

**DISEÑO DE UN REACTOR CATALÍTICO PARA LA OBTENCIÓN DE BUTANOL  
A PARTIR DE ETANOL**

**DUBAN FABIÁN GARCIA NAVAS**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERIAS FÍSICO-QUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA  
2009**

**DISEÑO DE UN REACTOR CATALÍTICO PARA LA OBTENCIÓN DE BUTANOL  
A PARTIR DE ETANOL**

**DUBAN FABIÁN GARCIA NAVAS**

Trabajo de Grado Modalidad Investigación presentado como requisito para optar al  
título de Ingeniero Químico.

**DIRECTORES:**

**Ph.D. Luz Ángela Carreño Díaz**  
Escuela de Química - UIS

**M.Sc. Crisóstomo Barajas Ferreira**  
Escuela de ingeniería Química - UIS

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERIAS FÍSICO-QUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA  
2009**

## DEDICATORIA

*A Dios;*

*A mis padres, Odilio y Martha, mis hermanos, Edison, Karol y Camila, y mis tíos,  
tías, primos y abuelos;*

*A mi novia Leidy Lizeth;*

*A mis amigos de universidad Daniel y Luz Adriana;*

*y a mi música y mi pueblo que son mi inspiración.*

## **AGRADECIMIENTOS**

Al profesor Crisóstomo Barajas quien fue el gestor y promotor del proyecto.

A la profesora Luz Ángela Carreño, quien me brindó todo lo necesario para desarrollar el proyecto.

A Karen y Daisy, mis compañeras de química, quienes fueron mis colegas en el camino del proyecto.

Al Ministerio de Agricultura, quienes son mis padrinos en este reto y quienes están aportando un granito de arena con el propósito de promover investigaciones y desarrollo en el país.

A mis compañeros del colegio y la universidad, quienes han puesto un toque en mi desarrollo personal y ético.

A los laboratoristas, en especial a Eduardo y Wilson del Laboratorio de Procesos de la escuela de Ingeniería Química.

A toda mi familia.

## CONTENIDO

1.	Introducción.....	1
2.	Marco teórico.....	3
2.1	Elegir el mejor reactor .....	3
2.1.1	Previo al proceso de elección .....	3
2.1.2	Análisis de la tarea de selección de reactor .....	3
2.1.3	Conocimiento acerca del dominio en ingeniería del reactor.....	4
2.1.4	Sistema basado en conocimiento .....	5
2.2	Reactores de laboratorio .....	7
2.2.1	Reactor Diferencial.....	8
2.2.2	Reactor Integral.....	8
2.3	Diseño del reactor .....	9
	Variables de diseño del reactor .....	9
3.	Determinación en laboratorio de la cinética de reacción .....	10
4.	Elección del reactor para el proceso de obtención de butanol .....	12
4.1	Objetivo .....	12
4.2	Recolección de información.....	12
4.3	Proceso de selección del reactor.....	12
4.3.1	Reactor deseado Clase de problema .....	12
4.3.2	Aplicación de las propiedades fuertes.....	13
4.3.3	Aplicación de las propiedades suaves y específicas.....	14

5.	Resultados y análisis.....	19
5.1	Aplicación método de integración.....	19
5.2	Obtención de las variables .....	21
6.	Conclusiones.....	24
7.	Recomendaciones.....	25
	Bibliografía.....	26
	Anexos.....	28

## LISTA FIGURAS

<b>Figura 1.</b> Montaje realizado en el laboratorio .....	10
<b>Figura 2.</b> Evaluación de las propiedades suaves .....	16
<b>Figura 3.</b> Diagrama de flujo del proceso de selección de reactor.....	18
<b>Figura 4.</b> Perfil de Masa de catalizador Vs. Conversión.....	21
<b>Figura 5.</b> Reactor Multitubular .....	22
<b>Figura 6.</b> Arreglo de los tubos del reactor .....	23
<b>Figura 7.</b> Dimensiones de cada tubo y disposición .....	24

## LISTA DE TABLAS

<b>Tabla 1.</b> Reactores posibles para el problema clase Gas-Catalizador .....	13
<b>Tabla 2.</b> Utilización de las propiedades específicas .....	14
<b>Tabla 3.</b> Evaluación propiedades suaves .....	15
<b>Tabla 4.</b> Reactores con el mismo nivel de esfuerzo .....	16
<b>Tabla 5.</b> Reactores con propiedades de retromezcla deseadas.....	17
<b>Tabla 6.</b> Reactores con características de tiempo de residencia deseado .....	17
<b>Tabla 7.</b> Datos medidos y valores de constante de reacción: .....	20
<b>Tabla 8.</b> Variables obtenidas en el diseño.....	22

## LISTA DE ANEXOS

<b>Anexo A.</b> Notación .....	28
<b>Anexo B.</b> Condiciones del cromatógrafo .....	29
<b>Anexo C.</b> Calibración correa de calentamiento .....	29
<b>Anexo D.</b> Cromatograma tomado a la salida del reactor. Pertenece al flujo de entrada de 130mL/min.....	30

## RESUMEN

**TITULO: DISEÑO DE UN REACTOR CATALÍTICO PARA LA OBTENCIÓN DE BUTANOL A PARTIR DE ETANOL\*.**

**AUTOR: DUBAN FABIÁN GARCÍA NAVAS\*\*.**

### **PALABRAS CLAVES:**

Síntesis n-butanol, bioetanol, reactor catalítico, reactor multitubular, cinética de reacción experimental.

### **DESCRIPCIÓN:**

En la actualidad nuestro país se encuentra implementando infraestructura para la obtención de etanol con el fin de cumplir con las normas reguladoras de los combustibles. Es así que ya se cuenta con plantas productoras de este componente en diferentes partes del territorio colombiano.

Estudios recientes están demostrando que la utilización de butanol en vez de etanol en la gasolina aumenta el rendimiento de dicho combustible y además es menos contaminante; el butanol es usado también en las industrias de obtención de polímeros tales como acrilato de butilo y metacrilato de butilo.

Existen varios procesos para obtener esta materia prima, tales como el *oxo proceso*, método de acetaldehído (o aldol condensación) y por bioprocesos, pero el más usado es el primero. Este método petroquímico consiste en la hidroformilación de propileno con gas de síntesis del petróleo a alta presión, y posterior hidrogenación del aldehído formado (ambas reacciones deben ser catalizadas). Este proceso es muy costoso ya que demanda mucha energía y además es altamente contaminante. En búsqueda de un mejor proceso se ha encontrado que la síntesis directa de butanol con hidroxipatita como catalizador es viable.

Es así que en el presente estudio se plantea el diseño de un reactor multitubular que cumpla con todos estos requerimientos y presente valores aceptables de conversión, partiendo del estudio experimental de la cinética de la reacción química obtenida. Con ello se pretende estar acorde con las políticas actuales colombianas, y con un fin último de no cambiar infraestructura implementada para la producción de bioetanol, sino adicionar una unidad más al proceso.

---

\* Tesis de Grado modalidad Investigación.

\*\* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas, Escuela de Ingeniería Química.  
M.Sc. Crisóstomo Barajas Ferreira (UIS), Ph.D. Luz Ángela Carreño Díaz (UIS).

## ABSTRACT

**TITLE: DESIGN OF A CATALYTIC REACTOR TO SYNTHESIZE BUTANOL FROM BIOETHANOL AS STARTING MATERIAL.\*.**

**AUTHOR: DUBAN FABIÁN GARCÍA NAVAS\*\*.**

**KEYWORDS:**

Synthesis of n-butanol, bio-ethanol, catalytic reactor, multitubular reactor, experimental kinetic reaction.

Colombia is currently implementing the physical infrastructure to produce bioethanol in order to meet the demand for biofuels. There are processing plants in different locations around the country.

Recent researches are showing that the use of butanol increases the yield of gasoline due to the additional carbon atoms that it has, butanol reduces also contaminant emissions to the atmosphere considerably. Furthermore, butanol is an important chemical feedstock used as solvent and as raw material for the synthesis of polymers like butyl acrylate and butyl methacrylate.

The synthesis of butanol can be carried out through the oxo process, the acetaldehyde method (so-called aldol condensation), or by bioprocesses, but the oxo process is the most widely spread. This consists of two successive reactions: the hydroformylation of propylene with syngas provided from oil at high pressure to produce aldehyde, and the hydrogenation of this aldehyde to provide *n*-butanol (both are catalytic reactions). This process requires large amounts of energy, leading to processes with high cost and low profitability. Searching for a better process, we have found that the direct synthesis of n-butanol from ethanol over hydroxyapatite is viable.

