

ANNEX D- ESTUDI DEL REACTOR

Índex

D.1- Introducció	3
D.2- Comparació entre un CSTR isotèrmic i un FP isotèrmic.	5
D.3- Comparació entre un CSTR adiabàtic i un FP adiabàtic.	10
D.4- Comparació entre un CSTR isotèrmic i un CSTR adiabàtic	13
D.5- Comparació entre un FP isotèrmic i un FP adiabàtic	15
D.6- Elecció de les condicions òptimes	16
D.6.1- Tipus de reactor.....	16
D.6.2- Temperatura.....	16
D.6.3- Percentatge d'hidrogen.....	17
D.6.4- Condicions de treball.....	20
D.6.5- Composició de la margarina obtinguda	20
D.7- Bibliografia	22





D.1- Introducció

Un cop escollit el model cinètic que millor s'ajusta al procés d'hidrogenació realitzat al laboratori ja estem en situació de poder estudiar quin reactor és el més apropiat per a elaborar margarina.

Tal com ja s'ha explicat anteriorment l'objectiu de l'estudi del procés d'hidrogenació amb solvent supercrític és veure quines condicions són les més favorables per a obtenir una margarina saludable i competitiva amb les existents al mercat. La composició d'àcids grassos que tenen les margarines existents al mercat es presenta a la taula següent, on es resumeixen les dades publicades a la revista Consumer [1]:

Àcid gras	Percentatge en massa (g.component / 100g. matèria grassa)
Saturats	27-33
Monoinsaturats	23-30
Poliinsaturats	36-49
Insaturats (sense elàidic)	61,2-72,3
Àcid elàidic (trans)	0,5-0,9
Relació Àcids insaturats/Àcids saturats	1,6-2,6

Taula D.1- Percentatge en massa de components de les margarines existents al mercat.

No s'ha d'oblidar que aquests percentatges són els que hi ha a la margarina, és a dir, al producte acabat. Aquesta composició s'aconsegueix fent mescles dels olis hidrogenats. A continuació mostrem la composició de l'oli de girasol hidrogenat en el procés convencional de fabricació de margarina i en el procés experimental fet per King [2].



Característica	Margarina (Punt de fusió: 32-39°C)		Greix per a pastisseria (Punt de fusió: 45-52°C)	
	Convencional	Experimental	Convencional	Experimental
Àcid esteàric (%)	6-9	7-11	11-13	13-24
Àcid elàidic (%)	11-30	1-3	15-20	3-8
IV	90-110	108-114	85-90	88-102

Taula D.2- Comparació entre l'oli de girasol hidrogenat experimentalment^a i la margarina i els greixos convencionals utilitzats com a matèria prima.

^aCondicions experimentals: 120°C, catalitzador 0,02 wt% Ni, 250 psi H₂, 250 psi CO₂.

Amb les constants obtingudes i utilitzant el programa Polymath podem simular el procés d'hidrogenació amb diferents tipus de reactors. Estudiarem dos tipus de reactor continu, el reactor de mescla completa (CSTR) i el reactor flux-pistó. Per ambdós casos estudiarem el cas isotèrmic i el cas adiabàtic.

Un reactor continu és aquell que opera contínuament, en el qual entren i surten corrents sense interrupció, és a dir, no existeixen etapes de parada, càrrega o descàrrega.

El reactor continu de mescla completa és un model de flux d'un reactor en el qual el fluid es mescla de forma total, fet que fa que s'assoleixi una homogeneïtat completa, de tal manera que la composició i la temperatura són iguals en tots els punts de la mescla.

El reactor de flux pistó és un model de flux a l'interior d'un reactor tubular en el qual el front de reacció progressa seguint la longitud del reactor com un pistó o èmbol, fet que condiciona la no existència de mescla en la direcció del desplaçament.



Un reactor isotèrmic és aquell on la temperatura de reacció es manté constant durant tot el procés degut a la presència d'un fluid exterior que absorbeix la calor generada per la reacció química.

En un reactor adiabàtic la calor generada no s'eliminarà i la temperatura augmentarà amb el temps. Aquest augment de temperatura afectarà el valor de les constants de reacció i per tant la composició de l'oli hidrogenat serà diferent segons el reactor amb el qual treballem.

A continuació mostrem els resultats de l'estudi comparatiu dels diferents tipus de reactors.

D.2- Comparació entre un reactor de mescla completa isotèrmic i un flux pistó isotèrmic

Per a poder comparar els dos reactors realitzarem una simulació de cada un sota les mateixes condicions. Aquesta simulació es realitzarà amb el programa Polimath i la metodologia serà la mateixa que al fer la predicció teòrica dels experiments realitzats al laboratori amb el model 3.

Per a simular el cas d'un CSTR isotèrmic utilitzarem les equacions (58)-(78), ja que és el reactor que tenim al laboratori i amb el qual s'ha realitzat la predicció dels resultats dels experiments. Com que tenim un cas isotèrmic la temperatura es manté constant i per tant no cal introduir cap balanç d'energia ja que les constants es mantindran amb el valor trobat a la temperatura de reacció.

