ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA

ESTUDIO PARAMÉTRICO Y SIMULACIÓN DE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONALES (CFD) PARA EL REACTOR DE LECHO EMPAQUETADO DEL LABORATORIO DE TERMODINÁMICA DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AGROINDUSTRIA DE LA ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

TRABAJO DE TITULACIÓN PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE MAGÍSTER EN DISEÑO Y SIMULACIÓN

ILIANA ELIZABETH CARRERA FLORES
iliana.carreraf@epn.edu.ec

EDWIN ANDRÉS PROAÑO FIALLOS
andres.proanof@epn.edu.ec

DIRECTOR: Ing. VÍCTOR HUGO HIDALGO, D.Sc.
victor.hidalgo@epn.edu.ec

CODIRECTOR: Ing. SEBASTIÁN TACO VÁSQUEZ, Ph.D.
sebastian.taco@epn.edu.ec

Quito, marzo, 2019

CERTIFICACIÓN

Certifico que el presente trabajo fue desarrollado por los ingenieros **Iliana Elizabeth Carrera Flores** y **Edwin Andrés Proaño Fiallos**, bajo nuestra supervisión.

Ing. Victor Hugo Hidalgo, D.Sc.	Ing. Sebastián Taco, Ph.D
DIRECTOR DE PROYECTO	**CODIRECTOR DE PROYECTO**

DECLARACIÓN

Nosotros, **Iliana Elizabeth Carrera Flores** y **Edwin Andrés Proaño Fiallos**, declaro bajo juramento que el trabajo aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y, que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

A través de la presente declaración cedo mis derechos de propiedad intelectual correspondiente a este trabajo, a la Escuela Politécnica Nacional, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su Reglamento y por la normativa institucional vigente.

Iliana Elizabeth Carrera Flores

Edwin Andrés Proaño Fiallos

ÍNDICE

INTRODUCCIÓN 1
Pregunta de Investigación 2
Objetivo general 2
Objetivos específicos 2

1. MARCO TEÓRICO 4
1.1. Reactores de lecho empacado 4
1.1.1. Principios de operación y diseño de un reactor de lecho empacado 4
1.1.2. Fenómenos de transporte de masa y calor 6
1.1.3. Modelo de lecho empacado 6
1.2. Mecanismo de la reacción de la obtención de hidrocarburos a partir de etanol 6
1.2.1. Ensayos para la caracterización de la gasolina 7
1.3. Simulación de la dinámica de fluidos computacionales 9
1.3.1. Método de elementos finitos 10
1.3.2. FlexPDE para la resolución del método de elementos finitos 11

2. METODOLOGÍA 13
2.1. Simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales (CFD) 14
2.1.1. Balance de masa y calor 14
2.1.2. Parámetros de diseño 15
2.1.3. Definición de los modelo y planteamiento del problema 17
2.2. Experimentación para obtención de hidrocarburos a partir de etanol 19
2.2.1. Temperatura de operación y velocidad espacial (WSHV) 19
2.2.2. Reacciones catalizadas 20
2.2.3. Rendimiento y conversión de la reacción 22

3. ANÁLISIS DE RESULTADOS 23
3.1. Simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales 23
3.2. Experimentación para obtención de hidrocarburos a partir de etanol 27
3.3. Análisis de resultados de la simulación en CFD y la experimentación. 30
3.3.1. Análisis de la concentración de octeno (C_8H_{16}) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario 31
3.3.2. Análisis de la concentración de octeno (C_8H_{16}) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario y del modelo en estado dinámico 34

3.3.3. Análisis de la concentración de octeno (C_8H_{16}) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario y los datos experimentales 35
3.3.4. Análisis de la concentración de buteno (C_4H_8) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario 37
3.3.5. Análisis de la concentración de buteno (C_4H_8) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario y del modelo en estado dinámico..... 40
3.3.6. Análisis de la concentración de buteno (C_4H_8) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario y los datos experimentales 42
3.3.8. Análisis del flujo másico del octeno (C_8H_{16}) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario y dinámico 45
3.3.9. Análisis de la temperatura del reactor a partir de la simulación de los modelos en estado estacionario..... 46
3.3.10. Análisis del flujo de calor del reactor a partir de la simulación de los modelos en estado estacionario..... 47
3.3.11. Análisis del flujo de calor del reactor a partir de la simulación de los modelos en estado estacionario y en estado dinámico 48

4. CONCLUSIONES 50
4.1. Conclusiones..... 50
4.2. Recomendaciones y Trabajos Futuros 52

Referencias Bibliográficas 54

Anexos 57
Anexo I. Cálculos de constantes para el desarrollo de los modelos…….……..56
Anexo II. Cálculos de números adimensionales y parámetros de diseño…..…….. 59
Anexo III. Códigos para dinámica de fluidos computacionales en Flex PDE…….67
Anexo IV. Resultados de la dinámica de fluidos computacionales en Flex PDE….....76
Anexo V. Resultados de los análisis químicos realizados a las muestras obtenidas experimentalmente……..….90

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1. Requisitos de las gasolinas comerciales 9
Tabla 1.2.Comandos utilizados para el ingreso del modelo 12
Tabla 2.1. Condiciones de temperatura (T) y velocidad espacial (WHSV) para la reacción de metanol sobre zeolita HZSM-5 21
Tabla 3.1. Parámetros del catalizador y del reactor 23
Tabla 3.2. Parámetros de fluido 24
Tabla 3.3. Números adimensionales para definir los parámetros de diseño..... 24
Tabla 3.4. Parámetros de transferencia de masa y calor 24
Tabla 3.5. Resultados experimentales 27
Tabla 3.6. Datos experimentales para cálculo del rendimiento 28
Tabla 3.7. Resultados de los análisis químicos..... 28
Tabla 3.8. Condiciones de la simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales (CFD)..... 30

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1. Reactor de lecho empacado adiabático (izquierda) y reactor de lecho empacado multitubular no empacado 5
Figura 1.2. Conversión de etanol en hidrocarburos 7
Figura 2.1. Esquema de la metodología del estudio paramétrico y simulación de dinámica de fluidos computacionales (CFD) para el reactor de lecho empaquetado... 13
Figura 2.2. Esquema del Reactor PFR a nivel de laboratorio para la conversión de metanol y metanol/etanol a hidrocarburos. 21
Figura 3.1. Esquema del reactor simplificado 30
Figura 3.2. Concentración molar de C_8H_{16} en simulaciones en estado estacionario ... 31
Figura 3.3. Concentración molar de C_8H_{16} en simulaciones en estado estacionario ... 33
Figura 3.4. Concentración molar de C_8H_{16} en simulaciones de la corrida 2..... 35
Figura 3.5. Concentración molar de C_8H_{16} en simulaciones en estado estacionario y datos experimentales 36
Figura 3.6. Concentración molar de C_4H_8 en simulaciones en estado estacionario..... 38
Figura 3.7. Concentración molar de C_4H_8 en simulaciones en estado estacionario..... 39
Figura 3.8. Concentración molar de C_4H_8 en simulaciones de la corrida 2 a) estado estacionario y b) en estado dinámico 41
Figura 3.9. Concentración molar de C_4H_8 en simulaciones en estado estacionario y datos experimentales 42
Figura 3.10. Flujo másico de C_8H_{16} en simulaciones en estado estacionario. a) corrida 1 y b) corrida 44
Figura 3.11. Flujo másico de C_8H_{16} para corrida 2 a) estado estacionario y b) estado dinámico 45
Figura 3.12. Variación de la temperatura en el eje axial y radial a) corrida 1 y b) corrida 2 46
Figura 3.13. Flujo de calor del reactor a) corrida 1 y b) corrida 2 48
Figura 3.14. Flujo de calor del reactor a) estado estacionario y b) estado dinámico ... 49
Figura AIV.4.1. Resultados 1 para el C_2H_4 79
Figura AIV.4.2. Resultados 2 para el C_2H_4 79
Figura AIV.4.3. Resultados 3 para el C_2H_4 80
Figura AIV.4.4. Resultados 4 para el C_2H_4 80
Figura AIV.4.5. Resultados 1 para el C_4H_8 81
Figura AIV.4.6. Resultados 2 para el C_4H_8 81
Figura AIV.4.7. Resultados 1 para el H_2O 82

Figura AIV.4.8. Resultados 2 para el H_2O 82
Figura AIV.4.9. Resultados 3 para el H_2O 83
Figura AIV.4.10. Resultados 1 para el C_2H_4 83
Figura AIV.4.11. Resultados 2 para el C_2H_4 84
Figura AIV.4.12. Resultados 3 para el C_2H_4 84
Figura AIV.4.13. Resultados 4 para el C_2H_4 85
Figura AIV.4.14. Resultados 1 para el C_4H_8 85
Figura AIV.4.15. Resultados 2 para el C_4H_8 86
Figura AIV.4.16. Resultados 1 para el H_2O 86
Figura AIV.4.17. Resultados 2 para el H_2O 87
Figura AIV.4.18. Resultados 3 para el H_2O 87
Figura AIV.4.19. Resultados 1 para el C_2H_4 88
Figura AIV.4.20. Resultados 2 para el C_2H_4 88
Figura AIV.4.21. Resultados 3 para el C_2H_4 89
Figura AIV.4.22. Resultados 4 para el C_2H_4 89
Figura AIV.4.23. Resultados 1 para el C_4H_8 90
Figura AIV.4.24. Resultados 2 para el C_4H_8 90
Figura AIV.4.25. Resultados 1 para el H_2O 91
Figura AIV.4.26. Resultados 2 para el H_2O 91
Figura AIV.4.27. Resultados 3 para el H_2O 92

NOMENCLATURA

C_i: Concentración de la especie i en la fase fluida (mol/m^3)

Cp_f: Capacidad calórica de la fase fluida (J/kgK)

Cp_s: Capacidad calórica de la fase sólida (J/kgK)

D_m: Difusividad molecular (m^2/s)

D_{cz}: Difusividad efectiva axial (m^2/s)

d_p: Diámetro de partícula equivalente(m)

J_h: Ley de Fourier para la conducción de calor

J_m: Ley de Fick para la difusión molecular

L: Longitud del lecho (m)

Pe_{hz} : Número de Peclet efectivo axial de calor en base al diámetro de partícula

Pe'_{hz}: Número de Peclet efectivo axial de calor en base a las dimensiones del lecho

Pe_{mz}: Número de Peclet efectivo axial de masa en base al diámetro de partícula

Pe'_{mz}: Número de Peclet efectivo radial de masa en base a las dimensiones del lecho

Pr: Número de Prandal

R: Radio interno del tubo (m)

R_0: Radio externo del tubo (m)

Re_p: Número de Reynolds basado en el diámetro de partícula

r_{vi}: Velocidad de reacción de la especie i $(mol/kg\ s)$

$(-\Delta H)r_v$: Generación total de calor por la reacción (W/kg)

Sc: Número de Schmidt

T: Temperatura del fluido (K)

t: Tiempo (h)

v: Velocidad (m/s)

x: Coordenada de partícula, (m)

y_i: Concentración adimensional de la especie i

z: Coordenada axial (m)

z': Coordenada axial adimensional

LETRAS GRIEGAS

α_w: Coeficiente de Transferencia de Calor a través de la pared

ε: Porosidad local

ε_0: Porosidad promedio

ε_p: Porosidad de la partícula del catalizador

η: Factor de Efectividad

λ_{cz}: Conductividad media térmica axial del lecho (W/mK)

λ_f: Conductividad térmica de la fase fluida (W/mK)

μ_g: Viscosidad del Fluido $(N\ s/m^2)$

θ: Temperatura adimensional

δ_b: Densidad del catalizador en base al volumen del lecho (kg/m^3)

δ_f: Densidad de la fase fluida (kg/m^3)

δ_p: Densidad de la partícula de catalizador (kg/m^3)

RESUMEN

El presente trabajo tiene por objetivo el estudio paramétrico y la simulación de la dinámica de fluidos computacionales (CFD) del reactor de lecho empaquetado del Laboratorio de Termodinámica de la Facultad de Ingeniería Química y Agroindustria de la EPN. Para esto, se realizó la simulación y parte experimental de un proceso químico, se escogió la obtención de hidrocarburos a partir de etanol. Primero, se diseñó el modelo matemático unidimensional adibático del reactor en estado estacionario y dinámico. A partir del modelo, se realizó una simulación CFD utilizando el software Flex PDE. Con base en la simulación, se determinaron los parámetros de trabajo para la parte experimental. Los parámetros seleccionados para el proyecto fueron la temperatura y la velocidad espacial. A través de una serie de experimentos, donde se utilizaron varias temperaturas y velocidades espaciales, se obtuvieron resultados favorables para la obtención de gasolina a una temperatura de 370 ºC y una velocidad espacial de 0,5 y 1,0 s^{-1}. La gasolina obtenida con una velocidad de 1,0 s^{-1} presentó un rendimiento del 7,66%, mientras que la gasolina obtenida con una velocidad de 0,5 s^{-1} es del 25,26%. Además, se realizaron ensayos químicos a las gasolinas obtenidas experimentalmente para compararlas con los estándares de una gasolina comercial, obteniéndose gasolinas que cumplen con los parámetros de la norma INEN 935. La simulación fue favorable porque sus resultados difieren de los resultados experimentales en menos del 25%.

Palabras clave: reactor lecho empacado, modelado, simulación CFD, temperatura, velocidad espacial.

ABSTRACT

The aim of this work is the parametric study and the simulation of computational fluid dynamics (CFD) of the packed bed reactor of the Thermodynamics Laboratory of the Chemical Engineering and Agroindustry Faculty of the EPN. For this, the simulation and experimental part of a chemical process was carried out, the extraction of hydrocarbons from ethanol was chosen. First, the one-dimensional, adiabatic mathematical model of the reactor was designed in a stationary and dynamic state. From the model, a CFD simulation was performed using the Flex PDE software. Based on the simulation, the parameters for the experimental part were determined. The parameters selected for the project were temperature and space velocity. Through a series of experiments, where several temperatures and space speeds are used, favorable results were obtained for obtaining gasoline at a temperature of 370 ° C and a space velocity of 0.5 and 1.0 s^{-1}. Gasoline obtained with a space velocity of 1.0 s^{-1} presented a yield of 7.66%, while gasoline obtained with a space velocity of 0.5 s^{-1} is 25.26%. Obtaining the highest yields, greater than 10%, with a space velocity of 0.5 s^{-1}. In addition, chemical tests were conducted on gasolines obtained experimentally to compare them with the standards of a commercial gasoline, obtaining gasolines that meet the parameters of the INEN 935 standard. The simulation was favorable because its results differ from the experimental results by less than 25%.

Keywords: packed bed reactor, modeling, CFD simulation, temperature, space velocity.

ESTUDIO PARAMÉTRICO Y SIMULACIÓN DE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONALES (CFD) PARA EL REACTOR DE LECHO EMPAQUETADO DEL LABORATORIO DE TERMODINÁMICA DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AGROINDUSTRIA DE LA ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

INTRODUCCIÓN

El reactor de lecho empaquetado del Laboratorio de Termodinámica de la Facultad de Ingeniería Química y Agroindustria de la Escuela Politécnica Nacional, opera en flujo axial en condiciones adiabáticas a presión constate. Para la obtención de hidrocarburos se utiliza zeolita como catalizador, la cual tiene una relación Si/Al de 80. En el reactor se pueden variar parámetros como la temperatura, caudal de entrada o cantidad de catalizador utilizado. En el presente trabajo se busca encontrar un modelo matemático de operación para el reactor, y luego realizar una simulación en CFD utilizando el software FlexPDE, donde se podrá analizar cómo influye los diferentes parámetros en el comportamiento de este. De la simulación, se obtendrán los parámetros de mayor influencia en el reactor y cómo estos se comportan, lo que ayudará a disminuir los tiempos de experimentación. Luego, se realizará una comparación de los resultados de la simulación con los resultados obtenidos experimentalmente.

Para la simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales se definirá las ecuaciones diferenciales parciales que representen a los fenómenos de transporte de masa y energía para un modelo unidimensional en estado estacionario y dinámico en función de la dimensión axial (z). Estos modelos matemáticos tienen como variables a la temperatura y la velocidad espacial WHSV (por sus siglas en inglés, weight hourly space velocity). Por último, utilizando el software Flex PDE, se obtendrán las gráficas de simulación de los parámetros para los diferentes modelos.

La parte experimental, se desarrollará en el reactor de lecho empacado del Laboratorio de Termodinámica de la FIQA y se obtendrá gasolina a partir de etanol anhidro, usando como catalizador a la zeolita HZSM-5. La temperatura de reacción y el caudal de entrada son los parámetros que se varían y estudian para la obtención de gasolina. Además, se obtendrá el rendimiento de cada unos de los experimentos realizados, comparando la cantidad de gasolina obtenida en función de la cantidad de etanol utilizado. Finalmente, se comparará las muestras de gasolina obtenidas experimentalmente con la gasolina

comercial mediante tres ensayos: determinación de la presión de vapor Reid, la destilación fraccionaria, y la determinación del contenido de gomas.

Para contrastar los resultados obtenidos con la simulación CFD y los obtenidos experimentalmente, se realizarán gráficas donde se compararán los perfiles de concentración de los productos y reactantes, y también se realizará una comparación entre el modelo estacionario y dinámico. Se realizará el mismo análisis para el parámetro de la temperatura.

Pregunta de Investigación

¿Es posible parametrizar las condiciones de operación de un reactor de lecho empacado a partir de la simulación de la dinámica de fluidos computacionales (CFD)?

Objetivo general

Estudiar paramétricamente las condiciones de operación del reactor de lecho empaquetado del laboratorio de termodinámica de la Facultad de Ingeniería Química y Agroindustria de la Escuela Politécnica para realizar la Simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales (CFD).

Objetivos específicos

- Revisar el estado del arte respecto al funcionamiento de los reactores de lecho empaquetado, la simulación de la dinámica de fluidos computacionales y la cinética de reacción de la obtención de hidrocarburos a partir de etanol
- Realizar la simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales de manera estacionaria y dinámica del reactor de lecho empaquetado considerando la temperatura y velocidad de reacción (WSHV, por sus siglas en inglés Weight Hourly Space Velocity)
- Realizar de manera experimental el proceso de obtención de hidrocarburos a partir de etanol en el reactor de lecho empacado del laboratorio de termodinámica de la Facultad de Ingeniería Química y Agroindustria
- Determinar el rendimiento y conversión de la reacción a partir de la presión de vapor REID, la destilación fraccionaria y el análisis de gomas de las muestras de hidrocarburos obtenidos en el proceso experimental

- Determinar los parámetros y las condiciones de reacción más adecuadas a partir de la comparación del estudio paramétrico con resultados experimentales obtenidos

1. MARCO TEÓRICO

En el presente capítulo se presenta se realiza una revisón bibliográfica del estado del arte sobre los reactores, la reacción de obtención de gasolina y la dinámica de fluidos computacionales (CFD). Como primera parte, se explica el modo de operación y diseño de un reactor adiabático empacado, para así exponer el modelo de dicho reactor. Luego, se abordará sobre la cinética de reacción que va desde el etanol hasta la obtención de hidrocarburos. Finalmente, se argumenta sobre la resolución del modelo del reactor a través del método de elementos finitos usando como software al programa Flex PDE.

1.1. Reactores de lecho empacado

1.1.1. Principios de operación y diseño de un reactor de lecho empacado

Los reactores de lecho fijo con catalizadores granulares sólidos son ampliamente usados en la industria de procesos químicos. El catalizador se encuentra como un relleno compacto ubicado en la parte interior del reactor. En la industria son muy utilizados los lechos multitubulares porque permiten una mayor transferencia de calor [1]. Con base en la transferencia de calor con el medio externo se pueden distinguir dos tipos de reactores: adiabáticos y no adiabáticos, como se muestran en la Figura 1.1.

Para la modelización de un reactor de lecho fijo es necesario tener un profundo conocimiento sobre el flujo de los fluidos y la transferencia de calor dentro del reactor. Por tal motivo, se desea presentar un modelo sin un excesivo número de parámetros para determinar el comportamiento del reactor a diferentes condiciones operativas [2].

Según Shinnar [3], un modelo no debe ser más detallado que lo enteramente necesario, donde se presenten el menor número de parámetros posibles cuya resolución matemática requiera un mínimo esfuerzo computacional compatible con la precisión y calidad de los resultados que se quieran obtener.

Los modelos se pueden dividir en determinísticos y estocásticos. Los modelos determinísticos utilizan como datos de entrada a valores conocidos mientras que, en los modelos estocásticos por lo menos un dato de entrada es tomado al azar utilizando funciones probabilísticas. Los modelos determinísticos se subdividen en discretos y continuos. Los modelos discretos establecen una celda pequeña que represente todas

las características del lecho, asumiendo que el lecho se compone del ensamblaje de dichas celdas y se modela su comportamiento tomando en cuenta su interacción con las celdas adyacentes [4]. La resolución del modelo continuo permite establecer las variables de estado del sistema. Los modelos continuos suponen una distribución continua de velocidades del fluido a lo largo del eje del reactor permitiendo una variación continua de las variables de estado que pueden expresarse mediante las ecuaciones de masa y energía de Fick y Fourier [5].

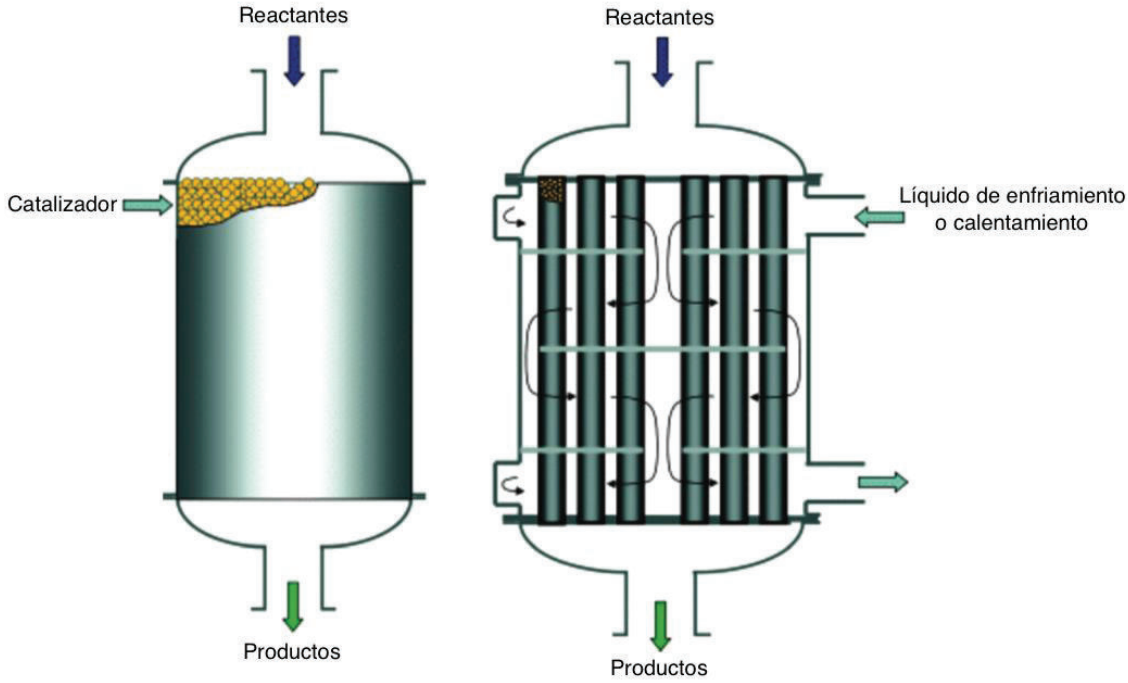


Figura 1.1. Reactor de lecho empacado adiabático (izquierda) y reactor de lecho empacado multitubular no empacado.
(Fuente: Eigenberger y Ruppel)

El modelo continuo toma valores promedio de concentración y temperatura en cada sección transversal del lecho. Para las ecuaciones de balance de masa y energía se toma en cuenta solamente la variación axial de concentración y temperatura. Este modelo se denomina modelo unidireccional (1D), despreciando la variación de los parámetros en el eje radial. Además, del modelo 1D se consideró que la variación de temperatura y concentración entre las partículas del catalizador y la fase fluida son pequeños, considerándolo un modelo continuo homogéneo [7].

1.1.2. Fenómenos de transporte de masa y calor

Las ecuaciones de Fick y Fourier, para el balance de masa y energía respectivamente, cuando el fluido es trasladado en el lecho empacado utilizando el modelo continuo homogéneo unidireccional [8], son:

$$J_m = -v\,\frac{\partial C}{\partial z} \qquad \text{(Ec. 1.1)}$$

$$J_h = -v\,\delta\,Cp\,\frac{\partial T}{\partial z} \qquad \text{(Ec. 1.2)}$$

1.1.3. Modelo de lecho empacado

En los modelos unidimensionales estacionarios, para los balances de masa y energía se toman en cuenta la variación de los perfiles de concentración y temperatura en el eje axial [8].

$$-v\,\delta_g\,Cp\,\frac{\partial T}{\partial z} = \delta_b\,\eta\,(-\Delta H)\mathrm{r_v} \qquad \text{(Ec. 1.3)}$$

$$-v\,\delta_g\,\frac{\partial C_i}{\partial z} = \delta_b\,\eta\,(-\Delta H)\mathrm{r_{v\,i}} \qquad \text{(Ec. 1.4)}$$

1.2. Mecanismo de la reacción de la obtención de hidrocarburos a partir de etanol

Por una parte, la obtención de hidrocarburos a partir de metanol utilizando catalizadores ha sido considerablemente estudiada, más no la obtención de hidrocarburos a partir de otros tipos de alcoholes.

Las zeolitas son minerales aluminosolicato cuyo cristal presenta iones en su estructura, que posee propiedades de tamices moleculares donde se pueden remover y reemplazar moléculas huésped. Las zeolitas son usadas en procesos de adsorción y separación por su gran capacidad de intercambio iónico. Es por esto, que las zeolitas son usadas en el campo de la catálisis, donde participan como catalizador en los procesos de cracking, isomerización y alquilación de hidrocarburos [9].

Según Gabuyo [10], la conversión de etanol a hidrocarburos usando como catalizador la zeolita H-ZSM-5, en principio, puede ser esquematizada en dos pasos:

$$H_3CH_2OH \leftrightarrow CH_2CH_2 + H_2O \begin{matrix} \nearrow olefinas\ gaseosas\ (C_2 - C_4) \\ \searrow olefinas\ líquidas\ (C_5 - C_{10}) \end{matrix}$$

Figura 1.2. Conversión de etanol en hidrocarburos
(Fuente: Gabuyo et al.)

La zeolita HZSM-5 se caracteriza por su alto contenido de silicio, la cual es utilizada ampliamente en el campo de transformación de alcoholes a hidrocarburos, es usada tanto para alcoholes de bajo como de gran peso molecular. La peculiar estructura de estas zeolitas, con fuertes capos electrostáticos, permite la formación y estabilización de los carbocationes, específicamente del ion carbenio (CH_3^+), que actúan como intermediarios reactivos [11].

En primera instancia el etileno se produce por la deshidratación del etanol. El etileno conjuntamente con el ion carbenio se sintetizan para formar olefinas gaseosas y olefinas líquidas mediante reacciones simultáneas. Las olefinas líquidas (alquenos de hasta 10 carbonos) se producen mediante oligomerización, cracking y aromatización. Las olefinas gaseosas (eteno, propileno y buteno) se producen mediante oligomerización y cracking, Debido al tamaño molecular del catalizador, el mismo que funciona como un tamiz, solamente se producen cadenas de hidrocarburos de hasta máximo 10 carbonos, por lo que no se produce coque [12].

Si la concentración de agua en el etanol es muy grande la primera reacción tiende a los reactivos y la formación de etileno es retrasada, por lo tanto, se debe trabajar con alcohol etílico que por lo menos posea una concentración del 96% en peso [13].

1.2.1. Ensayos para la caracterización de la gasolina

Existen ensayos estandarizados que sirven para determinar si una gasolina cumple con los requisitos para ser usada en motores de combustión interna, a continuación se detallan algunos procedimientos:

- Contenido de gomas mediante el método de evaporación

Algunas olefinas y parafinas tienden a formar gomas insolubles durante su periodo de almacenamiento. El combustible tiende a deteriorarse naturalmente, ya que fracciones de la gasolina reaccionan con el oxígeno presente en el medio ambiente. Las gomas son

compuestos viscosos de alto peso molecular que pueden traer problemas al funcionamiento del motor, como por ejemplo obstrucción de filtros o depósitos en los inyectores o válvulas.

Para determinar la cantidad en peso de gomas en una muestra de gasolina, se utiliza la norma ASTM D381-12 [14], donde una muestra de combustible es evaporada bajo ciertas condiciones controladas de flujo de aire y temperatura.

- Presión de vapor por el método Reid

La presión de vapor es la presión ejercida por el vapor de un compuesto cuando se encuentra en equilibrio con el líquido a una temperatura determinado. La presión de vapor está directamente relacionada con la volatilidad, mientras más volátil es un compuesto, mayor será su presión de vapor. La presión de vapor de una mezcla de hidrocarburos es igual a la sumatoria de la presión de vapor de cada componente tomando en cuenta la fracción molar de los mismos.

Es importante la determinación de la presión de vapor de la gasolina, ya que mediante esta propiedad física se puede saber la cantidad de componentes volátiles contiene, lo que servirá para conocer acerca del desempeño, almacenaje y transporte del combustible. Una gasolina es poco volátil dificultará el encendido del motor, mientras que, una gasolina muy volátil generará altas temperaturas ocasionando daños en el motor.

Para determinar la presión de vapor de un combustible u otros productos de petróleo se utiliza el método Reid especificado en la norma ASTM D323-15a [15]. El ensayo consiste determinar la presión de vapor de un combustible a 100°F para así determinar la cantidad de volátiles que tendría un tanque de almacenamiento en una temperatura de verano.

- Ensayo de destilación

Cuando se desea separar los componentes de una mezcla líquida, se utiliza la destilación. La destilación es un proceso físico que se fundamenta en la vaporización y condensación. El ensayo de destilación sirve para conocer acerca de la distribución de los hidrocarburos líquidos en función de su peso molecular en una muestra de gasolina.

El ensayo de destilación que describe la norma ASTM D86-17 [16] consiste en destilar a presión atmosférica una muestra de 100 mL. Primero, la muestra debe ser calentada, de tal manera que la velocidad de condensación sea constante. Durante el ensayo, la

primera lectura de temperatura que se toma es cuando condensa la primera gota del destilado, a continuación se van tomando lecturas de las temperaturas cuando se haya condensado 5, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 y 95% de la muestra de líquida de hidrocarburos. Por último, se determina la curva de destilación.

En el país, para que una gasolina puede ser utilizada en un motor de combustión interna, debe cumplir los requisitos establecidos en la norma INEN 935:2016 [17].

Tabla 1.1. Requisitos de las gasolinas comerciales.

Gasolina Comercial	Requisito	Unidad	Mínimo	Máximo
Gasolina de 87 octanos	Destilación:	°C		
	10%		--	70
	50%		77	121
	90%		--	189
	Presión de vapor Reid	kPa	--	60
	Contenido de gomas	Mg/100mL	--	3
Gasolina de 92 octanos	Destilación:	°C		
	10%		--	70
	50%		77	121
	90%		--	190
	Presión de vapor Reid	kPa	--	60
	Contenido de gomas	Mg/100mL	--	4

(Fuente: INEN)

1.3. Simulación de la dinámica de fluidos computacionales

La dinámica de fluidos computacionales (Computational Fluid Dynamics, CFD por sus siglas en inglés) es una rama de la mecánica de fluidos. A través del cálculo numérico, el CFD permite analizar fenómenos de transporte mediante la resolución y simulación de problemas de flujos que involucran cálculos complejos, dichos cálculos presentan como variables a los parámetros del sistema como presión, temperatura, velocidad, etc. [19].

El CFD reemplaza las ecuaciones de conservación de masa y energía que gobiernan el fenómeno, las cuales son generalmente derivadas parciales, con números; para sí obtener una descripción final numérica y completa sobre el comportamiento del flujo [20].

El instrumento que ha permitido el crecimiento del CFD es la computadora digital de alta velocidad. Para obtener una solución de CFD, generalmente se requiere una manipulación repetitiva de miles de números, por lo que ese necesario la ayuda de un computador. Es por esto, que los avances en la tecnología, específicamente en los capos de velocidad de procesamiento y almacenaje, están estrechamente ligados con la resolución de problemas más detallados y sofisticados [21].