In the present research we propose the design of a multitubular reactor to carry out the catalytic conversion. A successful implementation of the proposed catalytic conversion allows the biofuels industry to comply with government policies but also just to add a new unit to the existing bioethanol plants without reforming the entire plants.

---

\* Thesis of Degree Industrial Practical Modality

\*\*Physical - Chemical Engineering College, School of Chemical Engineering. M.Sc. Crisóstomo Barajas Ferreira (UIS), Ph.D. Luz Ángela Carreño Díaz (UIS)

## 1. INTRODUCCIÓN

Debido a problemas globales como el calentamiento global, el mundo ha venido implementando nuevas técnicas para cuidar el ambiente. Es así que en temas como los combustibles se buscan nuevos caminos de solución para esta problemática. En muchos países del mundo se están implementando normativas en miras a la utilización de combustibles más amigables con el ambiente y por ello se están adicionando cantidades de bioetanol y aceite natural a los combustibles comunes (gasolina y diesel respectivamente). En Colombia actualmente se adiciona una cantidad de 10% de etanol a la gasolina y 5% de aceite de palma al diesel<sup>1</sup>.

Por otro lado, estudios recientes demuestran que el butanol proporciona más rendimiento en el motor de los vehículos y también se están analizando los productos contaminantes arrojados en su combustión, notándose una leve mejoría a los obtenidos con el etanol<sup>2</sup>. Esto es buen indicio de que el uso del etanol podría en un futuro ser reemplazado por el butanol.

Además de esto, el butanol también tiene diferentes usos industriales tales como la obtención de polímeros como el acrilato de butilo y metacrilato de butilo. Hoy en día la fabricación de esta materia prima se realiza principalmente por el proceso denominado oxo proceso, el cual consiste en la hidroformilación de propileno con gas de síntesis del petróleo a alta presión, y posterior hidrogenación del aldehído formado<sup>3</sup>. Este proceso es muy costoso ya que demanda mucha energía y además es altamente contaminante. Volviendo al tema de los procesos limpios, la síntesis directa del n-butanol sobre hidroxiapatita se perfila como un proceso

---

<sup>1</sup> Infante, A. (2009). Evolución, Actualidad y Perspectivas de los Biocombustibles en Colombia. *Aseduis Bucaramanga*. Edición 3. 32-35.

<sup>2</sup> Tsuchida, T.; Sakuma, S.; Takeguchi, T; Ueda, W. (2006). Direct Synthesis of n-Butanol from Ethanol over Nonstoichiometric Hydroxyapatite. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2006, 45, 8634-8642

<sup>3</sup> Weissermel, K.; Arpe, H. J. (1981). *Química Orgánica Industrial*. Editorial Reverté. Oxo Alcoholes. Págs. 128-130.

innovador y que cumple con los requerimientos para ser amigable con el ambiente, proporcionando un producto demandado en el mercado.

Por todas estas ventajas del proceso se propone el diseño de un reactor para realizar dicha síntesis, partiendo del estudio cinético en el laboratorio de la reacción y obteniendo como resultado las variables necesarias para la fabricación de un reactor multitubular de lecho fijo.

## 2. MARCO TEÓRICO

### 2.1 Elegir el mejor reactor

El procedimiento consiste en recopilar la mayor cantidad de información posible acerca del proceso que se quiere llevar a cabo y reflejarla en el diseño del reactor que mejor cumpla con dichos requerimientos. En el artículo escrito por Jacobs, R., & Jansweijer, W., se observa un esquema paso por paso para elegir el mejor reactor. Este proceso se basa en los siguientes pasos:

#### 2.1.1 Previo al proceso de elección

La idea es tener una lista de todos los reactores posibles según las fases existentes en el proceso, evitando eliminación temprana de posibilidades y sucesivamente ir excluyendo reactores hasta obtener el mejor. La clasificación de los problemas de selección de reactor la componen las fases y combinaciones posibles de ellas que pueda tener el proceso y son 7: gas, líquido, gas-líquido, líquido-líquido, gas-catalizador, líquido-catalizador, gas-líquido.-catalizador.

Se tiene también unas restricciones adicionales:

- El *balance de masa* direcciona el proceso.
- Un componente deseado significa que debe ser producido.
- No se aplican enfoques especiales. (Reacciones bioquímicas, fotoquímicas, poliméricas y reacción de sólidos no se consideran).

#### 2.1.2 Análisis de la tarea de selección de reactor

El sistema se elabora a partir de observaciones sobre el trabajo que realizan los expertos en diseño de reactores y específicamente en la selección del tipo de reactor. Dos aspectos fundamentales son observados: los expertos muestran una manera de abordar el problema de selección para hacerlo en pocos pasos y el sistema deberá ser capaz de explicar lo que hace. Para abordar estos aspectos es importante trabajar sobre las siguientes estrategias:

- El ingeniero desarrolla la estrategia para resolver la selección del tipo de reactor después de seleccionar muchos reactores. Se recoge información que no es posible que cambie por el método Recoger-Entradas-Fijas

(cinética del laboratorio). Luego se recoge la otra información por el método Recoger-Entradas-Variables.

- Al seleccionar un reactor, el ingeniero no usa todos sus conocimientos. Primero aplicará conocimientos que descarten algunos reactores; se rechazan reactores que no cumplan con el proceso; aquí los rasgos fuertes deben ser satisfechos. (Derive-y-Aplique-Rasgos-Fuertes). Luego, los reactores que pasen la prueba deben someterse a otra llamada “Aplique-Propiedades-Suaves-y-Específicas”.

### 2.1.3 Conocimiento acerca del dominio en ingeniería del reactor

Para el método muy poco se usan redes de reactores pues se pueden explicar por unidades. Para cada clase de problema se lista las propiedades de gran significancia física.

#### **Propiedades Fuertes:**

- *Escala:* en la cual el reactor es aplicable. Una división entre pequeña y gran escala se trata cuando se escoge entre batch y continuo. Posibles valores son fino, semifino, grande y a granel. Batch se recomienda para: capacidades menores a  $10^7$  Lb/año, para productos estacionarios, para no fluidos, cuando la reacción es lenta, mejor para limpieza, entre otros.
- *Calor:* Características de transferencia de calor del reactor, no solo transferencia en una pared sino también otras técnicas de control de nivel de temperatura (transporte en sólidos, evaporación, transporte del catalizador que involucra regeneración). Esta propiedad es muy importante porque la operación en un reactor debe llevarse en un nivel apropiado de temperatura.
- *Cambio de Catalizador:* cómo debe ser suministrado y removido del reactor. Toma los valores: muy poco continuo, poco continuo, moderadamente continuo y discontinuo.

**Propiedades Específicas:** Sus valores son usualmente nominales. Ejemplos: (1) El reactor es sensible al polvo; (2) El catalizador debe ser resistente al roce; (3) El

reactor es inapropiado cuando el catalizador no puede resistir la fuerza en un lecho empacado.

**Propiedades Suaves:** son propiedades deseadas y aplican a todos los reactores en una clase de problema. Sus valores son cuantificados en una escala ordinal. Ejemplos: (1) Retromezcla de la fase en la cual ocurre la reacción. Posibles valores son: flujo tapón, flujo intermedio, modelo de flujo único de mezclado o no mezclado; (2) Desarrollo, si la opción para este reactor demanda o no esfuerzo de desarrollo; (3) Caída de presión.

#### 2.1.4 Sistema basado en conocimiento

**Recopilar entradas fijas:** Se debe proveer toda la información básica necesaria para la solución del problema de selección. La fuentes de información pueden ser: experimental, literatura o de compañías. Dicha información es:

- a) *Clase de Problema:* Se basa en las fases presentes durante la reacción.
- b) *Componentes y objetivos:* componentes en alimento y productos del proceso.
- c) *Reacciones y Ratas de Reacción:* Se debe especificar todas las reacciones posibles del proceso, además de su cinética. Comprende: (1) Reversibilidad, (2) Estequiometría, (3) Calor de Reacción. También es recomendable dar un rango de temperatura donde la cinética sea válida.

