



Universidad de San Carlos de Guatemala

Facultad de Ingeniería

Escuela de Ingeniería Química

**DISEÑO DE UN REACTOR CONTINUO DE FLUJO TAPÓN (PFR) A ESCALA
LABORATORIO PARA USO DOCENTE EN EL ÁREA DE FISICOQUÍMICA DE LA ESCUELA
DE INGENIERÍA QUÍMICA, FACULTAD DE INGENIERÍA, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS
DE GUATEMALA**

Carlos Rodrigo Hernández Pérez

Asesorado por el Dr. Adolfo Narciso Gramajo Antonio

Guatemala, abril de 2019
UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

**DISEÑO DE UN REACTOR CONTINUO DE FLUJO TAPÓN (PFR) A ESCALA
LABORATORIO PARA USO DOCENTE EN EL ÁREA DE FISICOQUÍMICA DE LA ESCUELA
DE INGENIERÍA QUÍMICA, FACULTAD DE INGENIERÍA, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS
DE GUATEMALA**

TRABAJO DE GRADUACIÓN

**PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA
FACULTAD DE INGENIERÍA
POR**

CARLOS RODRIGO HERNÁNDEZ PÉREZ
ASESORADO POR EL DR. ADOLFO NARCISO GRAMAJO ANTONIO

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

INGENIERO QUÍMICO

**GUATEMALA, ABRIL DE 2019
UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE
GUATEMALA FACULTAD DE INGENIERÍA**



NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA

DECANO Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco **VOCAL I**
Ing. José Francisco Gómez Rivera **VOCAL II** Ing. Mario
Renato Escobedo Martínez **VOCAL III** Ing. José Milton
de León Bran **VOCAL IV** Br. Luis Diego Aguilar Ralón

VOCAL V Br. Christian Daniel Estrada Santizo
SECRETARIA Inga. Lesbia Magalí Herrera López

TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO

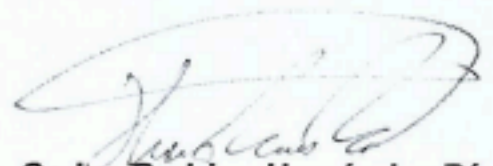
DECANO Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco
EXAMINADOR Ing. Erwin Manuel Ortiz Castillo
EXAMINADOR Ing. César Alfonzo García Guerra
EXAMINADOR Ing. Williams Guillermo Álvarez Mejía
SECRETARIA Inga. Lesbia Magalí Herrera López

HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR

En cumplimiento con los preceptos que establece la ley de la Universidad de San Carlos de Guatemala, presento a su consideración mi trabajo de graduación titulado:

**DISEÑO DE UN REACTOR CONTINUO DE FLUJO TAPÓN (PFR) A ESCALA
LABORATORIO PARA USO DOCENTE EN EL ÁREA DE FISICOQUÍMICA DE LA ESCUELA
DE INGENIERÍA QUÍMICA, FACULTAD DE INGENIERÍA, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS
DE GUATEMALA**

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Ingeniería Química, con fecha 9 de agosto de 2017.



Carlos Rodrigo Hernández Pérez

Guatemala, 17 de octubre de 2018

Universidad de San Carlos de Guatemala
Facultad de Ingeniería
Director Escuela Ingeniería Química
Ing. Carlos Salvador Wong Davi
Presente

Estimado Ingeniero Wong:

Por medio de la presente HAGO CONSTAR que he revisado y aprobado el informe final del Trabajo de Graduación **"DISEÑO DE UN REACTOR CONTINUO DE FLUJO TAPÓN (PFR) A ESCALA LABORATORIO PARA USO DOCENTE EN EL ÁREA DE FISICOQUÍMICA DE LA ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA, FACULTAD DE INGENIERÍA, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA"**, del estudiante de Ingeniería Química Carlos Rodrigo Hernández Pérez, quien se identifica con carné estudiantil número 201314169 y DPI: 2740627980501.

Por lo tanto, después de haber realizado la revisión respectiva y haberle hecho las correcciones pertinentes, por medio de la presente, solicito su autorización para que pueda continuar con el proceso respectivo.

Sin otro particular me suscribo de usted.

Atentamente.

Adolfo Gramajo
Ingeniero Químico
Colegiado 264



Dr. Adolfo Narciso Gramajo Antonio
Colegiado No. 264
Asesor del trabajo de graduación



Guatemala, 30 de enero de 2019.
Ref. EIQ.TG-IF.005.2019.

Ingeniero
Carlos Salvador Wong Davi
DIRECTOR
Escuela de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería

Estimado Ingeniero Wong:

Como consta en el registro de evaluación del informe final EIQ-PRO-REG-007 correlativo **013-2017** le informo que reunidos los Miembros de la Terna nombrada por la Escuela de Ingeniería Química, se practicó la revisión del:

INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADUACIÓN
-Modalidad Seminario de Investigación-

Solicitado por el estudiante universitario: **Carlos Rodrigo Hernández Pérez**.
Identificado con número de carné: **2740 62798 0501**.
Identificado con registro académico: **2013-14169**.
Previo a optar al título de **INGENIERO QUÍMICA**.

Siguiendo los procedimientos de revisión interna de la Escuela de Ingeniería Química, los Miembros de la Terna han procedido a **APROBARLO** con el siguiente título:

**DISEÑO DE UN REACTOR CONTINUO DE FLUJO TAPÓN (PFR) A ESCALA
LABORATORIO PARA USO DOCENTE EN EL ÁREA DE FISCOQUÍMICA DE LA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA, FACULTAD DE INGENIERÍA, UNIVERSIDAD DE
SAN CARLOS DE GUATEMALA**

El Trabajo de Graduación ha sido asesorado por el Ingeniero Químico: **Adolfo Narciso Gramajo Antonio**.

Habiendo encontrado el referido informe final del trabajo de graduación **SATISFACTORIO**, se autoriza al estudiante, proceder con los trámites requeridos de acuerdo a las normas y procedimientos establecidos por la Facultad para su autorización e impresión.



"ID Y ENSEÑADA TODOS"

Ing. Jorge Emilio Godínez Lemus
COORDINADOR DE TERNA
Tribunal de Revisión
Trabajo de Graduación



C.c.: archivo



El Director de la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer el dictamen del Asesor y de los Miembros del Tribunal nombrado por la Escuela de Ingeniería Química para revisar el Informe del Trabajo de Graduación del estudiante, **CARLOS RODRIGO HERNÁNDEZ PÉREZ** titulado: **"DISEÑO DE UN REACTOR CONTINUO DE FLUJO TAPÓN (PFR) A ESCALA LABORATORIO PARA USO DOCENTE EN EL ÁREA DE FISICOQUÍMICA DE LA ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA, FACULTAD DE INGENIERÍA, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA"**.
Procede a la autorización del mismo, ya que reúne el rigor, la secuencia, la pertinencia y la coherencia metodológica requerida.

"Id y Enseñad a Todos"

Ing. Carlos Salvador Wong Davi
Director
Escuela de Ingeniería Química

Guatemala, marzo 2019

FACULTAD DE INGENIERÍA USAC
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
DIRECTOR

Cc: Archivo
CSWD/ale

Universidad de San Carlos
De Guatemala



Facultad de Ingeniería
Decanato

Ref. DTG.174-2019

El Decano de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ingeniería Química del trabajo de graduación titulado: **"DISEÑO DE UN REACTOR CONTINUO DE FLUJO TAPÓN (PFR) A ESCALA LABORATORIO PARA USO DOCENTE EN EL ÁREA DE FISICOQUÍMICA DE LA ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA, FACULTAD DE INGENIERÍA, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA"** presentado por el estudiante: **Carlos Rodrigo Hernández Pérez** después de haber culminado las revisiones previas bajo la responsabilidad de las instancias correspondientes, se autoriza la impresión del mismo.

IMPRÍMASE.

Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco
Decano



Guatemala, Abril de 2019

/echm

**Universidad de San Carlos de
Guatemala**

Dios

Facultad de Ingeniería

**Dirección General de Investigación
(DIGI)**

Mis padres Mi familia

Dr. Adolfo Gramajo Ing. Víctor Ruiz

ACTO QUE DEDICO A:

Ing. Otto de León

Quien me inspiró para la realización de este estudio, por darme sabiduría y bendición para alcanzar mis metas como persona y como profesional.

Ing. William Álvarez Lic. Roberto

Barrios Ing. Hugo Ramírez

Carlos Hernández y Luz Aida Pérez. Su amor será siempre mi inspiración.

Por ayudarme en mi formación profesional.

Por brindarme su apoyo a lo largo de mi trayectoria.

Por haber colaborado en mi formación académica.

Por brindarme apoyo económico para la realización del presente estudio.

Por el asesoramiento y conocimientos.

Dios

AGRADECIMIENTOS A:

Por abrirme las puertas del centro de mecanizado de la Escuela de Ingeniería Mecánica.

Por haberme dado la oportunidad de realizar el presente estudio.

Por sus conocimientos y orientación.

financiamiento. Por facilitarme equipo

Por su ayuda con el trámite de la beca

para el presente estudio.

de tesis. Por asesorar el proceso de

Ing. Carlos Pérez Por su asesoramiento en la estructuración del trabajo de
graduación.

ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	XI
LISTA DE SÍMBOLOS	XVII
GLOSARIO	
XXV RESUMEN.....	
XXXI OBJETIVOS.....	
XXXIII	
INTRODUCCIÓN.....	XXXV
1. ANTECEDENTES	1
2. MARCO TEÓRICO.....	7
2.1. Cinética de reacción	7
2.1.1. Teoría de colisiones.....	8
2.1.2. Velocidad de reacción	8
2.1.3. Ley de velocidad.....	9
2.1.3.1. Velocidad de reacción relativa.....	10
2.1.3.2. El orden de reacción y la ley de velocidad	11
2.1.3.2.1. Modelos de ley de potencia y leyes de velocidad elementales ..	12
2.1.3.2.2. Reacciones reversibles	13
2.2. Reacciones químicas	14
2.2.1. Clasificación de las reacciones.....	15
2.2.1.1. Desde el punto de vista estructural.....	15

2.3. Reactores químicos.....	16
2.3.1. Balance general de masa.....	16
2.3.2. Reactores ideales.....	18
2.3.3. Clasificación de los reactores.....	18
2.3.3.1. Reactores intermitentes (batch)	18
2.3.3.2. Reactores de flujo continuo.....	19
2.3.3.2.1. Reactor tubular (PFR)...	19
2.3.3.2.2. Reactor CSTR.....	20
2.3.3.2.3. Reactor de lecho empacado	21
2.3.4. Funciones de un reactor químico	22
2.3.5. Reactores de flujo tapón (PFR).....	22
2.3.6. Consideraciones entre un reactor de flujo continuo (PFR)	23
2.3.7. Definiciones adicionales.....	24
2.3.7.1. Espacio-tiempo.....	25
2.3.7.2. Velocidad espacial	25
2.3.7.3. Conversión	26
2.3.8. Constante de velocidad de reacción	27
2.4. Estequiometría de un reactor continuo de flujo tapón (PFR)...	29
2.5. Efecto de calor en un PFR	30
2.5.1. Deducción del balance de energía para un PFR.....	31
2.5.2. Balance para el fluido calentador	32
2.5.2.1. Caso a flujo co-corriente.....	33
2.6. Tipos de flujo.....	33
2.6.1. Turbulencia.....	33
2.6.2. Número de Reynolds.....	34
2.7. Transferencia de calor.....	35
2.7.1. Convección.....	35

2.7.2. Fundamentos de la transferencia de calor.....	36
2.7.3. Coeficientes de transferencia de calor.....	37
2.7.3.1. Coeficiente de película	37
2.7.3.2. Coeficiente global de transferencia	

de calor.....	38
2.7.4. Velocidad de transmisión de calor.....	38
2.7.4.1. Densidad de flujo de calor	38
2.7.4.2. Temperatura media de la corriente de fluido	39
2.7.5. Factores de ensuciamiento.....	39
2.7.6. Diseño general del equipo para transferencia de calor.....	40
2.7.7. Regímenes de transferencia de calor en fluidos.....	41
2.7.7.1. Capa límite térmica.....	42
2.7.8. Transferencia de calor por convección forzada en flujo turbulento	44
2.7.9. Efecto de la rugosidad	44
Conductimetría	45
Definición.....	45
Conductividad electrolítica.....	45
débiles.....	47
.....	47
conductividades iónicas	47
2.8.3. Electrolitos débiles.....	47
2.8.4. Electrolitos fuertes	47
2.8.5. Determinación de las conductividades iónicas	47
2.8.5.1. Variación de la conductancia con la concentración: Ley de Kohlrausch.....	48
2.8.5.2. Ley de la migración independiente de los iones.....	49
2.8.6. Estudio conductimétrico de la cinética de la hidrólisis de los ésteres en medio básico	49

