

**Propuesta trabajo final**  
**OPTIMIZACIÓN DE UN REACTOR PARA LA PRODUCCIÓN DE ACETATO DE n-BUTILO**

A continuación, se describe un problema de optimización en ingeniería química.

**Contexto**

En un reactor en el que ocurre la reacción simple  $A \rightarrow B$ , la **conversión** es definida como el porcentaje de reactivo  $A$  que se convierte en producto  $B$  al final de la reacción, mientras mayor sea la conversión, mayor será también la cantidad final de  $B$  generado, por lo que, durante el diseño de un equipo de estos, el ingeniero intentará que la conversión sea la mayor posible.

Otros elementos a considerar durante el diseño, son los efectos del **equilibrio químico** y la **cinética de reacción**. El equilibrio químico define la máxima conversión que se puede llevar a cabo en el reactor y depende de las propiedades físico-químicas de las sustancias involucradas en la reacción. A su vez, la cinética de reacción indica a qué velocidad reaccionan los reactivos y es dependiente de la concentración de reactivos y productos.

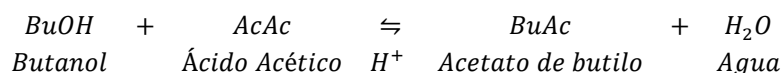
Una relación a tener en cuenta es que mientras más cerca al equilibrio químico se llegue en un reactor, el valor de la cinética será menor, haciendo que se requiera de volúmenes de reactor mucho mayores si se desea alcanzar mayores conversiones. En el punto de equilibrio químico, la cinética de reacción es cero, por lo que un reactor que llegue a estas condiciones tendrá un tamaño infinito, y por tanto un costo infinito.

Por lo anterior se ha establecido que cuando se quiere producir una cantidad específica de producto, no se debe introducir al reactor la cantidad de reactivo cuya máxima conversión sea exactamente igual a esa cantidad que se va a producir, ya que el resultado será un tamaño infinito de reactor. Se recomienda entonces introducir mayores cantidades de reactivo, ya que este exceso hace que no sea necesario alcanzar la máxima conversión y en tanto el tamaño de reactor final estará en valores realistas. El inconveniente con la aproximación planteada es que mientras el reactor sólo se compra por una vez (Costos fijos), este exceso de reactivo debe comprarse por siempre (Costos operativos), incidiendo a largo plazo sobre la rentabilidad de la planta.

El dilema para el ingeniero entonces es entonces conseguir el tamaño adecuado de reactor que consiga un buen balance entre los **costos fijos** y los **operativos** de sistema de reacción.

**Planteamiento del problema**

Se quiere producir 100 kmol/h de Acetato de n-butilo, el cual se produce por la siguiente reacción:



La **cinética química** es modelada con la ecuación modificada de Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (M-LHHW). En el desarrollo de la cinética [1] [2]. La ecuación del modelo y sus parámetros se muestran a continuación.

$$r_i = v_i M_{cat} K_f K_{s,AcH} K_{s,BuOH} \frac{a_{AcH} a_{BuOH} - \frac{1}{K_a} a_{BuAc} a_{H_2O}^\alpha}{\left(1 + K_{s,AcH} a_{AcH} + K_{s,BuOH} a_{BuOH} + K_{s,BuAc} a_{BuAc} + K_{s,H_2O} a_{H_2O}^\alpha\right)^2}$$

Donde  $r_i$  es la velocidad de reacción del componente  $i$  (Sea butanol, ácido acético, acetato de butilo o agua),  $M_{cat}$  es la masa de catalizador,  $a_i$  es el coeficiente de actividad del componente  $i$ , dependiente del coeficiente de actividad del componente  $i$   $\gamma_i$  y la **fracción molar de componente  $i$**   $x_i$

$$a_i = \gamma_i x_i$$

$K_f$  es la constante de avance de reacción dependiente de la temperatura,  $K_a$  es la **constante de equilibrio químico** dependiente de la temperatura, los parámetros  $K_{s,AcH}$ ,  $K_{s,BuOH}$ ,  $K_{s,BuAc}$  y  $K_{s,H_2O}$  son constantes de adsorción y  $\alpha$  es una constante empírica experimental.  $K_f$  y  $K_a$  dependen de la **temperatura** de acuerdo a las relaciones:

$$K_f = K_f^0 \exp - \frac{E_f}{RT}$$

$$K_a = \prod a_i^{v_i} = K_a^0 \exp - \frac{E_a}{RT}$$

Los parámetros de las ecuaciones mostradas son:

