FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA

TESIS

DESARROLLO DE UNA PLATAFORMA EN WOLFRAM MATHEMATICA PARA EVALUAR PERFILES DE CONCENTRACIÓN Y TEMPERATURA EN LA SAPONIFICACIÓN DEL ACETATO DE ETILO

PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE
INGENIERO QUÍMICO

PRESENTADO POR:

DEISY STEFFANY LOMAS VALLES
JOSIANE MARÍA MIGUEL CUADROS

ASESORES:

Ing. DUMA LUZ RENGIFO PINEDO, Dra.
Ing. VÍCTOR GARCÍA PÉREZ, Mtro.
Ing. FERNANDO JAVIER SALAS BARRERA, MSc.

IQUITOS, PERÚ
2023

UNAP

Facultad de Ingeniería Química
Unidad de Investigación

ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS N° 006 -CGT-FIQ-UNAP-2023

En Iquitos, en el auditorio de la Facultad de Ingeniería Química, a los 09 días del mes de JUNIO de 2023, a horas 11:00, se dio inicio a la sustentación pública de la Tesis titulada: **"DESARROLLO DE UNA PLATAFORMA EN WOLFRAM MATHEMATICA PARA EVALUAR PERFILES DE CONCENTRACIÓN Y TEMPERATURA EN LA SAPONIFICACIÓN DEL ACETATO DE ETILO"**, aprobado con Resolución Decanal N° 119-2023-FIQ-UNAP, presentado por los Bachilleres: **Deisy Steffany Lomas Valles y Josiane María Miguel Cuadros,** para optar el título profesional de **Ingeniero Químico**, que otorga la Universidad de acuerdo Ley y Estatuto.

El jurado calificador y dictaminador designado mediante R. D. N° 025-2023-FIQ-UNAP está integrado por:

Ing. JORGE ARMANDO VÁSQUEZ PINEDO, Dr.	Presidente
Ing. MATSEN ROLANDO GARCÍA NAVARRO, Mtro.	Miembro
Ing. ALCIDES ARMANDO DELGADO CÉSPEDES, Mgr.	Miembro

Luego de haber escuchado con atención y formulado las preguntas necesarias, las cuales fueron respondidas: SATISFACTORIAMENTE

El jurado después de las deliberaciones correspondientes, llegó a las siguientes conclusiones:

La sustentación pública y la tesis ha sido: APROBADO con la calificación BUENA, estando los bachilleres aptos para obtener el Título Profesional de Ingeniero Químico. Siendo las 12:05 se dio por terminado el acto de SUSTENTACIÓN.

Ing. JORGE ARMANDO VÁSQUEZ PINEDO, Dr.
Presidente de Jurado

Ing. MATSEN ROLANDO GARCÍA NAVARRO, Mtro.
Miembro

Ing. ALCIDES ARMANDO DELGADO CÉSPEDES, Mgr.
Miembro

Ing. DUMA LUZ RENGIFO PINEDO, Dra.
Asesora

Ing. VÍCTOR GARCÍA PÉREZ, Mtro.
Asesor

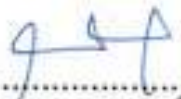
Ing. FERNANDO JAVIER SALAS BARRERA, MSc.
Asesor

UNIVERSIDAD LICENCIADA
RESOLUCIÓN N° 612-2019-SUNEDU/CD

JURADO Y ASESORES

.....

Ing. JORGE ARMANDO VÁSQUEZ PINEDO, Dr.
Presidente de Jurado



.....

Ing. MATSEN ROLANDO GARCÍA NAVARRO, Mtro.
Miembro

.....

Ing. ALCIDES ARMANDO DELGADO CÉSPEDES, Mgr.
Miembro

.....

Ing. DUMA LUZ RENGIFO PINEDO, Dra.
Asesora

.....

Ing. VÍCTOR GARCÍA PÉREZ, Mtro.
Asesor

.....

Ing. FERNANDO JAVIER SALAS BARRERA, MSc.
Asesor

UNICHECK

Nombre del usuario:
Universidad Nacional de la Amazonia Peruana

ID de Comprobación:
76903782

Fecha de comprobación:
31.10.2022 13:05:50 -05

Tipo de comprobación:
Doc vs Internet

Fecha del informe:
31.10.2022 13:45:18 -05

ID de Usuario:
Ocultado por Ajustes de Privacidad

Nombre de archivo: **TESIS RESUMEN JOSIANE MARIA MIGUEL CUADROS y DEISY STEFFANY LOMAS**

Recuento de páginas: **55** Recuento de palabras: **10235** Recuento de caracteres: **61566** Tamaño de archivo: **1.51 MB** ID de archivo: **87981210**

Modificaciones del texto detectadas (el índice de similitudes pueda verse afectado)

11.5% de Coincidencias

La coincidencia más alta: **4.06%** con la fuente de Internet (https://repositorio.unapiquitos.edu.pe/bitstream/handle/20.500.12737/.

11.5% Fuentes de Internet | 896 ..... Página 57

No se llevó a cabo la búsqueda en la Biblioteca

11.2% de Citas

Citas | 37 ..... Página 58

No se han encontrado referencias

0% de Exclusiones

No hay exclusiones

Modifind

Modificaciones del texto detectadas. Busque más detalles en el informe en línea.

Caracteres sustituidos | 552

Formatoo sospechoso | 11 Páginas

DEDICATORIA

Esta tesis es dedicada al esfuerzo, paciencia y perseverancia que he tenido en esta parte de mi vida, para logar uno de mis objetivos como profesional.

A Don Manuel Lomas y Doña Deisy Valles, quienes son mis padres, que, con su amor y esfuerzo, me dieron la suficiente fuerza para seguir.

Deisy Steffany Lomas Valles

A mi madre Joana Miguel, quien fue mi gran apoyo emocional brindándome siempre ese amor, coraje y perseverancia para perseguir mis anhelos.

A mi querida hermana Susan Miguel y Clever Ciro, por su apoyo incondicional durante mi formación académica y mis hermanas, Rita y Karina.

A mis asesores de tesis: Duma Luz Rengifo Pinedo, Víctor García Pérez y Fernando Javier Salas Barrera, quienes me apoyaron para escribir y concluir esta tesis.

Josiane María Miguel Cuadros

AGRADECIMIENTO

En primer lugar, quiero expresar mi enorme gratitud a Dios.

Agradezco a mi familia, en especial a mis padres por ser el soporte en cada instante de mi vida. A mi prima Valeria Lomas y mi primo Cristian Lomas con los que siempre comparto conversaciones y momentos muy gratificantes, a mi tía Mary que es como una segunda madre, a mi sobrina Madison quien es la luz de mis ojos.

A mi alma mater, la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional de la Amazonia Peruana, que fue mi hogar, durante un lapso de mi vida. A mis maestros, quienes me brindaron parte de su conocimiento en cada clase impartida.

Y un especial agradecimiento a mis asesores: la Ing. Duma Luz Rengifo Pinedo, Dra.; el Ing. Víctor García, Mtro y el Ing. Fernando Javier Salas Barrera, Msc, quienes me ayudaron a dar el primer pasó y a finalizar este proyecto.

Y me agradezco, por ser fuerte y valiente en todo momento, por seguir adelante y pasar cada obstáculo que se me atravesó. Hoy por fin, puedo decir que logre dar el primer paso como profesional.

Deisy Steffany Lomas Valles

A Dios por haberme otorgado una familia maravillosa, quienes han creído en mí siempre, dándome ejemplo de superación, humildad y sacrificio; enseñándome a valorar todo lo que tengo.

A mis maestros quienes nunca desistieron al enseñarme e inculcarme buenos aprendizajes.

A los miembros del jurado, quienes estudiaron mi tesis y la aprobaron.

Josiane María Miguel Cuadros

ÍNDICE DE CONTENIDO

Pág.

PORTADA i
ACTA DE SUSTENTACIÓN ii
JURADO Y ASESORES iii
RESULTADO DEL INFORME DE SIMILITUD iv
DEDICATORIA v
AGRADECIMIENTO vi
ÍNDICE DE CONTENIDO vii
ÍNDICE DE TABLAS ix
ÍNDICE DE FIGURAS x
RESUMEN xi
ABSTRACT xii
INTRODUCCIÓN 1
CAPÍTULO I: MARCO TEÓRICO 4
1.1. Antecedentes 4
1.2. Bases teóricas 5
1.2.1. Ecuación general de balance molar 5
1.2.2. Leyes de velocidad y estequiometría 6
1.2.3. Ecuación de Arrhenius 7
1.2.4. Reacción de la saponificación del acetato de etilo 8
1.2.5. Wolfram Mathematica 9
1.2.6. Solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden mediante Wolfram Mathematica 9
1.3. Definición de términos básicos 18
1.3.1. Concentración 18
1.3.2. Temperatura 18
1.3.3. Tiempo 19
1.3.4. Perfil de concentración 19
1.3.5. Perfil de temperatura 20
1.3.6. Velocidad neta de formación 20
CAPÍTULO II: HIPÓTESIS Y VARIABLES 21
2.1. Formulación de la hipótesis 21
2.2. Variables y su operacionalización 21
CAPÍTULO III: METODOLOGÍA 23
3.1. Tipo y diseño 23

3.1.1. Modelado de la reacción de saponificación del acetato de etilo en un reactor semicontinuo 24
3.1.2. Desarrollo de la plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar los perfiles de concentración y temperatura en la saponificación del acetato de etilo 34
3.2. Diseño muestral 43
3.3. Procedimientos de recolección de datos 43
3.4. Procesamiento y análisis de datos 45
3.5. Aspectos éticos 45
CAPÍTULO IV: RESULTADOS 46
CAPÍTULO V: DISCUSIÓN 51
CAPÍTULO VI: CONCLUSIONES 52
CAPÍTULO VII: RECOMENDACIONES 53
CAPÍTULO VIII: FUENTES DE INFORMACIÓN 54
ANEXOS 56
Anexo 1. Matriz de consistencia 57
Anexo 2. Compilación del sistema de ecuaciones principales del modelo que representa a la saponificación del acetato de etilo, para obtener los perfiles de concentración 58
Anexo 3. Compilación del sistema de ecuaciones principales del modelo que representa a la saponificación del acetato de etilo, para obtener los perfiles de temperatura en el reactor y enfriador 60

ÍNDICE DE TABLAS

Pág.

Tabla 1. Valores de m_A y m_B para diferentes tiempos 18

Tabla 2. Operacionalización de las variables 22

Tabla 3. Parámetros requeridos para la simulación del modelo que representa a la saponificación del acetato de etilo 44

Tabla 4. Valores de la concentración y la temperatura en el reactor, para cada uno de los componentes que intervienen en la reacción de saponificación 48

ÍNDICE DE FIGURAS

Pág.

Figura 1. Solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales mediante Wolfram Mathematica 10

Figura 2. Representación gráfica de la solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales en Wolfram Mathematica, mediante el comando ListLinePlot 12

Figura 3. Representación gráfica de la solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales en Wolfram Mathematica, mediante el comando ListPlot 13

Figura 4. Representación gráfica de la solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales en Wolfram Mathematica, mediante los comandos ListLinePlot y ListPlot 14

Figura 5. Determinación de los valores de m_{A} y m_{B} para cualquier tiempo mayor que cero (0), mediante el comando Evaluate 15

Figura 6. Perfil de concentración para los componentes de la reacción: $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B}$ 19

Figura 7. Perfil de temperatura para los componentes de la reacción: $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B}$ 20

Figura 8. Esquema del diseño de investigación 23

Figura 9. Reactor semicontinuo donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo 25

Figura 10. Perfiles de concentración para los componentes que intervienen en la reacción de saponificación 46

Figura 11. Perfiles de temperatura en el enfriador y reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato etilo 47

RESUMEN

El objetivo principal del presente trabajo de tesis fue: desarrollar una plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura en la reacción de saponificación del acetato de etilo. Para eso se dedujo un modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo, haciéndose una revisión bibliográfica sobre el lenguaje de programación de Wolfram Mathematica y la ecuación de balance molar aplicada a un reactor semicontinuo. Las ecuaciones que forman dicho modelo matemático se programaron en Wolfram Mathematica. Los resultados de la simulación del mencionado modelo matemático, muestran que la concentración del acetato de etilo dentro del reactor, disminuye su valor desde $5\ \mathrm{kmol/m^3}$ en $t = 0$ s, hasta $0\ \mathrm{kmol/m^3}$ en $t = 300$ s. La concentración del hidróxido de sodio dentro del reactor, aumenta desde $0\ \mathrm{kmol/m^3}$ en $t = 0$ s, hasta $0.0197385\ \mathrm{kmol/m^3}$ en $t = 250$ s y a partir de los 250 s, empieza a aumentar hasta $0.268293\ \mathrm{kmol/m^3}$ en $t = 360$ s. La concentración del acetato de sodio dentro del reactor, aumenta desde $0\ \mathrm{kmol/m^3}$ en $t = 0$ s, hasta $0.813595\ \mathrm{kmol/m^3}$ en $t = 250$ s y a partir de los 250 s, empieza a disminuir hasta $0.609756\ \mathrm{kmol/m^3}$ en $t = 360$ s. La temperatura en el reactor, aumenta desde 300 K en $t = 0$ s, hasta 314.071 K en $t = 240$ s y a partir de los 240 s empieza a disminuir hasta 309.687 K en $t = 360$ s. De esta forma se está cumpliendo con el objetivo general y probándose la hipótesis general.

Palabras claves: perfiles de concentración y temperatura, reacción de saponificación, acetato de etilo.

ABSTRACT

SUMMARY

The main objective of the present work of thesis was: developing a platform in Wolfram Mathematica to evaluate profiles of concentration and temperature in the reaction of saponification of ethyl acetate. For that matter a mathematical model that represents the reaction of saponification of ethyl acetate was deduced, getting oneself a bibliographic revision on the programming language of Wolfram Mathematica and the equation of balance molar once a semi-continuous reactor was applied. The equations that create said mathematical model programmed in Wolfram Mathematica themselves. The results of the simulation of the mentioned mathematical model, show that the concentration of the ethyl acetate inside the reactor, he decreases its value from $5\ \mathrm{kmol/m^3}$ in, $t = 0\ \mathrm{s}$ even in $t = 300\ \mathrm{s}$. The concentration of the sodium hydroxide inside the reactor, increases from $0\ \mathrm{kmol/m^3}$ in $t = 0\ \mathrm{s}$, even $0.0197385\ \mathrm{kmol/m^3}$ in v $t = 250\ \mathrm{s}$ and from them, begin to increase even $0.268293\ \mathrm{kmol/m^3}$ in $t = 360\ \mathrm{s}$. The concentration of the sodium acetate inside the reactor, increases from $0\ \mathrm{kmol/m^3}$ in $t = 0\ \mathrm{s}$, even $0.813595\ \mathrm{kmol/m^3}$ in $t = 250\ \mathrm{s}$ and from them, begin to diminish even $0.609756\ \mathrm{kmol/m^3}$ in $t = 360\ \mathrm{s}$. In this way is coming true with the objective general and trying on his general hypothesis

Keywords: profiles of concentration and temperature, reaction of saponification, ethyl acetate.

INTRODUCCIÓN

A inicio de la década de los 90, la simulación de procesos en la ingeniería química se ha convertido en una forma de obtener información sobre el comportamiento deseado de las variables que intervienen en un determinado proceso frente a diversas situaciones, lo cual tiene por finalidad tomar decisiones estratégicas, dada la habilidad de imitar problemas reales y permitir el análisis de estos a medida que cambian las condiciones de las variables de proceso. Aunque las personas son las que tienen que tomar las decisiones de que hacer, los softwares de simulación de procesos facilitan en gran medida el análisis de resultados, determinando la conveniencia de seguir adelante o recopilar más información.

En la actualidad, los simuladores de procesos son de mucha utilidad en investigación y desarrollo, debido a que permiten predecir resultados óptimos, ya sea en una etapa de diseño o en una planta en funcionamiento, teniéndose en cuenta que el costo de una simulación, normalmente es menos del 1 % del costo total de la implementación de un diseño o rediseño.

Desde hace aproximadamente 30 años, en las facultades de ingeniería química de las diferentes universidades nacionales como: Universidad Nacional de Ingeniería (UNI), Universidad Nacional Mayor de San Marcos (UNMSM), Universidad Nacional del Callao (UNAC), Universidad Nacional de Trujillo (UNT), etc., se vienen dictado el curso de simulación de procesos, en el cual hacen uso de softwares especializados tales como: Aspen HYSYS, Chemcad y COCO. Esto es debido a que dichas universidades pagan por la licencia de estos softwares y esto hace que los docentes sean capacitados cada vez que sale una versión de los mencionados softwares. En la Facultad de Ingeniería Química (FIQ) de la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana (UNAP), no se cuenta con la licencia de ninguno de los mencionados softwares, de manera que el futuro egresado de la FIQ-UNAP, no podrá desarrollar la competencia para usar las herramientas modernas en la resolución de problemas reales de ingeniería. En consecuencia, el egresado de la FIQ-UNAP no tendrá el mismo nivel de conocimiento para competir con egresados de las facultades de ingeniería química de las mencionadas universidades nacionales. Sin embargo, se puede desarrollar plataformas con código abierto, donde se haga uso de Simulink de Matlab y Wolfram Mathematica y registrarlas como propiedad de la FIQ-

UNAP; de esta manera, se podría utilizar estas plataformas como herramientas computacionales para el dictado de los diferentes cursos de especialidad (simulación de procesos químicos, cinética química y diseño de reactores, termodinámica I y II y transferencia de masa, etc.) de la FIQ-UNAP.

Por todo lo mencionado líneas arriba, es que, en el presente trabajo de tesis, se plantea el siguiente problema general: "¿es posible desarrollar una plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura en la reacción de saponificación del acetato de etilo?".

Entonces, los problemas específicos que se formulan en la presente investigación son:

Problemas específicos

- ¿Cuál es el modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo?
- ¿Cuál es la ecuación diferencial entre la concentración y el tiempo para cada uno de los cuatro componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) de la reacción de saponificación?
- ¿Cuál es la ecuación diferencial entre la temperatura y el tiempo en el reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo?

Teniendo en cuenta, el problema general y los problemas específicos, se generan el objetivo general y los objetivos específicos de la presente investigación, estos son:

Objetivo general

Desarrollar una plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura en la reacción de saponificación del acetato de etilo.

Objetivos específicos

- Obtener el modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo.

- Determinar la ecuación diferencial entre la concentración y el tiempo para cada uno de los cuatro componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) de la reacción de saponificación.

- Determinar la ecuación diferencial entre la temperatura y el tiempo en el reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo.

