



FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA

TESIS

MODELAMIENTO DE LA PRODUCCIÓN DE ETILENO EN UN REACTOR DE FLUJO PISTÓN PARA DETERMINAR EL PERFIL DE CONVERSIÓN DE BIOETANOL A DIFERENTES PRESIONES

PRESENTADO POR:

DENGXIAO ANDRÉ CHU CARMONA

CARLOS DANIEL GARCIA SOSA

ASESOR:

ING. FERNANDO JAVIER SALAS BARRERA, MSc.

IQUITOS, PERÚ

2021





ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS Nº 008-CGT-FIQ-UNAP

En Iquitos, a los quince días del mes de diciembre del dos mil veinte y uno, a horas <u>nueve</u>, se dio inicio a la sustentación pública de la Tesis titulada: **"MODELAMIENTO DE LA PRODUCCIÓN DE ETILENO EN UN REACTOR DE FLUJO PISTÓN PARA DETERMINAR EL PERFIL DE CONVERSIÓN DE BIOETANOL A DIFERENTES PRESIONES"**, aprobado con Resolución Decanal N° 219-2021-FIQ-UNAP, presentado por los Bachilleres: **Dengxiao André Chu Carmona y Carlos Daniel Garcia Sosa**, para optar el título profesional de **Ingeniero Químico**, que otorga la Universidad de acuerdo Ley y Estatuto.

El jurado calificador y dictaminador designado mediante R. D. Nº 200-2021-FIQ-UNAP está integrado por:

Ing. HUGO EMERSON FLORES BERNUY, Dr. Ing. VÍCTOR GARCÍA PÉREZ, Mtro. Ing. LUIS ANTONIO FLORES FLORES, Mtro. Presidente Miembro Miembro

Luego de haber escuchado con atención y formulado las preguntas necesarias, las cuales fueron respondidas: <u>ON forma Sotisfactoria</u>

El jurado después de las deliberaciones correspondientes, llegó a las siguientes conclusiones:

La sustentación pública y la t calificación <u>buena</u> , estano Ingeniero Químico, Siendo las <u>du</u> Sustentación	esis ha sido: <u>Abroboloo</u> con la o los bachilleres aptos para obtener el Título Profesional de <u>e horos</u> se dio por terminado el acto de
Ing. HUG	DEMARSON FLORES BERNUY, Dr.
Gaerand	PresiNente de Jurado
Ing. VICTOR GARCÍA PÉREZ, Mtro.	Ing. LUIS ANTONIO FLORES FLORES, Mtro.
Miembro	Wiembro
	ER .

Ing. FERNANDO JAVIER SALAS BARRERA, MSc. Asesor

JURADO Y ASESOR

Ing. HUGO ENGRSON FLORES BERNUY, Dr. Presidente de Jurado

.....

Ing. VICTOR GARCÍA PÉREZ, Mtro. Miembro

------..... Ing. LUIS ANTONIO FLORES FLORES, Mtro. Miembro

Ing. FERNANDO JAVIER SALAS BARRERA, MSc. Asesor

Ш

DEDICATORIA

La presente tesis está dedicada a mis padres y hermanos que me acompañaron en todo el proceso de mi formación profesional, que a pesar de las dificultades me enseñaron a ser constante y perseverante para cumplir mis metas.

Dengxiao André Chu Carmona

La presente tesis va dedicado a la mujer que me ha dado todo en la vida, a mi amor más bonito y real de la vida, a mi madre Kelly Sosa Affon. También para mi padre y familia en general, que sin su apoyo nada de esto sería posible.

Carlos Daniel García Sosa

AGRADECIMIENTO

Agradezco a Dios por darme la vida y la salud. Seguidamente a mis padres y hermanos, quienes con sus enseñanzas me inculcaron a ser un profesional con muchos valores y deseos de superación. También, agradezco a los buenos docentes que de una u otra manera me respaldaron en las diferentes decisiones que tome en mi formación académica, de lo cual estoy muy orgulloso y con deseo de seguir trascendiendo profesionalmente.

Dengxiao André Chu Carmona

Agradezco a Dios por mandarme una madre luchadora y trabajadora que siempre ha conseguido todo lo que se propone, gracias a eso todo fue posible. También quiero agradecer a cada uno de los miembros de mi familia, que me apoyaron durante mi carrera profesional.

Carlos Daniel García Sosa

ÍNDICE DE CONTENIDO

Pág.

POR	TADA	Ι
ACT	A DE SUSTENTACIÓN	II
JUR	ADO Y ASESOR	III
DED	ICATORIA	IV
AGR	ADECIMIENTO	V
ÍND	ICE DE CONTENIDO	VI
ÍND	ICE DE TABLAS	VIII
ÍND	ICE DE FIGURAS	IX
RES	UMEN	X
ABS	TRACT	XI
INTI	RODUCCIÓN	1
CAP	ÍTULO I: MARCO TEÓRICO	4
1.1.	Antecedentes	4
1.2.	Bases teóricas	5
1.2.1	. Ecuación general de balance molar	5
1.2.2	. Leyes de velocidad y estequiometría	5
1.2.3	. La ecuación de estado de gases ideales	6
1.2.4	. Ecuación de Arrhenius	6
1.2.5	. Reacción de la deshidratación de bioetanol a etileno	7
1.3.	Definición de términos básicos	7
1.3.1	. Presión	7
1.3.2	Etileno	9
1.3.3	. Bioetanol	9
1.3.4	. Reactor de flujo pistón	9
1.3.5	. Longitud del reactor de flujo pistón	11
1.3.6	. Conversión	11
1.3.7	. Perfil de conversión en un PFR	12
1.4.	Modelado de la reacción de deshidratación de bioetanol a etileno	12
CAP	ÍTULO II: HIPÓTESIS Y VARIABLES	19
2.1.	Formulación de la hipótesis	19
2.2.	Variables y su operacionalización	19
CAP	ÍTULO III: METODOLOGÍA	21
3.1.	Tipo y diseño	21
3.2.	Diseño muestral	22

3.3.	Procedimientos de recolección de datos	22
3.4.	Procesamiento y análisis de datos	24
3.5.	Aspectos éticos	24
CAI	PÍTULO IV: RESULTADOS	25
CAI	PÍTULO V: DISCUSIÓN	35
CAI	PÍTULO VI: CONCLUSIONES	38
CAI	PÍTULO VII: RECOMENDACIONES	39
CAI	PÍTULO VIII: FUENTES DE INFORMACIÓN	40
AN	EXOS	42
Ane	xo 1. Matriz de consistencia	43
Ane	xo 2. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 2 atm	44
Ane	xo 3. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 5 atm	45
Ane	xo 4. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 8 atm	46
Ane	xo 5. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 11 atm	47
Ane	xo 6. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 14 atm	48
Ane	xo 7. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 17 atm	49
Ane	xo 8. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 20 atm	50
Ane	xo 9. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 23 atm	51

ÍNDICE DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Estequiometría de la reacción de deshidratación de bioetanol a etileno	13
Tabla 2. Operacionalización de las variables	20
Tabla 3. Parámetros necesarios para el cálculo de la constante de velocidad de reacción	23
Tabla 4. Parámetros necesarios para hacer uso de la ecuación (41)	23
Tabla 5. Resultados de la conversión versus la longitud a 2 atm	25
Tabla 6. Resultados de la conversión versus la longitud a 5 atm	27
Tabla 7. Resultados de la conversión versus la longitud a 8 atm	28
Tabla 8. Resultados de la conversión versus la longitud a 11 atm	29
Tabla 9. Resultados de la conversión versus la longitud a 14 atm	30
Tabla 10. Resultados de la conversión versus la longitud a 17 atm	31
Tabla 11. Resultados de la conversión versus la longitud a 20 atm	32
Tabla 12. Resultados de la conversión versus la longitud a 23 atm	33
Tabla 13. Longitud del reactor de flujo pistón (PFR) a diferentes presiones	37

•

ÍNDICE DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Presión debido a la columna de un fluido	8
Figura 2. Reactor de flujo pistón (PFR)	10
Figura 3. Perfil de conversión a diferentes presiones	12
Figura 4. Reactor de flujo pistón para la reacción de deshidratación del bioetanol	13
Figura 5. Esquema del diseño de investigación	21
Figura 6. Perfil de conversión a 2 atm	26
Figura 7. Perfil de conversión a 5 atm	27
Figura 8. Perfil de conversión a 8 atm	28
Figura 9. Perfil de conversión a 11 atm	29
Figura 10. Perfil de conversión a 14 atm	30
Figura 11. Perfil de conversión a 17 atm	31
Figura 12. Perfil de conversión a 20 atm	32
Figura 13. Perfil de conversión a 23 atm	33
Figura 14. Comparación de los perfiles de conversión	34

RESUMEN

El objetivo principal del presente trabajo de tesis fue: determinar el modelo que se ajusta a la relación entre la conversión de bioetanol, la presión de operación y la longitud de un PFR (reactor de flujo pistón), cuando se lleva a cabo la producción de etileno. La presente investigación tiene enfoque cuantitativo con nivel de profundización predictivo y diseño correlacional. Se ha obtenido la ecuación (41), la cual representa el modelo que se ajusta a la relación entre la conversión de bioetanol, la presión de operación y la longitud de un reactor de flujo pistón (PFR), cuando se lleva a cabo la producción de etileno a partir de la deshidratación del bioetanol. A criterio de los investigadores, el tipo de muestreo fue el no probabilístico, considerándose un tamaño de muestra igual a ocho (8) simulaciones, mediante las cuales se ha podido observar el perfil de conversión de bioetanol a las siguientes presiones: 2, 5, 8, 11, 14, 17, 20 y 23 atm. En cada simulación realizada, se pudo observar, que cuanto mayor es la longitud del reactor de flujo pistón (PFR), mayor es la conversión que se obtiene de bioetanol. Los resultados de las ocho (8) simulaciones, muestran que la presión de operación óptima a la que debe trabajar el reactor de flujo pistón (PFR), es 23 atm, pues a esta presión se llegará en dicho reactor a la conversión máxima ($X_A = 0.99$) de bioetanol, con la longitud (L) más pequeña, la cual es aproximadamente igual a 18.97 pies.

Palabras claves: longitud, conversión de bioetanol, presión, reactor de flujo pistón.

