la hora de llevar a cabo o desarrollar una reacción química son:

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

Formas de cambios químicos:

- *Descomposición*, consiste en que una molécula se divide en moléculas más pequeñas, átomos o radicales.
- *Combinación*, ésta se realiza cuando una molécula o átomo se une con otra especie para formar un compuesto nuevo.
- *Isomerización*, en este caso la molécula no efectúa ninguna descomposición externa o adición a otra, es simplemente un cambio de configuración estructural interna. [3]

3.6.1.-Clases de Reacciones Químicas.

Reacciones Homogéneas: Cuando se afecta solamente una fase, ya sea gaseosa, sólida, o líquida.

Reacciones Heterogéneas: Cuando se requiere la presencia de al menos dos fases para que tenga lugar la reacción a una velocidad deseada.

Reacciones Enzimáticas: Utilizan catalizadores biológicos (proteínas con alto peso molecular, con centros activos, y que trabajan a bajas temperaturas)

Reacciones Catalíticas: Son aquellas reacciones que requieren de una sustancia adicional (que no aparece en el balance global) para modificar la velocidad de reacción; esta sustancia por su mera presencia provoca la reacción química, reacción que de otro modo no ocurriría.

Reacciones No Catalíticas: Los materiales reactantes no necesitan ninguna sustancia adicional para dar lugar a la reacción química

Reacciones Autocatalíticas: En esta reacción, uno de los productos formados actúa como catalizador, participando en otra etapa del proceso donde velocidad de reacción es más rápido que en la primera.

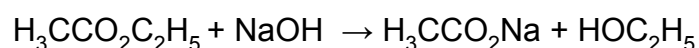
Reacciones Endotérmicas: Son aquellas que adsorben calor del exterior.

Reacciones Exotérmicas: Son aquellas que liberan calor hacia el exterior. [3]

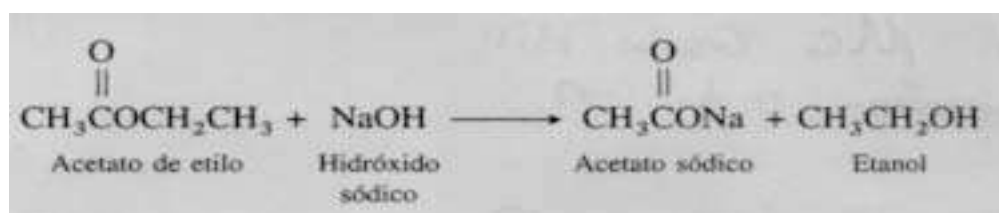
3.7.- REACCIÓN DE SAPONIFICACIÓN DE ACETATO DE ETILO.

La reacción a utilizar es la saponificación de acetato de etilo con hidróxido de sodio. Se escogió esta reacción debido a que ha sido ampliamente utilizada y demostrada en diferentes laboratorios alrededor del mundo. Además, los reactivos son sencillos de obtener, fáciles de manejar y no son muy tóxicos.

La reacción de saponificación corresponde a la hidrólisis de un éster, cuando los reactivos empleados son acetato de etilo e hidróxido de sodio los productos resultantes son acetato de sodio y etanol.



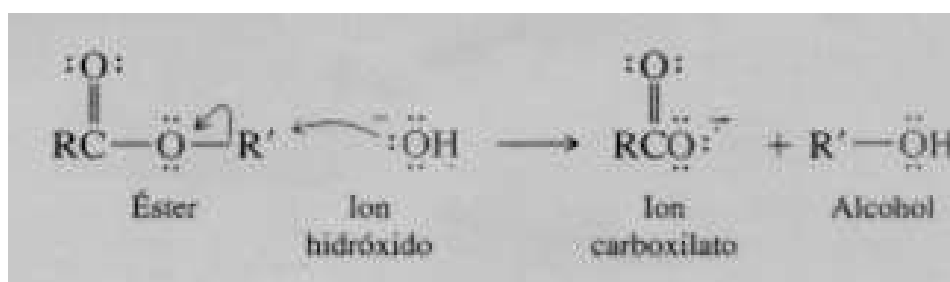
En uno de los primero estudios cinéticos de una reacción orgánica, llevado a cabo hace aproximadamente un siglo, se demostró que la velocidad de la hidrólisis del acetato de etilo en una disolución acuosa de hidróxido de sodio era de primer orden en el Ester y de primer orden en la base.



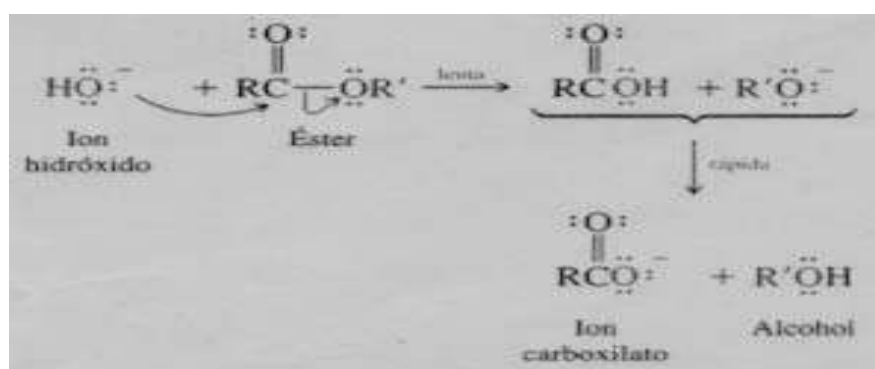
En conjunto, la reacción muestra una cinética de segundo orden. Tanto el ester como la base están implicados en la etapa determinante de la velocidad o en una etapa rápida que la precede.

Los dos procesos que son consistentes con la cinética de segundo orden implica al ión hidróxido como nucleófilo, pero se diferencia en la posición del ataque nucleófilo. Uno de estos procesos es simplemente una reacción S_N2 en la cual el hidróxido desplaza al carboxilato del grupo alquilo del ester. Decimos que este camino supone la rotura alquilo-oxígeno, porque es el enlace entre el oxígeno del grupo alquilo del ester el que se rompe. El otro proceso supone la rotura acilo-oxígeno, con el hidróxido atacando al grupo carbonilo.

Rotura alquilo-oxígeno



Rotura acilo-oxígeno



Las pruebas convincentes de que la hidrólisis de un ester promovida por base transcurre por la segunda de estas dos rutas, es decir, la rotura acilo –oxígeno. [7]

CAPITULO IV.- DESARROLLO EXPERIMENTAL

4.1.- El diseño del reactor.

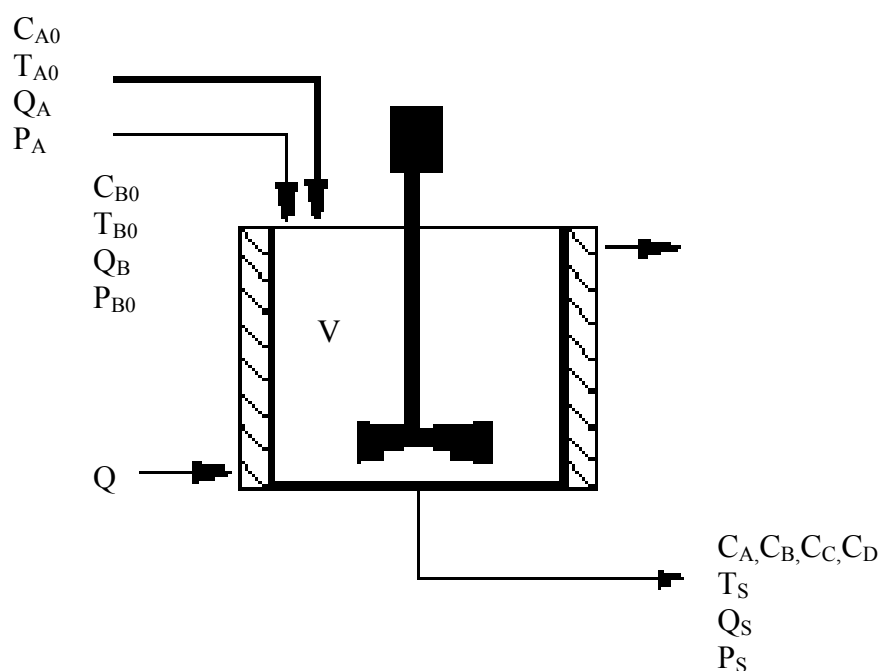
El objetivo del diseño es especificar tamaño, tiempos, flujos, temperaturas, presión, concentración, materiales y cuanto sea necesario para realizar la producción de una sustancia que cumpla establemente con determinadas condiciones de calidad.

Para saber el comportamiento de estos equipos, se necesita establecer un modelo matemático. Las bases para la construcción de los modelos matemáticos son: las leyes básicas de la física y de la química, en combinación como las leyes de la conservación de masa, energía y momentum expresado en forma de Ecuación diferencial.

Para el diseño de nuestro reactor contamos con 3 tanques de 4 litros de capacidad los que se acondicionarán para que trabajen como Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".

Definiendo los grados de libertad tenemos:

Variables del reactor



Variables totales $3C + 10$

Variables dependientes:

Balance de Masa total	C
Balance de masa individual	1
Restricciones	3
Total	C + 4

$$\text{Numero de grados de libertad} = (3C + 10) - (C + 4) = 2C + 6$$

Son $2C + 6$ variables que tendríamos que asignar para que nuestros grados de libertad sean igual a cero y así tener una solución única.

Las variables asignadas son:

Temperatura	1
C_{A0}, T_{A0}, Q_A	C + 2
C_{B0}, T_{B0}, Q_B	C + 2
Volumen	1
Total	2C + 6

Con esto quedan definidos los grados de libertad y tenemos una solución.

Ahora nuestras variables a calcular son las variables dependientes que son C + 4:

$C_A, C_B, C_C, C_D, T_S, Q_S$	C + 2
r_A	1
X	1

4.2.-Determinación analítica del grado de conversión

Reacción de saponificación de acetato de Etilo. Tenemos una reacción de segundo orden con los siguientes datos:

$$A = 564090918.8 \text{ Lt} / \text{mol min}$$

$$E_a = 1.987 \text{ Cal} / \text{molK}$$

$$C_{A0} = 0.1N$$

$$C_{B0} = 0.1M$$

Balance de Masa

$$\frac{dC_A}{dt} + \frac{QC_A - QC_{Ao}}{V} = -r_A \quad (1)$$

Suposiciones:

El reactor opera en estado estacionario

Mezclado perfecto

Volumen y flujo constante

Reactor isotérmico por lo que solo se realizara el balance de masa

A = Hidróxido de Sodio (NaOH).

