

LOS EFECTOS ECONÓMICOS EN EL CONTROL DE HIDRÓGENO EN REACCIONES DE ADICIÓN DE ÁCIDOS GRASOS EN LA INCERTIDUMBRE

Rubén Chávez Rivera¹
Federico González Santoyo²
Patricia Hernández Ojeda³

RESUMEN.

El uso adecuado de formulaciones de estratégicas para optimizar los recursos materiales para llevar adecuadamente y alto grado de eficiencia en las reacciones químicas de adición simples mediante la identificación de intervalos de confianza en lógica multivalente (lógica difusa). Dichas formulaciones de las estrategias consiste en relacionar a las empresas con el entorno, y las realizaciones de las mejores prácticas, a través de simulación de estos cálculos de balance materia con su interacción con la estequiometría de la reacción.

Palabras Clave: Competencias, optimización estequiométrica, intervalos de confianza, lógica multivalente.

ABSTRACT.

Proper use of strategic formulations to optimize the material resources for the proper conduct and high efficiency of chemical reactions by identifying simple addition of confidence intervals in multivalent logic (fuzzy logic). Such formulation of strategies is to link businesses with the environment, and achievement of best practice through simulation of these material balance calculations of its interaction with the stoichiometry of the reaction.

Key words: Skills, stoichiometric optimization, confidence intervals, multivalent logic.

Clasificación JEL: C, C65, M, M11.

¹ Profesor - Investigador en la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo. Miembro del SNI. E – mail: pintachavez@gmail.com

² Profesor - Investigador en la Facultad de Contaduría y Ciencias Administrativas de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo. Miembro del SNI. E – mail: fegosa@gmail.com

³ Profesora – Investigadora en la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo. E – mail: patyoaca@gmail.com

INTRODUCCIÓN.

Las reacciones químicas y la estequiometria.

De acuerdo a Felder M.R.(1981) que en las reacciones es poco común que una reacción $aA + bB \rightarrow cC$ se complete en un reactor continuo, no importa cuánto se encuentre presente al inicio de reacción o cuanto tiempo de permanencia en la mezcla de la reacción dentro del reactor, siempre algo de A y B aparecen en el producto.

Desafortunadamente, uno debe pagar por todo el reactivo que se alimenta al proceso, y no solo aquella proporción que reacciona, y toda la cantidad de A y B que salga junto con el producto representa pérdida de dinero. Entonces tendremos que llevarla a un escenario donde se encontrara alguna forma de que esta pérdida sea la menor posible y que nuestro proceso presente un óptimo operacional, para ello se buscara separar la mayor parte de reactivo que no reaccionó y que vaya la menor parte posible en el producto, donde una vez hecha la separación se pueda vender el producto mayormente puro y recircular el reactivo no consumido nuevamente al reactor.

Es de suponerse que se tendrá que invertir en un equipo de separación que ayude a la separación de reactivo-producto, pero estos gastos se compensarían al tener menor reactivo fresco y poder vender el producto purificado a mayor precio.

La presencia de reacciones químicas en un proceso, impone ciertas restricciones respecto a las cantidades relativas de reactivos y productos en las corrientes de entrada y salida, debido a que están en función de los moles estequiométricos que influyen en la reacción. Los balances de materia deben incluirse el término de generación o consumo de las sustancias.

Se puede observar que al principio de la operación, que en realidad puede ser cuando se carga el reactor para régimen intermitente, y conforme avanza la reacción los flujos del reactivo B se pueden ir ajustando. El comportamiento de reactivo B en la figura 2, va disminuyendo la proporción del reactivo B en la alimentación al reactor, con el uso de un software como Excel poniendo distintas proporciones de reactivo B y A (%) a la alimentación del reactor, con la finalidad de visualizar los límites óptimos de las proporciones de los reactivos a la alimentación del reactor, a través de los cálculos en los flujos, se podrá visualizar también con que proporciones (%), el reactivo B recirculando tiene flujos negativos y por lo tanto, dejan de efectuarse la reacción de acuerdo a la estequiometria de la reacción y con ello afectar considerablemente la eficiencia de la reacción.

Balances de materia global y de un solo paso.

