

Modelado del Tiempo de Reacción para Catalizadores Homogéneos en la Producción de Etanol

Modelling of the reaction time for homogeneous catalysts in the ethanol production

Aldo Chacín

Universidad Rafael Urdaneta. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Química. Maracaibo, Venezuela.
Email: aldodanicu@gmail.com

Jean Morles

Universidad Rafael Urdaneta. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Química. Maracaibo, Venezuela.
Email: jeanmorles21@gmail.com

Arelis Arrieta

Universidad Rafael Urdaneta. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Química. Maracaibo, Venezuela.
Email: ingarelisarrieta@gmail.com

Recibido: 07-06-2021

Aceptado: 06-06-2021

Resumen

El estudio tuvo como propósito determinar el tiempo de reacción para catalizadores homogéneos en la producción de etanol a partir de yaretanol mediante el modelado en un programa Microsoft Office Excel®. La investigación se realizó enmarcada en un enfoque descriptivo, considerado como un estudio no experimental, que presenta un diseño cuantitativo y cualitativo. La recolección de la información se obtuvo en cuatro (4) fases ejecutadas por los investigadores. Se aplicó la técnica de observación documental y como instrumento la recopilación de informaciones obtenidas de materiales bibliográficos y tecnológicos: mediante el diseño del programa en la hoja de cálculo Microsoft Office Excel® para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizaron y que están directamente vinculados con las reacciones homogéneas que cumplan con las condiciones del programa, de no cumplir con las condiciones se deben ajustar los parámetros para poder utilizar exitosamente el programa.

Palabras clave: Yaretanol, catalizadores, simulación, etanol.

Abstract

The purpose of the study was to determine the reaction time for homogeneous catalysts in the production of ethanol from yaretanol by means of the model in Microsoft Office Excel® program. The research was carried out within a descriptive approach, considered as a nonexperimental study, which presents a quantitative and qualitative design. The information collection was obtained in four (4) phases carried out by the researchers. The documentary observation technique was applied and the collection of information obtained from bibliographic and technological materials was applied as an instrument: through the design of the program in the Microsoft Office Excel® spreadsheet to calculate the reaction time of the homogeneous catalysts that are directly related to the homogeneous reactions that meet the conditions of the program, if the conditions are not met, the parameters must be adjusted to be able to use the program successfully.

Keywords: Yarethanol, catalytic converters, simulation, ethanol.

Introducción

Este artículo trata sobre el modelado del tiempo de reacción para catalizadores homogéneos en la producción de etanol, para lo cual fue necesario analizar y estudiar sistemas complejos que le permitieran reunir información pertinente sobre el comportamiento del sistema, porque se ejecuta un modelo computarizado y de acuerdo a los criterios de Winston [1, Pág.567] y limita el funcionamiento de un procedimiento del mundo real

cuando evoluciona en el tiempo, para estimar las medidas de desempeño del sistema modelado.

Referente a la intensificación de las catástrofes, que en la actualidad se atribuyen principalmente al calentamiento global, el cual estaría potenciado por la acumulación de gases invernaderos (Dióxido de Carbono, Metano, Óxido Nitroso y compuestos Halógenos), en la atmósfera y en donde la combustión de los derivados del crudo contribuye ampliamente a intensificar la problemática: siendo el petróleo, la principal fuente de energía a nivel industrial, que le aporta la pertinencia de este estudio, cuando se enfatiza en las preocupaciones ambientales de todas las naciones como factor de vida y aspecto clave dentro de los aspectos económicos de cada nación.

Desde esta perspectiva, en esta investigación se planteó la generación de alternativas energéticas distintas a las ya convencionales, obtenidas principalmente de la explotación del petróleo, que ha conllevado al uso de materias primas naturales, dando lugar a los llamados biocombustibles, dentro de los cuales destaca el bioetanol, que tiene las mismas características y composición química que el etanol, ya que se trata del mismo compuesto, sin embargo, la diferencia radica en su proceso de producción, como en este caso particular objeto de estudio.

