

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE CIENCIAS ADMINISTRATIVAS

DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN PARA EL MEJORAMIENTO ENERGÉTICO DE UN REACTOR DE LECHO EMPACADO ESCALA LABORATORIO PARA LA TRANSFORMACIÓN DE ALCOHOL Y CETONAS A GASOLINA

Diseño y optimización para el mejoramiento energético de un reactor de lecho empacado ubicado en el Laboratorio de Termodinámica de la Facultad de Ingeniería Química y Agroindustria de la Escuela Politécnica Nacional para la transformación de alcohol y cetonas.

**TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR PRESENTADO COMO REQUISITO
PARA LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE INGENIERO DE LA PRODUCCIÓN**

DANIEL FRANCISCO ECHEVERRÍA TAPIA

daniel.echeverria@epn.edu.ec

DIRECTOR: ING. SEBASTIAN ANÍBAL TACO VASQUEZ, PhD

sebastian.taco@epn.edu.ec

DMQ, febrero 2023

CERTIFICACIONES

Yo, DANIEL FRANCISCO ECHEVERRÍA TAPIA declaro que el trabajo de integración curricular 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.



DANIEL FRANCISCO ECHEVERRÍA

Certifico que el presente trabajo de integración curricular fue desarrollado por DANIEL FRANCISCO ECHEVERRÍA TAPIA, bajo mi supervisión.



ING. SEBASTIAN ANÍBAL TACO VASQUEZ, PhD
DIRECTOR

DECLARACIÓN DE AUTORÍA

A través de la presente declaración, afirmamos que el trabajo de integración curricular aquí descrito, así como el (los) producto(s) resultante(s) del mismo, son públicos y estarán a disposición de la comunidad a través del repositorio institucional de la Escuela Politécnica Nacional; sin embargo, la titularidad de los derechos patrimoniales nos corresponde a los autores que hemos contribuido en el desarrollo del presente trabajo; observando para el efecto las disposiciones establecidas por el órgano competente en propiedad intelectual, la normativa interna y demás normas.



DANIEL FRANCISCO ECHEVERRÍA TAPIA



ING. SEBASTIAN ANÍBAL TACO VASQUEZ, PhD

DEDICATORIA

La vida ha sido una completa lucha para mí, con la que he llegado satisfactoriamente a este punto importantísimo de mi vida, durante este transcurso me di cuenta para lo que soy bueno y malo, pero sobre todo forjé mi carácter día a día. Existieron momentos con muchas dificultades, de los cuales los pude superar gracias a la ayuda idónea de muchas personas.

Mi trabajo se lo dedico a Dios por la salud y fortaleza que me ha dado para poder terminar con éxito esta larga etapa de mi vida.

También se la dedico a mis padres Barbie y Jorge, hermanos, tíos, amigos quienes hicieron que el transcurso de la vida sea más alegre. Además, a mis abuelitas que supieron ayudarme y consentirme incondicionalmente.

De igual manera a mi amigo Sebas, quién ha sido el pilar fundamental de mi éxito.

Y quisiera dedicárselo a mis acompañantes fieles de mi vida Sarita, Shaggy, Zarigüeyo, Pancho, Tonny y Dulce María, gracias a ellos nunca estuvo fría la cama.

AGRADECIMIENTO

Agradezco a mi tutor Ing. Sebastián Aníbal Taco Vásquez, PhD por la empatía y gratitud que tiene con el prójimo y además por ser mi motivación académica y personal.

Mi agradecimiento infinito a la ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL, quien me brindo oportunidades valiosas, pero sobre todo de convertirme en un profesional. Agradezco a mis docentes por sus conocimientos impartidos y al personal administrativo de la FCA por su valioso e incondicional apoyo.

ÍNDICE DE CONTENIDO

INTRODUCCION

CERTIFICACIONES	I
DECLARACIÓN DE AUTORÍA	II
DEDICATORIA	III
AGRADECIMIENTO	IV
ÍNDICE DE FIGURAS	VIII
ÍNDICE DE TABLAS	X
RESUMEN.....	XI
ABSTRACT.....	XII
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Objetivo general.....	2
1.2 Objetivos específicos	2
1.3 Alcance.....	2
1.4 Marco teórico	3
1.4.1. Combustibles Alternativos.....	3
1.4.2. Reglamento y proyectos sobre el uso de biocombustibles en el Ecuador.....	4
1.4.3. Producción del Etanol	5
1.5 Etanol	5
1.6 Cetonas	7
1.7 Deshidratación.....	7
1.8 Oligomerización de alcoholes y cetonas	8
1.9 Cracking catalítico de los biocombustibles	8
1.10 Catalizador utilizado zeolita HZSM-5.....	9
1.11 Diseño del modelo dinámico en reactores de lecho empacado de tubos y coraza	11
1.12 Transferencia de masa y calor de partículas	13
1.13 Expresiones cinéticas.....	14
1.14 Dispersión de masa axial y radial (que coordenadas va a tomar).....	15
1.14.1 Coordenadas cilíndricas.....	15
1.15 Métodos de elementos finitos	15
1.16 Ecuaciones diferenciales y derivadas parciales EDPs.....	16
1.17 Condiciones de borde.....	17
1.18 Métodos de numéricos de solución	18
1.19 Software FlexPDE	21
METODOLOGÍA	27

2.1	Exposición del problema	27
2.1.1	Tipo de investigación	27
2.1.2	Diseño de la investigación.....	28
2.1.3	Determinación de población y muestra	28
2.1.4	Técnicas e instrumentos de investigación	28
2.1.5	Observación Directa.....	29
2.2.	Experimento.....	29
2.2.1.	Experimentación para la Obtención de hidrocarburos.....	29
2.3	Simulación	32
2.3.1	Definición del modelo	32
2.3.2	Parámetros de diseño	34
2.3.3	Parámetros dispersión de masa.....	36
2.3.4	Parámetros de temperatura de operación y velocidad espacial (WHSV).....	36
2.4	Rendimiento y conversión de la reacción.....	37
2.4.1	Análisis y recolección de datos	37
2.5	Instrumentos	37
2.5.1	Reactor de lecho empacado	37
2.5.2	FlexPDE.....	37
2.5.3	Registros de Observación	38
2.6	Herramientas	38
2.6.1	Computadora.....	38
2.6.2	Software Flex PDE.....	38
2.6.3	Controladores de Temperatura	39
2.6.4	Cronómetro.....	39
2.6.5	Calculadora	39
2.6.6	Cámara Fotográfica	39
2.6.7	Termocupla.....	39
RESULTADOS.....		39
3.1.	Resultados.....	40
3.2.	Experimentación y Producción de biogasolina a partir de etanol y cetona a temperatura de 600 °K	42
3.3.	Análisis de resultados de la simulación en FlexPDE del modelo estacionario.....	45
3.4	Análisis de temperatura del reactor en la simulación del modelo estacionario del etanol y la acetona	46
3.5.	Análisis de concentraciones en la simulación del modelo estacionario del etanol y la acetona.....	47
3.6.	Análisis termoquímico en la simulación del modelo estacionario del etanol y la acetona	50

3.7. Experimentación y Producción de biogasolina a partir de etanol y acetona a menor temperatura (400°K).....	51
4. Conclusiones	53
5. Recomendaciones	54
6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	55
6.1. Bibliografía	¡Error! Marcador no definido.
7. ANEXOS.....	
7.1 Anexo I. Símbolos y abreviaturas.....	58
7.2 Anexo II. Cálculos del parámetro de diseño y números adimensionales	60
7.3 Anexo III. Resolución de ecuaciones y obtención de parámetros del diseño matemático.....	74
7.4 Anexo IV. Programación y Resolución en FlexPDE	79
7.5 Anexo V. Resultados de la cromatografía de la biogasolina de etanol y acetona..	86
7.6 Anexo VI. Muestras de biogasolina a partir de etanol y acetona	90

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.	Reactor de lecho empacado ubicado en el Laboratorio de termodinámica de la Escuela Politécnica Nacional.	3
Figura 2.	Productos y componentes obtenidos por biorrefinería.	4
Figura 3.	Flujo de procesos de la obtención del etanol.	5
Figura 4.	Formación de cetonas.	7
Figura 5.	Estructura fundamental de las zeolitas.....	10
Figura 6.	Esquema de un reactor de lecho fijo empacado multitubular.	11
Figura 7.	Descripción del reactor de lecho empacado.....	12
Figura 8.	Dirección radial para una reacción exotérmica considerando temperatura y concentración.....	13
Figura 9.	Dirección axial para una reacción exotérmica considerando temperatura y concentración.....	14
Figura 10.	Construcción de malla a partir de los nodos.	19
Figura 11.	Triangulación de regiones.....	21
Figura 12.	Pantalla inicial de FlexPDE.	22
Figura 13.	Comandos de FlexPDE.	23
Figura 14.	Menú File.....	23
Figura 15.	Menú Controls.	24
Figura 16.	Menú View.....	24
Figura 17.	Menú Stop.	24
Figura 18.	Menú Edit.	25
Figura 19.	Menú Help.	25
Figura 20.	Comandos de FlexPDE.	26
Figura 21.	Diagrama del Reactor de lecho empacado escala laboratorio para la producción de biogasolina a partir de etanol y acetona.....	30
Figura 22.	Esquema general del análisis de la producción de biogasolina.....	31
Figura 23.	Diagrama del reactor de Lecho Empacado Ubicado en el Laboratorio de Termodinámica de la Facultad de Química y Agroindustria de la Escuela Politécnica Nacional.	31
Figura 24.	Esquema del reactor de lecho empacado.	46
Figura 25.	Temperatura del etanol y la acetona en K.....	46
Figura 26.	Concentración molar de C ₇ H ₈ en las muestras del etanol y de acetona.....	47
Figura 27.	Concentración molar de C ₈ H ₁₀ en las muestras del etanol y de acetona.....	48
Figura 28.	Concentración molar de C ₉ H ₁₂ en la muestra del etanol y acetona.	49
Figura 29.	Concentración molar de C ₉ H ₁₂ en la muestra del etanol y acetona.	50

Figura 30.	Cromatograma del etanol.....	86
Figura 31.	Resultado del espectrómetro de masa de la muestra del etanol.	87
Figura 32.	Cromatograma de la acetona.....	88
Figura 33.	Resultado del espectrómetro de masa de la muestra de acetona.....	89
Figura 34.	Muestra de biogasolina a partir de etanol	90
Figura 35.	Muestra de biogasolina a partir de a cetona	90

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Propiedades Químicas y Físicas del Etanol (Abascal, 2017).....	6
Tabla 2. Propiedades Termodinámicas del Etanol a 25°C y 1 Bar (Kyle, 1984).	6
Tabla 3. Propiedades físicas y químicas de la cetona (Wade, 2011).....	7
Tabla 4. Propiedades de los catalizadores homogéneos y heterogéneos.	9
Tabla 5. Propiedades físicas y químicas de la Zeolita H _{zsm} -5 (80).....	10
Tabla 6. Elementos uni-, bi- y tridimensionales.	16
Tabla 7. Tipos de condiciones de contorno.	17
Tabla 8. Comandos de ingreso de FlexPDE.	25
Tabla 9. Compendio de técnicas e instrumentos utilizados.	38
Tabla 10. Parámetros del Catalizador y del Reactor de lecho empacado.....	40
Tabla 11. Parámetros de los fluidos (etanol y cetona).....	40
Tabla 12. Números adimensionales.	41
Tabla 13. Parámetros de la transferencia en el reactor de lecho empacado de masa y calor.	41
Tabla 14. Compuestos obtenidos en la experimentación con etanol.	43
Tabla 15. Compuestos obtenidos en la experimentación con cetona.	43
Tabla 16. Datos experimentales para calcular el rendimiento del etanol.	44
Tabla 17. Datos experimentales para calcular el rendimiento de la cetona.	44

RESUMEN

La producción de biocombustibles en el Ecuador es un hecho, se realiza a partir de reactivos como el etanol y la acetona que provienen de la biomasa con el propósito de reducir el calentamiento global generado por la quema de combustibles fósiles. La presente investigación, tiene como objetivo el mejoramiento energético de un reactor de lecho empacado ubicado en el Laboratorio de Termodinámica de la Facultad de Ingeniería Química y Agroindustria de la Escuela Politécnica Nacional para la obtención de biogasolina. Con esta finalidad, hemos utilizado un diseño metodológico experimental (obtención de muestras de biogasolina) y simulativo (resolución de ecuaciones diferenciales a través de FlexPDE) a muestras de etanol y acetona, con el propósito de evaluar la temperatura ideal de producción. Se optimizó a partir de los datos establecidos por parte del investigador y se construyó las ecuaciones diferenciales con datos normalizados. A través de una serie de simulaciones con una temperatura de 523 K se determinó los parámetros para la parte experimental, obteniéndose resultados favorables en ambas muestras. La biogasolina a partir de etanol presentó un rendimiento de 16.22%, mientras que la muestra de acetona presentó un rendimiento de 64%. Se realizaron análisis cromatográficos de las muestras con resultados favorables confirmándose la presencia de cadenas de hidrocarburos en el producto.

PALABRAS CLAVE: temperatura, reactor de lecho empacado, biogasolina, simulación, calentamiento global

ABSTRACT

The production of biofuels in Ecuador is a fact, it is made from reagents such as ethanol and acetone that come from biomass with the purpose of reducing global warming generated by the burning of fossil fuels. The objective of this research is the energy improvement of a packed bed reactor located in the Thermodynamics Laboratory of the Faculty of Chemical Engineering and Agroindustry of the National Polytechnic School to obtain biogasoline. To this end, we have used an experimental (obtaining biogasoline samples) and simulation (solving differential equations through FlexPDE) methodological design for ethanol and acetone samples, with the purpose of evaluating the ideal production temperature. It was optimized from the data established by the researcher and the differential equations were built with normalized data. Through a series of simulations with a temperature of 523 K, the parameters for the experimental part were determined, obtaining favorable results in both samples. The biogasoline from ethanol presented a yield of 16.22%, while the acetone sample presented a yield of 64%. Chromatographic analyzes of the samples were carried out with favorable results, confirming the presence of hydrocarbon chains.

KEYWORDS: temperature, packed-bed reactor, biogasoline, simulation, global warming.

1. INTRODUCCIÓN

Los biocombustibles surgen como una alternativa ecológica a los combustibles convencionales derivados del petróleo. Es así como los biocombustibles son fuentes de energía amigables con el medio ambiente ya que surgen de la biomasa vegetal como son: caña de azúcar, maíz, etc. Las energías renovables (biocombustibles) han sido los primeros pasos para pensar en una independencia energética y reducir significativamente el calentamiento global (Taco Vásquez, 2013).

Además, las emisiones contaminantes representan un grave problema ambiental, ya que los combustibles de origen fósil representan más del 90 % de la energía que se utiliza a nivel mundial y contaminan aire, suelo y agua. Debido a esto es necesario migrar a nuevas alternativas de energía donde la materia prima sea renovable (Barrera, 2015).

Según, (Cruel Preciado & Vernaza Arroyo, 2022) el uso de biocombustibles en el Ecuador es a partir del año 2007, es así como fue impulsado por la constitución ecuatoriana (2008), *“El estado promoverá la eficiencia energética, el desarrollo y uso de prácticas y tecnologías ambientalmente limpias y sanas, así como de energías, diversificadas, de bajo impacto y que no pongan en riesgo la soberanía alimentaria, el equilibrio ecológico de los ecosistemas ni el derecho al agua” (art.413)*. Sin embargo, el uso de biocombustibles en el país es muy limitado entre algunas de las razones están porque la extracción de petróleo genera más ingresos económicos al país ocasionando mayores afectaciones al medioambiente y zonas intangibles naturales.

Existe varios métodos sobre la producción de los hidrocarburos, sin embargo, en esta investigación se ha seleccionado el reactor de lecho empacado también conocido como reactor tubular empacado, es un modelo de proceso continuo. Existen algunos modos de funcionamiento como es: isotérmica, adiabático, calor especificado, temperatura especificada (Noorman, 2007). El presente componente de este proyecto es mejorar la eficiencia energética en la transformación de alcoholes (etanol) y cetonas (acetona) usando un reactor de lecho empacado a gasolina con catalizador a base de zeolitas. Este proceso es de oligomerización y es el último paso de la transformación de la biomasa a los hidrocarburos.

El Laboratorio de Termodinámica del Departamento de Ingeniería Química de la Escuela Politécnica Nacional ha explorado la producción de biocombustibles mediante el proyecto PIMI-16-07. En este proyecto se espera optimizar la eficiencia energética para que la cama del catalizador tenga una temperatura constante usando la termoquímica de la reacción y los controladores de temperatura que gobierna las resistencias que calientan el reactor.

Este análisis servirá para la construcción de un nuevo reactor escala laboratorio. Se realizará un análisis de calor de reacción generado y la cantidad de calor que necesite entregar a los tres controladores de temperatura a lo largo de la cama de reacción con la utilización de ecuaciones diferenciales parciales.

1.1 Objetivo general

Mejorar la eficiencia energética en la transformación de alcoholes (etanol) y cetonas (acetona) usando un reactor de lecho empacado a gasolina usando zeolitas, a través de la construcción de ecuaciones diferenciales parciales.

1.2 Objetivos específicos

1. Identificar las variables producidas en el reactor que no permiten alcanzar la temperatura exacta.
2. Analizar el calor de reacción generado y la cantidad de calor que se necesitan entregar a los tres controladores de temperatura a lo largo de la cama de reacción.
3. Proponer un diseño de mejora del proceso de transformación.

1.3 Alcance

El alcance de este proyecto es encontrar el calor emitido a lo largo de la cama de catalizador para que los tres controladores de temperatura a lo largo del reactor hagan que el perfil de temperatura sea constante. Una temperatura constante sirve para el diseño del reactor a construir ya que define el tipo de gasolina que produce. Se utilizará constantes de equilibrio de reacción, termodinámica, ecuaciones diferenciales parciales para el análisis térmico y resolución con diferencias finitas. Este proyecto tendrá parte experimental, pero es un diseño previo para la construcción y dimensionamiento de los elementos para la construcción del reactor de lecho empacado escala laboratorio.



Figura 1. Reactor de lecho empacado ubicado en el Laboratorio de termodinámica de la Escuela Politécnica Nacional.

(Fuente: Laboratorio de Termodinámica de la Facultad de Ingeniería Química de la Escuela Politécnica Nacional).

1.4 Marco teórico

1.4.1. Combustibles Alternativos

Los combustibles convencionales que se producen a partir de recursos naturales no renovables como son las fuentes fósiles que emanan grandes cantidades de CO_2 a la atmosfera, siendo uno de los principales causantes del calentamiento global, se ha investigado nuevas fuentes de energía renovables cómo lo es la biomasa, representando un recurso inagotable ya que es un proceso continuo en el planeta. A partir de la biomasa se pueden producir algunos combustibles alternativos como pueden ser el bioetanol, biodiesel, biogás (Hackenberg, 2008).

A continuación, en la figura 2 podemos observar los productos y componentes de la biomasa.

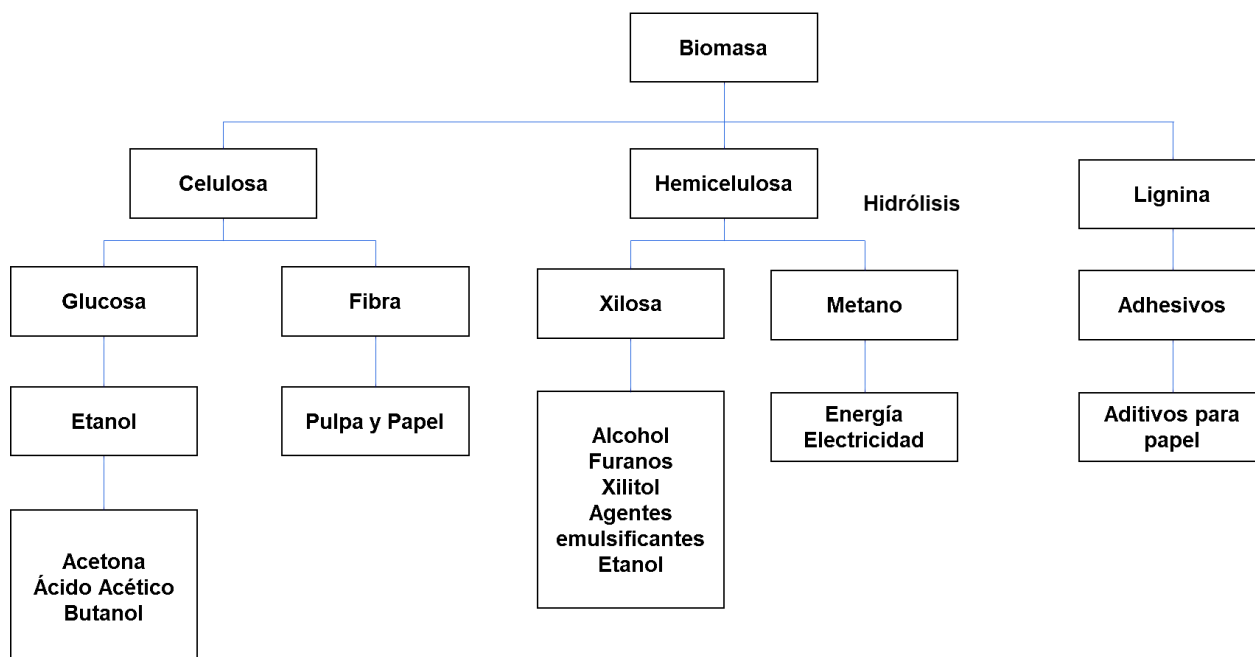


Figura 2. Productos y componentes obtenidos por biorrefinería.

(Fuente: Propia)

1.4.2. Reglamento y proyectos sobre el uso de biocombustibles en el Ecuador

Los biocombustibles en el Ecuador han ingresado como interés nacional en el 2008, considerando los derechos del buen vivir establecidos en la constitución del año 2008. Por esta razón el estado se compromete a promover energías limpias sin poner en riesgo la seguridad alimentaria y el derecho al agua de la nación (Constitución del Ecuador, 2008).

En el Ecuador se inició la producción de etanol carburante (eco país) a gran escala en el 2010, su composición es de 5% etanol (C_2H_5OH) y 95% de gasolina convencional con esto se trató de minimizar la importación de naftas para aumentar el octanaje.

En la actualidad los mayores productores de etanol en el Ecuador son las grandes azucareras cómo Ingenio Valdez y San Carlos sin embargo estas no pudieron vender al estado ecuatoriano ya que se encontraban inmersos en paraísos fiscales. Otras destilerías que se encuentran en el mercado es Producargo, Ingenio estatal Ecudos de la troncal, Sonino y la empresa Hidalgo & Hidalgo (Barriga, 2012).

1.4.3. Producción del Etanol

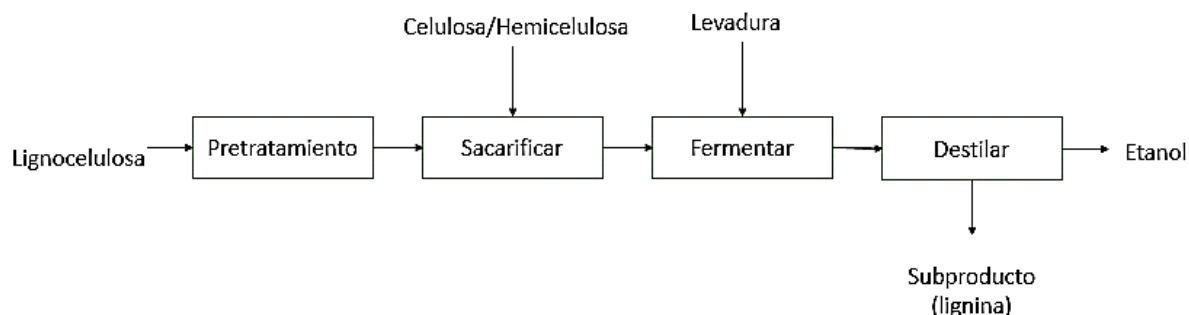


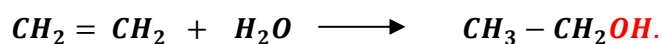
Figura 3. Flujo de procesos de la obtención del etanol.

(Fuente: Propia)

También conocido como alcohol etílico su producción depende la materia prima, en el caso de las sacarioideas tiene un tratamiento de dilución y las amiláceas (frutas) son hidrolizadas antes de que las levaduras actúen sobre estos azúcares. A continuación, se forma el jarabe de azúcares llamado melaza, posteriormente se mezcla con una levadura (*saccharomyces*) iniciadora del proceso de fermentación generando desprendimiento de CO_2 , finalmente se destila por una columna apropiada para separar el alcohol de otros elementos volátiles. En la figura 3 se muestra el flujo de procesos para la obtención del etanol (Peña & Arango, 2009).

1.5 Etanol

El etanol pertenece a la familia de los alcoholes caracterizándose por su grupo funcional $-\text{OH}$, en condiciones normales de presión y temperatura mantiene un punto de ebullición de $78\text{ }^\circ\text{C}$ y además es un líquido incoloro, se le considera un alcohol primario ya que su grupo hidroxilo está unido a un átomo de carbono primario como se muestra en la Ecuación 1. La mayor parte del etanol se forma a partir de la reacción del etileno con agua.