$\frac{dC_A}{dt} = 0$, puesto que el reactor opera en estado estacionario y como el flujo es constante $Q = Q_o$ por lo que nos queda:

$$\frac{Q(C_A - C_{Ao})}{V} = -r_A \quad (2)$$

Sabemos que es una reacción de segundo orden del tipo $A + B \rightarrow C + D$ por lo tanto:

$$r_A = kC_A C_B \quad (3)$$

Suponiendo que $C_A = C_B$

$$r_A = kC_A^2 \quad (4)$$

Sustituyendo (4) en (3) tenemos:

$$\frac{Q(C_A - C_{Ao})}{V} = -kC_A^2 \quad (5)$$

La ecuación (5) es nuestra Ecuación de diseño, de esta ecuación conocemos la concentración inicial, y podemos calcular la k por medio de la ecuación de Arrhenius y nuestras incógnitas son el volumen el flujo y la concentración final.

4.2.1.- Para el caso de un Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR"

Balance de masa

Partiendo de la ecuación (5)

$$\frac{Q(C_A - C_{Ao})}{V} = -kC_A^2 \quad (5)$$

En estado estacionario sabemos que:

$$\begin{aligned} V &= Cte \\ Q &= Cte \\ \theta &= V/Q \end{aligned} \quad (6)$$

Sustituyendo (6) en (4) tenemos:

$$\frac{(C_A - C_{A0})}{\theta} = -k C_A^2 \quad (7)$$

Reacomodando e igualando a cero tenemos:

$$\begin{aligned} (C_{A1} - C_{A0}) &= -\theta k C_A^2 \\ C_A - C_{A0} + \theta k C_A^2 &= 0 \\ \theta k C_A^2 + C_A - C_{A0} &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

Tenemos una ecuación de segundo orden con 2 incógnitas la cual se resuelve por medio de la ecuación cuadrática cuya formula es:

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (9)$$

Donde:

$$\begin{aligned} a &= \theta k \\ b &= 1 \\ c &= -C_{A0} \end{aligned}$$

Calculando k por medio de la ecuación de Arrhenius a T = 25°C tenemos:

$$k = A e^{\frac{-Ea}{RT}} \quad (10)$$

$$k = 564090918.8 e^{\frac{-10342.9907}{(1.987)(298)}}$$

$$k = 14.63 \text{ Lt/mol min}$$

Dejamos a la concentración en función del tiempo por lo que suponemos los tiempos de residencia para calcular la concentración final, sustituyendo datos en la ecuación (7).

Una vez calculada la concentración final calculamos la conversión alcanzada por medio de la siguiente formula:

$$C_A = C_{A0} - C_{A0}x$$

Despejando x tenemos:

$$x = \frac{C_A - C_{A0}}{-C_{A0}} \quad (11)$$

Para diferentes tiempos de residencia obtenemos los siguientes cálculos:

Tabla 4.1: Cálculos de conversión en diferentes tiempos obtenidos para un Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR".

TIEMPO	CONCENTRACIÓN	CONVERSIÓN
2	0.04381865	0.56181355
4	0.03366751	0.6633249
6	0.02853341	0.71466586
8	0.02526876	0.7473124
10	0.02294915	0.77050852
12	0.02118772	0.78812283
14	0.01978928	0.80210719
16	0.01864298	0.81357019
18	0.01768044	0.82319559
20	0.01685684	0.83143162
30	0.01399816	0.86001836
40	0.01224566	0.87754341
50	0.01102854	0.88971456
100	0.00793287	0.92067133
150	0.00652644	0.93473556
200	0.00567767	0.94322331

En la tabla 4.1 observamos como varia la conversión con respecto al tiempo de residencia. Basándonos en la tabla anterior elegimos el tiempo de residencia al cual operara nuestro reactor. Considerando que queremos alcanzar una conversión entre el 80 y 85%. De acuerdo a la tabla 4.1 tenemos cuatro tiempos de residencia diferentes en los que se cumple el rango de conversión deseada, ahora supondremos diferentes volúmenes para calcular el flujo de entrada.

Para elegir el volumen tenemos con una restricción ya que contamos con los tanques de capacidad de 4 litros por lo que nuestro volumen debe ser menor a este.

Para un volumen de 1 litro de la ecuación (6) tenemos:

$$\theta = V/Q \rightarrow Q = V/\theta$$

$$Q = \frac{1Lt}{14Min} = 0.0714 Lt/Min$$

Tabla 4.2: Calculo del flujo a un volumen de 1 litro y diferentes tiempos de residencia.

Tiempo (θ)	Flujo (Q)
14	0.0714
16	0.0625
18	0.0555
20	0.05

Para el volumen de 2 litros tenemos:

Tabla 4.3: Calculo del flujo a un volumen de 2 litros y diferentes tiempos de residencia.

Tiempo (θ)	Flujo (Q)
14	0.1428
16	0.125
18	0.1111
20	0.1

Para el volumen de 3 litros tenemos:

Tabla 4.4: Calculo del flujo a un volumen de 3 litros y diferentes tiempos de residencia.

Tiempo (θ)	Flujo (Q)
14	0.2142
16	0.1875
18	0.1666
20	0.15

Como podemos observar los flujos arrojados para volúmenes de 1 y 2 litros son muy pequeños y tendríamos dificultad en medirlos por lo que se elegirá el volumen de 3 litros.

Para definir el tiempo de residencia sabemos que entre 14 y 20 minutos cumplen con los requerimientos deseados de conversión por lo que arbitrariamente elegimos el tiempo residencia de 18 minutos.

Con estos cálculos hemos despejando las incógnitas que teníamos en la ecuación de diseño pues por medio de estos adaptaremos nuestro reactor para operar un volumen de 3 Litros en el cual se trabajara con un flujo constante de 0.16Lt/Min, un tiempo de residencia de 18Min con los cuales obtendremos una conversión para la reacción de saponificación de acetato de etilo del 82%.

Para los otros dos tanques mas que tenemos los adaptaremos para operar a las mismas condiciones y con estos realizaremos una serie de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR" del mismo tamaño.

4.2.2.- Para el caso de una serie de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR"

Balance de masa para cada reactor

$$\frac{Q(C_{A1} - C_{A0})}{V_1} = -r_1 \quad (12)$$

$$\frac{Q(C_{A2} - C_{A1})}{V_2} = -r_2 \quad (13)$$

$$\frac{Q(C_{A3} - C_{A2})}{V_3} = -r_3 \quad (14)$$

Sabemos que:

$$\begin{aligned} V_1 &= V_2 = V_3 = Cte \\ Q_0 &= Q_1 = Q_2 = Q_3 = Q = Cte \\ \theta &= V/Q \end{aligned} \quad (15)$$

Sustituyendo (4) en las ecuaciones (11), (12) y (13) tenemos:

$$\frac{(C_{A1} - C_{A0})}{\theta} = -r_1 \quad (16)$$

$$\frac{(C_{A2} - C_{A1})}{\theta} = -r_2 \quad (17)$$

$$\frac{(C_{A3} - C_{A2})}{\theta} = -r_3 \quad (18)$$

Sustituyendo (3) en las ecuaciones (15), (16) y (17) tenemos:

$$\frac{(C_{A1} - C_{A0})}{\theta} = -k_1 C_{A1}^2 \quad (19)$$

$$\frac{(C_{A2} - C_{A1})}{\theta} = -k_2 C_{A2}^2 \quad (20)$$

$$\frac{(C_{A3} - C_{A2})}{\theta} = -k_3 C_{A3}^2 \quad (21)$$

Acomodando las ecuaciones tenemos:

$$\begin{aligned} (C_{A1} - C_{A0}) &= -\theta k_1 C_{A1}^2 \\ (C_{A2} - C_{A1}) &= -\theta k_2 C_{A2}^2 \\ (C_{A3} - C_{A2}) &= -\theta k_3 C_{A3}^2 \end{aligned}$$

$$C_{A1} - C_{A0} + \theta k_1 C_{A1}^2 = 0$$

$$C_{A2} - C_{A1} + \theta k_1 C_{A1}^2 = 0$$

$$C_{A3} - C_{A2} + \theta k_1 C_{A1}^2 = 0$$

$$\theta k_1 C_{A1}^2 + C_{A1} - C_{A0} = 0 \quad (22)$$

$$\theta k_1 C_{A1}^2 + C_{A2} - C_{A1} = 0 \quad (23)$$

$$\theta k_1 C_{A1}^2 + C_{A3} - C_{A2} = 0 \quad (24)$$

Estas ecuaciones se resuelven por medio de la ecuación cuadrática

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (9)$$

Donde:

$$a = \theta k$$

$$b = 1$$

$$c = -C_{ai}$$

A una $T = 25^\circ\text{C}$, $k = 14.63 \text{ Lt/mol min}$

Ahora suponemos los tiempos de residencia para calcular la concentración final, sustituyendo datos en la ecuación (13).

Para una serie de reactores sabemos que:

$$\theta = \frac{\theta}{n} \quad (25)$$

Donde n= numero de CSTR

Calculo de la conversión

$$C_{A1} = C_{A0} - C_{A0}x$$

Despejando x tenemos:

$$x_1 = \frac{C_{A1} - C_{A0}}{-C_{A0}} \quad (26)$$

$$x_2 = \frac{C_{A2} - C_{A1}}{-C_{A1}} \quad (27)$$

$$x_3 = \frac{C_{A3} - C_{A2}}{-C_{A2}} \quad (28)$$

Suponiendo los tiempos de residencia obtenemos los siguientes cálculos:

Tabla 4.5: Cálculos de conversión en diferentes tiempos obtenidos para tres Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".

Tiempo (θ)	Tiempo ($\theta/3$)	Concentración			Conversión X
		C ₁	C ₂	C ₃	
2	0.66	0.06240119	0.04384177	0.03319925	0.66800754
4	1.33	0.05045867	0.03134325	0.02195991	0.78040087
6	2	0.04381865	0.0252151	0.01687895	0.83121047
8	2.66	0.03944637	0.02148412	0.0139313	0.86068703
10	3.33	0.03619075	0.01886064	0.01192855	0.88071449
12	4	0.03366751	0.016918	0.01048481	0.89515185
14	4.66	0.03166068	0.01542969	0.00940249	0.90597511
16	5.33	0.02996827	0.01421393	0.00853437	0.91465627
18	6	0.02853341	0.01321164	0.00782998	0.92170023
20	6.66	0.02731298	0.01237987	0.00725348	0.9274652
30	10	0.02294915	0.00956481	0.00536065	0.9463935
40	13.33	0.02022532	0.00793773	0.00431188	0.95688115
50	16.66	0.01830759	0.00685481	0.00363474	0.9636526
100	33.33	0.01333184	0.00430304	0.00211722	0.97882776
150	50	0.01102854	0.00325904	0.00153514	0.98464858
200	66.66	0.00962644	0.00267066	0.00121974	0.98780261

Operaremos nuestra serie de reactores CSTR a las mismas condiciones que se calcularon para un solo CSTR. Puesto que tenemos un volumen de 3Lt y un tiempo de residencia de 18 Minutos, repartido en los tres CSTR nos da que cada reactor se trabajara a un volumen de 1Lt y 6 minutos de tiempo de residencia con un flujo de 0.16 Lt/Min.