A tal efecto, el bioetanol ha de ser obtenido desde biomásas azucaradas, amiláceas y celulósicas; no pudiendo obtenerse del petróleo; en consecuencia, Izquierdo Ma. C, et al [2,Pág.89] se refieren que los licores que se proceden de la fermentación del azúcar de alguna planta se pueden denominar como bioetanol, realizando para ello pretratamientos viables en cuanto al proceso, sin dejar de lado la factibilidad económica, la facilidad para la obtención de materias primas y tomando en cuenta el uso de microorganismos, hongos y/o bacterias modificadas, combinadas, entre otras, para la potencialización de estas en la fermentación de azúcares y posterior obtención de Bioetanol.

Siendo este, un alcohol altamente conocido en la industria de los alimentos, también puede utilizarse como biocombustible cuando su pureza es cercana al 100% o también puede mezclarse con gasolina en cantidades variables para reducir el consumo de los productos derivados del petróleo. Actualmente, los países de mayor producción y mejores alternativas en desarrollo de programas significativos para la fabricación de bioetanol como combustible son: Estados Unidos (a partir de maíz), Brasil y Colombia (ambos a partir de caña de azúcar).

En tal sentido, Brasil es considerado como el segundo productor de bioetanol del mundo, con 33,2% de participación en el mercado, detrás de Estados Unidos, responsable de 54,7% de la producción mundial, según datos de 2009; Colombia, en tanto, figura en el décimo lugar de países productores, con 0,4%, que hacen referencia de la pertinencia del uso del bioetanol como posible combustible en el futuro en el mundo. Comisión Económica para América Latina y el Caribe [3].

En este orden de ideas, el mundo se ha percatado de la necesidad de cambiar los patrones de producción y consumo de combustibles fósiles, sin sacrificar la producción de alimentos, ya que el petróleo, además de ser no renovable, su mal manejo ocasiona graves problemas a la naturaleza.; pero también es necesario luchar contra el hambre en el mundo: tarea para la ciencia y la tecnología: para pensar cómo superar estos problemas y, más bien, aumentar la producción de alimentos y fuentes de trabajo, objeto de este estudio al investigar el yaretanol o petróleo verde, un compuesto químico proveniente de un desecho líquido proveniente de la yuca amarga.

Sin embargo, debido al largo proceso que lleva a la obtención final del bioetanol a partir del yaretanol se aplicaron distintos catalizadores homogéneos y heterogéneos para determinar cuál de ellos resulta ser más eficiente y reduce el tiempo de producción, por lo que resulta significativo aclarar que este tipo de análisis sí se realiza de manera experimental es muy extenso debido a los largos períodos de prueba; por estas razones se desarrolla en esta oportunidad investigativa mediante un programa amigable basado en macroinstrucciones con el paquete de Microsoft Office Excel©, según los criterios de Mills W [4, Pág.456]. Ya que, este ahorra tiempo y disminuye el error, es de fácil acceso y uso, sin ningún costo agregado para la utilización del mismo.

Para dar respuesta al propósito del estudio al determinar el tiempo de reacción para catalizadores homogéneos en la producción de etanol a partir de yaretanol, es necesario aplicar un sistema modelado a través del programa Microsoft Office Excel: para establecer las cinéticas de reacción de los catalizadores homogéneos que se requieren para identificar los procedimientos requeridos en el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizaron.

En consecuencia, la labor científica de este estudio gira en torno a la producción de etanol, que ofrece diversas ventajas sobre los derivados del petróleo, como son los menores precios de las importaciones, y a nivel económico la disminución en el costo del combustible, mayor seguridad energética de los países, así como socialmente la reducción de la contaminación, puesto que se ha comprobado que en términos de generación de gases invernaderos, el etanol reduce la producción de estos gases invernaderos los cuales se generan con la gasolina.

Así mismo, su relevancia examinada, determina que el uso de etanol para ser mezclado con la gasolina no ha tenido ningún efecto negativo en los motores de los automóviles, siendo un oxigenante de la gasolina, que mejora su octanaje de manera considerable y a su vez también reemplaza aditivos nocivos para la salud humana: y el propósito de este estudio es comprobarlo a través de la validación del programa propuesto para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizaron.