Per a simular el cas d'un flux pistó isotèrmic realitzarem uns canvis a les equacions [(C.57)-(C.61)]. Enlloc d'aquestes equacions introduïrem les equacions diferencials pròpies del reactor flux pistó:



$$\frac{d(F_L)}{d(w)} = r_L \quad (\text{D.1})$$

$$\frac{d(F_o)}{d(w)} = r_o \quad (\text{D.2})$$

$$\frac{d(F_e)}{d(w)} = r_e \quad (\text{D.3})$$

$$\frac{d(F_s)}{d(w)} = r_s \quad (\text{D.4})$$

$$\frac{d(F_H)}{d(w)} = r_H \quad (\text{D.5})$$

A continuació introduiríem les equacions de les velocitats de formació per a cada un dels components [(C.35)- (C.39)].

També és necessari introduir els fluxos inicials d'àcid palmític (F_{0p}), d'àcid linolènic (F_{0Ln}), de dimetilèter (F_{dme}), les constants a la temperatura de l'experiment (taula (C.5) o (C.6)), el cabal de la mescla en m^3/h (Q') i en kg/h (q), el pes del catalitzador en kg , i la concentració inicial d'hidrogen (C_{0H}). Les altres concentracions es calcularan a partir de les següents fórmules:

$$C_L = \frac{F_L}{Q'} \quad (\text{D.6})$$

$$C_o = \frac{F_o}{Q'} \quad (\text{D.7})$$

$$C_e = \frac{F_e}{Q'} \quad (\text{D.8})$$

$$C_s = \frac{F_s}{Q'} \quad (\text{D.9})$$

$$C_p = \frac{F_p}{Q'} \quad (\text{D.10})$$

$$C_{Ln} = \frac{F_{Ln}}{Q'} \quad (\text{D.11})$$



Per a comparar els dos tipus de reactor ho farem representant les fraccions màssiques (massa component/massa total) en funció de l'índex de iode. Per tant, a més a més introduïrem les següents fórmules:

$$X_{mL} = \frac{280,46 \cdot C_L}{PM \cdot C_{oli}} \quad (D.12)$$

$$X_{mo} = \frac{282,47 \cdot C_o}{PM \cdot C_{oli}} \quad (D.13)$$

$$X_{me} = \frac{282,47 \cdot C_e}{PM \cdot C_{oli}} \quad (D.14)$$

$$X_{mS} = \frac{284,48 \cdot C_S}{PM \cdot C_{oli}} \quad (D.15)$$

$$X_{mp} = \frac{256,47 \cdot C_p}{PM \cdot C_{oli}} \quad (D.16)$$

$$X_{mLn} = \frac{278,46 \cdot C_{Ln}}{PM \cdot C_{oli}} \quad (D.17)$$

On X_{mL} , X_{mo} , X_{me} , X_{mS} , X_{mp} , X_{mLn} són les fraccions màssiques d'àcid linoleic, d'àcid oleic, d'àcid elàidic, d'àcid esteàric, d'àcid palmític i d'àcid linolènic respectivament. Aquestes equacions de fraccions màssiques ((D.12)-(D.17)) també les introduïrem en el cas d'un CSTR isotèrmic ja que tal com hem dit interessa tenir els resultats en fraccions màssiques. El càlcul de la fracció màssica d'àcid linolènic no és necessari perquè aquest àcid gras no el tenim en compte alhora d'estudiar el nostre sistema per ser tan petita la seva concentració a l'oli (1% molar).

Per a poder realitzar aquesta comparació i introduir les dades necessàries al Polimath s'ha d'escollir unes condicions de treball determinades. En el nostre cas s'ha agafat com a referència les condicions de l'experiment 10 realitzat al laboratori. Aquesta prova experimental va ser realitzada a 183°C amb una composició d'entrada al reactor d'un 1% molar d'oli, un 9% molar d'hidrogen i un 90% molar de dimetilèter. Les



concentracions, cabals i fluxos dels components els trobem a l'annex B. Aquestes dades són les que s'han d'introduir al Polymath per a poder resoldre les equacions plantejades.

Per a comparar els dos reactors també tindrem en compte la fracció massica d'àcids grassos saturats, que serà la suma d'àcid palmític i d'àcid esteàric. Aquesta dada és important ja que com menys àcids grassos saturats hi hagi més saludable serà la margarina fabricada a partir d'aquest procés. D'altra banda és necessari que el % d'àcids grassos saturats sigui major o igual a un 27% per aconseguir que la consistència de l'oli hidrogenat sigui el desitjat per a fabricar margarina.