4.3.- Diagrama de reactor CSTR

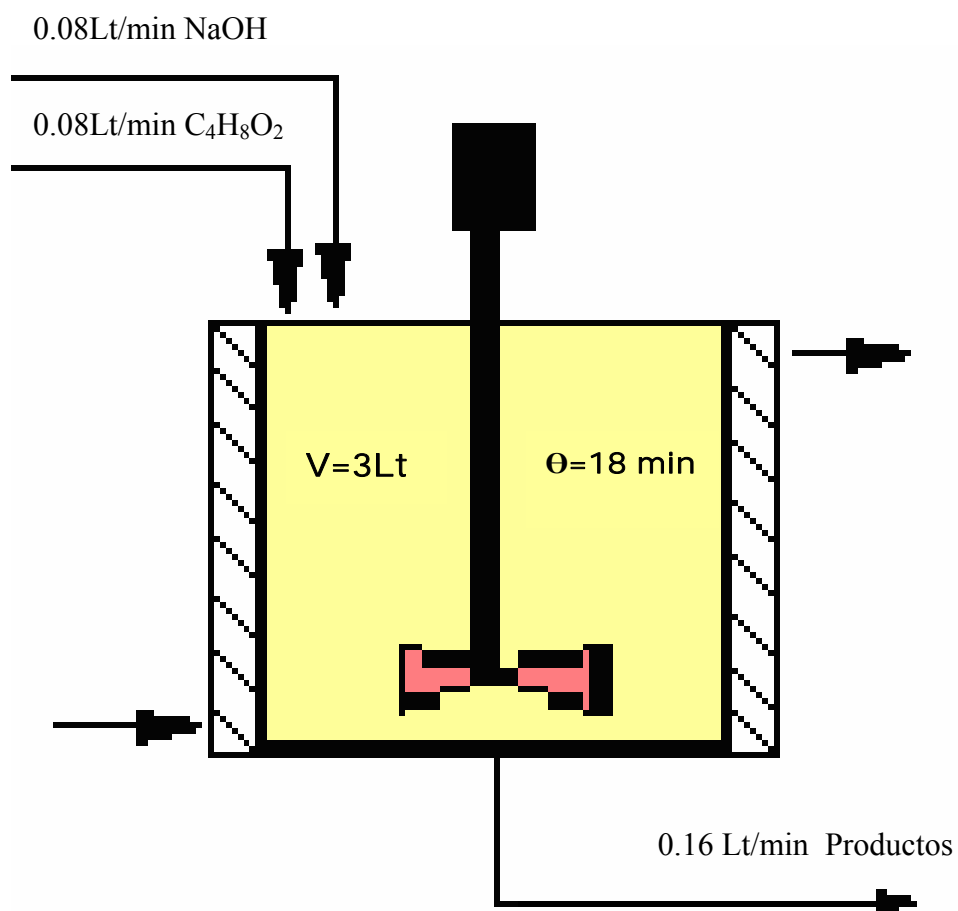


Fig. 4.1: Diagrama de un reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR".

4.4.- Diagrama de reactores CSTR en serie

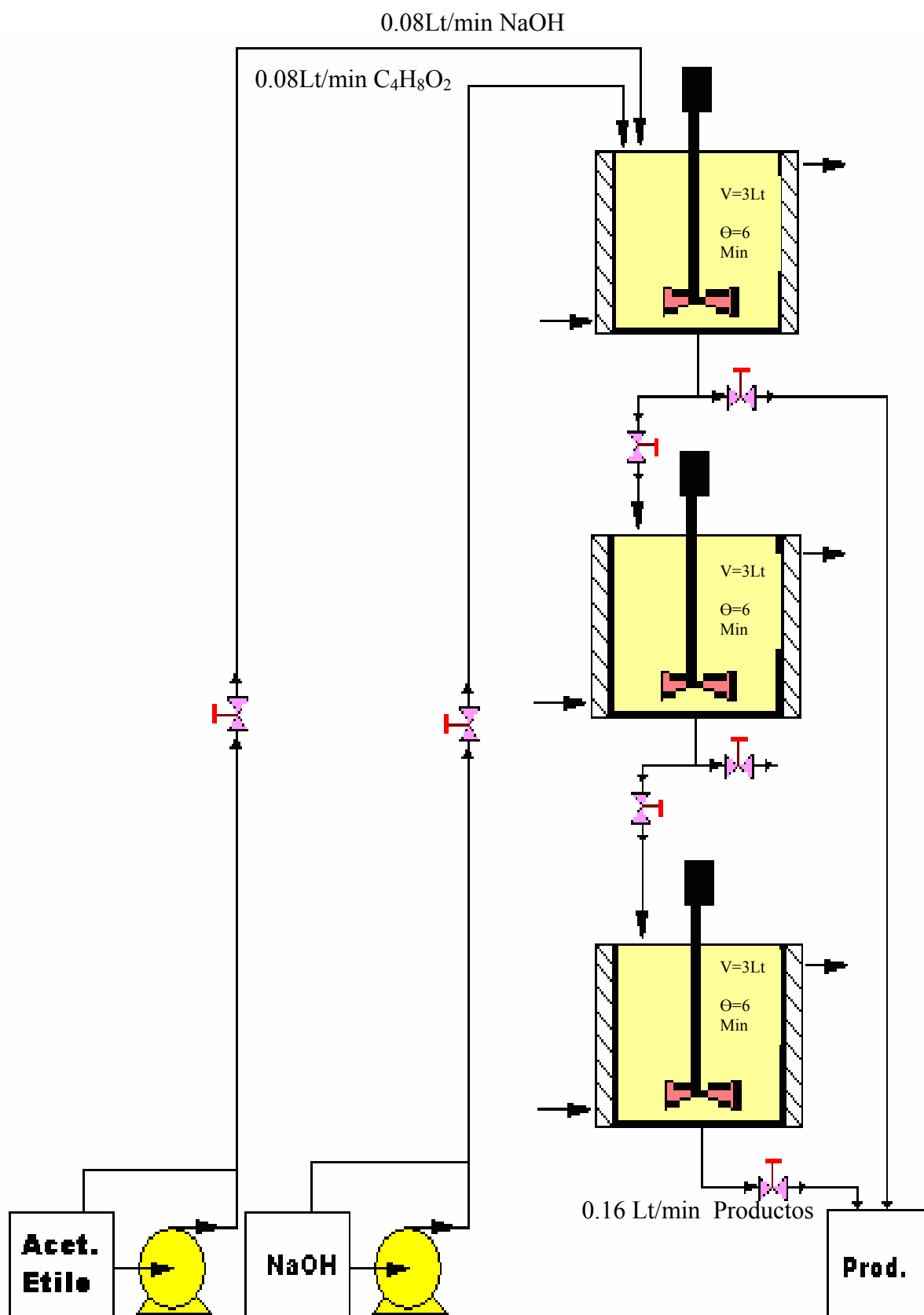


Fig. 4.2: Diagrama de tres Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".

4.5.- Construcción

La construcción del equipo se llevo a cabo en los siguientes pasos:

1. Tenemos 3 tanques cilíndricos con capacidad de 4Lt, los cuales fueron provistos de una chaqueta de enfriamiento. El material de construcción de estos tanques fue acero inoxidable. Los cuales se adaptaron para funcionar como Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".
2. Posteriormente seleccionamos la base para instalar los tanques.
3. Teniendo la base se empezaron a montar los tanques, iniciando de abajo para arriba, previo a esto se hicieron los orificios de alimentación y salida de los productos a los tanques.
4. Habiendo seleccionado los motores y varillas de agitación se instalaron en los tanques, se corto la tubería a la medida y se instalo.
5. Cuando se termino de instalar el primer reactor procedimos a instalar el segundo de tal forma que estuvieran conectados en serie y seguimos el mismo procedimiento para instalar el tercer reactor.
6. Cuando se termino la instalación de los tres reactores se instalaron las bombas.
7. Posteriormente se instalaron los recipientes para los reactivos y productos.
8. Una vez terminado procedimos a realizar la conexión eléctrica la cual cuanta con un control de encendido y apagado para las bombas y los agitadores.

4.6.- Puesta en marcha

Para probar los reactores se realiza una corrida con agua, de esta forma verificamos si existen fugas a algún mal funcionamiento de los equipos. Esta primera prueba se detectan todas las fallas y se familiariza con el funcionamiento del equipo.

El procedimiento es el siguiente:

Llenar los tanques con agua. Checar que todas las válvulas estén cerradas (excepto las del By-Pass). Arrancar las Bomba 1 y la Bomba 2. Fijar un gasto volumétrico (Lt/min) en cada uno de los Rotametros.

Llenar el Reactor 1 hasta un volumen X (deseado). Cuando el Reactor 1 este lleno, abrir la válvula de salida del Reactor 1 la cual alimenta al Reactor 2, hasta que la entrada al Reactor 1 sea igual a la salida. Dejar que se llene hasta un volumen X (deseado) y realizar el mismo procedimiento para llenar el Reactor 3 hasta el volumen deseado.

Cuando se haya llenado el Reactor 3 al volumen deseado abrir la válvula hasta que la entrada sea igual a la salida. (Cuando se haya logrado mantener los 3 Reactores a volumen constante arrancar los agitadores). Dejar funcionando unos minutos mas en lo que se revisa que el equipo no tenga alguna fuga en la tubería o falla en algún agitador o bomba.

Si no se encuentra ninguna falla apagar los agitadores y bombas, dejar que se vacíen los reactores y después cerrar las válvulas.

4.7.- Desarrollo experimental:

1. Preparar soluciones de Acetato de Etilo y de Hidróxido de Sodio 0.1M 15 Lt de cada uno. También una solución de Acido Clorhídrico 0.02N
2. Llenar los tanques de los reactivos con su producto correspondiente.
3. Checar que todas las válvulas estén cerradas (excepto las del By-Pass).
4. Arrancar las Bomba 1 y la Bomba 2.
5. Fijar un gasto volumétrico de 0.08 Lt/min en cada uno de los Rotametros.
6. Llenar el Reactor 1 hasta un volumen de 1 Lt.
7. Cuando el Reactor 1 este lleno a 1 Lt, abrir la válvula de salida del Reactor 1 la cual alimenta al Reactor 2, hasta que la entrada al Reactor 1 sea igual a la salida. Dejar que se llene hasta un volumen de 1Lt y realizar el mismo procedimiento para llenar el Reactor 3 hasta 1 Lt.
8. Cuando se haya llenado el Reactor 3 abrir la válvula hasta que la entrada sea igual a la salida. Dejar drenar un poco y tomar la primera muestra, (Cuando se haya logrado mantener los 3 Reactores a volumen constante arrancar los agitadores).
9. De la muestra tomada sacar una alícuota de 5 ml, agregar un gota de Fenolftaleina y titular con Acido Clorhídrico 0.02N.
10. Seguir tomando muestras cada 4 minutos, hasta alcanzar el estado estable.
11. Cuando se haya alcanzado el estado estable tomar una muestra del Reactor 1 y titular. Tomar otra muestra del reactor 2 y titular. Dar por terminada la practica.
12. Apagar los agitadores y bombas.
13. Sacar los reactivos restantes en los tanques de alimentación y cargarlos con agua para lavar los reactores.
14. Prender nuevamente las bombas y llenar los reactores con agua, prender los agitadores y dejarlos un tiempo razonable para limpiarlos.