Materiales y Métodos

Esta investigación se desarrolló considerando algunas bibliografías claves, procedente de publicaciones de revistas, artículos, información sobre el programa Microsoft Office Excel con una versión electrónica, teorías, así como trabajos de grado, constituyéndose en un compendio de información, sobre criterios, diseño y operación de equipos (computadora), en conjunto con resultados de estudios previos, permitiendo facilidad para desarrollar un modelo de simulación del tiempo de reacción para catalizadores homogéneos en la producción de Etanol.

Para la elaboración de este artículo se manejó el programa Microsoft Office Excel desde una versión electrónica que ejecuta en una hoja de papel tabulada, que consiste en numerosas filas y columnas, la intersección de una fila y una columna se denomina celda, que representa la unidad básica de la hoja de cálculo donde se introduce en una celda, los tipos de datos que puedes escribirse que son: alfanuméricos, fecha, hora, fórmulas, entre otros aspectos de interés para un usuario determinado; otra gran ventaja que tiene Microsoft Office Excel, como la habilidad de poder ser utilizado por el usuario y crear sus propias fórmulas usando la programación de Visual Basic para Aplicaciones, con en este caso particular objeto de estudio.

Dicha herramienta tecnológica fue de gran significación para la simulación del tiempo de reacción requerido para catalizadores homogéneos en la producción de etanol, de una manera óptima y eficiente, sumado a esto también se empleó una interfaz gráfica, facilitando tanto el ingreso de datos como la interpretación de los resultados; para elaborar gráficas comparando el proceso a diferentes condiciones de operación. Para cumplir los objetivos previamente mencionados se llevaron a cabo estas cuatro (4), experiencias:

Establecimiento de las cinéticas de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizaron

En esta fase para el establecimiento de los distintos tipos de cinética requeridos para la reacción adecuada, se basaron en los fundamentos, parámetros y conceptos básicos; para lo cual la información fue obtenida mediante la búsqueda bibliográfica, se comparó entre sí, y se procedió a seleccionar los autores que sus teorías otorgaban una información más completa acerca de cinética de reacciones químicas; debido a que en esta investigación de acuerdo a su objeto de estudio se requirieron aspectos del comportamiento de las reacciones de los catalizadores y la variación de su velocidad, para lo cual se planteó la cinética de reacciones homogéneas, que para desarrollarlas se necesitó de la revisión de las siguientes consideraciones para la realización del programa Microsoft Office Excel cuyos materiales requeridos fueron las siguientes:

1. La condición obligatoria que el diseño debió cumplir para su implementación del modelo de simulaciones: es la hoja de cálculo Excel® mediante la plataforma Microsoft Office, fue de fácil manejo, y accesible con el usuario investigador, y acorde a los requerimientos que la cinética de reacción implica.

2. Se evidenció que el programa de cálculo Excel solo sirve para reacciones homogéneas que cumplen con las condiciones del programa. De lo contrario se debe ajustar los parámetros para utilizar exitosamente esta herramienta tecnológica en la ingeniería química.

3. Las unidades utilizadas fueron las del sistema internacional, para obtener los datos en otras unidades que se debieron realizar en la conversión antes de entrar al programa de cálculo Excel®, para evitar resultados errados.

4. Fue necesario conocer por parte del usuario investigador los datos de la reacción pedidos por la hoja de cálculo para la correcta ejecución del programa.

Identificación de los procedimientos para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos que se emplearon

En esta fase se debió producir la identificación de los procedimientos para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizaron; para lo cual se elaboró un procedimiento de tratamiento de la información paso a paso para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos creando una secuencia lógica de cálculo que facilitó el entendimiento de los mismos, esto se basó en la bibliografía evaluada en la fase I, que se organizó de manera ordenada y secuencial en cada paso del estudio; en tal sentido, para lograr este objetivo se elaboró un procedimiento paso a paso creando una secuencia lógica de cálculo Excel que facilitó el entendimiento de los mismos; a pesar de ser no muy extenso, suele ser algo complicado debido a la facilidad con la cual puede ser alterada una reacción química, tal como sucedió en la ley de velocidad en función de la concentración de las sustancias que toman parte en la reacción y que normalmente tiene la forma. Se provocó mediante la siguiente ecuación detallada a continuación:

$$v = k [\text{REACTIVO}]^x$$

Ecuación. Ley de velocidad en función de la concentración de las sustancias en reacción

Donde:

v = Velocidad de reacción.