En análisis de reactores de químicos en los que se incluyen equipo de separación, regularmente se recirculan los reactivos que no reaccionaron o que están en exceso, ya que su simple salida del proceso con los productos principales ocasiona disminución de la concentración del reactivo principal o baja calidad en cuanto a la pureza del producto principal, por lo que se recomienda el uso de unidades de separación que lleve a la recuperación de material para su reproceso y con ello disminuir la cantidad de los materiales en la alimentación del proceso y su efecto económico más favorable, en los balances de materia se rigen bajo el principio de conservación de la materia, es decir, que las entradas son iguales a las salidas.

Los reactivos no consumidos se emplean dos definiciones de conversión de reactivo Felder, (Rousseau, 1981):

$$\text{global} = \frac{\text{entrada de reactivos al proceso} - \text{salida de reactivos del proceso}}{\text{entrada de reactivos al proceso}}$$

$$\text{paso} = \frac{\text{entrada de reactivos al reactor} - \text{salida de reactivos al reactor}}{\text{entrada de reactivos al reactor}}$$

El objeto de recirculación se logrará una utilización completa del reactivo que se debe lograr a través de una base continua, la alimentación fresca, aún cuando se consuma un porcentaje menor del reactivo que entra al reactor se consume antes de salir. La razón por la cual la conversión global es de 100 % es que presume de una separación perfecta. Ya que no reaccione se vuelve al reactor, si no existiera una separación perfecta, algo de reactivo abandonara el sistema.

Intervalo de confianza y la lógica multivalente.

Reconocen A. Kaufmann, J. Gil Aluja, A. Terceño G., citados por González S. F. (2000), que las teorías de relacionadas con la incertidumbre a partir de las percepciones de los sentidos y la reflexión. La valuación no es una medida, por lo contrario la medida es una valuación. Lo que es probable es posible y lo que es posible no es forzosamente probable.

Se pueden asignar valuaciones en toda escala numérica de valores; si bien, lo más usual en el campo binario es que una valuación se expresa por 0 o por 1, mientras que en el ámbito multivalente o borrosos esta valuación es un número comprendido entre 0 y 1, incluidos estos. Es decir, una

valuación es una estimación numérica subjetiva, puede ser dada por un número de $[0,1]$, por ejemplo: 0.3, 0.45, 0.67, 0.89, etc., pero también se puede expresar como dos extremos en $[0,1]$. A lo que se le conoce como intervalo de confianza.

Es una facultad suplementaria de expresión si somos capaces de expresar nuestra subjetividad por un número y sólo uno. Se puede ir más lejos, si resulta útil, entre dos extremos se establece un “máximo de presunción” para formar una triplete, siempre con números entre $[0,1]$. Así se tiene tripletes tales como (0.3, 0.7, 0.5) en donde 0.7 es máximo de presunción.

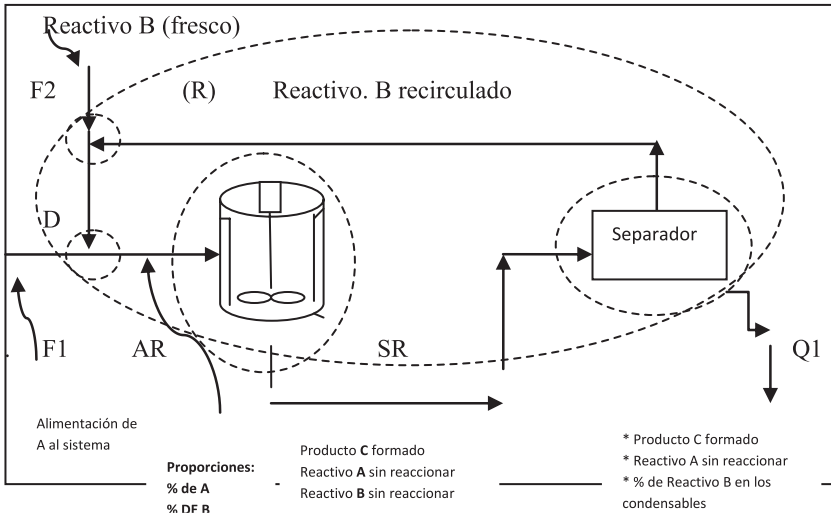
La valuación, puede expresarse en lenguaje humano mediante: palabras, relativos, superlativos e incluso por los valores asociados de manera subjetiva a palabras del lenguaje. Esto se produce cuando las cifras parecen un medio de comunicación mejor que las letras. Una valuación esta desde un punto de vista más práctico consiste en la expresión de un nivel de verdad que toma sus valores del intervalo de confianza.