Ecuación 1. Reacción del etileno

En la Tabla 1 y 2 se ha realizado un compendio de las propiedades tanto químicas como físicas del etanol.

Tabla 1. Propiedades Químicas y Físicas del Etanol (Abascal, 2017).

Apariencia	Líquido Incoloro
Peso Molecular	46.07 g/mol
Punto de ebullición	78°C
Temperatura crítica	241 °C
Presión crítica	63 atm
Punto de inflamación	27°C
Solubilidad	Soluble en todas las proporciones

Tabla 2. Propiedades Termodinámicas del Etanol a 25°C y 1 Bar (Kyle, 1984).

$\frac{\Delta_f H_{298}^\circ}{kJ mol^{-1}}$	-277,69
$\frac{\Delta_f G_{298}^\circ}{kJ mol^{-1}}$	-174,78
$\frac{S_{m,298}^\circ}{J mol^{-1} K^{-1}}$	160,7
$\frac{C_{p,m,298}^\circ}{J mol^{-1} K^{-1}}$	111,46

En la antigüedad el etanol era el combustible más utilizado para la industria automovilística, con el origen de la industria petrolífera esto se vio afectado reduciendo el uso de etanol en los automotores. Sin embargo, con los problemas ligados al consumo y producción del petróleo nuevamente se ha tomado en cuenta para producir energía verde. En la actualidad el etanol es producido principalmente por la fermentación de los azúcares que se encuentran presentes en el jugo de la caña de azúcar, obteniéndose alcohol hidratado. Para obtener combustible a partir del etanol (alcohol hidratado) es necesario que se aplique un proceso de deshidratación (Abascal, 2017).

En el etanol su composición química ya incluye oxígeno, lo que favorece una mejor combustión. En muchas ocasiones se utiliza como oxigenante de gasolinas, con lo que se reducen emisiones de hidrocarburos sin quemar y de monóxido de carbono. Existen tres mezclas comunes las cuales son codificadas como E5, E10 y E85, con contenidos de etanol del 5%, 10% y 85%, respectivamente (Abascal, 2017).

1.6 Cetonas

Las cetonas se producen de la deshidratación de alcoholes secundarios como se muestra en la Figura 4. A partir de esta formación al igual que otros compuestos orgánicos existen agrupaciones de átomos que por lo general son C, H, O se les denomina grupos funcionales (Wade, 2011).

En las cetonas el grupo carbonilo se encuentra unido a dos radicales, estos pueden ser iguales o diferentes. Su fórmula por lo general es R-CO-R*, dónde los grupos R y R* pueden ser del grupo aromático o alifático (Wade, 2011). En la Figura 4 se puede observar su grupo funcional.

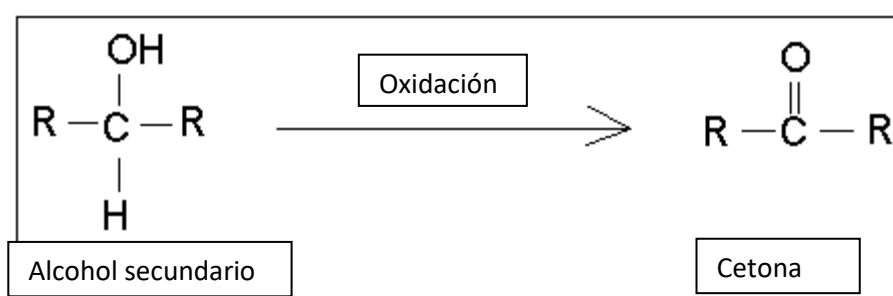


Figura 4. Formación de cetonas.

(Fuente: Propia)

En la Tabla 3 se ha realizado un compendio de las propiedades tanto químicas como físicas.

Tabla 3. Propiedades físicas y químicas de la cetona.

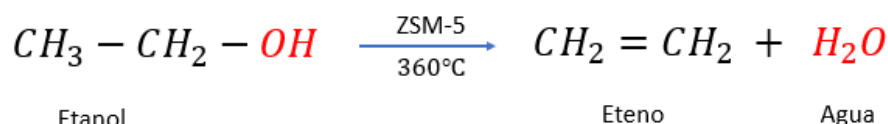
Apariencia	Líquido/ Sólido
Olor	De cadenas pequeñas olor agradable, mediana olor fuerte, grandes son inodoras
Punto de ebullición	Es mayor que el de los alcanos de igual peso molecular, pero menor que el de alcoholes y ácidos carboxílicos
Oxidación	En reacciones energéticas
Solubilidad	Soluble en solventes orgánicos

1.7 Deshidratación

El proceso de deshidratación de alcoholes tiene como objetivo la transformación de alcohol (etanol) a alquenos. Para este proceso de eliminación se utiliza un ácido mineral como pueden ser los catalizadores sólidos: zeolitas X, Y, HZSM-5, con el objetivo de extraer el grupo hidroxilo (OH), existe gran literatura describiendo las características de las zeolitas

mencionadas. Las investigaciones se enfocaron en la utilización de zeolita HZSM-5 cuya característica es de poro medio y con un tamaño de 0.54 nm (Ávila, 2010).

El etanol es un alcohol primario el cual reacciona con el catalizador en fase gaseosa para obtener alquenos, no obstante, las condiciones necesarias que se requiere son temperaturas elevadas y se pueden efectuar en lechos fijos de flujo continuo, en la Ecuación 2 se puede observar cómo se elimina el grupo hidroxilo (OH), produciendo el doble enlace y generando agua.



Ecuación 2. Reacción de deshidratación del etanol

Nota: Se muestra la reacción de deshidratación en presencia de la zeolita HZSM-5 a una temperatura de 360°C. Tomado de *Métodos sintéticos de obtención de los alquenos*. Disponible en: <https://www.fullquimica.com/2012/09/metodos-sinteticos-de-obtencion-de-los.html>.

1.8 Oligomerización de alcoholes y cetonas

Al hablar de oligomerización tenemos que definir lo que es un oligómero, el compendio de información lo define como una molécula constituida por pocas unidades (<20), por lo general se encuentran alineadas en una cadena lineal o un anillo cerrado. El proceso de oligomerización consiste en crear compuestos de mayor peso molecular, actualmente se utiliza para la fabricación de lubricantes, plásticos, detergentes y aditivos (Saavedra, 2019).

El mecanismo de oligomerización es generalmente la reacción que inicia con la unión de dos monómeros para formar una cadena corta llamada dímero, a partir de esta se producirá compuestos ligeros. Es importante mencionar que la oligomerización es activada por el catalizador específicamente por sus centros ácidos, la estructura y ramificación de los productos dependerá de la porosidad de el catalizador (Orbezua, 2017).

1.9 Cracking catalítico de los biocombustibles

El término craqueo significa “romper”, en la antigüedad se daba los procesos de craqueo térmico el compendio de información nos indica que se basaba en el proceso de destilación de combustibles pesados bajo presión, permitiendo que se rompan y se conviertan en moléculas más pequeñas, creando de esta manera producto de mejor valor (Kraus, 2000).

Con respecto a lo anterior, con el pasar de los años llegó la revolución del proceso de craqueo, se incorporó zeolitas como catalizador. En consecuencia, el craqueo catalítico presentó algunas ventajas por los centros ácidos de la zeolita como son: mayor estabilidad térmica frente a otros procesos, disminución de gas seco y coque, mayor conversión a gasolina y capacidad de procesado (Mengual, 2010).

Además, estos catalizadores de origen arcillosos permitieron trabajar en condiciones más críticas con el objetivo de aumentar la conversión y productividad del procesado. En la actualidad el proceso se puede llevar a cabo en un reactor de lecho fijo, las ventajas de producir la conversión en este tipo de reactor son: diseño simple al ser fijo, menor costo y fácil de manipular (Molina, 2015).

1.10 Catalizador utilizado zeolita HZSM-5

Los catalizadores por lo general son sólidos, tienen como objetivo aumentar la velocidad con la que se da la reacción química disminuyendo la energía de transición. Por otra parte, los catalizadores pueden ser homogéneos y heterogéneos, el compendio de la literatura menciona que los catalizadores homogéneos son por lo general compuestos químicos bien definidos que actúan con los reactivos y se encuentran dispersos en la reacción. Por el contrario, un proceso heterogéneo es aquello en el que los productos, reactivos y el catalizador se encuentran en distintas fases. En la Tabla 4 se muestra algunas propiedades catalíticas (Corma, 2011). En este proyecto se ha seleccionado como catalizador la zeolita HZSM-5 CBV 8014 en la Tabla 5 se indica sus características.

Tabla 4. Propiedades de los catalizadores homogéneos y heterogéneos.

Propiedades	Catalizador Homogéneo	Catalizador Heterogéneo
Estructura	Definida	Indefinida
Estabilidad térmica	Baja	Alta
Reciclaje de catalizadores	Innecesaria	Fácil
Condiciones de reacción	Suaves	Agresivas
Sitios Activos	Todos los átomos del metal	Sólo átomos superficiales

La zeolita es miembro de una nueva clase de catalizadores selectivos de forma, con estructuras de canal únicas que difieren de la conocida faujasita de poro grande y de las zeolitas de poro pequeño. En este caso la estructura primaria es un tetraedro formado principalmente por el tetraedro de silicio (SiO_4) y el tetraóxido de aluminio (AlO_4). La estructura de las zeolitas hidratadas está constituida principalmente por compuestos aluminosilicatos los cuales contienen elementos como son: aluminio, silicio, calcio, sodio y potasio (Santos, 2003).

De modo que el aluminio y el oxígeno se encuentran distribuidos en el centro y los extremos de los vértices respectivamente como se muestra en la Figura 5. También poseen propiedades catalíticas inusuales y tienen una alta estabilidad térmica, son aluminosilicatos naturales, que se utilizan a nivel de laboratorio y también industrial.

Es importante mencionar que los catalizadores de zeolita no son peligrosos a diferencia de otros catalizadores como por ejemplo el ácido fluorhídrico, por otra parte, son amigables con el medio ambiente ya que producen menos impurezas y tienen mayor eficiencia. En la Tabla 5 se indica propiedades física y químicas de la zeolita HZSM-5.

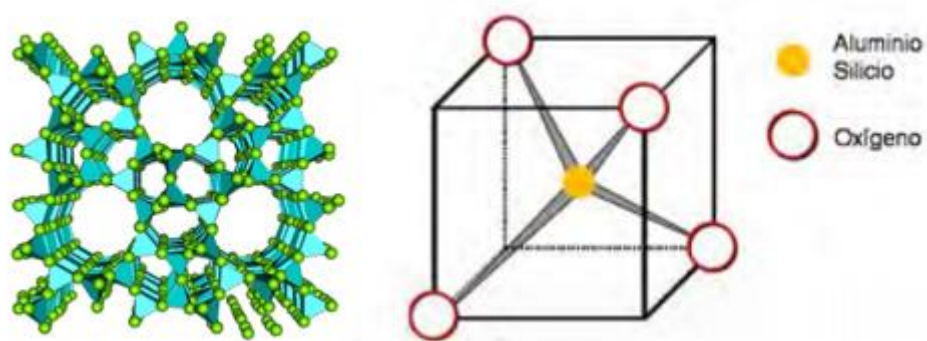


Figura 5. Estructura fundamental de las zeolitas.

(Fuente: Grau, 2016)

Nota: El gráfico representa la estructura cristalina de las zeolitas. Tomado de: *Preparación y caracterización de zeolitas jerarquizadas con estructura mfi y faujasita: análisis de diferentes métodos de incorporación de mesoporosidad en las mismas por Aida Grau, 2016, Universidad de Alicante.*

Tabla 5. Propiedades físicas y químicas de la Zeolita HZSM-5 (80).

Productos de Zeolita	CBV 8014
Apariencia	Polvo blanco
Olor	Inodoro
Punto de fusión	>1000 °C
Punto de ebullición	No aplica

$SiO_2 \cdot Al_2O_3$	80
Relación de lunares	Amonio
Na_2O Peso %	0.05
Superficie M ² /g	425
Densidad (g/ mL)	>1

1.11 Diseño del modelo dinámico en reactores de lecho empacado de tubos y coraza

El diseño del proceso consiste en la construcción de ecuaciones finitas para la oligomerización catalítica de etanol y cetonas. En la industria Química se utiliza ampliamente cuando existe una reacción catalítica de por medio. Los reactores de lecho empacado están constituidos por un tubo o más empacados, además se encuentra rodeado por una resistencia por medio de la cual realiza el calentamiento al reactor, y todo esto cubierto por material refractario. La descripción descrita en la Figura 6.

El sistema consta de una zona de precalentamiento, donde el etanol y la cetona adquiere la temperatura necesaria para convertirse en vapor, la zona de oligomerización se encuentra en el reactor de lecho empacado, y un condensador donde ingresan los productos generados en el reactor. En la Figura 7 se describe el proceso en un diagrama.

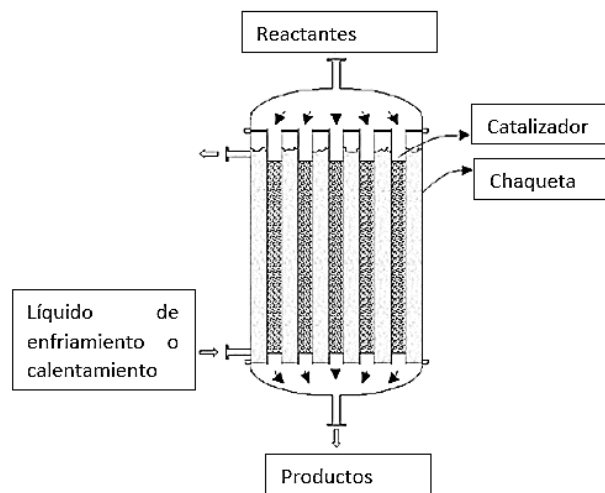


Figura 6. Esquema de un reactor de lecho fijo empacado multitubular.

(Fuente: Taco&Holtzapple,)

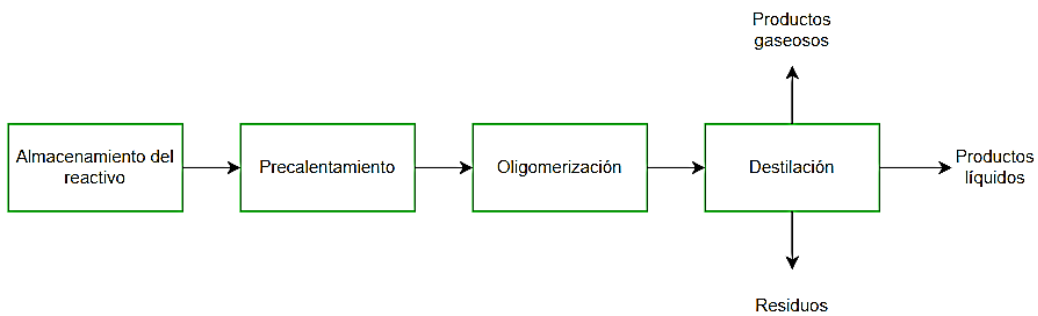


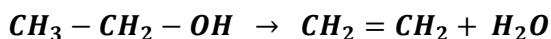
Figura 7. Descripción del reactor de lecho empacado.

(Fuente: Propia)

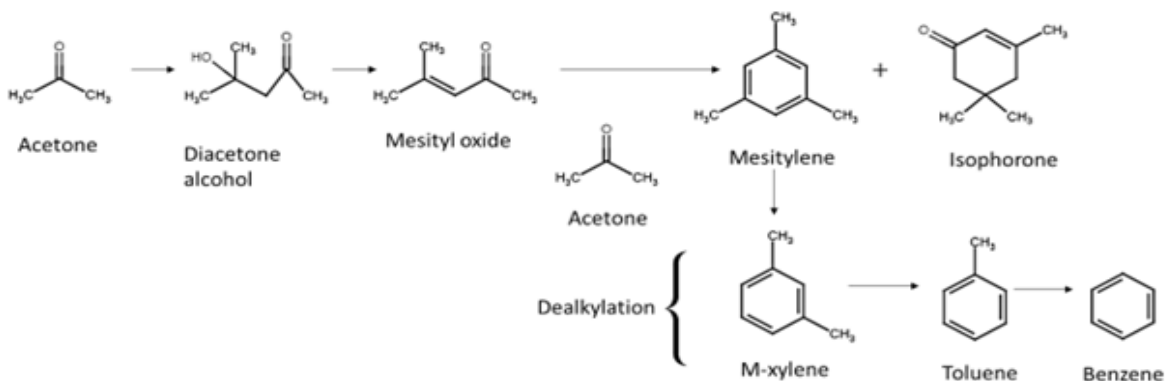
La oligomerización catalítica se efectúa en un reactor de lecho fijo empacado en el que se encuentra el catalizador. La reacción química consiste en las siguientes fases: líquido (etanol o cetona), sólido (catalizador zeolita HZSM-5) y finalmente los productos gaseosos que se originan por oligomerización.

El proceso consiste en hacer fluir el reactivo (etanol o cetonas) de forma ascendente en un precalentador, transversal en un conector y descendente en el reactor de lecho empacado, a través del catalizador en este caso zeolita HZSM-5 por ranuras que el fluido puede atravesar. Seguidamente los vapores oligomerizados son condensados y recolectados (Molina, 2015).

Para el diseño de las ecuaciones finitas se utilizó la cinética de trabajos anteriores. Las reacciones que se utilizaron son las siguientes:



Ecuación 3. Reacción del etanol



Ecuación 4. Reacción de la acetona

(Fuente: Taco,2022)

1.12 Transferencia de masa y calor de partículas

El reactor de lecho empacado multitubular está constituido por tubos, los mismos deberán comportarse de manera igual, es decir las condiciones de entrada, la temperatura en la pared y concentraciones son las mismas. Existe un inconveniente con este tipo de reactores y es que al momento que se da en su interior una alta reacción exotérmica, la transferencia de calor desde el interior hacia el medio externo o zona de enfriamiento trata de buscar el equilibrio térmico. En tal contexto, la estabilidad térmica depende esencialmente de la máxima transferencia de calor de la cama de lecho empacado con el medio externo (Taco S. , 2006).

En los reactores tubulares se considera la longitud del tubo y velocidad másica con la que ingresa el fluido en los lechos empacados, en la práctica, el tubo para las reacciones exotérmicas se encuentra en un rango de 3-5 cm, sin embargo, no supera los 10 cm.

En la mayoría de los reactores de lecho empacado se asume una simetría axial. Al momento de empacar el lecho se lo hace cuidadosamente para disminuir las variaciones de porosidad en la dirección axial, mientras que en el eje radial la porosidad varía. Podemos dividir en zonas a los modelos de lecho empacado estas son de pared y central como se muestra en la Figura 8 y 9 (Taco S. , 2006).

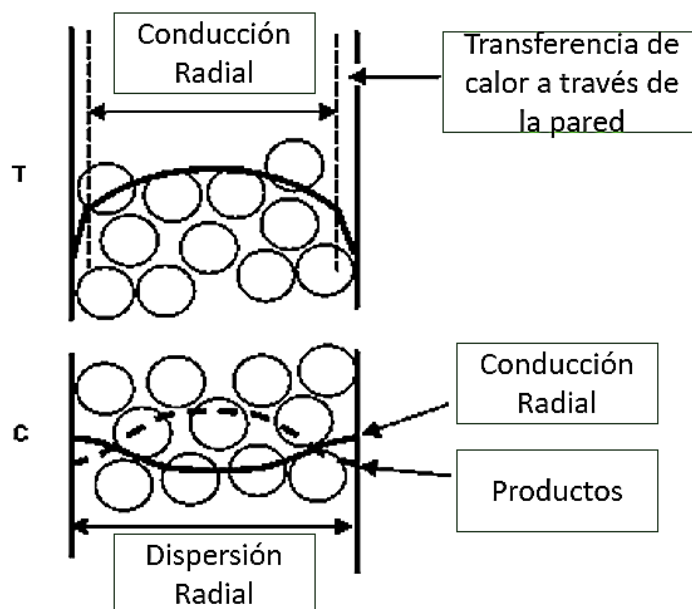


Figura 8. Dirección radial para una reacción exotérmica considerando temperatura y concentración.

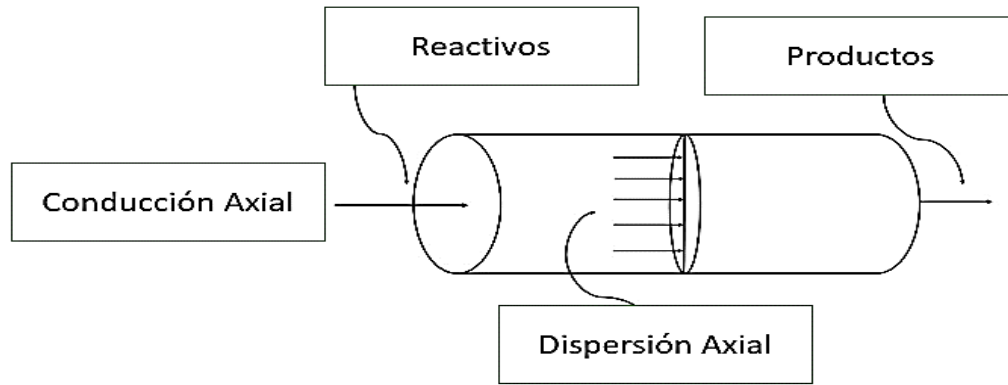


Figura 9. Dirección axial para una reacción exotérmica considerando temperatura y concentración.

Debe considerarse que los modelos más comunes son los de dispersión, que consisten principalmente en que la fase fluida y las partículas desarrollan un medio anisotrópico es decir movimiento o desplazamiento limitado, con el fin de comprender el comportamiento de energía y masa estas pueden ser representadas por ecuaciones diferenciales finitas con condiciones de borde (Taco S. , 2006).

En este trabajo, se restringirá el análisis a modelo unidimensional estacionario. El modelo dinámico homogéneo de dos dimensiones más simples son cuando la temperatura del fluido y del sólido son igualmente asumidas.

1.13 Expresiones cinéticas

La velocidad de reacción de la síntesis de Fischer- Tropsch está dada por la velocidad de consumo del monóxido de carbono CO y además la velocidad del carbono convertido en moléculas orgánicas (Izquierdo, 2004). Existen algunas expresiones cinéticas sin embargo no se encuentran validadas en su totalidad para distintos catalizadores y condiciones de manejo, por lo tanto, los valores tienen que ser determinados por datos experimentales de velocidad y selectividad del catalizador (Taco S. , 2006).

$$-r_{co} = \frac{A_{co} e^{E_{co}/RT} P_{co} P_{H_2}}{(1 + A_{adCC} e^{\Delta H_{adco}/RT} P_{co})^2}$$

Ecuación 8. Expresiones cinéticas

Donde:

r = relación de velocidad

K = constante de velocidad

A = factor de frecuencia del monóxido de carbono [*constantes de velocidad*]

E_{CO} = energía de activación [$KJ mol^{-1}$]

R = constante de gas ideales [$8.314 J mol^{-1} K^{-1}$]

T = temperatura [$^{\circ}K$]

Para este análisis consideramos la obtención de datos cinéticos que se han realizado en lotes de reactores de lecho empacado considerando que la velocidad y selectividad puede existir variaciones en temperatura, presión y concentración.

1.14 Dispersión de masa axial y radial

En los modelos unidimensionales la dispersión de masa axial se refiere a la variabilidad en la distribución de masa en torno al eje central del reactor de lecho empacado. Se asume que la masa está desigualmente distribuida en el eje principal y puede causar un desequilibrio y variación en la conversión de reactivos a productos. Está definida por el grupo adimensional, aquí se utiliza el número de Peclet (Pérez, 2016).

La dispersión radial en cambio se enfoca en la variabilidad que existe en la distribución de masa en torno a un radio determinado desde el centro del reactor de lecho empacado. La masa está desigualmente distribuida en un plano radial.

1.14.1 Coordenadas cilíndricas

El uso de coordenadas cilíndricas se da cuando existen inconvenientes en la simetría tipo cilíndricos como es el caso del reactor de lecho empacado. Se define como la extensión del sistema de coordenadas polares, aquí por lo general la variable z es la que define la extensión máxima de una superficie determinada.

1.15 Métodos de elementos finitos






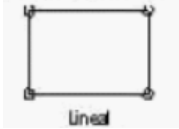
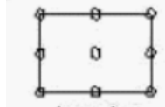

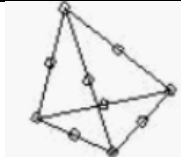
El método de los elementos finitos conocido por sus siglas MEF, consiste en la aproximación de problemas continuos, es decir el continuo se divide para un número finito de partes a los que llamaremos elementos, los mismos están asociados a los nodos que no es más que un número finito de parámetros (Frías, 2004).

El MEF surgió en Francia por el año de 1850 con el concepto de análisis de estructuras propuesto por algunos pensadores como son Maxwell, Mohr entre otros. Más adelante por el

año de 1950 y con el origen de las primeras computadoras aparecen los primeros programadores que utilizaron el modelo de elementos finitos para la programación matricial. Lo elementos que más se usan se muestran en la Tabla 6 (Frías, 2004).

