

Diseño de un proceso ingenieril mejorado, con implementación de una eos, basada en datos experimentales, de sustancias involucradas en la producción de biocombustibles.

INTRODUCCIÓN

La densidad, ρ /kg·m⁻³, es una propiedad física de la materia, característica de cada sustancia química, y que depende de su estado termodinámico, por lo que su valor cambia con la con la presión, temperatura, y el estado de agregación. Son numerosos los casos en el campo de la ingeniería química donde la participación de la densidad juega un importante papel:

- ✓ Cálculo de la potencia de bombeo/compresión.
- ✓ Diseño de equipos e instalaciones tales como:
 - Torres de destilación.
 - Reactores químicos
 - Intercambiadores de calor

OBJETIVO

“Elaborar un modelo matemático que represente de forma precisa la relación entre las variables: p - ρ - T de compuestos líquidos en un amplio rango de condiciones, constituyendo una herramienta que mejore el diseño de procesos en Ingeniería Química”.

MODELIZACIÓN

Se propone un nuevo modelo para representar la densidad de líquidos a alta presión, cuyo planteamiento se fundamenta en el desarrollo de la denominada “ecuación de Tait” [1], pero priorizando la representación del comportamiento isobárico $\left(\alpha_p = \frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T\right)$, en lugar del isotérmico $\left(\beta_T = -\frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p\right)$.

✓ Comprobación de la hipótesis de Tait

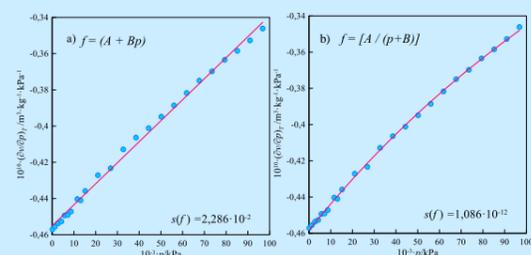


Figura 1. Datos experimentales (●) $(\partial v/\partial p)_T$ - p a 273 K [2] y calculados (líneas) a partir de las correlaciones matemáticas. (a) ecuación lineal; (b) asintótica.

✓ Identificación del comportamiento isobárico

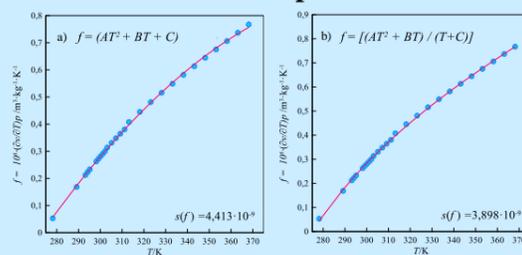


Figura 2. Datos experimentales (●) $(\partial v/\partial T)_p$ - T a 1 bar [3] y calculados (líneas) a partir de las correlaciones matemáticas. (a) ecuación cuadrática; (b) ecuación propuesta.

✓ Formulación de los modelos

Ecuación propuesta integrada

$$v(p, T) = C(p) [A(p)C(p) - B(p)] \ln [T + C(p)] + \frac{A(p)T^2}{2} + [B(p) - A(p)C(p)]T + D(p) \quad \checkmark$$

Ecuación propuesta polinómica

$$v(p, T) = \frac{A(p)T^3}{3} + \frac{B(p)T^2}{2} + C(p)T + D(p) \quad \times$$

DISEÑO

✓ Torre de platos (destilación)

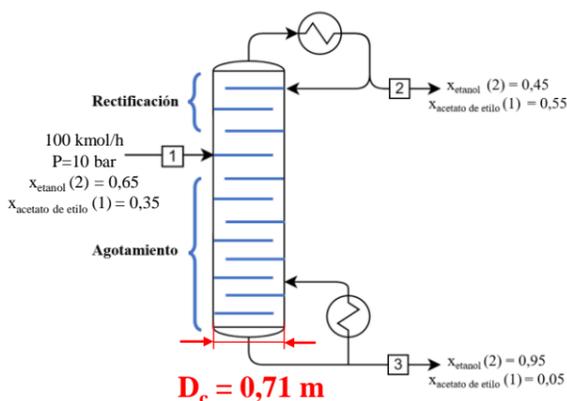


Figura 8. Representación esquemática torre de platos.

✓ Reactor CSTR (producción acetato de etilo)

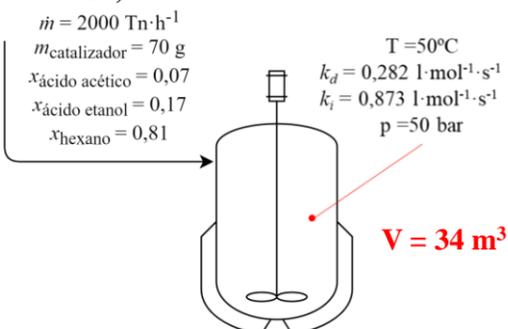


Figura 9. Representación esquemática CSTR.

