Informe de proyecto de investigación de Ecuaciones diferenciales

**Docente**

Jesús Alberto León Tordecilla

**Integrantes**

Luisa Fernanda Chacón

Juan Mosquera

Sebastián Barragán

Santiago Pérez Solano

Wilfredo Quintana

**Estudiantes de**

Ingeniería De Sistemas

**Universidad del Sinu seccional Cartagena**

1. **Fase 1**

Este proyecto busca modelar cómo cambia la concentración de biocombustible en un recipiente agitado de forma manual o con medios simples, como una bomba de aire o un motor casero, estudiando cómo varía la concentración de biocombustible en el tiempo cuando se mezclan dos líquidos a caudales constantes.

|  |  |
| --- | --- |
| Fase 1 | |
| **fase** | **Elección del tema:**  Modelado de mezclas |
| **Tareas** | **Escriba el tema de investigación:**   Mezcla de componentes para la creación de biocombustible.  **Escriba una descripción breve del problema:**  En contextos educativos o de pequeña escala, como laboratorios universitarios o talleres comunitarios, se experimenta con la producción de biocombustible a partir de aceite reciclado. Para su uso en motores, este biocombustible es de gran utilidad por su poder calorífico, y su accesibilidad para crearlo en base a una cierta cantidad de componentes en sus proporciones adecuadas.  **Escriba la pregunta de investigación para el tema elegido**  ¿Cómo se puede formular un modelo matemático, utilizando ecuaciones diferenciales, para determinar la proporción óptima de una mezcla en base a las proporciones de componentes para crear biocombustible que genere suficiente poder calorífico?  **Escriba los objetivos, general y específicos de la investigación**  Como objetivo general queremos modelar y resolver una serie de ecuaciones diferenciales que describa la dinámica de mezcla continua de biocombustible con diésel, utilizando parámetros estimados y condiciones realistas.  Como objetivos específicos tenemos:   1. Formular el modelo matemático con hipótesis simples y coherentes con el entorno del curso. 2. Resolver analíticamente la ecuación diferencial obtenida. 3. Simular escenarios con parámetros estimados y comparar con la solución analítica. 4. Evaluar el tiempo necesario para alcanzar una concentración objetivo de biocombustible. |

1. **Fase 2**

La formulación del modelo matemático es crucial para traducir el problema de mezcla con algo más simple y sencillo de entender ya que de esta manera puede ser analizada, resuelta y hasta simulada.

