

PLANTEAMIENTO METODOLÓGICO PARA EL DIAGNÓSTICO DEL BANCO DE
REACTORES DE LA PLANTA PILOTO DE LA FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE
AMÉRICA BAJO LAS CONDICIONES DE DISEÑO Y OPERACIÓN
ESTABLECIDAS POR EL FABRICANTE.

FRANCISCO JAVIER GONZALEZ CHAVES
ELIZABETH MORA QUIROZ

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BOGOTÁ, D.C.
2019

PLANTEAMIENTO METODOLÓGICO PARA EL DIAGNÓSTICO DEL BANCO DE
REACTORES DE LA PLANTA PILOTO DE LA FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE
AMÉRICA BAJO LAS CONDICIONES DE DISEÑO Y OPERACIÓN
ESTABLECIDAS POR EL FABRICANTE.

FRANCISCO JAVIER GONZALEZ CHAVES
ELIZABETH MORA QUIROZ

Proyecto integral de grado para optar el título de:
INGENIERO QUÍMICO

Director:
Jaime Eduardo Arturo Calvache
Ingeniero Químico

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BOGOTÁ D.C.

2019

Nota De Aceptación (Subdirector Operativo de Investigaciones)

Firma Docente Investigador

Firma Docente Jurado 1

Firma Docente Jurado 2

Bogotá, D.C., Febrero, 2019.

DIRECTIVAS DE LA UNIVERSIDAD

Presidente de la Universidad y Rector del Claustro

Dr. JAIME POSADA DÍAZ

Vicerrector de Desarrollo y Recursos Humanos.

Dr. LUIS JAIME POSADA GARCÍA-PEÑA

Vicerrectora Académica y de Posgrados

Dra. ANA JOSEFA HERRERA VARGAS

Decano Facultad de Ingenierías

Ing. JULIO CÉSAR FUENTES ARISMENDI

Director General de Investigación y Proyección Social

Dr. MANUEL CANCELADO JIMÉNEZ

Director Programa Ingeniería Química

Ing. LEONARDO DE JESÚS HERRERA GUTIÉRREZ

Las directivas de la Fundación Universidad de América, los jurados calificadores y el cuerpo docente no son responsables por los criterios e ideas expuestas en el presente documento. Estos corresponden únicamente a los autores.

DEDICATORIA

Para mis padres que siempre me han brindado su apoyo incondicional.

- Francisco Javier González Chaves.

Para mi familia por ser apoyo incondicional en este proceso.

- Elizabeth Mora Quiroz

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a Dios, al Señor Jesucristo, y a mis padres por darme la oportunidad de estudiar, y guiarme por el camino de aprender cada día más, ya que no hubiera llegado a este punto sin la ayuda de ellos. A todos los profesores les doy las gracias por el esfuerzo que hicieron para enseñarnos y guiarnos en el transcurso del pregrado. Muchas gracias Ingeniero Jaime Arturo por todas las enseñanzas y el apoyo que nos ha brindado.

Francisco Javier González Chaves.

Mi agradecimiento a Dios por darme salud y sabiduría para culminar esta etapa de la mejor manera, por brindarme la calma necesaria en los momentos de debilidad y por darme lugar en una familia maravillosa. A mis papás por los valores que me han inculcado, por el apoyo constante ante las adversidades, por darme oportunidad de formarme profesional y personalmente. Por la paciencia, la sabiduría y las enseñanzas.

A Karen por ser hermana, amiga, compañera, cómplice y sobre todo el más grande apoyo, no solo de la etapa que termina sino a lo largo de mi vida. A Laura por el apoyo y por regalarme al mejor sobrino que llevo a llenarme la vida de luz y alegría. A las personas que conocí a lo largo de esta etapa, a los que son amigos y a los que fueron, porque cada uno me puso en el lugar y el momento exacto en el que me encuentro.

Agradezco al Grupo de Procesos de Separación no Convencionales, al ingeniero Jaime Arturo y mi compañero por brindarme las herramientas y el apoyo necesario para el desarrollo del presente proyecto y el crecimiento que este nos deja.

Elizabeth Mora Quiroz

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	27
OBJETIVOS	28
1. GENERALIDADES	28
1.1 ESCALAMIENTO	28
1.1.1 Clasificación	30
1.1.1.1 Escala laboratorio	30
1.1.1.2 Escala banco	30
1.1.1.3 Escala piloto	31
1.1.1.4 Escala semi-industrial	31
1.1.1.5 Escala Industrial	31
1.1.2 Escalamiento de reactores	31
1.2 PLANTAS PILOTO	33
1.2.1 Costos operacionales	34
1.2.2 Tipos de planta piloto	34
1.2.2.1 Plantas piloto multipropósito	34
1.2.2.2 Plantas piloto unipropósito	35
1.2.3 Escala de la planta piloto	35
1.2.4 Seguridad en planta piloto	36
1.2.5 Selección del tipo de alimentación	36
1.2.6 Operación de la planta piloto	37
1.2.7 Adquisición de datos	37
1.2.8 Procedimientos operacionales	38
1.2.9 Procedimiento despues de la corrida	38
1.3 REACTORES	38
1.3.1 Ecuaciones de diseño	38

1.3.2 Reactores intermitentes	39
1.3.3 Reactores de flujo continuo	40
1.3.3.1 Reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR)	40
1.3.3.2 Reactor de flujo pistón (PFR)	41
1.3.3.3 Reactor de lecho empacado (PBR)	42
1.3.3.4 Reactores en serie	42
1.3.4 Reactores de estado no estacionario	45
1.3.4.1 Operación en estado no estacionario de un CSTR	45
1.3.4.1 Operación en estado no estacionario de un PFR	45
1.4 CONCEPTOS BASICOS DE CORROSION	45
1.4.1 Corrosión uniforme	46
1.4.2 Corrosión por picadura	46
1.4.3 Corrosión por cavidades	46
1.4.4 Corrosión galvánica	46
1.4.5 Corrosión intergranular	47
1.4.6 Corrosión de fractura bajo tensión	47
2. PLANTEAMIENTO METODOLÓGICO PARA LA CARACTERIZACIÓN OPERACIONAL DEL BANCO DE REACTORES	48
2.1 CARACTERIZACIÓN DEL BANCO DE REACTORES DE TANQUES AGITADOS	51
2.1.1 Caracterización técnica del banco de reactores de tanques agitados	51
2.1.1.1 Reactores	52
2.1.1.2 Tanques de alimentación y de descarga	54
2.1.1.3 Intercambiadores de calor	56
2.1.1.4 Tuberías	57
2.1.1.5 Bombas y amortiguadores de pulsación	58
2.1.1.6 Distribuidores de flujo	59
2.1.1.7 Instrumentos de medición	60
2.1.1.8 Válvulas	64

2.1.2 Caracterización operacional del banco de reactores de tanques agitados	73
2.1.2.1 Modo de operación continua	74
2.1.2.2 Modo de operación por lotes	85
2.1.2.3 Modo de operación semi-lotes	86
2.2 CARACTERIZACIÓN DEL BANCO DE REACTORES TUBULARES	87
2.2.1 Caracterización técnica del banco de reactores tubulares	87
2.2.1.1 Reactores tubulares y de lecho empacado	88
2.2.1.2 Tanques de alimentación y descarga	89
2.2.1.3 Intercambiadores de calor	89
2.2.1.4 Tuberías	90
2.2.1.5 Bombas y amortiguadores de pulsaciones	90
2.2.1.6 Distribuidores de flujo	90
2.2.1.7 Instrumentos de medición	91
2.2.1.8 Válvulas	95
2.2.1.9 Mezcladores estáticos	102
2.2.2 Caracterización operacional del banco de reactores tubulares	103
2.2.2.1 Único PFR	104
2.2.2.2 Único PBR	108
2.2.2.3 Secuencia de reactores tubulares	111
2.3 PROTOCOLO DE OPERACIÓN	113
2.3.1 Adecuación del sistema	113
2.3.2 Conexión del equipo a la red eléctrica	113
2.3.3 Calentamiento del aceite térmico	115
2.3.4 Carga de reactivos	117
2.3.4.1 Líquidos puros	117
2.3.4.2 Soluciones	117
2.3.5 Medición de la velocidad de flujo volumétrico en los rotámetros	120
2.4 REQUERIMIENTOS DE INSTALACIÓN	122
2.5 REQUERIMIENTOS DE OPERACIÓN	123
2.6 MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN DEL BANCO DE REACTORES	126

2.6.1 Propiedades químicas	127
2.6.2 Propiedades mecánicas	129
2.6.3 Propiedades físicas	130
2.6.4 Resistencia a las condiciones de operación	131
2.6.4.1 Resistencia a diversos medios	132
2.6.4.2 Temperatura	137
2.6.5 Selección de sistemas reaccionantes	137
2.6.5.1 Saponificación de acetato de etilo	138
2.6.5.2 Hidrólisis de anhídrido acético	148
2.6.5.3 Descomposición de alcohol diacetona en medio básico	153
2.6.5.4 Esterificación de ácido acético con etanol en medio de ácido metanosulfónico	158
2.7 RESISTENCIA QUÍMICA DEL MATERIAL DE LOS EMPAQUES	163
3. DESARROLLO DE UN MODELO MATEMÁTICO PARA SIMULAR EL FUNCIONAMIENTO DEL BANCO DE REACTORES DE LA PLANTA PILOTO	164
3.1 PARÁMETROS DEL MODELO	164
3.3.1 Ley de velocidad	164
3.3.2 Condiciones iniciales y de alimentación	166
3.2 MODO DE OPERACIÓN CONTINUA	168
3.2.1 Reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR)	169
3.2.1.1 Operación adiabática	172
3.2.1.2 Operación isotérmica	174
3.2.1.3 Operación con efectos térmicos	174
3.2.2 Secuencia de reactores continuos de mezcla perfecta (CSTR)	175
3.2.2.1 Operación adiabática	176
3.2.2.2 Operación isotérmica	177
3.2.2.3 Operación con efectos térmicos	177
3.2.3 Reactor tubular (PFR)	177

3.3 MODO DE OPERACIÓN POR LOTES	181
3.3.1 Operación adiabática	183
3.3.2 Operación isotérmica	186
3.3.3 Operación con efectos térmicos	188
3.4 SIMULACIÓN	189
3.4.1 Metodología	189
3.4.1.1 Ajuste de las propiedades termodinámicas	189
3.4.1.2 Especificación de la reacción	193
3.4.1.3 Modo de operación continuo	194
3.4.1.4 Modo de operación por lotes	201
3.4.2 Resultados	203
3.4.2.1 Reactores continuos de tanques agitados	203
3.4.2.2 Reactor tubular	205
3.4.2.3 Reactor por lotes	205
4. CONCLUSIONES	207
5. RECOMENDACIONES	209
BIBLIOGRAFÍA	210
ANEXOS	220

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Representación gráfica de dos CSTR en serie, para aproximar el volumen de un PFR, con la misma conversión.	44
Figura 2. Representación gráfica de dos PFR en serie, para aproximar el volumen de un PFR, con la misma conversión.	44
Figura 3. Representación del tablero de control del banco de reactores.	51
Figura 4. Representación de los reactores de tanque agitado en el PFD.	52
Figura 5. Representación de los tanques de alimentación de los reactivos 1 y 2 en el PFD.	54
Figura 6. Procedimiento para llevar a cabo el arranque del modo de operación continua.	74
Figura 7. Representación de los reactores de tanque agitado operados como único reactor con descarga directa al tanque de producto TK-103.	75
Figura 8. Línea de alimentación del reactivo 1 hasta el distribuidor de flujo "CSTR R1".	78
Figura 9. Alimentación de los reactivos 1 y 2 al reactor R-104 desde los distribuidores de flujo.	79
Figura 10. Línea de descarga de productos con enfriamiento desde el reactor R-104 al tanque TK-103 (líneas de flujo del reactivo 1 y 2 están resaltadas).	80
Figura 11. Línea de flujo del aceite térmico a los precalentadores E-101 y E-102.	81
Figura 12. Línea de flujo del aceite térmico a los reactores de tanque agitado (resaltada la línea hacia el reactor R-104).	82
Figura 13. Alimentación de los reactivos 1 y 2 al reactor R-101 para la secuencia CSTR.	83
Figura 14. Descarga de productos al tanque TK-103 para la secuencia CSTR.	85

Figura 15. Procedimiento para la carga de reactivos en el modo de operación por lotes.	86
Figura 16. Representación de los reactores tubulares en el PFD.	89
Figura 17. Alimentación al reactor tubular R-105 del reactivo 1 (negro) y reactivo 2 (rojo).	106
Figura 18. Línea de flujo de descarga de productos desde el reactor tubular R-105 a el tanque TK-104.	107
Figura 19. Línea de flujo de aceite térmico desde el tanque TK-106 al reactor tubular R-105.	108
Figura 20. Línea de flujo de alimentación del reactivo 1 (negro) y reactivo 2 (rojo) al reactor multitubular PBR.	109
Figura 21. Línea de flujo de descarga de productos desde el reactor R-109 hasta el tanque TK-104.	110
Figura 22. Línea de flujo del sistema de reactores PFR en serie y descarga de productos al tanque TK-104.	111
Figura 23. Procedimiento para la adecuación del sistema.	113
Figura 24. Procedimiento para la conexión del equipo a la red eléctrica.	114
Figura 25. Interfaz de la pantalla HMI al conectar el banco de reactores a la red eléctrica.	114
Figura 26. Protocolo de calentamiento de aceite térmico.	115
Figura 27. Interfaz de la pantalla HMI con la lista de chequeo de adecuación del sistema.	116
Figura 28. Interfaz del HMI para el calentamiento de aceite térmico para los precalentadores y reactores.	116
Figura 29. Procedimiento para carga de líquidos puros a los tanques de alimentación.	117
Figura 30. Protocolo para cargar soluciones a los tanques de alimentación.	118
Figura 31. Protocolo para la mezcla de soluciones.	119
Figura 32. Interfaz del HMI para la operación de mezcla del tanque de alimentación TK-102.	119

Figura 33. Diagrama de cuerpo libre de la esfera del rotámetro OMEGA®.	120
Figura 34. Curvas isocorrosion de distintos aceros inoxidable en ácido sulfúrico.	133
Figura 35. Resistencia a la corrosión en distintos medios para los aceros 304 y 304L.	137
Figura 36. Determinación de temperatura adiabática y la conversión de hidróxido de sodio en el reactor R-104.	173
Figura 37. Determinación de temperatura adiabática y la conversión de hidróxido de sodio en el reactor R-103.	173
Figura 38. Variación de la conversión de hidróxido de sodio a lo largo del reactor R-108 de 3 litros de capacidad.	179
Figura 39. Variación de la temperatura a lo largo del reactor R-108 de 3 litros de capacidad.	180
Figura 40. Variación de la conversión de hidróxido de sodio a lo largo del reactor R-105 de 1 litro de capacidad.	180
Figura 41. Variación de la temperatura a lo largo del reactor R-105 de 1 litro de capacidad.	181
Figura 42. Conversión en el tiempo para la saponificación de acetato de etilo en el reactor por lotes R-103 en operación adiabática.	185
Figura 43. Temperatura en el tiempo de reacción para la saponificación de acetato de etilo en el reactor por lotes R-103 en operación adiabática.	185
Figura 44. Conversión en el tiempo para la saponificación de acetato de etilo en el reactor por lotes R-103 en operación isotérmica.	187
Figura 45. Perfil de calor retirado en el tiempo de reacción para la saponificación de acetato de etilo en el reactor R-103 de 1 litro de capacidad.	187
Figura 46. Perfil de calor retirado en el tiempo de reacción para la saponificación de acetato de etilo en el reactor R-104 de 3 litros de capacidad.	188
Figura 47. Tipo de aplicación y sistema de unidades seleccionados para la simulación de la saponificación de acetato de etilo.	190
Figura 48. Especificación de los componentes presentes en la saponificación de acetato de etilo en Aspen Plus.	191

Figura 49. a) Especificaciones de los componentes base para la generación de las reacciones de disociación en agua en Aspen Plus. b) Componentes seleccionados para la generación de reacciones de disociación en agua en Aspen Plus.	191
Figura 50. Reacciones de disociación y equilibrio iónico generadas por Aspen Plus para la saponificación de acetato de etilo.	192
Figura 51. Selección del tipo de enfoque electrolítico para la simulación de la saponificación de acetato de etilo.	193
Figura 52. Especificación de los coeficientes estequiométricos y de los órdenes de reacción particular en Aspen Plus.	193
Figura 53. Parámetros cinéticos de la saponificación de acetato de etilo usado en Aspen Plus.	194
Figura 54. Especificaciones para el reactor R-101 para la simulación en Aspen Plus. a) Operación adiabática. b) Operación isotérmica.	196
Figura 55. Carga de la reacción de saponificación de acetato de etilo para el reactor R-101 para la simulación en Aspen Plus.	196
Figura 56. Topología para el sistema de alimentación de reactivos al banco de reactores de tanques agitados en Aspen Plus. a) Reactivo 1. b) Reactivo 2.	198
Figura 57. a) Topología desarrollada del banco de reactores en operación secuencia CSTR con descarga de productos. b) Topología desarrollada para los reactores tubulares.	199
Figura 58. Configuración del reactor tubular R-105 en Aspen Plus. a) Selección del modo de operación adiabática. b) Dimensiones del reactor y fase de reacción.	200
Figura 59. Esquema del modo de operación por lotes de R-103 para la saponificación de acetato de etilo en Aspen Plus con descarga directa.	201
Figura 60. Condiciones de alimentación del reactor por lotes R-103 en Aspen Plus.	202
Figura 61. Especificación del tiempo de ciclo del reactor por lotes R-103 en Aspen Plus.	202
Figura 62. Ajuste de las condiciones de operación en el reactor R-103. a) Adiabático. b) Isotérmico.	203

Figura 63. Resultados de la simulación del reactor R-103 por lotes. a) Perfil de composición en el reactor. b) Perfil de temperatura en el reactor.	206
Figura 64. Perfil de composición del reactor por lotes R-103 en operación isotérmica.	206

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Factores en el diseño y escalamiento de equipos de proceso.	36
Tabla 2. Unidades y dispositivos del banco de reactores.	49
Tabla 3. Componentes visibles del tablero de control del banco de reactores.	50
Tabla 4. Unidades y dispositivos del banco de reactores de tanques agitados.	51
Tabla 5. Número de etiqueta, volumen, y material de construcción de cada reactor del banco de reactores de tanques agitados.	54
Tabla 6. Identificación y línea de flujo correspondiente de los tanques de alimentación de aceite térmico.	56
Tabla 7. Especificaciones técnicas de los intercambiadores de calor del banco de reactores de tanque agitado.	56
Tabla 8. Identificación, ubicación, y función de los intercambiadores de calor del banco de reactores de tanques agitados.	57
Tabla 9. Especificaciones técnicas del sistema de tuberías del banco de reactores.	57
Tabla 10. Características técnicas de las bombas del banco de reactores.	58
Tabla 11. Identificación, tipo y función de cada bomba del banco de reactores (en paréntesis la aplicación al banco de reactores tubulares).	58
Tabla 12. Especificaciones técnicas y operacionales de los distribuidores de flujo del banco de reactores de tanques agitados.	59
Tabla 13. Ejemplo de representación de los instrumentos de medición en el PFD del banco de reactores.	61
Tabla 14. Identificación funcional y ubicación de los termopares tipo J del banco de reactores de tanques agitado.	62
Tabla 15. Identificación funcional y ubicación de los manómetros del banco de reactores de tanques agitados.	63
Tabla 16. Identificación funcional y ubicación de los indicadores de nivel del banco de reactores de tanques agitados.	64

Tabla 17. Identificación y función de cada válvula de bola del sistema de alimentación del reactivo 1, a los reactores R-101, R-103 y R-104 del banco de reactores de tanques agitados.	66
Tabla 18. Identificación y función de cada válvula de bola del sistema de alimentación del reactivo 2, a los reactores R-101, R-103, y R-104 del banco de reactores de tanques agitados.	67
Tabla 19. Identificación y función de cada válvula de bola de los reactores R-101, R-102, R-103, y R-104 del banco de reactores de tanques agitados, y del sistema de reactores en serie.	68
Tabla 20. Identificación y función de cada válvula de bola del sistema de descarga de productos de los reactores R-103 y R-104, al tanque de producto TK-103 del banco de reactores de tanques agitados.	69
Tabla 21. Identificación y función de cada válvula de bola de la línea de flujo del aceite térmico (THERMOIL Z-100 ISO 32), a los intercambiadores E-101 y E-102 del banco de reactores.	69
Tabla 22. Número de etiqueta y función de cada válvula de bola de la línea de flujo del agua de servicio, al intercambiador E-103 del banco de reactores de tanques agitados.	70
Tabla 23. Identificación y función de cada válvula de bola de la línea de flujo del aceite térmico a los reactores R-101, R-102, R-103 y R-104 del banco de reactores de tanques agitados.	71
Tabla 24. Identificación y función de cada válvula de bola de la línea de flujo del agua de servicio, a los reactores R-101, R-102, R-103 y R-104 del banco de reactores de tanques agitados.	71
Tabla 25. Ubicación y función de las válvulas de seguridad del banco de reactores de tanques agitados.	72
Tabla 26. Ubicación y función de las válvulas de retención del banco de reactores de tanques agitados.	73
Tabla 27. Identificación y función de las válvulas toma muestras del banco de reactores de tanques agitados.	73
Tabla 28. Válvulas de bola abiertas y cerradas de las líneas de flujo de reactivos y productos, con medición de caudal, para operación continua del reactor R-104 de 3 litros, sin purgas.	76

Tabla 29. Estado de válvulas de la línea de flujo de aceite térmico a los precalentadores para operación continua del banco de reactores.	76
Tabla 30. Estado de válvulas de la línea de flujo de aceite térmico a los reactores R-103 y R-104 para operación continua del banco de reactores.	76
Tabla 31. Estado de válvulas de la línea de flujo agua de enfriamiento a los reactores R-103 y/o R-104, y el intercambiador E-103 para operación continua del banco de reactores.	77
Tabla 32. Arreglo de válvulas para operación semi-lotes desde el tanque TK-101 hasta el reactor R-104.	87
Tabla 33. Unidades y dispositivos del banco de reactores tubulares.	87
Tabla 34. Identificación y características de los reactores tubulares y de lecho empacado.	88
Tabla 35. Especificaciones técnicas y operacionales de los distribuidores de flujo del banco de reactores tubulares.	90
Tabla 36. Identificación y ubicación de cada termopar del banco de reactores tubulares.	92
Tabla 37. Identificación funcional y ubicación de los manómetros del banco de reactores tubulares.	93
Tabla 38. Identificación funcional y ubicación de los indicadores de nivel del banco de reactores tubulares.	94
Tabla 39. Función e identificación de cada válvula de bola del sistema de alimentación del reactivo 1 al banco de reactores tubulares.	96
Tabla 40. Función e identificación de cada válvula de bola del sistema de alimentación del reactivo 2 al banco de reactores tubulares.	97
Tabla 41. Función e identificación de las válvulas de bola de la línea de flujo de la mezcla de reactivos 1 y 2 de alimentación, a los reactores tubulares.	99
Tabla 42. Identificación y función de cada válvula de bola del sistema de reactores en serie del banco de reactores tubulares.	99
Tabla 43. Función e identificación de las válvulas de bola involucradas en la descarga de los productos de los reactores tubulares.	99
Tabla 44. Válvulas de bola involucradas en la línea de flujo del agua de servicio al intercambiador de calor E-104.	100

Tabla 45. Función e identificación de las válvulas de bola de la línea de flujo de aceite térmico a los reactores tubulares.	100
Tabla 46. Ubicación y función de las válvulas de retención del banco de reactores de tanques agitados.	101
Tabla 47. Identificación y función de cada válvula toma-muestra del banco PFR.	102
Tabla 48. Arreglo de válvulas para operar únicamente el reactor tubular R-105, de 1 litro de capacidad, con medición de flujo volumétrico.	105
Tabla 49. Escala de lectura a centro de esfera de los rotámetros OMEGA®.	122
Tabla 50. Requerimientos de instalación del banco de reactores.	123
Tabla 51. Avisos de prudencia para la operación del banco de reactores.	125
Tabla 52. Composición química de los aceros 304 y 304L.	128
Tabla 53. Propiedades mecánicas del acero 304 y acero 304L.	129
Tabla 54. Algunas propiedades mecánicas del acero 304 a diferentes temperaturas por cortos rangos de tiempo.	130
Tabla 55. Propiedades físicas del acero inoxidable 304 y 304L a condiciones ambientales.	131
Tabla 56. Indicaciones de peligro y pictogramas de las sustancias involucradas en la saponificación de acetato de etilo según el SGA.	141
Tabla 57. Cantidad y precio de cada sustancia para una hora de operación en continuo sin pérdidas de material.	145
Tabla 58. Cantidad y precio de cada sustancia para una hora de operación por lotes en 1 litro de volumen de reacción.	146
Tabla 59. Cantidad y precio de cada sustancia para una hora de operación por lotes en 3 litros de volumen de reacción.	146
Tabla 60. Indicaciones de peligro y pictogramas para las sustancias involucradas en la hidrólisis de anhídrido acético según la SGA.	151
Tabla 61. Indicaciones de peligro y pictogramas de las sustancias involucradas en la descomposición de alcohol diacetona según la SGA.	157

Tabla 62. Indicaciones de peligro y pictogramas para el ácido metanosulfónico según la SGA.	160
Tabla 63. Parámetros cinéticos de la saponificación de acetato de etilo reportados por distintas fuentes bibliográficas.	165
Tabla 64. Condiciones de alimentación para la saponificación de acetato de etilo en reactores de flujo.	166
Tabla 65. Condiciones iniciales de carga de la saponificación de acetato de etilo en el reactor por lotes.	167
Tabla 66. Numero de moles iniciales de carga para la saponificación de acetato de etilo a cada reactor del sistema de operación por lotes.	168
Tabla 67. Parámetros energéticos de las sustancias para la resolución de los modelos matemáticos.	168
Tabla 68. Tabla estequiométrica de la saponificación de acetato de etilo con el hidróxido de sodio como reactivo limitante.	170
Tabla 69. Resultados del modelo matemático en operación adiabática para los reactores R-103 y R-104.	174
Tabla 70. Resultados para los reactores R-103 y R-104 en modo de operación continua isotérmica a 16°C.	174
Tabla 71. Resultados de la operación adiabática de la secuencia de reactores R-101, R-102 y R-103.	176
Tabla 72. Resultados de la operación isotérmica de la secuencia de reactores R-101, R-102 y R-103.	177
Tabla 73. Resultados del modelo matemático para la saponificación de acetato de etilo en los reactores tubulares R-105 y R-108 en operación adiabática.	179
Tabla 74. Condiciones de las corrientes de alimentación del modo de operación continuo en el simulador Aspen Plus.	195
Tabla 75. Resultados de la simulación para operación de un solo reactor CSTR, comparado con los valores calculados.	204
Tabla 76. Comparación de resultados de la saponificación de acetato de etilo para la secuencia CSTR calculada y de la simulación.	204

Tabla 77. Comparación de resultados de la saponificación de acetato de etilo en los reactores tubulares calculados y de la simulación.

205

LISTA DE ANEXOS

	pág.
Anexo A. Diagrama de flujo de procesos del banco de reactores	221

NOMENCLATURA

R	Constante Universal de los gases
T	Temperatura
P	Presión
t	Tiempo
F	Flujo molar
V	Volumen
G_A	Velocidad de generación de la especie A
N_A	Número de moles de A
$-r_A$	Velocidad de desaparición de A
r_A	Velocidad de aparición de A
W	Masa de catalizador
U	Coefficiente global de transferencia de calor
A	Hidróxido de sodio
A	Área de transferencia de calor.
C_p	Capacidad calorífica
ΔH	Cambio de entalpia
mL	Mililitros
L, l	Litros
L	Longitud
psi	Libra por pulgada cuadrada
min	Minutos
$^{\circ}C$	Grados Celsius
NPT	Rosca americana cónica para tubos
X_i	Conversión específica del reactor i
X_i^G	Conversión global del proceso del reactor i
\dot{Q}	Tasa de transferencia de calor
\dot{W}_s	Trabajo de eje
k	Constante de velocidad específica
k_0	Factor de frecuencia
K_C	Constante de equilibrio en términos de la concentración
E	Energía de activación
Subíndices	
i	Componente i
0	Inicial
Rx	Reacción
r	Refrigerante
Superíndices	
0	Estándar

RESUMEN

Para el presente documento, en el que se realiza el planteamiento metodológico para el diagnóstico del banco de reactores de la planta piloto de la Fundación Universidad de América bajo las condiciones de diseño y operación entregadas por el fabricante, se abordó el tema de escalamiento de plantas industriales, las ecuaciones de diseño de reactores y los principales mecanismos de corrosión para el desarrollo del primer capítulo, correspondiente a las generalidades para contextualizar el área en el cual se desarrolla el proyecto.

En el segundo capítulo para el planteamiento metodológico para la caracterización operacional del banco de reactores bajo las condiciones de diseño y operación entregadas por el fabricante, se realizó una caracterización técnica y operacional de los dispositivos y unidades del equipo, con base al manual de operación, y el diagrama de flujo de procesos. Teniendo en cuenta la resistencia química del material de construcción se llevó a cabo la selección de las reacciones químicas obteniendo: saponificación de acetato de etilo, hidrolisis de anhídrido acético, descomposición de alcohol diacetona, y esterificación de ácido acético con ácido metanosulfónico.

En el tercer capítulo se desarrolló un modelo matemático para la simulación del banco de reactores con la saponificación de acetato de etilo para 4 configuraciones de reactores, resolviendo las expresiones mediante métodos numéricos para comparar los resultados con los obtenidos en Aspen Plus. Al final fueron consistentes los resultados reportados, concluyendo que el modelo matemático y la simulación puede usarse para extensión de condiciones de operación distintas a las propuestas en el presente capítulo. Finalmente, se desarrollaron las guías de laboratorio para impartir docencia como entregables.

PALABRAS CLAVE: planteamiento metodológico, caracterización operacional, reactores, modelo matemático, simulación.

INTRODUCCIÓN

La Fundación Universidad de América ha adquirido una planta piloto con seis módulos para operar. Estas son las plantas de secado, evaporación, de destilación, de absorción, de extracción, y de reactores. La universidad requiere obtener información con respecto a los posibles modos de operación de las distintas plantas, así como un reporte acerca de las características técnicas y operacionales del equipo. El presente documento se enfoca en el banco de reactores de la planta piloto.

Adicionalmente, se requiere hacer una profundización con respecto a las sustancias que pueden operarse sin ningún inconveniente. Para determinar dichos compuestos es necesario realizar un estudio sobre la resistencia química del material de construcción del banco de reactores, y de los empaques de las tuberías, sobre la aplicabilidad de las sustancias en una reacción química, así como las condiciones en que se lleva a cabo el proceso.

Además, es necesario el desarrollo de un modelo matemático que represente el proceso que se vaya a llevar a cabo en el banco de reactores, y extender la aplicación al modelamiento y simulación con el uso de herramientas especializadas para ello. De esa forma, se trata con una de las funciones del ingeniero químico que involucra la caracterización de procesos químicos mediante el desarrollo de expresiones matemáticas que representen de manera satisfactoria el proceso a estudiar.

Con base en ese desarrollo, el objetivo es transmitir todas las herramientas a los estudiantes de la Fundación Universidad de América para que tengan un proceso de formación integral aplicando en la planta piloto todos los conocimientos y habilidades que han adquirido a lo largo del estudio de su pregrado, de tal forma que se vean mejor preparados para entrar en el mundo laboral. Por tanto, es necesario el desarrollo de guías de práctica de laboratorio para que sean evaluadas a futuro como una opción para el desarrollo de una asignatura de laboratorio de reactores.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Plantear la metodología para el diagnóstico del banco de reactores de la planta piloto de la Fundación Universidad de América a partir de la información suministrada por el fabricante.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Establecer los procedimientos para la caracterización operacional del banco de reactores de la planta piloto a partir de la información suministrada por el fabricante.
- Desarrollar un modelo matemático para simular el funcionamiento del banco de reactores de la planta piloto.
- Elaborar la guía de prácticas para el uso del banco de reactores con el fin de impartir docencia.

1. GENERALIDADES

1.1 ESCALAMIENTO

En el ámbito de la investigación y el desarrollo de nuevos productos se desarrollan metodologías para utilizar la información adquirida en el laboratorio, en procesos de producción de escala mayor. En el proceso de investigación y desarrollo pueden considerarse 5 etapas, o escalas; laboratorio, banco, piloto, semi-industrial, e industrial. Esta división es tradicional, pero no tienen que considerarse todas las escalas necesariamente, y dependerá del conocimiento previo que se tenga del proceso a escalar ¹. Además, no son muy precisos los límites entre una escala y otra².

Escalado es el proceso mediante el cual se logra la exitosa puesta en marcha y la operación económica de una unidad a escala comercial basándose, al menos en parte, en resultados de investigaciones realizadas en una escala menor³. Por lo tanto, deben existir investigaciones de un proceso determinado en una escala laboratorio, banco, piloto, o cualquier escala menor a la industrial, sin pasar necesariamente por todas las escalas, que brinde las bases para poder llevar el proceso a una escala mayor. El escalamiento es una herramienta matemática indispensable para ingenieros implicados en procesos industriales donde se llevan a cabo reacciones químicas que involucran fenómenos de transporte como transferencia de calor, masa y momento⁴.

Según Mejias⁵ un cambio de escala satisfactorio podría requerir un aumento paulatino de escala en escala hasta alcanzar el nivel industrial, sin embargo resultaría bastante costoso. Además, el uso de las metodologías para cambiar de una escala a otra, entrega información acerca de los efectos del cambio en el tamaño de los equipos en el proceso en cuestión, así como las variaciones requeridas en el diseño de los equipos. Mejias también señala que el proceso de escalado no es sencillo, debido a la combinación de distintos factores como que las ecuaciones representativas del proceso no se pueden resolver, los parámetros físicos y químicos están interconectados, o las soluciones que se obtienen a escala laboratorio o nivel planta piloto pueden no ser validas a nivel industrial, etc. Por tal razón se debe llevar a cabo un análisis detallado de las características del proceso

¹ GONZALEZ, Roberto. Principios básicos de escalado. Centro de estudios de combustión y energía, Universidad de Matanzas, Camilo Cienfuegos, Ciudad de Matanzas, Cuba: Editorial Universitaria, 2000. P. 10

² *Ibíd.*, p. 10

³ *Ibíd.*, p. 11.

⁴ COKER, A. Modeling of Chemical Kinetics and Reactor Design. Gulf Professional Publishing, 2001. p. 1034.

⁵ MEJIAS, Javier. Estudio sobre la depuración de los lixiviados de vertederos de RSU con cenizas volates zeolitizadas. Escuela técnica superior de ingeniería. Sevilla, España; 2005. p. 186.

a escalar, y obtener la información suficiente en una escala menor a la industrial, para poder desarrollar algunas de las técnicas de escalado que existen, con el objetivo de minimizar las etapas, el tiempo de escalado, y los costos económicos que ello representa⁶.

Definir los límites entre una escala y otra se puede hacer con base en una diversidad de criterios, y en muchos casos se utiliza el volumen de los equipos como criterio fundamental; como es el caso de la industria biotecnológica, así como las relaciones entre las dimensiones lineales de los equipos, que corresponde a factores de escala geométricos, a partir de criterios de semejanza⁷. Un ejemplo de un factor de escala geométrico, se puede aplicar a una columna de 0,25 metros de diámetro que será escalada a una torre de 2 metros de diámetro, teniendo un factor de escala geométrico de 8. La complejidad y el nivel del conocimiento previo del proceso suelen fijar el factor escala, que será tanto más grande cuanto menor sea el conocimiento del proceso, que cuando se conoce bastante del proceso, donde se suelen utilizar factores de escala del orden de 10⁷.

González⁷ advierte que cuando se escalan reactores, se considera el factor de escala con respecto al volumen, teniendo en ocasiones factores de escala más elevados a los esperados. Por ejemplo, Mejias Chimeno⁵ indica que en reactores químicos se pueden llegar a utilizar factores de escala de 50 a 80000.

1.1.1 Clasificación.

1.1.1.1 Escala laboratorio. En los experimentos a escala laboratorio, se investigan ciertos aspectos del proceso bajo la condición de pequeñas cantidades de materias primas. Principalmente, se obtienen parámetros cinéticos y termodinámicos que son independientes del tamaño de la unidad. Además, se determinan propiedades físicas como la densidad, viscosidad, calores específicos, etc. involucradas en el modelo que representa el proceso⁸. Para procesos bioquímicos, el nivel de trabajo es de tubos de ensayo a matraces de 500 mL, el cual puede también asignarse a reacciones químicas.

1.1.1.2 Escala banco. Según la bibliografía⁹ en esta etapa se comienza a adquirir un carácter tecnológico; se orienta a la configuración de los equipos con características geométricas y operacionales similares a la de los equipos de planta piloto o de escala industrial; se introduce con mayor rigurosidad la instrumentación y control del proceso; se orienta hacia el completamiento y precisión de la información de la escala laboratorio, pudiendo contribuir a reducir los costos de investigación y omitir en algunos casos en paso por la escala de planta piloto. Los objetivos principales de esta etapa son: revelar la esencia de los fenómenos que

⁶ GONZALEZ, Roberto. Op. cit., p. 12.

⁷ *Ibíd.*, p.13.

⁸ COKER. A. Op. cit., p. 1036. Párr. 3.

ocurren en el proceso; revelar los pasos controlantes o críticos en las operaciones; verificar la hipótesis de modelos matemáticos; y aportar información para cálculos y diseños en ingeniería⁹.

1.1.1.3 Escala piloto. Una planta piloto representa una etapa importante en el conocimiento de un proceso ya que se determinan especificaciones de diseño para una planta comercial¹⁰. A diferencia de la escala banco, esta etapa es más costosa, y su realización depende de factores como: el tipo de proceso; nivel de información disponible; y tamaño propuestos para la unidad industrial, de tal forma que pueda operarse para cumplir al menos uno de los siguientes objetivos¹¹:

- Evaluar la factibilidad de un proceso tecnológico.
- Obtener información para el diseño de una planta comercial.
- Obtener cantidades de productos con fines de ensayo.

El tamaño de los equipos puede variar de 5, 40, 200, 1000 a 2000 litros según el proceso y la disponibilidad de recursos económicos, pudiendo aplicar esta clasificación para equipos biotecnológicos.

1.1.1.4 Escala semi-industrial. Es una etapa costosa del proceso de escalado, la cual se aplica para aquellos procesos que tienen un nivel de complejidad considerablemente alto, y por ello se construyen de igual manera que una planta de escala industrial, pero a una capacidad de producción menor, sirviendo de modelo a futuras plantas industriales que se construyan¹².

1.1.1.5 Escala industrial. No se considera como parte del proceso de investigación y desarrollo, y es una prueba de validación de las experiencias precedentes. Además, complementa la información ingenieril disponible y los modelos matemáticos formulados, permitiendo mayor capacidad para el perfeccionamiento de los equipos y la optimización del proceso en cuestión¹³. Para equipos biotecnológicos el tamaño es mayor a 5000 litros, lo cual también podría extrapolarse a procesos químicos.

1.1.2 Escalamiento de reactores. Con el fin pasar de la escala laboratorio a la escala industrial, se debe pasar por tres etapas en el escalamiento de reactores: escala laboratorio, planta piloto y semi-industrial. Las consideraciones con respecto a la etapa de laboratorio se pueden encontrar en la sección "1.1.1.1". Con respecto

⁹ GONZALEZ, Roberto. Op, cit., p. 14. sección 1.4.3.

¹⁰ COKER. A. Op. cit., p. 1035.

¹¹ GONZALEZ, Roberto. Op, cit., p. 15. sección. 1.4.4.

¹² *Ibíd.* p.16. párr. 1.

¹³ *Ibíd.*, p. 16. párr. 4.

a la escala piloto, esta utiliza la información de la cinética de una reacción, obtenida de ensayos en escala laboratorio, para proveer información con respecto al comportamiento de la ley de velocidad en escalas mayores, como la industrial; conociendo el efecto macroscópico de las corrientes de proceso, así como el tiempo de residencia¹⁴. Los principales objetivos de la operación de reactores en planta piloto es la estimación de coeficientes de un modelo matemático que represente el proceso, y la validación del mismo; para ello la experimentación deberá proveer¹⁵

- Parámetros térmicos bajo las condiciones en que se lleva a cabo las operaciones de transferencia de calor, y un valor preciso del área de intercambio térmico.
- Una estimación precisa de los efectos producidos por los fenómenos de difusión, y conocimiento de la disposición que favorece la transferencia de masa en el sistema.
- Información con respecto a la operación en condiciones dinámicas y a las posibles perturbaciones sobre el sistema, vigilando como cambian las variables de proceso con el tiempo.
- El desarrollo de un modelo matemático que permita mejorar el rendimiento de la reacción.

En la escala semi-industrial, se construyen unidades industriales en un tamaño menor (relación 1:10 con respecto a la escala final), siendo unidades de demostración¹⁶. A continuación, se muestran algunas reglas generales en el escalado de reactores¹⁷:

- Las concentraciones iniciales de entrada a los reactores deben ser iguales.
- La calidad del producto debe ser la misma en ambos reactores.
- En ambos reactores, la temperatura de operación debe ser la misma para operación isotérmica, y si la temperatura es variable debe seguir el mismo comportamiento en ambas unidades.
- Adicionalmente, el comportamiento de la velocidad de reacción debe ser igual en ambos reactores. Para sistemas homogéneos esto implica que existe igualdad entre los cambios de temperatura y concentración en el sistema. Para sistemas

¹⁴ COKER. A. Op. cit., 1035. párr. 2.

¹⁵ *Ibíd.*, p. 1035. párr. 3.

¹⁶ *Ibíd.*, p. 1035. párr. 4.

¹⁷ DE LA PEÑA, Ramón. Técnicas de escalamiento aplicadas al diseño de procesos químicos [En línea]. Monterrey, México, 1978. p. 15-18 [Consultado: 11 de enero de 2019]. Disponible en internet: <http://www.ai.org.mx/presentacion/técnicas-de-escalamiento-aplicadas-al-diseño-de-procesos-químicos>

heterogéneos (por ejemplo, solido-gas) en algunos casos involucra igualdad de concentraciones, número de Reynolds, de diámetro de partícula, y de propiedades físicas y químicas.

- Las no idealidades en el reactor industrial deben ser menores o iguales a las que se tienen en la escala piloto.

Con respecto a los reactores por lotes y continuos de tanque agitado, el principal problema se encuentra en el escalamiento del tiempo de mezclado para alcanzar la uniformidad en el sistema¹⁸. Para que en el sistema reactivo se cumpla la suposición mezclado perfecto, el tiempo de vida medio de la reacción debe ser 8 veces mayor que el tiempo de mezclado para alcanzar la uniformidad en la mezcla¹⁹. Para lograr esta condición en volúmenes de reacción considerablemente grandes, se debe hacer un pretratamiento de los reactivos, realizando la agitación a temperaturas lo suficientemente bajas donde la reacción no sea factible, o llevar a cabo una operación de premezclado y precalentamiento antes de alimentar los reactivos al reactor²⁰.

Por otro lado, algunas estrategias para incrementar la capacidad de un reactor tubular se muestran a continuación²¹

- Configurar reactores idénticos en paralelo.
- Para sistemas a densidad constante se aumenta la longitud del reactor.
- Para reacciones en fase gaseosa en operación adiabática, se aumenta el diámetro del tubo manteniendo constante la longitud del reactor.
- Si se usa como herramienta de escalado la similaridad geométrica, se incrementa tanto la longitud como el diámetro del reactor, con el fin de mantener constante la relación entre el diámetro y la longitud.

1.2 PLANTAS PILOTO

Una planta piloto consiste en partes específicas ensambladas que operan como un todo armónico con el propósito de reproducir a escala procesos productivos; se involucran fenómenos simples y/o complejos de interés para la ingeniería química, permitiendo la profundización de las interacciones existentes en operaciones tales

¹⁸ NAUMAN, Bruce. Chemical Reactor Design, Optimization, and Scale Up. Rensselaer Polytechnic Institute, 2008. p. 73.

¹⁹ *Ibíd.*, p. 26.

²⁰ *Ibíd.*, p. 73

²¹ *Ibíd.*, p. 113.

como la termodinámica, el flujo de fluidos, la transferencia de masa y energía, las reacciones químicas, la biotecnología, el control de procesos, entre otras²². Los propósitos principales de la operación en planta piloto son²³

- Predecir el comportamiento del proceso a nivel industrial, operando a condiciones similares a las esperadas, obteniendo datos importantes en el diseño de la planta a escala industrial.
- Reproducir una planta de producción ya existente, con el fin de observar el comportamiento del proceso a las variaciones en las condiciones de operación, de manera más rápida y económica, a si se hicieran en la planta.

La actividad de la investigación es la que más tiempo conlleva, sin embargo, la etapa de experimentación en planta piloto es la etapa más costosa de la actividad de investigación y desarrollo²⁴.

1.2.1 Costos operacionales. Una planta piloto que opera de manera discontinua puede llegar a consumir materias primas a una gran velocidad, si se compara con escalas inferiores, y es mayor el gasto para unidades mayores y de operación continua²⁵. En algunos casos el costo de disposición de residuos excede los costos de las materias primas, por lo que sugiere que antes de la puesta en marcha, se debe realizar un análisis exhaustivo de las corrientes residuales que se esperan y de las posibilidades existentes para su tratamiento, de forma que se pueda contar con los planes necesarios²⁶.

1.2.2 Tipos de planta piloto. Se pueden clasificar las plantas piloto, como multipropósito, y como unipropósito.

1.2.2.1 Plantas piloto multipropósito. Este tipo contiene distintos equipos de proceso de tamaño pequeño, como tanques, reactores, columnas, intercambiadores de calor, centrifugas, secadores, bombas, etc. disponibles para unirse en la configuración que se desee para un propósito determinado²⁷. El tamaño

²² ANAYA, Alejandro y PEDROZA, Humberto. Escalamiento, el arte de la ingeniería química: plantas piloto, el paso entre el huevo y la gallina. Tecnología, Ciencia, Educación, vol. 23, núm. 1, Instituto Mexicano de Ingenieros Químicos A. C. Monterrey, México. Enero-junio, 2008, p. 32.

²³ *Ibíd.*, p. 32, 33.

²⁴ QUIJADA, Genoveva. Propuesta de diseño y construcción de un sistema de lavado y purificado de gases de combustión, en planta piloto; método de absorción-adsorción. Capítulo 10. Planta piloto [en línea]. Biblioteca digital. Hermosillo, México. p. 107. Disponible online: <http://tesis.uson.mx/digital/tesis/docs/4324/Capitulo10.pdf>

²⁵ GONZALEZ, Roberto. Op. cit., p. 114.

²⁶ *Ibíd.* p. 115. párr. 3.

²⁷ *Ibíd.*, p. 115. párr. 7.

de los reactores está en el rango de 20 a 2000 litros, donde los materiales de construcción son generalmente acero inoxidable y acero recubierto con vidrio²⁷.

Este tipo de plantas resulta muy costosa en su concepción inicial, pero después de instalada, se cubren todas las necesidades posibles de los ingenieros de planta piloto, y si es necesario realizar una corrida en específico, los gastos en equipos son prácticamente nulos, limitándose a alguna reconstrucción de tuberías²⁸.

1.2.2.2 Plantas piloto unipropósito. En una planta piloto específica o unipropósito, los equipos se instalan y se interconectan con tuberías para llevar a cabo un trabajo específico requerido por el proyecto, de manera muy similar a como estaría montada la planta a escala comercial²⁹.

Además, algunas de sus ventajas son:

- La planta piloto quedará disponible para trabajo experimental cuando la planta a escala total entre en funcionamiento, lo que ayudará a solucionar problemas específicos del proceso, incluso empleando corrientes reales de la planta industrial.
- La unidad específica puede ser montada sobre esquíes y transportada al lugar donde se instalará la planta definitiva para entrenamiento de personal y para la resolución de problemas.
- Se puede ver más claramente la factibilidad de una planta piloto que reproduce una planta a escala industrial, considerando la relación física que existe entre ambas.

1.2.3 Escala de la planta piloto. Son varios los factores que determinan el tamaño de la planta piloto. Los límites quedan fijados por la cantidad de producto necesario que permita determinar el efecto de las impurezas sobre la reacción, la eficiencia de la separación, y la calidad del producto; así como por la necesidad de fabricar suficiente producto para probar el mercado³⁰. En la tabla 1 se presentan los factores más importantes en el diseño y escalamiento.

Como puede verse en el caso de reactores que operan por lotes, el factor de escala máximo para llevar de planta piloto a escala industrial, es de 100:1 con respecto al volumen, y para reactores continuos se tiene una relación igual para el caso de escalamiento de la velocidad de flujo.

²⁸ *Ibíd.*, p. 116. párr. 2.

²⁹ *Ibíd.*, p. 116. párr. 6.

³⁰ QUIJADA, Genoveva. *Op. cit.*, p. 108.

Tabla 1. Factores en el diseño y escalamiento de equipos de proceso.

Equipo	¿Es imprescindible la experimentación en planta piloto?	Variables principales para el diseño operacional (además del flujo)	Variables principales que caracterizan el tamaño o capacidad	Relación máxima de escalamiento a industria basada en la variable de caracterización	Factor aproximado de seguridad recomendado (%)
Columnas empacadas	No	-Datos de equilibrio -Veloc. Superficial del vapor	Veloc. de flujo	100:1	15
			Diámetro	10:1	
Reactores batch	Si	-Veloc. de reacción -Estado de equilibrio	Volumen	100:1	20
			Tiempo de residencia	-	
Reactores continuos	Si	-Veloc. de reacción -Estado de equilibrio	Velocidad de flujo	100:1	20
			Tiempo de residencia	-	
Bombas	No	Presión a la descarga	Velocidad de flujo	100:1	10
			Suministro de fuerza	100:1	
Cambiadores de calor tubulares	No	- Temperaturas - Viscosidades - Conductividad térmica.	Velocidad de flujo	100:1	15
			Área de transferencia de calor	100:1	

Fuente: Adaptado de QUIJADA, Genoveva. Propuesta de diseño y construcción de un sistema de lavado y purificado de gases de combustión, en planta piloto; método de absorción-adsorción. Capítulo 10. Planta piloto [En línea], Hermosillo, México, 1995. p. 109. Disponible en internet: <http://tesis.uson.mx/digital/tesis/docs/4324/Capitulo10.pdf> . [Consultado: 28 de junio de 2018].

1.2.4 Seguridad en planta piloto. Independientemente de cuan simple o sofisticada sea una instalación piloto, siempre se debe hacer frente a los peligros físicos y químicos potenciales en una escala nunca probada anteriormente, lo que puede incluir sólidos pirofóricos, líquidos corrosivos, productos químicos tóxicos, reacciones exotérmicas, mezclas explosivas, etc. habiendo también errores operativos como malinterpretación de instrucciones, uso de equipamiento impropio, zona de trabajo abarrotada y mal organizada, entre otras³¹. Además, se debe considerar la cinética química de las reacciones, así como el efecto térmico que puedan tener sobre el reactor, para prevenir posibles riesgos en la etapa de experimentación en planta piloto.

1.2.5 Selección del tipo de alimentación. La selección del tipo de alimentación dependerá de las características de los fluidos, de la cantidad de carga, así como

³¹ GONZALEZ, Roberto. Op. cit., p. 121.

la precisión en la velocidad de flujo volumétrico de entrada a los equipos. La selección se hará entre alimentación por gravedad; para el caso de líquidos limpios y de poca viscosidad, pudiendo ser controlados por recipientes de carga constante (además si están hechos en vidrio, se puede chequear visualmente la cantidad de alimentación), o si el líquido está libre de sólidos puede emplearse una válvula de agujas, o mediante el empleo de equipamiento de potencia como bombas y compresores; o para el caso en que las corrientes contienen sólidos, o tienen una alta viscosidad, o se requiere un control de la proporción de múltiples corrientes de alimentación³². En el caso en que se alimenten sólidos, se sugiere utilizar una tolva, y si el material tiende a aglomerarse, puede disolverse en el líquido más adecuado para alimentarlos por esa vía³³.

1.2.6 Operación de la planta piloto. Se puede operar de manera continua o discontinua. Para el caso de operación discontinua, el modo de operación tiene un grado de similitud con la escala de laboratorio, y permiten el uso de reactores tipificados, y los sistemas de alimentación no tienen que ser demasiado sofisticados, así como la descarga de productos y toma de muestras es relativamente sencilla, mientras que por el otro lado, la operación en continuo es más compleja para operar y controlar, pero las piezas de los equipos son más pequeñas, así como el inventario es menor que en los procesos discontinuos³⁴.

En cuanto a los requerimientos de materia prima el tamaño requerido de los equipos se debe limitar de manera tal que se ajuste a la disponibilidad de espacio de almacenaje, y para la disposición de residuos se puede emplear según convenga incineración (en un incinerador registrado y aprobado legalmente), limpieza y recirculación para su conversión en un producto comercial. Para el caso de corrientes de agua limpia como agua de enfriamiento que no entra en contacto con el fluido, estas se pueden desechar por el alcantarillado, teniendo la aprobación pertinente de los organismos encargados de la protección del medio ambiente³⁵.

Para la toma de muestreos se debe garantizar que el sistema de muestreo obtenga datos representativos de la reacción, y la utilización de recipientes adecuados que permitan mantener las condiciones en las cuales estaba la reacción a la hora de tomar la muestra³⁶.

1.2.7 Adquisición de datos. Se puede hacer toma de datos de manera manual; siendo la opción más económica y viable para reacciones que no son críticas, garantizando que se tomen los datos en los intervalos predeterminados, pudiendo tener problemas al instante de detectar las pequeñas variaciones de las variables

³² *Ibíd.*, p. 125.

³³ *Ibíd.*, p. 126. párr. 1.

³⁴ *Ibíd.*, p. 126. párr. 5.

³⁵ *Ibíd.*, p. 127.

³⁶ *Ibíd.*, p. 128.

que se están midiendo, así como presentar errores en la transcripción; o con el uso de registradores electrónicos o mecánicos, los cuales son más costosos, pero no hay límites para el número de registros que se pueda hacer³⁷.

1.2.8 Procedimientos operacionales. González Castellanos³⁸ indica que la operación comienza con la circulación de agua o de algún otro solvente, lo que sirve como un chequeo y una indicación preliminar de que los operadores conocen la forma en la que opera el equipamiento, además de limpiar las escorias, residuos de materiales aislantes y cualesquiera otros residuos que normalmente se acumulan en las tuberías y equipos. Posteriormente, se opera con los reactivos químicos de manera lenta pero segura, y se pone el equipo en marcha llegando al instante en que se pueden variar las condiciones de operación según convenga, para tomar datos y estudiar el proceso³⁸. González afirma que debe mantenerse un control riguroso de las condiciones de operación, y de la adquisición de datos, añadiendo que: "...hay que recordar que variaciones menores de la temperatura en un reactor piloto puede convertirse, en el caso de la instalación completa, en un peligroso descontrol de la reacción."³⁹

El autor mencionado previamente, finaliza sugiriendo que debe pararse la corrida de la planta por uno o dos días en el caso en que se encuentre adversidades o dificultades muy superiores a las previstas, de tal forma que puedan detectarse las fallas, y solucionarlas para poner de nuevo en marcha la planta piloto.

1.2.9 Procedimiento después de la corrida. Se debe realizar una parada ordenada, y realizar posteriormente una limpieza cuidadosa de toda la instalación, hasta alcanzar niveles seguros en el interior del sistema; si la instalación es multipropósito, esta se debe dejar en condiciones tales que pueda iniciarse de inmediato un nuevo proyecto o corrida, y por otro lado, si la instalación es unipropósito se deberán realizar los trabajos de mantenimiento que sean necesarios para que también quede lista para una nueva puesta en marcha⁴⁰.

1.3 REACTORES

1.3.1 Ecuaciones de diseño. Para un sistema donde ocurre una reacción química, se puede escribir el balance molar o de masa de la siguiente forma:

$$\textit{Entra} - \textit{Sale} + \textit{Genera} = \textit{Acumula} \qquad \text{Ec. 1}$$

³⁷ *Ibíd.*, p. 129.

³⁸ *Ibíd.*, p. 131.

³⁹ *Ibíd.*, p. 132.

⁴⁰ *Ibíd.*, p. 132.

Cuya notación para el componente A, involucrado en la reacción, será:

$$F_{A0} - F_A + G_A = \frac{dN_A}{dt} \quad \text{Ec. 2}$$

Donde N_A representa el número de moles de la especie A en el sistema en el tiempo t . Si todas las variables del sistema como temperatura, actividad catalítica, concentración de la especie química, son espacialmente uniformes en todo el volumen del sistema, la velocidad de generación de la especie A, G_A , es solo el producto del volumen de reacción V , por la velocidad de formación de la especie A, r_A .⁴¹

$$G_A = r_A V \quad \text{Ec. 3}$$

Por otro lado, si la velocidad de formación de la especie A para la reacción, varía con la posición dentro del volumen del sistema, se expresará la velocidad de generación de la especie A como sigue⁴²:

$$G_A = \int_0^V r_A dV \quad \text{Ec. 4}$$

Sustituyendo la ecuación 4 en la ecuación 2, se tiene la ecuación básica para la ingeniería de las reacciones químicas⁴³.

$$F_{A0} - F_A + \int_0^V r_A dV = \frac{dN_A}{dt} \quad \text{Ec. 5}$$

A partir de esta ecuación general del balance de moles, puede desarrollarse las ecuaciones de diseño de los diferentes tipos de reactores industriales.

1.3.2 Reactores intermitentes. Un reactor intermitente se emplea en operaciones a pequeña escala para probar nuevos procesos que no se han desarrollado en su totalidad, para fabricar productos costosos, y para procesos difíciles de convertir en operaciones continuas⁴⁴.

En un reactor intermitente no hay flujos de entrada, ni de salida, mientras ocurre la reacción, por lo que del balance molar para el componente A, resulta la siguiente expresión:

⁴¹ FOGLER, Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. Pearson educación, México, 2008. p. 09.

⁴² *Ibíd.*, p. 10.

⁴³ *Ibíd.*, p. 39.

⁴⁴ *Ibíd.*, p. 10.

$$\frac{dN_A}{dt} = \int_0^V r_A dV \quad \text{Ec. 6}$$

Si el tanque está perfectamente mezclado, entonces la velocidad de reacción no variara de un punto a otro dentro del reactor, siendo constante a lo largo del volumen de reacción, y el balance molar resultara en:

$$\frac{dN_A}{dt} = r_A V \quad \text{Ec. 7}$$

La ecuación 7, corresponde a la forma diferencial del balance de masa de un reactor intermitente o por lotes. La ecuación de diseño de un reactor por lotes o intermitente, en términos de la conversión del reactivo limitante A (cantidad de la especie A que reacciona sobre la cantidad de la especie A que se alimenta inicialmente al reactor), será:

$$N_{A0} \frac{dX_A}{dt} = -r_A V \quad \text{Ec. 8}$$

También puede expresarse en términos de la concentración si el volumen de reacción es constante⁴⁵.

En la práctica, no todos los reactores de tanque agitado están perfectamente mezclados, y para llevar a cabo el modelamiento matemático se tienen en cuenta parámetros que explican la falta de idealidad del reactor, como por ejemplo “el volumen muerto del reactor” (V_D); que una vez ajustado o su valor es conocido, se puede aplicar a una metodología de “modelos de un parámetro”, con el fin de ajustar las expresiones matemáticas que describen el comportamiento del sistema a la realidad⁴⁶.

1.3.3 Reactores de flujo continuo.

1.3.3.1 Reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR). Es el tipo de reactor que se emplea sobre todo para reacciones en fase líquida, opera generalmente en estado estacionario (a excepción del arranque y la parada), y se asume que está perfectamente mezclado el tanque; sin embargo en reactores reales donde existe una agitación altamente no ideal, este modelo del CSTR resulta inadecuado, por lo que se debe recurrir a técnicas de modelaje como la distribución de tiempo de residencia⁴⁷, y/o modelos con un parámetro (volumen muerto del reactor o reactor

⁴⁵ *Ibíd.*, p. 12, 39.

⁴⁶ *Ibíd.*, p. 947.

⁴⁷ *Ibíd.*, p. 13.

con corto circuito) o dos parámetros (volumen muerto del reactor y reactor con corto circuito)⁴⁸.

Para una agitación ideal o perfecta las concentraciones, temperatura, y la velocidad de reacción no varían de una posición a otra dentro del reactor, ni en el tiempo. Aplicando la ecuación 5, general del balance de moles, para un CSTR que opera en estado estacionario se obtiene:

$$V = \frac{F_{A0} - F_{A0}}{-r_A} \quad \text{Ec. 9}$$

En términos de la conversión del reactivo limitante A, se obtiene la ecuación de diseño para un CSTR como se muestra en la ecuación 10.

$$V = \frac{F_{A0}X_A}{(-r_A)_{salida}} \quad \text{Ec. 10}$$

Como en el reactor hay mezclado perfecto, la composición, temperatura y velocidad de reacción de salida del reactor es idéntica a la composición del interior del mismo⁴⁹.

1.3.3.2 Reactor de flujo pistón (PFR). Los reactores de flujo pistón son reactores tubulares que se emplean con mayor frecuencia para reacciones en fase gaseosa, y operan en estado estacionario. Los materiales que reaccionan se consumen de manera continua a medida que fluyen a lo largo del reactor, y se asume que la variación de la concentración se da en 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 las de orden cero, también variará axialmente. Se considera que el campo de flujo puede representarse por un modelo correspondiente a un perfil de flujo pistón, es decir, de velocidad uniforme como en el flujo turbulento⁵⁰.

En la práctica, el perfil de velocidad no es plano, y existe dispersión axial; para compensar el grado de no idealidad de un reactor tubular se usan métodos como la elaboración del modelo como si fuese una secuencia CSTR de tamaño idéntico (bajo la premisa de representación de reactores reales usando una combinación de reactores ideales) o un método de modelo de dispersión que consiste en una modificación del reactor ideal imponiendo una dispersión axial al flujo tapón⁵¹. Los

⁴⁸ *Ibíd.*, p. 945.

⁴⁹ *Ibíd.*, p. 14, 43, 44.

⁵⁰ *Ibíd.*, p. 14.

⁵¹ *Ibíd.*, p. 948.

parámetros para los dos métodos previamente mencionados serían, el número de tanques y el coeficiente de dispersión, respectivamente⁴⁶.

El balance molar para un reactor de flujo pistón para el componente A en un segmento diferencial de volumen del reactor, resultara en:

$$\frac{dF_A}{dV} = r_A \quad \text{Ec. 11}$$

En términos de la conversión del reactivo limitante A, se tendrá:

$$F_{A0} \frac{dX_A}{dV} = -r_A \quad \text{Ec. 12}$$

1.3.3.3 Reactor de lecho empacado (PBR). Los reactores de lecho empacado (packed bed reactor) son reactores tubulares llenos de partículas de catalizador. La deducción de la forma diferencial e integral de las ecuaciones de diseño se hace de forma análoga a la del reactor tubular (PFR), donde se sustituye la coordenada de volumen por la coordenada de masa del catalizador W. También se hacen las suposiciones de que no hay gradientes radiales de concentración, temperatura ni velocidad de reacción. Del balance molar para un reactor de lecho empacado se obtiene la ecuación simplificada:

$$F_{A0} \frac{dX}{dW} = -r'_A \quad \text{Ec. 13}$$

En ausencia de la caída de presión se puede obtener una expresión de la integración con fronteras X=0 y W=0 obteniendo:

$$W = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r'_A} \quad \text{Ec. 14}$$

De la cual se puede obtener la masa del catalizador para alcanzar cierta conversión⁵².

1.3.3.4 Reactores en serie. Para los reactores conectados en serie la corriente de salida de un reactor es la corriente de alimentación del siguiente. La conversión está dada por la siguiente ecuación:

$$X_i = \frac{\text{moles totales de A que han reaccionado hasta el punto } i}{\text{moles de A alimentadas al primer reactor}} \quad \text{Ec. 15}$$

⁵² Ibíd., p. 19, 45.

Sin embargo, solo se utiliza cuando la alimentación entra únicamente al primer reactor de la serie y no hay corrientes de alimentación o descarga laterales⁵³.