[Reactivo] = concentración del reactivo.

x = Orden de ración.

De allí, que para la determinación de la velocidad de reacción fue necesario conocer el orden de la reacción que se está evaluando, aquí se muestra las diferentes formas se puede tomar la ley de velocidad. Izquierdo [5]. Tomando como referencia la Tabla 1 de la Ley de velocidad integrada referida a continuación:

Tabla 1. Ley de velocidad integrada

Ley de velocidad	Forma integrada
$v = \frac{-d[A]}{dt} = k[A]^0 = k$	$[A] = [A]_0 - kt$
$v = \frac{-d[A]}{dt} = k[A]$	$\ln \frac{[A]}{[A]_0} = -kt$
$v = \frac{-d[A]}{dt} = k[A]^2$	$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt$
$v = \frac{-d[A][B]}{dt} = k[A][B]$	$\frac{1}{[A]_0 - [B]_0} \ln \frac{[B]_0 [A]}{[A]_0 [B]} = kt$
$v = \frac{-d[A]}{dt} = k[A]^n$	$\frac{1}{[A]^{(n-1)}} = \frac{1}{([A]_0^{(n-1)})} + (n-1)kt$

Dónde:

$[A] = [B]$ Concentración de reactivo en un tiempo.

$[A]_0 = [B]_0$ Concentración inicial del reactivo.

$t_{1/2}$ Tiempo de vida media.

De igual manera, al aplicar la ecuación Arrhenius se demostró que los datos de la constante k (T) para muchas reacciones podían ajustarse por medio de la ecuación, la cual es muy importante, ya que esta determina la constante de velocidad y energía de activación de las reacciones, según esta ecuación presentada a continuación:

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Ecuación. Arrhenius

Dónde:

K = Constante de velocidad.

T = Temperatura absoluta.

R = Constante universal de los gases.

E_a = Energía de activación de Arrhenius.

A = Factor pre-exponencial o el factor A de Arrhenius.

Nota: A y E_a son constantes características de la reacción. Las unidades de A son las mismas que las de k. Las unidades de la E_a son generalmente k cal/mol o k J/mol.

Desde este contexto, la ecuación de Arrhenius en forma logarítmica, se obtiene de la ecuación de una recta teniendo como pendiente ($-E_a/R$), la cual es usada para obtener gráficamente la energía de activación, a través de esta ecuación que se sintetiza a continuación:

$$\ln k = \left(-\frac{E_a}{R} \right) \left(\frac{1}{T} \right) + \ln A$$

Ecuación. Ecuación de Arrhenius en forma logarítmica

Dónde:

K = Constante de velocidad.

T = temperatura absoluta.

R = Constante universal de los gases.

E_a = Energía de activación de Arrhenius.

A = Factor pre-exponencial o el factor A de Arrhenius.

La constante de Arrhenius permitió concluir que también es útil también para determinar el valor de la constante de velocidad de una misma reacción a otra temperatura; la cual se sustituye en la ecuación de Arrhenius los valores de K_1 ; T_1 y K_2 ; T_2 , para dos casos hipotéticos, especificada en la ecuación siguiente:

$$\ln\left(\frac{k_1}{k_2}\right) = \left(\frac{E_a}{R}\right)\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

Ecuación. Valor de la constante de velocidad en una misma reacción a otra temperatura

Dónde:

K_1 = Constante de velocidad a la temperatura 1 (T_1).

K_2 = Constante de velocidad a la temperatura 2 (T_2).

T_1 = temperatura absoluta (T_1).

T_2 = temperatura absoluta (T_2).

R = Constante universal de los gases.

E_a = Energía de activación de Arrhenius.