La presente investigación es importante, porque la plataforma que se desarrolla es de cogido abierto, de manera que los usuarios (estudiantes y docentes de la FIQ-UNAP), pueden visualizar las ecuaciones que forman parte del modelo de la saponificación del acetato de etilo. Esto también hace posible que los usuarios puedan realizar modificaciones con respecto a las ecuaciones diferenciales que forman dicho modelo. De esta manera, dicha plataforma será una herramienta computacional que generará nuevos conocimientos en los estudiantes y docentes de la FIQ-UNAP.

La población para la presente investigación, está formada por los cuatro (4) perfiles de concentración de los componentes de la saponificación, más el perfil de temperatura. Entonces, la población tiene un tamaño igual a cinco (5). Como la población tiene un tamaño menor que ocho (8), la muestra está representada por el 100 % de la población. Cada perfil se evalúa para un tiempo de 360 s.

La estructura de la tesis, está formada por los siguientes capítulos:

- Capítulo I: Marco teórico
- Capítulo II: Hipótesis y variables
- Capítulo III: Metodología
- Capítulo IV: Resultados
- Capítulo V: Discusión
- Capítulo VI: Conclusiones
- Capítulo VII: Recomendaciones
- Capítulo VIII: Fuentes de información

CAPÍTULO I: MARCO TEÓRICO

1.1. Antecedentes

- Castillo, Ramírez y Sigüenza (2019, pp. ii, 26-27), realizaron el trabajo de tesis titulado: Modelación y simulación de procesos de transferencia de masa en ingeniería química. En este trabajo desarrollaron una plataforma de simulación denominada Scilab, para la cual utilizaron Wolfram Mathematica. Mediante la plataforma Scilab, realizaron la simulación de los diferentes temas (difusión para gases y líquidos, absorción de gases, humidificación, destilación y secado) impartidos en el curso de Operaciones Unitarias III, de la carrera de Ingeniería Química de la Universidad de El Salvador. De esta forma los estudiantes y docentes de dicha carrera y universidad, tuvieron herramientas alternativas de aprendizaje y enseñanza en el curso de Operaciones Unitarias III. Los resultados de las simulaciones realizadas con la plataforma Scilab, se compararon con resultados reales, de lo cual pudieron observar que la diferencia entre dichos resultados fue insignificante.

- Martinez, Zamora y Vega (2018, pp. 1-7), en el X Congreso Argentino de Enseñanza de la Ingeniería Química, expusieron el siguiente tema: Simuladores de procesos en la carrera de Ingeniería Química. En esta exposición dieron a conocer que la importancia del uso de simuladores de procesos como Aspen HYSYS y COCO en carreras de Ingeniería Química, radica en que los usuarios (estudiantes y docentes), pueden simular la estructura de sistemas complejos del mundo real (equipos de procesos individuales y procesos químicos completos), permitiendo a dichos usuarios, evaluar variables, cambiar condiciones operativas y optimizar dichos procesos.

- Chávez (2017, pp. 23-24), ha realizado el trabajo de tesis titulado: Modelado y simulación de un reactor de lecho fluidizado para reacción de acoplamiento oxidativo de metano utilizando Wolfram Mathematica como herramienta de cómputo. El objetivo de este trabajo fue simular un reactor de lecho fluidizado para la reacción de OCM (acoplamiento oxidativo de metano) haciendo uso del software Wolfram Mathematica para su solución. Para esto, tuvieron en cuenta

algunos factores que determinan el proceso OCM con un catalizador La_2O_3/CaO, en un reactor de lecho fluidizado que opera isotérmicamente y en estado estacionario. Para ello utilizaron el modelo de Kunni-Levenspiel, el cual toma en consideración aspectos que se relacionan con la cinética química, el transporte de masa y la cantidad de movimiento de dicho proceso. Por la complejidad de dicho modelo, fue necesario que lo resuelvan numéricamente, haciendo uso del programa Wolfram Mathematica, esto permitió determinar el comportamiento del sistema cuando el reactor fue operado bajo diferentes condiciones.

1.2. Bases teóricas

1.2.1. Ecuación general de balance molar

La ecuación general de balance molar para un componente j, en cualquier instante del tiempo t es (Fogler, 2008, pp. 8-10):

$$\textbf{Entrada} - \textbf{Salida} + \textbf{Generación} = \textbf{Acumulación}. \quad \textbf{(1)}$$

$$\begin{aligned} \textbf{Entrada} &= F_{j\mathrm{E}}(\mathrm{kmol/s}). \\ \textbf{Salida} &= F_{j\mathrm{S}}(\mathrm{kmol/s}). \\ \textbf{Generación} &= G_j(\mathrm{kmol/s}). \\ \textbf{Acumulación} &= \frac{dN_j}{dt}(\mathrm{kmol/s}). \end{aligned}$$

$$F_{j\mathrm{E}} - F_{j\mathrm{S}} + G_j = \frac{dN_j}{dt}. \quad \textbf{(2)}$$

Donde N_j representa la cantidad de moles del componente j en el tiempo t. Los términos $F_{j\mathrm{E}}$, $F_{j\mathrm{S}}$, G_j y $\frac{dN_j}{dt}$ representan las velocidades molares del componente j que entran al sistema, salen del sistema, se generan y acumulan dentro del sistema, respectivamente.

El término G_j, se puede expresar mediante la siguiente ecuación:

$$G_j = \int r_j \, dV. \quad \textbf{(3)}$$

Donde r_j es la velocidad neta de formación del componente j en $\mathrm{kmol/(s.m^3)}$ y V es el volumen del sistema reaccionante en $\mathrm{m^3}$.

La cantidad de moles del componente j, se puede expresar en términos de la concentración molar del componente j y el volumen del sistema reaccionante, es decir:

$$N_j = C_j V. \tag{4}$$

Donde N_j y C_j representan a la cantidad de moles y la concentración molar del componente j, en kmol y $\mathrm{kmol/m^3}$, respectivamente.

Entonces, reemplazando las ecuaciones **(3)** y **(4)** en la ecuación **(2)**, se obtiene:

$$F_{j\mathrm{E}} - F_{j\mathrm{S}} + \int r_j \, dV = \frac{d(C_j V)}{dt}. \tag{5}$$

1.2.2. Leyes de velocidad y estequiometría

Las velocidades de reacción relativas de los diferentes componentes que intervienen en una reacción química, se pueden determinar por la relación de sus coeficientes estequiométricos (Fogler, 2008, p. 81; citado por Chu y García, 2021, p. 5), es decir:

$$a\mathrm{A} + b\mathrm{B} \underset{k_{\mathrm{izq}}}{\overset{k_{\mathrm{der}}}{\rightleftharpoons}} c\mathrm{C} + d\mathrm{D} \tag{6}$$

$$\mathrm{A} + \frac{b}{a}\mathrm{B} \underset{k_{\mathrm{izq}}}{\overset{k_{\mathrm{der}}}{\rightleftharpoons}} \frac{c}{a}\mathrm{C} + \frac{d}{a}\mathrm{D} \tag{7}$$

$$\frac{-r_{\mathrm{A}}}{a} = \frac{-r_{\mathrm{B}}}{b} = \frac{r_{\mathrm{C}}}{c} = \frac{r_{\mathrm{D}}}{d}. \tag{8}$$

Donde a, b, c y d, representan a los coeficientes estequiométricos de los componentes A, B, C y D, respectivamente. Las cantidades $(-r_{\mathrm{A}})$ y $(-r_{\mathrm{B}})$ son las

velocidades de desaparición de los componentes A y B, respectivamente. Las cantidades r_C y r_D son las velocidades de formación de las especies C y D, respectivamente. Las ecuaciones **(7)** y **(8)**, indican lo siguiente: por cada mol de A que se consume, se producen (c/a) moles de C, es decir:

$$r_C = \frac{c}{a}\ (-r_A). \tag{9}$$

Considerando la ecuación **(6)**, la velocidad neta de formación de la componente A, también se puede expresar como la derivada con respecto al tiempo de su concentración molar, es decir:

$$r_A = \frac{dC_A}{dt}. \tag{10}$$

Como la ecuación **(6)** es en ambos sentidos, entonces al aplicar la ley de velocidad a la componente A, se tiene que la velocidad neta de formación de esta componente, se puede expresar como la suma de las velocidades de formación, es decir:

$$r_A = r_{A,\,der} + r_{A,\,izq}. \tag{11}$$

Las cantidades $r_{A,\,der} = -k_{der}\ C_A C_B$ y $r_{A,\,izq} = k_{izq}\ C_C C_D$, son las velocidades de formación hacia la derecha (desaparición) y hacia la izquierda (producción), respectivamente. Las cantidades C_C y C_D representan a las concentraciones molares de los componentes C y D, respectivamente. Entonces, la velocidad neta de formación de la componente A, queda expresada mediante la siguiente ecuación:

$$r_A = k_{izq}\ C_C C_D - k_{der}\ C_A C_B. \tag{12}$$

Donde k_{izq} y k_{der} son las constantes de velocidad en $\mathrm{m^3/(s.kmol)}$, las cuales dependen específicamente de la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción química.

1.2.3. Ecuación de Arrhenius

La constante de velocidad de reacción (k), o velocidad de reacción específica a una determinada temperatura y en cualquier reacción química, se puede determinar con

la ecuación de Arrhenius (Fogler, 2008, p. 92; citado por Chu y García, 2021, pp. 6-7), tal como se indica a continuación:

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}. \quad \textbf{(13)}$$

Donde A es el factor preexponencial o factor de frecuencia, E_a es la energía de activación en J/kmol o kcal/kmol, $R = 8.314\ \frac{\text{J}}{\text{mol.K}} = 8314\ \frac{\text{J}}{\text{kmol.K}} = 1.987\ \frac{\text{kcal}}{\text{kmol.K}}$ es la constante de los gases y T es la temperatura en K.

La ecuación de Arrhenius, también puede expresarse en una forma más útil (Levenspiel, 2004, p. 28), tal como se muestra en la siguiente ecuación:

$$k(T_2) = k(T_1)e^{-\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T_2}-\frac{1}{T_1}\right)}. \quad \textbf{(14)}$$

Donde $k(T_1)$ y $k(T_2)$, son las constantes de velocidad a las temperaturas T_1 y T_2, respectivamente.

La ecuación **(14)**, muestra que si se conocen la constante de velocidad a la temperatura T_1 y la energía de activación E, se puede determinar la constante de velocidad a la temperatura T_2.

1.2.4. Reacción de la saponificación del acetato de etilo

La reacción de la saponificación del acetato de etilo, es como se muestra en la ecuación **(15)** (Núñez y Cabrera, pp. 1-7).

$$\mathrm{C_2H_5(CH_3COO)_{(aq)} + NaOH_{(aq)} \rightleftarrows Na(CH_3COO)_{(aq)} + C_2H_5OH_{(aq)}}. \quad \textbf{(15)}$$

Se puede observar en esta ecuación, que los componentes de la saponificación son: el acetato de etilo $\left(\mathrm{C_2H_5(CH_3COO)_{(aq)}}\right)$, el hidróxido de sodio $\left(\mathrm{NaOH_{(aq)}}\right)$ en estado acuoso, el acetato de sodio $\left(\mathrm{Na(CH_3COO)_{(aq)}}\right)$ y el etanol $\left(\mathrm{C_2H_5OH_{(aq)}}\right)$. Esta reacción se debe llevar a cabo en un reactor semicontinuo, a presión atmosférica (1 atm) y en un rango de temperatura de 23 a 40 °C (Núñez y Cabrera, pp. 1-7). También se puede

observar en la ecuación **(15)**, que para formar un mol de $Na(CH_3COO)_{(aq)}$, más un mol de $C_2H_5OH_{(aq)}$, se requiere que teóricamente reaccione un mol de $C_2H_5(CH_3COO)_{(aq)}$ con un mol de $NaOH_{(aq)}$.

1.2.5. Wolfram Mathematica

El programa Wolfram Mathematica es una herramienta que permite desarrollar plataformas para simular procesos químicos con modelos completamente interactivos listos para su implementación y utilización, ya que posee una miscelánea de cálculo, estadística, optimización, métodos numéricos y datos químicos incorporados (https://www.wolfram.com). Las tecnologías Wolfram Mathematica incluyen miles de funciones incorporadas que, en el campo de la ingeniería química, permiten realizar lo siguiente:

- Resolver ecuaciones diferenciales no lineales acopladas para modelado cinético químico y aplicaciones en fenómenos de transporte.

- Determinar las soluciones numéricas para ecuaciones de transporte, problemas avanzados de transferencia de masa y calor, termodinámica y otras aplicaciones de fenómenos de transporte.

- Desarrollar modelos termodinámicos para predecir el equilibrio vapor-líquido de mezclas no ideales.

1.2.6. Solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden mediante Wolfram Mathematica

Wolfram Research, Inc. (2008, pp. 275-276), indica que, para obtener la solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden con condiciones iniciales, la sintaxis es:

$$\text{sol} = \text{NDSolve}[\{eqn_1, eqn_2, \cdots\cdots\}, \{y_1, y_2, \cdots\cdots\}, \{x, x_{min}, x_{max}\}]. \qquad \textbf{(16)}$$

Donde NDSolve es el comando resolvedor diferencial numérico.

Los términos $eqn_1, eqn_2, \cdots\cdots$, representan a las ecuaciones diferenciales del sistema; las cantidades $y_1, y_2, \cdots\cdots$, representan a las variables dependientes y la cantidad x representa a la variable independiente. Por último, las cantidades x_{min} y x_{max}, representan el valor mínimo y máximo de la variable independiente, respectivamente. Para entender mejor lo mencionado, a continuación, se resuelve el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales.

$$\frac{dm_{\mathrm{A}}}{dt} = \frac{1}{50} m_{\mathrm{B}} - \frac{2}{25} m_{\mathrm{A}}. \tag{17}$$

$$\frac{dm_{\mathrm{B}}}{dt} = \frac{2}{25} m_{\mathrm{A}} - \frac{2}{25} m_{\mathrm{B}}. \tag{18}$$

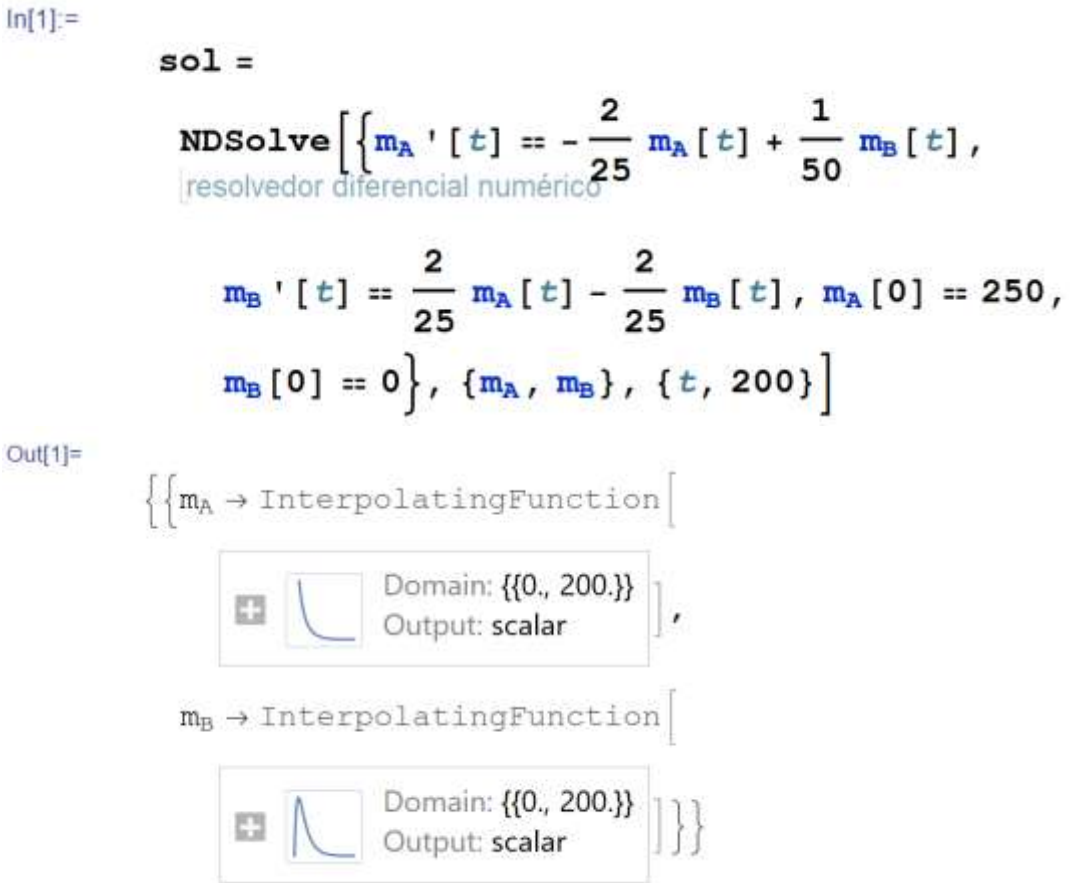


Figura 1. Solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales mediante Wolfram Mathematica.

Fuente: Elaboración propia.

En la figura 1, se puede observar la forma como se representa en Wolfram Mathematica el sistema de ecuaciones diferenciales formado por las ecuaciones **(17)** y **(18)**. También se puede observar en esta figura, que las cantidades m_{A} y m_{B} representan a las variables dependientes y t representa a la variable independiente. Los valores mínimo y máximo de la variable independiente son 0 y 200, respectivamente. En este caso, para representar a las derivadas de m_{A} y m_{B} con respecto a t en Wolfram Mathematica, se utiliza la notación prima $(')$, es decir:

$$\frac{dm_{\mathrm{A}}}{dt} = \mathrm{m_A}'[t], \quad \frac{dm_{\mathrm{B}}}{dt} = \mathrm{m_B}'[t].$$

Otro aspecto que se debe tener en cuenta cuando se utiliza Wolfram Mathematica, es que las variables dependientes deben escribirse en función de su argumento, el cual debe ir entre corchetes, es decir: $\mathrm{m_A}[t]$ y $\mathrm{m_B}[t]$. De esta forma, es que las derivadas de las cantidades m_{A} y m_{B} se escriben como funciones dependientes del tiempo, es decir: $\mathrm{m_A}'[t]$ y $\mathrm{m_B}'[t]$. Las condiciones iniciales de m_{A} y m_{B}, son 250 y 0, respectivamente, las cuales se expresan como $\mathrm{m_A}[0] == 250$ y $\mathrm{m_B}[0] == 0$. Por último, el signo igual en las ecuaciones diferenciales debe escribirse como doble igual, esto es: $==$.