La velocidad del flujo molar de A en el punto i es igual a las moles de A alimentadas al primer reactor menos todas las moles de A que han reaccionado hasta el punto i:⁵⁴

$$F_{Ai} = F_{A0} - F_{A0}X_i \quad \text{Ec. 16}$$

➤ **CSTR en serie.** Para el primer reactor de la serie, el balance molar será

$$F_{A0} - F_{A1} + r_{A1}V_1 = 0 \quad \text{Ec. 17}$$

El flujo molar a la salida puede expresarse en términos del flujo de alimentación y la conversión en el primer reactor

$$F_{A1} = F_{A0} - F_{A0}X_1 \quad \text{Ec. 18}$$

Combinando y reacomodando las ecuaciones 17 y 18 se obtiene:

$$V_1 = F_{A0} \frac{X_1}{-r_{A1}} \quad \text{Ec. 19}$$

En el segundo reactor la velocidad desaparición de A es $-r_{A2}$ se evalúa para la conversión de la corriente de salida del reactor 2, X_2 . Replanteando el balance molar para el segundo reactor:

$$F_{A1} - F_{A2} + r_{A2}V = 0 \quad \text{Ec. 20}$$

Donde la velocidad de flujo molar de A en el punto 2 es:

$$F_{A2} = F_{A0} - F_{A0}X_2 \quad \text{Ec. 21}$$

Combinando y reacomodando:

$$V_2 = \frac{F_{A1} - F_{A2}}{-r'_{A2}} = \frac{(F_{A0} - F_{A0}X_1) - (F_{A0} - F_{A0}X_2)}{-r'_{A2}} \quad \text{Ec. 22}$$

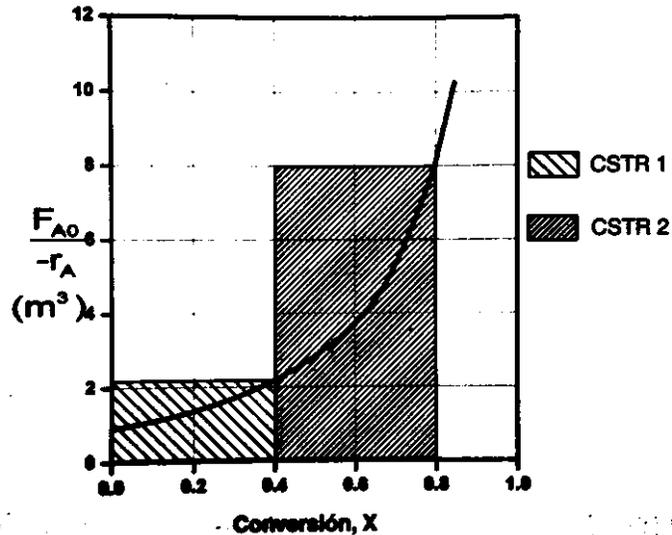
$$V_2 = \frac{F_{A0}}{-r'_{A2}} (X_2 - X_1) \quad \text{Ec. 23}$$

⁵³ *Ibíd.*, p. 54.

⁵⁴ *Ibíd.*, p. 54.

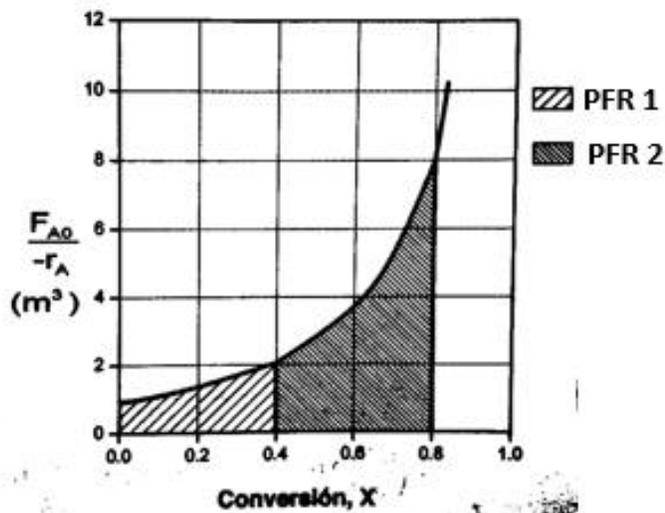
Con una secuencia de reactores CSTR se puede aproximar a un reactor PFR. Es decir, se puede elaborar un modelo de PFR empleando un gran número de CSTR en serie⁵⁵.

Figura 1. Representación gráfica de dos CSTR en serie, para aproximar el volumen de un PFR, con la misma conversión.



Fuente: FOGLER, Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. Pearson educación, México, 2008. Dos CSTR en serie [Gráfico].

Figura 2. Representación gráfica de dos PFR en serie, para aproximar el volumen de un PFR, con la misma conversión.



Fuente: FOGLER, Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. Pearson educación, México, 2008. Dos PFR en serie [Gráfico].

⁵⁵ *Ibíd.*, p. 58.

➤ **PFR en serie.** Los dos CSTR en serie proporcionan un volumen global más pequeño que un solo CSTR para lograr la misma conversión. En cambio, para los PFR conectados en serie el volumen global de los reactores es igual, a si se usara un PFR para alcanzar la misma conversión (figura 2)⁵⁶.

1.3.4 Reactores de estado no estacionario.

1.3.4.1 Operación en estado no estacionario de un CSTR. El arranque de un reactor es importante por la forma en que la temperatura y la concentración se aproximan a sus valores en estado estacionario. Por ejemplo, el exceso de temperatura podría degradar algún reactivo o producto, o también podría ser inaceptable para la operación segura. Aunque se puedan resolver numéricamente las ecuaciones de temperatura-tiempo y concentración-tiempo en estado no estacionario, es mejor estudiar el método para alcanzar el estado estacionario usando el plano de fase temperatura contra concentración⁵⁷. En la ecuación 24, se muestra el balance de moles sin anular el diferencial de número de moles A con tiempo.

$$F_{A0} - F_A + r_A V = \frac{dN_A}{dt} \quad \text{Ec. 24}$$

1.3.4.2 Operación en estado no estacionario de un PFR. Despreciando los cambios de presión total y trabajo de eje se obtiene la siguiente ecuación, correspondiente al balance de energía:

$$UA (T_r - T) - (\Sigma F_i C_{Pi}) \frac{dT}{dV} + (-r_A) [-\Delta H_{Rx}(T)] = \Sigma C_i C_{Pi} \frac{dT}{dt} \quad \text{Ec. 25}$$

Con los correspondientes balances molares

$$\frac{-dF_i}{dV} + v_i (-r_A) = \frac{dC_i}{dt} \quad \text{Ec. 26}$$

Y la ley de velocidad:

$$(-r_A) = k(T) f(C_i) \quad \text{Ec. 27}$$

1.4 CONCEPTOS BÁSICOS DE CORROSIÓN

Cuando un metal está expuesto a un medio, el metal se puede comportar de tres formas; de manera inmune, cuando el metal no reacciona, es estable termodinámicamente en el respectivo ambiente, no existe una pérdida de material,

⁵⁶ *Ibíd.*, p. 58.

⁵⁷ *Ibíd.*, p. 619.

y por tanto la reacción de corrosión no ocurre de forma espontánea; de manera activa, cuando el metal se corroe, producto de la reacción con el medio, el metal se disuelve en la solución formando compuestos solubles en el medio que no detienen el avance de la corrosión, perdiendo el metal parte de su material; de manera pasiva, cuando ocurre una reacción entre los iones del medio y el metal, formando una capa insoluble en el medio (película pasiva) que termina protegiendo el metal del daño por corrosión, aunque si esta capa se termina desvaneciendo o disolviendo en el medio por perturbaciones en el sistema, entonces el metal puede pasar del estado pasivo al estado activo, ocurriendo corrosión⁵⁸.

Los tipos de corrosión pueden dividirse en ocho categorías en base a los efectos sobre el material debido al daño por corrosión, o el mecanismo de reacción.

1.4.1 Corrosión uniforme. Resulta de un ataque corrosivo que se desarrolla uniformemente sobre toda la superficie. Se genera por exposición a la atmosfera, en especial ambientes industriales, o por exposición a aguas salinas, o químicos⁵⁹.

1.4.2 Corrosión por picadura. El material presenta pequeñas perforaciones localizadas en una parte de la superficie, que por otro lado no presenta áreas afectadas. Los ambientes que desarrollan este tipo de corrosión son el agua marina, y en general las aguas que en su composición contengan iones cloro⁶⁰.

1.4.3 Corrosión por cavidades. Es una forma de corrosión localizada que ocurre en intersticios de entre dos superficies metálicas o una metálica y la otra no metálica⁶¹. La bibliografía indica que para combatir este fenómeno se debe⁶²

- Evitar en la fase de diseño la formación de intersticios abiertos hacia el ambiente corrosivo.

- Durante el montaje, evitar que por debajo de los bordes queden aprisionados depósitos de suciedad, arena o polvo.

- Hacer una cuidadosa limpieza de las piezas, evitando la formación de depósitos.

1.4.4 Corrosión galvánica. Se da cuando dos metales distintos están en contacto eléctrico, y sumergidos en el mismo electrolito (incluyendo la humedad de la atmosfera), de tal forma que el material más activo de los dos se corroe a una

⁵⁸ DAVIS. J. R. Corrosion: Understanding the basics. ASM International, Material Park, Ohio, 2000. p. 22. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: http://dl.iran-mavad.com/pdf95/Corrosion%20Understanding%20the%20Basics_iran-mavad.com.pdf

⁵⁹ Ibid., p. 100, 101, 102.

⁶⁰ Resistencia a la corrosión de los aceros inoxidable [En línea]. p. 2. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <http://bonnet.es/resitcorrosion.pdf>

⁶¹ DAVIS. J. R. Corrosion: Understanding the basics. Op., cit. p. 107.

⁶² Resistencia a la corrosión de los aceros inoxidable [En línea]. Op., cit. p. 3.

velocidad mayor, mientras que el otro quedará protegido, y su velocidad de corrosión será menor⁶³. La bibliografía indica que para evitar este tipo de corrosión se debe utilizar el mismo material o evitar el contacto eléctrico entre los dos materiales distintos a unir.

1.4.5 Corrosión intergranular. Es un tipo de corrosión localizada a escala microscópica en los límites de grano de la aleación, siendo en el acero inoxidable la consecuencia del agotamiento del cromo sobre los límites del grano en zonas sensibilizadas por procesos térmicos, con la formación de carburos de cromo⁶⁴. Para evitar la corrosión intergranular, la bibliografía sugiere:

- No enfriar ni calentar lentamente en el rango de temperaturas de 450 a 850°C.
- Emplear aceros con bajo contenido de carbono (aceros de grado “L”).
- “Se pueden redissolver los carburos de cromo calentando la pieza sensibilizada a una temperatura de 1036 a 1150 °C seguido de un enfriamiento rápido con agua o aire forzado”⁶⁴.

1.4.6 Corrosión de fractura bajo tensión. La superficie del material expuesta al medio corrosivo deberá estar bajo esfuerzo de tensión (resultado de cargas aplicadas, presión interna en el sistema) y el medio corrosivo (presencia de cloruros, sosa caustica, y sulfuros bajo condiciones de alta temperatura) deberá específicamente ser causa de la corrosión bajo tensión. Es poco común que ocurra a temperaturas menores a los 50°C.⁶⁵

⁶³ *Ibíd.*, p. 5.

⁶⁴ *Ibíd.*, p. 3-4.

⁶⁵ *Ibíd.*, p. 4.

2. PLANTEAMIENTO METODOLÓGICO PARA LA CARACTERIZACIÓN OPERACIONAL DEL BANCO DE REACTORES

Del documento “MANUAL DE OPERACIÓN DEL BANCO DE REACTORES”, y el diagrama de flujo de procesos proporcionado por Process Solutions and Equipment (PSE S.A.S.) se obtuvo la información para el desarrollo del presente capítulo. Se desarrolla una caracterización técnica y operacional de banco de reactores, y se muestran los protocolos de operación, requerimientos de instalación y operación. Posteriormente, se caracteriza el material de construcción del banco de reactores con el fin de seleccionar reacciones químicas cuyas especies involucradas no generen corrosión. Adicionalmente, en la selección de reacciones se tuvo en cuenta consideraciones con respecto en el manejo de las sustancias, en la disposición de residuos, el interés académico, industrial, y en investigación de cada reacción, así como los precios de los reactivos. Finalmente, para cada sistema reactivo se eligió la configuración de reactores para operar en la planta piloto.

El banco de reactores cuenta con un conjunto de reactores que pueden operar bajo diferentes configuraciones. El equipo cuenta con el banco de reactores de tanques agitados. Esta unidad del equipo está compuesta principalmente por:

- Un reactor de tanque agitado de 3 L.
- Tres reactores de tanque agitado en serie de 1 L. de capacidad.

Cada reactor cuenta con:

- Un sistema de velocidad de agitación regulable.
- Chaqueta térmica.
- Condensador.
- Válvula de alivio de gases.
- Válvula toma muestras.
- Indicadores de nivel, presión, y temperatura.

En esta unidad del banco de reactores, se sugiere llevar a cabo reacciones homogéneas en fase líquida.

Por otra parte, la unidad cuenta con el banco de reactores tubulares, constando principalmente por:

- Un reactor tubular de 3 L. de capacidad.

- Tres reactores tubulares en serie de 1 L. de capacidad.
- Un reactor multitubular de lecho empacado de 9 tubos con capacidad de 1 L.

Cada reactor cuenta con un sistema de calentamiento o enfriamiento mediante una chaqueta térmica, con mezclador estático, manómetro, termocuplas, y válvulas toma muestras a lo largo del reactor, y en las entradas y salidas. En esta unidad del equipo se recomienda llevar a cabo reacciones en fase líquida, gas, o reacciones heterogéneas catalíticas.

Los dispositivos y unidades del banco de reactores se pueden revisar en la tabla 2.

Tabla 2. Unidades y dispositivos del banco de reactores.

Unidad	Descripción	Cantidad
Reactor	Tanque agitado	4
	Tubular	4
	Multitubular	1
Tanque	Alimentación reactivos	2
	Alimentación aceite térmico	2
	Descarga de productos	2
Intercambiador de calor	Tubos y coraza	4
Bombas	Dosificadora de reactivos	2
	Centrifuga de aceite térmico	2
Amortiguador de pulsaciones	-	2
Distribuidor de flujo	-	7
Instrumento de medición	Termopar tipo J	55
	Manómetro	22
	Indicador de nivel	10
	Rotámetro	4
Válvulas	Válvula de bola	152
	Válvula de globo	2
	Válvulas de seguridad	6
	Válvulas de retención	16
	Válvulas toma muestra	39
Mezcladores estáticos	-	3

Fuente: Elaboración propia.

El equipo cuenta con

- Tanques para el almacenamiento de los reactivos y de los productos.
- Sistema de mezclado.

- Precalentadores.
- Sensores y controladores de las variables de proceso.
- Tablero de control.
- Estructura modular construida sobre ruedas para su fácil desplazamiento.

Además, tiene un tablero de control de las siguientes características:

- Construido en acero inoxidable 304.
- Tiene pantalla HMI (Human-Machine-Interface en inglés, interfaz maquina-hombre en castellano) para el monitoreo y control general de todas las variables de proceso, y su respectivo almacenamiento para su posterior análisis.
- Internamente consta de drivers de potencia para el control de los actuadores como lo son variadores de frecuencia y relés de estado sólido.
- Contiene una unidad de control lógico programable SIMATIC S7-1200 1214C, con los correspondientes módulos de comunicación, y adecuación de señales.
- Adentro del tablero, se encuentran las protecciones termo-magnéticas de subsistemas, y un sistema totalizador.

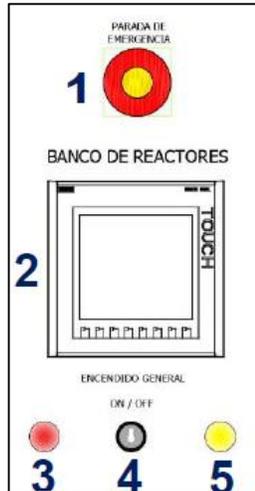
Los componentes del tablero de control se muestran en la tabla 3, y la ilustración del tablero de control, en la figura 3.

Tabla 3. Componentes visibles del tablero de control del banco de reactores.

Identificación	Descripción
1	Parada de emergencia
2	Pantalla táctil
3	Alarma de alta temperatura
4	Interruptor principal
5	Testigo de energización

Fuente: Modificado a partir de PSE, Manual de operación del banco de reactores.

Figura 3. Representación del tablero de control del banco de reactores.



Fuente: PSE, Manual de operación del banco de reactores.

El equipo es robusto, durable, y puede ser utilizado para operar en continuo, por lotes, o semi-lotes. Además, añade que el equipo se puede utilizar para docencia, investigación y extensión. El banco de reactores está construido en acero inoxidable 304.

2.1 CARACTERIZACIÓN DEL BANCO DE REACTORES DE TANQUES AGITADOS

2.1.1 Caracterización técnica del banco de reactores de tanques agitados. En la tabla 4, se encuentran el tipo y cantidad de dispositivos con los que cuenta el banco de reactores de tanques agitados:

Tabla 4. Unidades y dispositivos del banco de reactores de tanques agitados.

Unidad	Descripción	Cantidad
Reactor	Tanque agitado	4
Tanque	Alimentación reactivos	2
	Alimentación aceite térmico	2
	Descarga de productos	1
Intercambiador de calor	Tubos y coraza	3
Bombas	Dosificadora de reactivos	2
	Centrifuga de aceite térmico	2
Amortiguador de pulsaciones	-	2
Distribuidor de flujo	-	4

Tabla 4. (Continuación)

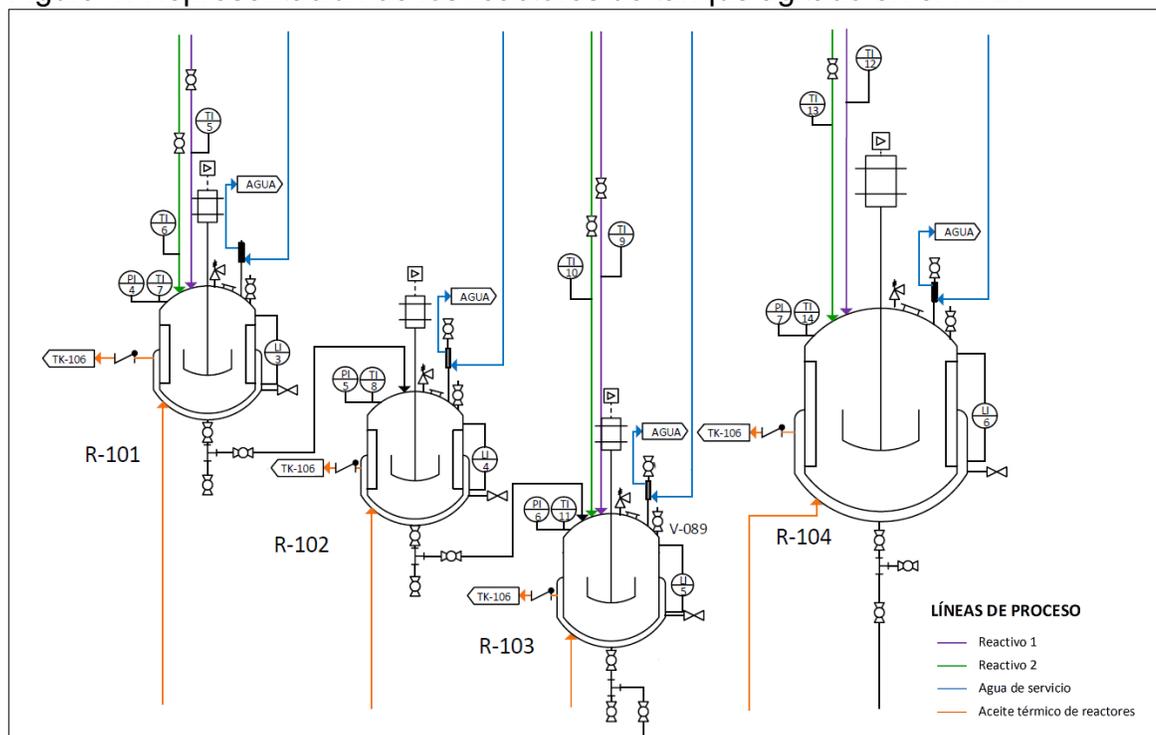
Unidad	Descripción	Cantidad
Instrumento de medición	Termopar tipo J	18
	Manómetro	11
	Indicador de nivel	9
	Rotámetro	2
Válvulas	Válvula de bola	97
	Válvula de globo	2
	Válvulas de seguridad	6
	Válvulas de retención	6
	Válvulas toma muestra	4

Fuente: Elaboración propia.

A continuación, se hace una descripción de los equipos y dispositivos con los que cuenta el banco de reactores de tanques agitados.

2.1.1.1 Reactores. El banco de reactores de tanques agitados, cuenta con 4 reactores. Tres de ellos tienen una capacidad de 1 L, están dispuestos en serie, y sus etiquetas los identifican como R-101, R-102, y R-103. El ultimo reactor tiene una capacidad de 3 L, y está identificado como R-104. A continuación, en la figura 4 se muestra la representación de los reactores de tanque agitado en el diagrama de flujo de procesos y se mencionan las características:

Figura 4. Representación de los reactores de tanque agitado en el PFD.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

- Los reactores son cilíndricos de fondo redondeado.
- Cada reactor esta sellado con una tapa removible con empaques y tornillos de acero inoxidable 304.
- Los reactores están aislados térmicamente.
- Cada reactor cuenta con una chaqueta térmica, por donde circula un fluido de transferencia de calor (aceite térmico THERMOIL Z-100 ISO 32, o agua de servicio).
- Cada reactor cuenta con 4 deflectores removibles, para generar turbulencia en el interior de cada tanque.
- Cada reactor cuenta con un sistema de agitación regulable.
- Internamente cada tanque contiene un agitador de múltiples posiciones.
- El eje de agitación está construido en acero inoxidable, y permite ubicar los impulsores a diferentes alturas dentro del tanque.
- Cada reactor cuenta con una válvula toma-muestras, con un sistema anti retorno.
- Cada reactor cuenta con una válvula de bola en la línea de descarga de productos.
- Contiene ménsulas de acero inoxidable para el soporte de la estructura.

En la tapa removible se encuentra instalado:

- Una válvula de bola para el alivio de gases.
- Una válvula de seguridad.
- Entrada para carga de sólidos.
- Conexión al condensador.
- Conexión para la termocupla.
- Un sensor de presión.
- El motor de agitación (controlado por un variador de frecuencia) acoplado por medio de un sello mecánico que garantiza la hermeticidad.

A continuación, se muestra en la tabla 5, el número de identificación, la capacidad, y el material de construcción de cada reactor.

Tabla 5. Numero de etiqueta, volumen, y material de construcción de cada reactor del banco de reactores de tanques agitados.

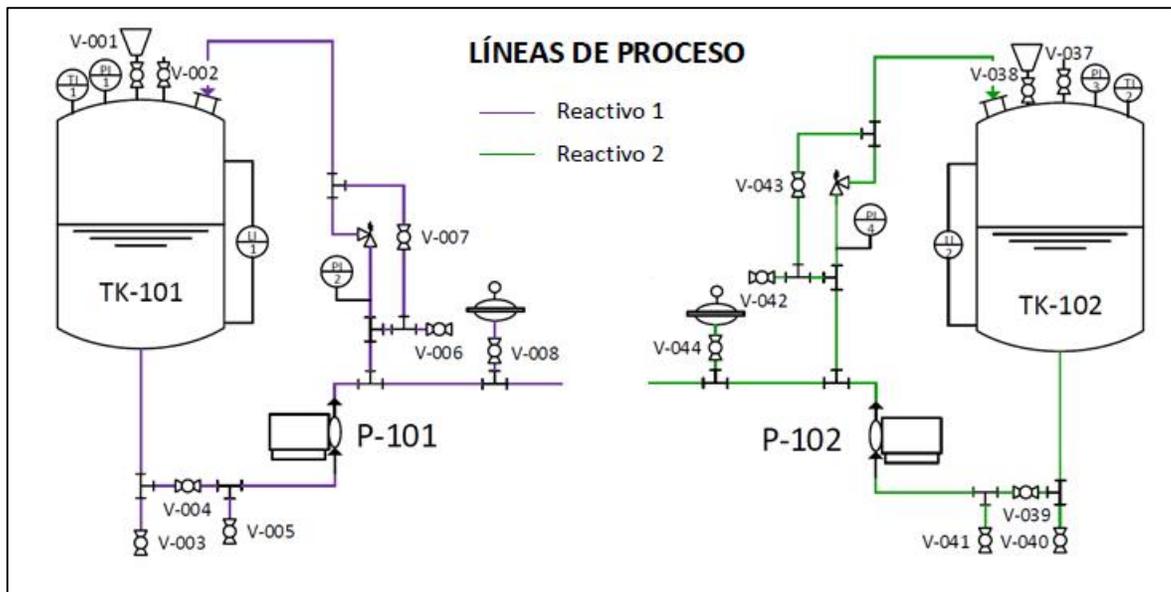
ID	Capacidad (L)	Material de construcción
R-101	1	Acero inoxidable 304
R-102	1	
R-103	1	
R-104	3	

Fuente: Elaboración propia.

2.1.1.2 Tanques de alimentación y de descarga.

➤ **Tanques de alimentación de reactivos y tanque de descarga de productos.** El banco de reactores de tanques agitados cuenta con dos tanques de alimentación de reactivos, TK-101 y TK-102, y un tanque de descarga de productos, TK-103. En la figura 5, se muestra la representación de los tanques de alimentación de los reactivos 1 y 2 en el diagrama de flujo de procesos.

Figura 5. Representación de los tanques de alimentación de los reactivos 1 y 2 en el PFD.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

Estos cuentan con las siguientes características:

- Los tanques están contruidos en acero inoxidable 304.

- Cada tanque tiene una capacidad de 15 L.
- Cuenta con un sistema de purga, mediante válvulas de bola en acero inoxidable 304 en el fondo del tanque.
- La tapa removible viene con empaques y tornillos en acero inoxidable.
- El tanque cuenta con un sistema de recirculación con el fin de realizar calibraciones de la bomba y la purga.

En la tapa se encuentran instalados:

- Una válvula de bola de un cuarto de pulgada en acero inoxidable, para el alivio de gases.
- Un embudo de entrada con válvula de bola de un medio de pulgada.
- Conexión para la termocupla.
- Sensor e indicador de presión.
- Sensor e indicador de nivel.

➤ **Tanques de alimentación de aceite térmico.** Para el sistema de flujo de fluidos de servicio, el banco de reactores de tanques agitados cuenta con 2 tanques de aceite térmico, con las siguientes características:

- Cada tanque tiene una capacidad de 25 L.
- El material de los tanques es acero inoxidable 316.
- Cada tanque cuenta con una resistencia de 4.5 kW.
- Los tanques cuentan con control de temperatura.

Además, según el diagrama de flujo de procesos (anexo A), se encontraron las siguientes características adicionales:

- Sensor e indicador de temperatura.
- Sensor e indicador de presión.
- Sensor e indicador de nivel.
- Válvula de bola de carga, o alivio atmosférico.

- Sistema de recirculación para calibrar la bomba y la purga.

La identificación y sistema de flujo al que pertenece se muestra a continuación, en la tabla 6.

Tabla 6. Identificación y línea de flujo correspondiente de los tanques de alimentación de aceite térmico.

Identificación	Sistema de flujo
TK-105	Intercambiadores de calor E-101, y E-102.
TK-106	Reactores R-101, R-102, R-103, y R-104.

Fuente: Elaboración propia.

Según las especificaciones técnicas sobre el aceite térmico, utilizado en las operaciones de precalentamiento en los intercambiadores de calor E-101 y E-102, se tienen las siguientes características

- Referencia THERMOIL Z-100 ISO 32.
- Aceite tipo parafinico de alta estabilidad térmica.
- La viscosidad a 40°C es de 32 cSt.
- La gravedad API es de 0.88.

2.1.1.3 Intercambiadores de calor. En los intercambiadores de calor se llevan a cabo las operaciones de precalentamiento de las corrientes de alimentación de los reactivos, y el enfriamiento de la corriente de productos. El precalentamiento se realiza con aceite térmico THERMOIL Z-100 ISO 32, mientras la operación de enfriamiento se realiza con agua de servicio. El banco de reactores de tanques agitado tiene 3 intercambiadores de calor. Las características técnicas son las siguientes:

Tabla 7. Especificaciones técnicas de los intercambiadores de calor del banco de reactores de tanque agitado.

Característica	Descripción
Tipo	Tubos y coraza
Diámetro tubos	1/4" NPT
Numero de tubos	4
Longitud de los tubos (cm)	40
Diámetro interno coraza (cm)	6.6

Fuente: PSE, Manual de operación del banco de reactores.

La identificación, y descripción de la operación que lleva a cabo cada uno, se muestra a continuación:

Tabla 8. Identificación, ubicación, y función de los intercambiadores de calor del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Ubicación	Operación	Función
E-101	Línea de flujo de alimentación del reactivo 1 a los reactores.	Transferencia de calor entre la corriente de alimentación del reactivo 1, y aceite térmico del tanque TK-105.	Pre calentamiento de la corriente de alimentación del reactivo 1 a los reactores.
E-102	Línea de flujo de alimentación del reactivo 2 a los reactores.	Transferencia de calor entre la corriente de alimentación del reactivo 2, y aceite térmico del tanque TK-105.	Pre calentamiento de la corriente de alimentación del reactivo 2 a los reactores.
E-103	Línea de flujo de descarga de productos de los reactores de tanques agitados.	Transferencia de calor entre la corriente de producto de los reactores de tanques agitados, y agua de servicio.	Enfriamiento de la corriente de productos para descargarla en el tanque de producto TK-103.

Fuente: Elaboración propia.

2.1.1.4 Tuberías. Las características técnicas del sistema de tuberías, en acero inoxidable 304, se pueden revisar en la tabla 9.

Tabla 9. Especificaciones técnicas del sistema de tuberías del banco de reactores.

Sección	Diámetro interno (mm)	Empaques	Descripción
Alimentación de reactivos	9.97	EPDM	Alimenta los reactivos a cada reactor.
Mezcla de reactivos y productos	17.1		Lleva las mezclas de producto-reactivo al siguiente reactor o al enfriador, para luego ir al tanque de productos.
Sistema de flujo de aceite térmico		Viton	Alimenta y descarga el aceite de las chaquetas de reactores y coraza de pre calentadores.
Sistema de flujo de agua de enfriamiento		EPDM	Alimenta a condensadores y enfriadores.

Fuente: PSE, Manual de operación del banco de reactores.

2.1.1.5 Bombas y amortiguadores de pulsaciones. El banco de reactores de tanques agitados tiene 4 bombas, divididas en:

- 2 bombas dosificadores de reactivos de acero inoxidable 316.
- 2 bombas centrifugas de aceite térmico con cabeza de 16 m, de acero inoxidable 304.

Las características técnicas se muestran en la tabla 10.

Tabla 10. Características técnicas de las bombas del banco de reactores.

Tipo	Flujo máximo (L/min)	Presión (psia)	Temperatura máxima (°C)	Potencia (kW)	Diámetro de succión y descarga
Dosificadora de reactivos	30.3	30	Desconocida	0.23	¼" NPT
Centrifuga	19	22.8	130	0.67	¾" Sanitario

Fuente: PSE, Manual de operación del banco de reactores.

La identificación, tipo y función de cada una en el banco de reactores, se encuentran a continuación:

Tabla 11. Identificación, tipo y función de cada bomba del banco de reactores (en paréntesis la aplicación al banco de reactores tubulares).

Identificación	Tipo de bomba	Función
P-101	Dosificadora	Impulsar la corriente de flujo del reactivo 1 hacia los reactores de tanque agitado (o tubulares) a una presión y un caudal especificados.
P-102		Impulsar la corriente de flujo del reactivo 2 hacia los reactores de tanque agitado (o tubulares) a una presión y caudal especificados.
P-103	Centrifuga	Proporcionar la presión y el caudal necesarios para habilitar la línea de flujo de aceite térmico hacia los intercambiadores de calor E-101, y E-102.
P-104		Proporcionar la presión y el caudal necesarios para habilitar la línea de flujo de aceite térmico hacia los reactores R-101, R-102, R-103, y R-104 (así como R-105, R-106, R-107, R-108 y R-109)

Fuente: Elaboración propia.

El banco de reactores cuenta con dos amortiguadores de pulsaciones de los cuales no se cuenta con información técnica. El amortiguador de pulsaciones del sistema de alimentación del reactivo 1 esta enlazado con la válvula de bola, V-008, y el amortiguador de pulsaciones de la línea de flujo de alimentación del reactivo 2 tiene conexión con la válvula de bola, V-044. La función de estos dispositivos es proveer un flujo más estable y minimizar las vibraciones y fluctuaciones en presión en el ducto posterior a las bombas dosificadoras, correspondientes.

2.1.1.6 Distribuidores de flujo. El sistema cuenta con 4 distribuidores de flujo en acero inoxidable 304, cuyas características técnicas y operacionales, se muestran en la tabla 12.

Tabla 12. Especificaciones técnicas y operacionales de los distribuidores de flujo del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Cantidad de entradas	Cantidad de salidas	Válvulas de bola relacionadas	Función
CSTR R1	1	4	V-018/V-019	Operación secuencia (3 reactores CSTR de 1 L).
			V-020/V-021	Operación individual (CSTR de 1 L)
			V-022/V-023	Operación individual (CSTR de 3 L)..
			V-024	Desagüe o purga.
CSTR R2	1	4	V-054/V-055	Operación secuencia CSTR (3 reactores de 1 L).
			V-056/V-057	Operación individual (CSTR de 1 L).
			V-058/V-059	Operación individual (CSTR de 3 L).
			V-060	Desagüe o purga.
Agua	1	7	V-186	Enfriamiento en R-101.
			V-187	Enfriamiento en R-102.
			V-188	Enfriamiento en R-103
			V-189	Enfriamiento en R-104.
			V-190	Enfriamiento en E-104.
			V-191	Enfriamiento en E-103.
Aceite CSTR	1	6	V-193	Desagüe o purga.
			V-169	Calentamiento en R-101.
			V-170	Calentamiento en R-102.
			V-171	Calentamiento en R-103.
			V-172	Calentamiento en R-104.
			V-173	Descarga de aceite.

Fuente: Elaboración propia.

El enfriamiento y calentamiento en cada reactor se hace mediante una chaqueta térmica.

2.1.1.7 Instrumentos de medición. El banco de reactores de tanques agitado cuenta con 40 instrumentos de medición, divididos en:

- 18 medidores de temperatura (termopares tipo J).
- 11 medidores de presión (manómetros).
- 9 medidores de nivel (de desplazamiento).
- 2 medidores de caudal (rotámetros).

La representación de cada uno en el diagrama de flujo de procesos del banco de reactores (anexo A) se muestra en la tabla 13; por ejemplo “TI” es la identificación funcional que significa en castellano “indicador de temperatura”, y le corresponde el número de bucle o zona “1”.

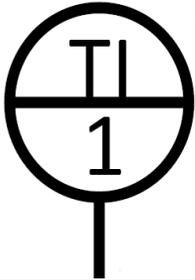
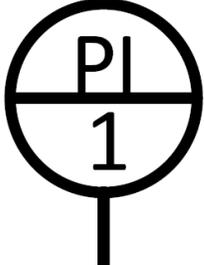
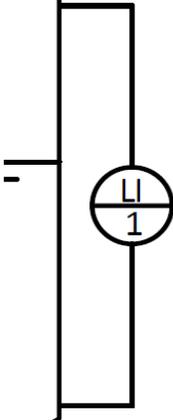
El tipo de instrumento, y la ubicación dentro del banco de reactores de tanques agitados, se encuentra a continuación.

➤ **Medidores de temperatura.** Los medidores de temperatura corresponden a termocuplas tipo J. En total, el banco de reactores de tanques agitados cuenta con 18 instrumentos de medición de temperatura. Estos se dividen de la siguiente forma:

- El sistema de alimentación de reactivos cuenta con 10 termopares tipo J, divididas en 5 para cada reactivo.
- Cada reactor del banco de reactores de tanques agitados, tiene asignada una termocupla.
- El sistema de descarga de productos tiene 2 medidores de temperatura.
- 1 termopar para el sistema de flujo de aceite térmico de los precalentadores.
- 1 termopar para el sistema de flujo del aceite térmico a los reactores de tanques agitados.

La identificación funcional, y su ubicación se encuentran en la tabla 14.

Tabla 13. Ejemplo de representación de los instrumentos de medición en el PFD del banco de reactores.

Instrumento	Ejemplo de representación
Termopar tipo J	
Manómetro	
Indicador de nivel desplazamiento	
Rotámetro	

Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad América.

Tabla 14. Identificación funcional y ubicación de los termopares tipo J del banco de reactores de tanques agitado.

Identificación funcional	Ubicación
TI-1	Tanque de alimentación del reactivo 1, TK-101.
TI-2	Tanque de alimentación del reactivo 2, TK-102.
TI-3	Corriente de salida del reactivo 1, del intercambiador de calor E-101.
TI-4	Corriente de salida del reactivo 2, del intercambiador de calor E-102.
TI-5	Corriente de alimentación del reactivo 1 al reactor R-101, de 1 L.
TI-6	Corriente de alimentación del reactivo 2 al reactor R-101, de 1 L.
TI-7	Reactor R-101, de 1 L.
TI-8	Reactor R-102, de 1 L.
TI-9	Corriente de alimentación del reactivo 1 al reactor R-103, de 1 L.
TI-10	Corriente de alimentación del reactivo 2 al reactor R-103, de 1 L.
TI-11	Reactor R-103, de 1 L.
TI-12	Corriente de alimentación del reactivo 1 al reactor R-104, de 3 L.
TI-13	Corriente de alimentación del reactivo 2 al reactor R-104, de 3 L.
TI-14	Reactor R-104, de 3 L.
TI-15	Corriente de producto que entra al intercambiador de calor, E-103.
TI-16	Tanque de producto, TK-103.
TI-54	Tanque de alimentación del aceite térmico, TK-105, a los intercambiadores de calor E-101, y E-102.
TI-55	Tanque de alimentación del aceite térmico, TK-106, a los reactores R-101, R-102, R-103, y R-104.

Fuente: Elaboración propia

➤ **Medidores de presión.** Los medidores de presión del banco de reactores de tanques agitados corresponden a manómetros (se desconoce el tipo de manómetro). En total, el sistema cuenta con 11 medidores de presión distribuidos como se muestra a continuación:

- 4 medidores de presión para el sistema de alimentación de reactivos.
- 1 medidor de presión para cada reactor de tanque agitado.

- 1 instrumento de medición en el tanque de producto TK-103.
- 1 medidor en el tanque de aceite térmico, TK-105.
- 1 Instrumento de medición en el tanque de aceite térmico, TK-106.

En el diagrama de flujo de procesos se repitió la identificación funcional y el número de bucle en dos manómetros de dos áreas diferentes, por lo que la identificación de los manómetros se cambió desde “PI-5”. La identificación funcional, y la ubicación de cada uno se muestra en la tabla 15.

➤ **Medidores de nivel.** En las especificaciones técnicas entregadas disponibles no se encuentra el tipo de medidor de nivel. Sin embargo, según el diagrama de flujo de procesos (anexo A), las representaciones de todos los instrumentos de medición de nivel son de indicadores de nivel de flotador⁶⁶. En el diagrama de flujo de procesos, los indicadores de nivel del tanque de alimentación del reactivo 2, y de los tanques de aceite térmico TK-105 y TK-106, tienen la misma identificación, y el mismo número de bucle, por lo que se modificó dicha enumeración para hacer consistente la identificación. El banco de reactores de tanques agitados cuenta con 9 indicadores de nivel, cuya distribución se muestra en la siguiente tabla 16.

Tabla 15. Identificación funcional y ubicación de los manómetros del banco de reactores de tanques agitados.

Identificación funcional	Ubicación
PI-1	Tanque de alimentación del reactivo 1, TK-101.
PI-2	Sistema de retorno de la corriente del reactivo 1, al tanque de alimentación TK-101, por activación de válvula de seguridad.
PI-3	Tanque de alimentación del reactivo 2, TK-102.
PI-4	Sistema de retorno de la corriente del reactivo 2, al tanque de alimentación TK-102, por activación de válvula de seguridad.
PI-5	Reactor R-101, de 1 L.
PI-6	Reactor R-102, de 1 L.
PI-7	Reactor R-103., de 1 L.
PI-8	Reactor R-104, de 3 L.
PI-9	Tanque de producto TK-103.
PI-21	Tanque de aceite térmico, TK-105.
PI-22	Tanque de aceite térmico, TK-106.

Fuente: Elaboración propia

⁶⁶ CREUS, Antonio. Instrumentación industrial. Alfaomega Grupo Editor, S. A, de C. V. México, D. F. 6° edición, p. 33. [Consultado: 18 de noviembre de 2018].

Tabla 16. Identificación funcional y ubicación de los indicadores de nivel del banco de reactores de tanques agitados.

Identificación funcional	Ubicación
LI-1	Tanque de alimentación del reactivo 1, TK-101.
LI-2	Tanque de alimentación del reactivo 2, TK-102.
LI-3	Reactor R-101, de 1 L.
LI-4	Reactor R-102, de 1 L.
LI-5	Reactor R-103., de 1 L.
LI-6	Reactor R-104, de 3 L.
LI-7	Tanque de producto TK-103.
LI-8	Tanque de aceite térmico, TK-105.
LI-9	Tanque de aceite térmico, TK-106.

Fuente: Elaboración propia.

➤ **Medidores de caudal.** Los medidores de caudal son rotámetros OMEGA®, con las siguientes características:

- Referencia: FL-3903ST
- Material de la esfera: Acero Inoxidable 316.
- Densidad de esfera: 8.04 g/cm³
- Temperatura de calibración: 70°F o 21.1°C
- Presión de calibración: 14.7 psia.

El banco de reactores de tanque agitado cuenta con dos rotámetros, cada uno dispuesto para la medición de la velocidad de flujo volumétrico de las corrientes de alimentación de los reactivos a los reactores, como se muestra en la siguiente descripción:

- “R1” realiza la medición del caudal del flujo de reactivo 1, y se encuentra ubicado entre las válvulas de bola V-015, y V-017.
- “R2” realiza la medición del caudal de flujo de reactivo 2, y se encuentra ubicado entre las válvulas de bola V-051, y V-053.

2.1.1.8 Válvulas. El banco de reactores de tanques agitados, cuenta con un total de 115 válvulas divididas en:

- 97 válvulas de bola.
- 6 válvulas de seguridad.

- 2 válvulas de globo.
- 6 válvulas de retención o anti retorno.
- 1 válvula toma-muestra en cada reactor.

La identificación de cada una de ellas, y su función se describen a continuación.

➤ **Válvulas de bola.** El banco de reactores de tanques agitados cuenta con:

- 48 válvulas de bola para el sistema de alimentación de los reactivos.
- 7 válvulas para el sistema de calentamiento por aceite térmico THERMOIL Z-100 ISO 32 a los precalentadores.
- 10 válvulas de bola para el sistema de calentamiento de los reactores de tanques agitados.
- 4 válvulas para el sistema de enfriamiento, por agua de servicio, de la corriente de productos en el intercambiador, E-103.
- 10 válvulas de bola para el sistema de enfriamiento mediante las chaquetas térmicas de los reactores de tanques agitados (2 repetidas del sistema de enfriamiento de productos).
- 10 válvulas de bola para la descarga de los productos al tanque de producto TK-103.
- 4 válvulas de bola de alivio de gases en los reactores (1 para cada reactor).
- 6 válvulas de bola para la línea de reactores en serie.

En total, el banco de reactores de tanques agitados cuenta con 97 válvulas de bola, basándose en el diagrama de flujo de procesos (anexo A).

❖ **Sistema de alimentación de reactivos.** El sistema de alimentación de reactivos comprende el flujo de los reactivos 1 y 2, desde sus tanques de alimentación, TK-101 y TK-102, respectivamente, hasta los reactores R-101, R-103 y R-104. La identificación y función de cada una de las válvulas de bola para el sistema de alimentación de los reactivos 1 y 2, se encuentran en la tabla 17 y 18, respectivamente. El número de válvulas de bola involucradas, en el sistema de alimentación, es de 24 para cada reactivo.

Tabla 17. Identificación y función de cada válvula de bola del sistema de alimentación del reactivo 1, a los reactores R-101, R-103 y R-104 del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Función
V-001	Alimentación de reactivos al tanque TK-101.
V-002	Alimentación de reactivos y alivio de gases.
V-003	Descarga al desagüe del tanque de reactivos, TK-101.
V-004	Habilitación de la línea de flujo a la bomba dosificadora, P-101.
V-005	Descarga al desagüe de la bomba dosificadora, P-101.
V-006	Descarga al desagüe de la bomba dosificadora, P-101, por retorno al tanque de reactivos, TK-101, para calibración de la bomba.
V-007	Habilitación de la línea de retorno al tanque de reactivos, TK-101.
V-008	Habilitación al amortiguador de pulsaciones.
V-009	Alimentación de la línea de flujo al intercambiador de calor E-101.
V-010	
V-011	Descarga al desagüe de la alimentación al intercambiador de calor, E-101.
V-012	Descarga al desagüe de la salida del intercambiador de calor, E-101.
V-013	Suministro de la línea de flujo al banco de reactores de tanque agitado.
V-014	Habilitación de la línea de flujo al banco de reactores tubulares.
V-015	Habilitación de la línea de flujo al rotámetro, R1, del banco de reactores agitados.
V-016	Bypass al rotámetro (R1) y habilitación de la línea al distribuidor de flujo (CSTR R1).
V-017	Habilitación de la línea al distribuidor de flujo (CSTR R1) desde el rotámetro (R1).
V-018	Suministro de la línea de flujo a la válvula de alimentación, V-019, del reactor de tanque agitado de 1 L, R-101.
V-019	Suministro de la línea de flujo al reactor de tanque agitado de 1 L, R-101, con medición de la temperatura (TI-5) de la corriente de entrada.
V-020	Suministro de la línea de flujo a la válvula de alimentación, V-021, del reactor de tanque agitado de 1 L, R-103.
V-021	Suministro de la línea de flujo al reactor de tanque agitado de 1 L, R-103, con medición de la temperatura (TI-9) de la corriente de entrada.
V-022	Suministro de la línea de flujo a la válvula de alimentación, V-023, del reactor de tanque agitado de 3 L, R-104.
V-023	Suministro de la línea de flujo al reactor de tanque agitado de 3 L, R-104, con medición de la temperatura (TI-12) de la corriente de entrada.
V-024	Descarga al desagüe del distribuidor de flujo, CSTR R1.

Fuente: Elaboración propia.

La identificación, y función de las válvulas del sistema de alimentación del reactivo 2, a los reactores de tanques agitados, R-101, R-103, y R-104, se encuentran en la tabla 18.

Tabla 18. Identificación y función de cada válvula de bola del sistema de alimentación del reactivo 2, a los reactores R-101, R-103, y R-104 del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Función
V-037	Alimentación de reactivos al tanque de reactivos, TK-102.
V-038	Alimentación de reactivos y alivio de gases.
V-039	Habilitación de la línea de flujo a la bomba dosificadora, P-102.
V-040	Descarga al desagüe de los tanques de reactivos, TK-102.
V-041	Descarga al desagüe de la bomba dosificadora, P-102.
V-042	Descarga al desagüe de la bomba dosificadora, P-102, por retorno al tanque de reactivos, TK-101, para la calibración de la bomba.
V-043	Habilitación de la línea de retorno al tanque de reactivos, TK-102.
V-044	Habilitación al amortiguador de pulsaciones.
V-045	Alimentación de la línea de flujo al intercambiador de calor E-102.
V-046	
V-047	Descarga al desagüe de la alimentación al intercambiador de calor, E-102.
V-048	Descarga al desagüe de la salida del intercambiador de calor, E-102.
V-049	Suministro de la línea de flujo al banco de reactores de tanque agitado.
V-050	Habilita la línea de flujo al banco de reactores tubulares
V-051	Habilitación de la línea de flujo al rotámetro, R2.
V-052	Bypass al rotámetro (R2) y habilitación de la línea al distribuidor de flujo (CSTR R2).
V-053	Habilitación de la línea al distribuidor de flujo (CSTR R2) desde el rotámetro (R2).
V-054	Suministro de la línea de flujo a la válvula de alimentación, V-055, del reactor de tanque agitado de 1 L, R-101.
V-055	Suministro de la línea de flujo al reactor de tanque agitado de 1 L, R-101, con medición de la temperatura (TI-6) de la corriente de entrada.
V-056	Suministro de la línea de flujo a la válvula de alimentación, V-057, del reactor de tanque agitado de 1 L, R-103.
V-057	Suministro de la línea de flujo al reactor de tanque agitado de 1 L, R-103, con medición de la temperatura (TI-10) de la corriente de entrada.
V-058	Suministro de la línea de flujo a la válvula de alimentación, V-059, del reactor de tanque agitado de 3 L, R-104.
V-059	Suministro de la línea de flujo al reactor de tanque agitado de 3 L, R-104, con medición de la temperatura (TI-13) de la corriente de entrada.
V-060	Descarga al desagüe del distribuidor de flujo, CSTR R2.

Fuente: Elaboración propia.

Cabe mencionar que el reactor R-102, no cuenta con sistema de alimentación continua desde los tanques de reactivos, TK-101 y TK-102.

❖ **Reactores y sistema de reactores en serie.** Cada reactor cuenta con una válvula de bola, y el sistema de reactores en serie con seis válvulas de bola, con 3 válvulas entre reactores. El número de etiqueta de cada válvula de bola, así como su función, se encuentran a continuación.

Tabla 19. Identificación y función de cada válvula de bola de los reactores R-101, R-102, R-103, y R-104 del banco de reactores de tanques agitados, y del sistema de reactores en serie.

ID	Función
V-077	Alivio de gases del reactor R-101.
V-079	Habilitación de la línea de flujo de los productos del reactor R-101, a la descarga directa mediante la válvula de bola V-081, o a la alimentación al reactor R-102, mediante la válvula de bola V-080.
V-080	Habilita la línea de flujo de productos del reactor R-101, al reactor R-102, para una secuenciación en serie.
V-081	Descarga directa de la corriente de productos del reactor R-101.
V-083	Alivio de gases del reactor R-102.
V-085	Habilitación de la línea de flujo de los productos del reactor R-102, a la descarga directa mediante la válvula de bola V-087, o a la alimentación al reactor R-103, mediante la válvula de bola V-086.
V-086	Habilita la línea de flujo de productos del reactor R-102, al reactor R-103, para un secuenciación en serie.
V-087	Descarga directa de la corriente de productos del reactor R-102.
V-089	Alivio de gases del reactor R-103.
V-094	Alivio de gases del reactor R-104.

Fuente: Elaboración propia.

❖ **Sistema de descarga de productos.** El sistema de descarga de productos abarca desde las líneas de salida de los reactores de tanques agitados R-103 y R-104, hasta el tanque de producto TK-103. La identificación y función de las válvulas de bola que comprenden este tramo se muestra en la tabla 20. El número de válvulas de bola involucradas son 10.

Tabla 20. Identificación y función de cada válvula de bola del sistema de descarga de productos de los reactores R-103 y R-104, al tanque de producto TK-103 del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Función
V-091	Habilitación de la línea de flujo de los productos, del reactor R-103, a la descarga directa mediante la válvula de bola V-092, o a la descarga mediante tratamiento térmico mediante la válvula de bola V-093.
V-092	Descarga directa de los productos del reactor R-103.
V-093	Habilitación de la línea de flujo hacia el intercambiador de calor, E-103, desde el reactor R-103.
V-097	Habilitación de la línea de flujo de los productos, del reactor R-104, a la descarga directa mediante la válvula de bola V-098, o a la descarga mediante tratamiento térmico mediante la válvula de bola V-099.
V-098	Descarga directa de los productos del reactor, R-104.
V-099	Habilitación la línea de flujo de los productos hacia el intercambiador de calor, E-103, desde el reactor R-104.
V-100	Habilitación de la línea de flujo de productos del intercambiador E-103, hacia el tanque de productos, TK-103.
V-101	Descarga al desagüe de la corriente de salida del intercambiador de calor, E-103.
V-102	Salida de gases, o alimentación de una sustancia al tanque de productos TK-103.
V-103	Descarga de productos desde el tanque de producto, TK-103.

Fuente: Elaboración propia.

❖ **Línea de flujo de los fluidos de servicio de los intercambiadores de calor E-101, E-102 y E-103.** La línea de flujo de los fluidos de servicio, aceite térmico “THERMOIL Z-100 ISO 32” a los intercambiadores de calor E-101 y E-102, y agua de servicio al intercambiador E-103, consta de 7 válvulas de bola para la línea de flujo del aceite térmico a los precalentadores, y 4 válvulas de bola para la línea de flujo del agua de servicio, hacia el intercambiador E-103. A continuación, se muestran las válvulas de bola involucradas para el sistema de flujo de aceite térmico.

Tabla 21. Identificación y función de cada válvula de bola de la línea de flujo del aceite térmico (THERMOIL Z-100 ISO 32), a los intercambiadores E-101 y E-102 del banco de reactores.

ID	Función
V-155	Alimentación del aceite térmico fresco al tanque de aceite térmico TK-105.
V-156	Habilitación la línea de flujo a la bomba centrífuga P-103
V-157	Descarga de aceite del tanque de aceite térmico, TK-105.

Tabla 21. (Continuación)

ID	Función
V-158	Habilitación del retorno de la línea de flujo al tanque de aceite térmico, TK-105, para calentar el aceite.
V-159	Habilitación la línea de flujo a la válvula de globo de alimentación al intercambiador de calor E-101, y/o a la válvula de globo que alimenta al intercambiador E-102.
V-161	Descarga del aceite de alimentación al intercambiador E-101, para calibración de la bomba P-103.
V-163	Descarga del aceite de alimentación al intercambiador E-102, para la calibración de la bomba P-103.

Fuente: Elaboración propia.

La identificación y función de cada válvula de bola del sistema de flujo de agua de servicio para el banco de reactores agitados, se muestra en la tabla 22.

Tabla 22. Numero de etiqueta y función de cada válvula de bola de la línea de flujo del agua de servicio, al intercambiador E-103 del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Función
V-185	Habilitación del flujo de agua de servicio al distribuidor de flujo de agua.
V-191	Suministro del flujo de agua de servicio hacia el intercambiador E-103, desde el distribuidor de flujo de agua.
V-192	Descarga al desagüe del agua de servicio de la alimentación al intercambiador, E-103.
V-193	Descarga al desagüe del distribuidor de flujo de agua.

Fuente: Elaboración propia.

❖ **Línea de flujo de los fluidos de servicio de los reactores R-101, R-102, R-103 y R-104.** El aceite térmico “THERMOIL Z-100 ISO 32” es alimentado a las chaquetas térmicas de los reactores de tanques agitados, desde el tanque de aceite térmico TK-106, y el agua de servicio se alimenta a cada reactor mediante el distribuidor de flujo de agua. En la tabla 23, se muestra la etiqueta y función de cada válvula de bola involucrada en la línea de flujo de aceite térmico. Adicionalmente, el número de etiqueta y función de cada válvula de bola del sistema de suministro de agua de servicio a los reactores R-101, R-102, R-103, y R-104, se muestra en la tabla 24. El sistema de válvulas de bola para el flujo de aceite térmico a los reactores cuenta con 10 válvulas, y el sistema de flujo de agua de servicio a los reactores cuenta con 10 válvulas de bola.

Tabla 23. Identificación y función de cada válvula de bola de la línea de flujo del aceite térmico a los reactores R-101, R-102, R-103 y R-104 del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Función
V-164	Alimentación del aceite térmico fresco al tanque de aceite térmico TK-106.
V-165	Habilitación de la línea de flujo a la bomba centrífuga P-104.
V-166	Descarga de aceite del tanque de aceite térmico, TK-106.
V-167	Habilitación del retorno de la línea de flujo al tanque de aceite térmico TK-106, para calentar el aceite.
V-168	Habilitación de la línea de flujo al distribuidor de flujo de aceite térmico CSTR o PFR.
V-169	Suministro de aceite térmico al reactor R-101.
V-170	Suministro de aceite térmico al reactor R-102.
V-171	Suministro de aceite térmico al reactor R-103.
V-172	Suministro de aceite térmico al reactor R-104.
V-173	Descarga del aceite desde el distribuidor de flujo de aceite térmico CSTR, para calibrar la bomba centrífuga P-104.

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 24. Identificación y función de cada válvula de bola de la línea de flujo del agua de servicio, a los reactores R-101, R-102, R-103 y R-104 del banco de reactores de tanques agitados. (Fuente: Elaboración propia)

ID	Función
V-076	Descarga al desagüe del agua de servicio desde la chaqueta térmica del reactor R-101.
V-082	Descarga al desagüe del agua de servicio desde la chaqueta térmica del reactor R-102.
V-088	Descarga al desagüe del agua de servicio desde la chaqueta térmica del reactor R-103.
V-094	Descarga al desagüe del agua de servicio desde la chaqueta térmica del reactor R-104.
V-185	Habilitación del flujo de agua de servicio al distribuidor de flujo de agua.
V-186	Suministro de agua de servicio a la chaqueta térmica del reactor R-101.
V-187	Suministro de agua de servicio a la chaqueta térmica del reactor R-102.
V-188	Suministro de agua de servicio a la chaqueta térmica del reactor R-103.
V-189	Suministro de agua de servicio a la chaqueta térmica del reactor R-104.
V-193	Descarga al desagüe desde el distribuidor de flujo de agua.

Fuente: Elaboración propia.

➤ **Válvulas de seguridad.** El banco de reactores de tanques agitados cuenta con 6 válvulas de seguridad en total. La ubicación y función de cada una se encuentra en la tabla 25. Cabe destacar que no cuentan con una etiqueta o identificación en los diagramas de flujo proceso (anexo A), por lo que se les asignó arbitrariamente un número de identificación.

Tabla 25. Ubicación y función de las válvulas de seguridad del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Ubicación	Función
SV-1	Sistema de retorno de la línea de flujo de reactivo 1 al tanque de alimento TK-101	No permite que la presión del fluido, que fluye en el ducto después de la bomba dosificadora P-101, supere un valor establecido, habilitando la línea de flujo de retorno al tanque de alimento TK-101.
SV-2	Sistema de retorno de la línea de flujo del reactivo 2 al tanque de alimento TK-102.	No permite que la presión del fluido, que fluye en el ducto después de la bomba dosificadora P-102, supere un valor establecido, habilitando la línea de flujo de retorno al tanque de alimento TK-102.
SV-3	Reactor R-101	No permite que la presión dentro del tanque supere un valor establecido, habilitando el alivio atmosférico.
SV-4	Reactor R-102	
SV-5	Reactor R-103	
SV-6	Reactor R-104	

Fuente: Elaboración propia.

➤ **Válvulas de globo.** El banco de reactores cuenta con dos válvulas de globo con la etiqueta V-160, y V-162. La ubicación de cada válvula se muestra a continuación:

- La válvula de globo V-160, pertenece a la línea de flujo de aceite térmico del tanque TK-105, y precede al intercambiador de calor E-101, y a la válvula de bola de descarga de aceite V-161.
- La válvula de globo V-162, pertenece a la línea de flujo de aceite térmico del tanque TK-105, y precede al intercambiador de calor E-102, y a la válvula bola de descarga del aceite térmico, V-163.

➤ **Válvulas de retención.** El banco de reactores de tanques agitados cuenta con 6 válvulas de retención, cuya ubicación y función se encuentran en la tabla 26. Cabe destacar que no cuentan con una etiqueta o identificación en el diagrama de flujo procesos, por lo que se les asignó arbitrariamente un número de identificación.

Tabla 26. Ubicación y función de las válvulas de retención del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Ubicación	Función
CV-1	Regula la línea de flujo de aceite térmico proveniente del intercambiador de calor, E-101, y precede el reciclo de aceite térmico al tanque TK-105.	No permitir el contraflujo hacia los intercambiadores de calor E-101 y E-102, para no afectar la operación de transferencia de calor en los intercambiadores.
CV-2	Regula la línea de flujo de aceite térmico proveniente del intercambiador de calor, E-102, y precede el reciclo de aceite térmico al tanque TK-105.	
CV-3	En la corriente de salida de aceite térmico, de la chaqueta térmica del reactor R-101.	No permitir el contraflujo de aceite térmico a las chaquetas térmicas de los reactores, para no afectar las condiciones del proceso en los reactores.
CV-4	En la corriente de salida de aceite térmico, de la chaqueta térmica del reactor R-102.	
CV-5	En la corriente de salida de aceite térmico, de la chaqueta térmica del reactor R-103.	
CV-6	En la corriente de salida de aceite térmico, de la chaqueta térmica del reactor R-104.	

Fuente: Elaboración propia.

➤ **Válvulas toma-muestras.** En total hay 4 válvulas toma muestras en el banco de reactores de tanques agitados. El número de etiqueta de cada válvula se encuentra en la tabla 27.

Tabla 27. Identificación y función de las válvulas toma muestras del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Función
V-078	Permite la toma de muestras de la mezcla del reactor R-101.
V-084	Permite la toma de muestras de la mezcla del reactor R-102.
V-090	Permite la toma de muestras de la mezcla del reactor R-103.
V-096	Permite la toma de muestras de la mezcla del reactor R-104.

Fuente: Elaboración propia.

2.1.2 Caracterización operacional del banco de reactores de tanques agitados.

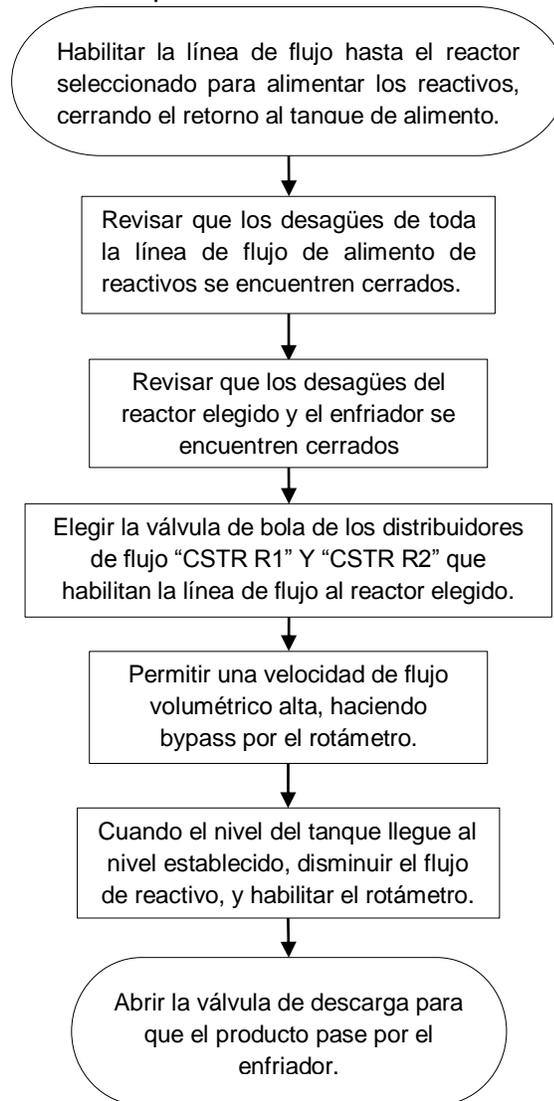
El banco de reactores de tanques agitados puede operar de las siguientes formas:

- Operación continua.
- Operación por lotes.
- Operación semi-lotes.

Para operar por alguna de estas configuraciones, se requiere una disposición y secuencia de válvulas abiertas determinada.

2.1.2.1 Modo de operación continua. Con respecto a la operación continua, en el banco de reactores pueden emplearse un reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR) de 1 L, o 3 L, así como una secuencia de tres reactores de mezcla perfecta, de 1 L. Para el arranque de sistema se deben seguir los siguientes pasos:

Figura 6. Procedimiento para llevar a cabo el arranque del modo de operación continua.



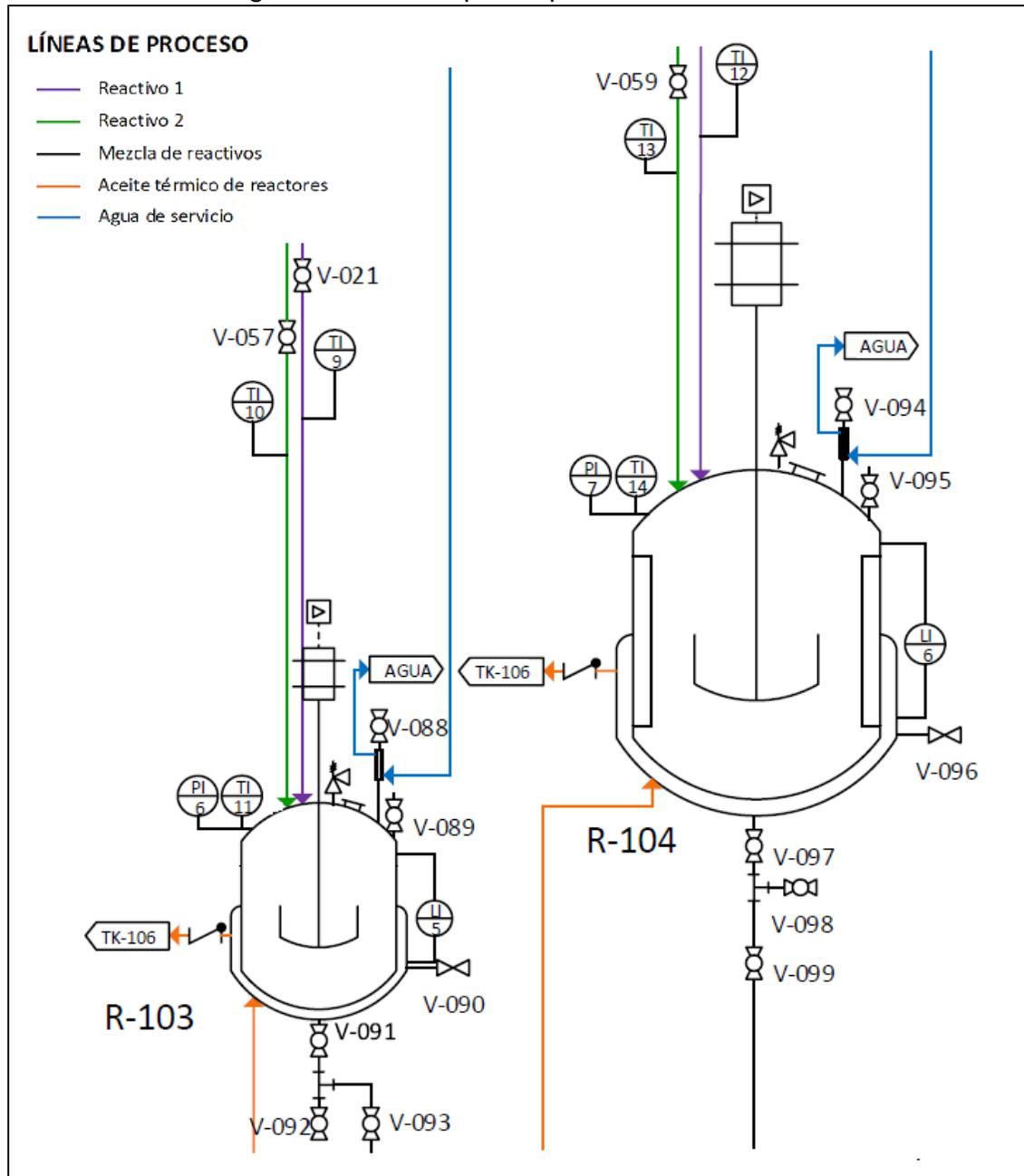
Fuente: Adaptado de PSE, Manual de operación del banco de reactores.