La velocidad de reacción se define entonces como la variación de moles de A en el tiempo, con la siguiente ecuación:

$$r_A = -\frac{1}{V} \left(\frac{dN_A}{dt} \right)_{\text{reacción}} = \frac{(\text{moles de A que desaparecen por reacción})}{(\text{unidad de volumen})(\text{unidad de volumen})}$$

Ecuación. Variación de los moles en el tiempo

En consecuencia, en los sistemas homogéneos la velocidad de reacción depende de la composición de las sustancias en la fase considerada de esta forma se ve expresada en función de quien está actuando la velocidad de reacción, tal como detalla en la siguiente ecuación.

$$r_A = f(\text{temperatura, composición})$$

Ecuación. Composición de sustancias

En este orden de ideas, las condiciones isotérmicas son la expresión para la velocidad de reacción que esté constituida por dos factores: uno dependiente exclusivamente de la concentración y otro dependiente exclusivamente de la temperatura, en la siguiente ecuación:

$$r_A = k \times f'(\text{composición})$$

Ecuación. Condiciones isotérmicas para la velocidad de reacción

Donde:

k = Se denomina constante cinética de la reacción.

r_A = Expresión de la ecuación cinética.

La Expresión de Arrhenius de dependencia con la temperatura que se puede traducir tal como se detalla en la ecuación siguiente:

$$k = k_0 e^{-E_a/RT}$$

Ecuación de Arrhenius de dependencia con la temperatura

Dónde:

k_0 = Independiente de la temperatura,

E_a = Energía de activación de la reacción

R = Constante universal de los gases.

Donde la ecuación de equilibrio para la reacción indica que muchas estas reacciones reversibles pueden considerarse como una combinación de dos reacciones elementales, una en sentido directo y otra en sentido inverso, tal como se distingue en la siguiente ecuación:

$$K_{eq} = \frac{k_1}{k_2} = \left[\frac{C_R C_S}{C_A C_B} \right]_{equilibrio}$$

Ecuación. De equilibrio para la reacción

Donde:

K_{eq} = Constante de equilibrio para esta reacción reversible compuesta por dos reacciones elementales.

K_1 = Constante de velocidad de la reacción directa.

K_2 = Constante de velocidad de la reacción inversa.

Y, donde la variable termodinámica es la constante de equilibrio que está relacionada también con variables termodinámicas, según la siguiente ecuación:

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K$$

Ecuación. Variable termodinámica

Donde:

ΔG = Variación de energía libre en la reacción.

R = Constante universal de los gases.

T = Temperatura absoluta.

Diseño del programa en la hoja de cálculo Microsoft Office Excel por medio de la temperatura para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizarán

Una vez identificados los criterios y fórmulas a utilizar, se procedió a estructurar el modelo de simulación en hoja de cálculo Microsoft Office Excel, mediante el empleo del simulacro en la función programador; para la realización de dicho modelo, fue necesario la revisión documental, también tuvo mucha importancia y vitalidad en el proceso investigativo conocer la herramienta principal para la elaboración de la misma, es decir, el programa Microsoft Office Excel, el cual es una herramienta accesible, ya que no necesita de instaladores secundarios, códigos de acceso, o compra de patentes, solo un ordenador que tenga instalado el paquete Microsoft Office Excel.

Es decir, el uso de estas hojas de cálculo para formular programas que permitan realizar cálculos rigurosos de manera automática mediante macros y el lenguaje VBA (Visual Basic for Applications), tal como el que fue el empleado en esta investigación, y ya familiarizados con la hoja de cálculo, se procedió a darle forma según los datos necesarios para el cálculo y los que fueron calculados de forma automática por el modelo de simulación, introduciendo las ecuaciones reflejadas según metodología de cálculo para obtener los resultados de dicha simulación.

Validación del programa propuesto para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizaron

En esta fase se verificaron los resultados arrojados por el modelo propuesto, con el objeto de validar los resultados obtenidos, se tomaron ejercicios de la bibliografía y se resolvieron mediante el modelo de simulación, comparándose con los valores dados por la literatura seleccionada y calculando el porcentaje de desviación; es decir, implementar en este estudio significa entonces que el modelo aplicado en esta investigación fue numéricamente tratable en el programa Microsoft Office Excel, y se pudieron producir los resultados esperados en tiempos adecuados a la finalidad perseguida por la simulación.

