

DISEÑO, CONSTRUCCIÓN Y MODELAMIENTO DE UN REACTOR TUBULAR DE LABORATORIO PARA REALIZAR HIDRÓLISIS Y SAPONIFICACIÓN

Responsible: Ing. Juan Víloche Bazán

RESUMEN

Primero se determinó el orden de reacción de hidrólisis de cristal violeta que fue una pseudoreacción de primer orden y un modelo de segundo orden para la saponificación del acetato de etilo, que permitió calcular el volumen del reactor para cada reacción. El reactor tubular (PFR) se construyó de polietileno de 12 m de longitud, un diámetro interno de 0,95 cm y una capacidad de 850 cm³.

El reactor PFR está enrollado helicoidalmente a lo largo de 30 cm en un soporte de acrílico cristal de 5 mm. de espesor y 15 cm de diámetro externo y sumergido en agua a temperatura controlada que permita modificar la temperatura del sistema. La conversión de diseño es aproximadamente del 80%, tanto para la hidrólisis del cristal violeta como para la saponificación del acetato de etilo.

ABSTRACT

First was determined the order of reaction of hidrólisis of violet crystal that was a pseudo reaction of the first order and a model of the second order for the saponification of the acetate of ethyl, which allowed to calculate the volume of the reactor for every reaction. The tubular Reactor (PFR) was construct of polyethylene of 12 m. Of length, an internal diameter of 0.95 cm and of a capacity of 850 cm³.

The reactor PFR is plunged spirally along 30 cm. In a support of Acrylic crystal of 5 mm. of thickness and 15 cm. of diameter external and plunged in water a control temperature that allows to modify the temperature of the system. The conversion of design is approximately 80 % such as for the hidrólisis of the violet crystal and for the saponification of the acetate of ethyl.

I. INTRODUCCIÓN

Uno de los problemas fundamentales que se le presentan al ingeniero químico que desea diseñar o simular la operación de un reactor es el conocimiento de los modelos cinéticos. El modelo cinético tiene que ser determinado experimentalmente o se puede obtener mediante una búsqueda bibliográfica.

La modelación y simulación de un reactor es de invaluable ayuda para determinar en qué dirección se modificarán las variables de operación y de proceso para maximizar la producción a los menores costos, esta modelación requiere de un entendimiento claro de fenómenos cinéticos, de superficie y de transporte.

II. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

Las reacciones con las cuales se va a trabajar en el presente proyecto son reacciones de primer orden y reacciones de segundo orden.

1) Reacciones de Primer Orden

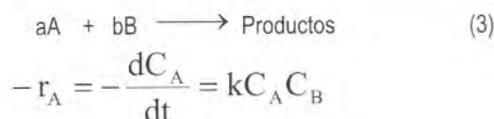
$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = kC_A \quad (1)$$

Que luego de ser integrada tiene la forma

$$\ln\left(\frac{C_{A_0}}{C_A}\right) = -\ln(1 - X_A) = kt \quad (2)$$

2) Reacciones de Segundo Orden

Son la mayoría de las reacciones bimoleculares que se realiza en la naturaleza y tiene la forma siguiente:



Aplicando el grado de conversión se tiene

$$\frac{dX_A}{dt} = k \cdot C_{A_0} (1 - X_A)(M - X_A) \quad (4)$$

Como $M = C_{B_0}/C_{A_0}$ se puede integrar la Ecuación anterior obteniendo

$$\ln\left(\frac{M - X_A}{M(1 - X_A)}\right) = (C_{B_0} - C_{A_0})k \cdot t \quad (5)$$

3) Diseño de un Reactor Tubular.

Utilizaremos la forma diferencial de la ecuación de diseño

$$\int_0^V dV = F_{A_0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r_A} \quad (6)$$

Si sustituimos la ley de velocidad ($-r_A$) para el caso de una reacción de hidrólisis del Cristal Violeta (reacción de primer orden) y para el caso de Saponificación de Acetato de Etilo (reacción de segundo orden) se puede obtener el volumen real del reactor.

III. MATERIAL Y MÉTODOS

1) Reactivos

- Agua
- Cristal violeta
- Acetato de Etilo (P = 0,9025 ramos/ml)
- NaOH (97,7% pureza)
- Hcl (37% pureza)

2) Materiales y Equipos

- Reactor Batch de 1000 ml de capacidad (vaso de precipitados)
- Termostato
- Interfase de adquisición de datos
- Sensor de conductimetría
- Sensor de temperatura
- Bomba peristáltica
- Reactor tubular construido
- Manguera de polietileno

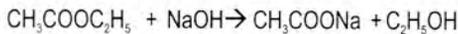
3) Métodos de Medición de Datos Experimentales Usados

Hidrólisis de Cristal Violeta:

Primero se debe determinar una curva de patrón y con esta curva patrón determinar en cualquier instante la concentración del Cristal Violeta cuando se está hidrolizando.