Por lo tanto, el CFD es una gran herramienta que se utiliza en el estudio de reactores para predecir su comportamiento a través del conocimiento de las variables de operación.

1.3.1. Método de elementos finitos

Según la complejidad de un modelo matemático, este puede ser resuelto usando soluciones analíticas o soluciones numéricas. Las soluciones analíticas son usadas para casos simples, sus resultados se basan en la experiencia y presentan una limitada posibilidad de análisis para casos más complejos. Las soluciones numéricas, con la ayuda de las nuevas tecnologías, permiten la resolución de casos más complejos con mayor precisión. Una solución numérica que destaca es el método de elementos finitos.

El método de elementos finitos (MEF) utiliza métodos numéricos con soluciones más exactas que los métodos tradicionales, que involucra un sistema de ecuaciones cuyas incógnitas constituyen los parámetros que describen el comportamiento del reactor. El MEF es ideal para la resolución de modelos que implican ecuaciones diferenciales en derivadas parciales [8].

El método de elementos finitos es una técnica que reemplaza ecuaciones diferenciales por ecuaciones algebraicas equivalentes, las ecuaciones algebraicas pueden ser resueltas mediante métodos generales. Para pasar de ecuaciones diferenciales a ecuaciones algebraicas existe una técnica llamada discretización, la cual consiste es subdividir una zona en sencillas formas geométricas las mismas que son llamadas elementos finitos.

Mediante el MEF el continuo se divide en un número finitos de partes (elementos finitos), sobre estas las variables dependientes se aproximan mediante el uso de funciones conocidas. Los nodos son los puntos de unión de cada elemento finito. Para cada nodo se genera un sistema de ecuaciones algebraicas, cuyos resultados son los valores de las

variables dependientes del sistema. El sistema completo se ensambla de la unión de todos sus elementos, y es resuelto mediante problemas discretos. La precisión de los resultados mejora si el número de nodos del sistema aumenta, pero también aumentará el número de ecuaciones a resolver y se necesitará de un computador con una gran velocidad de procesamiento [22].

Entonces, el MEF transforma un cuerpo cuya naturaleza es continua en un modelo discreto aproximado, esta transformación es llamada discretización. Mediante la interpolación de los valores conocidos en los nodos, se puede interpretar lo que sucede en el interior de un modelo. A partir del conocimiento de un número determinado y finitos de puntos se obtiene una aproximación de los valores de una función.

Si un fenómeno físico puede expresarse como un sistema de ecuaciones diferenciales, la manera más exacta de resolverlo es mediante el método de elementos finitos. El MEF puede ser usado para resolver el modelo continuo homogéneo de un reactor de lecho empacado. El modelo de un reactor de lecho empacado unidimensional puede ser descrito por ecuaciones diferenciales de primer orden no lineales, ya que la velocidad de reacción varía de manera exponencial en relación con la temperatura. En dicho modelo, las variables independientes del sistema de ecuaciones pueden ser las concentraciones de los elementos, la velocidad espacial o la temperatura [23].

1.3.2. FlexPDE para la resolución mediante el método de elementos finitos

El programa FlexPDE se utiliza para resolver sistema de ecuaciones diferenciales parciales mediante el método de elementos finitos y de esta manera encontrar una solución gráfica. FlexPDE permite resolver sistemas de ecuaciones parciales lineales o no líneas, de primer o segundo orden.

La herramienta FlexPDE dispone de dos módulos de trabajo. El primero, es el módulo donde se prepara el modelo para la resolución del cálculo. El modo de programación en el programa FlexPDE es mediante un módulo de edición y se trata de un procesador de palabras donde se ingresa el modelo. En la Tabla 1.2 se destacan los comandos de la herramienta.

Tabla 1.2. Comandos utilizados para el ingreso del modelo.

Comando	Descripción
TITLE	Una etiqueta descriptiva para la salida
SELECT	Controles de usuario que anulan el comportamiento predeterminado de FlexPDE.
VARIABLES	Aquí se nombran las variables dependientes
DEFINITIONS	Se definen parámetros, relaciones o funciones
EQUATIONS	Cada variable está asociada a una ecuación diferencial parcial
BOUNDARIES	La geometría se describe recorriendo el perímetro del dominio, encadenando segmentos de línea o arco para delimitar la figura
MONITORS and PLOTS	La salida gráfica deseada
END	Define el fin del problema

(Fuente: FlexPDE Solutions)

El segundo módulo, es el módulo donde se presentan todos los gráficos producto de los resultados de cálculos resueltos por el método de elementos finitos [23].

2. METODOLOGÍA

En el presente capítulo se detalla el procedimiento seguido para la realización del Estudio Paramétrico y Simulación de Dinámica de Fluidos Computacionales (CFD) para el reactor de lecho empaquetado del laboratorio de termodinámica de la Facultad de Ingeniería Química y Agroindustria de la Escuela Politécnica Nacional. Inicialmente se describe la metodología para la simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales, y en segundo lugar la metodología para la Experimentación para obtención de hidrocarburos a partir de etanol. En la Figura 2.1 se detalla de manera global todo el procedimiento seguido en la realización de este proyecto.

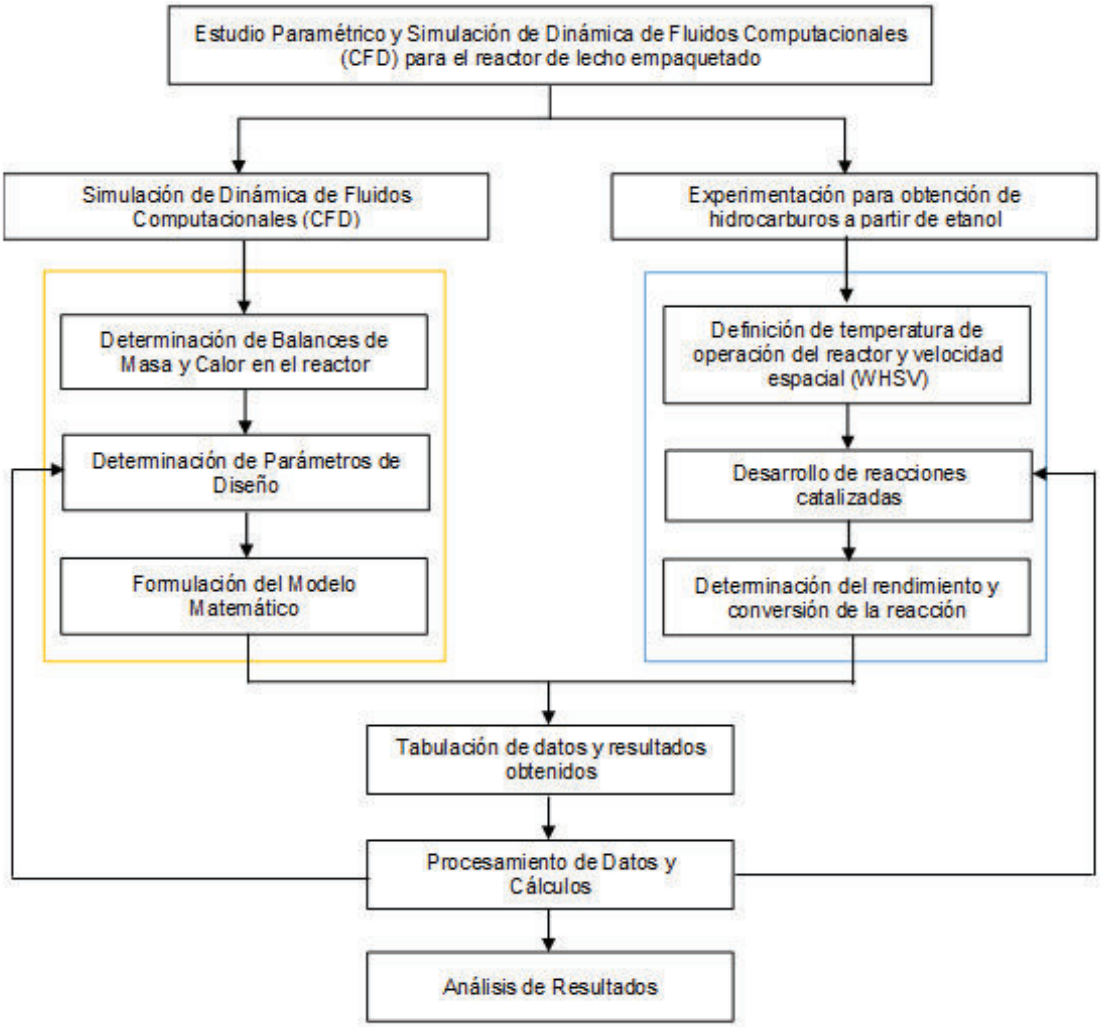


Figura 2.1. Esquema de la metodología del estudio paramétrico y simulación de dinámica de fluidos computacionales (CFD) para el reactor de lecho empaquetado.
(Fuente: Propia)

2.1. Simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales (CFD)

Para la simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales de todo proceso térmico es necesario definir las ecuaciones diferenciales parciales que representen a los fenómenos de transporte. Para el caso de la formulación del modelo para el reactor de lecho empacado se definieron las ecuaciones de balance masa y calor en función de la dimensión axial (z). Estos modelos matemáticos presentados tuvieron como variables temperatura y la concentración de los elementos del sistema.

2.1.1. Balance de masa y calor

En esta sección se detalla las ecuaciones de transferencia de masa y calor que se utilizó para describir el modelo matemático utilizado en la simulación de la Dinámica Computacional del fluido para el reactor de lecho empacado. Se consideró que es un sistema homogéneo es decir que la concentración y la temperatura permanecen constante en la partícula de catalizador como en la fase gaseosa, y que no es necesaria la información respecto a la transferencia de calor y masa entre la fase sólida y fluida.

Además, se consideró que el sistema es de una dimensión, en donde la variación radial de la concentración y temperatura no son tomadas en cuenta, por lo que la velocidad de transferencia de calor entre el fluido y la pared es proporcional a la diferencia de la temperatura del lecho y la temperatura de la pared. A continuación, se detallan el balance de calor y masa del sistema en las ecuaciones 2.1 y 2.2:

Variación de calor a través del tiempo (fase sólida y fluida)	=	Variación de calor por convección (fase fluida)	+	Variación de calor por conducción axial (fase sólida)	+	Pérdida de calor por enfriamiento	+	Generación de calor por reacción

- Balance de calor

$$\left(\varepsilon_0\delta_g Cp_g + (1-\varepsilon_0)\delta_p Cp_s\right)\frac{\partial T}{\partial t} = -v_0\delta_g Cp_g\frac{\partial T}{\partial z} + \lambda_{cz}\frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{4U}{\partial T}\,(T - Tc) + \delta_b\eta(-\Delta H)r_v \qquad \text{(Ec.2.1)}$$

- Balance de masa

Variación de la concentración a través del tiempo (fase fluida)	=	Variación de concentración por convección (fase fluida)	+	Variación de concentración por difusión axial (fase sólida y fluida)	+	Generación de moles por reacción

$$\varepsilon \frac{\partial C_i}{\partial t} = -v \frac{\partial C_i}{\partial z} + D_{cz} \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \delta_b \eta r_{vi} \qquad \text{(Ec. 2.2)}$$

Las ecuaciones planteadas se definieron con las siguientes condiciones de borde expresadas en las ecuaciones 2.3 y 2.4:

$$\lambda_{cz} \frac{\partial T}{\partial z} = v_0 \delta_g Cp_g (T - T_0) \text{ cuando } z = 0 \qquad \text{(Ec. 2.3)}$$

$$D_{cz} \frac{\partial C_i}{\partial z} = v_0 (C_i - C_0) \text{ cuando } z = 0 \qquad \text{(Ec. 2.4)}$$

2.1.2. Parámetros de diseño

En esta sección se definió las correlaciones para el cálculo de los parámetros de transferencia de masa y calor considerando que el modelo estuvo diseñado para un lecho empacado en donde ocurre una reacción química con catalizador. Todas las correlaciones se establecieron considerando que la porosidad y la velocidad del fluido se mantienen uniformes en todo el sistema, así como que la dispersión es constante.

El parámetro de diseño más importante es la conductividad térmica axial, la cual fue descrita como la suma de la contribución estática y la contribución dinámica del sistema. A partir de la correlación presentada por Dixon y Cresswell [25], se planteó la ecuación 2.5 que depende del número adimensional de Peclet efectivo axial de calor en base al diámetro de la partícula Pe_{hz} expresado en la ecuación 2.6.

$$\frac{1}{Pe_{hz}} = \frac{\lambda_f^0 / \lambda_f}{Re_p \cdot Pr} + 0.7 \qquad \text{(Ec. 2.5)}$$

$$Pe_{hz} = \frac{dp\, \overline{Cp}\, \bar{\delta}\, v}{\lambda_{cz}} \qquad \text{(Ec. 2.6)}$$

Para la resolución de la ecuación de 2.5 fue necesario, además, definir la conductividad térmica del fluido (mezcla gaseosa) así como de la conductividad térmica estándar del reactor de lecho empacado, esto se define a partir de las ecuaciones 2.7, 2.8, 2.9 y 2.10

$$\lambda_r^{\circ} = \left(\sqrt{1-\varepsilon_0} - 1\right) - \frac{2\sqrt{1-\varepsilon_0}}{1 - B \cdot K^{-1}}\left[\frac{B(1-K^{-1})}{1 - B \cdot K^{-1}} \cdot ln\left(\frac{K}{B}\right) - \frac{B-1}{1 - B \cdot K^{-1}} - \frac{B+1}{2}\right] \qquad \text{(Ec. 2.7)}$$

$$\lambda_f = \sum_{i=1}^{n} \frac{X_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^{n} y_i \phi_{ij}} \qquad \text{(Ec. 2.8)}$$

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(1 + \frac{PM_i}{PM_j}\right)^{-1/2}\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2}\left(\frac{PM_j}{PM_i}\right)^{1/4}\right]^2 \qquad \text{(Ec. 2.9)}$$

$$\phi_{ji} = \frac{\mu_j}{\mu_i} \cdot \frac{PM_i}{PM_j} \cdot \phi_{ij} \qquad \text{(Ec. 2.10)}$$

Bajo la determinación de la constante B en función de Cf y la constante K partir de las ecuaciones 2.11 y 2.12.

$$B = Cf\left(\frac{1-\varepsilon_o}{\varepsilon_o}\right) \qquad \text{(Ec. 2.11)}$$

Donde $Cf = 1{,}25$ para esferas y $Cf = 2{,}5$ para cilindros

$$K = \frac{\lambda_s}{\lambda_f} \qquad \text{(Ec. 2.12)}$$

Finalmente, fue necesario la determinación de los números adimensionales de Reynolds basado en el diámetro de partícula y Prandal, presentados en las ecuaciones 2.13 y 2.14.

$$Re_p = \frac{\bar{\delta}\, v\, d_p}{\bar{\mu}} \qquad \text{(Ec. 2.13)}$$

$$Pr = \frac{\overline{Cp}\, \bar{\mu}}{\lambda_f} \qquad \text{(Ec. 2.14)}$$

Otro parámetro de diseño que se determinó fue la dispersión de masa, considerando que el transporte es insignificante en la fase sólida, se pudo asumir que la dispersión de calor es análoga. Adicional, se consideró que existe difusividad molecular en la fase fluida del por lo que la difusividad efectiva es determinada por la convección y la difusión molecular. Dixon y Cresswell [25] presentaron una correlación para el cálculo de la conductividad másica axial, la cual se presenta en la ecuación 2.15, a partir del número de Peclet

efectivo axial de masa en base al diámetro de la partícula Pe_{mz} expresado en la ecuación 2.16:

$$\frac{1}{Pe_{mz}} = \frac{1-\sqrt{1-\varepsilon_0}}{Re_p \cdot Sc} + \frac{1}{2} \qquad \text{(Ec. 2.15)}$$

$$Pe_{mz} = \frac{dp\ v}{D_{cz}} \qquad \text{(Ec. 2.16)}$$

Para la resolución de la ecuación 2.4, fue necesario la determinación del número adimensional de Schmidt de cada componente de la fase fluida, el cual se presenta en la ecuación 2.17.

$$Sc_i = \frac{\mu_i}{\rho_i \cdot Dm} \qquad \text{(Ec. 2.17)}$$

2.1.3. Definición de los modelo y planteamiento del problema

En esta sección se plantearon los dos modelos matemáticos definidos para el reactor de lecho empacado; estos modelos son: el modelo homogéneo unidimensional estacionario y el modelo homogéneo dinámico unidimensional.

- Modelo Homogéneo Unidimensional Estacionario

En primer lugar, se determinó que las transferencias tanto de calor como de masa están en estado estacionario, por lo que las variaciones de temperatura y concentración respecto al tiempo no fueron consideradas. Se discretizó la temperatura $\theta = \frac{T}{T_0}$ y el eje axial $z' = z/L$ para convertir el sistema de ecuaciones diferenciales parciales en un sistema discreto de ecuaciones algebraicas.

Se consideró, además, que el grado de utilización del catalizador fue determinado por el factor de efectividad de la reacción. Este factor pudo ser definido al considerar que es la relación de velocidad de reacción promedio de toda la partícula sobre la velocidad de reacción a la temperatura y concentración en la superficie.

Adicional, se realizó un cambio de variables respecto a la determinación del número de Peclet efectivo axial de calor y masa el cual fue definido previamente en base al diámetro de la partícula por uno definido en función a las dimensiones del lecho, a partir de las ecuaciones 2.18 y 2.19.

$$Pe'_{hz} = \frac{L\,\bar{\delta}\,\overline{Cp}\,v}{\lambda_{cz}} \qquad \text{(Ec. 2.18)}$$

$$Pe'_{mz} = \frac{L\,v}{D_{cz}} \qquad \text{(Ec. 2.19)}$$

Finalmente, considerando que la reacción con la que se trabajó fue una reacción exotérmica se determinó que no existe pérdida de calor por enfriamiento. Y considerando que la porosidad permanece constante para todo el sistema, se definió el modelo homogéneo unidimensional estacionario, el cual se plantea en las ecuaciones 2.20 y 2.21

$$0 = -\frac{\partial\theta}{\partial z'} + \frac{1}{Pe'_{hz}}\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + + \frac{L}{vCp_f\delta_f T_0}(-\Delta H)r_v \qquad \text{(Ec. 2.20)}$$

$$0 = -\frac{\partial y_i}{\partial z'} + \frac{1}{Pe'_{mz}}\frac{\partial^2 y_i}{\partial z^2} + \frac{L}{vC_{0i}}\,\delta_b\,r_{vi} \qquad \text{(Ec. 2.21)}$$

Una vez que se definió el modelo matemático, fue necesario definir las condiciones de borde con el fin de tener una solución única, para este caso se consideró que los procesos de transferencia poseen condiciones de contorno de Dirichlet, es decir que la frontera está definida con valores fijos. Las condiciones de borde con las que se trabajó se presentan en las ecuaciones 2.22, 2.23 y 2.24:

$$\frac{\partial\theta}{\partial z'} = Pe'_{hz}\,(\theta - 1) \text{ cuando } z = 0 \text{ para todo } r \qquad \text{(Ec. 2.22)}$$

$$\frac{\partial y_i}{\partial z'} = Pe'_{mz}\,(y_i - 1) \text{ cuando } z = 0 \text{ para todo } r \qquad \text{(Ec. 2.23)}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial z} = \frac{\partial y_i}{\partial z} = 0 \text{ cuando } z = L \text{ para todo } r \qquad \text{(Ec. 2.24)}$$

- Modelo Homogéneo Unidimensional Dinámico

El segundo modelo con el que se trabajó fue un modelo que consideró la variación de la temperatura y la concentración respecto al tiempo. Para su definición se trabajó con las ecuaciones 2.20 y 2.21 presentadas para el modelo estacionario pero añadido las respectivas variaciones respecto al tiempo. Este modelo se plantea en las ecuaciones 2.25 y 2.26:

$$\frac{L\varepsilon}{v(3600)} + \frac{L\,Cp_s\delta_s\,(1-\varepsilon)}{vCp_f\delta_f\,(3600)}\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\frac{\partial\theta}{\partial z'} + \frac{1}{Pe'_{hz}}\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + + \frac{L}{vCp_f\delta_f T_0}(-\Delta H)r_v \qquad \text{(Ec. 2.25)}$$

$$\frac{L\varepsilon}{v(3600)}\frac{\partial y_i}{\partial t} = -\frac{\partial y_i}{\partial z'} + \frac{1}{Pe'_{mz}}\frac{\partial^2 y_i}{\partial z^2} + \frac{L}{vC_{0i}}\,\delta_b\,r_{vi} \qquad \text{(Ec. 2.26)}$$

Este modelo trabajó bajo las mismas condiciones de contorno de Dirichlet, presentadas en las ecuaciones 2.22, 2.23 y 2.24.

2.2. Experimentación para obtención de hidrocarburos a partir de etanol

Para la realización de este proyecto se trabajó con la reacción para la obtención de hidrocarburos a partir de etanol. La reacción presentó como productos alquenos como el eteno, el buteno y el octeno (gasolina) y adicional se obtuvo agua. La cinética y los mecanismos de la reacción fueron previamente definidos en el subcapítulo 1.2.

En el proyecto se trabajó con dos variables: la temperatura de operación del reactor y la velocidad espacial (WHSV, por sus siglas en inglés weight hourly space velocitv). El etanol antes de ingresar al reactor pasó por un proceso de precalentamiento y los productos de la reacción fueron enfriados en un condensador. Finalmente, los productos no volátiles fueron colocados a temperatura ambiente en embudos de separación. El método de calentamiento para el precalentador y para el reactor se lo realizó mediante resistencias eléctricas.

Al octeno obtenido de la reacción se le realizó los análisis estándar para gasolinas comerciales, como el análisis de la presión de vapor Reid, el análisis de destilación fraccionada y el análisis de gomas para determinar el rendimiento y conversión de la reacción con el fin de realizar una comparación de las características de un hidrocarburo comercial.

2.2.1. Temperatura de operación y velocidad espacial (WSHV)

Para la reacción catalítica se utilizaron tres temperaturas de reacción: 300, 370, y 450 °C, manteniendo un flujo constante de reactante mientras se varía la temperatura. La velocidad espacial por hora (WHSV) es el cociente entre el flujo de masa de los reactantes y para la masa del catalizador empacado en el reactor, se trabajará con tres valores: 0,5; 1 y 2 (h^{-1}), manteniendo la temperatura constante.

Para mantener la temperatura constante durante cada experimento el reactor de lecho empacado cuenta con un circuito cerrado de control, el mismo que posee un controlador “variac” de alta precisión. La temperatura se midió con una termocupla localizada en el centro del reactor, bajo control visual permanente durante el experimento.

La velocidad espacial, WHSV, es la relación entre la masa del flujo de reactantes dividida para el peso del catalizar empacado en el reactor y está expresando en función del inverso del tiempo (h^{-1}). Para alcanzar el valor de WHSV esperado se controla el flujo de reactantes a través de una la bomba de inyección En la ecuación 2.25 se presenta la ecuación a partir de la cual se define el flujo correspondiente para alcanzar el valor de velocidad espacial deseado.

$$Velocidad\ Espacial\ (WHSV) = \frac{Flujo\ de\ Reactantes\ \left({}^{g}/_{h}\right)}{masa\ de\ catalizar\ en\ el\ reactor\ (g)} \qquad \text{(Ec. 2.25)}$$

2.2.2. Reacciones catalizadas

Para la realización de las experimentaciones para el desarrollo de las reacciones catalizadas para la obtención de hidrocarburos a partir de etanol primero fue necesario la preparación del catalizador y su respectiva activación. Para todos los experimentos se trabajó con un catalizador en forma de polvo CBV 28014 H-ZSM-5, con una relación de sílice (SiO_2) – alúmina (Al_2O_3) de 280 mol/mol con un área superficial den 400 m^2/g.

Para utilizar el catalizar dentro del reactor previamente fue transformado en pellets de un tamaño menor a 0,5 cm a partir de un proceso de prensado y trituración en la prensa hidráulica del Laboratorio de Termodinámica de la FIQA. Dentro del reactor se colocaron 60g de catalizador, el cual permanecía activo por alrededor de 30 horas. Para la reactivación del catalizador gastado se calentó la zeolita a una temperatura de 560ºC durante 5 horas en una mufla.

En la Figura 2.2 se presenta el esquema del sistema del reactor de lecho empacado con el que se trabajó en todo el proyecto. El sistema está compuesto por un reactor tubular PFR construido de acero inoxidable, el cual cuenta con un lecho para colocar el catalizador de 0,35m de longitud con un diámetro interno de 0,02 m. Adicional, cuenta con un tanque cerrado destinado al almacenamiento de los reactantes, tuberías de interconexión de acero inoxidable de ¼ plg, válvulas de control de flujo y un precalentador. Tanto el reactor como el precalentador poseen cintas de calentamiento de fibra de vidrio y materiales compuestos.

Para alcanzar las condiciones isotérmicas necesarias para que se alcance la reacción se utilizaron resistencias eléctricas tipo U acopladas al reactor, las cuales eran controladas a

partir de un controlador de temperatura digital tipo PID. El controlador se encargaba de la temperatura de calentamiento y de la estabilización de la temperatura de reacción. Todos los experimentos se desarrollaron a presión atmosférica en la ciudad de Quito, es decir a 71,77 kPa, con flujo continuo en fase fluida.

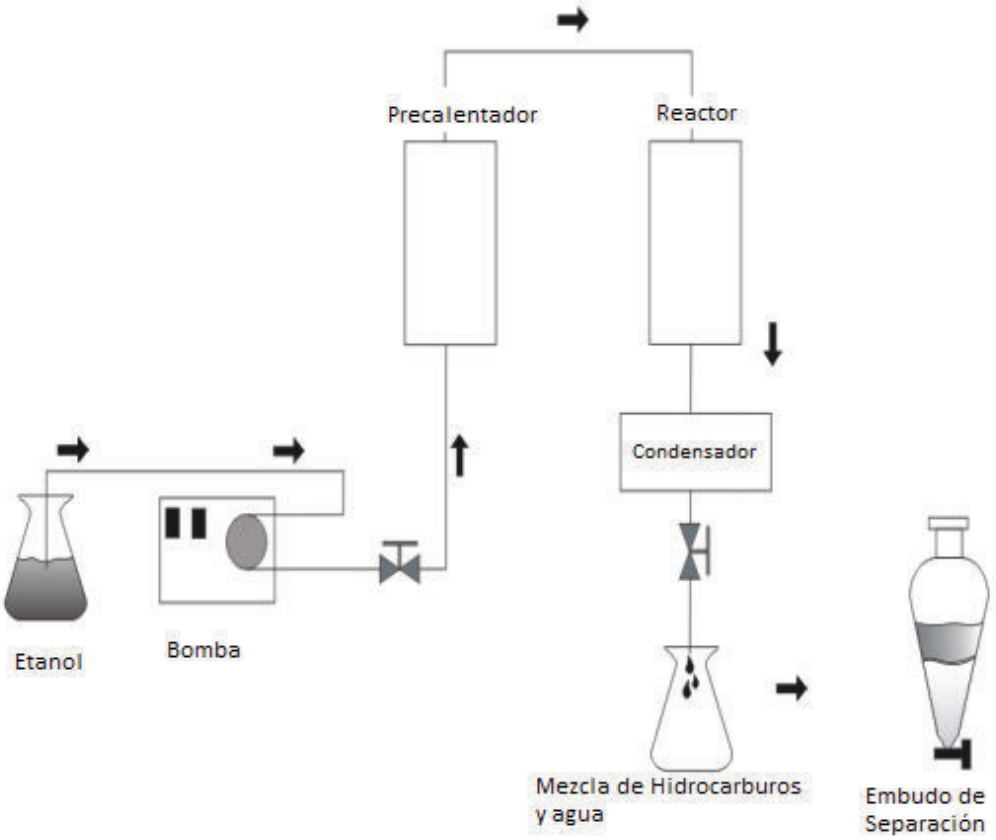


Figura 2.2. Esquema del Reactor PFR a nivel de laboratorio para la conversión de metanol y metanol/etanol a hidrocarburos.
(Fuente: Guandinango)

Los productos de la reacción salieron en estado gaseoso hacia un condensador de gases en espiral, el cual utilizó una mezcla agua-hielo a 0°C para el proceso de enfriamiento. Finalmente, los productos condesados fueron separados en un embudo de separación. En la Tabla 2.1 se presentan las condiciones de trabajo de los experimentos con el propósito determinar las mejores condiciones de operación.

Tabla 2.1. Condiciones de temperatura (T) y velocidad espacial (WHSV) para la reacción de metanol sobre zeolita HZSM-5.

	Reacciones Catalíticas		
	WHSV (h^{-1})		
T (°C)	**0,5**	**1**	**2**
300	Experimento 1	Experimento 2	Experimento 3

370	Experimento 4	Experimento 5	Experimento 6
400	Experimento 7	Experimento 8	Experimento 9

(Fuente: Propia)

2.2.3. Rendimiento y conversión de la reacción

Para la determinación del rendimiento de la reacción en función de las condiciones de operación establecidas se ingresó al reactor como base 1000 mL de etanol (reactivo) y se utilizó la ecuación 2.26 para el octeno (gasolina) debido a que este era el producto de interés.

$$Rendimiento\ (\%w) = \frac{peso\ del\ producto}{peso\ del\ reactivo} \times 100\% \qquad \text{(Ec. 2.26)}$$

Se realizaron análisis químicos a las muestras obtenidas para así determinar la influencia del etanol en las características de los hidrocarburos y a su vez para la determinación de la conversión de la reacción. Los análisis realizados fueron presión de vapor Reid, destilación fraccionaria y análisis de gomas. Los resultados de las muestras fueron comparados con los valores estándar que poseen los hidrocarburos comerciales para determinar las condiciones de operación a partir de las cuales se obtiene un hidrocarburo con características químicas más similares a un hidrocarburo comercial.

Los análisis químicos de las muestras fueron realizados en el laboratorio de Petróleos de la FIQA. La determinación de la Presión de Vapor a partir del Método Reid se realizó según la norma ASTM D323-15a, la destilación Fraccionaria se realizó según la norma ASTM D86-18, y finalmente la determinación del contenido de gomas por el método de evaporación se realizó según la norma ASTM D381-12. Los valores establecidos para los hidrocarburos comerciales fueron presentados en la Tabla 1.1.

3. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En este capítulo se presentan los resultados de la simulación de la dinámica de fluidos computacional, así como los resultados de la experimentación para la obtención de hidrocarburos a partir de etanol. La comparación de estos resultados permitió determinar las mejores condiciones de operación del reactor de lecho empaquetado.

3.1. Simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales

Como resultado de la simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales se definieron las ecuaciones diferenciales parciales que representaron los fenómenos de transporte, es decir los balances masa y calor en función de la dimensión axial (z).

En este subcapítulo se definieron las características del lecho empacado y el catalizador en la Tabla 3.1, las características y las propiedades del fluido en la Tabla 3.2 y los parámetros de diseño en las Tablas 3.3., 3.4., y 3.5. Todos estos valores fueron necesarios para definir los modelos descritos en la sección 2.1.3. Todos los cálculos realizados para la obtención de los parámetros se detallan en los anexos.

Tabla 3.1. Parámetros del catalizador y del reactor.

$L\ (m)$	$0{,}35$
$R\ (m)$	$2{,}56 \times 10^{-3}$
$R_0\ (m)$	$2{,}54 \times 10^{-3}$
$A\ (m^2)$	$2{,}38 \times 10^{-3}$
$\delta_b \left({kg}/{m^3} \right)$	$338{,}983$
$\delta_s \left({kg}/{m^3} \right)$	1000
ε_0	$0{,}66$
$d_p\ (m)$	1×10^{-3}
$Cp_s \left({J}/{kgK} \right)$	$836{,}8$

(Fuente: Propia)

Estos parámetros permitieron realizar los análisis considerando las dimensiones del reactor de lecho empacado que se encuentra en el laboratorio de Termodinámica de la Facultad de Ingeniería Química y Agroindustria, así como el catalizador que se empleó en los procesos experimentales.

Tabla 3.2. Parámetros de fluido.