Els resultats en percentatge en massa obtinguts per a un reactor CSTR isotèrmic i un flux pistó isotèrmic els tabulem a continuació:

Índex de iode (IV)	% Àcid linoleic	% Àcid oleic	% Àcid elàidic	% Àcid esteàric	% Àcid palmític	% Àcids saturats
139,4	68,3	15,1	0	7,9	7,4	15,4
117,0	62,8	16,1	1,7	10,7	7,4	18,2
96,4	58,2	17,0	2,3	13,8	7,4	21,2
77,7	54,3	17,5	2,6	16,8	7,4	24,3
60,8	50,9	17,8	2,8	19,8	7,4	27,3
45,5	48,0	17,8	2,9	22,6	7,4	30,0

Taula D.3- Predicció dels resultats amb un CSTR isotèrmic.

Índex de iode (IV)	% Àcid linoleic	% Àcid oleic	% Àcid elàidic	% Àcid esteàric	% Àcid palmític	% Àcids saturats
139,49	68,3	15,1	0	7,9	7,4	15,4
127,98	65,3	15,3	1,4	9,2	7,4	16,7
105,58	59,8	16,8	2,6	12,0	7,4	19,5
83,99	54,8	18,1	3,2	15,1	7,4	22,6
73,52	52,5	18,7	3,4	16,7	7,4	24,1
53,27	48,2	19,5	3,6	19,9	7,4	27,4

Taula D.4- Predicció dels resultats amb un reactor FP isotèrmic.



Amb aquestes dades realitzem un gràfic on es mostra l'evolució de les fraccions massiques dels components en funció de l'índex de iode en el cas d'un CSTR i d'un flux pistó. En el gràfic també mostrem l'índex de iode en el qual els components tenen la composició típica de les margarines comercials.

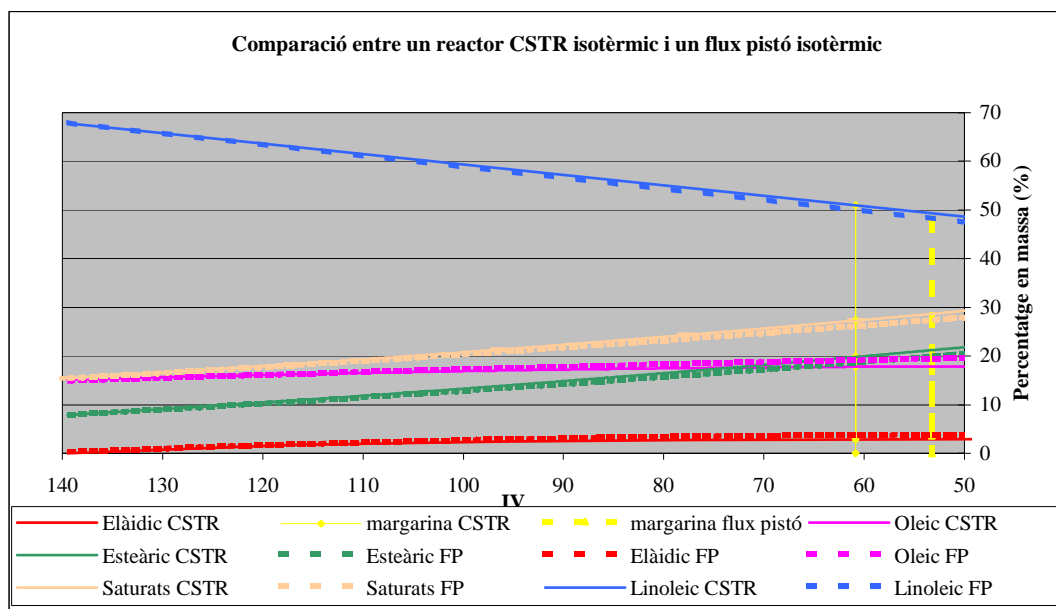


Figura D.1- Comparació entre un reactor CSTR isotèrmic i un FP isotèrmic.

Observem a través del gràfic com per un mateix índex de iode obtenim més àcid linoleic, esteàric i àcids saturats i menys àcid elàidic i oleic en el cas d'un reactor CSTR.

Si observem la composició de les margarines que obtindríem en cada cas podem veure com en el cas d'un CSTR obtindríem una composició més rica en àcid linoleic i més pobre en àcid elàidic que en el cas d'un reactor flux pistó. Per tant ens interessaria més un CSTR.

Per a mesurar la qualitat d'una margarina, a més a més de tenir en compte el percentatge d'àcid gras tipus trans (àcid elàidic), també s'utilitza la relació d'insaturats i saturats de l'oli hidrogenat. Com més gran és la divisió insaturats/saturats major serà la qualitat de la margarina. En aquest cas:



- Relació insaturats/saturats CSTR isotèrmic = 2,62
- Relació insaturats/saturats FP isotèrmic = 2,47

Per tant alhora d'escollir entre un reactor CSTR isotèrmic i un flux pistó isotèrmic ens quedaríem amb el primer pel fet d'obtenir una margarina més saludable, tant pel seu menor contingut en àcid trans com per la seva millor relació insaturats/saturats.

D.3- Comparació entre un reactor de mescla completa adiabàtic i un flux pistó adiabàtic

Per a realitzar la simulació d'un reactor adiabàtic serà necessari escriure les mateixes equacions que en el cas isotèrmic però amb unes determinades modificacions.