Saponificación de Acetato de Etilo:

La saponificación se puede expresar mediante la siguiente ecuación:



La conductividad del sistema reaccionante disminuye, debido a que la conductividad equivalente del ión OH es mayor que la del ión acetato, y éstos sustituyen a los OH en el transcurso de la reacción (el acetato de etilo y el alcohol etílico no son iónicos).

Como la conductividad es proporcional a la concentración del OH, se puede establecer un modelo que relaciona la conductividad con el grado de conversión.

$$X_A = \left(\frac{L_0 - L_t}{L_0 - L_\infty} \right) \quad (7)$$

Donde

- X_A = grado de conversión
- L_0 = conductividad inicial de la solución
- L_t = conductividad a un determinado tiempo
- L = conductividad a un tiempo Prolongado

IV. RESULTADOS

1) Curvas de Calibración y Modelo Cinético

Hidrólisis de Cristal violeta

$$CCV = 3,131E-07 + 1,238E-05 (ABS) \quad R^2 = 9,966E-01 \quad (8)$$

$$-r_{CV} = 0,174C_{CV} \quad (9)$$

Saponificación de Acetato de Etilo

El seguimiento de la reacción de saponificación se realizó mediante las medidas de la conductividad a diferentes temperaturas obteniéndose el siguiente resultado:

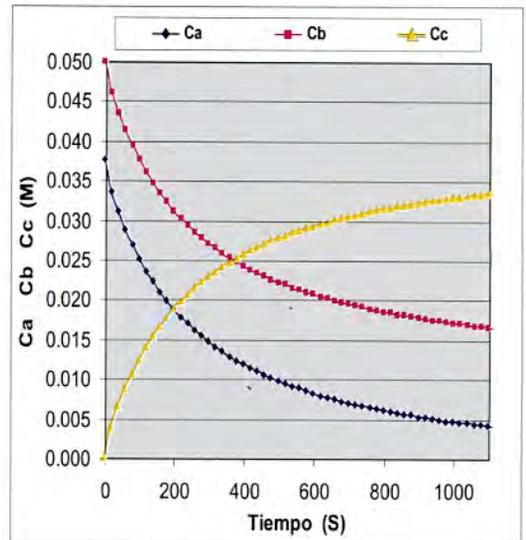


Figura N° 01: Variación de la concentración de reactantes y productos como función del tiempo.

$$k = 2,082(10^9) e^{\left(\frac{-5824}{T} \right)}$$

2) Diseño del Reactor PFR para Hidrólisis de Cristal Violeta

Reemplazando la ecuación (1) en la ecuación (6) se reduce a:

$$V = Q \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k * (1 - X_A)} \quad (10)$$

Donde k es igual 0,174 1/min, C_{A_0} es 7,33E-06 mol/l (concentración inicial de Cristal Violeta), Q es 60 ml/min, V es volumen del reactor tubular (cm³) de diámetro D (cm) y altura H (cm).

Con los datos de conversión obtenidos experimentalmente se construye la curva

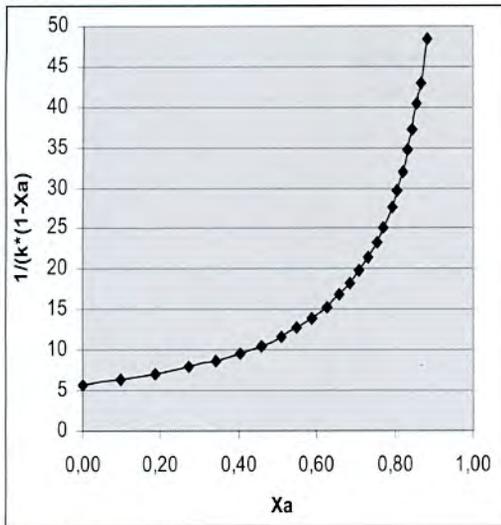


Figura N° 02: Cálculo del volumen del reactor PFR para hidrólisis de Cristal Violeta

$$V = 60 \text{ cm/min} * 12,2670268 = 613,35134 \text{ cm}^3$$

Luego el H es 9,65 m

3) Diseño del Reactor PFR para Saponificación de Acetato de Etilo

El volumen del reactor PFR se calcula por

$$V = Q \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{k \cdot C_{A0} (1 - X_A)(M - X_A)}$$

Se realizan las pruebas experimentales y se procede de igual manera como se procedió para el cálculo del volumen del PFR para la hidrólisis de Cristal Violeta.