En la figura 2, se muestra la representación gráfica de la solución del sistema de ecuaciones diferenciales formado por las ecuaciones **(17)** y **(18)** en Wolfram Mathematica, mediante el comando ListLinePlot. El comando $\mathrm{PlotRange} \rightarrow \{\{0, 200\}, \{0, 250\}\}$, se utiliza como rango de representación; los valores en la primera llave $\{0, 200\}$, indican al valor mínimo y máximo de la variable que se representa en el eje horizontal; los valores en la segunda llave $\{0, 250\}$, indican al valor mínimo y máximo de la variable que se representa en el eje vertical. El comando $\mathrm{GridLines} \rightarrow \mathrm{Automatic}$, se utiliza para que el gráfico se muestre en una parrilla de líneas. El comando $\mathrm{Frame} \rightarrow \mathrm{True}$, se utiliza para que el gráfico tenga un marco. El comando $\mathrm{FrameLabel} \rightarrow \{\mathrm{Tiempo\ (min)},\ \text{"Masa (lb)"}\}$, se utiliza para escribir las variables que se representan en los ejes horizontal y vertical, para este caso el tiempo en min y la masa en lb, respectivamente. Por último, el comando $\mathrm{PlotStyle} \rightarrow \{\{\mathrm{Thickness}[0.003], \mathrm{orange}\}, \{\mathrm{Thickness}[0.003], \mathrm{Gray}\}\}$, se usa para representar el color y grosor de cada una de las curvas que representan a m_{A} versus t (color naranja) y a m_{B} versus t (color gris).

```
In[2]:= ListLinePlot[{Table[{t, Evaluate[mA[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, 200, 1}],
          Table[{t, Evaluate[mB[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, 200, 1}]},
        PlotRange → {{0, 200}, {0, 250}}, GridLines → Automatic, Frame → True,
        FrameLabel → {"Tiempo (min)", "masa (lb)"},
        PlotStyle → {{Thickness[0.003], Orange}, {Thickness[0.003], Gray}}]
```

Out[2]=

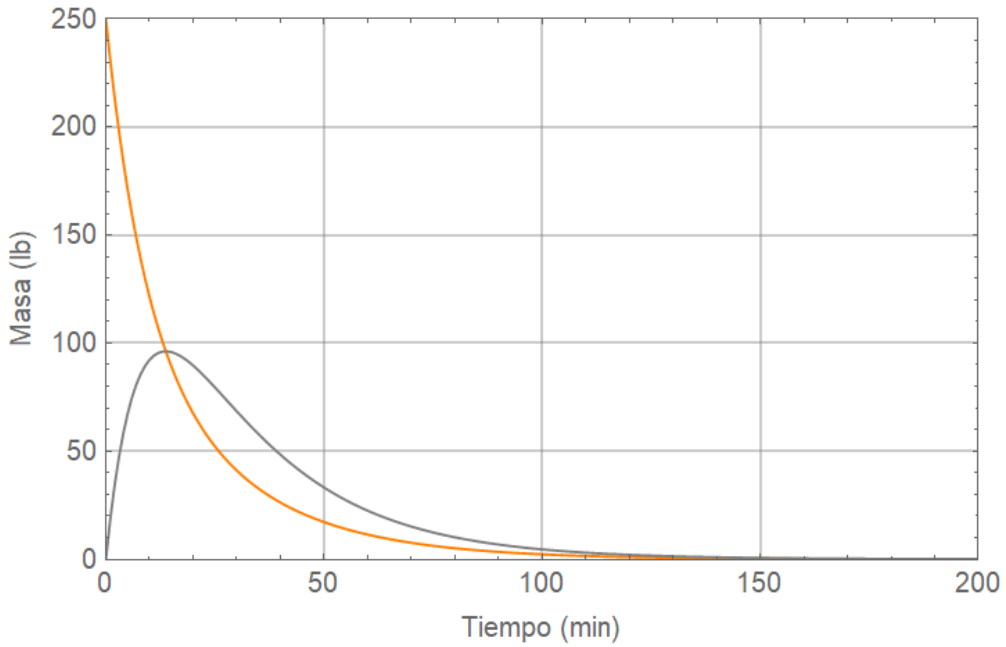


Figura 2. Representación gráfica de la solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales en Wolfram Mathematica, mediante el comando ListLinePlot.
Fuente: Elaboración propia.

La figura 3, es la representación gráfica de la solución del sistema de ecuaciones diferenciales formado por las ecuaciones **(17)** y **(18)** en Wolfram Mathematica, mediante el comando ListPlot. El comando PlotLegends → {"m_A" , "m_B"}, se usa para representar las leyendas de los gráficos de m_A versus t (color naranja) y de m_B versus t (color gris). El comando PlotMarkers → {"■" , "●"}, se utiliza para representar a los puntos que forman a las gráficas de m_A versus t (color naranja) y de m_B versus t (color gris), mediante marcadores; en este caso, los marcadores ■ (color naranja) y ● (color gris) representan a los puntos que forman a las gráficas de m_A versus t y m_B versus t, respectivamente.

```
In[3]:= ListPlot[{Table[{t, Evaluate[mA[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, 200, 4}],
          representació··· tabla        evalúa
          Table[{t, Evaluate[mB[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, 200, 4}]},
          tabla        evalúa
         PlotLegends → {"mA", "mB"}, PlotMarkers → {"■", "●"},
         leyendas de representación   marcadores de representación
         PlotRange → {{0, 200}, {0, 250}},
         rango de representación
         PlotStyle → {{Thickness[0.003], Orange}, {Thickness[0.003], Gray}}]
         estilo de represent··· grosor   naranja   grosor   gris
```

Out[3]=

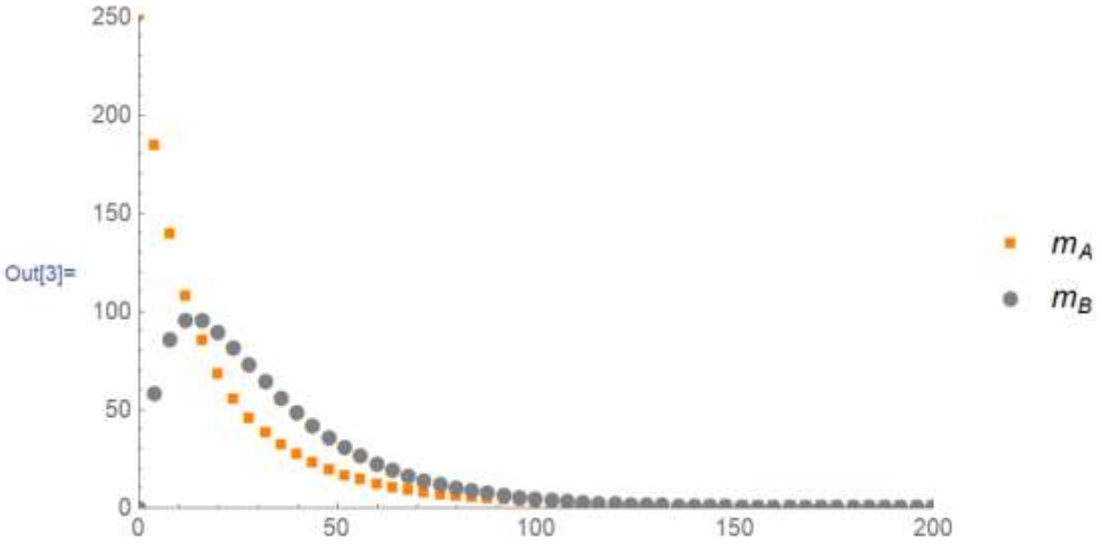


Figura 3. Representación gráfica de la solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales en Wolfram Mathematica, mediante el comando ListPlot.

Fuente: Elaboración propia.

Se puede utilizar al mismo tiempo los comandos ListLinePlot y ListPlot, para representar gráficamente a la solución del sistema de ecuaciones diferenciales formado por las ecuaciones **(17)** y **(18)** en Wolfram Mathematica, tal como se muestra en la figura 4. Para eso, se debe utilizar el comando Show antes de los comandos ListLinePlot y ListPlot, es decir: Show[ListLinePlot[ ] , ListPlot[ ]]. De esta forma, las figuras 2 y 3, se unen en una sola para formar la figura 4.

En la figura 5, se muestra la forma de cómo determinar los valores de m_A y m_B para cualquier tiempo mayor que cero (0), haciendo uso del comando Evaluate. Por ejemplo, al escribir Evaluate[m_A[4] /. sol] [[1]] y Evaluate[m_B[4] /. sol] [[1]], se

está determinando los valores de m_A y m_B en un tiempo $t = 4$ min, los cuales resultan igual a 183.866 lb y 58.3401 lb, respectivamente.

```
In[4]:= Show[ListLinePlot[{Table[{t, Evaluate[mA[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, 200, 1}],
          mues··  gráfico de línea de ···  tabla  evalúa
         Table[{t, Evaluate[mB[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, 200, 1}]},
          tabla  evalúa
        PlotRange → {{0, 200}, {0, 250}}, GridLines → Automatic, Frame → True,
          rango de representación  parrilla de líneas  automático  marco  verdadero
        FrameLabel → {"Tiempo (min)", "masa (lb)"},
          etiqueta de marco
       PlotStyle → {{Thickness[0.003], Orange}, {Thickness[0.003], Gray}}],
         estilo de represent···  grosor  naranja  grosor  gris
      ListPlot[{Table[{t, Evaluate[mA[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, 200, 4}],
        representació··  tabla  evalúa
       Table[{t, Evaluate[mB[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, 200, 4}]},
        tabla  evalúa
       PlotLegends → {"mA", "mB"}, PlotMarkers → {"■", "●"},
         leyendas de representación  marcadores de representación
       PlotRange → {{0, 200}, {0, 250}},
         rango de representación
       PlotStyle → {{Thickness[0.003], Orange}, {Thickness[0.003], Gray}}]
         estilo de represent···  grosor  naranja  grosor  gris
```

Out[4]=

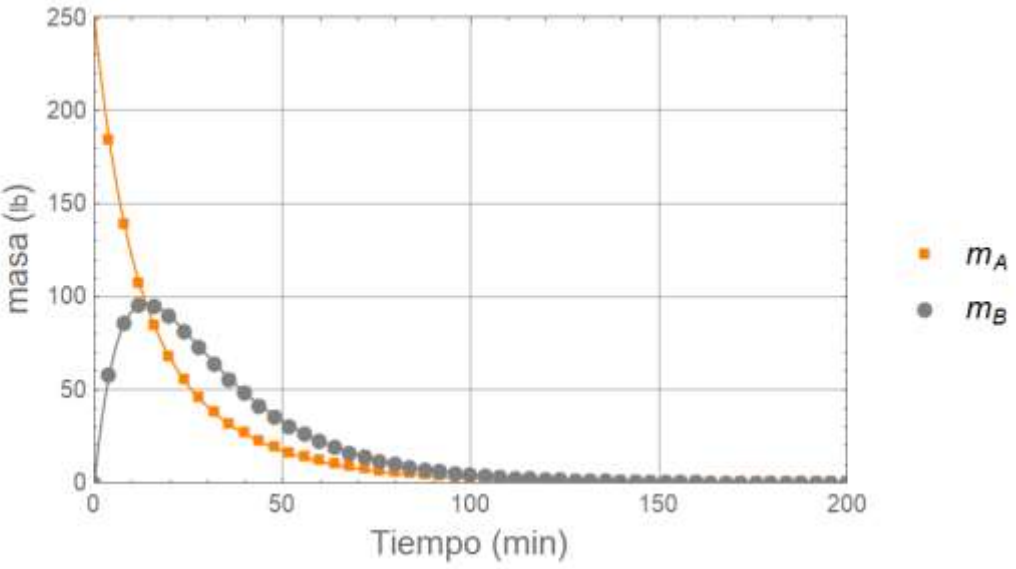


Figura 4. Representación gráfica de la solución numérica de un sistema de ecuaciones diferenciales en Wolfram Mathematica, mediante los comandos ListLinePlot y ListPlot.

Fuente: Elaboración propia.

```
In[5]:= Evaluate[mA[4] /. sol][[1]]
        evalúa
Out[5]= 183.866

In[6]:= Evaluate[mB[4] /. sol][[1]]
        evalúa
Out[6]= 58.3401
```

Figura 5. Determinación de los valores de m_{A} y m_{B} para cualquier tiempo mayor que cero (0), mediante el comando Evaluate.

Fuente: Elaboración propia.

De esta forma, mediante el comando Evaluate, se puede determinar los valores de m_{A} y m_{B} para cualquier tiempo mayor que cero y elaborar la tabla 1.

```
In[7]:= Evaluate[mA[20] /. sol][[1]]
        evalúa
Out[7]= 67.5059

In[8]:= Evaluate[mB[20] /. sol][[1]]
        evalúa
Out[8]= 89.6528

In[9]:= Evaluate[mA[40] /. sol][[1]]
        evalúa
Out[9]= 26.2658

In[10]:= Evaluate[mB[40] /. sol][[1]]
         evalúa
Out[10]=
         48.4167
```

In[11]:= `Evaluate[m_A[60] /. sol][[1]]`

evalúa

Out[11]=

11.4331

In[12]:= `Evaluate[m_B[60] /. sol][[1]]`

evalúa

Out[12]=

22.4928

In[13]:= `Evaluate[m_A[80] /. sol][[1]]`

evalúa

Out[13]=

5.10374

In[14]:= `Evaluate[m_B[80] /. sol][[1]]`

evalúa

Out[14]=

10.1736

In[15]:= `Evaluate[m_A[100] /. sol][[1]]`

evalúa

Out[15]=

2.29022

In[16]:= `Evaluate[m_B[100] /. sol][[1]]`

evalúa

Out[16]=

4.57737

In[17]:= `Evaluate[m_A[120] /. sol][[1]]`

evalúa

Out[17]=

1.02879

In[18]:= `Evaluate[m_B[120] /. sol][[1]]`

evalúa

Out[18]=

2.0573

```
In[21]:= Evaluate[mA[160] /. sol][[1]]
         evalúa
Out[21]=
         0.207695

In[22]:= Evaluate[mB[160] /. sol][[1]]
         evalúa
Out[22]=
         0.415388

In[23]:= Evaluate[mA[180] /. sol][[1]]
         evalúa
Out[23]=
         0.0933233

In[24]:= Evaluate[mB[180] /. sol][[1]]
         evalúa
Out[24]=
         0.186646

In[25]:= Evaluate[mA[200] /. sol][[1]]
         evalúa
Out[25]=
         0.0419328

In[26]:= Evaluate[mB[200] /. sol][[1]]
         evalúa
Out[26]=
         0.0838656
```

En la tabla 1, se puede observar los valores de m_{A} y m_{B} para $t \in [0, 200]$. Estos valores han sido obtenidos mediante el comando Evaluate de Wolfram Mathematica. Se debe notar en este caso, que m_{A} y m_{B} están en lb y t está en min. Los valores de m_{A} y m_{B} en $t = 0$ min, son 250 lb y 0 lb, respectivamente. Los valores de m_{A} disminuyen con el tiempo, llegando hasta 0.0419328 lb en $t = 200$ min. Los valores de m_{B} aumentan hasta el punto donde se interceptan las gráficas de m_{A} y m_{B}. A partir de dicho punto de intercepción, los valores de m_{B} disminuyen con el tiempo, llegando hasta 0.0838656 lb en $t = 200$ min.

Tabla 1. Valores de m_A y m_B para diferentes tiempos.

t min	m_A lb	m_B lb
0	250	0
20	67.5059	89.6528
40	26.2658	48.4167
60	11.4331	22.4928
80	5.10374	10.1736
100	2.29022	4.57737
120	1.02879	2.0573
140	0.462239	0.924453
160	0.207695	0.415388
180	0.0933233	0.186646
200	0.0419328	0.0838656

Fuente: Elaboración propia.

1.3. Definición de términos básicos

1.3.1. Concentración

La concentración molar de un componente en una mezcla, se define como el número de moles de este componente entre el volumen de la mezcla (Felder y Rousseau, 2004, p. 53; Geankoplis, 2006, p. 8). Para un componente *j*, la concentración se denota como C_j y matemáticamente se puede expresar mediante la siguiente ecuación:

$$C_j = \frac{\text{Moles de } j}{\text{Volumen de la mezcla}}. \tag{19}$$

1.3.2. Temperatura

Según Smith, Van Ness y Abbott (2007, p. 5), la temperatura de una sustancia es una medida de la energía cinética promedio de sus moléculas, la cual es medible mediante un termómetro. Debido a que es imposible medir esta energía de manera directa, la temperatura debe determinarse en forma directa midiendo alguna propiedad física de la

sustancia cuyo valor dependa de la temperatura. Se denota como T y sus unidades de medida son: °C, K, °F y °R.

1.3.3. Tiempo

Es una magnitud escalar que normalmente es independiente de las otras que intervienen en un proceso (Coughanowr y LeBlanc, 2009, p. 26). Se representa como t y sus unidades son: s, min, h, etc.

1.3.4. Perfil de concentración

Es la representación gráfica de la concentración de una sustancia versus el tiempo (Fogler, 2008, pp. 343, 391). En la figura 6, se puede observar el perfil de concentración para cada uno de los componentes de una reacción (A ⟶ B), la cual se lleva a cabo en un reactor intermitente.

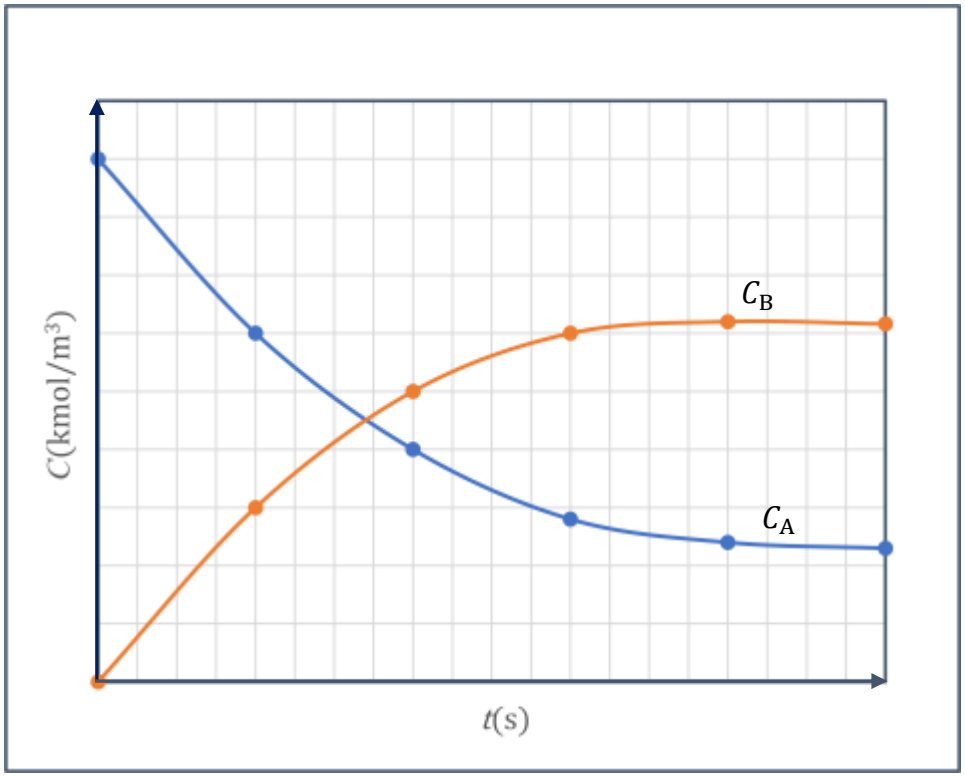


Figura 6. Perfil de concentración para los componentes de la reacción: A ⟶ B.
Fuente: Elaboración propia.