En primer lloc s'hauran d'escriure les constants del model en funció de la temperatura, seguint el model d'Arrhenius:

$$k = A \cdot \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (\text{D.18})$$

En segon lloc s'haurà d'introduir l'equació que ens determinarà la temperatura per a cada una de les condicions que tinguem:

$$f(T) = T - \frac{\left[T_0 + \left(w(H_L(-k_1 C_L \sqrt{C_H}) + H_L(-k_2 C_L \sqrt{C_H}) + H_0(-k_3 C_o C_H) + H_e(-k_4 C_e C_H)) \right) \right]}{C_p (F_{dme} + F_H)} \quad (\text{D.19})$$

On H_L , H_e , H_o són les entalpies en (kJ/mol) d'àcid linoleic, elàidic i oleic respectivament. Tots aquests valors s'introdueixen al Polymath:



$$\Delta H_L = -254 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_e = -120 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_o = -123 \text{ kJ/mol}$$

C_p és la calor específica de la mescla d'hidrogen i dimetilèter en (kJ/mol·K) i es calcula amb la següent expressió:

$$C_p = \frac{\left[0,9(A + BT_0 + CT_0^2 + DT_0^3 + ET_0^4 + 0,02) + 0,1(A_1 + B_1T_0 + C_1T_0^2 + D_1T_0^3 + E_1T_0^4)\right]}{1000} \quad (\text{D.20})$$

On els coeficients A,B,C,D,E corresponen al dimetilèter i els coeficients A_1, B_1, C_1, D_1, E_1 corresponen a l'hidrogen [3]. Els seus valors són:

$$A = 34668 \cdot 10^{-3}$$

$$B = 70293 \cdot 10^{-6}$$

$$C = 16530 \cdot 10^{-8}$$

$$D = -176675 \cdot 10^{-12}$$

$$E = 49313 \cdot 10^{-15}$$

$$A_1 = 25399 \cdot 10^{-3}$$

$$B_1 = 20178 \cdot 10^{-6}$$

$$C_1 = -38549 \cdot 10^{-9}$$

$$D_1 = 3188 \cdot 10^{-11}$$

$$E_1 = -87585 \cdot 10^{-16}$$

En aquest cas, de la mateixa manera que en l'apartat anterior, agafarem com a condicions inicials les de l'experiment 10 realitzat al laboratori.

Per a simular el cas adiabàtic es farà el mateix que en el cas isotèrmic, és a dir, anar variant la quantitat de catalitzador fins que s'aconsegueixi una composició de l'oli hidrogenat semblant a la que té la margarina. Per a cada un dels estats, és a dir, per cada una de les quantitats de catalitzador tindrem un increment de temperatura diferent.



Els resultats en percentatge en massa obtinguts per a un reactor CSTR isotèrmic i un flux pistó isotèrmic els tabulem a continuació:

Índex de iode (IV)	Increment de temperatura (°K)	% Àcid linoleic	% Àcid oleic	% Àcid elàidic	% Àcid esteàric	% Àcid palmític	% Àcids saturats
139,4	0	68,3	15,1	0	7,9	7,4	15,4
106,3	2,8	65,2	15,4	1,4	9,2	7,4	16,7
77,7	9	59,0	16,0	4,5	11,8	7,4	19,3
56,8	14,1	52,8	16,4	7,9	14,1	7,4	21,6
58,7	19,6	46,8	16,9	11,2	16,4	7,4	23,9
37,8	24,7	41,2	17,2	14,3	18,5	7,4	26,0

Taula D.5- Resultats predits amb un CSTR adiabàtic.

Índex de iode (IV)	Increment de temperatura (°K)	% Àcid linoleic	% Àcid oleic	% Àcid elàidic	% Àcid esteàric	% Àcid palmític	% Àcids saturats
139,4	0	68,3	15,1	0	7,9	7,4	15,4
127,6	1,0	65,3	15,3	1,4	9,2	7,4	16,7
104,1	2,9	59,5	16,2	3,6	11,9	7,4	19,4
81,4	4,8	54,2	16,7	5,7	14,7	7,4	22,2
75,7	5,3	52,9	16,8	6,2	15,4	7,4	22,9
70,3	5,7	51,6	16,8	6,8	16,1	7,4	23,5
62,4	6,0	49,2	16,8	7,9	17,4	7,4	24,9
52,5	7,5	46,8	16,7	9,1	18,7	7,4	26,2

Taula D.6-Resultats predits amb un FP adiabàtic.