**Determinar un perfil de reactor deseado:** Con base en la entrada especificada se puede derivar un juego de conceptos estratégicos, una clase de perfil para el reactor. Como por ejemplo, noción de temperatura de operación, ciertas nociones de fases, concentración (alta o baja) de componentes, etc.

**Recopilar variables de entrada:** Información acerca del flujo de alimento, las fases, ratas de flujo y fracciones molares de los componentes de cada flujo de alimento. Algunas veces no se tiene la información, pero se debe proveer un buen estimativo inicial guiándose de los conceptos o nociones estratégicas.

**Derive y aplique características fuertes del proceso:** después de recopilada la información, esta debe ser aplicada. El uso de propiedades fuertes es hacer una

selección burda y rechazar aquellos reactores que son inapropiados. Es rechazado si las propiedades fuertes del reactor con las características fuertes del proceso no son compatibles. El orden de aplicación de las propiedades fuertes es: escala, calor y catalizador.

**Aplique propiedades específicas y suaves:** El método trabaja en una matriz escogida la cual representa los reactores que son elegidos del paso anterior y con las propiedades del reactor que pueden ser usados para la selección. La matriz solo lleva las propiedades que tengan poder discriminativo. Las propiedades *específicas* tienen poder discriminativo cuando estas no aplican a todos los reactores de la matriz. Las propiedades *suaves* tienen su poder cuando estas no tienen los mismos valores para cada reactor de la matriz. El proceso de selección puede ser descrito como una construcción secuencial de nuevas matrices reducidas, emparejando propiedades del reactor al proceso químico deseado, hasta obtener solo un reactor (o varios). En cualquier momento el ingeniero puede tomar la matriz en un nodo y adicionar información para realizar una eliminación manual (por heurística). En esta parte del proceso se debe realizar:

a) Pasos de Selección: utilización de las propiedades específicas o suaves con o sin preguntas adicionales al sistema. Esta tarea se divide en tres pasos: (1) Una propiedad específica es tomada de la matriz; (2) Se pregunta si una propiedad esta o no satisfecha; (3) La propiedad específica es usada para crear una nueva matriz escogida. Reactores que no cumplan con dicha propiedad son eliminados resultando en menos filas. En el proceso puede ocurrir:

- Predominio estricto: un reactor se escoge por ser estrictamente el mejor o se elimina otro por ser el estrictamente peor.
- Predominio no estricto: no hay ni mejor ni peor. Se debe dividir la selección del reactor en dos o más sub-problemas. Se investiga independientemente y el mejor de cada sub-problema es el que se escoge y el peor el que se rechaza.

b) Estrategia de búsqueda: El progreso a través del espacio de búsqueda depende de la estrategia para el propósito de pasos de selección. Se desarrolla la

estrategia partiendo de un nivel “guía” y un nivel “usuario manejado”. El segundo es solo usado cuando el primero falla. El nivel “guía” prácticamente determina el sistema completo. En el nivel “usuario manejado” el ingeniero puede escoger algún nodo que contiene más de un reactor y algún paso que aplique a este nodo y decidir que no quiere estudiar otras alternativas. Cada nodo final describe una solución que es aceptable. Una solución puede consistir de uno o varios reactores.

## 2.2 Reactores de laboratorio

Para que sea posible el diseño del reactor es necesario conocer la cinética de reacción. En esta etapa del proyecto es indispensable explotar al máximo la parte experimental y realizar las pruebas suficientes en el laboratorio para recopilar la información necesaria. Para ello es necesario echar un vistazo a los reactores de laboratorio, conocer su uso y así poder determinar variables. Generalmente son usados reactores tubulares en régimen diferencial, integral o de recirculación. Aunque hay condiciones de resistencias externas e internas que no son deseadas y por lo cual se han propuesto diseños estándares para reactores de laboratorio, estos diseños son de muy difícil desarrollo. Por ende, se decide trabajar sobre un reactor tubular continuo isotérmico, y manejar con precaución las variables de proceso. Realizando el balance de masa diferencial para dicho reactor tenemos:

$$r_i = \frac{dN_i}{dV} = \frac{dN_i}{dW} = \frac{d(Q \cdot C_i)}{dV} \quad \text{Ec. 1}$$

Para el elemento  $A$ , considerando caudal constante y una reacción irreversible, integrando en todo el reactor se obtiene:

$$\frac{W}{N_{AO}} = \int_0^{X_{A,f}} \frac{dX_A}{-r_A} \quad \text{o} \quad \frac{W}{Q} = C_{AO} \int_0^{X_{A,f}} \frac{dX_A}{-r_A} = - \int_{C_{A,0}}^{C_{A,f}} \frac{dC_A}{-r_A} \quad \text{Ec. 2}$$

Los tipos más comunes de reactores a la hora de ser utilizados en el laboratorio y/o a escala de planta piloto son el reactor diferencial y el integral.

### 2.2.1 Reactor Diferencial

Son reactores que operan isotérmicamente y conversión y presión constantes; la velocidad obtenida es también constante en todo el reactor. Los datos de conversión deben ser pequeños; la suposición de reactor diferencial puede usarse hasta con conversiones de hasta 25%, y con errores de no más del 5%.

De la Ec. 1, para el caso del reactor diferencial:

$$r'_A = \frac{\Delta(Q \cdot C_A)}{\Delta V} \quad \text{Ec. 3}$$

Por otro lado, utilizando la conversión en función del caudal y las respectivas concentraciones y despejando esta ecuación para el término  $QC_A$  con un posterior reemplazo en la Ec. 3 obtenemos:

$$\frac{\Delta(Q \cdot C_A)}{\Delta V} = \frac{\Delta(Q_0 C_{A_0} (1 - X_A))}{\Delta V} = -Q_0 C_{A_0} \frac{\Delta X_A}{\Delta V} \Rightarrow -r'_A = N_{A_0} \frac{X_A}{V} \quad \text{Ec. 4}$$

Para determinar el error es necesario calcular la velocidad de reacción tanto con la Ec. 3 como con el balance de masa integrado en todo el reactor en función de una ecuación establecida de velocidad de reacción y utilizar estos valores.

### 2.2.2 Reactor Integral

Los datos de conversión medidos representan el valor integrado del reactor; para la conversión total es necesario diferenciar. En este caso la temperatura y presión son constantes y la velocidad depende únicamente de la conversión. Para el análisis de los datos se utiliza diferenciación gráfica o ajuste de curvas de conversión integral. El proceso experimental consiste en recopilar datos para la conversión con diferentes flujos de alimentación y con temperatura y presión constantes. La ecuación de diseño utilizada en este reactor es cualquiera de las formas de la Ec. 1, pero en este caso la conversión es necesario integrar en todo el reactor. Ya se pueden obtener gráficas de  $V/N_{A_0}$  en función de la conversión a de temperatura y presión constantes.

Para obtener una función de la velocidad de reacción es necesario utilizar un *método de diferenciación* o *método de integración*. El método diferencial requiere

una derivación de los datos experimentales de  $C_i$  en función de  $t$ ; la velocidad obtenida se compara con la conseguida en base a la ecuación de velocidad propuesta. En el método de integración se compara las concentraciones observada y estimada en función del tiempo; en este caso es necesario integrar la ecuación de velocidad para predecir la relación de  $C_i$  en función de  $t$ .

### **2.3 Diseño del reactor**

Una vez obtenida la expresión para la velocidad de reacción se procede a utilizarla en un balance de masa para el reactor en cuestión. La dificultad del diseño depende del tipo de flujo (Axial y/o radial) y la magnitud de la variación de temperatura en el reactor. En el mejor de los casos, no hay variación radial de velocidad y el régimen isotérmico opera en todo el reactor. Aunque es necesario adicionar calor al proceso para llevar a cabo la reacción, el horno utilizado garantiza un nivel de temperatura constante, por lo que consideramos se asemeja a una operación isotérmica. En cuanto al tipo de flujo, será supuesto como de flujo tapón y más adelante se analiza la desviación respecto a este supuesto.