Resultados y Discusión

Establecer las cinéticas de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizaron

En esta primera fase del presente de la investigación se estudiaron y analizaron los requerimientos teóricos sobre cómo establecer los distintos tipos de cinética de reacción adecuadamente para el cálculo del tiempo de reacción de los catalizadores, cabe destacar que solo se planteó la cinética de reacciones homogéneas, ya que de esa manera fue delimitado dicho trabajo especial de grado, para más adelante desarrollar la hoja de cálculo; como resultado de estas consideraciones para la realización de este programa fueron las siguientes:

- Las condiciones obligatorias que el diseño debe cumplir (la hoja de cálculo), según los requerimientos que la cinética de reacción así lo implique.
- La utilización de una hoja de cálculo Excel de la plataforma Microsoft Office, es debido a que este programa es de fácil manejo, accesible todas las personas y amigable con el usuario.
- El programa de cálculo solo servirá para reacciones homogéneas que cumplan con las condiciones del programa, de no cumplir con las condiciones se deben ajustar los parámetros para poder utilizar exitosamente el programa.
- Las unidades utilizadas son las del sistema internacional, de poseer los datos en otras unidades se debe realizar la conversión antes de entrar al programa, esto para evitar resultados errados.
- Se deben conocer los datos de la reacción pedidos por la hoja de cálculo para la correcta ejecución del programa.

Identificación los procedimientos para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizaron

En esta fase se elaboró un procedimiento paso a paso creando una secuencia lógica de cálculo que facilitó el entendimiento de los mismos; a pesar de ser no muy extenso, suele ser algo complicado debido a la facilidad con la cual puede ser alterada una reacción química; de allí, que para la determinación de la velocidad de reacción fue necesario conocer el orden de la reacción que se está evaluando, aquí se muestra las diferentes formas se puede tomar la Ley de Velocidad, mediante formas integradas de las leyes de velocidad dependiendo del orden de la reacción de la Ley de Velocidad integrada, además al aplicar la Ecuación de Arrhenius se demostró que los datos de la constante $k(T)$ para muchas reacciones podían ajustarse por medio de la ecuación, la cual es muy importante, ya que esta determina la constante de velocidad y energía de activación de las

reacciones. A continuación, se muestra la tabla utilizada para la determinación de la velocidad de reacción, en la cual fue necesario conocer el orden de la reacción que se evalúa, aquí se muestra las diferentes formas que puede tomar la Ley de Velocidad.

En cuanto a la disertación y aplicación de la ecuación de Arrhenius demostró que los datos de la constante $k(T)$, para muchas reacciones podían ajustarse por medio de la ecuación, la cual es muy importante ya que esta determina la constante de velocidad y energía de activación de las reacciones; de igual forma para las reacciones con diferencia de temperatura, la constante de Arrhenius es útil también para determinar el valor de la constante de velocidad de una misma reacción a otra temperatura, la cual se sustituye en la ecuación de Arrhenius los valores de $K_1; T_1$ y $K_2; T_2$; para dos casos hipotéticos; de allí que la velocidad de reacción se define entonces como la variación de moles de A en el tiempo.

Referente al sistema homogéneo la velocidad de reacción depende de la composición de las sustancias en la fase considerada de esta forma se ve expresada en función de quien está actuando la velocidad de reacción, y cuyas condiciones isotérmicas de velocidad de reacción; son expresión para la velocidad de reacción que esté constituida por dos factores: uno dependiente exclusivamente de la concentración y otro dependiente exclusivamente de la temperatura; en cuanto al equilibrio de reacción muchas de estas reacciones reversibles pueden considerarse como una combinación de dos reacciones elementales, una en sentido directo y otra en sentido inverso, y donde la constante de equilibrio está relacionada también con variables termodinámicas

Diseño del programa en la hoja de cálculo Microsoft Office Excel© por medio de la temperatura para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizaran.