A continuació es mostra el gràfic on es representen aquests valors:



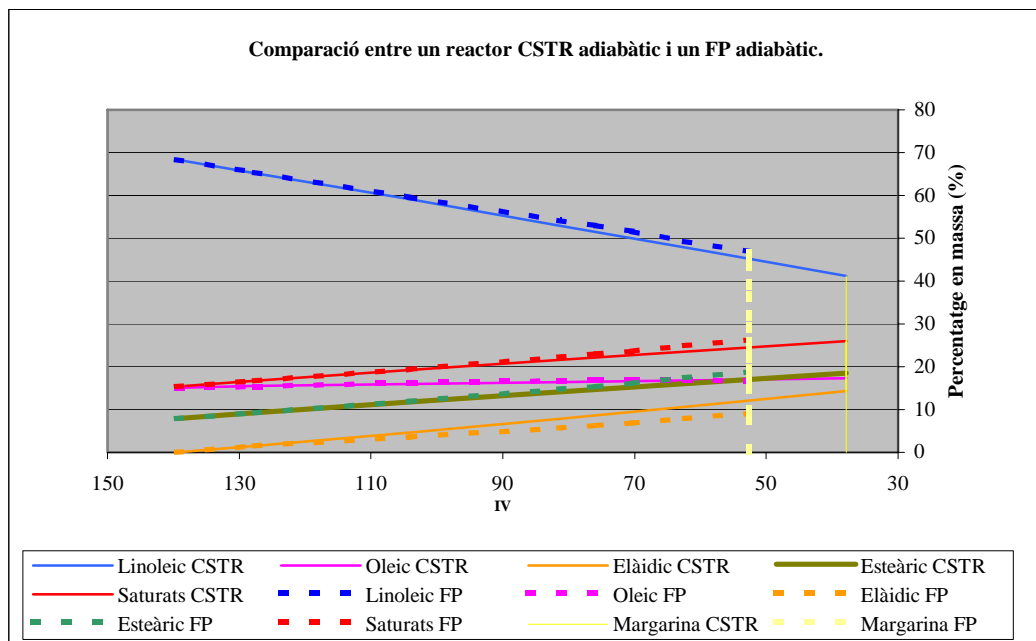


Figura D.2- Comparació entre un reactor CSTR adiabàtic i un FP adiabàtic.

Observem com en un flux pistó adiabàtic hi ha una major formació de tots els components excepte de monoinsaturats que en el cas d'un CSTR adiabàtic.

També podem veure com la margarina que podríem elaborar en ambdós casos no és gaire saludable, ja que té una gran quantitat d'àcid elàidic. Si s'hagués d'escollir entre els dos ens quedaríem amb el flux pistó adiabàtic per la seva menor quantitat d'àcid elàidic i per la seva millor relació insaturats/saturats:

- Relació insaturats/saturats CSTR adiabàtic = 2,24
- Relació insaturats/saturats FP adiabàtic = 2,4

D.4- Comparació entre un reactor de mescla completa isotèrmic i un adiabàtic

Per a comparar un CSTR operant de manera isotèrmica i de manera adiabàtica agafarem les dades que hem mostrat en els apartats D.2 (CSTR isotèrmic) i D.3 (CSTR adiabàtic) i les compararem a través del gràfic que presentem a continuació:



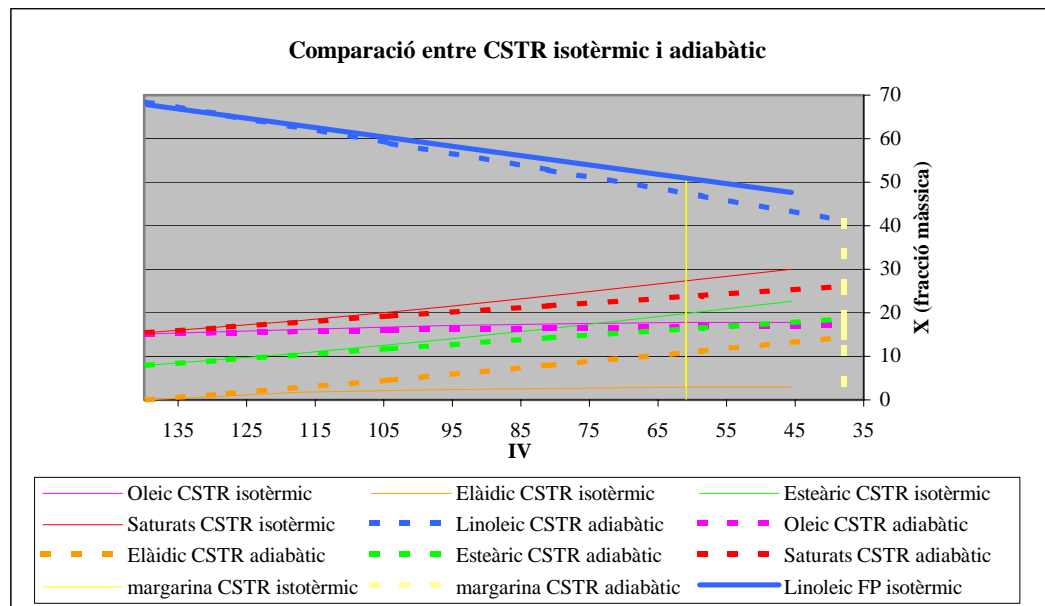


Figura D.3- Comparació entre un CSTR isotèrmic i un CSTR adiabàtic.