Procedimiento.

En búsqueda de la cantidad apropiada de la alimentación de reactivo B, el control de este reactivo es fundamental para asegurar la cantidad estequiométrica con respecto al reactivo A. La cantidad de reactivo B debe ser mayor al reactivo A para asegurar la reacción estequiométrica, sin embargo el exceso que no reacciona se recircula, teniendo en cuenta que a una mayor cantidad de reactivo recirculando, puede generar una serie de problemas como obstrucción en el mezclado con el reactivo A, además de otros problemas como sobre-presión en las líneas y equipos; los cuales están en función a la diseño capacidad instala y consecuentemente la seguridad del mismo equipo.

Los balances de materia en procesos de recirculación y la búsqueda de proporciones adecuadas para el mayor aprovechamiento de los reactivos y su eficiencia. Para ello haremos uso de la lógica multivalente, en la cual nos apoyaremos en los niveles de proporción al alimentar al reactor traducido con los niveles de reactivo B que no reacciona o se recircula con el fin de economizar.

Figura.
Diagrama general del proceso.



Fuente: Elaboración propia.

Para la solución del sistema con reacción química y la separación del reactivo B que no reacciona, se deben establecer los balances de materia (ubicados los círculos punteados) y resolver el sistema de ecuaciones, preferentemente en cantidad molar para que sea congruente con la estequiometría de la reacción. De acuerdo a lo anterior tenemos las ecuaciones de balance de materia:

Balance general del sistema (línea punteada general):

$$F_1 + F_2 = Q_1$$

Balances en la mezcla previa al reactor:

$$F_1 + D = AR$$

Balance en el reactor:

$$AR = SR$$

Balance en el separador:

$$SR = Q_1 + R$$

Balance en la mezcla de reactivo B y la recirculación de B:

$$R + F_2 = D$$

Balance por reactivo A en la mezcla previa al reactor de acuerdo % de alimentación al reactor:

$$\begin{aligned} F_1 &= (AR)(\% \text{ mol de reactivo A alimentados al reactor}) = A_1 \\ &= \left(\frac{\text{moles de C formados}}{0.95 \text{ de conversión}} \right) \left(\frac{\text{moles de A estequiométricos}}{\text{moles de C formados estequiométricos}} \right) \end{aligned}$$

Para el hidrógeno alimentado al reactor de acuerdo a su % de proporción:

$$B_1 = (1 - \% \text{ de reactivo A})AR = A_1 \left(\frac{\% \text{ moles de B}}{\% \text{ moles de A}} \right)$$

La cantidad de reactivo B teórico según la estequiometría:

$$\begin{aligned} B_t &= \text{moles teóricos de B} = \\ &= (\text{moles de C formados}) \left(\frac{\text{moles de B estequiométricos}}{\text{moles de C formados estequiométricos}} \right) \end{aligned}$$

La cantidad de reactivo B sin reaccionar:

$$B_2 = B_1 - B_t$$

La cantidad de reactivo B que recircula (se supone que en la línea de recirculación solo contiene a B).

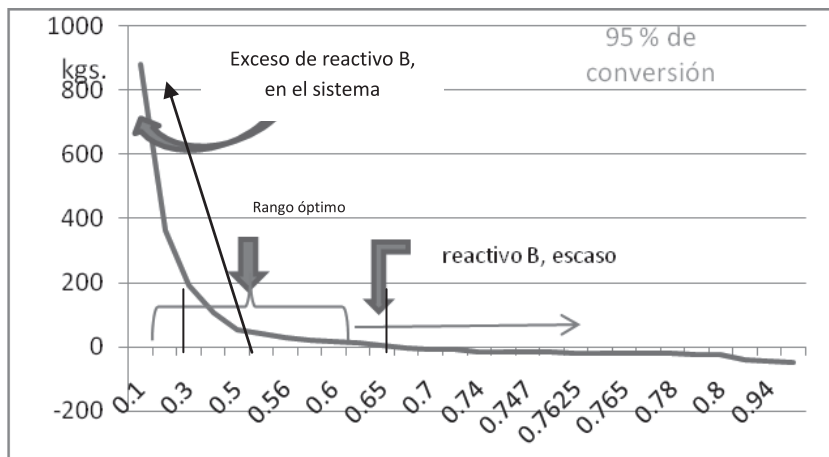
$$B_2 = R + (Q_1) (\% \text{ reactivo B que sale en los condensables})$$

Es de suponer que solo existe en la recirculación material en fase gaseosa con reactivo B, que se une con la alimentación fresca de éste. Así mismo, la alimentación al reactor tendrá un rango de porcentajes adecuados, que se pueden establecer a través de la experimentación y control de los reactivos, a través de la variedad de análisis que existen para valorar la composición. Por lo que en este trabajo, se hace énfasis en el rango apropiado, de modo que se cumpla los parámetros de calidad establecidos. Los balances de materia estarán gobernados principalmente en el reactor y su influencia con la estequiometría de la reacción y todos los demás balances de materia en el separador y uniones de líneas.