RESULTADOS

✓ Densidad a presión atmosférica

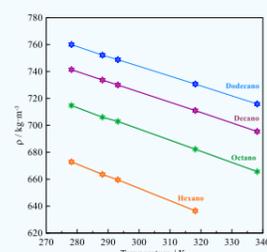


Figura 6. Densidad de compuestos a presión atmosférica y diversas temperaturas.

✓ Cinética de reacción de acetato de etilo

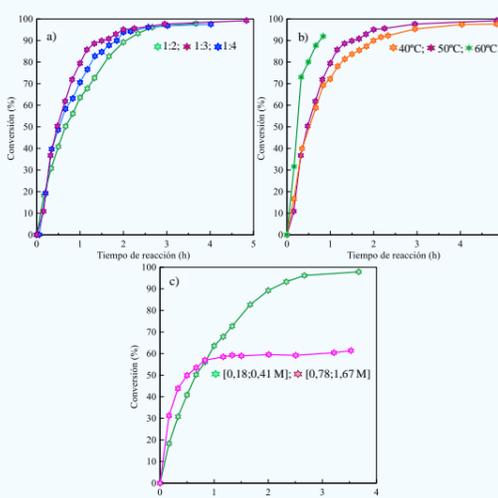


Figura 7. Efecto de la relación molar ácido:alcohol (a); de la temperatura (b); de la concentración de los reactivos (c) en la velocidad de reacción.

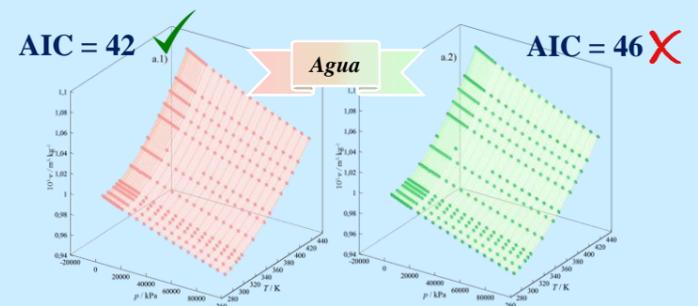


Figura 3. Datos p - v - T experimentales (●) [2] y calculados (líneas) de los volúmenes específicos en función de la presión y temperatura a partir de las ecuaciones planteadas con la dependencia de los parámetros.

EXPERIMENTACIÓN

Se toman datos experimentales en el laboratorio para disponer de datos empíricos de suficiente calidad para la aplicación del modelo propuesto.

✓ Experimentación volumétrica

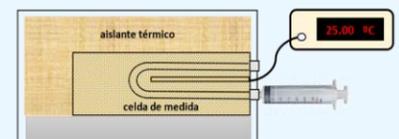


Figura 4. Representación esquemática del funcionamiento del densímetro de tubo vibrante.

✓ Determinación de la cinética de reacción de acetato de etilo

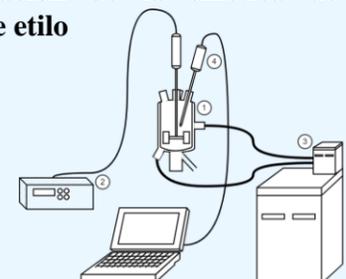


Figura 5. Instalación del sistema de reacción; 1. Reactor de vidrio; 2. Sistema de agitación; 3. Baño termostático; 4. Sonda de temperatura, Pt-100.

CONCLUSIÓN

- ✓ De los resultados de la modelización se concluye que la **ecuación propuesta integrada** es la que reproduce el comportamiento $f(p, \rho, T) = 0$ en el rango de presión y temperatura de estudio de forma más acertada.
- ✓ Se ha evaluado la repercusión de contar con modelos matemáticos que describan de manera precisa la relación entre las variables p - ρ - T , mediante la implementación del modelo seleccionado en el diseño de equipos de plantas químicas.
- ✓ En el caso del diseño del CSTR es crucial considerar las condiciones de operación en el cálculo de la densidad intrínseca en el caudal volumétrico de la alimentación para obtener adecuadamente el volumen del reactor, y en el caso de la torre de platos es fundamental para evaluar correctamente la hidráulica de la misma.

REFERENCIAS

- [1] Tait, P.G. (1888). Report on Some of the Physical Properties of Fresh Water and of Sea Water, Rept. Sci. Results Voy. H.M.S. Challenger, *Phys. Chem.*, 2, 1-76.
- [2] Kell, G. S. and Whalley, E. (1975). Reanalysis of the density of liquid water in the range 0–150 °C and 0–1 kbar. *The Journal of Chemical Physics*, 62, 3496–3503.
- [3] TRC Thermodynamic Tables: Non-Hydrocarbons. (1987). College station, Texas: Thermodynamic Research Center, The TEXAS A & M University System.