|  |  |
| --- | --- |
| Fase 2 | |
| Fase | **Formulación del modelo matemático** |
| Tareas | **Modelo para la producción de biodiésel**   * **Identifiquen las variables más importantes. Debe determinar las variables que sean significativas y las que pueden ser ignoradas.**   **Variables importantes:**   * : **Concentración de triglicéridos** (aceite). () * : **Concentración de metanol** (alcohol, reactivo). () * : **Concentración de éster metílico** (biodiésel). () * : **Concentración de glicerina** (subproducto). () * : **Tiempo** (horas).   Parámetros significativos   * : constante de velocidad de la reacción. * : constante efectiva pseudo primer orden. (Solo si en hay un exceso). * : volumen del recipiente (L). * : concentración de catalizador.   **Variables que pueden ser ignoradas inicialmente:**   * Transferencia de masa interfacial entre fases. * Evaporación de metanol. * Reacciones laterales menores. * **Formulación de la Ley**   **Ley de acción de Masas**   se asume que la velocidad de una reacción química es proporcional al producto de las concentraciones de los reactivos, cada una elevada a un exponente que representa su orden en la reacción.  En nuestro caso los reactivos son:  1. Triglicérido (La concentración de ).  2. Metanol (La concentración de ).     Entonces la velocidad de reacción se reescribe de la siguiente manera:    el viene de la estequiometría de la reacción (3 mol de metanol reaccionan por cada 1 mol de triglicérido).  donde:   * + : velocidad (cuánto biodiésel se forma por unidad de tiempo y volumen)   + : constante de velocidad (depende de temperatura, catalizador, etc.)   + : concentración de triglicéridos (disminuye)   + : concentración de metanol (disminuye) * **Balances de materia**   Cada componente varia en base a cuanto participe en la reacción, y como la reacción tiene relaciones fijas:  Aceite (Triglicéridos).  Alcohol (Metanol).  Etanol.  Glicerina.  Donde:   * + El signo – indica que el reactivo se consume.   + El signo + indica que el producto se forma.   + El factor 3 aparece por la proporción estequiométrica de 3:1 entre metanol y triglicérido. * **Aproximación práctica**   En laboratorios e industrias el Metanol se utiliza bastante, así que la concentración de este no varía mucho, es decir, lo podemos tratar como una constante.  Ahora el termino se puede reemplazar por una constante definiendo una nueva constante:  Entonces el modelo se simplifica a ED lineales de primer orden:  Aceite (Triglicéridos).  Etanol.  Glicerina.   * **Interpretación Física.**    + representa la aparente rapidez general de la transformación, ya considerando esto el exceso de metano.   + Esta ecuación: es usual en procesos de decaimiento exponencial. Donde su solución es:   Esto indica que la cantidad de aceite disminuye rápidamente con el tiempo.   * + Y como los productos se crean a la misma velocidad que se consumen los reactivos tenemos algo así:   Etanol.  Glicerina  Se pudo formalizar el proceso químico mediante la ley de acción de masas y Ecuaciones diferenciales. A su vez comprendimos la simplificación a un sistema de pseudo primer orden, variando respecto al componente y su estequiometría.   * **Identificación de variables**   Variables dependientes   * : **Concentración de triglicéridos** (aceite). () * : **Concentración de metanol** (alcohol, reactivo). () * : **Concentración de éster metílico** (biodiésel). () * : **Concentración de glicerina** (subproducto). ()   Variables independientes   * : **Tiempo** (horas).   Constantes del Modelo   * : constante de velocidad de reacción. * : constante de velocidad aparente. * : concentración inicial de metanol. * : concentración de catalizador. * : volumen del reactor. * rpm: velocidad del recipiente. * **Formulación Modelo Básico**   Para poder modelar la producción del biocombustible por el proceso de transesterificación de aceite reciclado con metanol planteamos un modelo basado en la ley de acción de masas. teniendo en cuenta que la velocidad de la reacción es proporcional a la cantidad de producto concentrado de los reactivos.  Aplicando la ley de acción de masas, la velocidad de reacción queda tal que:  Donde:   * . Es la concentración de triglicéridos. * . Concentración de metanol. * . Es la constante de velocidad de reacción. * . Es el tiempo en horas.   El balance de materia para los triglicéridos esta dado por:  Donde es la velocidad (cuánto biodiésel se forma por unidad de tiempo y volumen)  Sustituyendo la expresión de la velocidad  Esta ecuación diferencial representa la variación temporal de los triglicéridos durante la reacción.  **Simplificando con el modelo pseudo primer orden**  En laboratorios e industrias el Metanol se utiliza bastante entonces se puede tratar como una constante.  por ende, la ecuación se simplifica definiendo una constante:  Ahora el modelo básico se reduce a:  Triglicéridos (aceite).  Etanol.  Glicerina.  Donde la condición inicial es  Quedando las Ecuaciones Diferenciales simplificadas con cada una de las variables dependientes e independientes donde las dependientes son las concentraciones de los componentes y la independiente el tiempo   * **Refinar el modelo según lo necesario**   En el modelo básico asumimos que el metanol se mantiene constante, y que la reacción ocurre de manera homogénea, pero dependiendo del experimento podemos observar que, si estas condiciones no se cumplen completamente, el modelo puede mejorar en ciertas maneras.   * Consumo del metanol   si la concentración del metanol cambia con el tiempo, podemos usar la siguiente formula general.  junto con una ecuación adicional para .   * Pasar por fases intermedias (TG → DG → MG → G):   donde permitimos representar las formaciones del producto intermedio ajustando así los datos experimentales. Estas son las etapas internas del proceso químico de transesterificación:   * TG = Triglicérido (aceite original) * DG = Diglicérido * MG = Monoglicérido * G = Glicerina   Cada una se puede modelar con su propia constante de velocidad (). Esto se llama modelo por pasos.  En conclusión, el modelo básico de primer orden es suficiente para la práctica de laboratorio, pero puede refinarse si se busca mayor precisión o se dispone de datos experimentales más detallados. |

1. Fase 3

Ya formulado el modelo matemático pasamos a resolver la ED para poder conseguir una solución analítica.

|  |  |
| --- | --- |
| Fase 3 | |
| Fase | Solución del Modelo |
| Tareas | **Solución de la ecuación diferencial**  Teniendo la ecuación diferencial general tal que: Etanol.  La solución analítica de esta ecuación diferencial es de orden separable:  Aplicamos la condición inicial:  Reescribimos  **Expresiones para los productos**  En base a la estequiometria de la reacción:  Etanol (alcohol).  Glicerina.  **Prueba del modelo**  Una vez resuelto el modelo matemático analizamos como este resultado actúa bajo parámetros simulados en base a concentraciones aplicadas en un experimento, con la herramienta Matlab para graficar los resultados, y a su vez generando un código que simule una predicción bajo condiciones experimentales.  Podemos ver en esta grafica que los triglicéridos disminuyen exponencialmente en base al tiempo, el biodiesel aumenta rápidamente y luego se estabiliza, la glicerina aumenta de manera similar al biodiesel, pero más lenta.  Lo que podemos notar es que:   * A medida que avanza el tiempo, el aceite se transforma en biodiésel y glicerina. * Las curvas que suben muestran la formación de productos, y la que baja, la disminución del reactivo. * La curva de conversión indica qué tanto de tu aceite inicial ya reaccionó. * Solo se alcanzó aproximadamente un 30 % de conversión, puede que le haya faltado más tiempo para reaccionar bien.   Intentemos de nuevo, pero ahora con 18 horas para que suceda la reacción  Aquí podemos notar lo siguiente:   * El aceite disminuye casi por completo ya que se ha consumido en la reacción. * El biodiésel aumenta hasta su punto máximo es el producto principal formado. * La glicerina también crece, pero menos ya que es el subproducto. * La conversión (%) sube hasta cerca del 90 %, indicando que la reacción está casi completa.   En resumen:  En 18 horas, el aceite se transforma casi totalmente en biodiésel y glicerina, mostrando un proceso de reacción muy avanzado. |