Después de varias corridas a diferentes fracciones de alimentación al reactor cada reactivo, donde al principio se tiene cantidades grandes de reactivo B y después va disminuyendo hasta llegar a puntos en donde los balances de materia son negativos en los cuales no se cumple el princi-

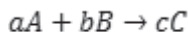
prio de conservación de la materia y con ellas eficiencia disminuye considerablemente ocasionando pérdidas económicas considerables. En la gráfica 2, se puede ver que al 95 % de conversión de la reacción (supuesto por fines prácticos, pero es una variable que puede cambiar de acuerdo al diseño del reactor, a factores y manejo operacional de las variables que afectan directamente a la reacción química), el comportamiento de la cantidad de reactivo (moles) no reaccionados, al principio con grandes cantidades que pueden significar el arranque de la operación, y después la forma en que se va controlando. También se puede visualizar el rango óptimo, en donde existe la menor cantidad de materia recirculando dentro del sistema, considerando que el cliente demanda la cantidad de producto principal C regularmente, y suponiendo que la demanda convertida en base molar de 100 del producto C. Hay que considerar un porcentaje de reactivo B que sale en los condensables del 2%.

Figura 2.
Visualización del rango óptimo de reactivo.



Fuente: Elaboración propia.

Teniendo una estequiometría como:

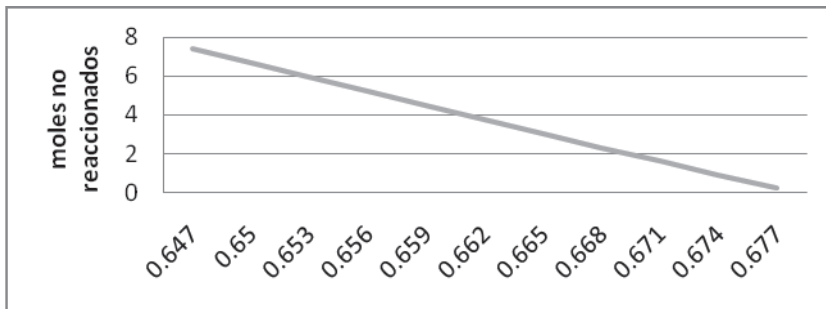


Se puede apreciar como en las fracciones de reactivo A de 0.1 a 0.3 existe una gran cantidad de reactivo B recirculando en sistema, el rango de 0.3 a 0.56 empieza a disminuir considerablemente, pero es el recomenda-

ble. De acuerdo a los resultados se puede ver el rango óptimo entre 0.647 y 0.677, de ahí en adelante, tendríamos valores negativos en los balances de materia lo que significa la falta de reactivo B en la reacción.

Tenemos en la figura 3, los niveles de reactivo B, en un rango entre 0.647 a 0.677. Se puede ver el comportamiento negativo con forme aumenta la concentración del reactivo A y disminución correspondiente del reactivo B.

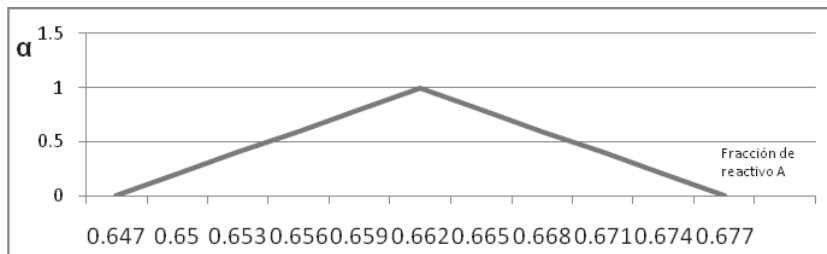
Figura 3.
Cantidad de moles que no reaccionan al aumentar el reactivo A.