4.7.1.- Para el caso de un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR”

PRUEBA N° 1

Para realizar esta prueba arrancamos el equipo siguiendo los pasos antes mencionados, esperamos a que salgan los primeros productos y tomamos una muestra de 5 mililitros la cual vamos a titular con ácido clorhídrico 0.021N preparado previamente (Consultar el apéndice C para técnicas de preparación). Anotamos el valor inicial que marca la bureta que contiene el Ácido Clorhídrico y agregamos el ácido a la muestra hasta vire de color, anotamos el valor final que marca la bureta y la diferencia entre estos dos valores es el volumen del Ácido Clorhídrico gastado. Seguimos este mismo procedimiento para las otras muestras que seguimos sacando hasta llegar al estado estable en el reactor, por lo cual obtuvimos la siguiente tabla.

Tabla 4.6: Datos obtenidos de la titulación del primer experimento para un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR”.

MILILITROS DE ACIDO CLORHIDRICO		
(V _{HCl}) INICIALES	(V _{HCl}) FINALES	(V _{HCl}) GASTADOS
0.0	4.2	4.3
4.2	8.3	4.1
8.3	12.3	4.0
12.3	16.2	3.9
16.2	19.9	3.7
19.9	23.5	3.7
23.6	27.3	3.7

Cálculos realizados para determinar el grado de conversión obtenido.

$$M_{eq} NaOH = \frac{PM}{(1000)(Num.Equivalentes)}$$

$$M_{eq} NaOH = \frac{40}{(1000)(1)} \quad (29)$$

$$M_{eq} NaOH = 0.04$$

Para calcular los gramos de NaOH presentes en una muestra de 5ml tenemos:

$$gNaOH = (N_{HCl})(V_{HCl} Gastados)(M_{eq} NaOH)$$

$$gNaOH = (0.02)(4.3)(0.04) \quad (30)$$

$$gNaOH = 3.61 \times 10^{-3} g$$

Para calcular la conversión necesitamos saber la concentración final y la podemos calcular mediante la siguiente formula:

$$C = \frac{W}{V_{Muestra}} \quad (31)$$

Como el peso (W) lo tenemos en g/ml lo ocupamos en g/Lt y lo convertimos de la siguiente manera:

$$C_{NaOH} = \left(\frac{3.61 \times 10^{-3} \text{ g}}{5 \text{ ml}} \right) \left(\frac{1000 \text{ ml}}{1 \text{ Lt}} \right)$$

$$C_{NaOH} = 0.722 \text{ g / Lt}$$

Para la conversión tenemos que:

$$x = \frac{C_{NaOH}^i - C_{NaOH}}{C_{NaOH}^i} \quad (32)$$

Sabemos que:

$$C_{NaOH}^i = 4 \text{ g/Lt}$$

Sustituyendo datos tenemos:

$$x = \frac{4 \text{ g / Lt} - 0.722 \text{ g / Lt}}{4 \text{ g / Lt}}$$

$$x = 0.81$$

Se repite el mismo procedimiento para cada uno de $V_{HCl}^{\text{Gastados}}$ y obtenemos la tabla 3.4 en la cual se tabulan los datos de concentración a la salida del reactor con los que calculamos la conversión alcanzada.

Tabla 4.7: Cálculos de conversión obtenidos del primer experimento para un Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR".

TIEMPO (Θ)	(V_{HCl}) GASTADOS	$gNaOH$	C_{NaOH}	x
0	4.3	3.61×10^{-3}	0.722	0.81
4	4.1	3.44×10^{-3}	0.688	0.82
8	4.0	3.36×10^{-3}	0.672	0.83
12	3.9	3.27×10^{-3}	0.654	0.83
16	3.7	3.01×10^{-3}	0.602	0.84
20	3.7	3.01×10^{-3}	0.602	0.84
24	3.7	3.01×10^{-3}	0.602	0.84

En esta tabla observamos que la conversión alcanzada es de 0.84.

PRUEBA N° 2

Corrida para un reactor CSTR con un volumen de 3 litros y un tiempo de residencia de 18 minutos. Seguimos el mismo procedimiento que para a prueba numero 1.

Muestra = 5ml

$N_{HCl} = 0.021$

Tabla 4.8: Datos obtenidos de la titulación del segundo experimento para un Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR".

MILILITROS DE ACIDO CLORHIDRICO		
(V_{HCl}) INICIALES	(V_{HCl}) FINALES	(V_{HCl}) GASTADOS
27.3	31.6	4.3
31.6	35.7	4.1
35.7	39.7	4.0
39.7	43.6	3.9
0.0	3.7	3.7
3.7	7.4	3.7
7.4	11.1	3.7

Seguimos el mismo procedimiento de cálculos para cada uno de $V_{HClGastados}$ que para la prueba numero 1 y obtenemos la tabla 3.6 en la cual se tabulan los datos de concentración a la salida del reactor con los que calculamos la conversión alcanzada.

Tabla 4.9: Cálculos de conversión obtenidos del segundo experimento para un Reactor Continuo Tanque Agitado "CSTR".

TIEMPO (Θ)	(V_{HCl}) GASTADOS	$gNaOH$	C_{NaOH}	x
0	4.2	3.52×10^{-3}	0.704	0.82
4	4.1	3.44×10^{-3}	0.688	0.82
8	4.0	3.36×10^{-3}	0.672	0.83
12	3.9	3.27×10^{-3}	0.654	0.83
16	3.7	3.01×10^{-3}	0.602	0.84
20	3.7	3.01×10^{-3}	0.602	0.84
24	3.7	3.01×10^{-3}	0.602	0.84

En esta tabla observamos que la conversión alcanzada es de 0.84.

4.7.2.- Para el caso de una serie de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR"

PRUEBA Nº 1

Corrida para una serie de 3 reactores CSTR con un volumen de 1 litro y un tiempo de residencia de 6 minutos para cada reactor.

Titulación del Hidróxido de Sodio con Acido Clorhídrico a la salida del tercer reactor. Seguimos el mismo procedimiento que para la prueba numero 1.

Muestra = 5ml

$N_{HCl} = 0.05$

Tabla 4.10: Datos obtenidos de la titulación del primer experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".

Tiempo (Θ)	MILILITROS DE ACIDO CLORHIDRICO		
	(V_{HCl}) INICIALES	(V_{HCl}) FINALES	(V_{HCl}) GASTADOS
0	0.0	2.4	2.4
2	2.4	4.7	2.3
4	4.7	7.3	2.6
6	7.3	9.7	2.4
8	9.7	12.0	2.3
10	12.6	15.0	2.4
12	15.7	18.0	2.3
14	19.2	21.9	2.7
16	21.9	23.3	1.4
18	23.3	25.6	2.3
20	25.6	27.4	1.8
22	27.4	29.2	1.8
24	29.2	31.0	1.8
26	31.0	32.8	1.8
	R1 32.8	35.3	2.5
	R2 35.3	37.3	2.0

Cálculos realizados para determinar el grado de conversión obtenido al final de la serie de reactores CSTR. Seguimos el mismo procedimiento de cálculos para cada uno de $V_{HClGastados}$ que para la prueba numero 1 y obtenemos la tabla 3.8 en la cual se tabulan los datos de concentración a la salida del tercer reactor con los que calculamos la conversión alcanzada.

Tabla 4.11: Cálculos de conversión obtenidos del Primer experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".

Tiempo (Θ)	(V_{HCl}) GASTADOS	$gNaOH$	C_{NaOH}	x
0	2.4	4.8×10^{-3}	0.96	0.76
2	2.3	4.6×10^{-3}	0.92	0.77
4	2.6	5.2×10^{-3}	1.04	0.74
6	2.4	4.8×10^{-3}	0.96	0.76
8	2.3	4.6×10^{-3}	0.92	0.76
10	2.4	4.8×10^{-3}	0.96	0.77
12	2.3	4.6×10^{-3}	0.92	0.76
14	2.7	5.4×10^{-3}	1.08	0.77
16	1.4	2.8×10^{-3}	0.56	0.73
18	2.3	4.6×10^{-3}	0.92	0.86
20	1.8	3.6×10^{-3}	0.72	0.77
22	1.8	3.6×10^{-3}	0.72	0.82
24	1.8	3.6×10^{-3}	0.72	0.82
26	1.8	3.6×10^{-3}	0.72	0.82
	R1 2.5	5.0×10^{-3}	1	0.75
	R2 2.0	4.0×10^{-3}	0.80	0.80

En esta tabla observamos que la concentración alcanzada es de 0.82.

R1 y R2 conversión alcanzada en el Reactor 1 y 2 respectivamente.

PRUEBA N° 2

Corrida para una serie de 3 reactores CSTR con un volumen de 1 litro y un tiempo de residencia de 6 minutos para cada reactor.

Titulación del Hidróxido de Sodio con Acido Clorhídrico a la salida del tercer reactor. Seguimos el mismo procedimiento que para la prueba numero 1.

Muestra = 5ml

$N_{\text{HCl}} = 0.021$

Tabla 4.12: Datos obtenidos de la titulación del segundo experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".

TIEMPO (Θ)	MILILITROS DE ACIDO CLORHDIRICO		
	(V_{HCl}) INICIALES	(V_{HCl}) FINALES	(V_{HCl}) GASTADOS
0	50.0	45.6	4.5
4	45.6	42.0	3.6
8	42.0	38.8	3.2
12	38.8	35.6	3.2
16	35.6	33.0	2.6
20	33.0	30.0	3.0
24	30.0	27.0	3.0
28	27.0	24.0	3.0
	R1 4.5	9.1	4.6
	R2 13.3	16.7	3.4

Cálculos realizados para determinar el grado de conversión obtenido al final de la serie de reactores CSTR. Seguimos el mismo procedimiento de cálculos para cada uno de $V_{HClGastados}$ que para la prueba numero 1 y obtenemos la tabla 3.10 en la cual se tabulan los datos de concentración a la salida del tercer reactor con los que calculamos la conversión alcanzada.

Tabla 4.13: Cálculos de conversión obtenidos del segundo experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".