Observem com en el cas adiabàtic tots els components es formen més lentament que en el cas isotèrmic excepte l'àcid elàidic, que és molt més gran que en un reactor CSTR isotèrmic.

Per tant, si s'hagués d'escollir entre una margarina elaborada amb un reactor CSTR isotèrmic o un adiabàtic s'escolliria el primer pel menor contingut en àcid tipus trans i per la seva millor relació insaturats/saturats respecte el cas adiabàtic:

- Relació insaturats/saturats CSTR isotèrmic = 2,62
- Relació insaturats/saturats CSTR adiabàtic = 2,24



D.5- Comparació entre un reactor flux pistó isotèrmic i un adiabàtic

De la mateixa manera que en el cas anterior, representarem les dades pròpies d'un reactor flux pistó isotèrmic (apartat 9.2) i les d'un reactor flux pistó adiabàtic (apartat 9.3) en un mateix gràfic per a veure les diferències entre els dos.

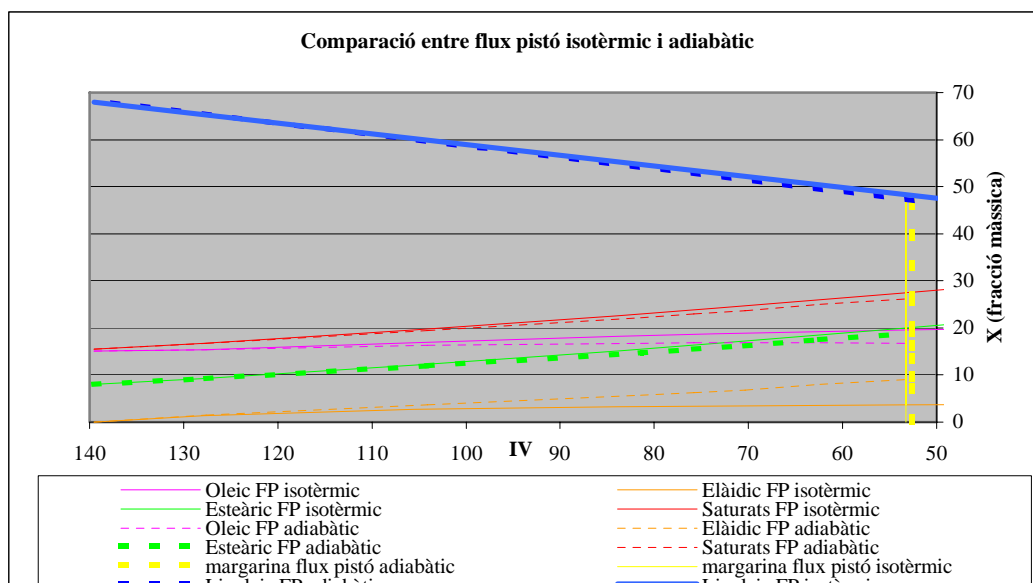


Figura D.4- Comparació entre un FP isotèrmic i un FP adiabàtic.

En aquest gràfic podem veure com en el cas d'un reactor flux pistó isotèrmic hi ha més formació d'àcid linoleic, d'àcid oleic, d'àcid esteàric i d'àcids grassos saturats, sent la formació d'àcid elàidic menor que en el cas adiabàtic. La tendència és la mateixa que en el cas d'un reactor CSTR.

Pel que fa a les margarines que es poden obtenir amb cada un dels reactors escolliríem la d'un reactor flux pistó isotèrmic pel seu menor contingut en àcid tipus trans, ja que la relació insaturats/saturats és molt semblant en els dos casos i per tant no ens permet discriminar cap dels dos tipus de reactor.



- Relació insaturats/saturats FP isotèrmic = 2,47
- Relació insaturats/saturats FP adiabàtic= 2,42

D.6- Elecció de les condicions òptimes per a hidrogenar oli de girasol per a elaborar margarina

D.6.1- Tipus de reactor

Un cop estudiat cada reactor i la composició de la margarina que tindriem en cada cas ja estem en situació de poder escollir.

Hem vist en els apartats anteriors que en el cas d'un reactor adiabàtic, tant si és CSTR com flux pistó, es forma una gran quantitat d'àcid elàidic, que com ja hem explicat és poc saludable des del punt de vista nutricional. Per tant, el reactor que ens permetria obtenir una millor margarina ha de ser isotèrmic.

Després d'haver escollit si treballem en condicions isotèrmiques o adiabàtiques s'ha de veure si és més adequat un reactor isotèrmic tipus CSTR o tipus flux pistó. Tal com veiem a l'apartat 9.1 és preferible treballar amb un reactor CSTR isotèrmic que amb un flux pistó isotèrmic ja que obtenim una margarina més saludable, amb menys àcid elàidic i amb una relació insaturats/saturats major.

D.6.2- Temperatura

En el nostre cas estudiarem quina de les dues temperatures a les que s'ha treballat és més apropiada per a fabricar margarina.