ABSTRACT SUMMARY

The main objective of the present work of thesis was: determining the model that fits to the relation between the conversion of bioethanol, the pressure of operation and the length of a PFR (reactor of flow piston), when the ethylene production takes effect. The present investigation has quantitative focus with level of deepening predictive and I design correlational. The equation (41) has been obtained, which represents the model that fits up the relation between the conversion of bioethanol, the pressure of operation and the length of a reactor of flow piston (PFR), when the ethylene production from the dehydration of the bioethanol takes effect. In the sole discretion of the investigators, the type of sampling was the probabilistic no, being considered a size of similar sample to eight (8) simulations, by means of the ones that they have been able to observe to me the profile of conversion of bioethanol to the following pressures: 2, 5, 8, 11, 14, 17, 20 y 23 atm. In each realized simulation, one could observe, that as much as the ledger book is the length of the reactor of flow the piston (PFR), ledger book is the conversion that is obtained of bioethanol. The results of eight (8) simulations, show that the pressure of optimal operation the reactor of flow should work piston to (PFR), is to 23 atm, because to this pressure it will take place in the aforementioned reactor to the maximum conversion ($X_A = 0.99$) of bioethanol, with the length smaller, which is approximately all the same to 18.97 feet.

Keywords: length, conversion of bioethanol, pressure, reactor of flow piston.

INTRODUCCIÓN

En la década de los 50, se producía etileno a grandes escalas mediante el proceso de pirólisis, donde se utilizaba como alimentación el etano proveniente del gas natural. Posteriormente, en la década de los 70, el precio de los productos derivados del gas natural se incrementó, por lo que se tuvo que buscar otras fuentes alternativas con el fin de disminuir el uso de los productos químicos derivados del gas natural, principalmente se buscó el uso de biomasas.

El proceso de pirólisis de hidrocarburos genera gases altamente contaminantes y requiere de gran cantidad de energía, por lo que se lleva a cabo a altas temperaturas. Es por eso que, en la actualidad, la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, se ha incrementado considerablemente por parte de las industrias que se dedican a la producción de plásticos, esto es debido a las ventajas que este proceso presenta en comparación con los métodos convencionales. En la actualidad, existen muchos trabajos relacionados a la producción de etileno, a partir de la deshidratación del bioetanol; sin embargo, en ninguno de ellos se hace la aplicación de criterios ingenieriles como: la ecuación general de balance molar, las leyes de velocidad y la estequiometría.

Para diseñar adecuadamente el proceso de producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, implica que se tenga que realizar el modelamiento de dicho proceso en un reactor de flujo pistón (PFR), aplicándose necesariamente la ecuación general de balance molar junto con las leyes de velocidad y estequiometría. De otra forma no se podría determinar con precisión la capacidad (volumen, longitud, diámetro) que tendría el PFR y tampoco se podría optimizar dicho proceso (esto implica determinar el perfil de conversión). Es por eso, que en la presente investigación se plantea la siguiente interrogante general: **¿Cuál es el modelo que se ajusta a la relación entre la conversión de bioetanol, la presión de operación y la longitud de un PFR (reactor de flujo pistón), cuando se lleva a cabo la producción de etileno?**

Los problemas específicos que se formulan en la presente investigación son:

• ¿Es posible realizar el modelamiento de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón)?

• ¿Es posible realizar la simulación del modelo de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón)?

De acuerdo al problema general y a los problemas específicos, se generan el objetivo general y los objetivos específicos de la presente investigación, respectivamente, los cuales se mencionan a continuación:

Objetivo general

Determinar el modelo que se ajusta a la relación entre la conversión de bioetanol, la presión de operación y la longitud de un PFR (reactor de flujo pistón), cuando se lleva a cabo la producción de etileno.

Objetivos específicos

- Realizar el modelamiento de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón).
- Realizar la simulación del modelo de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón).

La presente investigación es importante, porque muestra en detalle la aplicación de criterios ingenieriles que son necesarios para diseñar adecuadamente un reactor de flujo pistón (PFR), donde se lleva a cabo el proceso de producción de etileno a partir de bioetanol; contribuyendo de esta forma a la generación de nuevos conocimientos científicos entre alumnos, docentes y egresados de la Facultad de Ingeniería Química (FIQ) de la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana (UNAP).

En la presente investigación, la población es infinita, puesto que con el modelo que representa a la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol en un reactor de flujo pistón (PFR), se puede realizar infinitas simulaciones. De esta forma, a criterio de los investigadores, se realizan un total de ocho (8) simulaciones, las cuales representan el tamaño de la muestra. El detalle de estas simulaciones se indica en la sección 3.2.

La estructura de la tesis, está formada por los siguientes capítulos:

- Capítulo I: Marco teórico
- Capítulo II: Hipótesis y variables
- Capítulo III: Metodología
- Capítulo IV: Resultados
- Capítulo V: Discusión
- Capítulo VI: Conclusiones
- Capítulo VII: Recomendaciones
- Capítulo VIII: Fuentes de información

CAPÍTULO I: MARCO TEÓRICO

1.1. Antecedentes

- Ceciliano (2018, p. 9), realizó la investigación titulada: Evaluación preliminar del desempeño de un catalizador de níquel-cobre para la conversión de bioetanol a etileno, donde evaluó el rendimiento de un catalizador bifuncional de níquel-cobre, en la conversión de bioetanol a etileno, el cual consistió en alúmina impregnada con níquel y cobre. Para esto sintetizó alúmina a partir de una precipitación entre nitrato de aluminio e hidróxido de sodio, con un rendimiento entre 50% y 70%. Después realizó varias pruebas para evaluar el funcionamiento mecánico del sistema, a través de las cuales definió un flujo del gas de arrastre de 55 mL/min, un flujo de la bomba de 0.1 mL/min y la masa de catalizador de 0.15 g, trabajando en un rango de temperaturas entre los 300 y 450 °C y concentraciones de etanol entre 20 y 100%. Al final pudo comprobar que a 400 °C utilizando el catalizador Ni: Cu 1: 8 y un 20% de etanol en la alimentación, la reacción se vio favorecida hacia la formación de etileno.
- Agudelo y Montes (2005, pp. 22-26), realizaron el artículo científico titulado: Deshidratación catalítica de etano a etileno sobre HMOR y HZSM-5 modificada con hierro y cobre. En este trabajo estudiaron la deshidratación catalítica de etanol a etileno en fase gaseosa sobre HMOR (Si/Al = 6.5), HZSM-5 (Si/Al = 29), Cu-HZSM-5 (Si/Al = 98) y Fe-HZSM (Si/Al = 151); a presión atmosférica y en un intervalo de temperaturas entre 120 y 300 °C. Los catalizadores soportados en HZSM-5 fueron activos a temperaturas por encima de 260 °C, de lo cual obtuvieron conversiones superiores al 60%, siendo el etileno el producto predominante en la deshidratación del etanol. También pudieron observar en este trabajo, que la presencia de cobre en la zeolita HZSM-5 incrementó levemente la actividad catalítica a alta temperatura, mientras que con la adición de hierro la conversión de etanol disminuyó. Como conclusión de este trabajo, mencionaron que la zeolita HMOR fue activa a temperaturas menores de 200 °C, pero se desactivó rápidamente a 240 °C debido a la formación de coque.

• Espinoza, Mateo y Marca (2016, p. 4), realizaron el informe titulado: Diseño de una planta para la producción de etileno a partir del acoplamiento oxidativo del metano proveniente del gas natural. En este trabajo detallaron el proceso llevado en el reactor, donde se usa el catalizador Li/MgO, además de detallar una serie de operaciones de separación (separación de agua mediante alta presión y la remoción de CO₂ con aminas) para poder lograr separar los subproductos de esta reacción y obtener la mezcla de etileno y etano libre. También en el presente trabajo, detallaron el balance de masa y energía el cual lleva este proceso, así como también el diseño de los equipos principales. Finalmente desarrollaron un análisis económico para la evaluación de la rentabilidad de la planta.

1.2. Bases teóricas

1.2.1. Ecuación general de balance molar

Fogler (2008, pp. 8-10), menciona que la ecuación general de balance molar para una especie j, en cualquier instante del tiempo t es:

Entrada – Salida + Generación = Acumulación.

$$F_{jI} - F_{j0} + G_j = \frac{aN_j}{dt}$$
. (1)

...

Donde N_j representa la cantidad de moles de la especie j en el tiempo t. Los términos F_{jI} , F_{jO} , G_j y $\frac{dN_j}{dt}$ representan las velocidades molares de la especie j que entran al sistema, salen del sistema, se generan y acumulan dentro del sistema, respectivamente.

1.2.2. Leyes de velocidad y estequiometría

Las velocidades de reacción relativas de las diversas especies que intervienen en una reacción química, pueden obtenerse por la relación de sus coeficientes estequiométricos (Fogler 2008, p. 81), es decir:

$$aA + bB \rightarrow cC + dD.$$
 (2)

$$A + \frac{b}{a}B \longrightarrow \frac{c}{a}C + \frac{d}{a}D.$$
 (3)

$$\frac{-r_A}{a} = \frac{-r_B}{b} = \frac{r_C}{c} = \frac{r_D}{d}.$$
(4)

Donde *a*, *b*, *c* y *d*, son los coeficientes estequiométricos de las especies A, B, C y D, respectivamente. Las cantidades $(-r_A)$ y $(-r_B)$ son las velocidades de desaparición de las especies A y B, respectivamente. Las cantidades r_C y r_D son las velocidades de formación de las especies C y D, respectivamente. Las ecuaciones (3) y (4), indican lo siguiente: por cada mol de A que se consume, se producen (*c/a*) moles de C, es decir:

$$r_{\rm C} = \frac{c}{a} \ (-r_A). \tag{5}$$

1.2.3. La ecuación de estado de gases ideales

Esta ecuación relaciona a la presión, la temperatura, el volumen y el número de moles de un gas (Felder y Rousseau, 2004, pp. 191-192). Dicha ecuación es:

$$PV = nRT.$$
 (6)

Donde P es la presión absoluta del gas, V el volumen que ocupa el gas, T la temperatura absoluta del gas, n el número de moles y R es la constante de los gases cuyo valor depende de las unidades de P, V, T y n. De este modo, el valor de R, se puede expresar de las siguientes formas:

$$R = 0.082 \frac{\text{atm. L}}{\text{mol. K}} = 8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol. K}} = 1.987 \frac{\text{cal}}{\text{mol. K}} = 0.7302413 \frac{\text{atm. pie}^3}{\text{lb mol. }^{\circ}\text{R}}$$

Como la concentración molar (*C*), es la relación entre el número de moles y el volumen (C = n/V), entonces la ecuación (6), también se puede expresar en términos de la concentración molar, mediante la siguiente ecuación:

$$C = \frac{P}{RT}.$$
 (7)

1.2.4. Ecuación de Arrhenius

Fogler (2008, p. 92), menciona que la constante de velocidad de reacción (k), o

velocidad de reacción específica a una determinada temperatura y en cualquier reacción química, se puede calcular con la ecuación de Arrhenius, tal como se indica a continuación:

$$k[T] = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}.$$
(8)

Donde *A* es el factor preexponencial o factor de frecuencia, E_a es la energía de activación en J/mol o cal/mol, $R = 8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol.K}} = 1.987 \frac{\text{cal}}{\text{mol.K}}$ es la constante de los gases y *T* es la temperatura en K.