El arreglo de válvulas, así como la descripción de cada modo de operación se describen en los siguientes encisos.

- **Único CSTR.** Deben estar abiertas aquellas válvulas que habiliten la línea de flujo desde los tanques de alimentación TK-101 y TK-102, que pase por el reactor de tanque agitado R-103 de 1 L, y/o R-104 de 3 L, hasta el tanque de producto TK-

103. Adicionalmente, deben verificarse que estén cerradas las válvulas que habiliten el flujo a los reactores R-101, R-102, los reactores tubulares, y las purgas o líneas de desagüe que no se requieran. En la tabla 28, se muestran las válvulas que deben abrirse, y cerrarse para el modo de operación individual CSTR de 3 L.

Figura 7. Representación de los reactores de tanque agitado operados como único reactor con descarga directa al tanque de producto TK-103.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

Tabla 28. Válvulas de bola abiertas y cerradas de las líneas de flujo de reactivos y productos, con medición de caudal, para operación continua del reactor R-104 de 3 litros, sin purgas.

Posición	Reactivo 1		Reactivo 2		R-104 (3 L)	Producto
Abierta	V-002	V-004	V-037	V-039	V-097 V-099	V-100
	V-008	V-009	V-044	V-045		
	V-010	V-013	V-046	V-049		
	V-015	V-017	V-051	V-053		
	V-022	V-023	V-058	V-059		
Cerrada	V-003	V-005	V-040	V-041	V-098	V-101 V-103
	V-006	V-007	V-042	V-043		
	V-011	V-012	V-047	V-048		
	V-024	-	V-060	-		

Fuente: Elaboración propia.

Si se está operando el reactor R-103, de 1 L, deben abrirse las válvulas V-020 y V-021, con respecto a la alimentación del reactivo 1; abrir las válvulas V-056 y V-057 con respecto a la alimentación del reactivo 2; abrir las válvulas V-091 y V-093, con respecto a la descarga del reactor R-103; y finalmente, cerrar la válvula V-092 de purga del reactor R-103. Las válvulas abiertas y cerradas para el suministro de aceite térmico a los precalentadores se muestran en la tabla 29, y para la línea de flujo de aceite térmico a los reactores R-103, y R-104, en la tabla 30. En relación a las válvulas que suministran el agua de enfriamiento, se pueden ver aquellas que deben estar abiertas y cerradas en la tabla 31.

Tabla 29. Estado de válvulas de la línea de flujo de aceite térmico a los precalentadores para operación continua del banco de reactores.

Posición	Válvulas			
Abierta	V-156	V-159	V-160	V-162
Cerrada	V-157	V-158	V-161	V-163

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 30. Estado de válvulas de la línea de flujo de aceite térmico a los reactores R-103 y R-104 para operación continua del banco de reactores.

Posición	Válvulas				
Abierta	V-165	V-168	V-171 (R-103)	V-172 (R-104)	-
Cerrada	V-166	V-167	V-169	V-170	V-173

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 31. Estado de válvulas de la línea de flujo agua de enfriamiento a los reactores R-103 y/o R-104, y el intercambiador E-103 para operación continua del banco de reactores.

Posición	Reactores	Intercambiador E-103
Abierta	V-188 (R-103) V-189 (R-104)	V-191
Cerrada	V-088 (R-103) V-094 (R-104) V-186 V-187 V-90	V-192

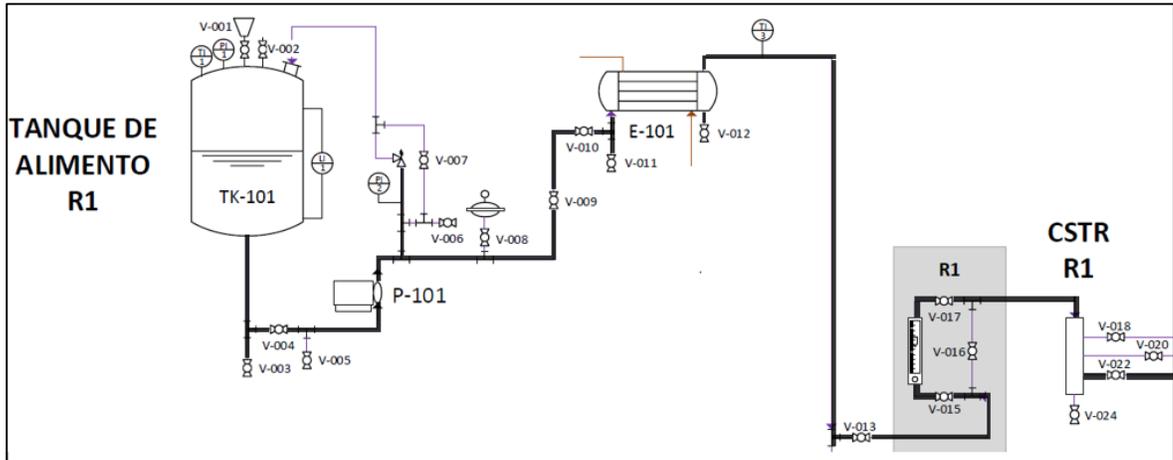
Fuente: Elaboración propia.

La válvula V-004 es la última que debe abrirse para el sistema de alimentación del reactivo 1. Mientras que la válvula V-039 es la última que debe abrirse para el sistema de alimentación del reactivo 2.

La mezcla del reactivo 1, que se encuentra inicialmente en el tanque TK-101, a temperatura ambiente y presión atmosférica, empieza a fluir por el sistema de tuberías de 9.97 mm de diámetro, pasando por la válvula V-004, que dirige la línea de flujo a la bomba de pistón o dosificadora P-101, donde la corriente es bombeada a una presión no mayor a 30 psi. La corriente bombeada del reactivo 1 pasa por las válvulas V-009, y V-010 para entrar al intercambiador de calor E-101, para aumentar su temperatura a un valor especificado. Cabe destacar que puede abrirse la válvula V-008 para activar el amortiguador de pulsaciones y obtener un flujo más estable. El intercambiador de calor E-101 es de tubos y coraza, y opera a contracorriente, fluyendo por los tubos la corriente de reactivo 1, y por la coraza el aceite térmico. La corriente de salida del reactivo 1 sale a mayor temperatura, la cual puede medirse mediante el termopar tipo J, "TI-3", ubicado en la corriente de salida de los tubos del intercambiador de calor. La corriente de alimentación del reactivo 1 caliente pasa por la válvula V-013 para dirigirse al rotámetro "R1" mediante la válvula V-015, o hacer un bypass sin medición de caudal por la válvula V-016. Posteriormente, el flujo de reactivo 1 ingresa al distribuidor de flujo "CSTR R1" donde se distribuye el flujo según el reactor que se esté operando.

Si se opera el reactor R-103 de 1 L, entonces debe habilitarse el paso por las válvulas V-020 y V-021, mientras que para operar el reactor R-104 de 3 L, deben estar abiertas las válvulas V-022 y V-023. Se puede hacer una lectura de la temperatura de entrada al reactor con "T-9" (R-103), y "T-12" (R-104). En la figura 8, se muestra la línea de alimentación del reactivo 1 hasta el distribuidor de flujo "CSTR R1".

Figura 8. Línea de alimentación del reactivo 1 hasta el distribuidor de flujo “CSTR R1”.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

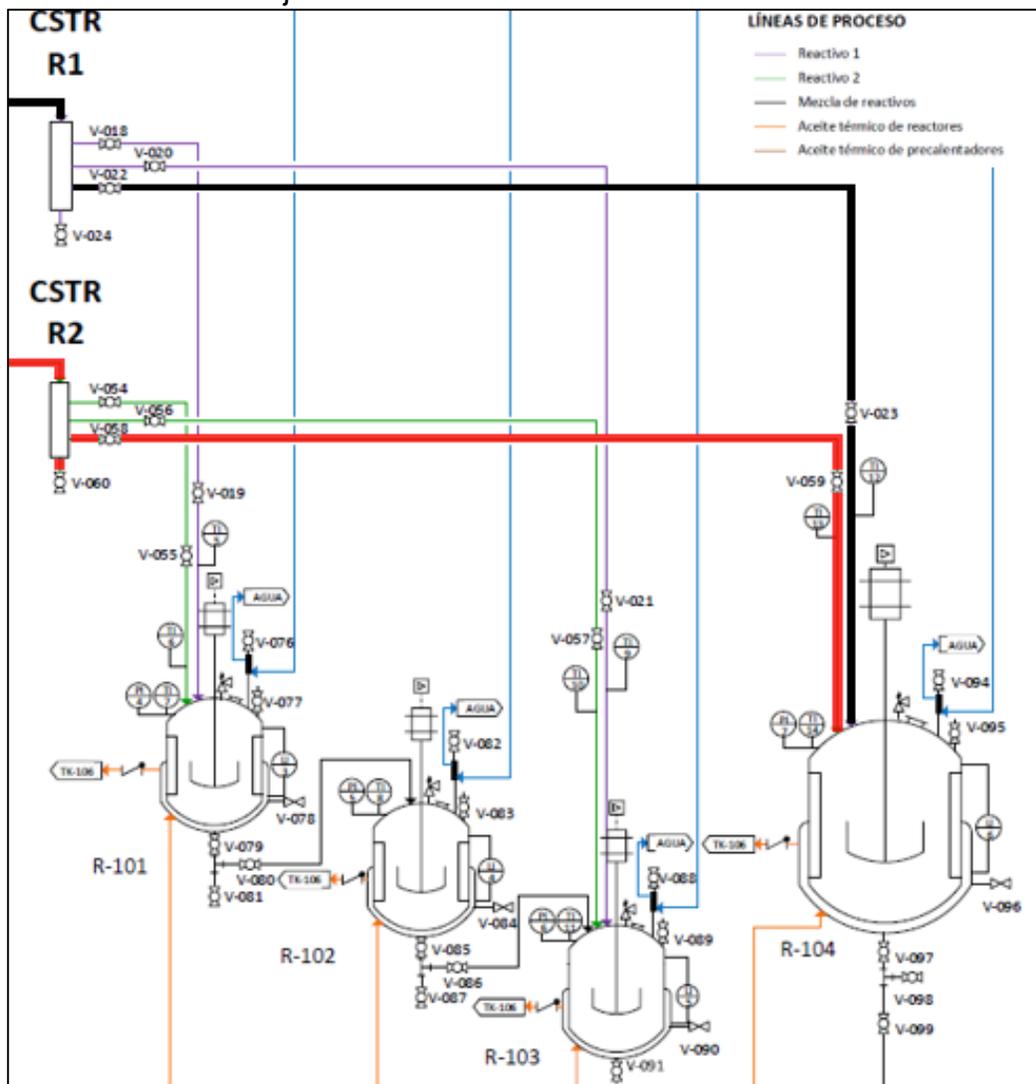
El recorrido de la línea de flujo del reactivo 2 es igual cambiando la identificación funcional de los dispositivos. El tanque TK-102 contiene la mezcla del reactivo 2 a temperatura ambiente y presión atmosférica. La corriente del reactivo 2 empieza a fluir por el sistema de tuberías pasando por la válvula V-039 que dirige el flujo hacia la bomba dosificadora P-102, la cual bombea el líquido a una presión no mayor a 30 psi. La corriente bombeada pasa por las válvulas V-045 y V-046 para entrar al intercambiador de calor E-102 de calentamiento de aceite térmico. El intercambiador E-102 tiene las mismas características del intercambiador E-101. La corriente de salida del reactivo 2, del intercambiador de calor E-102, sale a una temperatura mayor (la cual se puede medir en el instrumento “TI-4”). Posteriormente, la corriente del reactivo 2 caliente pasa por la válvula V-049, para dirigirse al rotámetro “R2” mediante la válvula V-051, o hacer un bypass pasando por la válvula V-052, e ingresar al distribuidor de flujo “CSTR R2”.

Si se está operando el reactor R-103 de 1 L, entonces deben estar abiertas las válvulas V-056 y V-057, mientras que si se está operando el reactor R-104, de 3 L, debe estar habilitado el paso por las válvulas V-058 y V-059. Se puede hacer una lectura de la temperatura de entrada al reactor con “T-10” (R-103), y “T-13” (R-104). En la figura 9 se muestra la línea de alimentación resaltada de los reactivos 1 (negro) y 2 (rojo) al reactor de 3 litros de capacidad, R-104, desde los distribuidores de flujo a modo de ejemplo.

Las corrientes de reactivo 1 y 2 se mezclan y reaccionan en el reactor R-103 o R-104, según el que esté operando. En el reactor existe un nivel establecido de líquido, el cual se obtiene en el arranque del equipo. Se pueden tomar muestras, abriendo la válvula V-090, para R-103, y la válvula V-096, para R-104. Cuando una unidad de volumen de reactivos es procesada en un tiempo de residencia o espacial del reactor CSTR, sale por la válvula V-091 (para R-103), o por V-097 (para R-104). La

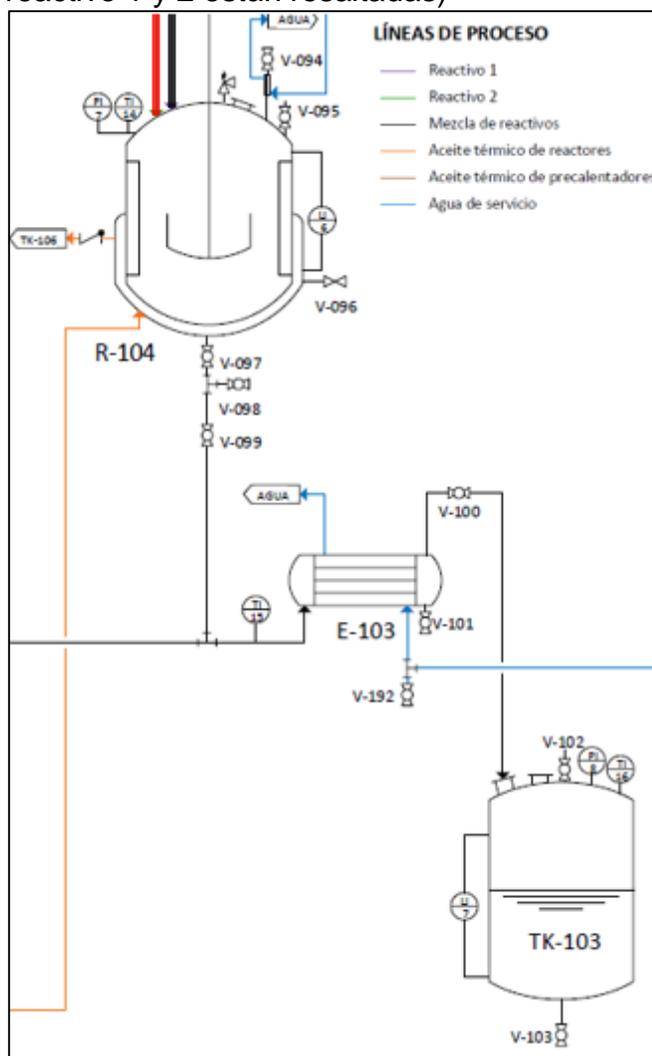
mezcla de productos y reactivos que no se agotaron pasa por la válvula V-093 (para R-103), o por V-099 (para R-104), para dirigirse hacia el intercambiador E-103 de agua de enfriamiento, mediante una tubería de 17.1 mm de diámetro. El intercambiador E-103 opera a contracorriente, fluyendo agua por la coraza y la corriente de descarga por los tubos. La corriente de salida de la mezcla de productos y reactivos pasa por la válvula V-100 que habilita la línea de flujo hacia el tanque de productos TK-104. Si la temperatura del tanque es menor a 25°C, que se puede leer en el instrumento "TI-16", se pueden descargar los productos abriendo la válvula V-103. En la figura 10, se muestra la representación de la descarga de productos desde el reactor R-104.

Figura 9. Alimentación de los reactivos 1 y 2 al reactor R-104 desde los distribuidores de flujo.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

Figura 10. Línea de descarga de productos con enfriamiento desde el reactor R-104 al tanque TK-103 (líneas de flujo del reactivo 1 y 2 están resaltadas)

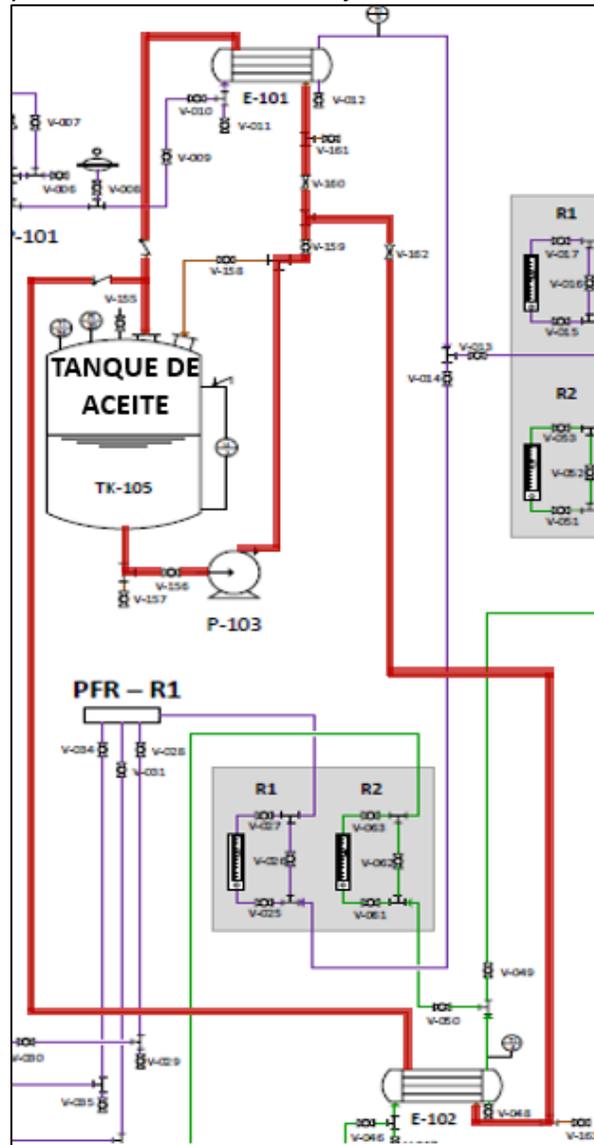


Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

En paralelo, la línea de flujo de aceite térmico para los intercambiadores E-101 y E-102, inicia en el tanque TK-105, donde empieza a fluir en el sistema de tuberías de diámetro 17.1 mm, pasando por la válvula V-156 y entrando a la bomba centrífuga P-103. La corriente de aceite térmico es bombeada a una presión no mayor de 22.8 psi, fluyendo a través de la válvula V-159, y llegando a un divisor, el cual distribuye el aceite proveniente del tanque TK-105 en dos corrientes; una corriente de alimentación al intercambiador E-101, pasando por la válvula de globo V-160, y una corriente de alimentación al intercambiador E-102, pasando por la válvula de globo V-162. Las corrientes respectivas entran por la coraza de los intercambiadores, y salen como reciclo hacia el tanque TK-105, pasando ambas corrientes por una

válvula de retención, que no permite el contraflujo hacia las unidades de transferencia de calor. En la figura 11, se muestra la representación de la línea de flujo de los precalentadores.

Figura 11. Línea de flujo del aceite térmico a los precalentadores E-101 y E-102.

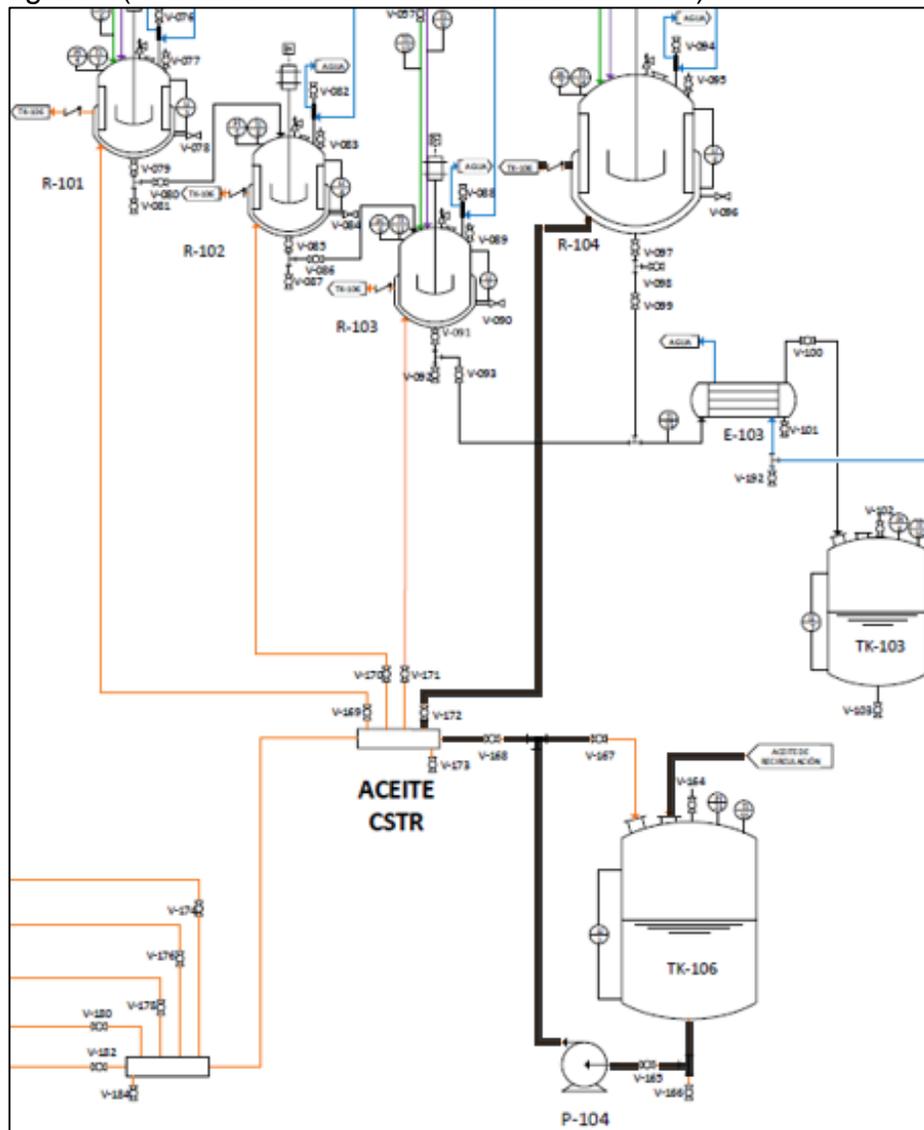


Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

Con respecto al aceite térmico del tanque TK-106 que se dirige a los reactores R-103 y R-104, la línea de flujo transita por las tuberías de 17.1 mm de diámetro, pasando inicialmente por la válvula V-165 que habilita el flujo hacia la bomba centrífuga P-104. El aceite es bombeado a una presión no mayor a 22.8 psi, fluyendo a través de la válvula V-168, para entrar posteriormente al distribuidor de

flujo “ACEITE CSTR”. Si la válvula V-171 está abierta, el aceite térmico entra a la chaqueta térmica del reactor R-103, para mantener a una temperatura establecida el sistema reactivo, Si la válvula V-172 está abierta, el aceite térmico entrara a la chaqueta del reactor R-104. La corriente de salida de aceite térmico, para ambos reactores, pasa por una válvula de retención, que impide el contraflujo, para posteriormente entrar de nuevo al tanque TK-106, como reciclo. En la figura 12, se muestra las líneas de flujo del aceite térmico hacia los reactores de tanque agitado, estando la línea hacia el reactor R-104 resaltada a modo de ejemplo para el calentamiento a un único CSTR.

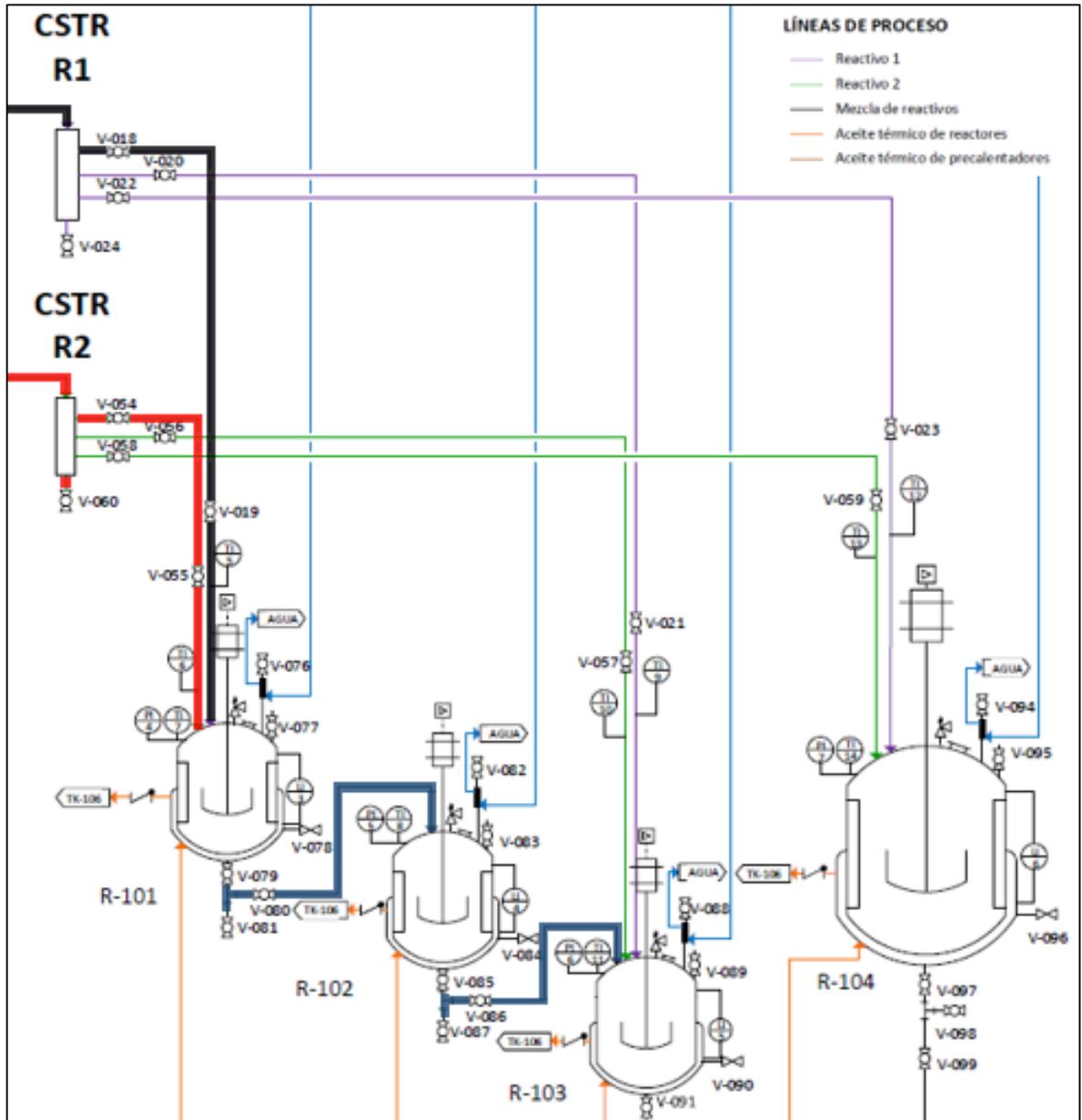
Figura 12. Línea de flujo del aceite térmico a los reactores de tanque agitado (resaltada la línea hacia el reactor R-104).



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

Finalmente, para los casos en que se requiera mantener la temperatura baja para reacciones exotérmicas, el distribuidor de flujo de agua suministra el fluido de servicio a las chaquetas de los reactores R-103, y R-104, mediante las válvulas V-188 y V-189, respectivamente. La válvula V-185 es la que abastece de agua al distribuidor de flujo. Pueden revisarse las líneas de flujo de agua de servicio en el diagrama de flujo de procesos que se encuentra en el anexo A.

Figura 13. Alimentación de los reactivos 1 y 2 al reactor R-101 para la secuencia CSTR.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

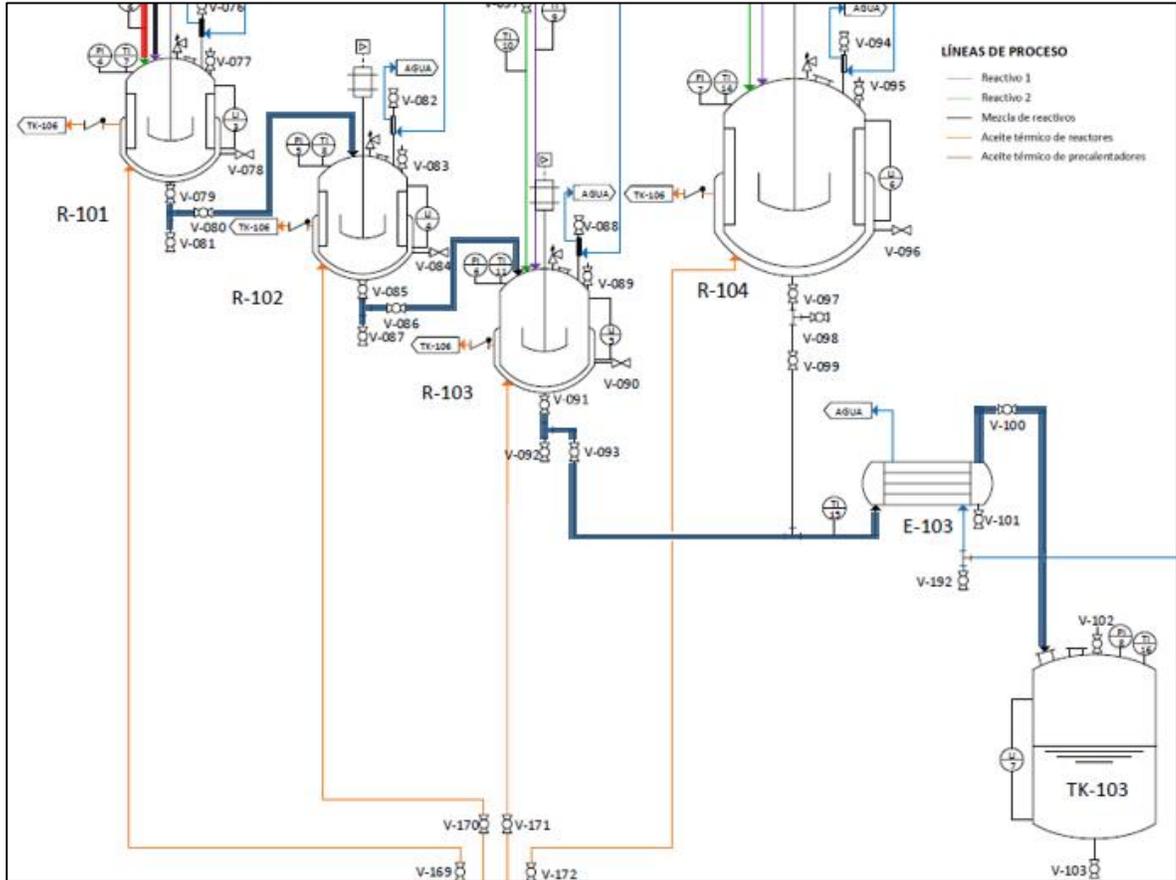
➤ **Secuencia CSTR.** Para la operación de la secuencia de tres reactores de tanques agitados de 1 litro, las líneas de flujo de alimentación de reactivos son las mismas que las descritas en el inciso anterior hasta los distribuidores de flujo “CSTR R1” y “CSTR R2”, por lo que las válvulas que deben estar abiertas y cerradas serán las mismas hasta ese punto del proceso. Del distribuidor de flujo “CSTR R1” debe habilitarse únicamente la válvula V-018 que dirige el flujo al reactor R-101, mientras que para el distribuidor de flujo “CSTR R2” se debe abrir la válvula V-054. Adicionalmente, en la entrada al reactor deben abrirse las válvulas V-019 (para el reactivo 1), y V-055 (para el reactivo 2). Los reactivos se mezclan y reaccionan en el reactor R-101, bajo la transferencia de calor de aceite o agua, según corresponda. Se pueden tomar muestras abriendo la válvula V-078. La corriente de salida del reactor R-101 pasa por las válvulas V-079 y V-080, para ingresar al reactor R-102. Se pueden tomar muestras, abriendo la válvula V-084. La corriente de salida del reactor R-102 pasa por las válvulas V-085 y V-086 para ingresar al tercer reactor R-103, donde termina el proceso de reacción. De este último reactor, se pueden tomar muestras abriendo la válvula V-090. En la figura 13, se muestran resaltadas las líneas de flujo para la secuencia CSTR.

La corriente de productos y reactivos que no se agotaron del reactor R-103, transita por las válvulas V-091 y V-093 para ingresar al intercambiador E-103 de enfriamiento. La corriente de salida fluye a través de la válvula V-100, para posteriormente ingresar al tanque de producto TK-103. Si la temperatura del tanque es menor a 25°C, se puede descargar el sistema mediante la válvula V-103. Cabe destacar que deben mantenerse cerradas las válvulas de purga o desagüe V-081, V-087, V-092 y V-101. En la figura 14, se muestra la representación de la descarga de productos de la secuencia CSTR.

La descripción operacional de la línea de flujo de aceite a los precalentadores es igual a la presentada en el inciso anterior. Con respecto al suministro de aceite térmico a la chaqueta de los reactores (si el proceso lo requiere), debe habilitarse únicamente las válvulas V-169, V-170 y V-171, desde el distribuidor de flujo “ACEITE CSTR”. El arreglo de válvulas desde el tanque TK-106 hasta el distribuidor de flujo es igual al descrito en el inciso anterior.

Si el proceso requiere de agua de enfriamiento, entonces deben estar abiertas las válvulas V-186, V-187 y V-188 del distribuidor de flujo de agua, estando cerradas V-189 y V-190. El arreglo de válvulas para el intercambiador E-103 es el mismo al presentado en el inciso anterior.

Figura 14. Descarga de productos al tanque TK-103 para la secuencia CSTR.



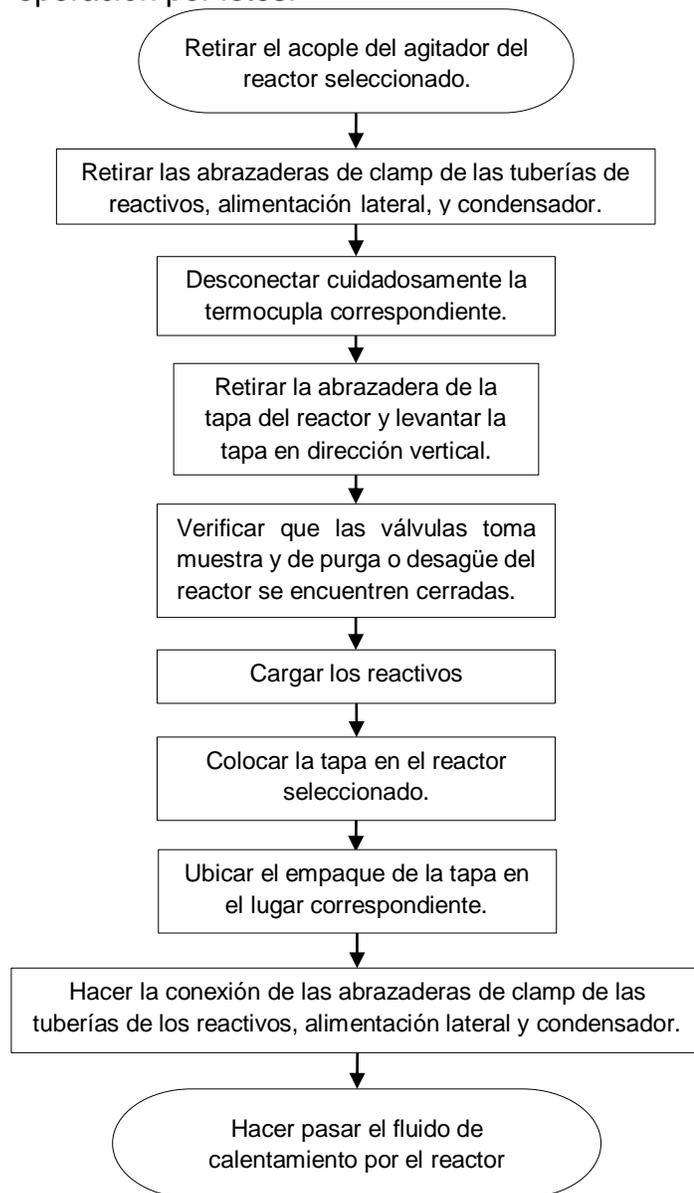
Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

2.1.2.2 Modo de operación por lotes. Los reactivos se cargan directamente en el reactor, siguiendo los pasos de la figura 15.

En intervalos de tiempo se deben tomar muestras del reactor, con el fin de hacer un análisis volumétrico que permita obtener la concentración de una de las sustancias en el tiempo. Cuando se decida terminar con la operación, para descargar se debe esperar a que el reactor este a una temperatura menor a 25°C, o permitir el flujo de la mezcla de productos y reactivos que no reaccionaron, al intercambiador enfriador R-103 con el fin de hacer la descarga en el tanque de producto TK-103.

Cabe mencionar que para hacer tratamiento térmico con el intercambiador E-103, debe haberse operado en los reactores R-103, o R-104, de otra manera la descarga debe hacerse directamente desde el reactor R-101 y R-102.

Figura 15. Procedimiento para la carga de reactivos en el modo de operación por lotes.



Fuente: Adaptado de PSE, Manual de operación del banco de reactores.

2.1.2.3 Modo de operación semi-lotes. En el caso de operación semi-lotes, uno de los reactivos se carga inicialmente al reactor, mientras el otro se alimenta de manera continua desde el tanque de alimentación que se seleccione. Si se alimenta desde el tanque TK-101 hasta el reactor R-104, entonces el arreglo de válvulas que deben estar abiertas y cerradas se muestran en la tabla 32. A medida que se alimenta el reactivo, el volumen de reacción cambia, lo que debe considerarse antes

de llevar a cabo la operación, con el fin de determinar el punto o volumen de reacción en que debe dejar de alimentarse uno de los reactivos.

Tabla 32. Arreglo de válvulas para operación semi-lotes desde el tanque TK-101 hasta el reactor R-104.

Posición	Válvula	
Abierta	V-002	V-004
	V-008	V-009
	V-010	V-013
	V-015	V-017
	V-022	V-023
Cerrada	V-003	V-005
	V-006	V-007
	V-011	V-012
	V-018	V-020
	V-024	-

Fuente: Elaboración propia.

2.2. CARACTERIZACIÓN DEL BANCO DE REACTORES TUBULARES.

2.2.1 Caracterización técnica del banco de reactores tubulares.

Tabla 33. Unidades y dispositivos del banco de reactores tubulares.

Unidad	Descripción	Cantidad
Reactor	Tubular	4
	Multitubular	1
Tanque	Alimentación reactivos	2
	Alimentación aceite térmico	2
	Descarga de productos	1
Intercambiador de calor	Tubos y coraza	3
Bombas	Dosificadora de reactivos	2
	Centrífuga de aceite térmico	2
Amortiguador de pulsaciones	-	2
Distribuidor de flujo	-	4
Instrumento de medición	Termopar tipo J	43
	Manómetro	17
	Indicador de nivel	5
	Rotámetro	2
Válvulas	Válvula de bola	97
	Válvula de globo	2
	Válvulas de seguridad	2
	Válvulas de retención	12
	Válvulas toma muestra	35

Fuente: Elaboración propia.

En la tabla 33, se encuentran el tipo y cantidad de dispositivos con los que cuenta el banco de reactores tubulares. La descripción e identificación de cada unidad y dispositivo se muestran en las siguientes secciones.

2.2.1.1 Reactores tubulares y de lecho empacado. El banco de reactores tubulares y de lecho empacado cuenta con 5 reactores construidos en acero inoxidable 304, divididos según la tabla 34, y representados en el diagrama de flujo de procesos (anexo A) como se muestra en la figura 16. Con respecto a las especificaciones técnicas de los reactores tubulares y multitubular, las características son las siguientes

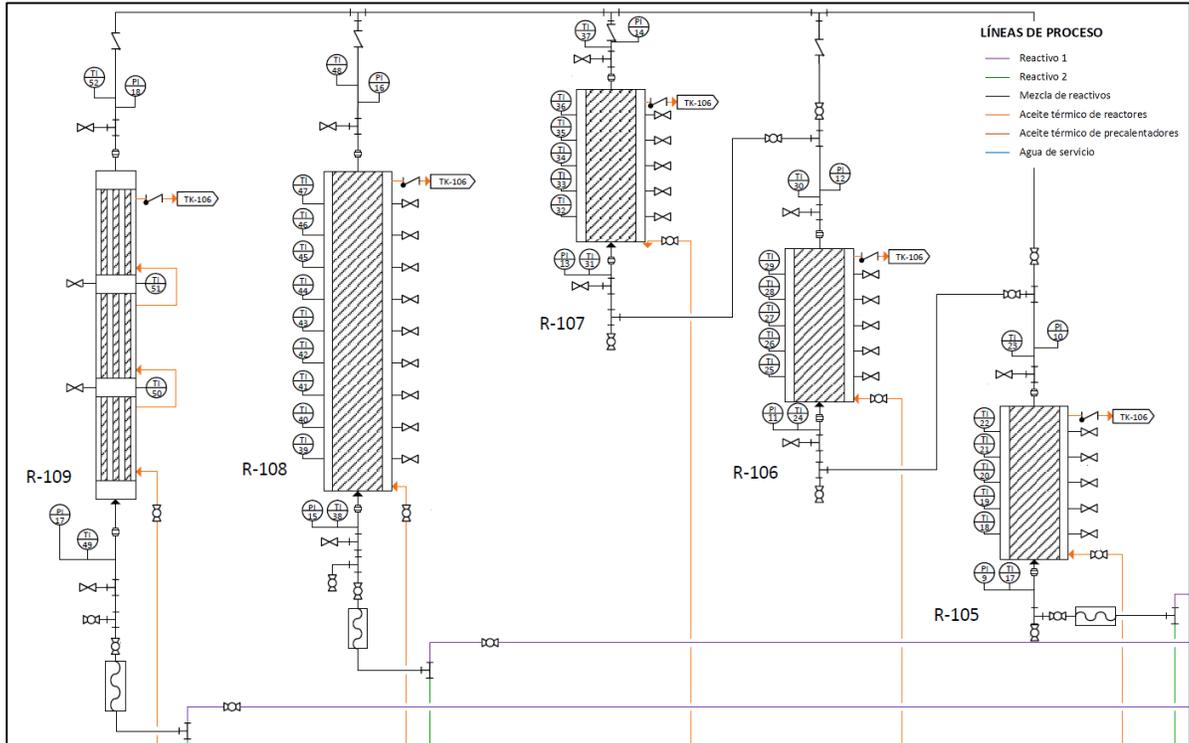
- Los reactores son cilíndricos de cabezal plano removible acoplado con unión tipo “clamp”, para carga de catalizador, y montaje rápido.
- Cuenta con mallas de ½” en la parte superior e inferior para soportar el lecho.
- Tiene una coraza por donde circula el fluido de transferencia de calor.
- Los reactores están aislados.
- A lo largo del reactor se encuentran instaladas válvulas toma-muestra, y termopares tipo J.
- En las corrientes de entrada, y salida se encuentran instalados los sensores de presión (manómetros).
- Cuenta con una válvula de acero inoxidable para descargar el sistema por gravedad.
- Tiene ménsulas de soporte a la estructura de acero inoxidable.

Tabla 34. Identificación y características de los reactores tubulares y de lecho empacado.

Tipo	Cantidad	Identificación	Numero tubos	Longitud (m)	Capacidad (L)
Tubular	4	R-105	1	0.262	1
		R-106			1
		R-107			1
		R-108		0.741	3
Multitubular	1	R-109	9	3 secciones de 0.28	3

Fuente: Adaptado de PSE, Manual de operación del banco de reactores.

Figura 16. Representación de los reactores tubulares en el PFD.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

Según la figura 16, el reactor tubular de 3 L cuenta con 9 válvulas toma-muestra y termopares tipo J, distribuidos a lo largo del reactor, mientras el reactor multitubular de 3 L cuenta con 2 válvulas toma-muestra y termopares tipo J, a lo largo del reactor.

2.2.1.2 Tanques de alimentación y descarga.

- **Tanques de alimentación de reactivos y de descarga de productos.** El banco de reactores tubulares cuenta con los mismos tanques de alimentación TK-101 y TK-102, del banco de reactores de tanques agitado. El tanque de descarga de productos tiene la identificación TK-104. Las especificaciones técnicas son las que se presentan en la sección “2.1.1.2”.
- **Tanques de alimentación de aceite térmico.** El banco de reactores tubulares presenta los mismos tanques de alimentación de aceite térmico, TK-105 para los precalentadores de las corrientes de los reactivos, y TK-106 para las chaquetas térmicas de los reactores tubulares, así como la utilización del mismo tipo de aceite THERMOIL Z-100 ISO 32, cuyas características técnicas se muestran en la sección “2.1.1.2”.

2.2.1.3 Intercambiadores de calor. El banco de reactores tubulares contiene en las líneas de flujo de los reactivos, los intercambiadores precalentadores E-101 y E-102, al igual que el banco de reactores de tanques agitados. La línea de flujo de

productos cuenta con un intercambiador de calor con identificación E-104, que lleva a cabo la operación de transferencia de calor entre la corriente de productos de los reactores tubulares, y agua de servicio, con el fin de descargar la corriente de productos a temperatura ambiente en el tanque de productos TK-104. Las especificaciones técnicas de los intercambiadores de calor involucrados son las presentadas en la sección “2.1.1.3”.

2.2.1.4 Tuberías. Las características técnicas del sistema de tuberías del banco de reactores tubulares son las mismas al sistema de tuberías del banco de reactores de tanques agitados, presentado en la sección “2.1.1.4”.

2.2.1.5 Bombas y amortiguadores de pulsaciones. Las características técnicas de las bombas del banco de reactores tubulares son las mismas a las de las bombas del banco de reactores de tanques agitados, presentado en la sección “2.1.1.5”, porque el sistema de alimentación de los reactivos tanto para el banco de reactores tubulares, como de tanques agitados, es idéntico hasta las válvulas V-013 y V-014 (para el reactivo 1), y V-049 y V-050 (para el reactivo 2).

2.2.1.6 Distribuidores de flujo. El banco de reactores tubulares cuenta con 4 distribuidores de flujo, cuyas especificaciones técnicas y operacionales se encuentran en la tabla 35. El enfriamiento y calentamiento en cada reactor se hace mediante una chaqueta térmica.

Tabla 35. Especificaciones técnicas y operacionales de los distribuidores de flujo del banco de reactores tubulares.

ID	Cantidad de entradas	Cantidad de salidas	Válvulas de bola relacionadas	Función
PFR R1	1	3	V-028/V-030	Operación individual (PFR de 1 L), o secuencia PFR (2 o 3 reactores PFR de 1 L).
			V-031/V-033	Operación individual (PBR de 3 L).
			V-034/V-036	Operación individual (PFR de 3 L).
PFR R2	1	3	V-064/V-066	Operación individual (PFR 1 de L), o secuencia PFR (2 o 3 reactores PFR de 1 L).
			V-068/V-070	Operación individual (PBR de 3 L).
			V-072/V-074	Operación individual (PFR de 3 L).
Agua	1	7	V-186	Enfriamiento en R-101.
			V-187	Enfriamiento en R-102.
			V-188	Enfriamiento en R-103.

Tabla 35. (Continuación)

ID	Cantidad de entradas	Cantidad de salidas	Válvulas de bola relacionadas	Función
Agua			V-189	Enfriamiento en R-104.
			V-190	Enfriamiento en E-104.
			V-191	Enfriamiento en E-103.
			V-193	Desagüe.
Aceite PFR	1	6	V-174-V-175	Calentamiento en reactor R-105.
			V-176-V-177	Calentamiento en reactor R-106.
			V-178-V-179	Calentamiento en reactor R-107.
			V-180-V-181	Calentamiento en reactor R-108.
			V-182-V-183	Calentamiento en reactor R-109.
			V-184	Descarga de aceite térmico.

Fuente: Elaboración propia.

2.2.1.7 Instrumentos de medición. Según el diagrama de flujo de procesos, los instrumentos de medición están distribuidos de la siguiente manera:

- 43 medidores de temperatura.
- 17 medidores de presión.
- 5 medidores de nivel.
- 2 medidores de caudal.

En total, el banco de reactores tubulares cuenta con 67 instrumentos de medición. Cabe mencionar que el banco de reactores tubulares, y de tanques agitados comparten 16 instrumentos en sus líneas de flujo.

➤ **Medidores de temperatura.** Los instrumentos de medición de temperatura del banco de reactores tubulares son termopares tipo J, distribuidos como sigue:

- 7 termopares para el sistema de alimentación de reactivos.
- 30 termocuplas dispuestas para los reactores tubulares, y el sistema de reactores en serie.
- 6 medidores de temperatura para el sistema de descarga de productos (2 repetidas del sistema de reactores en serie).
- 1 termopar en el sistema de flujo de aceite térmico a los precalentadores.
- 1 termopar en el sistema de flujo de aceite térmico a los reactores tubulares.

Tabla 36. Identificación y ubicación de cada termopar del banco de reactores tubulares.

Identificación funcional	Ubicación
TI-1	Tanque de alimentación del reactivo 1, TK-101.
TI-2	Tanque de alimentación del reactivo 2, TK-102.
TI-3	Corriente de salida del reactivo 1, del intercambiador de calor E-101.
TI-4	Corriente de salida del reactivo 2, del intercambiador de calor E-102.
TI-17	Corriente de alimentación de la mezcla de los reactivos 1 y 2, al reactor R-105.
TI-18	A lo largo del reactor R-105.
TI-19	
TI-20	
TI-21	
TI-22	
TI-23	Corriente de salida del reactor R-105.
TI-24	Corriente de entrada al reactor R-106.
TI-25	A lo largo del reactor R-106.
TI-26	
TI-27	
TI-28	
TI-29	
TI-30	Corriente de salida del reactor R-106.
TI-31	Corriente de entrada al reactor R-107.
TI-32	A lo largo del reactor R-107
TI-33	
TI-34	
TI-35	
TI-36	
TI-37	Corriente de salida del reactor R-107.
TI-38	Corriente de alimentación de la mezcla de los reactivos 1 y 2, al reactor R-108.
TI-39	A lo largo del reactor R-108.
TI-40	
TI-41	
TI-42	
TI-43	
TI-44	
TI-45	
TI-46	
TI-47	

Tabla 36. (Continuación)

Identificación funcional	Ubicación
TI-48	Corriente de salida del reactor R-108.
TI-49	Corriente de alimentación de la mezcla de reactivos 1 y 2, al reactor R-109.
TI-50	A lo largo del reactor R-109.
TI-51	
TI-52	Corriente de salida del reactor R-109.
TI-53	Tanque de producto TK-104.
TI-54	Tanque de aceite térmico, TK-105.
TI-55	Tanque de aceite térmico, TK-106

Fuente: Elaboración propia.

Teniendo en total 43 termocuplas. El banco de reactores tubulares, y el banco de reactores de tanques agitados comparten 6 termopares tipo J.

➤ **Medidores de presión.** Los instrumentos de medición de presión del banco de reactores tubulares son manómetros, distribuidos de la siguiente forma:

- 7 medidores de presión del sistema de alimentación de reactivos.
- 4 manómetros para los reactores, y sistema de reactores en serie.
- 6 instrumentos de medición en el sistema de descarga de productos (2 repetidos del sistema de reactores en serie).
- 1 manómetro en el sistema de flujo de aceite térmico a los precalentadores.
- 1 manómetro en el sistema de flujo de aceite térmico a los reactores tubulares.

El banco de reactores tubulares cuenta en total de 17 instrumentos de medición de presión, cuya identificación funcional, y ubicación se muestran en la tabla 37. Cabe destacar que se cambió la identificación funcional de los indicadores de presión desde PI-5, debido a que existían dos instrumentos con la misma identificación, y numero de bucle, en el diagrama de flujo de procesos (anexo A). El banco de reactores tubulares, y el banco de reactores de tanques agitados comparten 6 manómetros en sus líneas de flujo.

Tabla 37. Identificación funcional y ubicación de los manómetros del banco de reactores tubulares.

Identificación funcional	Ubicación
PI-1	Tanque de alimentación del reactivo 1, TK-101.
PI-2	Sistema de retorno de la corriente del reactivo 1, al tanque de alimentación TK-101, por activación de válvula de seguridad.
PI-3	Tanque de alimentación del reactivo 2, TK-102.
PI-4	Sistema de retorno de la corriente del reactivo 2, al tanque de alimentación TK-102, por activación de válvula de seguridad.
PI-10	Corriente de alimentación de la mezcla de reactivos 1 y 2 al reactor R-105.
PI-11	Corriente de salida del reactor R-105.
PI-12	Corriente de entrada al reactor R-106.
PI-13	Corriente de salida del reactor R-106.
PI-14	Corriente de entrada al reactor R-107.
PI-15	Corriente de salida del reactor R-107.
PI-16	Corriente de alimentación de la mezcla de reactivos 1 y 2, al reactor R-108.
PI-17	Corriente de salida del reactor R-108.
PI-18	Corriente de alimentación de la mezcla de reactivos 1 y 2, al reactor R-109.
PI-19	Corriente de salida del reactor R-109.
PI-20	Tanque de producto, TK-104.
PI-21	Tanque de aceite térmico, TK-105.
PI-22	Tanque de aceite térmico, TK-106.

Fuente: Elaboración propia.

➤ **Medidores de nivel.** El banco de reactores tubulares cuenta con 5 medidores de nivel, distribuidos e identificados como se muestra en la tabla 38.

Tabla 38. Identificación funcional y ubicación de los indicadores de nivel del banco de reactores tubulares.

Identificación funcional	Ubicación
LI-1	Tanque de alimentación del reactivo 1, TK-101.
LI-2	Tanque de alimentación del reactivo 2, TK-102.
LI-8	Tanque de producto, TK-104
LI-9	Tanque de aceite térmico, TK-105.
LI-10	Tanque de aceite térmico, TK-106

Fuente: Elaboración propia.

Como se indicó en la sección “2.1.1.7” la representación de los indicadores de nivel es de instrumentos de flotador o desplazamiento. El banco de reactores tubulares, y de tanques agitados comparten 4 medidores de nivel.

➤ **Medidores de caudal.** Las especificaciones técnicas de los medidores de caudal, se muestran en la sección “2.1.1.7.4”. El banco de reactores de tanque tubulares cuenta con dos rotámetros, cada uno dispuesto para la medición de la velocidad de flujo volumétrico de las corrientes de alimentación de los reactivos a los reactores, como se muestra en la siguiente descripción:

- “R1” realiza la medición del caudal del flujo de reactivo 1, y se encuentra ubicado entre las válvulas de bola V-025, y V-027.
- “R2” realiza la medición del caudal de flujo de reactivo 2, y se encuentra ubicado entre las válvulas de bola V-061, y V-063.

2.2.1.8 Válvulas. El banco de reactores tubulares cuenta con 146 válvulas en total, de las cuales 44 son compartidas con la línea de flujo del banco de reactores de tanques agitados en sus líneas de flujo. La distribución es la siguiente:

- 97 válvulas de bola (42 compartidas con la línea de flujo del banco de reactores de tanques agitados).
- 2 válvulas de seguridad (ambas compartidas).
- 2 válvulas de globo (ambas compartidas).
- 12 válvulas de retención (dos compartidas).
- 35 válvulas toma-muestras.

En total el banco de reactores cuenta con 215 válvulas, distribuidas entre el banco de reactores tubulares y de tanques agitados.

➤ **Válvulas de bola.** El banco de reactores tubulares cuenta con 97 válvulas de bola, de las cuales 42 son compartidas con la línea de flujo del banco de reactores de tanques agitados. La distribución de las válvulas de bola en el banco de reactores tubulares es la siguiente:

- 61 válvulas de bola para el sistema de alimentación de los reactivos a los reactores tubulares (24 compartidas con la línea de flujo del banco de reactores de tanques agitados).
- 4 válvulas de bola para el sistema de reactores en serie.
- 6 válvulas de bola para el sistema de descarga de productos al tanque de producto TK-104.

- 7 válvulas para el sistema de flujo de aceite térmico a los intercambiadores E-101, y E-102 (7 compartidas).
- 16 válvulas para el sistema de flujo de aceite térmico a las chaquetas térmicas de los reactores tubulares (5 compartidas).
- 3 válvulas de bola para el sistema de flujo de agua de enfriamiento al intercambiador E-104 (dos compartidas).

La identificación y función dentro del banco de reactores, se muestra como sigue.

❖ **Sistema de alimentación de reactivos.** El banco de reactores tubulares comprende 59 válvulas de bola para el sistema de alimentación de los reactivos. La línea de flujo abarca desde los tanques de reactivos TK-101, y TK-102, hasta las entradas a los reactores tubulares R-105, R-108, y R-109. Según el diagrama de flujo de procesos, los reactores R-106, Y R-107 no cuenta con alimentación directa desde los tanques de reactivos, y en cambio hacen parte del sistema de reactores en serie PFR. La identificación y función de cada válvula del sistema de alimentación del reactivo 1, se muestra en tabla 39.

Tabla 39. Función e identificación de cada válvula de bola del sistema de alimentación del reactivo 1 al banco de reactores tubulares.

ID	Función
V-001	Alimentación de reactivos al tanque TK-101.
V-002	Alimentación de reactivos y alivio de gases.
V-003	Descarga al desagüe del tanque de reactivos, TK-101.
V-004	Habilitación de la línea de flujo a la bomba dosificadora, P-101.
V-005	Descarga al desagüe de la bomba dosificadora, P-101.
V-006	Descarga al desagüe de la bomba dosificadora, P-101, por retorno al tanque de reactivos, TK-101, para calibración de la bomba.
V-007	Habilitación de la línea de retorno al tanque de reactivos, TK-101.
V-008	Habilitación al amortiguador de pulsaciones.
V-009	Alimentación de la línea de flujo al intercambiador de calor E-101.
V-010	
V-011	Descarga al desagüe de la alimentación al intercambiador de calor, E-101.
V-012	Descarga al desagüe de la salida del intercambiador de calor, E-101.
V-013	Habilita la línea de flujo al banco de reactores de tanque agitado.
V-014	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 1 al banco de reactores tubulares.
V-025	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 1 al rotámetro R1.
V-026	Bypass de la línea de flujo del reactivo 1 al rotámetro R1, y suministro al distribuidor de flujo PFR-R1.

Tabla 39. (Continuación)

ID	Función
V-027	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 1, al distribuidor de flujo PFR-R1, desde el rotámetro R1.
V-028	Suministro de flujo del reactivo 1, desde el distribuidor de flujo PFR-R1, al modo de operación individual PFR de 1 L, o a la secuenciación de tres reactores tubulares de 1 L.
V-029	Descarga al desagüe, desde el distribuidor de flujo PFR-R1, de la corriente de alimentación al reactor R-105.
V-030	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 1 al mezclador estático previo al reactor R-105 de 1 L.
V-031	Suministro de flujo del reactivo 1, desde el distribuidor de flujo PFR-R1, al modo de operación individual PBR de 3 L.
V-032	Descarga al desagüe, desde el distribuidor de flujo PFR-R1, de la corriente de alimentación al reactor R-109.
V-033	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 1 al mezclador estático previo al reactor R-109 de 3 L.
V-034	Suministro de flujo del reactivo 1, desde el distribuidor de flujo PFR-R1, al modo de operación individual PFR de 3 L.
V-035	Descarga al desagüe, desde el distribuidor de flujo PFR-R1, de la corriente de alimentación al reactor R-108.
V-036	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 1 al mezclador estático previo al reactor R-108 de 3 L.

Fuente: Elaboración propia.

Para el sistema de alimentación del reactivo 2, la identificación y función de cada válvula de bola involucrada se muestra a continuación.

Tabla 40. Función e identificación de cada válvula de bola del sistema de alimentación del reactivo 2 al banco de reactores tubulares.

ID	Función
V-037	Alimentación de reactivos al tanque de reactivos, TK-102.
V-038	Alimentación de reactivos y alivio de gases.
V-039	Habilitación de la línea de flujo a la bomba dosificadora, P-102.
V-040	Descarga al desagüe de los tanques de reactivos, TK-102.
V-041	Descarga al desagüe de la bomba dosificadora, P-102.
V-042	Descarga al desagüe de la bomba dosificadora, P-102, por retorno al tanque de reactivos, TK-101, para la calibración de la bomba.
V-043	Habilitación de la línea de retorno al tanque de reactivos, TK-102.
V-044	Habilitación al amortiguador de pulsaciones.
V-045	Alimentación de la línea de flujo al intercambiador de calor E-102.
V-046	

Tabla 40. (Continuación)

ID	Función
V-047	Descarga al desagüe de la alimentación al intercambiador de calor, E-102.
V-048	Descarga al desagüe de la salida del intercambiador de calor, E-102.
V-049	Habilita la línea de flujo al banco de reactores de tanque agitado.
V-050	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 2 al banco de reactores tubulares.
V-061	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 2 al rotámetro R2.
V-062	Bypass de la línea de flujo del reactivo 2 al rotámetro R2, y suministro al distribuidor de flujo PFR-R2.
V-063	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 2, al distribuidor de flujo PFR-R2, desde el rotámetro R2.
V-064	Suministro de flujo del reactivo 2, desde el distribuidor de flujo PFR-R2, al modo de operación individual PFR de 1 L, o a la secuenciación de tres reactores tubulares de 1 L.
V-065	Descarga al desagüe, desde el distribuidor de flujo PFR-R2, de la corriente de alimentación del reactivo 2 al reactor R-105.
V-066	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 2 al mezclador estático previo al reactor R-105 de 1 L.
V-067	Descarga al desagüe de la corriente del reactivo 2 de entrada al mezclador estático previo, al reactor R-105 de 1 L.
V-068	Suministro de flujo del reactivo 2, desde el distribuidor de flujo PFR-R2, al modo de operación individual PBR de 3 L.
V-069	Descarga al desagüe, desde el distribuidor de flujo PFR-R2, de la corriente de alimentación del reactivo 2 al reactor R-109.
V-070	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 2 al mezclador estático previo al reactor R-109 de 3 L.
V-071	Descarga al desagüe de la corriente del reactivo 2 de entrada al mezclador estático, previo al reactor R-109 de 3 L.
V-072	Suministro de flujo del reactivo 2, desde el distribuidor de flujo PFR-R2, al modo de operación individual PFR de 3 L.
V-073	Descarga al desagüe, desde el distribuidor de flujo PFR-R2, de la corriente de alimentación del reactivo 2 al reactor R-108.
V-074	Habilitación de la línea de flujo del reactivo 2 al mezclador estático previo al reactor R-108 de 3 L.
V-075	Descarga al desagüe de la corriente del reactivo 2 de entrada al mezclador estático, previo al reactor R-108 de 3 L.

Fuente: Elaboración propia.

Las corrientes de alimentación de reactivos se unen en el mezclador estático, del cual salen como una sola corriente de alimentación. Las válvulas de bola involucradas desde cada mezclador estático del sistema, hasta la entrada del

reactor tubular correspondiente, se muestran a continuación con su respectiva identificación y función.