1.3.5. Perfil de temperatura

Se refiere a la representación gráfica de la temperatura a la que se lleva a cabo una reacción química versus el tiempo (Fogler, 2008, pp. 619, 622). En la figura 7, se puede observar el perfil de temperatura para los componentes de una reacción $(\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B})$, la cual se puede llevar a cabo en un reactor semicontinuo y no isotérmico.

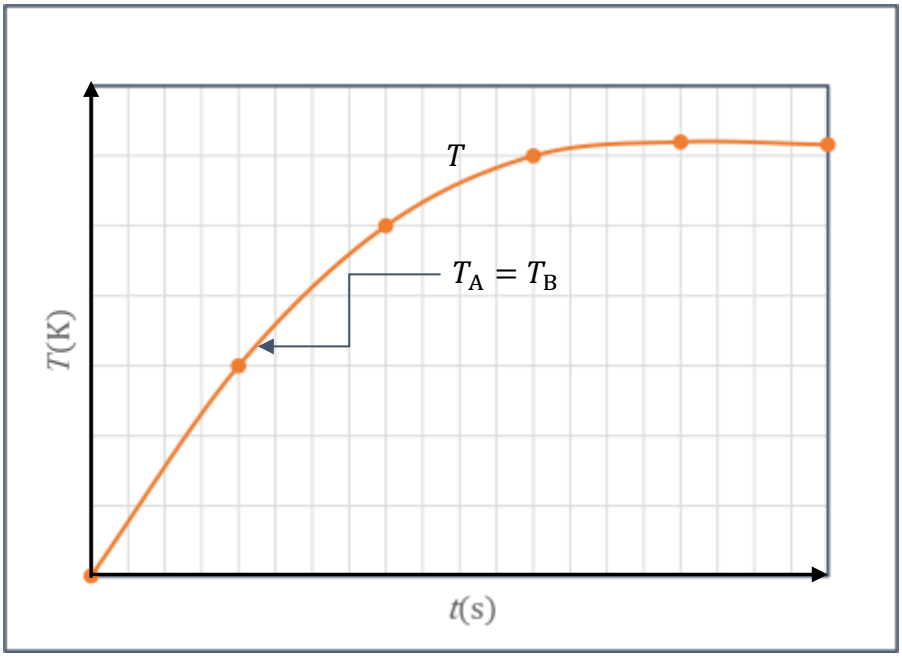


Figura 7. Perfil de temperatura para los componentes de la reacción: $\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B}$.
Fuente: Elaboración propia.

1.3.6. Velocidad neta de formación

La velocidad neta de formación de un componente j por unidad de volumen, se denota como r_j y es igual a la derivada de la concentración del mismo componente con respecto al tiempo (Fogler, 2008, pp. 6-7), tal como se indica en la siguiente ecuación:

$$r_j = \frac{dC_j}{dt}. \tag{20}$$

La unidad de medida de r_j es $\mathrm{kmol}/(\mathrm{s.m^3})$, estando C_j en $\mathrm{kmol}/\mathrm{m^3}$ y t en s.

CAPÍTULO II: HIPÓTESIS Y VARIABLES

2.1. Formulación de la hipótesis

a. Hipótesis general

Sí, es posible desarrollar una plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura en la reacción de saponificación del acetato de etilo.

b. Hipótesis específicas

- El modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo, permite desarrollar la plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura.

- La ecuación diferencial entre la concentración y el tiempo para cada uno de los cuatro componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) de la reacción de saponificación, permite desarrollar la plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura.

- La ecuación diferencial entre la temperatura y el tiempo en el reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo, permite desarrollar la plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura.

2.2. Variables y su operacionalización

Variable independiente: tiempo.

Variables dependientes: concentración del acetato de etilo, concentración del hidróxido de sodio, concentración del acetato de sodio, concentración del etanol y temperatura.

Tabla 2. Operacionalización de las variables.

Variables	Notación	Definición	Tipo por su naturaleza	Indicadores	Escala de medición	Medios de verificación
Independiente						
Tiempo	t	Es una magnitud escalar que normalmente es independiente de las otras que intervienen en un proceso (Coughanowr y LeBlanc, 2009, p. 26).	Cuantitativa continua	s	Razón	• Archivo de la plataforma en Wolfram Mathematica.
Dependientes						
Concentración del acetato de etilo	C_{A}	Es el número de moles del acetato de etilo entre el volumen de la mezcla (Felder y Rousseau, 2004, p. 53).	Cuantitativa continua	$\mathrm{kmol/m^3}$	Razón	• Archivo de la plataforma en Wolfram Mathematica.
Concentración del hidróxido de sodio	C_{B}	Es el número de moles del hidróxido de sodio entre el volumen de la mezcla (Felder y Rousseau, 2004, p. 53).	Cuantitativa continua	$\mathrm{kmol/m^3}$	Razón	• Archivo de la plataforma en Wolfram Mathematica.
Concentración del acetato de sodio	C_{C}	Es el número de moles del acetato de sodio entre el volumen de la mezcla (Felder y Rousseau, 2004, p. 53).	Cuantitativa continua	$\mathrm{kmol/m^3}$	Razón	• Archivo de la plataforma en Wolfram Mathematica.
Concentración del etanol	C_{D}	Es el número de moles del etanol entre el volumen de la mezcla (Felder y Rousseau, 2004, p. 53).	Cuantitativa continua	$\mathrm{kmol/m^3}$	Razón	• Archivo de la plataforma en Wolfram Mathematica.
Temperatura	T	Específicamente se refiere a la temperatura a la que se encuentran todos los componentes que intervienen en la reacción de saponificación (Smith, Van Ness y Abbott 2007, p. 5).	Cuantitativa continua	K	Intervalo	• Archivo de la plataforma en Wolfram Mathematica.

Fuente: Elaboración propia.

CAPÍTULO III: METODOLOGÍA

3.1. Tipo y diseño

En la presente investigación, primeramente, se ha realizado una revisión bibliográfica sobre el lenguaje de programación de Wolfram Mathematica, la ecuación de balance molar aplicada a un reactor semicontinuo, la estequiometría de las reacciones químicas, la ecuación general de balance de energía y la reacción de la saponificación del acetato de etilo. Posteriormente se dedujo el modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo, el cual se programó en Wolfram Mathematica. Por último, se realizó la simulación de dicho modelo obteniéndose los perfiles de concentración y temperatura para cada uno de los componentes de la saponificación. Por lo tanto, la presente investigación tiene enfoque **cuantitativo** con nivel de profundización **predictivo** y **diseño correlacional**. El esquema del diseño de investigación, se muestra en la figura 8.

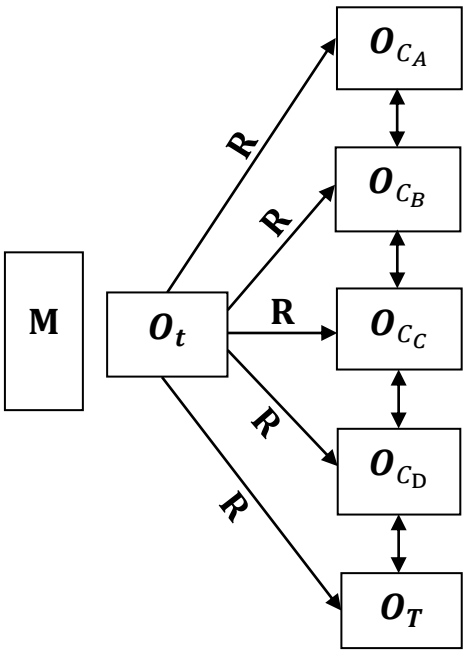


Figura 8. Esquema del diseño de investigación.

Fuente: Elaboración propia.

Donde:

O_t, O_{C_A}, O_{C_B}, O_{C_C}, O_{C_D} y O_T, son las observaciones obtenidas en cada una de las seis variables (t, C_A, C_B, C_C, C_D y T, respectivamente), distintas de la muestra.

t : tiempo (variable independiente).

C_A : concentración del acetato de etilo (variable dependiente).

C_B : concentración del hidróxido de sodio (variable dependiente).

C_C : concentración del acetato de sodio (variable dependiente).

C_D : concentración del etanol (variable dependiente).

T : temperatura (variable dependiente)

M : muestra.

R : relación entre las variables.

3.1.1. Modelado de la reacción de saponificación del acetato de etilo en un reactor semicontinuo

En la figura 9, se muestra el reactor semicontinuo donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo. A dicho reactor se alimenta una solución de hidróxido de sodio ($NaOH$), con una concentración de $1\ kmol/m^3$, una temperatura de $300\ K$ y un flujo volumétrico de $0.004\ m^3/s$. Inicialmente el reactor contiene un volumen de solución igual a $0.2\ m^3$, formado por agua y acetato de etilo, los cuales están a $300\ K$. Las concentraciones iniciales de acetato de etilo y agua son $5\ kmol/m^3$ y $30.7\ kmol/m^3$, respectivamente. La reacción se considera isotérmica, por lo que es necesario mantener la temperatura en el reactor semicontinuo por debajo de los $315\ K$. El reactor tiene instalado un enfriador, el cual tiene un coeficiente total de transferencia de calor igual a $3000\ J/(s.K)$ por cada m^2 de área de transferencia. El refrigerante utilizado en el enfriador es agua, la cual entra a razón de $0.43\ kg/s$ y a una temperatura igual a $285\ K$.

$$\underset{A}{C_2H_5(CH_3COO)_{(aq)}} + \underset{B}{NaOH_{(aq)}} \rightleftharpoons \underset{C}{Na(CH_3COO)_{(aq)}} + \underset{D}{C_2H_5OH_{(aq)}}. \qquad \textbf{(15)}$$

La reacción de saponificación es como se muestra en la ecuación **(15)**, donde para este caso, A representa al acetato de etilo $\left(C_2H_5(CH_3COO)_{(aq)}\right)$, B al hidróxido de sodio $\left(NaOH_{(aq)}\right)$, C al acetato de sodio $\left(Na(CH_3COO)_{(aq)}\right)$ y D al etanol $\left(C_2H_5OH_{(aq)}\right)$. Entonces, la concentración para cada uno de los componentes de la reacción de saponificación, se denotan como C_A, C_B, C_C y C_D, respectivamente.

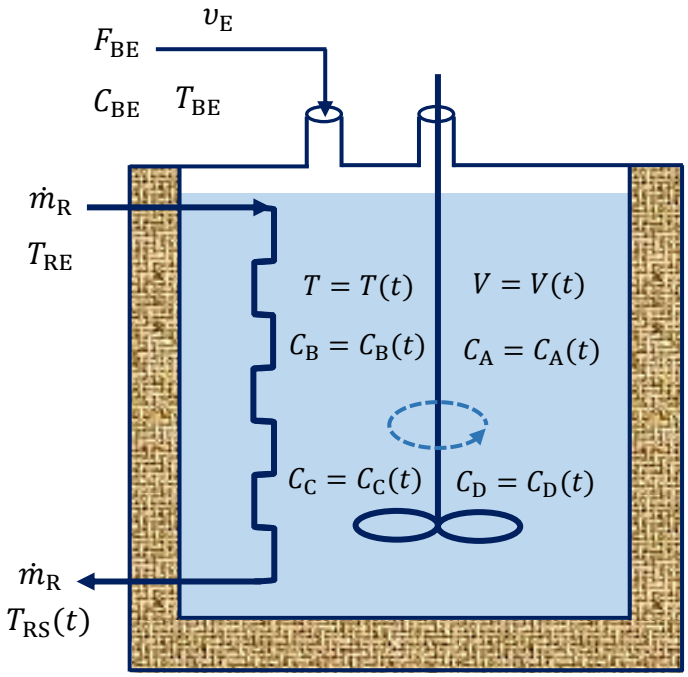


Figura 9. Reactor semicontinuo donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo.

Fuente: Elaboración propia.

Datos requeridos y nomenclatura utilizada

$Cp = Cp_B = Cp_C = Cp_D = Cp_W$ = capacidades caloríficas molares a presión constante del hidróxido de sodio (B), del acetato de sodio (C), del etanol (D) y el agua (W), 75240 J/(kmol. K).

Cp_A = capacidad calorífica molar a presión constante del acetato de etilo (A), 170700 J/(kmol. K).

C_{A0} = concentración inicial del acetato de etilo en el reactor, 5 kmol/m^3.

C_{WE} = concentración del agua en la corriente de entrada al reactor, 55 kmol/m^3.

C_{W0} = concentración inicial del agua en el reactor, 30.7 kmol/m^3.

C_{BE} = concentración del hidróxido de sodio en la corriente de entrada al reactor, 1 kmol/m^3.

C_{B0} = concentración inicial del hidróxido de sodio en el reactor, 0 kmol/m^3.

C_{C0} = concentración inicial del acetato de sodio en el reactor, 0 kmol/m^3.

C_{D0} = concentración inicial del etanol en el reactor, 0 $\mathrm{kmol/m^3}$.

T = temperatura a la que se encuentran en el reactor todos los componentes que intervienen en la reacción de saponificación, K.

T_0 = temperatura inicial a la que se encuentran en el reactor todos los componentes que intervienen en la reacción de saponificación, 300 K.

T_{BE} = temperatura a la que entra la solución de hidróxido de sodio al reactor, 300 K.

T_{RE} = temperatura a la que entra el refrigerante al enfriador, 285 K.

T_{RS} = temperatura a la que sale el refrigerante del enfriador, K.

$\dot{m}_R$ = flujo másico del refrigerante, 0.43 kg/s.

Ce_R = calor específico del refrigerante (agua), 4187 $\mathrm{J/(kg.K)}$.

V = volumen de solución en el reactor, $\mathrm{m^3}$.

V_0 = volumen inicial de solución en el reactor, 0.2 $\mathrm{m^3}$.

v_E = flujo volumétrico de la solución de hidróxido de sodio que entra al reactor, 0.004 $\mathrm{m^3/s}$.

r_A = velocidad neta de formación del acetato de etilo, $\mathrm{kmol/(s.m^3)}$.

F_{BE} = flujo molar del hidróxido de sodio que entra al reactor, kmol/s.

UA = coeficiente total de transferencia de calor, por cada $\mathrm{m^2}$ de área de transferencia, 3000 $\mathrm{J/(s.K)}$.

t = tiempo, s.

La entalpía molar de reacción del acetato de etilo (Fogler, 2008, p. 616), es: $\Delta H_{Rx} = -7.9076 \times 10^7$ J/kmol.

La constante de velocidad de reacción (k) del acetato de etilo en $\mathrm{m^3/(s.kmol)}$, para cualquier temperatura T en K (Fogler, 2008, p. 616), es como se muestra en la ecuación **(21)**.

$$k = 0.39175e^{5472.7\left(\frac{1}{273.15}-\frac{1}{T}\right)}. \quad \textbf{(21)}$$

La constante de equilibrio de concentración (K_C) sin unidades, para la reacción de saponificación del acetato de etilo a cualquier temperatura en K (Fogler, 2008, p. 616), es como se especifica en la ecuación **(22)**.

$$K_C = 10^{3885.44/T}. \quad \textbf{(22)}$$

Aplicando la ecuación general de balance molar para el agua y a cada uno de los componentes que intervienen en la reacción de saponificación, se tiene:

Balance molar para el agua (W).

Entrada $= C_{\mathrm{WE}}(\mathrm{kmol/m^3})\upsilon_{\mathrm{E}}(\mathrm{m^3/s}).$

Salida $= 0.$

Generación $= 0.$

Acumulación $= \frac{dN_{\mathrm{w}}}{dt}(\mathrm{kmol/s}).$

$$\frac{dN_{\mathrm{w}}}{dt} = C_{\mathrm{WE}}\upsilon_{\mathrm{E}}. \quad \textbf{(23)}$$

Como la cantidad de moles de una sustancia, se puede expresar como el producto de la concentración de la misma sustancia con el volumen de solución, es decir: $N_{\mathrm{w}} = C_{\mathrm{w}}V$, entonces en la ecuación **(23)** se tiene:

$$\frac{dN_{\mathrm{w}}}{dt} = \frac{d(C_{\mathrm{w}}V)}{dt} = V\frac{dC_{\mathrm{w}}}{dt} + C_{\mathrm{w}}\frac{dV}{dt}. \quad \textbf{(24)}$$

Téngase en cuenta que el flujo volumétrico es la derivada del volumen con respecto al tiempo, esto es:

$$\upsilon_{\mathrm{E}} = \frac{dV}{dt}. \quad \textbf{(25)}$$

Al integrar la ecuación **(25)**, se obtiene la ecuación del volumen de solución en función del tiempo, esta es:

$$V = V_0 + \upsilon_{\mathrm{E}}t. \quad \textbf{(26)}$$

Se debe notar en la ecuación **(24)**, que se tiene la derivada del producto de dos variables (C_{w} y V). Entonces, al tener en cuenta la ecuación **(25)** e igualar las ecuaciones **(23)** y **(24)**, se obtiene:

$$V\frac{dC_{\mathrm{w}}}{dt}+C_{\mathrm{w}}\frac{dV}{dt}=C_{\mathrm{WE}}\upsilon_{\mathrm{E}}. \tag{27}$$

Entonces, al despejar la derivada de C_{w} con respecto al tiempo en la ecuación **(27)**, se tiene:

$$\frac{dC_{\mathrm{w}}}{dt}=\frac{\upsilon_{\mathrm{E}}}{V}(C_{\mathrm{WE}}-C_{\mathrm{w}}). \tag{28}$$

La ecuación **(28)**, representa a la ecuación diferencial entre la concentración del agua y el tiempo.

Balance molar para el acetato de etilo (A).

