

Recibido 27/09/2011.
aprobado ...

COMPORTAMIENTO DINÁMICO DE LA SAPONIFICACIÓN DEL ACETATO DE ETILO EN UN REACTOR DE TANQUE CON REACCIÓN CONTINUA

Oscar Núñez¹ y Carlos Cabrera C.²

RESUMEN

El presente trabajo está orientado a la creación de un programa que permita simular el comportamiento dinámico de un reactor de tanque con reacción continua cuyas siglas en inglés es CSTR (Continuous Stirred Tank Reactor), y se considera como una mezcla completa y, por lo tanto, se asume que sus propiedades son uniformes en todo el interior del reactor en el cual se desarrolla la reacción exotérmica de la saponificación de acetato de etilo con hidróxido de sodio.

En la construcción del programa se emplea el software MATLAB Y Simulink.

Para la simulación de la reacción de saponificación se introducen las concentraciones iniciales del acetato de etilo y el hidróxido de sodio, así como la temperatura constante del sistema de enchaquetado del reactor CSTR. Seguidamente, a consideración del usuario, se cambia los datos de las variables enunciadas para simular y observar, mediante graficas, las concentraciones del acetato de etilo, el hidróxido de sodio, el acetato de sodio y el alcohol etílico en función del tiempo del proceso, así como otras reacciones similares cuyas constantes cinéticas son conocidas. Posteriormente se podrá comparar con resultados obtenidos en el laboratorio.

Palabras clave: Saponificación, balance materia y energía, software, simulación.

ABSTRACT

This paper is focused on creation a program to simulate the dynamic behavior of a reactor of tank with constant reaction which initials in English it is CSTR (Continuous Stirred Tank Reactor), and is considered as a complete mixture and, therefore, it is assumed that their properties are uniform throughout the reactor in which the exothermic reaction takes place of the ethyl acetate saponification with sodium hydroxide.

In building the software program used MATLAB and Simulink.

For the simulation of the saponification reaction are introduced initial concentrations of ethyl acetate and sodium hydroxide, and the constant temperature jacketing system of CSTR reactor. Next, consideration of the user, changes the data set of variables to simulate and observe, through graphs, the concentrations of ethyl acetate, sodium hydroxide, sodium acetate and ethyl alcohol function of time of the process, and other similar reactions whose kinetic constants are known. Subsequently, you can compare with results obtained in the laboratory.

Keywords: Saponification, material and energy balance, software, simulation.

1. Docente de la Facultad de Química e Ingeniería Química, UNMSM. E-mail: oscarnuve@gmail.com
2. Docente de la Facultad de Ingeniería Geológica, Minera, Metalúrgica y Geográfica, UNMSM. E-mail: cabreracar@hotmail.com

I. INTRODUCCIÓN

Un reactor químico se puede definir como un equipo en el cual se forma un producto o productos a partir de dos o más reactantes, por medio de una serie de transformaciones químicas (Smith, J. M. 1997).

Los reactores continuos CSTR constituyen una operación bastante compleja, dado que requieren procedimientos tales como llenado, mezclado, calentamiento, control del punto final, adición de alimentación, remoción de productos de enfriamiento y vaciado.

En las industrias de procesos, los reactantes químicos se convierten en productos de manera bien definida y controlada. El descontrol de las reacciones químicas ocurre bajo condiciones anormales, por ejemplo por un mal funcionamiento del sistema de refrigeración o por una carga incorrecta de reactantes, temperatura, presión, catálisis y contaminaciones tales como el agua, oxígeno del aire y lubricantes de equipos pueden modificar las condiciones de las reacciones en el reactor.

Si además se tiene una reacción exotérmica, la misma que muchas veces es inestable en estado estacionario (Shinsky, F. G. 1988).

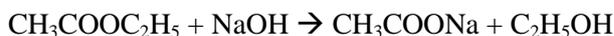
Debido a la importancia de estas unidades de proceso y a lo costoso que implicaría su estudio a partir de plantas piloto a nivel de pregrado, el presente trabajo se enfoca en el diseño de un esquema de control para un reactor continuo exotérmico, teniendo el modelo matemático y la simulación por computadora como puntos de apoyo para todo el desarrollo de dicho diseño; y utilizando el software académico-científico Matlab y su herramienta Simulink como elementos para la programación.

II. MARCO TEÓRICO

El proceso del reactor es una reacción de saponificación de acetato de etilo $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$ con hidróxido de sodio NaOH , donde se produce acetato de sodio CH_3COONa y etanol $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$.

Es una reacción poco exotérmica (23°C a 40°C), y con pH (11.5 a 12.5)

La reacción es la siguiente:



Se idealiza un reactor tipo tanque agitado que cuenta con entrada y salida de reactantes y productos, asimismo con una camisa de refrigeración. También con tanques de almacenamiento para los reactantes y productos.