1. Fase 4

|  |  |
| --- | --- |
| Fase 3 | |
| Fase | Prueba del Modelo |
| Tareas | 1. **¿Son razonables las hipótesis?**   Sí. La principal hipótesis es el modelo de pseudo primer orden. En esta se basa en que asumimos que la concentración del metanol permanece constante  Esta es una hipótesis razonable en el contexto práctico, ya que el metanol se utiliza en un exceso significativo para impulsar la reacción química hacia la formación de productos (Éster Metílico/Biodiésel y Glicerina).   1. **¿Son dimensionalmente consistentes las ecuaciones?**   Si. la ecuación diferencial para los triglicéridos queda tal que:     * la concentración del lado izquierdo es tal que: * la dimensión del lado derecho es la:   + Como absorbe la concentración constante de metanol , y su unidad debe de ser . Ambos lados tienen las mismas dimensiones, por lo que la ecuación es consistente.      1. **¿Es el modelo internamente consistente, en el sentido de que las ecuaciones no se contradicen entre sí?**   Sí. Ya que el modelo es consistente porque respeta la Ley de Acción de Masas y la Estequiometría.   * Para la ley de acción de masas la velocidad del consumo del reactivo , es directamente proporcional a la velocidad con la que se crea el biodiesel y glicerina . * El factor estequiométrico 3:1 entre el biodiésel y la glicerina se mantiene en las soluciones, la tasa de formación de biodiesel es y la de la glicerina es  1. **¿Tienen soluciones las ecuaciones importantes? ¿Son únicas las soluciones? ¿Qué tan difícil es obtener las soluciones?**  * ¿Tienen soluciones? Sí. La Ecuación Diferencial:     es de orden separable.   * ¿Son únicas? Sí. Al ser una Ecuación Diferencial Lineal de Primer Orden, la solución analítica es única dada la condición inicial . * ¿Qué tan difícil es obtener la solución? Fácil. La solución analítica se obtuvo mediante integración directa y separación de variables:  1. **¿Proporcionan estas soluciones una respuesta al problema en estudio?**  * El modelo de reacción responde a cómo se forman las proporciones de componentes (biodiésel y glicerina) en el tiempo, lo cual es fundamental para el objetivo de determinar la proporción óptima de una mezcla. * Además, el Modelo de Mezcla (refinamiento) resuelve directamente el objetivo de evaluar el tiempo necesario para alcanzar una concentración objetivo de biocombustible.  1. **¿Qué variaciones puedo hacer a las constantes?**   La constante principal del modelo es la constante de velocidad aparente, .   * En podemos variar ajustando la temperatura o la concentración del catalizador (que afecta ). * , también se puede variar ajustando el exceso de metanol dado que * Como efecto podemos Variar , esto afecta directamente la velocidad con la que la concentración de aceite disminuye y la concentración de biodiésel aumenta.  1. ¿**Qué variaciones puedo hacer a las condiciones iniciales?**   La condición inicial principal es la concentración inicial de triglicéridos, .   * es la concentración inicial de aceite reciclado en el reactor. * Como resultado podemos variar no afecta la rapidez de la reacción, pero sí afecta la cantidad máxima de producto que se puede formar, ya que el producto máximo es directamente proporcional a por ejemplo, . |

* Acosta-Rubio, D., Castro-Camacho, L., & Moreno-Arias, C. A. (2021). Pirólisis rápida para producir biocombustibles con residuos sólidos urbanos: estudio de caso, Madrid, Cundinamarca. *Gestión y Ambiente*, *24*(Supl3), 47–58.
* Barón-Molina, M. J. (2013). *Modelo de programación matemática para la cadena productiva del biocombustible biodiésel, en el departamento del Meta, Colombia*. (Tesis de pregrado). Repositorio Institucional Universidad Católica de Colombia.
* Felder, R. M., & Rousseau, R. W. (2019). *Elementary Principles of Chemical Processes*. Wiley.
* HRom. (2024, 8 de septiembre). *HAZ COMBUSTIBLE POR MUY POCO DINERO - BIODIÉSEL* [Video]. YouTube. <http://www.youtube.com/watch?v=K87LU6d21w0>
* MATLAB (versión R2023b). (2023). Natick, Massachusetts: The MathWorks Inc.
* Ministerio de Minas y Energía (2021). *Resolución 40421 de 2021*. <https://fedebiocombustibles.com>
* Zill, D. G. (2018). *A First Course in Differential Equations*. Cengage.