Corrida Número	1	2	3
$Flujo\left({m^3}/{s}\right)$	$2{,}12 \times 10^{-8}$	$1{,}2 \times 10^{-8}$	$1{,}2 \times 10^{-8}$
$v\ ({m}/{s})$	$2{,}38 \times 10^{-6}$	$1{,}35 \times 10^{-6}$	$1{,}35 \times 10^{-6}$
$\delta_f\ \left({kg}/{m^3}\right)$	0,716	0,584	0,584
$Cp_f\ \left({J}/{kgK}\right)$	2435,46	2473,17	2473,17
$\overline{PM}_g\left({g}/{mol}\right)$	40,374	51,526	51,526
$\mu_g\ \left({Nm}/{m^2}\right)$	$1575{,}05 \times 10^{-8}$	$1331{,}027 \times 10^{-8}$	$1331{,}027 \times 10^{-8}$
$\lambda_f\ ({W}/{mK})$	$17{,}709 \times 10^{-3}$	$14{,}231 \times 10^{-3}$	$2{,}38 \times 10^{-3}$
$\lambda_r^0\ ({W}/{mK})$	1,57336	1,73044	1,73044

(Fuente: Propia)

Se consideró que el fluido era una mezcla de gases uniforme compuesta por eteno, buteno, octeno y agua, por lo que todos los parámetros del mismo fueron calculados considerando las fracciones molares de los componentes.

Tabla 3.3. Números adimensionales para definir los parámetros de diseño.

Corrida Número	1	2	3
Re_p	0,000085	0,000073	0,000073
Pr	2,13228	2,31316	2,31316
$Sc_{C_2H_4}$	9,67192		
$Sc_{C_4H_8}$	4,07239		
$Sc_{C_8H_{16}}$	1,39898		
Sc_{H_2O}	3,90909		

(Fuente: Propia)

Los números adimensionales indican que la distribución de velocidades del fluido es uniforme y por tanto es considerado un fluido laminar.

Tabla 3.4. Parámetros de transferencia de masa y calor.

Corrida Número	1	2	3
$\lambda_{cz}\ ({W}/{mK})$	1,57743	17,2145	17,2145
Pe'_{hz}	0,000725	0,000049	0,000049
${1}/{Pe'_{hz}}$	1378,04	20408,2	20408,2

$D_{cz\,(C_2H_4)}\,(W/_{mK})$	$1{,}21 \times 10^{-6}$	$7{,}38 \times 10^{-7}$	$7{,}38 \times 10^{-7}$
$Pe'_{mz\,(C_2H_4)}$	0,68843	0,592105	0,592105
$1/_{Pe'_{mz\,(C_2H_4)}}$	1,45258	1,68889	1,68889
$D_{cz\,(C_4H_8)}\,(W/_{mK})$	$2{,}87 \times 10^{-6}$	$1{,}89 \times 10^{-6}$	$1{,}89 \times 10^{-6}$
$Pe'_{mz\,(C_4H_8)}$	0,290483	0,249487	0,249487
$1/_{Pe'_{mz\,(C_4H_8)}}$	3,44254	4,0023	4,0023
$D_{cz\,(C_8H_{16})}\,(W/_{mK})$	$8{,}35 \times 10^{-6}$	$9{,}717 \times 10^{-6}$	$9{,}717 \times 10^{-6}$
$Pe'_{mz\,(C_8H_{16})}$	0,099816	0,048626	0,048626
$1/_{Pe'_{mz\,(C_8H_{16})}}$	10,0185	20,5651	20,5651
$D_{cz\,(H_2O)}\,(W/_{mK})$	$2{,}99 \times 10^{-6}$	$3{,}48 \times 10^{-6}$	$3{,}48 \times 10^{-6}$
$Pe'_{mz\,(H_2O)}$	0,278838	0,135843	0,135843
$1/_{Pe'_{mz\,(H_2O)}}$	3,58631	7,36143	7,36143

(Fuente: Propia)

A partir de los parámetros de transferencia de masa y de calor se determinó que la reacción es endotérmica ya que los valores de los componentes de la reacción respecto a sus conductividades térmicas son positivas.

Todos los parámetros presentados sirven para completar los modelos matemáticos de nuestro proyecto, los cuales se presentan en las siguientes ecuaciones:

- Modelo Unidimensional Estacionario (Flujo 1)

Se completa el modelo establecido en las ecuaciones 2.20 y 2.21. La ecuación 3.1 corresponde a la ecuación del balance de energía, y las ecuaciones 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5 corresponden a las ecuaciones del balance de masa del C_2H_4, C_4H_8, C_8H_{16} y H_2O respectivamente para la primera simulación.

$$0 = -\frac{\partial \theta}{\partial z'} + 1378{,}04\,\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + (-10{,}0778) \qquad \text{(Ec. 3.1)}$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_2H_4}}{\partial z'} + 1{,}45258\frac{\partial^2 y_{C_2H_4}}{\partial z^2} + 1{,}75116 \qquad \text{(Ec. 3.2)}$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_4H_8}}{\partial z'} + 3{,}44254\frac{\partial^2 y_{C_4H_8}}{\partial z^2} + 1{,}75299 \qquad \text{(Ec. 3.3)}$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_8H_{16}}}{\partial z'} + 10{,}0185\frac{\partial^2 y_{C_8H_{16}}}{\partial z^2} + 1{,}75817 \qquad \text{(Ec. 3.4)}$$

$$0 = \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial z'} + 3{,}58631 \frac{\partial^2 y_{H_2O}}{\partial z^2} + 3{,}46814 \qquad \text{(Ec. 3.5)}$$

- Modelo Unidimensional Estacionario (Flujo 2)

Se completa el modelo establecido en las ecuaciones 2.20 y 2.21. La ecuación 3.6 corresponde a la ecuación del balance de energía, y las ecuaciones 3.7, 3.8, 3.9 y 3.10 corresponden a las ecuaciones del balance de masa del C_2H_4, C_4H_8, C_8H_{16} y H_2O, respectivamente para la segunda simulación.

$$0 = -\frac{\partial \theta}{\partial z'} + 20408{,}2 \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + (-7{,}80698) \qquad \text{(Ec. 3.6)}$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_2H_4}}{\partial z'} + 1{,}68889 \frac{\partial^2 y_{C_2H_4}}{\partial z^2} + 1{,}75769 \qquad \text{(Ec. 3.7)}$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_4H_8}}{\partial z'} + 1{,}63221 \frac{\partial^2 y_{C_4H_8}}{\partial z^2} + 1{,}793 \qquad \text{(Ec. 3.8)}$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_8H_{16}}}{\partial z'} + 20{,}5651 \frac{\partial^2 y_{C_8H_{16}}}{\partial z^2} + 1{,}74007 \qquad \text{(Ec. 3.9)}$$

$$0 = \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial z'} + 2{,}73886 \frac{\partial^2 y_{H_2O}}{\partial z^2} + 1{,}75842 \qquad \text{(Ec. 3.10)}$$

- Modelo Unidimensional Dinámico (Flujo 2)

Se completa el modelo establecido en las ecuaciones 2.24 y 2.25. Este modelo es descrito en base al Modelo Unidimensional Estacionario de la segunda simulación, debido a que se presentan los mejores resultados en estado estacionario. Las ecuaciones del modelo consideran las ecuaciones 3.6 hasta la 3.10 adicionando el valor referente al análisis del tiempo. La ecuación 3.11 corresponde a la ecuación del balance de energía, y las ecuaciones 3.12, 3.13, 3.14 y 3.15 corresponden a las ecuaciones del balance de masa del C_2H_4, C_4H_8, C_8H_{16} y H_2O, respectivamente

$$11609{,}8 \frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial \theta}{\partial z'} + 20408{,}2 \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + (-7{,}80698) \qquad \text{(Ec. 3.6)}$$

$$45{,}5309 \frac{\partial y_{C_2H_4}}{\partial t} = \frac{\partial y_{C_2H_4}}{\partial z'} + 1{,}68889 \frac{\partial^2 y_{C_2H_4}}{\partial z^2} + 1{,}75769 \qquad \text{(Ec. 3.7)}$$

$$45{,}5309 \frac{\partial y_{C_4H_8}}{\partial t} = \frac{\partial y_{C_4H_8}}{\partial z'} + 1{,}63221 \frac{\partial^2 y_{C_4H_8}}{\partial z^2} + 1{,}793 \qquad \text{(Ec. 3.8)}$$

$$5{,}5309\ \frac{\partial y_{C_8H_{16}}}{\partial t} = \frac{\partial y_{C_8H_{16}}}{\partial z'} + \ 20{,}5651 \frac{\partial^2 y_{C_8H_{16}}}{\partial z^2} + \ 1{,}74007 \qquad \text{(Ec. 3.9)}$$

$$45{,}5309\ \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial t} = \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial z'} + \ 2{,}73886 \frac{\partial^2 y_{H_2O}}{\partial z^2} + 1{,}75842 \qquad \text{(Ec. 3.10)}$$

3.2. Experimentación para obtención de hidrocarburos a partir de etanol

La parte experimental del presente proyecto consiste en obtener hidrocarburos a partir de etanol utilizando un reactor de lecho empacado con un catalizador de silice/alumina. Los hidrocarburos que se desea obtener son hidrocarburos condensables (gasolina), sin embargo, la reacción produce productos secundarios como hidrocarburos volátiles (eteno, buteno) y agua. Los experimentos consideran como variables de trabajo la velocidad espacial (WHSV) y la temperatura, y fueron realizados bajo las condiciones especificadas en la Tabla 2.1.

De los 9 experimentos propuestos, dos de los cuales presentan resultados una conversión aceptable de etanol a hidrocarburos condensables, es decir una conversión superior al 10%. El resto de los experimentos presentan conversiones a hidrocarburos líquidos menores al 1%, esto ocurre debido a que únicamente se produce una deshidratación alcohólica como reacción química.

A temperaturas bajas la reacción da como producto únicamente agua, mientras que a temperaturas altas la reacción da como resultado únicamente hidrocarburos volátiles. Cuando se trabaja a una temperatura aceptable, pero con un WHSV superior a 1 la reacción tampoco es favorable ya que los productos son agua e hidrocarburos volátiles. Los experimentos que presentan resultados aceptables son aquellos en los que la temperatura de la reacción es igual a 370°C con velocidades espaciales de 0,5 y 1 (s^{-1}). De las muestras que presentan hidrocarburos condensables se obtiene el rendimiento de octeno en cada caso a partir de la ecuación 2.26, a partir de los datos presentados en la Tabla 3.5

Tabla 3.5. Resultados experimentales.

Condiciones de la Reacción	Volumen de Etanol (mL)	Volumen de Octeno (mL)	Volumen de Buteno (mL)	Volumen de Agua (mL)	Volumen de Eteno (mL)
$T = 370°C$ $WHSV = \ 1\ s^{-1}$	2500	191,59	799,07	710,28	799,07
$T = 370°C$	2500	631,43	507,85	852,86	507,85

$WHSV = 0{,}5\ s^{-1}$					

(Fuente: Propia)

Para obtener el rendimiento de la reacción es necesario pasar del volumen de reactantes y productos a pesos por lo que utilizamos la densidad. Los pesos obtenidos de etanol y octeno, el cual es nuestro producto de interés, se presentan en la Tabla 3.6.

Tabla 3.6. Datos experimentales para cálculo del rendimiento.

Especie	**Volumen** (mL)	**Densidad** (g/mL)	**Masa** (g)
Etanol	2500	0,789	1787,5
Octeno (Muestra 1)	191,59	0,715	136,99
Octeno (Muestra 2)	631,43	0,715	451,47

(Fuente: Propia)

Finalmente se calcula el rendimiento de cada muestra

$$Rendimiento\ (\%w)_1 = \frac{136{,}99}{1787{,}5} \times 100\% = 7{,}66\ \%$$

$$Rendimiento\ (\%w)_2 = \frac{451{,}47\ g}{1787{,}5} \times 100\% = 25{,}26\ \%$$

Como se observa en los cálculos realizados, el rendimiento en la muestra 2, es decir con una velocidad de reacción más baja es mayor el rendimiento, lo que indica que bajo estas condiciones la reacción ocurre de manera más favorable.

Los resultados de los análisis químicos de las muestras obtenidas experimentalmente son mostrados en la Tabla 3.7.

Tabla 3.7. Resultados de los análisis químicos.

				Muestra 1	**Muestra 2**
Ensayo	**Norma**	**Unidad**	**Norma requisito**	**Valor obtenido**	**Valor obtenido**
Ensayo de destilación	Temperatura del 10%	°C	70 Máx	92	84
	Temperatura del 50%	°C	77 a 121	131	130
	Temperatura del 90%	°C	190 Máx	178	177
	Punto final	°C	220 Máx	212	220
	Residuo	%	2,0 Máx	1,0	1,0
Presión de vapor Reid		kPa	60 Máx	21.4	26,9
Contenido de gomas		mg/100mL	3,0 Máx	111,13	32,7

(Fuente: Propia)

- Contenido de gomas

La muestras de gasolina obtenidas experimentalmente presentan un alto contenido de gomas, el cual se encuentra fuera de los límites permitidos por la norma INEN 935. Un alto contenido de gomas significa que existe una gran cantidad de compuestos cíclicos. Una de las razones por la que las muestras presentan alto contenido de gomas es porque la obtención de gasolina tomaba varios días, lo que ocasionaba que algunos de los hidrocarburos de la gasolina reaccionasen con el oxígeno del ambiente formándose las gomas. Es por esto, que se hace imprescindible la refrigeración inmediata de las muestras que se obtienen en cada experiemento.

- Ensayo de destilación

Para determinar la distribución de los hidrocarburos líquidos en función de su peso molecular se realiza un ensayo de destilación. Los valores de temperatura que se muestran en el ensayo, son tomados cuando se haya condensado el 10, 50 y 90% de la muestra evaporada. Para la primera lectura de temperatura, ambas muestras presentan una temperatura superior a la permitida por la norma lo que indica un bajo contenido de volátiles. En la segunda lectura de temperatura, ambas muestras presentan resultados muy próximos a los de una gasolina comercial. La temperatura del 50% es muy importante ya que este parámetro indica el contenido de parafinas condensables que contiene una gasolina, por lo tanto, las muestras obtenidas experimentalmente presentan una cantidad similar de hidrocarburos condensables a la que contiene la gasolina vendida en nuestro país. La temparatura del 90% y punto final indican la cantidad de aromáticos que presenta una muestra de gasolina, esto quiere decir que las muestras 1 y 2 no contienen un exceso de aromáticos cumpliendo con este parámetro requerido por la norma INEN 935 para una gasolina comercial. Finalmente, las muestras obtenidas tienen un bajo contenido de residuos, cumpliendo con el límite permitido.

- Presión de vapor Reid

La presión de vapor que presentan las muestras obtenidas experimentalmente se encuentran por debajo del límite requerido por la norma INEN 935 para gasolinas comerciales. Ambas muestras de gasolina presentan bajas presiones de vapor, dicha propiedad física está estrechamente ligada con la volatilidad, transporte y almacenamiento de la gasolina. Una gasolina volátil facilitará el encendido del motor, por

lo tanto, la gasolina obtenida experimentalmente tiene un desempeño similiar a la gasolina comercial Súper.

3.3. Análisis de resultados de la simulación en CFD y la experimentación.

Corresponde a la presentación de la interpretación que el autor hace de los resultados obtenidos, analizando su significado. En esta sección se debe, además vincular los resultados logrados con el contexto científico en el cual el autor enmarcó la pregunta de investigación en la introducción. Si la investigación ha involucrado la definición de hipótesis, en esta sección se discute el apoyo o rechazo de las mismas. En general, la discusión sigue lineamientos coherentes con la pregunta de investigación, los objetivos y los resultados obtenidos.

Para la presentación del análisis de resultados del presente proyecto se considera que el eje x es el eje axial normalizado (z') y toma valores de 0 a 1. Adicional se determina que las variables independientes en el eje axial van de 0 a 1, todo esto para facilitar el análisis. La Figura 3.1 muestra el esquema del reactor simplificado en donde el eje axial ha sido discretizado considerando que $z' = z/L$.

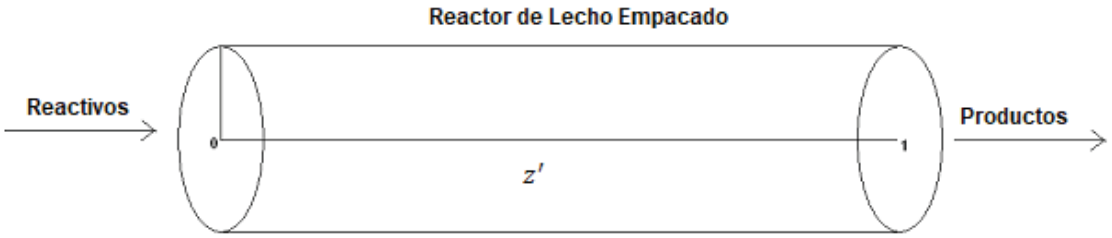


Figura 3.1. Esquema del reactor simplificado.
(Fuente: Taco)

La simulación de la Dinámica del Fluidos Computaciones fue realizada en 3 corridas, estas corridas consideraron la temperatura del reactor y las velocidades espaciales que presentaron resultados experimentales, esto debido a que de esta manera se puede realizar una comparación entre los dos análisis. El análisis del modelo dinámico fue establecido a las condiciones de funcionamiento que presentaron los mejores resultados experimentales Las condiciones de las corridas se presentan en la Tabla 3.8

Tabla 3.8. Condiciones de la simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales (CFD).

Condiciones del Reactor	Corrida 1	Corrida 2	Corrida 3

Temperatura (K)	643	643	643
Velocidad Espacial (h^{-1})	1	0,5	0,5

(Fuente: Propia)

3.3.1. Análisis de la concentración de octeno (C_8H_{16}) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario

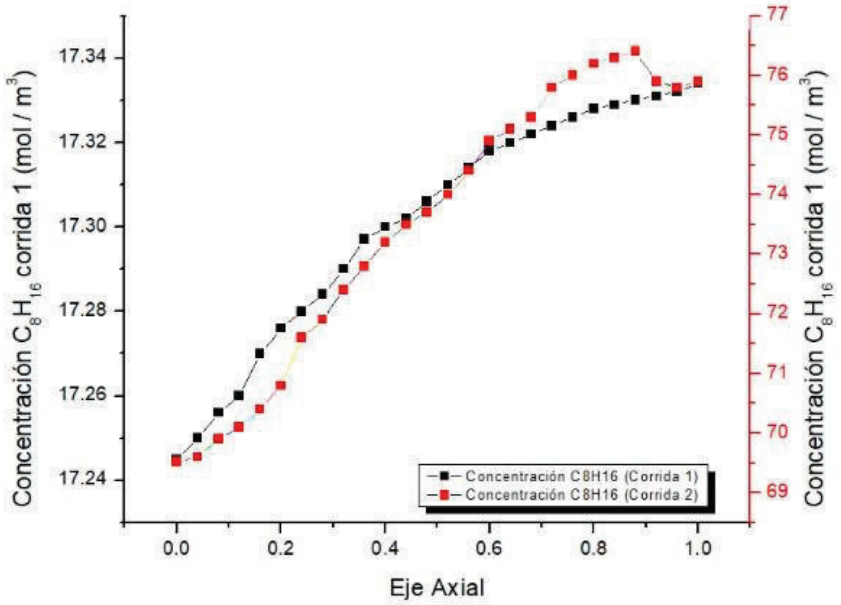
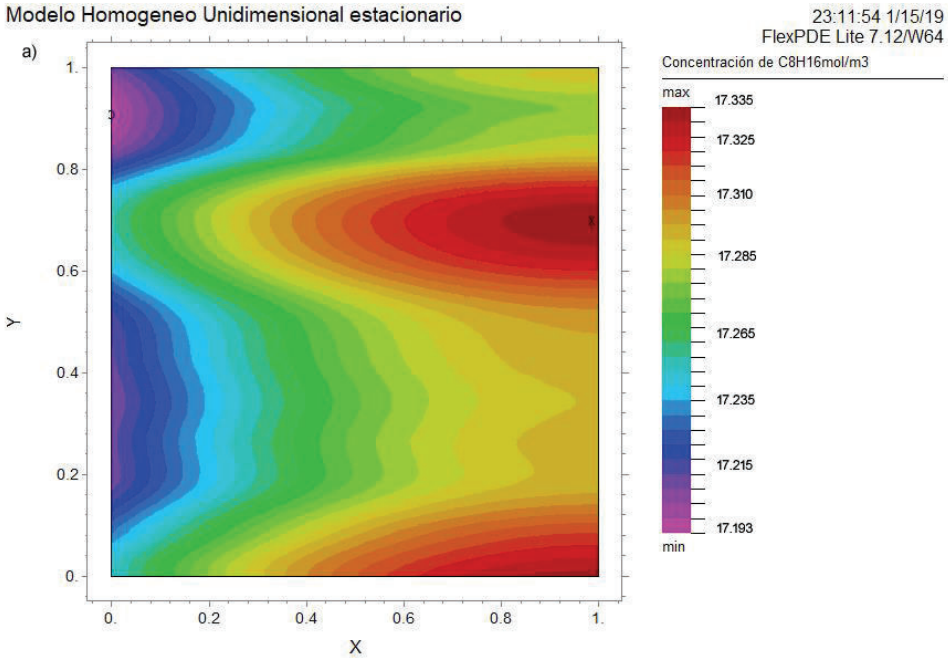


Figura 3.2. Concentración molar de C_8H_{16} en simulaciones en estado estacionario.
(Fuente: Propia)

En la Figura 3.2 se puede observar los perfiles de concentración molar mol/m^3 del hidrocarburo condensable de mayor interés, el octeno (C_8H_{16}). El perfil de concentración en ambas simulaciones es un perfil creciente con la misma tendencia, esto debido a que el octeno es un producto en la reacción y va aumentando conforme pasa por el eje axial del reactor. Para ambas corridas, de 0,0 a 0,6 del eje axial existe un crecimiento aproximandamente lineal en donde la velocidad de la primera corrida es mayor pero la segunda corrida produce mayor cantidad de producto; la variación lineal inicial se debe a que la reacción con la que se trabajó es inmediata y la mayor cantidad de producto es producida en la primera parte del reactor. Mientras que, de 0,6 a 1,0 en el eje axial la pendiente de crecimiento es menor debido a que la mayor parte de reactivo ya se transformó en octeno y por ende existe menor cantidad de etileno que pueda reaccionar. Incluso en la segunda corrida ocurre un decrecimiento de la concentración, el mismo que puede ser explicado en términos que el reactivo se consumió por completo con lo que no se produjo ninguna reacción.

Al comparar los resultados entre las simulaciones se observa que en la corrida 1 el perfil de concentración de C_8H_{16} va de 17,24 mol/m^3a 17,34 mol/m^3 mientras que en la

corrida 2 el perfil de concentración de C_8H_{16} va de 69,52 mol/m^3a 76,40 mol/m^3. Esto quiere decir que en la corrida 2 se alcanza un valor de concentración superior al alcanzado en la corrida 1, determinando que la conversión de etanol a gasolina en la corrida 2 es más favorable debido a que la velocidad espacial es menor y por tanto, permiten una mayor obtención del producto de interés. Al considerar que la simulación con mejores resultados se obtuvo con una velocidad espacial menor se afirma que mientras menor es el WHSV de la reacción dentro del lecho empaquetado los reactivos tendrán mayor contacto con el catalizador por lo que ocurrirá una mayor conversión de la reacción, para este caso mientras mayor contacto tenga el etanol con el catalizador mayor será la obtención de hidrocarburos condensables como el octeno.



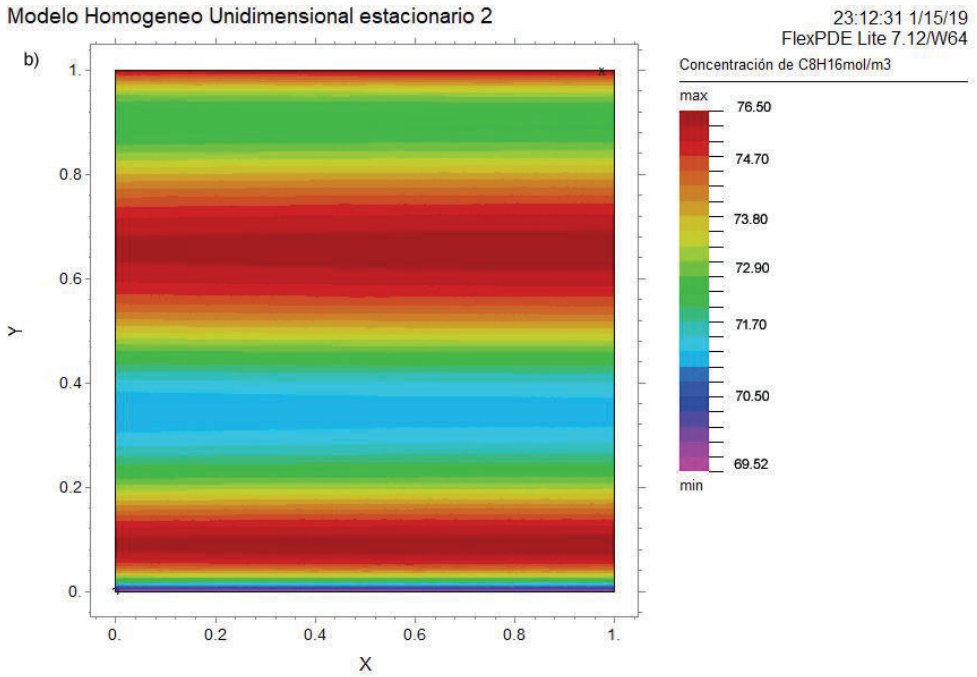


Figura 3.3. Concentración molar de C_8H_{16} en simulaciones en estado estacionario a) corrida 1 y b) corrida 2.
(Fuente: Propia)

La Figura 3.3 muestra la variación de concentración molar de la gasolina a lo largo del eje axial del reactor, tanto para la velocidad espacial de la corrida 1 y la corrida 2. En el gráfico a) se observa que la formación de la gasolina comienza a ocurrir en mayor cantidad a partir de 0,4 en el eje axial hasta llegar al máximo valor al final de dicho eje, y la reacción ocurre principalmente en la parte central de eje radial. Por otro lado, para la segunda velocidad, en el gráfico b), la formación de la gasolina es inmediata, obteniéndose la misma cantidad de producto a lo largo de todo el eje axial; mientras que en el valor de 0,6 del eje radial la concentración es mayor que en los extremos debido a que la entrada del reactivo es por la parte media del eje radial. Por lo tanto, la segunda velocidad espacial es la que presenta mejor rendimiento porque la formación de la gasolina ya que ocurre antes.

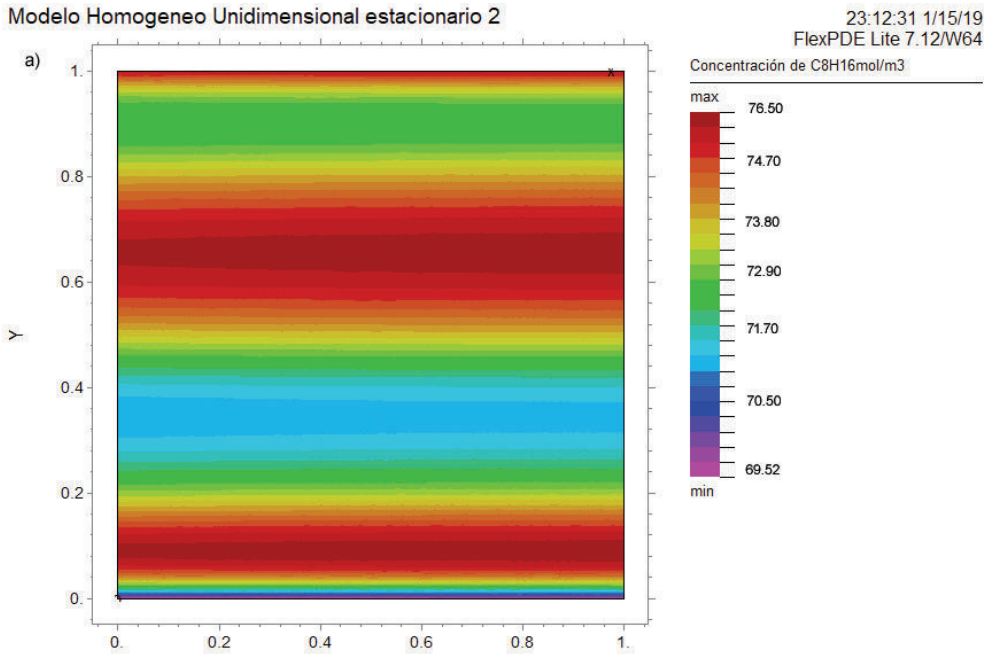
Al comparar resultados, se observa que a una velocidad más rápida la concentración alcanza un valor máximo de 17,33 mol/m^3, mientras que para una velocidad más lenta se alcanza un valor máximo de 76,40 mol/m^3 de gasolina. Por lo tanto, se comprueba que a una menor velocidad se obtiene perfiles de concentración mayores, esto sucede porque al ser el paso más lento a través del lecho favorece a la reacción y por ende se produce mayor cantidad de gasolina.

Además, para futuras investigaciones se debe considerar la variación de la concentración del producto en el eje radial, ya que en ambas figuras se muestra que existe una

variación de concentración de la gasolina en dicho eje. La variación de C_8H_{16} en el eje radial se da por la variación de porosidad que existe y que no fue tomada en cuenta para este trabajo.

3.3.2. Análisis de la concentración de octeno (C_8H_{16}) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario y del modelo en estado dinámico

En la Figura 3.4 se muestra la variación del perfil de concentración de la gasolina para el modelo estacionario (superior) y para el modelo dinámico (inferior). Se observa que para el modelo estacionario la variación de la concentración de la gasolina se da a lo largo del eje radial y no en el eje axial, debido a que la formación de gasolina es inmediata, la formación de gasolina se produce alrededor del eje radial de 0,6 es decir en la parte central del reactor por la entrada del reactivo que se da por esa sección. Por otro lado, para el modelo dinámico la concentración de gasolina varía de forma lineal a lo largo del eje axial desde 0 hasta 1 y se demuestra que la formación de gasolina se da en forma gradual a medida que los reactantes pasan a través del lecho del reactor. Esta diferencia que presenta el modelo dinámico de la variación del perfil de concentración exclusivamente en el eje radial se da porque en dicho modelo el estudio de la concentración se lo hace de manera constante en el tiempo.



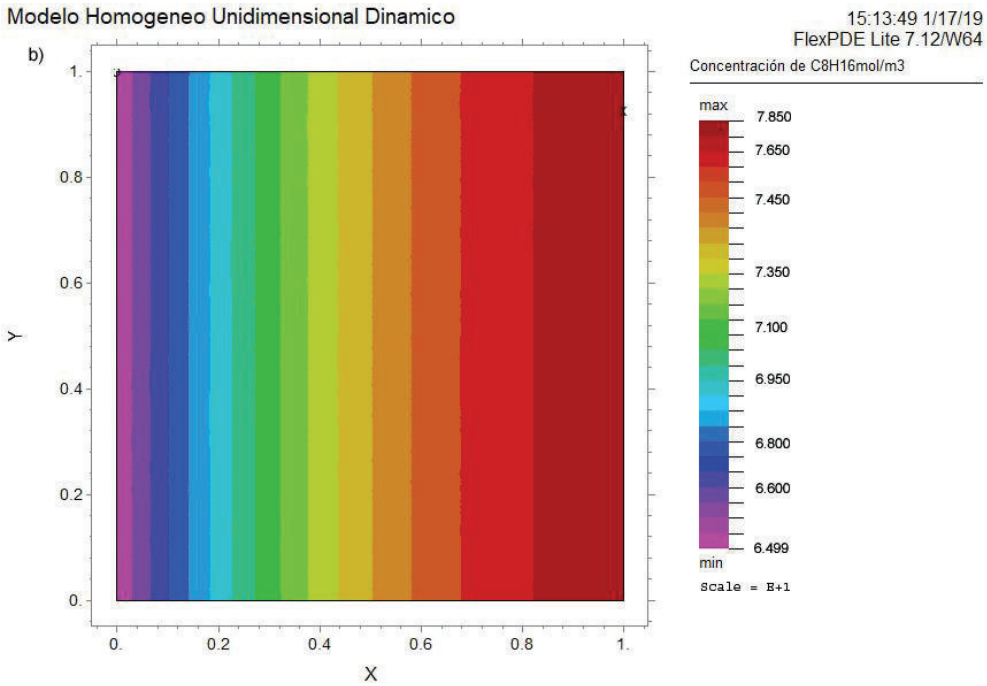


Figura 3.4. Concentración molar de C_8H_{16} en simulaciones de la corrida 2
a) estado estacionario y b) en estado dinámico.
(Fuente: Propia)

Sin embargo, tomando en cuenta los valores de perfil de concentración, para el modelo estacionario se obtiene una concentración máxima 76,40 mol/m^3y para el modelo dinámico un valor máximo de 78,14 mol/m^3, obteniéndose un mejor resultado en el modelo dinámico ya que este modelo considera un mayor número de parámetros como por ejemplo la porosidad del catalizador.