Fuente: Elaboración propia.

Bajo este comportamiento, es de considerar que un punto medio de este rango de proporciones será el nivel ideal, por el cual se puede asignar como valor de α igual a 1 en una escala subconjunto borroso. De modo que los valores menos deseados serán las fracciones ≤ 0.647 ya que se tendría mucho material recirculando dentro del proceso que afecta considerablemente a los equipos e instrumentales, ni fracciones ≥ 0.677 debido a que estaría muy por abajo del límite del reactivo mínimo necesario para completar estequiométricamente la reacción, a estos valores designados para subconjunto borroso igual a cero. De tal manera que intervalo de confianza se encuentra de siguiente manera:

Figura 4.
Tripleta difusa de confianza del reactivo A.



Fuente: Elaboración propia.

Por lo tanto el intervalo de confianza, estará conformado por:

$$[r_k^\alpha, s_k^\alpha] = [0.647 + (0.662 - 0.647)\alpha_k, 0.677 - (0.677 - 0.662)\alpha_k]$$

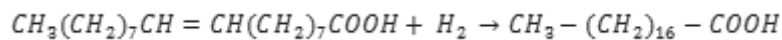
$$[r_k^\alpha, s_k^\alpha] = [0.647 + 0.015\alpha_k, 0.677 - 0.015\alpha_k]$$

Donde: $\alpha \in [0,1]$

CASO DE APLICACIÓN.

Para casos en los que se involucren hidrogenación de compuestos insaturados como ácidos grasos con una, dos y tres dobles ligaduras en su estructura molecular que están representados por oléico, linoléico y linolénico respectivamente. Con la hidrogenación de las moléculas anteriores el producto es el ácido esteárico, la hidrogenación del ácido oléico, tendremos la siguiente ecuación química:

Caso 1: Entre ácido oleico e hidrógeno.



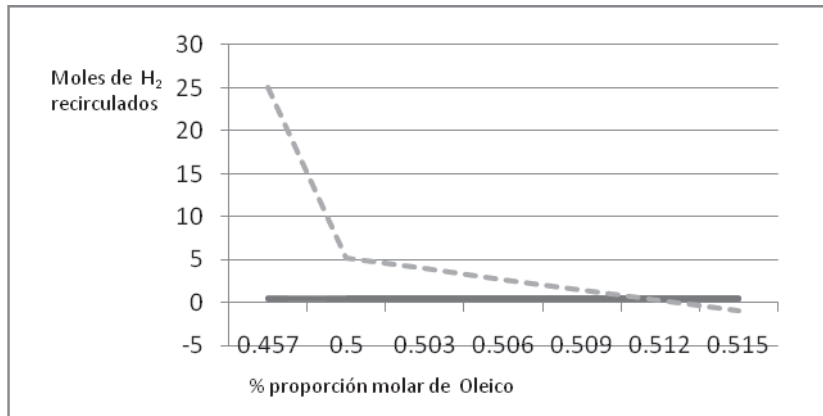
La relación es 1:1 entre el oleico y el H_2 y siguiendo la misma variación de las fracciones que se alimentan al reactor y sus valores de hidrógeno que no reaccionan:

Tabla 1.
Fraciones que se alimentan al reactor.

Reactivo oleico	0.45	0.5	0.503	0.506	0.509	0.512	0.515
Reactivo H ₂	0.55	0.5	0.497	0.494	0.491	0.488	0.485
Moles recirc. H ₂	28.65	5.26	4	2.77	1.54	0.329	-0.87

Fuente: Elaboración propia.

Figura 5.
Moles recirculados de H₂ vs fracción mol de Oleico.



Fuente: Elaboración propia.

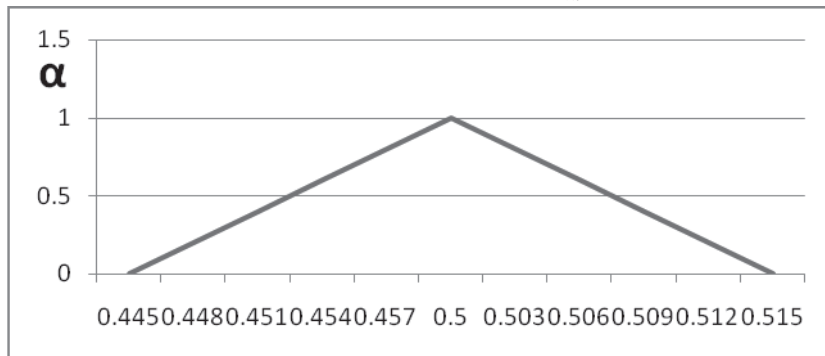
Los moles recirculados de hidrógeno son bastantes cuando la fracción es menor de 0.457 y cuando son mayores de 0.515 los balances de material desalojan valores negativos o reacción incompleta.