El modelo matemático se basa en balances de materia teniendo en cuenta las ecuaciones diferenciales. Luyben, W.L. (1990).

Para simplificar el modelo se toma en cuenta lo siguiente:

- El volumen del reactor es constante.
- Se asume que la agitación es eficiente.
- También se asume que las propiedades de los compuestos son uniformes en cualquier tiempo.
- No hay pérdida de calor al exterior del sistema.
- Las concentraciones en la salida y dentro del reactor son constantes.
- El flujo a través del recipiente, es decir las corrientes de entrada y salida es continuo.

Ecuación General del balance de moles (Fogler, S. 2008).

Un balance de moles de la especie J en un volumen del sistema, donde la especie J representa la especie química, está representada por la siguiente Figura N°1.

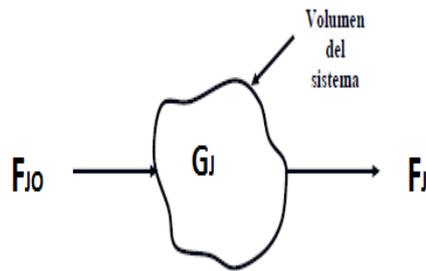


Figura N°1 Balance en el volumen del sistema

El balance de moles de la especie J en cualquier instante t, viene a ser:

Velocidad de flujo de J hacia +/- el sistema (mol/s)	Velocidad de generación de J por reacción química dentro del sistema (mol/s)	Velocidad de flujo de J desde el sistema (mol/s)	Velocidad de acumulación de J dentro del sistema (mol/s)
entrada	+/- generación	- salida	= acumulación
$F_{J_x} \cdot C_{J_x}$	- GJ	- F · C _x	= V · dCJ / dt (1.0)

Donde:

- FJ_x es la velocidad de flujo molar a la entrada (l/s).
- CJ_x es la concentración de material x a la entrada (mol).
- GJ es la velocidad de generación o transformación (mol/s).
- F es la velocidad de flujo molar a la salida (l/s).
- V es el volumen del recipiente tanque.
- CJ es la concentración de material x a la salida (mol).
- t es el tiempo

Si la temperatura, la concentración y otros parámetros son uniformes, entonces se cumple:

$$GJ = r_j \cdot V \quad (2.0)$$

Como la reacción es de segundo orden, entonces la velocidad de reacción es:

$$-r_j = K \cdot CJ \quad (3.0)$$

La ecuación de Arrhenius:

$$K = A \cdot e^{-E_x / (R \cdot T)} \quad (4.0)$$

Constante cinética teórica del acetato de etilo a 27°C

$$K = 2,083 \text{ l/mol} \cdot \text{min} \quad (5.0)$$

Como el volumen es constante, y los flujos de entrada y salida son iguales, entonces:

$$2 F = F_{J_A} + F_{J_B} \quad (6.0)$$

El balance de masa para el hidróxido de sodio (A)

$$V \cdot dC_A / dt = FJ_A \cdot CJ_A - F \cdot C_A - K \cdot C_A \cdot C_B \cdot V \quad (7.0)$$

El balance de masa para el acetato de etilo (B)

$$V \cdot dC_B / dt = FJ_B \cdot CJ_B - F \cdot C_B - K \cdot C_A \cdot C_B \cdot V \quad (8.0)$$

El balance de masa para el acetato de sodio (C)

$$V \cdot dC_C / dt = - F \cdot C_C + K \cdot C_A \cdot C_B \cdot V \quad (9.0)$$

El balance de masa para el etanol (D)

$$V \cdot dC_D / dt = - F \cdot C_D + K \cdot C_A \cdot C_B \cdot V \quad (10.0)$$

Las ecuaciones del modelo son:

$$dC_A / dt = (FJ_A \cdot CJ_A - F \cdot C_A - K \cdot C_A \cdot C_B \cdot V) / V \quad (11.0)$$

$$dC_B / dt = (FJ_B \cdot CJ_B - F \cdot C_B - K \cdot C_A \cdot C_B \cdot V) / V \quad (12.0)$$

$$dC_C / dt = (- F \cdot C_C + K \cdot C_A \cdot C_B \cdot V) / V \quad (13.0)$$

$$dC_D / dt = (- F \cdot C_D + K \cdot C_A \cdot C_B \cdot V) / V \quad (14.0)$$

Considerando los siguientes datos de prueba para el reactor químico CSTR. Henry A. Mendiburu Díaz (2005).