3.3.3. Análisis de la concentración de octeno (C_8H_{16}) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario y los datos experimentales

En la Figura 3.5 se observa una comparación entre los datos obtenidos a partir de la simulación de la CFD y los datos experimentales obtenidos en el laboratorio para el octeno (C_8H_{16}), para ambas corridas, el perfil de temperaturas tanto de los datos experimentales como para la simulación es un perfil creciente. Experimentalmente, los datos obtenidos fueron los iniciales y finales, mientras que los puntos medios fueron obtenidos a manera de conseguir una tendecia que indique el comportamiento del sistema.

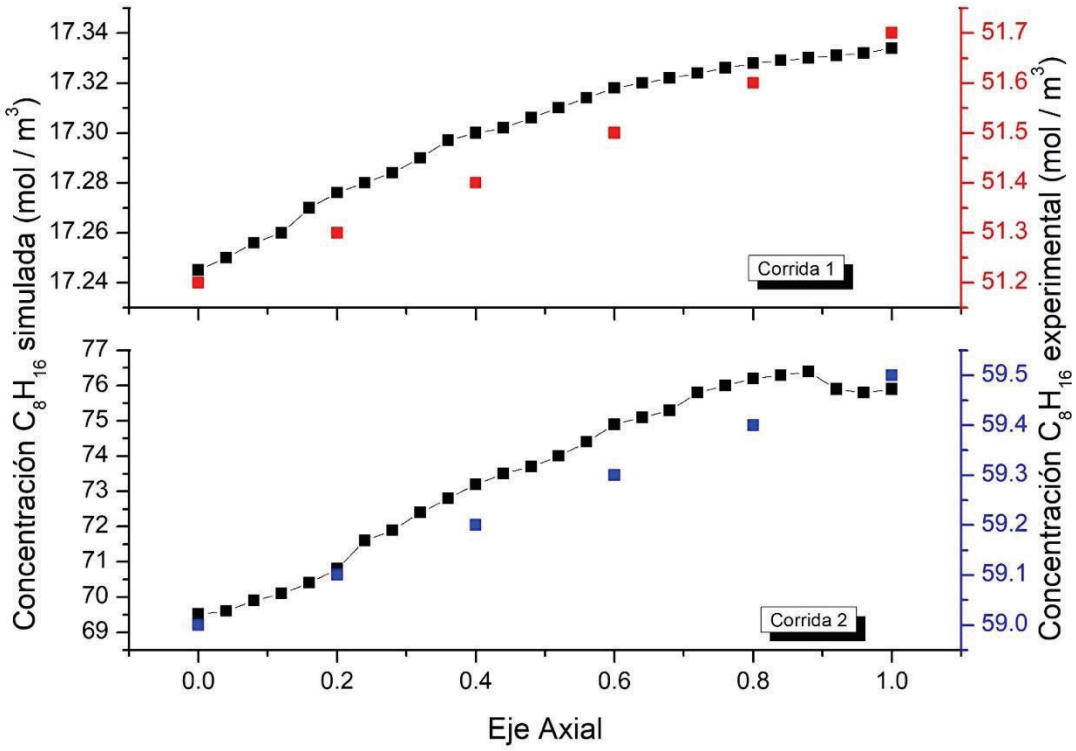


Figura 3.5. Concentración molar de C_8H_{16} en simulaciones en estado estacionario y datos experimentales.
(Fuente: Propia)

Se observa en la parte superior de la figura la comparación de la corrida 1, en donde para los datos experimentales la concentración molar varía entre 51,2 mol/m^3a 51,8 mol/m^3 mientras que para los datos de la simulación la concentración varía entre 17,24 mol/m^3 a 17,34 mol/m^3. Desde 0,0 hasta 05 en el eje axial, la tendencia de concentración crece de una manera lineal; mientras que a partir de 0,5 en el eje axial la tendencia de crecimiento disminuye debido a que la cantidad de reactivo se va agotando y por lo tanto sucede lo mismo con la cantidad de producto producido. El error que se presenta entre los datos de la simulación y los datos experimentales supera el 50% por lo que la simulación no permite describir el fenómeno de manera adecuada bajo las condiciones establecidas. La diferencia entre los valores experimentales y simulados de la concentración de octeno ocurre debido a que la simulación no toma en cuenta la variación de la actividad del catalizador la cual está relacionada con la velocidad de reacción y la velocidad espacial del fenómeno (WHSV). Cuando se tiene una velocidad espacial grande se observa que los datos simulados presentan concentraciones menores a los datos experimentales ya que al no considerar la actividad del catalizador se trabaja con una velocidad de reacción constante lo que genera que la conversión del octeno simulada sea menor en comparación a la conversión experimental.

En la parte inferior de la figura se presenta la comparación de la corrida 2, en donde para los datos experimentales la concentración molar varía entre 59,0 mol/m^3 a 59,5 mol/m^3 mientras que para los datos de la simulación la concentración varía entre 69,52 mol/m^3 a 76,4 mol/m^3. Desde 0,0 hasta 0,9 en el eje axial, la tendencia de concentración crece de una manera aproximadamente lineal; mientras que a partir de 0,9 en el eje axial se presenta una dismunición de la cantidad de producto producido hasta aumentar nuevamente la concentración al final de dicho eje. El error que se presenta entre los datos de la simulación y los datos experimentales es menor al 25% por lo que la simulación permite describir el fenómeno de manera adecuada bajo las condiciones establecidas. La diferencia entre los valores experimentales y simulados de la concentración de octeno es aceptable y ocurre debido a que al tener una velocidad espacial baja de 0,5 (h^{-1}) la simulación toma en cuenta la variación de la actividad del catalizador la cual está relacionada con la velocidad de reacción y la velocidad espacial del fenómeno.

La formación de gasolina en la corrida 2 es más uniforme que en la primera corrida, debido a que en la segunda corrida el reactivo está en contacto mayor tiempo con el catalizador ya que la velocidad espacial es menor.

3.3.4. Análisis de la concentración de buteno (C_4H_8) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario

En la Figura 3.6 se puede observar los perfiles de concentración molar mol/m^3 del hidrocarburo volátil que se produjo como parte de la reacción, buteno (C_4H_8), este hidrocarburo no es de interés dentro de la reacción ya que al no ser condensable no pude ser utilizado como combustible, por tanto, se desea que la producción de este producto sea en menor cantidad.

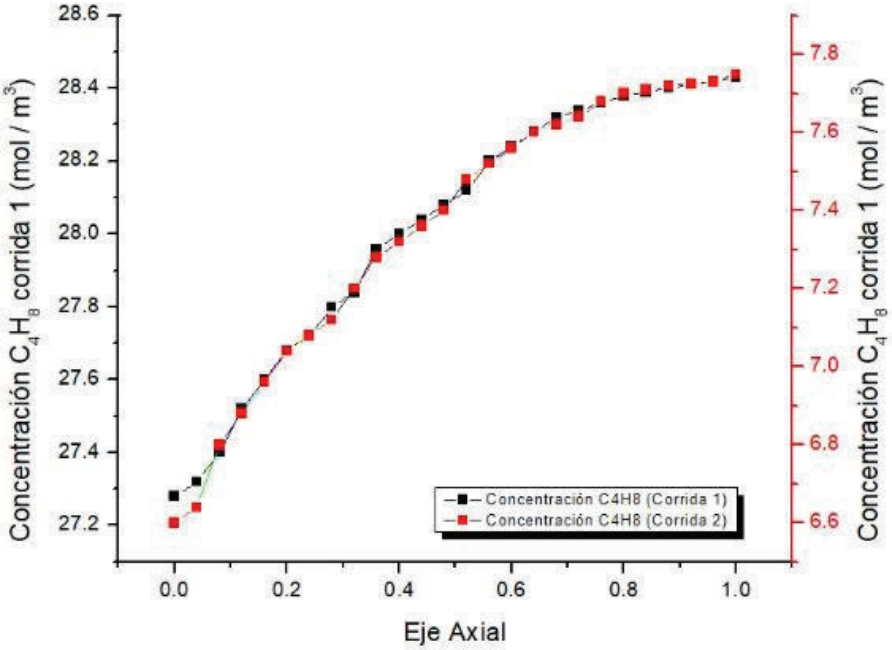


Figura 3.6. Concentración molar de C_4H_8 en simulaciones en estado estacionario.
(Fuente: Propia)

Como se observa, el perfil de concentraciones en ambas simulaciones es un perfil creciente con la misma tendencia, esto debido a que la producción de buteno va aumentando conforme pasa por el eje axial del reactor mientras ocurre la reacción química en la que el etanol va desapareciendo. La velocidad de obtención del buteno en ambas corridas es la misma pero la diferencia radica en la cantidad de buteno obtenido. Para ambas corridas, el aumento en la concentración de buteno es mayor en el rango de 0,0 a 0,5 del eje axial ya que la pendiente es mayor, mientras que en la segunda mitad del eje axial la pendiente del aumento de la concentración disminuye, lo que indica que la obtención de buteno es menor ya que existe una disminución de la cantidad de reactivo que pueda reaccionar para obtener este producto.

Al comparar los resultados entre las simulaciones se observa que en la corrida 1 el perfil de concentración de C_4H_8 va de 27,2 mol/m^3 a 28,6 mol/m^3 mientras que en la corrida 2 el perfil de concentración de C_4H_8 va de 6,6 mol/m^3 a 7,8 mol/m^3. Esto quiere decir que en la corrida 2 se alcanza un valor de concentración menor al alcanzado en la corrida 1, determinando que la conversión de etanol a buteno en la corrida 2 es menos favorable lo cual es un propósito de este trabajo ya que se desea que la mayor cantidad de producto sea octeno y no buteno. Lo que quiere decir que en la corrida 2 se obtienen los resultados deseados.

Al comparar todos los datos de la simulación de la corrida 1 se observa que en esta simulación se produce mayor cantidad de buteno que es un producto secundario no deseado, por tanto se establece que la simulación bajo estas condiciones no es favorable.

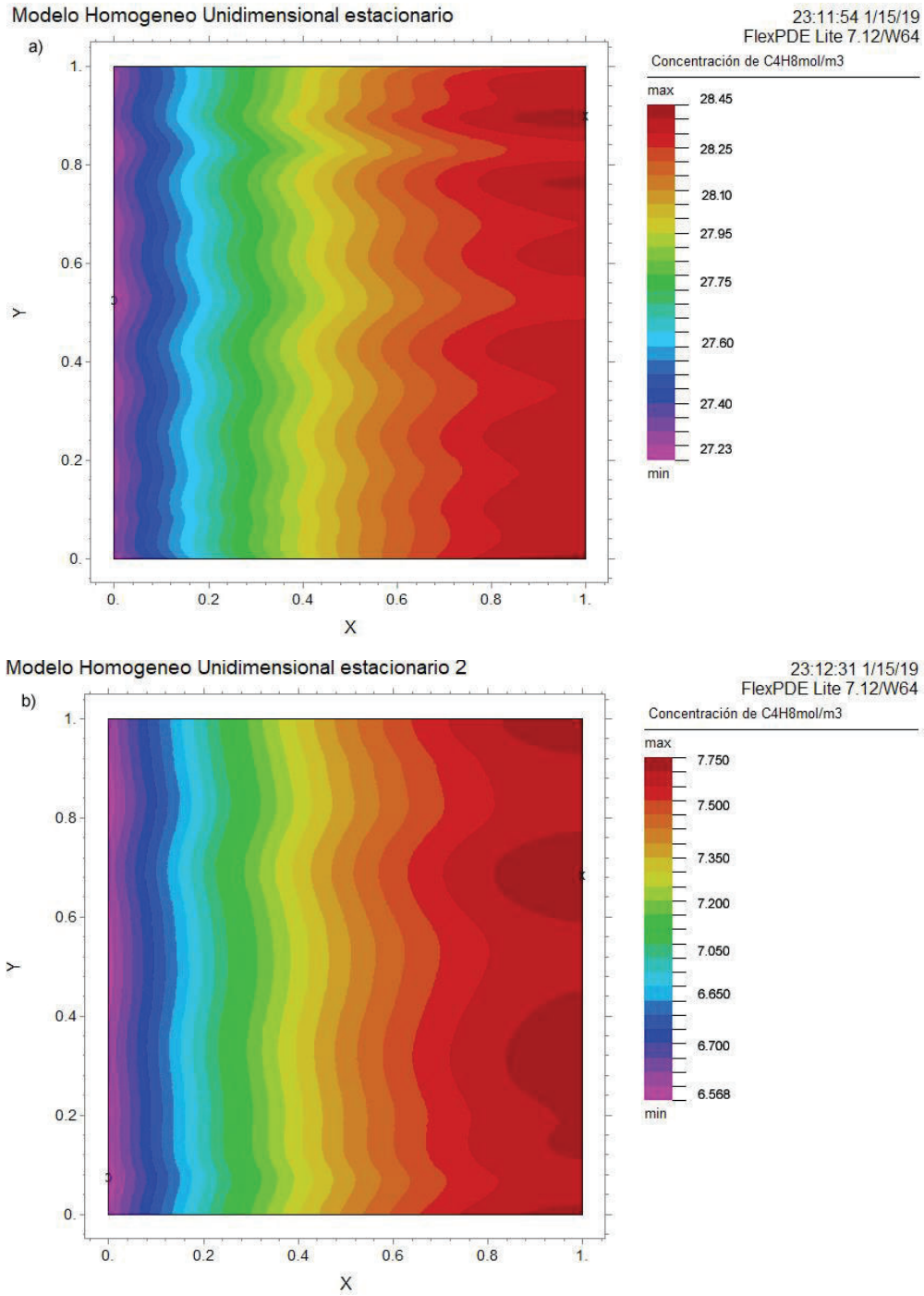


Figura 3.7. Concentración molar de C_4H_8 en simulaciones en estado estacionario a) corrida 1 y b) corrida 2.
(Fuente: Propia)

La Figura 3.7 muestra la variación de la concentración molar del buteno. En la parte superior, en la figura a) se encuentra la concentración para la velocidad espacial de 1 s^{-1}, mientras que, en la figura b), se encuentra la concentración para la velocidad espacial de 0,5 s^{-1}. Se observa en ambas figuras, que la concentración de este producto va en aumento a lo largo del eje axial del reactor debido al proceso natural de la reacción. En la primera figura el cambio de concentración es mayor a partir del valor de 0,4 del eje axial, mientras que en la segunda figura el mayor cambio de concentración ocurre desde el valor de 0,3 del eje axial; esto se debe a que la reacción va perdiendo eficiencia lo que provoca que se aumente la obtención de un producto no deseado.

Con base en los valores de concentración molar, donde se muestra un valor de concentración máximo de 28,43 mol/m^3para la primera velocidad, mientras que para la segunda velocidad se observa un valor máximo de 7,73 mol/m^3 se concluye que la primera velocidad espacial es la que produce mayor cantidad de buteno. Sin embargo, la obtención de buteno no es la finalidad de este proyecto ya que se trata un combustible no condensable. El presente estudio, tiene como objetivo obtener la mayor cantidad de combustible condensable, es decir, la gasolina.

Por último, se observa que la concentración de buteno, para ambas velocidades, a lo largo del eje radial presenta una ligera desviación. Esto sucede porque en el eje radial se presenta una variación de porosidad, fenómeno que no fue tomado en el presente modelo ya que se trata de un modelo unidireccional.

3.3.5. Análisis de la concentración de buteno (C_4H_8) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario y del modelo en estado dinámico

En la Figura 3.8 se compara la concentración molar del buteno entre el modelo estacionario y el modelo dinámico a una misma velocidad espacial, igual a 0,5 s^{-1}. Se observa que el modelo estacionario, figura a), presenta una variación de concentración de buteno tanto en el eje radial como en el eje axial, presentando la mayor conversión de concentración a partir del valor 0,3 del eje radial. Mientras que, en el modelo dinámico, figura b), solo se observa un cambio de perfil de concentración en el eje axial ya que en el eje radial no existe variación de dicho parámetro, presentándose la mayor conversión de buteno a partir de 0,2 del eje radial. El modelo dinámico no presenta variación en el eje radial debido a que se realiza un análisis de concentración de forma periódica.

Tomando en cuenta los valores del perfil de concentración del buteno, el modelo estacionario presenta un valor de concentración máximo de 7,73 mol/m^3, y el modelo dinámico un valor máximo de 8,36 mol/m^3, esto se debe a que en el modelo dinámico se toman en cuenta los parámetros del catalizador. Finalmente, el buteno es un producto secundario y por tanto se desea obtener en mayor cantidad.

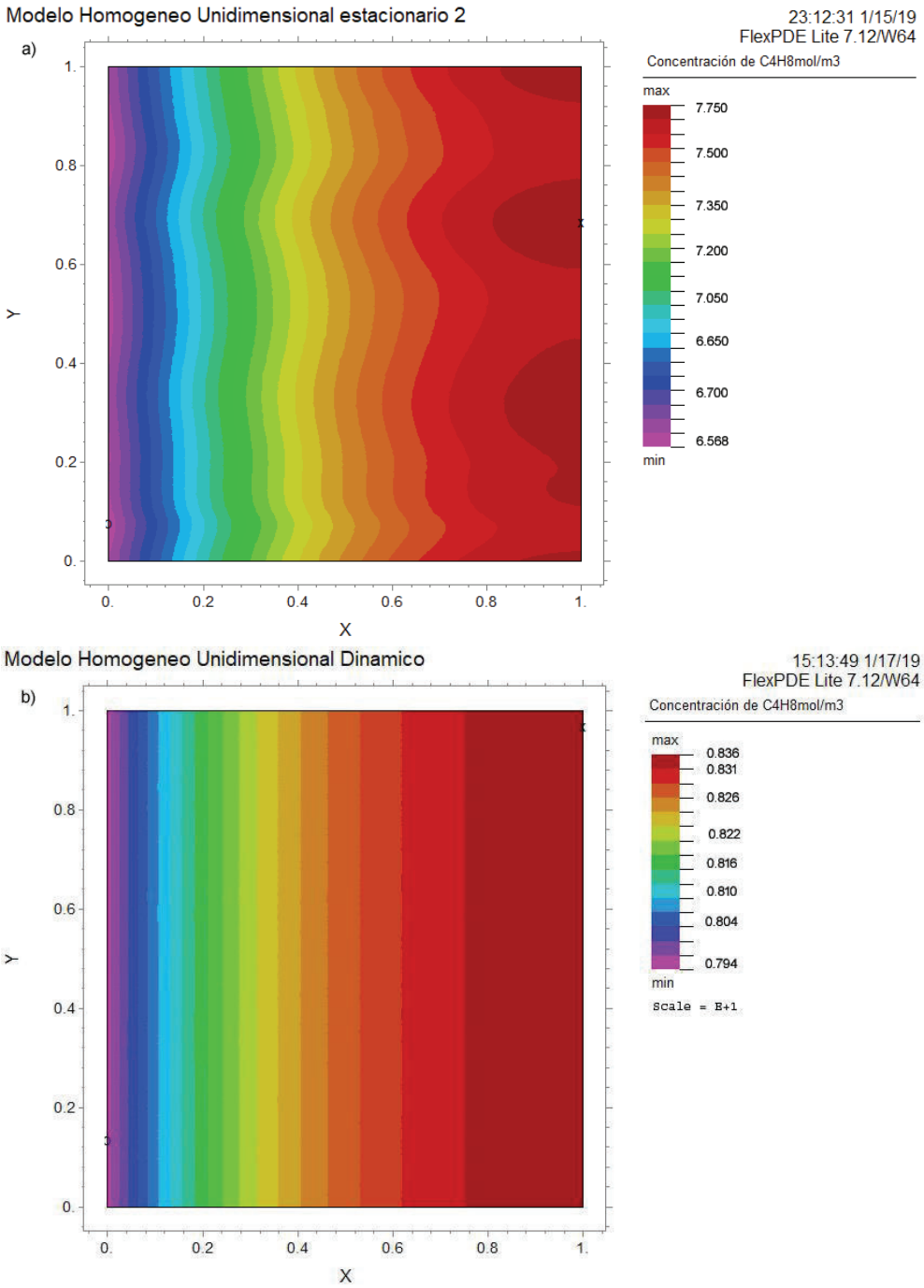


Figura 3.8. Concentración molar de C_4H_8 en simulaciones de la corrida 2 a) estado estacionario y b) en estado dinámico.
(Fuente: Propia)

3.3.6. Análisis de la concentración de buteno (C_4H_8) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario y los datos experimentales

En la Figura 3.9 se observa una comparación entre los datos obtenidos a partir de la simulación de la CFD y los datos experimentales obtenidos en el laboratorio para el buteno (C_4H_8), para ambas corridas, el perfil de temperaturas tanto de los datos experimentales como para la simulación es un perfil creciente. Los valores experimentales inicial y final fueron determinados, mientras que los valores intermedios buscan seguir una tendencia entre dichos valores.

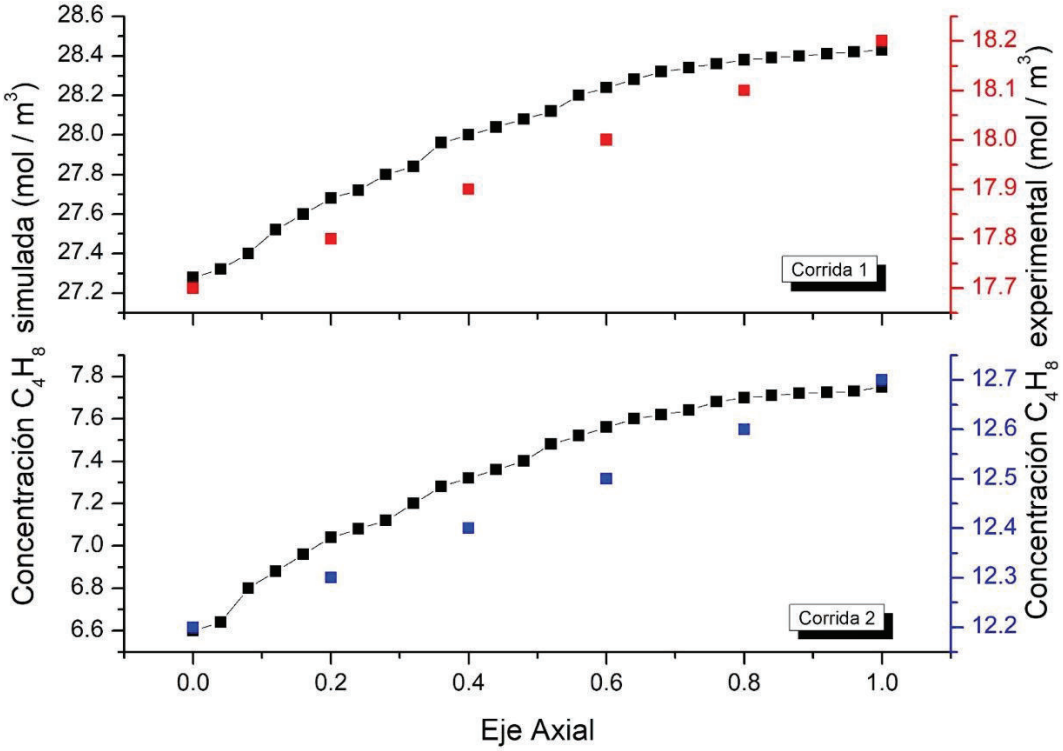


Figura 3.9. Concentración molar de C_4H_8 en simulaciones en estado estacionario y datos experimentales.
(Fuente: Propia)

En la gráfica de la primera corrida se observa que los resultados simulados presentan un crecimiento lineal hasta el valor de 0,4 del eje axial, y partir de ahí el crecimiento disminuye, esto se debe a que la velocidad de reacción es mayor al inicio por tratarse de una reacción espontánea y a medida que se traslada a lo largo del reactor la reacción pierde espontaneidad. Los datos experimentales la concentración molar varía entre 17,6 mol/m^3 a 18,2 mol/m^3 mientras que para los datos simulados varían entre 27,2 mol/m^3 a 28,4 mol/m^3. Los valores simulados son mayores porque la simulación considera que la velocidad de reacción para el buteno permanece constante obviando la participación del catalizador en la reacción. El catalizador por su parte en la parte

experimental es quien permite que la conversión de etanol a octeno sea más favorable disminuyendo la concentración de buteno respecto a la simulación.

En la gráfica de la segunda corrida (inferior) se observa que los resultados simulados presentan un crecimiento lineal hasta el valor de 0,5 del eje axial, y partir de ahí el crecimiento disminuye, ya que la reacción es espontánea produciendo buteno a mayor velocidad en la primera mitad del reactor. Los datos experimentales de la concentración molar varían entre 12,2 mol/m^3 a 12,7 mol/m^3mientras que para los datos de la simulación la concentración varía entre 6,6 mol/m^3a 7,8 mol/m^3.

Como se explica en la Figura 3.6, la simulación de la corrida 1 no es favorable debido a que produce mayor cantidad de buteno respecto al octeno, el cual es el hidrocarburo de interés. Por lo que, se demuestra que la segunda corrida permite una mayor producción de hidrocarburos condensables.

3.3.7. Análisis del flujo másico de octeno (C_8H_{16}) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario

En la Figura 3.10 se observa como el flujo másico del octeno está en dirección axial lo que indica que está controlado por la convección generada dentro del reactor. También el mayor flujo másico se encuentra cerca de la entrada del reactor debido a que en este punto ocurre un mayor gradiente de concentración lo que según la ley de Fick genera que aumente el flujo másico.

La gráfica a) presenta un flujo másico de octeno decreciente hasta el valor de 0,8 del eje axial. Al principio el flujo másico es uniforme ya que el gradiente de concentración se mantiene parcialmente constante porque la reacción tiende a formar rápidamente octeno, mientras que en la parte final del reactor el gradiente de concentración disminuye rápidamente porque la velocidad de reacción se reduce lo que ocasiona la no uniformidad observada. En la gráfica b) se observa que la diferencia de flujo másico a la entrada y salida del reactor es considerable debido a que la reacción sucede hasta el valor de 0,6 en el eje axial. Como la velocidad espacial es baja, lo cual favorece a la reacción, provoca que la variación del gradiente de concentración también presente un valor alto y se produzca rápidamente octeno.

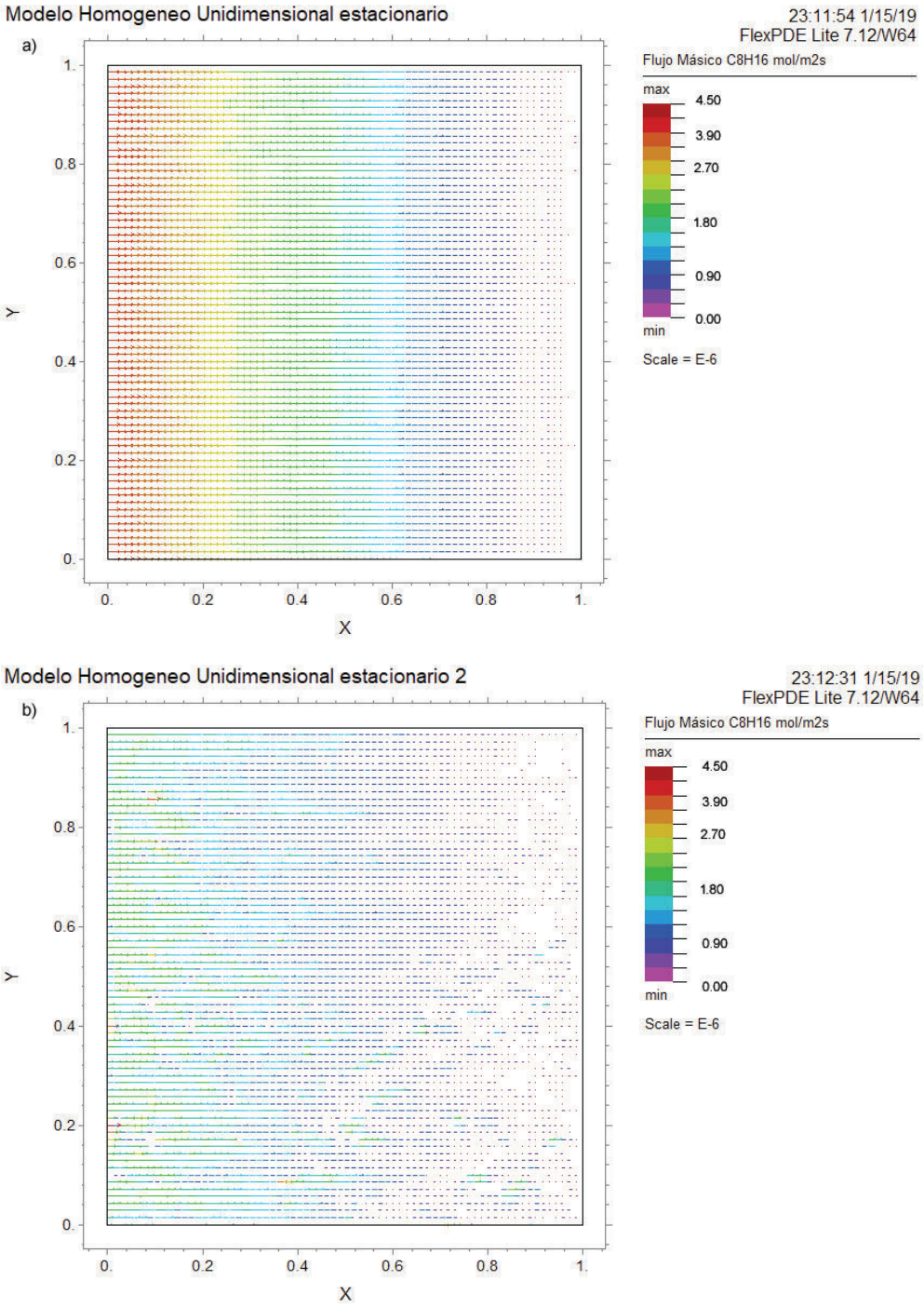


Figura 3.10. Flujo másico de C_8H_{16} en simulaciones en estado estacionario. a) corrida 1 y b) corrida.
(Fuente: Propia)

3.3.8. Análisis del flujo másico del octeno (C_8H_{16}) a partir de la simulación del modelo en estado estacionario y dinámico

En la Figura 3.11 se observa como el cómo flujo másico del octeno está en dirección axial lo que tanto en el modelo estacionario como en el estado transitorio indica que está controlado por la convección generada dentro del reactor.