TIEMPO (Θ)	(V_{HCl}) GASTADOS	$gNaOH$	C_{NaOH}	x
0	4.5	3.78×10^{-3}	0.756	0.81
4	3.6	3.02×10^{-3}	0.604	0.84
8	3.2	2.68×10^{-3}	0.536	0.86
12	3.2	2.68×10^{-3}	0.536	0.86
16	2.6	2.18×10^{-3}	0.4360	0.89
20	3.0	2.52×10^{-3}	0.504	0.87
24	3.0	2.52×10^{-3}	0.504	0.87
28	3.0	2.52×10^{-3}	0.504	0.87
	R1 4.6	3.8×10^{-3}	0.57	0.85
	R2 3.4	2.8×10^{-3}	0.772	0.81

En esta tabla observamos que la conversión alcanzada es de 0.87.

R1 y R2 conversión alcanzada en el Reactor 1 y 2 respectivamente.

PRUEBA N° 3

Corrida para una serie de 3 reactores CSTR con un volumen de 1 litro y un tiempo de residencia de 6 minutos para cada reactor.

Titulación del Hidróxido de Sodio con Acido Clorhídrico a la salida del tercer reactor. Seguimos el mismo procedimiento que para la prueba numero 1.

Muestra = 5ml

$N_{\text{HCl}} = 0.021$

Tabla 4.14: Datos obtenidos de la titulación del tercer experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".

TIEMPO (Θ)	MILITROS DE ACIDO CLORHIDRICO		
	(V_{HCl}) INICIALES	(V_{HCl}) FINALES	(V_{HCl}) GASTADOS
0	0.0	4.2	4.2
4	4.2	8.4	4.2
8	8.4	11.3	2.9
12	11.3	41.6	3.3
16	41.6	20.8	3.3
20	20.8	23.8	3.0
24	23.8	26.8	3.0
28	26.8	29.9	3.0
	R1 29.9	35	5.0
	R2 35.0	37.9	2.9

Cálculos realizados para determinar el grado de conversión obtenido al final de la serie de reactores CSTR. Seguimos el mismo procedimiento de cálculos para cada uno de $V_{\text{HClGastados}}$ que para la prueba numero 1 y obtenemos la tabla 3.12 en la cual se tabulan los datos de concentración a la salida del tercer reactor con los que calculamos la conversión alcanzada.

Tabla 4.15: Cálculos de conversión obtenidos del tercer experimento para una serie de tres Reactores Continuos Tanque Agitado "CSTR".

TIEMPO (Θ)	(V_{HCl}) GASTADOS	$g\text{NaOH}$	C_{NaOH}	x
0	4.2	3.52×10^{-3}	0.704	0.82
4	4.2	3.52×10^{-3}	0.704	0.82
8	2.9	2.43×10^{-3}	0.486	0.87
12	3.3	2.77×10^{-3}	0.554	0.86
16	3.3	2.77×10^{-3}	0.554	0.86
20	3.0	2.52×10^{-3}	0.504	0.87
24	3.0	2.52×10^{-3}	0.504	0.87
28	3.0	4.52×10^{-3}	0.504	0.87
	R1 5.0	3.27×10^{-3}	0.84	0.79
	R2 3.9	4.02×10^{-3}	0.654	0.83

En esta tabla observamos que la conversión alcanzada es de 0.87.

R1 y R2 conversión alcanzada en el Reactor 1 y 2 respectivamente.

CAPITULO V.- ANALISIS Y DISCUSION DE RESULTADOS

Se llevara a cabo la comparación de los resultados obtenidos analíticamente con los experimentales.

5.1.- Comparación de datos de conversión obtenidos analítica y experimentalmente, en un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR”.

5.1.1- Primer experimento

En la siguiente tabla se muestran tabulados los datos obtenidos mediante los cálculos previos realizados analíticamente y los que se obtuvieron de forma experimental en la primera corrida.

Tabla 5.1: Comparación de la conversión para un “CSTR” (Primer experimento).

TIEMPO (Θ)	CONVERSIÓN	
	ANALÍTICO	EXPERIMENTAL
0	0	
2	0.56181355	
4	0.6633249	
6	0.71466586	
8	0.7473124	
10	0.77050852	
12	0.78812283	
14	0.80210719	
16	0.81357019	
18	0.82319559	
20	0.82319559	0.81
24	0.82319559	0.82
28	0.82319559	0.83
32	0.82319559	0.83
36	0.82319559	0.84
40	0.82319559	0.84
44	0.82319559	0.84

Como podemos observar en los datos tabulados anteriormente estos son muy parecidos, hay una pequeña diferencia de 0.017 entre los datos calculados analíticamente y los que se obtuvieron de forma experimental esto nos da la certeza de poder predecir la conversión que será alcanzada con nuestro modelo matemático ya que la desviación es de $\pm 2\%$. En la siguiente grafica podemos observar mejor el comportamiento de los datos.

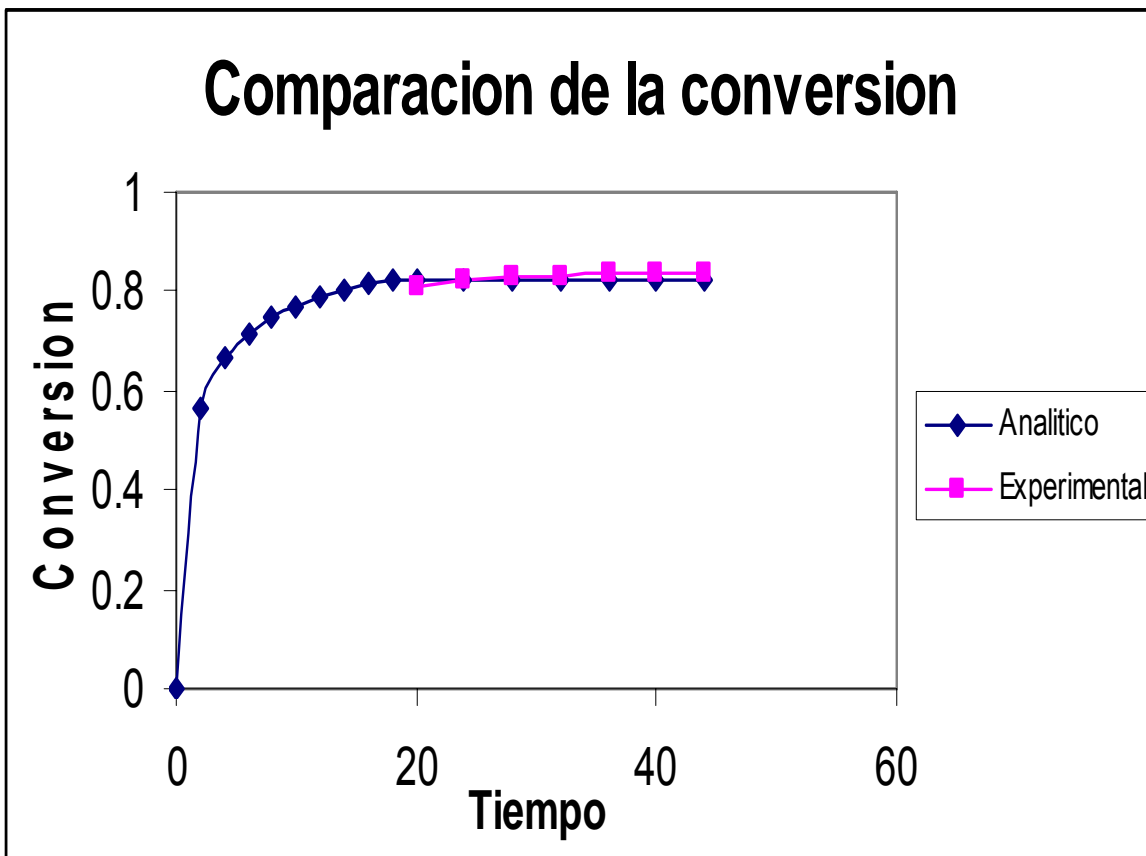


Fig. 5.1: Comparación de la conversión para un “CSTR” (Primer experimento).

En la grafica anterior podemos ver que el comportamiento de los datos es muy parecido en los datos calculados analíticamente a un tiempo de residencia de 18 minutos la conversión alcanzada es de 0.823 y la conversión que se obtuvo de forma experimental fue de 0.84 alcanzando el estado estable aproximadamente 25 minutos después de obtener la primera muestra.

5.1.2.-SEGUNDO EXPERIMENTO

En la siguiente tabla se muestran tabulados los datos obtenidos mediante los cálculos previos realizados analíticamente y los que se obtuvieron de forma experimental en la segunda corrida.

Tabla 5.2: Comparación de la conversión para un “CSTR” (Segundo experimento).

TIEMPO (Θ)	CONVERSIÓN	
	ANALÍTICO	EXPERIMENTAL
0	0	
2	0.56181355	
4	0.6633249	
6	0.71466586	
8	0.7473124	
10	0.77050852	
12	0.78812283	
14	0.80210719	
16	0.81357019	
18	0.82319559	
20	0.82319559	0.82
24	0.82319559	0.82
28	0.82319559	0.83
32	0.82319559	0.83
36	0.82319559	0.84
40	0.82319559	0.84
44	0.82319559	0.84

Esta tabla es muy parecida con la anterior solo difieren en el primer dato.