En la actualidad el MEF se utiliza ampliamente para la resolución de problemas relacionados a la mecánica estructural, transferencia de calor y mecánica de fluidos, además se ha caracterizado por ser un método práctico de ingeniería ya que resuelve problema de contorno gobernadas por ecuaciones diferenciales parciales u ordinarias. Por lo antes mencionado se ha escogido el MEF como un método numérico para la resolución de modelos de reactores de lecho empacado (Taco S. , 2006).

Tabla 6. Elementos uni-, bi- y tridimensionales.

	Constante	Lineal	Cuadrático	Cúbico
Unidimensionales				
Bidimensional	Lineal	Lineal	Lagrangiano	
				
Tridimensional	Asimétrico	Tetraedro		
				

1.16 Ecuaciones diferenciales y derivadas parciales EDPs

Los modelos de transporte son representados matemáticamente por las ecuaciones diferenciales de segundo orden que pueden ser lineales y no lineales. A continuación, se indica algunas características cuando es lineal y no lineal.

Una ecuación diferencial de n-ésimo orden es lineal cuando:

$$a_n(x) \frac{d^n y}{dx^n} + a_{n-1}(x) \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} + \dots + a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(x)y = f(x)$$

Ecuación 9. Diferencial Lineal

- La variable dependiente y todas sus derivadas son de primer grado
- Los coeficientes de la variable dependiente y sus derivadas dependen de la variable independiente
- La linealidad solo existe para la variable dependiente y sus derivadas

Entre las EDPs lineales de segundo orden tenemos las más conocidas que son: ecuación de ondas, de calor y de Laplace. En función de estas se clasifican en hiperbólicas, elípticas o parabólicas (Aranda, 2011). Ampliando el concepto decimos que las funciones hiperbólicas se originan con soluciones de discontinuidad, por otra parte, las ecuaciones parabólicas se originan por problemas físicos transitorios (Aranda, 2011).

Mientras que una ecuación diferencial de n-ésimo orden es no lineal cuando:

$$a_n(x) \frac{d^n y}{dx^n} + a_{n-1}(x) \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} + \dots + a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(x)y = f(y)$$

Ecuación 10. Diferencial No Lineal

- No parece la variable independiente

En este estudio las ecuaciones de transferencia de masa y calor en un reactor de lecho empacado se les ha clasificado en dos partes:

- Si se encuentra en estado estable corresponderá al de ecuaciones diferenciales elíptica
- Si se encuentra en estado variable (cambia con respecto al tiempo) corresponderá al de ecuaciones diferenciales parabólicas.

1.17 Condiciones de borde

Tabla 7. Tipos de condiciones de contorno.

Nombre	Definición	Ecuación
Condiciones tipo Dirichlet	El contorno es definido con valores fijos	$T = T_0$

Condiciones tipo Neuman	El contorno es definido con un flujo	$\frac{\partial T}{\partial x} = f(x)$
Condiciones tipo Mixto o Robin	Ecuación de transferencia, es la combinación de las anteriores	$A\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right) - bT = f(x)$

En esta sección se ampliará algunos comentarios sobre las condiciones iniciales y de borde en las ecuaciones diferenciales parciales, el fin de especificar las condiciones es encontrar una solución única. Las condiciones de contorno para procesos de mecánica de fluidos son tres tipos básicamente (Hernández, 2001). En la tabla 7 se indica las ecuaciones y características.

1.18 Métodos de numéricos de solución

Los métodos analíticos y numéricos son los más utilizados al momento de resolver las ecuaciones diferenciales parciales. Los métodos analíticos se enfocan en encontrar una solución completa. Los métodos analíticos por lo general son limitados, representan soluciones basadas en fórmulas matemáticas en cambio los métodos numéricos son versátiles al momento de diseñar el modelo (Cortés, 2019). A continuación, se hará una breve descripción de los métodos analíticos y numéricos.

Entre los métodos analíticos de solución tenemos los siguientes:

Método de Fourier: también conocido como separación de variables, es uno de los métodos más utilizados a la hora de resolver ecuaciones de primer orden ya sean diferenciales o parciales. Consiste en dividir las variables dependientes en base a una sola variable independiente y esto que sea resuelto por separado (Zill & Cullen, 2008).

Transformadas integrales de Laplace: el nombre de este método es a que la diferenciación e integración se conoce como transformadas, es decir que transforman una función en otra. Consiste básicamente en cambiar la EDP (Ecuación Diferencial Parcial) con dominio diferencial a una EDP con dominio algebraico, de esta manera se origina la EDO (Ecuación Diferencial Ordinaria) (Zill & Cullen, 2008).

A continuación, se describe los métodos numéricos de solución:

Método de Diferencias Finitas (MDF): tiene por objetivo la resolución cercana de las ecuaciones diferenciales definidas, tiene gran utilización al momento de solucionar problemas

relacionados a la transferencia de calor y mecánica de fluidos, consiste en discretizar la variable independiente es decir discretizar la variable independiente sobre un dominio finito formando una malla centesimalmente pequeños. El software que puedan escoger para esta solución se aconseja que tenga un buen procesador el ordenador. Es necesario definir la pared nodal también conocida como malleo que casi siempre es ortogonal (Lara, 2019). En la Figura 11 se muestra un ejemplo de mallado con dominio.

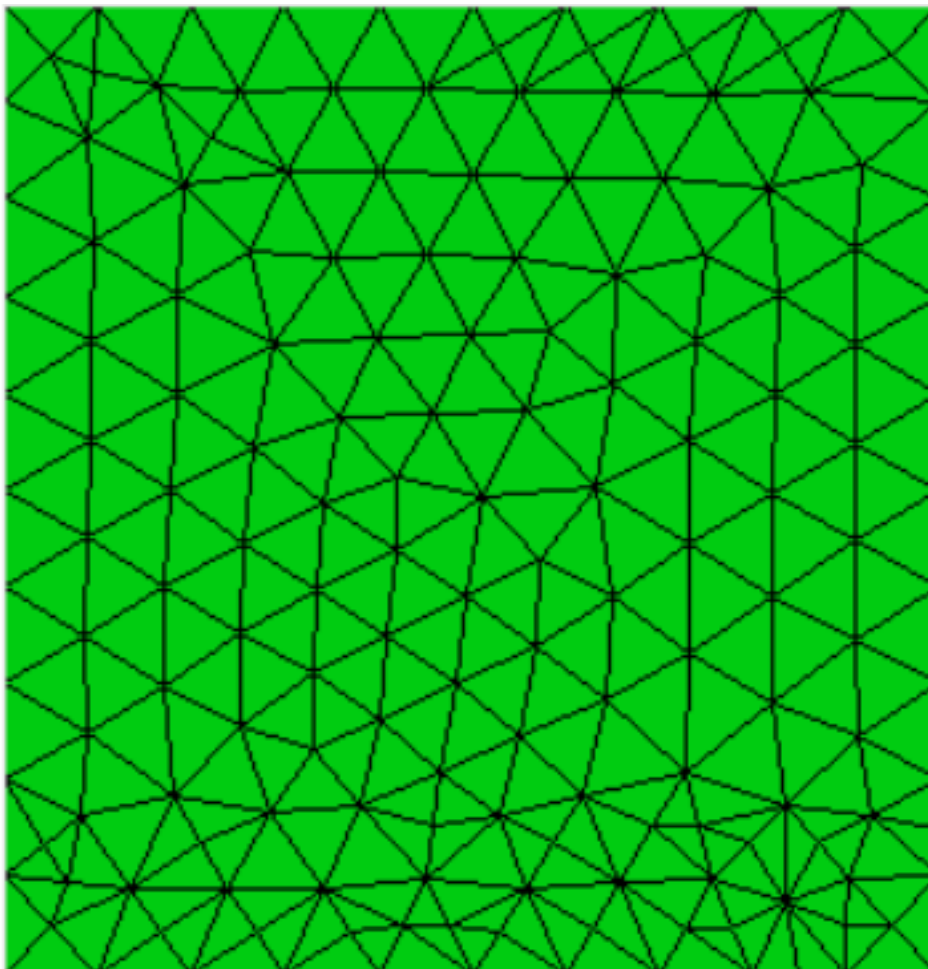


Figura 10. Construcción de malla a partir de los nodos.

Método de Elementos Finitos: en este método consiste en discretizarse dividiendo el dominio en un número finito de partes a diferencia del MDF este método divide el dominio en elementos más grandes y no es necesario que sean ortogonales entre sí. El propósito de este método es que se puede usar líneas, placas o elementos volumétricos. En un dominio bidimensional tenemos elementos como triángulos o cuadriláteros y en un dominio tridimensional pueden ser tetraedros o hexaedros (Taco S. , 2006). En la Figura 12 se muestra un claro ejemplo del mallado con el método de elementos finitos.

En cada uno de los nodos de cada elemento finito se realizan cálculos matemáticos considerando las variables dependientes como puede ser la temperatura, concentración, velocidad es decir basados en las condiciones iniciales, que determinan el comportamiento de la transferencia de calor por las ecuaciones construidas en base al reactor de lecho empacado (Moreno, 2007).

Las variables dependientes se aproximan utilizando una función conocida. Estas funciones pueden ser lineales o no lineales (generalmente polinómicas), según las ubicaciones geométricas (nodos) utilizadas para definir los elementos finitos. Posteriormente, las ecuaciones gobernantes se integran en cada elemento finito y el conjunto resultante de soluciones individuales se ensambla en el dominio total. Como resultado de estas operaciones se obtienen un conjunto de ecuaciones algebraicas, las cuales se resuelven para los valores de las variables dependientes en los nodos (Taco S. , 2006).

Este método tiene ventajas sobre los demás métodos y son:

- Maneja el comportamiento lineal y no lineal existente con deformaciones y materiales no lineales
- Modela un problema o forma irregular con bastante facilidad
- Maneja un número ilimitado y tipo de condiciones de contorno
- Reduce o aumenta el tamaño de los elementos para utilizar elementos pequeños donde sea necesario
- Disminuye el error por medio de interpolación entre los nodos más cercanos
- Permite modelar de manera casi exacta la forma real del dominio de un problema

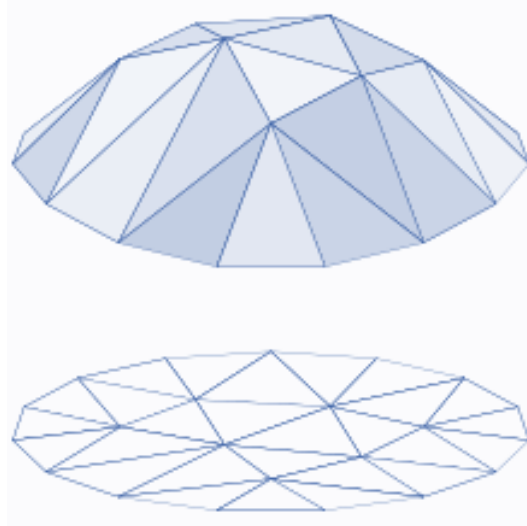


Figura 11. Triangulación de regiones.

En esta investigación se utilizará en este estudio el Método de los elementos finitos para analizar el comportamiento dinámico en el reactor de lecho empacado. Para la resolución se utilizará un software computacional llamado FlexPDE.

1.19 Software FlexPDE

Esta herramienta computacional fue desarrollada por el personal que desarrolló originalmente PDEase2, FlexPDE es un software libre de propósito general, amigable y poderoso para obtener soluciones numéricas.

El software FlexPDE se ha escogido como programa base para la resolución de las ecuaciones diferenciales parciales por medio del método de elementos finitos para obtener soluciones numéricas. Se caracteriza por dar solución al sistema de ecuaciones diferenciales en general y no sólo en un área como lo hace otros programas, además se caracteriza por resolver modelos cuando se da una reacción química en un fluido (Taco S. , 2006).

El principal producto de este software es para resolver los conjuntos acoplados de ecuaciones diferenciales parciales que se encuentran matemáticamente descritos en la mayoría de los fenómenos físico que se encuentra con frecuencia en la ingeniería, física, química, biología, matemática y otros campos.

Existen otros programas computacionales como ALGOR, GID, SAP2000 entre otros los cuales presentan diseños preestablecidos lo que complica al usuario ya que no puede ir más allá del modelo además no pueden ser útiles si existe una reacción química en el interior del reactor.

Por otra parte, es importante mencionar que FlexPDE tiene dos versiones en la web para estudiantes y profesionales, cada una tiene un período de prueba de 30 días después de este período hay que pagar la licencia de uso. Por medio de bibliografía se ha comparado el error de las respuestas entre ambas versiones y podemos decir que las respuestas en la versión profesional son casi exactas con un error de milésimas.

En general el ambiente del programa es amigable con el usuario, permite editar las ecuaciones diferenciales, los comandos son sencillos de utilizar, permite reeditar después de correr el programa y la solución. Por lo antes mencionado FlexPDE es ideal para el análisis del reactor de lecho empacado para la producción de biocombustibles.

A continuación, se presenta y describe el software y sus comandos:

En la Figura 12 se muestra la pantalla inicial de FlexPDE, además en la parte superior se muestra los comandos de texto que los describen en un lenguaje legible y los módulos que se encuentran a la izquierda. En aplicaciones sencillas el script puede parecer muy simple, pero a nivel que aumenta la dificultad esto cambiara.

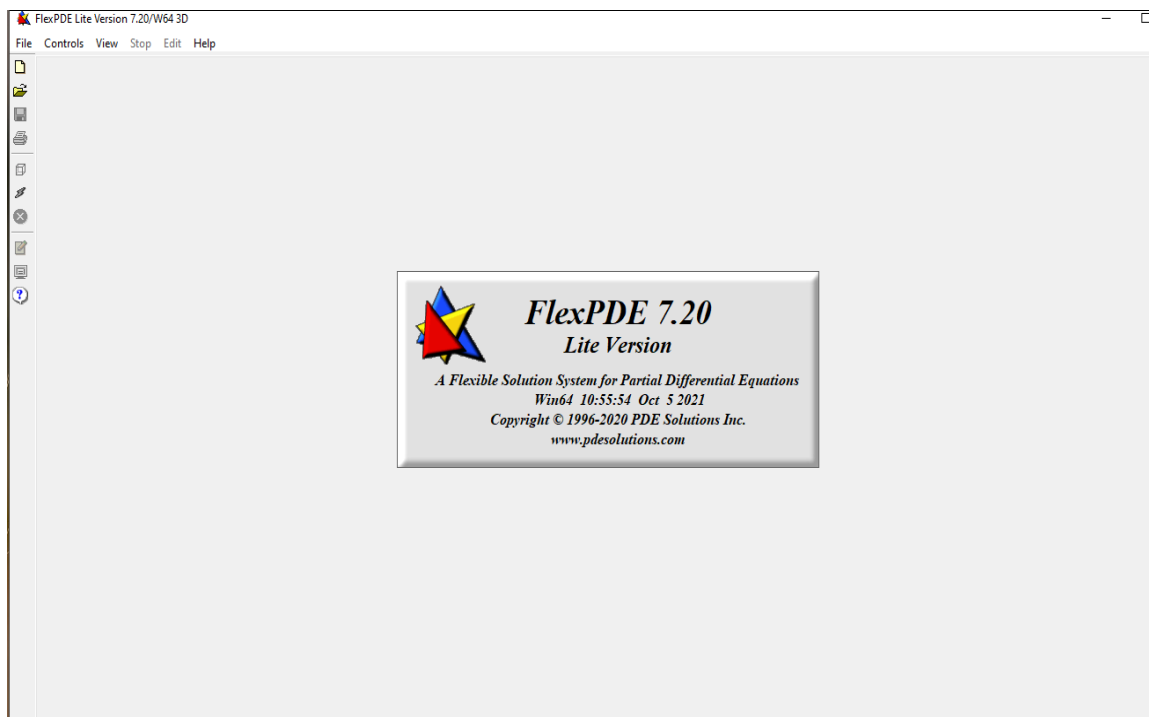


Figura 12. Pantalla inicial de FlexPDE.

(FlexPDE, 2022)

En la Figura 13 se muestra la barra de menú con algunas funciones que voy a describir a detalle a continuación:



Figura 13. Comandos de FlexPDE.

(FlexPDE, 2022)

File: básicamente en esta opción se permite iniciar un script nuevo, también conta con opciones para guardar o abrir el proyecto en el que se está trabajando.

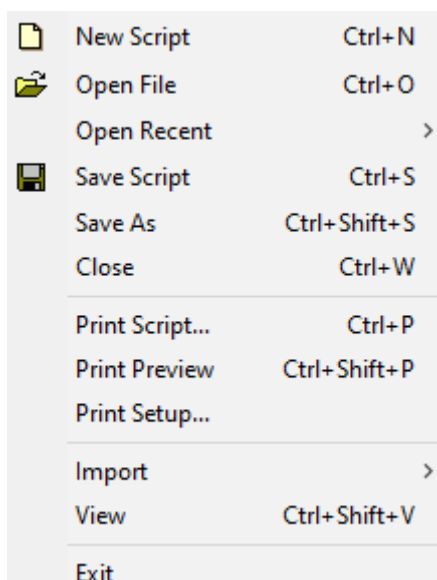


Figura 14. Menú File.

(FlexPDE, 2022)

Controls: contiene funciones que serán utilizadas cuando se corra el problema.





	Domain Review	Ctrl+D
	Run Script	Ctrl+R
	Show Editor	Ctrl+E
	Show Plots	Ctrl+L
	Stop Batch	Ctrl+B

Figura 15. Menú Controls.

(FlexPDE, 2022)

View: básicamente en este ítem se utiliza para controlar las imágenes guardadas en FlexPDE.

Next Frame	Ctrl+Shift+N
Back	Ctrl+Shift+B
Restart	Ctrl+Shift+R
Last Frame	Ctrl+Shift+L
Select Frame	Ctrl+Shift+F
Movie	Ctrl+Shift+M
Export Movie	Ctrl+Shift+E
Frame Delay	Ctrl+Shift+D
Stop Movie	Ctrl+Shift+S
View File	Ctrl+Shift+V

Figura 16. Menú View.

(FlexPDE, 2022)

Stop: este menú está disponible mientras está corriendo el problema, nos brindara algunas estrategias de urgencia.

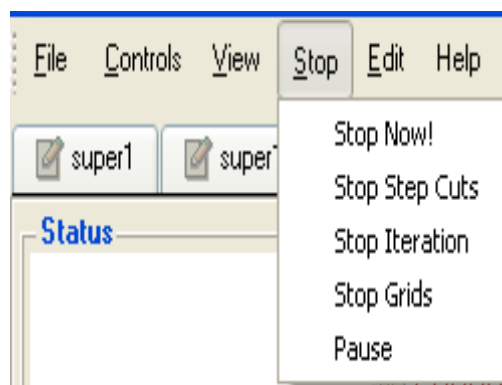


Figura 17. Menú Stop.

(FlexPDE, 2022)

Edit.: básicamente sirve para editar la descripción del problema.

Select All	Ctrl+A
Undo	Ctrl+Z
Redo	Ctrl+Shift+Z
Cut	Ctrl+X
Copy	Ctrl+C
Paste	Ctrl+V
Find	Ctrl+F
Font	

Figura 18. Menú Edit.

(FlexPDE, 2022)

Help: el siguiente menú ofrece algunas opciones de ayuda, además muestra el contrato y características de la empresa.


 Help	Ctrl+H
Preferences	Ctrl+Shift+P
Register FlexPDE	
Read License Agreement	
About FlexPDE	

Figura 19. Menú Help.

(FlexPDE, 2022)

En la Tabla 8 y en la Figura 20 se muestra los comandos necesarios para la edición del modelo ya que se trata de un procesador de palabras donde se ingresa el modelo a resolver.

Tabla 8. Comandos de ingreso de FlexPDE.

Comandos	Objetivo
TITLE	Se describe el proyecto a realizar
SELECT	Selecciona los controles a utilizar
VARIABLES	Se ingresa las variables dependientes
DEFINITIONS	Se ingresa las funciones, parámetros.

EQUATIONS	Para cada variable se asocia una ecuación diferencial parcial
BOUNDARIES	Se delimita la figura por medio del perímetro de dominio
MONITORS and PLOTS	Se imprime la gráfica deseada
END	Finaliza el problema

```

{ Fill in the following sections (removing comment marks ! if necessary),
  and delete those that are unused.}
TITLE 'New Problem' { the problem identification }
COORDINATES cartesian2 { coordinate system, 1D,2D,3D, etc }
VARIABLES { system variables }
  u { choose your own names }
! SELECT { method controls }
! DEFINITIONS { parameter definitions }
! INITIAL VALUES
EQUATIONS { PDE's, one for each variable }
  div(grad(u))=0 { one possibility }
! CONSTRAINTS { Integral constraints }
BOUNDARIES { The domain definition }
  REGION 1 { For each material region }
    START(0,0) { Walk the domain boundary }
    LINE TO (1,0) TO (1,1) TO (0,1) TO CLOSE
! TIME 0 TO 1 { if time dependent }
MONITORS { show progress }
PLOTS { save result displays }
  CONTOUR(u)
END

```

Figura 20. Comandos de FlexPDE.

(Fuente:FlexPDE,2022)

2. METODOLOGÍA

2.1. Exposición del problema

La aplicación de técnicas y métodos numéricos del modelo de Elementos Finitos se realizó en un reactor de lecho empacado dedicado a la producción de biocombustibles. Se encuentra ubicado en el laboratorio de Termodinámica del Departamento de Ingeniería Química de la Escuela Politécnica Nacional. Este reactor presenta un problema en el control de temperatura de reacción. Por todo lo anterior expuesto el propósito de esta investigación es controlar y optimizar la eficiencia energética para que la cama del catalizador tenga una temperatura constante usando la termoquímica de la reacción y los controladores de temperatura que gobierna las resistencias que calientan el reactor escala y en base a esto aumentar su producción.

2.1.1 Tipo de investigación

Esta investigación se caracteriza por tener un alcance de tipo experimental. Bernal (2010) afirmó lo siguiente:

Se caracteriza porque en ella el investigador actúa conscientemente sobre el objeto de estudio, en tanto que los objetivos de estos estudios son precisamente conocer los efectos de los actos producidos por el propio investigador como mecanismo o técnica para probar sus hipótesis. (p.117), es decir en este tipo de investigación existe al menos un experimento en el que se manipule las variable independientes (radio, altura, tiempo) y estudiar el efecto que produce sobre una o más variables dependientes (temperatura, concentración, velocidad de reacción, flujo de calor, flujo másico). En el marco de esta investigación, es necesario plantear una hipótesis que sugiera una relación entre dos o más variables. A nivel cuantitativo, la aplicación del método de elementos finitos tiene como objetivo optimizar los resultados energéticos a lo largo del reactor de lecho empacado (Bernal, 2010).

Además, la presente investigación tiene un alcance explicativo ya que busca una explicación, determinación y en qué condiciones se manifiesta los fenómenos. El objetivo de la manipulación de variables es ver los cambios en la variable dependiente en un ambiente controlado. Se realizan repeticiones en los experimentos para verificar la hipótesis determinada por el investigador. De esta manera, se podrá analizar los cambios de temperatura que existen cuando se da la reacción en el reactor específicamente en el precalentador. (Ramos, 2020).

Esta investigación motiva a la academia en especial a la Escuela Politécnica Nacional a que se involucre en la producción y mejoramiento de biocombustibles generando energías eficientes para el medio ambiente.

La presente investigación promueve el cuidado del medio ambiente y sobre todo la disminución del calentamiento global, reduciendo así la emisión de metano y de CO₂ a la atmosfera de nuestro planeta.

2.1.2 Diseño de la investigación

El diseño de investigación es experimental, ya que, el investigador posee el control directo de las variables independientes y éstas cambian de manera intencionada (Hernandez Sampieri, 2014). En esta investigación la hipótesis planteada es la siguiente: La variación de temperaturas en el punto de ingreso de los tres controladores influye en la producción de gasolina. Además, el diseño es longitudinal donde según Bernal, 2010 “En la investigación longitudinal se obtienen datos de la misma población en distintos momentos durante un período determinado, con la finalidad de examinar sus variaciones en el tiempo” (p.117). Es decir, tiene como objetivo medir y analizar las variables en diferentes intervalos de tiempo. Se va a correr acetona y etanol al inicio y se realizará un análisis con respecto a la temperatura, la obtención de datos será aromáticos y dependiendo del número de carbonos se observará el aumento o disminución de la temperatura. Se utilizará un volumen de 600 mL para cada muestra de lo producido se recogerá un vial de 10 mL, posteriormente se inyectará estas muestras en un cromatógrafo para poder observar los compuestos aromáticos. Se medirá el rendimiento de gasolina respecto a lo que inyectó.

2.1.3 Determinación de población y muestra

La técnica de muestreo que se utilizó es de tipo no probabilístico ya que las muestras que se escogieron fueron por conveniencia del experimentador, debido a que los reactivos disponibles en el laboratorio en ese momento es etanol y metanol.

2.1.4 Técnicas e instrumentos de investigación

Las técnicas e instrumentos para la recolección de datos son diversas en la actualidad. Según (Pimienta, 2017) las técnicas de investigación son procedimientos que permiten levantar información de una manera sistemática y organizada. A continuación, se mencionará las técnicas que se utilizará en la presente investigación.

2.1.5 Observación Directa

Consiste en observar de cerca el objeto de estudio es decir el investigador está en contacto con el fenómeno que se analizará. Esta técnica es fundamental al momento de recopilar la mayor cantidad de información (Pimienta, 2017).