$V = 7,9 \text{ m}^3$	Volumen del tanque
$V_r = 8,0 \text{ m}^3$	Volumen de la camisa de refrigeración
$A = 24,0 \text{ m}^2$	Área para la transferencia de calor

PERTURBACIONES

$FJ_A = 0,01268 \text{ L/s}$	Velocidad de flujo molar de A a la entrada
$FJ_B = 0,01037 \text{ L/s}$	Velocidad de flujo molar de B a la entrada
$TJ_A = 300^\circ\text{K}$	Temperatura del material A en la entrada
$TJ_B = 300^\circ\text{K}$	Temperatura del material B en la entrada
$F_r = 0,4768 \text{ L/s}$	Flujo del líquido refrigerante

INICIALIZACION DE VARIABLES

$C_A = 0,08 \text{ mol/L}$	Concentración de material A a la salida
$C_B = 0,08 \text{ mol/L}$	Concentración de material B a la salida
$C_C = 0,09 \text{ mol/L}$	Concentración de material C a la salida
$C_D = 0,15 \text{ mol/L}$	Concentración de material D a la salida
$T = 306^\circ\text{K}$	Temperatura en el reactor a la salida
$T_r = 300^\circ\text{K}$	Temperatura en el refrigerante a la salida
$CJ_A = 0,2 \text{ mol/L}$	Concentración de material A a la entrada
$CJ_B = 0,2 \text{ mol/L}$	Concentración de material B a la entrada
$TJ_r = 306^\circ\text{K}$	Temperatura del refrigerante a la entrada

III. SIMULACIÓN Y RESULTADOS

Las ecuaciones diferenciales que gobiernan el reactor continuo CSTR se simulan con el software de MATLAB y Simulink.

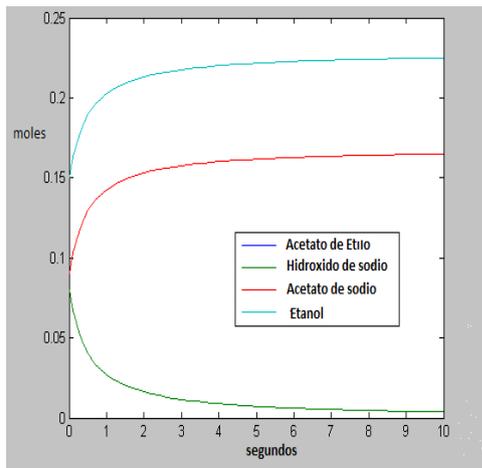


Figura N° 2.

Concentraciones (mol) de los Reactantes y productos de saponificación versus tiempo (s).

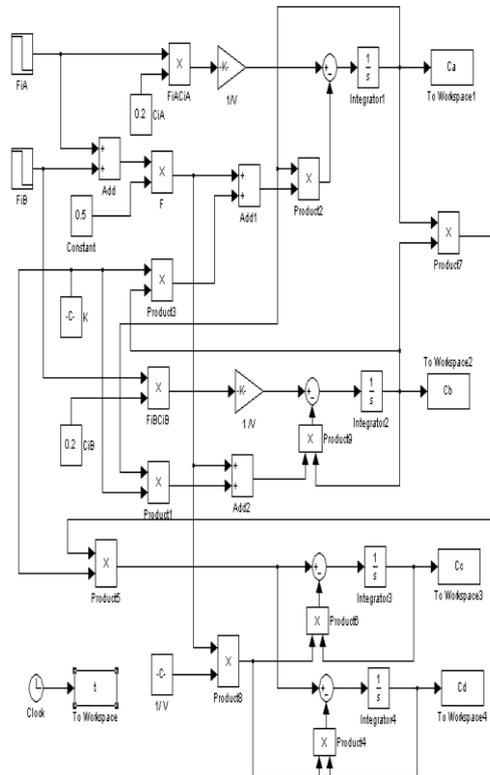


Figura N°3.

Diagrama MATLAB y Simulink de las siguientes concentraciones:

- Ca: Acetato de Etilo,
- Cb: Hidróxido de sodio,
- Cc: Acetato de sodio, y
- Cd: Etanol.

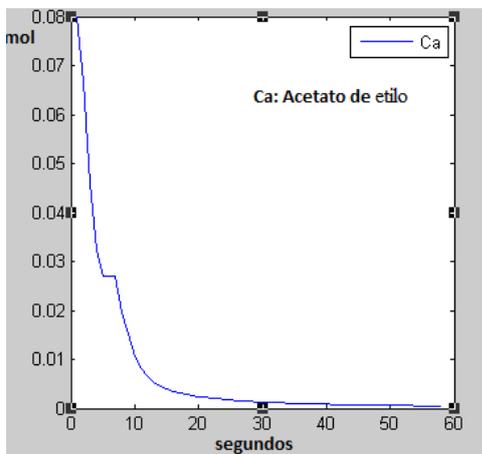


Figura N°4

Concentración del Acetato de etilo (mol) versus tiempo (s)