1.2.5. Reacción de la deshidratación de bioetanol a etileno

El etileno se produce mediante la reacción de deshidratación de bioetanol (Ceciliano, 2018, p. 39), dicha reacción es:

$$CH_3CH_2OH \rightarrow C_2H_4 + H_2O \tag{9}$$

La ecuación (9), indica que al reaccionar un mol de bioetanol (CH_3CH_2OH), se producen un mol de etileno (C_2H_4) más un mol de vapor de agua (H_2O). Esta reacción se debe llevar a cabo en fase gaseosa, en un reactor de flujo pistón (PFR) a la temperatura de 470 °C; asimismo, la presión de operación del reactor de flujo pistón (PFR) puede variar entre 1.4 y 24 atm (Calvo, 2015, pp. 13-14).

1.3. Definición de términos básicos

1.3.1. Presión

La presión de un fluido, es la relación entre la fuerza (*F*) y el área (*A*) sobre la cual actúa el mismo. Se denota como *P* y sus unidades son: bar, atm, $Pa = N/m^2$, dinas/cm², atm, etc. (Felder y Rousseau, 2004, p. 55; Mott, 2006, pp. 52-53).

$$P = \frac{F}{A}.$$
 (10)

De la figura 1, se puede observar lo siguiente:

- La presión manométrica (P_{man}) , se debe a la columna de fluido.
- La presión atmosférica (P_{atm}) , se debe al medio ambiente.
- La presión absoluta, es la suma de la presión manométrica con la presión atmosférica.

$$P_{abs} = P_{man} + P_{atm}.$$
 (11)

La presión atmosférica en el punto A es: Patm

La presión manométrica en el punto B, es: $P_{man(B)} = \gamma h = \rho g h$.

Entonces, la presión absoluta queda:

$$P_{abs} = P_{atm} + \gamma h. \tag{12}$$

Donde *h* es la columna del fluido cuyas unidades son: m, cm, pie, etc.; γ es el peso específico del fluido y sus unidades pueden ser: N/m³, kg_f/m³, lb_f/m³, etc.



Figura 1. Presión debido a la columna de un fluido.

Fuente: Mott, 2006, p. 54.

1.3.2. Etileno

El **etileno** o **eteno** es un compuesto químico orgánico gaseoso, formado por dos átomos de carbono y cuatro átomos de hidrógeno, enlazados mediante un doble enlace (um.es/acc/etileno/). Su fórmula molecular es C_2H_4 .

El etileno es el primer término de la serie de los alquenos y se obtiene por «craking» del petróleo y a partir del gas natural. El 60% del etileno obtenido se destina a la producción de diversos polímeros, que vulgarmente conocemos como plásticos. El más conocido es el polietileno, de alta y baja densidad, seguido del estireno y cloruro de polivinilo y todos ellos forman parte de nuestra vida cotidiana. En nuestra vida diaria, nos encontramos varios de los derivados del etileno, ya sea en forma de plásticos duros y moldeables o como disolventes para pinturas, tintes y adhesivos. El etileno no solo tiene una gran importancia industrial, también es una hormona sintetizada por los vegetales y su acción afecta prácticamente a todas las etapas del desarrollo de las plantas, desde la germinación de las semillas hasta la senescencia y muerte de las mismas (um.es/acc/etileno/).

1.3.3. Bioetanol

El bioetanol es un biocombustible que se obtiene mediante un proceso de fermentación industrial que transforma el azúcar o el almidón de los diferentes tipos de plantas como pueden ser la caña de azúcar y el maíz en alcohol. Posteriormente, éste se destila y se deshidrata para conseguir el biocombustible. Su fórmula molecular es CH_3CH_2OH (blog.gruponovelec.com/energias-renovables/que-es-el-bioetanol/).

1.3.4. Reactor de flujo pistón

El **reactor de flujo pistón (PFR)** o reactor tubular, es aquel donde los materiales que reaccionan se consumen de manera continua a medida que fluyen a lo largo del reactor, es decir la conversión aumenta con la longitud del reactor y el fluido se desplaza como tapón sin gradientes radiales de concentración, temperatura o velocidad de reacción. Al deducir la ecuación de diseño de un reactor de flujo pistón se asume que la concentración varía continuamente en la dirección axial a todo lo largo del reactor; por consiguiente, la velocidad de reacción que es una función de la concentración también variará axialmente (Fogler 2008, p. 14).

Este reactor consta normalmente de un tubo cilíndrico y opera en estado estacionario. Su aplicación es con mayor frecuencia para reacciones en fase gaseosa.



Figura 2. Reactor de flujo pistón (PFR). Fuentes: Fogler, 2008, p. 14. y Levenspiel, pp. 101-102.

Aplicando la ecuación general de balance molar al diferencial de volumen (ΔV) que se muestra en la figura 2, considerando que el volumen diferencial es suficiente mente pequeño, de manera que no haya variaciones espaciales de la velocidad de reacción dentro de este volumen. Tambien se toma como componente base al reactante A.

Flujo molar de entrada de A al diferencial de volumen = $F_A|_V$

Flujo molar de salida de A al diferencial de volumen = $F_A|_{V+\Delta V}$

Velocidad de acumulación de A en el volumen diferencial = $\frac{dN_A}{dt} = 0$ (estado estacionario).

Velocidad de generación de A en el volumen diferencial = $G_A = r_A \Delta V$.

Entonces, la ecuación de balance molar para el elemento diferencial de volumen ΔV que se muestra en la figura 2, es:

$$F_{\rm A}|_V - F_{\rm A}|_{V+\Delta V} + r_{\rm A}\Delta V = 0.$$
⁽¹³⁾

Reordenando la ecuación (13), se obtiene:

$$F_{\rm A}|_{V+\Delta V} - F_{\rm A}|_{V} = r_{\rm A}\Delta V.$$
(14)

Aplicando el límite cuando $\Delta V \rightarrow 0$ y el criterio de la primera derivada (Venero, 2016, pp. 92-94; Mitacc y Toro, 2009, pp. 197-200):

$$\lim_{\Delta V \to 0} \frac{F_{\rm A}|_{V+\Delta V} - F_{\rm A}|_{V}}{\Delta V} = r_{\rm A}.$$
(15)

$$\frac{dF_{\rm A}}{dV} = r_{\rm A}.\tag{16}$$

Integrando la ecuación (16), se obtiene:

$$V = \int_{F_{\rm AI}}^{F_{\rm A}} \frac{dF_{\rm A}}{r_{\rm A}} = \int_{F_{\rm A}}^{F_{\rm AI}} \frac{dF_{\rm A}}{(-r_{\rm A})}.$$
 (17)

1.3.5. Longitud del reactor de flujo pistón

Se refiere a la distancia que recorren los reactivos y productos de una reacción química, la cual se lleva a cabo en el reactor de flujo pistón (PFR), se denota como L y sus unidades son: m, cm, pie, etc., (Fogler 2008, p. 14).

1.3.6. Conversión

La conversión o fracción de conversión, se define como la relación entre el número de moles de un reactivo que reaccionan y el número de moles iniciales del mismo reactivo (Fogler, 2008, p. 38; Felder y Rousseau, 2004, p. 118). Entonces, para un reactivo A, la conversión (X_A), se puede expresar mediante la siguiente ecuación:

$$X_{\rm A} = \frac{\text{Moles de A que reaccionan}}{\text{Moles iniciales de A}}.$$
 (18)

1.3.7. Perfil de conversión en un PFR

Se refiere a la representación gráfica de la conversión (X_A) en función de la longitud (L) del reactor de flujo pistón (PFR) (Fogler, 2008, p. 175). En la figura 3, se puede observar el perfil de conversión del reactivo A, a diferentes presiones.



Figura 3. Perfil de conversión a diferentes presiones. Fuente: Elaboración propia.

1.4. Modelado de la reacción de deshidratación de bioetanol a etileno

El modelado de esta reacción se realiza, teniendo en cuenta la ecuación (9) y haciendo la aplicación de la ecuación general de balance molar en un reactor de flujo pistón (PFR) (véase la figura 4), para lo cual, es necesario tener en cuenta la siguiente ecuación:

$$A \longrightarrow \frac{b}{a}B + \frac{c}{a}C.$$
 (19)

Si comparamos la ecuación (19) con la ecuación (9), se puede observar que: el

reactivo A representa al bioetanol. Los productos B y C representan al etileno y al vapor de agua, respectivamente. Las cantidades (b/a) y (c/a), son los coeficientes estequiométricos de los productos B y C, respectivamente.



Figura 4. Reactor de flujo pistón para la reacción de deshidratación del bioetanol. Fuente: Elaboración propia.

En la figura 4, las cantidades F_{AI} , F_{BI} y F_{CI} , representan los flujos molares de los componentes A, B y C a la entrada del reactor de flujo pistón (PFR), respectivamente. Los términos X_{AI} y X_{AO} , representan la conversión del reactivo A a la entrada y salida del reactor de flujo pistón (PFR), respectivamente. De igual manera, las cantidades F_{AO} , F_{BO} y F_{CO} , representan los flujos molares de los componentes A, B y C a la salida del reactor de flujo pistón (PFR), respectivamente. De acuerdo a esto se construye la siguiente tabla estequiométrica:

Tabla 1. Estequiometría de la reacción de deshidratación de bioetanol a etileno.

Especies	Inicial	Cambio	Remanente
A	F _{AI}	$-F_{\mathrm{AI}}$. X_{A}	$F_{\rm A} = F_{\rm AI}(1 - X_{\rm A})$
В	$F_{\rm BI}=0$	$\frac{b}{a}F_{\rm AI}$. $X_{\rm A}$	$F_{\rm B} = \frac{b}{a} F_{\rm AI} \cdot X_{\rm A}$
C	$F_{\rm CI}=0$	$\frac{c}{a}F_{\rm AI}$. $X_{\rm A}$	$F_{\rm C} = \frac{c}{a} F_{\rm AI} \cdot X_{\rm A}$

Fuente: Elaboración propia.