Tabla 41. Función e identificación de las válvulas de bola de la línea de flujo de la mezcla de reactivos 1 y 2 de alimentación, a los reactores tubulares.

ID	Función
V-104	Habilitación de la línea de flujo de la mezcla de reactivos 1 y 2, al reactor tubular R-105 de 1 L, desde el mezclador estático correspondiente.
V-105	Descarga al desagüe de la corriente de entrada al reactor R-105, de 1 L.
V-132	Habilitación de la línea de flujo de la mezcla de reactivos 1 y 2, al reactor tubular R-108 de 3 L, desde el mezclador estático correspondiente.
V-133	Descarga al desagüe de la corriente de entrada al reactor R-108, de 3 L.
V-145	Habilitación de la línea de flujo de la mezcla de reactivos 1 y 2, al reactor tubular R-109 de 3 L, desde el mezclador estático correspondiente.
V-146	Descarga al desagüe de la corriente de entrada al reactor R-109, de 3 L.

Fuente: Elaboración propia.

❖ **Sistema de reactores en serie.** La identificación y función de cada válvula de bola involucrada en el sistema de reactores en serie PFR, se muestra en la tabla 42.

Tabla 42. Identificación y función de cada válvula de bola del sistema de reactores en serie del banco de reactores tubulares.

ID	Función
V-112	Habilitación de la línea de flujo del producto del reactor R-105, a la alimentación del reactor R-106, para una secuenciación en serie.
V-114	Descarga al desagüe de la corriente de alimentación al reactor R-106.
V-122	Habilitación de la línea de flujo del producto del reactor R-106, a la alimentación del reactor R-107, para una secuenciación en serie.
V-124	Descarga al desagüe de la corriente de alimentación al reactor R-107.

Fuente: Elaboración propia.

❖ **Sistema de descarga de productos al tanque TK-104.** En la tabla 43 se muestra la identificación de cada válvula de bola involucrada en el sistema de descarga de productos al tanque TK-104.

Tabla 43. Función e identificación de las válvulas de bola involucradas en la descarga de los productos de los reactores tubulares.

ID	Función
V-113	Habilitación de la corriente de producto del reactor R-105, al flujo hacia el intercambiador de enfriamiento E-104.
V-123	Habilitación de la corriente de producto del reactor R-106, al flujo hacia el intercambiador de enfriamiento E-104.
V-151	Descarga al desagüe de la corriente de producto de entrada al intercambiador E-104.

Tabla 43. (Continuación)

ID	Función
V-152	Descarga al desagüe de la corriente de producto de salida del intercambiador E-104.
V-153	Carga de sustancias o alivio atmosférico del tanque de producto TK-104.
V-154	Descarga de los productos del proceso desde el tanque TK-104.

Fuente: Elaboración propia.

❖ **Línea de flujo de los fluidos de servicio de los intercambiadores de calor E-101, E-102 y E-104.** Las válvulas de bola involucradas en el flujo de aceite térmico a los intercambiadores E-101, y E-102, se encuentran en la sección “2.1.1.8.1.4”. Las válvulas de bola que hacen parte de la línea de flujo del agua de servicio al intercambiador E-104, se encuentran en la tabla 44.

Tabla 44. Válvulas de bola involucradas en la línea de flujo del agua de servicio al intercambiador de calor E-104.

ID	Función
V-185	Habilitación de la línea de flujo de agua de servicio al distribuidor de flujo de agua.
V-190	Suministro de agua de servicio al intercambiador E-104.
V-193	Descarga al desagüe de agua de servicio desde el distribuidor de flujo de agua.

Fuente: Elaboración propia.

❖ **Línea de flujo de los fluidos de servicio de los reactores R-105, R-106, R-107, R-108 y R-109.** Según las especificaciones disponibles, los reactores tubulares cuentan únicamente con servicio de aceite térmico desde el tanque TK-106. Las válvulas de bola que hacen parte de la línea de flujo desde el tanque de aceite térmico TK-106, hasta los reactores tubulares se muestran a continuación.

Tabla 45. Función e identificación de las válvulas de bola de la línea de flujo de aceite térmico a los reactores tubulares.

ID	Función
V-164	Alimentación del aceite térmico fresco al tanque de aceite térmico TK-106.
V-165	Habilitación de la línea de flujo a la bomba centrífuga P-104.
V-166	Descarga de aceite del tanque de aceite térmico, TK-106.
V-167	Habilitación del retorno de la línea de flujo al tanque de aceite térmico TK-106, para calentar el aceite.
V-168	Habilitación de la línea de flujo al distribuidor de flujo de aceite térmico CSTR o PFR.
V-174	Suministro de aceite térmico a la coraza del reactor R-105, de 1 L.
V-175	
V-176	Suministro de aceite térmico a la coraza del reactor R-106, de 1 L.
V-177	

Tabla 45. (Continuación)

V-178	Suministro de aceite térmico a la coraza del reactor R-107, de 1 L.
V-179	
V-180	Suministro de aceite térmico a la coraza del reactor R-108, de 3 L.
V-181	
V-182	Suministro de aceite térmico a la coraza del reactor R-109, de 3 L.
V-183	
V-184	Descarga de aceite desde el distribuidor de flujo de aceite PFR.

Fuente: Elaboración propia.

- **Válvulas de seguridad.** Las válvulas de seguridad del banco de reactores tubulares son dos en total, y corresponde a las identificadas arbitrariamente como SV-1 y SV-2, cuya función se encuentra en la sección “2.1.1.8”, y hacen parte del sistema de alimentación de los reactivos 1 y 2.
- **Válvulas de globo.** Las válvulas de globo del banco de reactores tubulares son dos en total, y son las mismas del banco de reactores de tanques agitados, identificadas como V-160, y V-162, que pertenecen a la línea de flujo de aceite térmico a los precalentadores.
- **Válvulas de retención.** El banco de reactores tubulares cuenta con 12 válvulas de retención, dos de las cuales también pertenecen a las líneas de flujo del banco de reactores agitados.

Tabla 46. Ubicación y función de las válvulas de retención del banco de reactores de tanques agitados.

ID	Ubicación	Función
CV-1	Regula la línea de flujo de aceite térmico proveniente del intercambiador de calor, E-101, y precede el reciclo de aceite térmico al tanque TK-105.	No permitir el contraflujo hacia los intercambiadores de calor E-101 y E-102, para no afectar la operación de transferencia de calor en los intercambiadores.
CV-2	Regula la línea de flujo de aceite térmico proveniente del intercambiador de calor, E-102, y precede el reciclo de aceite térmico al tanque TK-105.	
CV-7	Corriente de descarga de producto del reactor R-105, al tanque TK-104.	No permitir el contraflujo hacia los tubos de producto, para no afectar la operación de transferencia de calor, ni el proceso químico en el sistema reactivo.
CV-8	Corriente de descarga de producto del reactor R-106, al tanque TK-104.	
CV-9	Corriente de descarga de producto del reactor R-107, al tanque TK-104.	
CV-10	Corriente de descarga de producto del reactor R-108, al tanque TK-104.	
CV-11	Corriente de descarga de producto del reactor R-109, al tanque TK-104.	

Tabla 46. (Continuación)

ID	Ubicación	Función
CV-12	Corriente de aceite térmico de salida de la coraza del reactor R-105.	No permitir el contraflujo hacia la coraza de aceite térmico, para no afectar la operación de transferencia de calor, ni el proceso químico en el sistema reactivo.
CV-13	Corriente de aceite térmico de salida de la coraza del reactor R-106.	
CV-14	Corriente de aceite térmico de salida de la coraza del reactor R-107.	
CV-15	Corriente de aceite térmico de salida de la coraza del reactor R-108.	
CV-16	Corriente de aceite térmico de salida de la coraza del reactor R-109.	

Fuente: Elaboración propia.

➤ **Válvulas toma-muestra.** El banco de reactores tubulares cuenta con 35 válvulas toma-muestra divididas de la siguiente forma:

- 2 válvulas para el sistema de alimentación de reactivos a los reactores tubulares.
- 30 válvulas en los reactores, y sistema de reactores en serie.
- 3 válvulas en el sistema de descarga de productos.

En la tabla 47 se encuentra la identificación y función de cada válvula.

2.2.1.9 Mezcladores estáticos. El banco de reactores tubulares cuenta con 3 mezcladores estáticos, que preceden a la corriente de alimentación a los reactores tubulares. Las características técnicas de los mezcladores estáticos se muestran a continuación:

- Constan de 12 elementos de mezcla.
- Cada elemento de mezcla tiene una longitud de 12 mm, y un diámetro de 10.4 mm.
- Permiten hacer la mezcla de reactivos 1 y 2 antes de ingresar a los reactores tubulares.

Tabla 47. Identificación y función de cada válvula toma-muestra del banco PFR.

ID	Función
V-106	Permiten la toma de muestras a lo largo del reactor R-105, siendo V-106 la válvula más cercana a la entrada del reactor, y la válvula V-110 la más cercana a la salida del reactor R-105.
V-107	
V-108	
V-109	
V-110	
V-111	Permitir la toma de muestra de la corriente de salida del reactor R-105.
V-115	Permite la toma de muestra de la corriente de alimentación al reactor R-106.

Tabla 47. (Continuación)

ID	Función
V-116	Permiten la toma de muestras a lo largo del reactor R-106, siendo V-116 la válvula más cercana a la entrada del reactor, y la válvula V-120 la más cercana a la salida del reactor R-106.
V-117	
V-118	
V-119	
V-120	
V-121	Toma de muestra de la corriente de salida del reactor R-106.
V-125	Permite la toma de muestra de la corriente de alimentación al reactor R-107.
V-126	Permiten la toma de muestras a lo largo del reactor R-107, siendo V-126 la válvula más cercana a la entrada del reactor, y la válvula V-130 la más cercana a la salida del reactor R-107.
V-127	
V-128	
V-129	
V-130	
V-131	Toma de muestra de la corriente de salida del reactor R-107.
V-134	Toma de muestra de la corriente de mezcla de reactivos 1 y 2, a la entrada del reactor R-108.
V-135	Permiten la toma de muestras a lo largo del reactor R-108, siendo V-135 la válvula más cercana a la entrada del reactor, y la válvula V-143 la más cercana a la salida del reactor R-108.
V-136	
V-137	
V-138	
V-139	
V-140	
V-141	
V-142	
V-143	Permite la toma de muestras a la salida del reactor R-108.
V-144	Toma de muestra de la corriente de salida del reactor R-108.
V-147	Toma de muestra de la corriente de mezcla de reactivos 1 y 2, a la entrada del reactor R-109.
V-148	Permiten la toma de muestras a lo largo del reactor R-109, siendo V-148 la válvula más cercana a la entrada del reactor, y la válvula V-149 la más cercana a la salida del reactor R-109.
V-149	
V-150	Toma de muestra de la corriente de salida del reactor R-109.

Fuente: Elaboración propia.

2.2.2 Caracterización operacional del banco de reactores tubulares. El banco de reactores tubulares opera de manera continua, bajo las siguientes modalidades:

- Reactor tubular de 1 L, R-105.
- Reactor tubular de 3 L, R-108.
- Reactor multitubular de 3 L, R-109.

- Secuencia de hasta 3 reactores tubulares de 1 L; R-105, R-106 y R-107.

No se obtuvo información con respecto al protocolo de iniciación del sistema de reactores tubulares, por lo que en las secciones subsiguientes se mencionara el arreglo de válvulas para operar en cada modalidad, y una descripción general del proceso.

2.2.2.1 Único PFR. De esta modalidad, pueden seleccionarse el reactor R-105, o el reactor R-108. En la tabla 48, se muestra el arreglo de válvulas que deben estar abiertas y cerradas para operar con el reactor R-105 de 1 L, de capacidad. En dado caso de que se necesite operar el reactor tubular R-108 de 3 L, se deben abrir las válvulas de bola siguientes:

- V-043 y V-036, para la corriente de alimentación del reactivo 1.
- V-072 y V-074, para la corriente de alimentación del reactivo 2.
- V-132, para la corriente de mezcla del reactivo 1 y 2.

Cerrando las válvulas de bola relacionadas con purgas o desagües, como:

- V-035 de la purga de la corriente de alimentación del reactivo 1.
- V-073 y V-075, de las purgas de la corriente de alimentación del reactivo 2.
- V- 133, de la purga de la corriente de mezcla de reactivos.

La descripción del flujo de los reactivos 1 y 2, desde sus tanques de alimentación, TK-101 y TK-102, respectivamente, hasta los intercambiadores de calor de precalentamiento es igual, a la presentada en la caracterización operacional del banco de reactores de tanques agitados, de la sección “2.1.2.1”.

La representación del sistema de alimentación a los reactivos al reactor tubular R-105 se muestra en la figura 17. La corriente de salida del reactivo 1 del intercambiador de calor E-101, fluye por el sistema de tuberías de 9.97 mm de diámetro interno, pasando por la válvula de bola V-14, la cual habilita la línea de flujo a los reactores tubulares. La corriente para entrar al rotámetro “R1” debe tener paso por la válvula V-025. Después de la medición de caudal, la línea de flujo se dirige hacia el distribuidor de flujo “PFR - R1” fluyendo antes por la válvula de bola V-027. Se puede hacer un bypass al rotámetro cerrando las dos válvulas previamente mencionadas, y habilitando la línea de flujo por V-026. Desde el distribuidor de flujo “PFR – R1” la corriente toma la línea de flujo de la válvula V-028 (R-105), o V-034 (R-108), según el reactor que se esté operando. Si se selecciona el reactor tubular de 1 L, entonces la corriente de alimentación del reactivo 1, después de pasar por la válvula V-028, se dirige hacia el mezclador estático (previo

al reactor), pasando antes por la válvula de bola V-030. La corriente del reactivo 1 entra al mezclador estático con la corriente de alimentación del reactivo 2.

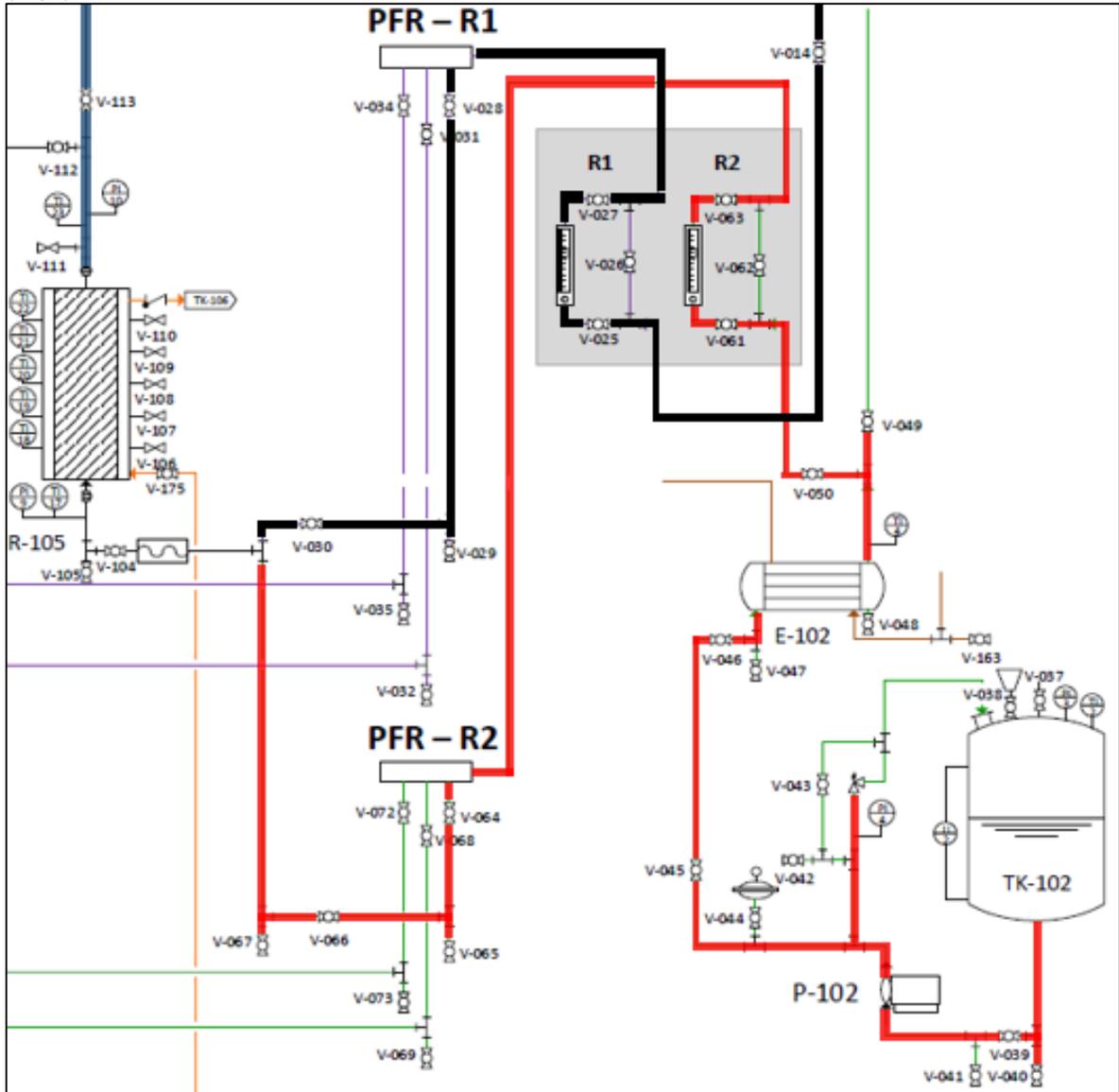
En paralelo, la corriente del reactivo 2 de salida del intercambiador E-102 fluye por el sistema de tubería de 9.97 mm de diámetro pasando por la válvula V-050, que habilita la línea de flujo a los reactores tubulares. La corriente del reactivo 2 para entrar al rotámetro “R2” debe pasar por la válvula de bola V-061. Después de la medición de caudal, la corriente del reactivo 2 se dirige hacia el distribuidor de flujo “PFR – R2”, fluyendo previamente por la válvula V-063. Se puede hacer un bypass al rotámetro, cerrando las dos válvulas previamente mencionadas, habilitando el paso por la válvula de bola V-062. La corriente de alimentación del reactivo 2 sale del distribuidor de flujo mediante la válvula V-064, para fluir por el sistema de tuberías, pasando por la válvula V-066, que lleva al mezclador estático, donde se mezcla con la corriente del reactivo 1.

Tabla 48. Arreglo de válvulas para operar únicamente el reactor tubular R-105, de 1 litro de capacidad, con medición de flujo volumétrico.

Posición	Reactivo 1	Reactivo 2	Mezcla de reactivos	Producto
Abierta	V-004	V-039	V-104	V-113
	V-008	V-044		
	V-009	V-045		
	V-010	V-046		
	V-014	V-050		
	V-025	V-061		
	V-027	V-063		
	V-028	V-064		
	V-030	V-066		
Cerrada	V-003	V-040	V-105	V-111 V-112 V-151 V-152 V-154
	V-005	V-041		
	V-006	V-042		
	V-007	V-043		
	V-011	V-047		
	V-012	V-048		
	V-013	V-049		
	V-026	V-062		
	V-029	V-065		
	V-031	V-067		
	V-034	V-068		
		V-072		

Fuente: Elaboración propia.

Figura 17. Alimentación al reactor tubular R-105 del reactivo 1 (negro) y reactivo 2 (rojo).



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

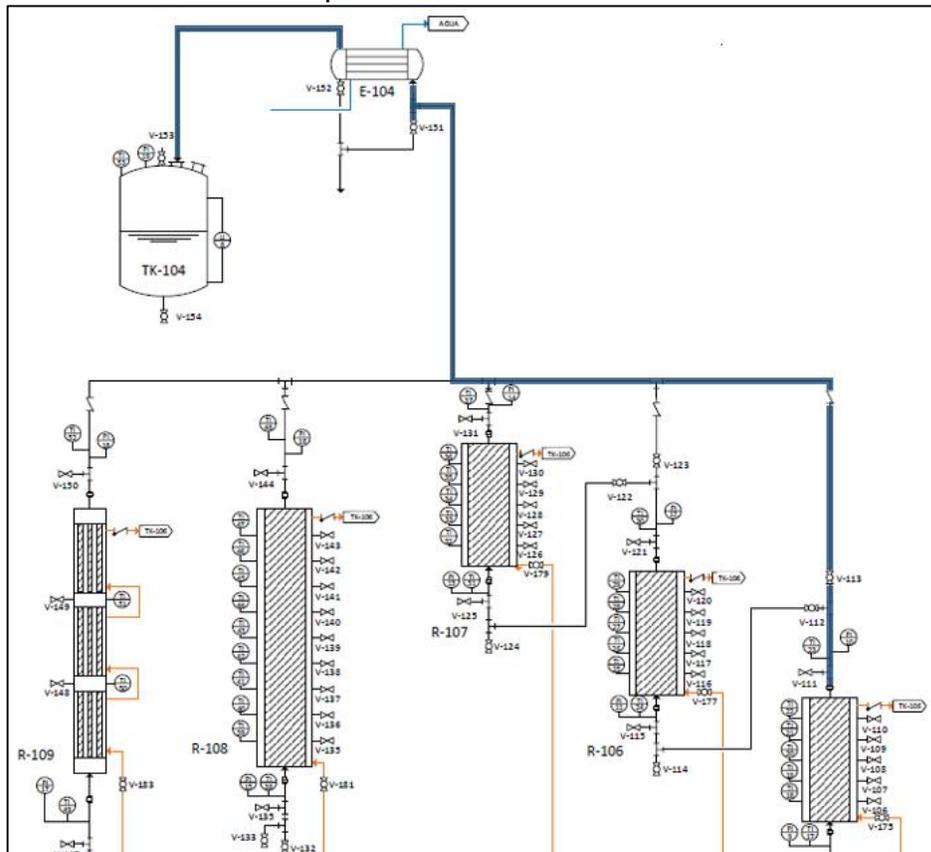
La mezcla de reactivos 1 y 2 sale del mezclador estático, fluyendo a través del sistema de tuberías de 9.1 mm de diámetro interno, pasando por la válvula V-104, para entrar al reactor R-105. Se puede hacer una lectura de las condiciones de alimentación al reactor mediante los instrumentos “PI-10” y “TI-17” que corresponde al manómetro del bucle 9, y el termopar tipo J del bucle 17.

La corriente de reactivos fluye a través del reactor tubular de 0.262 m de largo, mientras ocurre la reacción. Se pueden tomar muestras a lo largo del reactor, desde la válvula V-106 (más cercana a la entrada del reactor), hasta la válvula V-110.

Además, se puede leer la temperatura en distintos puntos a lo largo del reactor, desde la termocupla “TI-18”, hasta “TI-22”. Cabe mencionar que además de la temperatura, la velocidad de reacción, la concentración de los reactivos, y la presión (para reacciones en fase gaseosa con cambio en el número total de moles) varían a lo largo del reactor, debido a que, en teoría, no existe mezclado axial de la corriente de reactivos.

La corriente de salida fluye por el sistema de tuberías de 17.1 mm de diámetro interno pasando por la válvula de bola V-113, que habilita la línea de flujo hacia el ducto de mezcla de todas las corrientes de producto de todos los reactores tubulares, y el reactor multitubular. Antes de ingresar a dicha sección de tubería, cada corriente de producto pasa por una válvula de retención, para evitar el contraflujo hacia el reactor correspondiente. La corriente de productos, y reactivos que no se agotaron entran en el intercambiador E-103 para alcanzar una temperatura menor a 25°C, con el fin hacer la descarga de productos en el tanque TK-104. En la figura 18, se muestra la representación en el diagrama de flujo de procesos (anexo A) de la descarga de productos desde el reactor R-105.

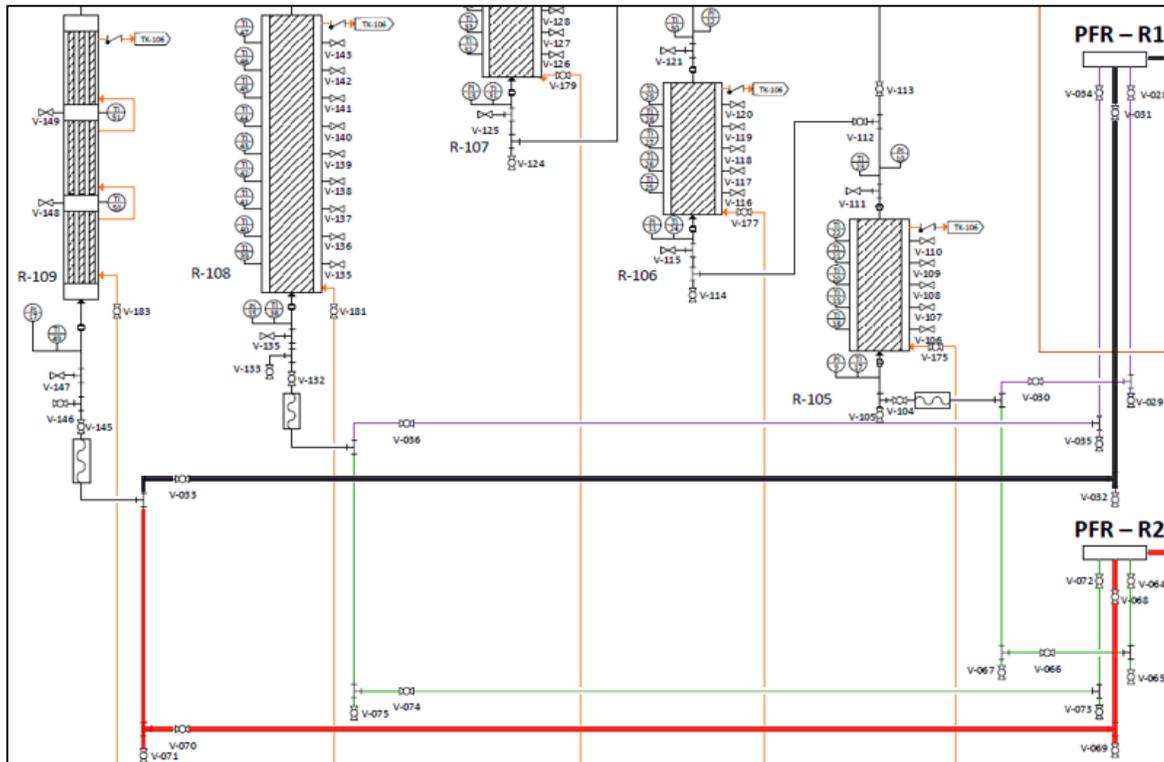
Figura 18. Línea de flujo de descarga de productos desde el reactor tubular R-105 a el tanque TK-104.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

térmico a los precalentadores, así como la línea de flujo de agua de enfriamiento para el intercambiador E-104, son iguales a las descritas en el inciso anterior.

Figura 20. Línea de flujo de alimentación del reactivo 1 (negro) y reactivo 2 (rojo) al reactor multitubular PBR.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

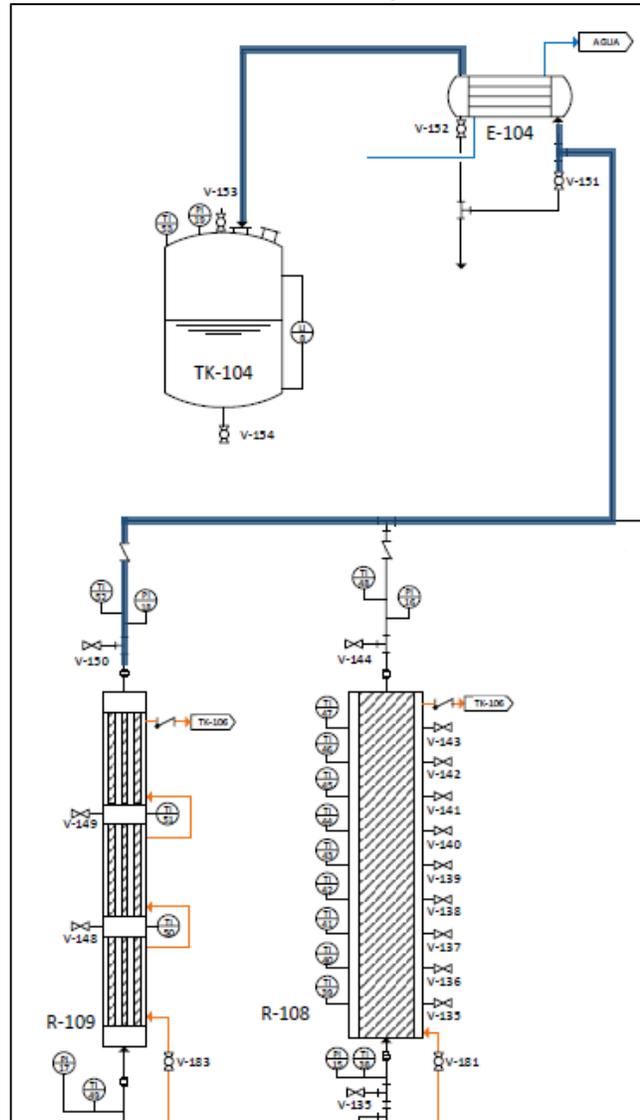
Con respecto a la corriente de reactivo 1, desde el distribuidor de flujo “PFR – 1” debe habilitarse el paso por la válvula V-031 para operar el reactor R-109. El reactivo 1 fluye por el sistema de tuberías de 9.97 mm de diámetro interno, pasando por las válvulas V-031 y V-033, para entrar al mezclador estático, con la corriente de alimentación del reactivo 2 procedente de una línea de flujo distinta.

La corriente de alimentación del reactivo 2 fluye por la válvula V-068 (habilita la línea de flujo, desde el distribuidor de flujo hacia el reactor multitubular R-109) y V-070, para mezclarse con la corriente del reactivo 1, en el mezclador estático previo al reactor.

Una vez mezcladas las corrientes de reactivo, estas fluyen a través de la válvula V-145, para entrar al reactor multitubular, R-109. A la entrada del reactor, es posible medir las condiciones de alimentación, mediante los instrumentos “PI-18” y “TI-49”, que corresponde al manómetro del bucle 17, y el termopar tipo J del bucle 49. La corriente de reactivos fluye a través de 3 secciones de 0.26 m de largo cada una, mientras ocurre la reacción. Se pueden tomar muestras a lo largo del reactor,

mediante las válvulas V-148, y V-149. Además, puede leerse la temperatura en dos puntos determinados a lo largo del reactor, usando las termocuplas “TI-50” y “TI-51”. A continuación, se muestra una representación de la sección de alimentación de reactivos desde los distribuidores de flujo.

Figura 21. Línea de flujo de descarga de productos desde el reactor R-109 hasta el tanque TK-104.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

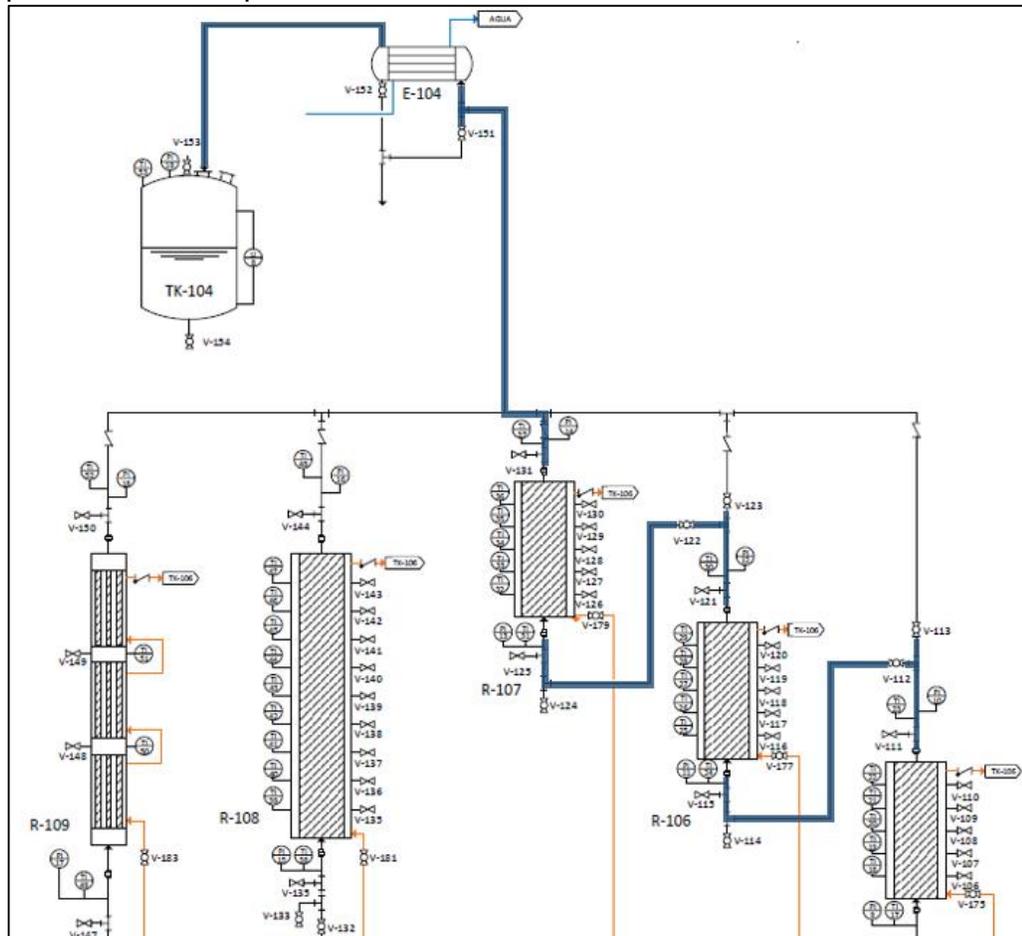
La corriente de productos y reactivos que no se agotaron de salida del reactor pasan una válvula de retención, para evitar el contraflujo hacia el reactor, y posteriormente ingresa al intercambiador de calor E-104 de agua de enfriamiento, con el fin de obtener una temperatura menor a 25°C a la salida. Finalmente, la línea de flujo de

productos y reactivos que no se agotaron entran al tanque de descarga TK-104. Cabe mencionar, que debe revisarse que las purgas o desagües de las válvulas V-032, V-69, V-071 y V-146, se encuentren cerradas. A continuación, se muestra una representación de esta última sección.

La línea de flujo de aceite térmico a los reactores, es igual a la descrita en el inciso anterior, desde el tanque TK-106, hasta el distribuidor de flujo “ACEITE PFR”. Para este caso, desde el distribuidor de flujo “ACEITE PFR” debe habilitarse la línea de flujo por la válvula V-182. El aceite térmico fluye por el sistema de tuberías de 17.1 mm de diámetro interno, pasando por las válvulas V-182, y V-183, para ingresar a la coraza del reactor multitubular R-109, y mantener la temperatura del sistema en un rango determinado. La corriente de aceite de salida del reactor R-109, se dirige nuevamente al tanque TK-106, como reciclo.

2.2.2.3 Secuencia de reactores tubulares.

Figura 22. Línea de flujo del sistema de reactores PFR en serie y descarga de productos al tanque TK-104.



Fuente: Adaptado de PSE, PFD Banco de reactores de la Fundación Universidad de América.

Las líneas de flujo del sistema de alimentación de los reactivos hasta la salida del reactor R-105, la línea de flujo de aceite térmico a los precalentadores, así como la línea de flujo de agua de enfriamiento para el intercambiador E-104, son iguales a las descritas en el inciso “2.2.2.1”. En la figura 22 se muestra la línea de flujo correspondiente a la secuencia de reactores PFR y descarga de productos al tanque TK-104.

La corriente de productos y reactivos que no se agotaron de salida del reactor R-105, pasa por la válvula V-112 (verificando que la válvula de bola V-113 esté cerrada), para ingresar el reactor R-106, de 1 litro de capacidad. Se puede tomar una muestra de la corriente de salida del reactor R-105, mediante la válvula V-111, y una muestra de la corriente de alimentación al reactor R-106, mediante la válvula V-115. Asimismo, se puede leer la temperatura y presión de la corriente de salida del reactor R-105, con los instrumentos “TI-23” y “PI-11”, y de la corriente de entrada al reactor R-106, mediante los instrumentos “TI-24” y “PI-12”. Se pueden tomar muestras a lo largo del reactor R-106, desde la válvula V-116 hasta V-120, y tomar lecturas de temperatura en distintos puntos a lo largo del reactor, desde el termopar tipo J “TI-25” hasta “TI-29”.

La corriente de salida del reactor R-106, pasa por la válvula V-122 (verificando que la válvula V-123 esté cerrada) para ingresar al reactor R-107, de 1 litro de capacidad. La toma de muestra de la corriente de salida del reactor R-106 se hace mediante la válvula identificada como V-121, y los instrumentos de medición asociados son “TI-30” y “PI-13”. Por otro lado, la toma de muestra de la corriente de alimentación al reactor R-107, se realiza mediante la válvula V-125, y los instrumentos de medición asociados son “TI-31” y “PI-14”. Se pueden tomar muestras a lo largo del reactor R-107, desde la válvula V-126 hasta la válvula V-130, y lecturas de temperatura en distintos puntos a lo largo del reactor, desde el termopar tipo J “TI-32” hasta “TI-36”.

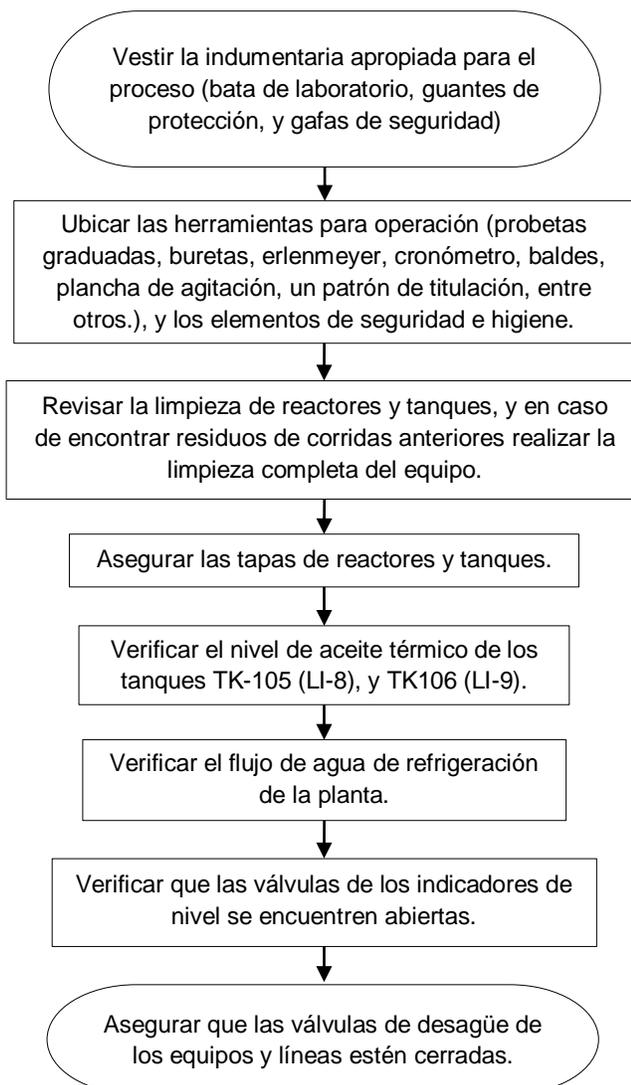
La corriente de productos y reactivos que no se agotaron del reactor R-107 pasa por una válvula de retención, que no permite el contraflujo hacia el reactor correspondiente. Posteriormente, entra en el intercambiador de calor E-104, con el fin de salir a una temperatura menor a 25°C. Finalmente, la corriente de producto entra al tanque de descarga TK-104. Cabe destacar, que debe revisarse que las válvulas de purga y desagüe V-114 y V-124, se encuentren cerradas.

La línea de flujo de aceite térmico a los reactores, es igual a la descrita en la sección “2.2.2.1”, desde el tanque de alimentación de aceite térmico TK-106, hasta el distribuidor de flujo “ACEITE PFR”. Para suministrar aceite térmico a los tres reactores, debe habilitarse el paso por las válvulas V-174, V-176, y V-178, para los reactores R-105, R-106, y R-107, respectivamente. Las corrientes de salida de aceite de los reactores, se dirigen nuevamente al tanque TK-106, como reciclo, volviendo a repetirse el mismo procedimiento para la línea de aceite térmico a los reactores.

2.3 PROTOCOLO DE OPERACIÓN

2.3.1 Adecuación del sistema. Se debe cumplir el siguiente protocolo para la adecuación del sistema:

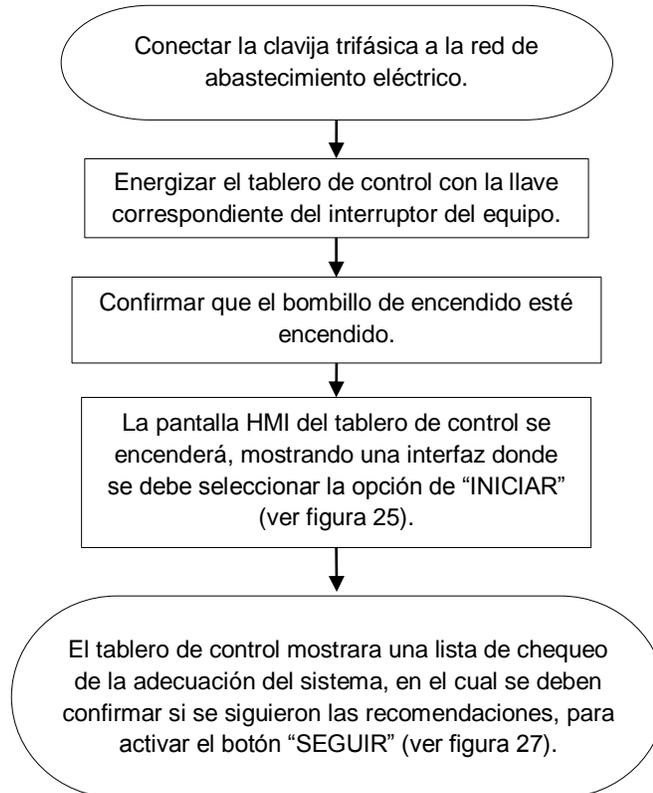
Figura 23. Procedimiento para la adecuación del sistema.



Fuente: Adaptado de PSE, Manual de operación del banco de reactores.

2.3.2 Conexión del equipo a la red eléctrica. En el manual de operaciones se indica el siguiente procedimiento:

Figura 24. Procedimiento para la conexión del equipo a la red eléctrica.



Fuente: Adaptado de PSE, Manual de operación del banco de reactores.

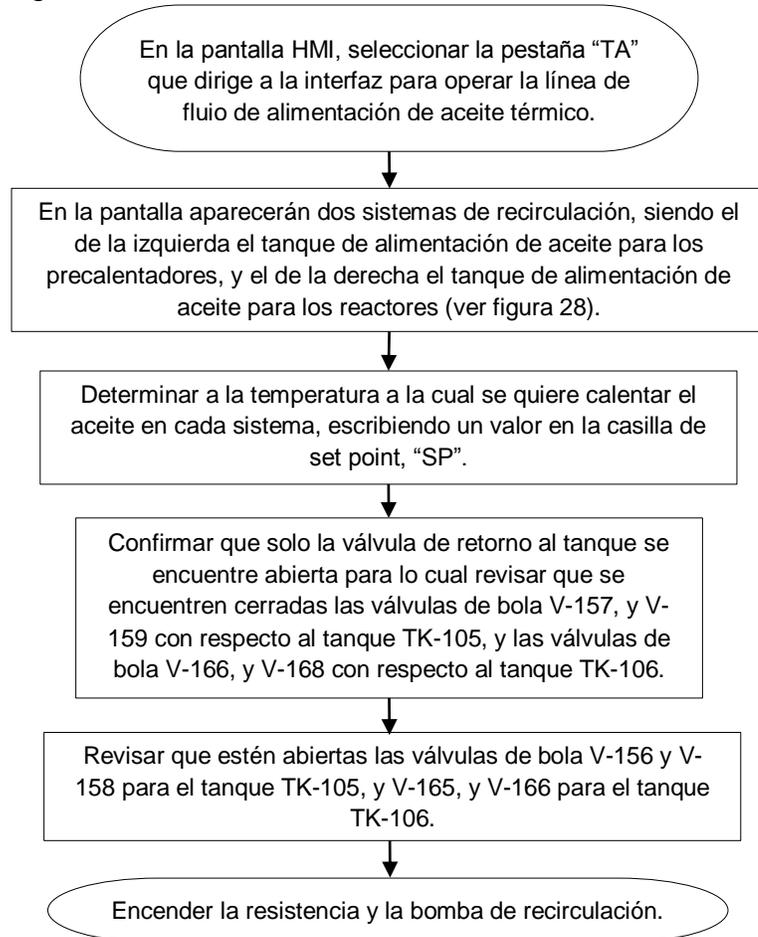
Figura 25. Interfaz de la pantalla HMI al conectar el banco de reactores a la red eléctrica.



Fuente: PSE, Manual de operación del banco de reactores.

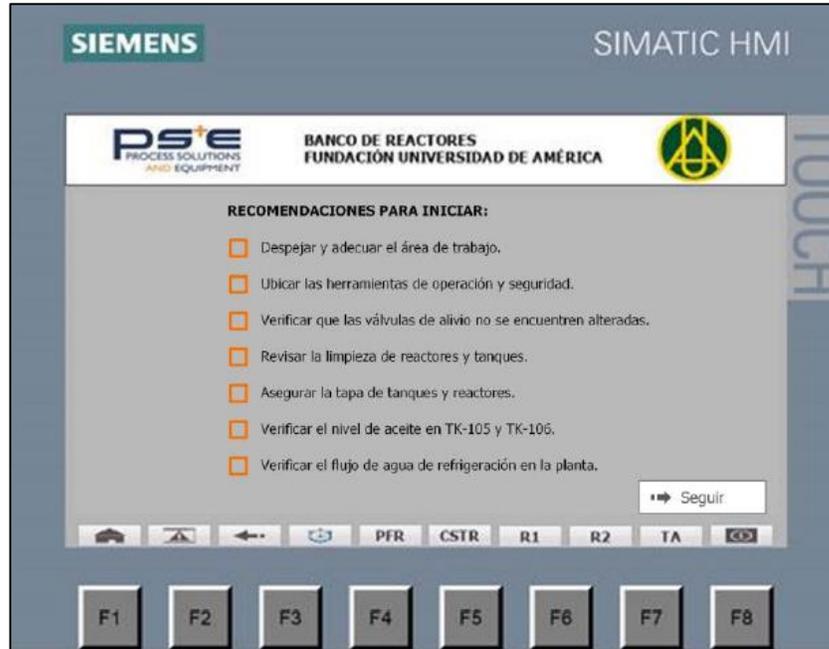
2.3.3 Calentamiento de aceite térmico. Para operar la línea de flujo de aceite térmico para intercambiadores de calor y reactores, se debe inicialmente realizar la operación de calentamiento del aceite de servicio con el fin de que la temperatura del aceite sea la que se estableció para el proceso. La operación puede tardar varios minutos, por lo que se recomienda llevarla a cabo antes de iniciar el proceso en el banco de reactores. A continuación, se indica el procedimiento a realizar:

Figura 26. Protocolo de calentamiento de aceite térmico.



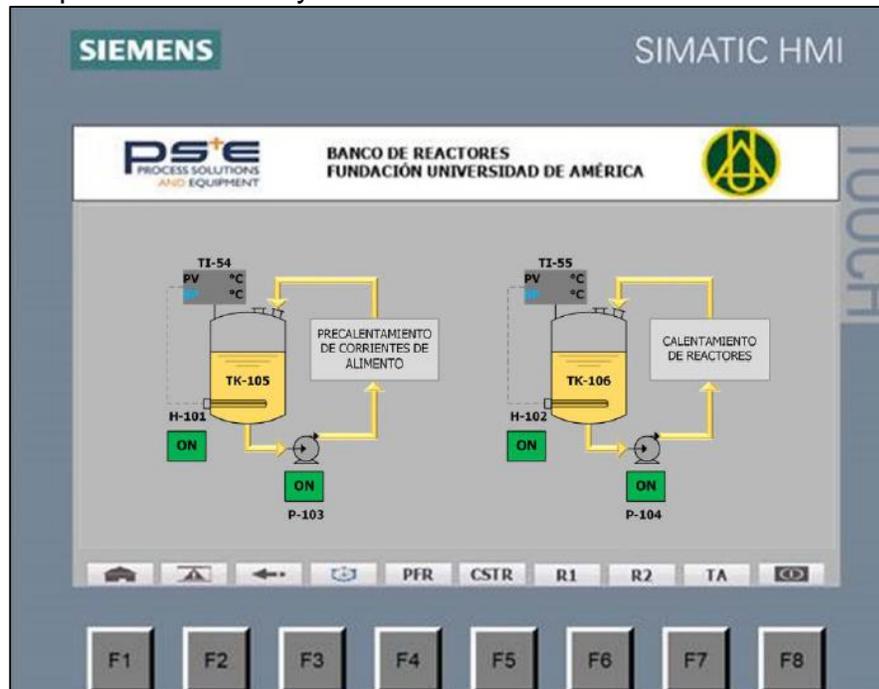
Fuente: Adaptado de PSE, Manual de operación del banco de reactores.

Figura 27. Interfaz de la pantalla HMI con la lista de chequeo de adecuación del sistema.



Fuente: PSE, Manual de operación del banco de reactores.

Figura 28. Interfaz del HMI para el calentamiento de aceite térmico para los precalentadores y reactores.

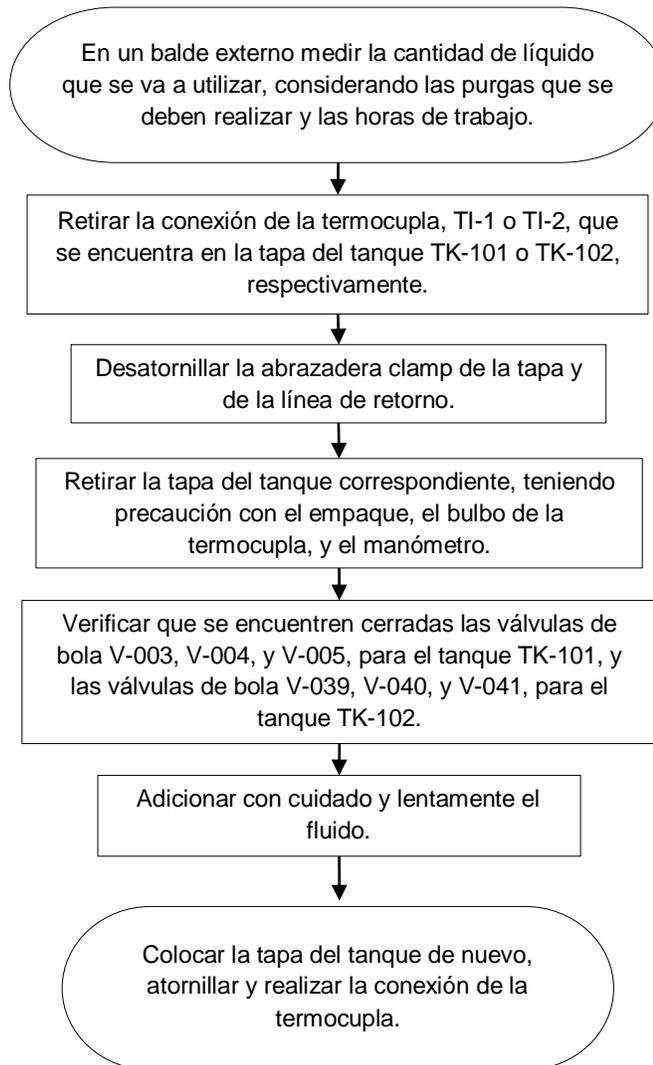


Fuente: PSE, Manual de operación del banco de reactores.

2.3.4 Carga de reactivos. El procedimiento para la carga de reactivos a los tanques de alimentación se muestra en las secciones siguientes.

2.3.4.1 Líquidos puros.

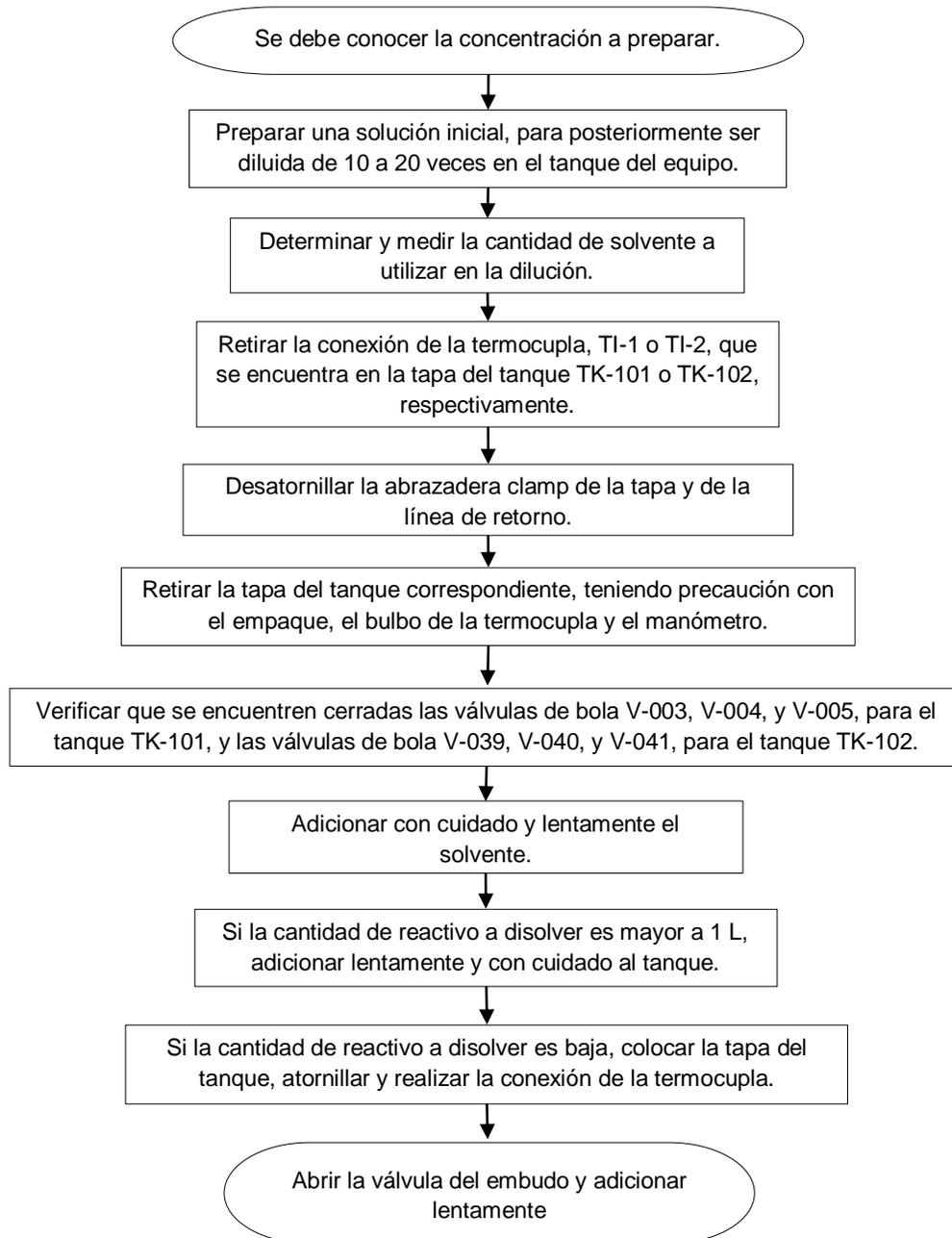
Figura 29. Procedimiento para carga de líquidos puros a los tanques de alimentación.



Fuente: Adaptado de PSE, Manual de operación del banco de reactores.

2.3.4.2 Soluciones. El procedimiento para cargar soluciones se muestra a continuación

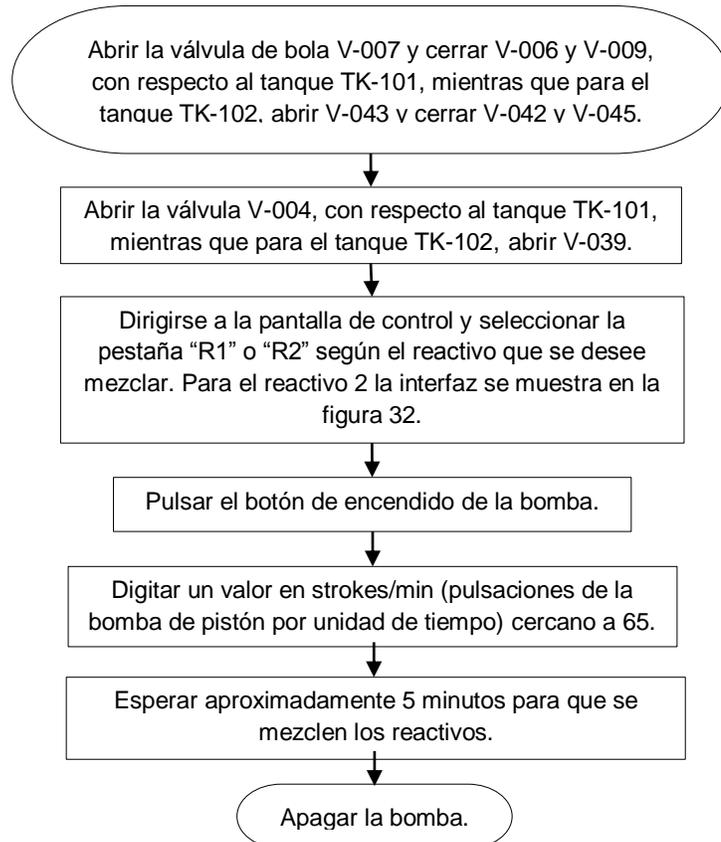
Figura 30. Protocolo para cargar soluciones a los tanques de alimentación.



Fuente: Adaptado de PSE, Manual de operación del banco de reactores.

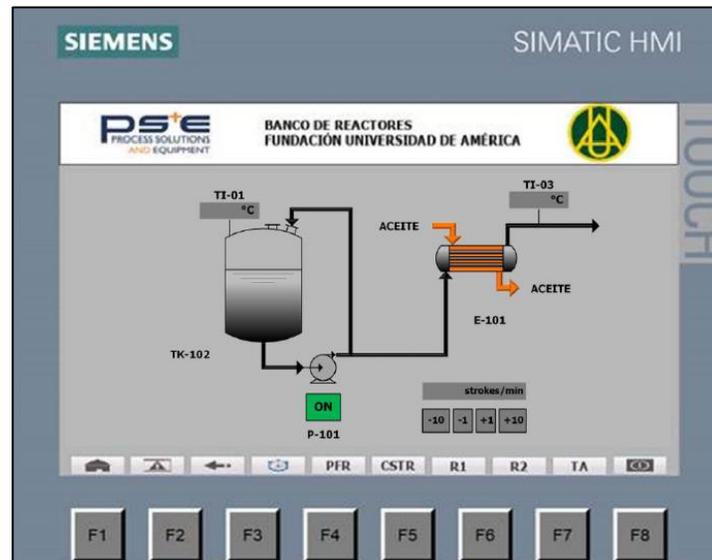
Adicionalmente, a continuación, se muestra el procedimiento a seguir para mezclar la solución que se cargó a los tanques de alimento TK-101 o TK-102, usando la interfaz HMI para llevar a cabo dicho fin.

Figura 31. Protocolo para la mezcla de soluciones.



Fuente: Adaptado de PSE, Manual de operación del banco de reactores.

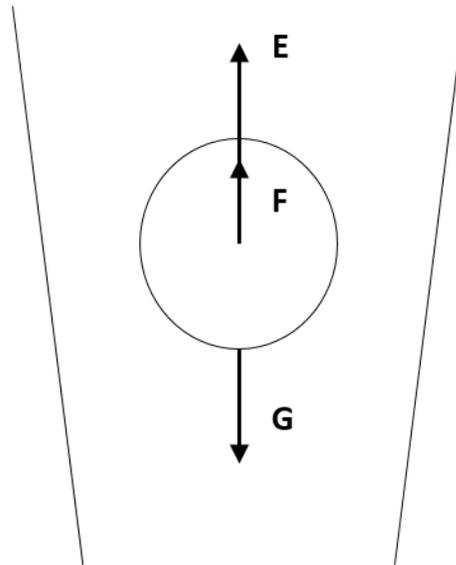
Figura 32. Interfaz del HMI para la operación de mezcla del tanque de alimentación TK-102.



Fuente: PSE, Manual de operación del banco de reactores.

2.3.5 Medición de la velocidad de flujo volumétrico en los rotámetros. Los rotámetros OMEGA® se encuentran calibrados para agua a 21.1 °C. Para conocer el flujo real de otra sustancia se parte del balance de fuerzas sobre la esfera. El desarrollo de las siguientes ecuaciones se hizo con el apoyo del libro “Instrumentación industrial”, de Antonio Creus⁶⁷. En la figura 33, se puede apreciar las fuerzas que actúan sobre la esfera del rotámetro.

Figura 33. Diagrama de cuerpo libre de la esfera del rotámetro OMEGA®.



Fuente: Elaboración propia basado en Fig. 4.21 de CREUS, Antonio. Instrumentación Industrial. Alfaomega. Grupo Editor, S.A, de C.V. México, D. F. 6° edición. p. 136.

Sobre la esfera actúan las fuerzas de arrastre y empuje del fluido sobre el flotador en dirección del fluido, y la fuerza del peso en sentido contrario. La fuerza del peso (G) viene dada por la siguiente expresión

$$G = v_f \rho_f g \quad \text{Ec. 28}$$

Cuyas unidades en el sistema internacional (SI) son Newton (N). Donde v_f es el volumen del flotador (en el SI las unidades serían m^3), ρ_f es la densidad del flotador (m^3), y g es la aceleración de la gravedad (m/s^2). La fuerza de empuje (F) del fluido sobre el flotador sigue la siguiente expresión

$$F = v_f \rho_l g \quad \text{Ec. 29}$$

⁶⁷ CREUS, Antonio. Instrumentación industrial. Op. cit., p. 137

Donde ρ_l es la densidad del líquido o fluido. Además, la fuerza de arrastre (E) del fluido sobre el flotador está dada por la siguiente ecuación

$$E = C_d \rho_l A_f \vec{v}^2 \quad \text{Ec. 30}$$

Donde C_d es el coeficiente de arrastre del fluido sobre el flotador (adimensional), A_f es el área de la sección del flotador (m^2), y \vec{v} es la velocidad del fluido (m/s). En el equilibrio se cumple la siguiente condición

$$E + F = G \quad \text{Ec. 31}$$

Reemplazando las ecuaciones 28, 29 y 30, en la ecuación 31, y se despeja la velocidad del fluido se obtiene

$$\vec{v} = \sqrt{\frac{2g v_f (\rho_f - \rho_l)}{C_d \rho_l A_f}} \quad \text{Ec. 32}$$

El rotámetro viene calibrado con agua, por lo que la velocidad de flujo volumétrico (Q_{agua}) para este fluido será

$$Q_{agua} = A_w \vec{v}_w \quad \text{Ec. 33}$$

Cuyas unidades en el sistema internacional son m^3/s , donde A_w es la sección interior del tubo. Por lo que la expresión quedara

$$Q_{agua} = A_w \sqrt{\frac{2g^2 v_f g (\rho_f - \rho_{agua})}{C_d \rho_{agua} A_f}} \quad \text{Ec. 34}$$

El caudal para un fluido diferente al agua será

$$Q_m = A_w \sqrt{\frac{2g^2 v_f g (\rho_f - \rho_m)}{C_d \rho_m A_f}} \quad \text{Ec. 35}$$

Dividiendo la ecuación 35 entre la ecuación 34, y despejando Q_m se tendrá

$$Q_m = \sqrt{\frac{\rho_{agua} (\rho_f - \rho_m)}{\rho_m (\rho_f - \rho_{agua})}} Q_{agua} \quad \text{Ec. 36}$$

Lo que es equivalente a

$$Q_m = \sqrt{\frac{(SG_f - SG_m)}{SG_m(SG_f - 1)}} Q_{agua} \quad \text{Ec. 37}$$

Donde se define el factor de corrección de la gravedad específica del líquido o fluido distinto del agua

$$LSGCF = \sqrt{\frac{(SG_f - SG_m)}{SG_m(SG_f - 1)}} \quad \text{Ec. 38}$$

Donde SG_f es la gravedad específica de la esfera de acero inoxidable 316, cuyo valor es 8.04, SG_m es la gravedad específica de la sustancia de medición, que se determina experimentalmente mediante una curva en la que se relacionan la densidad y la temperatura de la sustancia cuyo caudal se esté midiendo. En la tabla 49, se muestra la escala de lectura de los rotámetros del banco de reactores.

Tabla 49. Escala de lectura a centro de esfera de los rotámetros OMEGA®.