Per a comparar els casos anteriors, realitzats a 183°C, amb un cas a 210°C, escollirem unes condicions experimentals semblants a aquesta temperatura. Per a simular un cas a alta temperatura farem servir les condicions inicials de l'experiment 9, en el qual la composició a l'entrada del reactor és la mateixa que a l'experiment 20.3 (1% d'oli, 9% d'hidrogen i 90% de dimetilèter).



Simularem el cas d'un CSTR isotèrmic, ja que és el tipus de reactor òptim segons l'estudi que hem fet a l'apartat anterior.

A continuació presentem les fraccions màssiques obtingudes al fer la simulació del procés amb un reactor CSTR isotèrmic a 210°C:

Índex de iode (IV)	% Àcid linoleic	% Àcid oleic	% Àcid elàidic	% Àcid esteàric	% Àcid palmític	% Àcids saturats
136,0	64,1	19,5	0	7,1	7,9	15,1
119,0	59,4	20,5	2,2	8,7	7,9	16,6
90,62	51,8	21,0	06,2	11,7	7,9	19,6
68,0	46,1	20,6	9,7	14,4	7,9	22,3
49,7	41,6	19,9	12,6	16,7	7,9	24,6
41,8	39,7	19,5	13,9	17,7	7,9	25,6
34,5	38,0	19,0	15,1	18,7	7,9	26,6

Taula D.7- Predicció dels resultats amb un CSTR isotèrmic a 210°C.

Observem com la margarina que obtindríem en aquest cas (última fila de la taula) tindria una quantitat molt gran d'àcid elàidic.

Per tant la millor temperatura per a realitzar la hidrogenació d'oli de girasol amb dimetilèter i amb un CSTR isotèrmic és 183°C.

D.6.3- Percentatge d'hidrogen

Un cop escollit el reactor i la temperatura més favorables podem estudiar quin dels percentatges d'hidrogen amb els que hem treballat al laboratori ens permet obtenir una millor qualitat de l'oli hidrogenat.

A l'apartat D.2 ja hem fet una simulació del cas amb un 9% d'hidrogen. A continuació farem una simulació del procés realitzat amb un 4% i amb un 7%. Les condicions inicials que utilitzarem corresponen a l'experiment 8 i 9 respectivament.



A continuació s'exposen els resultats trobats per a cada una de les simulacions:

Índex de iode (IV)	% Àcid linoleic	% Àcid oleic	% Àcid elàidic	% Àcid esteàric	% Àcid palmític	% Àcids saturats
139,4	68,3	15,1	0	7,9	7,4	15,4
118,6	62,6	16,9	1,9	9,9	7,4	17,4
106	59,4	18,0	2,4	11,4	7,4	18,9
94,4	56,6	19,0	2,8	13,0	7,4	20,4
83,7	54,1	19,7	3,0	14,5	7,4	21,9
73,8	51,9	20,2	3,2	15,9	7,4	23,4
60,5	49,0	20,8	3,4	18,0	7,4	25,5
52,3	47,3	21,1	3,5	19,3	7,4	26,8

Taula D.8- Prediccions amb un CSTR isotèrmic, a 183°C i amb un 4% d'hidrogen.

Índex de iode (IV)	% Àcid linoleic	% Àcid oleic	% Àcid elàidic	% Àcid esteàric	% Àcid palmític	% Àcids saturats
139,4	68,3	15,1	0	7,9	7,4	15,4
129,6	65,7	15,5	1,1	9,0	7,4	16,5
110,9	61,1	16,8	2,0	11,3	7,4	18,8
93,7	57,2	17,7	2,5	13,8	7,4	21,3
78,1	53,9	18,3	2,8	16,3	7,4	23,8
63,8	51,0	18,6	3,0	18,7	7,4	26,2
57,2	49,6	18,7	3,0	19,9	7,4	27,3

Taula D.9- Prediccions amb un CSTR isotèrmic, a 183°C i amb un 7% d'hidrogen.

Amb les dades obtingudes de les tres simulacions realitzades amb un 4%, 7% i 9% d'hidrogen a 183°C realitzarem un gràfic on es representa el percentatge en massa de cada component de les tres margarines que obtindríem a partir d'aquests processos. Mitjançant aquest gràfic podrem veure quin percentatge d'hidrogen ens permet obtenir una margarina amb millors propietats.