Entonces, el flujo molar total (F_T), en cualquier punto del reactor de flujo pistón (PFR), es:

$$F_{\rm T} = F_{\rm A} + F_{\rm B} + F_{\rm C} = F_{\rm AI} \left[(1 - X_{\rm A}) + \frac{b}{a} X_{\rm A} + \frac{c}{a} X_{\rm A} \right]$$
$$F_{\rm T} = F_{\rm AI} + \left(\frac{b}{a} + \frac{c}{a} - 1 \right) X_{\rm A} \cdot F_{\rm AI}.$$
 (20)

Se define el parámetro δ , mediante la siguiente ecuación:

$$\delta = \frac{b}{a} + \frac{c}{a} - 1. \tag{21}$$

Entonces, la ecuación (20) queda:

$$F_{\rm T} = F_{\rm AI} + \,\delta X_{\rm A}.\,F_{\rm AI}.\tag{22}$$

La concentración del reactivo A, es el número de moles del mismo por unidad de volumen, es decir:

$$C_{\rm A} = \frac{F_{\rm A}}{v}.$$
 (23)

De la misma forma se tiene para los productos B y C.

$$C_{\rm B} = \frac{F_{\rm B}}{\upsilon}.$$
 (24)

$$C_{\rm C} = \frac{F_{\rm C}}{v}.$$
 (25)

Donde v es el caudal (m³/s, pie³/s, L/s, L/min, etc.).

Reemplazando F_A , F_B y F_C de la tabla estequiométrica en las ecuaciones (23), (24) y (25), se tiene:

$$C_{\rm A} = \frac{F_{\rm AI}(1 - X_{\rm A})}{v}.$$
 (26)

$$C_{\rm B} = \frac{\left(\frac{b}{a}\right) F_{\rm AI} \cdot X_{\rm A}}{\upsilon}.$$
 (27)

$$C_{\rm C} = \frac{\left(\frac{c}{a}\right) F_{\rm AI} \cdot X_{\rm A}}{\upsilon}.$$
 (28)

La concentración total (C_T), en cualquier punto del reactor de flujo pistón (PFR), teniendo en cuenta la ecuación de los gases ideales, es:

$$C_{\rm T} = \frac{P}{RT} = \frac{F_{\rm T}}{\upsilon}.$$
 (29)

Entonces, la concentración total a la entrada del reactor de flujo pistón, es:

$$C_{\mathrm{TI}} = \frac{P_{\mathrm{I}}}{RT_{\mathrm{I}}} = \frac{F_{\mathrm{TI}}}{v_{\mathrm{I}}}.$$
(30)

Relacionando las ecuaciones (29) y (30), se obtiene:

$$v = v_{\rm I} \left(\frac{F_{\rm T}}{F_{\rm TI}}\right) \left(\frac{P_{\rm I}}{P}\right) \left(\frac{T}{T_{\rm I}}\right). \tag{31}$$

Como el reactor de flujo pistón (PFR), trabaja a presión y temperatura constante, entonces: $P = P_I$ y $T = T_I$. De esta forma la ecuación (31), se reduce a:

$$v = v_{\rm I} \left(\frac{F_{\rm T}}{F_{\rm TI}}\right). \tag{32}$$

En la figura 4, se puede observar que al inicio del reactor de flujo pistón (PFR), solo hay el reactivo A, entonces: $F_{TI} = F_{AI}$.

Reemplazando la ecuación (22), en la ecuación (32), se tiene:

$$v = v_{\rm I} \left(\frac{F_{\rm AI} + \delta X_{\rm A}.F_{\rm AI}}{F_{\rm AI}} \right)$$

$$v = v_{\rm I}(1 + \delta X_{\rm A}). \tag{33}$$

Ahora, reemplazando la ecuación (33) en la ecuación (26):

$$C_{\rm A} = \frac{F_{\rm AI}(1 - X_{\rm A})}{v_{\rm I}(1 + \delta X_{\rm A})} = \frac{C_{\rm AI}(1 - X_{\rm A})}{(1 + \delta X_{\rm A})}.$$
(34)

De tabla 1, se tiene que: $F_A = F_{AI}(1 - X_A)$, entonces si se reemplaza esta relación en la ecuación (17), se obtiene:

$$V = \int_{X_{\rm A}}^{X_{\rm AI} = 0} \frac{-F_{\rm AI} \cdot dX_{\rm A}}{(-r_{\rm A})} = \int_{0}^{X_{\rm A}} \frac{F_{\rm AI} \cdot dX_{\rm A}}{(-r_{\rm A})} = F_{\rm AI} \int_{0}^{X_{\rm A}} \frac{dX_{\rm A}}{(-r_{\rm A})}.$$
 (35)

La reacción de deshidratación del bioetanol, es de primer orden, entonces:

$$-r_{\rm A} = kC_{\rm A}.\tag{36}$$

Donde k es la constante de velocidad de reacción (s⁻¹, min⁻¹, etc.)

Reemplazando las ecuaciones (34) y (36) en la ecuación (35), se obtiene:

$$V = F_{\rm AI} \int_0^{X_{\rm A}} \frac{(1+\delta X_{\rm A})dX_{\rm A}}{kC_{\rm AI}(1-X_{\rm A})} = \frac{F_{\rm AI}}{kC_{\rm AI}} \int_0^{X_{\rm A}} \frac{(1+\delta X_{\rm A})dX_{\rm A}}{(1-X_{\rm A})}.$$
 (37)

La integral de la ecuación (37), se resuelve a continuación:

$$\int \frac{(1+\delta X_{\rm A})dX_{\rm A}}{(1-X_{\rm A})} = \underbrace{\int \frac{dX_{\rm A}}{(1-X_{\rm A})}}_{I_1} + \delta \underbrace{\int \frac{X_{\rm A}.dX_{\rm A}}{(1-X_{\rm A})}}_{I_2}$$

Resolviendo por separado cada una de las integrales

$$I_1 = \int \frac{dX_A}{(1 - X_A)}$$

Haciendo el cambio de variable: $u = 1 - X_A \implies du = -dX_A$. Entonces, I_1

queda:

$$I_{1} = \int \frac{dX_{A}}{(1 - X_{A})} = -\int \frac{du}{u} = -\ln(u), \ u > 0$$
$$I_{1} = -\ln(1 - X_{A}) = \ln\left(\frac{1}{1 - X_{A}}\right).$$

Venero (2012, p. 188) y Mitacc y Toro (2009, p. 5), muestran las siguientes fórmulas de integración:

$$\int du = u + C, \ C \in \mathbb{R}.$$
$$\int \frac{du}{u} = \ln|u| + C, \ C \in \mathbb{R}.$$

Desarrollando ahora I_2 ,

$$I_2 = \int \frac{X_{\mathrm{A}} \, dX_{\mathrm{A}}}{(1 - X_{\mathrm{A}})}.$$

Haciendo el mismo cambio de variable que en I_1 , se tiene:

$$I_2 = \int \frac{X_A \cdot dX_A}{(1 - X_A)} = -\int \frac{(1 - u)du}{u} = -\int \frac{du}{u} + \int du = -\ln(u) + u$$
$$I_2 = -\ln(1 - X_A) + (1 - X_A) = \ln\left(\frac{1}{1 - X_A}\right) + (1 - X_A).$$

Entonces la integral queda:

$$\int_{0}^{X_{A}} \frac{(1+\delta X_{A})dX_{A}}{(1-X_{A})} = \ln\left(\frac{1}{1-X_{A}}\right)\Big|_{0}^{X_{A}} + \delta\left[\ln\left(\frac{1}{1-X_{A}}\right) + (1-X_{A})\right]\Big|_{0}^{X_{A}}$$
$$= \ln\left(\frac{1}{1-X_{A}}\right) + \delta\left[\ln\left(\frac{1}{1-X_{A}}\right) - X_{A}\right]$$

$$= (1+\delta)\ln\left(\frac{1}{1-X_{\rm A}}\right) - \delta X_{\rm A}.$$

Entonces, la ecuación (37), queda:

$$V = \frac{F_{\rm AI}}{kC_{\rm AI}} \left[(1+\delta) \ln\left(\frac{1}{1-X_{\rm A}}\right) - \delta X_{\rm A} \right].$$
(38)

La concentración del reactivo A a la entrada del reactor de flujo pistón (PFR), es:

$$C_{\rm AI} = y_{\rm AI} C_{\rm TI} = y_{\rm AI} \frac{P}{RT}.$$
 (39)

Donde y_{AI} , es la fracción molar del reactivo A a la entrada del reactor de flujo pistón (PFR).

Considerando que el reactor de flujo pistón (PFR), está formado por un número determinado de tubos horizontales, se obtiene la siguiente ecuación:

$$L = \frac{V}{A_S. n_{\text{Tubos}}}.$$
 (40)

Donde A_S es el área de sección transversal al flujo molar en cada tubo horizontal y n_{Tubos} es la cantidad de tubos horizontales de los cuales está formado el reactor de flujo pistón (PFR).

Reemplazando las ecuaciones (38) y (39) en la ecuación (40), se obtiene:

$$L = \frac{F_{\text{AI}} \cdot R \cdot T}{A_{\text{S}} \cdot n_{\text{Tubos}} \cdot k \cdot y_{\text{AI}} \cdot P} \left[(1+\delta) \ln \left(\frac{1}{1-X_{\text{A}}}\right) - \delta X_{\text{A}} \right].$$
(41)

La ecuación (41), representa el modelo que se ajusta a la relación entre la conversión de bioetanol, la presión de operación y la longitud de un PFR (reactor de flujo pistón), cuando se lleva a cabo la producción de etileno a partir de la deshidratación del bioetanol.

CAPÍTULO II: HIPÓTESIS Y VARIABLES

2.1. Formulación de la hipótesis

a. Hipótesis general

Existe el modelo que se ajusta a la relación entre la conversión de bioetanol, la presión de operación y la longitud de un PFR (reactor de flujo pistón), cuando se lleva a cabo la producción de etileno.

b. Hipótesis específicas

- Sí, es posible realizar el modelamiento de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón).
- Sí, es posible realizar la simulación del modelo de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón).

2.2. Variables y su operacionalización

Variables independientes: longitud del reactor de flujo pistón (PFR) y presión.

Variable dependiente: conversión del bioetanol.

Variables	Notación	Definición	Tipo por su	Indicadores	Escala de	Medios de
.			naturaleza		medicion	verification
Independient	es	1			1	
Longitud del reactor de flujo pistón	L	Es la distancia que recorren los reactivos y productos de una reacción química, la cual se lleva a cabo en el reactor de flujo pistón (Fogler 2008, p. 14).	Cuantitativa continua	pie m	Razón	Hojas de cálculo de Excel.
Presión	Р	Se refiere a la presión de operación, a la que se llevará a cabo la producción de etileno en el PFR (reactor de flujo pistón) (Felder y Rousseau, 2004, p. 55).	Cuantitativa continua	N/m ² atm	Razón	Hojas de cálculo de Excel.
Dependiente						
Conversión del bioetanol	X _A	Es la relación entre el número de moles de bioetanol que reaccionan y el número de moles iniciales del mismo (Fogler, 2008, p. 38; Felder y Rousseau, 2004, p. 118)	Cuantitativa continua	$X_{\rm A} = \frac{\text{Moles de bioetanol que reaccionan}}{\text{Moles iniciales de bioetanol}}$	Razón	Hojas de cálculo de Excel.