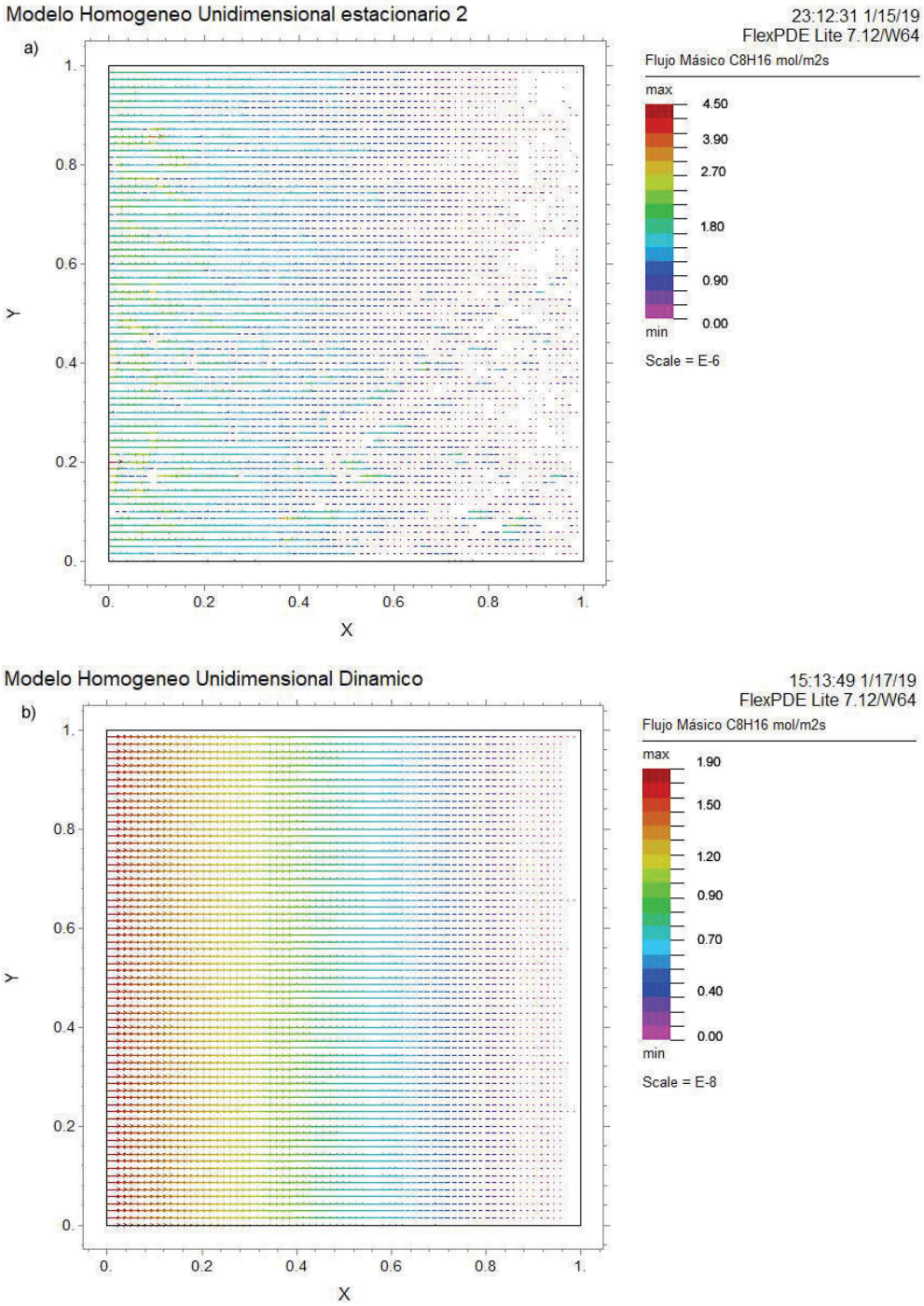


Figura 3.11. Flujo másico de C_8H_{16} para corrida 2 a) estado estacionario y b) estado dinámico. (Fuente: Propia)

En la primera gráfica de la Figura 3.11, muestra un flujo másico de octeno uniforme hasta la primera mitad del reactor y un flujo mínimo al final de este. Para evitar estas fluctuaciones en el flujo másico es necesario considerar el tiempo como una variable dentro del modelo ya que de esta manera se considera que la actividad del catalizador siempre va disminuyendo a medida que corre el tiempo y afecta a la velocidad de reacción. En la segunda gráfica se observa que al considerar el tiempo la diferencia de flujo másico a la entrada y salida del reactor varía de manera uniforme ya que la diferencia de gradiente de concentración a la entrada del reactor también es uniforme respecto a la salida.

3.3.9. Análisis de la temperatura del reactor a partir de la simulación de los modelos en estado estacionario

En la Figura 3.12 se observa el cambio de temperatura tanto a lo largo del eje axial (eje X) del reactor como a lo largo del eje radial (eje Y) para las dos velocidades espaciales. La temperatura presenta una mínima variación a lo largo del eje axial. Mientras que, para el eje radial no existe variación de temperatura debido a que el modelo establecido en el presente trabajo no se consideraron las variaciones de los parámetros en dicho eje debido al tamaño del diámetro del reactor usado. Para ambas velocidades, se observa como la temperatura alcanza su máximo valor en la parte inicial del reactor, esto se debe a que esta es la parte más cercana a las resistencias.

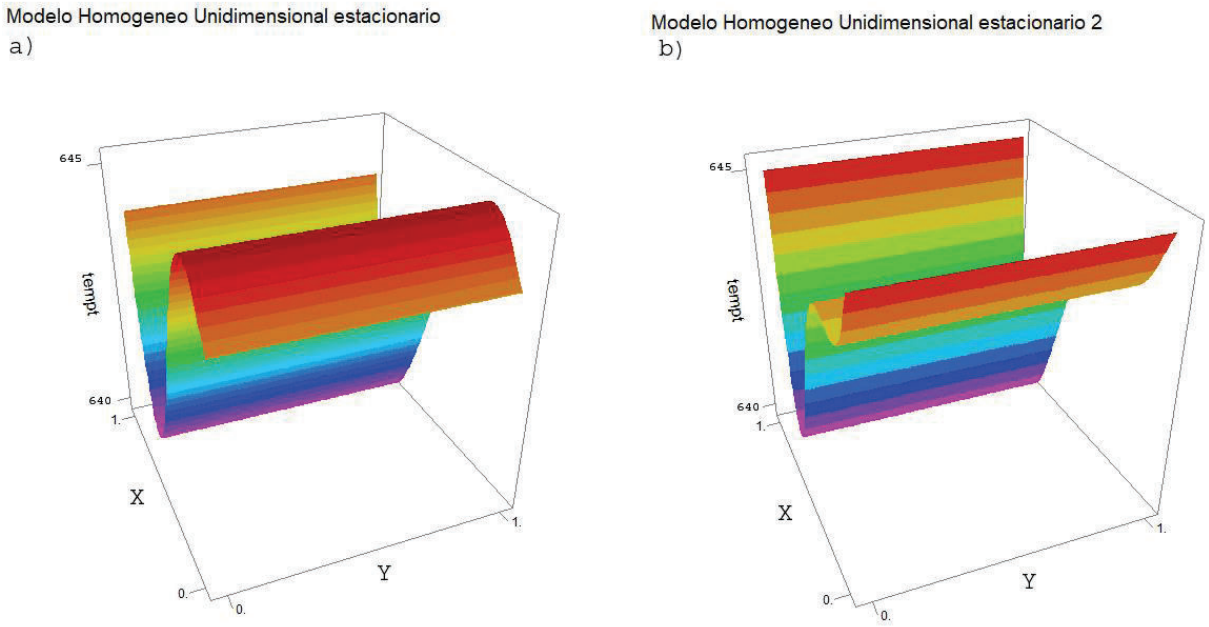


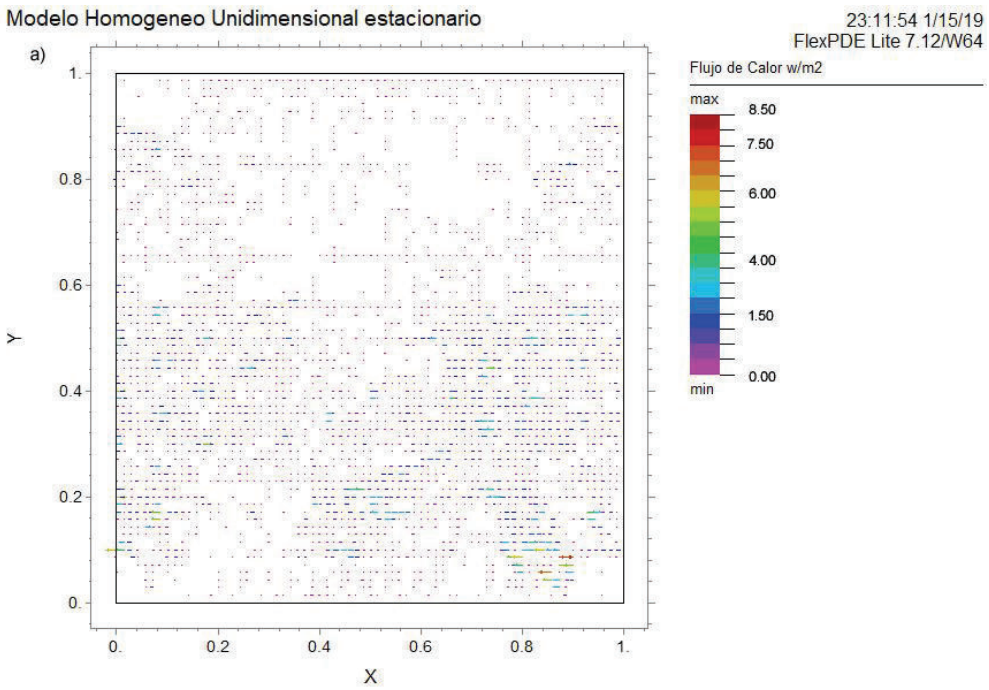
Figura 3.12. Variación de la temperatura en el eje axial y radial a) corrida 1 y b) corrida 2.
(Fuente: Propia)

Otra razón por la cual las temperaturas más altas están en la parte superior del reactor es porque en ese lugar los reactivos se encuentran en mayor cantidad, produciéndose una mayor transferencia de calor entre el reactor y las sustancias. A medida que transcurre la reacción y las sustancias avanzan a lo largo del reactor, se observa que la temperatura va decreciendo, hasta alcanzar un mínimo valor, esto se debe a que en el reactor la distribución de temperatura no es uniforme por la ubicación de la termocupla.

Además, se observa que, para ambos casos de velocidades, la temperatura vuelve a ascender por la parte final del reactor, este fenómeno puede suceder debido a la acumulación del catalizador en la parte inferior debido a la gravedad.

3.3.10. Análisis del flujo de calor del reactor a partir de la simulación de los modelos en estado estacionario

En la Figura 3.13 no se puede realizar un análisis del flujo de calor en el eje axial ya que no se puede encontrar una tendencia de este parámetro. En la Figura 3.12 la variación de la temperatura es mínima lo que provoca que la transferencia de calor por conducción y convección a lo largo del reactor sea despreciable. Como se observa, la transferencia de calor es nula, ya que se trata de un reactor de lecho adiabático que cuenta con una chaqueta que impide al reactor enfriarse cuando se encuentra en contacto con el medio externo.



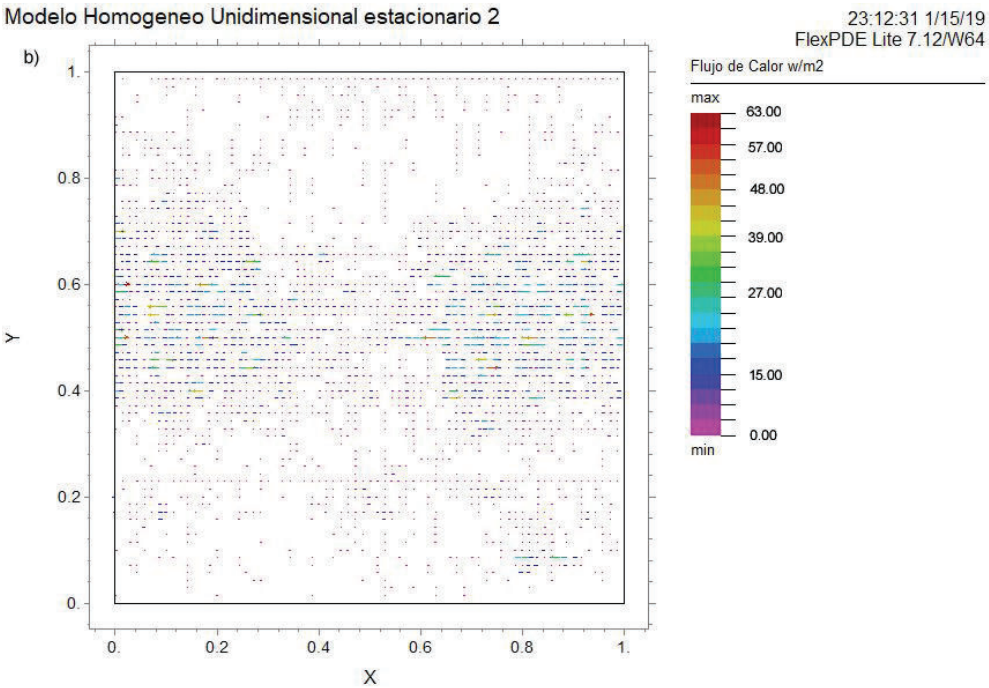


Figura 3.13. Flujo de calor del reactor a) corrida 1 y b) corrida 2.
(Fuente: Propia)

3.3.11. Análisis del flujo de calor del reactor a partir de la simulación de los modelos en estado estacionario y en estado dinámico

Al igual que la figura anterior no se puede realizar un análisis del flujo de calor comparando el modelo estacionario con el dinámico, ya que no existe una tendencia de esta propiedad por las razones expuestas anteriormente. Si se observan los valores de flujo de calor en la Figura 3.14 dichos valores denotan una transferencia de calor que tiende a cero.

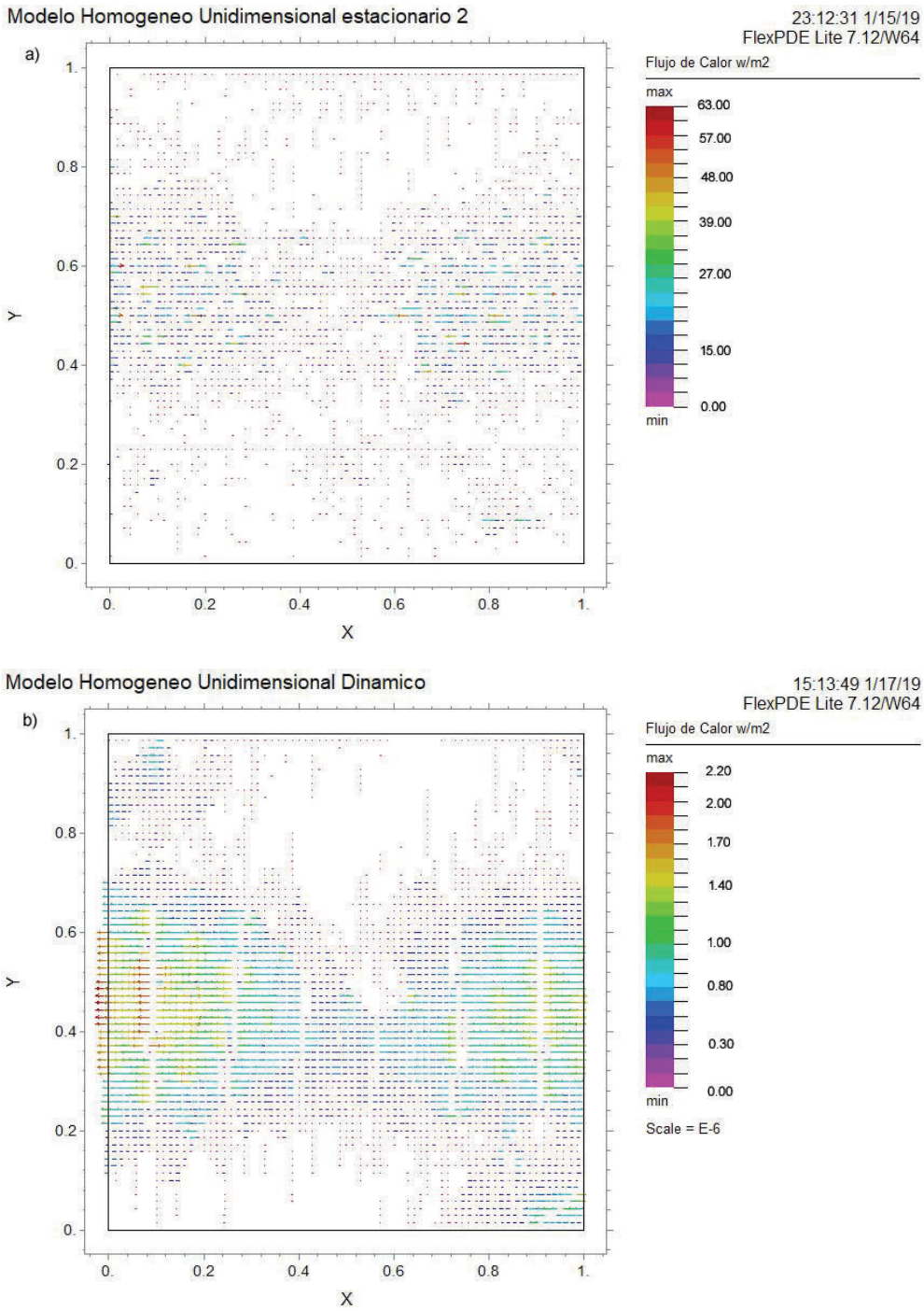


Figura 3.14. Flujo de calor del reactor a) estado estacionario y b) estado dinámico.
(Fuente: Propia)

4. CONCLUSIONES

4.1. Conclusiones

En el presente estudio se realizó un análisis paramétrico del reactor de lecho empaquetado del Laboratorio de Termodinámica de la Facultad de Ingeniería Química y Agroindustria de la Escuela Politécnica Nacional y se concluyó que es posible realizar la Simulación de la Dinámica de Fluidos Computacionales de todo el proceso de manera favorable.

El estudio se basó en la obtención de hidrocarburos condensables (gasolina) a partir de etanol anhidro, y se determinó que la reacción es favorable alcanzando un rendimiento de gasolina superior al 10% con una temperatura de 370°C y con una velocidad espacial entre 0.5 y 1 s^{-1}.

Al analizar la temperatura se determinó que a temperaturas bajas la reacción presenta como producto únicamente agua, mientras que a temperaturas altas únicamente se obtiene hidrocarburos volátiles. De la misma manera, al analizar la velocidad espacial se determinó que al trabajar con WHSV altos, sin importar la temperatura de trabajo, la reacción tampoco genera gasolina sino agua e hidrocarburos volátiles simultáneamente.

Al comparar los datos experimentales de las reacciones favorables se determinó que al trabajar a una temperatura de 370°C y una velocidad espacial de 1 s^{-1}, el rendimiento de

gasolina fue del 7,66% mientras que al trabajar una temperatura de 370°C y una velocidad espacial de 0,5 s^{-1} el rendimiento fue de 25,26%. Por lo que, se concluye que al trabajar con valores bajos de WHSV se favorece la reacción debido a que la velocidad del fluido respecto a la masa del catalizador es menor y se potencia el contacto superficial entre ellos mejorando la conversión de hidrocarburos volátiles.

Las muestras obtenidas de los experimentos fueron analizadas según su presión de vapor Reid y su destilación fraccionaria, y estos resultados fueron comparados con los valores establecidos para gasolinas comerciales a partir de la norma INEN 935 y se concluye que las dos muestras analizadas cumplen con los valores especificados en la norma, es decir, la gasolina obtenida a partir de etanol anhidro producida en un reactor de lecho empacado con catalizador de silice/alumina bajo una temperatura de 370°C y una velocidad espacial de 0,5 o 1 s^{-1} puede ser utilizada como combustible comercial.

A partir de la simulación de la dinámica de fluidos computacionales del proceso en el programa Flex PDE. se desarrolló una simulación en estado estacionario para las condiciones de reacción favorables y se determinó que al trabajar con una temperatura de 370°C y una velocidad espacial de 0,5 s^{-1} los resultados de la simulación son aceptables ya que presenta un error menor al 25% respecto a los datos experimentales mientras que para las condiciones de temperatura de 370°C y velocidad espacial de 1 s^{-1} la simulación no es favorable ya que el error entre los datos de la simulación y los datos experimentales superan el 50%. Esto se debe a que esta simulación no considera la variación de la actividad del catalizador.

Se realizó una simulación dinámica con las condiciones de trabajo que presentan resultados favorables en la parte experimental como en la simulación, es decir a una temperatura de 370°C y velocidad espacial de 0,5 s^{-1}. Los datos obtenidos en esta simulación se compararon con los datos obtenidos en la simulación en estado estacionario y se determinó que la simulación dinámica presenta mejores resultados debido a que en esta simulación al incluir el análisis respecto al tiempo se consideran parámetros referentes al catalizador como la porosidad.

La comparación entre los datos simulados y los datos experimentales permitió determinar que para el estudio de la mecánica de fluidos del reactor de lecho empacado se puede realizar una simulación computacional en lugar de realizar toda la experimentación, lo que genera una reducción sustancial en el tiempo y en los costos de experimentación.

La simulación de la Dinámica de Fluidos computacionales a lo largo del proyecto permitió obtener representaciones gráficas de las variables que gobiernan el funcionamiento del reactor tanto en estado estacionario como en estado dinámico lo que facilitó el análisis de los resultados, así como la compresión de la mecánica térmica del sistema.

4.2. Recomendaciones y Trabajos Futuros

El estudio paramétrico de las condiciones de operación del reactor de lecho empaquetado para la obtención de hidrocarburos condensables a partir de etanol fue desarrollado bajo un modelo unidimensional considerando únicamente el eje axial, por lo que se recomienda realizar el análisis considerando el eje radial y el eje angular del reactor.

Como los resultados favorables para la obtención de hidrocarburos no volátiles se presentaron con un WHSV de 0.5 s^{-1} y de 1 s^{-1}, se recomienda realizar otros estudios con valores intermedios. Así como trabajar con otros valores de temperaturas cercanos a 370$°C$.

Para que las muestras de gasolina obtenidas en la parte experimental no se degraden se recomienda trabajar en un laboratorio con condiciones ambientales controladas debido a que la temperatura ambiente EL oxigeno reacciona con las muestras.

Una vez que se han determinado las condiciones más favorables de operación del reactor se recomienda analizar la utilización de otros alcoholes como reactivo para la obtención de hidrocarburos bajo estas condiciones.

Se recomienda desarrollar la simulación de fluidos computacionales en otro programa diferente a Flex PDE en el cual se emplee técnica de volúmenes finitos para los análisis.

Referencias Bibliográficas

[1] J. Coulson y J. F. Richardson. Chemical and biochemical reactors and process control, Vol. 3. Elsevier, 1994.

[2] J. Conesa. Diseño de reactores heterogéneos. Diseño de Reactores II, 2010. [Online]. Recuperado de http://hdl.handle.net/10045/15296

[3] R. Shinnar. Chemical reactor modelling for purposes of controller design. Chemical Engineering Communications, 9(1-6), 73-99, 1981

[4] D. Asensio, "Modelado de reactores de lecho fijo de baja relación de aspecto asistido por Fluidodinámica Computacional (CFD)" Doctoral dissertation, Universidad Nacional de La Plata, 2017

[5] A. Dixon y M. Nijemeisland, CFD as a design tool for fixed-bed reactors. Industrial & Engineering Chemistry Research, 40(23), 5246-5254, 2001.

[6] G. Eigenberger. Catalytic fixed-bed reactors. Handbook of Heterogeneous Catalysis: Online, 2075-2106, 2008

[7] O. M. Martinez, S. P. Duarte y N.O. Lemcoff. Modeling of fixed bed catalytic reactors. Computers & chemical engineering, 9(5), 535-545, 1985.

[8] A. Taco, "Análisis termoquímico de un lecho empacado por el método de los elementos finitos usando el programa FlexPDE 5" Proyecto de titulación previo a la obtención de Ingeniero Químico. Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador, 2006.

[9] J. Schulz y F. Bandermann. Conversion of ethanol over zeolite H-ZSM-5. Chemical Engineering & Technology: Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology, 17(3), 179-186, 1994.

[10] A. Gayubo, A. Tarrío, A. Aguayo, M. Olazar y J. Bilbao. Kinetic modelling of the transformation of aqueous ethanol into hydrocarbons on a HZSM-5 zeolite. Industrial & engineering chemistry research, 40(16), 3467-3474, 2001

[11] N. Okulik. “Diseño computacional en análisis aplicado al estudio de interacción y reactividad de moléculas orgánicas de interés industrial sobre zeolitas”. Doctoral dissertation, Facultad de Ingeniería. Buenos Aires, 2002.

[12] M. Tsodikov, F. Yandieva, V. Kugel, A. Chistyakov, A. Gekhman e I. Moiseev, IReductive dehydration of ethanol: A new route towards alkanes. Catalysis Letters, 121(3-4), 199-208, 2008.

[13] E. Costa, A. Uguina, J. Aguado y P. Hernández. Ethanol to gasoline process: effect of variables, mechanism, and kinetics. Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 24(2), 239-244, 1985

[14] ASTM D381-12. Standard Test Method for Gum Content in Fuels by Jet Evaporation. Estados Unidos, 2017

[15] ASTM D323-15a. Standard Test Method for Vapor Pressure of Petroleum Products (Reid Method). Estados Unidos, 2015

[16] ASTM D86-17. Standard Test Method for Distillation of Petroleum Products and Liquid Fuels at Atmospheric Pressure. Estados Unidos, 2017

[17] INEN. NTE INEN 935. Productos Derivados de Petróleo. Gasolina Requisitos. [Online]. 2016. Recuperado de: http://www.controlhidrocarburos.gob.ec/wp-content/uploads/downloads/2016/06/nte-inen-935-9.pdf

[18] P. Gates. Gas Chromatography Mass Spectrometry (GC/MS), School of Chemistry, University of Bristol, Reino Unido. [Online]. 2008. Recuperado de http://www.bris.ac.uk/nerclsmsf/techniques/gcms.html

[19] M. Iborra Urios, X. Tejero Salvador y F. Cunill García. Reactores Multifásicos. [Online]. 2013. Recuperado de http://diposit.ub.edu/dspace/handle/2445/33262

[20] J. Joshi y V. Ranade. Computational fluid dynamics for designing process equipment: expectations, current status, and path forward. Industrial & engineering chemistry research, 42(6), 1115-1128, 2003.

[21] J. Anderson y J. Wendt. Computational fluid dynamics, Vol. 206. New York: McGraw-Hill, 1985.

[22] M. Gerrero, S. Valderrabano Salazar, R. Campos y M. Isasi Larrea. Aplicación del método de elemento finito al análisis nodal. Ingenierías, 2(3), 49-55, 1999.

[23] J. M. Oro. Técnicas numéricas en ingeniería de fluidos: Introducción a la dinámica de fluidos computacional (CFD) por el método de volúmenes finitos. 2012. Reverté

[24] FlexPDE. P. D. E. Solutions Inc. 2015. [Online]. Recuperado de http://www. pdesolutions. com

[25] Dixon, Cresswell, Theoretical prediction of effective heat transfer parameters in packed beds, AIChE J., 25 pp 663. 1979.

[26] Guandinango, Carlos, Estudio de la obtención de hidrocarburos de Alto Octanaje a partir de Metanol y la mezcla de Metanol/Etanol usando zeolita H-ZSM-5 como catalizador. Proyecto de titulación previo a la obtención de Ingeniero Químico. Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador, 2018.

Anexos

Anexo I. Cálculos de constantes para el desarrollo de los modelos

1. *Peso molecular de la mezcla gaseosa*

$$\overline{PM} = X_{H_2O}PM_{H_2O} + X_{C_2H_4}PM_{C_2H_4} + X_{C_4H_8}PM_{C_4H_8} + X_{C_8H_{16}}PM_{C_8H_{16}}$$

Ejemplo de cálculo para un caudal de $2{,}12 \times 10^{-8}\ {m^3}/{s}$ (velocidad de $2.38\ x\ 10^{-6}\ \frac{m}{s}$):

$$\overline{PM} = (0{,}284 \cdot 18) + (0{,}3195 \cdot 28) + (0{,}3195 \cdot 56) + (0{,}077 \cdot 112)$$

$$\overline{PM} = 40{,}574 \frac{g}{mol}$$

2. *Capacidad Calorífica de gases ideales*

	$C_1 \times 10^{-5}$	$C_2 \times 10^{-5}$	$C_3 \times 10^{-3}$	$C_4 \times 10^{-5}$	C_5
H_2O	2,7637	-2,0901	8,125	-1,4116	937,01
C_2H_4	0,3338	0,9479	1,5960	0,5510	740,80
C_4H_8	0,5998	2,0846	1,5884	1,2940	707,30
C_8H_{16}	1,2355	3,9570	1,5640	2,7669	718,17

$$Cp = C_1 + C_2\left[\frac{{C_3}/{T}}{senh\left({C_3}/{T}\right)}\right]^2 + C_4\left[\frac{{C_5}/{T}}{cosh\left({C_5}/{T}\right)}\right]^2$$

Ejemplo de cálculo para el C_2H_4

$$Cp_{C_2H_4} = 33380 + 94790\left[\frac{{1596}/{623}}{senh\left({1596}/{623}\right)}\right]^2 + 55100\left[\frac{{740{,}8}/{623}}{cosh\left({740{,}8}/{623}\right)}\right]^2$$

$$Cp_{C_2H_4} = 72573{,}9 \frac{J}{kmol\ K}$$

$$Cp_{C_2H_4} = 2591{,}93 \frac{J}{kg\ K}$$

	$Cp\left[\frac{J}{kg\ K}\right]$
H_2O	2052,12
C_2H_4	2591,93
C_4H_8	2679,51
C_8H_{16}	2779,81

3. *Capacidad Calórica de la mezcla gaseosa*

$$\overline{Cp} = X_{H_2O}Cp_{H_2O} + X_{C_2H_4}Cp_{C_2H_4} + X_{C_4H_8}Cp_{C_4H_8} + X_{C_8H_{16}}Cp_{C_8H_{16}}$$

Ejemplo de cálculo para un caudal de $2{,}12 \times 10^{-8}\ m^3/_S$ (velocidad de $2.38\ x\ 10^{-6}\ \frac{m}{s}$):

$$\overline{Cp} = (0{,}284 \cdot 2052{,}12) + (0{,}3195 \cdot 2591{,}93) + (0{,}3195 \cdot 2679{,}51) + (0{,}077 \cdot 2779{,}81)$$

$$\overline{Cp} = 2435{,}46 \left[\frac{J}{kg\ K}\right]$$

4. *Viscosidad de la mezcla gaseosa*

	$\mu \left[\frac{N \cdot s}{m^2}\right]$
H_2O	$2{,}15 \times 10^{-5}$
C_2H_4	$1{,}90 \times 10^{-5}$
C_4H_8	$1{,}60 \times 10^{-5}$
C_8H_{16}	$1{,}10 \times 10^{-5}$

$$\frac{\overline{PM}}{\bar{\mu}} = \frac{X_{H_2O}PM_{H_2O}}{\mu_{H_2O}} + \frac{X_{C_2H_4}PM_{C_2H_4}}{\mu_{C_2H_4}} + \frac{X_{C_4H_8}PM_{C_4H_8}}{\mu_{C_4H_8}} + \frac{X_{C_8H_{16}}PM_{C_8H_{16}}}{\mu_{C_8H_{16}}}$$

Ejemplo de cálculo para un caudal de $1.27\ \frac{mL}{min}$ (velocidad de $2.38\ x\ 10^{-6}\ \frac{m}{s}$):

$$\frac{40{,}574}{\bar{\mu}} = \frac{0{,}284 \cdot 18}{2{,}15 \times 10^{-5}} + \frac{0{,}3195 \cdot 28}{1{,}90 \times 10^{-5}} + \frac{0{,}3195 \cdot 56}{1{,}60 \times 10^{-5}} + \frac{0{,}077 \cdot 112}{1{,}10 \times 10^{-5}}$$

$$\bar{\mu} = 1575{,}05 \times 10^{-8} \left[\frac{N \cdot s}{m^2}\right]$$

5. *Calor de reacción*

$$C_2H_5OH \rightarrow C_2H_4 + H_2O \qquad [1]$$

$$2\ C_2H_4 \rightarrow C_4H_8 \qquad [2]$$

$$4\ C_2H_4 \rightarrow C_8H_{16} \qquad [3]$$

	$\Delta H_f \left[\frac{kJ}{mol}\right]$
H_2O	$-241{,}814$
C_2H_4	$52{,}510$
C_4H_8	$-0{,}540$
C_8H_{16}	$-83{,}60$
C_2H_5OH	$-239{,}450$