III

2.9. Análisis de grados de libertad	52
2.10. Concentración	52
2.10.1. Solubilidad.....	53
Acetato de sodio	53
Propiedades físicas y termodinámicas	54
Propiedades químicas.....	54
Síntesis.....	54
Mecanismos de reacción.....	54
Aplicaciones del acetato de sodio	55
sodio.....	56
2.12. Hidróxido de sodio.....	56
2.12.1. Propiedades	

físicas y termodinámicas	56	2.12.2. Propiedades
químicas.....	56	2.13. Acetato de etilo
.....	57	2.13.1. Propiedades
físicas y termodinámicas	57	2.13.2. Propiedades
químicas.....	57	2.14.
Soldadura.....	58	2.14.1.
Clasificación de los procesos de soldeo.....	59	2.14.1.1. Proceso
		de soldeo por fusión.....
		2.14.1.2. Proceso de soldeo en estado sólido.....
		2.14.1.3. Procesos de soldeo fuerte y blando
2.14.2. Fundamentos de electricidad y el magnetismo de la		
soldadura.....	60	
2.14.2.1. Naturaleza de la electricidad	60	
2.14.2.2. Corriente eléctrica	61	
2.14.2.3. Tensión, intensidad y resistencia	62	
2.14.2.4. Ley de Ohm.....	63	
2.14.2.5. Corriente continua y corriente alterna ..	63	
		2.14.2.5.1. Corriente continua.....
		2.14.2.5.2. Corriente alterna
		IV
2.14.2.6. Energía y potencia eléctrica.....	65	
2.14.2.7. Efecto calorífico de la corriente		
eléctrica efecto Joule	67	
2.14.3. Arco eléctrico.....	68	
2.14.3.1. La columna de plasma.....	68	
2.14.3.2. Zonas características del arco de		
soldeo	69	
2.14.3.3. Influencia del tipo de corriente.....	70	
		2.14.3.3.1. Efecto de la polaridad... 71
2.14.4. Soldeo por arco con electrodos revestidos.....	71	
2.14.4.1. Aplicaciones.....	73	
2.14.4.2. Selección del tipo de corriente.....	74	
2.14.5. Soldeo TIG.....	76	
2.14.5.1. Aplicaciones.....	78	
2.14.5.2. Selección de tipo de corriente.....	78	
		2.14.5.2.1. Arco con corriente

continua.....	79
2.14.5.2.2. Arco con corriente alterna	79
3. DISEÑO METODOLÓGICO.....	81
Variables.....	81
de diseño	81
3.1.1. Variables independientes	82
3.1.1.2. Variables dependientes	82
3.2. Delimitación de campo de estudio.....	83
Recursos humanos disponibles.....	83
Recursos materiales disponibles	84
Reactivos.....	84
V	
3.4.2. Materiales e insumos	84
3.4.3. Herramientas y equipos auxiliares	90
3.4.4. Cristalería.....	93
3.4.5. Recursos generales	93
3.5. Técnica cuantitativa.....	95
3.5.1. Técnicas cuantitativas de la fase de diseño del reactor.....	95
3.5.1.1. Dimensionamiento del reactor.....	95
3.5.1.1.1. Escalamiento.....	96
3.5.1.1.2. Volumen de reactor.....	105
3.5.1.1.3. Longitud, configuración espacial y materiales.....	105
3.5.1.2. Determinación de parámetros de operación.....	114
3.5.1.2.1. Selección de flujos de operación y diseño térmico	114
3.5.1.2.2. Parámetros de reacción.....	137
3.5.1.3. Selección de equipos auxiliares	145
3.5.1.3.1. Selección de	

accesorios y válvulas. .	145
3.5.1.3.2. Selección de fuente de energía para sistema de calentamiento.....	156
3.5.1.3.3. Diseño del sistema de bombas	159
VI	
3.5.1.3.4. Diseño del sistema eléctrico	178
3.5.1.3.5. Dimensionamiento de tanques.....	178
3.5.1.3.6. Selección de medidor de conductividad.....	181
3.5.1.4. Diseño espacial del equipo conjunto .	183
Técnicas cualitativas de la fase de construcción ..	183
3.5.2.1. Metalmecánica.....	183
3.5.2.2. Soldadura TIG	184
3.5.2.3. Soldadura MMA con arco eléctrico	185
3.5.2.4. Construcción de tablero eléctrico.....	186
3.5.2.5. Corte y ensamblaje de tubería de PVC y CPVC.....	187
3.5.2.6. Aplicación de pintura, revestimientos y resinas epóxicas	187
3.5.2.7. Armado de circuitos eléctricos en tablero.....	188
3.5.2.8. Ensamblaje de soportes y estructura metálica	189
3.5.2.9. Instalación de bombas y equipos auxiliares.....	189
3.5.2.10. Montaje de accesorios y ensamblaje final	190
3.5.2.11. Prueba de fugas	191
Técnicas cuantitativas de la fase de validación	192
3.5.3.1. Calibración de bombas de corriente	

VII

3.5.3.1.1. Calibración de bomba de solución de hidróxido de sodio.....	192
3.5.3.1.2. Calibración de bomba de solución de acetato de etilo.....	193
3.5.3.2. Calibración de bomba de corriente alterna	194
3.5.3.3. Técnica conductimétrica.....	194
3.5.3.4. Simulación por computadora.....	195
3.6. Recolección y ordenamiento de la información.....	195
3.7. Tabulación, ordenamiento y procesamiento de la información.....	198
4. RESULTADOS.....	199
4.1. Diseño del reactor.....	199
4.2. Construcción del reactor	237
4.2.1. Reactor construido	237
4.2.2. Fotografía de componentes del reactor.....	240
4.3. Validación del reactor.....	243
4.4. Propuesta de práctica de laboratorio	251
4.4.1. Título de práctica de laboratorio.....	251
4.4.2. Objetivos	251
4.4.2.1. General.....	251
4.4.2.2. Específicos	251
4.4.3. Material y equipo	252
4.4.4. Equipo de protección personal.....	252
4.4.5. Reactivos e insumos	253
4.4.6. Procedimiento	253

VIII

4.4.6.1. Calibración de bombas de reactivos..	253
4.4.6.2. Calibración de bomba de agua.....	254
4.4.6.3. Prueba de reactor.....	255

4.4.7. Cálculos.....	256
Manual de operación y mantenimiento.....	257
5. DISCUSIÓN DE RESULTADOS.....	259
CONCLUSIONES	267
RECOMENDACIONES.....	269
BIBLIOGRAFÍA.....	271
APÉNDICES	279
ANEXOS.....	337

IX X **ÍNDICE DE ILUSTRACIONES**

FIGURAS

1. Balance en el volumen del sistema	16
Reactor simple intermitente homogéneo.....	19
2.	2.
3.	3.

Esquema de un reactor CSTR.	20	4.
Reactor longitudinal de lecho empacado	21	5.
Reactor PFR.....	22	6.
Balance de moles para la especie j en el volumen δv	24	7.
Tabla estequiométrica para un sistema de flujo	29	8.
Variables de reactor de flujo.....	30	9.
PFR con ganancia o pérdida de calor	30	10.
Transferencia de calor en fluidos	32	11.
Perfiles de temperatura del fluido en la transferencia de calor.....	33	12.
Capa límite térmica e hidrodinámica sobre una lámina (a) toda la placa está caliente; (b) longitud no calentada = x_0	42	
13. Mecanismo de reacción de saponificación del acetato de etilo.....	55	
14. Átomo y sus partes.....	61	
15. Corriente continua electrodo negativo.....	70	
16. Descripción del proceso TIG	76	
17. Reactor para poliestireno expansible	110	
18. Reactor PFR helicoidal.....	111	
19. Reactor PFR zigzag	112	
20. Reactor PFR tubos cruzados	113	
21. Perfil longitudinal de temperatura de flujos en contracorriente.....	117	
22. Perfil longitudinal de temperatura de flujos paralelos	118	

XI

23. Diagrama del anulo del intercambiador de calor.....	121
24. Cálculo de conversión usando Polymath 5.1	143
25. Resultados de diseño de reactor Polymath 5.1.....	144
26. Esquema 3D preliminar 1 del diseño del reactor	145
27. Esquema 3D preliminar 2 del diseño del reactor	146
28. Codo 90° clamp ½ pulg SS304.....	147
29. Abrazadera clamp ½ pulg SS304	147
30. Ferrula clamp ½ pulg SS304.....	147
31. Reducidor concéntrico soldable 1 x ½ pulg SS304.....	148
32. Tee soldable 1 pulg SS304.....	148
Empaque clamp ½ pulg	148
Codo roscado NPT ¼ pulg SS304	149
Cople roscado NPT ¼ pulg SS304	149
Tapón roscado NPT ¼ pulg SS304	149
Reducidor campana roscado NPT ½ a ¼ pulg SS304.....	150

Niple roscado NPT ¼ x 3 pulg SS304.....	150	39.
Niple roscado NPT ¼ x 1 ½ pulg SS304.....	150	40.
Tee roscada NPT ¼ pulg SS304	151	41.
Unión universal roscada NPT ¼ pulg. SS304.....	151	42.
Niple roscado NPT ¼ x 1 pulg SS304.....	151	43.
Terminal para manguera roscado NPT ½ x 3/8 pulg.....	152	44.
Válvula de cheque horizontal roscada NPT ½ pulg	152	45.
Valvula de bola CPVC ½ pulg.....	152	46.
Válvula de bola CPVC negra roscada NPT ½ pulg.....	153	47.
Unión universal negra PVC 1 pulg cedula 80.....	153	48.
Unión universal CPVC ½ pulg.....	153	49.
Reductor bushing PVC 1 a ¾ pulg.....	154	50.
Reductor bushing PVC ¾ a ½ pulg roscado NPT.....	154	51.
Adaptador macho CPVC rosca NPT ½ pulg	154	

XII

52. Adaptador macho PVC rosca NPT 1 pulg	155
53. Codo 90° CPVC ½ pulg.....	155
54. Codo 90° PVC 1 pulg	155
55. Calentador titan N 120 SCR 2.....	159
56. Plano de tanque de almacenamiento Dynalon Baritainer Jerry Can	
10 L	
180 57. Tanque Dynalon Baritainer Jerry Can 10 L	
181 58. Conductividad eléctrica vs concentración de hidróxido de sodio.....	
182 59. Vista 3D perspectiva frontal.....	
208 60. Vista 3D perspectiva trasera	
209 61. Vista 3D perspectiva lateral 1.....	
210 62. Vista 3D perspectiva lateral 2.....	
211 63. Vista 3D perspectiva planta.....	
212 64. Vista 2D frontal (elevación 1)	
213 65. Vista 2D trasera (elevación 2)	
214 66. Vista 2D lateral (elevación 3).....	
215 67. Vista 2D lateral (elevación 4).....	
216 68. Vista 2D planta.....	
217 69. Plano frontal (elevación 1) acotado	
218 70. Plano trasero (elevación 2) acotado.....	
219 71. Plano lateral (elevación 3) acotado	

220	72. Plano lateral (elevación 4) acotado	
221	73. Plano de planta	
222	74. Plano estructural del reactor frontal.....	
223	75. Plano estructural del reactor trasero	
224	76. Plano estructural del reactor lateral 1.....	
225	77. Plano estructural del reactor lateral 2.....	
226	78. Plano estructural del reactor planta.....	
227	79. Plano estructural de soporte del reactor.....	
228		

XIII

80.	Plano estructural de soporte de bombas.....	229
81.	Plano estructural de soporte de tanques.....	230
82.	Reducidor concéntrico y codo clamp SS304.....	231
83.	Abrazadera clamp y tee soldable SS304	232
84.	Férrula clamp ½ pulg SS304.....	233
85.	Plano eléctrico del reactor.....	236
86.	Fotografía frontal del reactor construido	237
87.	Fotografía trasera del reactor construido	238
88.	Fotografía lateral del reactor construido.....	239
89.	Fotografía de bomba de agua.....	240
90.	Bomba AEO WP-501210	240
91.	Fuente de poder de 24 V DC	241
92.	Manómetro de acero inoxidable.....	241
93.	Termómetro de acero inoxidable	242
94.	Medidor de conductividad eléctrica.....	242
95.	Conversiones promedio de pruebas	250

XIV

TABLAS

I. Comparación entre corriente continua y corriente alterna.....	75	II.
Valores fijos en el proceso de diseño.....	81	III.
Variables independientes de la investigación	82	IV.
Variables dependientes de la investigación	82	V.
Reactivos	84	VI.
Materiales.....	84	VII.
Componentes electrónicos.....	88	VIII.
Insumos.....	89	IX.
Equipo auxiliares.....	90	X.
Herramientas.....	92	XI.
Cristalería y equipo de laboratorio	93	XII.
Recursos generales	94	XIII.
Recursos tecnológicos	95	XIV.
Matriz de evaluación de tuberías	106	XV.
Parámetros de selección de fuente de energía.....	156	XVI.
Matriz de ponderación para selección de calentador.....	157	XVII.
Calentadores eléctricos de paso.....	158	XVIII.
Accesorios de tubería del enchaquetamiento	163	XIX.
Rugosidad absoluta de materiales	164	XX.
Número de reynolds para cada tramo de tubería.....	165	XXI.
Factor de fricción para cada tramo de tubería.....	165	XXII.