Xa	Q (ml/min)	V (cm ³)
0,8	60	704,742395
0,8	50	587,285329
0,8	40	469,828263
Xa	Q (ml/min)	V (cm ³)
0,85	60	900,21149
0,85	50	750,176241
0,85	40	600,140993
Xa	Q (ml/min)	V (cm ³)
0,9	60	1211,52169
0,9	50	1009,60141
0,9	40	807,681126

V. DISCUSION DE LOS RESULTADOS

Los datos cinéticos calculados experimentalmente se ajustan a los datos obtenidos en la bibliografía.

La reacción de hidrólisis de Cristal Violeta es una reacción de pseudoprimer orden y la reacción de saponificación del acetato de etilo es una reacción de segundo orden

El volumen para el reactor PFR calculado para la hidrólisis de Cristal Violeta es de 613 cm³ y la longitud es de 9,65 m

El volumen para el reactor PFR calculado para la saponificación es mayor que para la hidrólisis.

El grado de conversión tanto para la hidrólisis de cristal violeta como para la saponificación está alrededor del 80% para las especificaciones de diseño del reactor construido.

El reactor PFR construido es un reactor de polietileno de 12 m de longitud y de 095 cm de diámetro interno. El PFR está sumergido en un recipiente de acrílico de 5 mm de espesor, de 30 cm de altura y 15 cm de diámetro interno que se encuentra.

El recipiente de acrílico está lleno de agua termostatazada con la finalidad de variar la temperatura del sistema a voluntad.

VI. CONCLUSIONES

1. La construcción del reactor se ha realizado con materiales que se encuentran en el mercado.
2. Como el volumen calculado para el PFR para hidrólisis de Cristal Violeta difiere del volumen calculado para la saponificación de acetato de etilo, se ha visto por conveniente normalizar la altura de 12 m de longitud para el reactor PFR que se pretende construir, haciendo un volumen de 850 cm³ para obtener un grado de conversión aproximada del 80%.
3. Se ha construido un equipo para que los estudiantes puedan realizar sus prácticas de laboratorio en el curso de Diseño de Reactores.
4. Se obtuvieron resultados satisfactorios para ambas reacciones, tanto para la hidrólisis del cristal violeta como para la saponificación del acetato de etilo y esto se valida al determinar y comparar las constante específicas de velocidad de reacción para cada caso, así como de la obtención de un grado de conversión aceptable que oscila alrededor del 90%.
5. Las curvas de calibración obtenidas demuestran ser totalmente confiables, debido a que el nivel de confianza es de la unidad.
6. En el caso de la hidrólisis del cristal violeta, se comprobó satisfactoriamente el valor de la constante específica de reacción, con el reportado por Cayrol y Hundgins. Lo mismo ocurre en el caso de la saponificación del acetato de etilo.
7. El volumen del reactor PFR construido es de 650 cm³, un diámetro de 0,9cm y una longitud de 10.21m que permitirá obtener grados de conversión del 90% para el proceso de Hidrólisis.

En cambio para el proceso de saponificación del Acetato de Etilo se tendrá que disminuir el caudal para obtener grados de conversión altos.

VII. BIBLIOGRAFIA

Folger, H. Scott, *Elementos de Ingeniería de las reacciones químicas*. Edit. Prentice Hall. Tercera Edición, México, 2001.

Levenspiel Octave, *Ingeniería de las reacciones químicas*. Edit Reverte, México, 1993.

Smith, J.M., *Ingeniería de la cinética química*. Edit. Cesca, México, 1992.

Levenspiel Octave, *EL omnilibro de los reactores químicos*. Edit Reverte, México, 1986.

Levenspiel Octave, *El Minilibro de los Reactores Químicos*. Edit Reverte, México 1986.

Luyben, W. A *feed-effluent heat exchanger/reactor dynamic control laboratory experiment*.(2000) 56-61. Skoog, D.H. Holler, J. **Nieman, T.** *Principios de Análisis Instrumental*. Quinta edición. Editorial Mc Graw Hill/ Interamericana de España 2001.

Aris R. *Análisis de Reactores*. Editorial Alambra. Primera Edición en Español. España 1973.