Entrada $=$ $0.$

Salida $=$ $0.$

Generación $=$ $r_{\mathrm{A}}(\mathrm{kmol}/(\mathrm{s.m^3}))V(\mathrm{m^3}).$

Acumulación $=$ $\frac{dN_{\mathrm{A}}}{dt}(\mathrm{kmol/s}).$

$$\frac{dN_{\mathrm{A}}}{dt}=r_{\mathrm{A}}V. \tag{29}$$

$$V\frac{dC_{\mathrm{A}}}{dt}+C_{\mathrm{A}}\frac{dV}{dt}=r_{\mathrm{A}}V \quad\Longrightarrow\quad V\frac{dC_{\mathrm{A}}}{dt}+C_{\mathrm{A}}\upsilon_{\mathrm{E}}=r_{\mathrm{A}}V.$$

$$\frac{dC_{\mathrm{A}}}{dt}=r_{\mathrm{A}}-\frac{C_{\mathrm{A}}\upsilon_{\mathrm{E}}}{V}. \tag{30}$$

La velocidad de formación neta del acetato de etilo, se puede expresar mediante la siguiente ecuación:

$$r_{\mathrm{A}}=-k\left(C_{\mathrm{A}}C_{\mathrm{B}}-\frac{C_{\mathrm{C}}C_{\mathrm{D}}}{K_C}\right). \tag{31}$$

La ecuación **(30)**, representa a la ecuación diferencial entre la concentración del acetato de etilo y el tiempo. Al reemplazar r_{A} en la ecuación **(30)**, C_{A} también queda en función de C_{B}, C_{C} y C_{D}.

Por las leyes de velocidad y estequiometría, se tiene que:

$$r_{\mathrm{A}} = r_{\mathrm{B}}. \tag{32}$$

$$r_{\mathrm{C}} = -r_{\mathrm{A}}. \tag{33}$$

$$r_{\mathrm{C}} = r_{\mathrm{D}}. \tag{34}$$

Balance molar para el hidróxido de sodio (B).

Entrada = $F_{\mathrm{BE}}(\mathrm{kmol/s})$.

Salida = 0.

Generación = $r_{\mathrm{B}}(\mathrm{kmol/(s.m^3)})V(\mathrm{m^3})$.

Acumulación = $\frac{dN_{\mathrm{B}}}{dt}(\mathrm{kmol/s})$.

$$\frac{dN_{\mathrm{B}}}{dt} = F_{\mathrm{BE}} + r_{\mathrm{B}}V. \tag{35}$$

$$V\frac{dC_{\mathrm{B}}}{dt} + C_{\mathrm{B}}\frac{dV}{dt} = F_{\mathrm{BE}} + r_{\mathrm{B}}V \quad \Longrightarrow \quad V\frac{dC_{\mathrm{B}}}{dt} + C_{\mathrm{B}}\upsilon_{\mathrm{E}} = F_{\mathrm{BE}} + r_{\mathrm{B}}V.$$

$$\frac{dC_{\mathrm{B}}}{dt} = r_{\mathrm{B}} + \frac{F_{\mathrm{BE}} - C_{\mathrm{B}}\upsilon_{\mathrm{E}}}{V}. \tag{36}$$

El flujo molar del hidróxido de sodio que entra al reactor, se puede expresar como el producto del flujo volumétrico de la solución de hidróxido de sodio que entra al reactor, con la concentración del hidróxido de sodio en la misma corriente, es decir:

$$F_{\mathrm{BE}} = C_{\mathrm{BE}}\upsilon_{\mathrm{E}}. \tag{37}$$

Reemplazando la ecuación **(37)** en la ecuación **(36)**, se obtiene:

$$\frac{dC_{\mathrm{B}}}{dt} = r_{\mathrm{B}} + \frac{\upsilon_{\mathrm{E}}}{V}(C_{\mathrm{BE}} - C_{\mathrm{B}}). \tag{38}$$

La ecuación **(36)**, representa a la ecuación diferencial entre la concentración del hidróxido de sodio y el tiempo. Al reemplazar r_{B} en la ecuación **(38)**, C_{B} también queda en función de C_{A}, C_{C} y C_{D}.

Balance molar para el acetato de sodio (C).

Entrada $=$ $0.$

Salida $=$ $0.$

Generación $=$ $r_{\mathrm{C}}(\mathrm{kmol}/(\mathrm{s.m^3}))V(\mathrm{m^3}).$

Acumulación $=$ $\frac{dN_{\mathrm{C}}}{dt}(\mathrm{kmol/s}).$

$$\frac{dN_{\mathrm{C}}}{dt} = r_{\mathrm{C}}V. \quad \textbf{(39)}$$

De la misma forma que para el acetato de etilo (A), se obtiene la ecuación diferencial que relaciona a la concentración del acetato de sodio y el tiempo, esta es:

$$\frac{dC_{\mathrm{C}}}{dt} = r_{\mathrm{C}} - \frac{C_{\mathrm{C}}\upsilon_{\mathrm{E}}}{V}. \quad \textbf{(40)}$$

Teniendo en cuenta la estequiometria de la reacción de saponificación, se obtiene:

$$C_{\mathrm{C}} = C_{\mathrm{D}}. \quad \textbf{(41)}$$

La velocidad de transferencia de calor del enfriador al reactor, se denota como $\dot{Q}$ y se define por la siguiente ecuación:

$$\dot{Q} = \frac{UA(T_{\mathrm{RE}} - T_{\mathrm{RS}})}{\ln[(T - T_{\mathrm{RE}})/(T - T_{\mathrm{RS}})]}. \quad \textbf{(42)}$$

La unidad de medida de $\dot{Q}$ es J/s, estando UA en $\mathrm{J/(s.K)}$ y las temperaturas T_{RE}, T_{RS} y T en K.

El balance de energía para el fluido refrigerante que entra y sale del enfriador es:

$$\begin{bmatrix}\text{Velocidad de}\\ \text{entrada de energía}\\ \text{por flujo}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Velocidad de}\\ \text{salida de energía}\\ \text{por flujo}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\text{Velocidad de}\\ \text{transferencia de calor}\\ \text{del enfriador}\\ \text{al reactor}\end{bmatrix} = 0. \quad \textbf{(43)}$$

$$\text{Velocidad de entrada de energía por flujo} = \dot{m}_{\mathrm{R}}(\mathrm{kg/s})Ce_{\mathrm{R}}\big(\mathrm{J/(kg.K)}\big)(T_{\mathrm{RE}} - T_{\mathrm{R}})(\mathrm{K}).$$

$$\text{Velocidad de salida de energía por flujo} = \dot{m}_{\mathrm{R}}(\mathrm{kg/s})Ce_{\mathrm{R}}\big(\mathrm{J/(kg.K)}\big)(T_{\mathrm{RS}} - T_{\mathrm{R}})(\mathrm{K}).$$

$$\text{Velocidad de transferencia de calor del enfriador al reactor} = \frac{UA\big(\mathrm{J/(s.K)}\big)(T_{\mathrm{RE}} - T_{\mathrm{RS}})(\mathrm{K})}{\ln[(T - T_{\mathrm{RE}})/(T - T_{\mathrm{RS}})]}.$$

$$\dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}(T_{\mathrm{RE}} - T_{\mathrm{R}}) - \dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}(T_{\mathrm{RS}} - T_{\mathrm{R}}) - \frac{UA(T_{\mathrm{RE}} - T_{\mathrm{RS}})}{\ln[(T - T_{\mathrm{RE}})/(T - T_{\mathrm{RS}})]} = 0. \quad \textbf{(44)}$$

Donde T_{R} es la temperatura de referencia en K.

Simplificando la ecuación **(44)** y relacionándola con la ecuación **(42)**, se obtiene:

$$\dot{Q} = \dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}(T_{\mathrm{RE}} - T_{\mathrm{RS}}) = \frac{UA(T_{\mathrm{RE}} - T_{\mathrm{RS}})}{\ln[(T - T_{\mathrm{RE}})/(T - T_{\mathrm{RS}})]}. \quad \textbf{(45)}$$

Despejando T_{RS} de la ecuación **(45)**, se obtiene:

$$\dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}} = \frac{UA}{\ln[(T - T_{\mathrm{RE}})/(T - T_{\mathrm{RS}})]} \quad \Longrightarrow \quad \ln\left(\frac{T - T_{\mathrm{RS}}}{T - T_{\mathrm{RE}}}\right) = -\frac{UA}{\dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}}.$$

$$T_{\mathrm{RS}} = T - (T - T_{\mathrm{RE}})e^{\left(\frac{-UA}{\dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}}\right)}. \quad \textbf{(46)}$$

Reemplazando la ecuación **(46)** en la ecuación **(45)**, se obtiene:

$$\dot{Q} = \dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}\left[T_{\mathrm{RE}} - T + (T - T_{\mathrm{RE}})e^{\left(\frac{-UA}{\dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}}\right)}\right]$$

$$\dot{Q} = \dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}(T_{\mathrm{RE}} - T)\left[1 - e^{\left(\frac{-UA}{\dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}}\right)}\right]. \quad \textbf{(47)}$$

El balance de energía para la solución que está dentro del reactor es:

$$\begin{bmatrix}\text{Velocidad de entrada de energía por flujo}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\text{Velocidad de transferencia de calor del enfriador al reactor}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\text{Velocidad de generación de energía}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{Velocidad de acumulación de energía}\end{bmatrix}. \quad \textbf{(48)}$$

$$\text{Velocidad de entrada de energía por flujo} = -(F_{\mathrm{BE}} + F_{\mathrm{WE}})Cp(T - T_{\mathrm{BE}}).$$

$$\text{Velocidad de transferencia de calor del enfriador al reactor} = \dot{Q}.$$

$$(F_{\mathrm{BE}} + F_{\mathrm{WE}})Cp(T - T_{\mathrm{BE}}) = F_{\mathrm{BE}}\left(1 + \frac{F_{\mathrm{WE}}}{F_{\mathrm{BE}}}\right)Cp(T - T_{\mathrm{BE}}).$$

Los flujos molares del hidróxido de sodio (F_{BE}) y el agua (F_{WE}) en la corriente de entrada al reactor, se pueden relacionar con sus respectivas concentraciones, es decir: $F_{\mathrm{WE}}/F_{\mathrm{BE}} = C_{\mathrm{WE}}/C_{\mathrm{BE}}$. Entonces, la velocidad de entrada de energía por flujo para la solución que está dentro del reactor, queda:

$$\text{Velocidad de entrada de energía por flujo} = -F_{\mathrm{BE}}\left(1 + \frac{C_{\mathrm{WE}}}{C_{\mathrm{BE}}}\right)Cp(T - T_{\mathrm{BE}}).$$

$$\text{Velocidad de generación de energía} = r_{\mathrm{A}}V\Delta H_{\mathrm{Rx}}.$$

$$\text{Velocidad de acumulación de energía} = V[Cp(C_{\mathrm{B}} + C_{\mathrm{C}} + C_{\mathrm{D}} + C_{\mathrm{W}}) + Cp_{\mathrm{A}}\,C_{\mathrm{A}}]\frac{dT}{dt}.$$

$$V[Cp(C_{\mathrm{B}} + C_{\mathrm{C}} + C_{\mathrm{D}} + C_{\mathrm{W}}) + Cp_{\mathrm{A}}\,C_{\mathrm{A}}]\frac{dT}{dt} = \dot{Q} - F_{\mathrm{BE}}\left(1 + \frac{C_{\mathrm{WE}}}{C_{\mathrm{BE}}}\right)Cp(T - T_{\mathrm{BE}}) + r_{\mathrm{A}}V\Delta H_{\mathrm{Rx}}.$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - F_{\mathrm{BE}}\left(1 + \frac{C_{\mathrm{WE}}}{C_{\mathrm{BE}}}\right)Cp(T - T_{\mathrm{BE}}) + r_{\mathrm{A}}V\Delta H_{\mathrm{Rx}}}{V[Cp(C_{\mathrm{B}} + C_{\mathrm{C}} + C_{\mathrm{D}} + C_{\mathrm{W}}) + Cp_{\mathrm{A}}\,C_{\mathrm{A}}]}. \quad \textbf{(49)}$$

La ecuación **(49)**, representa a la ecuación diferencial entre la temperatura y el tiempo en el reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo.

El modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo, está formado por dos sistemas de ecuaciones, a las cuales se las denomina ecuaciones auxiliares y ecuaciones principales, respectivamente.

El sistema de ecuaciones auxiliares, para dicho modelo, lo conforman las ecuaciones **(21)**, **(22)**, **(26)**, **(31)**, **(32)**, **(33)**, **(34)**, **(37)**, **(46)** y **(47)**, las cuales se muestran a continuación:

$$k = 0.39175e^{5472.7\left(\frac{1}{273.15}-\frac{1}{T}\right)}. \quad \textbf{(21)}$$

$$K_C = 10^{3885.44/T}. \quad \textbf{(22)}$$

$$V = V_0 + v_{\mathrm{E}}t. \quad \textbf{(26)}$$

$$r_{\mathrm{A}} = -k\left(C_{\mathrm{A}}C_{\mathrm{B}} - \frac{C_{\mathrm{C}}C_{\mathrm{D}}}{K_C}\right). \quad \textbf{(31)}$$

$$r_{\mathrm{A}} = r_{\mathrm{B}}. \quad \textbf{(32)}$$

$$r_{\mathrm{C}} = -r_{\mathrm{A}}. \quad \textbf{(33)}$$

$$r_{\mathrm{C}} = r_{\mathrm{D}}. \quad \textbf{(34)}$$

$$F_{\mathrm{BE}} = C_{\mathrm{BE}}v_{\mathrm{E}}. \quad \textbf{(37)}$$

$$T_{\mathrm{RS}} = T - (T - T_{\mathrm{RE}})e^{\left(\frac{-UA}{\dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}}\right)}. \quad \textbf{(46)}$$

$$\dot{Q} = \dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}(T_{\mathrm{RE}} - T)\left[1 - e^{\left(\frac{-UA}{\dot{m}_{\mathrm{R}}Ce_{\mathrm{R}}}\right)}\right]. \quad \textbf{(47)}$$

El sistema de ecuaciones principales, para el modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo, lo conforman las ecuaciones **(30)**, **(36)**, **(40)**, **(41)**, **(28)** y **(49)**, las cuales se indican a continuación:

$$\frac{dC_{\mathrm{A}}}{dt} = r_{\mathrm{A}} - \frac{C_{\mathrm{A}} v_{\mathrm{E}}}{V}. \tag{30}$$

$$\frac{dC_{\mathrm{B}}}{dt} = r_{\mathrm{B}} + \frac{F_{\mathrm{BE}} - C_{\mathrm{B}} v_{\mathrm{E}}}{V}. \tag{36}$$

$$\frac{dC_{\mathrm{C}}}{dt} = r_{\mathrm{C}} - \frac{C_{\mathrm{C}} v_{\mathrm{E}}}{V}. \tag{40}$$

$$C_{\mathrm{C}} = C_{\mathrm{D}}. \tag{41}$$

$$\frac{dC_{\mathrm{w}}}{dt} = \frac{v_{\mathrm{E}}}{V}(C_{\mathrm{WE}} - C_{\mathrm{w}}). \tag{28}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - F_{\mathrm{BE}}\left(1 + \frac{C_{\mathrm{WE}}}{C_{\mathrm{BE}}}\right) Cp(T - T_{\mathrm{BE}}) + r_{\mathrm{A}} V \Delta H_{\mathrm{Rx}}}{V[Cp(C_{\mathrm{B}} + C_{\mathrm{C}} + C_{\mathrm{D}} + C_{\mathrm{W}}) + Cp_{\mathrm{A}}\, C_{\mathrm{A}}]}. \tag{49}$$

Todas estas ecuaciones se programan en Wolfram Mathematica.

3.1.2. Desarrollo de la plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar los perfiles de concentración y temperatura en la saponificación del acetato de etilo

La plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar los perfiles de concentración y temperatura en la reacción de saponificación del acetato de etilo, se ha desarrollado en las siguientes etapas que se mencionan a continuación:

- Título de la plataforma, nombre de las autoras y la nomenclatura utilizada.
- Celda con la programación de los datos ingresados por el usuario y el flujo molar del hidróxido de sodio que entra al reactor (ecuación **(37)**).
- Programación de la constante de velocidad de reacción del acetato de etilo (ecuación **(21)**).

- Programación de la constante de equilibrio de concentración (ecuación **(22)**).
- Programación del volumen de solución en el reactor (ecuación **(26)**).
- Programación de la velocidad neta de formación del acetato de etilo (ecuación **(31)**).
- Programación de la velocidad neta de formación del hidróxido de sodio (ecuación **(32)**).
- Programación de la velocidad neta de formación del acetato de sodio (ecuación **(33)**).
- Programación de la velocidad neta de formación del etanol (ecuación **(34)**).
- Programación de la velocidad de transferencia de calor del enfriador al reactor (ecuación **(47)**).
- Programación de la temperatura a la que sale el refrigerante del enfriador (ecuación **(46)**).
- Programación del sistema de ecuaciones principales del modelo que representa a la saponificación del acetato de etilo, para determinar perfiles de concentración (ecuaciones **(30)**, **(36)**, **(40)**, **(41)**, **(28)** y **(49)**). En este caso las condiciones iniciales son: $C_{\mathrm{A}}(0) = C_{\mathrm{A0}}$, $C_{\mathrm{B}}(0) = C_{\mathrm{B0}}$, $C_{\mathrm{C}}(0) = C_{\mathrm{C0}}$, $C_{\mathrm{D}}(0) = C_{\mathrm{D0}}$, $C_{\mathrm{W}}(0) = C_{\mathrm{W0}}$ y $T(0) = T_0$.
- Programación del sistema de ecuaciones principales del modelo que representa a la saponificación del acetato de etilo, para determinar perfiles de temperatura (ecuaciones **(30)**, **(36)**, **(40)**, **(41)**, **(28)** y **(49)**).
- Determinación de los valores de la concentración para el acetato de etilo, mediante el comando Evaluate. En este caso b indica el valor del tiempo en s, a la que se desea determinar el valor de C_{A}.
- Determinación de los valores de la concentración para el hidróxido de sodio, mediante el comando Evaluate. En este caso b indica el valor del tiempo en s, a la que se desea determinar el valor de C_{B}.
- Determinación de los valores de la concentración para el acetato de sodio, mediante el comando Evaluate. En este caso b indica el valor del tiempo en s, a la que se desea determinar el valor de C_{C}.
- Determinación de los valores de la concentración para el etanol, mediante el comando Evaluate. En este caso b indica el valor del tiempo en s, a la que se desea determinar el valor de C_{D}.

- Determinación de los valores de la temperatura a la que se encuentran en el reactor todos los componentes que intervienen en la reacción de saponificación, mediante el comando Evaluate. En este caso b indica el valor del tiempo en s, a la que se desea determinar el valor de T.