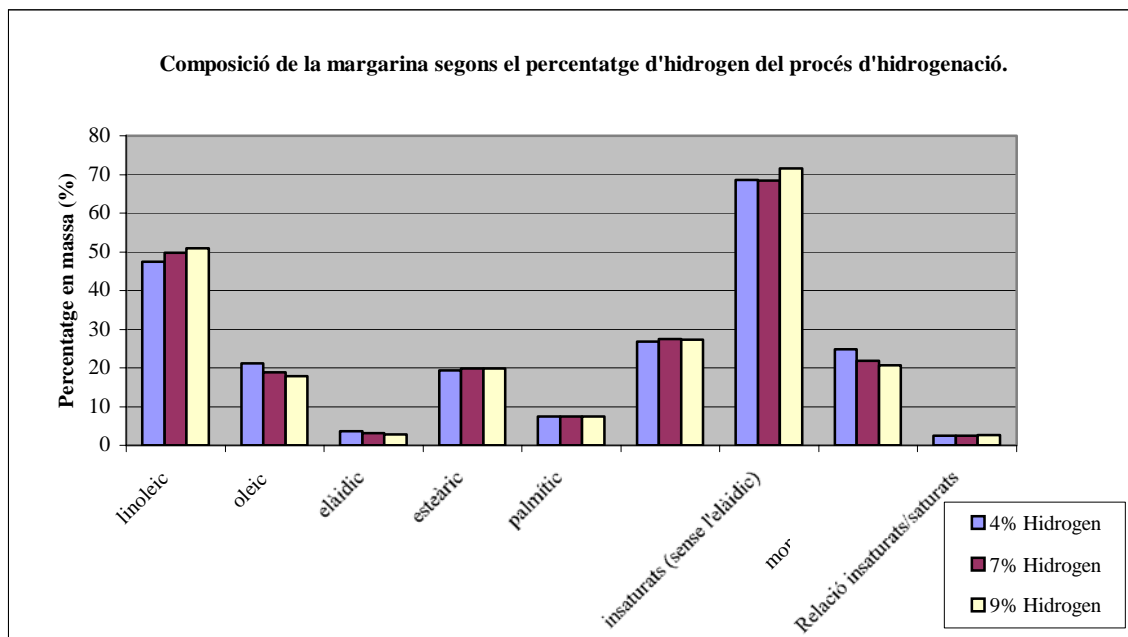


Figura D.5- Composició de la margarina segons el percentatge d'hidrogen utilitzat.

Analitzant el gràfic podem veure com el percentatge d'àcid elàidic és lleugerament menor en el procés amb un 9% d'hidrogen. A més a més el percentatge d'àcid linoleic és major en aquest cas que en els altres. Aquest últim aspecte s'ha de tenir en compte ja que l'àcid linoleic és un àcid gras essencial que el nostre organisme necessita i no pot sintetitzar. A més a més, tot i que la relació d'insaturats/saturats sembla la mateixa en els tres casos, és lleugerament superior en el cas d'un 9% d'hidrogen. A continuació mostrem aquests valors:

- Relació insaturats/saturats 4% d'hidrogen = 2,55
- Relació insaturats/saturats 7% d'hidrogen = 2,50
- Relació insaturats/saturats 9% d'hidrogen = 2,62

Per totes les raons anteriors podem considerar que el procés amb un 9% d'hidrogen és l'òptim per aquest procés.



D.6.4- Condicions de treball

A continuació fem un recull de les condicions òptimes per a hidrogenar oli de girasol per a elaborar margarina:

- *Reactor*: Reactor continu de mescla completa (CSTR)
- *Catalitzador*: 0,5% Pd sobre esferes de 2-4 mm Al_2O_3
- *Condicions*: Isotèrmiques
- *Temperatura*: 183°C
- *Percentatge d'hidrogen d'entrada*: 9%
- *Percentatge d'oli d'entrada*: 1%
- *Percentatge de dimetilèter d'entrada*: 90%

D.6.5- Composició de la margarina obtinguda

La margarina obtinguda sota aquestes condicions tindrà les següents característiques (extreta de la taula de l'apartat D.5.2):

Característica	Valor
IV	60,8
% Àcid linoleic	50,9
% Àcid oleic	17,8
% Àcid elàidic	2,8
% Àcid esteàric	19,8
% Àcid palmític	7,4
% Àcids saturats	27,3
% Àcids insaturats	71,6
% Àcids monoinsaturats	20,6
Relació Insaturats/Saturats	2,6

Taula D.10- Característiques de la margarina obtinguda sota les condicions proposades.

Aquests valors són els que obtindríem directament a la sortida del reactor. Observem com els percentatges dels components són propis de les margarines existents al mercat (Veure taula D.1). Aquest fet és molt important tenint en compte que les margarines



fabricades a partir del procés convencional s'elaboren després de realitzar varies hidrogenacions consecutives i de fer mescles de components fins aconseguir la composició desitjada. Per tant, hidrogenant l'oli de gira-sol sota les condicions indicades a l'apartat anterior s'aconseguiria una reducció de costos, temps i recursos important.

La conclusió que es pot treure d'aquest estudi és que cal tenir en compte l'aplicació dels solvents supercrítics en el procés d'hidrogenació d'olis vegetals per a elaborar margarina, ja que s'han pogut comprovar en aquest estudi les avantatges d'aquest nou procés proposat respecte el convencional.



D.7- Bibliografia

- [1] www. Revista Consumer.es, N°48 Octubre 2001
- [2] KING, JERRY W., Hydrogenation of Vegetable Oils Using Mixtures of Supercritical Carbon Dioxide and Hydrogen. JAOCS., Vol. 78, no. 2, 2001
- [3] PERRY, ROBERT H. et al., Perry's Chemical Engineers' Handbook. New York: McGraw-Hill 1984 Sixth Edition.