Para el valor de 0.5 con la finalidad de tener el mejor aprovechamiento y consumo de las especies, ya que no es precisamente el mínimo ni el sobrado, más bien son los valores donde se puede completar la relación estequiométrica quedando algún diferencial pequeño recirculando en el proceso sin ocasionar problemas como efectos sobre-presión en líneas ni acumulación de material que impida el paso de material fresco.

Esta valuación regularmente el grupo de expertos, dando el valor de 1 para la cantidad de moles recirculados en el proceso sin problemas, es decir la fracción más adecuada a la alimentación del reactor de las dos especies, y el valor de cero para aquellas cantidades en fracciones menos recomen-

Figura 6.

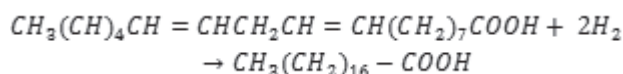
Tripleta de confianza α vs fracción molar de H_2 .



Fuente: Elaboración propia.

dadas, en que existan extremos de cantidad de moles recirculando en el proceso o que no se complete la cantidad de especies para la reacción y así afectar la eficiencia.

Caso 2: reacción entre linoleico e hidrógeno.



La relación estequiométrica es de 1:2 entre el linoleico y el hidrógeno, siguiendo la misma variación de las fracciones que se alimentan al reactor y sus valores de hidrógeno que no reaccionan:

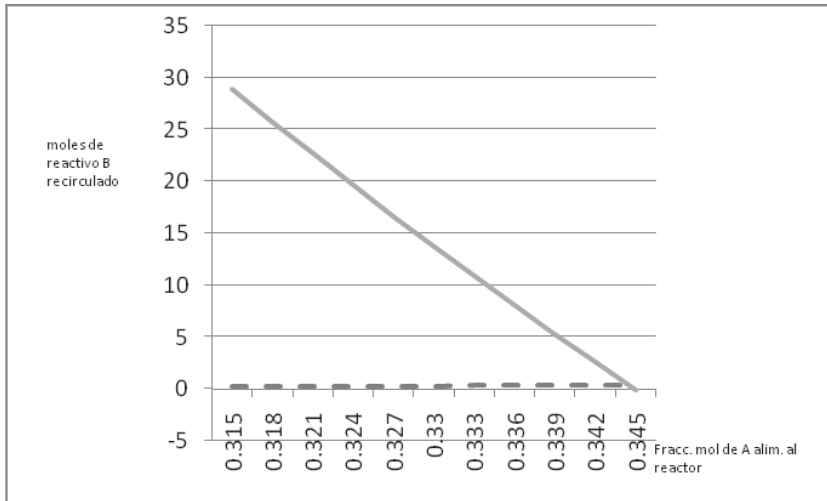
Tabla 2.

Relación de reactivos, moles recirculados y valores α .

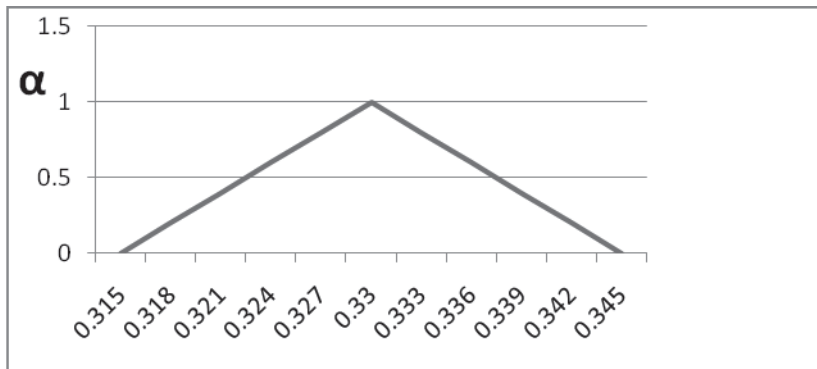
Fracción molar de Linoleico	0.315	0.318	0.321	0.324	0.327	0.33	0.333	0.336	0.339	0.342	0.345
Fracción molar de H_2	0.685	0.682	0.679	0.676	0.673	0.67	0.667	0.664	0.661	0.658	0.655
Moles recirc. H_2	28.91	25.75	22.66	19.62	16.64	13.72	10.84	8.02	5.25	2.54	-0.15
α	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1	0.8	0.6	0.4	0.2	0

Donde: reactivo A= linoleico, reactivo B =Hidrógeno

Fuente: Elaboración propia.