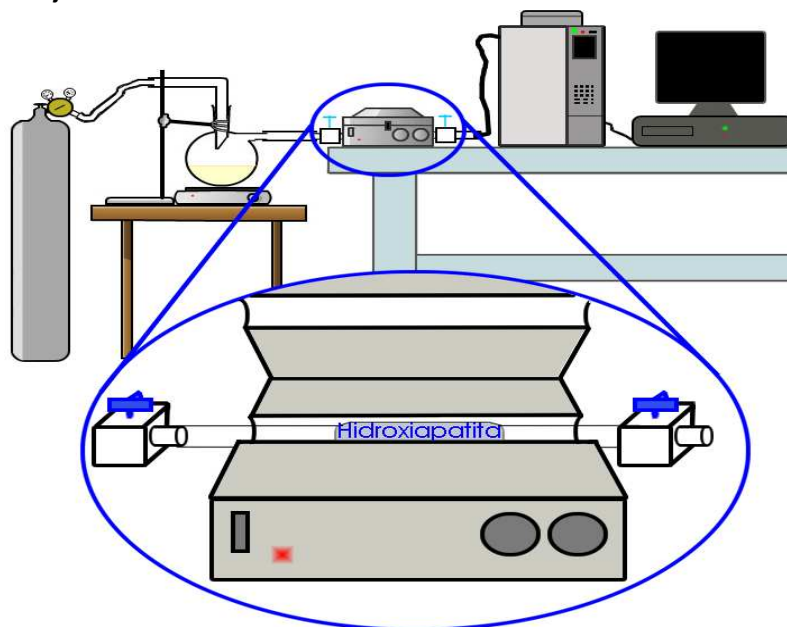
#### **Variables de diseño del reactor**

La función de velocidad de reacción obtenida se inserta en la Ec. 2, obteniendo como respuesta una función de masa de catalizador en función de la conversión. Es deber del ingeniero analizar la masa de catalizador a usar dependiendo de la conversión de reactivo. Se debe escoger la pareja de datos más adecuada tanto viable como económicamente. Así, una vez determinada la masa de catalizador se determina su volumen para así hallar el volumen de reactor necesario; teniendo el volumen se obtiene la longitud y diámetro del reactor.

### 3. DETERMINACIÓN EN LABORATORIO DE LA CINÉTICA DE REACCIÓN

A la hora de realizar el diseño se utiliza una ecuación dependiendo del tipo de reactor. En todos los casos es necesario conocer la velocidad de reacción. En nuestro caso es necesario determinar esta cinética experimentalmente ya que no se encuentra en la literatura. Para medir dicha cinética se dispuso un montaje consistente en un reactor de lecho fijo tubular el cual contenía la hidroxiapatita en polvo. Para la alimentación del proceso, una cantidad de bioetanol se colocó en un balón al cual se le adicionó calor para volatilizar la muestra; una corriente de nitrógeno se usó como gas de arrastre para lograr que los vapores de bioetanol entren al reactor y se produzca contacto con el catalizador. La salida del reactor se conectó a un cromatógrafo de gases, para analizar el producto obtenido, mediante una válvula de inyección. Para mayor seguridad, a la entrada y salida del reactor se implementaron válvulas manuales para purga. El esquema es el mostrado en la figura:

**Figura 1.** Montaje realizado en el laboratorio



Fuente: El autor

Cuando el objetivo principal de conocer la cinética de una reacción catalítica es el diseño, se puede utilizar el enfoque más simple y empírico, el cual consiste en usar la forma exponencial de la ecuación de velocidad (usado para reacciones homogéneas) y determinar el valor de los exponentes (orden de reacción) de las concentraciones, ajustando parámetros que concuerden con dichos datos experimentales.

La metodología del proceso consiste en obtener los datos de concentración de salida variando el flujo de entrada. Para lograrlo se hizo un monitoreo estricto de los productos mediante mediciones por cromatografía; se utilizó un cromatógrafo GC-2014 Shimadzu, al cual se le hace una programación previa de acuerdo a normas internacionales<sup>4</sup> (Ver anexo B). Es necesario preliminarmente realizar curvas de calibración de todos los posibles productos de reacción. El flujo de ingreso al reactor es controlado variando el flujo de salida de nitrógeno. El reactor usado es de cuarzo de 4 mm de diámetro interno y contiene 0,5 gr de hidroxiapatita proporcionado por otro grupo de investigación. La temperatura es constante en el reactor gracias al control del horno (400°C). La tubería de acceso al cromatógrafo se recubrió con una banda de calentamiento controlada por un reóstato (ver calibración en anexo C) y además se ajustó la longitud del reactor a la del horno, para que no quedara parte de éste afuera. Se hicieron cinco corridas variando el flujo de entrada así: 90, 100, 110 y 130 mL/min.

Una vez obtenidos los datos de concentración se introducen en la Ec. 5 para determinar la conversión:

$$x = \frac{C_{Etanol_0} - C_{Etanol_f}}{C_{Etanol_0}} \quad \text{Ec. 5}$$

---

<sup>4</sup> Standard Test Method for Determination of Ethanol of Denatured Fuel Ethanol by Gas Chromatography.

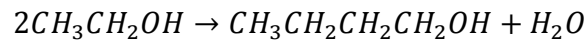
## 4. ELECCIÓN DEL REACTOR PARA EL PROCESO DE OBTENCIÓN DE BUTANOL<sup>5</sup>

### 4.1 Objetivo

Síntesis de n-Butanol a partir de metanol en fase líquida sobre HAP como catalizador.

### 4.2 Recolección de información

Información de entrada y determinación del perfil de reactor. Solo una reacción es posible a presión atmosférica y baja temperatura:



Es importante que el catalizador tenga un valor de 1,64 en la relación Ca/P. La variable de entrada es el flujo de alimento al reactor. El bio-etanol a utilizar tiene una concentración de 99,9 (%V/V) y un pH de 5,87.

### 4.3 Proceso de selección del reactor

#### 4.3.1 Reactor deseado Clase de problema

Reactor con dos fases: gas y catalizador. Se desprende un juego de 30 reactores posibles (ver tabla 1).

*Escala:* se asume semifino.

*Calor:* Se debe trabajar a temperaturas mayores a 250°C. Además, el cambio de temperatura adiabática es negativo, luego debe aplicarse calor al proceso. También es importante un control de nivel de temperatura.

*Reemplazo de catalizador:* se asume que el tiempo de desactivación es 1 mes, luego su clasificación es Discontinuo, debido a que "El reemplazo de catalizador se considera discontinuo cuando el tiempo de desactivación es mayor a 5 días" de acuerdo al método.

---

<sup>5</sup> Basado en: Jacobs, R., & Jansweijer, W. N. H. (2000). A knowledge-based system for reactor selection. *Computers & Chemical Engineering*, 24(2000), 1781–1801.

**Tabla 1.** Reactores posibles para el problema clase Gas-Catalizador

1	Reactor de lecho fijo simple
2	Reactor de lecho fijo con zona de combustión
3	Reactor de flujo radial, de afuera hacia adentro
4	Reactor de lecho fijo con elementos de enfriamiento o calentamiento
5	Reactor de lecho fijo con regeneración
6	Reactor de lecho fijo multitubular
7	Reformador tubular
8	Reactor de lecho móvil en co-corriente
9	Reactor de lecho móvil en contra-corriente
10	Reactor de lecho fluidizado, de burbujeo adiabático
11	Reactor multitubular de lecho fijo con regeneración
12	Reactor de lecho fijo simple con gran reciclo, no adiabático
13	Reactor de lecho fijo simple con alimento externo al efluente de intercambio de calor
14	Reactor multitubular de lecho fijo con alimento interno al efluente de intercambio de calor
15	Reactor de flujo inverso
16	Reactor de lecho fluidizado con regeneración
17	Reactor de flujo inverso con regeneración
18	Reactor de lecho fijo simple con gran reciclo, adiabático
19	Reactor Monolítico
20	Lecho fluidizado circular, no adiabático
21	Reactor de lecho fijo simple con reciclo pequeño, adiabático
22	Reactor de lecho fluidizado, de burbujeo no adiabático
23	Reactor de flujo radial con regeneración
24	Lecho fluidizado circular con regeneración
25	Reactor de lecho fijo simple con pequeño reciclo, no adiabático
26	Reactor de flujo radial, de adentro hacia afuera
27	Fase diluida elevada con regeneración
28	Fase diluida elevada, adiabática
29	Fase diluida elevada, no adiabática
30	Lecho fluidizado circulante, adiabático

Fuente: Jacobs, R. & Jansweijer, W. A knowledge-based system for reactor selection.