Ejemplo de cálculo del calor de reacción del etanol en etileno:

$$\Delta H_1 = \Delta H_{reactivos} - \Delta H_{productos}$$

$$\Delta H_1 = \Delta H_{H_2O} + \Delta H_{C_2H_4} - \Delta H_{C_2H_5OH}$$

$$\Delta H_1 = -241{,}814 + 52{,}510 + 239{,}450$$

$$\Delta H_1 = 45{,}646 \left[\frac{kJ}{mol}\right]$$

$$\Delta H_2 = -293{,}640 \left[\frac{kJ}{mol}\right]$$

$$\Delta H_3 = -105{,}620 \left[\frac{kJ}{mol}\right]$$

Cálculo del calor de reacción total

$$\Delta H = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$$

$$\Delta H = 45{,}646 - 293{,}640 - 105{,}620$$

$$\Delta H = -353{,}614 \left[\frac{kJ}{mol}\right]$$

Anexo II. Cálculos de números adimensionales y parámetros de diseño

1. *Dimensiones del reactor*

$$L = 35\ cm$$

$$\phi_i = 2{,}54\ cm$$

$$\phi_e = 2{,}56\ cm$$

2. *Volumen del reactor*

$$V = \pi r^2 h$$

$$V = \pi \cdot \left(\frac{0{,}254}{2}\right)^2 \cdot 0{,}35$$

$$V = 1{,}77 \times 10^{-4}\ m^3$$

3. *Área transversal del reactor*

$$A = h \cdot \emptyset$$

$$A = 0{,}35 \cdot 0{,}0254$$

$$A = 8{,}89 \times 10^{-3}\ m^2$$

4. *Caudales*

$$Q_1 = 1{,}2 \times 10^{-8}\ {m^3}/{s}$$

$$Q_2 = 2{,}12 \times 10^{-8}\ {m^3}/{s}$$

5. *Velocidades*

$$v_1 = 1{,}35 \times 10^{-6}\ {m}/{s}$$

$$v_2 = 2{,}38 \times 10^{-6}\ {m}/{s}$$

Ejemplo de cálculo de velocidad para un caudal de $1{,}2 \times 10^{-8}\ {m^3}/{s}$

$$v_1 = \frac{Flujo_{\ 1}}{Area}$$

$$v_1 = \frac{1{,}2 \times 10^{-8}}{8{,}89 \times 10^{-3}}$$

$$v_1 = 1{,}35 \times 10^{-6}\ {m}/{s}$$

6. *Diámetro de la partícula*

$$d_p = 1\ mm \cdot \frac{1\ m}{1000\ mm} = 0{,}001\ m$$

Composición Molar Muestra 1

X_{H_2O}	0,284
$X_{C_2H_4}$	0,3195
$X_{C_4H_8}$	0,3195
$X_{C_8H_{16}}$	0,077

Peso molecular

$$\overline{PM} = X_{H_2O}PM_{H_2O} + X_{C_2H_4}PM_{C_2H_4} + X_{C_4H_8}PM_{C_4H_8} + X_{C_8H_{16}}PM_{C_8H_{16}}$$

$$\overline{PM} = (0{,}284 \cdot 18) + (0{,}3195 \cdot 28) + (0{,}3195 \cdot 56) + (0{,}077 \cdot 112)$$

$$\overline{PM} = 40{,}574\ \frac{g}{mol}$$

7. *Densidad de la mezcla*

$$\bar{\delta} = \frac{P\ \overline{PM}}{R\ T}$$

$$\bar{\delta} = \frac{0{,}71\ atm \cdot 40{,}574\ {}^{g}/_{mol}}{0{,}082\ {}^{atm\ L}/_{mol\ K} \cdot 623\ K}$$

$$\bar{\delta} = 0{,}564\ \frac{g}{L}$$

$$\bar{\delta} = 0{,}564\ \frac{kg}{m^3}$$

8. *Generación total de calor por la reacción*

Ejemplo de cálculo

$$(-\Delta H)\ \mathrm{rv} = \frac{2{,}12 \times 10^{-8} m^3}{s} \cdot \frac{1000\ L}{1\ m^3} \cdot \frac{0{,}564\ g}{L} \cdot \frac{1 mol}{40{,}574\ g} \cdot \frac{-353{,}614\ kJ}{1\ mol} \cdot \frac{1000 J}{1\ kJ} \cdot \frac{1}{0{,}6\ kg}$$

$$(-\Delta H)\ \mathrm{rv} = -0{,}173\ \frac{W}{kg\ catalizador}$$

9. Análisis del Caudal de la muestra 2

Caudales

Caudal	$\left[\frac{ml}{min}\right]$
Q_2	1,270
Q_{H_2O}	0,317
$Q_{C_2H_4}$	0,356
$Q_{C_4H_8}$	0,356
$Q_{C_8H_{16}}$	0,085

Ejemplo de cálculo para el C_2H_4

$$\delta = \frac{P\,\overline{PM}}{R\,T}$$

$$\delta = \frac{0{,}71\ atm \cdot 28\ {}^{g}/_{mol}}{0{,}082\ {}^{atm\ L}/_{mol\ K} \cdot 623\ K}$$

$$\delta = 0{,}389\ \frac{g}{L}$$

10. Velocidad de reacción de las especies

	$\mathrm{rv}\left[\frac{mol}{s\ \cdot kg\ cat}\right]$
H_2O	$1{,}222 \times 10^{-7}$
C_2H_4	$1{,}37 \times 10^{-7}$
C_4H_8	$1{,}37 \times 10^{-7}$
C_8H_{16}	$3{,}280 \times 10^{-8}$

$$\mathrm{rv}_{C_2H_4} = \frac{0{,}356mL}{min} \cdot \frac{1min}{60\ s} \cdot \frac{1\ L}{1000\ mL} \cdot \frac{0{,}389\ g}{1\ L} \cdot \frac{1mol}{28\ g} \cdot \frac{1}{0{,}6\ kg\ cat}$$

$$\mathrm{rv}_{C_2H_4} = \frac{1{,}37 \times 10^{-7}\ mol}{s\ \cdot kg\ cat}$$

11. Viscosidad de la mezcla

	$\mu\left[\frac{N \cdot s}{m^2}\right]$
C_2H_4 (1)	$1{,}90 \times 10^{-5}$
C_4H_8 (2)	$1{,}60 \times 10^{-5}$
C_8H_{16} (3)	$1{,}10 \times 10^{-5}$
H_2O (4)	$2{,}15 \times 10^{-5}$

$$\frac{\overline{PM}}{\bar{\mu}} = \frac{X_{H_2O}PM_{H_2O}}{\mu_{H_2O}} + \frac{X_{C_2H_4}PM_{C_2H_4}}{\mu_{C_2H_4}} + \frac{X_{C_4H_8}PM_{C_4H_8}}{\mu_{C_4H_8}} + \frac{X_{C_8H_{16}}PM_{C_8H_{16}}}{\mu_{C_8H_{16}}}$$

$$\frac{40{,}574}{\bar{\mu}} = \frac{0{,}284 \cdot 18}{2{,}15 \times 10^{-5}} + \frac{0{,}3195 \cdot 28}{1{,}90 \times 10^{-5}} + \frac{0{,}3195 \cdot 56}{1{,}60 \times 10^{-5}} + \frac{0{,}077 \cdot 112}{1{,}10 \times 10^{-5}}$$

$$\bar{\mu} = 1575{,}05 \times 10^{-8} \left[\frac{N \cdot s}{m^2}\right]$$

$$\bar{\mu} = 1575{,}05 \times 10^{-8} \left[\frac{kg}{m \cdot s}\right]$$

12. Conductividad térmica λ_f

	$\lambda_f \left[\frac{W}{m \cdot K}\right]$
C_2H_4 (1)	0,018
C_4H_8 (2)	0,014
C_8H_{16} (3)	0,015
H_2O (4)	0,025

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(1 + \frac{PM_i}{PM_j}\right)^{-1/2}\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2}\left(\frac{PM_j}{PM_i}\right)^{1/4}\right]^2$$

$$\phi_{ji} = \frac{\mu_j}{\mu_i} \cdot \frac{PM_i}{PM_j} \cdot \phi_{ij}$$

ϕ_{12}	1,52166
ϕ_{21}	0,64069
ϕ_{13}	2,58416
ϕ_{31}	0,37402
ϕ_{14}	0,75019
ϕ_{41}	1,32053
ϕ_{23}	1,71055
ϕ_{32}	0,58801
ϕ_{24}	0,47446
ϕ_{42}	1,98354
ϕ_{34}	0,27771
ϕ_{43}	3,37734

Ejemplo de cálculo

$$\phi_{12} = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(1 + \frac{PM_1}{PM_2}\right)^{-1/2}\left[1 + \left(\frac{\mu_1}{\mu_2}\right)^{1/2}\left(\frac{PM_2}{PM_1}\right)^{1/4}\right]^2$$

$$\phi_{12} = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(1 + \frac{28}{56}\right)^{-1/2}\left[1 + \left(\frac{1{,}90 \times 10^{-5}}{1{,}60 \times 10^{-5}}\right)^{1/2}\left(\frac{56}{28}\right)^{1/4}\right]^2$$

$$\phi_{12} = 1{,}52166$$

$$\phi_{21} = \frac{\mu_2}{\mu_1} \cdot \frac{PM_1}{PM_2} \cdot \phi_{12}$$

$$\phi_{21} = \frac{1{,}60 \times 10^{-5}}{1{,}90 \times 10^{-5}} \cdot \frac{28}{56} \cdot 1{,}52166$$

$$\phi_{21} = 0{,}64069$$

$$\lambda_f = \frac{X_1\lambda_1}{X_1 + X_2\phi_{12} + X_3\phi_{13} + X_4\phi_{14}} + \frac{X_2\lambda_2}{X_2 + X_1\phi_{21} + X_3\phi_{23} + X_4\phi_{24}} + \frac{X_3\lambda_3}{X_3 + X_1\phi_{31} + X_2\phi_{32} + X_4\phi_{34}} + \frac{X_4\lambda_4}{X_4 + X_1\phi_{41} + X_2\phi_{42} + X_3\phi_{43}}$$

$$\lambda_f = \frac{0{,}3195 \cdot 0{,}018}{0{,}3195 + 0{,}3195 \cdot 1{,}52166 + 0{,}077 \cdot 2{,}58416 + 0{,}284 \cdot 0{,}75019} + \frac{0{,}3195 \cdot 0{,}014}{0{,}3195 + 0{,}3195 \cdot 0{,}64069 + 0{,}077 \cdot 1{,}71055 + 0{,}284 \cdot 0{,}47446} + \frac{0{,}077 \cdot 0{,}015}{0{,}077 + 0{,}3195 \cdot 0{,}37402 + 0{,}3195 \cdot 0{,}58801 + 0{,}284 \cdot 0{,}27771} + \frac{0{,}284 \cdot 0{,}025}{0{,}284 + 0{,}3195 \cdot 1{,}32053 + 0{,}3195 \cdot 1{,}98354 + 0{,}077 \cdot 3{,}37734}$$

$$\lambda_f = 0{,}01709\ \frac{W}{m\,K}$$

$$K = \frac{\lambda_s}{\lambda_f}$$

$$K = \frac{0{,}1}{0{,}017709}$$

$$K = 5{,}64689$$

$$B = Cf\left(\frac{1 - \varepsilon_o}{\varepsilon_o}\right)$$

$$B = Cf\left(\frac{1 - 0{,}66}{0{,}66}\right)$$

$$B = 0{,}644$$

13. Porosidad del catalizador - zeolita

$$\rho_b = 1000\ \frac{kg}{m^3}$$

$$\varepsilon_0 = \frac{\rho_p - \rho_b}{\rho_p}$$

$$\varepsilon_0 = \frac{1000 - 338{,}983}{1000}$$

$$\varepsilon_0 = 0{,}66$$

14. Conductividad térmica estándar λ_r°

$$\lambda_r^{\circ} = \left(\sqrt{1-\varepsilon_0} - 1\right) - \frac{2\sqrt{1-\varepsilon_0}}{1 - B \cdot K^{-1}}\left[\frac{B(1-K^{-1})}{1 - B \cdot K^{-1}} \cdot ln\left(\frac{K}{B}\right) - \frac{B-1}{1 - B \cdot K^{-1}} - \frac{B+1}{2}\right]$$

$$\lambda_r^{\circ} = \left(\sqrt{1-0{,}66} - 1\right) - \frac{2\sqrt{1-0{,}66}}{1 - 0{,}644 \cdot 5{,}64689^{-1}}\left[\frac{0{,}644(1-5{,}64689^{-1})}{1 - 0{,}644 \cdot 5{,}64689^{-1}} \cdot ln\left(\frac{5{,}64689}{0{,}644}\right) - \frac{0{,}644-1}{1 - 0{,}644 \cdot 5{,}64689^{-1}} - \frac{0{,}644+1}{2}\right]$$

$$\lambda_r^{\circ} = -1{,}57336\ \frac{W}{m\,K}$$

15. Número de Reynolds

$$Re_p = \frac{\bar{\delta}\ v\ d_p}{\bar{\mu}}$$

$$Re_p = \frac{0{,}56\ {}^{kg}/_{m^3} \cdot 2{,}38 \times 10^{-6}\ {}^{m}/_{s}\ \cdot 0{,}001\ m}{1575 \times 10^{-8}\ {}^{kg}/_{m \cdot s}}$$

$$Re_p = 8{,}5 \times 10^{-5}$$

16. Número de Prandt

$$Pr = \frac{\overline{Cp}\ \bar{\mu}}{\lambda_f}$$

$$Pr = \frac{2435{,}96\,{}^{J}/_{kg\,K} \cdot 1575 \times 10^{-8}\ {}^{kg}/_{m \cdot s}}{0{,}017709\ {}^{W}/_{m\,K}}$$

$$Pr = 2{,}13228$$

17. Número de Peclet efectivo axial de calor en base al diámetro de partícula

$$Pe_{hz} = \frac{dp\ \bar{\delta}\ v}{\lambda_f}$$

$$Pe_{hz} = \frac{dp\ \overline{Cp}\ \bar{\delta}\ v}{\lambda_{cz}}$$

$$Pe_{hz} = \frac{0{,}001\ m \cdot 2435{,}96\,{}^{J}/_{kg\,K} \cdot 2{,}38 \times 10^{-6}\ {}^{m}/_{s} \cdot 0{,}56\ {}^{kg}/_{m^3} \cdot 2{,}38 \times 10^{-6}\ {}^{m}/_{s}}{\lambda_{cz}\ {}^{W}/_{m\,K}}$$

$$Pe_{hz} = \frac{3{,}3269 \times 10^{-6}}{\lambda_{cz}}$$

$$\frac{1}{Pe_{hz}} = \frac{{}^{\lambda_r^{\circ}}/_{\lambda_{cr}}}{Re_p \cdot Pr} + 0{,}7$$

$$\frac{1}{\frac{3{,}3269 \times 10^{-6}}{\lambda_{cz}}} = \frac{{}^{1{,}57336}/_{0{,}01709}}{8{,}5 \times 10^{-5} \cdot 2{,}13228} + 0{,}7$$

$$\lambda_{cz} = 1{,}57743 \frac{W}{m\,K}$$

18. Número de Peclet efectivo axial de calor en base a las dimensiones del lecho

$$Pe'_{hz} = \frac{L\ \bar{\delta}\ \overline{Cp}\ v}{\lambda_{cz}}$$

$$Pe'_{hz} = \frac{0{,}35\ m \cdot 0{,}56\ {}^{kg}/_{m^3} \cdot 2435{,}96\,{}^{J}/_{kg\,K} \cdot 2{,}38 \times 10^{-6}\ {}^{m}/_{s}}{1{,}57743\ {}^{W}/_{m\,K}}$$

$$Pe'_{hz} = 7{,}25 \times 10^{-4}$$

$$\frac{1}{Pe'_{hz}} = 1378.04$$

19. Número de Schmith

Ejemplo de cálculo para el C_8H_{16}

$$Sc_{C_8H_{16}} = \frac{\mu_{C_8H_{16}}}{\rho_{C_8H_{16}} \cdot Dm}$$

$$Sc_{C_8H_{16}} = \frac{1{,}10 \times 10^{-5}\, {}^{kg}/_{m \cdot s}}{1{,}557\, {}^{kg}/_{m^3} \cdot 5{,}05 \times 10^{-6}\, {}^{m^2}/_{s}}$$

$$Sc_{C_8H_{16}} = 1{,}39898$$

20. Número de Peclet efectivo axial de masa en base al diámetro de partícula

$$Pe_{mz} = \frac{dp\ v}{D_{cz}} = \frac{0.001\, m \cdot 2.38 \times 10^{-6}\, {}^{m}/_{s}}{D_{cz}}$$

$$Pe_{mz} = \frac{2{,}38 \times 10^{-9}}{D_{cz}}$$

$$\frac{1}{\frac{2{,}38 \times 10^{-9}}{D_{cz}}} = \frac{1 - \sqrt{1 - 0{,}66}}{0{,}000085 \cdot 1{,}39898} + \frac{1}{2}$$

$$4{,}20168\, D\ cz = 3506{,}46$$

$$D_{cz} = 8{,}35 \times 10^{-6} \frac{m^2}{s}$$

21. Número de Peclet efectivo radial de masa en base a las dimensiones del lecho

$$Pe'_{mz} = \frac{0{,}35m \cdot 2{,}38 \times 10^{-6}\, {}^{m}/_{s}}{8{,}35 \times 10^{-6} \frac{m^2}{s}}$$

$$\frac{1}{Pe'_{mz}} = 10{,}0185$$

22. Concentración molar de las especies

Ejemplo de cálculo para el C_8H_{16}

$$C_{o\ C_8H_{16}} = \frac{0{,}085\, mL}{min} \cdot \frac{1{,}557\, g}{L} \cdot \frac{1\, L}{100\, mL} \cdot \frac{1\, mol}{112\, g} \cdot \frac{1\, s}{2{,}38 \times 10^{-6}\, m} \cdot \frac{1}{8{,}89 \times 10^{-3} m^2} \cdot \frac{1\, min}{60\, s}$$

$$C_{o\ C_8H_{16}} = 0{,}93 \frac{mol}{m^3}$$

Anexo III. Códigos para dinámica de fluidos computacionales en Flex PDE

1. Corrida 1: Modelo Unidimensional Estacionario Flujo 1

```
TITLE 'Modelo Homogeneo Unidimensional estacionario'     { titulo del problema }
COORDINATES cartesian2  {sistema de coordenadas , 1D,2D,3D, etc }
 Variables{ se define las variables del sistema}
Temp(threshold=1) {temperatura adimensional}
y1(threshold=1) {concentracion de C2H4 adimensional}
y2(threshold=1) {concentracion de C4H8 adimensional}
y3(threshold=1) {concentracion de C8H16 adimensional}
y4(threshold=1) {concentracion de H2O adimensional}

select
painted { para que las figures salgan a colores}
definitions
z1=1
r1=1
{Parámetros de 1/Peclet Normalizados}
max1= 1.45258 { 1/Pe?mz para el C2H4}
max2=3.44254 { 1/Pe?mz para el C4H8}
max3=10.0185{ 1/Pe?mz para el C8H16}
max4=3.58631{ 1/Pe?mz para el H2O}
qax=1378.04 { (1/Pe?hz)}
df=0.564 { densidad del fluido}
cpf= 2435.46 { capacidad calórica del fluido}
vo= 0.00000238 { velocidad del fluido}

cony1=(1-y1)*100 {conversion de C2H4}

cony2=(1-y2)*100 {conversión de C4H8}
cony3=(1-y3)*100 {conversion de C8H16}
cony4=(1-y4)*100 {conversion de H2O}
Concy1=y1*3.90{concentración de C2H4}
```

```
Concy2=y2*3.89593{concentración de C4H8}
Concy3=y3*0.93 {concentración de C8H16}
Concy4=y4*3.46814 {concentración de H2O}
 tempt=temp
Initial values {Valores Iniciales de las Variables }
Temp = 1  {Valor Inicial de la Temperatura }
y1= 0 {Valor Inicial del C2H4}
y2= 0{Valor Inicial del C4H8}
y3=0 {Valor Inicial del C8H16}
y4=0 {Valor Inicial del H2O}

equations
Temp:  0= -dx(temp)+qax*dxx(temp)-10.0778 {EDP de la Temperatura}
y1: 0= dx(y1)+max1*dxx(y1)+1.75116 {EDP del C2H4}
y2:       0 = dx(y2)+max2*dxx(y2)+1.75299 {EDP del C4H8 }
y3:       0 = dx(y3)+max3*dxx(y3)+1.75817{EDP del C8H16 }
y4:       0 = dx(y4)+max4*dxx(y4)+3.46814{EDP del H2O}
Boundaries{ Definición del Dominio y Condiciones de Borde}
region 1start 'INICIO' (0,0) line to (z1,0) { zona de salida de reactivos}
natural(Temp) = 0 { condición de borde natural o de Dirichlet  para la temperatura }
natural(y1)= 0 { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C2H4 }
natural(y2)= 0{ condición de borde natural o de Dirichlet  para el C4H8 }
natural(y3)= 0{ condición de borde natural o de Dirichlet  para el C8H16}
natural(y4)= 0{ condición de borde natural o de Dirichlet  para el H2O}

 line to (z1,r1) line to (0,r1) { zona de entrada de reactivos}

natural(Temp)  =1/qax*(temp-1)  {  condición  de  borde  natural  o  de  Dirichlet   para  la
temperatura}
natural(y1)=1/max1*(y1) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C2H4}
natural(y2)=1/max2*(y2) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C4H8}
natural(y3)=1/max3*(y3) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C8H16}
natural(y4)=1/max4*(y4) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el H2O}

 line to (0,0) to close
plots{ Salidas Gráficas}
```

```
surface(tempt)
surface(concy1)
elevation(tempt) from (0,0) to(z1,0)
elevation(concy1) from(0,0) to(z1,0)
elevation(concy2) from(0,0) to(z1,0)
elevation(concy3) from(0,0) to(z1,0)
elevation(concy4) from(0,0) to(z1,0)

plots

contour(tempt)as " Temperatura K"
contour(concy1)as " Concentración de C2H4mol/m3"
contour(concy2)as " Concentración de C4H8mol/m3"
contour(concy3)as "Concentración de C8H16mol/m3"
contour(concy4)as "Concentración de H2Omol/m3"

vector(-qax*cpf*vo*df*dx(temp),0)as     "Flujo de Calor w/m2"
vector(max1*vo*3.9*dx(y1),0) as "Flujo Másico C2H4  mol/m2s"
vector(max2*vo*3.89593*dx(y2),0) as "Flujo  Másico C4H8 mol/m2s"
vector(max3*vo*0.93*dx(y3),0) as "Flujo Másico C8H16 mol/m2s"
vector(max4*vo*03.46814*dx(y4),0) as "Flujo Másico H2O mol/m2s"

elevation(tempt) from (0,0) to(z1,0) as " Temperatura K"
elevation(concy1) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de C2H4 mol/m3"
elevation(concy2) from(0,0) to(z1,0) as "Concentración de C4H8 mol/m3"
elevation(concy3) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de C8H16 mol/m3"
elevation(concy4) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de H2O mol/m3"

plots
END
```

2. Corrida 2: Modelo Unidimensional Estacionario Flujo 2

```
TITLE 'Modelo Homogeneo Unidimensional estacionario 2'     { titulo del problema }
COORDINATES cartesian2  {sistema de coordenadas , 1D,2D,3D, etc }
 Variables{ se define las variables del sistema}
Temp(threshold=1) {temperatura adimensional}
y1(threshold=1) {concentracion de C2H4 adimensional}
y2(threshold=1) {concentracion de C4H8 adimensional}
y3(threshold=1) {concentracion de C8H16 adimensional}
y4(threshold=1) {concentracion de H2O adimensional}

 select
painted { para que las figures salgan a colores}
 definitions
z1=1
r1=1
{Parámetros de 1/Peclet Normalizados}
max1=1.68889 { 1/Pe?mz para el C2H4}
max2=1.63221 { 1/Pe?mz para el C4H8}
max3=20.5651{ 1/Pe?mz para el C8H16}
max4=2.73886{ 1/Pe?mz para el H2O}
qax=20408.2 {(1/Pe?hz)}
df=0.716 { densidad del fluido}
cpf= 2473.17 { capacidad calórica del fluido}
vo= 0.00000135 { velocidad del fluido}

cony1=(1-y1)*100 {conversion de C2H4}

cony2=(1-y2)*100 {conversión de C4H8}
cony3=(1-y3)*100 {conversion de C8H16}
cony4=(1-y4)*100 {conversion de H2O}

Concy1=y1*1.63221{concentración de C2H4}
Concy2=y2*1.63221{concentración de C4H8}
Concy3=y3*2.0455 {concentración de C8H16}
Concy4=y4*2.73886 {concentración de H2O}
```

```
 tempt=temp
Initial values {Valores Iniciales de las Variables }
Temp = 1  {Valor Inicial de la Temperatura }
y1= 0 {Valor Inicial del C2H4}
y2= 0{Valor Inicial del C4H8}
y3=0 {Valor Inicial del C8H16}
y4=0 {Valor Inicial del H2O}

equations
Temp:  0= -dx(temp)+qax*dxx(temp)-10.0778 {EDP de la Temperatura}
y1: 0= dx(y1)+max1*dxx(y1)+1.75769 {EDP del C2H4}
y2:       0 = dx(y2)+max2*dxx(y2)+1.793 {EDP del C4H8 }
y3:       0 = dx(y3)+max3*dxx(y3)+1.74007{EDP del C8H16 }
y4:       0 = dx(y4)+max4*dxx(y4)+1.75842{EDP del H2O}
Boundaries{ Definición del Dominio y Condiciones de Borde}
region 1start 'INICIO' (0,0) line to (z1,0) { zona de salida de reactivos}
natural(Temp) = 0 { condición de borde natural o de Dirichlet  para la temperatura }
natural(y1)= 0 { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C2H4 }
natural(y2)= 0{ condición de borde natural o de Dirichlet  para el C4H8 }
natural(y3)= 0{ condición de borde natural o de Dirichlet  para el C8H16}
natural(y4)= 0{ condición de borde natural o de Dirichlet  para el H2O}

 line to (z1,r1) line to (0,r1) { zona de entrada de reactivos}

natural(Temp) =1/qax*(temp-1) { condición de borde natural o de Dirichlet  para la
temperatura}
natural(y1)=1/max1*(y1) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C2H4}
natural(y2)=1/max2*(y2) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C4H8}
natural(y3)=1/max3*(y3) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C8H16}
natural(y4)=1/max4*(y4) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el H2O}

 line to (0,0) to close
plots{ Salidas Gráficas}
surface(tempt)
surface(concy1)
elevation(tempt) from (0,0) to(z1,0)
```

```
elevation(concy1) from(0,0) to(z1,0)
elevation(concy2) from(0,0) to(z1,0)
elevation(concy3) from(0,0) to(z1,0)
elevation(concy4) from(0,0) to(z1,0)

plots

contour(tempt)as " Temperatura K"
contour(concy1)as " Concentración de C2H4mol/m3"
contour(concy2)as " Concentración de C4H8mol/m3"
contour(concy3)as "Concentración de C8H16mol/m3"
contour(concy4)as "Concentración de H2Omol/m3"

vector(-qax*cpf*vo*df*dx(temp),0)as     "Flujo de Calor w/m2"
vector(max1*vo*3.9*dx(y1),0) as "Flujo Másico C2H4  mol/m2s"
vector(max2*vo*3.89593*dx(y2),0) as "Flujo  Másico C4H8 mol/m2s"
vector(max3*vo*0.93*dx(y3),0) as "Flujo Másico C8H16 mol/m2s"
vector(max4*vo*03.46814*dx(y4),0) as "Flujo Másico H2O mol/m2s"

elevation(tempt) from (0,0) to(z1,0) as " Temperatura K"
elevation(concy1) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de C2H4 mol/m3"
elevation(concy2) from(0,0) to(z1,0) as "Concentración de C4H8 mol/m3"
elevation(concy3) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de C8H16 mol/m3"
elevation(concy4) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de H2O mol/m3"

plots
END
```

3. Corrida 3: Modelo Unidimensional Dinámico Flujo 2

```
TITLE 'Modelo Homogeneo Unidimensional Dinamico'     { titulo del problema }
COORDINATES cartesian2  {sistema de coordenadas , 1D,2D,3D, etc }
 Variables{ se define las variables del sistema}
Temp(threshold=1) {temperatura adimensional}
y1(threshold=1) {concentracion de C2H4 adimensional}
y2(threshold=1) {concentracion de C4H8 adimensional}
y3(threshold=1) {concentracion de C8H16 adimensional}
y4(threshold=1) {concentracion de H2O adimensional}

 select
painted { para que las figures salgan a colores}
 definitions
z1=1
r1=1
{Parámetros de 1/Peclet Normalizados}
max1=1.68889 { 1/Pe?mz para el C2H4}
max2=1.63221 { 1/Pe?mz para el C4H8}
max3=20.5651{ 1/Pe?mz para el C8H16}
max4=2.73886{ 1/Pe?mz para el H2O}
qax=20408.2 {(1/Pe?hz)}
df=0.716 { densidad del fluido}
cpf= 2473.17 { capacidad calórica del fluido}
vo= 0.00000135 { velocidad del fluido}

cony1=(1-y1)*100 {conversion de C2H4}

cony2=(1-y2)*100 {conversión de C4H8}
cony3=(1-y3)*100 {conversion de C8H16}
cony4=(1-y4)*100 {conversion de H2O}

Concy1=y1*1.63221{concentración de C2H4}
Concy2=y2*1.63221{concentración de C4H8}
Concy3=y3*2.0455 {concentración de C8H16}
Concy4=y4*2.73886 {concentración de H2O}
```

```
 tempt=temp
Initial values {Valores Iniciales de las Variables }
Temp = 1  {Valor Inicial de la Temperatura }
y1= 0 {Valor Inicial del C2H4}
y2= 0{Valor Inicial del C4H8}
y3=0 {Valor Inicial del C8H16}
y4=0 {Valor Inicial del H2O}

equations
Temp: 11609.8 *dt(temp)= -dx(temp)+qax*dxx(temp)-10.0778 {EDP de la Temperatura}
y1:   45.5309 *dt(y1)= dx(y1)+max1*dxx(y1)+1.75769 {EDP del C2H4}
y2:   45.5309 *dt(y2) = dx(y2)+max2*dxx(y2)+1.793 {EDP del C4H8 }
y3:       45.5309 *dt(y3) = dx(y3)+max3*dxx(y3)+1.74007{EDP del C8H16 }
y4:       45.5309 *dt(y4) = dx(y4)+max4*dxx(y4)+1.75842{EDP del H2O}
Boundaries{ Definición del Dominio y Condiciones de Borde}
region 1start 'INICIO' (0,0) line to (z1,0) { zona de salida de reactivos}
natural(Temp) = 0 { condición de borde natural o de Dirichlet  para la temperatura }
natural(y1)= 0 { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C2H4 }
natural(y2)= 0{ condición de borde natural o de Dirichlet  para el C4H8 }
natural(y3)= 0{ condición de borde natural o de Dirichlet  para el C8H16}
natural(y4)= 0{ condición de borde natural o de Dirichlet  para el H2O}

 line to (z1,r1) line to (0,r1) { zona de entrada de reactivos}

natural(Temp) =1/qax*(temp-1) { condición de borde natural o de Dirichlet  para la
temperatura}
natural(y1)=1/max1*(y1) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C2H4}
natural(y2)=1/max2*(y2) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C4H8}
natural(y3)=1/max3*(y3) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el C8H16}
natural(y4)=1/max4*(y4) { condición de borde natural o de Dirichlet  para el H2O}

 line to (0,0) to close
 time 0 to 8

plots{ Salidas Gráficas}
```

```
for t=1{ salida para un tiempo de operación de 1 hora}
surface(tempt)
surface(concy1)
elevation(tempt) from (0,0) to(z1,0)
elevation(concy1) from(0,0) to(z1,0)
elevation(concy2) from(0,0) to(z1,0)
elevation(concy3) from(0,0) to(z1,0)
elevation(concy4) from(0,0) to(z1,0)

plots
 for t=8
contour(tempt)as " Temperatura K"
contour(concy1)as " Concentración de C2H4mol/m3"
contour(concy2)as " Concentración de C4H8mol/m3"
contour(concy3)as "Concentración de C8H16mol/m3"
contour(concy4)as "Concentración de H2Omol/m3"

vector(-qax*cpf*vo*df*dx(temp),0)as     "Flujo de Calor w/m2"
vector(max1*vo*3.9*dx(y1),0) as "Flujo Másico C2H4  mol/m2s"
vector(max2*vo*3.89593*dx(y2),0) as "Flujo  Másico C4H8 mol/m2s"
vector(max3*vo*0.93*dx(y3),0) as "Flujo Másico C8H16 mol/m2s"
vector(max4*vo*03.46814*dx(y4),0) as "Flujo Másico H2O mol/m2s"

elevation(tempt) from (0,0) to(z1,0) as " Temperatura K"
elevation(concy1) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de C2H4 mol/m3"
elevation(concy2) from(0,0) to(z1,0) as "Concentración de C4H8 mol/m3"
elevation(concy3) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de C8H16 mol/m3"
elevation(concy4) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de H2O mol/m3"

plots
END
```