- **Título de la plataforma, nombre de las autoras y la nomenclatura utilizada**

PLATAFORMA EN WOLFRAM MATHEMATICA PARA EVALUAR PERFILES DE CONCENTRACIÓN Y TEMPERATURA EN LA SAPONIFICACIÓN DEL ACETATO DE ETILO

AUTORAS: DEISY STEFFANY LOMAS VALLES Y JOSIANE MARÍA MIGUEL CUADROS

NOMENCLATURA UTILIZADA

C_A = concentración del acetato de etilo en el reactor, $kmol/m^3$.

C_B = concentración del hidróxido de sodio en el reactor, $kmol/m^3$.

C_C = concentración del acetato de sodio en el reactor, $kmol/m^3$.

C_D = concentración del etanol en el reactor, $kmol/m^3$.

C_W = concentración del agua en el reactor, $kmol/m^3$.

C_{BE} = concentración del hidróxido de sodio en la corriente de entrada al reactor, 1 $kmol/m^3$.

C_{B0} = concentración inicial del hidróxido de sodio en el reactor, 0 $kmol/m^3$.

C_{C0} = concentración inicial del acetato de sodio en el reactor, 0 $kmol/m^3$.

Cp = Cp_B = Cp_C = Cp_D = Cp_W = capacidades calorificas molares a presión constante del hidróxido de sodio (B), del acetato de sodio (C), del etanol (D) y el agua (W), 75240 J/(kmol.K).

Cp_A = capacidad calorifica molar a presión constante del acetato de etilo, 170700 J/(kmol.K).

C_{A0} = concentración inicial del acetato de etilo en el reactor, 5 $kmol/m^3$.

C_{WE} = concentración del agua en la corriente de entrada al reactor, 55 $kmol/m^3$.

C_{W0} = concentración inicial del agua en el reactor, 30.7 $kmol/m^3$.

C_{BE} = concentración del hidróxido de sodio en la corriente de entrada al reactor, 1 $kmol/m^3$.

C_{B0} = concentración inicial del hidróxido de sodio en el reactor, 0 $kmol/m^3$.

C_{C0} = concentración inicial del acetato de sodio en el reactor, 0 $kmol/m^3$.

C_{D0} = concentración inicial del etanol en el reactor, 0 $kmol/m^3$.

T = temperatura a la que se encuentran en el reactor todos los componentes que intervienen en la reacción de saponificación, K.

T_0 = temperatura inicial a la que se encuentran en el reactor todos los componentes que intervienen en la reacción de saponificación, K.

T_{BE} = temperatura a la que entra la solución de hidróxido de sodio al reactor, 300 K.

T_{RE} = temperatura a la que entra el refrigerante al enfriador, 285 K.

T_{RS} = temperatura a la que sale el refrigerante del enfriador, K

$\dot{m}_R$ = flujo másico del refrigerante, 0.43 kg/s.

Ce_R = calor específico del refrigerante (agua), 4187 J/(kg.K).

V = volumen de solución en el reactor, m^3.

V_0 = volumen inicial de solución en el reactor, 0.2 m^3.

v_E = flujo volumétrico de la solución de hidróxido de sodio que entra al reactor, 0.004 m^3/s.

r_A = velocidad neta de formación del acetato de etilo, $kmol/(s.m^3)$.

F_{BE} = flujo molar del hidróxido de sodio que entra al reactor, kmol/s.

UA = coeficiente total de transferencia de calor, por cada m^2 de área de transferencia, 3000 J/(s.K).

t = tiempo, s.

ΔH_{Rx} = entalpía molar de reacción del acetato de etilo, -7.9076×10^7 J/kmol.

k = constante de velocidad de reacción del acetato de etilo, $(m^3/s.kmol)$.

K_C = constante de equilibrio de concentración, sin unidades.

- **Celda con la programación de los datos ingresados por el usuario y el flujo molar del hidróxido de sodio que entra al reactor**

```
CB0 = 0 (*kmol/m^3*) ;
CC0 = 0 (*kmol/m^3*) ;
CD0 = 0 (*kmol/m^3*) ;
UA = 3000 (*J/(s.K)*) ;
Cp = 75240 (*J/(kmol.K)*) ;
T0 = 300 (*K*) ;
TBE = 300 (*K*) ;
TRE = 285 (*K*) ;
ΔHRx = -7.9076 x 10^7 (*J/kmol*) ;
CWE = 55 (*kmol/m^3*) ;
CW0 = 30.7 (*kmol/m^3*) ;
CA0 = 5 (*kmol/m^3*) ;
CpA = 170700 (*J/(kmol.K)*) ; V0 = 0.2 (*m^3*) ;
ṁR = 0.43 (*kg/s*) ; CeR = 4187 (*J/(kg.K)*) ;
ts = 360 (*tiempo de simulación en s*) ;
(*Programación del flujo molar del hidróxido de sodio que entra al reactor*)
FBE = CBE vE (*kmol/s*)
```

➢ **Programación de la constante de velocidad de reacción del acetato de etilo**

(*Programación de la constante de velocidad de reacción del acetato de etilo*)

$$k = 0.39175\, e^{5472.7\left(\frac{1}{273}-\frac{1}{T[t]}\right)} \quad (*m^3/s.kmol*)$$

➢ **Programación de la constante de equilibrio de concentración**

(*Programación de la constante de equilibrio de concentración*)

$$K_C = 10^{(3885.44/T[t])} \quad (*sin\ unidades*)$$

➢ **Programación del volumen de solución en el reactor**

(*Programación del volumen de solución en el reactor*)

$$V = V_0 + v_E\, t$$

➢ **Programación de la velocidad neta de formación del acetato de etilo**

(*Programación de la velocidad neta de formación del acetato de etilo*)

$$r_A = -k\left((C_A[t]\, C_B[t]) - \left(\frac{C_C[t]\, C_D[t]}{K_C}\right)\right) \quad (*kmol/\left(m^3.s\right)*)$$

➢ **Programación de la velocidad neta de formación del hidróxido de sodio**

(*Programación de la velocidad neta de formación del hidróxido de sodio*)

$$r_B = r_A \quad (*kmol/\left(m^3.s\right)*)$$

- **Programación de la velocidad neta de formación del acetato de sodio**

```
(*Programación de la velocidad neta de formación del acetato de sodio*)
r_C = -r_A (*kmol/(m^3 . s)*)
```

- **Programación de la velocidad neta de formación del etanol**

```
(*Programación de la velocidad neta de formación del etanol*) r_D = r_C
 (*kmol/(m^3 . s)*)
```

- **Programación de la velocidad de transferencia de calor del enfriador al reactor**

```
(*Programación de la velocidad de transferencia de calor del
 enfriador al reactor*)
Q = ṁ_R Ce_R (T_RE - T[t]) (1 - e^(-UA/(ṁ_R Ce_R))) (*J/s*)
```

- **Programación de la temperatura a la que sale el refrigerante del enfriador**

```
(*Programación de la temperatura a la que sale el refrigerante del enfriador*)
T_RS = T[t] - (T[t] - T_RE) e^(-UA/(ṁ_R Ce_R))
```

- **Programación del sistema de ecuaciones principales del modelo que representa a la saponificación del acetato de etilo, para determinar perfiles de concentración**

```
(*Programación del sistema de ecuaciones principales del modelo
 que representa a la saponificación del acetato de etilo,
para determinar perfiles de concentración*)

sol = NDSolve[{Cₐ'[t] == rₐ - (Cₐ[t] vₑ)/V, Cᵦ'[t] == rᵦ + (Fᵦₑ - Cᵦ[t] vₑ)/V,
    C_c'[t] == r_c - (C_c[t] v_E)/V, C_d[t] == C_c[t], C_w'[t] == v_E/V (C_we - C_w[t]),
  T'[t] == (Q - F_BE Cp (1 + C_we/C_BE) (T[t] - T_BE) + r_A V ΔH_Rx)/
    ((Cp (C_B[t] + C_c[t] + C_d[t] + C_w[t]) + Cp_A C_A[t]) V), C_A[0] == C_A0,
  C_B[0] == C_B0, C_c[0] == C_c0, C_d[0] == C_d0, C_w[0] == C_w0, T[0] == T_0},
{C_A, C_B, C_c, C_d, C_w, T}, {t, 0, t_s}];
Show[ListLinePlot[{Table[{t, Evaluate[C_A[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, 1}],
    Table[{t, Evaluate[C_B[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, 1}],
    Table[{t, Evaluate[C_c[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, 1}],
    Table[{t, Evaluate[C_d[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, 1}]},
  PlotRange → {{0, t_s}, {0, 5}}, GridLines → Automatic, Frame → True,
  FrameLabel → {"Tiempo (s)", "Concentración (kmol/m^3)"},
  PlotStyle → {{Thickness[0.004], Orange}, {Thickness[0.004], Gray},
    {Thickness[0.004], Red}, {Thickness[0.004], Blue}}],
 ListPlot[{Table[{t, Evaluate[C_A[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, t_s/10}],
   Table[{t, Evaluate[C_B[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, t_s/10}],
   Table[{t, Evaluate[C_c[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, t_s/10}],
   Table[{t, Evaluate[C_d[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, t_s/10}]},
  PlotLegends → {"C_A (acetato de etilo)", "C_B (hidróxido de sodio)",
    "C_c (acetato de sodio)", "C_d (etanol)"}, PlotMarkers → Automatic,
  PlotLegends → {"C_A (acetato de etilo)", "C_B (hidróxido de sodio)",
    "C_c (acetato de sodio)", "C_d (etanol)"}, PlotMarkers → Automatic,
```

```
PlotRange → {{0, ts}, {0, 5}},
rango de representación
PlotStyle → {{Thickness[0.003], Orange}, {Thickness[0.003], Gray},
              grosor              naranja   grosor              gris
  {Thickness[0.003], Red}, {Thickness[0.003], Blue}}]]
   grosor              rojo   grosor              azul
```

- **Programación del sistema de ecuaciones principales del modelo que representa a la saponificación del acetato de etilo, para determinar perfiles de temperatura**

```
(*Programación del sistema de ecuaciones principales del modelo
 que representa a la saponificación del acetato de etilo,
para determinar perfiles de temperatura*)
sol = NDSolve[{CA'[t] == rA - CA[t] vE / V, CB'[t] == rB + (FBE - CB[t] vE) / V,
      resolvedor diferencial numérico
   CC'[t] == rC - (CC[t] vE) / V, CD[t] == CC[t], CW'[t] == vE / V (CWE - CW[t]),
   T'[t] == (Q - FBE Cp (1 + CWE / CBE) (T[t] - TBE) + rA V ΔHRx) /
   ((Cp (CB[t] + CC[t] + CD[t] + CW[t]) + CpA CA[t]) V), CA[0] == CA0,
 CB[0] == CB0, CC[0] == CC0, CD[0] == CD0, CW[0] == CW0, T[0] == T0},
{CA, CB, CC, CD, CW, T}, {t, 0, ts}];
Show[ListLinePlot[{Table[{t, Evaluate[T[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, ts, 1}],
mues··  gráfico de línea de ···  tabla      evalúa
   Table[{t, Evaluate[TRS /. sol][[1]]}, {t, 0, ts, 1}]},
   tabla      evalúa
  GridLines → Automatic, PlotRange → {{0, ts}, {280, 320}},
  parrilla de líneas  automático   rango de representación
  Frame → True, FrameLabel → {"Tiempo (s)", "Temperatura (K)"},
  marco   verda···  etiqueta de marco
  PlotStyle → {{Thickness[0.005], Orange}, {Thickness[0.005], Gray}}],
  estilo de represent···  grosor              naranja   grosor              gris
 ListPlot[{Table[{t, Evaluate[T[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, ts, ts / 10}],
           tabla      evalúa
   Table[{t, Evaluate[TRS /. sol][[1]]}, {t, 0, ts, ts / 10}]},
              evalúa
 PlotLegends → {"T", "TRS"}, PlotMarkers → Automatic,
                              marcadores de rep··  automático
```

```
PlotRange → {{0, t_s}, {280, 320}},
rango de representación
PlotStyle → {{Thickness[0.003], Orange}, {Thickness[0.003], Gray}}]]
            grosor              naranja   grosor              gris
```

- **Determinación de los valores de la concentración para el acetato de etilo, mediante el comando Evaluate**

```
(*Determinación de los valores de la concentración para el
 acetato de etilo, mediante el comando Evaluate*)
b = 360(*Es el valor del tiempo en s,
a la que se desea determinar el valor de C_A*);
Evaluate[C_A[b] /. sol][[1]]
evalúa
(*kmol/m^3*)
```

- **Determinación de los valores de la concentración para el hidróxido de sodio, mediante el comando Evaluate**

```
(*Determinación de los valores de la concentración para el
 hidróxido de sodio, mediante el comando Evaluate*)
b = 360(*Es el valor del tiempo en s,
a la que se desea determinar el valor de C_B*);
Evaluate[C_B[b] /. sol][[1]]
evalúa
(*kmol/m^3*)
```

- **Determinación de los valores de la concentración para el acetato de sodio, mediante el comando Evaluate**.

```
(*Determinación de los valores de la concentración para el
 acetato de sodio, mediante el comando Evaluate*)
b = 360(*Es el valor del tiempo en s,
 a la que se desea determinar el valor de C_C*);
Evaluate[C_C[b] /. sol][[1]]
evalúa
(*kmol/m^3*)
```

- **Determinación de los valores de la concentración para el etanol, mediante el comando Evaluate**

```
(*Determinación de los valores de la concentración para el etanol,
mediante el comando Evaluate*)
b = 360(*Es el valor del tiempo en s,
 a la que se desea determinar el valor de C_D*);
Evaluate[C_D[b] /. sol][[1]]
evalúa
(*kmol/m^3*)
```

- **Determinación de los valores de la temperatura a la que se encuentran en el reactor todos los componentes que intervienen en la reacción de saponificación, mediante el comando Evaluate**

```
(*Determinación de los valores de la temperatura a la que se
 encuentran en el reactor todos los componentes que intervienen en
 la reacción de saponificación*)
b = 360 (*Es el valor del tiempo en s,
a la que se desea determinar el valor de T*);
Evaluate[T[b] /. sol][[1]]
evalúa
(*K*)
```

3.2. Diseño muestral

La población para la presente investigación, estuvo formada por los cuatro (4) perfiles de concentración de los componentes de la saponificación, más el perfil de temperatura. De esta forma, la población tuvo un tamaño igual a cinco (5). Como la población tuvo un tamaño menor que ocho (8), entonces, la muestra estuvo representada por el 100 % de la población. Cada perfil se evaluó para un tiempo de 360 s.

3.3. Procedimientos de recolección de datos

Los procedimientos de recolección de datos, estuvieron basados en la revisión de las fuentes de información referidas a la reacción de saponificación del acetato de etilo.

Este procedimiento se realizó con el fin de recolectar valores de parámetros que se requieren para la simulación del modelo que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo. La nomenclatura y los valores correspondientes de estos parámetros, se indican en la sección 3.1.1 y en la tabla 3, respectivamente.

Tabla 3. Parámetros requeridos para la simulación del modelo que representa a la saponificación del acetato de etilo.

Parámetro	Valor	Unidad
υ_{E}	0.004	m^3/s
Cp	75240	$\mathrm{J/(kmol.K)}$
Cp_{A}	170700	$\mathrm{J/(kmol.K)}$
C_{A0}	5	$\mathrm{kmol/m^3}$
C_{B0}	0	$\mathrm{kmol/m^3}$
C_{BE}	1	$\mathrm{kmol/m^3}$
C_{C0}	0	$\mathrm{kmol/m^3}$
C_{D0}	0	$\mathrm{kmol/m^3}$
C_{W0}	30.7	$\mathrm{kmol/m^3}$
C_{WE}	55	$\mathrm{kmol/m^3}$
T_0	300	K
T_{BE}	300	K
T_{RE}	285	K
$\dot{m}_{\mathrm{R}}$	0.43	kg/s
Ce_{R}	4187	$\mathrm{J/(kg.K)}$
V_0	0.2	$\mathrm{m^3}$
UA	3000	$\mathrm{J/(s.K)}$
ΔH_{Rx}	-7.9076×10^7	J/kmol
k	$0.39175e^{5472.7\left(\frac{1}{273.15}-\frac{1}{T}\right)}$	$\mathrm{m^3/(s.kmol)}$
K_C	$10^{3885.44/T}$	Sin dimensiones

Fuente: Fogler, 2008, p. 616.

Otro procedimiento de recolección de datos, cuando dicha plataforma ya se haya

desarrollado, es la determinación de los valores de la concentración y la temperatura en el reactor semicontinuo para cada uno de los componentes que intervienen en la reacción de saponificación, mediante el comando Evaluate, tal como se indica en la sección 3.1.2. Esto permitió elaborar la tabla 4.

3.4. Procesamiento y análisis de datos

Este procedimiento estuvo basado en la representación gráfica de las concentraciones y la temperatura versus el tiempo, para cada uno de los componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) que intervienen en la reacción de saponificación. Para eso se desarrolló la mencionada plataforma en Wolfram Mathematica 10.4, en donde se programó los dos sistemas de ecuaciones (auxiliares y principales) que forman el modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo. Para el sistema de ecuaciones auxiliares se programó en Wolfram Mathematica 10.4, las ecuaciones **(21)**, **(22)**, **(26)**, **(31)**, **(32)**, **(33)**, **(34)**, **(37)**, **(46)** y **(47)**. Para el sistema de ecuaciones principales se programó en Wolfram Mathematica 10.4, las ecuaciones **(30)**, **(36)**, **(40)**, **(41)**, **(28)** y **(49)**. El detalle de la programación de los dos sistemas de ecuaciones que forman el modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo en Wolfram Mathematica 10.4, se puede observar en la sección 3.1.2.

3.5. Aspectos éticos

Como tesistas y egresadas de la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana, declaramos que en nuestro trabajo de tesis no existe plagio de ningún tipo de otro trabajo de tesis, informe, proyecto de investigación u artículo científico. Asimismo, nos comprometemos a respetar la veracidad de los resultados que se obtuvieron al evaluar los cuatro (4) perfiles de concentración de los componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) que intervienen en la reacción de saponificación del acetato de etilo, más el perfil de temperatura en el reactor semicontinuo donde se lleva a cabo dicha reacción.