Pérdidas por fricción y forma de accesorios.....	166 XXIII.
Pérdidas por fricción en sistema de agua	167 XXV.
Número de reynolds para cada tramo de tubería.....	174 XXVI.
Factor de fricción para cada tramo de tubería.....	174 XXVII.
Pérdidas por fricción y forma de accesorios.....	175 XXVIII.
Pérdidas por fricción en tubería del reactor	176

XV

XXIX. Dimensiones de tanque Dynalon Baritainer Jerry Can 10 L	180
XXX. Recolección de información de pruebas conversión del reactor.....	196
XXXI. Calibración de bomba de hidróxido de sodio.....	196
XXXII. Calibración de bomba de acetato de etilo.....	197
XXXIII. Calibración de bomba de agua.....	197
XXXIV. Ordenamiento de pruebas	198
XXXV. Codificación de componentes del reactor.....	199
XXXVI. Codificación de componentes eléctricos.....	234
XXXVII. Calibración de bomba de hidróxido de sodio.....	243
XXXVIII. Calibración de bomba de acetato de etilo.....	244
XXXIX. Calibración de bomba de agua.....	245
XL. Resultados de prueba No. 1	245 XLI.
Errores absolutos de prueba No. 1.....	246 XLII.
Error y conversión promedio de prueba No. 1	246 XLIII.
Resultados de prueba No.2	246 XLIV.
Errores absolutos de prueba No. 2.....	247 XLV.
Error y conversión promedio de prueba No. 2	247 XLVI.
Resultados de prueba No. 3	247 XLVII.
Errores absolutos de prueba No. 3.....	248 XLVIII.
Error y conversión promedio de prueba No. 3	248 XLIX.
Error y conversión del reactor.....	248 L.
Conversión al infinito promedio de las pruebas del reactor	249 LI.
Errores de la conversión al infinito.....	249

XVI LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo Significado

°◆◆ Grados Celsius de temperatura

◆◆ Área

A Amperios

◆◆ Área de intercambio de calor por unidad de volumen del reactor.

◆◆◆◆ Área en mojada o en contacto con agua de calentamiento en el enchaquetamiento del reactor.

◆◆◆◆◆ Concentración inicial de hidróxido de sodio en la reacción.

◆◆◆◆◆ Concentración inicial de acetato de etilo en la reacción.

◆◆◆ Concentración de hidróxido de sodio ◆◆◆◆

Concentración de acetato de etilo

◆◆◆ Concentración de acetato de sodio ◆◆◆◆

Concentración de etanol

◆◆◆◆ Centímetro, indica longitud

◆◆◆◆ Capacidad calorífica a presión constante ◆◆◆◆◆ Capacidad calorífica a presión constante del hidróxido de sodio puro en solución acuosa.

◆◆◆◆◆ Capacidad calorífica de la mezcla reactante de hidróxido de sodio y acetato de etilo en medio acuoso.

XVII

◆◆◆◆◆ Capacidad calorífica a presión constante de una solución de hidróxido de sodio acuosa.

- ◆◆◆◆. Capacidad calorífica a presión constante del acetato de etilo puro.
- ◆◆◆◆. Capacidad calorífica a presión constante de una solución de acetato de etilo acuosa.
- ◆◆◆◆. Capacidad calorífica a presión constante del agua. ◆◆ Diámetro
- ◆◆◆◆. Diámetro equivalente de una sección transversal de una tubería con figura geométrica diferente de un círculo.
- ◆◆◆. Diferencial de temperatura
- ◆◆◆. Diferencial de volumen
- ◆◆◆. Diferencial de conversión
- ◆◆. Espesor de pared de un tubo
- ◆◆. Flujo molar de una solución de hidróxido de sodio **F** Faradios, indica capacitancia
- ◆◆. Flujo molar de una solución de acetato de etilo ◆◆◆. Factor de fricción de Darcy
- ◆◆. Aceleración de la fuerza de gravedad ◆◆ Gramos, indica la cantidad de masa ◆◆ Entalpía
- ◆◆. Cabeza de bomba
- ◆◆. Coeficiente individual de película del agua de calentamiento en el enchaquetamiento del reactor.
- ◆◆. Sumatoria de pérdidas por fricción y forma ◆◆. Coeficiente individual de película de la mezcla reactante.
- ◆◆. Perdida de energía por trabajo generado por el fluido

XVIII

- ◆◆. Hercio, indica la frecuencia de oscilación del fluido eléctrico.
- ◆◆ Joule, indica cantidad de energía
- ◆◆ Grados Kelvin, indica de temperatura ◆◆◆. Longitud equivalente en diámetros de conducto, de un accesorio de tubería.
- ◆◆ Conductividad térmica
- ◆◆. Conductividad térmica de hidróxido de sodio en solución acuosa.
- ◆◆. Conductividad térmica de la solución de hidróxido de sodio acuosa.
- ◆◆. Conductividad térmica de la mezcla reactante de hidróxido de sodio y acetato de etilo en medio acuoso.
- ◆◆. Conductividad térmica de acetato de etilo puro ◆◆. Conductividad térmica de la solución de acetato de etilo acuosa.

◆◆◆ Constante de equilibrio químico

◆◆◆ Kilogramo, indica cantidad de materia ◆◆◆ Kilojulio,

indica cantidad de energía ◆◆◆ Kilowatt, indica potencia

◆◆ Constante de velocidad de reacción ◆◆◆ Kilo ohmio, indica la
resistencia eléctrica de un componente electrónico.

◆◆ Longitud

◆◆ Litro, indica el volumen o cantidad de espacio ◆◆◆ Longitud
equivalente

◆◆◆◆ Logaritmo en base 10

◆◆ Metros, indica longitud

XIX

◆◆ Molaridad, indica concentración de un soluto en una solución acuosa.

◆◆ ◆◆ Flujo másico de una solución de hidróxido de sodio acuoso (◆◆/min).

◆◆◆: Flujo másico de una solución de acetato de etilo acuoso
(◆◆/◆◆◆◆◆).

◆◆◆ Flujo molar de agua caliente en el enchaquetamiento del reactor.

◆◆◆◆ Minutos, indica cantidad de tiempo ◆◆◆

Mililitros, indica volumen

◆◆◆ Milímetros, indica longitud

◆◆◆◆ Moles, indica cantidad de materia

◆◆◆ Suma de los flujos másicos de las soluciones de hidróxido de sodio y
acetato de etilo.

◆◆◆ Número de Nusselt

◆◆ Flujo másico (◆◆◆◆◆/◆◆◆◆◆)

◆◆◆◆ Flujo molar de una solución de hidróxido de sodio acuoso.

◆◆◆◆ Flujo molar de una solución de acetato de etilo acuoso.

◆◆◆◆: Flujo másico de agua (◆◆◆◆◆/◆◆◆◆◆)

◆◆◆ Nanómetros, indica longitud

◆◆◆: Flujo molar total de reactivos (◆◆◆◆◆/◆◆◆◆◆) ◆◆

Presión de un fluido

◆◆◆ Pascal, indica presión

◆◆◆ Perímetro mojado o en contacto con agua de calentamiento en el en el
enchquetamiento del
reactor.

XX

◆◆◆◆ Número de Prandtl. Indica la relación entre la capa límite térmica y la capa límite viscosa.

◆◆ Flujo de calor

◆◆◆ Velocidad de reacción del hidróxido de sodio ◆◆◆◆◆◆◆◆

Resistencia a la conducción

◆◆◆◆ Factor de ensuciamiento

◆◆◆◆ Número de Reynolds. Indica el régimen de flujo: turbulento, transición o laminar.

◆◆◆◆ Radio hidráulico

◆◆ Segundo, indica cantidad de tiempo ◆◆ Siemens, unidad de conductancia, admitancia y susceptancia del sistema internacional de unidad, equivalente a la inversa de 1 ohmio.

◆◆ Tiempo

◆◆◆◆ Temperatura del enchaquetamiento del reactor ◆◆◆◆ Temperatura de ingreso de un fluido al reactor o enchaquetamiento.

◆◆◆◆ Temperatura de referencia (298.15 ◆◆) ◆◆◆◆ Temperatura de salida de un fluido al reactor o enchaquetamiento.

◆◆ Unidad, indica cantidad de objetos o accesorios ◆◆ Coeficiente global de transferencia de calor ◆◆ Volumen

◆◆ Flujo volumétrico en (m^3/s), (m^3/min) o (m^3/h) ◆◆ Watt, unidad de medida de la potencia en el sistema internacional de unidades.

◆◆ Conversión de la reacción, indica el consumo de reactivos.

XXI

◆◆◆ Fracción molar de hidróxido de sodio en una solución acuosa.

◆◆◆◆ Fracción molar de una solución acuosa de hidróxido de sodio en una mezcla con otra solución.

◆◆◆ Fracción molar de acetato de etilo en una solución acuosa.

◆◆◆◆ Fracción molar de una solución acuosa de acetato de etilo en una mezcla con otra solución.

◆◆◆ Fracción molar de agua en una solución ◆◆ Cabeza de altura en el balance de momentum para dimensionamiento de bombas.

◆◆◆◆◆ Cambio total en capacidad calorífica por mol de hidróxido de sodio que reacciona.

◆◆◆◆◆ Calor de reacción a una temperatura específica ◆◆ Calor de reacción a una temperatura de referencia

◆◆◆◆◆

◆◆◆◆◆ Diferencia de temperaturas pequeña en el perfil longitudinal de temperaturas del reactor.

◆◆◆◆◆ Diferencia de temperaturas grande en el perfil longitudinal de temperaturas del reactor.

◆◆◆◆◆ Diferencia de temperatura media logarítmica del perfil longitudinal de temperaturas del reactor.

◆◆ Rugosidad absoluta de un material ◆◆ Viscosidad dinámica de un fluido

◆◆◆◆ Viscosidad dinámica de la solución acuosa de hidróxido de sodio.

◆◆◆◆ Viscosidad dinámica de la mezcla reactante de hidróxido de sodio y acetato de etilo en medio acuoso.

◆◆◆ Viscosidad dinámica del acetato de etilo puro

XXII

◆◆◆◆ Viscosidad dinámica de la solución acuosa de acetato de etilo.

◆◆◆ Viscosidad dinámica del agua

◆◆◆ Micrómetro, indica longitud

◆◆◆ Micro siemens, indica conductividad eléctrica ◆◆ Velocidad (◆◆/◆◆)

◆◆ Es la constante entre la longitud de una circunferencia y su diámetro en geometría euclidiana.

Corresponde al valor 3.1415192...

◆◆ Densidad, es la magnitud escalar que indica la cantidad de masa en un determinado volumen de una sustancia.

◆◆◆◆ Densidad de la solución acuosa de hidróxido de sodio.

◆◆◆◆ Densidad de la mezcla reactante de hidróxido de sodio y acetato de etilo en medio acuosos.

◆◆◆ Densidad del acetato de etilo puro ◆◆◆◆ Densidad de la solución acuosa de acetato de etilo. ◆◆◆ Densidad del agua.