Anexo IV. Resultados de la dinámica de fluidos computacionales en Flex PDE

Corrida 1: Modelo Unidimensional Estacionario Flujo 1

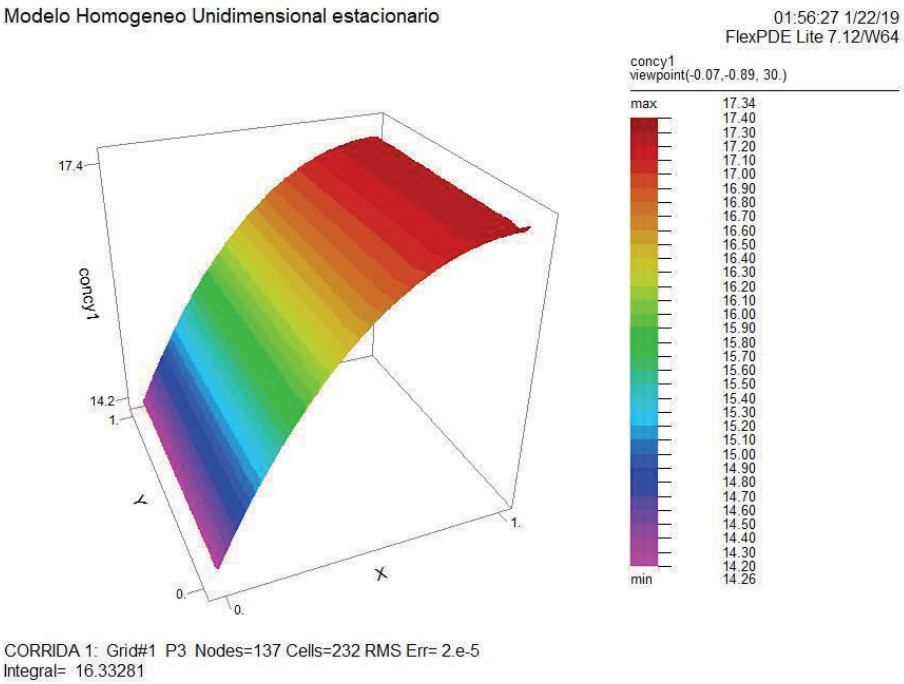


Figura AIV.4.1. Resultados 1 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

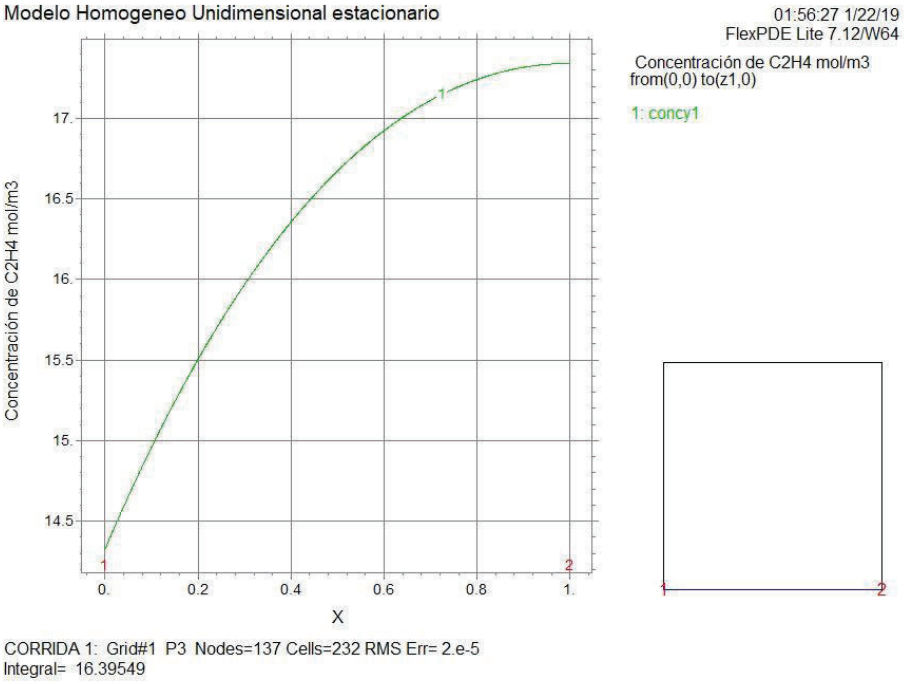


Figura AIV.4.2. Resultados 2 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

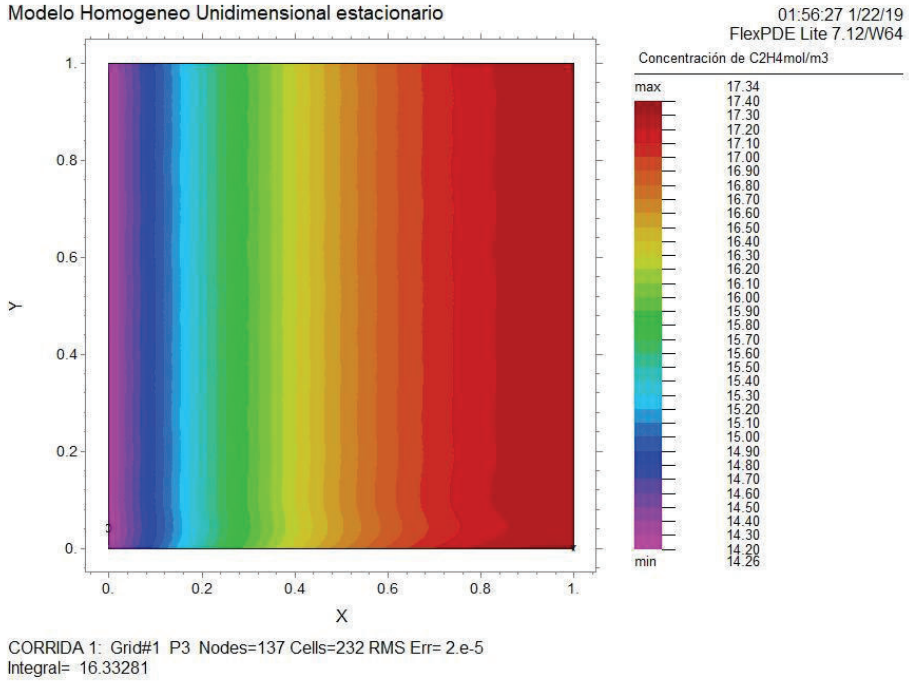


Figura AIV.4.3. Resultados 3 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

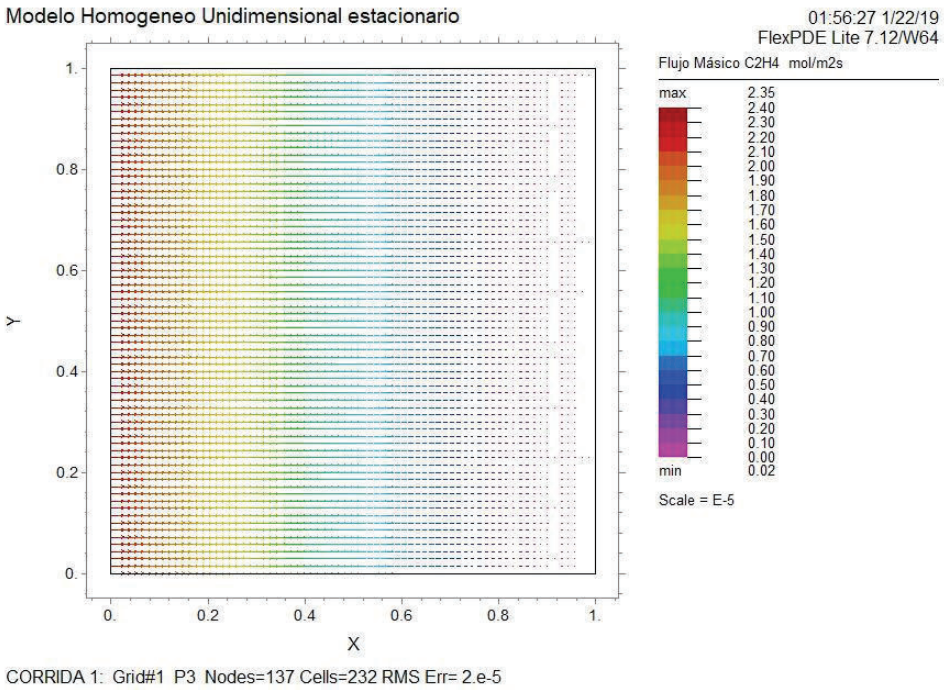


Figura AIV.4.4. Resultados 4 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

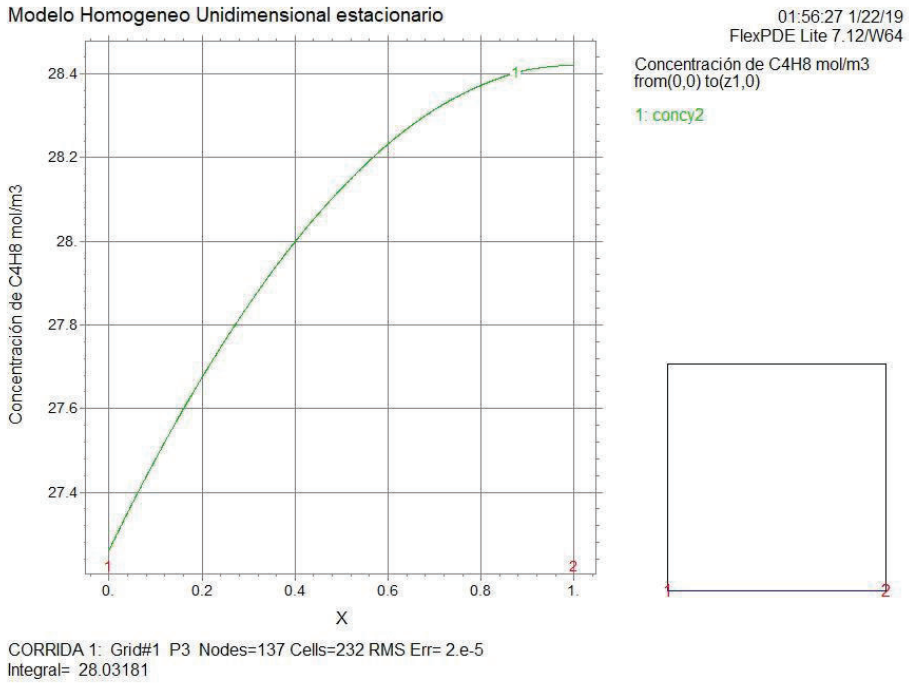


Figura AIV.4.5. Resultados 1 para el C_4H_8.
(Fuente: Propia)

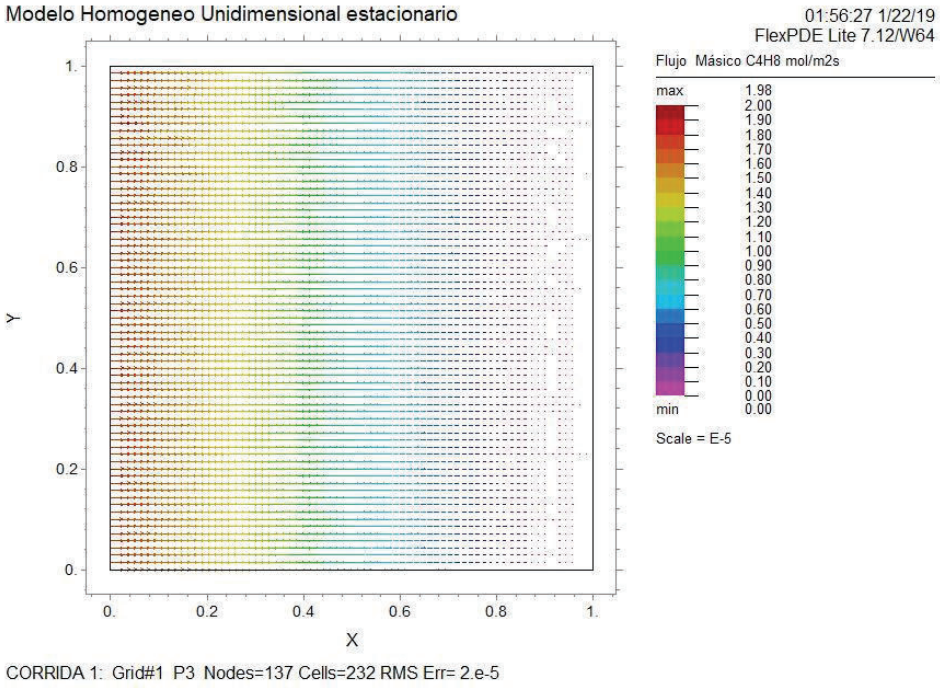


Figura AIV.4.6. Resultados 2 para el C_4H_8.
(Fuente: Propia)

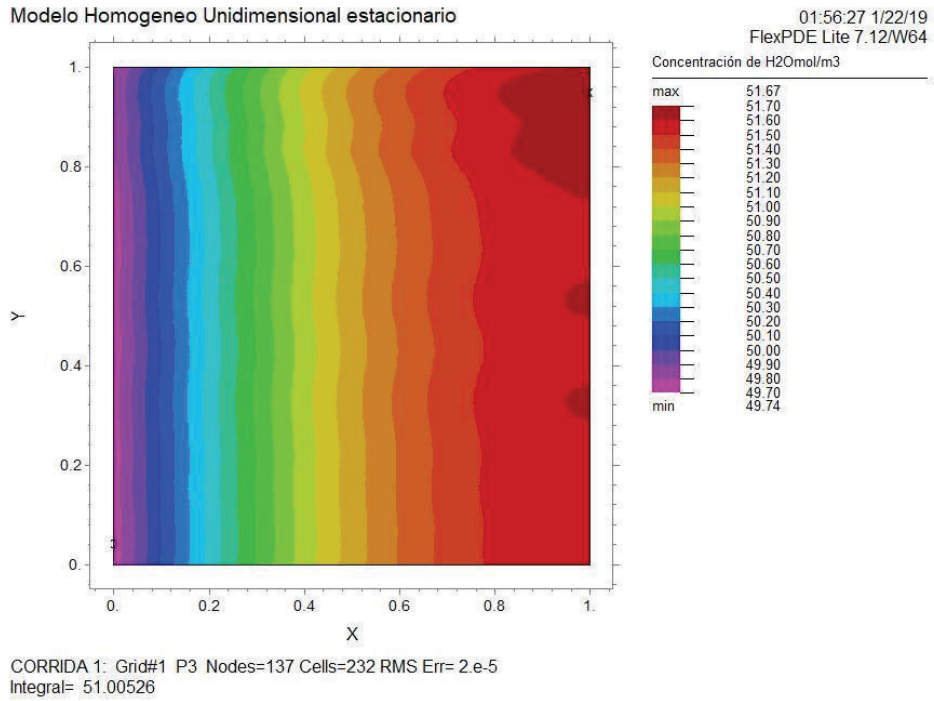


Figura AIV.4.7. Resultados 1 para el H_2O.
(Fuente: Propia)

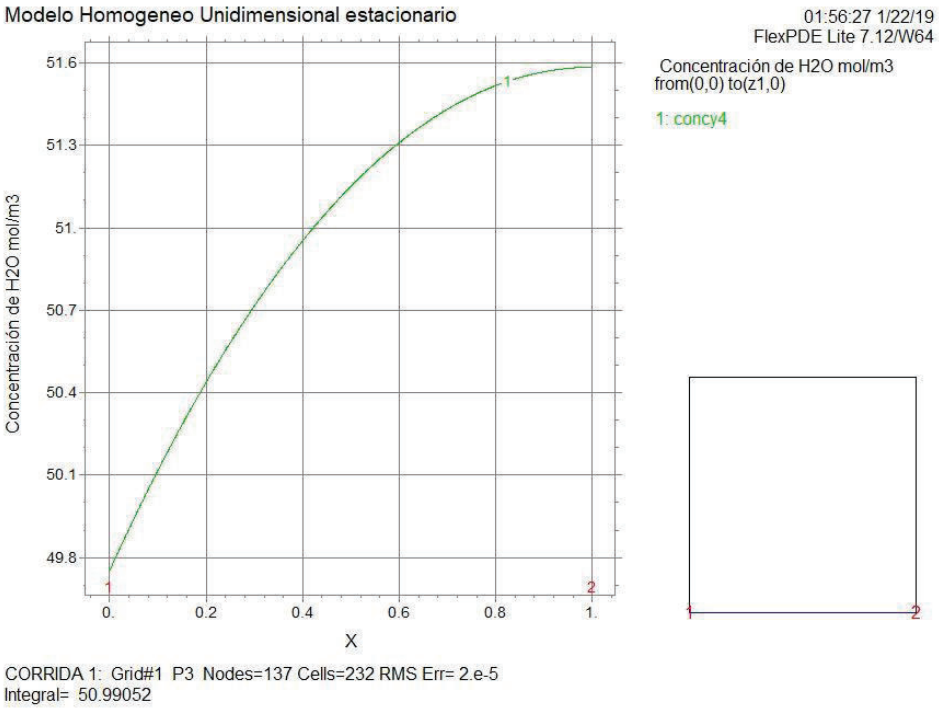


Figura AIV.4.8. Resultados 2 para el H_2O.
(Fuente: Propia)

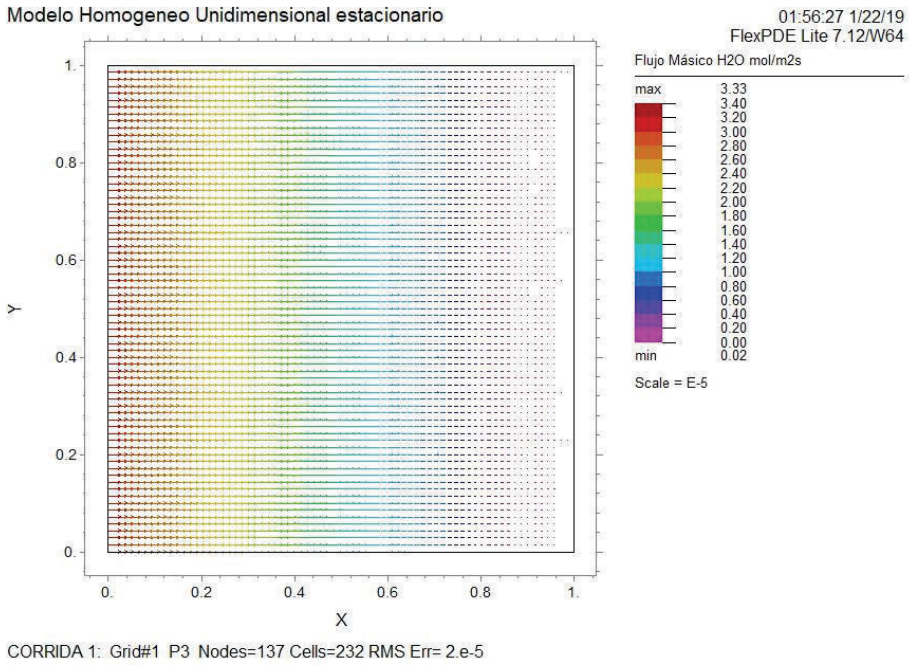


Figura AIV.4.9. Resultados 3 para el H_2O.
(Fuente: Propia)

Corrida 2: Modelo Unidimensional Estacionario. Flujo 2

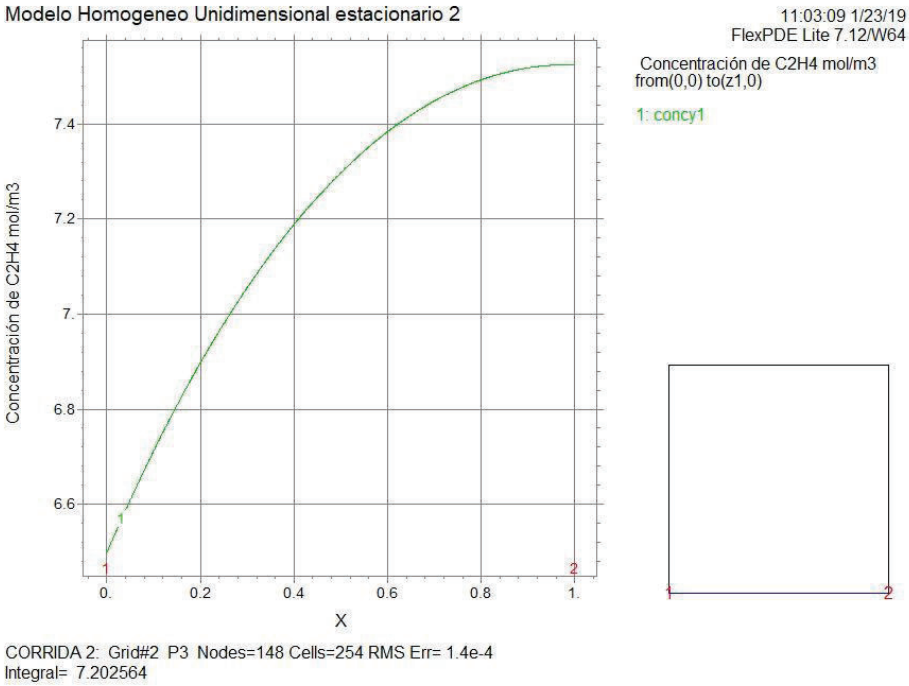


Figura AIV.4.10. Resultados 1 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

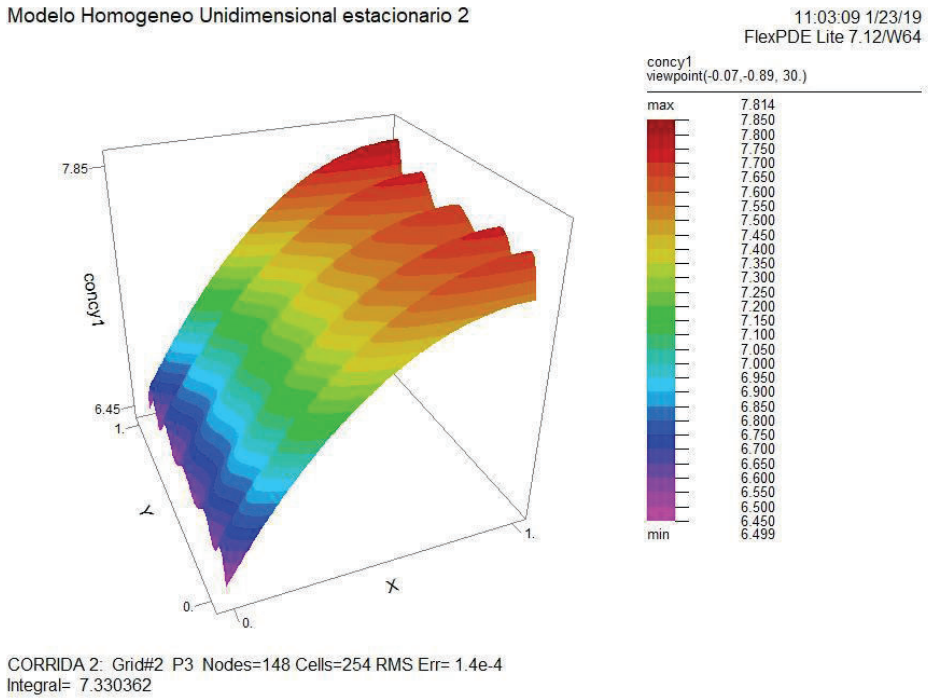


Figura AIV.4.11. Resultados 2 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

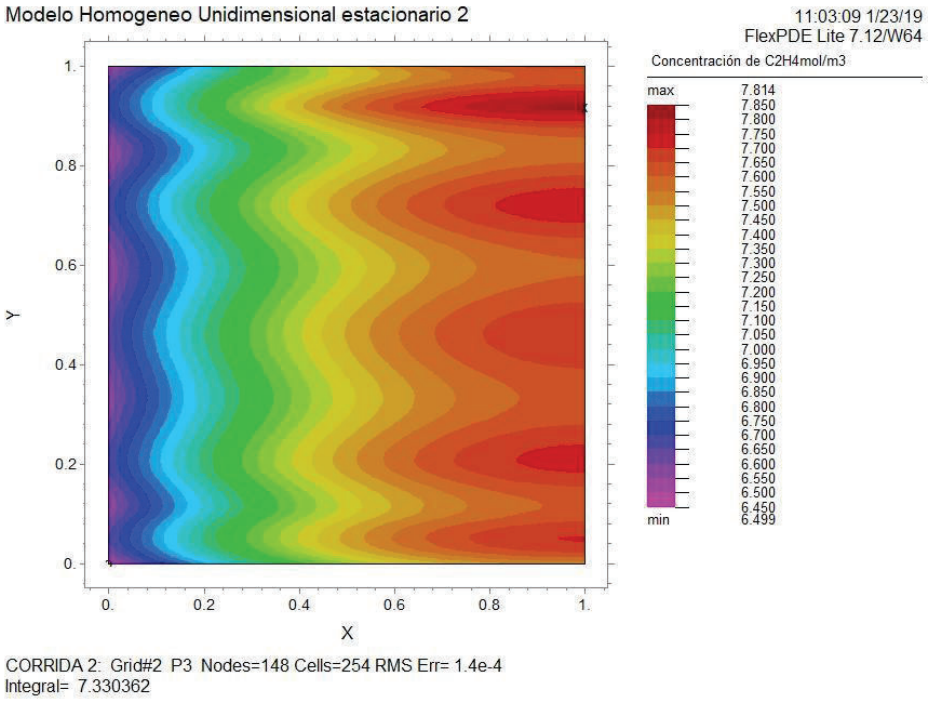


Figura AIV.4.12. Resultados 3 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

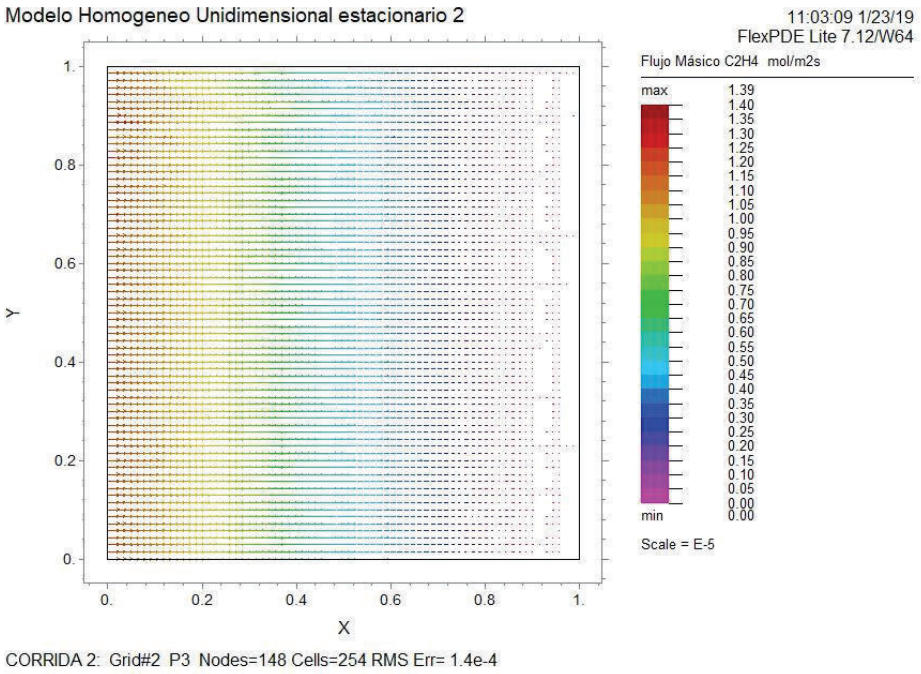


Figura AIV.4.13. Resultados 4 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

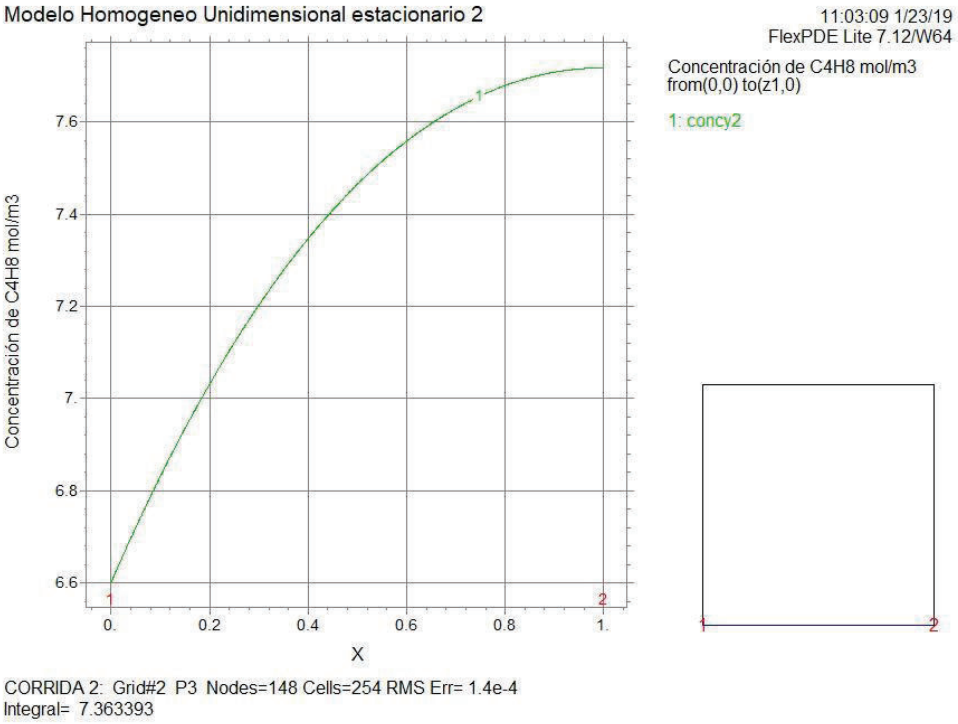


Figura AIV.4.14. Resultados 1 para el C_4H_8.
(Fuente: Propia)

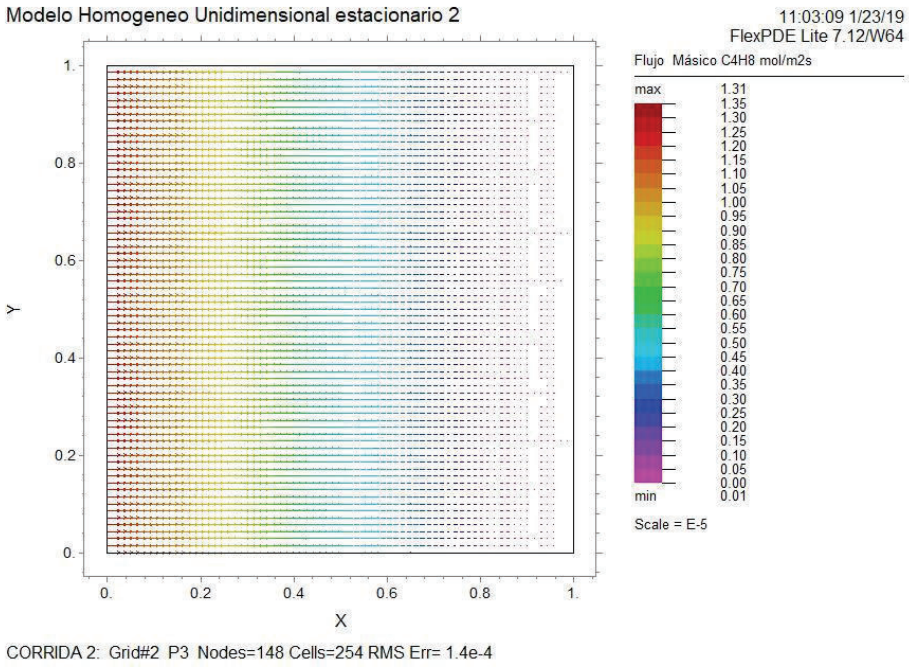


Figura AIV.4.15. Resultados 2 para el C_4H_8.
(Fuente: Propia)

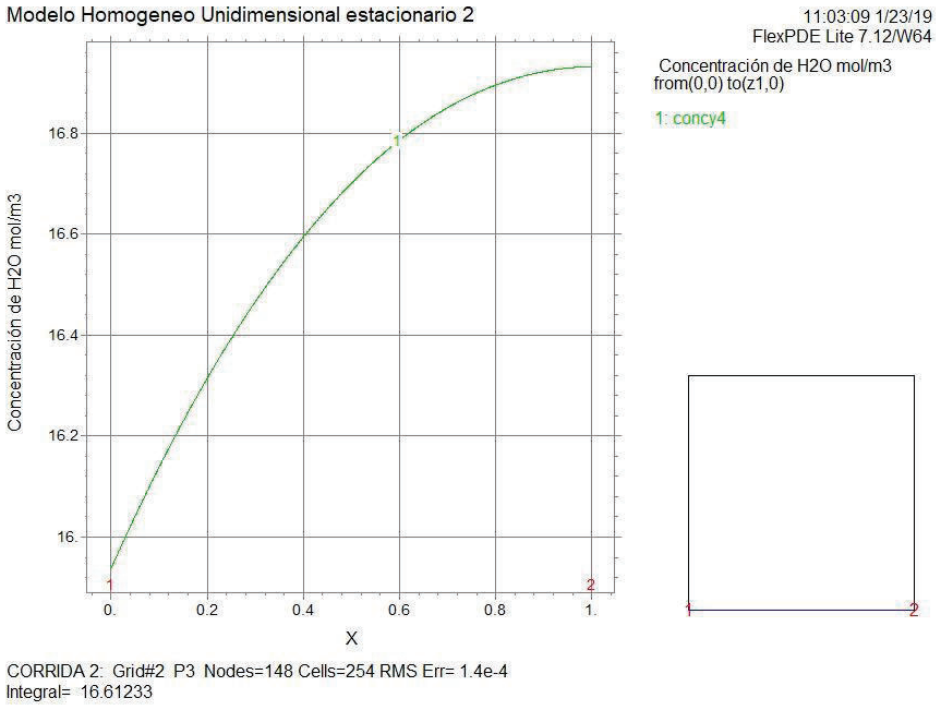


Figura AIV.4.16. Resultados 1 para el H_2O.
(Fuente: Propia)