Escala de lectura	Flujo de agua (ml/min)	Flujo de agua (l/h)
150	44.3	2.66
140	41.2	2.47
130	38.2	2.29
120	35.8	2.15
110	32.9	1.97
100	30.0	1.80
90	27.3	1.64
80	24.6	1.48
70	21.7	1.30
60	18.7	1.12
50	15.8	0.95
40	12.8	0.77
30	9.80	0.59
20	6.80	0.41
10	4.00	0.24

Fuente: Flow meter instructions OMEGA® en PSE, Manual de operación del banco de reactores,

2.4 REQUERIMIENTOS DE INSTALACIÓN

En la tabla 50. se encuentran los requerimientos de instalación del banco de reactores.

Tabla 50. Requerimientos de instalación del banco de reactores.

Requerimiento	Valor/Descripción
Área libre (m ²)	3.75
Altura mínima (m)	2.61
Ubicación	Proveer la suficiente ventilación para la evacuación segura de vapores.
Agua de servicio	El equipo requiere un flujo mínimo de 4 m ³ /h con una presión de 2 bar.
Suministro eléctrico	Requiere conexión a tierra, un voltaje de 220 V, una frecuencia de 60 Hz, amperaje de 80 A, y una potencia de 17.6 kW.
Material de la línea de desagüe	Gres o PVC.

Fuente: PSE, Manual de operación del banco de reactores.

Adicionalmente, el espacio donde se disponga el banco de reactores, debe ser un laboratorio de química, para la preparación de soluciones de alimentación, así como la realización de análisis de tipo volumétrico de muestras de los reactores, con el fin de seguir el avance de reacción.

2.5 REQUERIMIENTOS DE OPERACIÓN

Según la información entregada por el fabricante se debe contar con las siguientes herramientas; la universidad debe proveer:

- Llave expansiva.
- Juego de llaves de tuercas.
- Balde para recolección de purgas.
- Embudo.

Con respecto a los dispositivos de almacenamiento, se requiere:

- Envases de material inerte (vidrio ámbar, polietileno de alta densidad, polipropileno), para toma de muestras.
- Recipiente para almacenar reactivos y productos, antes y después de finalizar la operación.

Por otro lado, para el registro de la información es necesario contar con una bitácora de laboratorio, y formatos para registro de los datos del proceso, los cuales hacen parte de la guía de laboratorios.

En relación con los elementos de seguridad y aseo, para la operación del banco de reactores el laboratorio de la universidad debe estar equipado con:

- Botiquín de primeros auxilios.
- Extintor.
- Equipo anti-derrame.
- Señalización de áreas de trabajo, equipos, líneas y rutas de seguridad.

A continuación, se mencionan más elementos de seguridad y protección colectiva sugeridas en las distintas fuentes bibliográficas^{68 69 70}:

- Campana extractora de gases.
- Lavaojos.
- Duchas de seguridad.
- Manta ignífugas.
- Sistema de ventilación.
- Barandillas, pasarelas y escaleras.
- Carcasa de protección de motores o piezas en movimiento.
- Señalizaciones e indicativos.

Por otro lado, es de responsabilidad de los estudiantes al entrar al laboratorio de reactores, la siguiente indumentaria

- Gafas de seguridad

⁶⁸ Universidad de San Buenaventura Cartagena. Guía de seguridad y bioseguridad: Laboratorios [En línea]. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: http://www.usbcartagena.edu.co/phocadownload/facultades/salud/GUIA_SEGURIDAD_Y_BIOSEGURIDAD.pdf

⁶⁹ Instituto Tecnológico Metropolitano. Elementos de protección personal por oficio en profesionales de laboratorio [En línea]. Medellín, Colombia, 2016. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: https://www.itm.edu.co/wp-content/uploads/Practicas_Laboratorio/MGL-003-Elementos-de-protección-personal-por-oficio-en-profesionales-de-....pdf

⁷⁰ Portal de riesgos laborales de los trabajadores de la enseñanza. Protección Colectiva e individual [En línea]. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: <http://riesgoslaborales.feteugt-sma.es/portal-preventivo/riesgos-laborales/riesgos-relacionados-con-la-seguridad-en-el-trabajo/proteccion-colectiva-e-individual/>

- Bata de laboratorio u overol.

- Guantes de carnaza.

Además, en la tabla 51 se muestran indicaciones para operar el banco de reactores.

Tabla 51. Avisos de prudencia para la operación del banco de reactores.

Numeral	Descripción
1	Emplear los elementos de protección personal todo el tiempo mientras se están operando los equipos.
2	Operar el proceso con mínimo dos personas.
3	No separarse de las unidades del proceso por tiempo prolongado. En caso de ausentarse, avisar al relevo.
4	Informar a la persona responsable el inicio y la parada de la operación en la planta.
5	Las personas que operan el equipo no deben trabajar más de 8 horas continuas sin descanso.
6	Operar el equipo en una zona con ventilación adecuada para evitar la acumulación de vapores, y la formación de atmosferas inflamables o asfixiantes.
7	Para descargar el sistema se debe esperar a que el equipo este a 25°C (el sistema está aislado por lo que puede tardar horas).
8	Descargar el tanque siempre con overol o bata de laboratorio, guantes de carnaza, y si es posible un pechera del mismo material para evitar quemaduras si el material aún está caliente.
9	Dejar los equipos limpios y lavados después de la operación (de esta forma se evita la contaminación entre lotes de procesamiento, y se reduce el riesgo de corrosión).
10	Mantener en un lugar accesible un botiquín de primeros auxilios.
11	Mantener en un lugar accesible un extintor de fuego.
12	Evitar el acceso al panel interno de las cajas eléctricas.
13	Usar envases de material inerte para almacenar los reactivos.
14	Realizar mantenimiento preventivo y correctivo de la unidad de proceso.
15	Ajustar las tuberías que presente fugas o goteos.
16	Cambiar el empaque que sella entre el tanque y la tapa cuando se requiera.
17	Limpiar frecuentemente los equipos por acumulación de polvo o materiales extraños.
18	Mantener limpia y aseada el área de operación, y el tablero de control.
19	Determinar la magnitud de una fuga para evaluar si se detiene la operación para resolver el problema.

Fuente: PSE, Manual de operación del banco de reactores.

2.6 MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN DEL BANCO DE REACTORES

Según las especificaciones técnicas del banco de reactores, el material de construcción del banco de reactores es acero 304. Este es considerado uno de los aceros inoxidable austeníticos más utilizados, y más versátiles, ya que es capaz de satisfacer una amplia variedad de requisitos físicos por lo que es un material adecuado para utilizar en tanques de almacenamiento, contenedores químicos (incluyendo la transportación), equipos para el procesamiento de alimentos, intercambiadores de calor, evaporadores, entre otros⁷¹. El tipo de acero 304 proporciona una buena resistencia al ataque ácido moderado, pero se considera inferior si se compara con el acero tipo 316⁷².

Dentro del catálogo de Italumínio⁷³ sobre el acero 304, se pueden reconocer las siguientes características:

- Alta resistencia a la corrosión.
- Excelente formalidad.
- Facilidad de fabricación.
- Facilidad de limpieza.
- Buena soldabilidad.
- Amplio rango de propiedades mecánicas en condiciones de recocido y trabajado en frío.
- Buena resistencia a temperaturas criogénicas.

El acero 304 hace parte de los aceros inoxidable austeníticos, y es llamado tradicionalmente acero inoxidable 188 ya que cuenta en su composición con 18% de cromo, y 8% de níquel, siendo muy utilizado en la industria alimenticia⁷⁴. Las

⁷¹ ITALUMINIO. Ficha técnica del producto: Acero inoxidable 304 [En línea]. Italumínio: Catálogos. p. 3. [Consultado 01 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://italuminio.com.co/catalogos/SS304-ficha.pdf>

⁷² CHAVEZ, Cecilia. Acero inoxidable 304 versus 316, ¿Cuál es mejor? Armagard, El Especialista En Armarios Para PC Lo Investiga [En línea]. Blog de Armagard. 02 de Julio de 2014, párr. 10. [Consultado: 01 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://www.armagard.es/blog/acero-inoxidable-304-versus-316-cual-es-mejor-armagard-el-especialista-en-armarios-para-pc-lo-investiga/>

⁷³ ITALUMINIO. Op.cit, p. 1.

⁷⁴ TORRE, Fabiana. Proceso de fabricación: “LOS ACEROS”; Características y usos de los aceros [En línea]. Conocer los materiales. 27 de abril de 2018. [Consultado: 02 de julio de 2018]. Disponible

propiedades físicas y mecánicas de un acero varían según su composición, y los diversos tratamientos térmicos, químicos o mecánicos, que se aplican para obtener un tipo determinado de acero para una aplicación en específico⁷⁵.

En el proceso de caracterización del material del banco de reactores, se comparó el acero 304 con el acero 304L, con el fin de profundizar en el tema de precipitación de carburos de cromo, y el efecto de los componentes de la aleación, sobre las propiedades mecánicas, químicas, y físicas.

2.6.1 Propiedades químicas. En la tabla 52, se muestran la composición química del acero 304 y 304L, según algunas fuentes bibliográficas. Estos dos tipos de acero son bastante similares en su composición química, teniendo una diferencia en la composición de carbono. El acero 304 (estándar) tiene como límite 0.08% como el máximo contenido de carbono, mientras el acero 304L tiene un máximo de contenido de carbono de 0.03%. La letra L que procede el número puede interpretarse con el significado de “Low Carbon”. Estos dos tipos de acero son bastante similares en su composición química, teniendo una diferencia en la composición de carbono. El acero 304 (estándar) tiene como límite 0.08% como el máximo contenido de carbono, mientras el acero 304L tiene un máximo de contenido de carbono de 0.03%. La letra L que procede el número puede interpretarse con el significado de “Low Carbon”. Debido a la diferencia en el porcentaje en carbono, existe una diferencia marcada en el rendimiento de las dos aleaciones. Según la bibliografía, el uso a temperaturas altas (500 – 850°C) del acero 304L de bajo carbón ayuda a minimizar o eliminar la precipitación de carburos de cromo a lo largo de los límites del grano del acero; fenómeno que se llama sensibilización⁷⁶. La sensibilización puede agotar el cromo disponible a lo largo de los límites del grano reduciendo la resistencia a la corrosión, lo que puede resultar en corrosión intergranular⁷⁷. Este fenómeno, exceptuando los aceros con contenido de carbón muy bajo (acero 304L), aparece por el enfriamiento o calentamiento entre 430 y 900°C en procesos como soldadura o alivio de tensiones, y el grado de sensibilización dependerá de la temperatura y el tiempo de permanencia⁷⁸. Según la bibliografía, un acero con contenido de 0.03% de carbono como el 304L, puede

en internet: <https://sites.google.com/site/conocerlosmateriales/home/proceso-de-fabricacion-los-aceros/caracteristicas-y-usos-de-los-aceros>

⁷⁵ El acero y su densidad [En línea]. 24 de enero de 2018. Párr. 2. [Consultado: 02 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://www.mujaresenmatematicas.com/2018/01/el-acero-y-su-densidad.html>

⁷⁶ SANABRIA, Ricardo. ¿Qué son los aceros inoxidables de calidad “L”? [En línea]. Asociación Mexicana de industriales de acabados superficiales. 30 de Agosto de 2017. Párr. 2. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://www.amas.org/que-son-los-aceros-inoxidables-de-calidad-l/>

⁷⁷ *Ibíd.*, Párr. 3

⁷⁸ FUENTES ORTEGA, Enrique. Microestructura y propiedades de los aceros inoxidables AISI 304 Y ASI 420 [En línea]. KIPDF. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: https://kipdf.com/21-microestructura-y-propiedades-de-los-aceros-inoxidables-aisi-304-y-aisi-420_5ab873e61723dd439c973c21.html

sufrir corrosión intergranular, en casi una hora, y con contenido 0.02% de carbono, se necesitarían casi 10 horas⁷⁹.

Tabla 52. Composición química de los aceros 304 y 304L.

Componente (%)	Acero 304	Acero 304L
C	0.08	0.03
N	0.10	0.10
Cr	18-20	18-20
Ni	8.0-10.5	8.0-12.0*
Mn	2.0	2.0
Si	1.0	1.0
P	0.045	0.045
S	0.030	0.030

Fuente: MCGUIRE, Michael. Table A1.1 Composition of austenitic stainless steel [En línea]. Stainless Steel for design engineers. ASM International. Materials Park, Ohio, 2008. p. 270. [Consultado: 03 de julio de 2018]. Disponible en internet:

<http://ezproxy.uamerica.edu.co:2070/ehost/ebookviewer/ebook/ZTAwMHh3d19fMzk1ODM4X19BTg2?sid=1555cad6-e9ea-4ab2-8729-b2792e718518@sessionmgr103&vid=1&format=EB>

*NAS, NORTH AMERICAN STAINLESS. Flat Products Stainless Steel Grade Sheet [En línea]. Steel Grades. [Consultado: 03 de julio de 2018]. Disponible en internet:

<https://www.northamericanstainless.com/wp-content/uploads/2010/10/Grade-304-304L-304H.pdf>

El carbono y nitrógeno les proporciona una gran resistencia a altas temperaturas⁸⁰. Las aleaciones austeníticas son mejores que las aleaciones ferrosas debido a que las austeníticas contienen un porcentaje de níquel; dado un contenido de cromo, la velocidad de oxidación disminuye, aumentando el contenido de níquel⁸¹. Además, el contenido de níquel aumenta la tenacidad, el límite de elasticidad y la resistencia a las altas temperaturas⁸². Por el lado del cromo, este se utiliza con frecuencia junto con el níquel para obtener la tenacidad y ductilidad proporcionadas por el níquel, y la resistencia al desgaste y la dureza que le aporta el cromo⁸³. Otros componentes

⁷⁹ SANABRIA, Ricardo. Op.,cit, párr. 3, 4.

⁸⁰ MCGUIRE, Michael. Physical and Mechanical Properties of Select Alloys [En línea]. Stainless Steel for design engineers. ASM International. Materials Park, Ohio, 2008. p. 79. Párr 1. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://ezproxy.uamerica.edu.co:2070/ehost/ebookviewer/ebook/ZTAwMHh3d19fMzk1ODM4X19BTg2?sid=94138784-07ee-41d7-99d9-c3b6241ae579@sessionmgr103&vid=5&format=EB&rid=5>

⁸¹ Ibíd., p. 79, párr. 6.

⁸² BILTRA, Bilbaina de tratamientos. Influencia de los aleantes en los aceros . Párr. 4. [Consultado: 04 de julio de 2018].

⁸³ CONSTRUMATICA. Propiedades del acero aleado [En línea]. Párr. 5. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: https://www.construmatica.com/construpedia/Propiedades_del_Acero_Aleado

como el manganeso y el silicio, aumentan la dureza del acero, mientras el azufre es una impureza que se intenta mantener en muy bajas proporciones⁸⁴.

Cabe destacar, que existen aceros inoxidable con mayor resistencia a la corrosión y a las altas temperaturas, como es el caso del acero inoxidable 316. Este último se diferencia en su composición de los demás aceros, ya que contiene cerca del 2 % de molibdeno, lo que mejora la resistencia a la corrosión, en particular de cloruros (como el agua de mar)⁸⁵.

2.6.2 Propiedades mecánicas. En la tabla 53, se muestran algunas de las propiedades mecánicas del acero 304 comparado con las del acero 304L, obtenidas de la bibliografía. Existe una leve diferencia entre algunas propiedades mecánicas del acero 304 y el acero 304L, teniendo mejores propiedades mecánicas el acero de grado 304 (estándar). Por ejemplo, si se tienen dos objetos metálicos con el mismo diseño y grosor, el objeto hecho en acero 304L será estructuralmente más débil que el que está hecho en acero 304 (estándar)⁸⁶.

Tabla 53. Propiedades mecánicas del acero 304 y acero 304L.

Propiedad	Acero 304	Acero 304L
Limite elástico (MPa)	205 min	170 min
Resistencia tracción (MPa)	515 min	485 min
Alargamiento (%)	40 min	40 min
Dureza Brinell max.*	202	183

Fuente: MCGUIRE, Michael. Physical and Mechanical Properties of Select Alloys [En línea]. Stainless Steel for design engineers. ASM International. Materials Park, Ohio, 2008. p. 280. [Consultado: 02 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://ezproxy.uamerica.edu.co:2070/ehost/ebookviewer/ebook/ZTAwMHh3d19fMzk1ODM4X19BTg2?sid=94138784-07ee-41d7-99d9-c3b6241ae579@sessionmgr103&vid=5&format=EB&rid=5>

* NAS, NORTH AMERICAN STAINLESS. Flat Products Stainless Steel Grade Sheet [En línea]. Steel Grades. [Consultado: 03 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://www.northamericanstainless.com/wp-content/uploads/2010/10/Grade-304-304L-304H.pdf>

Según la bibliografía, al obtener algunas propiedades mecánicas como la resistencia a la tracción y el porcentaje de elongación a diferentes temperaturas de los aceros 304 y 304L, los valores para 304L decrecieron con rapidez por encima

⁸⁴ CAP S.A.S. Efectos de los elementos de aleación [En línea]. Información del acero. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://www.infoacero.cl/acero/efectos.htm>

⁸⁵ CHAVEZ, Cecilia. Op.,cit, párr. 11.

⁸⁶ MARLIN STEEL. What's the difference between grade 304 and 304L stainless steel? [En línea]. Steel Wire Products, Stainless Steel Baskets. 06 de Enero de 2017. párr. 7. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://www.marlinwire.com/blog/difference-between-grade-304-and-304l-stainless-steel>

de los 425°C⁸⁷. A continuación, se muestran los valores de dichas propiedades mecánicas a distintas temperaturas para el acero 304 (estándar):

Tabla 54. Algunas propiedades mecánicas del acero 304 a diferentes temperaturas por cortos rangos de tiempo.

Temperatura (°C)	Resistencia a la tracción (MPa)	Elongación en 50mm (%)
-196	1609	38
-140	1368	41
-100	1281	42
-50	1101	50
-10	976	55
0	885	64
20	616	70
100	510	52
300	435	40
500	410	36
600	360	35
700	245	35
800	135	37
900	75	42
1000	40	73
1100	20	96

Fuente: NAS, NORTH AMERICAN STAINLESS. Flat Products Stainless Steel Grade Sheet [En línea]. Steel Grades. [Consultado: 03 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://www.northamericanstainless.com/wp-content/uploads/2010/10/Grade-304-304L-304H.pdf>

El acero 304 es más estable estructuralmente bajo ciertas condiciones de esfuerzo que el acero 304L, ya que cuenta con mayor contenido de carbono, lo que le proporciona una mayor resistencia mecánica.

2.6.3 Propiedades físicas. En la tabla 56 se muestran las propiedades físicas del acero 304, y acero 304L, tomadas de la bibliografía. La densidad de un acero varía dependiendo del tipo de aleación, y por ende la composición química, incluyendo elementos distintos al hierro y carbón, que son los elementos base. Para el caso de los aceros 304 y 304L, puede verse según la tabla 55 que no varía demasiado en referencia a la densidad de un acero puro de 7,90 kg/L.⁸⁸

⁸⁷ NAS, NORTH AMERICAN STAINLESS. Flat Products Stainless Steel Grade Sheet [En línea]. Steel Grades. p. 4. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://www.northamericanstainless.com/wp-content/uploads/2010/10/Grade-304-304L-304H.pdf>

⁸⁸ El acero y su densidad. Op. cit., párr. 3, 4.

Tabla 55. Propiedades físicas del acero inoxidable 304 y 304L a condiciones ambientales.

Propiedades físicas	Acero 304 / Acero 304L
Densidad (kg/L)	7,90
Módulo de elasticidad (GPa)	200
Coefficiente de expansión térmico ($10^{-6} K^{-1}$)	16,6
Conductividad térmica (W/m*K)	16,3
Calor específico (J/ kg*K)	500
Resistencia eléctrica ($\Omega \cdot mm^2/m$)	0,72
Intervalo de fusión ($^{\circ}C$)	1398-1454*

Fuente: MCGUIRE, Michael. Physical and Mechanical Properties of Select Alloys [En línea]. Stainless Steel for design engineers. ASM International. Materials Park, Ohio, 2008. p. 279. [Consultado: 02 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://ezproxy.uamerica.edu.co:2070/ehost/ebookviewer/ebook/ZTAwMHh3d19fMzk1ODM4X19BTg2?sid=94138784-07ee-41d7-99d9-c3b6241ae579@sessionmgr103&vid=5&format=EB&rid=5>

* IRESTAL GROUP. Tabla de características técnicas: Serie 300 [En línea]. Tablas técnicas del acero inoxidable. p. 2. [Consultado: 02 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://data.irestal.com/files/files/2012030204152933979.pdf>

Con respecto al módulo elástico, este indica la relación existente (en la zona de comportamiento elástica del material) entre los incrementos de tensión aplicados y los incrementos de deformación longitudinal unitaria; entre más rígido sea un material, mayor es su módulo de elasticidad⁸⁹. En otras palabras, entre mayor sea el módulo de elasticidad de un material, mayor será su capacidad para soportar esfuerzos sin sufrir deformaciones ni desplazarse. Si se compara con otros materiales de ingeniería como aleaciones de aluminio, latón, bronce, cobre, aleaciones de níquel, zinc, titanio, entre otros; el valor del módulo elástico del acero inoxidable 304 es de los más altos, lo que lo hace preferible para aplicaciones donde se tengan que soportar altos esfuerzos, y se requiera la mínima deformación.

2.6.4 Resistencia a las condiciones de operación. Se describe la resistencia del material de construcción del banco de reactores, acero 304, a diversas sustancias químicas, y a condiciones de operación a altas temperaturas, con el fin de usar este criterio para la selección de reacciones para llevar a cabo en el equipo.

2.6.4.1 Resistencia a diversos medios. De la bibliografía, se puede encontrar la afinidad del material con diversas sustancias entre las cuales están los ácidos, bases, y sales.

⁸⁹ PEREZ GONZALEZ, Antonio. Módulo de elasticidad [En línea]. Enciclopedia virtual de ingeniería mecánica. Área de ingeniería mecánica, Dpto. Ingeniería mecánica y construcción, Univesitat Jaume I. Castellón, España. 24 de junio de 2014. [Consultado: 02 de julio de 2018]. Disponible en internet: http://www.mecapedia.uji.es/modulo_de_elasticidad.htm

➤ Ácidos.

❖ **Ácido sulfúrico.** Los aceros inoxidables requieren más de una cantidad mínima de porcentaje en cromo para resistir al ácido sulfúrico. Los aceros 430 que contienen aproximadamente 16% en cromo resisten levemente, mientras que los aceros 304 (tanto estándar como de bajo carbono) tienen mejores resultados en ácido sulfúrico, gracias a su contenido en cromo que puede estar entre el 18 y el 20% aproximadamente⁹⁰. La tasa de corrosión debido al ácido sulfúrico depende de la concentración del mismo; a bajas concentraciones el ácido sulfúrico se comporta como reductor, disociándose en agua para formar iones hidronio (H_3O^+) donde se liberan burbujas de gas hidrogeno mientras ocurre la reacción que da lugar a la corrosión; a medida que la concentración de ácido incrementa, el medio o solución se vuelve más corrosiva⁹¹. Según la bibliografía, los aceros austeníticos, no se usan para manejar ácido sulfúrico debido a que necesitan una concentración crítica de oxidante para mantener su estado pasivo; lo cual puede solucionarse si se les incorpora un sistema de protección anódica o con el uso de un acero inoxidable del tipo que contenga entre un 5 o 6% de silicio, pudiendo resistir a disoluciones concentradas de ácido sulfúrico, incluso sin protección anódica⁹². Para casos de soluciones de ácido sulfúrico entre el 96 y 100% a elevadas temperaturas, se requiere el uso de aceros aleados con alto contenido de cromo y silicio, como por ejemplo en plantas de producción del ácido mencionado⁹³. En situaciones en las que en la solución del ácido se encuentre presente trióxido de azufre (óleum) aceros como el 310S se encuentran dentro del pequeño grupo de materiales que muestran resistencia a dichos medios⁹⁴.

Se muestra la velocidad de corrosión con respecto a la concentración de ácido sulfúrico del medio para distintos aceros, en la figura 34. Como se puede notar en la figura 34, los aceros 316 y 317 son los más resistentes al ácido sulfúrico. El acero 304 tiene mejor desempeño que los aceros 410, 430 y 431, pero se considera inferior si compara con los tipos de acero 316 y 317⁹⁵. A temperaturas elevadas, la velocidad de corrosión aumenta, ni siquiera siendo útil el tipo 316 para el ácido sulfúrico⁹⁶. Por lo que serán mucho menos útil los aceros de tipo 304 para resistir a las condiciones de un medio con ácido sulfúrico durante un tiempo prolongado, y en menor medida a temperaturas elevadas. Dado este punto, para evitar daños en el

⁹⁰ MCGUIRE, Michael. Op.,cit, p. 31.

⁹¹ *Ibíd.*, p. 32.

⁹² UNIVERSIDAD DE ALICANTE. Corrosión en la industria química [En línea]. Corrosión (Ingeniería química). p. 8. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/8237/1/CorrTema11.pdf>

⁹³ MCGUIRE, Michael. Op., cit, p. 32, 33.

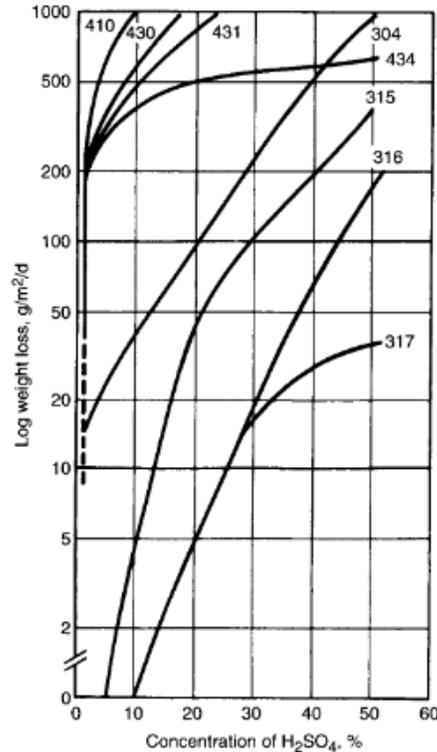
⁹⁴ *Ibíd.*, p. 33.

⁹⁵ CHAVEZ, Cecilia. Op., cit, párr. 10.

⁹⁶ CENDI, Centro nacional para el desarrollo del acero inoxidable, A.C. Resistencia a la corrosión de los aceros inoxidables [En línea]. San Luis de Potosí, México. p. 11. párr. 7. [Consultado: 05 de julio de 2018]. Disponible en internet: http://www.iminox.org.mx/downloads/publicaciones/manual_resistencia_a_la_corrosion.pdf

material del banco de reactores, se evitará seleccionar reacciones que generen o necesiten de ácido sulfúrico.

Figura 34. Curvas isocorrosión de distintos aceros inoxidable en ácido sulfúrico.



Fuente: TRUMAN, J.E. Isocorrosion rates of various stainless steels in sulfuric acid. En MCGUIRE, Michael. Physical and Mechanical Properties of Select Alloys. Stainless Steel for design engineers. ASM International. Materials Park, Ohio, 2008. p. 32. [Consultado: 04 de julio de 2018].

❖ **Ácido clorhídrico.** Los aceros de tipo 304 no son los más adecuados para aplicaciones en las que intervenga el ácido clorhídrico, ya que según la bibliografía ni siquiera en condiciones ambientales y al 1% de HCL, se proporcionaría una buena resistencia a la corrosión⁹⁷. Otra fuente bibliográfica afirma que todas las concentraciones de ácido clorhídrico atacarán los aceros inoxidable porque este ácido destruye fácilmente su pasividad, donde las aleaciones son atacadas rápidamente con el desprendimiento de hidrógeno⁹⁸.

❖ **Ácido nítrico.** El ácido nítrico es fuertemente oxidante; lo que favorece la formación de la película pasiva de óxido de cromo, por lo que incluso aceros con

⁹⁷ MCGUIRE, Michael. Op.,cit, p. 33.

⁹⁸ CENDI. Op.,cit, p. 11, párr. 6.

bajas concentraciones de cromo, se mantienen con la película pasiva a todas las concentraciones de ácido nítrico a temperatura ambiente⁹⁹. El acero 304 puede ser utilizado hasta el punto de ebullición del ácido nítrico con una concentración máximo del 50%^{100 101}. Para concentraciones mayores del 50% y temperaturas por encima de 50°C, se aumenta la velocidad de corrosión, y no es recomendable usar el acero 304. Por otro lado, según la bibliografía, la presencia de ácido nítrico en algunas mezclas de ácidos, conlleva velocidades de corrosión extremadamente bajas; la corrosividad de ácidos como el sulfúrico, acético y fosfórico se ve reducida; sin embargo, las mezclas de ácido nítrico con ácido clorhídrico o fluorhídrico son corrosivas para todos los aceros inoxidables¹⁰².

❖ **Ácido fosfórico.** Los aceros que contienen hierro-cromo, como es el caso de los aceros 304, presentan una resistencia moderada, por lo que se necesitan aleaciones con molibdeno-cobre-níquel o molibdeno-cobre-cromo¹⁰³. Como se mostró en la tabla 52, los aceros del tipo 304 no cuentan con molibdeno en su composición química, por lo que pueden emplearse con la mayoría de las concentraciones de ácido fosfórico, únicamente a temperatura ambiente, requiriendo aceros del tipo 316 para temperaturas más elevadas¹⁰⁴.

❖ **Acido sulfuroso.** El ácido sulfuroso causa picadura para los aceros tipo 304, teniendo menor efecto en aceros con un porcentaje de molibdeno¹⁰⁵.

❖ **Acido carbónico.** Según la bibliografía, el ácido carbónico no tiene ningún efecto sobre los aceros inoxidables, y los tipo 304 tienen un buen desempeño en la fabricación de equipos para carbonizar¹⁰⁶.

❖ **Ácidos orgánicos.** Debido a que poseen una capacidad de disociación débil, son generalmente no agresivos para los aceros inoxidables, con la excepción de medios que incluyen altas temperaturas y la presencia de cloruros¹⁰⁷. En el caso del ácido acético, los tipos 304 tienen una excelente resistencia a todas las concentraciones de ácido acético a temperaturas moderadas, y al ácido caliente concentrado¹⁰⁸.

⁹⁹ MCGUIRE, Michael. Op.,cit, p. 34. párr. 3.

¹⁰⁰ SRC. Tablas de corrosión del acero inoxidable [En línea]. p. 1. [Consultado: 18 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: http://srcsl.com/catalogoPDFs/AreaTecnica/TABLAS_CORROSION_INOX.pdf

¹⁰¹ CENDI. Op.,cit, p. 12. párr. 1.

¹⁰² *Ibid.*, p. 12. párr. 2.

¹⁰³ MCGUIRE, Michael. Op.,cit, p. 34. párr. 6.

¹⁰⁴ CENDI. Op.,cit, p. 12. párr. 3.

¹⁰⁵ *ibid.*, p. 12. párr. 4.

¹⁰⁶ *ibid.*, p. 12. párr. 6.

¹⁰⁷ MCGUIRE, Michael. Op.,cit, p. 35. párr. 1.

¹⁰⁸ CENDI. Op.,cit, p. 13. párr. 2.

Por otro lado, el ácido fórmico es un buen reductor pudiendo generar corrosión severa en aceros austeníticos normales cuando se encuentra a temperaturas elevadas¹⁰⁹.

Los aceros 304 pueden ser usados para manejar soluciones de ácido láctico a temperaturas cercanas a la ambiente, ya que a temperaturas relativamente altas, las soluciones de ácido láctico concentrado producen picado severo de las aleaciones que no contienen molibdeno, como el caso de las tipo 304¹¹⁰.

➤ **Bases.** Con respecto a las bases débiles como el hidróxido de amonio, los aceros inoxidable austeníticos presentan una excelente resistencia a la corrosión, pudiendo usar el acero 304 para equipos de proceso en plantas de amoniaco, y para ciertos tipos de reacciones de aminación¹¹¹. Por otro lado, con respecto a las bases fuertes, los aceros inoxidable austeníticos muestran un ligero ataque corrosivo en soluciones de hidróxido de sodio al 50% a temperaturas cercanas a 105°C¹¹². Para aceros con porcentajes en cromo mayor al 17%, pueden emplearse bases fuertes a cualquier concentración a temperaturas cercanas a los 50°C¹¹³, como es el caso del acero 304.

➤ **Sales.** Para el caso de sales ácidas como el cloruro de aluminio y cloruro de amonio, pueden hidrolizar para formar soluciones ácidas; las sales ácidas tienen un valor pequeño de pH, lo que acelera el proceso de corrosión, por el efecto ácido que ello conlleva. Por otro lado, la presencia de sales alcalinas que hidrolizan para incrementar el pH de la solución, tiene un efecto positivo, disminuyendo la tasa de corrosión¹¹⁴. Según la bibliografía, los aceros inoxidable austeníticos están prácticamente libres de corrosión por sales neutras y alcalinas, incluso aquellas de naturaleza fuertemente oxidante¹¹⁵.

Por el lado de las sales halógenas, las de naturaleza ácida pueden causar corrosión por picado, ya que los iones halógenos penetran la película pasiva, si las soluciones son de naturaleza oxidante, o causar un ataque general si las soluciones son reductoras¹¹⁶.

¹⁰⁹ ibíd.. p. 13. párr. 3.

¹¹⁰ ibíd.. p. 13. párr. 5.

¹¹¹ ibíd., p. 12. párr. 7.

¹¹² ibíd., p. 12. párr. 8.

¹¹³ MCGUIRE, Michael. Op.,cit, p. 35. párr. 3.

¹¹⁴ KUMAR, Ajit, et al. Corrosion behaviour of stainless steel grade 304 IN-1MHCL [En línea]. En: International journal of innovative research & development. Mayo 2014, vol. 3. no. 5. p. 342. [Consultado: 30 de Julio de 2018]. Disponible en internet: <http://www.ijird.com/index.php/ijird/article/viewFile/49634/40225> ISSN 2278- 0211

¹¹⁵ CENDI. Op.,cit, p. 11. párr. 3.

¹¹⁶ Ibíd.. p. 11. párr. 5.

➤ **Otros medios.** Los aceros inoxidable con un porcentaje en cromo mayor al 10,5% no sufren desgaste por oxidación después de una exposición prolongada a la atmósfera¹¹⁷. En atmósferas marinas, el acero 304 puede mancharse superficialmente de color café amarillento, dándose los primeros meses de exposición, después de los cuales no progresa¹¹⁸.

En el caso del agua destilada, el tipo 304 no sufre ataque, más para el agua doméstica debe tenerse cuidado con muestras de agua con contenido de cloro anormalmente elevado¹¹⁹.

Para el agua salina, la corrosión estará determinada por las condiciones de exposición, por ejemplo donde la velocidad de agua es baja y hay probabilidad de que materia sólida u organismos marinos se adhieran a la superficie, puede suceder un ataque localizado alrededor o debajo de esta materia adherida¹²⁰.

En medios muy oxidantes, debe evitarse el uso de vapor de agua, ya que intensifica la oxidación de la capa pasiva, incrementando la porosidad la capa de Cr_2O_3 , conllevando la formación de compuestos volátiles, por lo que la temperatura máxima de operación debe reducirse entre 50 a 100°C en presencia de vapor¹²¹.

En la figura 35 se muestra el comportamiento de los aceros 304 y 304L en algunos medios ya mencionados y otros que aún no se han discutido. Puede verse que, para el caso del ácido sulfúrico, y ácido hipoclorhídrico se alcanzan las velocidades más altas de corrosión según las convenciones en todo el rango de temperaturas, y con unos porcentajes mínimos de 20% y 45% en peso de ácido sulfúrico y ácido hipoclorhídrico, respectivamente. También nótese que el ácido sulfúrico puro puede ser utilizado en los aceros 304, a temperatura ambiente. Sin embargo, un aumento en la temperatura puede significar efectos severos de corrosión sobre el material. Para los casos del ácido nítrico, ácido acético, y ácido fosfórico la velocidad de corrosión será baja a temperatura ambiente, y a todas las concentraciones de ácido, más, sin embargo, puede notarse el daño por oxidación a temperaturas relativamente altas cercanas a los 100°C para ácidos concentrados.

En base con la búsqueda bibliográfica, se tiene un criterio que es la resistencia a la corrosión a diferentes temperaturas del acero 304 a distintos medios, para la búsqueda de reacciones viables en el sistema.

¹¹⁷ MCGUIRE, Michael. Op.,cit, p. 84.

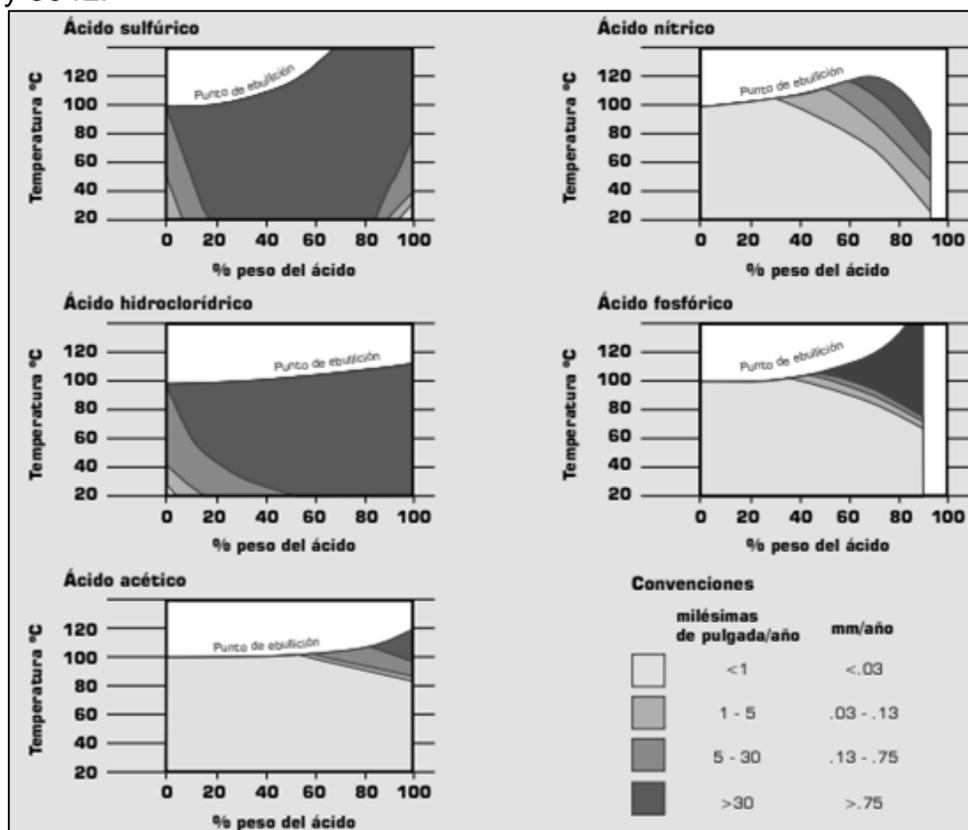
¹¹⁸ CENDI. Op.,cit, p. 10. párr. 6.

¹¹⁹ *Ibid.* p. 10. párr. 8.

¹²⁰ *Ibid.* p. 11. párr. 1.

¹²¹ MCGUIRE, Michael. Op.,cit, p. 81-82.

Figura 35. Resistencia a la corrosión en distintos medios para los aceros 304 y 304L.



Fuente: CIA. GENERAL DE ACEROS S.A. Aceros inoxidables austeníticos [En línea]. p. 5. [Consultado 28 de junio de 2018]. Disponible en internet: <https://www.cga.com.co/images/document/ficha-304-304L.pdf>

2.6.4.2 Temperatura. El acero 304 tiene buena resistencia a la corrosión por oxidación básica hasta una temperatura de 900°C operando de manera continua, y 815°C para modo de servicio por lotes¹²². Sin embargo, debido a las limitaciones de las bombas centrifugas P-103, y P-104 de la línea de flujo de aceite térmico, la temperatura máxima de operación es de 130°C, sin considerar reacciones exotérmicas.

2.6.5 Selección de sistemas reaccionantes. Para la selección de sistemas reaccionantes para el banco de reactores se tuvieron en cuenta criterios como la temperatura de operación, revisando que la reacción se pueda llevar a cabo a temperatura ambiente, con el fin de disminuir los costos de operación de la planta piloto. Además, se delimitó la selección a reacciones en fase líquida debido a que se desconoce el protocolo de operación del banco de reactores para reacciones en fase gaseosa, y es más seguro en términos operacionales. Por otro lado, se revisó que la resistencia a la corrosión del material de construcción, y de los empaques, a

¹²² ITALUMINIO. Op. cit. p. 3.

las sustancias involucradas en cada reacción fuese alta. Se tuvieron en cuenta, las consideraciones para el manejo seguro de las sustancias, así como para la disposición de residuos. El interés de cada reacción a nivel académico, industrial y en investigación se describe con el fin de evaluar el tipo de aplicabilidad que tendrá. Por último, se hace referencia a los precios de experimentación (para la saponificación de acetato de etilo) y de los reactivos, y a la selección del reactor. A continuación, se describen los sistemas reactivos seleccionados.

2.6.5.1 Saponificación de acetato de etilo. La ecuación química correspondiente a la reacción de saponificación de acetato de etilo se muestra a continuación:



Donde reaccionan acetato de etilo e hidróxido de sodio para formar acetato de sodio y etanol en fase líquida¹²³. La reacción es exotérmica, y se puede llevar a cabo a 20°C, con un pH entre 11,5 y 12,5¹²⁴. Además, la reacción no está limitada por el equilibrio a 25°C, estando desplazada únicamente hacia el sentido de los productos (se hizo un análisis termodinámico de la reacción, a partir de la energía libre de Gibbs de reacción, y la constante de equilibrio a temperaturas cercanas a 25°C; dando un valor de Kc muy grande, lo que indica que la reacción ocurre prácticamente en un solo sentido). La reacción es espontánea a 25°C, ya que el valor de la energía libre de Gibbs de reacción dio aproximadamente -67 kJ/mol, calculando a partir de la energía libre de Gibbs de formación de cada especie que participa en la reacción. Por tanto, la reacción es factible a 25°C, y debido a que es exotérmica, liberará energía en forma de calor; si el sistema es adiabático el aumento de temperatura será proporcional a la cantidad de reactivos que se consuman.

➤ **Resistencia química del material de construcción.** El acetato de etilo participa como reactivo en la reacción, y puede ser formado por la reacción entre ácido acético (ácido débil) y etanol (alcohol), donde se puede notar que proviene de sustancias que no corroen el acero 304, como se indicó previamente; el ácido acético al ser un ácido débil que no se disocia por completo y es generalmente no agresivo con el material del banco de reactores, y en el caso del etanol, según la bibliografía los aceros austeníticos del tipo 304 tiene gran aplicación en la industria

¹²³ GARCIA, Guillermo. CHEM. REACTOR SIMULATOR: Herramienta de simulación de CSTR como apoyo a la docencia [En línea]. Trabajo de grado para la obtención del título en Ingeniería Química. Madrid. Escuela técnica superior de ingenieros industriales, Universidad politécnica de Madrid, Junio 2016, p. 14. [Consultado: 06 de agosto de 2018]. Disponible en internet: http://oa.upm.es/42867/1/TFG_GUILLERMO_NIEVA_GARCIA_VILLARACO.pdf

¹²⁴ NUÑEZ, Oscar, y CABRERA, Carlos. Comportamiento dinámico de la saponificación del acetato de etilo en un reactor de tanque con reacción continua [En línea]. Revista del instituto de investigaciones de la facultad de Geología, Minas, Metalurgia, y Ciencias Geográficas. 2012, p. 2. [Consultado: 06 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://revistasinvestigacion.unmsm.edu.pe/index.php/iigeo/article/viewFile/676/530>

química de alcoholes¹²⁵, por lo que se puede considerar resistente a esta sustancia, además las tablas de corrosión de empresas especializadas en el tema como SRC¹²⁶, indican que el desempeño es bueno entre temperaturas de 20°C y el punto de ebullición del etanol. Las tablas de corrosión de Matelco y Proindexsa, indican que el desempeño del acero 304 en acetato de etilo es bueno. Con respecto al hidróxido de sodio, la reacción se llevara a cabo a 16°C, por lo que el desempeño del acero 304 sería bueno, si la concentración es baja, e incluso del 50%¹²⁷.

Por el lado de los productos de reacción, los iones del acetato de sodio no son agresivos en el rango de temperaturas de operación de la reacción, como se indica en las tablas de corrosión de la bibliografía de Alacer Mas y Matelco. En relación al etanol, según la bibliografía mencionada, el desempeño del acero 304 en etanol es bueno en el rango de temperaturas de 20°C hasta el punto de ebullición del alcohol.

➤ **Consideraciones de seguridad en el manejo de sustancias.** En la tabla 56, se muestran las indicaciones de peligro y pictogramas, según el sistema globalmente armonizado de clasificación y etiquetado (SGA), para las sustancias involucradas en la reacción. La normatividad para la seguridad industrial está regida por la Norma Técnica Colombiana 18001 (OHSAS), la cual ayuda a prevenir accidentes y enfermedades laborales mediante una serie de requisitos para implementar un Sistema de Gestión de Seguridad y Salud Ocupacional¹²⁸. A continuación, se indican algunas consideraciones antes de manipular las sustancias involucradas en la reacción.

El acetato de etilo de concentraciones cercanas al 99,5%, es altamente inflamable (mantener alejado de chispas, llamas al descubierto, superficies calientes, y no fumar), y como medida de lucha contra incendios se recomienda usar espuma resistente al alcohol, dióxido de carbono, o agua pulverizada. Además, evitar la descarga de la electricidad estática, que podría ocasionar la inflamación de los

¹²⁵ ACERIND. Aceros inoxidables: Desarrollo y aplicaciones [En línea]. Introducción a los aceros inoxidables. [Consultado: 06 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.inoxidable.com/infoutil.htm>

¹²⁶ SRC. Tablas de corrosión del acero inoxidable [En línea]. p. 1. [Consultado: 06 de agosto de 2018]. Disponible en internet: http://srcsl.com/catalogoPDFs/AreaTecnica/TABLAS_CORROSION_INOX.pdf

¹²⁷ *Ibid.*, p. 2.

¹²⁸ GUADALUPE, Katherine. Diseño de un sistema de gestión de seguridad y salud ocupacional basado en los lineamientos de la norma OHSAS 18001-2007 para la industria farmacéutica laboratorios G.F. [En línea]. Tesis para optar por el título de Ingeniera en sistemas de calidad y emprendimiento. Universidad de Guayaquil, Facultad de ingeniería química, Proyecto de investigación, Guayaquil, Ecuador, 2017. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet:

<http://repositorio.ug.edu.ec/bitstream/redug/32488/1/TESIS%20SYSO%20GF%20FINAL.pdf>

vapores orgánicos, y las mezclas de vapor/aire en este caso son explosivas¹²⁹. Con respecto a la exposición al acetato de etilo, los consejos para la manipulación segura son: "...evitar el contacto con la piel, ojos y ropa. Lavarse las manos antes de los descansos e inmediatamente después de manipular el producto. Disponer de la suficiente renovación del aire y/o extracción en los lugares de trabajo."¹³⁰. Usar protección respiratoria, guantes protectores, traje de protección, y gafas ajustadas de seguridad¹³¹. Para almacenarlo, se deben mantener los envases herméticamente cerrados en un lugar fresco y bien ventilado, y cuando se almacena en conjunto se debe evitar los ácidos y bases fuertes, así como agentes oxidantes fuertes¹³². El acetato de etilo es estable bajo las condiciones de almacenamiento recomendadas, sin descomposiciones peligrosas.

Con respecto al hidróxido de sodio, no es combustible, sin embargo, el contacto con el agua puede generar el calor suficiente para provocar la ignición de materiales combustibles. Además puede haber riesgo de incendio y explosión si reacciona con sales de amonio produciendo amoníaco¹³³. Se debe evitar la dispersión del polvo, usando guantes, traje, y gafas de protección. Se debe almacenar separado de alimentos, ácidos fuertes y metales; mantener en un lugar seco, bien cerrado, y en un área sin acceso a desagües o alcantarillas¹³⁴. En la bibliografía consultada indican que debe añadirse al agua lentamente, para generar una disolución, y no de manera contraria que sería verter el agua sobre el hidróxido de sodio.

Con respecto a los productos de reacción, el acetato de sodio tiene un grado de riesgo de inflamabilidad al ser combustible, lo que puede suponer un peligro de incendio cuando se expone a temperaturas elevadas o por contacto con una fuente de ignición¹³⁵. Sin embargo, el producto es químicamente estable bajo condiciones normales. Debe evitarse el contacto con ácido nítrico, el fluoruro, nitrato de potasio, oxidantes fuertes y diketene; emite gases de ácido acético en la combustión y en

¹²⁹ QUMICA DELTA S.A DE C.V. Hoja de datos de seguridad: Acetato de etilo [En línea]. 2014. p. 3. Disponible en internet: https://www.quidelta.com.mx/archivos/Acetato%20de%20Etilo.esp.pdf2016-06-17_16_14_22_SyP_sga.pdf [Consultado: 09 de agosto de 2018].

¹³⁰ *Ibid.*, p. 4.

¹³¹ INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Acetato de etilo [En línea]. 1994. p. 1. [Consultado: 09 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/301a400/nspn0367.pdf>

¹³² QUMICA DELTA S.A DE C.V. Op. cit. p. 4.

¹³³ INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Hidróxido de sodio [En línea]. 2010. p. 1. [Consultado: 09 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/301a400/nspn0360.pdf>

¹³⁴ *Ibid.*, p. 2.

¹³⁵ INR. Hojas de datos de seguridad: Acetato de sodio [En línea]. Comité de bioseguridad, Mayo 2013, p. 1. [Consultado: 09 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.inr.gob.mx/Descargas/bioSeguridad/acetatoSodio31.pdf>

contacto con ácidos fuertes¹³⁶. Se debe mantener en un lugar seco, separado de ácidos fuertes y oxidantes fuertes; se descompone al calentarla intensamente y en contacto con ácidos fuertes produciendo vapores de ácido acético, y reacciona violentamente con oxidantes fuertes¹³⁷. Se debe utilizar guantes protectores y gafas ajustadas de seguridad¹³⁸.

Tabla 56. Indicaciones de peligro y pictogramas de las sustancias involucradas en la saponificación de acetato de etilo según el SGA.

Sustancia	Pictograma	Indicaciones de peligro
Acetato de etilo		Líquidos y vapores muy inflamables. Provoca irritación ocular grave.
Hidróxido de sodio		Puede ser corrosivo para los metales, provocar quemaduras graves en la piel, y lesiones oculares graves.
Acetato de sodio	Sin pictograma	Provoca irritación ocular
Etanol		Líquidos y vapores muy inflamables, provoca irritación ocular grave, y es nocivo para los organismos acuáticos.
Agua destilada	Sin pictograma	Clasificada como sustancia no peligrosa.

Fuente: Elaboración propia basado en MERCK. Disponible en: <https://www.merckmillipore.com/CO/es>

¹³⁶ *Ibid.*, p. 2. "SECCION VI. REACTIVIDAD".

¹³⁷ INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Acetato de sodio [En línea]. 2006, p. 1, 2. [Consultado: 09 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/501a600/nspn0565.pdf>

¹³⁸ INR. Op. cit. p. 3. "SECCION IX. PROTECCION ESPECIAL ESPECIFICA PARA SITUACIONES DE EMERGENCIA".

Con respecto al etanol; es fácilmente inflamable¹³⁹ (evitar llamas, no producir chispas y no fumar), además el vapor de etanol se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas, por lo que se recomienda mantener en un sistema cerrado con ventilación, con equipos eléctricos a prueba de explosión¹⁴⁰. En cuanto a peligros químicos, las fichas de seguridad de la literatura indican que reacciona lentamente con hipoclorito de sodio, óxido de plata y amoníaco, mientras que, por otro lado, reacciona violentamente con oxidantes fuertes tales como el ácido nítrico, nitrato de plata, nitrato de mercurio o perclorato manganésico, originando peligro de incendio o explosión¹⁴¹. Almacenar en sistemas a prueba de incendios, y separado de oxidantes fuertes, y al manipularlo utilizar guantes de protección, gafas de seguridad (puede causar irritación ocular grave)¹⁴².

➤ **Consideraciones en la disposición de residuos.** La disposición de residuos se puede llevar a cabo siguiendo el Manual de Gestión Integral de Residuos, del Instituto Nacional de Salud de la República de Colombia¹⁴³. Para determinar si un residuo es peligroso o no, se puede utilizar el decreto 4741 de 2005, que establece las características, y lista de residuos peligrosos¹⁴⁴.

A continuación, se mencionan algunas consideraciones en la disposición de residuos de las sustancias involucradas en la reacción.

El acetato de etilo debe evitarse derramar, y/o verter en medios acuáticos, sin el tratamiento previo adecuado¹⁴⁵. Con respecto al hidróxido de sodio; puede ser peligroso para el ambiente, teniendo que prestar atención a los organismos acuáticos, manteniéndolo alejado de los desagües, y de las aguas superficiales y subterráneas¹⁴⁶. Por el lado de los productos de reacción, según la bibliografía debe evitarse verter acetato de sodio a alcantarillas, desagües, o en sistemas

¹³⁹ ALSURA. Hoja de seguridad: Etanol [En línea]. Bogotá, Noviembre de 2003, p. 1. [Consultado: 18 de agosto]. Disponible en internet: <https://www.arlsura.com/files/hojas/etanol.pdf>

¹⁴⁰ INSHT. Fichas Internacionales de Seguridad Química: Etanol (Anhidro) [En línea]. Octubre 2000, p. 1. sección "PREVENCION" [Consultado: 18 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.ebd.csic.es/lie/PDF/ETANOL.pdf>

¹⁴¹ *Ibid.*, p. 2. sección "PELIGROS QUIMICOS".

¹⁴² *Ibid.*, p. 1. sección "EXPOSICION" & "ALMACENAMIENTO".

¹⁴³ INSTITUTO NACIONAL DE SALUD. Manual de Gestión Integral de Residuos [En línea]. Ministerio de Salud y Protección Social, República de Colombia, mayo de 2010. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: <https://www.minsalud.gov.co/sites/rid/Lists/BibliotecaDigital/RIDE/IA/INS/manual-gestion-integral-residuos.pdf>

¹⁴⁴ COLOMBIA. MINISTERIO DE AMBIENTE, VIVIENDA Y DESARROLLO TERRITORIAL. Decreto 4741 (30, diciembre, 2005). Por el cual se reglamenta parcialmente la prevención y manejo de los residuos o desechos peligrosos generados en el marco de la gestión integral. Bogotá, 2005.

¹⁴⁵ QUMICA DELTA S.A DE C.V. Op. cit. p. 3. sección "Precauciones ambientales".

¹⁴⁶ INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Hidróxido de sodio. Op., cit. p. 2. sección "DATOS AMBIENTALES".

acuáticos¹⁴⁷. En relación al etanol; representa un peligro agudo, según el sistema globalmente armonizado de clasificación y etiquetado de productos químicos, para los medios acuáticos, además de prevenir la entrada hacia alcantarillas, sótanos o áreas confinadas no controladas¹⁴⁸.

➤ **Interés académico de la reacción.** Se conoce del caso de la Universidad Nacional del Mar del Plata, ubicada en Argentina, la cual lleva a cabo esta reacción en sus prácticas de laboratorio de planta piloto, en reactores de tanque con agitación que operan de manera discontinua, así como con reactores tubulares, con el fin de estudiar la cinética química de una reacción de segundo orden irreversible en medio básico, la cual corresponde a la saponificación de acetato de etilo, midiendo el avance de reacción mediante conductimetría, y determinando la distribución de tiempos de residencia del respectivo reactor¹⁴⁹.

➤ **Interés industrial de la reacción.** El acetato de sodio, que es producto de la reacción, tiene gran interés industrial, ya que se usa para remover sales de algunos textiles, para intensificar el color de pinturas, como regulador de pH en la industria alimenticia, etc¹⁵⁰. Por lo que se ha estudiado la reacción usando software especializado, recreando el proceso en reactores continuos de tanque agitado (CSTR); como lo hicieron Núñez y Cabrera, estudiando el comportamiento dinámico de la saponificación de acetato de etilo empleando programas como MATLAB y Simulink, pudiendo cambiar los valores de las variables que gobiernan el proceso, y determinando el efecto de dicho cambio sobre alguna de las variables determinada por el usuario, concluyendo los autores que la simulación presentada es de bajo costo, pudiendo mejorar el ejercicio del proceso en una planta química que lleve a cabo la reacción mencionada¹⁵¹.

¹⁴⁷ GTM. Hoja de datos de seguridad: Acetato de sodio [En línea]. Junio de 2014. [Consultado: 18 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.gtm.net/images/industrial/a/ACETATO%20DE%20SODIO.pdf>.

¹⁴⁸ GTM. Etanol: Ficha de datos de seguridad [En línea]. Enero 2017. p. 2, 4. [Consultado: 18 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.gtm.net/images/industrial/e/ETANOL.pdf>

¹⁴⁹ UNMDP. Trabajo practico de laboratorio N°2 – Cinética Química – Reactor Tubular [En línea]. Laboratorio de reactores y control, Planta piloto de ingeniería química, Facultad de ingeniería-UNMDP, 2018, p. 1. [Consultado: 18 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://sites.google.com/site/plantapilotomdq/guias>

¹⁵⁰ ACOSTA, Jair y PEREZ, Rolando. Estudio experimental y simulación de la saponificación del acetato de etilo en tres reactores CSTR en serie [En línea]. Trabajo de grado para optar por el título de Ingeniero Químico. Cartagena, Colombia. Universidad de Cartagena, Facultad de ingeniería, Programa de Ingenieria Quimica, Marzo de 2012, p. 09. [Consultado: 18 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://repositorio.unicartagena.edu.co:8080/jspui/bitstream/11227/107/2/PROPUESTA%20DEFINITIVA.%20FINAL.pdf>

¹⁵¹ NUÑEZ, Oscar y CABRERA, Carlos. Comportamiento dinámico de la saponificación del acetato de etilo en un reactor de tanque con reacción continua. Op. cit., p. 1.

En otro caso, Acosta y Pérez para optar por el título de Ingeniero químico, realizaron el estudio experimental y simulación de la saponificación de acetato de etilo en tres reactores CSTR en serie. Estos últimos establecen que la reacción es ampliamente conocida, pero son muy pocos los avances logrados para mejorar la producción de acetato de sodio; por lo que proponen una simulación en el software Comsol para comparar el grado de avance de la reacción, y los estados estacionarios con los resultados obtenidos en forma experimental, para ayudar en la comprensión del proceso, y en la optimización de la producción a futuro¹⁵².

➤ **Interés en investigación de la reacción.** La reacción de saponificación de acetato de etilo ha sido abordada desde un principio con el fin de determinar la cinética y los parámetros energéticos, usando reactores calorimétricos, así como el uso de reactores batch, semibatch, y CSTR, obteniendo perfiles de concentración del hidróxido de sodio en base a las mediciones de conductividad de la masa de reacción¹⁵³. Además, se ha investigado acerca de la optimización del proceso, realizando experimentos con cambios en los parámetros de operación (temperatura, velocidad de agitación, concentración inicial de los reactivos), para estudiar el efecto de dicha variación en el proceso (en algunos casos se determinó que la relación de concentraciones iniciales de reactivos influía en la conversión de los mismos)¹⁵⁴.

➤ **Precio de experimentación.** Sin tener en cuenta los materiales mencionados en la sección “2.5”, los costos de disponibilidad de las instalaciones, ni los costos de mano de obra y considerando a modo de ejemplo los siguientes precios

- El precio de acetato de etilo por litro es de 94000 COP¹⁵⁵.
- El precio por litro de agua destilada es de 4200 COP¹⁵⁶.
- El kilogramo de hidróxido de sodio cuesta cerca de 91000 COP¹⁵⁷.

¹⁵² ACOSTA, Jair y PEREZ, Rolando. Estudio experimental y simulación de la saponificación del acetato de etilo en tres reactores CSTR en serie. Op. cit., p. 1.

¹⁵³ *Ibíd.*, p. 6, 7 y 8.

¹⁵⁴ *Ibíd.*, p. 8 y 9.

¹⁵⁵ MERCK. Solvents for Lab Applications EMPLURA: Etilo Acetato [En línea]. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: http://www.merckmillipore.com/CO/es/product/Ethylacetate,MDA_CHEM-822277

¹⁵⁶ COLSUBSIDIO. [Consultado: 06 de febrero de 2018]. Disponible en internet: <https://www.colsubsidioenlinea.com/tienda/bogota/agua-destilada-x-500-cc>

¹⁵⁷ MERCK. Caustic Alkalis and Bases EMSURE, EMPLURA [En línea]. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: http://www.merckmillipore.com/CO/es/product/Sodiumhydroxide,MDA_CHEM-106462

- El precio por cada kilovatio-hora para sectores no residenciales es de 356 COP¹⁵⁸.

Basándose en la tabla 50, donde se indica que la potencia requerida del equipo es de 17.6 kW, y si toma una hora de experimentación, tanto para los modos de operación por lotes y continuo, ya que es aproximadamente el tiempo establecido según la conversión del hidróxido de sodio (como se puede revisar en la figura 42 para los reactores por lotes), y las condiciones de operación establecidas según la bibliografía, el precio de energía por cada hora de operación del banco de reactores sería de 6265 COP aproximadamente.

Para el modo de operación continua, las cantidades a utilizar sin considerar pérdidas según la tabla 74 serán

- 5.6 g de hidróxido sodio, y 9.997 L de agua destilada para una solución acuosa 0.014 M.
- 136.8 mL de acetato de etilo, y 9.863 L de agua destilada para una solución acuosa de 0.14 M.

En la tabla 57 se muestra la cantidad total a utilizar de cada sustancia, y el precio correspondiente, según la información mencionada previamente. Se puede concluir que el precio total por reactivos sería de 96780.8 COP para una hora de operación en modo continuo, sin considerar pérdidas, procesando en total 20 L/h de material. Teniendo en cuenta el costo de energía, el precio total sería de 103045.8 COP aproximadamente. Las cantidades y los precios de los reactivos, según la tabla 65, en los reactores por lotes de 1 y 3 litros, se muestra en las tablas 58 y 59, respectivamente.

Tabla 57. Cantidad y precio de cada sustancia para una hora de operación en continuo sin pérdidas de material.

Sustancia	Cantidad a utilizar	Precio (COP)
Hidróxido de sodio	5.6 g	509.6
Acetato de etilo	136.8 mL	12859.2
Agua destilada	19.86 L	83412

Fuente: Elaboración propia

¹⁵⁸ CREG. Tarifas de energía eléctrica (\$/kWh) reguladas por la comisión de regulación de energía y gas (CREG). Mayo de 2018. [Consultado: 25 de enero de 2019]. Disponible en internet: <https://www.codensa.com.co/document/Tarifario-mayo-2018.pdf>

Tabla 58. Cantidad y precio de cada sustancia para una hora de operación por lotes en 1 litro de volumen de reacción.

Sustancia	Cantidad a utilizar	Precio (COP)
Hidróxido de sodio	4.00 g	364.00
Acetato de etilo	9.77 mL	918.38
Agua destilada	988.35 mL	4151.07

Fuente: Elaboración propia

Tabla 59. Cantidad y precio de cada sustancia para una hora de operación por lotes en 3 litros de volumen de reacción.

Sustancia	Cantidad a utilizar	Precio (COP)
Hidróxido de sodio	12.00 g	1092.00
Acetato de etilo	29.31 mL	2755.14
Agua destilada	2.97 L	12453.25

Fuente: Elaboración propia

Para un precio total de 11698.45 y 22565.39 COP, para los reactores de 1 y 3 litros respectivamente (considerando el costo de kilovatio-hora). Cabe mencionar que las reacciones se llevan a cabo sin el uso de fluidos de servicio.

➤ **Selección del reactor.** En un enfoque industrial, la saponificación de acetato de etilo es una reacción única, por lo que generalmente para este tipo de reacciones se prefiere un reactor por lotes o PFR, que un CSTR, debido a que este último opera a la velocidad de reacción más baja con respecto a los demás reactores, ya que corresponderá a la velocidad de reacción de salida del reactor, que es donde la concentración de los reactivos es baja, y por tanto los requerimientos de volumen del reactor serán mayores¹⁵⁹. Sin embargo, este enfoque solo considera el volumen del reactor, y no otros factores como los costos del reactor y de operación que terminan siendo determinantes en la toma de decisiones. Para efectos de investigación se puede llevar a cabo la reacción en un reactor CSTR, desarrollando análisis de sensibilidad con respecto a las variables que gobiernan el proceso, determinando las condiciones de operación que maximizan la producción de acetato

¹⁵⁹ SMITH, Robin. Chemical Process Design and Integration. John Wiley & Sons Ltd. 2005. p. 91. [Consultado: 02 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <https://es.slideshare.net/MiguelAngelmartinezS1/chemical-process-design-and-integration-r-smith-2nd-ed>

de sodio. Entonces, la selección del reactor dependerá del contexto en el que se vaya a utilizar.