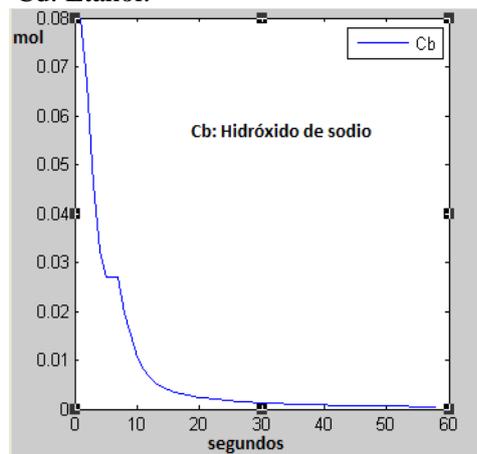


Figura N°5

Concentración del Hidróxido de sodio (mol) versus tiempo (s)

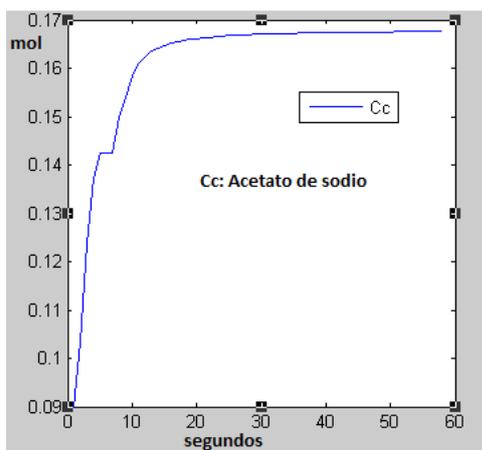


Figura N°6
Concentración del Acetato de sodio (mol) versus tiempo (s)

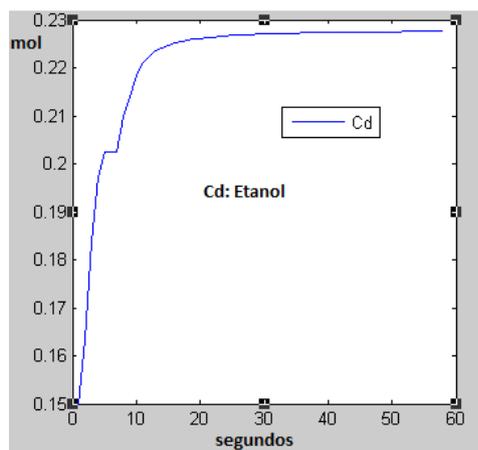


Figura N°7
Concentración del Etanol (mol) versus tiempo (s)

IV. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN

En la figura N°2, se observa la variación de las concentraciones de los reactantes: acetato de etilo y el hidróxido de sodio y los productos acetato de sodio y etanol simultáneamente en función del tiempo; estas curvas es producto del software MATLAB y Simulink (Figura N°3).

El gasto del reactante acetato de etilo se muestra en la Figura N°4.

El gasto del reactante hidróxido de sodio se muestra en la Figura N°5.

El producto del acetato de sodio se muestra en la Figura N°6.

El producto del etanol se muestra en la Figura N°7.

V. CONCLUSIONES

La simulación presentada es de bajo costo y puede mejorar el ejercicio de un proceso en la planta química como la saponificación del acetato de etilo con hidróxido de sodio.

Los datos que se obtengan en el laboratorio puede ser comparado con las curvas presentadas en esta simulación y además se pueden cambiar las condiciones de los reactantes, y también se puede considerar mediante este esquema de solución otras reacciones químicas.

VI. AGRADECIMIENTO

Los autores agradecen ampliamente el apoyo brindado por la Revista del Instituto de Investigación de la Facultad de Ingeniería Geológica, Minera, Metalúrgica y Geográfica RIIGEO de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos.

VII. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- [1] Smith, J. M. (1997). "Ingeniería de la Cinética Química". Editorial CECSA. México.
- [2] Shinskey, F. G. (1988). "Process Control Systems (Application, Design and Tuning)". McGraw Hill. Third Edition. U.S.A.
- [3] Luyben, W.L. (1990). "Process modeling, simulation, and control for chemical engineers". McGraw-Hill. New York.
- [4] Fogler, S. (2008). "Elementos de ingeniería de las reacciones químicas". Pearson Prentice Hall. Cuarta Edición. México.
- [5] Henry A. Mendiburu Díaz (2005), "Diseño de un Neurocontrolador Dinámico (DBP) aplicado a un Reactor Químico Continuo (CSTR)". Tesis en Ingeniería de Control y Automatización. PUCP.