◆◆ Espacio-tiempo, es el tiempo de residencia o tiempo que tarda una partícula

en cruzar el cuerpo del
reactor.

◆◆ Theta, parámetro utilizado para factorizar el número de moles inicial de un reactivo en cada una de las expresiones de concentración.

◆◆ Ohmio, unidad de la resistencia eléctrica en el sistema internacional de unidades.

[NaOH]_f Concentración de hidróxido de sodio al final de la reacción

XXIII

[NaOH]_o Concentración de hidróxido de sodio al inicio de la reacción.

[NaOH]_{t→∞} Concentración de hidróxido de sodio cuando de reacción es muy grande, por lo tanto, tiende al infinito.

XXIV

GLOSARIO

AC Alternating current (corriente alterna).

AISI American Iron and Steel Institute (Instituto Americano del Hierro y el Acero).

Anulo Palabra utilizada en el argot de transferencia de calor para referirse al tubo exterior de un conjunto de tubos concéntricos.

API American Petroleum Institute (Instituto Americano del Petróleo).

ASME American Society of Mechanical Engineers (Sociedad Americana de Ingenieros Mecánicos).

ASTM American Society for Testing and Materials (Sociedad Americana para Pruebas y Materiales).

AWS American Welding Society (Sociedad de Soldadura Americana).

Correlación de Correlación empírica utilizada para calcular el **Gnielinski** número de Nusselt en conductos internos bajo flujo turbulento.

XXV

CPVC Es un homopolímero de PVC que ha sido sometido a una reacción de cloración. Típicamente, el cloro y el PVC reaccionan de acuerdo con un mecanismo básico de radicales libres, que puede lograrse mediante diversos enfoques que utilizan energía térmica y/o UV.

DC Direct Current (corriente directa).

Enchaquetamiento Palabra utilizada en el argot de transferencia de calor para referirse a la parte externa de un intercambiador de calor por donde circula un fluido. En este trabajo de graduación corresponde al espacio entre el tubo del anulo y el tubo del reactor. Su propósito es contener al fluido de intercambio de calor y crear un área de contacto térmico.

Ferrula Es un accesorio mecánico utilizado en tuberías para unión, fijación y sellado de tubos. Son anillos angostos circulares que generalmente se sueldan a los tubos, luego son fijados mediante una abrazadera

y se sellan con empaques.

Gritt Palabra utilizada en la industria del acero inoxidable para describir el acabado, pulido y tipo de superficie en aceros inoxidables desde los de tipo decorativo a los aceros inoxidables tipo sanitario.

XXVI

Joule Es una unidad derivada del sistema internacional para medir energía, trabajo y calor.

Mecanismo de reacción Es un postulado teórico que trata de explicar los pasos lógicos mediante los cuales una serie de reacciones elementales, intermediarios, complejos activados, entre otros, permiten explicar las características cualitativas y cuantitativas de una reacción. Los mecanismos de reacción son la base para describir la velocidad de reacción.

MMA Manual Metal Arc (Soldadura Manual de Arco de Metal). Es el tipo de soldadura más común, la característica más importante es que el arco eléctrico se produce entre la pieza y un electrodo metálico recubierto. El recubrimiento protege el interior del electrodo hasta el momento de la fusión.

PBR Packed Bed Reactor (Reactor de Lecho Empacado), es un tipo de reactor químico que utiliza una membrana o una serie de elementos que distorsionan el flujo de la reacción con el fin de controlar, aumentar el área de contacto y acelerar una reacción. Al conjunto de elementos utilizados se le denomina empaque.

Perfil longitudinal Es un diagrama utilizado en el diseño y control de **de temperaturas** intercambiadores calor para analizar las temperaturas de entrada y salida del equipo. Este diagrama sirve para calcular la diferencia de temperatura media logarítmica.

PFR Plug Flow Reactor (Reactor de Flujo Tapón), es un tipo de reactor químico cuya característica principal es que este modelo supone un flujo ideal de pistón, y la conversión es en función de la posición. En este tipo de reactor la composición del fluido varía de un punto a otro a través de la dirección del flujo, esto implica que el balance para un componente dado de la reacción química implicada debe realizarse en un elemento diferencial de volumen. Por lo que su análisis requiere de conocimientos de termodinámica, cinética química, transferencia de masa y energía, mecánica de fluidos y matemática diferencial.

Picnómetro Es un instrumento que sirve para determinar la densidad. Consta de un envase con un volumen calibrado y dispone de un tapón provisto de un finísimo capilar, de tal manera que puede obtenerse un volumen con gran precisión. Esto permite medir la densidad de un fluido.

PVC Policloruro de vinilo es el producto de la polimerización del monómero de cloruro de vinilo. En

la industria existen dos tipos de PVC: flexible y rígido.

Este último es el utilizado en tuberías para transporte de fluidos.

Reacción Se le llama así a cualquier reacción química que no **endotérmica** se da de forma espontánea y que necesita de energía externa para iniciar la reacción, esta energía externa se conoce como energía de activación.

Reacción Se le llama así a cualquier reacción química que **exotérmica** se da de forma espontánea dado que el cambio de energía libre de Gibbs es negativo. Este tipo de reacciones son violentas y liberan energía en forma de calor.

Reactor Se le llama así a cualquier equipo utilizado para monitorear, controlar y agilizar una reacción química, diseñado para maximizar la conversión y la selectividad de esa reacción con el menor costo posible, haciendo el proceso rentable desde el punto de vista económico.

SS Stainless Steel (Acero Inoxidable). **TDC** Transferencia de calor.

XXIX

TEMA Tubular Exchanger Manufacturers Association (Asociación de Fabricantes de Intercambiadores

Tubulares). Es la asociación comercial de los principales fabricantes de intercambiadores de calor de carcasa y tubos, que han sido pioneros en la investigación y el desarrollo de intercambiadores de

calor.

TIG Tungsten Inert Gas (Gas inerte de tungsteno), Es la sigla del tipo de soldadura que se caracteriza por el empleo de un electrodo permanente de tungsteno, y que utiliza gas de protección, que puede ser argón, helio o una mezcla de ambos. La gran ventaja de este método de soldadura es la obtención de cordones más resistentes, más dúctiles y menos sensibles a la corrosión. Por este motivo es el método de soldadura más empleado en la industria del acero inoxidable.

XXX

RESUMEN

El presente informe de graduación se realizó con el objetivo de brindar a los estudiantes del curso de Cinética de Procesos Químicos de la carrera de Ingeniería Química, un equipo para el estudio de reacciones químicas y el efecto de calor en las mismas.

Se diseñó y construyó un reactor de flujo tapón (PFR), con tubería de acero inoxidable ATSM A270 304. El equipo cuenta con un intercambiador de calor de tubos concéntricos y un sistema de calentamiento para controlar la

temperatura de la reacción.

Se validó utilizando la reacción de saponificación de acetato de etilo, con temperatura de alimentación de reactivos de 25 °C y temperatura de salida de productos de 43 °C, a una concentración equimolar de 0,3 M.

Los reactivos fueron bombeados al reactor por medio de bombas centrífugas de corriente directa, variando el voltaje se pudieron calibrar por medio de un circuito de regulación. La conversión de la reacción se monitoreó con una técnica conductimétrica, utilizando valores empíricos de conductividad en función de la concentración de hidróxido de sodio.

Se determinó que el reactor PFR es apto para estudiar la reacción de saponificación de acetato de etilo a temperatura de alimentación de reactivos de 25 °C, temperatura de salida de productos de 43 °C y concentración equimolar de 0,3 M.

XXXI

XXXII

OBJETIVOS

General

Diseñar un reactor continuo de flujo tapón (PFR) a escala laboratorio, para uso docente en el Área de Fisicoquímica de Escuela de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de San Carlos de Guatemala.

Específicos

1. Diseñar un reactor continuo de flujo tapón para la síntesis de acetato de sodio en fase líquida a escala laboratorio, usando programas de simulación computarizada.
2. Construir un reactor continuo de flujo tapón, con un sistema de bombeo centrífugo para los reactantes y con un sistema de monitoreo de las

condiciones de reacción.

3. Validar el funcionamiento del reactor continuo de flujo tapón por medio del análisis de la conversión en la síntesis de acetato de sodio, al variar la temperatura de la reacción y las concentraciones de los reactivos en proporciones no estequiométrica.
4. Desarrollar una práctica de laboratorio donde se estudie la síntesis del acetato de sodio por medio del reactor continuo de flujo tapón, para el curso de Cinética de Procesos Químicos.

XXXIII

5. Redactar un manual de operación del reactor continuo de flujo tapón.

XXXIV

INTRODUCCIÓN

El Laboratorio de Fisicoquímica de la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos de Guatemala no cuenta con un reactor PFR para estudio de reacciones químicas. Aunque se han realizado investigaciones para

diseñar y construir reactores a lo largo de más de dos décadas, los mismos han dejado de funcionar y actualmente son obsoletos.

Se busca diseñar, construir y validar el funcionamiento de un reactor PFR a escala laboratorio, con el fin de utilizarlo posteriormente para el estudio de velocidad, conversión y selectividad de diferentes reacciones a distintas temperaturas de operación, además de estudiar el efecto de calor en las reacciones. El diseño del reactor tendrá bases teóricas de flujo de fluidos, transferencia de masa y energía, transferencia de calor, cinética de química, matemática diferencial, balances de masas y energía. También se recurre a modelos empíricos para el cálculo del número de Nusselt, coeficiente de fricción de Darcy, constante de velocidad de reacción y constante de equilibrio de reacción.

El diseño se limita a la escala laboratorio. Se dimensionará el reactor, se realizará el dimensionamiento del intercambiador de calor. Se realizará un análisis para determinar los materiales de construcción.

Se construirá el reactor empleando las técnicas de mecanizado, corte, soldadura MMA, soldadura TIG, caracterizando el equipo por medio de planos del reactor, planos de soportes, planos de cuerpo del reactor, plano eléctrico,

XXXV

fotografías. Además, se creará un manual de operación y mantenimiento del reactor, donde se establecerán procedimientos estándares de operación.

La reacción estudiada es la saponificación del acetato de etilo. Para validar el funcionamiento del equipo diseñado y construido, se utilizará una técnica conductimétrica para determinar la conversión a la salida del reactor. Los valores obtenidos se compararán con el valor teórico de diseño.

Se incluye una propuesta de práctica de laboratorio para implementar el uso del reactor en el curso Cinética de Procesos Químicos de la carrera de Ingeniería Química.

XXXVI

1. ANTECEDENTES

En 2016, el estudiante de ingeniería química, Guillermo Nieva García Villaraco, de la Universidad Politécnica de Madrid, España, realizó un estudio titulado “Chem. Reactor Simulator: Herramienta de simulación de CSTR como apoyo a la docencia”. En este trabajo se elaboró una herramienta virtual a través de una interfaz gráfica (MATLAB, “GUI”), para simular un reactor químico CSTR en el que se llevaba a cabo la reacción de saponificación de Acetato de Etilo con Hidróxido de Sodio, esta simulación está compuesta por un reactor CSTR, un depósito con sistema de agitación, y un enchaquetamiento que permitía controlar la temperatura del proceso.

En 2014, los estudiantes de ingeniería química, Jorge Aldás y Gabriel Vivar, de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, Ecuador, realizaron un estudio titulado “Diseño y construcción de un reactor semicontinuo para la

obtención de acetato de sodio”. En esta investigación se construyó un reactor de acero inoxidable grado alimenticio de 2 mm de espesor, una altura de 30 cm, diámetro de 20 cm y volumen de 9,40 l, un sistema de agitación de tipo paleta accionado por un motor de 0,24 hp y un sistema de calefacción para temperatura constante. La operación del reactor consistía en cargar el hidróxido de sodio seguido del encendido del motor de agitación y del sistema de calefacción, al alcanzar una temperatura constante, se inicia la alimentación de acetato de etilo mediante la válvula de empaques, la misma que regulaba la entrada. Para realizar la evaluación del equipo se realizó una prueba, la cual inició con un volumen de 400 ml de Hidróxido de Sodio y un volumen consumido de Acetato de Etilo de 1 340 ml dando un volumen final de 1 740 ml de Acetato de Sodio y Etanol con una concentración del reactivo limitante

1

CNaOH = 0,00332385 M y una conversión del 86 %, que representaba la transformación de los reactivos en productos.