 Tabla 2. Operacionalización de las variables.

CAPÍTULO III: METODOLOGÍA

3.1. Tipo y diseño

Al inicio de la presente investigación se revisó toda la información concerniente a la ecuación de balance molar y las leyes de velocidad y estequiometría, esto con el fin de tener el conocimiento necesario para realizar el modelamiento de la producción de etileno en un reactor de flujo pistón (PFR) y así determinar el perfil de conversión de bioetanol a diferentes presiones. Por lo tanto, la investigación tiene **enfoque cuantitativo** con nivel de profundización **predictivo** y **diseño correlacional**. El esquema del diseño de investigación, se muestra en la figura 5.



Figura 5. Esquema del diseño de investigación. Fuente: Elaboración propia.

Donde:

 O_{X_A} , O_L y O_P , son las observaciones obtenidas en cada una de las tres variables

 $(X_A, P \text{ y } L, \text{ respectivamente})$, distintas de la muestra.

 $X_{\rm A}$: conversión de bioetanol (variable dependiente).

P : presión (variable independiente).

L : longitud del reactor de flujo pistón (PFR) (variable independiente).

- *M* : muestra.
- *R* : relación entre las variables.

3.2. Diseño muestral

En realidad, con el modelo que representa a la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol en un reactor de flujo pistón (PFR), se puede realizar múltiples simulaciones, esto indica que la población de estudio es infinita. Entonces, a criterio de los investigadores, el tipo de muestreo fue el no probabilístico. En total se realizaron ocho (8) simulaciones, teniéndose en cuenta que la producción de etileno se debe llevar a cabo a 470°C y en un rango de presión entre 2 y 23 atm y que la conversión de bioetanol a través de la longitud del reactor de flujo pistón (PFR) debe variar entre 0 y 0.99. Por lo tanto, el tamaño de la muestra es igual a las ocho (8) simulaciones que se realizaron.

- Primera simulación: 470°C, 2 atm y variando la conversión de bioetanol entre 0 y 0.99.
- Segunda simulación: 470°C, 5 atm y variando la conversión de bioetanol entre 0 y 0.99.
- Tercera simulación: 470°C, 8 atm y variando la conversión de bioetanol entre 0 y 0.99.
- Cuarta simulación: 470°C, 11 atm y variando la conversión de bioetanol entre 0 y 0.99.
- Quinta simulación: 470°C, 14 atm y variando la conversión de bioetanol entre 0 y 0.99.
- Sexta simulación: 470°C, 17 atm y variando la conversión de bioetanol entre 0 y 0.99.
- Séptima simulación: 470°C, 20 atm y variando la conversión de bioetanol entre 0 y 0.99.
- Octava simulación: 470°C, 23 atm y variando la conversión de bioetanol entre 0 y 0.99.

3.3. Procedimientos de recolección de datos

El procedimiento de recolección de datos, estuvo basado en la recopilación de los parámetros que se requieren para calcular la constante de velocidad de reacción y luego hacer uso de la ecuación (41), estos parámetros se muestran en las siguientes tablas.

Tabla 3. Parámetros necesarios para el cálculo de la constante de velocidad de reacción.

E_a	R	Т	Α
cal/mol	cal/(mol. K)	К	s ⁻¹
19701	1.96	743.15	97800

Fuente: Calvo, 2015, pp. 13-14.

Para calcular la contante de velocidad de reacción a la temperatura T = 470 °C = 743.15 K, se hizo uso de la ecuación de Arrhenius con los datos de la tabla 3, esto es:

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}} = (97800 \text{ s}^{-1})e^{-\frac{(19701 \text{ cal/mo})}{[1.96 \text{ cal/(mol.K)}](743.15 \text{ K})}} = 0.13069426 \text{ s}^{-1}.$$

Recordando que la ecuación (41), representa el modelo que se ajusta a la relación entre la conversión de bioetanol, la presión de operación y la longitud de un PFR (reactor de flujo pistón), cuando se lleva a cabo la producción de etileno a partir de la deshidratación del bioetanol.

$$L = \frac{F_{\text{AI}} \cdot R \cdot T}{A_{S} \cdot n_{\text{Tubos}} \cdot k \cdot y_{\text{AI}} \cdot P} \left[(1+\delta) \ln \left(\frac{1}{1-X_{\text{A}}}\right) - \delta X_{\text{A}} \right].$$
(41)

Los parámetros que se requirieron para hacer uso de la ecuación (41), se muestran en la tabla 4:

	УAI	Т		R		
	Adimensional	°R	°C	atm. pi	ie ³ / (lb mo	l. °R)
	1	1337.67	470	(0.7302413	
	A_S	$n_{ m Tubos}$		F_{A}	AI	δ
m ²	pie ²	Adimensiona	al lb	mol/s	mol/s	Adimensional
0.001963	5 0.021124069	10	0	0.0015	0.68175	1

Tabla 4. Parámetros necesarios para hacer uso de la ecuación (41).

Fuente: Elaboración propia.

Para calcular el parámetro δ , se hizo uso de la ecuación (21):

$$\delta = \frac{b}{a} + \frac{c}{a} - 1. \tag{21}$$

Donde a = 1, b = 1 y c = 1, entonces:

$$\delta = \frac{1}{1} + \frac{1}{1} - 1 = 1$$

Como a la entrada del reactor de flujo pistón (PFR), solo está presente el componente A, entonces: $y_{AI} = 1$.

Se consideró que el reactor de flujo pistón está conformado por diez (10) tubos cilíndricos de 0.05 m de diámetro interior, entonces: $n_{Tubos} = 10$.

$$A_S = \frac{\pi}{4} (0.05 \text{ m})^2 = 0.001963495 \text{ m}^2 = 0.021124069 \text{ pie}^2.$$

3.4. Procesamiento y análisis de datos

El procesamiento y análisis de datos, estuvo basado en la programación de la ecuación (41) en las hojas de cálculo de Excel 2019 y luego se realizó la representación gráfica de la conversión de bioetanol a través de la longitud del reactor de flujo pistón (PFR), de acuerdo a las condiciones indicadas en las ocho (8) simulaciones. En los anexos 2-9, se puede observar las capturas de pantalla, de cada una de las hojas de cálculo que se utilizó para programar la ecuación (41) y obtener el perfil de conversión a una determinada presión.

3.5. Aspectos éticos

Como tesistas y egresados de la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana, declaramos que en nuestro trabajo de investigación no existe plagio de ningún tipo de otro trabajo de tesis, informe, proyecto de investigación o artículo científico. Así mismo, nos comprometemos a respetar la veracidad de los resultados que se obtengan de las ocho (8) simulaciones que fueron realizadas.

CAPÍTULO IV: RESULTADOS

X _A	L
Adimensional	pies
0	0
0.05	1.39546046
0.1	2.93814116
0.15	4.64488031
0.2	6.53558104
0.25	8.63400362
0.3	10.9688313
0.35	13.5751321
0.4	16.4964063
0.45	19.7875277
0.5	23.5190904
0.55	27.7840531
0.6	32.7083146
0.65	38.4683866
0.7	45.3227831
0.75	53.6722888
0.8	64.1883347
0.85	78.1296248
0.9	98.321998
0.95	133.782483
0.99	218.138506

Tabla 5. Resultados de la conversión versus la longitud a 2 atm.

Fuente: Elaboración propia.

Los resultados que se muestran en la tabla 5, se obtuvieron haciendo uso de la ecuación (41). Se puede observar en esta tabla, que si el reactor de flujo pistón (PFR) trabaja a una presión de 2 atm, para llegar a obtener una conversión de 0.99, la longitud de dicho reactor tendría que ser 218.138506 pies. Tambien cabe mencionar, que se han utilizado los datos que se muestran en las tablas 3 y 4; a continuación, se muestra unos ejemplos de cálculo para $X_A = 0.7$ y $X_A = 0.9$.

$$L = \frac{F_{\text{AI}} \cdot R \cdot T}{A_{S} \cdot n_{\text{Tubos}} \cdot k \cdot y_{\text{AI}} \cdot P} \left[(1+\delta) \ln \left(\frac{1}{1-X_{\text{A}}}\right) - \delta X_{\text{A}} \right]$$

$$L = \frac{(0.0015 \text{ lb mol/s})(0.7302413 \text{ atm. pie}^3 / (\text{lb mol.}^{\circ}\text{R}))(1337.67 \text{ }^{\circ}\text{R})}{(0.021124069 \text{ pie}^2)(10)(0.13069426 \text{ s}^{-1})(1)(2 \text{ atm})} \Big[(1+1)\ln\left(\frac{1}{1-0.7}\right) - 0.7 \Big]$$

$$L = 45.3227831$$
 pies.

$$L = \frac{(0.0015 \text{ lb mol/s})(0.7302413 \text{ atm. pie}^3 / (\text{lb mol. °R}))(1337.67 \text{ °R})}{(0.021124069 \text{ pie}^2)(10)(0.13069426 \text{ s}^{-1})(1)(2 \text{ atm})} \Big[(1+1)\ln\left(\frac{1}{1-0.9}\right) - 0.9 \Big]$$

De esta forma se calculan todos los demás valores de la longitud del reactor de flujo pistón (PFR).

Con los valores obtenidos de la longitud (*L*) versus la conversión (X_A), se construye el perfil de conversión.





X _A	L
Adimensional	pies
0	0
0.1	1.17525646
0.2	2.61423242
0.3	4.38753254
0.4	6.59856251
0.5	9.40763615
0.6	13.0833259
0.7	18.1291132
0.8	25.6753339
0.85	31.2518499
0.9	39.3287992
0.95	53.5129932
0.99	87.2554025

Tabla 6. Resultados de la conversión versus la longitud a 5 atm.





X _A	L
Adimensional	pies
0	0
0.1	0.73453529
0.2	1.63389526
0.3	2.74220784
0.4	4.12410157
0.5	5.87977259
0.6	8.17707866
0.7	11.3306958
0.8	16.0470837
0.85	19.5324062
0.9	24.5804995
0.95	33.4456207
0.99	54.5346266

Tabla 7. Resultados de la conversión versus la longitud a 8 atm.

ruente: Elaboración propia	Fuente:	Elat	ooración	pro	pia.
----------------------------	---------	------	----------	-----	------





X _A	L
Adimensional	pies
0	0
0.1	0.53420748
0.2	1.18828746
0.3	1.99433297
0.4	2.9993466
0.5	4.27619825
0.6	5.9469663
0.7	8.24050602
0.8	11.6706063
0.85	14.2053863
0.9	17.8767269
0.95	24.3240878
0.99	39.6615466

Tabla 8. Resultados de la conversión versus la longitud a 11 atm.

