

Métodos Numéricos en el Cálculo de la Concentración en el Equilibrio de la Obtención de Butadieno a partir de Etanol en fase Vapor

Carlos Espinoza 1, Diego Yupanqui 2, Luis Ramos 3

Facultad de Ciencias 1, Universidad Nacional de Ingeniería 1, e-mail: espinoza_mansilla@hotmail.com

Facultad de Ciencias 2, Universidad Nacional de Ingeniería 2, e-mail: dyupanquih@uni.pe

Facultad de Ciencias 3, Universidad Nacional de Ingeniería 3, e-mail: lramosg@uni.pe

El presente trabajo describe como utilizar métodos numéricos para la solución de problemas no lineales en el contexto de la obtención de butadieno a partir de etanol en fase vapor.

Palabras Claves: Métodos numéricos para sistemas no lineales, Etanol, Butadieno

This work describes how to use numerical methods in solution of non linear problems in the context of obtaining butadiene from ethanol in vapor phase.

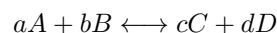
Keywords: Numerical methods for non linear systems, Ethanol, Butadiene

1. INTRODUCCIÓN

En la actualidad, reducir en gran medida el impacto medioambiental negativo de la actividad humana debería ser, si es que no lo es, prioridad para las grandes industrias y los gobiernos al rededor del mundo. Se sabe que una de las industrias que produce un gran impacto negativo en el medio ambiente es la industria del petroleo, desde la extraccion del mismo hasta la produccion de cada uno de sus derivados. En los Estados Unidos, el butadieno, un derivado del petroleo, ocupa el puesto 36 entre las sustancias quimicas de mayor produccion; recientemente se han desarrollado metodos para obtener butadieno ya no a partir del petroleo si no, a partir de etanol, una sustancia que se obtiene de fuentes renovables como el maiz, las algas y pastizales, lo que abre la posibilidad de adquirir una fuente renovable de plasticos. En este trabajo analizaremos una manera en particular de obtener butadieno a partir de etanol en fase vapor y usaremos metodos numericos para ecuaciones no lineales para hallar las concentraciones de etanol y butadieno en el equilibrio.

2. CONCEPTOS PREVIOS

*CONSTANTE DE EQUILIBRIO: La expresión de la constante de equilibrio(k) se escribe como el cociente del producto de concentraciones de los productos dividido por el de los reactivos.

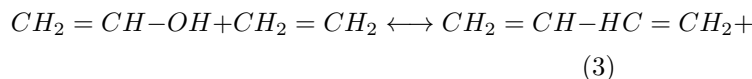
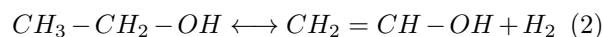
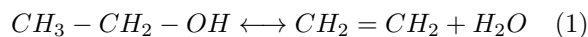


$$k = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b}$$

* COMBINACIÓN DE LAS EXPRESIONES DE LAS CONSTANTES DE EQUILIBRIO: Para obtener la constante de equilibrio de la reaccion neta resultante cuando se combinan ecuaciones, es decir, cuando se suman, deben multiplicarse las constantes de equilibrio de las ecuaciones individuales.

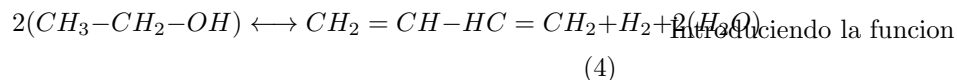
3. ANÁLISIS

Tenemos el siguiente método de obtención de butadieno a partir de etanol en fase vapor:



Con sus correspondientes constantes de equilibrio a $400^\circ C$ y $1atm$ $k_1 = 5,97$, $k_2 = 0,27$, $k_3 = 2,8$.

Sumando las 3 ecuaciones obtenemos la siguiente ecuacion:



Y su correspondiente constante de equilibrio a $400^{\circ}C$ y 1atm $K = k_1.k_2.k_3$

Sea Q la concentracion inicial de etanol, usando las formulas para el calculo de la constante de equilibrio tenemos:

$$K = \frac{(x)(x)(x)^2}{(Q-x)^2} \quad (5)$$

Operando, llegamos a la expresion:

$$x^4 - Kx^2 + 2KQx - KQ^2 = 0 \quad (6)$$

Introduciendo la funcion

$$f(x) = x^4 - Kx^2 + 2KQx - KQ^2$$

tenemos que estamos ante el problema de encontrar x tal que $f(x) = 0$ con f no lineal, para lo cual utilizaremos los siguientes metodos:

4. OBSERVACIONES

5. CONCLUSIONES

-
1. Jaan Kiusalaas, *Numerical Methods in Engineering with Python*. Cambridge University Press **37** (2010).
 2. Mathews J., Fink K, *Métodos numéricos con MATLAB*. Prentice Hall **37** (2000).
 3. L.Héctor Juárez V.,
 4. Ralph H., F. Geoffrey, Jeffry D., Carey B., *Química General Principios y aplicaciones modernas*. Pearson **655** (2011). *Análisis Numérico*. Universidad Autónoma Metropolitana **37** (2008).