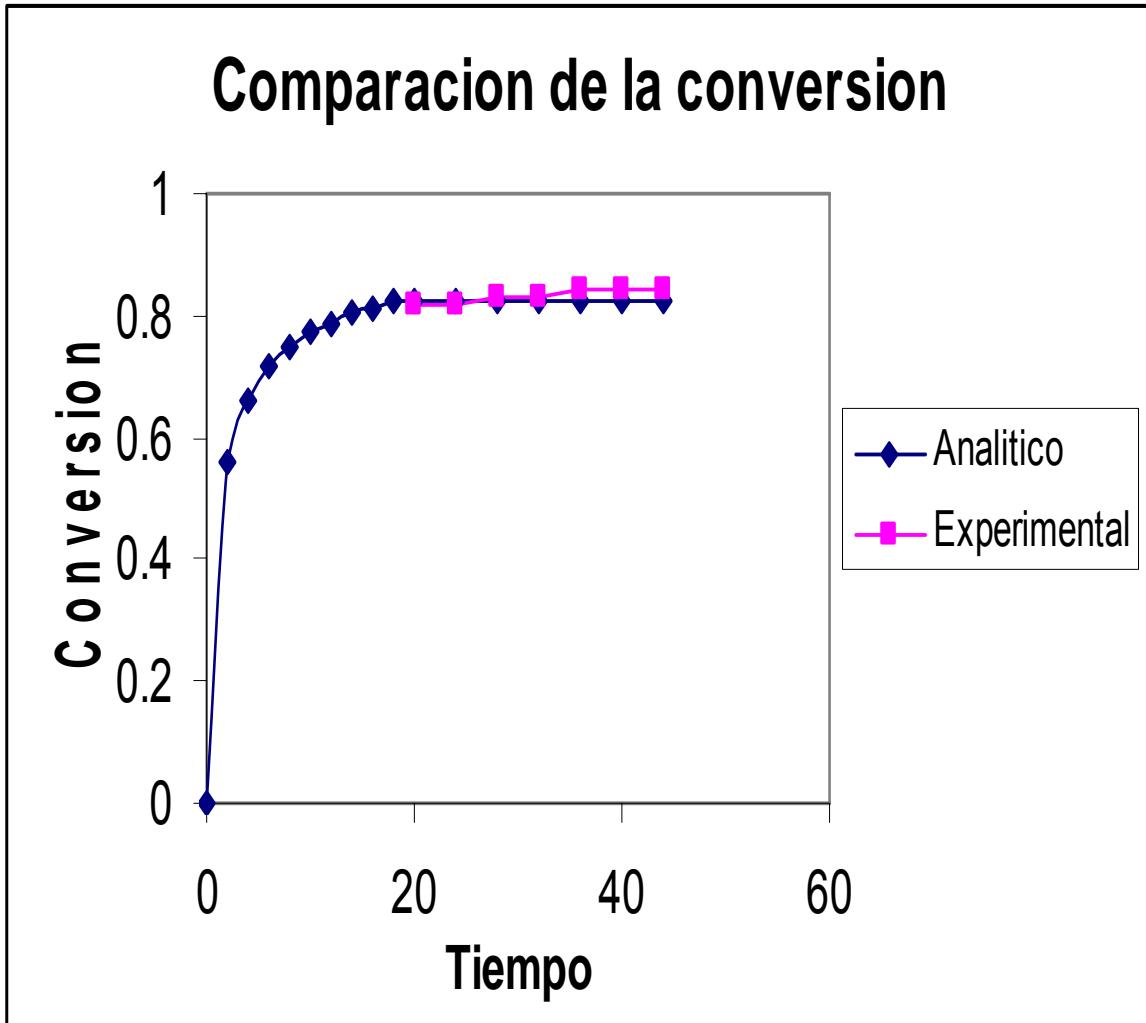


Fig. 5.2: Comparación de la conversión para un "CSTR" (Segundo experimento).

Como podemos observar esta grafica es casi exactamente igual a la del primer experimento se alcanza el estado estable en una conversión de 0.84 igual que en la anterior. Por medio de estos resultados podemos decir que trabajar con un solo reactor es muy fácil de operar y alcanzar el estado estable en muy poco tiempo.

5.2.- Comparación de datos de conversión obtenidos analítica y experimentalmente, en una serie de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”.

52.1.-Primer Experimento

En la siguiente tabla se muestran tabulados los datos obtenidos mediante los cálculos previos realizados analíticamente y los que se obtuvieron de forma experimental en la primera corrida para tres Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”.

Tabla 5.3: Comparación de la conversión para 3 “CSTR” (Primer experimento).

TIEMPO (Θ)	Conversión	
	Analítico	Experimental
0	0	
2	0.66800754	
4	0.78040087	
6	0.83121047	
8	0.86068703	
10	0.88071449	
12	0.89515185	
14	0.90597511	
16	0.91465627	
18	0.92170023	
20	0.92170023	0.76
22	0.92170023	0.77
24	0.92170023	0.74
26	0.92170023	0.76
28	0.92170023	0.76
30	0.92170023	0.77
32	0.92170023	0.76
34	0.92170023	0.77
36	0.92170023	0.73
38	0.92170023	0.8
40	0.92170023	0.77
42	0.92170023	0.82
44	0.92170023	0.82
46	0.92170023	0.82

Como podemos ver en la tabla anterior los datos tabulados obtenidos de forma analítica y experimental para este primer experimento con tres Reactores Continuos Tanque agitado “CSTR” se alejan un poco de lo predicho por el modelo matemático, como se podrá observar mejor en la siguiente grafica.

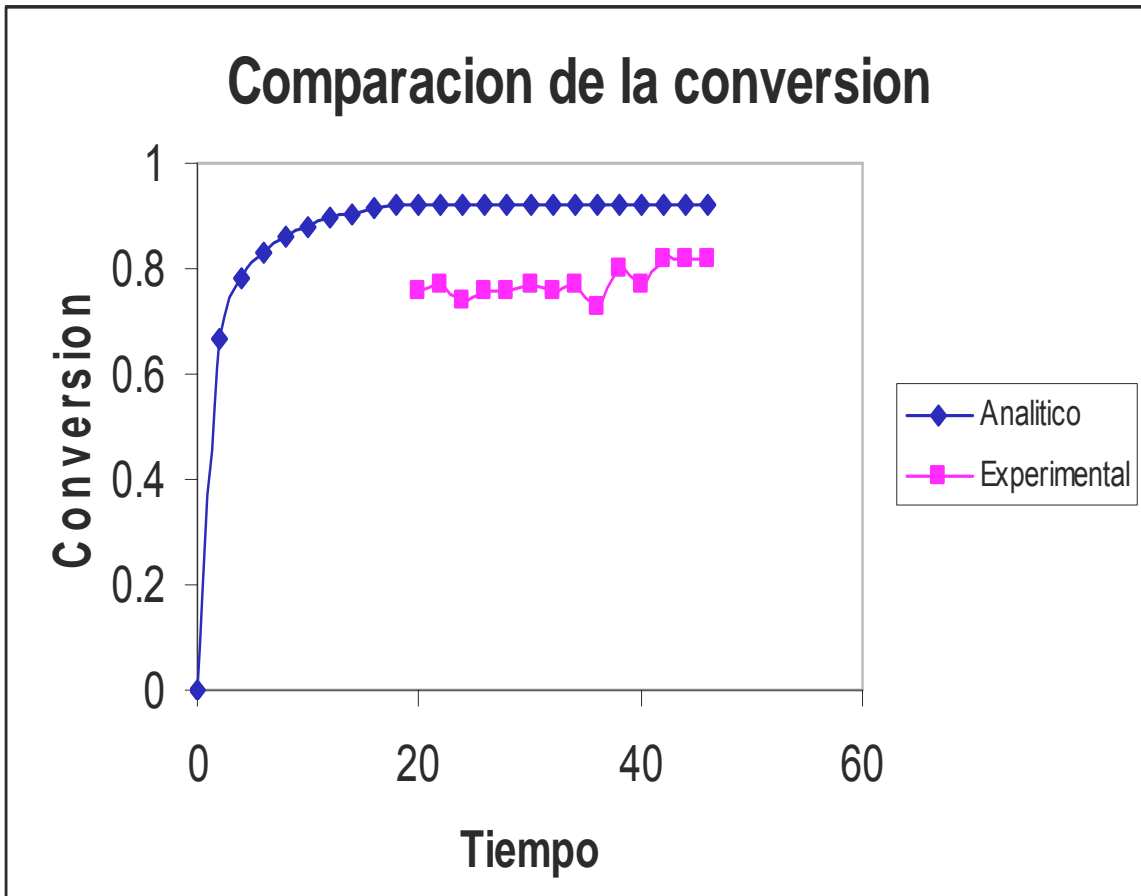


Fig. 5.3: Comparación de la conversión para 3 “CSTR” (Primer experimento).

En esta grafica observamos la diferencia muy notable entre los datos obtenidos de forma analítica y experimental pues encontramos una diferencia en la conversión de 0.101, lo que equivale a una desviación del 11% la cual es un porcentaje de error un poco grande. El comportamiento del reactor no es muy inestable por lo que se puede ver en la grafica pero no se obtuvo la conversión predicha por el modelo por lo que podemos decir que algo salió mal al realizar esta primera corrida.

5.2.2.-Segundo Experimento

En la siguiente tabla se muestran tabulados los datos obtenidos mediante los cálculos previos realizados analíticamente y los que se obtuvieron de forma experimental en la segunda corrida para tres Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”.

Tabla 5.4: Comparación de la conversión para 3 “CSTR” (Segundo experimento).

TIEMPO (Θ)	CONVERSIÓN	
	ANALÍTICO	EXPERIMENTAL
0	0	
2	0.66800754	
4	0.78040087	
6	0.83121047	
8	0.86068703	
10	0.88071449	
12	0.89515185	
14	0.90597511	
16	0.91465627	
18	0.92170023	
20	0.92170023	0.81
24	0.9221700	0.84
28	0.9221700	0.86
32	0.9221700	0.86
36	0.9221700	0.89
40	0.9221700	0.87
44	0.9221700	0.87
48	0.9221700	0.87

Como podemos observar en la tabla anterior los datos tabulados obtenidos de forma analítica y experimental para el segundo experimento con tres Reactores Continuos Tanque agitado “CSTR” ya son más parecidos a lo predicho por el modelo matemático, como se podrá observar mejor en la siguiente grafica.

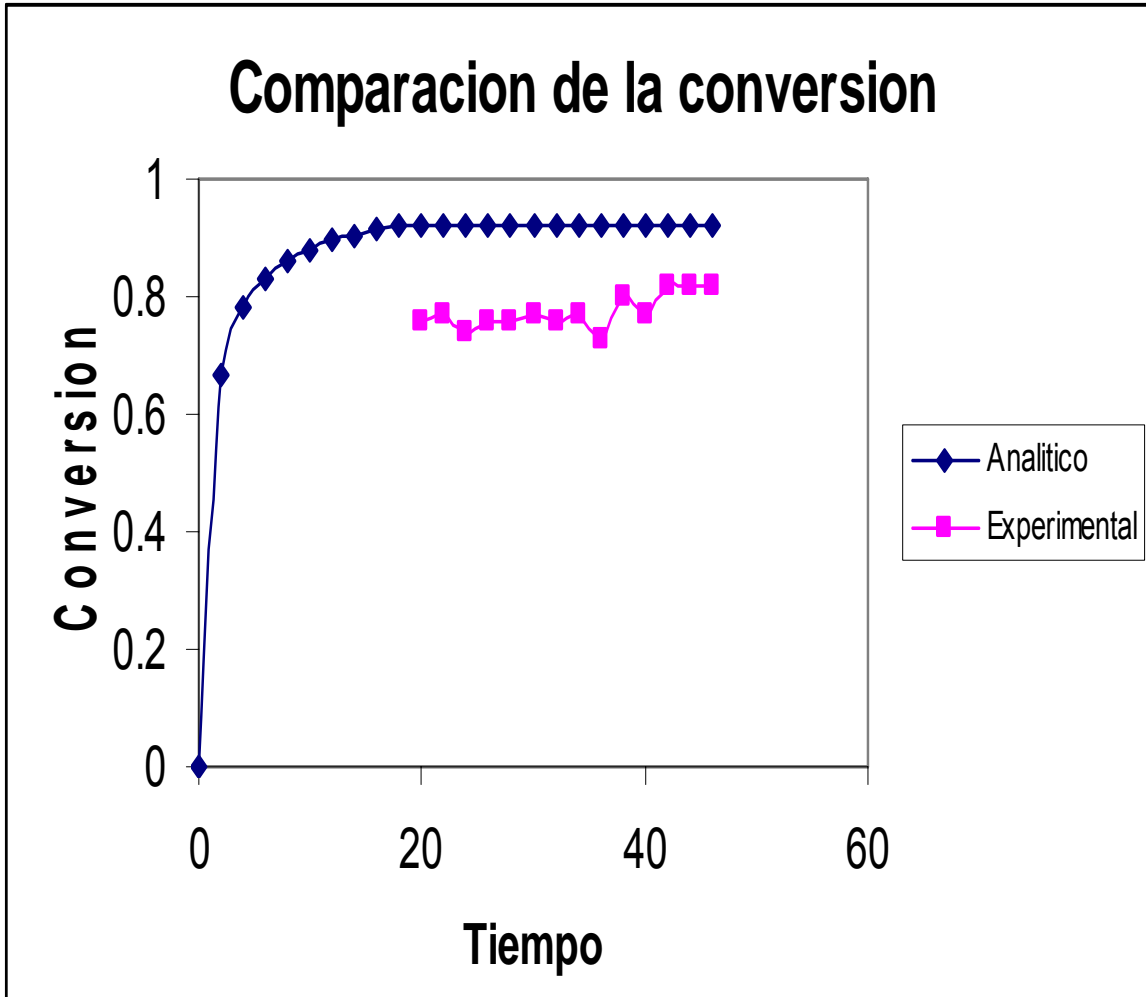


Fig. 5.4: Comparación de la conversión para 3 “CSTR” (Segundo experimento).