2.2. Experimento

2.2.1. Experimentación para la obtención de hidrocarburos

Es una técnica que consiste en el planteamiento de una hipótesis en relación con las variables del fenómeno que queremos investigar, con el objetivo de analizar sus efectos (Pimienta, 2017). En este caso el fenómeno que se está estudiando se le recreará en el laboratorio de Termodinámica y se simulará por medio del software FlexPDE. Posteriormente se va a correr acetona y etanol al inicio y se realizará un análisis con respecto a la temperatura, la obtención de datos será aromáticos y dependiendo del número de carbonos se observará el aumento o disminución de la temperatura. Se utilizará un volumen de 600 mL para cada muestra seguidamente se llenará viales de 10 mL, posteriormente se inyectará estas muestras en un cromatógrafo para poder observar los compuestos aromáticos. Se trabajo con la reacción para obtener biogasolina a partir del etanol y cetona en la Ecuación 3 y 4 se presenta los productos como el eteno, buteno y además agua. Se utilizó la cinética y los mecanismos de reacción de un estudio anteriormente realizado (Carrera & Proaño, 2019). Se medirá el rendimiento de gasolina respecto a lo que inyectó. En la Figura 18 se puede observar el diagrama de la producción de biogasolina.

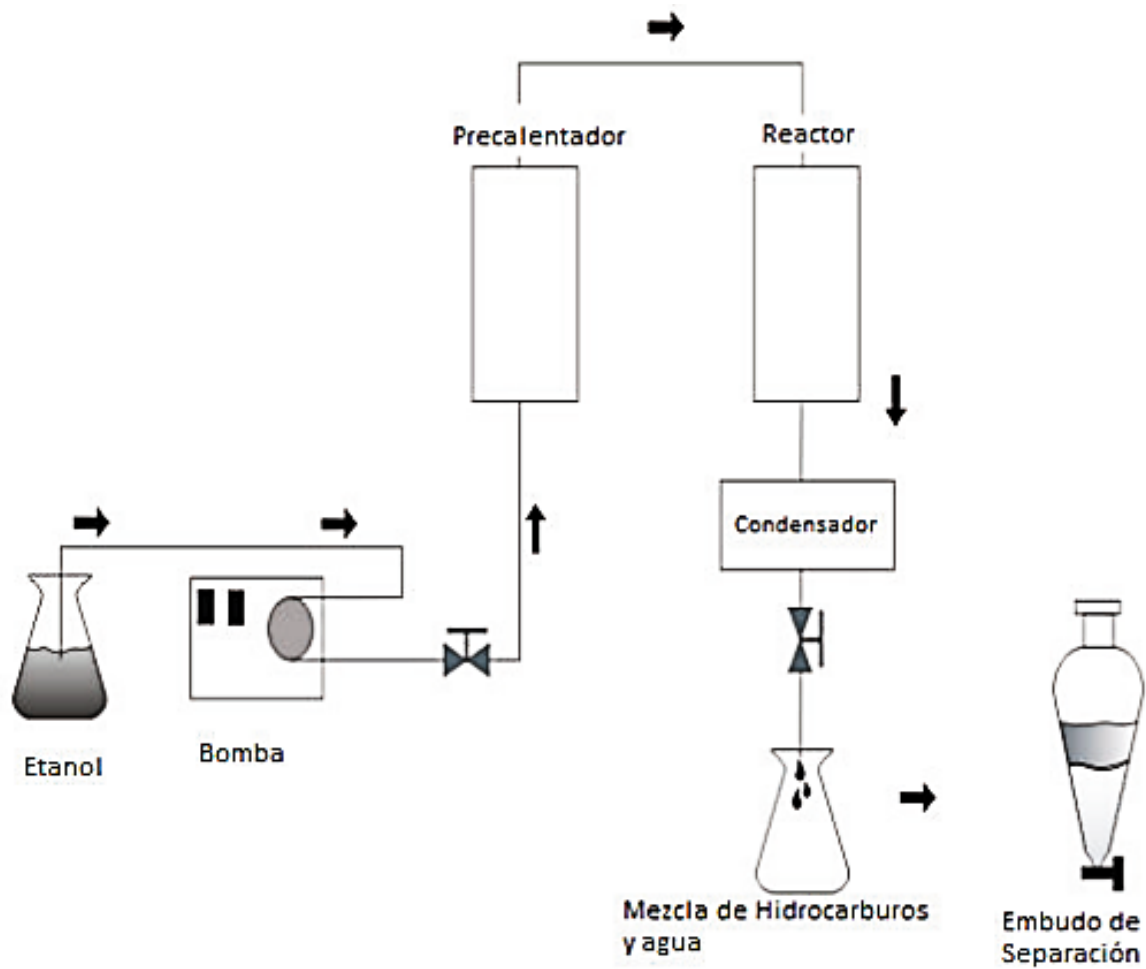


Figura 21. Diagrama del reactor de lecho empacado escala laboratorio para la producción de biogasolina a partir de etanol y acetona.

Fuente: (Guandinango, 2018)

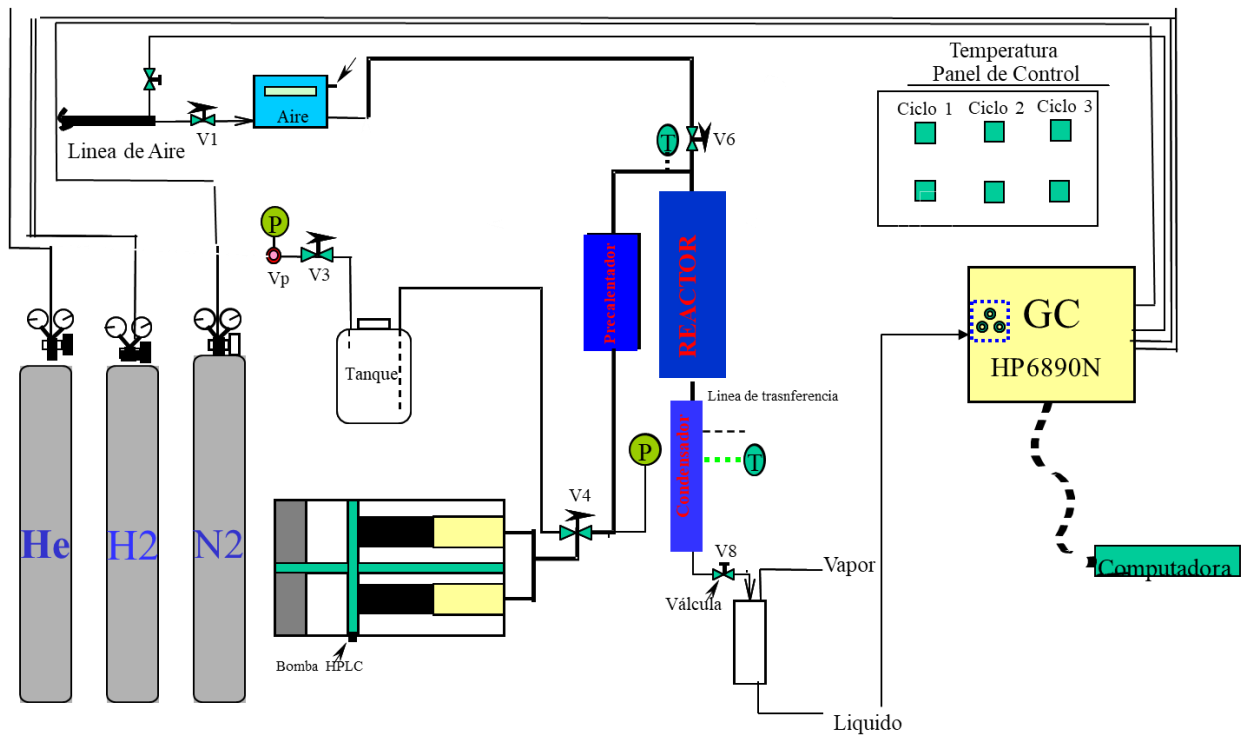


Figura 22. Esquema general del análisis de la producción de biogolina.

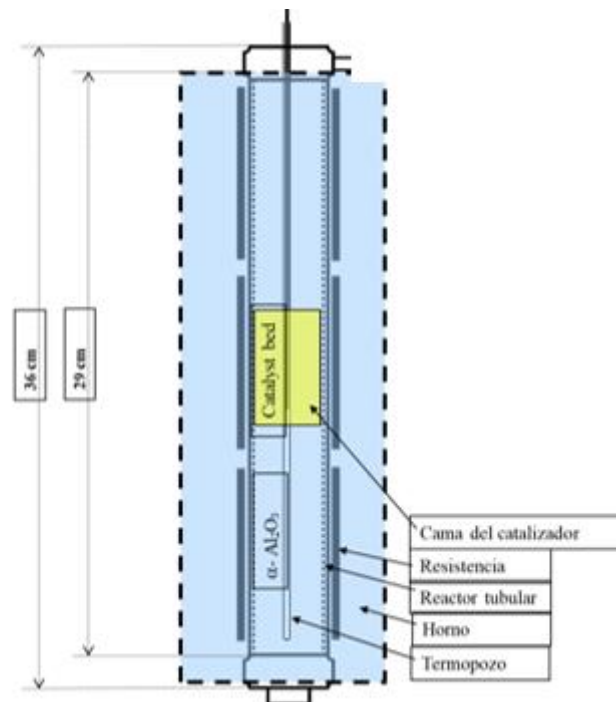


Figura 23. Diagrama del reactor de Lecho Empacado Ubicado en el Laboratorio de Termodinámica de la Facultad de Química y Agroindustria de la Escuela Politécnica Nacional.

2.3. Simulación

En esta sección se presenta el planteamiento del modelo.

2.3.1 Definición del modelo

Este modelo se lo representa de la siguiente manera: Modelo Homogéneo Estacionario Unidimensional. Para este modelo se tomó algunas consideraciones:

- Las transferencias de calor y masa se encuentran en estado estacionario
- No se considera las variaciones de temperatura y concentración respecto al tiempo
- Se determino los ejes z y r
- A la temperatura se discretizo $\theta = \frac{T}{T_0}$ y el eje axial $z' = \frac{z}{L}$
- El balance de masa para el reactor de flujo en pistón es el siguiente:

$$\begin{array}{ccccccccc} \text{Variación de} & & \text{Variación de Calor} & & \text{Variación de Calor} & & \text{Generación de} & & \text{Variación de} \\ \text{Concentración por} & + & \text{por Difusión axial en} & + & \text{por Difusión axial en} & + & \text{Moles por} & = & \text{Concentración a} \\ \text{Convección en la} & & \text{la fase Sólida y} & & \text{la fase Sólida y} & & \text{Reacción} & & \text{través del tiempo en} \\ \text{fase Fluida} & & \text{Fluida} & & \text{Fluida} & & & & \text{la fase Sólida y} \\ & & & & & & & & \text{Fluida} \end{array}$$

A continuación, en la Ecuación 11 se detalla en balance de calor:

$$\varepsilon \frac{\partial C_i}{\partial T} = -v \frac{\partial C_i}{\partial z} + D_{cz} \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \delta_b \eta r_{vi}$$

Ecuación 11. Balance de calor.

- Mientras que el balance de calor es el siguiente:

$$\begin{array}{ccccccccc} \text{Variación de Calor} & & \text{Variación de Calor} & & \text{Variación de Calor} & & \text{Generación de} & & \text{Variación de Calor a} \\ \text{por Convección en la} & + & \text{por Conducción axial} & + & \text{por Conducción} & + & \text{Calor por} & = & \text{través del Tiempo} \\ \text{fase Fluida} & & \text{en la fase Sólida y} & & \text{radial en la fase} & & \text{Reacción} & & \text{de la fase Sólido y} \\ & & \text{Fluida} & & \text{Sólida y Fluida} & & & & \text{Fluida} \end{array}$$

A continuación, en la Ecuación 12 se detalla en balance de masa:

$$(\varepsilon_0 \delta_g C_{p_g} + (1 - \varepsilon_0) \delta_p C_{p_s}) \frac{\partial T}{\partial t} = -v_0 \delta_g C_{p_g} \frac{\partial T}{\partial z} + \lambda_{cz} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \frac{4U}{\partial T} (T - T_c) + \delta_b \eta (-\Delta H) r_v$$

Ecuación 12. Balance de masa.

Las ecuaciones planteadas siguen las siguientes condiciones de borde:

$$\lambda_{cz} \frac{\partial T}{\partial z} = v_0 \delta_g C p_g (T - T_0) \quad ; \text{ cuando } z = 0$$

Ecuación 13. Condiciones de borde.

$$D_{cz} \frac{\partial C_i}{\partial z} = v_0 (C_i - C_0) \quad ; \text{ cuando } z = 0$$

Ecuación 14. Condiciones de borde.

Para generar la solución de la Ecuación 15 es necesario determinar el número adimensional de Schmidt de cada componente en la fase fluida según (Carrera & Proaño, 2019).

$$Sc_i = \frac{\mu_i}{\rho_i \cdot Dm}$$

Ecuación 15. Número adimensional de Schmidt.

En la ecuación 16 y 17 se define el modelo matemático considerando que es una reacción exotérmica la cual desprende calor y no existe pérdida por enfriamiento.

- Modelo Homogéneo Unidimensional Estacionario

$$0 = -\frac{\partial \theta}{\partial z'} + \frac{1}{Pe'_{hz}} \frac{\partial^2 T}{\partial z'^2} + \frac{L}{v C p_f \delta_f T_0} (-\Delta H) r_v$$

Ecuación 16. Modelo matemático

$$0 = -\frac{\partial y_i}{\partial z'} + \frac{1}{Pe'_{mz}} \frac{\partial^2 y_i}{\partial z'^2} + \frac{L}{v C_{oi}} \delta_b r_{vi}$$

Ecuación 17. Modelo matemático.

Dónde:

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

Pe_{hz} : Número de Peclet efectivo axial de calor en base al diámetro de partícula
 $[d_p p_{pg} u_0 / \lambda_{cz}]$

Pe_{mz} : Número de Peclet efectivo axial de masa en base al diámetro de partícula
 $[d_p u_o / D_{cz}]$

θ : Temperatura Adimensional T/T_o

ρ_b : Densidad del catalizador en base al volumen del lecho, kg/m^3

ε_0 : Porosidad promedio

C_{0i} : Concentración inicial de la especie i mol/m^3

c_{pg} : Capacidad calórica de la fase fluida, $J/(kg K)$

r : Coordenada radial, m

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

Con el fin de tener una solución única se define las condiciones de borde. Para su definición este estudio se basó en los procesos de transferencia que se basan en tener los valores de frontera fijos también conocido como condiciones de contorno de Dirichlet.

Las condiciones de borde son las siguientes:

$$\frac{\partial \theta}{\partial z'} = Pe'_{hz}(\theta - 1) \quad ; \text{ Cuando } z = 0, \text{ para todo } r$$

$$\frac{\partial y_i}{\partial z} = Pe'_{mz}(y_i - 1) \quad ; \text{ Cuando } z = 0, \text{ para todo } r$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{\partial y_i}{\partial z} = 0 \quad ; \text{ Cuando } z = L, \text{ para todo } r$$

2.3.2 Parámetros de diseño

2.3.2.1 Parámetros dispersión de calor

En este espacio se definió la construcción de parámetros considerando que la reacción ocurre con catalizador en un reactor de lecho empacado. En la Sección 1.10 se definió la conductividad axial. Según (Dixon & Crewell, 1979). En la Ecuación 18 la correlación se encuentra expresada, además plantearon la relación entre el diámetro de partícula Pe_{hz} y el número adimensional de Peclet axial de calor. En la Ecuación 19 se encuentra expresado:

$$\frac{1}{Pe_{hz}} = \frac{\lambda_f^0 / \lambda_f}{Re_p \cdot Pr} + 0.7$$

Ecuación 18. Correlación de Dixon y Cresswell.

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

Ecuación 19. Número adimensional de Peclet en base al diámetro de partícula.

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

Ecuación 20. Número adimensional de Peclet en base a las dimensiones del lecho empacado.

Para la resolución de la Ecuación 9 es necesario definir la mezcla gaseosa (conductividad térmica del fluido) y la conductividad térmica del reactor de lecho empacado, esto se encuentra expresado en las Ecuaciones 21, 22, 23 y 24.

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

Ecuación 21. Conductividad térmica estándar.

$$\lambda_f = \sum_{i=1}^n \frac{X_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^n y_i \phi_{ij}}$$

Ecuación 22. Conductividad térmica.

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

Ecuación 23. Conductividad térmica reactor.

Se considera la constante B en función de Cf y la constante k

$$B = Cf \left(\frac{1 - \varepsilon_0}{\varepsilon_0} \right)$$

Ecuación 24. Constante B en función de Cf.

Donde Cf = 1.25 para esferas y Cf = 2.5 cilindros

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

Ecuación 25. Constante K .

A continuación, se determina los números adimensionales de Reynolds con base al diámetro de la partícula y Prandal, las ecuaciones son las siguientes:

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

Ecuación 26. Numero adimensional de Reynolds.

$$Pr = \frac{\bar{C}_p \bar{\mu}}{\lambda_f}$$

Ecuación 27. Numero adimensional de Prandal.

2.3.3 Parámetros dispersión de masa

Según (Dixon & Creewell, 1979) presentaron una correlación para el cálculo de la conductividad másica axial, esta expresión se encuentra relacionada con el número de Peclet.

$$\frac{1}{Pe_{mz}} = \frac{1 - \sqrt{1 - \varepsilon_0}}{Re_p \cdot Sc} + \frac{1}{2}$$

Ecuación 28. Correlación para el cálculo de conductividad másica axial.

$$Pe_{mz} = \frac{d_p v}{D_{cz}}$$

Ecuación 29. Diámetro de la partícula.

2.3.4 Parámetros de temperatura de operación y velocidad espacial (WHSV)

Para la reacción de oligomerización se utilizó dos temperaturas: 400 y 623°K, manteniendo un flujo constante de los reactantes a través de la bomba HPLC de 2 mL/ min mientras se varia la temperatura.

La velocidad espacial está definida por la relación entre la masa de flujo de los reactantes dividida para el catalizador en este caso HZSM-5 y se expresa en la función inversa del tiempo h^{-1} . En la Ecuación 30 se presenta la ecuación para alcanzar la velocidad espacial deseado.

$$Velocidad\ Espacial\ (WHSV) = \frac{Flujo\ de\ reactantes\ (\frac{g}{h})}{masa\ del\ catalizador\ (g)}$$

2.4. Rendimiento y conversión de la reacción

En base a las condiciones de operación previamente establecidas, se ingresó 600 mL de etanol y 600 mL de cetona ambos por separado. Se calculo el rendimiento con la ecuación 31.

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

Ecuación 31. Rendimiento del producto.

2.4.1 Análisis y recolección de datos

Según (Pimienta, 2017) es una técnica que nos permite obtener información de calidad. Es de carácter sistemático ya que organiza, clasifica y revisa los datos de la investigación para garantizar la integridad de la investigación (Pimienta, 2017).

2.5. Instrumentos

Tiene como objetivo apoyar a que las técnicas cumplan su propósito y alcancen el objetivo de la investigación. En este caso se utilizó instrumentos que ya han sido validados con anterioridad para probar la hipótesis planteada (Pimienta, 2017). A continuación, se indicará que instrumentos se utilizó en el presente estudio:

2.5.1 Reactor de lecho empacado

Para este estudio se usará un reactor de lecho empacado que realiza la experimentación y producción de biocombustibles, existen estudios previos a este reactor, el experimentador cuyo título del documento científico es "Thermochemical Analysis of a Packed-Bed Reactor Using Finite Elements with FlexPDE and COMSOL Multiphysics" (Taco,2022).

2.5.2 FlexPDE

Se utiliza el programa FlexPDE para la resolución de las ecuaciones diferenciales utilizando el método de elementos finitos. Generando mallas basados en elementos finitos.

En este paquete informático la generación de nodos en las mallas es automático sin embargo nos permite ir modificando los nodos.

2.5.3 Registros de Observación

Se enfocó en la recolección de datos de los controladores de temperatura y de la producción de biogasolina, con la finalidad de facilitar la agrupación e interpretación de nuevos datos.

En la tabla 9 se presenta en forma de resumen las técnicas e instrumentos de investigación.

Tabla 9. Compendio de técnicas e instrumentos utilizados.

Técnica	Instrumento	Objetivo
Experimento	Reactor de lecho empacado	Transformar los alcoholes y cetonas a bicombustible
Simulación	FlexPDE	Resolver las ecuaciones diferenciales que se obtiene del balance de masa y energía
Observación directa	Registros de observación	Observar la variación de temperatura en la producción de biocombustible

2.6. Herramientas

2.6.1. Computadora

Se utilizó para la resolución del modelo con ayuda del software FlexPDE, además se registró los datos experimentales e interpretación de estos y la elaboración del informe.

2.6.2 Software Flex PDE

Se escribió el sistema de ecuaciones diferenciales parciales en un modelo de elementos finitos sofisticados incluyendo dimensiones espaciales.

2.6.3. Controladores de Temperatura

Se utilizó para poder regular el estado térmico en el interior del reactor de lecho empacado.

2.6.4. Cronómetro

Permitió determinar el tiempo de cada experimento.

2.6.5. Calculadora

Facilita el análisis de diversos datos obtenidos en el proceso experimental.

2.6.6. Cámara Fotográfica

Se utilizó para registrar el proceso experimental en el reactor y a su vez para visualizar los productos obtenidos del reactor.

2.6.7. Termocupla

Permite medir la temperatura en el interior del reactor.

3. RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados de la simulación del modelo matemático por medio del software FlexPDE, además los resultados de la experimentación para la obtención de biogasolina a partir de etanol y cetona. Se realizó la comparación de resultados para determinar las óptimas condiciones del reactor de lecho empacado para el aumento de la producción de biogasolina.

3.1. Parámetros

En esta sección se presenta las dimensiones y características del reactor de lecho empacado en la Tabla 10, los parámetros del diseño del modelo matemático en las Tablas 11, 12, 13. La resolución de ecuaciones y cálculos se presentan en los anexos I y II.

Tabla 10. Parámetros del Catalizador y del Reactor de Lecho Empacado.

$L (m)$	0.34
$R (m)$	0.023
$R_0(m)$	0.0251
$\delta_b(kg/m^3)$	338.983
$\delta_s(kg/m^3)$	1000
ε_0	0.66
$d_p (m)$	1×10^{-3}
$Cp_s \left(\frac{J}{Kg \cdot ^\circ K} \right)$	836.8

Los parámetros son del reactor que se encuentra en el laboratorio de termodinámica de la Facultad de Química y Agroindustria de la Escuela Politécnica Nacional. Así mismo los parámetros de la zeolita HZSM-5.

Tabla 11. Parámetros de los fluidos (etanol y acetona).

Muestra	Etanol	Acetona
$Q (m^3/s)$	$1.5 \times 10^{-8} m^3/s$	$2.5 \times 10^{-8} m^3/s$
$v \left(\frac{m}{s} \right)$	$1.86 \times 10^{-6} m/s$	$3.10 \times 10^{-6} m/s$
$u \left(N \cdot \frac{m}{m^2} \right)$	1.44×10^{-8}	1.39×10^{-8}
λ_f	0.422	0.142
$Cp \left(\frac{J}{Kg \cdot ^\circ K} \right)$	2275.51	2325.41
PM ($\frac{g}{mol}$)	46	58
$\delta (Kg/m^3)$	0.994	1.031
$\delta_{catalizador}$	338.98	338.98

La Tabla 11 indica la composición del fluido de etanol y cetona, se consideró una mezcla de gases y se escogió los compuestos que se encuentran en mayor cantidad:

Productos a partir de la reacción de etanol: 1-etil-3-metil-Benceno, 1,3-dimetil-Benceno, Tolueno y agua.

Productos a partir de la reacción de acetona: Tolueno, 1,3-dimetil-Benceno, 1,2,4-trimetil-benceno y agua.

Tabla 12. Números adimensionales.

	Etanol	Cetona
Re_p	0.013	0.023
Pr	7.76×10^{-5}	2.27×10^{-4}
$Sc_{C_7H_8}$	2.23×10^{-3}	2.23×10^{-3}
$Sc_{C_8H_{10}}$	1.98×10^{-3}	1.98×10^{-3}
$Sc_{C_9H_{12}}$	1.62×10^{-3}	1.62×10^{-3}
Sc_{H_2O}	0.018	0.018

La Tabla 12 nos indica los números adimensionales que no es más que la distribución de las velocidades del fluido en el reactor de lecho empacado.

Tabla 13. Parámetros de la transferencia en el reactor de lecho empacado de masa y calor.