Figura 7.**Fracc. mol de A alimentación al reactor y los moles recirculados de B.**

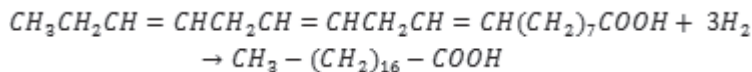
Fuente: Elaboración propia.

Figura 8.**Tripleta de confianza para los reactivos.**

Fuente: Elaboración propia.

Los valores más adecuados están cercanos a la fracción de 0.33 con valor de α igual a 1, y para los menos recomendados los valores extremos como 0.315 y 0.345 con valor de $\alpha=0$.

Caso 3: reacción entre linolénico e hidrógeno.



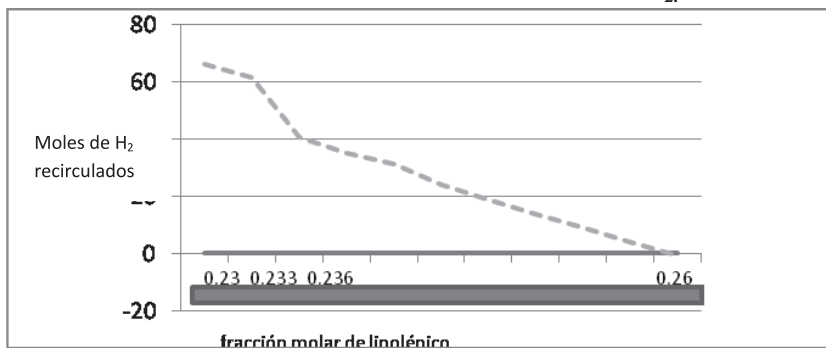
La relación es 1:3 entre el linolénico y el hidrógeno y siguiendo la misma variación de las fracciones que se alimentan al reactor y sus valores de hidrógeno que no reaccionan:

Tabla 3.
Relación de reactivos, moles recirculados y valores α

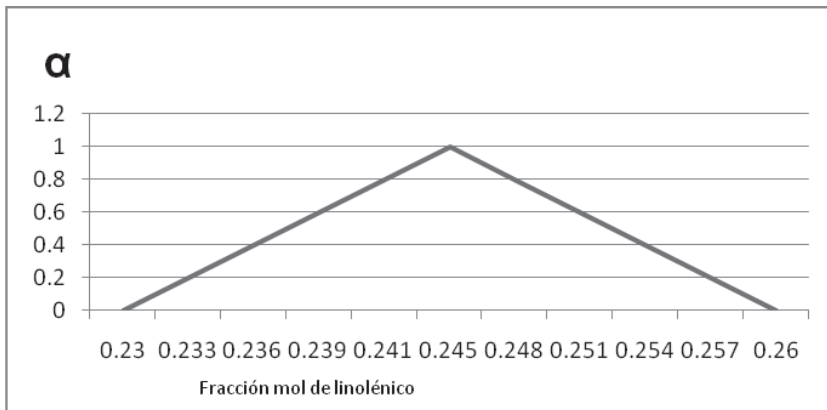
Linoléico	0.23	0.233	0.236	0.239	0.241	0.245	0.248	0.251	0.254	0.257	0.26
H ₂	0.77	0.767	0.764	0.761	0.759	0.755	0.752	0.749	0.746	0.743	0.74
Moles recirc. H ₂	66.13	61.42	40.77	35.17	31.51	24.38	19.19	14.11	9.16	4.32	- 0.41
α	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1	0.8	0.6	0.4	0.2	0

Donde: reactivo A= linoléico y reactivo B= Hidrógeno-
Fuente: Elaboración propia.

Figura 9.
Fracción molar de linolénico y moles recirculados de H₂.



Fuente: Elaboración propia.