Out[19]=

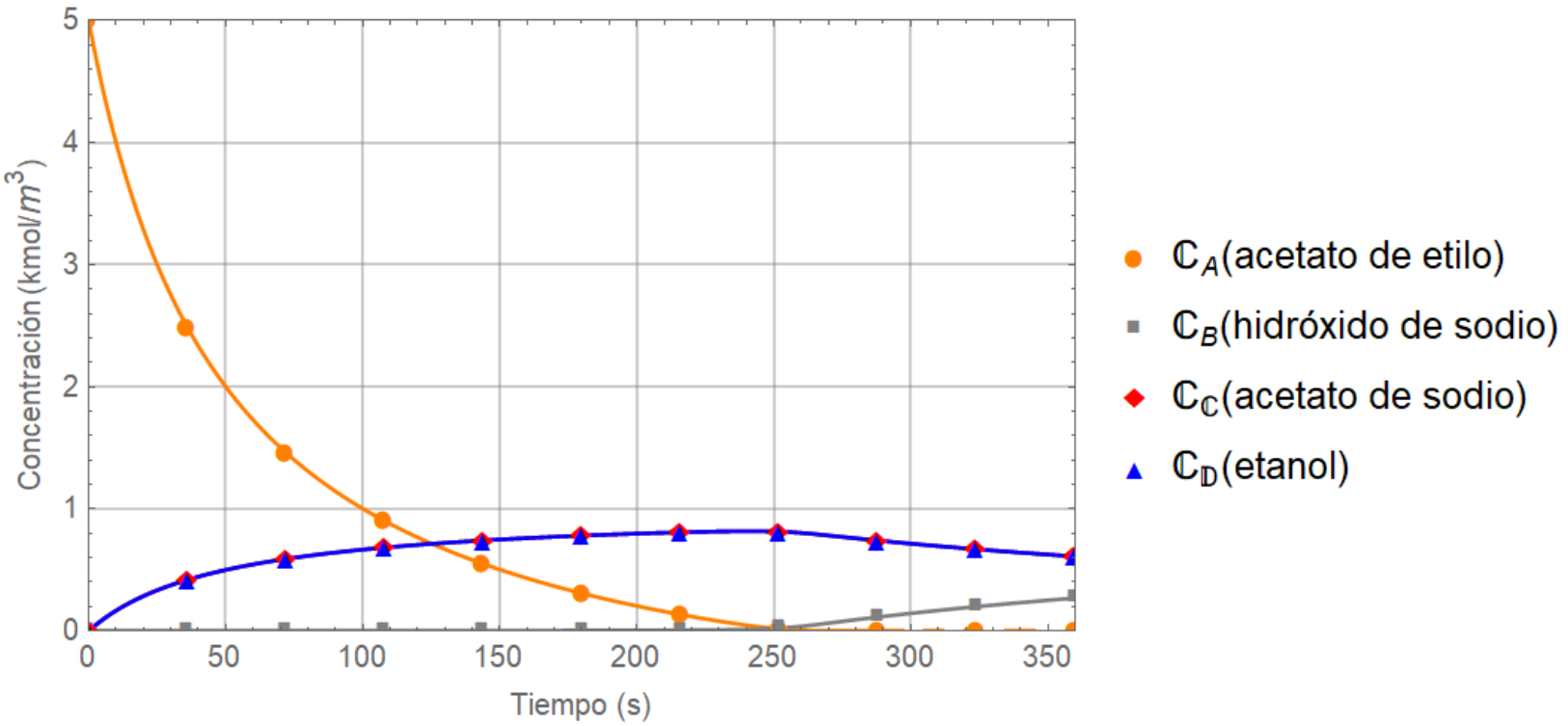


Figura 10. Perfiles de concentración para los componentes que intervienen en la reacción de saponificación.

Fuente: Elaboración propia.

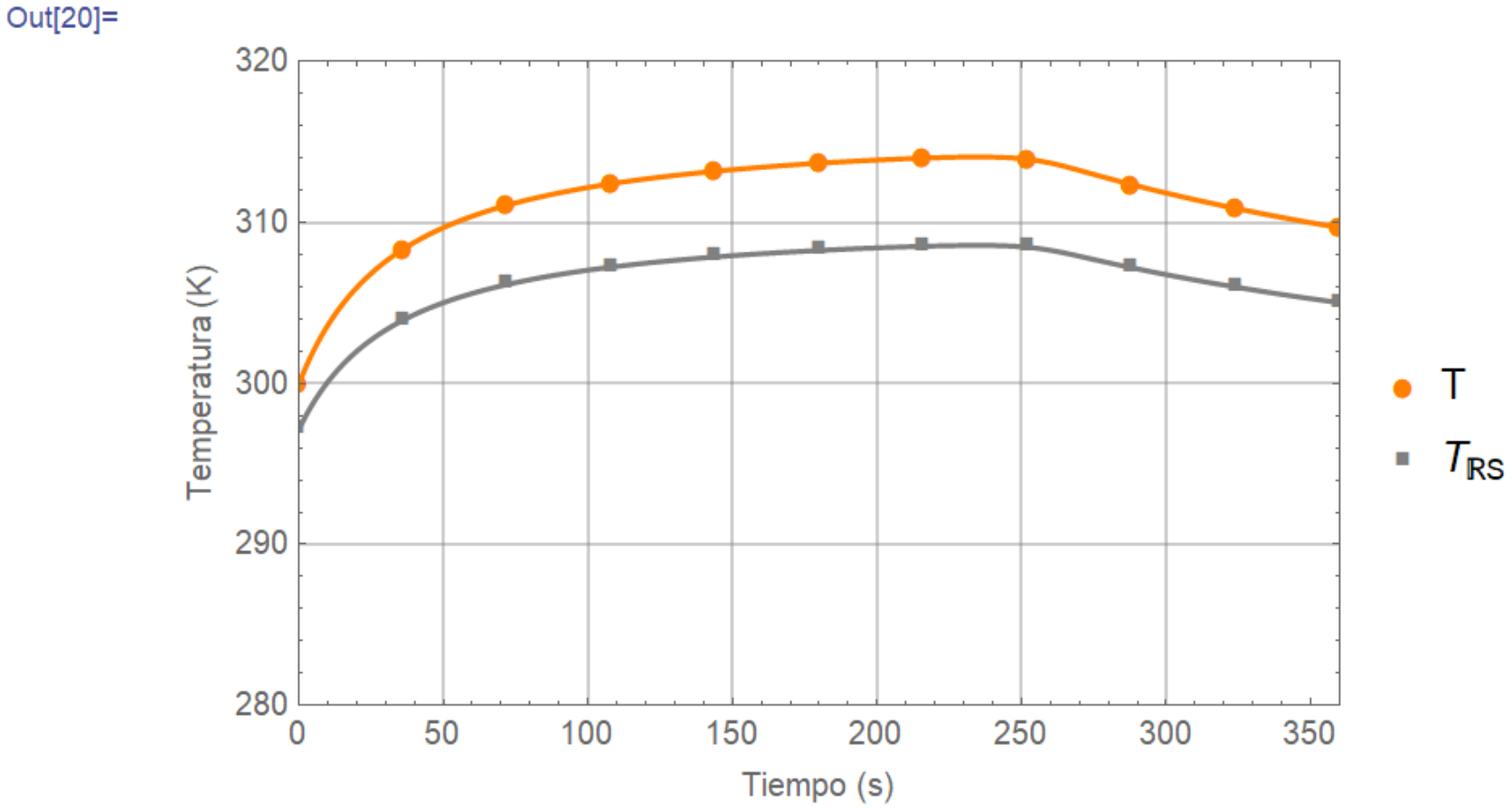


Figura 11. Perfiles de temperatura en el enfriador y reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato etilo.

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 4. Valores de la concentración y la temperatura en el reactor, para cada uno de los componentes que intervienen en la reacción de saponificación.

t s	C_A kmol/m^3	C_B kmol/m^3	C_C kmol/m^3	C_D kmol/m^3	T K
0	5	0	0	0	300
10	4.00141	0.00140813	0.165259	0.165259	303.614
20	3.28699	0.00127917	0.284435	0.284435	305.96
30	2.75122	0.00121621	0.373784	0.373784	307.588
40	2.33452	0.00118924	0.443255	0.443255	308.78
50	2.00119	0.0011851	0.498815	0.498815	309.689
60	1.72847	0.00119741	0.544257	0.544257	310.404
70	1.50122	0.00122294	0.58211	0.58211	310.98
80	1.30895	0.00126023	0.614124	0.614124	311.453
90	1.14417	0.00130892	0.641548	0.641548	311.848
100	1.00137	0.00136942	0.665297	0.665297	312.183
110	0.876443	0.00144286	0.686057	0.686057	312.471
120	0.766237	0.00153117	0.704351	0.704351	312.719
130	0.668304	0.0016371	0.720585	0.720585	312.936
140	0.580712	0.00176472	0.735077	0.735077	313.127
150	0.50192	0.00191976	0.74808	0.74808	313.295
160	0.430682	0.00211047	0.759794	0.759794	313.445
170	0.365986	0.00234915	0.770378	0.770378	313.578
180	0.307003	0.00265466	0.779954	0.779954	313.697
190	0.253057	0.00305727	0.788609	0.788609	313.802
200	0.203608	0.00360832	0.796392	0.796392	313.894
210	0.158247	0.00440123	0.803291	0.803291	313.973
220	0.116732	0.00562111	0.809194	0.809194	314.035
230	0.0791032	0.00767454	0.813754	0.813754	314.074
240	0.0460351	0.0115522	0.816034	0.816034	314.071
250	0.0197385	0.0197385	0.813595	0.813595	313.978
260	0.0044617	0.0367197	0.80199	0.80199	313.705
270	0.000331281	0.0628312	0.780919	0.780919	313.249
280	0.00000649	0.0909155	0.757569	0.757569	312.752
290	0.0000000361	0.117647	0.735294	0.735294	312.282
300	0.0000000000	0.142857	0.714286	0.714286	311.841
310	0.0000000000	0.166667	0.694445	0.694445	311.428
320	0.0000000000	0.189189	0.675676	0.675676	311.038
330	0.0000000000	0.210526	0.657895	0.657895	310.671
340	0.0000000000	0.230769	0.641026	0.641026	310.325
350	0.0000000000	0.25	0.625	0.625	309.998
360	0.0000000000	0.268293	0.609756	0.609756	309.687

Fuente: Elaboración propia.

En la figura 10, se puede observar los perfiles de concentración para cada uno de los componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) que intervienen en la reacción de saponificación del acetato de etilo. Cada perfil se evalúo para un tiempo de 360 s y en intervalos de 10 s. Es decir, se empezó en $t = 0$ s, el siguiente valor fue en $t = 10$ s y asi sucesivamente hasta llegar a los 360 s. Entonces, cada perfil está formado por 37 puntos.

En la figura 11, se puede observar los perfiles de temperatura en el enfriador y reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato etilo. De la misma forma que en los perfiles de concentración, cada perfil de temperatura se evalúo para un tiempo de 360 s y en intervalos de 10 s. Es decir, se empezó en $t = 0$ s, el siguiente valor fue en $t = 10$ s y asi sucesivamente hasta llegar a los 360 s. Entonces, cada perfil está formado por 37 puntos.

En la tabla 4, se puede observar los valores de la concentración y la temperatura en el reactor, para cada uno de los componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) que intervienen en la reacción de saponificación del acetato de etilo. Estos valores fueron determinados haciendo uso del comando Evaluate, tal como se indica a continuación.

Por ejemplo, para determinar el valor de la concentración y la temperatura en el reactor, para cada uno de los componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol), en un tiempo igual a 50 s, se efectuó de la forma siguiente:

```
In[21]:= (*Determinación de los valores de la concentración para el
          acetato de etilo, mediante el comando Evaluate*)
         b = 50(*Es el valor del tiempo en s,
         a la que se desea determinar el valor de C_A*);
         Evaluate[C_A[b] /. sol][[1]]
         evalúa
         (*kmol/m^3*)
Out[21]=
         2.00119
```

```
In[22]:= (*Determinación de los valores de la concentración para el
          hidróxido de sodio, mediante el comando Evaluate*)
         b = 50(*Es el valor del tiempo en s,
         a la que se desea determinar el valor de C_B*);
         Evaluate[C_B[b] /. sol][[1]]
         evalúa
         (*kmol/m^3*)
Out[22]=
         0.0011851
```

```
In[23]:= (*Determinación de los valores de la concentración para el
          acetato de sodio, mediante el comando Evaluate*)
         b = 50(*Es el valor del tiempo en s,
          a la que se desea determinar el valor de C_C*);
         Evaluate[C_C[b] /. sol][[1]]
         evalúa
         (*kmol/m^3*)
Out[24]=
         0.498815
```

```
In[25]:= (*Determinación de los valores de la concentración para el etanol,
         mediante el comando Evaluate*)
         b = 50(*Es el valor del tiempo en s,
          a la que se desea determinar el valor de C_D*);
         Evaluate[C_D[b] /. sol][[1]]
         evalúa
         (*kmol/m^3*)
Out[26]=
         0.498815
```

```
In[27]:= (*Determinación de los valores de la temperatura a la que se
          encuentran en el reactor todos los componentes que intervienen en
          la reacción de saponificación*)
         b = 50 (*Es el valor del tiempo en s,
         a la que se desea determinar el valor de T*);
         Evaluate[T[b] /. sol][[1]]
         evalúa
         (*K*)
Out[27]=
         309.689
```

CAPÍTULO V: DISCUSIÓN

En la figura 10 y en la tabla 4, se puede observar lo siguiente:

- La concentración del acetato de etilo (C_A) dentro del reactor, disminuye su valor desde $5\ \text{kmol/m}^3$ en $t = 0$ s, hasta $0.0197385\ \text{kmol/m}^3$ en $t = 250$ s y sigue disminuyendo hasta $0\ \text{kmol/m}^3$ en $t = 300$ s. Esto indica, que en $t = 300$ s, el acetato de etilo se ha consumido totalmente en la reacción de saponificación.

- La concentración del hidróxido de sodio (C_B) dentro del reactor, aumenta su valor desde $0\ \text{kmol/m}^3$ en $t = 0$ s, hasta $0.0197385\ \text{kmol/m}^3$ en $t = 250$ s. Esto indica que hasta los 250 s, gran parte del hidróxido de sodio que ingresa en forma continua al reactor se consume en la reacción de saponificación. A partir de los 250 s, C_B empieza a aumentar su valor hasta $0.268293\ \text{kmol/m}^3$ en $t = 360$ s, lo cual se debe a que solo una pequeña parte del hidróxido de sodio que ingresa en forma continua al reactor reacciona con el acetato de etilo.

- La concentración del acetato de sodio (C_C) dentro del reactor, aumenta su valor desde $0\ \text{kmol/m}^3$ en $t = 0$ s, hasta $0.813595\ \text{kmol/m}^3$ (máximo) en $t = 250$ s. Esto muestra que hasta los 250 s, gran parte de los reactantes (acetato de etilo e hidróxido de sodio) se consumen, dando como productos de la reacción al acetato de sodio y al etanol. A partir de los 250 s, C_C empieza a disminuir debido a que ya no se está produciendo, pues hasta este instante prácticamente todo el acetato de etilo (A) se ha consumido y el hidróxido de sodio (B) ya no tiene con quien reaccionar. La concentración del etanol (C_D), tiene los mismos valores que la concentración del acetato de sodio (C_C), pues de acuerdo a la estequiometría de la reacción de saponificación $C_C = C_D$.

En la figura 11 y en la tabla 4, se puede observar que la temperatura (T), en el reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo, aumenta su valor desde 300 K en $t = 0$ s, hasta 314.071 K (máximo) en $t = 240$ s. Esto indica que dicha reacción de saponificación es exotérmica (desprende energía). A partir de los 240 s el valor de T empieza a disminuir hasta 309.687 K en $t = 360$ s, debido a que la temperatura del refrigerante a la entrada del enfriador durante todo los 360 s es 285 K.

CAPÍTULO VI: CONCLUSIONES

- En la sección 3.1.1, se ha obtenido el modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo. Este modelo está formado por dos sistemas de ecuaciones, a las cuales se las denomina ecuaciones auxiliares y ecuaciones principales, respectivamente. El sistema de ecuaciones auxiliares, para dicho modelo, lo conforman las ecuaciones **(21)**, **(22)**, **(26)**, **(31)**, **(32)**, **(33)**, **(34)**, **(37)**, **(46)** y **(47)** y el sistema de ecuaciones principales lo conforman las ecuaciones **(30)**, **(36)**, **(40)**, **(41)**, **(28)** y **(49)**. De esta forma se está cumpliendo con el primer objetivo específico y probando la primera hipótesis específica.

- También en la sección 3.1.1, se ha determinado la ecuación diferencial entre la concentración y el tiempo para cada uno de los cuatro componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) que intervienen en la reacción de saponificación. Estas ecuaciones son: **(30)**, **(36)**, **(40)** y **(41)**, respectivamente. De esta manera se está cumpliendo con el segundo objetivo específico y la vez probándose la segunda hipótesis específica.

- Se ha determinado que la ecuación diferencial entre la temperatura y el tiempo en el reactor donde se lleva a cabo la saponificación del acetato de etilo, es la ecuación **(49)**, cumpliéndose de esta forma con el tercer objetivo y probándose la tercera hipótesis específica.

- Las ecuaciones **(30)**, **(36)**, **(40)** y **(41)**, son ecuaciones diferenciales de primer orden, en donde el tiempo representa a la variable independiente y las concentraciones de los cuatro componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) que intervienen en la reacción de saponificación representan a las variables dependientes. La ecuación **(49)**, es una ecuación diferencial de primer orden, donde la temperatura del reactor depende del tiempo.

- De esta manera se concluye el presente trabajo de tesis, en el cual se ha desarrollado una plataforma en Wolfram Mathematica 10.4 para evaluar perfiles de concentración y temperatura en la reacción de saponificación del acetato de etilo, cumpliéndose con el objetivo general y probándose a la vez la hipótesis general.

CAPÍTULO VII: RECOMENDACIONES

- Se recomienda otros estudios que estén relacionados al diseño de los sistemas de enfriamiento de los reactores batch, continuo y semicontinuo, donde se haga la aplicación de los mecanismos de transferencia de calor para asi determinar el valor del coeficiente global de transferencia de calor.

- Se recomienda que se hagan otros estudios que estén relacionados con la automatización de los reactores batch, continuo y semicontinuo. Esto con el fin de poder controlar variables de proceso como la temperatura de la solución en el reactor y el flujo volumétrico de la corriente a la entrada del reactor.

- En el caso de que se desee diseñar y construir un reactor donde se lleve a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo, se recomienda hacer uso de los dos sistemas de ecuaciones (auxiliares y principales) que conforman dicho modelo matemático (véase para esto la sección 3.1.1).

- Para entender correctamente la programación de los sistemas de ecuaciones que conforman el mencionado modelo matemático, se recomienda que se revise la sección 3.1.2. En esta sección se muestra en detalle, la sintaxis utilizada en Wolfram Mathematica 10.4, para la programación de cada una de las ecuaciones que conforman dicho modelo matemático.