Muestra	Etanol	Cetona
$\lambda_{cz}(W/m \cdot ^\circ K)$	0.089	-336.83
Pe_{hz}	0.016	-7.5×10^{-6}
$1/Pe_{hz}$	62.5	-133333.33
$D_{cz(C_7H_8)}(W/m \cdot ^\circ K)$	2.67	8.03×10^{-4}
$Pe_{mz(C_7H_8)}$	2.36×10^{-7}	1.31×10^{-3}
$1/Pe_{mz(C_7H_8)}$	4222011.36	761.86
$D_{cz(C_8H_{10})}(W/m \cdot ^\circ K)$	6.21×10^{-4}	1.03×10^{-3}
$Pe_{mz(C_8H_{10})}$	1.02×10^{-3}	1.023×10^{-3}
$1/Pe_{mz(C_8H_{10})}$	981.97	977.23
$D_{cz(C_9H_{12})}(W/m \cdot ^\circ K)$	9.01×10^{-4}	1.49×10^{-3}
$Pe_{mz(C_9H_{12})}$	7.01×10^{-4}	7.07×10^{-4}
$1/Pe_{mz(C_9H_{12})}$	1424.73	1413.66
$D_{cz(H_2O)}(W/m \cdot ^\circ K)$	4.14×10^{-4}	6.90×10^{-4}
$Pe_{mz(H_2O)}$	1.52×10^{-3}	1.52×10^{-3}
$1/Pe_{mz(H_2O)}$	654.65	654.64

Todos los parámetros mencionados anteriormente permiten la construcción del modelo matemático propuesto. A continuación, se presenta las ecuaciones del modelo unidimensional estacionario:

Modelo matemático del Etanol respecto al balance de masa y de energía:

$$0 = -\frac{\partial \theta}{\partial z} + 62.5 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + (-0.019)$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_7H_8}}{\partial z} + 4222011.36 \frac{\partial^2 y_{C_7H_8}}{\partial z^2} + 0.30$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_8H_{10}}}{\partial z} + 981.97 \frac{\partial^2 y_{C_8H_{10}}}{\partial z^2} + 1.59$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_9H_{12}}}{\partial z} + 1424.73 \frac{\partial^2 y_{C_9H_{12}}}{\partial z^2} + 1.60$$

$$0 = \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial z} + 654.65 \frac{\partial^2 y_{H_2O}}{\partial z^2} + 8.43$$

Modelo matemático de la Acetona respecto al balance de masa y de energía:

$$0 = -\frac{\partial \theta}{\partial z} - 133333.33 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + (-2.54 \times 10^{-3})$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_7H_8}}{\partial z} + 761.86 \frac{\partial^2 y_{C_7H_8}}{\partial z^2} + 1.59$$

$$0 = \frac{\partial y_{C_8H_{10}}}{\partial z} + 981.97 \frac{\partial^2 y_{C_8H_{10}}}{\partial z^2} + 1.59$$

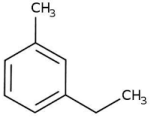
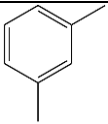
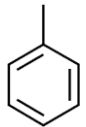
$$0 = \frac{\partial y_{C_9H_{12}}}{\partial z} + 1413.66 \frac{\partial^2 y_{C_9H_{12}}}{\partial z^2} + 1.59$$

$$0 = \frac{\partial y_{H_2O}}{\partial z} + 654.64 \frac{\partial^2 y_{H_2O}}{\partial z^2} + 1.59$$

3.2. Experimentación y Producción de biogasolina a partir de etanol y cetona a temperatura de 600 K

Luego de la cromatografía realizada a la biogasolina de etanol se determinó que el fluido estaba constituido por una mezcla de gases compuesta por 1-etil-3-metil-Benceno, 1,3-dimetil-Benceno, Tolueno y agua.

Tabla 14. Compuestos obtenidos en la experimentación con etanol.

Nomenclatura	Formula Química	Estructura Molecular
1-etil-3-metil-Benceno	C_9H_{12}	
1,3-dimetil-Benceno	C_8H_{10}	
Tolueno	C_7H_8	

Así mismo después de realizar la cromatografía a la biogasolina de cetona se determinó que el fluido estaba constituido por una mezcla de gases compuesta por Tolueno, 1,3-dimetil-Benceno, 1,2,4-trimetil-benceno y agua.

Tabla 15. Compuestos obtenidos en la experimentación con cetona.

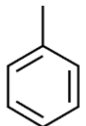
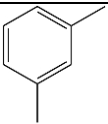
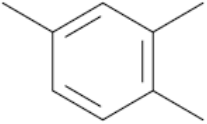
Nomenclatura	Formula Química	Estructura Molecular
Tolueno	C_7H_8	
1,3-dimetil-benceno	C_8H_{10}	
1,2,4-trimetil-benceno	C_9H_{12}	

Tabla 16. Datos experimentales para calcular el rendimiento del etanol.

Muestra	Volumen (mL)	Densidad (g/mL)	Masa (g)
Etanol	600	0.789	473.4

A continuación, se calcula el rendimiento:

Rendimiento teórico:

$$\text{Masa Total ingresada} = 473.4 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento máximo } H_2O = 473.4 \left(\frac{18}{46} \right) = 185.24 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento máximo Biogasolina} = 473.4 \left(\frac{28}{46} \right) = 288.16 \text{ g}$$

Rendimiento experimental:

$$\text{Rendimiento experimental } H_2O = 185.24 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento experimental Biogasolina} = 107.2 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento de No Condensables (C2 - C4)} = 177.96 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento experimental (\% w)} = \frac{107.2}{288.16} \cdot 100$$

$$\text{Rendimiento experimental (\% w)} = 37.20\%$$

De esta manera se obtiene que el rendimiento de la gasolina es de 37.20%. En el rendimiento teórico total se obtiene un resultado de 470.4 g. La masa de no condensables es 177.96 g en fase gaseosa y son las cadenas de hidrocarburos más pequeñas que van en el rango de C2 a C4 que se ventilan al exterior.

Tabla 17. Datos experimentales para calcular el rendimiento de la acetona.

Muestra	Volumen (mL)	Densidad (g/mL)	Masa (g)
Cetona	600	0.789	473.4

A continuación, se calcula el rendimiento:

Rendimiento teórico:

$$\text{Masa Total Ingresada} = 473.4 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento máximo } H_2O = 470.4 \left(\frac{18}{59} \right) = 143.51 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento máximo Biogasolina} = 470.4 \left(\frac{41}{59} \right) = 326.88 \text{ g}$$

Rendimiento experimental:

$$\text{Rendimiento experimental } H_2O = 143.51 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento experimental Biogasolina} = 213.46 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento de No Condensables (C2 - C4)} = 113.43 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento experimental (\% w)} = \frac{213.46}{326.88} \cdot 100$$

$$\text{Rendimiento experimental (\% w)} = 65.30\%$$

De esta manera se obtiene que el rendimiento de la gasolina es de 65.30%. En el rendimiento teórico total se obtiene un resultado de 470.44 g mientras que en el rendimiento experimental se obtuvo un total de 356.97 g. La masa de no condensables es 113.43 g en fase gaseosa y son las cadenas de hidrocarburos más pequeñas que van en el rango de C2 a C4 que se ventilan al exterior.

3.3. Análisis de resultados de la simulación en FlexPDE del modelo estacionario

A continuación, se presenta el esquema del lecho Normalizado en el que se programó el modelo estacionario para ambas muestras de etanol y cetona. Para el análisis se considera que el eje x es el eje axial normalizado del lecho empacado tubular (z'). El contorno de este eje por facilidad se definió que vayan de 0 a 1 al igual que las variables independientes.

Las concentraciones y temperaturas arrojan sus resultados en las unidades de mol/m^3 y en k respectivamente. Las ecuaciones de balance de masa y calor fueron normalizadas.

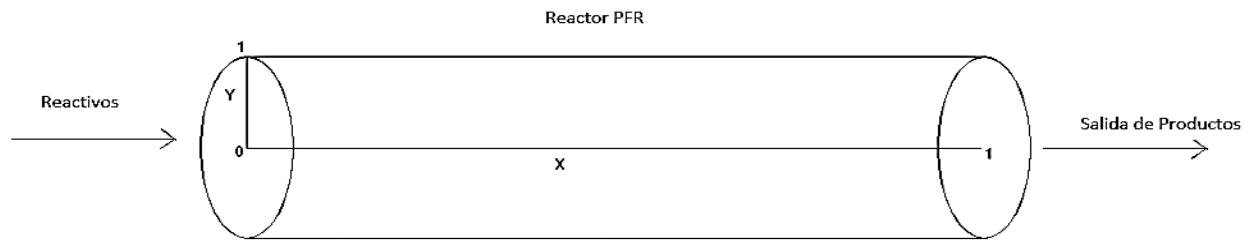


Figura 24. Esquema del reactor de lecho empacado.

3.4 Análisis de temperatura del reactor en la simulación del modelo estacionario del etanol y la acetona

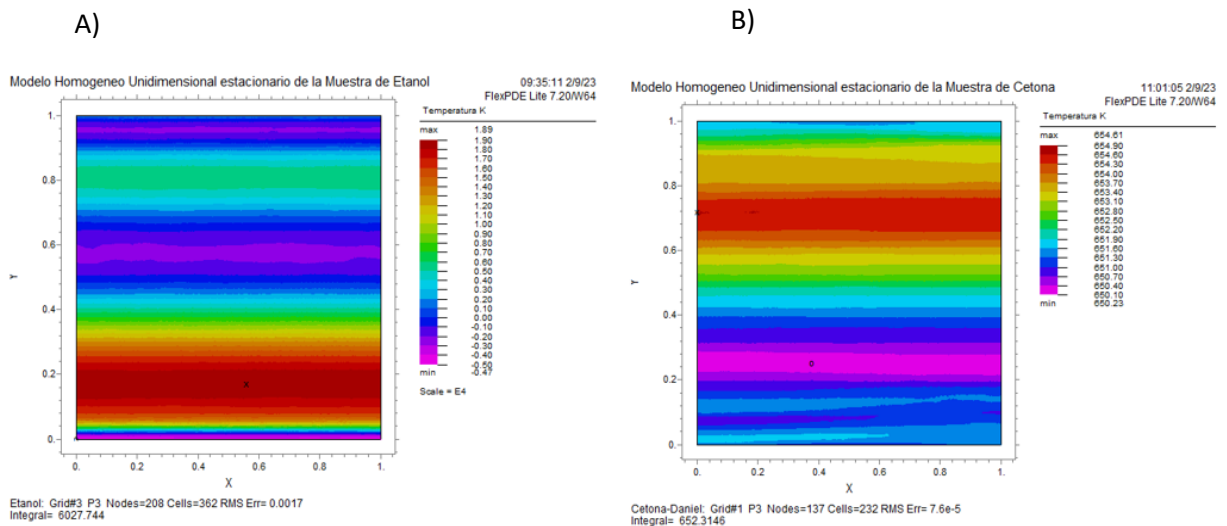


Figura 25. Temperatura de la reacción de A) etanol y B) acetona en K .

En la Figura 25 se observa la variación de temperatura en el reactor con respecto a x que es el eje axial y el eje y la velocidad espacial para ambas muestras. En la Figura 25 A de la muestra del etanol nos indica como al final del reactor existe un aumento de temperatura debido a que existe una menor concentración de reactivos al inicio ya que se trabajó con etanol artesanal de 95 grados de alcohol. En la Figura 25 B de la muestra de acetona observamos que el aumento de temperatura es en la parte inicial del reactor debido a que las resistencias se encuentran cercanas en ese punto, además se considera que la concentración de los reactivos se encuentra en mayor cantidad en la entrada del reactor.

Las condiciones de operación experimentalmente fueron adiabáticas, pero en la Figura 25 A y 25 B se puede observar que no cumple en su totalidad estas condiciones o no tiene un perfil ideal ya que las reacciones que se liberan en el interior del reactor están acompañadas de calor dependiendo si es liberado o exotérmico.

Al ser un reactor tubular se observa que en la entrada se origina una reacción adiabática posteriormente se desprende calor para ser más exactos es el calor de conversión de los reactivos como el tolueno, 1-etil-3-metil-Benceno, 1-3 dimetil benceno.

En la Figura 25 A observamos que la temperatura es más baja en la entrada del reactor lo que favorece a que la energía de activación sea menor, como resultado de una menor temperatura la velocidad de reacción es menor y esto favorece a una mayor conversión.

En ambos casos la temperatura no se mantiene constante y tiende a existir disminuciones este fenómeno puede estar asociado a la acumulación de catalizador en el interior del reactor. En conclusión, esto nos demuestra que la pureza de las muestras con la que trabajemos influye en el comportamiento térmico del reactor.

3.5. Análisis de concentraciones en la simulación del modelo estacionario del etanol y la acetona

La Figura 26 A se muestra como la concentración va disminuyendo a través del lecho, esto se debe a que se va crakeando es decir convirtiendo en gasolina. Se debe considerar que existe acumulación de catalizador al final del reactor de lecho empacado como resultado de esto la velocidad de reacción disminuye y por ende la conversión de reactivos disminuye en este caso la constante de activación es menor que la que se encuentra en la Figura 26 B.

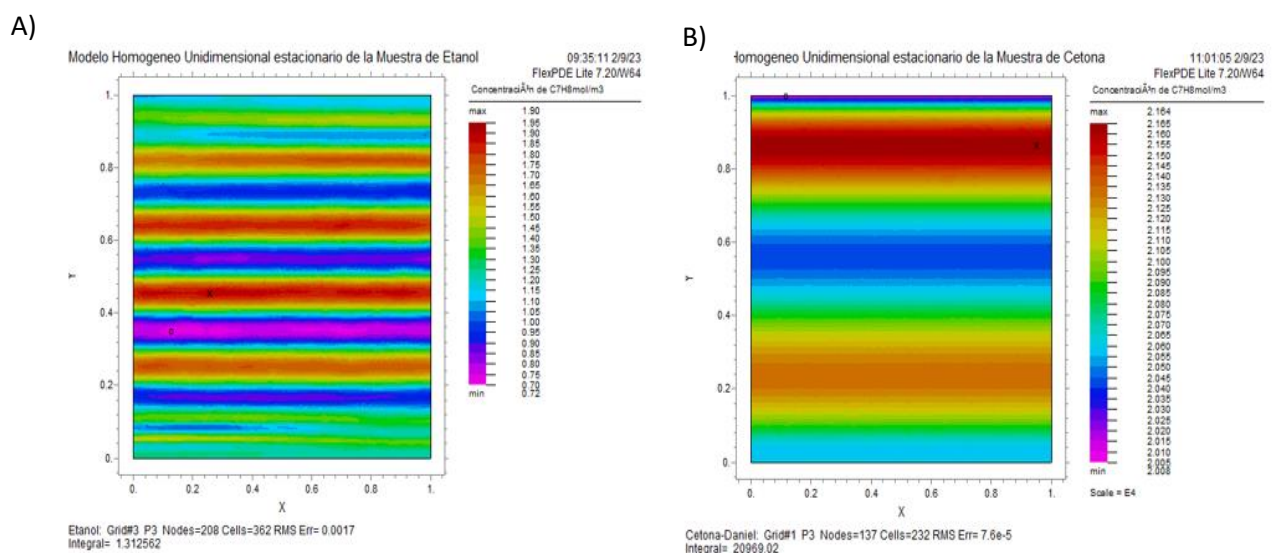


Figura 26. Concentración molar de C₇H₈ en las muestras del etanol y de acetona.

En la Figura 26 B se muestra una mejor conversión del tolueno a lo largo de la cama del catalizador sin embargo al existir una saturación de reactantes no se puede ocupar los espacios intersticiales del catalizador creando una disminución de productos, pero aumenta la generación de productos no deseados.

Se debe considerar que en el interior del reactor los reactivos se encuentran en fase gaseosa y que el catalizador utilizado se encuentra en fase solida por lo que origina los canales de tamaño pequeño creando una barrera para que el flujo pueda pasar y exista una conversión para estas reacciones.

En conclusión, al existir una menor saturación de reactivos se origina una mejor conversión de reactantes y se obtiene mayor cantidad de hidrocarburos los cuales son aprovechados para un mayor octanaje de la biogasolina.

La Figura 27 A se muestra una mayor concentración del aromático C_8H_{10} en la parte inicial del reactor de lecho empacado y esto se debe a que existe una mayor concentración de reactivos, por otra parte, va disminuyendo al momento que se sigue en contacto con el catalizador.

En la Figura 27 B la concentración molar del aromático C_8H_{10} presenta una variación en el eje axial, es decir presenta una mayor conversión que el etanol de 0.5 en el eje radial. Además, nos indica que concentración máxima es de 3.07 mol/m^3 .

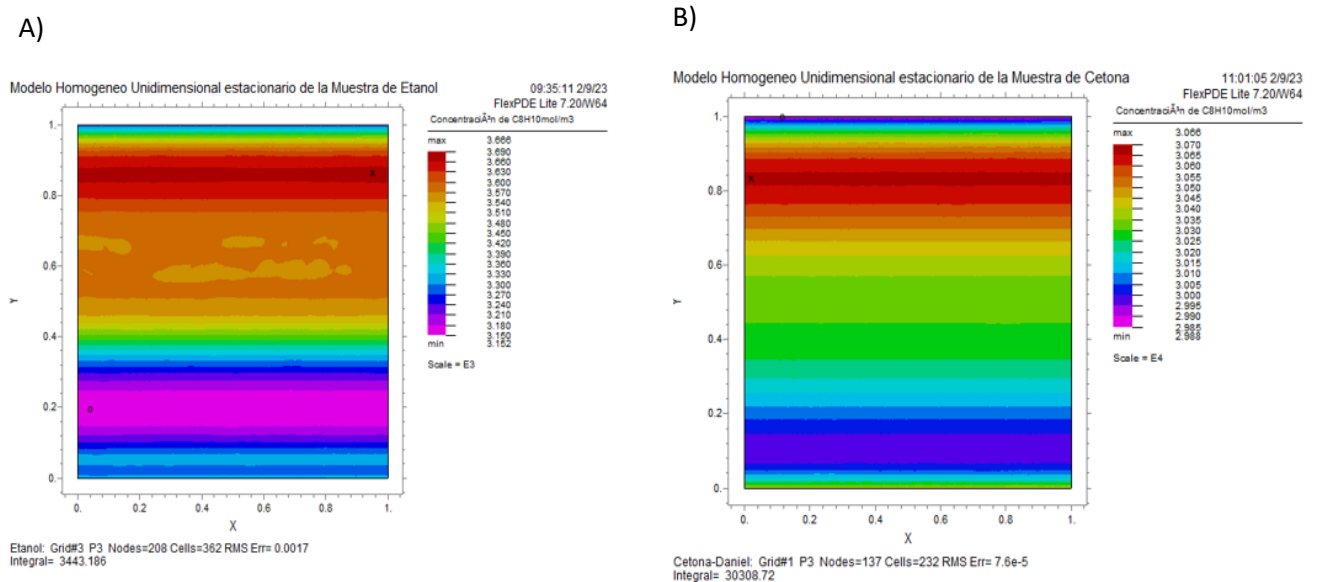


Figura 27. Concentración molar de C_8H_{10} en las muestras del etanol y de acetona.

Es importante mencionar que en el interior del reactor de lecho empacado también se encuentra la termocupla la cual nos dice a qué temperatura se encuentra dándose la reacción química pero que también interfiere en el proceso de conversión ya que obstruye el flujo del gas en el interior del reactor.

Las variables del sistema no son uniformes en el interior del reactor de lecho empacado por lo que genera que la velocidad de reacción varíe con respecto a la concentración creando variación en la velocidad de reacción.

En conclusión, la conversión en el interior de un reactor se rige por las variables que se ha considerado en el diseño, pero es pertinente conocer mucho más las especificaciones de estas variables, generalmente de entrada como pueden ser flujo del fluido, flujo de calor y además el flujo de salida.

En la Figura 28 A se muestra que el aromático C_9H_{12} alcanza una concentración máxima de 4.01 mol/m^3 en la simulación con la muestra del etanol, mientras que en la Figura 28 B en la muestra de la acetona alcanza una concentración 2.4 mol/m^3 . Para ambas muestras la temperatura tiene un patrón de crecimiento al inicio y un descenso al final.

Se puede diferenciar que la conversión de los reactivos varía según el tiempo al igual que la concentración. El perfil de temperatura con el que se trabajó en esta simulación no es el ideal para alcanzar una conversión efectiva que este por encima del 70%.

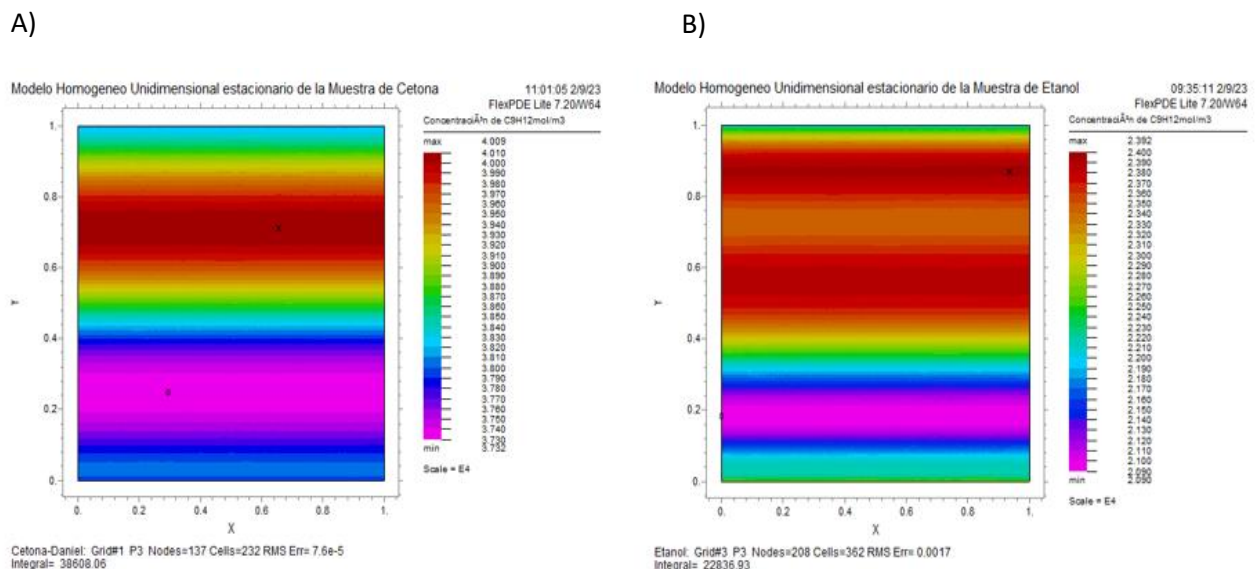


Figura 28. Concentración molar de C_9H_{12} en la muestra del etanol y acetona

3.6. Análisis termoquímico en la simulación del modelo estacionario del etanol y la acetona

A continuación, se presenta los resultados del modelo en el que se disminuye la temperatura con la que trabaja el reactor de lecho empacado, considerando el modelo anterior en el que existen variaciones de temperatura e incluso enfriamiento constante. Se decidió disminuir la temperatura del reactor ya que las resistencias se ubican a la entrada de este por lo que presumimos que disminuye la concentración de los reactivos.

En la Figura 29 muestra el resultado de la simulación del modelo estacionario con ambas muestras, etanol y acetona respectivamente, con la disminución de la temperatura a 523 K.

La Figura 29 A muestra el perfil de temperatura disminuido a 523 K en el modelo estacionario del Reactor de Lecho Empacado. En ambos casos se observa cambios substanciales con respecto a los resultados de la Figura 25. Es decir, la temperatura a lo largo del reactor presento aumentos de temperatura a pesar de tener variaciones de esta. Este fenómeno explica el aumento de rendimiento de ambas muestras en la producción de biogasolina.

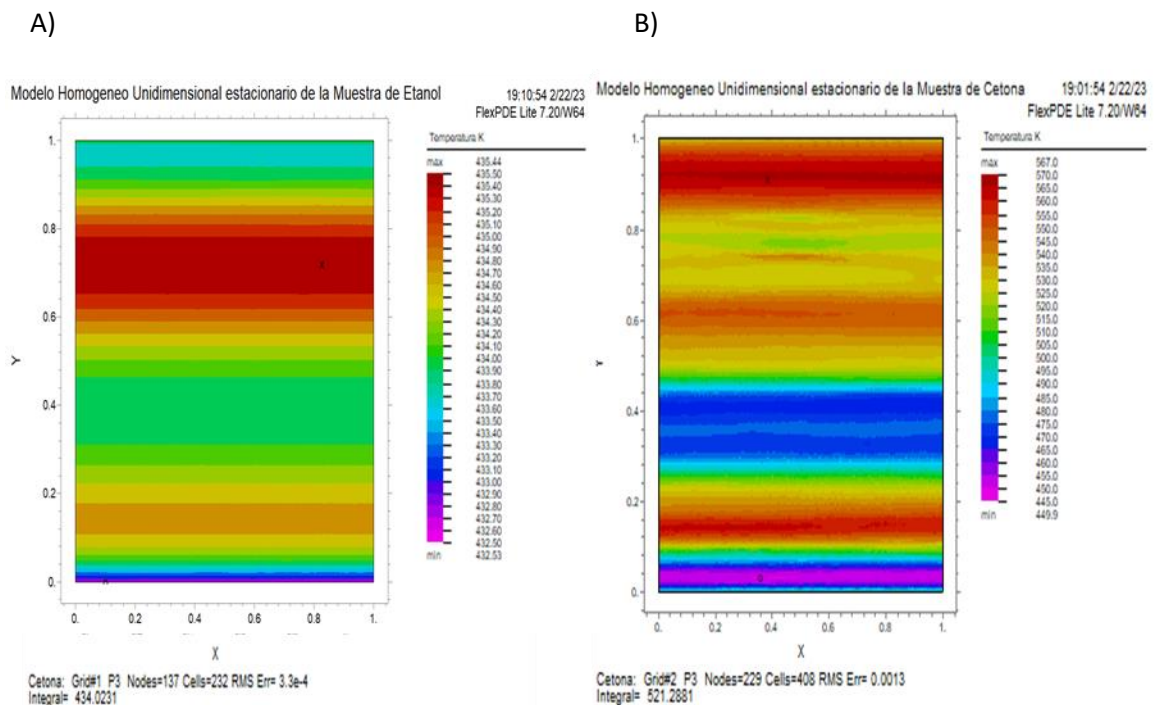


Figura 29. Concentración molar de C_9H_{12} en la muestra del A) acetona y B) etanol.