En la grafica anterior podemos ver que las líneas son un poco más parecidas y no muy alejadas de lo predicho por el modelo matemático en esta encontramos una desviación del 6% que ya se puede considerar más razonables estos resultados. Al igual que en la grafica del primer experimento el comportamiento del reactor no es muy inestable como se podrá observar. El estado estable se alcanzo al minuto 28 después de sacar la primera muestra.

5.2.3.- Tercer Experimento

En la siguiente tabla se muestran tabulados los datos obtenidos mediante los cálculos previos realizados analíticamente y los que se obtuvieron de forma experimental en la tercera corrida para tres Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”.

Tabla 5.5: Comparación de la conversión para 3 “CSTR” (Tercer experimento).

TIEMPO (Θ)	CONVERSIÓN	
	ANALÍTICO	EXPERIMENTAL
0	0	
2	0.66800754	
4	0.78040087	
6	0.83121047	
8	0.86068703	
10	0.88071449	
12	0.89515185	
14	0.90597511	
16	0.91465627	
18	0.92170023	
20	0.92170023	0.82
24	0.9221700	0.82
28	0.9221700	0.87
32	0.9221700	0.86
36	0.9221700	0.86
40	0.9221700	0.87
44	0.9221700	0.87
48	0.9221700	0.87

Lo que se puede observar en esta tabla es la semejanza en los datos comparándolos con la tabla del segundo experimento, ya que se alcanza la estabilidad en una conversión de 0.87 al igual que en el segundo experimento. Como lo podremos observar mejor en la siguiente grafica.

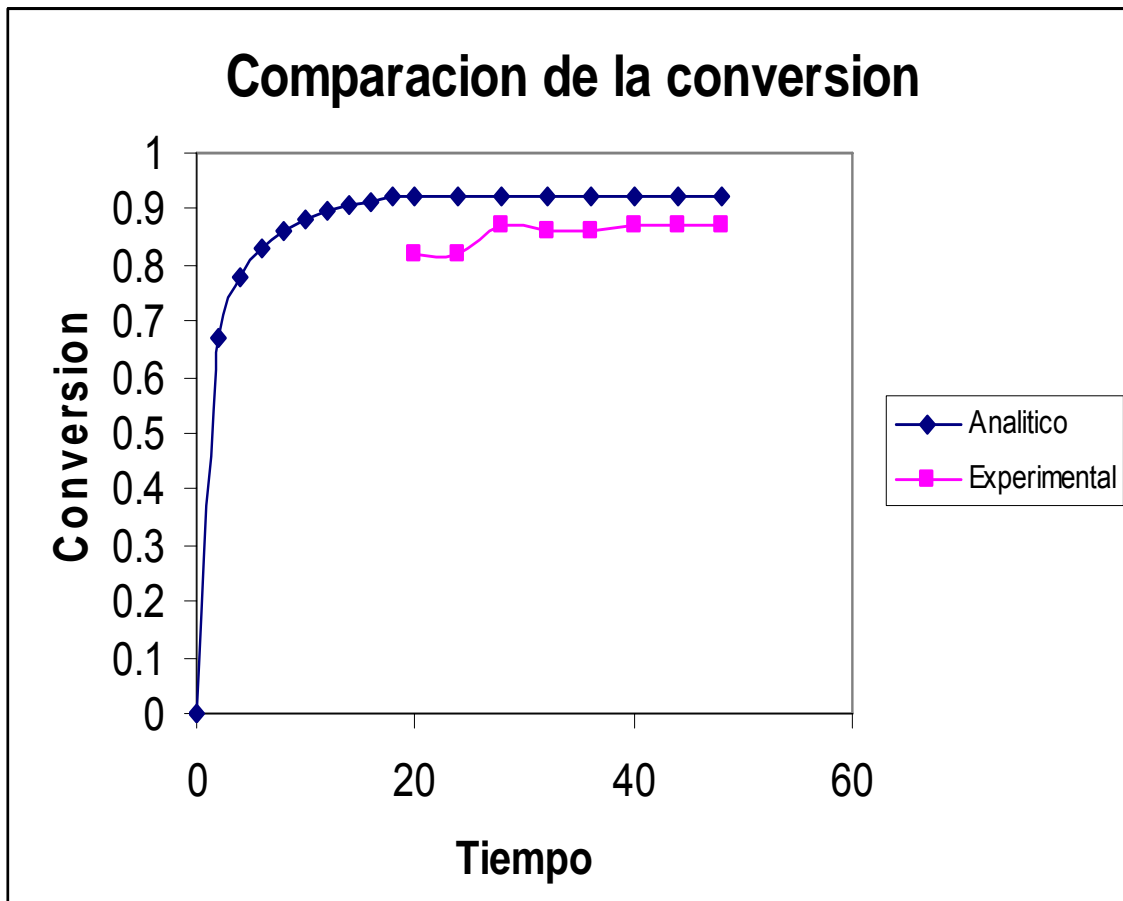


Fig. 5.5: Comparación de la conversión para 3 "CSTR" (Tercer experimento).

En esta grafica vemos que es muy parecido el comportamiento al del segundo experimento, se observa que el reactor no es muy inestable y seguimos teniendo una desviación de 6% respecto a lo predicho por el modelo matemático. Conseguimos mantener el estado estable a los 28 minutos después de sacar la primera muestra, al igual que en el segundo experimento.

5.3.- Comparación de datos de conversión obtenidos experimentalmente, para un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR” y una serie de 3 Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”.

En la siguiente tabla se muestran tabulados los datos de conversión obtenidos mediante experimentación para un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR” y 3 Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR”.

Tabla 5.6: Comparación de la conversión para 1 y 3 “CSTR”.

Tiempo	Conversión para 3 Reactores	Conversión para 1 Reactor
20	0,81	0,82
24	0,84	0,82
28	0,86	0,83
32	0,86	0,83
36	0,89	0,84
40	0,87	0,84
44	0,87	0,84
48	0,87	

En esta tabla observamos que de acuerdo a la teoría la conversión para 3 Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR” es mucho mayor que para 1. Como lo podemos observar mejor en la siguiente grafica.

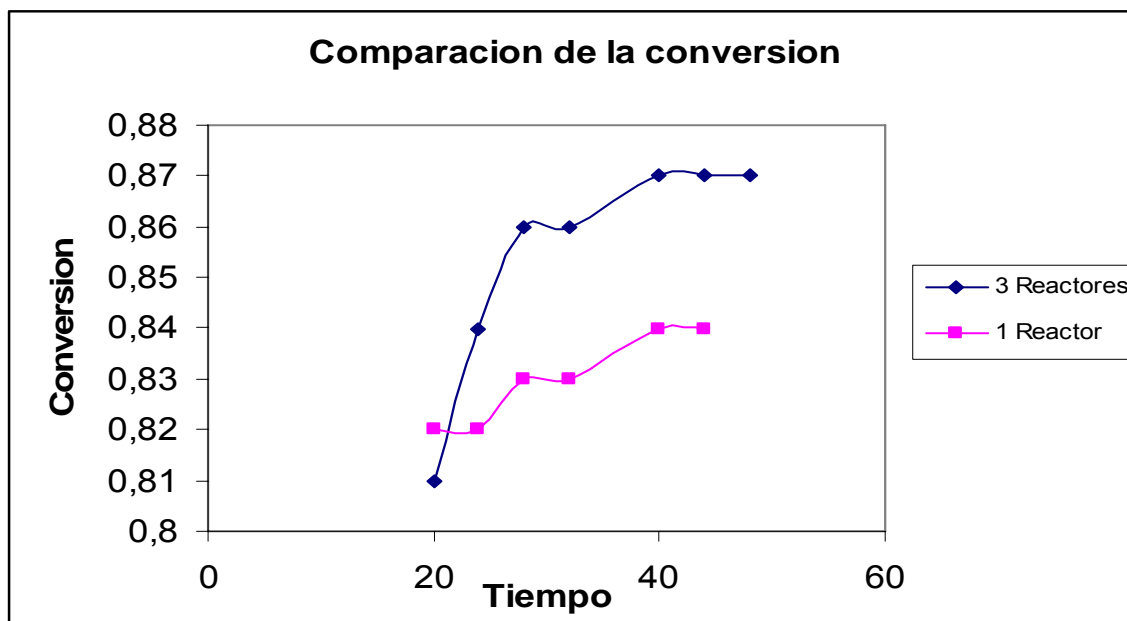


Fig. 5.6: Comparación de la conversión para 1 y 3 “CSTR”

CONCLUSIONES

- ◆ Cumplimos con el objetivo planteado que fue determinar el grado de conversión alcanzado al operar un Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR” en contraste a operar 3 Reactores Continuos Tanque Agitado “CSTR” en serie a las mismas condiciones. Con los datos obtenidos comprobamos la hipótesis planteada ya que en nuestros resultados experimentales obtuvimos mayor conversión al trabajar con una serie de 3 Reactores, por lo que se concluye que la hipótesis es verdadera.
- ◆ Por medio de las corridas experimentales comprobamos que para un solo Reactor Continuo Tanque Agitado “CSTR”, la predicción con el modelo matemático es muy acertado. A diferencia de cuando se trabaja con tres, ya que obtuvimos una desviación del 6%, las posibles explicaciones de este fenómeno son:
 - ◆ El control del volumen es manual y por más que se trate de mantenerlo constante no se logra por lo tanto es impreciso y poco confiable.
 - ◆ La velocidad de agitación no es la misma para los tres reactores y esto afecta considerablemente a la reacción ya que es la agitación dentro de este la que hace que la reacción sea más rápida o más lenta.