Acosta y Pérez¹⁵², llevaron a cabo la saponificación de acetato de etilo en una secuencia de tres reactores CSTR (reactores continuos de tanque agitado), cada uno de 1 L, enchaquetados con vidrio, provisto con sistemas de medición (termopares, conductímetro y rotámetro), bomba para flujo de materia prima y fluido de enfriamiento¹⁶⁰. Posteriormente, modelaron el proceso en un software llamado COMSOL, con el fin de ayudar en la comprensión del proceso, y que pueda optimizarse la producción de acetato de sodio a futuro.

En la Universidad Nacional del Mar Del Plata de Argentina, se lleva a cabo en una de sus prácticas de laboratorio de planta piloto la reacción de saponificación de acetato de etilo en un reactor de tanque agitado discontinuo (por lotes) de 0.8 L, haciendo un seguimiento del avance de reacción mediante conductimetría¹⁶¹. Además, también llevan a cabo la reacción en un reactor tubular (PFR)¹⁶².

Con base al libro “Elementos de Ingeniería de las reacciones químicas.” de H. Scott Fogler, se sugiere usar un reactor CSTR (reactor continuo de mezcla perfecta), ya que este tipo de reactor se emplea sobre todo para reacciones en fase líquida¹⁶³. Por otro lado, el mismo autor indica que para obtener los datos de velocidad de reacciones homogéneas, para estudiar su cinética, se usan con mayor frecuencia reactores intermitentes o por lotes, ya que de esa forma se simplifica el análisis de los datos obtenidos experimentalmente¹⁶³. Además, distintos autores¹⁶⁴ ¹⁶⁵ han usado reactores batch con el fin de estudiar la cinética de la saponificación de acetato de etilo.

Por lo tanto, si se pretende estudiar la cinética de la saponificación de acetato de etilo, se seleccionará el modo de operación de reactor por lotes isotérmico (como lo hicieron los respectivos autores previamente mencionados, y como se ha hecho en la planta piloto de la UNMDP previamente mencionada), que se lograría con el juego

¹⁶⁰ ACOSTA, Jair y PEREZ, Rolando. Estudio experimental y simulación de la saponificación del acetato de etilo en tres reactores CSTR en serie. Op., cit. p. 26.

¹⁶¹ UNMDP. Trabajo practico de laboratorio N°2 – DTR Reactor Tubular/Reacción en TAD [En línea]. Laboratorio de reactores y control, Planta piloto de ingeniería química, Facultad de ingeniería-UNMDP, 2018, p. 3. [Consultado: 01 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <https://sites.google.com/site/plantapilotomdq/guias>

¹⁶² UNMDP. Trabajo practico de laboratorio N°2 – Cinética Química – Reactor Tubular [En línea]. Op., cit. p. 3.

¹⁶³ FOGLER, H. Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. Op., cit. p. 12-13, 254.

¹⁶⁴ MUKHTAR, Ahmad et. al. Estimation parameters of Arrhenius equation for Ethyl Acetate Saponification Reaction [En línea]. Research Journal of Chemical Sciences. Vol. 5 (11), 46- 50, Noviembre de 2015. [Consultado: 02 de Agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.isca.in/rjcs/Archives/v5/i11/8.ISCA-RJCS-2015-150.pdf>

¹⁶⁵ SARDAR, Suneela et. al. Kinetic law parameters study of saponification reaction using integral method [En línea]. NFC-IEFR Journal of engineering & Scientific research. [Consultado: 02 de Agosto de 2018]. Disponible en intener: <http://nijesr.iefr.edu.pk/journalFolder/7/66a74.pdf>

de válvulas correspondiente (sin entradas ni salidas de reactivos y productos, durante la reacción), en el banco de reactores de tanques agitados. Esto indica, que se usaría uno de los reactores de 1 L, o el reactor de 3 L del banco de reactores de tanque agitado.

Si se pretende estudiar el comportamiento de la reacción en un sistema continuo, se puede usar el banco de reactores de tanques agitados, pero en este caso con un juego de válvulas distinto (con entradas y salidas de reactivos y productos, durante la reacción), de tal forma que puede utilizarse un reactor CSTR de 1 L o 3 L, o una secuencia de hasta tres reactores CSTR de 1L cada uno (como lo hicieron; Acosta y Pérez), o por otro lado, emplear un reactor PFR (como lo hicieron en la planta piloto de la UNDMP) de 1L o de 3L, del banco de reactores tubulares. De esta forma, puede compararse el nivel de conversión de los reactivos en cada uno de los reactores, y en la secuencia de reactores CSTR. Cabe aclarar que los reactores cuentan con toma de muestras lateral con sistema anti-retorno y con chaqueta térmica para los casos en que se pretenda mantener la temperatura constante.

2.6.5.2 Hidrólisis de anhídrido acético. El anhídrido acético reacciona con agua en exceso para formar ácido acético. La reacción se lleva a cabo en fase líquida, a temperaturas de 20°C a 26°C. Termodinámicamente, la reacción es exotérmica, y se usa agua en exceso para modelar una cinética de pseudo-primer orden¹⁶⁶.



Realizando un análisis termodinámico de la espontaneidad de la reacción, se verificó que a 25°C la reacción es factible o espontánea, teniendo un valor aproximado de energía libre de Gibbs de $\Delta G_{\text{reaccion}} = -60$ kJ/mol, por lo que no requiere de temperaturas más altas para que se lleve a cabo la reacción.

Además, se comprobó la naturaleza exotérmica de la reacción, determinando la entalpía de reacción a 25°C, teniendo un valor aproximado de $\Delta H_{\text{reaccion}} = -47$ kJ/mol, lo que implica que a medida que transcurre la reacción se libera calor. Para el caso de Amenaghawon et. al. si bien la reacción desprende calor, los cambios de temperatura no fueron significativos¹⁶⁷.

¹⁶⁶ KOVAC, Anita. Checking the kinetics of acetic acid production by measuring the conductivity [En línea]. Faculty of chemistry and chemical engineering, University of Maribor, Slovenia, 2007. [Consultado: 19 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://www.theric.org/PDF/JIEC/IE13/IE13-4-0631.pdf>

¹⁶⁷ AMENAGHAWON, N.A, et. al, Modelling and simulation of the batch hydrolysis of acetic anhydride to produce acetic acid [En línea]. Nigerian Journal of Technology, vol. 32, no. 3, 2013, p. 391. [Consultado: 20 de Agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://www.ajol.info/index.php/njt/article/download/123610/113139>

Cabe mencionar que es una reacción irreversible, ya que a partir de la energía libre de Gibbs de reacción determinada previamente, se determinó el valor de la constante de equilibrio, la cual tuvo un valor bastante alto.

➤ **Resistencia química del material de construcción.** Según la bibliografía, el anhídrido acético puede corroer los materiales hechos en acero, inclusive los de tipo 304 bajo ciertas condiciones de temperatura y concentración¹⁶⁸. A 20°C, la resistencia del acero 304 al 90% de concentración de anhídrido acético en agua, se considera como buena siendo el material completamente resistente, según las tablas de corrosión de Alacer Más¹⁶⁹. Se puede soportar lo mencionado mediante las tablas de corrosión de CAMLAB¹⁷⁰. Si se usa una solución al 60% en agua a una temperatura de 85°C, según las tablas de corrosión de Alacer mas, el material es resistente. Por otro lado, de la misma fuente se puede notar que si se calienta la solución al 90% desde los 20°C, hasta la temperatura de ebullición del anhídrido acético, la velocidad de corrosión aumenta considerablemente.

La temperatura de operación para la hidrólisis de anhídrido acético está en el rango de 20 a 26°C, según Kovac¹⁶⁶ y Amenaghawon et. al.¹⁶⁷, siendo una reacción exotérmica en la cual se emplea un exceso de agua para atenuar el efecto térmico en el reactor, y para modelar una cinética de pseudo-primer orden, comprobando la espontaneidad de la reacción en ese intervalo de temperaturas, por lo que si el banco de reactores opera a una temperatura aproximada de 25°C, con respecto al anhídrido acético no va a sufrir ataque por corrosión, en ausencia de cloruros.

Con respecto al agua, se puede emplear agua destilada como lo hicieron autores previamente mencionados, la cual no afecta los aceros de tipo 304, como se mencionó en uno de los incisos previos de resistencia del material de construcción del banco de reactores a diversos medios; si se usa agua domestica debe tenerse en consideración el contenido de cloros de la muestra a utilizar.

Por último, como se estableció previamente, el ácido acético al ser un ácido débil no se disocia por completo, por lo que el acero 304 tiene buen desempeño incluso con ácido acético concentrado caliente, lo cual se puede corroborar en las tablas de corrosión de Alacer Mas, SRC, y CAMLAB. Sin embargo, según estas fuentes

¹⁶⁸ NJDHSS. Hoja informativa sobre sustancias peligrosas: Anhídrido acético [En línea]. 2005, p. 4. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://www.nj.gov/health/eoh/rtkweb/documents/fs/0005sp.pdf>

¹⁶⁹ ALACER MAS. Tablas de corrosión [En línea]. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.alacermas.com/productos.php?categoria=1&subcategoria=152&gama=1&producto=199#>

¹⁷⁰ CAMLAB. Corrosion Chart [En línea]. Introduction to Stainless Steel. [Consultado: 20 de Agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://www.camlab.co.uk/originalimages/sitefiles/Stainless%20Steel%20Chemical%20Compatibility.pdf>

bibliográficas, debe evitarse llevar las soluciones de ácido acético al punto de ebullición.

➤ **Consideraciones de seguridad en el manejo de sustancias.** El anhídrido acético es inflamable (se debe evitar las llamas; el anhídrido acético se descompone al calentarse, produciendo gases y humos tóxicos, y vapores de ácido acético; no se deben producir chispas, ni fumar), y por encima de los 49°C pueden formarse mezclas explosivas vapor/aire (se debe mantener en un sistema cerrado, con ventilación y equipo eléctrico a prueba de explosión)¹⁷¹. Se recomienda mantener alejado de fuentes de calor, y manipular con guantes, prendas, gafas y máscara de protección (ya que puede provocar quemaduras graves en la piel y lesiones oculares graves), evitando todo contacto con la piel, y con ventilación o extracción localizada, y protección respiratoria¹⁷². Se debe almacenar en recipientes a prueba de incendio, separado de alimentos y piensos, y de sustancias incompatibles como alcoholes, aminas, bases fuertes y agua, además puede atacar a muchos metales en presencia de agua o en seco¹⁷³. Por otro lado, el agua no se considera una sustancia peligrosa, es incombustible, sin embargo en ausencia de control, debe evitarse el contacto con metales alcalinos, metales alcalinotérreos en polvo, anhídridos, ácidos fuertes, fósforo y aluminio en polvo¹⁷⁴.

Con respecto al ácido acético; es inflamable (se deben evitar las llamas, el producir chispas y no se debe fumar), y por encima de los 39°C pueden formarse mezclas explosivas vapor-aire (se debe mantener en un sistema cerrado, con ventilación, y equipo eléctrico a prueba de explosión), además de existir riesgo de incendio y explosión cuando está en contacto con oxidantes fuertes. El ácido acético reacciona violentamente con bases fuertes y ácidos fuertes, además ataca algunos tipos de caucho y revestimientos¹⁷⁵. En la tabla 60, se indican los pictogramas y advertencias de peligro según el sistema globalmente armonizado de clasificación y etiquetado.

¹⁷¹ INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Anhídrido Acético [En línea]. Abril de 2006, p. 1. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/201a300/nspn0209.pdf>

¹⁷² MERCK. Ficha de datos de seguridad: Anhídrido acético [En línea]. Julio de 2017. p. 2. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: http://www.merckmillipore.com/INTERSHOP/web/WFS/Merck-INTL-Site/en_US/-/USD/ShowDocument-File?ProductSKU=MDA_CHEM-100042&DocumentType=MSD&Language=ES&Country=ES

¹⁷³ INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Anhídrido acético. Op. cit., p. 2.

¹⁷⁴ CTR SCIENTIFIC. Hoja de datos de seguridad: Agua destilada [En línea]. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.amerex-mexico.com/pdf/certificados/MSDS%20Agua%20Destilada.pdf>

¹⁷⁵ INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Acido acético [En línea]. Mayo de 2019, p. 1, 2. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://sct.uab.cat/l-amb-controlat/sites/sct.uab.cat.l-amb-controlat/files/CH3COOH.pdf>

Tabla 60. Indicaciones de peligro y pictogramas para las sustancias involucradas en la hidrólisis de anhídrido acético según la SGA.

Sustancia	Pictograma	Indicaciones de peligro
Anhídrido acético		Líquidos y vapores muy inflamables, nocivo en caso de ingestión o inhalación, provoca quemaduras graves en la piel, y lesiones oculares graves.
Agua destilada	Sin pictograma	Clasificada como sustancia no peligrosa.
Ácido acético		Líquidos y vapores muy inflamables, provoca quemaduras graves en la piel y lesiones oculares graves.

Fuente: Elaboración propia basado en MERCK. Disponible en: <https://www.merckmillipore.com/CO/es>

➤ **Consideraciones en la disposición de residuos.** No se debe permitir que el anhídrido acético entre en el sistema de alcantarillado¹⁷⁶. En relación al agua, dependiendo del contenido de residuo, se debe evaluar si es viable verter los residuos por el desagüe¹⁷⁷. Con respecto al ácido acético; es nocivo para los organismos acuáticos, dependiendo de la concentración de vertido y la variación del pH¹⁷⁸.

➤ **Interés académico de la reacción.** Es un acercamiento a un proceso de pseudo-primer orden, el cual se amolda a las ecuaciones de balance molar, y ecuación de velocidad de manera sencilla, pudiendo enseñar a los estudiantes de manera aplicada el método de análisis de datos obtenidos en un reactor con el uso de simplificaciones al utilizar agua en exceso. Por ejemplo, si se obtiene del laboratorio datos de concentración de anhídrido acético con respecto al tiempo de reacción, se pueden emplear métodos de análisis diferencial, y/o integral no muy complejos, para determinar los parámetros cinéticos (constante de velocidad específica) y energéticos de la reacción (energía de activación de la reacción), con el fin de caracterizar la reacción, poder predecir el comportamiento bajo ciertas condiciones, y comparar los resultados obtenidos con la literatura.

¹⁷⁶ CARLROTH. Fichas de datos de seguridad: Anhídrido acético [En línea]. Enero de 2018, p. 7. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: https://www.carlroth.com/downloads/sdb/es/4/SDB_4483_ES_ES.pdf

¹⁷⁷ MERCK. Ficha de datos de seguridad: Agua destilada. Óp. cit., p. 10

¹⁷⁸ OXIDIAL. Hoja de seguridad: Ácido acético [En línea]. Mayo de 2008, p. 4. [Consultado: 20 de agosto]. Disponible en internet: <http://www.oxidial.com.ar/assets/files/es/acido-acetico.pdf>

➤ **Interés industrial de la reacción.** En la hidrólisis de anhídrido acético se produce ácido acético, el cual es usado en la producción de acetato de celulosa para la industria de la fotografía, en la producción de acetato de polivinilo para adhesivos, en la producción de fibras sintéticas, como solvente de reacciones químicas, etc.¹⁷⁹

Amenaghawon et. al. estudiaron el comportamiento dinámico de la hidrólisis de anhídrido acético con el fin de caracterizar la reacción en base a los parámetros cinéticos y energéticos del proceso. Usando el software gPROMS reprodujo los datos obtenidos en un reactor intermitente de manera satisfactoria, afirmando los autores que el modelo desarrollado proveerá una visión del comportamiento del proceso en condiciones dinámicas, e indicios acerca de la instrumentación y control requeridos¹⁸⁰.

➤ **Interés en investigación de la reacción.** La reacción de hidrólisis de anhídrido acético ha sido abordada por varios autores con el fin de determinar sus parámetros cinéticos, mediante la obtención de datos experimentales mediante métodos colorimétricos, calorimétricos, de conductividad, espectroscopia, y titulación, usando métodos diferenciales e integrales de análisis de datos¹⁸¹. Amenaghawon et. al. afirma que muy poco trabajo se ha hecho para modelar el proceso, y el uso de un modelo matemático que represente el proceso en una simulación dinámica puede predecir las condiciones óptimas de operación. Fritzler et al.¹⁸¹ desarrollaron una investigación y experimentación basándose en el hecho de que casi todo el trabajo de caracterización de la reacción, se ha hecho bajo la condición de exceso de agua con el fin de obtener una cinética de pseudo-primer orden, afirmando que una de las mayores preocupaciones en la industria era la posible combinación de abundantes cantidades de anhídrido acético con pequeñas cantidades de agua en tanques de almacenamiento, por lo que desarrollaron varios experimentos con exceso de anhídrido, en algunos casos a temperaturas relativamente altas, de cerca de 60°C, concluyendo que a medida que aumenta la concentración de anhídrido acético, el ácido acético formado tiene mayor efecto sobre la velocidad de reacción, pudiendo los autores desarrollar una expresión cinética que involucre el ácido acético producido.

¹⁷⁹ BASILE. Angelo. Acetic acids: Chemical properties, production and applications [En línea]. Hauppauge, New York : Nova Science Publishers, Inc. 2013. p. 12. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en ebook:

<http://ezproxy.uamerica.edu.co:2098/ehost/ebookviewer/ebook/ZTAwMHh3d19fNjY3MDMyX19BTg2?sid=3a78db79-9131-4a85-b501-182325b0bafd@sessionmgr4009&vid=1&format=EB&rid=1>

¹⁸⁰ AMENAGHAWON, N.A, et. al. Modelling and simulation of the batch hydrolysis of acetic anhydride to produce acetic acid. Nigerian Journal of Technology. Op. cit, p. 386.

¹⁸¹ FRITZLER, B. C. et. al. Acetic Anhydride hydrolysis at high acetic anhydride to water ratios [En línea]. Wiley Online Lybrary. Enero de 2014. [Consultado: 20 de Agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/kin.20838>

- **Precio de los reactivos.** El precio de anhídrido acético por litro para un proveedor específico está en 397000 pesos colombianos (COP)¹⁸².
- **Selección del reactor.** Como se ha mencionado, si se pretende estudiar la cinética de la reacción, que corresponde a una de pseudo-primer orden en exceso de agua, entonces lo más apropiado es el uso de un reactor batch o por lotes isotérmico, como lo hicieron Amenaghawon et. al. y Kovac, ya que el análisis de datos obtenidos experimentalmente se simplifica en el balance molar, al no tener que considerar entradas y salidas de materia. Para mantener la temperatura constante se dispone del uso de la chaqueta térmica con agua de enfriamiento, que retire la cantidad de energía necesaria.

No se sugiere operar de manera continua, debido a que la resistencia química de los empaques (EPDM) de las tuberías de las líneas de reactivos y productos, se ve afectada en cierta medida por el anhídrido acético, según las tablas de corrosión de Proindecsa.

2.6.5.3 Descomposición de alcohol diacetona en medio básico. La descomposición de alcohol diacetona para formar acetona, sigue la siguiente estequiometría:



En la práctica es una reacción que se puede llevar a cabo a temperaturas de 20, 25, 30°C, y 35°C¹⁸³, catalizada en medio básico por hidróxido de sodio. Experimentalmente, para determinar la velocidad de reacción se debe medir cualquier propiedad de la mezcla reaccionante que varíe continuamente durante el curso de la reacción, y que pueda relacionarse con la concentración de los reactivos o de los productos; en este caso, durante la reacción de descomposición se sugiere medir la variación del volumen total de la mezcla¹⁸⁴.

Algunos autores determinaron que la velocidad de descomposición de diacetona alcohol, además de depender de la concentración de alcohol diacetona, también dependía de la concentración de catalizador (NaOH) utilizada en los

¹⁸² MERCK. Acids EMSURE, EMPARTA, EMPLURA: Anhídrido acético [En línea]. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: http://www.merckmillipore.com/CO/es/product/Acetic-anhydride,MDA_CHEM-100042

¹⁸³ MURRY, George. Salt and medium effects on the temperature coefficient of velocity of decomposition of diacetone alcohol. *Journal of the American Chemical Society*, 53(3), Marzo de 1931, p. 981. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. DOI: 10.1021/ja01354a019

¹⁸⁴ SYKES, Peter. Investigación de mecanismos de reacción en química orgánica [En línea]. Editorial reverté, s.a. 1982, p. 9. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://books.google.com.co/books?id=g8aOyokxblAC&printsec=frontcover&hl=es#v=onepage&q&f=false>

experimentos¹⁸⁵. Con el fin de llevar a cabo simplificaciones en el modelo cinético de la reacción, la reacción se lleva a cabo en soluciones diluidas para que los coeficientes de actividad del alcohol diacetona, el catalizador y las especies intermedias se aproximen a 1¹⁸⁶. Como el catalizador no se consume durante la reacción, su concentración durante la reacción no cambia, y se modelaría una cinética de pseudo-primer orden, de la siguiente forma:

$$-r_A = k' C_A \quad \text{Ec. 42}$$

Donde:

$$k' = k * C_B \quad \text{Ec. 43}$$

Donde C_A corresponde a la concentración de alcohol diacetona, C_B a la concentración de hidróxido de sodio, k es la constante de velocidad cinética de pseudo-segundo orden, y k' es la constante de velocidad cinética de segundo orden. Los valores de k y k' se pueden encontrar a 25°C en el libro de Introducción al análisis de la ingeniería química de Russell y Denn. Como puede notarse por las expresiones previas, la constante de velocidad específica de pseudo-primer orden depende de la concentración de catalizador, mientras que la velocidad de reacción específica de segundo orden no depende de la concentración de catalizador.

➤ **Resistencia química del material de construcción.** En general, se recomienda almacenar el alcohol diacetona en contenedores de acero inoxidable. De manera más específica, con respecto al acero 304, el desempeño es bueno a temperaturas cercanas a la ambiente, lo cual se puede soportar en las tablas de corrosión de la literatura^{187 188 189}. La reacción se puede llevar en un rango de temperaturas de 20 a 35°C, según la bibliografía, y además se realiza en ausencia de iones de cloro, por lo que el desempeño del alcohol diacetona será bueno en el banco de reactores.

Con respecto al hidróxido de sodio, como se indicó previamente, el desempeño es bueno dentro del rango de temperaturas de 20 a 35°C, en el cual se puede llevar a

¹⁸⁵ RUSSELL, F. y DENN, M. Introducción al análisis en la ingeniería química [En línea]. Editorial Limusa, México, 1976, p. 157. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://recursosbiblio.url.edu.gt/Sinparedes/2015/Quimica/ltrodQuim/05.pdf>

¹⁸⁶ MURRY, George. Salt and medium effects on the temperature coefficient of velocity of decomposition of diacetone alcohol. Op., cit. p. 979.

¹⁸⁷ FP. Guía de resistencias químicas [En línea]. p. 3. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.poberaj.com.ar/distribuidora/FlexPower/guia-resistencia-quimica-flexpower.pdf>

¹⁸⁸ TECNOPRODUCTS. Tabla de compatibilidad [En línea]. [Consultado: 26 de agosto de 2018] Disponible en internet: <http://tecno-products.com/tabla-de-compatibilidad/>

¹⁸⁹ MATELCO. Tabla de compatibilidades [En línea]. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.matelco.com/admin/UploadFiles/Matelco%20-%20Tabla%20de%20compatibilidades.pdf>

cabo la reacción de descomposición de alcohol diacetona, a concentraciones de máximo 50% de hidróxido de sodio, en agua.

Por el lado del producto de la reacción, según las fuentes bibliográficas, el acero 304 es muy resistente a la acetona, incluso a la temperatura de ebullición¹⁹⁰, y además es resistente a todas las concentraciones de acetona en agua a temperaturas cercanas a los 20°C¹⁹¹. Las tablas de corrosión de Matelco, FP y Alacer mas afirman que el desempeño de la acetona en acero 304 es excelente a temperatura ambiente. Por lo que el producto de la reacción no afecta el material del banco de reactores bajo las condiciones en las que se da la reacción.

➤ **Consideraciones de seguridad en el manejo de las sustancias.** El alcohol diacetona es inflamable, y los vapores pueden formar mezclas explosivas con el aire (no manejar por encima de 58°C¹⁹²), se descompone térmicamente en productos inflamables y tóxicos (monóxido de carbono)^{192 193}. Además, puede haber aumento de la presión interna de los recipientes y estanques expuestos al fuego de calor, con riesgo de explosión¹⁹⁴. Usar equipo de protección individual: gafas de seguridad herméticas para productos químicos, botas, guantes, y delantal impermeables, y protección respiratoria adecuada, evitando el contacto con la piel, ojos, mucosas y tracto respiratorio, y garantizando una buena ventilación en el sitio de experimentación (proveer ventilación local de extracción donde sea necesario)¹⁹⁵. Con respecto a las condiciones de almacenamiento, se debe almacenar en un lugar limpio y bien ventilado, evitando proximidad de fuentes de calor, y materiales incompatibles (ácido sulfúrico, ácido clorhídrico, ácido oxálico, yodo, bases, anhídrido acético, peróxido de hidrogeno¹⁹⁶), además el piso del almacén debe ser impermeable y no combustible¹⁹⁷. Dentro de los materiales recomendados se encuentra el acero inoxidable 304, y como materiales inadecuados para almacenamiento se tienen a la mayoría de los plásticos¹⁹⁸. Se

¹⁹⁰ CAMLAB. Corrosion chart [En línea]. Introduction to stainless Steel. Op., cit. p. 2.

¹⁹¹ SRC. Tablas de corrosión de acero inoxidable [En línea]. Op., cit. p. 1

¹⁹² COR QUIMICA. Ficha de datos de seguridad: Alcohol diacetona [En línea]. Abril de 2005. p. 2-3. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://cor.es/eng/pdf/disolventes/DIACETONA%20ALCOHOL.pdf>

¹⁹³ QUIMIDROGA S.A. Ficha de datos de seguridad: Alcohol diacetona [En línea]. Marzo de 2011. p. 2. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.ecosmep.com/cabecera/upload/fichas/7089.pdf>

¹⁹⁴ GTM. Hoja de datos de seguridad: Alcohol diacetona [En línea]. Agosto de 2014. p. 4. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.gtm.net/images/industrial/d/DIACETONA%20ALCOHOL.pdf>

¹⁹⁵ *Ibid.*, p. 5-6.

¹⁹⁶ QUIMIDROGA S.A. Ficha de datos de seguridad: Alcohol diacetona [En línea]. Op, cit. p. 4.

¹⁹⁷ GTM. Hoja de datos de seguridad: Alcohol diacetona. Op., cit. p 6. sección "ALMACENAMIENTO".

¹⁹⁸ COR QUIMICA. Ficha de datos de seguridad: Alcohol diacetona [En línea]. Op, cit. p. 3

pueden revisar las medidas de primeros auxilios en las hojas de datos de seguridad del alcohol diacetona que aparecen la bibliografía o en las notas de pie de página.

En relación con el hidróxido de sodio, las consideraciones de seguridad se encuentran en el factor de seguridad para la reacción de saponificación de acetato de etilo. Para mayor información se pueden revisar las hojas de datos de seguridad del hidróxido de sodio mencionadas en la bibliografía o en las notas de pie de página.

Con respecto al producto de reacción, los líquidos y vapores de acetona son muy inflamables¹⁹⁹(se debe evitar las chispas, no producir chispas, no fumar, y como medio de extinción en caso de incendio se debe usar espuma resistente al alcohol, agua en grandes cantidades o dióxido de carbono), las mezclas vapor-aire son explosivas (usar un sistema cerrado, con ventilación, no utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular, y utilizar herramientas manuales no generadoras de chispas)²⁰⁰. El recipiente sometido a calor puede explotar inesperadamente, y proyectar fragmentos peligrosos²⁰¹. Prohibido comer, beber, o fumar durante su manipulación, así como evitar el contacto con la piel, ojos, y ropa, usando guantes de protección, gafas de seguridad, y protección respiratoria, garantizando una ventilación continua, o extracción localizada²⁰². Con respecto al almacenamiento, se debe hacer en un área limpia, seca, y bien ventilada, protegiendo del sol, y manteniendo lejos de oxidantes fuertes como ácido acético, ácido nítrico y peróxido de hidrogeno (reacciona para formar peróxidos explosivos), almacenando a temperaturas no mayores de 38°C²⁰³ ²⁰⁴. Las fichas de seguridad de INSHT indican que reacciona con cloroformo y bromo formo en medio básico, originando peligro de incendio y explosión, y también advierten que la acetona ataca los plásticos. Se pueden revisar las medidas de primeros auxilios en las hojas de datos de seguridad de la acetona que aparecen la bibliografía o en las notas de pie de página. En la tabla 61, se muestran las indicaciones de peligro y pictogramas de las sustancias mencionadas según el sistema globalmente armonizado de clasificación y etiquetado.

¹⁹⁹ GTM. Hoja de datos de seguridad: Acetona [En línea]. Octubre de 2016. p. 2. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.gtm.net/images/industrial/d/DIACETONA%20ALCOHOL.pdf>

²⁰⁰ INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Acetona [En línea]. Abril del 2009. p. 1. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/0a100/ns pn0087.pdf>

²⁰¹ GTM. Hoja de datos de seguridad: Acetona [En línea]. Op, cit. p. 3.

²⁰² INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Acetona. Op., cit. p. 1. sección "EXPOSICION".

²⁰³ *Ibíd.* p. 4.

²⁰⁴ INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Acetona [En línea]. Op., cit. p. 2.

Tabla 61. Indicaciones de peligro y pictogramas de las sustancias involucradas en la descomposición de alcohol diacetona según la SGA.

Sustancia	Pictograma	Indicaciones de peligro
Alcohol diacetona		Líquidos y vapores muy inflamables, y provoca irritación ocular grave.
Acetona		Líquidos y vapores muy inflamables, provoca irritación ocular grave, puede provocar somnolencia o vértigo.

Fuente: Elaboración propia basado en MERCK. Disponible en internet: <https://www.merckmillipore.com/CO/es>

Para las indicaciones y pictogramas del hidróxido de sodio y agua destilada revisar la tabla 56.

➤ **Consideraciones en la disposición de residuos.** El alcohol de diacetona no presenta peligro particular para el medio ambiente, a menos que se descomponga en gases tóxicos como dióxido de carbono y monóxido de carbono²⁰⁵, evitando que el producto llegue a cursos hídricos, rejillas o sistemas de alcantarillado²⁰⁶. Con respecto al hidróxido de sodio, las consideraciones de disposición ambiental se encuentran en la sección de factor ambiental de la saponificación de acetato de etilo.

Con respecto al producto de reacción, se debe evitar la entrada de acetona a cursos hídricos, alcantarillas, sótanos, o áreas confinadas no controladas²⁰⁷.

➤ **Interés académico de la reacción.** Se hace referencia a la reacción de descomposición de alcohol diacetona en el libro de “Introducción al análisis en ingeniería química” de Russell y Denn, con el fin de explicar el concepto de una reacción de pseudo-primer orden basándose en el hecho de que en la reacción se necesita de una segunda especie, además del reactivo, que permita que se lleve a cabo la reacción sin consumirse, actuando como catalizador, a concentración constante durante la reacción.

➤ **Interés industrial de la reacción.** Realmente no existe un interés industrial de la reacción, debido a que la producción de acetona, se hace mayoritariamente con el proceso de hidrolisis acida del hidroperóxido de cumeno, teniendo además como co-producto, fenol. Se puede evaluar la posibilidad de usar la reacción para reutilizar el alcohol diacetona sobrante o residuo en un proceso químico, para generar acetona si se considera factible económicamente.

²⁰⁵ GTM. Hoja de datos de seguridad: Alcohol diacetona [En línea]. Op., cit p. 2, 9.

²⁰⁶ *Ibid.*, p. 5.

²⁰⁷ GTM. Hoja de datos de seguridad: Acetona [En línea]. Op., cit p. 4.

- **Interés en investigación de la reacción.** Los trabajos en investigación encontrados acerca de la reacción datan de hace más de 80 años, donde los autores se enfocaban en analizar el efecto que tenía sobre la velocidad de reacción el cambio en el uso del disolvente; en vez de agua, emplear solventes orgánicos como metanol, etanol, alcohol isopropílico, glicerina, entre otros; teniendo los mejores resultados de velocidad de reacción con alcohol isopropílico, ya que se obtuvieron los mayores valores de velocidad de reacción, usando la menor cantidad de solvente²⁰⁸. Akerlof y Miller indican que la reacción se puede utilizar para determinar las constantes de disociación de bases débiles²⁰⁹.
- **Precio de los reactivos y catalizador.** El precio por litro de alcohol diacetona puede estar cerca de los 308000 Pesos colombianos (COP)²¹⁰. Las consideraciones económicas se encuentran en la reacción de saponificación de acetato de etilo con respecto al precio del hidróxido de sodio.
- **Selección del reactor.** Como en la bibliografía solamente se encontró el desempeño del alcohol diacetona en sistemas intermitentes, a temperaturas de entre 20 a 40°C, y se desconoce del comportamiento en sistemas continuos, se escogerá el modo de operación por lotes, con el fin de poder estudiar la cinética de pseudo-primer orden.

También se sugiere el modo de operación en semi-batch, ya que se opera a concentraciones diluidas de alcohol diacetona, con el fin de modelar un sistema que se acerque a la idealidad, cargando la solución de alcohol diacetona diluida al reactor en primera instancia, para posteriormente alimentar una solución de NaOH en pequeñas cantidades, con el juego de válvulas adecuado (solamente abierta la válvula a la entrada del reactor).

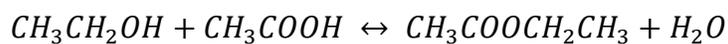
Para todos los casos se puede seguir el avance de reacción por el cambio de volumen de la masa reaccionante, usando los indicadores de nivel con los que cuenta el banco de reactores de tanque agitado.

2.6.5.4 Esterificación de ácido acético con etanol en medio de ácido metanosulfónico. Ácido acético reacciona con etanol para formar acetato de etilo y agua en medio ácido:

²⁰⁸ AKERLOF, Gosta. Decomposition of diacetone alcohol by sodium hydroxide in water mixtures of organic solvents. *Journal of the American Chemical Society*. 50(5), p. 1272- 1275. DOI:10.1021/ja01392a006

²⁰⁹ MILLER, J. G., & KILPATRICK, M. Basic catalysis in the decomposition of diacetone alcohol. *Journal of the American Chemical Society*, 53(9), 1931, p. 3217–3224. doi:10.1021/ja01360a003

²¹⁰ MERCK. Substituted Alcohols: 4-Hidroxí-4-metil-2-pentanona [En línea]. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: http://www.merckmillipore.com/CO/es/product/4-Hydroxy-4-methyl-2-pentanone,MDA_CHEM-804512



Ec. 44

La reacción se lleva a cabo en fase líquida, generalmente en presencia de ácido sulfúrico, pero debido al material de construcción del banco de reactores, se propone el uso de ácido metanosulfónico que es un ácido menos corrosivo²¹¹. Según la bibliografía, la reacción se puede llevar a cabo entre 45°C y 75°C, siendo exotérmica y reversible²¹².

➤ **Resistencia química del material.** Como se indicó previamente, el acero 304 no sufre ataque de ácido acético, debido a que es un ácido débil y no se disocia por completo, pudiendo utilizarse concentrado hasta temperaturas de 70°C, lo cual está soportado en las tablas de corrosión de SRC.

Con respecto al etanol, según las tablas de corrosión, el material de construcción del banco de reactores es resistente en el rango de temperaturas de 20°C a la temperatura de ebullición del alcohol.

En la relación a los productos de la reacción, como se indicó en la reacción de saponificación de acetato de etilo, los iones de acetato de etilo no son agresivos en el rango de temperaturas de la reacción.

Con respecto al agua, como se indicó en el inciso de resistencia del material de construcción a diversos medios, se debe prestar atención a su contenido en cloruros. Sin embargo, la reacción se lleva a cabo en ausencia de iones de cloro, por lo que el acero 304 no sufrirá ataque por el agua generada en la reacción de esterificación.

Por otro lado, el ácido metanosulfónico como catalizador en esterificaciones ha demostrado ser un 40% menos corrosivo con respecto al ácido p-tolueno sulfónico, y 20 veces menos corrosivo que el ácido sulfúrico²¹³. Además, Finšgar y Milosev emplearon pruebas de corrosión de ácido metanosulfónico en diferentes tipos de aceros inoxidable, dentro de los cuales se encuentra el de tipo 304, concluyendo

²¹¹ DURAN, Jairo. Esterificación del alcohol isoamílico con ácido N-butírico: estudio del equilibrio químico y de fases [En línea]. Proyecto de grado para optar por el título de Magister en Ingeniería Química. Universidad Nacional de Colombia, Facultad de ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Bogotá, 2013. p. 15. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <http://bdigital.unal.edu.co/11638/1/300195.2013.pdf>

²¹² MANJARE, Manisha. et. al. ESTERIFICATION REACTION OF ACETIC ACID AND ETHANOL WITH H₂SO₄: BATCH KINETICS AND SIMULATION APPROACH [En línea]. International Journal of Advanced Technology in Engineering and Science. vol. no 3, special issue no 01, Noviembre de 2015. p. 74 [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: http://www.ijates.com/images/short_pdf/1446731325_144D.pdf

²¹³ ATOCHEM. MSA Catalyzed Esterification [En línea]. Chemical & Engineering news, Thiopics, 1991, p. 9-10. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <https://cdn-pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/cen-v069n019.p009>

que es resistente contra la corrosión uniforme y localizada, siempre y cuando las soluciones de ácido metanosulfónico no contenga impurezas como cloruros y sulfatos²¹⁴.

➤ **Consideraciones de seguridad en el manejo de las sustancias.** Las consideraciones de seguridad del ácido acético, se encuentran en el inciso de seguridad del ácido acético en la reacción de hidrolisis de anhídrido acético. Se pueden revisar las hojas de seguridad para el ácido acético dispuestas en la bibliografía o en las notas de pie de página. Las consideraciones de seguridad con respecto al etanol, se encuentran en el inciso de seguridad del etanol en la reacción de saponificación de acetato de etilo. Para mayor información, se pueden revisar las hojas de seguridad del etanol que se encuentran en la bibliografía o en las notas de pie de página.

Por el lado de los productos de reacción, las consideraciones de seguridad del acetato de etilo, se encuentran en el inciso de seguridad del acetato de etilo, en la reacción de saponificación de acetato de etilo. Para mayor información se pueden revisar las hojas de datos de seguridad del acetato de etilo dispuestas en la bibliografía y las notas de pie de página. Con respecto al agua, las consideraciones de seguridad se encuentran en el inciso de seguridad del agua en la reacción de hidrolisis de anhídrido acético. Para mayor información se pueden revisar las hojas de datos de seguridad del agua que se encuentran en la bibliografía y en las notas de pie de página.

En la tabla 62, se muestran las indicaciones de peligro y pictogramas para el ácido metanosulfónico según el sistema globalmente armonizado de clasificación de etiquetado. Para el ácido acético revisar la tabla 60, para etanol y agua destilada la tabla 56.

Tabla 62. Indicaciones de peligro y pictogramas para el ácido metanosulfónico según la SGA.

Sustancia	Pictograma	Indicaciones de peligro
Ácido metanosulfónico		Puede ser corrosivo para los metales, nocivo en caso de ingestión y contacto, puede irritar las vías respiratorias, provoca graves quemaduras en la piel y lesiones oculares.

Fuente: Elaboración propia basado en MERCK. Disponible en internet: <https://www.merckmillipore.com/CO/es>

²¹⁴ FINŠGAR, M. y MILOŠEV. Corrosion behaviour of stainless steels in aqueous solutions of methanesulfonic acid. *Corrosion Science*, 52(7), 2430–2438. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. DOI:10.1016/j.corsci.2010.04.001

El ácido metanosulfónico es combustible, siendo los vapores más pesados que el aire, y en caso de incendio pueden formarse vapores tóxicos, liberándose óxidos de azufre²¹⁵. Además, puede ser corrosivo para los metales, nocivo en contacto con la piel (provoca graves quemaduras), puede irritar las vías respiratorias (en caso de ingestión), y puede propiciar lesiones oculares, por lo que se recomienda manipular con el uso de guantes, indumentaria, y gafas de seguridad, así como protección facial²¹⁶. En caso de derrame utilizar absorbentes como arena, aserrín, aglutinante universal y/o aglutinante de ácidos; utilizar neutralizador, y asegurar una ventilación constante²¹⁷. Con respecto a la manipulación y almacenamiento seguro, se debe mantener en un depósito herméticamente cerrado, en un ambiente seco y fresco, asegurando suficiente ventilación en el puesto de trabajo; no se debe almacenar con agua y oxidantes fuertes, y se debe mantener alejado de bases fuertes, almacenando bajo gas inerte seco, a temperaturas entre 15 y 25°C y con acceso permitido solamente a profesionales o personal autorizado²¹⁷. Los materiales adecuados para su almacenamiento son acero inoxidable 304L, acero inoxidable 316, y polietileno de alta densidad²¹⁸.

➤ **Consideraciones en la disposición de residuos.** La información con respecto a las consideraciones hacia el medio ambiente del ácido acético se puede encontrar en el inciso de factor ambiental en la reacción de hidrólisis de anhídrido acético.

La información con respecto a las consideraciones hacia el medio ambiente del etanol se puede encontrar en el inciso de factor ambiental en la reacción de saponificación de acetato de etilo.

La información con respecto a las consideraciones hacia el medio ambiente del acetato de etilo se puede encontrar en el inciso de factor ambiental en la reacción de saponificación de acetato de etilo.

La información con respecto a las consideraciones hacia el medio ambiente del agua se puede encontrar en el inciso de factor ambiental en la reacción de hidrólisis de anhídrido acético.

²¹⁵ APPLICHEM. Ficha de datos de seguridad: Acido Metanosulfónico [en línea]. Junio de 2015, p. 2. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: https://www.applichem.com/fileadmin/datenblaetter/A7524_es_ES.pdf

²¹⁶ BASF. Hoja de seguridad: Acido Metanosulfónico [en línea]. Mayo de 2015, p. 2. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: https://worldaccount.basf.com/wa/NAFTA/Catalog/ChemicalsNAFTA/doc4/BASF/PRD/30169062/.pdf?asset_type=msds/pdf&language=ES&validArea=MX&urn=urn:documentum:ProductBase_EU:09007af8803fe554.pdf

²¹⁷ TERMOFISHER. Ficha de datos de seguridad: Acido Metanosulfónico [En línea]. Junio de 2018, p. 2. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <https://www.alfa.com/es/content/msds/SouthAmerican/L04538.PDF>

²¹⁸ BASF. Hoja de seguridad: Acido Metanosulfónico [en línea]. Op., cit. p. 3.

En relación al catalizador, ácido metanosulfónico, se recomienda retener las aguas contaminadas, incluida el agua de extinción de incendios, en caso de estar contaminada; se debe evitar verter por el alcantarillado, aguas superficiales o subterráneas ya que es peligroso para el medio ambiente acuático²¹⁹.

➤ **Interés académico de la reacción.** Es una reacción reversible de la cual se puede estudiar el equilibrio químico en reacciones en fase líquida. Se pueden aplicar los conceptos comprendidos en clase del principio de Le Chatelier, determinando los factores que afectan el equilibrio químico de la reacción de esterificación de ácido acético y etanol. Por otro lado, puede estudiarse la cinética de una reacción reversible de segundo orden.

➤ **Interés industrial de la reacción.** El acetato de etilo es el producto de interés de la reacción, el cual es un solvente orgánico que se aplica en la industria de recubrimientos de superficies, saborizantes, tintas, resinas sintéticas, quita esmaltes, agentes adhesivos, etc. siendo factible su utilización por bajo costo, baja toxicidad y olor agradable²²⁰. Además, el uso de ácido metanosulfónico puede ser de gran interés en la industria, en la obtención de acetato de etilo, debido a que resulta menos peligroso con respecto al uso de ácido sulfúrico como catalizador homogéneo²²¹.

➤ **Interés en investigación de la reacción.** En la producción de acetatos se estudia el comportamiento de la reacción de esterificación bajo catálisis ácida de resinas de intercambio iónico. Gangadwala et. al.²²², llevaron a cabo un estudio de la reacción de esterificación de ácido acético con n-butanol usando una resina ácida denominada Amberlyst-15. Orjuela et. al.²²³, llevaron a cabo la síntesis de acetato de butilo usando una resina de intercambio iónico denominada Lewatit K-3432. De Silva et. al.²²⁴ realizaron la esterificación de ácido acético con etanol usando una resina de intercambio iónico de bajo costo, denominada Trilite SCR-B. En estos

²¹⁹ *Ibíd.*, p. 4, 10.

²²⁰ SERNA, Sebastian. et. al, Evaluación tecno-económica y ambiental de la producción de acetato de etilo por vía química y biológica [En línea]. Revista de la facultad de ciencias químicas, 2015. p. 22, 23. [Consultado: 03 de agosto de 2018]. Disponible en internet: http://dspace.ucuenca.edu.ec/bitstream/123456789/23891/1/3_articulo_Revista_13.pdf

²²¹ ATOCHEM. MSA Catalyzed Esterification [En línea]. Op. cit. p. 1.

²²² GANGADWALA, Jignesh et. al. Esterification of Acetic Acid with Butanol in the Presence of Ion-Exchange Resins as Catalysts. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 2003 42 (10), 2146-2155. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. DOI: 10.1021/ie0204989

²²³ ORJUELA LONDONO, Álvaro et al. Estudio de la síntesis de acetato de butilo: 4- Cinética de reacción. *Ing. Investig.* [En línea]. 2006, vol.26, n.2 p.28-36 [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0120-56092006000200004&lng=en&nrm=iso. ISSN 0120-5609.

²²⁴ E.C.L De Silva. Heterogeneous Kinetic Study for Esterification of Acetic Acid with Ethanol [En línea]. *ENGINEER* - Vol. XLVII, No. 01, pp. [9-15], 2014. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <https://engineer.sjlo.info/articles/10.4038/engineer.v47i1.6855/galley/5345/download/>

casos, la cinética de la reacción siguió el modelo de Langmuir – Hinshelwood – Hougen – Watson (LHHW).

➤ **Precio de los reactivos y catalizador.** El precio por litro de ácido acético por litro para un proveedor específico es de 107000 COP²²⁵. El precio de medio litro de etanol es cercano a 81000 COP²²⁶. El precio de ácido metanosulfónico por litro, en una pureza del 70% en agua es de cerca de 460,000.00 pesos colombianos²²⁷.

➤ **Selección del reactor.** La reacción se puede llevar a cabo en los reactores batch de 1 L o 3 L del banco de reactores de tanque agitado, con el fin de estudiar la cinética de la reacción. Por otro lado, se puede llevar a cabo en el mismo banco pero operando de manera continua con el fin de evaluar el nivel de conversión en un reactor CSTR de 1 L o 3 L o una secuencia de reactores CSTR de 1 L, cambiando los flujos de alimentación inicial, y la temperatura de operación.

2.7 RESISTENCIA QUÍMICA DEL MATERIAL DE LOS EMPAQUES

El tipo de material de los empaques de las tuberías, y accesorios del banco de reactores, son:

- EPDM, de las tuberías de las líneas de flujo de los reactivos, productos y agua.
- Viton, de las tuberías de la línea de flujo del aceite.
- PTFE, de las uniones clamp de las tuberías.

Con respecto a la resistencia química, de las 9 sustancias involucradas en las reacciones químicas seleccionadas, el anhídrido acético es la única sustancia que tiene un efecto menor sobre el empaque EPDM²²⁸. Por esa razón, se sugiere no operar en modo continuo con el sistema reactivo; hidrólisis de anhídrido acético. Para los demás casos, la resistencia química de EPDM y PTFE es satisfactoria, lo cual se puede soportar en las tablas de resistencia química de la bibliografía.

²²⁵ MERCK. Coupling Reagents and Additives: Ácido acético 99-100% [En línea]. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: http://www.merckmillipore.com/CO/es/product/Acetic-acid-99-1000-0,MDA_CHEM-818755

²²⁶ MERCK. Solvents for Lab Applications EMPLURA: Etanol [En línea]. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: http://www.merckmillipore.com/CO/es/product/Ethanol,MDA_CHEM-818760

²²⁷ MERCK. Sulfonic Acid Esters and Salts: Ácido metanosulfónico [En línea]. [Consultado: 06 de febrero de 2019]. Disponible en internet: http://www.merckmillipore.com/CO/es/product/Methanesulfonic-acid,MDA_CHEM-814637

²²⁸ PROINDECSA. Tabla de resistencia química [En línea]. [Consultado: 23 de noviembre de 2018]. Disponible en internet: <https://studylib.es/doc/4468207/tabla-de-resistencia-química>

3. DESARROLLO DE UN MODELO MATEMÁTICO PARA SIMULAR EL FUNCIONAMIENTO DEL BANCO DE REACTORES DE LA PLANTA PILOTO

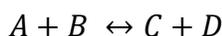
Para desarrollar un modelo matemático del banco de reactores, se escogió una de las reacciones propuestas en el capítulo 2. La saponificación de acetato de etilo es la reacción que se seleccionó, porque es el sistema reactivo que bajo las condiciones de operación de Bogotá, puede operarse en la mayor cantidad de reactores sin afectar el material de construcción del banco, y de los empaques de las tuberías. Además, los reactivos son los menos costosos y existe bastante información de la reacción con respecto a sus parámetros cinéticos, condiciones de operación y corridas experimentales en distintos reactores.

El desarrollo del capítulo está delimitado a obtener y resolver los modelos matemáticos de los reactores CSTR (R-103, y R-104), secuencia CSTR (R-101, R-102, y R-103), y reactor por lotes (R-103, y R-104), en operación isotérmica y, sin el uso de fluidos de servicio o en operación adiabática. Para el reactor tubular (R-105 y R-108), se resolvió el modelo matemático correspondiente para operación adiabática. Posteriormente, se llevó a cabo la simulación en Aspen Plus, para comparar los resultados calculados y los del simulador.

Se desconoce información con respecto a la longitud de los tramos de tuberías entre unidades, la cantidad y tipo de accesorios que generan pérdidas de energía, área de transferencia de calor en los intercambiadores de calor y el área de transferencia de calor de las chaquetas térmicas de los reactores, por lo que no se tuvieron en cuenta en el modelo matemático.

3.1 PARÁMETROS DEL MODELO

La ecuación química de la reacción seleccionada corresponde a la ecuación 39. Para simplificar el desarrollo del modelo, se asignó a cada sustancia una letra de identificación.



Donde hidróxido de sodio (A), reacciona con acetato de etilo (B) en solución acuosa. Los productos de la reacción son acetato de sodio (C), y etanol (D). Para el desarrollo del modelo se consideró la carga energética del agua (W).

3.1.1 Ley de velocidad. La expresión de la ley de velocidad de la saponificación de acetato de etilo es²²⁹

²²⁹ FOGLER, H. Scott. Op., cit. p. 550.

$$-r_A = k \left(C_A C_B - \frac{C_C C_D}{K_C} \right) \quad \text{Ec. 45}$$

Donde $-r_A$ es la velocidad de desaparición de hidróxido de sodio (que es equivalente a la velocidad de desaparición del acetato de etilo (B), debido a la estequiometría de la reacción, y cuyas unidades son mol/L s), k es la constante de velocidad específica de la reacción directa (cuyas unidades son L/mol s), K_C es la constante de equilibrio de la reacción, y C_A , C_B , C_C , y C_D , son la concentración de acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio, y etanol, respectivamente (cuyas unidades son mol/L o M). La constante de velocidad específica, viene dada por la ecuación de Arrhenius que es de la forma

$$k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} \quad \text{Ec. 46}$$

Donde k_0 es el factor de frecuencia (de unidades L/mol s), E es la energía de activación (kJ/kmol), R es la constante de los gases ideales (8.3145 kJ/kmol K), y T es la temperatura (K) en una posición espacial determinada dentro del reactor. Los parámetros de factor de frecuencia, y energía de activación, se determinan experimentalmente para una temperatura dada. A continuación, se muestran los valores reportados por diferentes autores.

Tabla 63. Parámetros cinéticos de la saponificación de acetato de etilo reportados por distintas fuentes bibliográficas.

Autor	k_0 (l mol⁻¹s⁻¹) * 10⁻⁶	E (kJ/kmol)
Villiermaux ^a	3.05	43300
Fogler	3.28	45500
Acosta y Perez	3.50	44900
Wijayarathne et al	2.19	41400

a) En Balland et al. A genetic algorithm with decimal coding for the estimation of kinetic and energetic parameters, 1999. b) FOGLER, H. Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas, 2008. c) ACOSTA, Jair y PEREZ, Rolando. Estudio experimental y simulación de la saponificación del acetato de etilo en tres reactores CSTR en serie, 2012. d) WIJAYARATHNE et al. Aspen Plus Simulation of Saponification of Ethyl Acetate in the Presence of Sodium Hydroxide in a Plug Flow Reactor, 2014.

Los parámetros que se utilizaron para el desarrollo de los modelos fueron las utilizadas por Acosta y Pérez, debido a que desarrolla experimentalmente y en simulación, la saponificación de acetato de etilo en una secuencia de 3 reactores CSTR de 1 litro, similar a la secuencia del banco de reactores de tanques agitados de la Fundación Universidad América. Se extendió dicha elección para el reactor tubular, y modo lotes para comparar los niveles de conversión.

La constante de equilibrio viene dada por la expresión²³⁰

$$K_c = 10^{\frac{3885,44}{T}} \quad \text{Ec. 47}$$

Bajo las condiciones de operación de Bogotá, la constante de equilibrio tiende a infinito, lo que significa que la reacción se desarrolla en un solo sentido, de reactivos a productos. Para el desarrollo del modelo matemático, se utilizó la constante de equilibrio debido a que las expresiones que se desarrollaron pueden llegar a utilizarse en futuros proyectos bajo las condiciones en que la saponificación de acetato de etilo es una reacción reversible. Sin embargo, para la simulación del proceso en Aspen Plus, se especificó la reacción en un solo sentido bajo una ley de potencias de segundo orden global, debido a que la simulación se desarrolló bajo las condiciones de temperatura y presión de Bogotá.

3.1.2 Condiciones iniciales y de alimentación. Se seleccionaron las condiciones de operación de Bogotá. Para el modo de operación continuo, se pueden revisar en la tabla 64.

Tabla 64. Condiciones de alimentación para la saponificación de acetato de etilo en reactores de flujo.

Parámetro	Valor
Temperatura (°C)	16
Presión (mm Hg)	560
C _{A0} (M)	0.007
C _{B0} (M)	0.07
C _{W0} (M)	55.1
Velocidad de flujo volumétrico de alimentación (l/h)	20

Fuente: Basado en ACOSTA, Jair y PEREZ, Rolando. Estudio experimental y simulación de la saponificación del acetato de etilo en tres reactores CSTR en serie, 2012.

Donde C_{A0}, C_{B0} y C_{W0} son las concentraciones iniciales del hidróxido de sodio, acetato de etilo y agua en la corriente de alimentación. Como la saponificación de acetato de etilo es una reacción en fase líquida, la presión no tiene efecto sobre la velocidad de reacción, ni la conversión de los reactivos. La velocidad de flujo volumétrico de 20 l/h se puede lograr usando las bombas dosificadoras P-101, y/o P-102, ya que el valor de caudal seleccionado no supera el límite máximo permitido de flujo volumétrico. La velocidad de flujo volumétrico se pasó a l/s con el fin de hacer consistente el desarrollo del modelo matemático.

Para las condiciones iniciales del reactor por lotes, se escogieron los siguientes parámetros:

²³⁰ FOGLER, H. Scott. Op., cit. p. 549.

Tabla 65. Condiciones iniciales de carga de la saponificación de acetato de etilo en el reactor por lotes.

Parámetro	Valor
Temperatura (°C)	16
Presión (mm Hg)	560
C_{A0} (M)	0.1
C_{B0} (M)	0.1
C_{W0} (M)	54.8

Fuente: Basado en a) NUÑEZ, José y UDEOS Teresa. Diseño, construcción y operación de un reactor batch para saponificar acetato de etilo, 2012. b) ABDALLA, Arman. Saponification: A Comparative Kinetic Study in a Batch Reactor, 2010.

Se encontró que distintos autores utilizan cantidades equimolares de los reactivos para sistemas por lotes, con el fin de simplificar el análisis de datos, con concentraciones de cerca de 0.1 M, como Núñez & Udeos, y Abdalla, por lo que se usó dicho valor para las concentraciones iniciales de los reactivos. La forma en que se determinó la concentración de agua se muestra a continuación. En un litro de solución, la cantidad de moles de hidróxido de sodio (N_{A0}) y acetato de etilo (N_{B0}) será

$$N_{A0} = N_{B0} = 0.1 \text{ mol} \quad \text{Ec. 48}$$

Usando los valores masa molecular y la densidad reportados por Núñez & Udeos²³¹ para el agua, hidróxido de sodio y acetato de etilo, con el fin de obtener el volumen de hidróxido de sodio (V_{A0}), y acetato de etilo (V_{B0}) requerido para la solución acuosa de 1 L

$$V_{A0} = 0.1 \text{ mol} * \frac{40.0 \text{ g}}{1 \text{ mol}} * \frac{1.00 \text{ ml}}{2.13 \text{ g}} = 1.8779 \text{ ml NaOH} \quad \text{Ec. 49}$$

$$V_{B0} = 0.1 \text{ mol} * \frac{88.11 \text{ g}}{1 \text{ mol}} * \frac{1.00 \text{ ml}}{0.902 \text{ g}} = 9.7683 \text{ ml CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3 \quad \text{Ec. 50}$$

Por tanto, el volumen de agua (V_{W0}) para completar un litro de solución, el número de moles, y concentración correspondientes será:

$$V_{W0} = 1000 - 1.8779 - 9.7683 = 988.3538 \text{ ml H}_2\text{O} \quad \text{Ec. 51}$$

²³¹ NUÑEZ, José y UDEOS Teresa. Diseño, construcción y operación de un reactor batch para saponificar acetato de etilo. Trabajo de grado para optar por el título de Ingeniero Químico [En línea], Escuela Superior Politécnica del Litoral, Guayaquil, Ecuador, 2012. p. 61. [Consultado: 30 de octubre]. Disponible en internet: <http://www.dspace.espol.edu.ec/xmlui/bitstream/handle/123456789/38218/D-CD102078.pdf?sequence=-1&isAllowed=y>

$$N_{W0} = 988.3538 \text{ ml} * \frac{0.998 \text{ g}}{1 \text{ ml}} * \frac{1 \text{ mol}}{18 \text{ g}} = 54.7987 \text{ mol } H_2O \quad \text{Ec. 52}$$

$$C_{W0} = 54.7987 \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad \text{Ec. 53}$$

Sin embargo, el número de moles iniciales no será el mismo para los reactores R-103 de 1 litro de capacidad, y R-104 de tres litros de capacidad. El número de moles iniciales para cada reactor se muestra a continuación

Tabla 66. Numero de moles iniciales de carga para la saponificación de acetato de etilo a cada reactor del sistema de operación por lotes.

Componente	R-103 (1 L)	R-104 (3 L)
A	0.1	0.3
B	0.1	0.3
W	54.8	164.4

Fuente: Elaboración propia.

Los parámetros energéticos que se utilizaron para cada sustancia se muestran en la tabla 67. El cálculo de C_{PS} (capacidad calorífica promedio de la mezcla) y ΔC_P , se puede revisar en las ecuaciones 71 y 72, respectivamente.

Tabla 67. Parámetros energéticos de las sustancias para la resolución de los modelos matemáticos.

Parámetro	Valor
C_{PA} (J/mol K)	57.213 ^a
C_{PB} (J/mol K)	170.1 ^a
C_{PC} (J/mol K)	65.07 ^a
C_{PD} (J/mol K)	97.49 ^a
C_{PW} (J/mol K)	75.246 ^a
C_{PS} (J/mol K)	593606.66
ΔC_P (J/ mol K)	-65.356
ΔH°_{Rx} (J/mol)	-79076 ^b

Valores tomados de a) PERRY, Robert en NUÑEZ, José y UDEOS Teresa. Diseño, construcción y operación de un reactor batch para saponificar acetato de etilo, 2012. b) FOGLER, H. Scott. Elementos de Ingeniería de las reacciones químicas, 2008.

3.2 MODO DE OPERACIÓN CONTINUA

Se desarrollaron y resolvieron los modelos matemáticos para los reactores de 1 litro (R-103) y tres litros (R-104) del banco de reactores de tanques agitados, en modo

de operación única, la secuencia de reactores de 1 L (R-101, R-102, y R-103), para la batería de reactores CSTR, y el reactor R-108 tubular en modo de operación única.

3.2.1 Reactor continuo de mezcla perfecta (CSTR). El balance de moles se muestra a continuación (desarrollo entre ecuaciones 54 y 65). Iniciando con la ecuación general de balance

$$E - S + G = A$$

En estado estacionario para el reactor de flujo de mezcla perfecta

$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0 \quad \text{Ec. 54}$$

Donde F_{A0} , y F_A son el flujo molar de hidróxido de sodio de entrada y de salida. El flujo molar se puede expresar en términos de la velocidad de flujo volumétrico y la concentración de la especie involucrada. Para una reacción en fase líquida, el flujo molar de A, a la entrada será:

$$F_{A0} = \dot{V}_0 C_{A0} \quad \text{Ec. 55}$$

De la misma manera, para la salida del reactor:

$$F_A = \dot{V}_0 C_A \quad \text{Ec. 56}$$

Si se reemplazan las ecuaciones 55 y 56, en el balance molar (Ec. 54), se obtiene:

$$\dot{V}_0 C_{A0} - \dot{V}_0 C_A + r_A V = 0 \quad \text{Ec. 57}$$

Si se divide entre la velocidad de flujo volumétrico

$$C_{A0} - C_A + r_A \frac{V}{\dot{V}_0} = 0 \quad \text{Ec. 58}$$

Introduciendo el tiempo de residencia τ , el cual es el cociente entre el volumen de reacción y la velocidad de flujo volumétrico de alimentación de los reactivos, quedara expresado

$$C_{A0} - C_A + r_A \tau = 0 \quad \text{Ec. 59}$$

Reemplazando en la ecuación 59, la expresión de la ley de velocidad se obtiene

$$C_{A0} - C_A - k \left(C_A C_B - \frac{C_C C_D}{K_C} \right) \tau = 0 \quad \text{Ec. 60}$$

Bajo las condiciones de alimentación, el hidróxido de sodio es el reactivo limitante. A continuación, se realiza una tabla estequiometrica para expresar las concentraciones de los reactivos y productos, en términos de la concentración inicial, y la conversión del reactivo limitante (X).

Tabla 68. Tabla estequiometrica de la saponificación de acetato de etilo con el hidróxido de sodio como reactivo limitante.

Especie	t = 0	t = t _{reaccion}
A	C _{A0}	C _A =C _{A0} (1-X)
B	C _{B0}	C _B =C _{A0} (θ _B -X)
C	C _{C0}	C _C =C _{A0} (θ _C +X)
D	C _{D0}	C _D =C _{A0} (θ _D +X)

Fuente: Elaboración propia.

Donde t es el tiempo, y los parámetros θ adimensionales se expresan como sigue

$$\theta_B = \frac{C_{B0}}{C_{A0}} \quad \text{Ec. 61}$$

$$\theta_C = \frac{C_{C0}}{C_{A0}} \quad \text{Ec. 62}$$

$$\theta_D = \frac{C_{D0}}{C_{A0}} \quad \text{Ec. 63}$$

La ley de velocidad en términos de la conversión será

$$-r_A = kC_{A0}^2 \left((1-X)(\theta_B - X) - \frac{(\theta_C + X)(\theta_D + X)}{K_C} \right) \quad \text{Ec. 64}$$

Reemplazando en la ecuación 60 los parámetros y ecuaciones de la tabla estequiometrica, se obtiene la siguiente ecuación cuadrática de la conversión

$$(1 - K_C)X^2 + \left(\frac{K_C}{\tau k C_{A0}} + K_C(1 + \theta_B) + \theta_C + \theta_D \right) X + (\theta_C \theta_D - K_C \theta_B) = 0 \quad \text{Ec. 65}$$

De la ecuación 65, la única variable desconocida es la conversión, ya que los demás parámetros se especificaron en la sección "3.1.2". Para resolver la ecuación cuadrática se define

$$a = (1 - K_C) \quad \text{Ec. 66}$$

$$b = \frac{K_C}{\tau k C_{A0}} + K_C(1 + \theta_B) + \theta_C + \theta_D \quad \text{Ec. 67}$$

$$c = \theta_C \theta_D - K_C \theta_B \quad \text{Ec. 68}$$

La conversión se obtiene mediante

$$X = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad \text{Ec. 69}$$

Cabe mencionar que se descartó la raíz que genera un resultado de conversión sin sentido físico.