3.7. Experimentación y Producción de biogasolina a partir de etanol y acetona a menor temperatura (523 K)

En la siguiente experimentación se presenta los rendimientos obtenidos a una temperatura de trabajo del reactor de 523 K, a diferencia de la experimentación a 600 K se obtiene un mejor rendimiento en ambas muestras. En la muestra de etanol tenemos un mejoramiento de 9.94 % en rendimiento. Por otra parte, la muestra de acetona se obtuvo un mejoramiento de 10.54% en rendimiento.

En la Tabla 18 se presenta los resultados:

Tabla 18. Datos experimentales para calcular el rendimiento del etanol.

Muestra	Volumen (mL)	Densidad (g/mL)	Masa (g)
Etanol	600	0.789	473.4

A continuación, se calcula el rendimiento:

Rendimiento teórico:

$$\text{Rendimiento Total} = 473.4 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento máximo H}_2\text{O} = 473.4 \left(\frac{18}{46} \right) = 185.24 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento máximo Biogasolina} = 473.4 \left(\frac{28}{46} \right) = 288.16 \text{ g}$$

Rendimiento experimental:

$$\text{Rendimiento experimental H}_2\text{O} = 185.24 (1) = 185.24 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento experimental Biogasolina} = 135.86 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento de No Condensables (C2 - C4)} = 149.3 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento experimental Total} = 321.10 \text{ g}$$

$$\text{Rendimiento (\% w)} = \frac{135.86}{288.16} \cdot 100$$

$$\text{Rendimiento (\% w)} = 47.14\%$$

De esta manera se obtiene que el rendimiento de la gasolina es de 47.14%. En el rendimiento teórico total se obtiene un resultado de 470.4 g mientras que en el rendimiento experimental se obtuvo un total de 321.10 g. Existe una pérdida de masa 149.3 g en fase gaseosa y son las cadenas de hidrocarburos más pequeñas que se disipan en el medio ambiente.

Tabla 19. Datos experimentales para calcular el rendimiento de la acetona.

Muestra	Volumen (mL)	Densidad (g/mL)	Masa (g)
Cetona	600	0.789	473.4

A continuación, se calcula el rendimiento:

Rendimiento teórico:

$$\mathbf{Masa\ Total\ Ingresada = 473.4\ g}$$

$$\mathbf{Rendimiento\ máximo\ H_2O = 473.4 \left(\frac{18}{59} \right) = 144.42\ g}$$

$$\mathbf{Rendimiento\ máximo\ Biogasolina = 473.4 \left(\frac{41}{59} \right) = 328.97\ g}$$

Rendimiento experimental:

$$\mathbf{Rendimiento\ experimental\ H_2O = 144.42\ g}$$

$$\mathbf{Rendimiento\ experimental\ Biogasolina = 238.10\ g}$$

$$\mathbf{Rendimiento\ de\ No\ Condensables\ (C2 - C4) = 88.79\ g}$$

$$\mathbf{Rendimiento\ experimental\ Total = 381.61\ g}$$

$$\mathbf{Rendimiento\ (\% w) = \frac{238.10}{328.97} \cdot 100}$$

$$\mathbf{Rendimiento\ (\% w) = 72.37\%}$$

De esta manera se obtiene que el rendimiento de la gasolina es de 72.37%. En el rendimiento teórico total se obtiene un resultado de 470.44 g mientras que en el rendimiento experimental se obtuvo un total de 381.6 g. Existe una pérdida de masa en fase gaseosa de 88.79 g y son las cadenas de hidrocarburos más pequeñas que se ventean como no condensables.

4. Conclusiones

La optimización realizada de manera experimental y computarizada en el reactor de lecho empacado ubicado en el laboratorio de termodinámica de la Escuela Politécnica Nacional se concluyó que es posible aumentar la productividad de biogasolina a partir de las muestras de etanol y acetona.

El estudio termoquímico de la reacción de oligomerización a partir de muestras de etanol y acetona en el reactor de lecho empacado se desarrolló con el criterio de modelo unidimensional estacionario y en dirección axial.

El método de elementos finitos es una herramienta muy útil al momento de resolver problemas de transferencia de masa y calor representados en ecuaciones diferenciales.

El software FlexPDE permite la simulación del diseño en el reactor, además facilita la visualización del comportamiento de la temperatura, concentración de los reactivos, flujo de calor y masa. Las gráficas que se obtuvo permitieron el estudio y mejoramiento termoquímico de ambas muestras.

El calor generado por la reacción exotérmica influye en la conversión de los reactivos al inicio del reactor. La conversión de los reactivos aumenta a medida que pasa a través catalizador.

Las altas temperaturas influyen a la disminución de concentración de los reactivos por ende disminuye la producción de biogasolina. Por esta razón es importante el análisis del flujo de calor en el reactor de lecho empacado.

La acumulación de zeolita HZSM-5 en el interior del reactor a una alta temperatura genera más coque por lo que se genera mayor cantidad de gases y estos no se puedan condensar, en cambio sí se encuentra a una menor temperatura se mejora la reacción de oligomerización y se generaría más biogasolina.

Los datos experimentales con los que presentó resultados favorables son a una temperatura de 523 K y 45 g de zeolita HZSM-5, estos datos fueron comparados con los datos obtenidos en la simulación y se determinó que existe una menor variación de temperatura lo que origina una mejor conversión de los reactivos a biogasolina.

Los datos experimentales y simulados guardan relación en la productividad de biogasolina. De esta manera se determina que la temperatura es una variable determinante en la producción de gasolina a partir de etanol y acetona.

5. Recomendaciones

Al momento de realizar los cálculos es importante mantener un orden y claridad en los datos ya que por la cantidad de variables es fácil confundirse y tener equivocaciones en las unidades.

El software FlexPDE es una herramienta útil para visualizar el comportamiento de variables, se encuentra de manera libre en el internet por lo que se recomienda adquirir el paquete profesional ya que tiene otras herramientas importantes como la opción de volúmenes finitos.

Se recomienda realizar una recirculación de calor por etapas en el reactor de lecho empacado obteniendo descensos de temperaturas deseados para el mejoramiento de la productividad.

Por otro lado, se recomienda revisar todo el sistema que conforma el reactor de lecho empacado ya que en la parte experimental puede existir fugas de vapor en los acoples del condensador, también disminuir el flujo de la bomba HPLC, aunque es aconsejable realizar un estudio previo de flujo y sus implicaciones en la producción de biogasolina.

Se aconseja normalizar los datos con los que se va a construir las ecuaciones diferenciales ya que mejoran la precisión y el modelado de los resultados. Al normalizar los datos se pueden trabajar con valores que tienen unidades de medida diferentes convirtiéndose en una escala común.

Por otra parte, como problema que afecta la producción de biogasolina es la temperatura por lo que se aconseja precalentar el reactor a la temperatura con la que se va a ingresar los reactivos al reactor de lecho empacado posteriormente a esto se debe inyectar los reactivos a través de la bomba HPLC.

Se considera que en futuras investigaciones se considere el cambio de tiempo espacial ya que se considera el tiempo para transformar el volumen del fluido en las condiciones determinadas en la entrada del reactor.

Se sugiere que los proveedores de etanol cumplan con normas de calidad ya que el rendimiento de la producción depende de la pureza de este.

6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

6.1. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abascal, R. (2017). Estudio de la obtención de bioetanol a partir de diferentes tipos de biomasa lignocelulósica.(tesis de pregrado). Escuela Politécnica de Ingeniería de Minas y Energía, Cantabria.
- Aranda, P. (2011). Apuntes de ecuaciones diferenciales II (EDPs). Madrid: Universidad Complutense de Madrid.
- Ávila, G. (2010). Obtención de alquenos aplicando los principios de la química verde. *scielo*, 183-188.
- Barrera, C. M. (28 de julio de 2015). Diseño, construcción y puesta en marcha de un reactor de lecho fijo en acero inoxidable para el craqueo catalítico de aceites lubricantes usados. Quito, Pichincha, Ecuador: Universidad San Francisco de Quito.
- Barriga, V. (2012). Sostenibilidad del plan Alcohol Etanol como carburante de la gasolina en el Ecuador.
- Bernal, C. (2010). Metodología de la investigación (Tercera ed.). Bogotá, Colombia: Pearson.
- Carrera, I., & Proaño, E. (2019). Estudio paramétrico y simulación de dinámica de fluidos computacionales (CFD) para el reactor de lecho empacado del laboratorio de termodinámica de la facultad de ingeniería química y agroindustria de la escuela politecnica nacional. Quito.
- Carvajal, L. (2006). Metodología de la Investigación Científica. Curso general y aplicado (28 ed.). Santiago de Cali: U.S.C.
- Constitución del Ecuador. (2008). Derechos del buen vivir.
- Corma, A. (2011). Catálisis con zeolitas: desde el laboratorio a su aplicación industrial. *ARBOR*, 84-111.
- Cortés, J. (2019). Solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales. Universidad Autónoma de México. México: Plataforma educativa para Análisis Numérico.
- Cruel Preciado, M., & Vernaza Arroyo, G. (2022). Uso de biocombustibles en Ecuador: Una mirada desde la protección de los derechos de la naturaleza. *Revista Venezolana de gerencia*, 477-491.
- Dixon, A., & Crewell, D. (1979). Theoretical prediction of effective heat transfer parameters in packed beds. *AIChE*, 663-676.
- FlexPDE. (Jueves de Enero de 2022). PDE Solutions Inc. Obtenido de <https://www.pdesolutions.com/>
- Frías, E. (2004). Aportaciones al estudio de las máquinas eléctricas de flujo axial mediante la aplicación del método de los elementos finitos. Barcelona: Universidad Politécnica de Catalunya.
- Guandinango, C. (2018). 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. Quito: Escuela Politécnica Nacional.

- Hackenberg, N. (2008). Biocombustible de segunda generación. Redesma.
- Hernandez Sampieri, R. (2014). Metodología de la investigación. En Metodología de la investigación (pag. 634). México: Mc Graw Hill.
- Hernández, J. (2001). Condiciones iniciales y de contorno. Madrid: Universidad Nacional de Educación a Distancia.
- Izquierdo, J. (2004). Cinéticas de las reacciones Químicas. Barcelona: Universitat de Barcelona.
- Kraus, R. (2000). Proceso de refino del petróleo. Enciclopedia de salud y seguridad en el trabajo.
- Kyle, B. (1984). Chemical and process thermodynamics. Nueva Jersey: PRENTICE-HALL, INC.
- Lara, L. (2019). El método de diferencias finitas. Teoría y Práctica. Trujillo: Universidad Privada Antenor Orrego.
- Mengual, J. (2010). Craqueo térmico y catalítico, con y sin vapor de agua, de alcanos sobre zeolitas. Cinética, desactivación y estabilización del catalizador. (Tesis doctoral). Valencia: Universidad de Valencia.
- Molina, C. (2015). Diseño, construcción y puesta en marcha de un reactor de lecho fijo en acero inoxidable para el craqueo catalítico de aceites lubricantes usados (Tesis de ingeniería). Quito: Universidad San Francisco de Quito.
- Moreno, J. (2007). Simulación de una Celda calorimétrica mediante Elementos Finitos. Información Tecnológica, 18, 25-35.
- Noorman, S. (2007). Packed Bed Reactor Technology for Chemical-Looping Combustion. 9.
- Orbezua, G. (2017). Producción de combustibles por oligomerización catalítica a presión atmosférica de olefinas de bajo interés. Leioa: Euskal Herriko Unibertsitatea.
- Peña, C., & Arango, R. (12 de diciembre de 2009). Evaluación de la producción de etanol utilizando cepas recombinantes de *Saccharomyces cerevisiae* a partir de caña de azúcar. Medellín. Recuperado el 10 de octubre de 2022, de http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0012-73532009000300016
- Pérez, J. (2016). Modelo de dispersión axial para sistemas de flujo continuo ajustado a las condiciones de borde. SciELO.
- Pimienta, J. (2017). Metodología de la investigación. En Metodología de la investigación (pág. 180). Madrid: Pearson.
- Ramos, C. (2020). Los alcances de una investigación. CienciaAmérica, 2.
- Saavedra, J. (2019). Oligomerization of ethanol-derived propene and isobutene mixtures to transportation fuels: catalyst and process considerations. Catalysis science & technology, 1063-1318.

- Santos. (2003). Morphological varieties of goethite in iron ores from Minas Gerais, Brazil. ELSEVIER, 1285-1289.
- Schulz, H. (1999). Short history and present trends of fischer-Tropsch synthesis. ScienceDirect, 186, 3-12.
- Taco Vásquez, S. (2013). Conversion of Isopropanol and Mixed Alcohols to Hydrocarbons Using HZSM-5 Catalyst in the MixAlco Process. AIChE, 9.
- Taco, S. (2006). Análisis termoquímicos de un lecho empacado por el método de los elementos finitos usando el programa FlexPDE5(Proyecto previo a la obtención del título de pregrado). Quito.
- Taco, S. (2022). Conversion of acetone and mixed ketones to hydrocarbons using HSZM-5 catalyst in the carboxylate platform. PLOS ONE.
- Taco, S. (2022). Conversion of acetone and mixed ketones to hydrocarbons using HZSM-5 catalyst in the carboxylate platform. PLOS ONE, 1-25.
- Taco, S. (2022). Thermochemical Analysis of a Packed-Bed Reactor Using Finite Elements with FlexPDE and COMSOL Multiphysics. processes, 15.
- Wade. (2011). Química Orgánica (séptima ed., Vol. 1). Naulcapan de Juárez, México: Pearson. Recuperado el noviembre de 2022
- Zill, D., & Cullen, M. (2008). Matemáticas Avanzadas para Ingeniería, Vol.1: Ecuaciones diferenciales (Tercera ed.). México: McGraw-Hill Interamericana.

7 ANEXOS

7.1 Anexo I. Símbolos y abreviaturas

L : longitud del reactor de lecho empacado

ϕ : Diámetro interno/externo

r : Radio

h : Altura

v : Velocidad

P_m : Peso molecular

ρ : Densidad

p : Presión

R : Constante de los gases ideales

T : Temperatura

$-(\Delta H)rv$: Generación del calor total por la reacción

Q : Caudal del flujo de las muestras

rv : Velocidad de reacción de las especies

λ_f : Conductividad térmica del fluido

ε_0 : Porosidad promedio

z' : Coordenada axial

x : Coordenada de la partícula

Re_p : Número de Reynolds

Pr : Número de Prandtl

Sch : Número de Schmidt

C_o : Concentración de la fase fluida

C_p : Capacidad calorífica

$\overline{C_p}$: Capacidad calorífica de la mezcla gaseosa

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

$Pe_{c_{hz}}$: Número de Peclet efectivo axial de calor en base a las dimensiones del reactor de lecho empacado

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

D_{cz} : Difusividad efectiva axial

ΔH : Calor de reacción

μ : viscosidad del gas

7.2 Anexo II. Cálculos del parámetro de diseño y números adimensionales

1. Dimensiones del reactor de lecho empacado del Laboratorio de Termodinámica

$$L = 35 \text{ cm}$$

$$\phi_{\text{interno}} = 2.30 \text{ cm}$$

$$\phi_{\text{externo}} = 2.51 \text{ cm}$$

2. Volumen del reactor de lecho empacado

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

$$V = \pi \left(\frac{0.023}{2} \right)^2 \cdot (0.35)$$

$$V = 1.45 \times 10^{-4} \text{ m}^3$$

3. Área transversal del reactor de lecho empacado

$$A = h \cdot \phi_{\text{interno}}$$

$$A = (0.3) \cdot (0.0230)$$

$$A = 8.05 \times 10^{-3} \text{ m}^2$$

4. Caudales muestra 1 (etanol)

$$Q_1 = 1.5 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$Q_2 = 2.5 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$$

5. Velocidad del caudal

$$v_1 = \frac{\text{Flujo}_1}{\text{Area}}$$

$$v_1 = \frac{\text{Flujo}_1}{\text{Area}}$$

$$v_1 = \frac{1.5 \times 10^{-8}}{8.05 \times 10^{-3}} \text{ m/s}$$

$$v_1 = 1.86 \times 10^{-6} \text{ m/s}$$

$$v_2 = 3.10 \times 10^{-6} \text{ m/s}$$

6. Diámetro de la partícula

$$\phi_{particula} = 1mm \cdot \frac{1 m}{1000 mm} = 0.001 m$$

7. Composición molar del etanol

Datos obtenidos por cromatografía:

X_{H_2O}	0.40
$X_{C_9H_{12}}$	0.25
$X_{C_8H_{10}}$	0.21
$X_{C_7H_8}$	0.14

$$\overline{PM} = X_{H_2O} PM_{H_2O} + X_{C_9H_{12}} PM_{C_9H_{12}} + X_{C_8H_{10}} PM_{C_8H_{10}} + X_{C_7H_8} PM_{C_7H_8}$$

$$\overline{PM} = (0.4 \cdot 18) + (0.25 \cdot 120) + (0.21 \cdot 106) + (0.14 \cdot 92)$$

$$\overline{PM} = 72.34 \frac{g}{mol}$$

8. Composición molar de la acetona

Datos obtenidos por cromatografía:

X_{H_2O}	0.31
$X_{C_7H_8}$	0.26
$X_{C_8H_{10}}$	0.24
$X_{C_9H_{12}}$	0.19

$$\overline{PM} = X_{H_2O} PM_{H_2O} + X_{C_7H_8} PM_{C_7H_8} + X_{C_8H_{10}} PM_{C_8H_{10}} + X_{C_9H_{12}} PM_{C_9H_{12}}$$

$$\overline{PM} = (0.31 \cdot 18) + (0.26 \cdot 92) + (0.24 \cdot 106) + (0.19 \cdot 106)$$

$$\overline{PM} = 75.08 \frac{g}{mol}$$

9. Densidad de la mezcla del etanol

$$\rho = \frac{P \cdot \overline{PM}}{R \cdot T}$$

$$\rho = \frac{0.71 \text{ atm} \cdot 72.34 \text{ g/mol}}{0.082 \text{ atm L/mol}^\circ\text{K} \cdot 630^\circ\text{K}}$$

$$\rho = 0.994 \text{ g/L}$$

$$\rho = 0.994 \text{ kg/m}^3$$

10. Densidad de la mezcla de la cetona

$$\rho = \frac{P \cdot \overline{PM}}{R \cdot T}$$

$$\rho = \frac{0.71 \text{ atm} \cdot 75.08 \text{ g/mol}}{0.082 \text{ atm L/mol}^\circ\text{K} \cdot 630^\circ\text{K}}$$

$$\rho = 1.031 \text{ g/L}$$

$$\rho = 1.031 \text{ kg/m}^3$$

11. Generación del calor total por la reacción etanol

$$-(\Delta H)rv = \frac{2.5 \times 10^{-8} \text{ m}^3}{\text{s}} \cdot \frac{1000 \text{ L}}{1 \text{ m}^3} \cdot \frac{0.994 \text{ g}}{\text{L}} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{72.34 \text{ g}} \cdot \frac{-463.355}{1 \text{ mol}} \cdot \frac{1000 \text{ J}}{1 \text{ kJ}} \cdot \frac{1}{0.6 \text{ Kg}}$$

$$-(\Delta H)rv = -0.15 \text{ W/kg catalizador}$$

12. Generación del calor total por la reacción acetona

$$-(\Delta H)rv = \frac{2.5 \times 10^{-8} \text{ m}^3}{\text{s}} \cdot \frac{1000 \text{ L}}{1 \text{ m}^3} \cdot \frac{0.994 \text{ g}}{\text{L}} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{72.34 \text{ g}} \cdot \frac{-104.894}{1 \text{ mol}} \cdot \frac{1000 \text{ J}}{1 \text{ kJ}} \cdot \frac{1}{0.6 \text{ Kg}}$$

$$-(\Delta H)rv = -0.034 \text{ W/kg catalizador}$$

13. Caudales muestra etanol

$$Q_1 = 1.5 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$Q_1 = 0.9 \text{ mL}/\text{min}$$

Caudal	[mL/min]
$Q \text{ H}_2\text{O}$	0.22
$Q \text{ C}_9\text{H}_{12}$	1.47
$Q \text{ C}_8\text{H}_{10}$	1.31
$Q \text{ C}_7\text{H}_8$	1.134

Cálculo para el C_7H_8 :

$$\rho = \frac{P \cdot \overline{PM}}{R \cdot T}$$

$$\rho = \frac{0.71 \text{ atm} \cdot 92 \text{ g/mol}}{0.082 \text{ atm L/mol}^\circ\text{K} \cdot 630^\circ\text{K}}$$

$$\rho = 1.26 \text{ g/L}$$

14. Caudales muestra cetona

$$Q_2 = 2.5 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$Q_2 = 1.5 \text{ mL}/\text{min}$$

Caudal	[mL/min]
$Q \text{ H}_2\text{O}$	0.36
$Q \text{ C}_7\text{H}_8$	1.89
$Q \text{ C}_8\text{H}_{10}$	2.175
$Q \text{ C}_9\text{H}_{12}$	2.46

15. Velocidad de reacción de las especies etanol

	$rv \left[\frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{kg cat}} \right]$
H₂O (4)	4.31×10^{-7}
C₉H₁₂ (3)	5.58×10^{-7}
C₈H₁₀ (2)	4.97×10^{-7}
C₇H₈ (1)	8.14×10^{-8}

Cálculo para el C₇H₈:

$$rv_{C_7H_8} = \frac{1.134 \text{ mL}}{\text{min}} \cdot \frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \cdot \frac{1 \text{ L}}{1000 \text{ mL}} \cdot \frac{1.26}{1 \text{ L}} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{92 \text{ g}} \cdot \frac{1}{0.6 \text{ Kg cat}}$$

$$rv_{C_7H_8} = \frac{4.31 \times 10^{-7}}{\text{s} \cdot \text{kg cat}}$$

16. Velocidad de reacción de las especies cetona

	$rv \left[\frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{kg cat}} \right]$
H₂O (4)	1.33×10^{-7}
C₇H₈ (3)	7.19×10^{-7}
C₈H₁₀ (2)	8.26×10^{-7}
C₉H₁₂ (1)	9.33×10^{-7}

17. Conductividad térmica del etanol (λ_f)

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

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

	$\lambda_f [W/m \cdot K]$
H₂O	0.437

C_9H_{12}	0.062
C_8H_{10}	0.0521
C_7H_8	0.051

$$\phi_{12} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{92}{106}\right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{2.23 \times 10^{-8}}{1.34 \times 10^{-8}}\right)^2 \left(\frac{106}{92}\right)^{1/4}\right]^2$$

$$\phi_{12} = 4.07$$

$$\phi_{21} = \frac{1.34 \times 10^{-8}}{2.23 \times 10^{-8}} \cdot \frac{92}{106} \cdot 4.07$$

$$\phi_{21} = 2.12$$

ϕ_{12}	4.13
ϕ_{21}	2.12
ϕ_{13}	3.29
ϕ_{31}	1.64
ϕ_{14}	1
ϕ_{41}	3.25
ϕ_{23}	1.03
ϕ_{32}	0.98
ϕ_{24}	0.35
ϕ_{42}	2.18
ϕ_{34}	0.34
ϕ_{43}	2.22

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

$$\lambda_f = \frac{0.14 \cdot 0.051}{0.14 + 0.21 \cdot 4.13 + 0.25 \cdot 3.29 + 0.4 \cdot 1} + \frac{0.21 \cdot 0.0521}{0.21 + 0.14 \cdot 2.12 + 0.25 \cdot 1.03 + 0.4 \cdot 0.35} + \frac{0.25 \cdot 0.062}{0.25 + 0.14 \cdot 1.64 + 0.21 \cdot 0.98 + 0.4 \cdot 0.34} + \frac{0.4 \cdot 0.437}{0.4 + 0.051 \cdot 3.25 + 0.21 \cdot 2.18 + 0.25 \cdot 2.22}$$

$$\lambda_f = 0.422 \text{ W/m}^\circ\text{K}$$

$$K = \frac{\lambda_{\text{conductividad term. lecho empacado}}}{\lambda_f}$$

$$K = \frac{0.1}{0.422}$$

$$K = 0.237$$

$$B = Cf \left(\frac{1 - 0.66}{0.66} \right)$$

$$B = 1.25 \left(\frac{1 - 0.66}{0.66} \right)$$

$$B = 0.643$$

18. Conductividad térmica de la cetona (λ_f)

	$\lambda_f [W/m \cdot K]$
H₂O (4)	0.437
C₇H₈ (3)	0.051
C₈H₁₀ (2)	0.0521
C₉H₁₂ (1)	0.062