#### 4.3.2 Aplicación de las propiedades fuertes

La *escala* no aplica porque todos los posibles reactores sirven o encajan en la subdivisión semifino, luego esta propiedad no tiene poder discriminativo. Para el *Calor*, 8 reactores son rechazados (1, 8, 9, 10, 18, 21, 28 y 30). Por último, para el *reemplazo de catalizador*, 7 reactores son rechazados, los que tienen regeneración continua de catalizador (5, 11, 16, 17, 23, 24 y 27).

La matriz obtenida es denominada **Nodo 2** y contiene 15 reactores.

#### 4.3.3 Aplicación de las propiedades suaves y específicas

Primero se deben realizar los pasos posibles sin interacción con el ingeniero. Las propiedades específicas aplicables a la clase gas-catalizador son: sensibilidad al polvo, resistencia del catalizador al roce, fuerza en el lecho empacado, reciclo térmico del catalizador, temperatura alta y baja de sublevación. En cuanto a la temperatura de elevación como el proceso es relativamente nuevo no se posee información de esto, por consiguiente no lo tendremos en cuenta. Respecto a la sensibilidad al polvo, se asume que el flujo de alimento está libre de impurezas luego ningún reactor es rechazado. Las demás propiedades no están claras y el método por si solo no puede diferenciar entre cuales aplican a un reactor y cuales no, luego es necesaria la interacción con el ingeniero. Con la resistencia del catalizador al roce primero nos cuestionamos sobre qué se desearía en este proceso, razonando que no es una variable notable en el proceso pues todos los reactores aplican. Analizando la fuerza del lecho empacado, característica crucial en el diseño, descartamos los reactores con lecho fluidizado, los cuales no poseen la característica de resistir altos flujos, además del reactor con fase diluida sublevada, no adiabático (reactores con código rojo en la tabla 2). Respecto al reciclo térmico de catalizador no tiene poder discriminativo. La nueva matriz se denomina **Nodo 3**. El proceso descrito puede observarse en la tabla 2.

**Tabla 2.** Utilización de las propiedades específicas

Reactores		Prop. Específica		
		PE1	PE2	PE3
2	Reactor de lecho fijo con zona de combustion	•	•	•
3	Reactor de flujo radial, de afuera hacia adentro	•	•	•
4	Reactor de lecho fijo con elementos de enfriamiento o calentamiento	•	•	•
6	Reactor de lecho fijo multitubular	•	•	•
7	Reformador tubular	•	•	•
12	Reactor de lecho fijo simple con gran reciclo, no adiabatico	•	•	•
13	Reactor de lecho fijo simple con aliemnto externo al efluente de intercambio de calor	•	•	•
14	Reactor multitubular de lecho fijo con alimento interno al efluente de intercambiad de calor	•	•	•
15	Reactor de flujo inverso	•	•	•
19	Reactor Monolítico	•	•	•
20	Lecho fluidizado circular, no adiabatico	•		•
22	Reactor de lecho fluidizado, bubbling no adiabatico	•		•
25	Reactor de lecho fijo con con pequeño reciclo, no adiabático	•	•	•
26	Reactor de flujo radial, de adentro hacia fuera	•	•	•
29	Fase diluida elevada, no adiabática	•		•

PE1: Resistencia del catalizador al roce

PE2: Fuerza en el lecho empacado

PE2: Envolvente vapor-líquido

En cuanto a propiedades suaves se deben tener en cuenta: retromezcla, desarrollo, caídas de presión, retromezcla de calor, tiempo de residencia, tamaño y forma del catalizador, transferencia externa del catalizador, fracción de volumen de catalizador y RTD<sup>6</sup> del catalizador. De todas estas propiedades solo clasifican en este proceso la retromezcla, tiempo de residencia, desarrollo y caídas de presión. Por efectos de simplificación, se recomienda para la retromezcla el valor de flujo tapón<sup>7</sup>. Respecto al tiempo de residencia existe un valor de 1,78. Por último, la caída de presión y esfuerzo de desarrollo del reactor son más simples; a esta última se recomienda poco esfuerzo de desarrollo, mientras que la primera requiere de muy bajos valores de caídas de presión.

Antes de continuar se deja claro que el autor decide proseguir el procedimiento teniendo en cuenta estas cuatro propiedades dejando a un lado las demás propiedades suaves. Se realiza una matriz con los reactores posibles y las propiedades suaves consideradas. Estas características son tasadas para cada reactor evaluando numéricamente su desempeño:

**Tabla 3.** Evaluación propiedades suaves

Reactores		Prop. Suaves			
		PS1	PS2	PS3	PS4
2	Reactor de lecho fijo con zona de combustión	1	1	3	1
3	Reactor de flujo radial, de afuera hacia adentro	1	2	2	1
4	Reactor de lecho fijo con elementos de enfriamiento o calentamiento	1	2	2	1
6	Reactor de lecho fijo multitubular	1	1	3	1
7	Reformador tubular	1	1	3	1
12	Reactor de lecho fijo simple con gran reciclo, no adiabático	4	2	3	1
13	Reactor de lecho fijo simple con aliemnto externo al efluente de intercambio de calor	1	1	3	1
14	Reactor multitubular de lecho fijo con alimento interno al efluente de intercambiad de calor	1	2	3	1
15	Reactor de flujo inverso	1	2	3	1
19	Reactor Monolítico	1	1	1	2
25	Reactor de lecho fijo con con pequeño reciclo, no adiabático	2	1	3	1
26	Reactor de flujo radial, de adentro hacia fuera	1	2	3	1

PS1: Retromezcla

PS2: Desarrollo

PS2: Caída de Presión

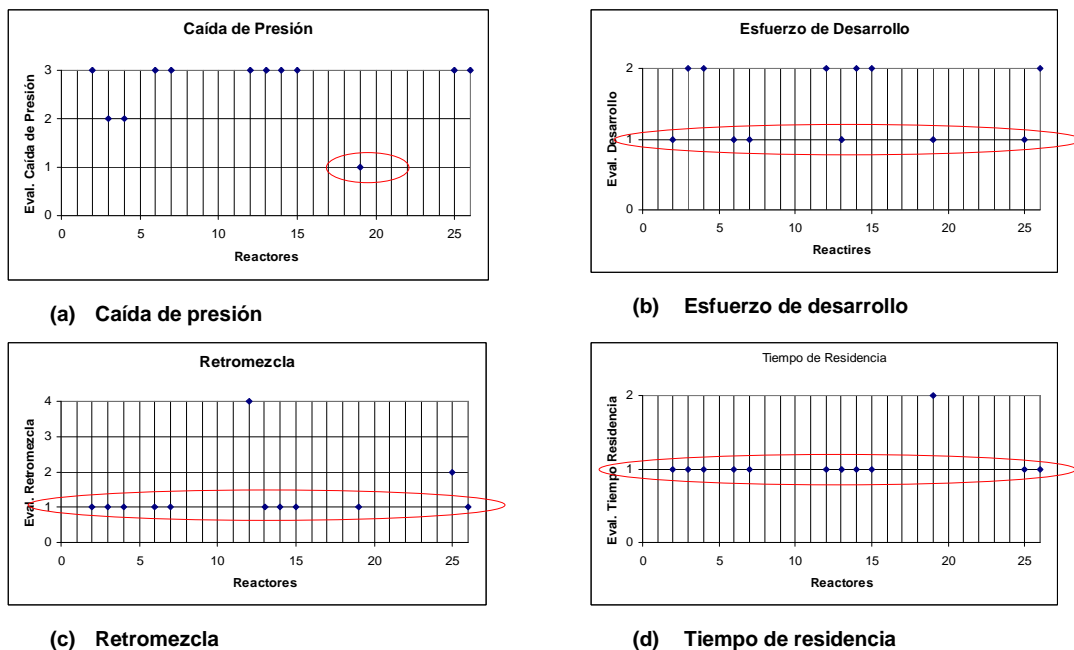
PS4: Tiempo de residencia

Para poder seleccionar los reactores y propiedades para las siguientes matrices realizamos las gráficas presentadas en la siguiente figura:

<sup>6</sup> Distribución de tiempo de residencia.

<sup>7</sup> Tsuchida, T.; Sakuma, S.; Takeguchi, T; Ueda, W. Direct Synthesis of n-Butanol from Ethanol over Nonstoichiometric Hydroxyapatite. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2006, 45, 8634-8642

**Figura 2.** Evaluación de las propiedades suaves



Fuente: el autor

El eje de las abscisas contiene los códigos de los reactores, mientras que en el eje de las ordenadas se da una evaluación numérica de la propiedad, siendo los menores valores los más deseados. Las coordenadas encerradas en la figura 2 son los reactores escogidos. Así, el Nodo 3 se fragmenta de la siguiente forma:

**Nodo 4:** Compuesto por los reactores que menos tienen caída de presión (figura 2a); aquí ya tenemos una primer respuesta, el **Reactor Monolítico**.