En 2012, los estudiantes de ingeniería química, Sandra Heredia e Iván Huacho, de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, Ecuador, realizaron un estudio titulado “Diseño y construcción de un reactor de flujo pistón”. En dicho estudio diseñaron y construyeron un reactor de flujo pistón a escala laboratorio, para uso docente de reacciones químicas que se usaría posteriormente por estudiantes. El equipo fue construido de acero inoxidable 304 debido a las propiedades anticorrosivas, el cuerpo del reactor fue dispuesto de forma helicoidal con manguera de PVC transparente que permitía observar la reacción a lo largo del reactor, los reactivos eran impulsados hacia el reactor utilizando una bomba centrífuga de corriente directa, poseía accesorios de bronce para evitar pérdidas durante el funcionamiento y constaba de envases plásticos de 2 l resistentes a los reactivos utilizados. Para demostrar el funcionamiento realizaron la síntesis de acetato de sodio y etanol utilizando la reacción de hidróxido de sodio 0,038 M y acetato de etilo 0,038 M. Por medio de análisis de parámetros entre la literatura y los determinados experimentalmente se concluyó que las condiciones ideales de operación eran: 21 °C, un flujo de alimentación de $7,32 \times 10^{-4} \text{ m}^3$ de cada reactivo, y un tiempo de residencia de 47,57 s. En este estudio se obtuvo una conversión de 21 % y una concentración final de 0,029 M.

En 2012, los estudiantes de ingeniería electrónica, Remberto Cuadrado y

Teddy Cañavera, de la Universidad Tecnológica de Bolívar, realizaron un estudio titulado “Simulación con MATLAB y SCILAB de un reactor tipo tanque agitado (CSTR)”. En el realizaron la simulación de un reactor CSTR utilizando dos herramientas informáticas, analizaron los errores experimentales de los datos de conversión respecto los datos teóricos, también analizaron los tiempos

2

de cálculo y versatilidad de los programas para calcular los tiempos de residencia, concentraciones, calor transferido, entre otros.

Otra investigación bajo la temática de simulación se realizó en 2011, por Oscar Núñez y Carlos Cabrera, cuya investigación titulada “Comportamiento dinámico de la saponificación del Acetato de Etilo en un reactor de tanque con reacción continua” estudian la creación de un programa para simular el comportamiento dinámico de un reactor de tanque con reacción continua (CSTR), en la construcción del programa se emplea el software MATLAB y Simulink. Para la simulación de la reacción de saponificación se introdujeron 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 cambian los datos de las variables enunciadas para simular y observar, mediante gráficas, las concentraciones del acetato de etilo, el Hidróxido de Sodio, el Acetato de Sodio y el Alcohol etílico en función del tiempo del progreso, así como otras reacciones similares cuyas constantes cinéticas son conocidas.

En la Facultad de Ingeniería de la Universidad San Carlos de Guatemala, se han realizado diversas investigaciones de reactores por medio de trabajos de graduación de estudiantes de pregrado, las cuales han abarcado partes del proceso del diseño de un reactor, dichas investigaciones se muestran a continuación.

El estudio de investigación más reciente en el tema de diseño de reactores en la Universidad San Carlos de Guatemala se realizó en 2009, por el estudiante de ingeniería química, Diego Bernardo Lainfiesta López, en cuyo trabajo de graduación “Diseño, construcción y evaluación de un reactor flujo pistón de forma helicoidal escala laboratorio” realiza un estudio para proveer

una herramienta docente a la Escuela de Ingeniería Química. El reactor fue diseñado para evaluarse con la reacción de hidrólisis alcalina del acetato de etilo, esta reacción es fácil de estudiar y controlar. La reacción es casi isotérmica.

El reactor tubular contaba con un volumen de 0,825 l y una longitud de 26,05 m dispuesta helicoidalmente, estaba diseñado para un flujo volumétrico total de $20,73 \text{ cm}^3/\text{s}$ en régimen turbulento y poseía seis muestreadores a distancias equidistantes a lo largo del reactor. Casi la totalidad de la estructura del reactor era translúcida, lo cual permitía observar el flujo de reactivos y productos a través de él. Tenía una capacidad de almacenamiento de reactivos de 2 l por reactivos y un colector de productos de 5 l. El flujo volumétrico era variable gracias a reóstatos conectados a las bombas centrífugas. Para la detección de la fracción de conversión, se utilizó un conductímetro Hanna HI 9813. Este poseía un rango de lectura de 0 hasta 4 mS/cm . Debido a esta característica se utilizó tres concentraciones de iniciales de reactivos 0,038 M, 0,03 M y 0,025 M respectivamente, las cuales arrojaban conversiones dentro de la capacidad de detección del instrumento.

Las soluciones de hidróxido de sodio y acetato de etilo se bombearon a una tasa de flujo igual a $10,365 \text{ cm}^3/\text{s}$ esto implicaba un flujo total de reactivos de $20,73 \text{ cm}^3/\text{s}$, para ello se realizaron calibraciones de las bombas centrífugas a diferentes voltajes. Hasta que se determinó un voltaje de operación igual a 3,96 V para la bomba 1 y 3,67 V para la bomba 2.

En 2009, el estudiante de ingeniería química, Sergio Fernando Hernández Ávila, realizó un estudio titulado “Evaluación de la cinética de hidrólisis del sistema $\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7\text{-HCl}$, monitoreado por espectrofotometría (VIS), utilizando un reactor discontinuo –CSTR–, para diferentes condiciones de operación, a nivel

de laboratorio”. Este trabajo de graduación se realizó, la evaluación de la cinética de hidrólisis ácida del Pirofosfato Sódico a Ortofosfato, mediante el estudio de la evolución de la reacción en función de diferentes concentraciones molares de reactante y reactivo, y bajo diferentes temperaturas de reacción.

En lo que respecta a investigaciones realizadas por científicos de diversos centros de investigaciones se puede mencionar el estudio de Eliana Peña T, et al. Realizado en 2008 “Modelado de un reactor químico tipo CSTR y evaluación del control predictivo aplicando Matlab-Simulink”. En él se estudia un reactor tipo tanque continuamente agitado (CSTR), a partir de su modelo matemático en variables de espacio de estado. Se utilizó un modelo no lineal para realizar pruebas de lazo abierto del sistema y por último se diseñó un control predictivo por modelo (MPC), este se compara con una estrategia de control proporcional.

En 2007, el estudiante de ingeniería química, Zaid Jacobo Lou Díaz, realizó un estudio titulado “Validación del uso de un reactor modificado de tipo discontinuo para la hidrólisis alcalina del acetato de etilo monitoreada por conductimetría para ser utilizado en estudios de cinética química”. En donde se realizó la evaluación de una técnica conductimétrica para determinar experimentalmente los valores del orden de reacción, velocidad específica de reacción y energía de activación, los cuales comparó con valores teóricos de diferentes fuentes. El objetivo principal del estudio era poner en funcionamiento un reactor NBSC que estaba abandonado y demostrar que era apto para estudios de cinética química. El método de monitoreo utilizado fue el conductimétrico, lo que permitió obtener valores de concentración instantánea a partir de curvas de calibración. Además, se desarrolló una animación por computadora en tres dimensiones para poder entender el mecanismo de reacción con el programa Flash MX. También se elaboró los planos del reactor y el manual de uso del reactor y su equipo auxiliar.

5

El único trabajo de reactores continuos bajo temática de investigación realizado en la Universidad Rafael Landívar. En 2007, el estudiante Víctor Demetrio Marroquín Aguilar, realizó una investigación titulada “Diseño de la práctica “Hidrólisis alcalina del Acetato de Etilo” para el reactor computarizado continuo del laboratorio de operaciones unitarias de la Universidad Rafael Landívar”. En esta investigación se diseñó una práctica de laboratorio para estudiantes, que consistía en determinar la velocidad de reacción de la Hidrólisis alcalina del Acetato de Sodio, utilizando para ello un reactor computarizado continuo Recla1/EV, la primera fase del estudio consistió en complementar la instalación del equipo implementando un baño termostático al

tanque del reactor. En la segunda fase se realizaron las consultas sobre la teoría de la conductividad eléctrica en soluciones como técnica de valoración de sustancias, debido a que el equipo utilizado operaba bajo dicho principio.

En lo que respecta a reactores diseñados por profesionales de la Facultad de Ingeniería se puede mencionar el aporte hecho por el Ing. Cesar García Guerra, luego de haber participado en un seminario sobre “La enseñanza de la ingeniería química” en 1982. Fue realizado en la Universidad de Puebla, México, y en consecuencia efectuó la implementación y diseño de un reactor tubular a escala laboratorio. Con esto diversos estudiantes pregrado realizaron posteriormente estudios de investigación hasta que el reactor fue desmontado en el año. Dicho reactor fue construido con vidrio pírex, constaba de ocho condensadores recortados en ambos extremos y soldados, fragmentados de varilla de vidrio del mismo diámetro que el conducto interno del condensador (0,009 m diámetro interno y 0,011 m diámetro externo), con longitud de 0,455 m.

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Cinética de reacción

La cinética química es el estudio de las velocidades de reacciones químicas y los mecanismos de reacción. En el estudio de la ingeniería de las reacciones químicas, se combina el estudio de la cinética química con los reactores en los cuales se llevan a cabo dichos procesos. El diseño de reactores y la cinética química constituyen la base de la producción de casi todos los productos químicos industriales, tales como la manufactura del anhídrido ftálico, que es usado en la producción de colorantes industriales.

Son principalmente el conocimiento de la cinética química y el diseño de reactores los elementos que diferencian al ingeniero químico de otros

ingenieros. En la industria, los reactores son el pilar manufacturero de diversos productos de venta común, en la producción de cementos se utiliza un reactor tubular para el calentamiento de la molienda cruda y llevar a cabo la clinkerización aunque en el argot de los ingenieros cementeros es llamado horno rotatorio.

La selección de un sistema de reacción que opere de la forma más segura y eficiente puede ser la clave para el éxito o el fracaso económico de una planta química. Por ejemplo, si un sistema de reacción produce una gran cantidad de producto indeseable, la purificación y separación subsecuentes del producto deseado ocasionarían que todo el proceso fuera no factible desde el punto de vista económico.

7

2.1.1. Teoría de colisiones

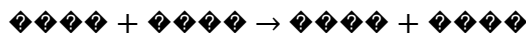
La teoría de colisiones ofrece la explicación cuantitativa más simple de las velocidades de reacción, aunque sólo se puede utilizar para la discusión de reacciones entre especies sencillas en fase gas. Las reacciones en disolución se pueden clasificar en dos tipos: las controladas por difusión, cuya velocidad se puede cuantificar utilizando la ecuación de difusión, y las controladas por activación. En la teoría del complejo activado se supone que las moléculas de reactivo forman un complejo que se puede estudiar analizando la población de sus niveles energéticos. Esta teoría proporciona una aproximación termodinámica a las velocidades de reacción que permite expresar la constante de velocidad en función de parámetros termodinámicos, hecho que resulta útil para parametrizar las velocidades de las reacciones en disolución. El nivel más alto de sofisticación se obtiene utilizando las superficies de energía potencial y analizando el movimiento de las moléculas a través de estas superficies. Este análisis proporciona una descripción detallada de las distintas etapas por las que transcurre una reacción.

2.1.2. Velocidad de reacción

La velocidad de reacción es la variación que experimenta la concentración de uno de los reactivos o de los productos de la reacción en la unidad de

tiempo. La forma habitual de expresar la concentración es la molaridad.

La velocidad de reacción se expresa siempre con referencia a una de las sustancias que intervienen en la reacción. Hay que considerar una reacción general, del tipo:



8

La velocidad respecto a “A” es:

$$v_A = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt}$$

El signo menos se pone para obtener velocidades positivas, pues las concentraciones de A y B disminuyen con el tiempo. Los corchetes indican concentraciones molares.

2.1.3. Ley de velocidad

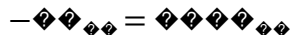
Una reacción homogénea es aquella que se realiza en una sola fase. Una reacción heterogénea incluye más de una fase, cuya reacción usualmente ocurre en la interfaz entre las fases. Una reacción irreversible es la que procede únicamente en una dirección y continúa en ese sentido hasta que los reactivos se agotan. Una reacción reversible puede proceder en cualquier sentido, dependiendo de las concentraciones de reactivos y productos en relación con las concentraciones correspondientes en el equilibrio. Una reacción irreversible se comporta como si no hubiera condiciones de equilibrio. En términos estrictos, ninguna reacción química es totalmente irreversible. No obstante, en muchas reacciones el punto de equilibrio se encuentra tan lejos hacia el lado de los productos que dichas reacciones se tratan como irreversibles¹.