En esta etapa se diseñó el programa propuesto el cual cuenta con una serie de pasos para su correcta utilidad

Desarrollo de la hoja de cálculo

Para la estructuración adecuada de la hoja de cálculo, se requirió establecer previamente los datos necesarios para la realización de la simulación y los resultados que se obtendrán la simulación cuenta únicamente con una hoja, ya que en ella misma nos da los resultados de la simulación.

Datos

Inicialmente, se colocaron los datos a ser ingresados por el usuario o mejor conocidos como requerimientos de manera organizada en el modelo de simulación, identificados por el recuadro amarillo, ya que estos valores son los necesarios para el funcionamiento del procedimiento de cálculo, cada una de las fórmulas implicadas en el procedimiento fue ingresada una a una, de forma organizada y secuencial, porque entre ellas existen valores que son requeridos por otras fórmulas.

Resultados

Las características a ser calculadas con el modelo de simulación y que son resultados obtenidos por este, están identificadas en el recuadro de color amarillo.

Los datos que serán obtenidos son:

- Inversa de temperatura ($1/T$)
- Logaritmo Natural de K ($\ln K$)
- Grafico comportamiento de Arrhenius
- Energía de activación
- Coeficiente de Arrhenius
- Valores de la constante cinética a diferentes Temperaturas

- Energía de activación con “A” constante a determinada temperatura.
- Diferencia entre las energías de activación “Con – Sin catalizador”

Una vez ingresadas todos los valores necesarios para la determinación de tiempo de reacción, se verificó el funcionamiento adecuado del modelo de simulación elaborado, lo cual consistió en ingresar datos en la hoja de cálculo para obtener resultados.

De esta manera queda estructurada la simulación propuesta que por medio de cálculos rápidos y sencillos nos permitirá ahorrar tiempo y dinero en experimentos.

Validación el programa propuesto para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos que se utilizaron.

En vez terminada la simulación se procedió a realizar la validación del mismo, ya que este nos permite ver la veracidad de nuestros valores, esto se realizó con una serie de ejemplos propuestos.

Ejemplo 1: Se muestra a continuación una serie de tablas (T vs. K). Las cuales nos indican los parámetros que utilizaremos para la simulación para así poder validar la simulación, determinar mediante la simulación planteada en este estudio cuál de los siguientes catalizadores genera la menor energía de activación para la producción de etanol (Ver Tabla 1).

Tabla 1. Datos T vs K de Etanol

T (K)	K
333,15	5,07E-05
343,15	3,35E-04
353,15	8,13E-03
363,15	1,19E-01

1. Hidróxido de Sodio (NaOH)

Tabla 2. Datos T vs K de NaOH

T (K)	K
333,15	8,32E-04
343,15	4,11E-04
353,15	6,31E-03
363,15	4,76E-03

2. Hidróxido de Potasio (KOH)

Tabla 3. Datos T vs K de KOH

T (K)	K
333.15	4.60E-03
343.15	3.59E-03
353.15	2.49E-02
363.15	2.70E-02

3. Ácido sulfúrico (H₂SO₄)

Tabla 4. Datos T vs K de H₂SO₄

T (K)	K
333.15	4.59E-03
343.15	7.44E-03
353.15	3.56E-02
363.15	5.37E-02

4. Ácido Clorhídrico (HCl)

Tabla 5. Datos T vs K de HCl

T (K)	K
333,15	5,59E-03
343,15	7,44E-03
353,15	2,56E-02
363,15	3,37E-02

5. Ácido Fosfórico (H₂PO₄).

Tabla 6. Datos T vs K de H₂PO₄

T (K)	K
333,15	8,25E-03
343,15	5,33E-03
353,15	5,99E-02
363,15	3,67E-02

Tabla 7. Resultados obtenidos de la simulación.