T	T 1	1 • /	•
Fuente:	Ela	boración	prop1a.
1 001100.		coracion	propra





X _A	L
Adimensional	pies
0	0
0.1	0.41973445
0.2	0.93365443
0.3	1.56697591
0.4	2.35662947
0.5	3.35987005
0.6	4.67261638
0.7	6.4746833
0.8	9.1697621
0.85	11.161375
0.9	14.0459997
0.95	19.1117833
0.99	31.1626438

Tabla 9. Resultados de la conversión versus la longitud a 14 atm.

F	T11 -	1		•
Fuente:	Ela	boración	pro	D 1a.
		001001011	P - 0	P





X _A	L
Adimensional	pies
0	0
0.1	0.34566367
0.2	0.76889189
0.3	1.29045075
0.4	1.94075368
0.5	2.76695181
0.6	3.84803702
0.7	5.33209213
0.8	7.55156879
0.85	9.19172057
0.9	11.5672939
0.95	15.7391156
0.99	25.6633537

Tabla 10. Resultados de la conversión versus la longitud a 17 atm.



Figura 11. Perfil de conversión a 17 atm. Fuente: Elaboración propia.

X _A	L
Adimensional	pies
0	0
0.1	0.29381412
0.2	0.6535581
0.3	1.09688313
0.4	1.64964063
0.5	2.35190904
0.6	3.27083146
0.7	4.53227831
0.8	6.41883347
0.85	7.81296248
0.9	9.8321998
0.95	13.3782483
0.99	21.8138506

Tabla 11. Resultados de la conversión versus la longitud a 20 atm.





X _A	L
Adimensional	pies
0	0
0.1	0.25549054
0.2	0.56831139
0.3	0.95381142
0.4	1.43447011
0.5	2.04513829
0.6	2.84420127
0.7	3.94111158
0.8	5.58159432
0.85	6.79388042
0.9	8.54973896
0.95	11.6332594
0.99	18.9685658

 Tabla 12. Resultados de la conversión versus la longitud a 23 atm.

Fuente: Elaboración propia	
----------------------------	--







Figura 14. Comparación de los perfiles de conversión. Fuente: Elaboración propia.

En la sección 1.4, se ha realizado el modelado de la reacción de deshidratación de bioetanol a etileno, esto permitió que se puedan realizar las ocho (8) simulaciones de la ecuación (41). De esta forma, se indica que, en la presente investigación, se ha cumplido con el primer objetivo específico, lo cual también prueba la primera hipótesis específica: "sí, es posible realizar el modelamiento de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón)".

Al realizar las ocho (8) simulaciones de la ecuación (41), se está cumpliendo con el segundo objetivo específico y también se prueba la segunda hipótesis específica: "sí, es posible realizar la simulación del modelo de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón)."

CAPÍTULO V: DISCUSIÓN

La tabla 5, muestra los resultados de la conversión versus la longitud a 2 atm. En esta tabla, se puede observar que para llegar a obtener una conversión ($X_A = 0.99$), la longitud del reactor de flujo pistón (PFR) tiene que ser (L = 218.138506 pies). El perfil correspondiente a esta presión, se muestra en la figura 6.

La tabla 6, muestra los resultados de la conversión versus la longitud a 5 atm. En esta tabla, se puede observar que para llegar a obtener una conversión ($X_A = 0.99$), la longitud del reactor de flujo pistón (PFR) tiene que ser (L = 87.2554025 pies). El perfil correspondiente a esta presión, se muestra en la figura 7.

$$L = \frac{(0.0015 \text{ lb mol/s})(0.7302413 \text{ atm. pie}^3 / \text{ (lb mol. °R)})(1337.67 \text{ °R})}{(0.021124069 \text{ pie}^2)(10)(0.13069426 \text{ s}^{-1})(1)(5 \text{ atm})} \Big[(2) \ln \Big(\frac{1}{1 - 0.99}\Big) - 0.99 \Big]$$

$$L = 87.2554025$$
 pies.

La tabla 7, muestra los resultados de la conversión versus la longitud a 8 atm. En esta tabla, se puede observar que para llegar a obtener una conversión ($X_A = 0.99$), la longitud del reactor de flujo pistón (PFR) tiene que ser (L = 54.5346266 pies). El perfil correspondiente a esta presión, se muestra en la figura 8.

$$L = \frac{(0.0015 \text{ lb mol/s})(0.7302413 \text{ atm. pie}^3 / (\text{lb mol. °R}))(1337.67 \text{ °R})}{(0.021124069 \text{ pie}^2)(10)(0.13069426 \text{ s}^{-1})(1)(8 \text{ atm})} \Big[(2) \ln \Big(\frac{1}{1 - 0.99}\Big) - 0.99 \Big]$$

$$L = 54.5346266$$
 pies.

La tabla 8, muestra los resultados de la conversión versus la longitud a 11 atm. En esta tabla, se puede observar que para llegar a obtener una conversión ($X_A = 0.99$), la longitud del reactor de flujo pistón (PFR) tiene que ser (L = 39.6615466 pies). El perfil correspondiente a esta presión, se muestra en la figura 9.

$$L = \frac{(0.0015 \text{ lb mol/s})(0.7302413 \text{ atm. pie}^3 / (\text{lb mol. °R}))(1337.67 \text{ °R})}{(0.021124069 \text{ pie}^2)(10)(0.13069426 \text{ s}^{-1})(1)(11 \text{ atm})} \Big[(2) \ln \Big(\frac{1}{1 - 0.99}\Big) - 0.99 \Big]$$

La tabla 9, muestra los resultados de la conversión versus la longitud a 14 atm. En esta tabla, se puede observar que para llegar a obtener una conversión ($X_A = 0.99$), la longitud del reactor de flujo pistón (PFR) tiene que ser (L = 31.1626438 pies). El perfil correspondiente a esta presión, se muestra en la figura 10.

$$L = \frac{(0.0015 \text{ lb mol/s})(0.7302413 \text{ atm. pie}^3/(\text{lb mol. °R}))(1337.67 \text{ °R})}{(0.021124069 \text{ pie}^2)(10)(0.13069426 \text{ s}^{-1})(1)(14 \text{ atm})} \Big[(2)\ln\left(\frac{1}{1-0.99}\right) - 0.99 \Big]$$

$$L = 31.1626438$$
 pies.

La tabla 10, muestra los resultados de la conversión versus la longitud a 17 atm. En esta tabla, se puede observar que para llegar a obtener una conversión ($X_A = 0.99$), la longitud del reactor de flujo pistón (PFR) tiene que ser (L = 25.6633537 pies). El perfil correspondiente a esta presión, se muestra en la figura 11.

$$L = \frac{(0.0015 \text{ lb mol/s})(0.7302413 \text{ atm. pie}^3 / (\text{lb mol. °R}))(1337.67 \text{ °R})}{(0.021124069 \text{ pie}^2)(10)(0.13069426 \text{ s}^{-1})(1)(17 \text{ atm})} \Big[(2) \ln \Big(\frac{1}{1 - 0.99}\Big) - 0.99 \Big]$$

$$L = 25.6633537$$
 pies.

La tabla 11, muestra los resultados de la conversión versus la longitud a 20 atm. En esta tabla, se puede observar que para llegar a obtener una conversión ($X_A = 0.99$), la longitud del reactor de flujo pistón (PFR) tiene que ser (L = 21.8138506 pies). El perfil correspondiente a esta presión, se muestra en la figura 12.

$$L = \frac{(0.0015 \text{ lb mol/s})(0.7302413 \text{ atm. pie}^3 / (\text{lb mol. °R}))(1337.67 \text{ °R})}{(0.021124069 \text{ pie}^2)(10)(0.13069426 \text{ s}^{-1})(1)(20 \text{ atm})} \Big[(2) \ln \Big(\frac{1}{1 - 0.99}\Big) - 0.99 \Big]$$

$$L = 21.8138506$$
 pies.

La tabla 12, muestra los resultados de la conversión versus la longitud a 23 atm. En esta tabla, se puede observar que para llegar a obtener una conversión ($X_A = 0.99$), la longitud del reactor de flujo pistón (PFR) tiene que ser (L = 18.9685658 pies). El perfil correspondiente a esta presión, se muestra en la figura 13.

$$L = \frac{(0.0015 \text{ lb mol/s})(0.7302413 \text{ atm. pie}^3 / (\text{lb mol. °R}))(1337.67 \text{ °R})}{(0.021124069 \text{ pie}^2)(10)(0.13069426 \text{ s}^{-1})(1)(23 \text{ atm})} \Big[(2) \ln \Big(\frac{1}{1 - 0.99}\Big) - 0.99 \Big]$$

$$L = 18.9685658$$
 pies.

Los resultados que se muestran en las tablas 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 y 12, indican que, a mayor presión de operación, la longitud del reactor de flujo pistón (PFR) disminuye; es decir, la longitud (L) es inversamente proporcional a la presión de operación. Esto se puede verificar en la ecuación (41).

$$L = \frac{F_{\text{AI}} \cdot R \cdot T}{A_{\text{S}} \cdot n_{\text{Tubos}} \cdot k \cdot y_{\text{AI}} \cdot P} \left[(1+\delta) \ln\left(\frac{1}{1-X_{\text{A}}}\right) - \delta X_{\text{A}} \right].$$
(41)

En la figura 14, se puede observar que a medida que aumenta la presión de operación del reactor de flujo pistón (PFR), con mayor facilidad se llegará a obtener una conversión (X_A) igual a = 0.99. Esto indica que la conversión (X_A) depende proporcionalmente de la presión (*P*). También se puede observar en la figura 14, que la conversión (X_A) depende proporcionalmente de la longitud (*L*) del reactor de flujo pistón (PFR). Es decir, cuanto mayor sea la longitud (*L*), mayor será la conversión (X_A) que se obtenga. Los resultados que se muestran en las tablas 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 y 12, también sirven para construir la tabla 13.

Р	L	X _A
atm	pies	Adimensional
2	218.14	0.99
5	87.26	0.99
8	54.53	0.99
11	39.66	0.99
14	31.16	0.99
17	25.66	0.99
20	21.81	0.99
23	18.97	0.99

Tabla 13. Longitud del reactor de flujo pistón (PFR) a diferentes presiones.