La molecularidad de una reacción es el número de átomos, iones o moléculas que participan (efectúan colisiones) en un paso de la reacción. Los términos; unimolecular, bimolecular y termolecular se refieren, respectivamente, a reacciones que incluyen; uno, dos o tres átomos (o moléculas) que interaccionan o chocan en algún paso de reacción. El ejemplo más común de reacción unimolecular es la desintegración radiactiva; por ejemplo, la emisión espontánea de una partícula alfa de uranio-238 para dar torio y helio:

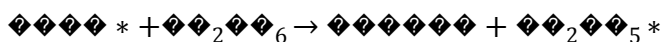


9

La velocidad de desaparición del uranio (U) es descrita por la ley de velocidad:



Las reacciones biomoleculares verdaderas que existen son reacciones que incluyen radicales libres como los siguientes:



Con la velocidad de desaparición del bromo es dada por la ley de velocidad:



2.1.3.1. Velocidad de reacción relativa

Las velocidades de reacción relativas de las diversas especies involucradas en una reacción pueden obtenerse por la relación de sus coeficientes estequiométricos. Por ejemplo, para la reacción:



Se observa que por cada mol de A que se consume, aparecen c/a moles de C. En otras palabras:

$$\frac{d[C]}{dt} = \frac{c}{a} \left(-\frac{d[A]}{dt} \right)$$

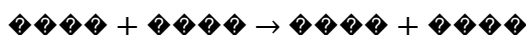
10



De manera similar, la relación entre las velocidades de formación de C y D es:



La relación puede expresarse directamente por la estequiometría de la reacción:



Para la cual:



2.1.3.2. El orden de reacción y la ley de velocidad

En las reacciones químicas que se consideren en los siguientes párrafos, se tomarán como base de cálculo la especie A, que es uno de los reactivos que están desapareciendo como resultado de la reacción. El reactivo limitante suele escogerse como base de cálculo. La velocidad de desaparición de A $-r_A$, depende de la temperatura y la composición. Para muchas reacciones, puede escribirse como el producto de una constante de velocidad de reacción k_A' y una función de las concentraciones (actividades) de las diversas especies que participan en la reacción:

$$-r_A = k_A' [A]^m [B]^n [C]^p [D]^q \dots$$

11

La ecuación algebraica que relaciona $-r_A$ con las concentraciones de las especies se llama expresión cinética o ley de velocidad. La velocidad de reacción específica (también llamada constante de velocidad), k_A , igual que la velocidad de reacción $-r_A$, siempre se refiere a una especie particular en la reacción y normalmente debe llevar el subíndice correspondiente a esa especie. Sin embargo, para reacciones en las cuales el coeficiente estequiométrico es 1 para todas las especies que intervienen en la reacción, se puede omitir el subíndice de la velocidad de reacción específica.

2.1.3.2.1. Modelos de ley de potencia y leyes de velocidad elementales

La dependencia de la velocidad de reacción, $-r_A$ en las concentraciones de las especies presentes, $f_n(C_j)$, casi sin excepción es determinada por observación experimental. Aunque la dependencia funcional sobre la concentración puede postularse a partir de la teoría, se requieren experimentos para confirmar la forma propuesta. Una de las formas generales más comunes de esta dependencia es el modelo de ley de potencia².

Aquí, la ley de velocidad es el producto de las concentraciones de las especies individuales reaccionantes, cada una de ellas elevada a una potencia, por ejemplo:

$$-r_A = k C_A^\alpha C_B^\beta$$

Los exponentes de las concentraciones en la ecuación (3-3) conducen al concepto de orden de reacción. El orden de una reacción se refiere a las potencias a las cuales se elevan las concentraciones en la ley de velocidad cinética. En la ecuación anterior, la reacción es de orden α , con respecto al

²FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 82.

12

reactivo A, y de orden β , con respecto al reactivo B. El orden global de la reacción, n , es

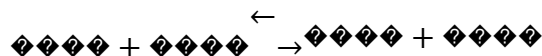
$$n = \alpha + \beta$$

Las unidades de $-r_A$ siempre se dan en términos de concentración por unidad de tiempo, mientras que las unidades de la velocidad de reacción específica k , varían con el orden de la reacción.

2.1.3.2.2. Reacciones reversibles

Todas las leyes de velocidad de reacciones reversibles deben reducirse a la relación termodinámica que relaciona las concentraciones de las especies en el equilibrio. En el equilibrio, la velocidad de reacción es idéntica a cero para

todas las especies (es decir, $\sum \nu_i = 0$). O sea, para la reacción general:



Las concentraciones en el equilibrio están relacionadas por la relación termodinámica para la constante de equilibrio K_c :

$$K_c = \frac{\nu_3^{\nu_3} \nu_4^{\nu_4}}{\nu_1^{\nu_1} \nu_2^{\nu_2}}$$

La relación de la constante de ley de velocidad hacia la izquierda y hacia la derecha por la constante de equilibrio, se obtiene:

$$-k_1 = k_2 (K_c^{\nu_1} - K_c^{\nu_2})$$

13

Cuando no hay cambio en el número total de moles y el término de capacidad calorífica $\Delta C_p = 0$, la dependencia de la temperatura de la constante de concentración en el equilibrio es:

$$K_c(T) = K_c(T_1) \exp \left[\frac{\Delta H^{\circ}}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T} \right) \right]$$

Por lo tanto, si se conoce la constante de equilibrio a una temperatura T_1 y el calor de reacción ΔH° , se puede calcular la constante de equilibrio a cualquier otra temperatura T .

2.2. Reacciones químicas

Una reacción química es la manifestación de un cambio químico, mediante el cual una sustancia o varias sustancias, denominadas reactivos, originan o se transforman en otras distintas, llamadas productos de la reacción.

En un cambio químico unas sustancias puras se transforman en otras diferentes. Para ello, tiene lugar una reordenación de los átomos de las distintas sustancias puras que intervienen y, por tanto, hay una modificación de los

enlaces químicos entre las mismas.

En el lenguaje químico, la expresión de una reacción química se llama ecuación química y muestra lo que sucede en la transformación. En una ecuación química correctamente expresada, el número total de átomos de cada elemento químico es igual en los reactivos y en los productos, por lo que cada fórmula está acompañada de su coeficiente estequiométrico, para mostrar así las cantidades de las distintas sustancias que interviene en la reacción química. Se dice entonces que la ecuación química está ajustada. Si no hay coeficiente

14

estequiométrico delante de la fórmula de una sustancia se entiende que el coeficiente tiene el valor de la unidad.

2.2.1. Clasificación de las reacciones

Existen diversos criterios para clasificar las reacciones químicas.

2.2.1.1. Desde el punto de vista estructural

- Reacciones de síntesis o de combinación, donde unos reactivos se combinan entre sí para originar un producto diferente. De forma general se expresan mediante la ecuación: $A + B \rightarrow C$.
- Reacciones de descomposición, que pueden ser de dos tipos:
 - Reacción de descomposición simple, que es la reacción inversa a la de síntesis, donde $A \rightarrow B + C$.
 - Reacción de descomposición mediante un reactivo, representada por:
 $A + B \rightarrow C + D$, donde el compuesto químico A reacciona con el reactivo B para originar los compuestos químicos C y D .
- Reacciones de sustitución o desplazamiento, representadas por la ecuación:
 $A + B \rightarrow C + D$, donde el compuesto químico A reacciona con el reactivo B para formar el compuesto químico C y liberar D . Mediante este tipo de reacciones químicas, los elementos químicos más reactivos toman el puesto de los que son menos reactivos.
- Reacciones de doble sustitución con un intercambio entre los elementos químicos o grupos de elementos de las sustancias que intervienen en la

reacción química y se representan mediante: $\diamond\diamond\diamond\diamond + \diamond\diamond\diamond\diamond \rightarrow \diamond\diamond\diamond\diamond + \diamond\diamond\diamond\diamond$.

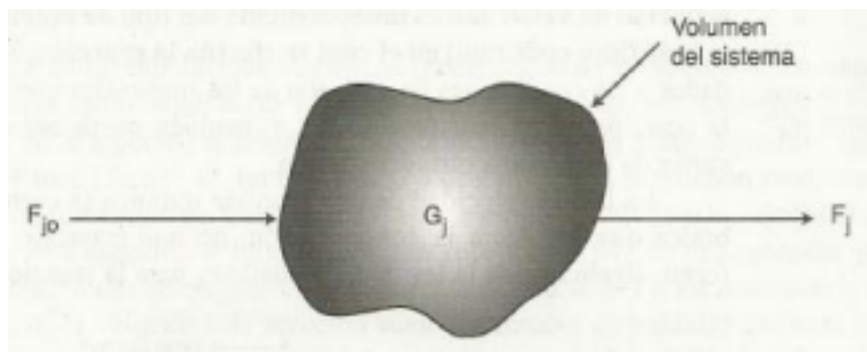
2.3. Reactores químicos

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

2.3.1. Balance general de masa

Para realizar un balance de moles en cualquier sistema, primero hay que especificar las fronteras del sistema. El volumen encerrado por dichas fronteras se conoce como volumen del sistema. Un balance de moles para la especie j en un volumen del sistema, donde j representa una especie química específica de interés; por ejemplo, agua o NaOH.

Figura 1. **Balance en el volumen del sistema**



Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 8.

La velocidad de generación $\Delta\diamond\diamond\diamond\diamond$, en términos de $\diamond\diamond\diamond_1$ y el subvolumen $\Delta\diamond\diamond_1$, es:

$$\Delta\diamond\diamond\diamond_1 = \diamond\diamond\diamond_1 \Delta\diamond\diamond_1$$

Se puede escribir expresiones similares para $\Delta\diamond\diamond\diamond_2$ y los otros

subvolúmenes del sistema ΔV_{ii} . La velocidad total de generación dentro del volumen del sistema es la suma de todas las velocidades de generación en cada uno de los subvolúmenes. Si el volumen total del sistema se divide en N subvolúmenes, la velocidad total de generación es:

$$r_{t,i} = \sum_{i=1}^N r_{ii} \Delta V_{ii}$$

Tomando los límites adecuados y usando la definición de una integral, es posible escribir la ecuación anterior en la forma:

$$r_{t,i} = \int_V r_{ii} dV$$

En esta ecuación se ve que r_{ii} será una función indirecta de la posición, porque las propiedades de los materiales que reaccionan y las condiciones de reacción pueden tener diferentes valores en distintos puntos dentro del reactor.

Ahora se sustituye r_{ii} en la ecuación siguiente:

$$r_{ii,0} + r_{ii} + r_{ii} = r_{ii}$$

Por su forma integral para obtener una forma de la ecuación general del balance de moles para cualquier especie química ii que esté entrando, saliendo, reaccionando o acumulándose dentro de cualquier volumen del sistema V .

$$r_{ii,0} + r_{ii} + \int_V r_{ii} dV = r_{ii}$$

A partir de esta ecuación general de balances de moles se puede desarrollar las ecuaciones de diseño para diversos tipos de reactores industriales: discontinuo, semicontinuo y de flujo continuo. Al evaluar tales ecuaciones es posible determinar el tiempo o el volumen de reactor necesarios para convertir una cantidad específica de reactivos en productos.

2.3.2. Reactores ideales

Se denomina reactor ideal al cual está diseñado bajo condiciones teóricas que no se consideran factores externos como la variación de la temperatura ambiental o picos de presión en los reactores, lo que puede desplazar el equilibrio de una reacción y así modificar la conversión teórica calculada.