**Nodo 5:** Compuesto por los reactores con menos esfuerzo de desarrollo (figura 2b); 2, 6, 7, 13, 19 y 25.

**Tabla 4.** Reactores con el mismo nivel de esfuerzo

Reactores		Prop. Suaves			
		PS1	PS3	PS4	
2	Reactor de lecho fijo con zona de combustion	1	3	1	•
6	Reactor de lecho fijo multitubular	1	3	1	•
7	Reformador tubular	1	3	1	•
13	Reactor de lecho fijo simple con aliemnto externo al efluente de intercambio de calor	1	3	1	•
19	Reactor Monolítico	1	1	2	
25	Reactor de lecho fijo con con pequeño reciclo, no adiabático	2	3	1	

PS1: Retromezcla  
 PS3: Caída de Presión  
 PS4: Tiempo de residencia

**Nodo 6:** Compuesto por los reactores con comportamiento de retromezcla más parecido a flujo tapón (figura 2c); 2, 3, 4, 6, 7, 13, 14, 15, 19 y 26.

**Tabla 5.** Reactores con propiedades de retromezcla deseadas

Reactores		Prop. Suaves			
		PS2	PS3	PS4	
2	Reactor de lecho fijo con zona de combustion	1	3	1	•
3	Reactor de flujo radial, de afuera hacia adentro	2	2	1	
4	Reactor de lecho fijo con elementos de enfriamiento o calentamiento	2	2	1	
6	Reactor de lecho fijo multitubular	1	3	1	•
7	Reformador tubular	1	3	1	•
13	Reactor de lecho fijo simple con aliemnto externo al efluente de intercambio de calor	1	3	1	•
14	Reactor multitubular de lecho fijo con alimento interno al efluente de intercambiad de calor	2	3	1	
15	Reactor de flujo inverso	2	3	1	
19	Reactor Monolítico	1	1	2	
25	Reactor de lecho fijo con con pequeño reciclo, no adiabático	1	3	1	•
26	Reactor de flujo radial, de adentro hacia fuera	2	3	1	

PS2: Desarrollo

PS3: Caída de Presión

PS4: Tiempo de residencia

**Nodo 7:** Matriz compuesta por reactores con comportamiento adecuado de tiempo de residencia (figura 2d); 2, 3, 4, 6, 7, 12, 13, 14, 15, 25 y 26.

**Tabla 6.** Reactores con características de tiempo de residencia deseado

Reactores		Prop. Suaves			
		PS1	PS2	PS3	
2	Reactor de lecho fijo con zona de combustion	1	1	3	•
3	Reactor de flujo radial, de afuera hacia adentro	1	2	2	
4	Reactor de lecho fijo con elementos de enfriamiento o calentamiento	1	2	2	
6	Reactor de lecho fijo multitubular	1	1	3	•
7	Reformador tubular	1	1	3	•
12	Reactor de lecho fijo simple con gran reciclo, no adiabatico	4	2	3	
13	Reactor de lecho fijo simple con aliemnto externo al efluente de intercambio de calor	1	1	3	•
14	Reactor multitubular de lecho fijo con alimento interno al efluente de intercambiad de calor	1	2	3	
15	Reactor de flujo inverso	1	2	3	
25	Reactor de lecho fijo con con pequeño reciclo, no adiabático	2	1	3	
26	Reactor de flujo radial, de adentro hacia fuera	1	2	3	

PS1: Retromezcla

PS2: Desarrollo

PS3: Caída de Presión

La última columna de cada tabla contiene la información de los reactores que poseen mejor perfil y son preseleccionados así:

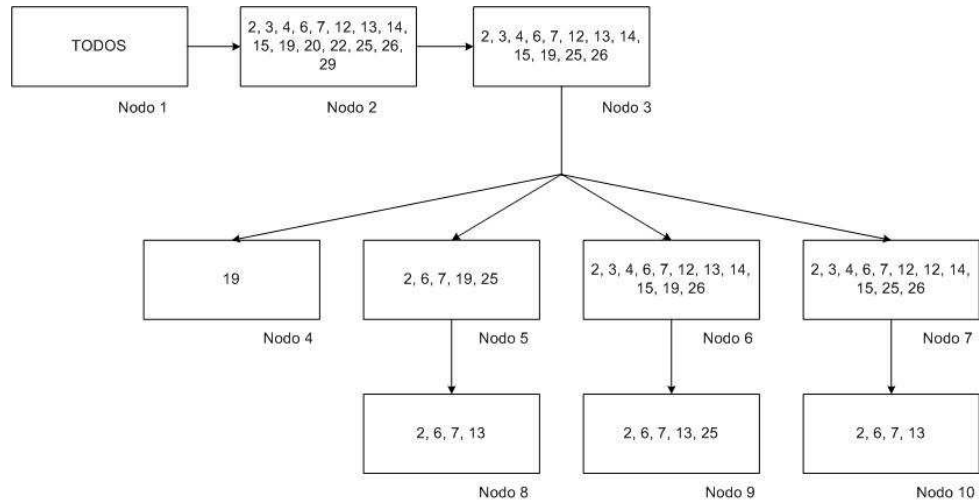
**Nodo 8:** Viene del Nodo 5. Compuesto por los reactores 2, 6, 7 y 13.

**Nodo 9:** Viene del Nodo 6. Compuesto por los reactores 2, 6, 7, 13 y 25.

**Nodo 10:** Viene del Nodo 7. Compuesto por los reactores 2, 6, 7 y 13.

En la siguiente figura se esquematiza el proceso global de selección:

**Figura 3.** Diagrama de flujo del proceso de selección de reactor



Fuente: el autor

Como respuesta se tienen 6 reactores: Reactor de lecho fijo con zona de combustión; Reactor de lecho fijo multitubular; Reformador tubular; Reactor de lecho fijo simple con alimento externo al efluente de intercambio de calor; Reactor Monolítico y Reactor de lecho fijo con pequeño reciclo, no adiabático. El reactor monolítico es descartado debido al esfuerzo que implica soportar la hidroxapatita. El reactor con recirculación, tiene la complicación del manejo de la cantidad a reciclar y del empleo de un medio mecánico para lograr dicho requerimiento. El reactor de lecho fijo simple con alimento externo al efluente de intercambio de calor, aunque su esfuerzo de desarrollo es menor, tiene la complicación de utilizar dos artefactos, el intercambiador y el reactor. Estos aspectos son combinados en el **reactor multitubular** el cual es más versátil y cumple con las mismas funciones. Este último es el seleccionado para el proceso.

## 5. RESULTADOS Y ANÁLISIS

La probabilidad de que el reactor utilizado sea diferencial es mayor que la de ser integral ya que las cantidades de catalizador usadas son bajas y por consiguiente los cambios de temperatura, presión y composición, que pueden ocurrir mientras los reactivos pasan por el lecho, también son bajos; en nuestro caso obtenemos valores bajos de conversión (Aprox. 4%) por consiguiente obtenemos un *Reactor Diferencial*.

Para determinar la conversión, como obtuvimos varios productos de la reacción observados en los cromatogramas, la calculamos partiendo del butanol obtenido respecto al etanol entrante (aplicación Ec. 5). Los datos de concentración obtenidos y de conversión se muestran en la tabla 7.

Con el fin de obtener la expresión de la velocidad de reacción, se utiliza algún método definido anteriormente en la teoría de los reactores de laboratorio. Seleccionamos el método integral debido a que no es necesario aplicar métodos numéricos, e incurrimos menos en error.