La ecuación resultante del balance de energía (asumiendo capacidades caloríficas constantes, sin considerar calores de mezclado) en estado estacionario es²³²

$$\dot{Q} + \dot{W}_S + F_{A0} C_{PS} (T_0 - T) - F_{A0} X (\Delta H_{Rx}^0 + \Delta C_p (T - T^0)) = 0 \quad \text{Ec. 70}$$

Donde se utiliza la convención positiva para flujos de entrada de calor y trabajo, y signos negativos para flujos de salidas de calor y trabajo del reactor. En la ecuación 70, \dot{Q} es la tasa de transferencia de calor (W) entre el volumen de reacción y un fluido de servicio que fluye por la chaqueta térmica mientras ocurre la reacción, \dot{W}_S es el trabajo del agitador en el reactor, F_{A0} es el flujo molar de hidróxido de sodio de alimentación (mol/s), T_0 es la temperatura de alimentación de los reactivos (K), T es la temperatura de salida del reactor CSTR, T^0 es la temperatura estándar (generalmente 25°C), ΔH_{Rx}^0 es la entalpia de reacción en condiciones estándar (J/mol), y C_{PS} es la capacidad calorífica promedio de la mezcla (J/mol K), definida como sigue

$$C_{PS} = \sum_{i=1}^n \theta_i C_{PI} \quad \text{Ec. 71}$$

Donde n es el número de componentes en el sistema, incluyendo inertes, y finalmente, para la saponificación de acetato de etilo

²³² FOGLER, H. Scott. Op. cit., p. 440.

$$\Delta C_p = C_{p(D)} + C_{p(C)} - C_{p(B)} - C_{p(A)} \quad \text{Ec. 72}$$

Donde ΔC_p es el cambio de capacidad calorífica de la mezcla reaccionante por mol de A que se consume, $C_{p(A)}$, $C_{p(B)}$, $C_{p(C)}$, y $C_{p(D)}$ son las capacidades caloríficas de A, B, C, y D. Se puede notar que la ecuación 72 ya es aplicable a la saponificación de acetato de etilo, debido a que incluye los coeficientes estequiométricos de los reactivos y productos de la reacción. Cabe destacar que se puede despreciar el trabajo realizado por el agitador, ya que en la saponificación de acetato de etilo no intervienen materiales altamente viscosos²³³.

3.2.1.1 Operación adiabática. El balance de materia resultante, es el presentado en la ecuación 65. Por otro lado, no existe transferencia de calor desde el reactor o hacia el reactor. Es decir, el sistema está aislado. Por tanto, el término \dot{Q} es cero en el balance de energía. Se despreciará el término de trabajo de eje del agitador como se indicó en la sección anterior. Despejando, bajo estas condiciones, la conversión de equilibrio de la ecuación 70, se obtiene

$$X = \frac{C_{pS}(T_0 - T)}{\Delta H_{Rx}^0 + \Delta C_p(T - T^0)} \quad \text{Ec. 73}$$

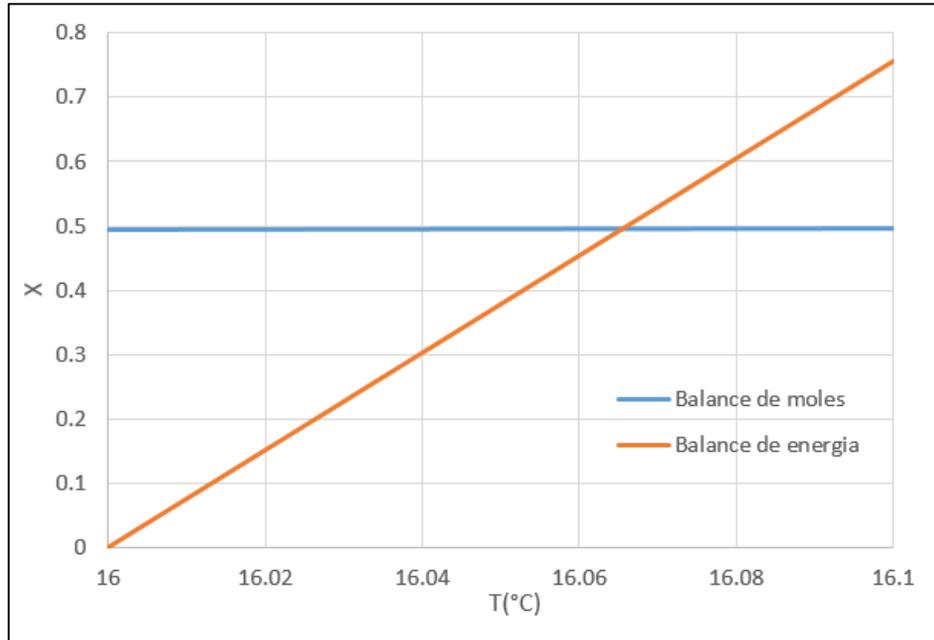
Al resolver el sistema de ecuaciones, bajo las condiciones de alimentación de la sección “3.1.2”, se obtienen los resultados para los reactores R-104 de 3 litros de capacidad y R-103 de 1 litro de capacidad, en las figuras 36 y 37, respectivamente.

Como puede notarse, la temperatura permanece casi constante debido a la cantidad de agua en exceso que tiene el sistema reactivo, que atenúa el efecto térmico de la reacción exotérmica. El resultado para el reactor R-103, de 1 litro se muestra en la figura 37. En la tabla 69, se puede revisar los resultados de conversión y temperatura adiabática para cada reactor.

La temperatura adiabática del reactor R-104 es mayor debido a que reaccionan mayor cantidad de reactivos que en R-103, lo que implica mayor liberación de calor. Será preferible realizar la saponificación de acetato de etilo en el reactor R-104 en operación adiabática, ya que se obtiene casi dos veces la conversión del reactor R-103. Otra opción es utilizar la secuencia de reactores R-101, R-102, y R-103, para obtener una conversión global mayor, como se muestra en la sección “3.2.2”.

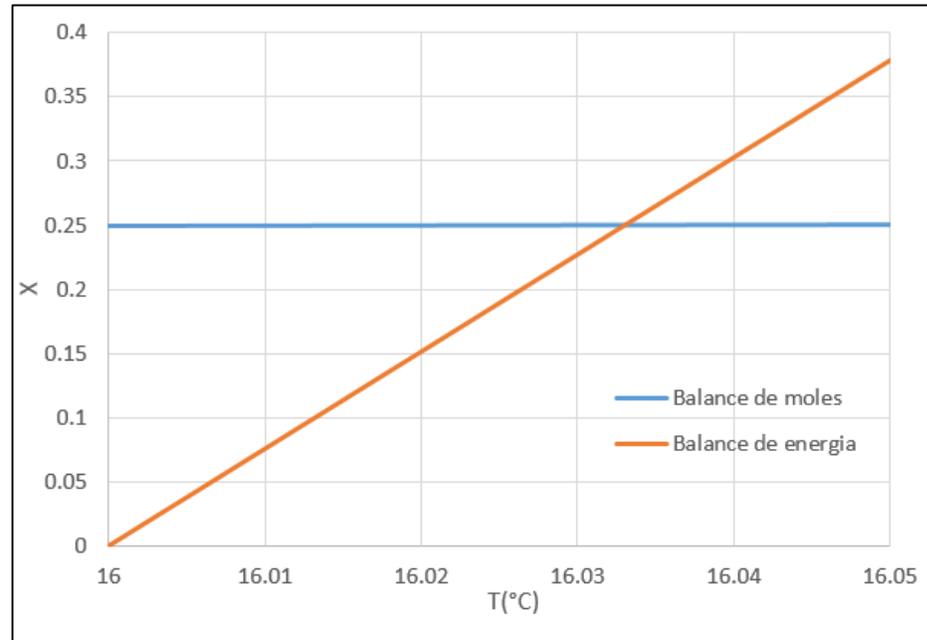
²³³ Fogler, H. Scott. Op., cit. p. 444.

Figura 36. Determinación de temperatura adiabática y la conversión de hidróxido de sodio en el reactor R-104.



Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo Excel.

Figura 37. Determinación de temperatura adiabática y la conversión de hidróxido de sodio en el reactor R-103.



Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo Excel.

Tabla 69. Resultados del modelo matemático en operación adiabática para los reactores R-103 y R-104.

Reactor	Capacidad (L)	Conversión	Temperatura adiabática (°C)
R-103	1	0.2502	16.03
R-104	3	0.4945	16.07

Fuente: Elaboración propia.

3.2.1.2 Operación isotérmica. El balance de moles resultante es el presentado en la ecuación 65. En la operación isotérmica, la temperatura del reactor se mantiene constante mediante un fluido de servicio que transita por la chaqueta térmica del reactor. Como la reacción es exotérmica, el sistema requerirá de agua de enfriamiento para retirar la cantidad de calor que mantiene la temperatura en un valor constante. Si no se tiene en cuenta el trabajo del agitador, el balance de energía resultara en

$$\dot{Q} = F_{A0}X(\Delta H_{Rx}^0 + \Delta C_p(T - T^0)) \quad \text{Ec. 74}$$

A continuación, se muestra los resultados para los reactores de 1 L, y de 3 L.

Tabla 70. Resultados para los reactores R-103 y R-104 en modo de operación continua isotérmica a 16°C.

Reactor	Conversión	Calor requerido (W)
R-103 (1 L)	0.2498	-0.7625
R-104 (3 L)	0.4934	-1.5060

Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

3.2.1.3 Operación con efectos térmicos. La ecuación correspondiente al balance de moles resultante, es la numero 65. Para el balance de energía, el termino tasa de transferencia de calor (\dot{Q}) y la temperatura de salida del refrigerante (T_{C2}) vienen dados por²³⁴

$$\dot{Q} = \dot{m}_c C_{PC} (T_{C1} - T) \left(1 - e^{\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{PC}}} \right) \quad \text{Ec. 75}$$

$$T_{C2} = T - (T - T_{C1}) e^{\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{PC}}} \quad \text{Ec. 76}$$

Donde

- m_c es el flujo másico del refrigerante (kg/s).
- C_{PC} es la capacidad calorífica del refrigerante.

²³⁴ FOGLER, H. Scott. Op., cit. p. 439.

- T_{C1} es la temperatura de entrada del refrigerante.
- T es la temperatura de la mezcla reaccionante.
- U es el coeficiente global de transferencia de calor del proceso ($W/m^2 K$).
- A es el área de transferencia de calor entre el refrigerante y el volumen de reacción.

Despejando la conversión del balance de energía se tendrá

$$X = \frac{\dot{m}_c C_{PC}(T_{C1} - T) \left(1 - e^{\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{PC}}} \right) + F_{A0} C_{PS}(T_0 - T)}{F_{A0}(\Delta H_{Rx}^0 + \Delta C_p(T - T^0))} \quad \text{Ec. 77}$$

La resolución del presente caso no entra en las delimitaciones del proyecto.

3.2.2 Secuencia de reactores continuos de mezcla perfecta (CSTR). Para este caso, los reactores R-101, R-102, y R-103, operan en secuencia. La expresión del balance de moles resultante para cada reactor es el presentado en la ecuación 65. Sin embargo, cambiarán las concentraciones de alimentación de los componentes, y los parámetros θ para cada especie en cada reactor, y la conversión (X) es la conversión específica para cada reactor. Se asumió que la velocidad de flujo volumétrico de alimentación es igual para todos los reactores.

El desarrollo para determinar la expresión de conversión global en cada reactor se muestra a continuación. La conversión individual para el reactor R-102 se determina por la ecuación 65, teniendo como condiciones de alimentación las condiciones de salida del reactor R-101. La conversión individual para el reactor 2 (X_2) se puede expresar en términos de la concentración de entrada y salida del reactivo limitante (bajo las condiciones de alimentación la reacción se lleva en fase líquida)

$$X_2 = \frac{C_{A1} - C_{A2}}{C_{A1}} \quad \text{Ec. 78}$$

Donde C_{A1} es la concentración de alimentación de hidróxido de sodio al reactor R-102, que corresponde a la concentración de salida del reactor R-101, C_{A2} es la concentración de salida de hidróxido de sodio del reactor R-102, que corresponde a la concentración de alimentación del reactor R-103. Se pueden expresar las concentraciones previamente mencionadas en términos de la concentración inicial de hidróxido de sodio (alimentación a R-101; C_{A0}), y la conversión global

$$C_{A1} = C_{A0}(1 - X_1^G) \quad \text{Ec. 79}$$

$$C_{A2} = C_{A0}(1 - X_2^G) \quad \text{Ec. 80}$$

Donde X_1^G y X_2^G son la conversión global en el reactor R-101, y la conversión global en el reactor R-102, respectivamente. Reemplazando en la ecuación 78, se obtiene la conversión individual del reactor R-102, en términos de las conversiones globales en los reactores R-101, y R-102

$$X_2 = \frac{X_2^G - X_1^G}{1 - X_1^G} \quad \text{Ec. 81}$$

Cabe destacar, que la conversión global en el reactor R-101, es la conversión individual en el mismo. Despejando la conversión global en el reactor R-102, se obtiene

$$X_2^G = X_2(1 - X_1^G) + X_1^G \quad \text{Ec. 82}$$

Análogamente, la conversión global en el reactor R-103, será

$$X_3^G = X_3(1 - X_2^G) + X_2^G \quad \text{Ec. 83}$$

El balance de energía resultante para cada reactor es el presentado en la ecuación 70, cambiando para cada reactor las condiciones de alimentación.

3.2.2.1 Operación adiabática. El termino de transferencia de calor \dot{Q} es cero, y la ecuación de balance de energía para cada reactor es la numero 73, cambiando las condiciones de alimentación para cada reactor. En la tabla 71, se pueden revisar los resultados que se obtuvieron.

Tabla 71. Resultados de la operación adiabática de la secuencia de reactores R-101, R-102 y R-103.

Reactor	Conversión específica	Conversión global	Temperatura adiabática (°C)
R-101	0.2502	0.2502	16.03
R-102	0.2469	0.4354	16.06
R-103	0.2445	0.5734	16.08

Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

Como puede notarse, la temperatura permanece prácticamente constante, debido al exceso de agua en el sistema, por lo que los resultados para la operación isotérmica deben ser similares. Además, se mejora el nivel de conversión de un reactor CSTR de 3 L, con la secuencia de 3 reactores de 1 litro cada uno.

3.2.2.2 Operación isotérmica. El balance de energía resultará en la ecuación 74, cambiando las condiciones de alimentación para cada reactor. De esta forma, se obtendrá la cantidad de calor que se necesita retirar para mantener la temperatura constante. En la tabla 72 se pueden revisar los resultados de la secuencia CSTR en operación isotérmica para todos sus reactores.

Tabla 72. Resultados de la operación isotérmica de la secuencia de reactores R-101, R-102 y R-103.

Reactor	Conversión específica	Conversión global	Calor requerido (W)
R-101	0.2498	0.2498	-0.7626
R-102	0.2463	0.4348	-0.5639
R-103	0.2436	0.5723	-0.4204

Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo en Excel.

De los resultados, se concluye que no es necesario el uso de un fluido de servicio para mantener la temperatura constante, operando de forma adiabática.

3.2.2.3 Operación con efectos térmicos. El balance de energía resultante es el indicado en la ecuación 77, cambiando las condiciones de alimentación, y las condiciones de operación del fluido de servicio en cada reactor. La resolución de este caso no entra en la delimitación del proyecto.

3.2.3 Reactor tubular (PFR). De la ecuación general del balance de moles se obtiene

$$F_A(V) - F_A(V + \Delta V) + r_A \Delta V = 0 \quad \text{Ec. 84}$$

Reordenando con el fin de despejar la velocidad de reacción (r_A)

$$\frac{F_A(V + \Delta V) - F_A(V)}{\Delta V} = r_A \quad \text{Ec. 85}$$

Si la sección de volumen, ΔV , tiende a cero, entonces la ecuación 85 resultará en

$$\frac{dF_A}{dV} = r_A \quad \text{Ec. 86}$$

El flujo molar de hidróxido de sodio en un punto determinado en el reactor (F_A), se puede expresar en términos del flujo molar de alimentación al reactor tubular (F_{A0}), y la conversión (X) en ese punto

$$F_A = F_{A0}(1 - X) \quad \text{Ec. 87}$$

Derivando la ecuación 87 con respecto a la conversión se obtiene

$$dF_A = -F_{A0}dX \quad \text{Ec. 88}$$

Reemplazando en la ecuación 86

$$-F_{A0} \frac{dX}{dV} = r_A \quad \text{Ec. 89}$$

La velocidad de reacción en términos de la conversión se puede encontrar en la ecuación 64. Combinando la ecuación 64 con la ecuación 89, se obtiene

$$-F_{A0} \frac{dX}{dV} = -kC_{A0}^2 \left((1-X)(\theta_B - X) - \frac{(\theta_C + X)(\theta_D + X)}{K_C} \right) \quad \text{Ec. 90}$$

El flujo molar de alimentación, F_{A0} , se puede expresar en términos de la velocidad de flujo volumétrico inicial, y la concentración inicial de hidróxido de sodio, como se muestra en la ecuación 55. Eliminando los signos negativos, y combinando las ecuaciones 55 y 90, se obtiene

$$\dot{V}_0 C_{A0} \frac{dX}{dV} = kC_{A0}^2 \left((1-X)(\theta_B - X) - \frac{(\theta_C + X)(\theta_D + X)}{K_C} \right) \quad \text{Ec. 91}$$

Simplificando, y dejando en términos del tiempo de residencia τ , quedará

$$\frac{dX}{d\left(\frac{V}{\dot{V}_0}\right)} = kC_{A0} \left((1-X)(\theta_B - X) - \frac{(\theta_C + X)(\theta_D + X)}{K_C} \right) \quad \text{Ec. 92}$$

$$\frac{dX}{d\tau} = kC_{A0} \left((1-X)(\theta_B - X) - \frac{(\theta_C + X)(\theta_D + X)}{K_C} \right) \quad \text{Ec. 93}$$

La ecuación 93 es el resultado del balance de moles para el reactor tubular. El balance de energía para operación adiabática, en términos de la conversión resultará en²³⁵

$$\frac{dT}{dV} = \frac{r_A \Delta H_{Rx}^0}{F_{A0}(C_{PS} + \Delta C_P X)} \quad \text{Ec. 94}$$

Donde los parámetros C_{PS} y ΔC_P están definidos en las ecuaciones 71 y 72, respectivamente.

Para resolver las ecuaciones 93 y 94, se empleó el método de Euler usando un tamaño de paso de $\Delta V = 0.0003 L$, y $\Delta \tau = 0.054 s$, y los resultados se compararán

²³⁵ FOGLER, H. Scott. Op., cit. p. 459

con los obtenidos en Aspen Plus. En la tabla 73, se pueden revisar los resultados de los reactores R-105 y R-108.

Tabla 73. Resultados del modelo matemático para la saponificación de acetato de etilo en los reactores tubulares R-105 y R-108 en operación adiabática.

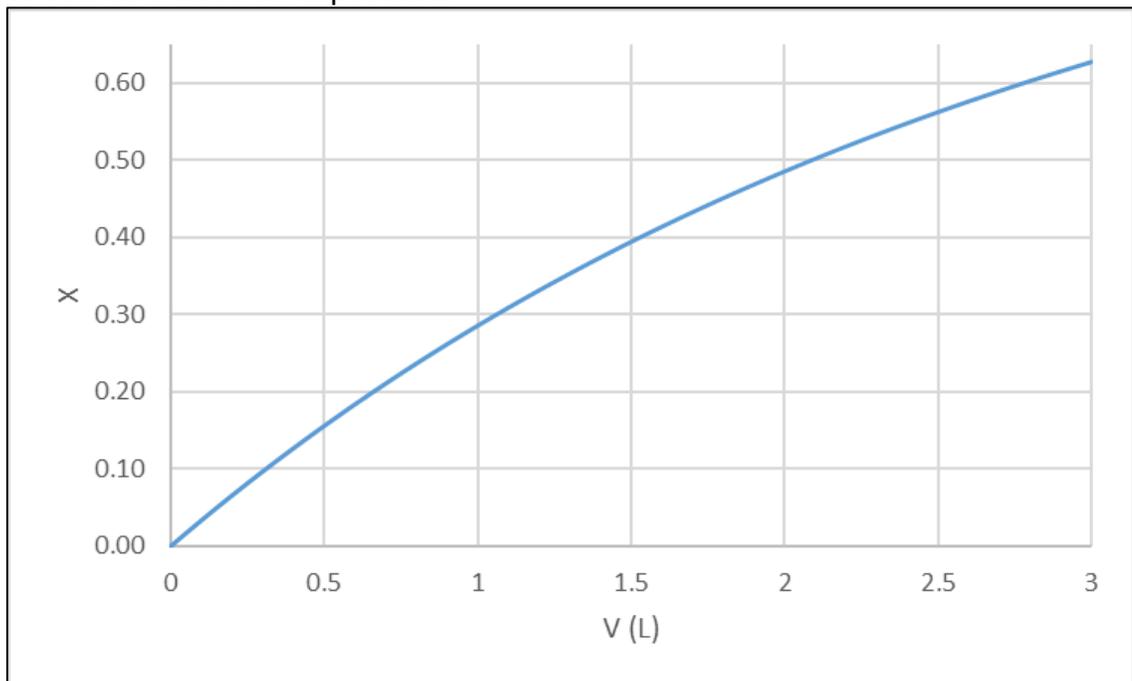
Reactor	Conversión de salida	Temperatura de salida (°C)
R-105 (1 L)	0.2857	16.04
R-108 (3 L)	0.6274	16.08

Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

El nivel de conversión se mejoró con respecto al reactor CSTR de 3 litros de capacidad (R-104), lo que indica el reactor PFR es el más adecuado para llevar a cabo la saponificación de acetato de etilo con el fin de minimizar el volumen del reactor. En la figura 38 se muestra cómo cambia la conversión de hidróxido de sodio a medida que los reactivos fluyen por el reactor R-108. En la figura 39 se puede ver el perfil de temperatura a lo largo del reactor de 3 litros de capacidad.

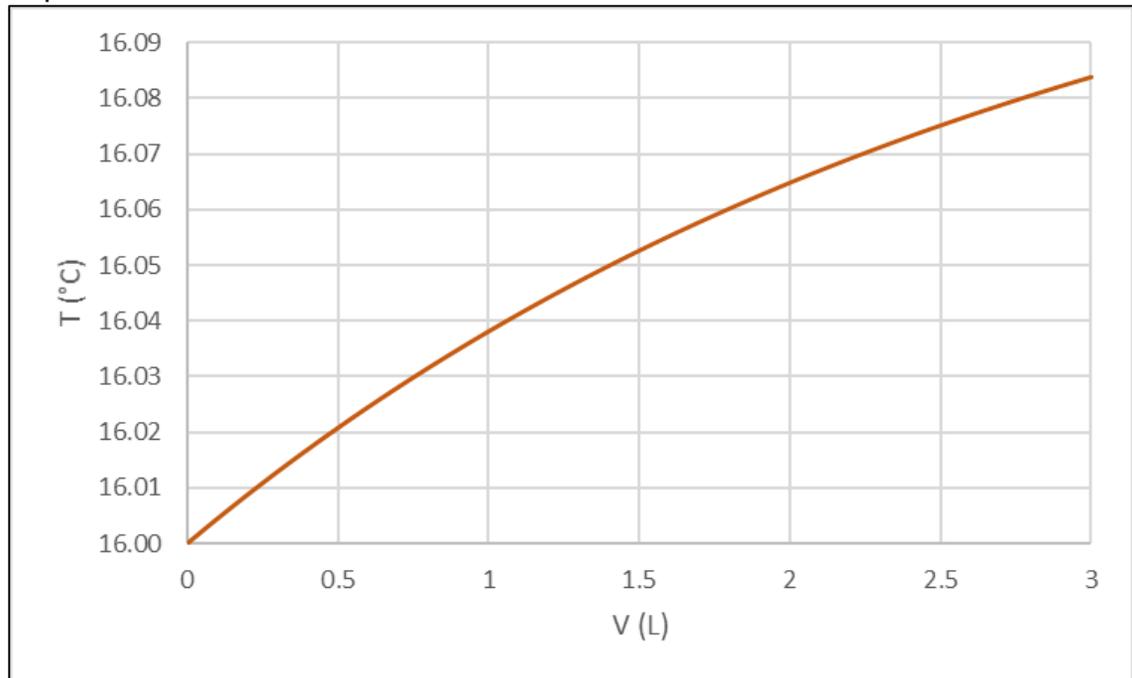
Se puede ver en la figura 39, que la temperatura aumenta debido a la naturaleza exotérmica de la reacción, sin embargo, dicho cambio es prácticamente despreciable debido al exceso de agua presente en el sistema. La reacción se lleva a cabo prácticamente de modo isotérmico. A continuación, se muestran los resultados para el reactor R-105 de 1 litro de capacidad.

Figura 38. Variación de la conversión de hidróxido de sodio a lo largo del reactor R-108 de 3 litros de capacidad.



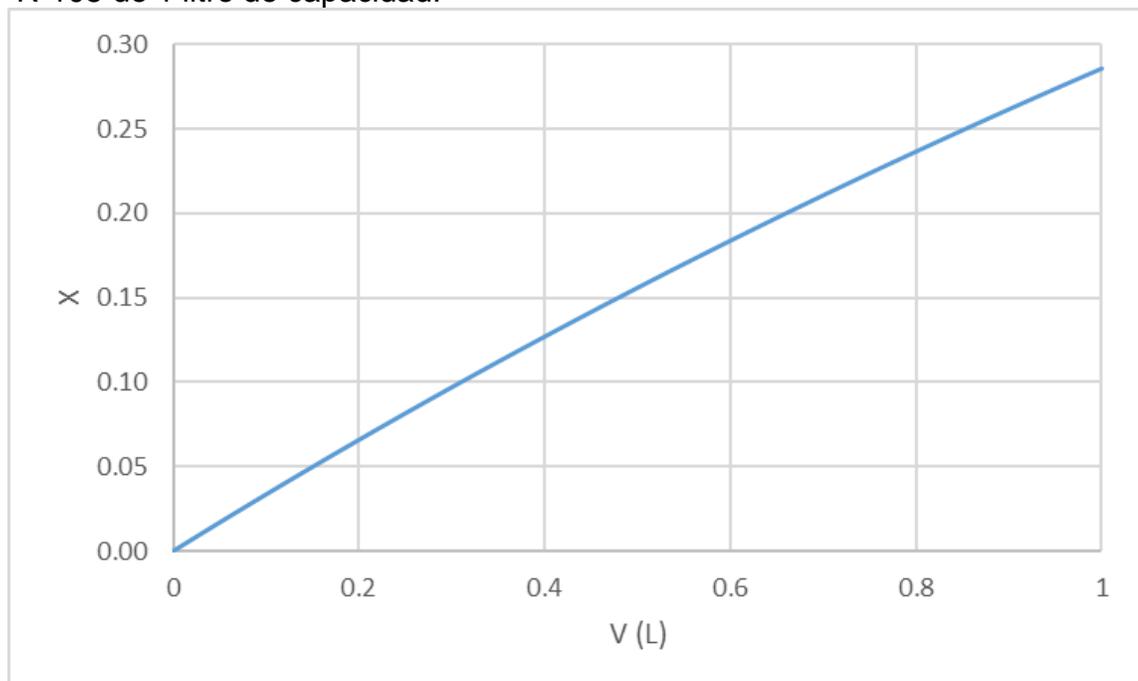
Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

Figura 39. Variación de la temperatura a lo largo del reactor R-108 de 3 litros de capacidad.



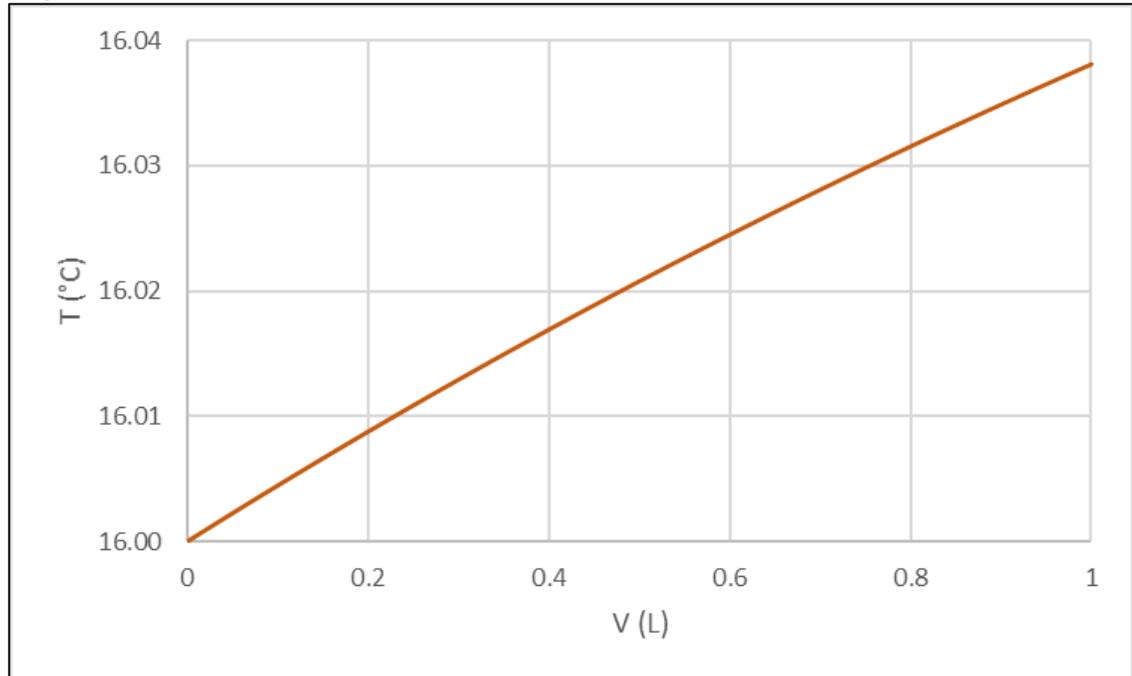
Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

Figura 40. Variación de la conversión de hidróxido de sodio a lo largo del reactor R-105 de 1 litro de capacidad.



Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

Figura 41. Variación de la temperatura a lo largo del reactor R-105 de 1 litro de capacidad.



Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

La conversión disminuye en el reactor R-105, debido a que el volumen del reactor es menor al del reactor R-108, lo que implica que el tiempo de retención de los reactivos será menor.

3.3 MODO DE OPERACIÓN POR LOTES

Los reactivos se cargan al reactor directamente y reaccionan por un lapso de tiempo determinado. El banco de reactores de tanques agitados puede operar todos sus reactores en modo lotes (R-101, R-102, R-103, y R-104); sin embargo, según el diagrama de flujo de procesos (anexo A), únicamente los reactores R-103, y R-104 tienen conexión directa con el intercambiador de calor E-103 de agua de enfriamiento, por lo que se obtendrán los resultados del modelo matemático para estos dos reactores. De la ecuación general de balance se obtiene

$$r_A V = \frac{dN_A}{dt} \quad \text{Ec. 95}$$

Como la reacción se da en fase líquida, es a densidad constante, y se puede expresar la ecuación 95 en términos de la concentración de hidróxido de sodio (A)

$$r_A = \frac{dC_A}{dt} \quad \text{Ec. 96}$$

La concentración de hidróxido de sodio puede expresarse en términos de su concentración inicial y la conversión (ya que la reacción ocurre en fase líquida)

$$C_A = C_{A0}(1 - X) \quad \text{Ec. 97}$$

Derivando la ecuación 97 con respecto a la conversión

$$dC_A = -C_{A0}dX \quad \text{Ec. 98}$$

Reemplazando la ecuación 98 en la ecuación 96

$$r_A = -C_{A0} \frac{dX}{dt} \quad \text{Ec. 99}$$

La velocidad de reacción en términos de la conversión se encuentra en la ecuación 64. Combinando la ecuación 64 con la ecuación 99 se obtiene

$$-kC_{A0}^2 \left((1 - X)(\theta_B - X) - \frac{(\theta_C + X)(\theta_D + X)}{K_C} \right) = -C_{A0} \frac{dX}{dt} \quad \text{Ec. 100}$$

Simplificando, se obtiene la ecuación resultante del balance de moles para el reactor por lotes

$$kC_{A0} \left((1 - X)(\theta_B - X) - \frac{(\theta_C + X)(\theta_D + X)}{K_C} \right) = \frac{dX}{dt} \quad \text{Ec. 101}$$

Donde la constante k depende de la temperatura como se muestra en la ecuación 46. La ecuación 101 es la primera ecuación diferencial del modelo matemático del reactor por lotes, en términos de la conversión y temperatura como variables dependientes, y el tiempo como variable independiente.

El balance de energía general para un reactor por lotes, asumiendo entalpia de reacción constante, resulta en²³⁶

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} + \dot{W}_S + (-\Delta H_{Rx}^0)(-r_A)V}{N_{A0}(C_{PS} + \Delta C_p X)} \quad \text{Ec. 102}$$

Donde N_{A0} es el número de moles iniciales de hidróxido de sodio en el reactor. La ecuación 102 es la segunda ecuación diferencial del modelo matemático para el

²³⁶ FOGLER, H. Scott. Op., cit. p. 537

reactor por lotes. Se aplicará el modo de operación adiabático, e isotérmico a las ecuaciones 101 y 102 con el fin de obtener expresiones específicas para cada caso, en los reactores R-103 y R-104.

3.3.1 Operación adiabática. El balance de moles es el presentado en la ecuación 101. El término de transferencia de calor \dot{Q} es cero, y si se desprecia el efecto del agitador, debido a que la reacción no presenta compuestos altamente viscosos, el balance de energía resultará en

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(-\Delta H_{Rx}^0)(-r_A)V}{N_{A0}(C_{PS} + \Delta C_p X)} \quad \text{Ec. 103}$$

Para la resolución de las dos ecuaciones diferenciales, se empleó el método de Runge Kutta de cuarto orden, determinando 4 constantes para cada ecuación. Para el balance de moles, se tiene

$$K_{1,M} = f(t_n, X_n) \quad \text{Ec. 104}$$

$$K_{2,M} = f\left(t_n + \frac{h}{2}, X_n + \frac{1}{2}hK_{1,M}\right) \quad \text{Ec. 105}$$

$$K_{3,M} = f\left(t_n + \frac{h}{2}, X_n + \frac{1}{2}hK_{2,M}\right) \quad \text{Ec. 106}$$

$$K_{4,M} = f(t_n + h, X_n + K_{3,M}h) \quad \text{Ec. 107}$$

Donde

- El subíndice n indica el paso anterior.
- $f(t_n, X_n)$ es la expresión de la ecuación 101.
- h es el paso de la variable independiente establecido para el método.
- $K_{i,M}$ es la constante i del balance de moles para el método de Runge Kutta 4 orden.

Los valores de tiempo y conversión del nuevo paso, vienen dados por

$$t_{n+1} = t_n + h \quad \text{Ec. 108}$$

$$X_{n+1} = X_n + \frac{1}{6}h(K_{1,M} + 2K_{2,M} + 2K_{3,M} + K_{4,M}) \quad \text{Ec. 109}$$

De manera análoga, el conjunto de ecuaciones para la resolución de la segunda ecuación diferencial del reactor por lotes adiabático (Ec. 102) por el método de Runge Kutta se muestran a continuación

$$K_{1,E} = f(t_n, T_n) \quad \text{Ec. 110}$$

$$K_{2,E} = f\left(t_n + \frac{h}{2}, T_n + \frac{1}{2}hK_{1,E}\right) \quad \text{Ec. 111}$$

$$K_{3,E} = f\left(t_n + \frac{h}{2}, T_n + \frac{1}{2}hK_{2,E}\right) \quad \text{Ec. 112}$$

$$K_{4,E} = f(t_n + h, T_n + K_{3,E}h) \quad \text{Ec. 113}$$

$$t_{n+1} = t_n + h \quad \text{Ec. 114}$$

$$T_{n+1} = T_n + \frac{1}{6}h(K_{1,E} + 2K_{2,E} + 2K_{3,E} + K_{4,E}) \quad \text{Ec. 115}$$

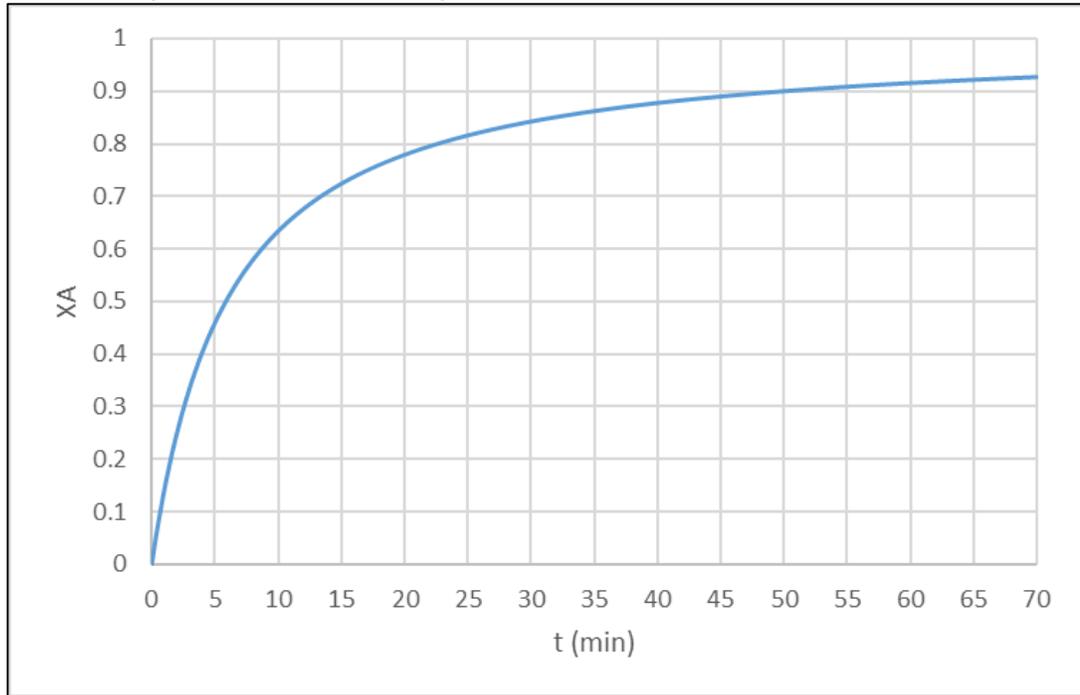
Donde

- El subíndice n indica el paso anterior.
- $f(t_n, T_n)$ es la expresión de la ecuación 102.
- h es el paso de la variable independiente establecido para el método.
- $K_{i,T}$ es la constante i del balance de energía para el método de Runge Kutta 4 orden.

Como la variable independiente de ambas ecuaciones es el tiempo, se estableció un paso de 0.007 minutos que aplica en ambos casos. Cabe destacar que se utilizó la constante de velocidad en "l/mol min". Se muestran en la figura 42 y 43 los resultados.

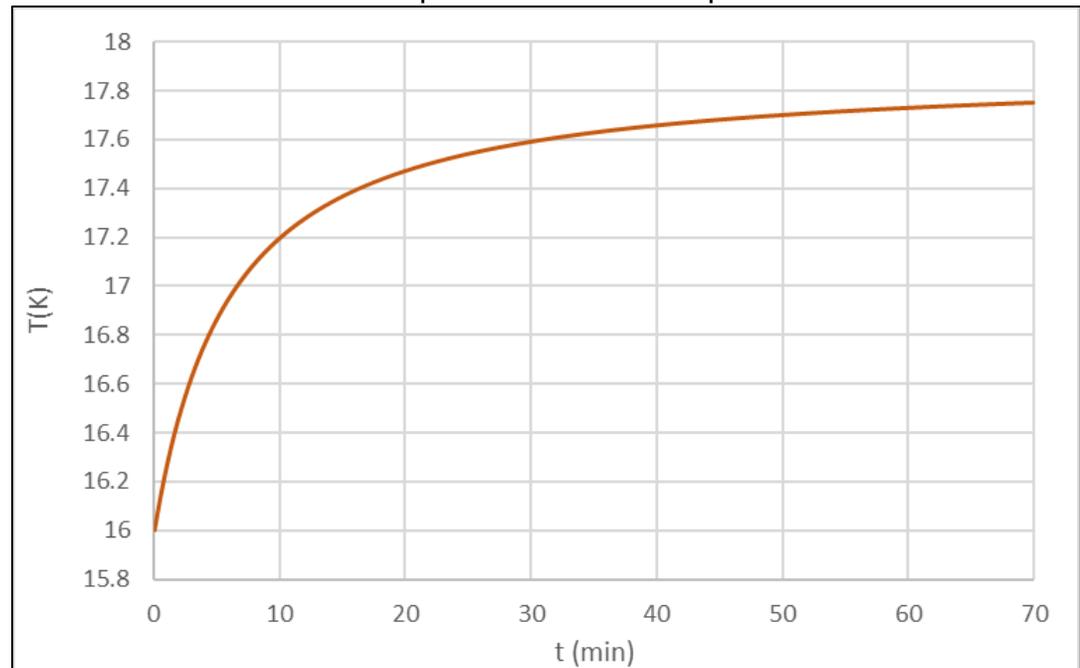
La reacción se puede detener a los 50 minutos cuando se alcanza una conversión de aproximadamente el 90%, ya que desde ese momento la conversión crece lentamente debido a que se han consumido la mayor parte de los reactivos. Por otro lado, si bien la temperatura aumenta, no lo hace en gran medida, debido al exceso de agua en el sistema que atenúa el efecto térmico en el reactor. Los resultados para el reactor R-104 de tres litros de capacidad fueron los mismos, por lo que no se vio necesario presentar las gráficas respectivas.

Figura 42. Conversión en el tiempo para la saponificación de acetato de etilo en el reactor por lotes R-103 en operación adiabática.



Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

Figura 43. Temperatura en el tiempo de reacción para la saponificación de acetato de etilo en el reactor por lotes R-103 en operación adiabática.



Fuente: Elaboración propia con el apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

3.3.2 Operación isotérmica. El balance de moles es el presentado en la ecuación 101. La temperatura en el reactor se mantiene constante mediante un fluido de servicio que fluye por la chaqueta térmica del reactor. El balance de energía resultará en

$$\dot{Q} = (-\Delta H_{Rx}^o)(-r_A)V \quad \text{Ec. 116}$$

Donde

$$(-r_A)V = -\frac{dN_A}{dt} \quad \text{Ec. 117}$$

Combinando la ecuación 116 con la ecuación 117, se obtiene

$$\dot{Q} = \Delta H_{Rx}^o \frac{dN_A}{dt} \quad \text{Ec. 118}$$

Que corresponde al calor que se debe retirar del reactor, para mantener la temperatura constante. Como la velocidad de reacción para un reactor por lotes varia en el tiempo, el calor que se debe retirar también será una función del tiempo. La resolución se hace mediante el método de Runge Kutta 4 orden para la ecuación 101 (explicado en la sección anterior), manteniendo la temperatura constante. La conversión en el tiempo se muestra en la figura 44.

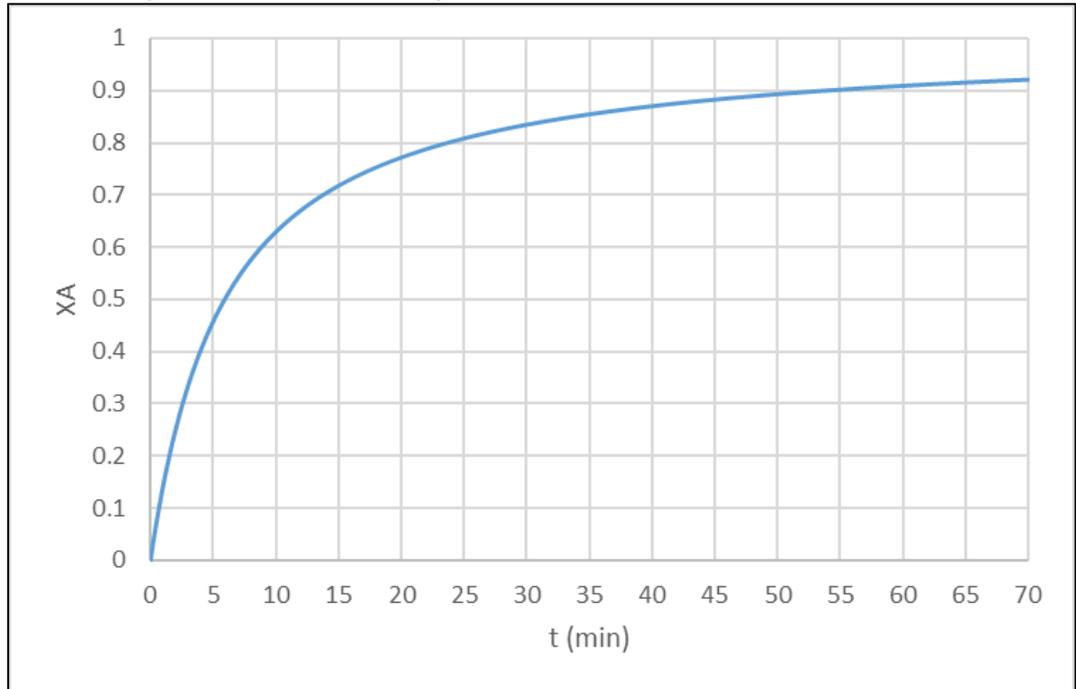
El resultado es similar con respecto al modo de operación adiabático, debido al exceso de agua en el sistema. El resultado es idéntico con respecto al reactor R-104. El calor máximo que se debe retirar, para una velocidad de reacción inicial de 0.01627 mol/(l min), para el reactor de 1 L, es de

$$\dot{Q} = \left(-79076 \frac{J}{mol}\right) \left(0.01627 \frac{mol}{l \min}\right) 1 l \quad \text{Ec. 119}$$

$$\dot{Q} = -1286.56 \frac{J}{min} = 21.44 W \quad \text{Ec. 120}$$

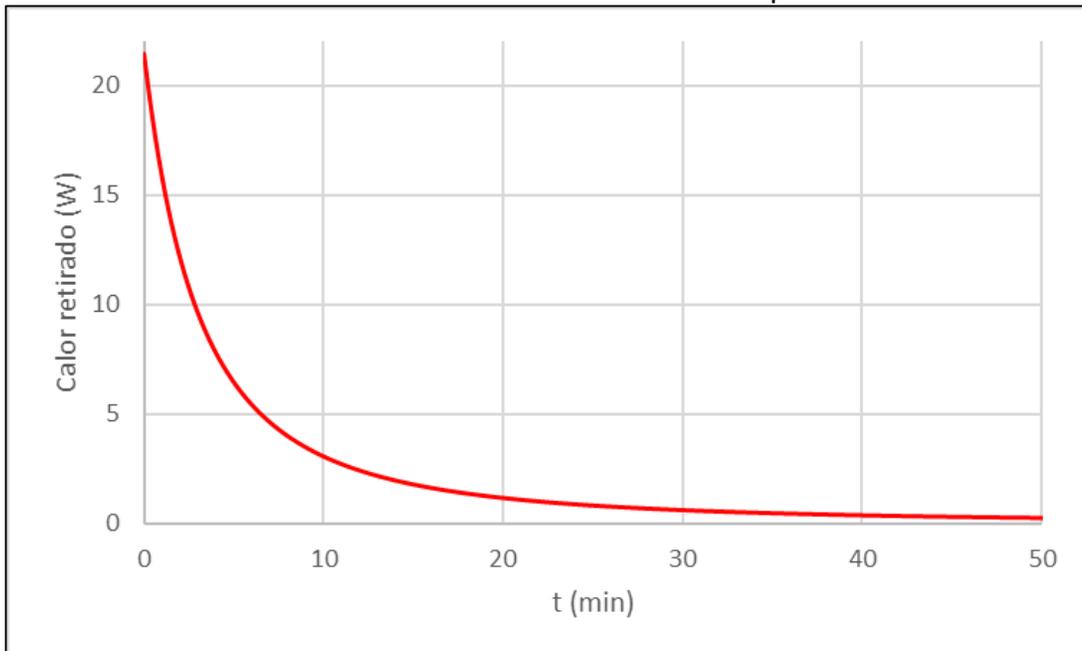
El perfil de calor necesario para retirar del sistema para mantener la temperatura constante durante 50 minutos de reacción, se muestra en las figuras 45 y 46 para los reactores R-103 y R-104, respectivamente.

Figura 44. Conversión en el tiempo para la saponificación de acetato de etilo en el reactor por lotes R-103 en operación isotérmica.



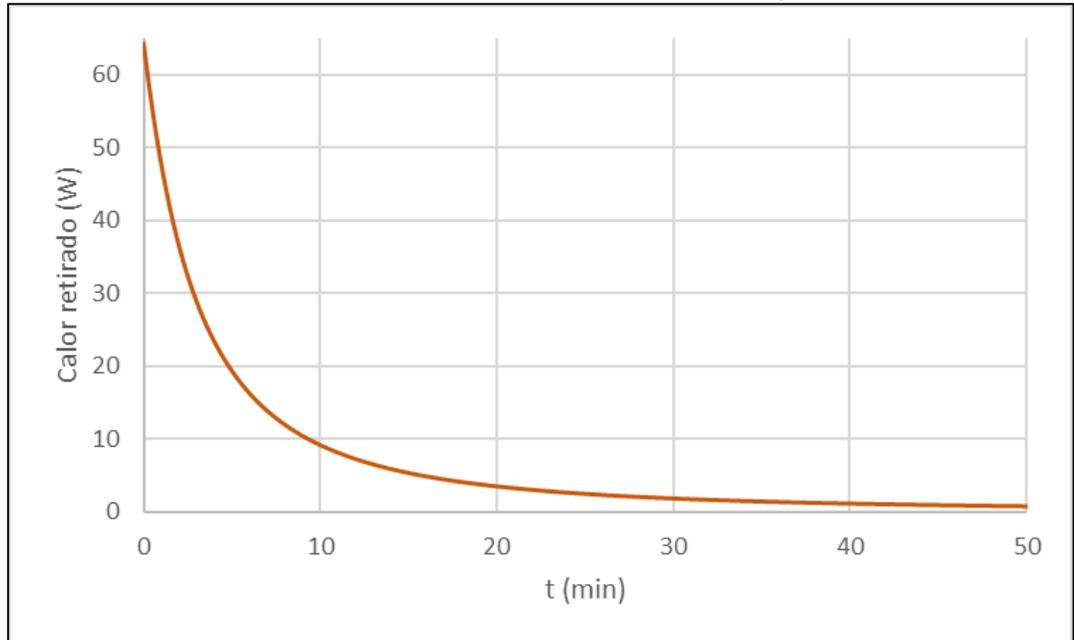
Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

Figura 45. Perfil de calor retirado en el tiempo de reacción para la saponificación de acetato de etilo en el reactor R-103 de 1 litro de capacidad.



Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

Figura 46. Perfil de calor retirado en el tiempo de reacción para la saponificación de acetato de etilo en el reactor R-104 de 3 litros de capacidad.



Fuente: Elaboración propia con apoyo de la hoja de cálculo de Excel.

Se debe retirar más energía en forma de calor del reactor de 3 litros que en el 1 litro debido a que reaccionan mayor cantidad de reactivos, lo que implica una cantidad mayor de liberación energética. Se puede notar que la cantidad de calor a retirar es muy pequeña porque al operar adiabáticamente la temperatura de la mezcla aumenta no más de 2°C.

3.3.3 Operación con efectos térmicos. El balance de moles corresponde al presentado en la ecuación 101. Como la reacción es exotérmica se puede usar agua de enfriamiento para atenuar el efecto térmico en el reactor. La tasa de transferencia de calor es la indicada en la ecuación 75, así como la temperatura de salida del refrigerante se muestra en la ecuación 76. El balance de energía resultante se muestra a continuación

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{m}_c C_{PC} (T_{C1} - T) \left(1 - e^{\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{PC}}} \right) + \dot{W}_S + (-\Delta H_{Rx}^0)(-r_A)V}{N_{A0}(C_{PS} + \Delta C_p X)} \quad \text{Ec. 121}$$

Dadas las condiciones de operación del fluido de servicio, usando la ecuación de ley de velocidad en términos de la conversión (Ec. 64), y las condiciones iniciales y de alimentación de la sección “3.1.2”, se puede resolver el sistema de ecuaciones diferenciales usando un método numérico determinado. La resolución del presente caso no entra en la delimitación del proyecto.

3.4. SIMULACION

Con el fin de simular el funcionamiento del banco de reactores, se utilizó el software Aspen Plus, donde se desarrolló una topología basada en el diagrama de flujo de procesos, con el fin de comparar los resultados obtenidos de la simulación, con aquellos adquiridos en la hoja de cálculo. Se simuló la saponificación de acetato de etilo en reactores de flujo continuo y en reactores por lotes.

3.4.1 Metodología.

3.4.1.1 Ajuste de las propiedades termodinámicas. Para llevar a cabo la simulación, se debe establecer un modelo termodinámico adecuado para la representación de las propiedades de las sustancias involucradas en el proceso, y sus interacciones a nivel molecular. La saponificación de acetato de etilo (Ec. 39), presenta componentes electrolíticos fuertes como el hidróxido de sodio ($NaOH$), y el acetato de sodio (CH_3COONa), componentes polares como etanol y agua; y un componente con baja polaridad como el acetato de etilo. Utilizando la metodología propuesta por Carlson²³⁷ para la selección del modelo termodinámico, se requiere que el sistema químico cumpla con las siguientes condiciones

- Presenta al menos un componente polar.
- Presenta al menos un componente electrolítico.

Por tanto, se sugiere utilizar los modelos de “Pitzer” y “Electrolyte NRTL”. Para el presente caso, se utilizó el asistente de simulación rigurosa con electrolitos “Electrolyte Wizard”, que usa el modelo termodinámico de “Electrolyte NRTL”. Dicho método, calcula las propiedades de la fase líquida mediante el modelo de coeficientes de actividad ELECTROLYTE-NRTL, mientras que las propiedades de la fase vapor son calculadas de la ecuación de estado de Redlich-Kwong. “Electrolyte NRTL” puede modelar sistemas acuosos y acuosos orgánicos electrolíticos en todo el rango de concentración del electrolito con un conjunto de parámetros de interacción binaria²³⁸.

Para comenzar, se especifica en la ventana de iniciación de Aspen Plus, el tipo de aplicación que se desea llevar a cabo. Para la saponificación de acetato de etilo, el tipo de aplicación corresponde a electrolitos, por lo que debe seleccionarse la

²³⁷ CARLSON, Eric C. Don't gamble with physical properties for simulation [En línea]. Chemical Engineering Progress, 1996. p. 36. [Consultado: 27 de noviembre de 2018]. Disponible en internet: <https://pdfs.semanticscholar.org/a691/8690efb562b462410b4bb82a3ec58cd694bc.pdf>

²³⁸ Aspen Technology, Inc. Modeling Processes with Electrolytes: Getting Started [En línea]. Aspen Plus: Steady State Simulation, Version 10. 1981-1999. p. 19 [Consultado: 26 de noviembre de 2018]. Disponible en internet: <https://chemengr.ucsb.edu/~ceweb/courses/che184b/aspenplus/GettingStartedElectrolytes.pdf>

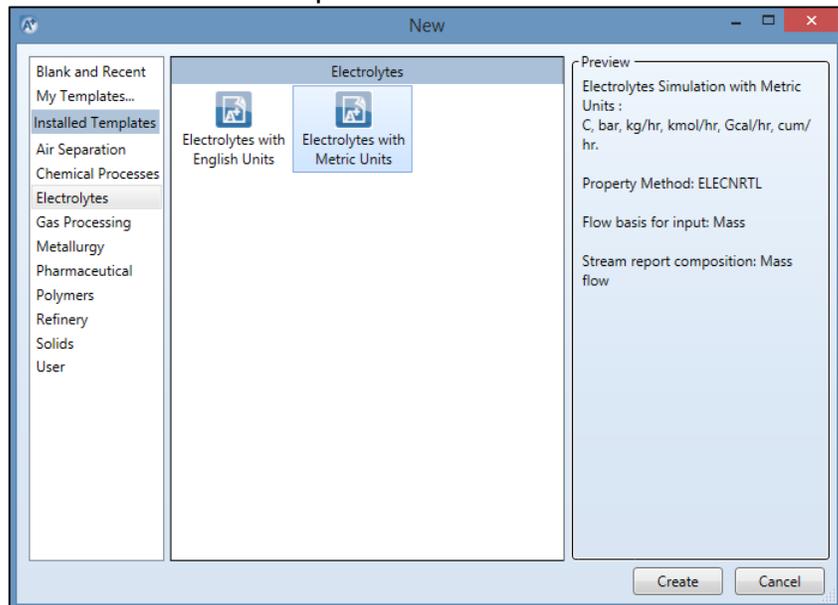
opción “Electrolytes”. Posteriormente, se seleccionó el sistema de unidades mediante el cual se va a representar las condiciones de operación del proceso, así como los resultados de la simulación, escogiendo unidades métricas, como se muestra en la figura 47. Finalmente, se selecciona el botón “Create”.

Consecutivamente, se especifican las sustancias involucradas en el proceso que son las presentadas en la ecuación 39. Como se seleccionó aplicación para sistemas electrolíticos, el componente agua viene por defecto. En la figura 48, se puede ver los componentes que se seleccionaron para el sistema reactivo, cambiando la identificación de cada uno como se estableció en la sección “3.1”.

Posteriormente, se elige el botón “Elec Wizard” que es el asistente de Aspen Plus para especificar las especies iónicas, y sales a partir de los componentes de la figura 48, y las reacciones de disociación de los electrolitos en agua.

En la ventana de diálogo del asistente, se debe especificar el tipo de ion de hidrogeno presente en el sistema químico, que para el caso es ion hidronio, “Hydronium ion H3O+”, ya que es la opción que mejor representa el equilibrio de fases y químico de casi todos los sistemas electrolíticos²³⁹. Además, se deben arrastrar todos los componentes al cuadro “Selected Compounds”, para determinar cuáles reacciones de disociación en agua se generan en base a las sustancias involucradas, como se muestra en la figura 49.

Figura 47. Tipo de aplicación y sistema de unidades seleccionados para la simulación de la saponificación de acetato de etilo.



Fuente: Aspen Plus.

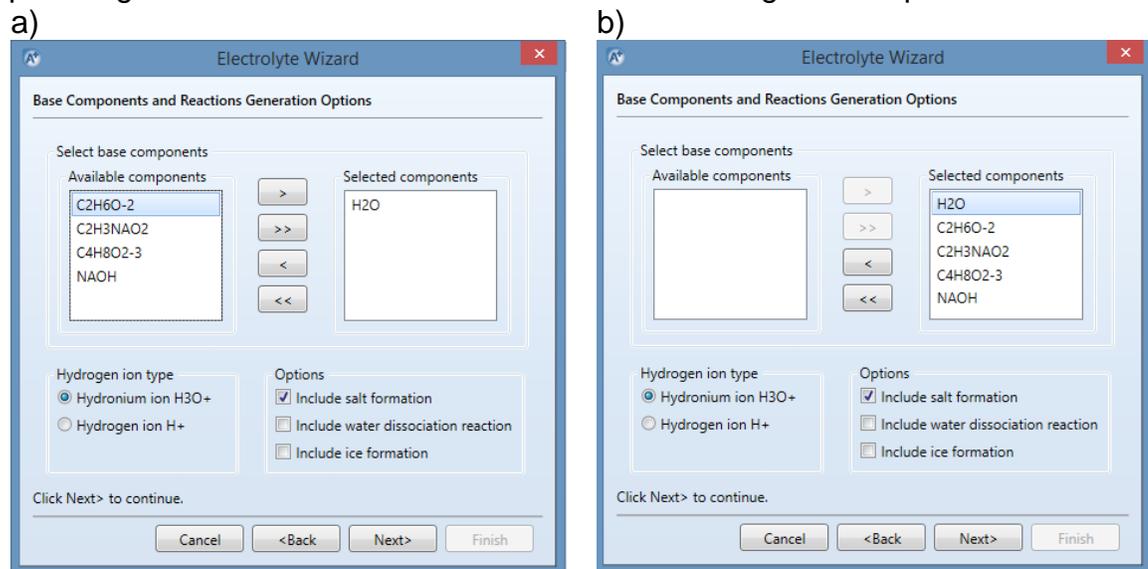
²³⁹ Aspen Technology, Inc. Op., cit. p. 10

Figura 48. Especificación de los componentes presentes en la saponificación de acetato de etilo en Aspen Plus.

Component ID	Type	Component name	Alias
A	Conventional	SODIUM-HYDROXIDE	NAOH
B	Conventional	ETHYL-ACETATE	C4H8O2-3
C	Conventional	SODIUM-ACETATE	C2H3NAO2
D	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
W	Conventional	WATER	H2O

Fuente: Simulación en Aspen Plus.

Figura 49. a) Especificaciones de los componentes base para la generación de las reacciones de disociación en agua en Aspen Plus. b) Componentes seleccionados para la generación de reacciones de disociación en agua en Aspen Plus.



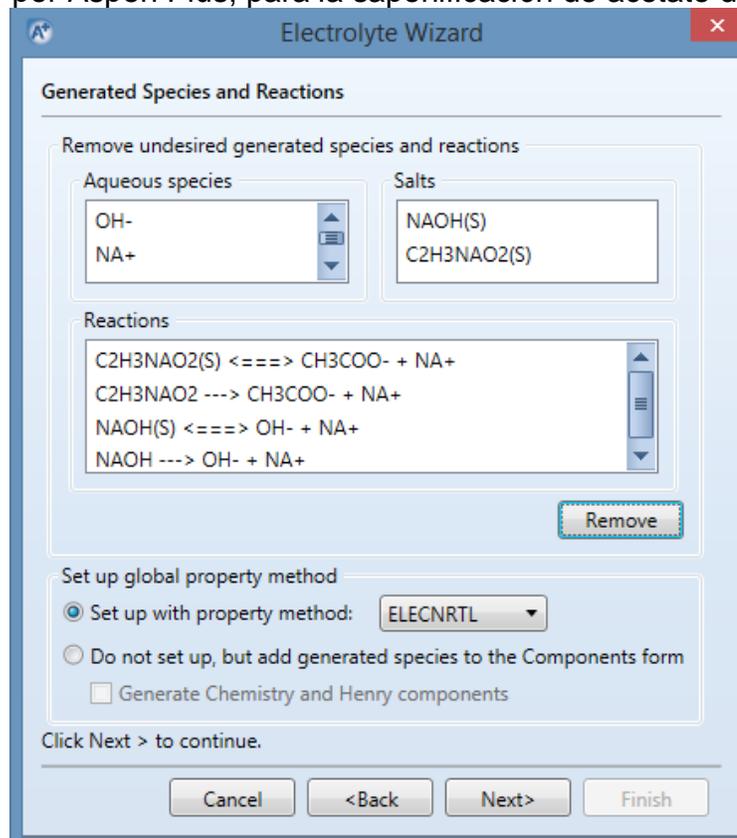
Fuente: Simulación en Aspen Plus.

Al continuar en la configuración del sistema electrolítico, aparecen las especies y reacciones generadas, donde se deben remover aquellas reacciones que no hacen parte del proceso estudiado. Para el presente caso, solamente se dejaron las disociaciones y equilibrios iónicos de hidróxido de sodio y acetato de sodio con agua, como se muestra en la figura 50, y se continuó con la siguiente ventana de diálogo.

El siguiente paso es especificar el tipo de enfoque electrolítico en la simulación, pudiendo seleccionar entre un enfoque real (true componente approach), o un enfoque aparente (apparent component approach), para los componentes del

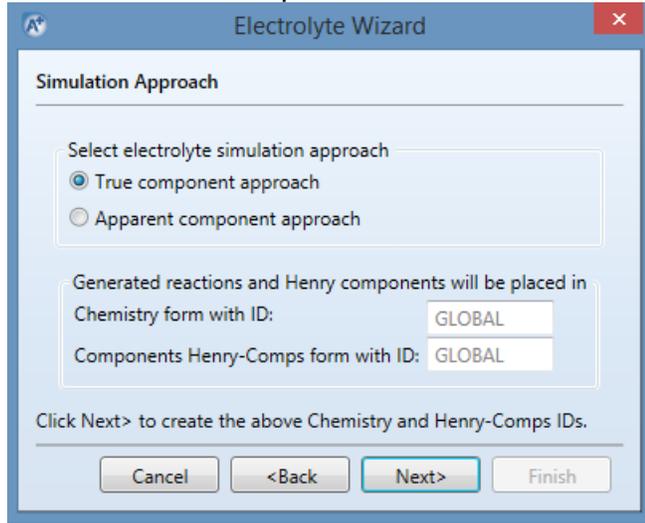
sistema. Cuando se usa un enfoque real, el modelo de resolución en Aspen Plus considera las especies iónicas, generadas por el asistente de sistemas electrolíticos, reportando los resultados en términos de los iones, sales, y compuestos involucrados debido a las condiciones del proceso, en vez de los componentes iniciales especificados en la figura 48. Por otro lado, el enfoque aparente, entrega los resultados de la simulación en base a los componentes especificados inicialmente en la figura 48. Con el fin de llevar a cabo una simulación del sistema electrolítico rigurosa, se seleccionará el enfoque real (true component approach), como se muestra en la figura 51. Más adelante se indica cómo cambiar el enfoque de la simulación para una unidad determinada, como en los reactores, debido a que la forma en que se especifica la reacción es con los componentes base. Cabe destacar, que el presente caso no presenta gases solubles como nitrógeno, oxígeno, o dióxido de carbono que puedan ser modelados mediante la ley de Henry. Una vez finalizado la configuración de las reacciones de disociación y el tipo de enfoque electrolítico de la simulación, se procede a revisar los parámetros de interacción, y a ingresar al ambiente de simulación.

Figura 50. Reacciones de disociación y equilibrio iónico, generadas por Aspen Plus, para la saponificación de acetato de etilo



Fuente: Simulación en Aspen Plus.