CAPÍTULO VI: CONCLUSIONES

- Se aplicó la ecuación general de balance molar, las leyes de velocidad y estequiometría, la ecuación de estado de gases ideales y la ecuación de Arrhenius para realizar el modelado de la reacción de deshidratación de bioetanol a etileno en un reactor de flujo pistón (PFR), de lo cual se obtuvo la ecuación (41), de esta forma se está cumpliendo con el primer objetivo específico y probando la primera hipótesis específica.
- Se han realizado ocho (8) simulaciones de la ecuación (41), de lo cual se ha obtenido los perfiles de conversión a diferentes presiones: 2, 5, 8, 11, 14, 17, 20 y 23 atm. En cada perfil se pudo observar, que cuanto mayor es la longitud (*L*) del reactor de flujo pistón (PFR), mayor es la conversión (*X*_A) de bioetanol que se obtiene. De esta forma se está cumpliendo con el segundo objetivo específico y probando la segunda hipótesis específica.
- A medida que aumenta la presión de operación del reactor de flujo pistón (PFR), facilita obtener la máxima conversión de bioetanol. Esto indica que la conversión (X_A) depende proporcionalmente de la presión (P).
- Las ocho (8) simulaciones de la ecuación (41), muestran que la presión de operación óptima a la que debe trabajar el reactor de flujo pistón (PFR), es 23 atm, pues a esta presión se llegará en dicho reactor a la conversión máxima (X_A = 0.99) de bioetanol, con la longitud (L) más pequeña, la cual es aproximadamente igual a 18.97 pies. Esto indica que la longitud (L) es inversamente proporcional a la presión de operación (P).
- Además, cabe recalcar, que la presente investigación es importante, porque explica en detalle los criterios ingenieriles que son necesarios para diseñar adecuadamente un reactor de flujo pistón (PFR), donde se lleva a cabo el proceso de producción de etileno a partir de bioetanol, contribuyendo de esta forma a la generación de nuevos conocimientos científicos. Se concluye de esta manera el presente trabajo de investigación, probando cada una de las hipótesis específicas y la hipótesis general y simultáneamente se está cumpliendo con cada uno de los objetivos específicos y el objetivo general.

CAPÍTULO VII: RECOMENDACIONES

- Se recomienda realizar diversos estudios sobre la reacción de deshidratación de bioetanol a etileno en un reactor de flujo pistón (PFR), esto con la finalidad de realizar balances de materia, lo cual puede servir para determinar la cantidad de bioetanol que se requiere para producir una determinada cantidad de etileno.
- Se recomienda realizar otros estudios, donde se determine la cantidad de energía requerida en la reacción de deshidratación de bioetanol a etileno en un reactor de flujo pistón (PFR), de acuerdo a la temperatura y presión óptima a la que se debe llevar a cabo este proceso.
- Se debe resaltar estos tipos de trabajos en los alumnos, egresados y docentes de la Facultad de Ingeniería Química (FIQ) de la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana (UNAP), ya que en la actualidad el modelamiento y simulación, nos permite saber en gran medida el comportamiento de las variables que están involucradas en un proceso cuando se lleve a cabo en la realidad. Para esto, se recomienda que, al realizar otro trabajo similar al presente, se debe aplicar siempre los criterios ingenieriles: la ecuación general de balance molar, las leyes de velocidad y estequiometría, las ecuaciones de estado, la termodinámica y la ecuación de Arrhenius.
- Para determinar el valor de la longitud (*L*) del reactor de flujo pistón (PFR), que se requiere para obtener una determinada conversión (X_A) de bioetanol, a una determinada presión de operación, se recomienda que se debe hacer uso de la ecuación (41), con los parámetros que se muestran en las tablas 3 y 4.
- Se recomienda la presente investigación, para los profesionales que deseen realizar el adecuado diseño de reactores de flujo pistón (PFR), donde se lleven a cabo reacciones en fase gaseosa.

CAPÍTULO VIII: FUENTES DE INFORMACIÓN

- AGUDELO, José y Montes, Consuelo. Deshidratación catalítica de etanol a etileno sobre HMOR y HZSM-5 modificada con hierro y cobre, Antioquia-Colombia. Revista Ingeniería e Investigación, 25 (3): 22-26, 2005.
- CALVO, Francisco. Ingeniería básica de una planta de producción de etileno a partir de etanol de maíz. Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Química. Sevilla, España: Universidad de Sevilla, Escuela Técnica superior de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, 2015. pp. 13-14.
- CECILIANO, Chris. Evaluación preliminar del desempeño de un catalizador de níquel-cobre para la conversión de bioetanol a etileno. Proyecto de graduación Sometido a consideración de la Escuela de Ingeniería Química como requisito final para optar por el grado de Licenciatura en Ingeniería Química. San José, Costa Rica: Universidad de Costa Rica, Facultad de Ingeniería, Escuela de Ingeniería Química, 2018. pp. 9, 39.
- ESPINOZA, Libio; MATEO, Eduardo y MARCA, Junior. Diseño de una planta para la producción de etileno a partir del acoplamiento oxidativo del metano proveniente del gas natural. Informe final del curso de diseño de plantas. Lima, Perú: Universidad Nacional de Ingeniería, Facultad de Ingeniería Química y Textil, Escuela de Ingeniería Química, 2016. 4 p.
- FELDER, Richard y ROUSSEAU, Ronald. Principios elementales de los procesos químicos. 3a. ed. México: Limusa Wiley, 2004. pp. 55, 118, 191-192. ISBN: 968-18-6169-8.
- FOGLER, H. Scott. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. 4a. ed. México: Pearson Educación, S.A. de C.V., 2008. pp. 8-10, 14, 38, 81, 175. ISBN 10: 970-26-1198-9. ISBN 13: 978-970-26-1198-1.
- https://blog.gruponovelec.com/energias-renovables/que-es-el-bioetanol/

- <u>https://www.um.es/acc/etileno/</u>
- LEVENSPIEL, Octave. Ingeniería de las reacciones químicas. 3a. ed. México: Limusa Wiley, 2004. 28 p.
 ISBN: 968-18-5860-3.
- MOTT, Robert L. Mecánica de fluidos. 6a. ed. México: Pearson Educación, 2006. pp. 52-54
 ISBN: 970-26-0805-8.
- MITACC, Máximo y TORO, Luis. Tópicos de Cálculo. Vol 1. 3a. ed. Lima, Perú: Editorial Thales S.R.L, 2009. pp. 197-200.
- MITACC, Máximo y TORO, Luis. Tópicos de Cálculo. Vol 2. 3a. ed. Lima, Perú: Editorial Thales S.R.L, 2009. 5 p.
- VENERO, Armando. Análisis Matemático 1. 2a. ed. Lima, Perú: Ediciones Gemar, 2016. pp. 92-94 ISBN: 978-612-45216-3-8.
- VENERO, Armando. Análisis Matemático 2. 2a. ed. Lima, Perú: Ediciones Gemar, 2012. 188 p. ISBN: 978-612-45216-3-8.

ANEXOS

Anexo 1. Matriz de consisten	cia.
------------------------------	------

PROBLEMA	OBJETIVOS	HIPÓTESIS	VARIABLES	INDICADORES	METODOLOGÍA
 PROBLEMA Problema general ¿Cuál es el modelo que se ajusta a la relación entre la conversión de bioetanol, la presión de operación y la longitud del PFR (reactor de flujo pistón), cuando se lleva a cabo la producción de etileno? Problemas específicos ¿Es posible realizar el modelamiento de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón)? ¿Es posible realizar la simulación del modelo de la producción de etileno a partir de la deshidrogenación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón)? 	 OBJETIVOS Objetivo general Determinar el modelo que se ajusta a la relación entre la conversión de bioetanol, la presión de operación y la longitud del PFR (reactor de flujo pistón), cuando se lleva a cabo la producción de etileno. Objetivos específicos Realizar el modelamiento de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón). Realizar la simulación del modelo de la producción de etileno a partir de la deshidrogenación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón). 	 HIPÓTESIS Hipótesis general Existe el modelo que se ajusta a la relación entre la conversión de bioetanol, la presión de operación y la longitud del PFR (reactor de flujo pistón), cuando se lleva a cabo la producción de etileno. Hipótesis específicas Sí, es posible realizar el modelamiento de la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón). Sí, es posible realizar la simulación del modelo de la producción de etileno a partir de la deshidrogenación de bioetanol, en un PFR (reactor de flujo pistón). 	VARIABLES Variables independientes L: Longitud del reactor de flujo pistón P: Presión de operación del PFR. Variable dependiente X _A : conversión de bioetanol	INDICADORES pie m N/m ² atm <u>Moles que reacionan</u> Moles iniciales	METODOLOGÍATipo de investigaciónLa presente investigacióntiene enfoque cuantitativocon nivel de profundizaciónpredictivo y diseñocorrelacional. M Q_L R Q_L R Q_L Figura 5. Esquema del diseño de investigación. Fuente: Elaboración propia.PoblaciónLo representan las múltiples simulaciones que se puedan realizar con el modelo que representa a la producción de etileno a partir de la deshidratación de bioetanol, en un reactor de flujo pistón (PFR).Muestra El tamaño de muestra es igual a las ocho (8) simulaciones
					El tamaño de muestra es igual a las ocho (8) simulaciones que se realizaron.

17		- : ×	√ f _x =(\$D\$19*\$F	\$5*\$D\$5)*(((1+\$F\$19)*LN((1/(1-H7))-\$	\$F\$19*H7)/(\$B\$	19*\$C\$19*\$E\$1	12*\$	\$B\$5*\$	C\$5)										
1	А	В	С	D	E	F	G	н	I	J		К	L		М		N			0		P
3	$C_{\rm AI}$	У AI	Р		Τ	R	-	X _A	L													
4	1b mol/pie ³	Adimensional	atm	°R	°C	atm.pies3/(1	b mol.°R)	Adimensional	pies		X	A	Per	rfil de	conver	sión	a 2 at	m				
5	0.0020475	1	2	1337.67	470	0.7302	2413	0	0		1	•									•	
6								0.05	1.39546046		0.95					_			_			
7	C = v	P (30)						0.1	2.93814116		0.9											
8	CAI - YAI	RT (32)						0.15	4.64488031		0.8											
9								0.2	6.53558104		0.75											
10	Ea	R	Т	A	k			0.25	8.63400362		0.7		-			_						
11	cal/mol	cal/(mol.K)	K	s ⁻¹	s ⁻¹			0.3	10.9688313		0.65					_					-	
12	19701	1.96	743.15	97800	0.13069426			0.35	13.5751321		0.6		1			_						
13								0.4	16.4964063		0.55										-	
14		$-\frac{E_{\alpha}}{E_{\alpha}}$	$L = \frac{F_{AI} \cdot F_{AI}}{F_{AI}}$	R. T	$(1 + \delta) \ln \left(- \frac{1}{2} \right)$	$\frac{1}{\delta x}$.] (41)	0.45	19.7875277		0.5	1										
15	k = 978	300 <i>e RT</i>	A _S .n _{Tubos}	. k. y _{AI} . P [(1 + 0)m($1 - X_A$	A]. (41)	0.5	23.5190904		0.45											
16								0.55	27.7840531		0.35										_	
17		As	n _{Tubos}	F	AI	δ		0.6	32.7083146		0.3										_	
18	m ²	pies ²	Adimensional	lb mol/s	mol/s	Adimensional		0.65	38.4683866		0.25	+				_					-	
19	0.001963495	0.021124069	10	0.0015	0.68175	1		0.7	45.3227831		0.2	+ -				_						
20								0.75	53.6722888		0.15	1				_					-	
21								0.8	64.1883347		0.1	1										
22								0.85	78.1296248		0.05											
23								0.9	98.321998		0	20	40 6	0 80	100	120	140 1	160 1	180	200	220	
24								0.95	133.782483						L(pi	es)						
25								0.99	218.138506													
	< >	2 atm 5	atm 8 atm	11 atm	14 atm	17 atm	20 atm	23 atm Co	omparación		(+)		4									

Anexo 2. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 2 atm.