### 5.1 Aplicación método de integración

a) Suponer segundo orden de reacción:

$$r'_A = -kC_A = -k \left( \frac{p_t}{RT} \right)^2 \left( \frac{1 - X_A}{1 + X_A} \right)^2$$

b) Insertar en Ec. 2 e integrar:

$$\frac{W}{N_{A0}} = \frac{1}{k} \left( \frac{RT}{p_t} \right)^2 \left[ \frac{4}{1-x} + 4 \ln(1-x) + x - 4 \right]$$

c) Lo único que se desconoce es la constante ( $k$ ) de reacción. Aplicando los datos se obtiene la siguiente tabla:

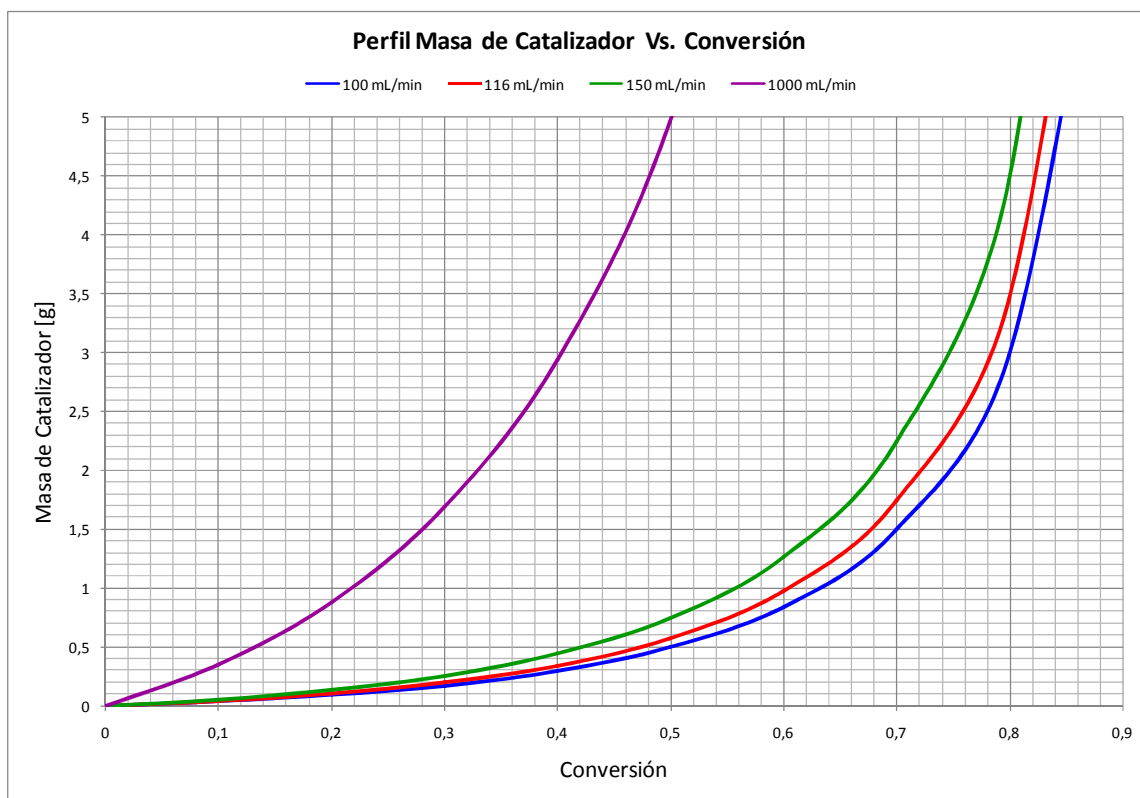
**Tabla 7.** Datos medidos y valores de constante de reacción:

$N_{A0}$ [mL/s]	$N_{A0}$ [mol/s]	$C_{n\text{-Butanol}}$ [%V/V]	$X_A$	$k$ [L <sup>2</sup> /mol g s]
1,500	0,027	3,981	0,040	394,719
1,667	0,030	3,542	0,035	386,711
2,000	0,036	3,032	0,030	393,110
2,167	0,039	2,753	0,028	384,485
				<b>389,756</b>

Los valores de  $k$  presentan una leve variación, para el dato tomamos un promedio.

Insertamos la expresión de la cinética en la Ec. 2, y obtenemos el siguiente perfil:

**Figura 4.** Perfil de Masa de catalizador Vs. Conversión



Fuente: El autor

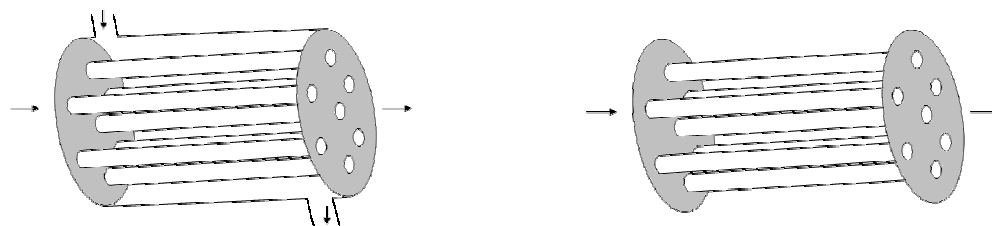
## 5.2 Obtención de las variables

Experimentalmente es más cómodo trabajar con un flujo de 130 mL/min. Así, desde el punto de vista económico, se podría tomar como aceptable una conversión de 0,5 para así obtener una masa de 0,74 g. En este orden de ideas, sabiendo que la densidad a granel del catalizador es 0,342 g/mL<sup>8</sup>, el volumen de dicho catalizador es 2,164 mL, que corresponde al del reactor. A este valor le adicionamos un 20 más de rango de error. Y para que el lecho no quede muy compacto. Utilizamos la ecuación para el volumen de un cilindro, e introduciendo los valores conocidos obtenemos una relación longitud-diámetro:

$$\left(\frac{D}{2}\right)^2 = 0.826 \left(\frac{1}{L}\right)$$

Tomamos como diámetro 5 mm, lo que corresponde a tubos estándares de laboratorio, para obtener una longitud de 3,3 cm. Esto es el centro donde se empaca la hidroxiapatita, pero es necesario un tubo de por lo menos 10 veces este valor para que la muestra no se condense antes de llegar al punto de reacción (al lecho). La imagen del reactor es la mostrada en la Figura 5(b), pues el reactor reposará en un horno.

**Figura 5.** Reactor Multitubular



(a) Con carcasa para fluido intercambiador de calor

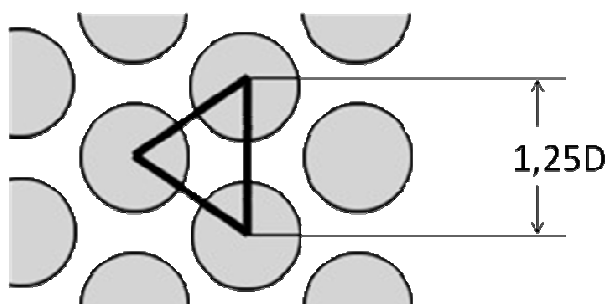
(b) Para introducir en un horno

---

<sup>8</sup> Determinada en el laboratorio. ASTM Standard D4512-0.(2008), " Standard Test Method for Vibrated Apparent Packing Density of Fine Catalyst and Catalyst Carrier Particles and Powder," ASTM International, West Conshohocken, PA, 2008, DOI: 10.1520/D4512-03R08, [www.astm.org](http://www.astm.org).

“Para la transferencia de calor, la disposición o arreglo de los tubos más eficiente es triangular; en cuanto el espacio entre centro y centro de cada tubo será 1.25 veces el diámetro externo de cada tubo”, de la norma TEMA<sup>9</sup> para intercambiadores de calor de carcasa y tubos. La cantidad de tubos se tomará de acuerdo al área transversal disponible en el horno para sus posteriores pruebas.

**Figura 6.** Arreglo de los tubos del reactor



Fuente: Standards of the tubular exchanger manufactures association.

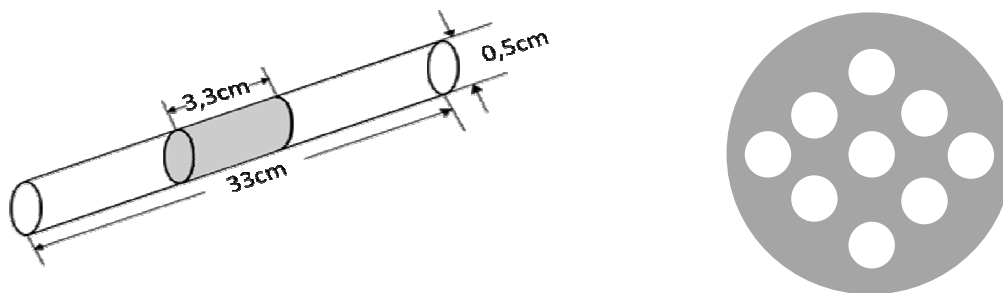
En resumen, las variables necesarias se muestran en la siguiente tabla:

**Tabla 8.** Variables obtenidas en el diseño

Variable	Valor
Conversión ( $X$ ):	0,5
Masa de catalizador ( $W$ ):	0,74 g
Longitud de cada tubo ( $L$ ):	33 cm
Diámetro de cada tubo ( $D$ ):	5 mm
Numero de Tubos:	9
Arreglo de los Tubos:	Triangular

<sup>9</sup> Tubular Exchanger Manufactures Association, INC. (1999). Standards of the tubular exchanger manufactures association. Eight Edition.