*Tabla 1. Parámetros cinética y equilibrio químico [1]*

|              |   |
|--------------|---|
| $K_f^0$      | $14.0093 \times 10^6 \text{ kmol/kg/s}$ |
| $E_f$        | $72.896 \times 10^3 \text{ kJ/kmol}$    |
| $K_a^0$      | 3.8207                                  |
| $E_a$        | $-3.5817 \times 10^3 \text{ kJ/kmol}$   |
| $K_{s,AcH}$  | 4.4521                                  |
| $K_{s,BuOH}$ | 6.9211                                  |
| $K_{s,BuAc}$ | 3.5995                                  |
| $K_{s,H_2O}$ | 9.0304                                  |
| $\alpha$     | 2.00                                    |

La ecuación que permite determinar el tamaño de reactor es la siguiente [3]:

$$\frac{d\zeta}{dW} = - \frac{r_i}{F_0 x_{i_0}}$$

Donde  $X$  es la conversión,  $W$  corresponde al tamaño del reactor (masa de catalizador) y  $F_0$  es la corriente de entrada al reactor y  $x_{i_0}$  la composición inicial del compuesto  $i$ . Esta ecuación diferencial una vez resuelta permite calcular el tamaño de reactor  $W$  de acuerdo a una corriente de alimentación inicial  $F_0$ , compuesta por  $x_i$  y una conversión especificada  $\zeta$ .

Para los efectos del problema de optimización, la función de tamaño del reactor se sintetiza en:

$$W = \varphi(\zeta, F_0, x_{10}, x_{20}, \dots, x_{i0})$$

Finalmente, las funciones objetivo corresponden a:

### Costos fijos

$$C_{fijos} = \text{costo del reactor} = W \times \$_{catalizador}$$

|                    |   |
|--------------------|---|
| $C_{fijos}$        | Costos fijos en dólares                       |
| $W$                | Masa de catalizador                           |
| $\$_{catalizador}$ | Costo en dólares por kilogramo de catalizador |

### Costos de operación

Correspondientes a los costos anuales de las corrientes de alimentación

$$C_{operación} = \text{costo de las corrientes} = F_0 \cdot x_{BuOH_0} \cdot \$_{BuOH} + F_0 \cdot x_{AcAc_0} \cdot \$_{AcAc}$$

|                 |  |
|-----------------|--|
| $C_{operación}$ | Costos de operación en dólares por año           |
| $F_0$           | Flujo de alimentación al reactor                 |
| $x_{BuOH_0}$    | Composición de butanol en la entrada             |
| $\$_{BuOH}$     | Costo en dólares del Butanol por kilogramo       |
| $x_{AcAc_0}$    | Composición de ácido acético en la entrada       |
| $\$_{AcAc}$     | Costo en dólares del ácido acético por kilogramo |

Las variables escogidas para optimizar son las siguientes:

|              |  |
|--------------|--|
| $F_0$        | Flujo de alimentación al reactor   |
| $x_{BuOH_0}$ | Composición de butanol en la entrada   |
| $x_{AcAc_0}$ | Composición de ácido acético en la entrada   |
| $T$          | Temperatura de operación (el equilibrio químico y la cinética dependen de esta variable) |

## Referencias

- [1] J. Gangadwala, S. Mankar y S. Mahajani, «Esterification of Acetic Acid with Butanol in the Presence of Ion-Exchange Resins as Catalysts,» *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 42, n° 10, p. 2146–2155, 2003.
- [2] The Dow Chemical Company®, «AMBERLYST™ 15,» [En línea]. Available: [http://msdssearch.dow.com/PublishedLiteratureDOWCOM/dh\\_08d2/0901b803808d2f06.pdf](http://msdssearch.dow.com/PublishedLiteratureDOWCOM/dh_08d2/0901b803808d2f06.pdf). [Último acceso: 8 Noviembre 2014].
- [3] S. Fogler, *Elementos de Ingeniería de Las Reacciones Químicas*, Michigan, USA: Pearson, Pentice Hall, 2008.