Figura 10.**Tripleta de confianza α vs fracción molar de linolénico.**

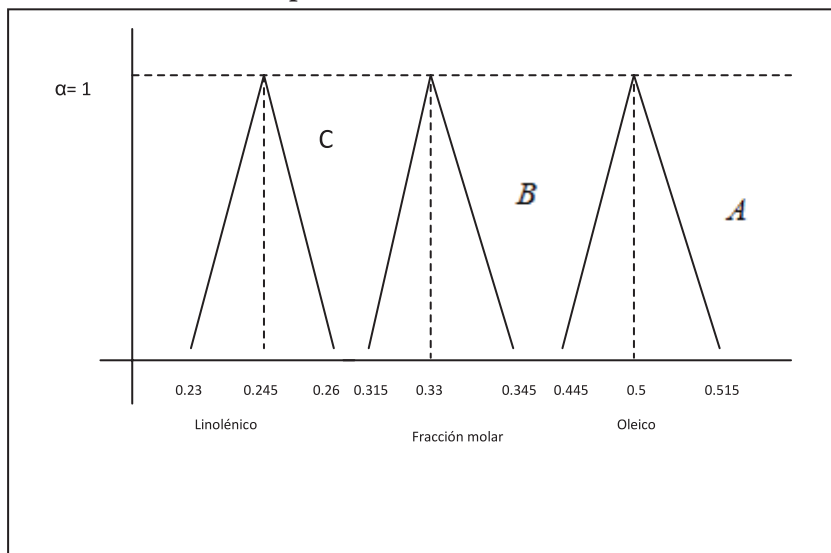
Fuente: Elaboración propia.

Los valores más adecuados están cercanos a la fracción de 0.245 con valor de $\alpha=1$, y para los menos recomendados los valores extremos como 0.23 y 0.26 con valor de $\alpha=0$.

Para la saturación de las cadenas hidrogenas de oleico, linoleico y linolénico, estas tres moléculas se hidrogenan al mismo tiempo, no por separado y así, transformándolas en ácido esteárico. Estas cadenas vienen en composiciones de acuerdo con el origen del triglicérido (animal o vegetal y las características de composición propias según su origen), por lo que, se usará la sumatoria de intervalos de confianza.

Para contemplar la cantidad de H_2 suficiente para hidrogenar las tres moléculas de ácidos insaturados, Las tres tripletas de confianza como indica en la figura 11, la fracción molar de los reactivos insaturados va desde 0.23 a 0.515 que corresponde al linolénico (tripleta C), linoleico (tripleta B) y oleico (tripleta A):

Figura 11.
Sumatoria de las tres tripletas de confianza.



Fuente: Elaboración propia.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES.

Para asegurar que las cantidades estequiométricas cuando se hidrogenan en forma conjuntas las tres moléculas insaturadas (oleico, linoleico y linolénico), es conveniente usar una proporción del 80 % de nitrógeno y 20 % de los reactivos correspondientes a la alimentación del reactor. Con ello se tendrá un gran exceso de H_2 para la reacción oleico, sin embargo, para el linolénico estará con una muy cantidad de H_2 , de modo que se compensan dichas cantidades y así satisfacer la estequiometría. El uso de reactor o equipo con distintos componentes para constantes y permanentes cambios que tiene que estar enfrentando la industria química, a ello se debe, la identificación de los intervalos de confianza que se identificaron, para obtener el mejor control del proceso y con ello garantizar la calidad de los productos que demandan los clientes.

Uno de los principales propósitos de este trabajo, es de tener los elementos mínimos necesarios para hacer la carga de reactivos a reactores con características similares, ya que es común, que las especies con frecuencias son cargadas en exceso y puedan ocasionar problemas a los equipos e instrumentación del proceso. El efecto contrario es que no pueda completarse

las especies en función a la estequiometría que se requiere y con ello la falta de eficiencia y eficacia del proceso, tomando en cuenta que los costos de operación por regular muy costosos.

BIBLIOGRAFÍA.

- Feigenbaum A.V. (2007) Control de la calidad, CECOSA, México.
- Felder M.R. Rousseau R. W. (1981) "Principios básicos de los procesos químicos", editorial el manual moderno, México.
- González S. F. (2000) La incertidumbre en la evaluación financiera de las empresas, Fegosa Ingeniería Administrativa y la FCA-UMSNH, Morelia, México.
- Kaufmann A., Gil A.J., Terceño G.A. (1988) "Matemáticas para economía", Ediciones del foro científico, Barcelona, España.