**Figura 7.** Dimensiones de cada tubo y disposición



Fuente: El autor

En la figura 4 se observan varias gráficas a diferentes flujos de entrada de alimento. Se puede analizar que a mayor flujo, menor tiempo de contacto entre el reactivo y el catalizador, por consiguiente se necesitaría de mayor tamaño en el reactor.

Los valores de conversión obtenidos para la determinación de la cinética dependen en gran medida de la relación Ca/P presente en la hidroxiapatita. Así, este componente suministrado por el grupo que trabaja en paralelo a este proyecto podría no tener dicha relación. Por ello podríamos pensar que se pueden obtener mejores resultados, es decir, mayores cantidades de n-butanol en el producto si se garantiza dicho valor en la relación.

Otra cosa importante de analizar es que el método usado para la determinación de la cinética fue planteado desde el punto de vista más sencillo, es decir, la cinética obtenida solo sirve para el presente trabajo y no representa el mecanismo de reacción. Sería importante plantear el diseño partiendo del mecanismo completo de la reacción, es decir, analizando todos los productos obtenidos de reacción y todas las reacciones posibles en un amplio rango de temperaturas, para tener menos margen de error en las variables obtenidas, y que sea más probable que el reactor que se fabrique cumpla con los requerimientos. La única forma de saber si el diseño obtenido se asemeja al proceso deseado es fabricando el reactor y analizar la reacción.

## 6. CONCLUSIONES

- ♣ Se estudió la cinética de la reacción en el laboratorio obteniendo un modelo de segundo orden, aplicando el enfoque más simple para la determinación de ésta, el cual consistió en ajustar parámetros al conjunto de datos experimentales medido.
- ♣ Se usó un modelo reciente para la elección del mejor candidato de un grupo de reactores posibles para el proceso en cuestión, obteniendo como respuesta una lista de 6 reactores y de la cual se seleccionó el reactor multitubular de lecho fijo.
- ♣ Se obtuvo un perfil de masa de catalizador Vs. Conversión a partir de la cinética estudiada.
- ♣ Se calcularon todas las variables necesarias para la fabricación del reactor multitubular de lecho fijo.

## 7. RECOMENDACIONES

- ♠ Realizar un estudio cinético a fondo de la reacción, ya que el enfoque abordado fue de forma preliminar con el único propósito del diseño y es muy importante conocer el mecanismo de la reacción.
- ♠ Comparar el método utilizado para la selección del reactor con un desarrollo normal del procedimiento elaborado con los conocimientos en la materia.
- ♠ Fabricar el diseño planteado del reactor multitubular y corroborar que se cumplan las condiciones obtenidas para el proceso.

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] Trambouze, P., Landeghem, P., Van, H., Wauquier, J. P., & Marshall, N. (1988). *Chemical reactors: design, engineering and operation*. Paris: Editions Technip.
- [2] COULSON, J. M.; RICHARDSON, J. F. *Ingeniería Química*. Tomo III. (1979). Editorial Reverté.
- [3] LEVENSPIEL, O. *El Omnilibro de los Reactores Químicos*. (1986). Editorial Reverté.
- [4] SCOTT FOGLER, H. *Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas*. Tercera Edición. (2001). Editorial Pearson Education.
- [5] SMITH, J. M. *Ingeniería de la Cinética Química*.
- [6] LEVENSPIEL, O. *Ingeniería de las Reacciones Químicas*. Tercera Edición (2006). Editorial Limusa Wiley.
- [7] MCCABE, W. SMITH, J. HARRIOT, P. (2007). *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. Séptima edición. McGraw Hill.
- [8] Weissermel, K.; Arpe, H. J. (1981). *Química Orgánica Industrial*. Editorial Reverté.
- [9] Tsuchida, T., Yoshioka T., Sakuma S., Takeguchi T., Ueda W. (2008) *Synthesis of Biogasoline from Ethanol over Hydroxyapatite Catalyst*. American Chemical Society. Ind. Eng. Chem. Res. 2008, 47, 1443-1452.
- [10] Jacobs, R., & Jansweijer, W. N. H. (2000). *A knowledge-based system for reactor selection*. Computers & Chemical Engineering, 24(2000), 1781–1801.

- [11] Jacobs, R., & Jansweijer, W. N. H. (2000). *A knowledge-based method for the automatic derivation of reactor strategies*. Computers & Chemical Engineering, 24(8), 1803–1813.
- [12] Tsuchida, T.; Sakuma, S.; Takeguchi, T.; Ueda, W. (2006). *Direct Synthesis of n-Butanol from Ethanol over Nonstoichiometric Hydroxyapatite*. Ind. Eng. Chem. Res. 2006, 45, 8634-8642.
- [13] Tsuchida, T.; Kubo, J.; Yoshioka, T.; Sakuma, S.; Takeguchi, T.; Ueda, W. (2008). *Reaction of ethanol over hydroxyapatite affected by Ca/P ratio of catalyst*. Journal of Catalysis 259 183–189.
- [14] Standard Test Method for Determination of Ethanol of Denatured Fuel Ethanol by Gas Chromatography.
- [15] ASTM Standard D4512-0 (2008), " Standard Test Method for Vibrated Apparent Packing Density of Fine Catalyst and Catalyst Carrier Particles and Powder," ASTM International, West Conshohocken, PA, 2008, DOI: 10.1520/D4512-03R08.
- [16] Infante, A. (2009). Evolución, Actualidad y Perspectivas de los Biocombustibles en Colombia. *Aseduis Bucaramanga*. Edición 3. 32-35.
- [17] López, E.; Heracleous, E.; Lemonidou, A.; Borio, D. (2008). *Study of a multitubular fixed-bed reactor for ethylene production via ethane oxidative dehydrogenation*. Chemical Engineering Journal 145 (2008) 308–315.
- [18] Pereda, J. (2003). Intercambiadores de Calor. España. CIF: G-39.486.360.
- [19] Tubular Exchanger Manufacturers Association, INC. (1999). *Standards of the tubular exchanger manufactures association*. Eight Edition.

## ANEXOS

### Anexo A. Notación

$N$	Flujo molar
$Q$	Caudal
$i$	Subíndice elemento $i$
$in$	Subíndice entrada elemento diferencial
$out$	Subíndice salida elemento diferencial
$0$	Subíndice entrada al reactor
$f$	Subíndice salida del reactor
$A, B, C \dots$	Elementos A, B, C...de una corriente
$x$	Conversión
$p_t$	Presión
$T$	Temperatura
$C$	Concentración
$W$	Masa de catalizador
$V$	Volumen lecho
$r'_A$	Velocidad de reacción en unidades de masa de solido catalizador
$D$	Diámetro del reactor
$L$	Longitud del reactor

## Anexo B. Condiciones del cromatógrafo

Programación de Temperatura en la Columna	
Column Length	30 m
Initial Temperature	40°C
Initial hold time	1.00 min
Program rate	5°C/min
Final Temperature	50°C
Final Hold Time	1.00 min
Inyector	
Temperatura	200°C
Split Ratio	50:1
Simple size	1.00 $\mu$ L
Detector	
Type	Ionización en llama
Temperatura	250°C
Fuel Gas	Hidrógeno
Oxidizing Gas	Aire
Make-up Gas	Nitrógeno
Gas Carrier	
Type	Helio
Average linear velocity	32.7 cm/s

## Anexo C. Calibración correa de calentamiento

Tiempo [min]	V [Volts]	Temp. [°C]
0	30	-
5	30	28
10	45	50
20	45	60
30	60	82
40	60	85
50	70	96
55	70	96
60	80	110

**Anexo D.** Cromatograma tomado a la salida del reactor. Pertenece al flujo de entrada de 130mL/min.