2.3.3. Clasificación de los reactores

A continuación, se muestran los tipos más comunes de

reactores. **2.3.3.1. Reactores intermitentes**

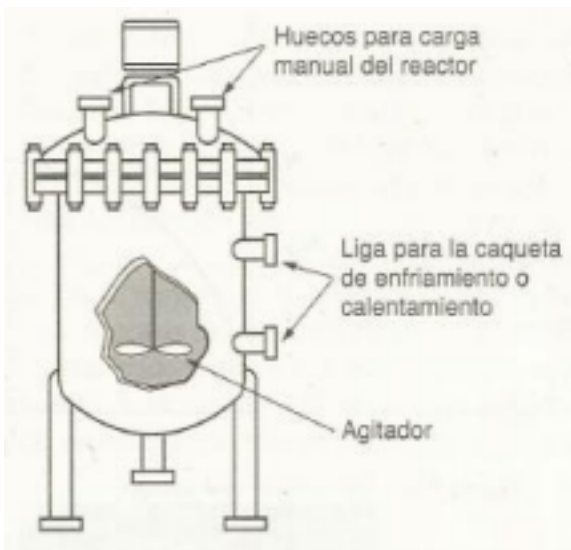
(batch)

Un reactor intermitente se emplea para operaciones a pequeña escala para probar nuevos procesos que aún no se han desarrollado en su totalidad, para fabricar productos costosos y para procesos difíciles de convertir en operaciones continuas. El reactor se carga (es decir, se llena) por los huecos de la parte superior. El reactor intermitente tiene la ventaja de permitir una alta conversión, que puede obtenerse dejando el reactivo dentro del reactor por periodos prolongados, pero también cuenta con la desventaja del alto costo de

18

mano de obra por lote, la variabilidad del producto de un lote a otro y la dificultad para producción a gran escala.

Figura 2. Reactor simple intermitente homogéneo



Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 11.

2.3.3.2. Reactores de flujo continuo

Los reactores de flujo continuo casi siempre se operan en estado estacionario. Dentro de esta categoría hay tres tipos principales: el reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR), el reactor de flujo tapón (PFR) que se tratara en el inciso 2.3.5 y el reactor empacado (PBR).

2.3.3.2.1. Reactor tubular (PFR)

Es un reactor de uso común en la industria. Consta de un tubo cilíndrico y normalmente opera en esto estacionario, igual que el CSTR. Los reactores tubulares se emplean con mayor frecuencia para reacciones en fase gas.

19

En el reactor tubular los materiales que reaccionan se consumen de manera continua a medida que fluyen a lo largo del reactor. Al modelar el reactor tubular se asume que la concentración varía continuamente en la dirección axial a todo lo largo del reactor. Por consiguiente, la velocidad de reacción, que es una función de la concentración para todas las reacciones, excepto la de orden cero, también variará axialmente.

2.3.3.2.2. Reactor CSTR

Figura 3. Esquema de un reactor CSTR.



Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 18.

Un reactor de uso común en procesos industriales es el reactor continuo de mezcla perfecta.

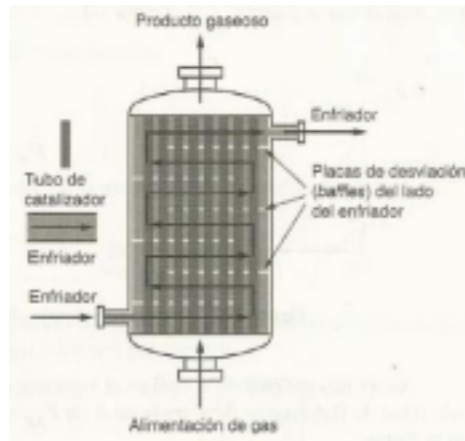
20

Se llama reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR), o reactor de retromezcla (backmix), y se emplea sobre todo para reacciones en fase líquida. Normalmente se opera en estado estacionario y se asumen que produce una mezcla perfecta. No hay dependencia del tiempo o de la posición en la temperatura, la concentración o de la velocidad de reacción del reactor. Es decir, todas las variables son iguales en todos los puntos del interior del reactor. Como la temperatura y la concentración son también idénticas en todo el interior del recipiente de reacción, son las mismas en el punto de salida. Por lo tanto, la temperatura y la concentración de la corriente de salida se toman en el modelo como si fueran iguales a aquéllas en el interior del reactor. Para sistemas donde el mezclado es altamente no ideal, este modelo de mezcla perfecta resulta inadecuado, por lo que debemos recurrir a técnicas de modelaje, como distribución de tiempo de residencia, para obtener resultados significativos³.

2.3.3.2.3. Reactor de lecho empacado

La principal diferencia entre los cálculos de diseño de reactores en los que intervienen reacciones homogéneas y aquellos en los cuales se realizan reacciones heterogéneas, fluido-sólido, es que en el segundo caso la reacción tiene lugar sobre la superficie del catalizador. Por consiguiente, la velocidad de reacción se basa en la masa de catalizador sólido ♦♦, y no el volumen de reactor ♦♦.

Figura 4. **Reactor longitudinal de lecho empacado**



Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 18.

³FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 18.

21

Todos los reactores descritos anteriormente se consideran ideales.

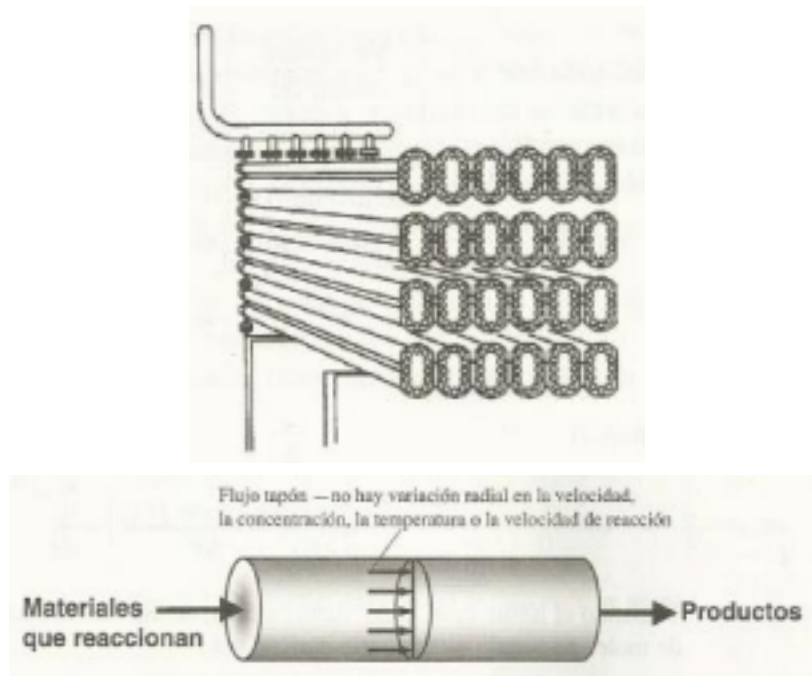
2.3.4. Funciones de un reactor químico

La función principal de un reactor químico es proporcionar un buen contacto de los reactivos para reducir el tiempo de reacción al mínimo, logrando al mismo tiempo una conversión adecuada y económicamente rentable para un proceso.

En algunos casos el reactor cuenta con sistemas auxiliares que sirven para monitorear la reacción, además de sistemas de control de flujos, entre otros.

2.3.5. Reactores de flujo tapón (PFR)

Figura 5. **Reactor PFR**



Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 11.

22

2.3.6. Consideraciones entre un reactor de flujo continuo (PFR)

Cuando la ecuación general de balance de moles:

$$\frac{dF_j}{dt} + F_j \frac{dV}{V} = \sum_i F_i \frac{dV}{V} + \int \frac{dV}{V}$$

Se aplica a un CSTR que opera en estado estacionario (es decir, las condiciones no cambian con el tiempo),

$$\sum_i F_i \frac{dV}{V} = 0$$

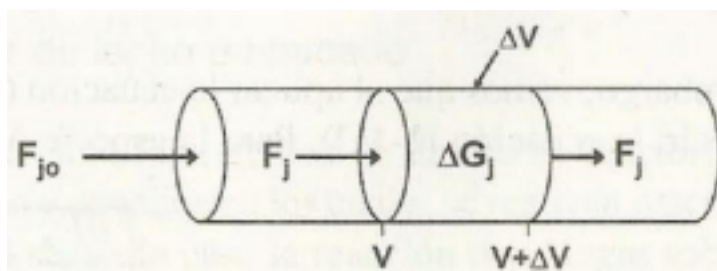
La ecuación que se emplea para diseñar reactores tubulares en estado estacionario puede desarrollarse de dos modos: (1) directamente a partir de la ecuación del balance general de moles, diferenciando con respecto al volumen V , o (2) a partir de un balance molar para la especie j en un segmento diferencial del volumen del reactor ΔV . Realizando el segundo método para llegar a la forma diferencial del balance de moles del PFR. El volumen diferencial ΔV , que se muestra en la siguiente figura, se elegirá de manera que

sea suficientemente pequeño para que no haya variaciones espaciales en la velocidad de reacción dentro de este volumen. Por lo tanto, el término de generación ΔG_j es:

$$\Delta G_j = \int_V \Delta g_j dV$$

23

Figura 6. **Balance de moles para la especie j en el volumen ΔV**



Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 15.

Dividiendo entre ΔV y reordenando:

$$\left[\frac{F_j}{\Delta V} \right]_{V+\Delta V} - \left[\frac{F_j}{\Delta V} \right]_V + \Delta g_j = 0$$

El término entre corchetes se asemeja a la definición de la

derivada: $\lim_{\Delta V \rightarrow 0} \left[\frac{F_j}{\Delta V} \right]_{V+\Delta V} - \left[\frac{F_j}{\Delta V} \right]_V$

$$\lim_{\Delta V \rightarrow 0} \left[\frac{F_j}{\Delta V} \right]_{V+\Delta V} - \left[\frac{F_j}{\Delta V} \right]_V = \frac{dF_j}{dV}$$

Tomando el límite cuando ΔV tiende a cero, se obtiene la forma diferencial del balance de moles en estado estacionario para un PFR:

$$\frac{dF_j}{dV} + \Delta g_j = 0$$

$$\tau = \frac{V}{v_0}$$

2.3.7. Definiciones adicionales

Es necesario definir algunos términos y ecuaciones de uso común en ingeniería de reacciones químicas.

24

2.3.7.1. Espacio-tiempo

También conocido como tiempo de residencia τ , se obtiene dividiendo el volumen del reactor entre la velocidad de flujo volumétrico que entra al reactor:

$$\tau = \frac{V}{v_0}$$

“El espacio-tiempo es el tiempo necesario para procesar un volumen de reactor de líquido basado en las condiciones de entrada”⁴.

2.3.7.2. Velocidad espacial

La velocidad espacial (sv), que se define como sigue:

$$sv = \frac{v_0}{V}$$

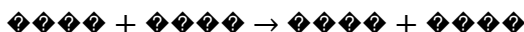
Aunque algunos la definen de la siguiente manera:

$$sv = \frac{1}{\tau}$$

Podría considerarse a primera vista como el recíproco del espacio-tiempo. Sin embargo, llega a haber una diferencia en las definiciones de ambas cantidades. En el espacio-tiempo, la velocidad de flujo volumétrico entrante se mide en las condiciones de entrada, pero en la velocidad espacial a menudo se emplean otras condiciones.

2.3.7.3. Conversión

Para definir la conversión, se debe elegir uno de los materiales que reaccionan como base de cálculo y después se relacionarán las otras especies que participan en la reacción con esta base. Prácticamente en todos los casos es mejor elegir el reactivo limitante como base de cálculo. Se desarrollarán las relaciones estequiométricas y las ecuaciones de diseño considerando la reacción general.



Las letras mayúsculas representan especies químicas y las minúsculas, coeficientes estequiométricos. Tomando la especie A como base de cálculo, se divide la expresión de la reacción entre el coeficiente estequiométrico de la especie A, para expresarla como sigue:



Con la finalidad de tener todas las cantidades “por mol de A”, este es el reactivo limitante.

Ahora se pregunta: “¿Cómo se podría cuantificar el grado de avance de una reacción?”⁵. Una forma conveniente de responder a esto es definiendo el parámetro llamado conversión. La conversión X_A es el número de moles de A que reaccionan por mol de A alimentada al sistema:

$$X_A = \frac{\text{moles de A que reaccionan}}{\text{moles de A alimentados}}$$

⁵FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 38.

2.3.8. Constante de velocidad de reacción

La constante de velocidad de reacción k no es verdaderamente una constante, es sólo independiente de las concentraciones de las especies que interactúan en la reacción. La cantidad k es referida velocidad de reacción específica o constante de velocidad. Casi siempre depende fuertemente de la temperatura Y de que esté presente un catalizador o no, y en reacciones en fase gas puede estar en función de la presión total. En sistemas líquidos también llega a estar en función de parámetros como la fuerza iónica y la elección de disolvente. Estas otras variables normalmente exhiben un efecto mucho menor sobre la velocidad de reacción específica que la temperatura, con excepción de los disolventes supercríticos, como el agua supercrítica⁶.