- Finalmente, se recomienda que se sigan realizando estos tipos de trabajos de tesis en la Facultad de Ingeniería Química (FIQ) de la Universidad Nacional de la Amazonia Peruana (UNAP), donde se haga la aplicación directa de aspectos ingenieriles como la ecuación general de balance molar, las leyes de velocidad y estequiometría, la ecuación general de balance de energía y el uso de software especializado para la resolución de sistemas de cuaciones diferenciales. Esto permitirá en gran medida que el egresado de la mencionada facultad desarrolle competencias como: diseño y optimización de procesos químicos, cálculo del dimensionamiento de equipos y control automático de la producción en la industria química.

CAPÍTULO VIII: FUENTES DE INFORMACIÓN

- CASTILLO, Oswaldo; RAMÍREZ, Fausto y SIGÜENZA, Pedro. "Modelación y simulación de procesos de transferencia de masa en ingeniería química". Tesis para optar el título de Ingeniero Químico. El Salvador: Universidad de El Salvador, Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Escuela de Ingeniería Química y de Alimentos, 2019. pp. ii, 26-27.

- CHU, Dengxiao y GARCÍA, Carlos. "Modelamiento de la producción de etileno en un reactor de flujo pistón para determinar el perfil de conversión de bioetanol a diferentes presiones. Tesis para optar el título profesional de Ingeniero de Químico. Iquitos Perú: Universidad Nacional de la Amazonía Peruana, Facultad de Ingeniería Química, 2021. pp. 5-7.

- COUGHANOWR, Donald y LEBLANC, Steven. Process Systems Analysis and Control. 3a. ed. New York, USA: McGraw-Hill, 2009. 26 p.
  ISBN: 978-0-07-339789-4.

- CHÁVEZ, Johan. "Modelado y simulación de un reactor de lecho fluidizado para reacción de acoplamiento oxidativo de metano utilizando Wolfram Mathematica como herramienta de cómputo". Tesis para obtener el título de Ingeniero Químico. México: Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química, 2017. pp. 23-24.

- FELDER, Richard y ROUSSEAU, Ronald. Principios elementales de los procesos químicos. 3a. ed. México: Limusa Wiley, 2004. 53 p.
  ISBN: 968-18-6169-8.

- FOGLER, H. Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. 4a. ed. México: Pearson Educación, S.A. de C.V., 2008. pp. 6-10, 343, 391, 616, 619, 622.
  ISBN 13: 978-970-26-1198-1.

- GEANKOPLIS, Christie. Procesos de transporte y principios de separación. 4a. ed. México: Compañía Editorial Continental, 2006. 8 p.
  ISBN: 970-24-0856-3.

- https://www.wolfram.com/solutions/industry/chemical-engineering/index.es.php

- LEVENSPIEL, Octave. Ingeniería de las reacciones químicas. 3a. ed. México: Limusa Wiley, 2004. 28 p.
  ISBN: 968-18-5980-3.

- MARTÍNEZ, Julieta; ZAMORA, Silvia y VEGA, Judith. "Simuladores de procesos en la carrera de Ingeniería Química". X Congreso Argentino de Enseñanza de la Ingeniería Química. Córdoba, Argentina: Universidad Nacional de Salta, Facultad de Ingeniería, 2018. pp. 1-7.

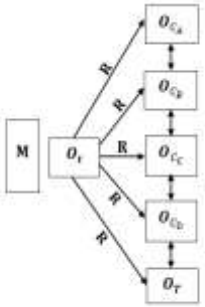
- NÚÑEZ, Oscar y CABRERA, Carlos. Comportamiento dinámico de la saponificación del acetato de etilo en un reactor de tanque con reacción continua, Lima, Perú. Revista del Instituto de Investigación de la Facultad de Minas, Metalurgia y Ciencias Geográficas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos: 14 (26): 1-7, 2011.

- SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C. y ABBOTT, M. M. Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química. 7a. ed. México: McGraw-Hill Interamericana Editores, S.A. de C.V., 2007. 5 p.
  ISBN-13: 978-970-10-6147-3.
  ISBN-10: 970-10-6147-0.

- Wolfram Research, Inc. "Wolfram Mathematica ® Tutorial Collection", Mathematics and Algorithms. United States of America: Wolfram Research, Inc., 2008, pp. 275-276.

ANEXOS

Anexo 1. Matriz de consistencia.

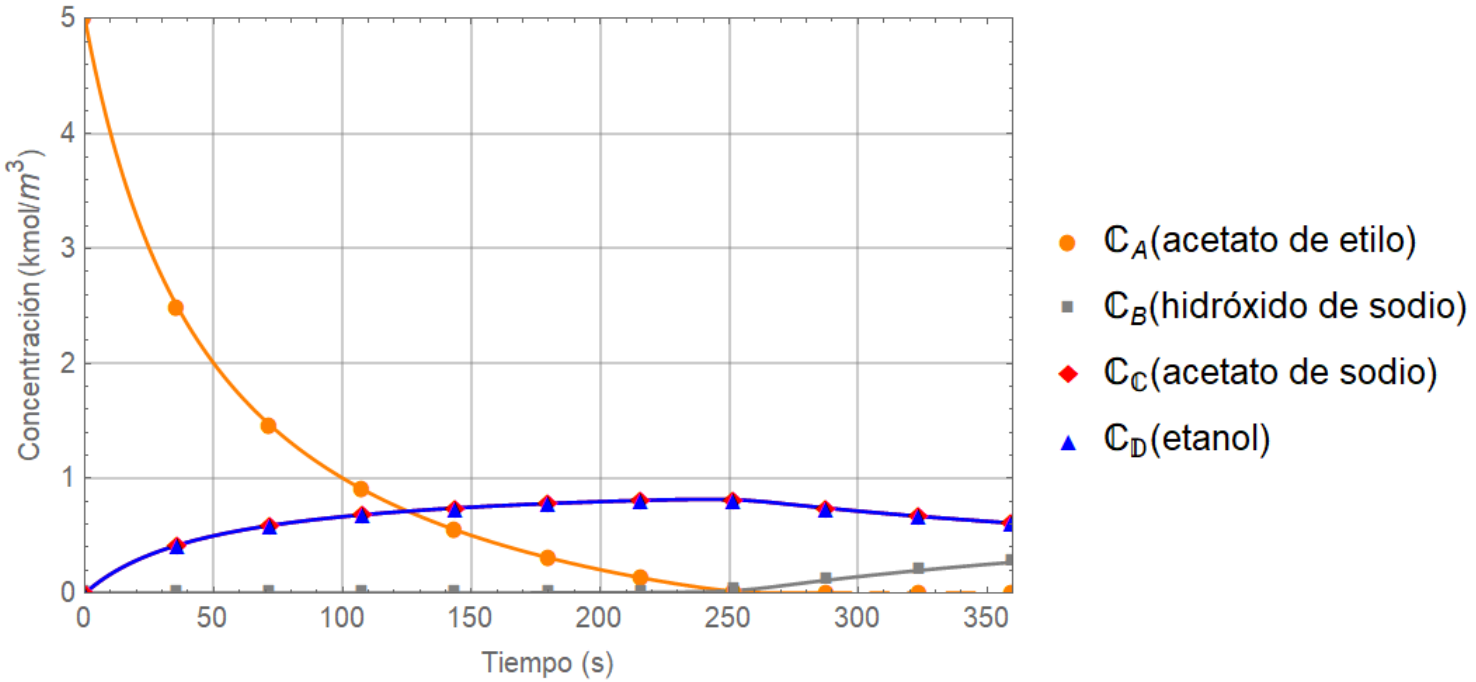
PROBLEMA	OBJETIVOS	HIPÓTESIS	VARIABLES	INDICADOR	METODOLOGÍA
Problema general ¿Es posible desarrollar una plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura en la reacción de saponificación del acetato de etilo?	**Objetivo general** Desarrollar una plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura en la reacción de saponificación del acetato de etilo.	**Hipótesis general** Sí, es posible desarrollar una plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura en la reacción de saponificación del acetato de etilo.	**Variable independiente** t: tiempo.	s	**Tipo de investigación** La presente investigación tiene enfoque cuantitativo con nivel de profundización predictivo y diseño correlacional.
Problemas específicos • ¿Cuál es el modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo?	**Objetivos específicos** • Obtener el modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo.	. **Hipótesis específicas** • El modelo matemático que representa a la reacción de saponificación del acetato de etilo, permite desarrollar la plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura.	**Variables dependientes** C_A: Concentración del acetato de etilo.	$kmol/m^3$	 **Figura 8.** Esquema del diseño de investigación.
• ¿Cuál es la ecuación diferencial entre la concentración y el tiempo para cada uno de los cuatro componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) de la reacción de saponificación?	• Determinar la ecuación diferencial entre la concentración y el tiempo para cada uno de los cuatro componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) de la reacción de saponificación.	• La ecuación diferencial entre la concentración y el tiempo para cada uno de los cuatro componentes (acetato de etilo, hidróxido de sodio, acetato de sodio y etanol) de la reacción de saponificación, permite desarrollar la plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura.	C_B: Concentración del hidróxido de sodio.	$kmol/m^3$	
			C_C: Concentración del acetato de sodio.	$kmol/m^3$	**Población y muestra** La población para la presente investigación, estuvo formada por los cuatro (4) perfiles de concentración de los componentes de la saponificación, más el perfil de temperatura. De esta forma, la población tuvo un tamaño igual a cinco (5). Como la población tuvo un tamaño menor que ocho (8), entonces, la muestra estuvo representada por el 100 % de la población. Cada perfil se evaluó para un tiempo de 360 s.
• ¿Cuál es la ecuación diferencial entre la temperatura y el tiempo en el reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo?	• Determinar la ecuación diferencial entre la temperatura y el tiempo en el reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo.	• La ecuación diferencial entre la temperatura y el tiempo en el reactor donde se lleva a cabo la reacción de saponificación del acetato de etilo, permite desarrollar la plataforma en Wolfram Mathematica para evaluar perfiles de concentración y temperatura.	C_D: Concentración del etanol.	$kmol/m^3$	
			T: Temperatura.	K	

Anexo 2. Compilación del sistema de ecuaciones principales del modelo que representa a la saponificación del acetato de etilo, para obtener los perfiles de concentración.

```
In[18]:= (*Programación del sistema de ecuaciones principales del modelo
          que representa a la saponificación del acetato de etilo,
         para determinar perfiles de concentración*)
sol = NDSolve[{C_A'[t] == r_A - (C_A[t] v_E)/V, C_B'[t] == r_B + (F_BE - C_B[t] v_E)/V,
    C_C'[t] == r_C - ((C_C[t] v_E))/V, C_D[t] == C_C[t], C_W'[t] == v_E/V (C_WE - C_W[t]),
  T'[t] == (Q - F_BE Cp (1 + C_WE/C_BE) (T[t] - T_BE) + r_A V ΔH_Rx)/
    (((Cp (C_B[t] + C_C[t] + C_D[t] + C_W[t]) + Cp_A C_A[t]) V)), C_A[0] == C_A0,
  C_B[0] == C_B0, C_C[0] == C_C0, C_D[0] == C_D0, C_W[0] == C_W0, T[0] == T_0},
 {C_A, C_B, C_C, C_D, C_W, T}, {t, 0, t_s}];
Show[ListLinePlot[{Table[{t, Evaluate[C_A[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, 1}],
    Table[{t, Evaluate[C_B[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, 1}],
    Table[{t, Evaluate[C_C[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, 1}],
    Table[{t, Evaluate[C_D[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, 1}]},
  PlotRange → {{0, t_s}, {0, 5}}, GridLines → Automatic, Frame → True,
  FrameLabel → {"Tiempo (s)", "Concentración (kmol/m^3)"},
  PlotStyle → {{Thickness[0.004], Orange}, {Thickness[0.004], Gray},
    {Thickness[0.004], Red}, {Thickness[0.004], Blue}}],
 ListPlot[{Table[{t, Evaluate[C_A[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, t_s/10}],
   Table[{t, Evaluate[C_B[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, t_s/10}],
   Table[{t, Evaluate[C_C[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, t_s/10}],
   Table[{t, Evaluate[C_D[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, t_s, t_s/10}]},
  PlotLegends → {"C_A (acetato de etilo)", "C_B (hidróxido de sodio)",
    "C_C (acetato de sodio)", "C_D (etanol)"}, PlotMarkers → Automatic,
  PlotLegends → {"C_A (acetato de etilo)", "C_B (hidróxido de sodio)",
    "C_C (acetato de sodio)", "C_D (etanol)"}, PlotMarkers → Automatic,
```

```
PlotRange → {{0, t_s}, {0, 5}},
rango de representación
PlotStyle → {{Thickness[0.003], Orange}, {Thickness[0.003], Gray},
              grosor              naranja   grosor              gris
  {Thickness[0.003], Red}, {Thickness[0.003], Blue}}]
   grosor              rojo   grosor              azul
```

Out[18]=

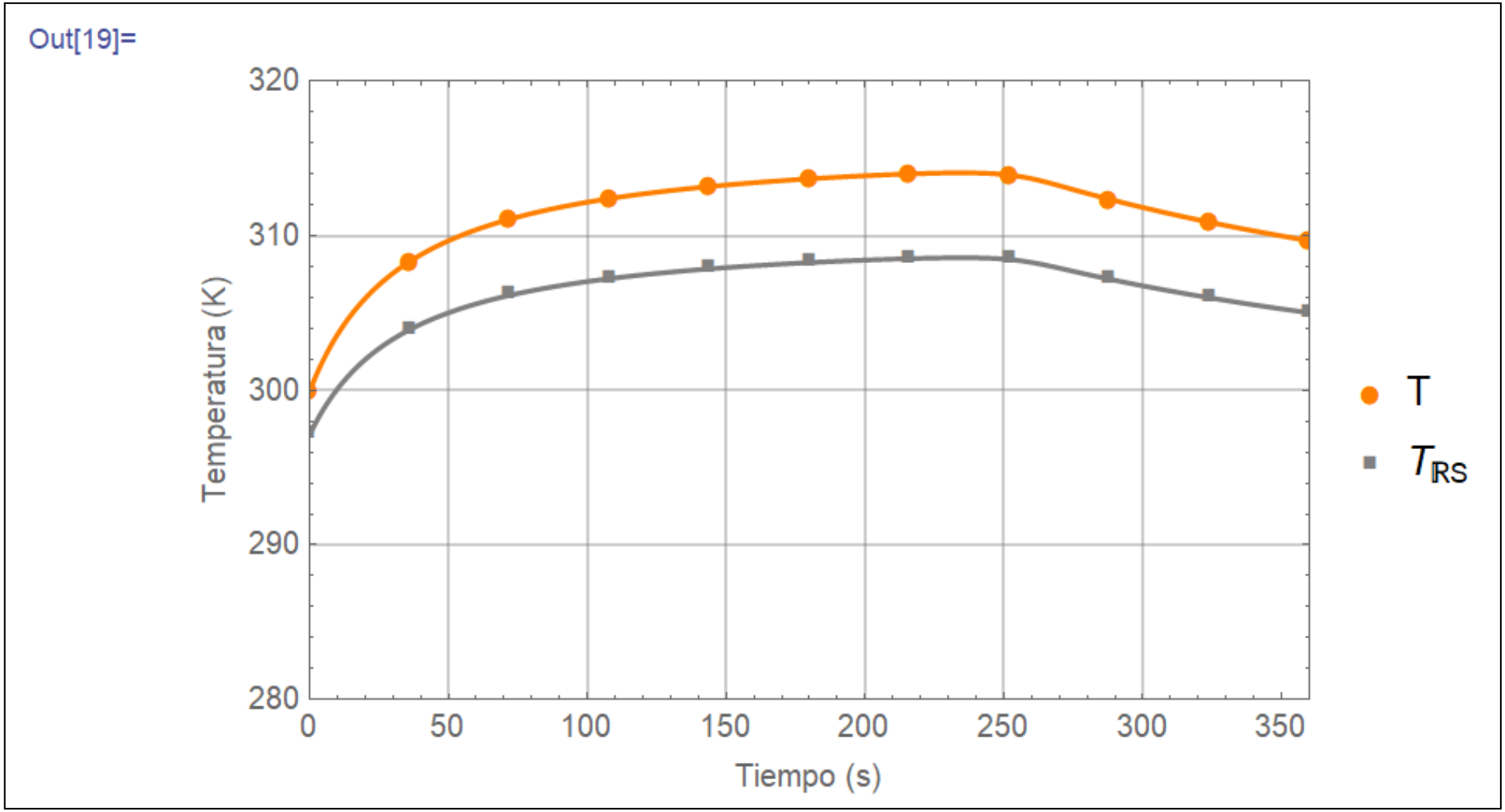


Anexo 3. Compilación del sistema de ecuaciones principales del modelo que representa a la saponificación del acetato de etilo, para obtener los perfiles de temperatura en el reactor y enfriador. .

```
In[19]:= (*Programación del sistema de ecuaciones principales del modelo
      que representa a la saponificación del acetato de etilo,
     para determinar perfiles de temperatura*)
sol = NDSolve[{Ca'[t] == rA - (Ca[t] vE)/V, Cb'[t] == rB + (FBE - Cb[t] vE)/V,
    Cc'[t] == rC - (Cc[t] vE)/V, Cd[t] == Cc[t], Cw'[t] == vE/V (CWE - Cw[t]),
    T'[t] == (Q - FBE Cp (1 + CWE/CBE) (T[t] - TBE) + rA V ΔHRx)/
     ((Cp (Cb[t] + Cc[t] + Cd[t] + Cw[t]) + CpA Ca[t]) V), Ca[0] == CA0,
    Cb[0] == CB0, Cc[0] == CC0, Cd[0] == CD0, Cw[0] == CW0, T[0] == T0},
  {Ca, Cb, Cc, Cd, Cw, T}, {t, 0, ts}];
Show[ListLinePlot[{Table[{t, Evaluate[T[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, ts, 1}],
    Table[{t, Evaluate[TRS /. sol][[1]]}, {t, 0, ts, 1}]},
   GridLines → Automatic, PlotRange → {{0, ts}, {280, 320}},
   Frame → True, FrameLabel → {"Tiempo (s)", "Temperatura (K)"},
   PlotStyle → {{Thickness[0.005], Orange}, {Thickness[0.005], Gray}}],
  ListPlot[{Table[{t, Evaluate[T[t] /. sol][[1]]}, {t, 0, ts, ts/10}],
    Table[{t, Evaluate[TRS /. sol][[1]]}, {t, 0, ts, ts/10}]},
   PlotLegends → {"T", "TRS"}, PlotMarkers → Automatic,
```

```
   PlotRange → {{0, ts}, {280, 320}},
   PlotStyle → {{Thickness[0.003], Orange}, {Thickness[0.003], Gray}}]]
```

Out[19]=


320
310
300
290
280
Temperatura (K)
0
50
100
150
200
250
300
350
Tiempo (s)
T
T_{RS}