\emptyset_{12}	1.33
\emptyset_{21}	1.63
\emptyset_{13}	0.52
\emptyset_{31}	0.44
\emptyset_{14}	0.19
\emptyset_{41}	1.29
\emptyset_{23}	0.80

ϕ_{32}	0.55
ϕ_{24}	0.26
ϕ_{42}	1.44
ϕ_{34}	0.31
ϕ_{43}	2.48

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

$$\lambda_f = \frac{0.19 \cdot 0.062}{0.19 + 0.24 \cdot 1.33 + 0.26 \cdot 0.52 + 0.31 \cdot 0.19} + \frac{0.24 \cdot 0.0521}{0.24 + 0.19 \cdot 1.63 + 0.26 \cdot 0.80 + 0.437 \cdot 0.26} + \frac{0.26 \cdot 0.051}{0.26 + 0.19 \cdot 0.44 + 0.24 \cdot 0.55 + 0.31 \cdot 0.31} + \frac{0.31 \cdot 0.437}{0.31 + 0.19 \cdot 1.29 + 0.24 \cdot 1.44 + 0.26 \cdot 2.48}$$

$$\lambda_f = 0,142 \text{ W/m}^\circ\text{K}$$

$$K = \frac{\lambda_{\text{conductividad term.lecho empacado}}}{\lambda_f}$$

$$K = \frac{0.1}{0.142}$$

$$K = 0.71$$

$$B = Cf \left(\frac{1 - 0.66}{0.66} \right)$$

$$B = 1,25 \left(\frac{1 - 0.66}{0.66} \right)$$

$$B = 0.643$$

19. Catalizador- zeolita HZSM-5 utilizado para las muestras de etanol y cetona

$$\tau = 1000 \text{ kg}/\text{m}^3$$

$$\varepsilon_0 = \frac{\tau_i - \tau_f}{\tau_i}$$

$$\varepsilon_0 = \frac{1000 - 338.983}{1000}$$

$$\varepsilon_0 = 0.66$$

20. Conductividad térmica estándar del etanol

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

$$\lambda_r = (\sqrt{1 - 0.66} - 1)$$

$$- \frac{2\sqrt{1 - 0.66}}{1 - 0.643 \cdot 0.237^{-1}} \left[\frac{0.643(1 - 0.237^{-1})}{1 - 0.643 \cdot 0.237^{-1}} \cdot \ln\left(\frac{0.237}{0.6430}\right) - \frac{0.643 - 1}{1 - 0.643 \cdot 0.237^{-1}} - \frac{0.643 + 1}{2} \right]$$

$$\lambda_r = 1.092 \text{ W}/\text{m}^\circ\text{K}$$

21. Conductividad térmica estándar de la cetona

$$\lambda_r = (\sqrt{1 - 0.66} - 1)$$

$$- \frac{2\sqrt{1 - 0.66}}{1 - 0.643 \cdot 0.71^{-1}} \left[\frac{0.643(1 - 0.71^{-1})}{1 - 0.643 \cdot 0.71^{-1}} \cdot \ln\left(\frac{0.71}{0.6430}\right) - \frac{0.643 - 1}{1 - 0.643 \cdot 0.71^{-1}} - \frac{0.643 + 1}{2} \right]$$

$$\lambda_r = -33.61 \text{ W}/\text{m}^\circ\text{K}$$

22. Número de Reynolds etanol

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

$$Re_p = \frac{0.994 \frac{kg}{m^3} \cdot 1.86 \times 10^{-6} \frac{m}{s} \cdot 0.0001 m}{1.44 \times 10^{-8} \frac{kg}{m \cdot s}}$$

$$Re_p = 0.013$$

23. Número de Reynolds cetona

$$Re_p = \frac{1.03 \frac{kg}{m^3} \cdot 3.10 \times 10^{-6} \frac{m}{s} \cdot 0.0001 m}{1.39 \times 10^{-8} \frac{kg}{m \cdot s}}$$

$$Re_p = 0.023$$

24. Número de Prandt etanol

$$Pr = \frac{\bar{C}_p \bar{\mu}}{\lambda_f}$$

$$Pr = \frac{2275.51 \frac{J}{Kg^{\circ}K} \cdot 1.44 \times 10^{-8} \frac{Kg}{m \cdot s}}{0.422 \frac{W}{m^{\circ}K}}$$

$$Pr = 7.76 \times 10^{-5}$$

25. Número de Prandt cetona

$$Pr = \frac{2325.41 \frac{J}{Kg^{\circ}K} \cdot 1.39 \times 10^{-8} \frac{Kg}{m \cdot s}}{0.142 \frac{W}{m^{\circ}K}}$$

$$Pr = 2.27 \times 10^{-4}$$

26. Numero de Peclet axial de calor en base del diámetro de partícula (etanol)

$$Pe_{hz} = \frac{dp \rho v}{\lambda_f}$$

$$Pe_{hz} = \frac{0.001 \text{ m} \cdot 2275.51 \text{ J/Kg}^\circ\text{K} \cdot 0.994 \text{ Kg/m}^3 \cdot 1.86 \times 10^{-6} \text{ m/s}}{\lambda_{cz} \text{ W/m}^\circ\text{K}}$$

$$Pe_{hz} = \frac{4.36 \times 10^{-6}}{\lambda_{cz}}$$

$$\frac{1}{Pe_{hz}} = \frac{\lambda_r / \lambda_{cr}}{Re_p \cdot Pr} + 0.7$$

$$\frac{1}{\frac{4.36 \times 10^{-6}}{\lambda_{cz}}} = \frac{1.092 / 0.422}{0.013 \cdot 7.76 \times 10^{-5}} + 0.7$$

$$\lambda_{cz} = 0.089 \text{ W/m K}$$

27. Numero de Peclet axial de calor en base del diámetro de partícula (cetona)

$$Pec_{hz} = \frac{dp \rho v}{\lambda_f}$$

$$Pe_{hz} = \frac{0.001 \text{ m} \cdot 2325.41 \text{ J/Kg}^\circ\text{K} \cdot 1.031 \text{ Kg/m}^3 \cdot 3.10 \times 10^{-6} \text{ m/s}}{\lambda_{cz} \text{ W/m}^\circ\text{K}}$$

$$Pe_{hz} = \frac{7.43 \times 10^{-6}}{\lambda_{cz}}$$

$$\frac{1}{Pe_{hz}} = \frac{\lambda_r / \lambda_{cr}}{Re_p \cdot Pr} + 0.7$$

$$\frac{1}{\frac{7.43 \times 10^{-6}}{\lambda_{cz}}} = \frac{-33.61 / 0.142}{0.023 \cdot 2.27 \times 10^{-4}} + 0.7$$

$$\lambda_{cz} = -336.83 \text{ W/m K}$$

28. Numero de Peclet axial de calor en base a las dimensiones del lecho empacado (etanol)

$$Pe_{hz} = \frac{L \rho \overline{C_p} v}{\lambda_{cz}}$$

$$Pe_{hz} = \frac{0.34 \text{ m} \cdot 0.994 \text{ Kg}/\text{m}^3 \cdot 2275.51 \frac{\text{J}}{\text{Kg}^\circ\text{K}} \cdot 1.86 \times 10^{-6} \text{ m}/\text{s}}{0.089 \text{ W}/\text{m K}}$$

$$Pe_{hz} = 0.016$$

$$\frac{1}{Pe_{hz}} = 62.5$$

29. Numero de Peclet axial de calor en base a las dimensiones del lecho empacado (cetona)

$$Pec_{hz} = \frac{0.34 \text{ m} \cdot 1.031 \text{ Kg}/\text{m}^3 \cdot 2325.41 \frac{\text{J}}{\text{Kg}^\circ\text{K}} \cdot 3.10 \times 10^{-6} \text{ m}/\text{s}}{-336.83 \text{ W}/\text{m K}}$$

$$Pe_{hz} = -7.5 \times 10^{-6}$$

$$\frac{1}{Pe_{hz}} = -133333.33$$

30. Número de Schmidt etanol

	m^2/s
H₂O	0.018
C₉H₁₂	1.62×10^{-3}
C₈H₁₀	1.98×10^{-3}
C₇H₈	2.23×10^{-3}

Ejemplo para la obtención del **C₇H₈**:

$$Sch_{C_7H_8} = \frac{\mu_{C_7H_8}}{\rho_{C_7H_8} \cdot Dm}$$

$$Sch_{C_7H_8} = \frac{1.42 \times 10^{-8}}{1.26 \cdot 5.05 \times 10^{-6}}$$

$$Sc_{C_7H_8} = 2.23 \times 10^{-3}$$

31. Número de Schmidt cetona

	m^2/s
H₂O	0.018
C₇H₈	2.23×10^{-3}
C₈H₁₀	1.98×10^{-3}
C₉H₁₂	1.62×10^{-3}

32. Numero de Peclet axial de masa en base del diámetro de partícula

$$Pe_{mz} = \frac{dp \ v}{D_{cz}} = \frac{0.001 \ m \cdot 1.86 \times 10^{-6}}{D_{cz}}$$

$$Pe_{mz} = \frac{1.86 \times 10^{-9}}{D_{cz}}$$

$$\frac{1}{1.86 \times 10^{-9}} = \frac{1 - \sqrt{1 - 0.66}}{0.000085 \cdot 2.23 \times 10^{-3}} + \frac{1}{2}$$

$$D_{cz} = 4.09 \times 10^{-3} \ m^2/s$$

33. Concentración molar de especies etanol

	mol/m^3
H₂O	3.26
C₉H₁₂	22.36
C₈H₁₀	19.94
C₇H₈	17.29

$$C_{o\ C_7H_8} = \frac{1.134\ mL}{min} \cdot \frac{1.26\ g}{L} \cdot \frac{1\ L}{1000\ mL} \cdot \frac{1\ mol}{92\ g} \cdot \frac{1\ s}{1.86 \times 10^{-6}\ m} \cdot \frac{1}{8.05 \times 10^{-3}} \cdot \frac{1\ min}{60\ s}$$

$$C_{o\ C_7H_8} = 17.29\ mol/m^3$$

34. Concentración molar de especies cetona

	mol/m^3
H_2O	3.20
C_7H_8	17.28
C_8H_{10}	19.87
C_9H_{12}	22.45

7.3 Anexo III. Resolución de ecuaciones y obtención de parámetros del diseño matemático

1. Peso molecular de la mezcla gaseosa del etanol

$$\overline{PM} = X_{H_2O} PM_{H_2O} + X_{C_9H_{12}} PM_{C_9H_{12}} + X_{C_8H_{10}} PM_{C_8H_{10}} + X_{C_7H_8} PM_{C_7H_8}$$

$$\overline{PM} = (0.4 \cdot 18) + (0.25 \cdot 120) + (0.21 \cdot 106) + (0.14 \cdot 92)$$

$$\overline{PM} = 72.34 \frac{g}{mol}$$

2. Peso molecular de la mezcla gaseosa de la acetona

$$\overline{PM} = X_{H_2O} PM_{H_2O} + X_{C_7H_8} PM_{C_7H_8} + X_{C_8H_{10}} PM_{C_8H_{10}} + X_{C_9H_{12}} PM_{C_9H_{12}}$$

$$\overline{PM} = (0.31 \cdot 18) + (0.26 \cdot 92) + (0.24 \cdot 106) + (0.19 \cdot 106)$$

$$\overline{PM} = 75.08 \frac{g}{mol}$$

3. Capacidad calorífica de gases ideales a partir de etanol y cetona

$$C_p = C_1 + C_2 \left[\frac{\frac{C_3}{T}}{\sinh\left(\frac{C_3}{T}\right)} \right]^2 + C_4 \left[\frac{\frac{C_5}{T}}{\sinh\left(\frac{C_5}{T}\right)} \right]^2$$

$$\frac{C_p^{ig}}{R} = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4$$

Datos etanol

	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
H_2O	4.40	-0.00418	1.41E-05	1.6E-08	6.32E-12
C_9H_{12}	2.99	0.034196	0.000119	2E-07	8.92E-11
C_8H_{10}	4.00	0.017537	0.000106	1.5E-07	6.01E-11
C_7H_8	3.87	0.003558	0.000134	1.9E-07	7.69E-11

Ejemplo de obtención para el C_9H_{12}

$$Cp_{H_2O} = 4.40 + (-0.00418 \cdot 600) + (1.41 \times 10^{-5} \cdot 600^2) + (-1,6 \times 10^{-8} \cdot 600^3) + (6,32 \times 10^{-12} \cdot 600^4)$$

$$Cp_{C_9H_{12}} = 4.42 \cdot 8.314 \left[\frac{J}{mol \cdot ^\circ K} \right]$$

$$Cp_{C_9H_{12}} = 36756 \left[\frac{J}{mol \cdot ^\circ K} \right]$$

	$Cp \left[\frac{J}{Kg \cdot ^\circ K} \right]$
H_2O	2042
C_9H_{12}	2464.91
C_8H_{10}	2270.38
C_7H_8	2612.17

Datos cetona

	$a0$	$a1$	$a2$	$a3$	$a4$
H_2O	4.40	-0.00418	1.41E-05	-	1.6E-08 6.32E-12
C_7H_8	3.87	0.003558	0.000134	-	1.9E-07 7.69E-11
C_8H_{10}	4.00	0.017537	0.000106	-	1.5E-07 6.01E-11
C_9H_{12}	2.99	0.034196	0.000119	-	2E-07 8.92E-11

	$Cp \left[\frac{J}{Kg \cdot ^\circ K} \right]$
H_2O	2042
C_7H_8	2612.17

C_8H_{10}	2270.38
C_9H_{12}	2464.91

4. Capacidad calórica de la mezcla gaseosa del etanol

$$\overline{Cp} = X_{H_2O} Cp_{H_2O} + X_{C_9H_{12}} Cp_{C_9H_{12}} + X_{C_8H_{10}} Cp_{C_8H_{10}} + X_{C_7H_8} Cp_{C_7H_8}$$

$$\overline{Cp} = (0.4 \cdot 2042) + (0.25 \cdot 2464.91) + (0.21 \cdot 2270.38) + (0.14 \cdot 2612.17)$$

$$\overline{Cp} = 2275.51$$

5. Capacidad calórica de la mezcla gaseosa de la acetona

$$\overline{Cp} = X_{H_2O} Cp_{H_2O} + X_{C_7H_8} Cp_{C_7H_8} + X_{C_8H_{10}} Cp_{C_8H_{10}} + X_{C_9H_{12}} Cp_{C_9H_{12}}$$

$$\overline{Cp} = (0.31 \cdot 2042) + (0.26 \cdot 2612.17) + (0.24 \cdot 2270.38) + (0.19 \cdot 2464.91)$$

$$\overline{Cp} = 2325.41$$

6. Viscosidad de la mezcla gaseosa del etanol

Datos de la viscosidad del gas puro:

	$\mu \left[\frac{N \cdot s}{m^2} \right]$
H_2O	2.23×10^{-8}
C_9H_{12}	1.34×10^{-8}
C_8H_{10}	1.45×10^{-8}
C_7H_8	1.42×10^{-8}

$$\frac{\overline{PM}}{\overline{\mu}} = \frac{X_{H_2O} PM_{H_2O}}{\mu_{H_2O}} + \frac{X_{C_9H_{12}} PM_{C_9H_{12}}}{\mu_{C_9H_{12}}} + \frac{X_{C_8H_{10}} PM_{C_8H_{10}}}{\mu_{C_8H_{10}}} + \frac{X_{C_7H_8} PM_{C_7H_8}}{\mu_{C_7H_8}}$$

$$\frac{72.34}{\overline{\mu}} = \frac{(0.4 \cdot 18)}{2.23 \times 10^{-8}} + \frac{(0.25 \cdot 120)}{1.34 \times 10^{-8}} + \frac{(0.21 \cdot 106)}{1.45 \times 10^{-8}} + \frac{(0.14 \cdot 92)}{1.42 \times 10^{-8}}$$

$$\overline{\mu} = 1.44 \times 10^{-8}$$

7. Viscosidad de la mezcla gaseosa de la cetona

Datos de la viscosidad del gas puro:

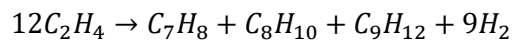
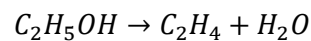
	$\mu \left[\frac{N \cdot s}{m^2} \right]$
H_2O	2.23×10^{-8}
C_7H_8	1.42×10^{-8}
C_8H_{10}	1.45×10^{-8}
C_9H_{12}	1.34×10^{-8}

$$\frac{\overline{PM}}{\bar{\mu}} = \frac{X_{H_2O} PM_{H_2O}}{\mu_{H_2O}} + \frac{X_{C_7H_8} PM_{C_7H_8}}{\mu_{C_7H_8}} + \frac{X_{C_8H_{10}} PM_{C_8H_{10}}}{\mu_{C_8H_{10}}} + \frac{X_{C_9H_{12}} PM_{C_9H_{12}}}{\mu_{C_9H_{12}}}$$

$$\frac{75.08}{\bar{\mu}} = \frac{(0.31 \cdot 18)}{2.23 \times 10^{-8}} + \frac{(0.26 \cdot 92)}{1.34 \times 10^{-8}} + \frac{(0.24 \cdot 106)}{1.45 \times 10^{-8}} + \frac{(0.19 \cdot 120)}{1.42 \times 10^{-8}}$$

$$\bar{\mu} = 1.39 \times 10^{-8} \left[\frac{N \cdot s}{m^2} \right]$$

8. Calor de reacción del etanol



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

$$\Delta H_1 = 47.325 \left[\frac{kJ}{mol} \right]$$

$$\Delta H_2 = -510.168 \left[\frac{kJ}{mol} \right]$$

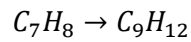
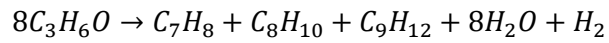
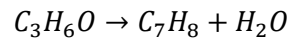
Calor de reacción total

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

$$\Delta H = 47.325 - 510.168$$

$$\Delta H = -463.355 \left[\frac{KJ}{mol} \right]$$

9. Calor de reacción de la acetona



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

$$\Delta H_1 = -104.894 \left[\frac{kJ}{mol} \right]$$

Calor de reacción total

$$\Delta H = \Delta H_1$$

$$\Delta H = -104.894$$

$$\Delta H_1 = -104.894 \left[\frac{KJ}{mol} \right]$$

7.4 Anexo IV. Programación y Resolución en FlexPDE

1. Modelo Unidimensional Estacionario Flujo 1

TITLE 'Modelo Homogéneo Unidimensional estacionario de la Muestra de Etanol'
{título 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) {concentración de C7H8 adimensional}

y2(threshold=1) {concentración de C8H10 adimensional}

y3(threshold=1) {concentración de C9H12 adimensional}

y4(threshold=1) {concentración de H2O adimensional}

select

painted {para que las figures salgan a colores}

definitions

z1=1

r1=1

{Parámetros de 1/Peclet Normalizados}

max1= 4222011.36{1/Pe´mz para el C7H8}

max2=9781.97 {1/Pe´mz para el C8H10}

max3=1424.73{1/Pe´mz para el C9H12}

max4=654.65{1/Pe´mz para el H2O}

qax=62.5{(1/Pe´hz)}

df=0.994{densidad del fluido}

cpf= 36756{capacidad calórica del fluido}

vo= 0.00000310 {velocidad del fluido}

{Parámetros de la reacción y velocidad de la reacción}

$T_i=623$ {temperatura inicial}

$cony1=(1-y1) *100$ {conversión de C7H8}

$cony2=(1-y2) *100$ {conversión de C8H10}

$cony3=(1-y3) *100$ {conversión de C9H12}

$cony4=(1-y4) *100$ {conversión de H2O}

$Concy1=y1*17.29$ {concentración de C7H8}

$Concy2=y2*19.94$ {concentración de C8H10}

$Concy3=y3*22.36$ {concentración de C9H12}

$Concy4=y4*3.26$ {concentración de H2O}

$tempt=temp*T_i$

Initial values {Valores Iniciales de las Variables}

$Temp = 1$ {Valor Inicial de la Temperatura}

$y1= 0$ {Valor Inicial del C7H8}

$y2= 0$ {Valor Inicial del C4H8}

$y3=0$ {Valor Inicial del C9H12}

$y4=0$ {Valor Inicial del H2O}

equations

$Temp: 0= -dx(temp)+qax*dxx(temp)-0.019$ {EDP de la Temperatura}

$y1: 0= dx(y1) +max1*dxx(y1) +0.30$ {EDP del C7H8}

$y2: 0 = dx(y2) +max2*dxx(y2) +1.59$ {EDP del C8H10}

$y3: 0 = dx(y3) +max3*dxx(y3)+1.60$ {EDP del C9H12 }

$y4: 0 = dx(y4) +max4*dxx(y4) +8.43$ {EDP del H2O}

Boundaries {Definición del Dominio y Condiciones de Borde}

region 1start 'RUN' (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 C7H8 }

```

natural(y2) = 0{condición de borde natural o de Dirichlet para el C8H10}
natural(y3) = 0{condición de borde natural o de Dirichlet para el C9H12}
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 C7H8}
natural(y2)=1/max2*(y2) { condición de borde natural o de Dirichlet para el
C8H10}
natural(y3)=1/max3*(y3) { condición de borde natural o de Dirichlet para el
C9H12}
natural(y4)=1/max4*(y4) { condición de borde natural o de Dirichlet para el H2O}
line to (0,0) to close plots {Salidas Graphics}
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
surface (concy1)
contour(tempt)as " Temperatura K."
contour(concy1) as " Concentración de C7H8mol/m3"
contour(concy2) as " Concentración de C8H10mol/m3"
contour(concy3)as "Concentración de C9H12mol/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*17.28*dx(y1),0) as "Flujo Másico C7H8 mol/m2s"

```

```

vector(max2*vo*19.87*dx(y2),0) as "Flujo Másico C8H10 mol/m2s"
vector(max3*vo*22.45*dx(y3),0) as "Flujo Másico C9H12 mol/m2s"
vector(max4*vo*3.20*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 C7H8 mol/m3"
elevation(concy2) from(0,0) to(z1,0) as "Concentración de C8H10 mol/m3"
elevation(concy3) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de C9H12 mol/m3"
elevation(concy4) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de H2O mol/m3"

plots

END

```

2. Modelo Unidimensional Estacionario Flujo 2

TITLE 'Modelo Homogéneo Unidimensional estacionario de la Muestra de Cetona'
{título 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) {concentración de C7H8adimensional}

y2(threshold=1) {concentración de C8H10 adimensional}

y3(threshold=1) {concentración de C9H12 adimensional}

y4(threshold=1) {concentración de H2O adimensional}

select

painted {para que las figures salgan a colores}

definitions

z1=1

r1=1

{Parámetros de 1/Peclet Normalizados}

$\text{max1} = 761.86 \{1/\text{Pe}'\text{mz para el C7H8}\}$
 $\text{max2} = 977.23 \{1/\text{Pe}'\text{mz para el C8H10}\}$
 $\text{max3} = 1413.66 \{1/\text{Pe}'\text{mz para el C9H12}\}$
 $\text{max4} = 654.64 \{1/\text{Pe}'\text{mz para el H2O}\}$
 $\text{qax} = -133333.33 \{(1/\text{Pe}'\text{hz})\}$
 $\text{df} = 1.031 \{\text{densidad del fluido}\}$
 $\text{cpf} = 2325.41 \{\text{capacidad calórica del fluido}\}$
 $\text{vo} = 0.00000310 \{\text{velocidad del fluido}\}$
 {Parámetros de la reacción y velocidad de la reacción}
 $\text{Ti} = 623 \{\text{temperatura inicial}\}$
 $\text{cony1} = (1 - y1) * 100 \{\text{conversión de C7H8}\}$
 $\text{cony2} = (1 - y2) * 100 \{\text{conversión de C8H10}\}$
 $\text{cony3} = (1 - y3) * 100 \{\text{conversión de C9H12}\}$
 $\text{cony4} = (1 - y4) * 100 \{\text{conversión de H2O}\}$
 $\text{Concy1} = y1 * 17.28 \{\text{concentración de C7H8}\}$
 $\text{Concy2} = y2 * 19.87 \{\text{concentración de C8H10}\}$
 $\text{Concy3} = y3 * 22.45 \{\text{concentración de C9H12}\}$
 $\text{Concy4} = y4 * 3.20 \{\text{concentración de H2O}\}$
 $\text{tempt} = \text{temp} * \text{Ti}$
 Initial values {Valores Iniciales de las Variables}
 $\text{Temp} = 1 \{\text{Valor Inicial de la Temperatura}\}$
 $y1 = 0 \{\text{Valor Inicial del C7H8}\}$
 $y2 = 0 \{\text{Valor Inicial del C4H8}\}$
 $y3 = 0 \{\text{Valor Inicial del C9H12}\}$
 $y4 = 0 \{\text{Valor Inicial del H2O}\}$
 equations