Por consiguiente, para los objetivos del material aquí presentado, se asumirá que k solo depende de la temperatura. Esta suposición es válida en la mayoría de las reacciones de laboratorio e industriales, y parece funcionar bastante bien.

Fue el gran químico sueco Arrhenius quien primero sugirió que la dependencia de la velocidad de reacción específica k respecto de la temperatura, podría correlacionarse por una ecuación del tipo:

$$k(T) = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Donde:

A = Factor preexponencial o factor de frecuencia

E_a = Energía de activación, J/mol o cal/mol

R = Constante de los gases ideales = 8.314 J/mol*K

T = Temperatura absoluta, K

La ecuación anterior, conocida como la ecuación de Arrhenius, ha sido verificada empíricamente para dar el comportamiento de la mayoría de las

⁶FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 91.

constantes de velocidad de reacción con exactitud experimental en intervalos amplios de temperatura.

¿Por qué hay una energía de activación? Si los reactivos son radicales libres que esencialmente reaccionan de inmediato al chocar, hay usualmente energía de activación. Sin embargo, para la mayoría de los átomos y las moléculas que experimentan una reacción, hay una energía de activación. Dos

razones son las siguientes, para reaccionar:

- Las moléculas requieren energía para distorsionar o estirar sus enlaces de modo que puedan romperse para formar otros nuevos.
- Las fuerzas de repulsión estérica y electrónica deben ser vencidas para que las moléculas reaccionantes se acerquen.

La energía de activación puede considerarse como una barrera para la transferencia de energía (de energía cinética a energía potencial) entre moléculas reactivas y debe ser vencida. Una manera de considerar tal barrera para las reacciones es a través del uso de coordenadas de reacción. Dichas coordenadas denotan la energía potencial del sistema en función del progreso a lo largo de la trayectoria de reacción, al ir desde reactivos hasta un producto intermedio y después hacia el producto final.

Un comentario final sobre la ecuación de Arrhenius es que puede expresarse en forma más útil encontrando la velocidad de reacción específica a temperatura T_0 , esto es:

$$k(T) = \frac{k(T_0) e^{\frac{E_a}{RT_0}}}{e^{\frac{E_a}{RT}}} = k(T_0) e^{\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right)}$$

28

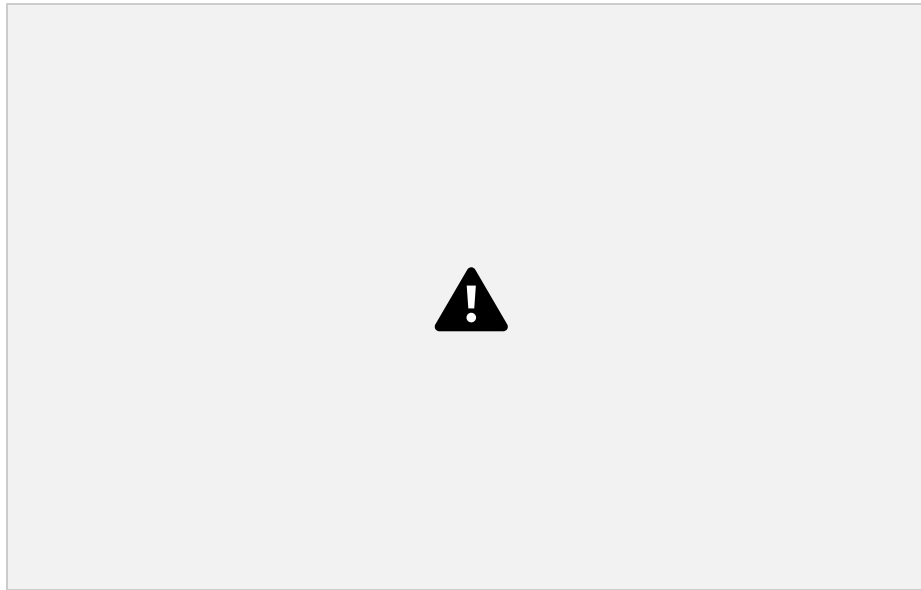
Esta ecuación dice que si se conoce la velocidad de reacción específica $k(T_0)$ a la temperatura T_0 , y se conoce la energía de activación E_a , se encuentra la velocidad de reacción específica $k(T)$ a cualquier otra temperatura T para esa reacción.

2.4. Estequiometría de un reactor continuo de flujo tapón (PFR)

La forma de la tabla estequiométrica para un sistema de flujo continuo es virtualmente idéntica a aquella para un sistema intermitente, con excepción de que se reemplaza ν_i por ν_i y por ν_i . Tomando A como base, se divide la ecuación de reacción entre el coeficiente estequiométrico de A para obtener:



Figura 7. Tabla estequiométrica para un sistema de flujo



Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 107.

29

Donde:

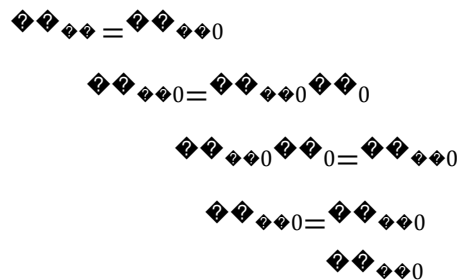
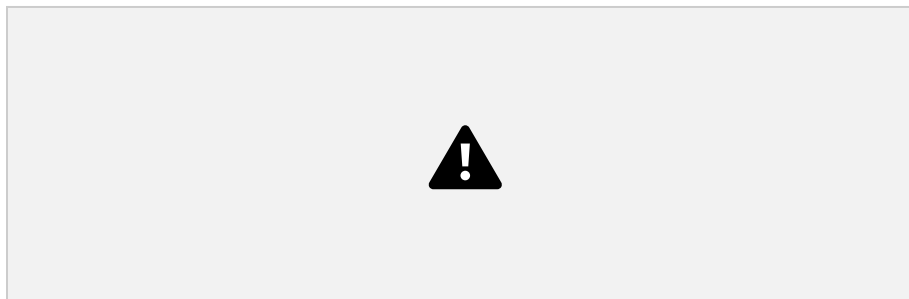


Figura 8. Variables de reactor de flujo



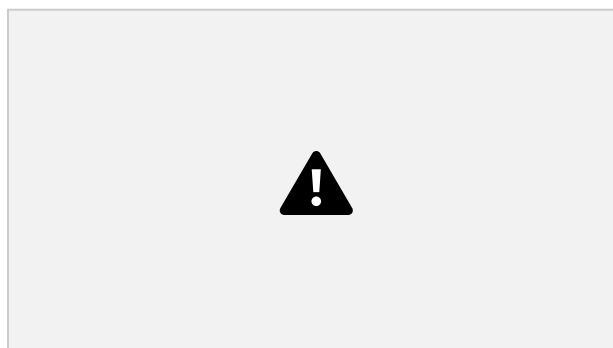
Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 106.

2.5. Efecto de calor en un PFR

Para elaborar un modelo de reactor de un PFR en el cual el calor se agrega o retira a través de las paredes cilíndricas del mismo, se asumirá que no

hay gradientes radiales en el mismo y que el flujo de calor a través de la pared por volumen unitario del reactor es como se indica en la figura siguiente.

Figura 9. **PFR con ganancia o pérdida de calor**



Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 495.

30

2.5.1. Deducción del balance de energía para un PFR

El balance de energía para el volumen ΔV con $\dot{Q}_{\text{reacción}} = 0$. La ecuación que se obtienen es:

$$\Delta \dot{Q} + \sum \dot{Q}_{\text{entrada}} - \sum \dot{Q}_{\text{salida}} = 0$$

El flujo de calor al reactor \dot{Q} se da en términos del coeficiente total de transferencia de calor U ; el área de intercambio de calor A , y la diferencia entre la temperatura ambiente, T_{ambiente} y la temperatura del reactor T .

$$\dot{Q} = UA(T_{\text{ambiente}} - T) = UA\Delta T(T_{\text{ambiente}} - T)$$

Donde a es el área de intercambio de calor por unidad de volumen del reactor para el PFR.

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= UA\Delta T(T_{\text{ambiente}} - T) \\ &= \frac{4\pi R^2 L}{V} \Delta T(T_{\text{ambiente}} - T) \\ &= \frac{4\pi R^2}{V} \Delta T(T_{\text{ambiente}} - T) \end{aligned}$$

De una serie de deducciones se obtiene la ecuación para el balance de

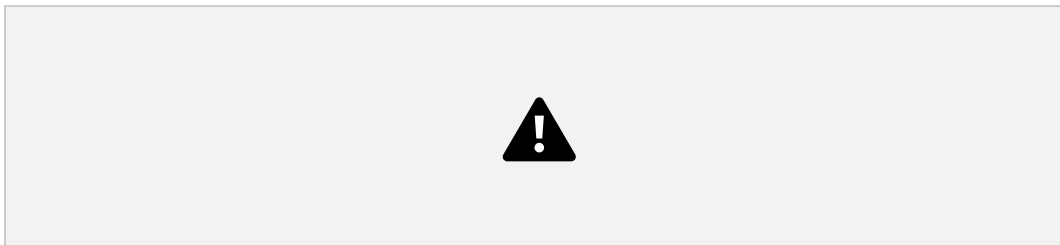
$$\dot{Q} = \dot{m} C_p (T_{out} - T_{in}) + (\dot{m} C_p) (\Delta T_{coolant})$$

$$\dot{Q} = (\sum \theta_i \dot{m}_i C_{p,i} + \dot{m} C_p) (\Delta T_{coolant})$$

2.5.2. Balance para el fluido calentador

“El fluido en la transferencia de calor será un enfriador para reacciones exotérmicas y un medio de calentamiento para reacciones endotérmicas. Si el flujo del fluido en la transferencia de calor es suficientemente alta con respecto al calor liberado (o absorbido) por la mezcla de reacción, entonces la temperatura del fluido en la transferencia de calor será constante a lo largo del reactor”⁷.

Figura 10. **Transferencia de calor en fluidos**



Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 499.

A continuación, se desarrollarán ecuaciones básicas para un enfriador utilizado para retirar calor de reacciones exotérmicas; sin embargo, tales ecuaciones serán aplicables a reacciones endotérmicas en las cuales se emplea un medio de calentamiento para suministrar calor.

Por convención, \dot{Q} es el calor agregado al sistema. A continuación, se realizará el balance para el enfriador en la sección anular entre r_1 y r_2 y entre T y $T + \Delta T$. El flujo de masa del enfriador es \dot{m}_c . Hay que considerar el caso en el que el radio externo del canal enfriador r_2 está aislado.

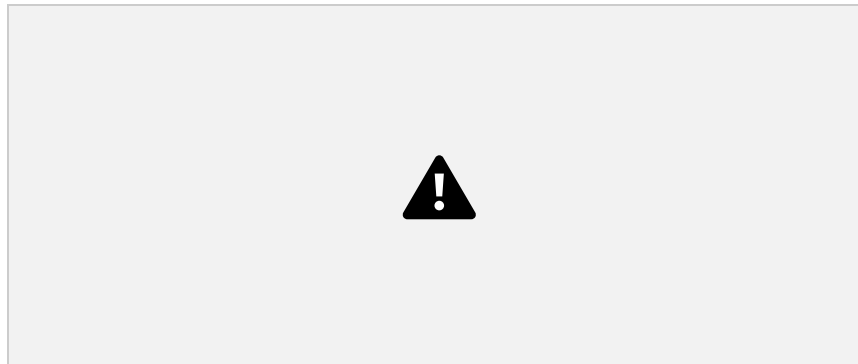
2.5.2.1. Caso a flujo co-corriente

El reactivo y el enfriador fluyen en la misma dirección, la variación de temperatura del enfriador T_c a lo largo del reactor es:

$$T_c = T_{c0} + \frac{U A}{C_p} (T - T_{c0})$$

A continuación, se muestran los perfiles de temperatura del fluido en la transferencia de calor típicos para reacciones exotérmicas y endotérmicas:

Figura 11. **Perfiles de temperatura del fluido en la transferencia de calor**



Fuente: FOGLER, Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 501.

2.6. Tipos de flujo

2.6.1. Turbulencia

La forma en la que un fluido fluye a lo largo de una tubería puede dividirse en flujo laminar y flujo turbulento. En la primera las partículas fluyen de manera ordenada mientras que en la segunda se crean cambios bruscos de presión y velocidad que tienen por consecuencia el apareamiento de vórtices de