SUGERENCIAS PARA TRABAJO FUTURO

Este equipo fue diseñado para implementarle una tubería de vapor para calentamiento. También se pueden realizar mejoras al control de las válvulas, cambiando el control manual por un automático.

La reacción propuesta en esta tesis puede ser cambiada por alguna otra ya que el material con el cual se construyo el equipo es muy resistente a muchas sustancias.

BIBLIOGRAFIA

1. **Mc Cabe, Smith, Harriot. (2002).** *“Operaciones Unitarias en Ingeniería Química”*. Mc Graw Hill. México.
2. **Tiscareño L.F.** *“Diseño de Reactores Químicos para Reacciones Múltiples”*. Instituto Tecnológico de Celaya
3. [WWW.ilustrados](http://WWW.ilustrados.com). Com
4. **Fogler H. S. (2001)** *“Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas”* Pearson. México.
5. **Gonzales R.H. (2004).** *“Notas de Ingeniería de Reactores”*. Facultad de Ingeniería Química. Morelia Mich.
6. **Romero B.J.R. (2005).** *“Control mediante lógica difusa para un reactor multivariable no isotérmico tipo CSTR”*. Facultad de Ingeniería Química. Morelia Mich.
7. **Carey F. A. (2006)** *“Química Orgánica”*. Mc Graw Hill. México.
8. **todoambiente.com**
9. **Day, JR. R. A.; Underwood A. L.(1989).** *“Química Analítica Cuantitativa”*. Pearson. México.
10. **Ayres G. H. (2001).** *“Análisis Químico Cuantitativo”*. Litografica Ingramex, S.A. de C.V. México.

APENDICE A: CONSTRUCCIÓN

Iniciamos teniendo un tanque cilíndrico, el cual esta provisto de una tapa y chaqueta de enfriamiento, el material utilizado es Acero inoxidable.



A los tanques se les realizaron los orificios de entrada y salida al tanque, la entrada será por la parte superior del tanque por lo cual se perforo la tapa. Se le hicieron cuatro orificios ya que son dos reactivos los que se alimentan, otro orificio es para un termoposo en el cual se instalara un termómetro para medir la temperatura y el ultimo es para la varilla de agitación. La salida será por la parte inferior del tanque.



Al orificio de salida se le soldó una conexión "T" de Acero inoxidable, a la cual se le agregaron tres conectores de latón estos nos sirven para unir la tubería de acero inoxidable de $\frac{1}{2}$ con la conexión "T" que es de $\frac{3}{4}$ y también le pusimos la válvula de salida del reactor.



Teniendo un reactor terminado procedemos a adptar los otros dos mas siguiendo el mismo procedimiento a excepción de que solo se hacen tres orificios en la tapa puesto que solo tendremos una entrada de reactivos.

Después de esto se hacen las varillas de agitación y los termoposos para cada reactor. Se selecciono el motor para agitación el cual es un rotómartillo, teniendo esto se procede a instalar los reactores en la base. Comenzando de abajo para arriba y fijando bien los rotomartillos.



Terminado la instalación de uno seguimos con el segundo y después el tercero acomodándolos de tal forma que la entrada del primero sea la salida del segundo y la entrada del segundo la salida del tercero.



Continuamos con la instalación de tanque para reactivos y productos. Se instalan las tuberías para los reactivos que se alimentan en el tercer reactor.



Posteriormente se instalan los rotámetros a las tuberías de alimentación de reactivos y se instala la tubería de enfriamiento.



En la parte final se instalan las bombas, se construye un control para encender y apagar las bombas y los agitadores, después se realiza la conexión eléctrica.



APENDICE B: PROPIEDADES DE LOS COMPONENTES A UTILIZAR

HIDROXIDO DE SODIO

Sinónimos: sosa cáustica, hidrato de sodio, cáustico blanco.

Peso molecular: 40.01

Composición: H 2.52%, Na 57.48%, O 40.00%.

Formula: NaOH

Obtención: por electrolisis de cloruro sódico, reacciona entre el hidróxido cálcico y carbonato sódico.

Características físicas: sólido blanco, giroscópico, principalmente en forma de barras, terrones o copos, también en soluciones acuosas.

Densidad: 2.13

Punto de ebullición: 1390 °C

Punto de fusión: 318 °C

Toxicidad: corroe los tejidos en presencia de humedad, fuerte irritante para los tejidos (ojos, piel, membranas mucosas), por ingestión.

Uso: Generalmente se utiliza en forma sólida o en solución. El hidróxido de sodio es uno de los principales compuestos químicos utilizados en la industria. Por ejemplo, es ampliamente utilizado en la fabricación de papel, en la industria del algodón, en la industria textil, en la fabricación de jabón y en la fabricación de muchos otros productos químicos.

ACETATO DE ETILO

Sinónimos: acedo acético etileter

Peso molecular: 88.10

Formula: CH₃COOC₂H₅

Obtención: por destilación de la mezcla ácido acético, alcohol etílico y ácido sulfúrico.

Características físicas: líquido incoloro.

Densidad: 0.893 – 0.895

Punto de ebullición: 77.1 °C

Punto de fusión: -83 °C

Toxicidad: moderado riesgo de incendio.

Uso: Se utiliza como solvente, como sustancia sintética para dar sabor y para fabricar perfumes y tinturas.

AGUA

Sinónimos: Oxido de hidrogeno.

Peso molecular: 18.016

Composición: H 11.19%, O 88.81%.

Formula: H₂O

Características físicas: Liquido incoloro e inodoro.

Densidad: 3.98: 1.00

Punto de ebullición: 100°C

APENDICE C: METODOS PARA PREPARAR SOLUCIONES

PREPARACION DE SOLUCION DE ACETATO DE ETILO 0.1N

CALCULOS:

$$N = 0.1$$

$$\rho = 0.894 \text{ g/ml}$$

$$PM = 88.11$$

$$g = (M)(V)(PM)$$

$$g = (0.1)(1)(88.11)$$

$$g = 8.811g$$

$$V = \frac{W}{\rho}$$

$$V = \frac{8.811g}{0.894g/ml}$$

$$V = 9.85ml$$

Para una pureza del 99.5%

$$9.85 \rightarrow 100$$

$$X \rightarrow 99.5$$

$$X = \frac{9.85}{(100)(99.5)}$$

$$X = 9.89ml$$

PROCEDIMIENTO:

Mida 9.89 ml de Acetato de Etilo utilizando una pipeta graduada, vaciar en un matraz aforado de un litro, agregue unos 500 ml de agua destilada y agítelo, después aforar a 1Lt. Tape el matraz, mezcle la solución agitando e invirtiéndolo.

PREPARACION DE SOLUCION DE HIDROXIDO DE SODIO 0.1M

CALCULOS:

$$M = 0.1$$

$$PM = 40$$

$$g = (M)(V)(PM)$$

$$g = (0.1)(1)(40)$$

$$g = 4g$$

PROCEDIMIENTO:

Pesar 4g de Hidróxido de Sodio en forma de lentejas, vaciar en un matraz aforado de un litro, agregue unos 500 ml de agua destilada y agítelo (se puede hacer uso de una parrilla con agitación), después aforar a 1Lt. Tape el matraz, mezcle la solución agitando e invirtiéndolo.

NORMALIZACION DEL HIDROXIDO DE SODIO

Pesar exactamente y por triplicado en matraces Erlenmeyer de 250 ml, muestras de 0.8g de ftalato acido de potasio, $KHC_8H_4O_4$, patrón primario. A cada muestra se añaden unos 25 ml de agua destilada y dos gotas de disolución de fenolftaleina. Lavar y cargar una bureta con la disolución de hidróxido de sodio y leer y anotar la lectura inicial de la bureta. Añadir a la primera muestra la disolución de hidróxido de sodio hasta la primera tonalidad rosada que se pueda detectar. Leer de nuevo la bureta y anotar la lectura final. Valorar las otras dos muestras de la misma forma. La desviación media no debe exceder del 2 %.

PRUEBA	MI DE NaOH
1	40.4
2	40.6
3	40.4
Promedio = 40.46	

$$N_{NaOH} = \frac{g_{Biftalato}}{(M_{eq} Biftalato)(MlNaOH)}$$

$$M_{eq} Biftalato = \frac{PM}{(1000)(Num.Equivalentes)}$$

$$M_{eq} Biftalato = \frac{204}{(1000)(1)}$$

$$M_{eq} Biftalato = 0.204$$

$$N_{NaOH} = \frac{0.8g}{(0.204)(40.46)}$$

$$N_{NaOH} = 0.0969$$

PREPARACION DE SOLUCION DE ACIDO CLORHIDRICO 0.02N

CALCULOS:

$$N = 0.02$$

$$\rho = 1.19 \text{ g/ml}$$

$$PM = 36.46$$

$$g = (M)(V)(PM)$$

$$g = (0.02)(1)(36.46)$$

$$g = 0.7292g$$

$$V = \frac{W}{\rho}$$

$$V = \frac{0.7292g}{1.19g/ml}$$

$$V = 0.6127ml$$

Para una pureza del 37%

$$0.6127 \rightarrow 100$$

$$X \rightarrow 37$$

$$X = \frac{0.6127}{(100)(37)}$$

$$X = 1.65ml$$

PROCEDIMIENTO:

Mida 1.65 ml de Acido Clorhídrico concentrado utilizando una probeta a una pipeta graduada, vaciar en un matraz aforado de un litro, agregue unos 500 ml de agua destilada y agítelo, después aforar a 1Lt. Tape el matraz, mezcle la solución agitando e invirtiéndolo y etiquetelo.

NORMALIZACION DEL ACIDO CLORHIDRICO

En matraces Erlenmeyer numerados de 250 ml adicionar exactamente y por triplicado 5 ml de Hidróxido de Sodio, NaOH (Del valorado anteriormente). Lavar y cargar una bureta con la disolución de Acido Clorhídrico. Leer y anotar la lectura inicial de la bureta. Añadir a la primera muestra de disolución de hidróxido de sodio una gota de fenolftaleina y titular hasta vire de rosa a incoloro. Realizar el mismo procedimiento con las otras dos muestras.

PRUEBA	MI DE HCl (V _{HCl})
1	22.3
2	22.1
3	22.0
Promedio = 22.13	

Para calcular la normalidad del Acido Clorhídrico utilizaremos la siguiente formula:

$$N_{HCl} V_{HCl} = N_{NaOH} V_{NaOH}$$

Despejando N_{HCl} tenemos:

$$N_{HCl} = \frac{N_{NaOH} V_{NaOH}}{V_{HCl}}$$

$$N_{HCl} = \frac{(0.0969)(5)}{22.13}$$

$$N_{HCl} = 0.021$$