Temp: $0 = -dx(\text{temp}) + qax * dxx(\text{temp}) - 0.00254$ {EDP de la Temperatura}

y1: $0 = dx(y1) + max1 * dxx(y1) + 1.59$ {EDP del C7H8}

y2: $0 = dx(y2) + max2 * dxx(y2) + 1.59$ {EDP del C8H10 }

y3: $0 = dx(y3) + max3 * dxx(y3) + 1.59$ {EDP del C9H12 }

y4: $0 = dx(y4) + max4 * dxx(y4) + 1.59$ {EDP del H2O}

Boundaries {Definición del Dominio y Condiciones de Borde}

region 1start 'RUN' (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 C7H8}

natural(y2) = 0 {condición de borde natural o de Dirichlet para el C8H10}

natural(y3) = 0 {condición de borde natural o de Dirichlet para el C9H12}

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 (Ttemp) = $1/qax * (\text{temp} - 1)$ { condición de borde natural o de Dirichlet para la temperatura}

natural(y1) = $1/max1 * (y1)$ {condición de borde natural o de Dirichlet para el C7H8}

natural(y2) = $1/max2 * (y2)$ {condición de borde natural o de Dirichlet para el C8H10}

natural(y3) = $1/max3 * (y3)$ {condición de borde natural o de Dirichlet para el C9H12}

natural(y4) = $1/max4 * (y4)$ {condición de borde natural o de Dirichlet para el H2O}

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

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 C7H8mol/m3"
contour(concy2) as " Concentración de C8H10mol/m3"
contour(concy3) as "Concentración de C9H12mol/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*17.28*dx(y1),0) as "Flujo Másico C7H8 mol/m2s"
vector(max2*vo*19.87*dx(y2),0) as "Flujo Másico C8H10 mol/m2s"
vector(max3*vo*22.45*dx(y3),0) as "Flujo Másico C9H12 mol/m2s"
vector(max4*vo*3.20*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 C7H8 mol/m3"
elevation(concy2) from(0,0) to(z1,0) as "Concentración de C8H10 mol/m3"
elevation(concy3) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de C9H12 mol/m3"
elevation(concy4) from(0,0) to(z1,0) as " Concentración de H2O mol/m3"
plots
END

```

7.5 Anexo V. Resultados de la cromatografía de la biogasolina de etanol y acetona

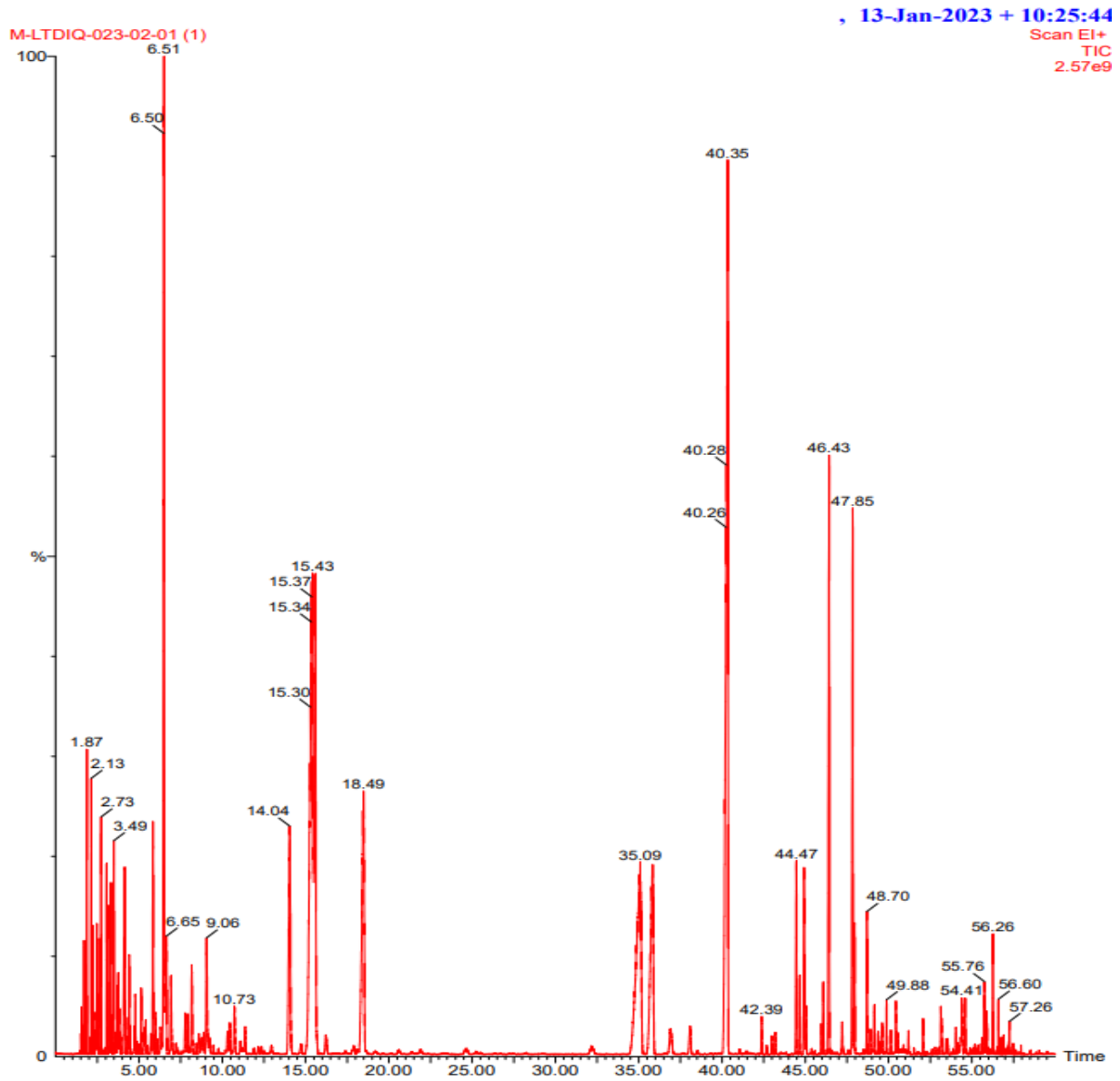


Figura 30. Cromatograma del etanol

I	Pk #	RT	Hit	Compound Name	Match	R.Match	Concentración.
1	65	40.345	1	Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	908	909	14.138
2	57	15.43	1	Benzene, 1,3-dimethyl-	926	927	11.905
3	37	6.506	1	Toluene	927	927	7.785
4	61	35.093	1	Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	891	892	7.613
5	58	15.595	1	o-Xylene	909	910	6.251
6	60	18.486	1	Benzene, 1,3-dimethyl-	922	923	5.156
7	62	35.838	1	Benzene, (1-methylethyl)-	892	938	4.553
8	75	46.433	1	o-Cymene	900	914	4.109
9	77	47.848	1	1,3-Cyclopentadiene, 1,2,3,4-tetramethyl-5-methylene-		910	3.882
10	55	14.044	1	Ethylbenzene	919	927	3.473
11	69	44.472	1	Benzene, 1,3-diethyl-	899	900	1.411
12	71	44.932	1	Benzene, 1,3-diethyl-	873	875	1.285
13	34	5.841	1	Cyclobutane, (1-methylethylidene)-	879	880	1.276
14	48	9.057	1	Cyclopentene, 1,2,3-trimethyl-	892	893	1.113
15	38	6.651	1	Cyclohexene, 3-methyl-	886	893	0.921
16	17	3.49	1	Hexane, 3-methyl-	831	835	0.832
17	79	48.704	1	2,4-Dimethylstyrene	830	852	0.82
18	23	4.14	1	1,4-Pentadiene, 3,3-dimethyl-	779	812	0.814
19	13	2.735	1	Cyclopentane, methyl-	898	900	0.742
20	78	47.958	1	Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	904	906	0.709
21	6	2.134	1	Pentane, 2-methyl-	838	846	0.68
22	43	8.167	1	Bicyclo[3.1.0]hexane, 1,5-dimethyl-	822	832	0.675
23	5	1.869	1	2-Butene, 2-methyl-	919	921	0.628
24	14	3.055	1	Cyclopentene, 1-methyl-	909	911	0.6
25	39	6.926	1	Heptane, 3-methyl-	857	863	0.591
26	16	3.315	1	Hexane, 2-methyl-	832	869	0.557
27	70	44.667	1	Benzene, 1-methyl-3-propyl-	842	845	0.541
28	63	36.894	1	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	822	826	0.53
29	22	4.09	1	3,5-Dimethylcyclopentene	857	866	0.515
30	74	46.082	1	o-Cymene	862	894	0.474
31	15	3.215	1	Benzene	941	944	0.458
32	26	4.42	1	1,4-Pentadiene, 3,3-dimethyl-	810	832	0.455
33	52	10.728	1	Cyclohexene, 1,4-dimethyl-	819	831	0.432
34	99	56.262	1	epoxy-1,1,1,7,7,7-hexamethyl-3,5,5-tris(trimethylsiloxy)tetrasiloxane		708	0.419
35	64	38.089	1	Benzene, (1-methylethyl)-	805	832	0.399
36	81	49.159	1	Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	832	851	0.371
37	42	7.912	1	Cyclopentane, 1-ethyl-3-methyl-	870	870	0.356
38	10	2.469	1	2-Pentene, 2-methyl-	885	885	0.341
39	95	54.406	1	1-Phthalalane, 1,3,3-trimethyl-	496	675	0.328
40	29	5.135	1	Cyclopentane, ethyl-	859	869	0.321
41	20	3.76	1	Cyclopentane, 1,2-dimethyl-	812	839	0.293
42	97	55.761	1	Naphthalene, 1,6-dimethyl-	867	871	0.289
43	12	2.619	1	2-Pentene, 3-methyl-	871	871	0.285
44	66	42.386	1	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	825	825	0.282
45	28	4.78	1	Cyclohexane, methyl-	803	812	0.27
46	59	16.21	1	2-Decene, 5-methyl-, (Z)-	644	690	0.267
47	7	2.249	1	Pentane, 3-methyl-	868	873	0.266
48	41	7.777	1	Cyclopentane, 1-ethyl-3-methyl-	879	879	0.263
49	72	45.057	1	Benzene, 1-ethyl-2,3-dimethyl-	840	846	0.262
50	84	49.884	1	Benzene, 1,4-diethyl-2-methyl-	834	843	0.261
51	76	47.223	1	p-Cymene	732	748	0.259
52	54	11.383	1	1-Ethyl-5-methylcyclopentene	746	769	0.258
53	51	10.448	1	trans-3,5-Dimethylcyclohexene	798	814	0.255
54	35	5.991	1	1-Ethylcyclopentene	803	822	0.253
55	86	50.444	1	2,2-Dimethylindene, 2,3-dihydro-	868	898	0.248
56	90	53.135	1	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-6-methyl-	828	833	0.242
57	19	3.69	1	Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, cis-	820	837	0.228
58	2	1.704	1	Butane, 2-methyl-	877	884	0.206
59	45	8.592	1	3-Heptyne, 5-methyl-	753	893	0.195
60	89	52.08	1	2-Ethyl-2,3-dihydro-1H-indene	754	761	0.195
61	96	54.601	1	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2,6-dimethyl-	825	830	0.193
62	3	1.774	1	2-Methyl-1-butene	897	909	0.191
63	83	49.619	1	Benzene, 1-ethyl-3-(1-methylethyl)-	821	824	0.185
64	91	53.175	1	2,2-Dimethylindene, 2,3-dihydro-	830	857	0.176
65	11	2.504	1	2-Pentene, 3-methyl-, (Z)-	893	893	0.175
66	100	56.602	1	Naphthalene, 2-(1-methylethyl)-	845	855	0.175
67	21	3.825	1	Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, trans-	855	855	0.171
68	73	45.967	1	Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	787	795	0.169
69	50	10.318	1	Bicyclo[3.1.0]hexane, 1,5-dimethyl-	759	759	0.168
70	32	5.406	1	Cyclopentane, 1,2,4-trimethyl-	838	857	0.165
71	68	43.206	1	Tetracyclo[3.3.1.0(2,8).0(4,6)]-non-2-ene	785	798	0.159
72	93	54.046	1	Naphthalene, 2-methyl-	822	835	0.158
73	4	1.819	1	2-Methyl-1-butene	901	911	0.155
74	25	4.36	1	2-Pentene, 3-ethyl-	843	843	0.153
75	67	43.001	1	o-Cymene	743	763	0.15
76	47	8.892	1	Cyclohexane, 1,3-dimethyl-, cis-	807	829	0.145
77	49	9.227	1	3-Heptyne, 5-methyl-	741	918	0.142
78	56	14.725	1	3,4-Nonadiene	724	727	0.142
79	80	48.919	1	Benzene, 1,3-diethyl-5-methyl-	758	763	0.141
80	36	6.291	1	5,5-Dimethyl-1,3-hexadiene	781	797	0.134
81	87	50.569	1	2,2-Dimethylindene, 2,3-dihydro-	781	801	0.131
82	31	5.361	1	(E)-2-Butenylcyclopropane	776	783	0.129
83	27	4.725	1	Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, trans-	845	845	0.128
84	9	2.389	1	2-Ethyl-oxetane	831	858	0.125
85	82	49.384	1	Diphenethylamine, 3-methyl-	678	740	0.124
86	94	54.341	1	1-Nonadecanol, TMS derivative	590	632	0.124
87	46	8.787	1	1,4-Hexadiene, 3-ethyl-	685	720	0.12
88	88	51.2	1	Decane, 6-ethyl-2-methyl-	783	806	0.116
89	85	50.144	1	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl)-	776	790	0.114
90	92	53.531	1	Benzene, 1,3-diethyl-5-methyl-	689	769	0.114
91	53	11.098	1	Cyclopentane, propyl-	737	775	0.109
92	30	5.301	1	(E)-2-Butenylcyclopropane	795	803	0.101
93	40	7.221	1	Cyclohexane, 1,3-dimethyl-	656	656	0.099
94	8	2.299	1	1-Pentene, 2-methyl-	810	810	0.097
95	33	5.716	1	Cyclopentene, 1,2,3-trimethyl-	772	772	0.096
96	44	8.447	1	3-Heptene, 3-methyl-	715	769	0.094
97	98	55.877	1	Naphthalene, 1,7-dimethyl-	816	841	0.094
98	18	3.58	1	Ethylidenecyclobutane	752	792	0.092
99	24	4.265	1	2-Heptene, (E)-	771	811	0.082
100	1	1.549	1	2-Butene	878	881	0.08

Figura 31. Resultado del espectrómetro de masa de la muestra del etanol.

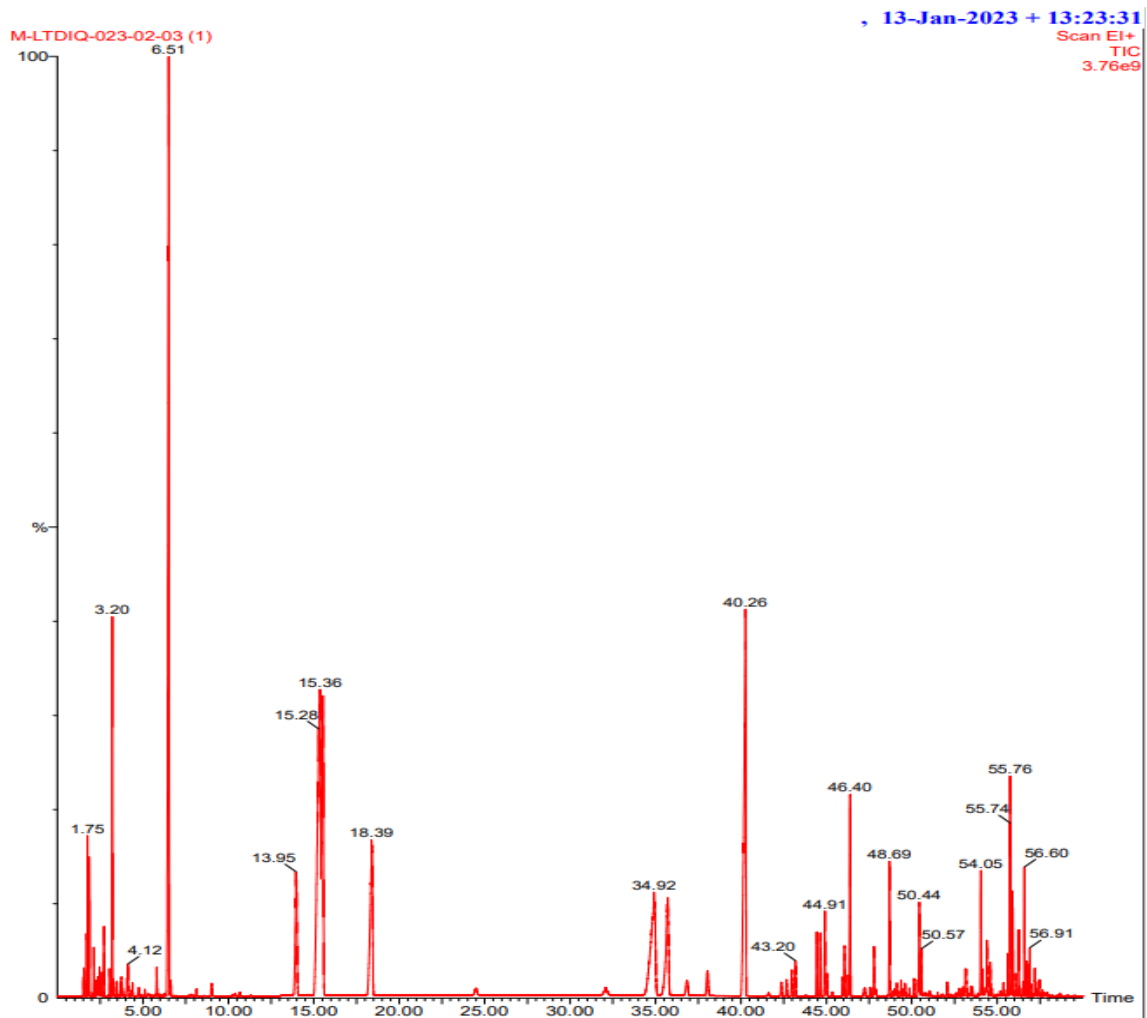


Figura 32. Cromatograma de la acetona.

Pk #	RT	Hit	Compound Name	Match	R.Match	Concentración
27	6.511	1	Toluene	939	939	16.283
31	15.365	1	Benzene, 1,3-dimethyl-	943	944	15.263
38	40.265	1	Benzene, 1,2,4-trimethyl-	920	924	11.784
34	34.918	1	Benzene, (1-methylethyl)-	876	921	7.197
32	15.53	1	Benzene, 1,3-dimethyl-	933	934	7.172
33	18.386	1	Benzene, 1,3-dimethyl-	922	924	5.696
35	35.723	1	Benzene, (1-methylethyl)-	895	940	3.963
30	13.954	1	Ethylbenzene	909	914	3.376
50	46.397	1	Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	898	900	2.491
18	3.2	1	Benzene	953	953	2.461
70	55.761	1	Naphthalene, 1,7-dimethyl-	919	926	1.707
52	48.693	1	2,4-Dimethylstyrene	872	889	1.597
64	54.05	1	Naphthalene, 2-methyl-	887	897	1.238
45	44.912	1	2-Tolyloxirane	834	837	1.066
58	50.444	1	2,2-Dimethylindene, 2,3-dihydro-	886	909	1.011
44	44.652	1	Benzene, 1-methyl-3-propyl-	863	867	0.855
6	1.754	1	Acetone	910	921	0.821
43	44.442	1	Benzene, 1,3-diethyl-	869	872	0.783
76	56.602	1	Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	870	871	0.775
37	38.049	1	Benzene, (1-methylethyl)-	822	860	0.731
59	50.569	1	1H-Indene, 2,3-dihydro-1,6-dimethyl-	854	854	0.666
48	46.067	1	o-Cymene	805	866	0.63
42	43.196	1	Indane	843	851	0.555
8	1.864	1	2-Methyl-1-butene	895	898	0.529
71	55.876	1	Naphthalene, 1,7-dimethyl-	896	902	0.499
66	54.401	1	1-Phthalanol, 1,3,3-trimethyl-	565	656	0.494
36	36.833	1	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	816	818	0.49
51	47.793	1	1,3-Cyclopentadiene, 1,2,3,4-tetramethyl-5-methylene-		853	0.488
74	56.261	1	3-Isopropoxy-1,1,1,7,7,7-hexamethyl-3,5,5-tris(trimethylsiloxy)tetrasiloxane		697	0.404
41	42.981	1	o-Cymene	825	834	0.401
72	55.916	1	Naphthalene, 1,5-dimethyl-	895	906	0.39
16	2.72	1	Cyclopentane, methyl-	880	886	0.385
26	5.806	1	Cyclobutane, (1-methylethylidene)-	838	849	0.282
9	2.124	1	1-Pentanol, 2-methyl-	778	782	0.281
61	53.135	1	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-6-methyl-	786	792	0.269
24	4.12	1	1,4-Pentadiene, 3,3-dimethyl-	707	744	0.267
40	42.661	1	Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	791	803	0.251
46	45.042	1	Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-	798	808	0.249
67	54.596	1	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2,6-dimethyl-	854	860	0.24
47	45.952	1	Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	790	800	0.231
62	53.18	1	1H-Indene, 2,3-dihydro-4,7-dimethyl-	875	875	0.23
39	42.361	1	Benzene, 1,2,3-trimethyl-	820	822	0.226
69	55.616	1	Naphthalene, 2-ethyl-	859	881	0.225
65	54.156	1	Benzene, 4-(2-butenyl)-1,2-dimethyl-, (E)-	735	741	0.223
49	46.272	1	1-Methyl-2-phenylcyclopropane	806	814	0.222
5	1.704	1	Butane, 2-methyl-	879	887	0.215
29	9.017	1	Cyclopentene, 1,2,3-trimethyl-	769	769	0.211
17	3.04	1	Cyclopentene, 3-methyl-	879	892	0.185
56	50.139	1	Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl)-	776	786	0.181
77	56.732	1	Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	848	855	0.177
57	50.359	1	Naphthalene	900	916	0.174
80	56.907	1	Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	861	865	0.174
82	57.202	1	Naphthalene, 2-methyl-1-propyl-	828	828	0.163
23	4.07	1	3,5-Dimethylcyclopentene	796	813	0.157
55	49.599	1	3-Isopropylbenzaldehyde	717	737	0.157
28	6.631	1	(E)-2-Butenylcyclopropane	792	804	0.152
13	2.459	1	2-Pentene, 3-methyl-	873	873	0.151
73	56.071	1	Naphthalene, 1,7-dimethyl-	863	871	0.148
60	52.075	1	2-Ethyl-2,3-dihydro-1H-indene	759	759	0.147
53	49.118	1	2-Isopropylbenzaldehyde	658	659	0.144
22	3.74	1	Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, trans-	784	791	0.14
2	1.549	1	2-Butene	786	849	0.137
78	56.782	1	Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	860	869	0.133
54	49.374	1	Benzene, (1-methylbutyl)-	748	763	0.123
15	2.609	1	2-Pentene, 3-methyl-, (Z)-	861	861	0.112
20	3.47	1	Pentane, 2,2,3,3-tetramethyl-	732	753	0.11
25	4.39	1	3-Hexyne, 2-methyl-	752	853	0.105
12	2.379	1	2-Ethyl-oxetane	755	866	0.099
81	56.987	1	Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	855	870	0.096
21	3.675	1	Cyclopentane, 1,3-dimethyl-, trans-	833	833	0.093
7	1.814	1	2-Methyl-1-butene	868	887	0.089
19	3.295	1	Di-n-hexyl-diselenide	705	805	0.086
63	53.445	1	Naphthalene, 5-ethyl-1,2,3,4-tetrahydro-	700	716	0.085
68	55.366	1	Benzene, 1,3,5-trimethyl-2-(1,2-propadienyl)-	768	928	0.084
11	2.359	1	Methyl glyoxal	765	849	0.072
84	57.482	1	Cyclopentene, 1,2-dimethyl-4-methylene-3-phenyl-	552	597	0.07
10	2.239	1	Pentane, 3-methyl-	834	863	0.066
75	56.511	1	Naphthalene, 2-(1-methylethyl)-	820	832	0.059
79	56.872	1	Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	825	838	0.058
1	1.519	1	Isobutane	875	903	0.057
14	2.494	1	2-Pentene, 3-methyl-, (Z)-	783	783	0.056
3	1.574	1	2-Butene	846	855	0.052
83	57.257	1	1,1,1,3,5,7,7-Octamethyl-3,5-bis(trimethylsiloxy)tetrasiloxane		669	0.048
4	1.594	1	2-Butene	784	787	0.036

Figura 33. Resultado del espectrómetro de masa de la muestra de acetona

7.6 Anexo VI. Muestras de biogasolina a partir de etanol y acetona



Figura 34. Muestra de biogasolina a partir de etanol

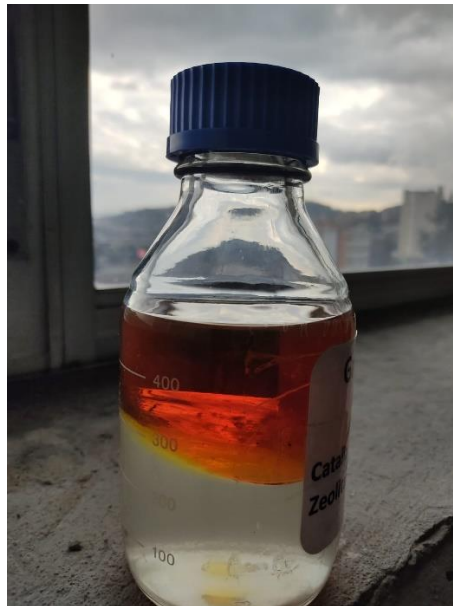


Figura 35. Muestra de biogasolina a partir de a cetona