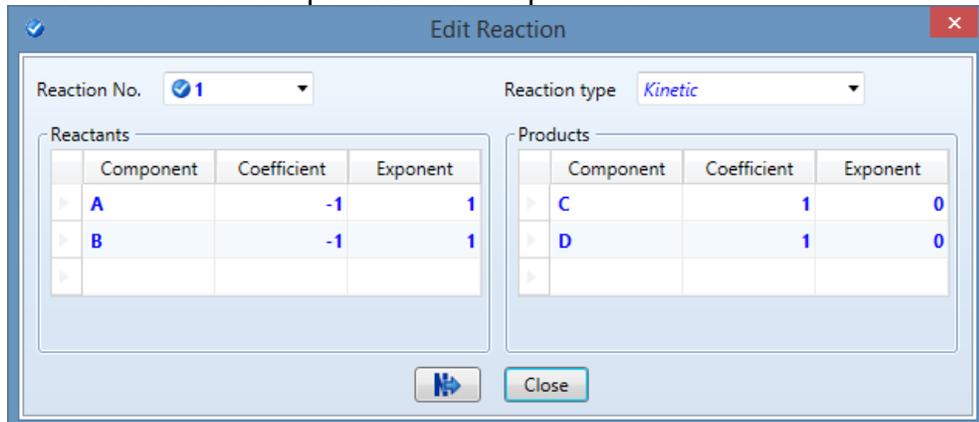
Figura 51. Selección del tipo de enfoque electrolítico para la simulación de la saponificación de acetato de etilo.



Fuente: Simulación en Aspen Plus.

3.4.1.2 Especificación de la reacción. El siguiente paso es introducir la reacción en el simulador, en el ítem de “Reactions” encontrado en la columna de opciones de la parte izquierda de la pantalla. Se presiona en el botón que genera una nueva reacción, especificando una reacción de tipo ley de potencias (POWERLAW) debido a que se conoce la ley de velocidad para la saponificación de acetato de etilo (Ec. 45).

Figura 52. Especificación de los coeficientes estequiométricos y de los órdenes de reacción particular en Aspen Plus.



Fuente: Simulación en Aspen Plus.

Como se indicó en la sección “3.1.1”, bajo las condiciones de operación en que se lleva a cabo la simulación la constante de equilibrio de la reacción (Ec. 47) tiende a infinito, lo que implica que el término de la reacción inversa de la ecuación 45 sea igual a cero, quedando

$$-r_A = kC_A C_B$$

Ec. 122

En la figura 52, se puede ver cómo se especificó la ecuación 112 en el módulo de reacciones de Aspen Plus. Los coeficientes estequiométricos de los reactivos se especificaron como “-1”, mientras que para los productos el valor de “1”, como se puede revisar en la ecuación 39. Con respecto a los órdenes de reacción, en la ecuación 122, puede notarse que para el hidróxido de sodio (A), y para el acetato de etilo (B), el valor es de “1”, mientras que para los productos, acetato de sodio (C), y etanol (D) son cero. Cabe destacar que el agua (W) es un inerte del proceso que atenúa el efecto térmico de la reacción exotérmica, por lo que no se encuentra presente en las especificaciones de la reacción. Como se describió, los componentes de la reacción son “aparentes”, y por tanto se estableció para los reactores, y las válvulas previas de alimentación a cada reactor, el enfoque de simulación de “componentes aparentes”, en la sección “Block Options” de los bloques involucrados.

El siguiente paso es definir los parámetros cinéticos de la reacción. Para el presente caso, se utilizaron los valores seleccionados en la sección “3.1.1”, reportados en la tabla 63, que se introdujeron en Aspen Plus como se muestra en la figura 53. Además, se especificó que la reacción se llevaba a cabo en fase líquida y que la velocidad de reacción viene en base del volumen del sistema reactivo.

Figura 53. Parámetros cinéticos de la saponificación de acetato de etilo usados en Aspen Plus.

1) A + B --> C(MIXED) + D(MIXED)

Reacting phase: *Liquid* Rate basis: *Reac (vol)*

Power Law kinetic expression

If To is specified Kinetic factor = $k(T/T_0)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_0]}$

If To is not specified Kinetic factor = $kT^n e^{-E/RT}$

k:

n:

E:

To:

[Ci] basis: *Molarity*

Edit Reactions

Solids

Fuente: Simulación en Aspen Plus.

3.4.1.3 Modo de operación continuo.

➤ **Simulación del banco de reactores de tanques agitados.** Las concentraciones de los reactivos se especificaron de tal forma que se obtuvieran, a la entrada del reactor correspondiente, las concentraciones que se utilizaron para el desarrollo del modelo matemático. En consecuencia, se introdujeron el doble de

valor de cada concentración, con una velocidad de flujo volumétrico dividida a la mitad, con respecto a las condiciones de entrada al reactor, con el fin de que los compuestos se diluyan a la mitad de la cantidad cuando se mezclen, y se obtenga el valor deseado de concentración.

Tabla 74. Condiciones de las corrientes de alimentación del modo de operación continuo en el simulador Aspen Plus.

Parámetro	Corriente del reactivo 1	Corriente del reactivo 2
Temperatura (°C)	16	
Presión (mm Hg)	560	
Caudal (l/h)	10	
C _A (mol/l)	0.014	-
C _B (mol/l)	-	0.14
Solvente	Agua	

Fuente: Elaboración propia.

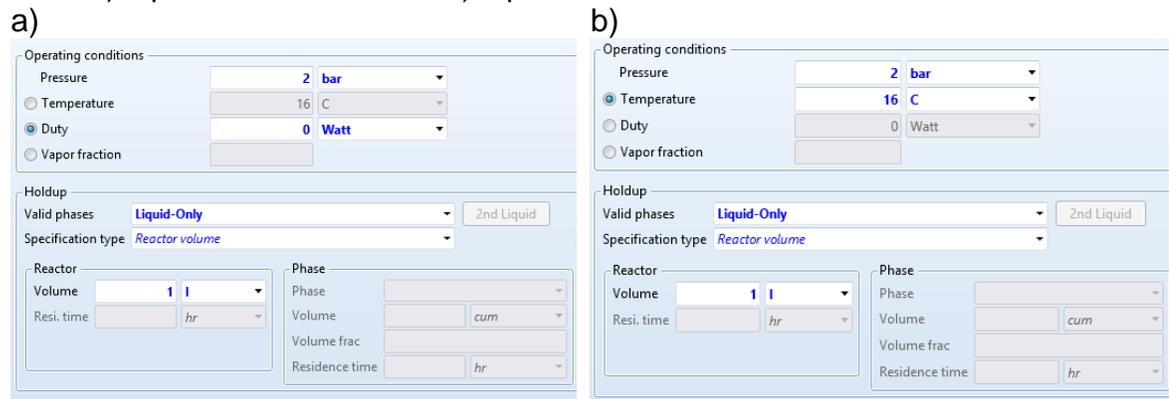
Las condiciones de alimentación para los reactivos 1 y 2, se indican en la tabla 74. La topología desarrollada para el sistema de alimentación de reactivos para el banco de reactores de tanque agitados, se muestra en la figura 56. Cada válvula de bola de la línea de flujo del sistema de alimentación del reactivo 1, y del reactivo 2 se incluyeron en la topología, con el fin de desactivar aquellas que deberían estar cerradas antes de llevar a cabo la operación, y en este caso la simulación. Se desactivaron todas aquellas válvulas correspondientes a las purgas, líneas de desagüé, y la válvula que conecta con los reactores tubulares, para cada línea de flujo, que se encuentran identificadas en la sección “2.1.2.1.1”, y se simularon como válvulas de paso de líquido únicamente, sin caída de presión.

Las bombas P-101 y P-102 se especificaron con una presión de salida de 2 bar, valor aproximado a la presión de descarga entregada por el fabricante. Los intercambiadores de calor E-101, y E-102 se modelaron con un método corto, con un flujo de calor que tiende a cero, debido a no es necesario calentar las corrientes de alimentación, y no se encontraron sistemas de bypass en el diagrama de procesos, por lo que la temperatura de entrada será igual a la de salida para las corrientes de proceso. Se asignaron indicadores de medición para las corrientes que presentan termocuplas, manómetros o rotámetros según el diagrama de procesos (anexo A). Como distribuidor de flujo, se utilizaron divisores de corrientes, teniendo que especificar cómo se divide la corriente de entrada a cada divisor, en términos fraccionales. Adicionalmente, las uniones y divisiones de corrientes se modelaron con mezcladores (Mixers), y divisores (FSplit) con una simbología diferente, respectivamente.

La topología de las líneas de flujo de los reactores tanques agitados desarrollada en Aspen Plus se muestran en la figura 57.a. A modo de ejemplo, se representó mediante la línea de flujo roja, el modo de operación para la secuencia CSTR, de los reactores R-101, R-102, y R-103. La simbología de las válvulas involucradas en

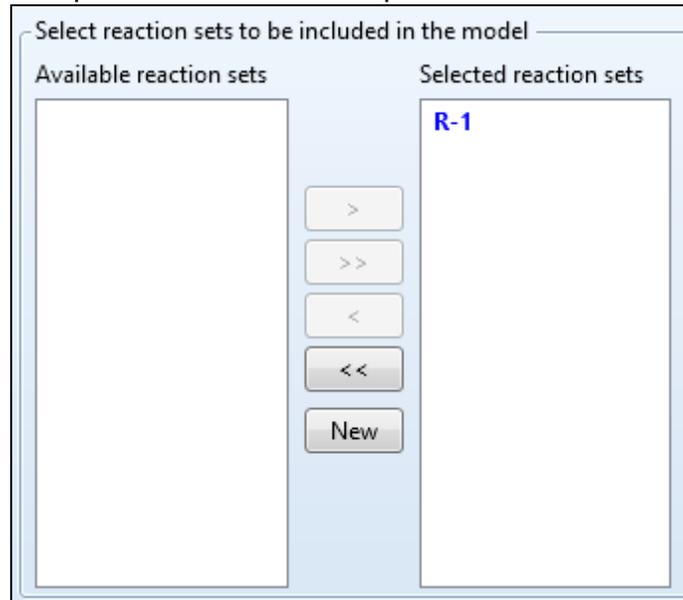
el flujo de productos y mezcla de reactivos que no se agotaron, se cambió con el fin de hacer la distinción con las líneas de flujo de alimentación de reactivos. Se desactivaron aquellas válvulas que deberían estar cerradas para la operación de la planta piloto de reactores, como se especificó en la sección “2.1.2.1.2”. Se especificó una tasa de transferencia de calor que tiende a cero en el intercambiador E-103 de la misma forma que los intercambiadores E-101, y E-102, debido a que para el proceso no es necesario disminuir la temperatura de la corriente por debajo de 16°C.

Figura 54. Especificaciones para el reactor R-101 para la simulación es Aspen Plus. a) Operación adiabática. b) Operación isotérmica.



Fuente: Simulación en Aspen Plus.

Figura 55. Carga de la reacción de saponificación de acetato de etilo para el reactor R-101 para la simulación en Aspen Plus.



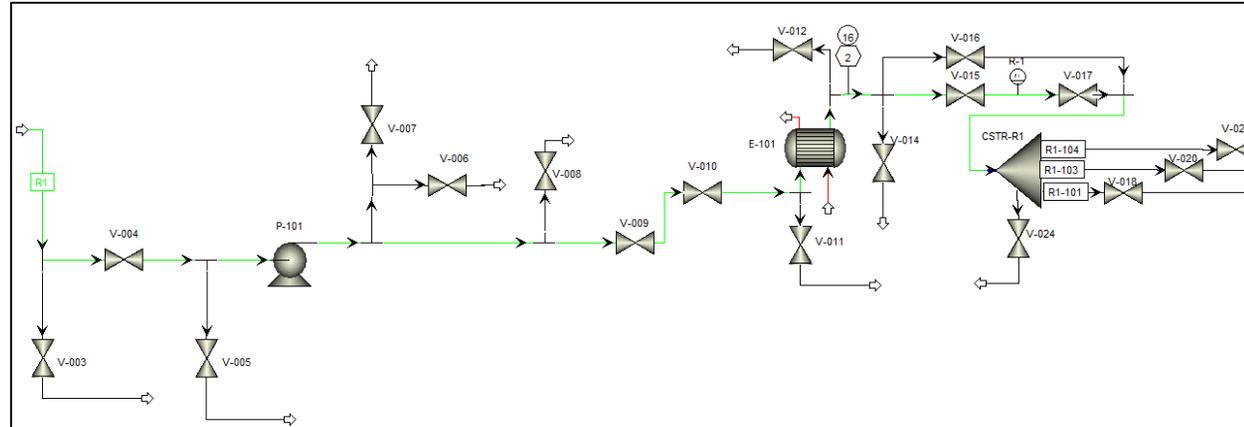
Fuente: Simulación en Aspen Plus.

Para la operación adiabática se especificó una tasa de transferencia de calor nula, y el volumen de cada reactor. Como ejemplo, se muestra en la figura 54.a. la forma en que se introdujeron los parámetros para el reactor R-101 de 1 litro de capacidad. De la misma forma, para la operación isotérmica se definió una temperatura constante de 16°C, como se muestra en la figura 54.b. Para ambos casos, la única fase válida es líquida, debido a que la reacción se lleva a cabo bajo esas condiciones.

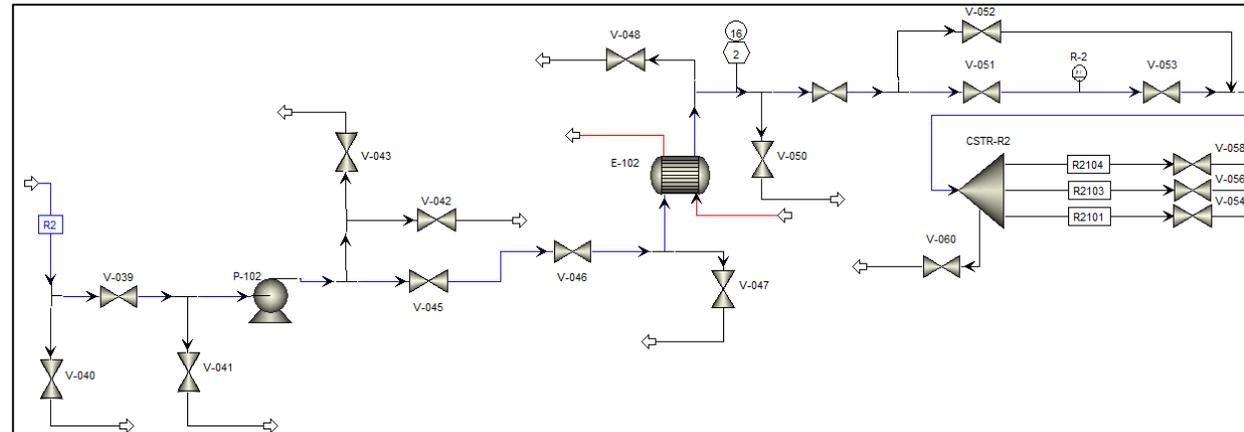
Posteriormente, se incluyó la reacción de saponificación de acetato de etilo para la resolución del modelo, como se indica en la figura 55.

Figura 56. Topología para el sistema de alimentación de reactivos al banco de reactores de tanques agitados en Aspen Plus. a) Reactivo 1. b) Reactivo

a)

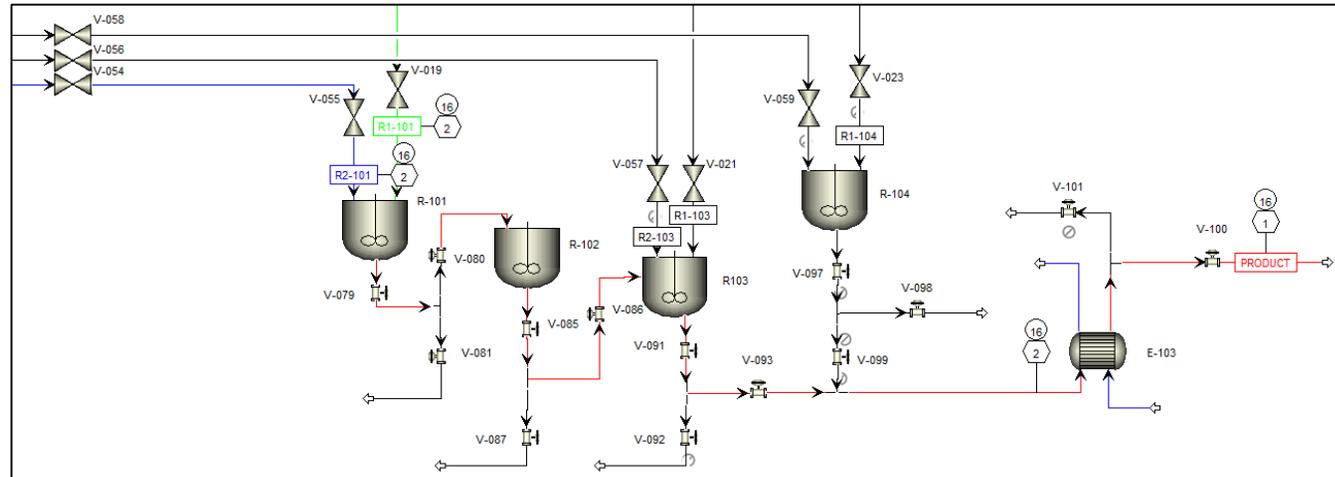


b)

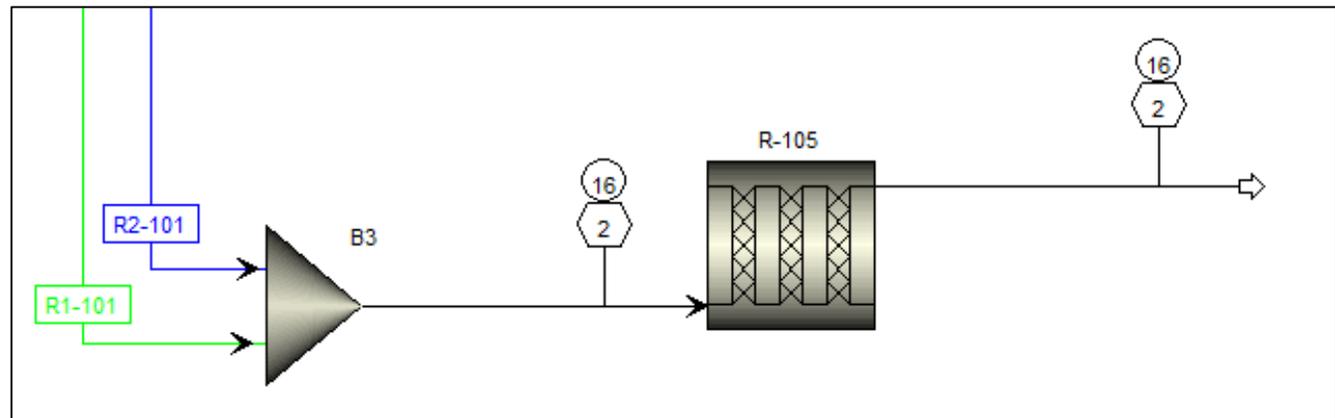


Fuente: Elaboración propia con apoyo del simulador Aspen Plus

Figura 57. a) Topología desarrollada del banco de reactores en operación secuencia CSTR con descarga de productos. b) Topología desarrollada para los reactores tubulares.



b)



Fuente: Elaboración propia con apoyo del simulador Aspen Plus

➤ **Simulación del banco de reactores de tubulares.** La línea de flujo de los reactivos hasta la corriente de salida de los intercambiadores de calor, es la misma para el sistema de alimentación de reactores tubulares. Con respecto al flujo del reactivo 1, este fluirá a través de la válvula V-014 en vez de la válvula V-015. Para el reactivo 2 será a través de la válvula V-050, en vez de la válvula V-049. A diferencia del banco de reactores de tanques agitados, las corrientes de reactivos se mezclan antes de entrar al reactor. En la figura 58, se muestra la forma en la que se especificó el reactor. La manera en que se carga la reacción de saponificación de acetato de etilo es la misma a la descrita en la simulación del banco de reactores de tanques agitados.

Figura 58. Configuración del reactor tubular R-105 en Aspen Plus. a) Selección del modo de operación adiabática. b) Dimensiones del reactor y fase de reacción.

a)

b)

Fuente: Simulación en Aspen Plus.

La forma en que se determinó el diámetro se muestra en la expresión de la ecuación 123, que surge de la ecuación del volumen de un cilindro

$$D = \sqrt{\frac{4 * V}{\pi * L}} \quad \text{Ec. 123}$$

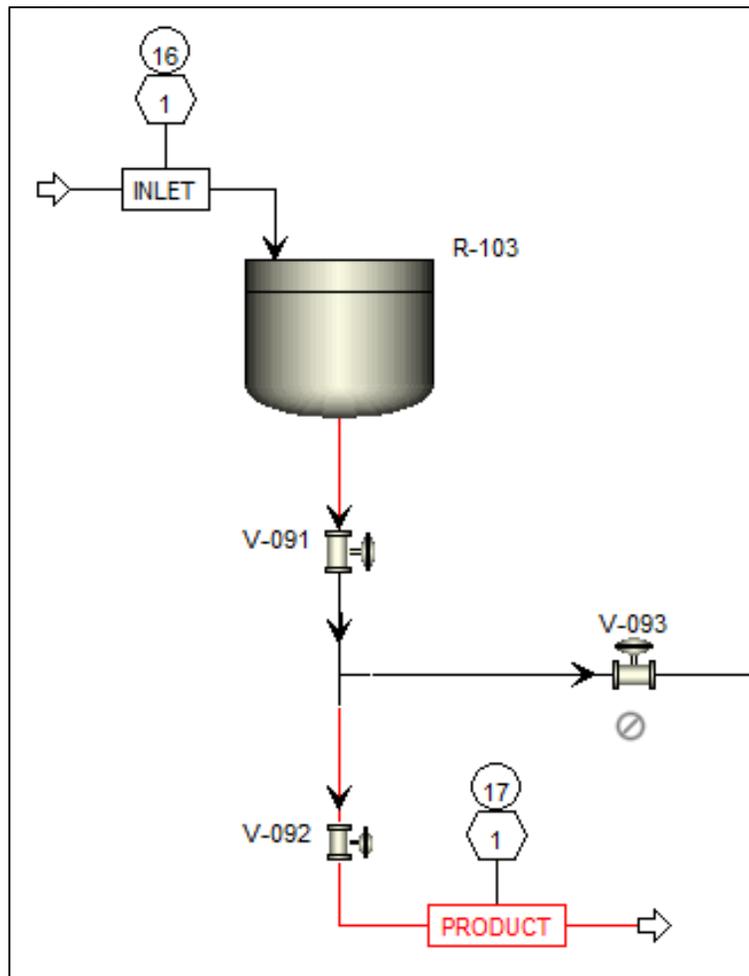
Donde D es el diámetro del reactor, V es el volumen del reactor (1 L), y L es la longitud del reactor (262 mm). Resolviendo y haciendo consistente el uso de las unidades se tendrá

$$D = \sqrt{\frac{4 * 10^6 \text{ mm}^3}{\pi * 262 \text{ mm}}} = 69.71 \text{ mm} \quad \text{Ec. 124}$$

Se hizo el mismo procedimiento para el reactor de 3 litros, R-108, teniendo una longitud de 741 mm, y un diámetro de 71.8 mm. La topología desarrollada en Aspen Plus para los reactores tubulares, se muestra en la figura 57.b.

3.4.1.4 Modo de operación por lotes. Debido a que los reactivos se cargan directamente al reactor, y la reacción se desarrolla prácticamente a temperatura constante bajo las condiciones de alimentación, se presenta el siguiente esquema con descarga directa de productos para el modo de operación por lotes.

Figura 59. Esquema del modo de operación por lotes de R-103 para la saponificación de acetato de etilo en Aspen Plus con descarga directa.



Fuente: Elaboración propia con apoyo del simulador Aspen Plus.

En el tiempo inicial ($t=0$) se cargan los reactivos al reactor bajo las condiciones estipuladas en la tabla 65. Para llevar el ciclo de un lote de 1 litro de reactivos, se especifica la velocidad de flujo volumétrico como 1 l/h, como se muestra en la figura 60, y el tiempo por ciclo como 1 hora, como se indica en la figura 61. El tiempo por

ciclo del modo de operación por lotes se encuentra en la pestaña de “Operation Times” en la configuración de cada reactor. A su vez, en esta pestaña se define el tiempo máximo de cálculo, así como el intervalo de tiempo entre los puntos de los perfiles generados durante la simulación. En la figura 62, se puede revisar la forma en la que se especificaron en el simulador los modos de operación adiabático, e isotérmico. La manera en que se carga la reacción es igual a la de los reactores de CSTR y PFR.

Figura 60. Condiciones de alimentación del reactor por lotes R-103 en Aspen Plus.

Specifications

Flash Type: **Temperature** Pressure

State variables

Temperature: 16 C

Pressure: 560 mmHg

Vapor fraction: []

Total flow basis: **Volume**

Total flow rate: 1 l/hr

Solvent: **H2O**

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: [] C

Component concentration reference temperature: [] C

Composition: **Mole-Conc** mol/l

Component	Value
H2O	
ETHYL-01	0.1
SODIU-01	0.1
SODIU-02	
ETHAN-01	
NA+	
OH-	
CH3COO-	
Total	0.2

Fuente: Simulación en Aspen Plus.

Figura 61. Especificación del tiempo de ciclo del reactor por lotes R-103 en Aspen Plus.

Batch cycle time

Total cycle time: 1 hr

Batch feed time: hr

Down time: 0 hr

Profile result time

Maximum calculation time: 1 hr

Time interval between profile points: 0.01 hr

Maximum number of profile points: 102

Fuente: Simulación en Aspen Plus.

Figura 62. Ajuste de las condiciones de operación en el reactor R-103. a) Adiabático. b) Isotérmico.

a)

The screenshot shows the configuration for reactor R-103 in Aspen Plus. On the left, under 'Reactor operating specification', the 'Constant heat duty' option is selected, and the 'Duty' is set to 0 Watt. On the right, under 'Pressure specification', the 'Specify reactor pressure' option is selected, with 'Reactor pressure' set to 560 mmHg and 'Catalyst loading' set to 0 kg.

b)

The screenshot shows the configuration for reactor R-103 in Aspen Plus. On the left, under 'Reactor operating specification', the 'Constant temperature' option is selected, and the 'Temperature' is set to 16 C. On the right, under 'Pressure specification', the 'Specify reactor pressure' option is selected, with 'Reactor pressure' set to 560 mmHg and 'Catalyst loading' set to 0 kg.

Fuente: Simulación en Aspen Plus

3.4.2 Resultados. Los resultados obtenidos en cada modo de operación se presentarán junto con los resultados calculados del modelo matemático propuesto para cada caso, indicando las razones por las que difieren.

3.4.2.1 Reactores continuos de tanques agitados.

➤ **Único CSTR.** A continuación, se muestran los resultados para la configuración de reactores únicos CSTR, R-103, y R-104 de 1 litro, y 3 litros de capacidad respectivamente. Como se puede notar en la tabla 75, los resultados de conversión difieren por decimales, lo que indica que los métodos numéricos se aplicaron de manera satisfactoria. Existe mayor diferencia en los resultados de temperatura de salida, para el reactor de 1 litro y calor requerido. Esto puede explicarse con el hecho de que las corrientes de alimentación a los reactores en la simulación, llevaban una leve mayor carga energética debido a las operaciones de bombeo, que aumenta en un grado muy leve la temperatura del líquido a la entrada del reactor. Por otro lado, Aspen Plus lleva a cabo la resolución del modelo de una manera rigurosa involucrando calores de mezclado de las corrientes y un modelo termodinámico que considera las propiedades de las mezclas, así como la interacción molecular para el sistema electrolítico. Todas las consideraciones previas no se tuvieron en cuenta en el modelo matemático. Adicionalmente, puede verse cierto grado de divergencia para el calor requerido de cada reactor. Esto se puede explicar con el hecho de que en el modelo matemático se alimentó una corriente con todos los reactivos al reactor, mientras que en la simulación se alimentaron dos corrientes, cada una con una solución de cada reactivo, lo que implica que además del término de generación de energía por la reacción, debe considerarse el término de generación de energía con respecto al mezclado de las soluciones de alimentación, en el balance global de energía de los reactores.

Además, los valores de capacidad calorífica y entalpia de reacción seleccionados pueden diferir con los que utiliza el simulador a condiciones estándar.

Tabla 75. Resultados de la simulación para operación de un solo reactor CSTR, comparado con los valores calculados.

Reactor	Operación adiabática			
	Conversión		Temperatura de salida (°C)	
	Simulación	Calculada	Simulación	Calculada
R-103	0.2506	0.2502	16.07	16.03
R-104	0.4943	0.4945	16.07	16.07
Reactor	Operación isotérmica			
	Conversión		Calor requerido (W)	
	Simulación	Calculada	Simulación	Calculado
R-103	0.2498	0.2498	-2.0576	-0.7625
R-104	0.4933	0.4934	-2.5453	-1.5060

Fuente: Elaboración propia con el apoyo de la hoja de cálculo de Excel y el simulador Aspen Plus.

➤ Secuencia CSTR.

Tabla 76. Comparación de resultados de la saponificación de acetato de etilo para la secuencia CSTR calculada y de la simulación.

Modo de operación	Variable	R-101	R-102	R-103	
Adiabático	X^G	Simulación	0.2506	0.4357	0.5735
		Calculada	0.2502	0.4354	0.5734
	T (°C)	Simulación	16.07	16.07	16.07
		Calculada	16.03	16.06	16.08
Isotérmico	X^G	Simulación	0.2498	0.4344	0.5721
		Calculada	0.2498	0.4348	0.5723
	\dot{Q} (W)	Simulación	-2.0576	-0.3699	-0.2757
		Calculado	-0.7626	-0.5639	-0.4204

Fuente: Elaboración propia con el apoyo de la hoja de cálculo de Excel y el simulador Aspen Plus.

En la tabla 76 se puede verificar los resultados para la secuencia CSTR. Se puede notar que los valores de conversión difieren por decimales, y los valores que se relacionan con el balance de energía difieren en mayor grado, debido a que el modelo matemático se solucionó en condiciones ideales, sin calores de mezclado, y sin la consideración de un modelo termodinámico que involucre las propiedades de las sustancias, así como la interacción de las moléculas del sistema electrolítico. Cabe destacar, que se llevó a cabo la simulación bajo las condiciones de operación de Acosta y Perez¹⁵², obteniendo resultados satisfactorios, por lo que el modelo

desarrollado en Aspen Plus para el banco de reactores de tanques agitados se puede extender para otras condiciones de operación de la reacción.

3.4.2.2 Reactor Tubular. En la tabla 77, se muestran los resultados para la operación adiabática de los reactores tubulares (PFR) de 1 litro y de tres litros.

Tabla 77. Comparación de resultados de la saponificación de acetato de etilo en los reactores tubulares calculados y de la simulación.

Reactor	Conversión		Temperatura de salida (°C)	
	Simulación	Calculada	Simulación	Calculada
R-105	0.2869	0.2857	16.09	16.04
R-108	0.6353	0.6274	16.12	16.08

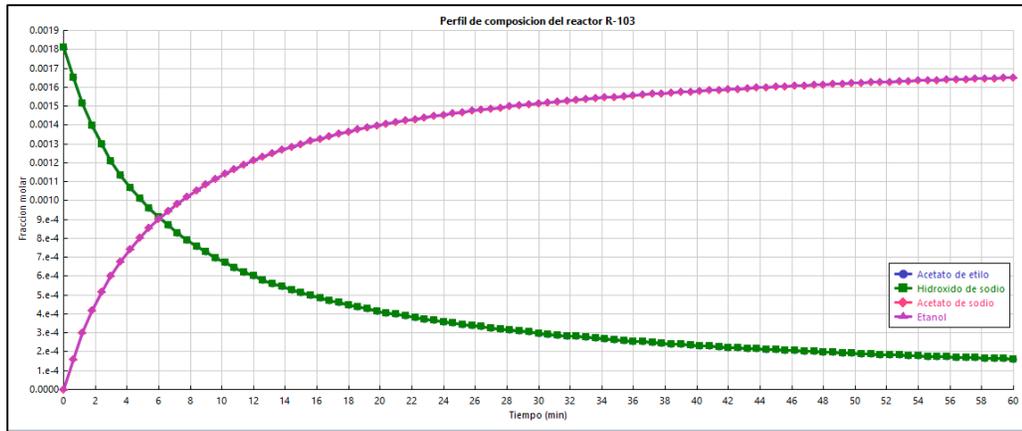
Fuente: Elaboración propia con el apoyo de la hoja de cálculo de Excel y el simulador Aspen Plus.

Como se indicó previamente, el simulador considera los calores de mezclado de las corrientes, razón por la cual difieren en cierta medida los resultados de temperatura de salida. Se puede explicar que la divergencia se encuentra debido a que para el desarrollo del modelo PFR en la simulación, fue necesario establecer las dimensiones del mismo, implicando una resolución más rigurosa de las ecuaciones de diseño, mientras que en el modelo matemático solo se especificó el volumen y una velocidad de flujo volumétrico, que permitiera definir un tiempo de residencia τ .

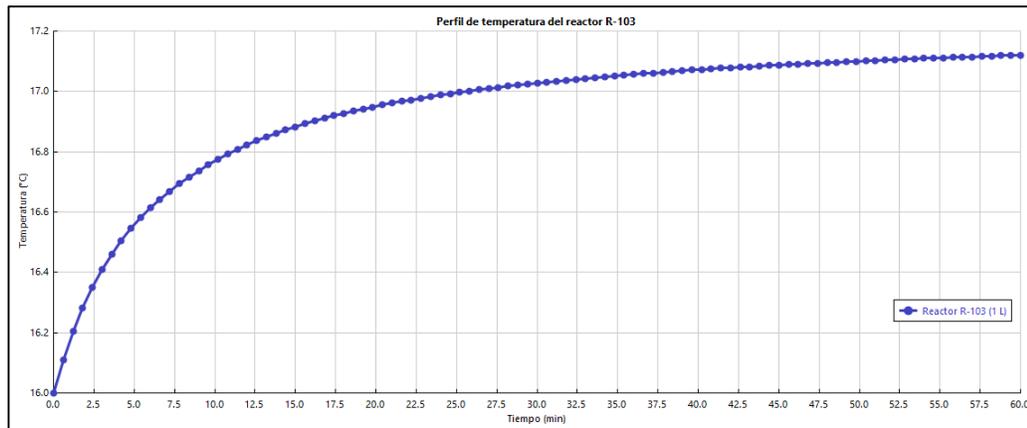
3.4.2.3 Reactor por lotes. Los resultados de la simulación se muestran en la figura 63 para operación adiabática, y 64 para operación isotérmica. Con respecto al nivel de conversión los resultados son prácticamente iguales comparando las gráficas 63.a. y 64. Esto es debido a que bajo las condiciones de carga al reactor, no es necesario llevar a cabo una estrategia de regulación térmica del reactor, ya que en operación adiabática la temperatura se eleva en aproximadamente 1 °C, lo que indica que las condiciones que se lleva a cabo la reacción en ambos modos de operación es prácticamente igual. Si se compara la figura 63.b con la figura 43, puede notarse que el modelo matemático entregó una temperatura mayor de 17.7°C, mientras que en la simulación se obtuvo una temperatura de 17.1°C después de 1 hora del lote. Se puede explicar con el hecho de que los valores de entalpia de reacción, y de capacidad calorífica difieren de los que utiliza el simulador. Además, como se indicó previamente, Aspen Plus considera un modelo termodinámico para resolver la resolución de la simulación. Por otro lado, los valores de conversión son casi idénticos para el tiempo de vida media (aproximadamente 6 minutos) y el valor de conversión después de 1 hora de operación (aproximadamente 90%).

Figura 63. Resultados de la simulación del reactor R-103 por lotes. a) Perfil de composición en el reactor. b) Perfil de temperatura en el reactor.

a)

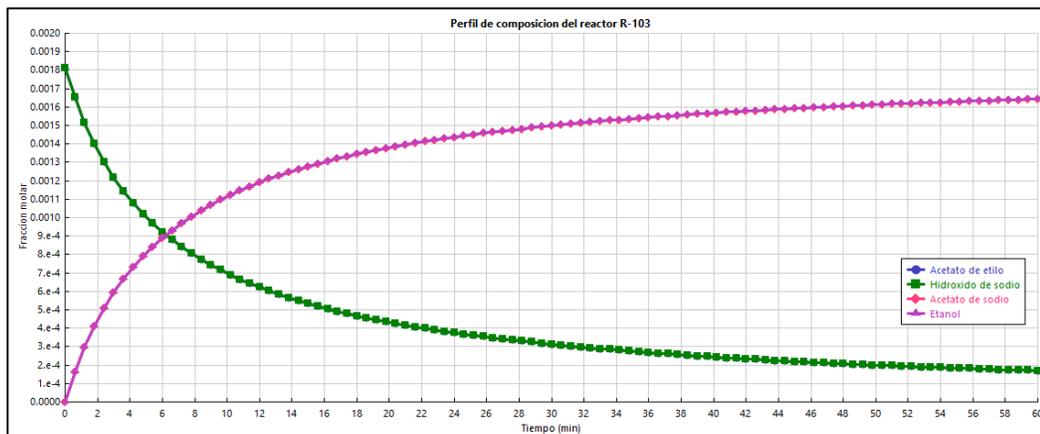


b)



Fuente: Elaboración propia con el apoyo de la hoja de cálculo de Excel y el simulador Aspen Plus.

Figura 64. Perfil de composición del reactor por lotes R-103 en operación isotérmica.



Fuente: Elaboración propia con el apoyo de la hoja de cálculo de Excel y el simulador Aspen Plus

4. CONCLUSIONES

- Se planteó metodológicamente la caracterización operacional del banco de reactores con base en la información suministrada por el fabricante, llegando a la conclusión de que la unidad puede operarse en modo continuo; pudiéndose utilizar los tanques agitados como reactores de flujo (CSTR) tanto para operación de un solo equipo (R-103 o R-104 con enfriamiento de productos) como para una secuencia CSTR de tres reactores (R-101 a R-103), así como los reactores tubulares en modo de operación continuo (PFR) en un único reactor (R-105, R-108 o R-109), o en secuencia de hasta tres reactores (R-105 a R-107), con posibilidad de utilizar 4 intercambiadores de calor (2 de precalentamiento de reactivos, 1 para cada línea de flujo de los reactivos; y 2 de enfriamiento de productos, 1 para cada banco de reactores), 2 bombas dosificadores de reactivos, 2 bombas centrifugas de aceite térmico (para el precalentamiento de reactivos, y la operación de transferencia de calor en los reactores, respectivamente), instrumentos de medición como termopares tipo J, manómetros, indicadores de nivel de desplazamiento y rotámetros, y un arreglo de válvulas de bola, de globo, de retención, de seguridad y toma-muestras; y pudiéndose operar en modo lotes y semilotes con la utilización de los reactores de tanques agitado; proponiendo que se lleven a cabo las reacciones de saponificación de acetato de etilo, hidrólisis de anhídrido acético, descomposición de alcohol diacetona, y esterificación de ácido acético en medio de ácido metanosulfónico, reacciones seleccionadas principalmente en base al criterio de resistencia química del material de construcción (acero 304), y de los empaques de las tuberías (EPDM).
- Se desarrolló un modelo matemático para la saponificación de acetato de etilo, utilizando ecuaciones de balance de materia y de energía en los reactores, la ley de velocidad de la saponificación de acetato de etilo, parámetros energéticos y cinéticos de la reacción y factores energéticos de las sustancias involucradas, con el fin de simular el funcionamiento del banco de reactores para los modos de operación continua (CSTR, Secuencia CSTR, PFR), y para el modo de operación por lotes, resolviendo el sistema por el método de ecuaciones simultáneas, bajo las condiciones de operación seleccionadas con base en la literatura, por el método de Euler para los reactores tubulares, y el método de Runge Kutta 4 orden para los reactores por lotes, usando como herramienta las hojas de cálculo de Excel, comparando los resultados obtenidos con la simulación desarrollada en Aspen Plus, concluyendo que se desarrolló de manera satisfactoria la resolución de las expresiones matemáticas en base a la información entregada en las tablas 75, 76 y 77, estableciendo que las diferencias en los resultados están soportados en el hecho de que el modelo matemático desarrollado no consideró las interacciones intermoleculares entre los componentes del sistema que son de tipo electrolítico, así como las entalpías de mezclado de las corrientes de alimentación, obteniendo los mejores resultados en la secuencia de tres reactores CSTR, cada uno de 1 litro de capacidad, con una conversión de aproximadamente 57%, y en el reactor tubular R-108 de tres litros con una conversión de aproximadamente

63%; para el modo de operación por lotes, se alcanza el 90% de conversión a los 50 minutos de reacción, recomendando operar adiabáticamente bajo las condiciones de operación utilizadas.

- Se elaboraron las guías de laboratorio con base en la reacción de saponificación de acetato de etilo, basándose en los resultados del modelo matemático y de la simulación, con respecto a las cantidades de alimentación, y a los resultados esperados, entregando las guías de laboratorio teórico-prácticas para uso en docencia, considerando los protocolos para la disposición de residuos, la seguridad en el área de trabajo mediante la Norma Técnica Colombiana referente a higiene, colores, y señales de seguridad (NTC 1461) así como las indicaciones de peligro y pictogramas del sistema globalmente armonizado de clasificación y etiquetado (SGA), el seguimiento del avance de reacción mediante titulación de hidróxido de sodio con ácido clorhídrico, los tiempos de experimentación, y los cuestionarios que ayudan a profundizar en la preparación de la práctica de laboratorio, en el tiempo de experimentación, y en la post-operación.

5. RECOMENDACIONES

- Caracterizar en físico la planta piloto de reactores de la Fundación Universidad América, comparando con las especificaciones entregadas por el fabricante, y el desarrollo de este documento.
- Identificar todos los dispositivos del diagrama de flujo de procesos del banco de reactores en la planta en físico.
- Caracterizar las longitudes y accesorios del sistema de tuberías de la planta en físico, con el fin de desarrollar un modelo matemático que involucre las pérdidas de energía primarias y secundarias, respectivamente.
- Buscar reacciones únicas y múltiples que se puedan llevar a cabo en el banco de reactores, que complementen las reacciones propuestas en el presente documento, para que se puedan proponer para la realización de las prácticas de laboratorio.
- Llevar a cabo la saponificación de acetato de etilo en el banco de reactores, comparando los resultados obtenidos con los propuestos por este documento.
- Modelar y representar el banco de reactores de manera más rigurosa en el simulador Aspen Plus, teniendo en cuenta tramos de tubería, curvas de eficiencia de las bombas, y coeficientes de transferencia de calor global de los intercambiadores de calor, operando tanto en estado estacionario como transitorio.

BIBLIOGRAFÍA

ABDALLA, Arman. Saponification: A Comparative Kinetic Study in a Batch Reactor, 2010.

ACERIND. Aceros inoxidable: Desarrollo y aplicaciones [En línea]. Introducción a los aceros inoxidable. [Consultado: 06 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.inoxidable.com/infoutil.htm>

ACOSTA, Jair y PEREZ, Rolando. Estudio experimental y simulación de la saponificación del acetato de etilo en tres reactores CSTR en serie [En línea]. Trabajo de grado para optar por el título de Ingeniero Químico. Cartagena, Colombia. Universidad de Cartagena, Facultad de ingeniería, Programa de Ingeniería Química, marzo de 2012. [Consultado: 18 de agosto de 2018]. Disponible en: <http://repositorio.unicartagena.edu.co:8080/jspui/bitstream/11227/107/2/PROPU%20DEFINITIVA.%20FINAL.pdf>

AKERLOF, Gosta. Decomposition of diacetone alcohol by sodium hydroxide in water mixtures of organic solvents. *Journal of the American Chemical Society*. 50(5), p. 1272- 1275. DOI:10.1021/ja01392a006

ALACER MAS. Tablas de corrosión [En línea]. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en: <http://www.alacermas.com/productos.php?categoria=1&subcategoria=152&gamma=1&producto=199#>

ALSURA. Hoja de seguridad: Etanol [En línea]. Bogotá, noviembre de 2003. [Consultado: 18 de agosto]. Disponible en internet: <https://www.arlsura.com/files/hojas/etanol.pdf>

AMENAGHAWON, N.A, et. al, Modelling and simulation of the batch hydrolysis of acetic anhydride to produce acetic acid [En línea]. *Nigerian Journal of Technology*, vol. 32, no. 3, 2013. [Consultado: 20 de Agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://www.ajol.info/index.php/njt/article/download/123610/113139>

ANAYA, Alejandro y PEDROZA, Humberto. Plantas piloto, el paso entre el huevo y la gallina. Instituto Mexicano de Ingenieros Químicos A.C. Tecnología, Ciencia, Educación, vol. 23, núm. 1, Ciudad de México, México, 2008.

APPLICHEM. Ficha de datos de seguridad: Acido Metanosulfonico [en línea]. Junio de 2015. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: https://www.applichem.com/fileadmin/datenblaetter/A7524_es_ES.pdf

Aspen Technology, Inc. Modeling Processes with Electrolytes: Getting Started [En línea]. Aspen Plus: Steady State Simulation, Version 10. 1981-1999. [Consultado: 26 de noviembre de 2018]. Disponible en internet:

<https://chemengr.ucsb.edu/~ceweb/courses/che184b/aspplus/GettingStartedElectrolytes.pdf>

ATOCHEM. MSA Catalyzed Esterification [En línea]. Chemical & Engineering news, Thiopics, 1991. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <https://cdn-pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/cen-v069n019.p009>

BASF. Hoja de seguridad: Acido Metanosulfonico [en línea]. Mayo de 2015, p. 2. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: https://worldaccount.basf.com/wa/NAFTA/Catalog/ChemicalsNAFTA/doc4/BASF/PRD/30169062/.pdf?asset_type=msds/pdf&language=ES&validArea=MX&urn=urn:documentum:ProductBase_EU:09007af8803fe554.pdf

BASILE. Angelo. Acetic acids: Chemical properties, production and applications [En línea]. Hauppauge, New York: Nova Science Publishers, Inc. 2013. p. 12. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en ebook: <http://ezproxy.uamerica.edu.co:2098/ehost/ebookviewer/ebook/ZTAwMHh3d19fNjY3MDMyX19BTg2?sid=3a78db79-9131-4a85-b501-182325b0bafd@sessionmgr4009&vid=1&format=EB&rid=1>

CAMLAB. Corrosion Chart [En línea]. Introduction to Stainless Steel. [Consultado: 20 de Agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://www.camlab.co.uk/originalimages/sitefiles/Stainless%20Steel%20Chemical%20Compatibility.pdf>

CAP S.A.S. Efectos de los elementos de aleación [En línea]. Información del acero. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://www.infoacero.cl/acero/efectos.htm>

CARLSON, Eric C. Don't gamble with physical properties for simulation [En línea]. Chemical Engineering Progress, 1996. [Consultado: 27 de noviembre de 2018]. Disponible en internet: <https://pdfs.semanticscholar.org/a691/8690efb562b462410b4bb82a3ec58cd694bc.pdf>

CARLROTH. Fichas de datos de seguridad: Anhídrido acético [En línea]. Enero de 2018. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: https://www.carlroth.com/downloads/sdb/es/4/SDB_4483_ES_ES.pdf

CENDI, Centro nacional para el desarrollo del acero inoxidable, A.C. Resistencia a la corrosión de los aceros inoxidables [En línea]. San Luis de Potosí, México. [Consultado: 05 de julio de 2018]. Disponible en internet: http://www.iminox.org.mx/downloads/publicaciones/manual_resistencia_a_la_corrosion.pdf

CHAVEZ, Cecilia. Acero inoxidable 304 versus 316, ¿Cuál es mejor? Armagard, El Especialista En Armarios Para PC Lo Investiga [En línea]. Blog de Armagard. 02 de Julio de 2014. [Consultado: 01 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://www.armagard.es/blog/acero-inoxidable-304-versus-316-cual-es-mejor-armagard-el-especialista-en-armarios-para-pc-lo-investiga/>

COKER, A. Modeling of Chemical Kinetics and Reactor Design. Gulf Professional Publishing, 2001.

COR QUIMICA. Ficha de datos de seguridad: Alcohol diacetona [En línea]. Abril de 2005. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://cor.es/eng/pdf/disolventes/DIACETONA%20ALCOHOL.pdf>

CREG. Tarifas de energía eléctrica (\$/kWh) reguladas por la comisión de regulación de energía y gas (CREG). Mayo de 2018. [Consultado: 25 de enero de 2019]. Disponible en internet: <https://www.codensa.com.co/document/Tarifario-mayo-2018.pdf>

CREUS, Antonio. Instrumentación industrial. Alfaomega Grupo Editor, S. A, de C. V. México, D. F. 6° edición. [Consultado: 18 de noviembre de 2018].

CTR SCIENTIFIC. Hoja de datos de seguridad: Agua destilada [En línea]. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.amerex-mexico.com/pdf/certificados/MSDS%20Agua%20Destilada.pdf>

DAVIS. J. R. Corrosion: Understanding the basics. ASM International, Material Park, Ohio, 2000. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: http://dl.iran-avad.com/pdf95/Corrosion%20Understanding%20the%20Basics_iran-mavad.com.pdf

DE LA PEÑA, Ramón. Técnicas de escalamiento aplicadas al diseño de procesos químicos [En línea]. Monterrey, México, 1978. [Consultado: 11 de enero de 2019]. Disponible en internet: <http://www.ai.org.mx/presentacion/técnicas-de-escalamiento-aplicadas-al-diseño-de-procesos-químicos>

DURAN, Jairo. Esterificación del alcohol isoamilico con ácido N-butírico: estudio del equilibrio químico y de fases [En línea]. Proyecto de grado para optar por el título de Magister en Ingeniería Química. Universidad Nacional de Colombia, Facultad de ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Bogotá, 2013. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <http://bdigital.unal.edu.co/11638/1/300195.2013.pdf>

El acero y su densidad [En línea]. 24 de enero de 2018. [Consultado: 02 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://www.mujaresenmatematicas.com/2018/01/el-acero-y-su-densidad.html>

E.C.L De Silva. Heterogeneous Kinetic Study for Esterification of Acetic Acid with Ethanol [En línea]. ENGINEER - Vol. XLVII, No. 01, pp. [9-15], 2014. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <https://engineer.sljol.info/articles/10.4038/engineer.v47i1.6855/galley/5345/download/>

FINŠGAR, M. y MILOŠEV. Corrosion behaviour of stainless steels in aqueous solutions of methanesulfonic acid. Corrosion Science, 52(7), 2430–2438. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. DOI:10.1016/j.corsci.2010.04.001

FOGLER, Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. Pearson educación, México, 2008.

FP. Guía de resistencias químicas [En línea]. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.poberaj.com.ar/distribuidora/FlexPower/guia-resistencia-quimica-flexpower.pdf>

FRITZLER, B. C. et. al. Acetic Anhydride hydrolysis at high acetic anhydride to water ratios [En línea]. Wiley Online Lybrary. Enero de 2014. [Consultado: 20 de Agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/kin.20838>

FUENTES ORTEGA, Enrique. Microestructura y propiedades de los aceros inoxidables AISI 304 Y ASI 420 [En línea]. KIPDF. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: https://kipdf.com/21-microestructura-y-propiedades-de-los-aceros-inoxidables-aisi-304-y-aisi-420_5ab873e61723dd439c973c21.html

GANGADWALA, Jignesh et al. Esterification of Acetic Acid with Butanol in the Presence of Ion-Exchange Resins as Catalysts. Industrial & Engineering Chemistry Research 2003 42 (10), 2146-2155. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. DOI: 10.1021/ie0204989

GARCIA, Guillermo. CHEM. REACTOR SIMULATOR: Herramienta de simulación de CSTR como apoyo a la docencia [En línea]. Trabajo de grado para la obtención del título en Ingeniería Química. Madrid. Escuela técnica superior de ingenieros industriales, Universidad politécnica de Madrid, junio 2016. [Consultado: 06 de agosto de 2018]. Disponible en internet: http://oa.upm.es/42867/1/TFG_GUILLERMO_NIEVA_GARCIA_VILLARACO.pdf

GONZALEZ, Roberto. Principios básicos de escalado. Centro de estudios de combustión y energía, Universidad de Matanzas, Camilo Cienfuegos, Ciudad de Matanzas, Cuba: Editorial Universitaria, 2000.

GTM. Hoja de datos de seguridad: Acetato de sodio [En línea]. Junio de 2014. [Consultado: 18 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.gtm.net/images/industrial/a/ACETATO%20DE%20SODIO.pdf>.

GTM. Hoja de datos de seguridad: Acetona [En línea]. Octubre de 2016. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.gtm.net/images/industrial/d/DIACETONA%20ALCOHOL.pdf>

GTM. Hoja de datos de seguridad: Alcohol diacetona [En línea]. Agosto de 2014. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.gtm.net/images/industrial/d/DIACETONA%20ALCOHOL.pdf>

GTM. Etanol: Ficha de datos de seguridad [En línea]. Enero 2017. [Consultado: 18 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.gtm.net/images/industrial/e/ETANOL.pdf>

INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Acetato de etilo [En línea]. 1994. [Consultado: 09 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/301a400/nspn0367.pdf>

INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Acetato de sodio [En línea]. 2006. [Consultado: 09 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/501a600/nspn0565.pdf>

INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Ácido acético [En línea]. Mayo de 2019. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://sct.uab.cat/l-amb-controlat/sites/sct.uab.cat.l-amb-controlat/files/CH3COOH.pdf>

INSHT. Fichas internacionales de seguridad química: Anhídrido Acético [En línea]. Abril de 2006. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/201a300/nspn0209.pdf>

INSHT. Fichas Internacionales de Seguridad Química: Etanol (Anhidro) [En línea]. Octubre 2000, p. 1. sección "PREVENCION" [Consultado: 18 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.ebd.csic.es/lie/PDF/ETANOL.pdf>

INSTITUTO COLOMBIANO DE NORMAS TÉCNICAS Y CERTIFICACIÓN. Compendio de normas para trabajos escritos. NTC-1486-6166. Bogotá D.C.: El instituto, 2018. ISBN 9789588585673 153 p.

ITALUMINIO. Ficha técnica del producto: Acero inoxidable 304 [En línea]. Italuminio: Catálogos. [Consultado 01 de julio de 2018]. Disponible en internet: <http://italuminio.com.co/catalogos/SS304-ficha.pdf>

KOVAC, Anita. Checking the kinetics of acetic acid production by measuring the conductivity [En línea]. Faculty of chemistry and chemical engineering, University of

Maribor, Slovenia, 2007. [Consultado: 19 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://www.cheric.org/PDF/JIEC/IE13/IE13-4-0631.pdf>

KUMAR, Ajit, et al. Corrosion behaviour of stainless steel grade 304 IN-1MHCL [En línea]. En: International journal of innovative research & development. Mayo 2014, vol. 3. no. 5. [Consultado: 30 de Julio de 2018]. Disponible en internet: <http://www.ijird.com/index.php/ijird/article/viewFile/49634/40225> ISSN 2278- 0211

MANJARE, Manisha. et. al. ESTERIFICACION REACTION OF ACETIC ACID AND ETHANOL WITH H₂SO₄: BATCH KINETICS AND SIMULATION APPROACH [En línea]. International Journal of Advanced Technology in Engineering and Science. vol. no 3, special issue no 01, Noviembre de 2015. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: http://www.ijates.com/images/short_pdf/1446731325_144D.pdf

MARLIN STEEL. What's the difference between grade 304 and 304L stainless steel? [En línea]. Steel Wire Products, Stainless Steel Baskets. 06 de enero de 2017. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://www.marlinwire.com/blog/difference-between-grade-304-and-304l-stainless-steel>

MATELCO. Tabla de compatibilidades [En línea]. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.matelco.com/admin/UploadFiles/Matelco%2020Tabla%20de%20compa%20tibilidades.pdf>

MERCK. Ficha de datos de seguridad: Anhídrido acético [En línea]. Julio de 2017. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: http://www.merckmillipore.com/INTERSHOP/web/WFS/Merck-INTL-Site/en_US/-/USD/ShowDocument-File?ProductSKU=MDA_CHEM-100042&DocumentType=MSD&Language=ES&Country=ES

MILLER, J. G., & KILPATRICK, M. Basic catalysis in the decomposition of diacetone alcohol. Journal of the American Chemical Society, 53(9), 1931, p. 3217–3224. doi:10.1021/ja01360a003

NAUMAN, Bruce. Chemical Reactor Design, Optimization, and Scale Up. Rensselaer Polytechnic Institute, 2008.

NJDHSS. Hoja informativa sobre sustancias peligrosas: Anhídrido acético [En línea]. 2005. [Consultado: 20 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://www.nj.gov/health/eoh/rtkweb/documents/fs/0005sp.pdf>

NUÑEZ, José y UDEOS Teresa. Diseño, construcción y operación de un reactor batch para saponificar acetato de etilo. Trabajo de grado para optar por el título de Ingeniero Químico, Escuela Superior Politécnica del Litoral, Guayaquil, Ecuador,

2012. Disponible en internet:
<http://www.dspace.espol.edu.ec/xmlui/bitstream/handle/123456789/38218/D-CD102078.pdf?sequence=-1&isAllowed=y>

NUÑEZ, Oscar, y CABRERA, Carlos. Comportamiento dinámico de la saponificación del acetato de etilo en un reactor de tanque con reacción continua [En línea]. Revista del instituto de investigaciones de la facultad de Geología, Minas, Metalurgia, y Ciencias Geográficas. 2012. [Consultado: 06 de agosto de 2018]. Disponible en internet:
<http://revistasinvestigacion.unmsm.edu.pe/index.php/iigeo/article/viewFile/676/530>

MCGUIRE, Michael. Physical and Mechanical Properties of Select Alloys [En línea]. Stainless Steel for design engineers. ASM International. Materials Park, Ohio, 2008. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet:
<http://ezproxy.uamerica.edu.co:2070/ehost/ebookviewer/ebook/ZTAwMHh3d19fMzk1ODM4X19BTg2?sid=94138784-07ee-41d7-99d9-c3b6241ae579@sessionmgr103&vid=5&format=EB&rid=5>

MEJIAS, Javier. Estudio sobre la depuración de los lixiviados de vertederos de RSU con cenizas volates zeolitizadas. Escuela técnica superior de ingeniería. Sevilla, España; 2005.

MUKHTAR, Ahmad et. al. Estimation parameters of Arrhenius equation for Ethyl Acetate Saponification Reaction [En línea]. Research Journal of Chemical Sciences. Vol. 5 (11), 46- 50, noviembre de 2015. [Consultado: 02 de Agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.isca.in/rjcs/Archives/v5/i11/8.ISCA-RJCS-2015-150.pdf>

MURRY, George. Salt and medium effects on the temperature coefficient of velocity of decomposition of diacetone alcohol. Journal of the American Chemical Society, 53(3), Marzo de 1931. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. DOI: 10.1021/ja01354a019

NAS, NORTH AMERICAN STAINLESS. Flat Products Stainless Steel Grade Sheet [En línea]. Steel Grades. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://www.northamericanstainless.com/wp-content/uploads/2010/10/Grade-304-304L-304H.pdf>

ORJUELA LONDONO, Álvaro et al. Estudio de la síntesis de acetato de butilo: 4-Cinética de reacción. Ing. Investig. [En línea]. 2006, vol. 26, n. 2 [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S01206092006000200004&lng=en&nrm=iso. ISSN 0120-5609.

OXIDIAL. Hoja de seguridad: Ácido acético [En línea]. Mayo de 2008, p. 4. [Consultado: 20 de agosto]. Disponible en internet: <http://www.oxidial.com.ar/assets/files/es/acido-acetico.pdf>

PEREZ y GONZALEZ, Antonio. Módulo de elasticidad [En línea]. Enciclopedia virtual de ingeniería mecánica. Área de ingeniería mecánica, Dpto. Ingeniería mecánica y construcción, Univesitat Jaume I. Castellón, España. 24 de junio de 2014. [Consultado: 02 de julio de 2018]. Disponible en internet: http://www.mecapedia.uji.es/modulo_de_elasticidad.htm

Process Solutions and Equipment S.A.S, Manual de operación del banco de reactores.

PROINDECSA. Tabla de resistencia química [En línea]. [Consultado: 23 de noviembre de 2018]. Disponible en internet: <https://studylib.es/doc/4468207/tabla-de-resistencia-química>

QUIMICA DELTA S.A DE C.V. Hoja de datos de seguridad: Acetato de etilo [En línea]. 2014. [Consultado: 09 de agosto de 2018]. Disponible en internet: https://www.quidelta.com.mx/archivos/Acetato%20de%20Etilo.esp.pdf2016-06-17_16_14_22_SyP_sga.pdf

QUIMIDROGA S.A. Ficha de datos de seguridad: Alcohol diacetona [En línea]. Marzo de 2011. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://www.ecosmep.com/cabecera/upload/fichas/7089.pdf>

SERNA, Sebastian. et. al, Evaluación tecno-económica y ambiental de la producción de acetato de etilo por vía química y biológica [En línea]. Revista de la facultad de ciencias químicas, 2015. [Consultado: 03 de agosto de 2018]. Disponible en internet: http://dspace.ucuenca.edu.ec/bitstream/123456789/23891/1/3_articulo_Revista_13.pdf

SARDAR, Suneela et. al. Kinetic law parameters study of saponification reaction using integral method [En línea]. NFC-IEFR Journal of engineering & Scientific research. [Consultado: 02 de Agosto de 2018]. Disponible en intener: <http://nijesr.iefr.edu.pk/journalFolder/7/66a74.pdf>

SRC. Tablas de corrosión del acero inoxidable [En línea]. [Consultado: 18 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: http://srcsl.com/catalogoPDFs/AreaTecnica/TABLAS_CORROSION_INOX.pdf

Resistencia a la corrosión de los aceros inoxidables [En línea]. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <http://bonnet.es/resitcorrosion.pdf>

RUSSELL, F. y DENN, M. Introducción al análisis en la ingeniería química [En línea]. Editorial Limusa, México, 1976. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <http://recursosbiblio.url.edu.gt/Sinparedes/2015/Quimica/ltrodQuim/05.pdf>

TECNOPRODUCTS. Tabla de compatibilidad [En línea]. [Consultado: 26 de agosto de 2018] Disponible en internet: <http://tecno-products.com/tabla-de-compatibilidad/>

TERMOFISHER. Ficha de datos de seguridad: Acido Metanosulfonico [En línea]. Junio de 2018. [Consultado: 03 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <https://www.alfa.com/es/content/msds/SouthAmerican/L04538.PDF>

SANABRIA, Ricardo. ¿Qué son los aceros inoxidable de calidad “L”? [En línea]. Asociación Mexicana de industriales de acabados superficiales. 30 de agosto de 2017. Párr. 2. [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://www.amas.org/que-son-los-aceros-inoxidables-de-calidad-l/>

SYKES, Peter. Investigación de mecanismos de reacción en química orgánica [En línea]. Editorial reverté, s.a. 1982. [Consultado: 26 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://books.google.com.co/books?id=g8aOyokxblAC&printsec=frontcover&hl=es#v=onepage&q&f=false>

SMITH, Robin. Chemical Process Design and Integration. John Wiley & Sons Ltd. 2005. [Consultado: 02 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <https://es.slideshare.net/MiguelAngelmartinezS1/chemical-process-design-and-integration-r-smith-2nd-ed>

TORRE, Fabiana. Proceso de fabricación: “LOS ACEROS”; Características y usos de los aceros [En línea]. Conocer los materiales. 27 de abril de 2018. [Consultado: 02 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://sites.google.com/site/conocerlosmateriales/home/proceso-de-fabricacion-los-aceros/caracteristicas-y-usos-de-los-aceros>

UNIVERSIDAD DE ALICANTE. Corrosión en la industria química [En línea]. Corrosión (Ingeniería química). [Consultado: 04 de julio de 2018]. Disponible en internet: <https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/8237/1/CorrTema11.pdf>

QUIJADA, Genoveva. Propuesta de diseño y construcción de un sistema de lavado y purificado de gases de combustión, en planta piloto; método de absorción-adsorción. Capítulo 10. Planta piloto [en línea]. Biblioteca digital. Hermosillo, México. Disponible online: <http://tesis.uson.mx/digital/tesis/docs/4324/Capitulo10.pdf>

UNMDP. Trabajo practico de laboratorio N°2 – Cinética Química – Reactor Tubular [En línea]. Laboratorio de reactores y control, Planta piloto de ingeniería química,

Facultad de ingeniería-UNMDP, 2018. [Consultado: 18 de agosto de 2018]. Disponible en internet: <https://sites.google.com/site/plantapilotomdq/guias>

UNMDP. Trabajo practico de laboratorio N°2 – DTR Reactor Tubular/Reacción en TAD [En línea]. Laboratorio de reactores y control, Planta piloto de ingeniería química, Facultad de ingeniería-UNMDP, 2018. [Consultado: 01 de septiembre de 2018]. Disponible en internet: <https://sites.google.com/site/plantapilotomdq/guias>

ANEXOS

ANEXO A.
DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESOS DEL BANCO DE REACTORES.