Compuesto	Ecuación de línea recta	Energía de activación (J/mol)	Factor A de Arrhenius	Energía de Activación a 358.15 K	Diferencia Kcon/Ksin Catalizador
Etanol	y=10816x+26.963	21491.39	5.12722E+11	89924.224	-
Hidróxido de Sodio	y=-9596.8x+21.268	19068.84	1724149979	79787.795	30.089
Hidróxido de Potasio	y=-8733.2x+20.531	17352.86	825087500.6	72607.825	335.43
Ácido sulfúrico	y=-9377.5x+22.787	18633.09	7875322711	77964.535	55.50
Ácido Clorhídrico	y=-8005.8x+18.733	15907.52	136659091.6	66560.221	2556.22
Ácido Fosfórico	y=-8336.3x+19.931	16564.22	452817621.1	69307.998	1016.01

Ejemplo 2: En el hidrólisis alcalino de metilo se encontró que la constante de velocidad variaba con la temperatura según de muestra en los siguientes datos:

Tabla 8. Resultados obtenidos de la simulación

T (K)	K(mol/L).S ⁻¹
293	0.135
298	0.186
303	0.259
308	0.358

Calcular: La ecuación de la línea recta, la energía de activación y el factor pre-exponencial de Arrhenius.

Tabla 9. Resultados obtenidos de la simulación

	Ecuación de línea recta	Energía de activación (J/mol)	Factor A de Arrhenius
Ejercicio planteado	y=-5877.1x+18.049	11754.01	68958012.82
Simulación	y=-5877.1x+18.049	11677.79	68957435.82

Con estos ejemplos propuestos se observó el funcionamiento del simulador arrojando que es adecuado y que sus resultados cumplen la veracidad y las variaciones. Además, permite considerarse pequeñas desviaciones o mal manejo de la información por parte del operador.

Conclusiones

En esta investigación se encontró con respecto al establecimiento de las cinéticas de reacción del tipo de catalizador homogéneo utilizado: existen diversos tipos de procesos por los cuales pueden llevarse a cabo el equilibrio de las reacciones, a través de un procedimiento de modelado para lograr con la simulación, la información fue suministrada paso a paso para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos creando una secuencia lógica de cálculo facilitando así el entendimiento de los mismos.

Se identificaron los procedimientos para el cálculo de tiempo de reacción de los catalizadores homogéneos empleados; el modelado de procesos químicos como una práctica de simulación, para este se empleó la ecuación de Arrhenius que actúa como el objeto real modelado en cuanto a la imitación de ciertas características, pero su uso evita experimentos reales que pueden ser costosos y lentos; usados en el diseño del proceso, que en este estudio se aplica en función al objeto de estudio: representado por el tiempo de reacción para catalizadores homogéneos en la producción de Etanol, donde se enfocó únicamente en el procedimiento y parámetros de cálculo exclusivo de tales catalizadores, en el transcurso de toda la investigación. A tal efecto, la simulación llevada a cabo concede el fácil procesamiento de las variables de proceso al operador de la versión tecnológica de Excel. Esto se debe a la facilidad con la cual son afectadas las variables de una reacción química, el procedimiento de cálculo propuesto no es infalible, y depende en primer lugar de la veracidad de los datos suministrados y en segundo lugar del criterio del investigador como diseñador de sus aportes científicos.

Referencias Bibliográfica

- [1]. Winston Wayne L. Investigación de Operaciones. Grupo Editorial Iberoamérica. México, (1994).
- [2]. Izquierdo, Ma. C., Peral, F., De la Plaza, Ma. A., Troitiño, Ma. D. Evolución histórica de los principios de la química Editorial UNEC. Madrid, (2013).
- [3] Comisión Económica para América Latina y el Caribe. Estudio Regional sobre Economía de los Biocombustibles 2010: Temas clave para América Latina y el Caribe. Comunicado de Prensa. Naciones Unidas, (2009).
- [4] Mills, William R. Microsoft Office Excel 2007. Una guía para principiantes. Editorial LIBERTY Drive-. Estados Unidos, (2010).
- [5] Izquierdo, J. Cinética de las Reacciones Químicas. Ediciones UNIVERS. Barcelona España, (2004).

Nota Especial

Artículo de investigación derivado del Trabajo Especial de Grado, titulado: Modelado del tiempo de reacción para catalizadores homogéneos en la producción de Etanol, presentado en la Universidad Rafael Urdaneta, Maracaibo, Venezuela