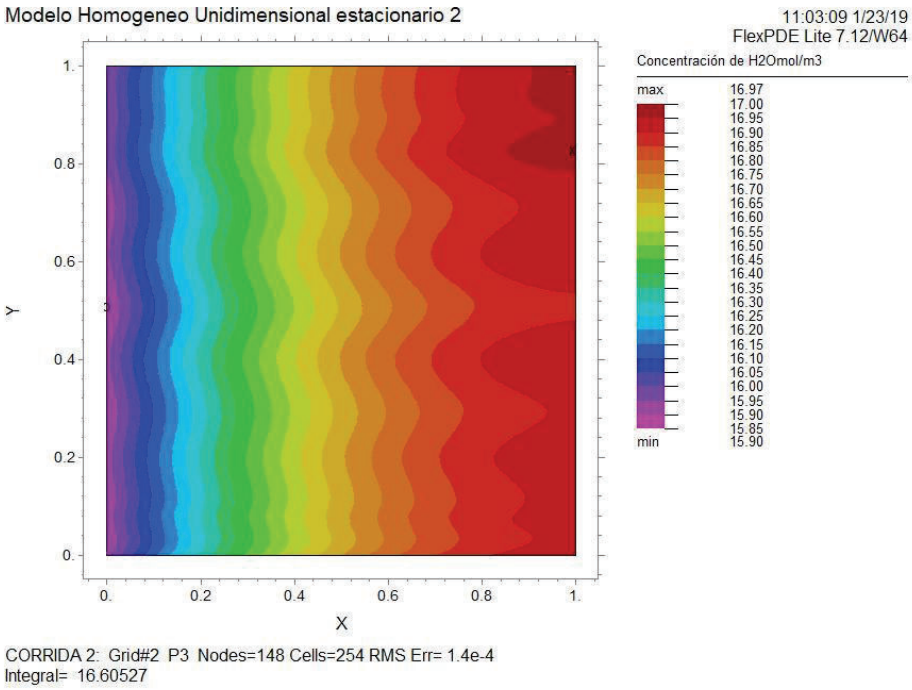


Figura AIV.4.17. Resultados 2 para el H_2O.
(Fuente: Propia)

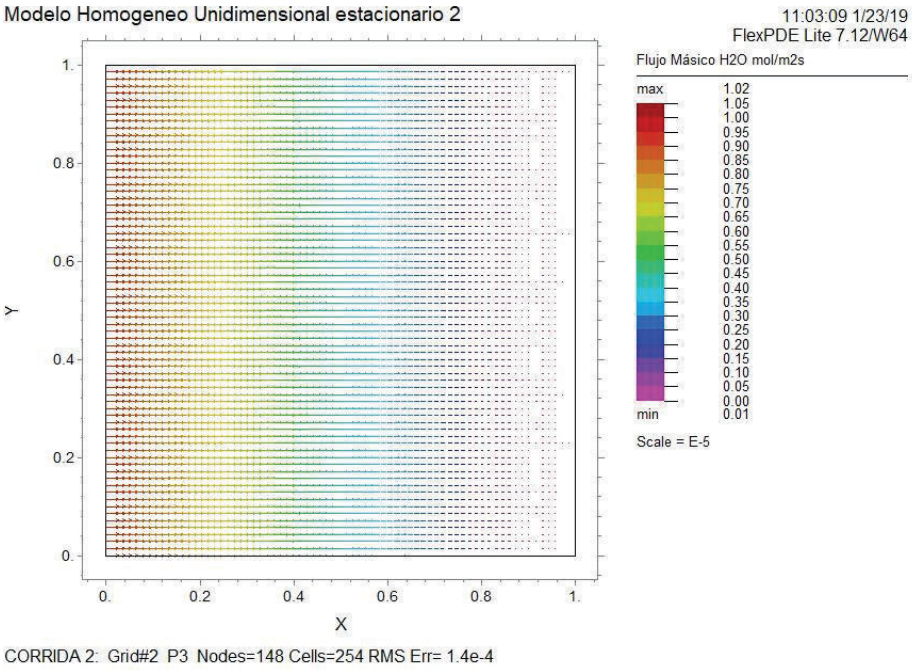


Figura AIV.4.18. Resultados 3 para el H_2O.
(Fuente: Propia)

Corrida 3: Modelo Unidimensional Dinámico. Flujo 2

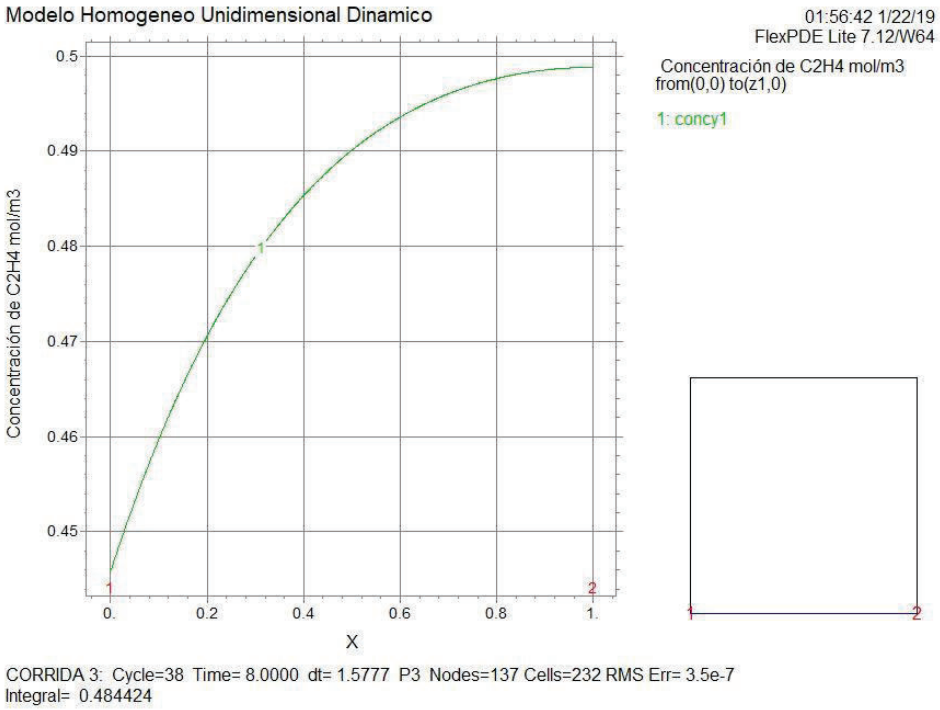


Figura AIV.4.19. Resultados 1 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

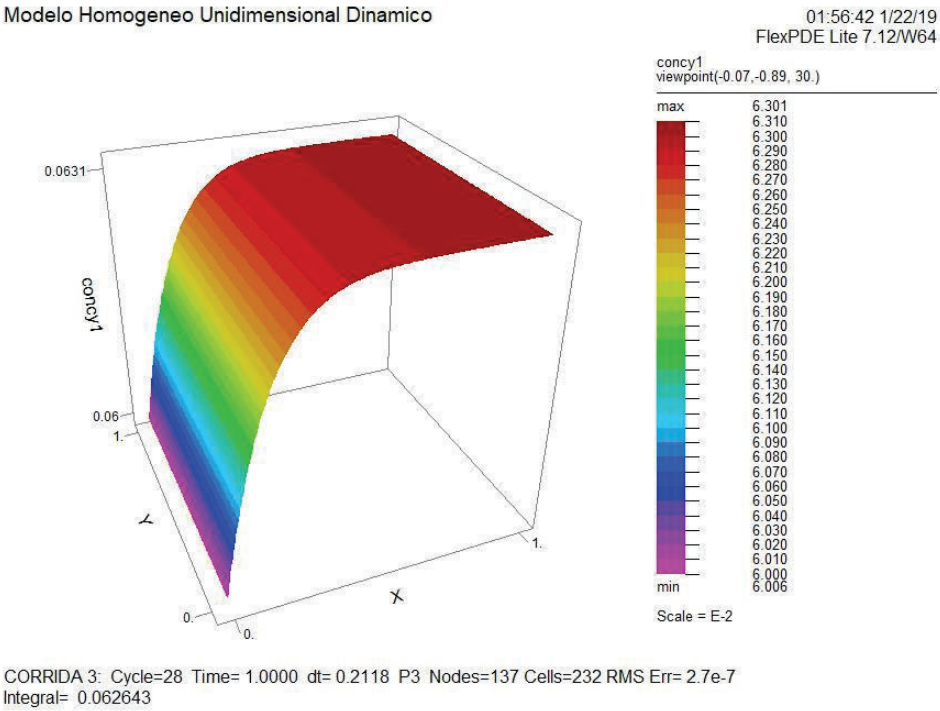


Figura AIV.4.20. Resultados 2 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

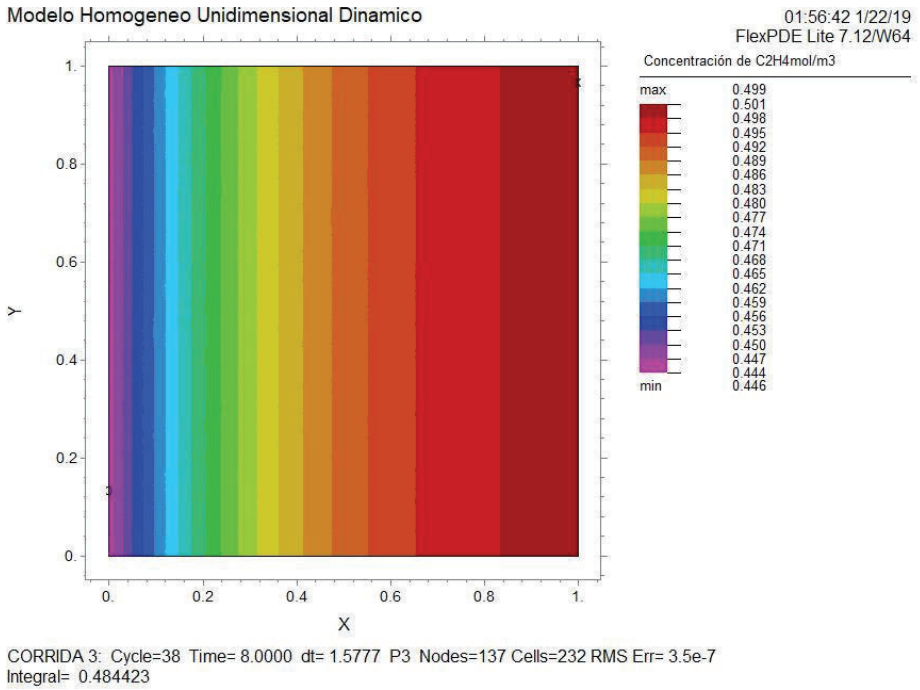


Figura AIV.4.21. Resultados 3 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

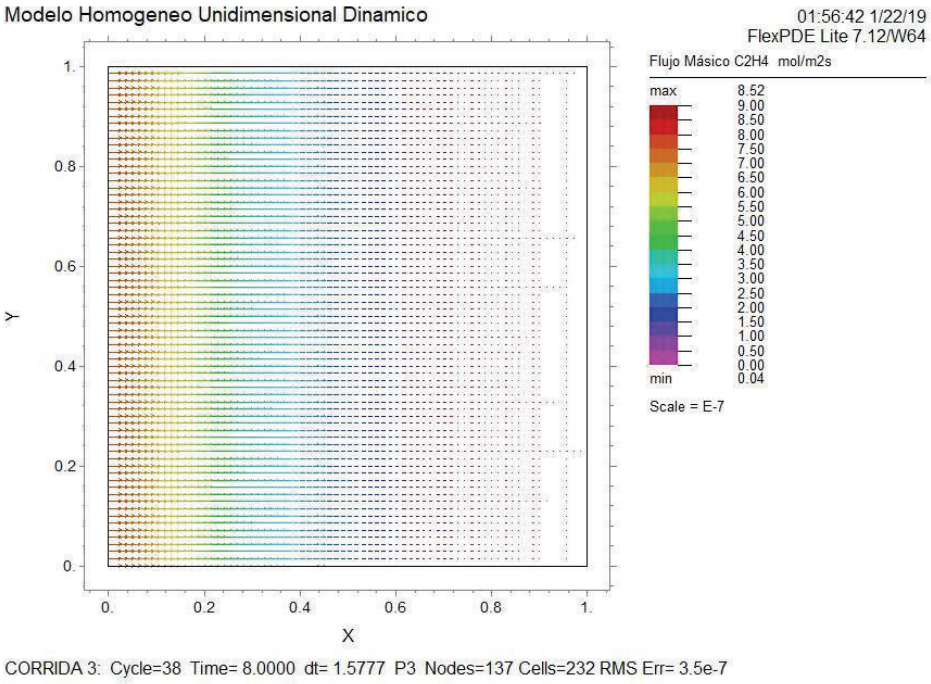


Figura AIV.4.22. Resultados 4 para el C_2H_4.
(Fuente: Propia)

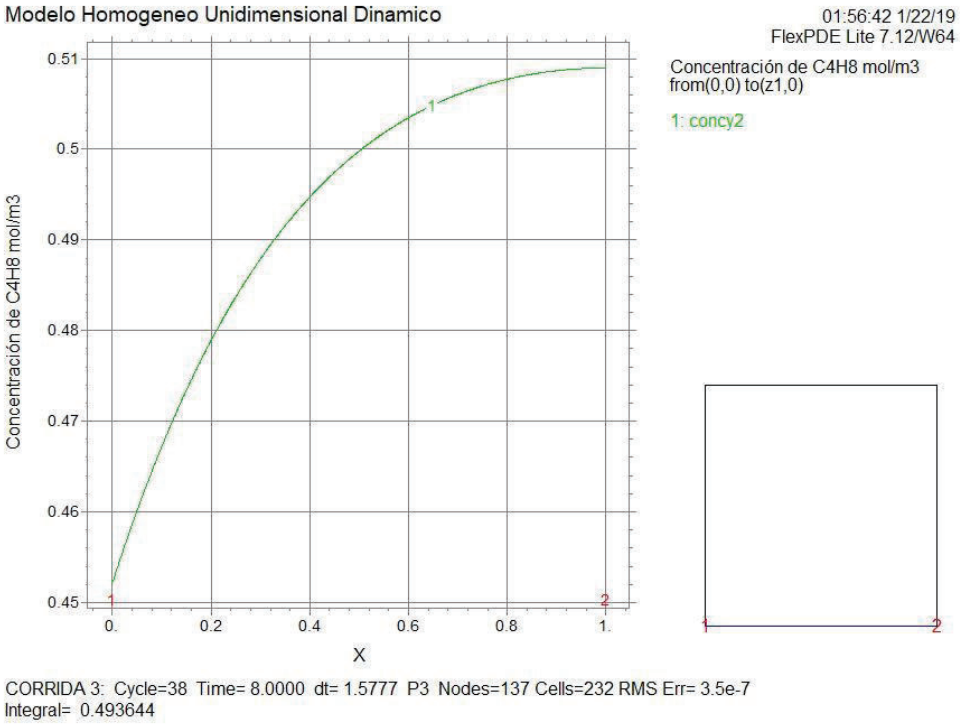


Figura AIV.4.23. Resultados 1 para el C_4H_8.
(Fuente: Propia)

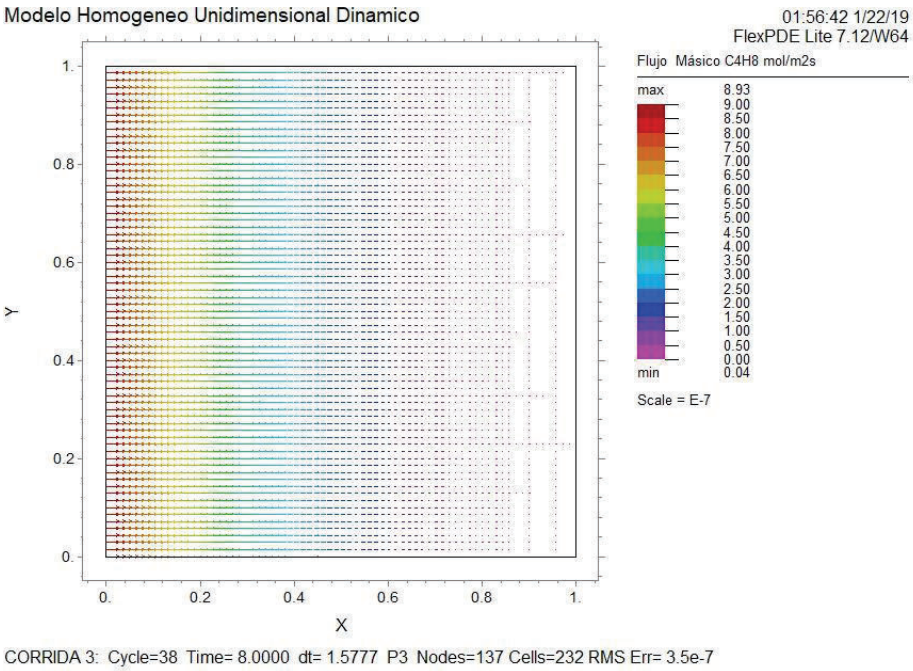


Figura AIV.4.24. Resultados 2 para el C_4H_8.
(Fuente: Propia)

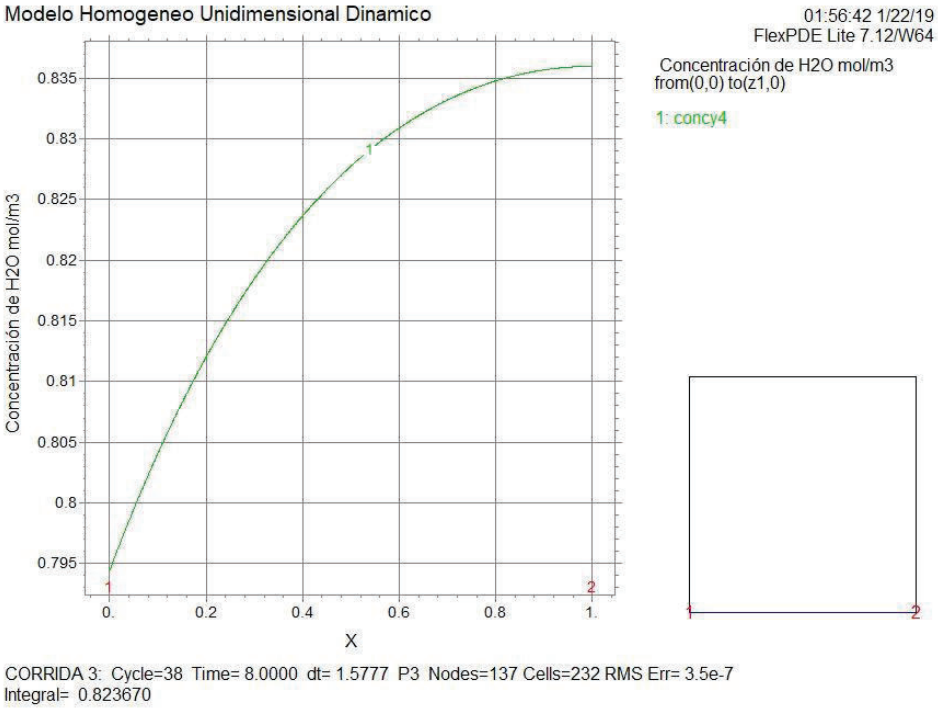


Figura AIV.4.25. Resultados 1 para el H_2O.
(Fuente: Propia)

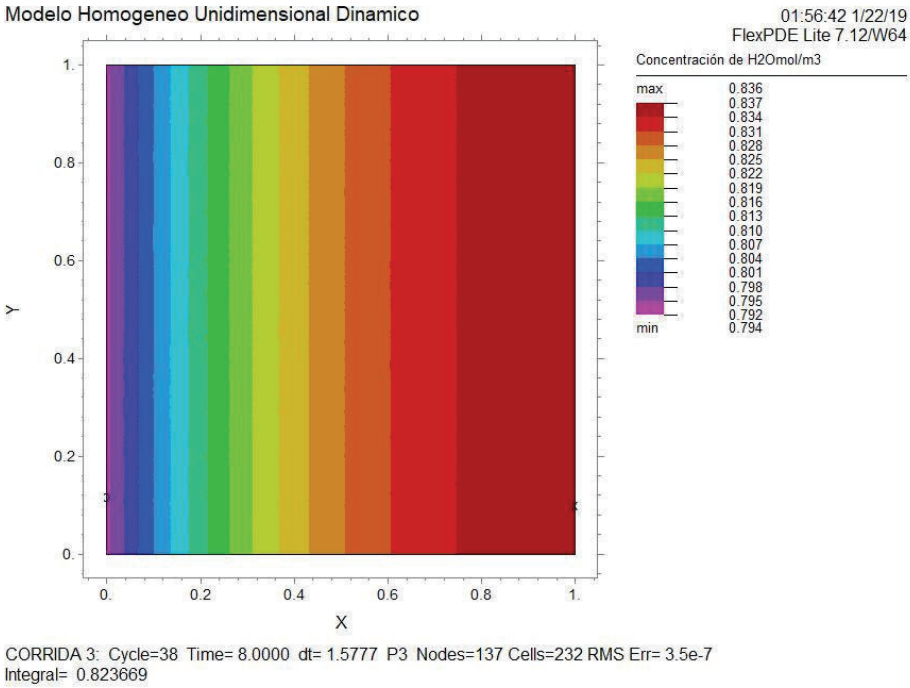


Figura AIV.4.26. Resultados 2 para el H_2O.
(Fuente: Propia)

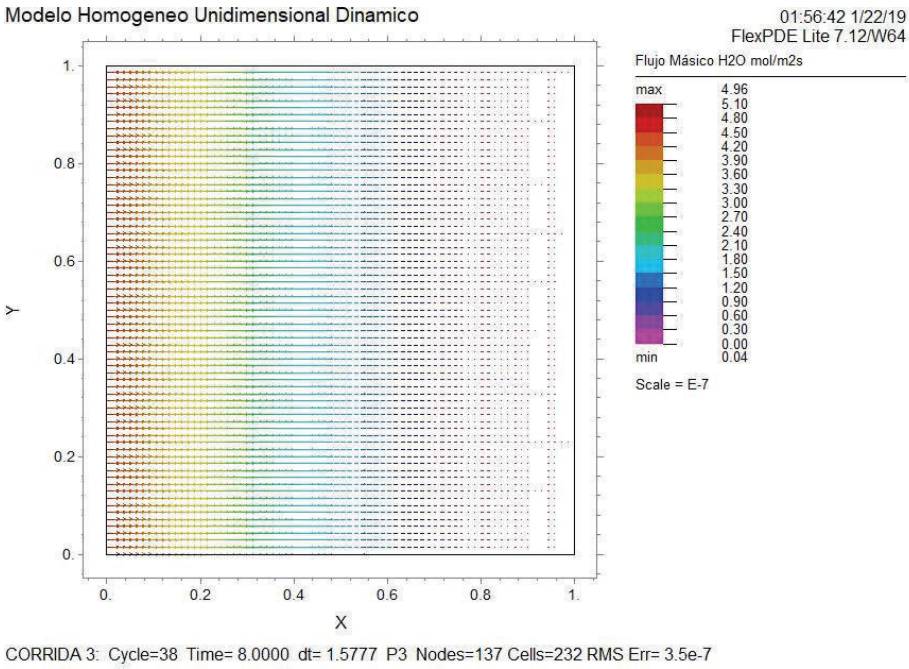


Figura AIV.4.27. Resultados 3 para el H_2O.
(Fuente: Propia)

Anexo V. Resultados de los análisis químicos realizados a las muestras obtenidas experimentalmente

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL LACBAL	Revisión:	00
	Fecha:	03-Sep-2018
	Página:	1 de 2
INFORME DE ANÁLISIS DE RESULTADOS	FPT0401-00	

I-LACBAL-2019-007

INFORMACIÓN CLIENTE:	NOMBRE/EMPRESA	ANDRÉS PROAÑO (TESIS MAESTRIA MECÁNICA)
	DIRECCIÓN	PLAZA Y CARRIÓN, LA MARISCAL
	NÚMERO DE MUESTRAS	2

INFORMACIÓN GENERAL:

RESPONSABLE DEL INFORME		ING. TANIA PARRA	ORDEN DE TRABAJO	EPN	DQ-OT0006-2019
FECHA	RECEPCIÓN	18-01-2019		LACBAL	OT-LACBAL-2019-007
	INICIO DE ENSAYO	18-01-2019	PROFORMA	EPN	DQ-P0189-2019
	ENTREGA DE INFORME	24-01-2019		LACBAL	COT-LACBAL-2019-007

IDENTIFICACIÓN DE LA MUESTRA:

IDENTIFICACIÓN	CÓDIGO LABORATORIO	TIPO MUESTRA	TIPO ENVASE	CANTIDAD
GASOLINA EXTRA	M-LACBAL-2019-007-01	Gasolina Extra	Vidrio	0.76 L

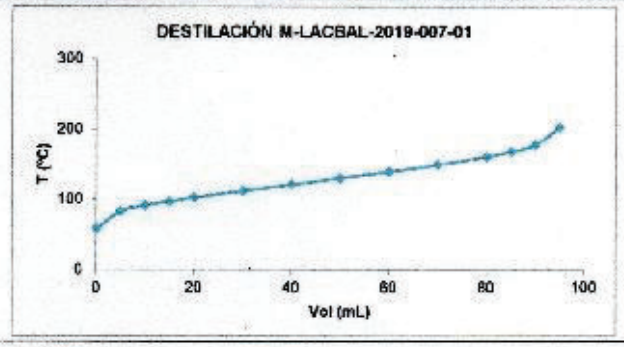
CONDICIONES AMBIENTALES:

TEMPERATURA [°C]	20.5	HUMEDAD RELATIVA [%]	45	PRESIÓN [kPa]	72.9

RESULTADOS OBTENIDOS:

MUESTRA	ENSAYO		NORMA MÉTODO	UNIDAD	NORMA REQUISITO[4]	VALOR OBTENIDO
M-LACBAL-2019-002-01	*Ensayo de destilación:	Temperatura del 10%	ASTM D86-15	°C	70 Máx.	92
		Temperatura del 50%		°C	77 a 121	131
		Temperatura del 90%		°C	190 Máx.	178
		Punto final		°C	220 Máx.	212
		Residuo		%	2.0 Máx.	1.0
	*Presión de vapor Reid		ASTM D323-15a	kPa	60 Máx.	21.4
	*Contenido de gomas		ASTM D381-12	mg/100mL	3.0 Máx.	111.13

INFORMACIÓN ADICIONAL:



ING. MERCEDES CUEVA
RESPONSABLE TÉCNICA LACBAL

LACBAL

NOTAS ACLARATORIAS

1. Los parámetros se encuentran dentro del Sistema de Gestión ISO 17025, pero no están acreditados.
2. Los resultados reportados corresponden únicamente a los ítems ensayados.
3. Queda prohibida la reproducción de forma parcial o total del presente informe sin autorización del Laboratorio LACBAL.
4. Cuando aplique, se realizan los ensayos en cumplimiento con los criterios de aceptación y rechazo de las muestras de objeto de ensayo previa aceptación del cliente.
5. El muestreo es responsabilidad del cliente, la Escuela Politécnica Nacional no responde por posibles variaciones ocasionadas por la toma de muestra.

Ladrón de Guevara E11-253-Edif. Eléctrica Química (Nº 17) - 5to piso
022976 300 Ext. 4329/4317/4336
lacbal@epn.edu.ec

FPG0102

Figura AV.1. Resultados de los análisis químicos realizados a la primera muestra obtenida experimentalmente.
(Fuente: Propia)

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL LACBAL INFORME DE ANÁLISIS DE RESULTADOS	Revisión: 00 Fecha: 03-Sep-2018 Página: 2 de 2 FPT0401-00

I-LACBAL-2019-007

INFORMACIÓN CLIENTE:	NOMBRE/EMPRESA	ANDRÉS PROAÑO (TESIS MAESTRIA MECÁNICA)
	DIRECCIÓN	PLAZA Y CARRIÓN, LA MARISCAL
	NÚMERO DE MUESTRAS	2

INFORMACIÓN GENERAL:

RESPONSABLE DEL INFORME		ING. TANIA PARRA	ORDEN DE TRABAJO	EPN	DQ-OT0006-2019
FECHA	RECEPCIÓN	18-01-2019		LACBAL	OT-LACBAL-2019-007
	INICIO DE ENSAYO	18-01-2019	PROFORMA	EPN	DQ-P0189-2019
	ENTREGA DE INFORME	24-01-2019		LACBAL	COT-LACBAL-2019-007

IDENTIFICACIÓN DE LA MUESTRA:

IDENTIFICACIÓN	CÓDIGO LABORATORIO	TIPO MUESTRA	TIPO ENVASE	CANTIDAD
GASOLINA EXTRA	M-LACBAL-2019-C07-02	Gasolina Extra	Vidrio	0.72 L

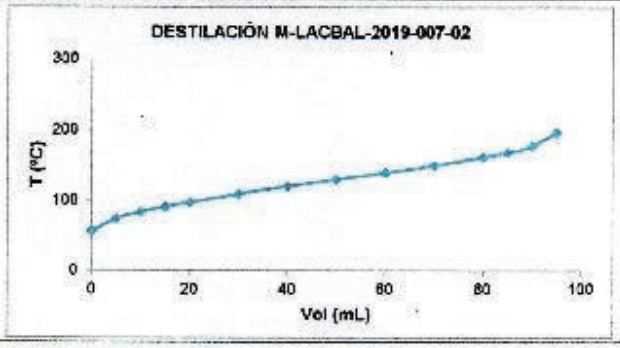
CONDICIONES AMBIENTALES:

TEMPERATURA [°C]	20.5	HUMEDAD RELATIVA [%]	45	PRESIÓN [kPa]	72.9

RESULTADOS OBTENIDOS:

MUESTRA	ENSAYO		NORMA MÉTODO	UNIDAD	NORMA REQUISITO*	VALOR OBTENIDO
M-LACBAL-2019-002-02	*Ensayo de destilación:	Temperatura del 10%	ASTM D86-15	°C	70 Máx.	84
		Temperatura del 50%		°C	77 a 121	130
		Temperatura del 90%		°C	190 Máx.	177
		Punto final		°C	220 Máx.	220
		Residuo		%	2.0 Máx..	1.0
	*Presión de vapor Reid		ASTM D323-15a	kPa	60 Máx.	26.9
	*Contenido de gomas		ASTM D381-12	mg/100mL	3.0 Máx.	32.7

INFORMACIÓN ADICIONAL:



ING. MERCEDES CUEVA
RESPONSABLE TÉCNICA LACBAL

LACBAL

NOTAS ACLARATORIAS

1. Los parámetros se encuentran dentro del Sistema de Gestión ISO 17025, pero no están acreditados.
2. Los resultados reportados corresponden únicamente a los ítems ensayados.
3. Queda prohibida la reproducción de forma parcial o total del presente informe sin la autorización del Laboratorio LACBAL.
4. Cuando aplique, se realizan los ensayos sin cumplir con los criterios de aceptación y rechazo de las muestras de objeto de ensayo previa aceptación del cliente.
5. El muestreo es responsabilidad del cliente, la Escuela Politécnica Nacional no responde por posibles variaciones relacionadas por la toma de muestra.

Ladrón de Guevara E11-253 Edif. Eléctrica Química (M 17) - 5to piso
022976-300 Ext. 4323/4317/4316
lacbal@epn.edu.ec

FPG0102

Figura AV.2. Resultados de los análisis químicos realizados a la primera muestra obtenida experimentalmente.
(Fuente: Propia)