16		• : ×	√ f _x =(\$D\$19*\$F\$	\$5*\$D\$5)*(((1+\$F\$19)*LN(1/(1-H6))-\$	F\$19*H6)/(\$B\$1	.9*\$C\$19*\$E\$1	12*\$	\$B\$5*\$	C\$5)									
	А	В	С	D	E	F	G	н	1	J		К	L		м	N	1		0		Ρ
3	$C_{\rm AI}$	У АІ	Р		Т	R		X _A	L												
4	1b mo1/pie ³	Adimensional	atm	°R	°C	atm.pies3/(1	b mol.°R)	Adimensional	pies		X	Δ.	Perf	il de c	onversi	ón a 5	atm				
5	0.0051186	1	5	1337.67	470	0.7302	2413	0	0		1	•								•	
6								0.05	0.55818418		0.95										
7	C = v	P (39)						0.1	1.17525646		0.85										
8	CAI - YAI	RT						0.15	1.85795212		0.8										
9								0.2	2.61423242		0.75									_	
10	Ea	R	Т	A	k			0.25	3.45360145		0.7									-	
11	cal/mol	cal/(mol.K)	K	s ⁻¹	s ⁻¹			0.3	4.38753254		0.65									- [
12	19701	1.96	743.15	97800	0.13069426			0.35	5.43005284		0.6		1							- [
13								0.4	6.59856251		0.55							_		- [
14		E_{α}	F	R.T	[(1)	1	0.45	7.91501108		0.5	1								-	
15	k = 978	300 <i>e</i> RT	$L = \frac{n}{A_{c}, n_{Tub}}$		$\frac{1}{5} \left[(1 + \delta) \ln \right]$	$\left(\frac{1}{1-X_{\lambda}}\right) - \delta$	X_{A}]. (41)	0.5	9.40763615		0.45	J									
16			3106	Al -		A		0.55	11.1136213		0.35										
17		As	n _{Tubos}	F	AI	δ		0.6	13.0833259		0.3										
18	m ²	pies ²	Adimensional	lb mol/s	mol/s	Adimensional		0.65	15.3873546		0.25	+								-	
19	0.001963495	0.021124069	10	0.0015	0.68175	1		0.7	18.1291132		0.2	+ +								-	
20								0.75	21.4689155		0.15	1								-	
21								0.8	25.6753339		0.1										
22								0.85	31.2518499		0.05										
23								0.9	39.3287992		0	8	16 24	32	40 4	8 56	64	72	80	88	
24								0.95	53.5129932					02	L(pies)		. 2			
25				1				0.99	87.2554025						-4.00	,					
	• • • • • • • • • • • • • • • • • • •	2 atm 5 a	atm 8 atm	11 atm	14 atm	17 atm	20 atm	23 atm Co	mparación		\oplus		4								

Anexo 3. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 5 atm.

17		- : × ·	√ f _x =	(\$D\$19*\$F\$	\$5*\$D\$5)*(((1+\$F\$19)*LN	(1/(1-H7))-\$	F\$19*H7)/(\$B\$	19*\$C\$19*\$E\$:	12*;	\$B\$5*\$	C\$5)									
1	А	В	с	D	E	F	G	Н	1	J		К	L		М		N		0		Р
3	C_{AI}	У AI	Р		Т	F	2	X _A	L												_
4	lb mol/pie ³	Adimensional	atm	°R	°C	atm.pies3/(lb mol.°R)	Adimensional	pies		Х	A	Perf	il de	conver	sión a	8 atm				
5	0.0081898	1	8	1337.67	470	0.730	2413	0	0		1	•							_	-	
6								0.05	0.34886511		0.95										
7	$C \dots = v \dots$	$\frac{P}{(39)}$						0.1	0.73453529		0.85										
8	CAI JAI	RT						0.15	1.16122008		0.8										
9								0.2	1.63389526		0.75										
10	E_a	R	Т	A	k			0.25	2.15850091		0.7		-								
11	cal/mol	cal/(mol.K)	K	s ⁻¹	s ⁻¹			0.3	2.74220784		0.65		1			_					
12	19701	1.96	743.15	97800	0.13069426			0.35	3.39378303		0.6		1								
13								0.4	4.12410157		0.55		1								
14		E_a	F.	R, T	r	(1)	1	0.45	4.94688193		0.5		1								
15	k = 978	300 <i>e</i> RT	$L = \frac{-1}{4}$	k v. P	$(1+\delta)$ ln	$\left(\frac{1}{1-X_{1}}\right) - \delta$	SX_{A} . (41)	0.5	5.87977259		0.45										
16			"S'"Tub	os. w. yAI.		1 - AA'		0.55	6.94601329		0.35	1									
17		A_{S}	n _{Tubos}	F	AI	δ		0.6	8.17707866		0.3	4									
18	m ²	pies ²	Adimensional	lb mol/s	mol/s	Adimensional	l	0.65	9.61709664		0.25	+		_							
19	0.001963495	0.021124069	10	0.0015	0.68175	1		0.7	11.3306958		0.2	1									
20								0.75	13.4180722		0.15	1				_					
21								0.8	16.0470837		0.1	1									
22								0.85	19.5324062		0.05	,								_	
23								0.9	24.5804995		0)	5 10 15	2.0	25	30 3	5 40) 45	50	55	
24								0.95	33.4456207		Ì		- 10 10	20	L(pie	20 0 25)	- 1	0			
25								0.99	54.5346266		L			_		-					
		2 atm 5 a	atm 8 atm	11 atm	14 atm	17 atm	20 atm	23 atm Co	mparación		\oplus	:	4								

Anexo 4. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 8 atm.

18		r E X	√ f _x =(\$D\$19*\$F\$	\$5*\$D\$5)*(((1+\$F\$19)*LN(1/(1-H8))-\$	F\$19*H8)/(\$B\$1	9*\$C\$19*\$E\$	12*\$	B\$5*\$C	\$5)							
	А	В	С	D	E	F	G	н	1	J		< l	L	М	1	N		0	Р
3	$C_{\rm AI}$	У AI	Р		Т	R		X _A	L										
4	lb mol/pie ³	Adimensional	atm	°R	°C	atm.pies3/(1	b mol.°R)	Adimensional	pies		XA		Pe	erfil de conv	versión	a 11	atm		
5	0.011261	1	11	1337.67	470	0.7302	413	0	0		0 05 T								
6								0.05	0.25372008		0.95								
1	· = v	$\frac{P}{-}$ (39)						0.1	0.53420748		0.85								
		RT						0.15	0.84452369		0.8								
/								0.2	1.18828746		0.75								
0	E_a	R	Т	A	k			0.25	1.56981884		0.7						_		
I	cal/mol	cal/(mol.K)	K	s ⁻¹	s ⁻¹			0.3	1.99433297		0.65		1						
2	19701	1.96	743.15	97800	0.13069426			0.35	2.46820584		0.6								
;								0.4	2.9993466		0.55	1							
1		Ea	FAT.	R.T	[(1)	1	0.45	3.59773231		0.5	1							
5	k = 978	$00e^{-RT}$	$L = \frac{n}{A_{ci}n_{Tirbar}}$		$\left[(1+\delta)\ln\right]$	$\left(\frac{1-\chi_{1}}{1-\chi_{2}}\right) - \delta \lambda$	[A]. (41)	0.5	4.27619825		0.45	1							
5			31000	A		A		0.55	5.05164603		0.35	I							
7		A_{S}	n _{Tubos}	F	AI	δ		0.6	5.9469663		0.3								
3	m ²	pies ²	Adimensional	lb mol/s	mol/s	Adimensional		0.65	6.9942521		0.25	+							
	.001963495	0.021124069	10	0.0015	0.68175	1		0.7	8.24050602		0.2	t –							
)								0.75	9.75859797		0.15	†							
								0.8	11.6706063		0.1								
2								0.85	14.2053863		0.05								
3								0.9	17.8767269		0	2 4	5 8 10	12 14 16 1	8 20 22	24 26	5 28 3	32 34	36 38 40
4								0.95	24.3240878		0	_ 1	10		L(pies)				0 00 10
5				1				0.99	39.6615466	l									
	Þ	2 atm 5 a	atm 8 atm	11 atm	14 atm	17 atm	20 atm	23 atm Co	mparación		\oplus								

Anexo 5. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 11 atm.

17		• : ×	√ <i>f</i> _x	=(\$D\$19*\$F	\$5*\$D\$5)*((1+\$F\$19)*LN	(1/(1-H7))-\$	F\$19*H7)/(\$B	\$19*\$C\$19*\$E\$1	2*\$B\$5*\$C\$5)
	А	В	С	D	E	F	G	Н	1	JKLMNO
3	$C_{\rm AI}$	У AI	Р		Т	R	2	X _A	L	
4	lb mol/pie ³	Adimensional	atm	°R	°C	atm.pies3/(lb mol.°R)	Adimension	al pies	X_{Λ} Perfíl de conversión a 14 atm
5	0.0143322	1	14	1337.67	470	0.730	2413	0	0	
6								0.05	0.19935149	0.95
7	C = v	P (39)						0.1	0.41973445	0.85
8	$c_{AI} - y_{AI}$	RT (32)						0.15	0.66355433	0.0
9								0.2	0.93365443	0.75
10	Ea	R	Т	A	k			0.25	1.23342909	0.7
11	cal/mol	cal/(mol.K)	K	s ⁻¹	s ⁻¹			0.3	1.56697591	0.65
12	19701	1.96	743.15	97800	0.13069426			0.35	1.93930459	0.6
13								0.4	2.35662947	0.55
14		E_a		$F_{AI}.R.T$	[($\begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix}$]	0.45	2.82678967	0.5
15	k = 978	$00e^{-RT}$	$L = \frac{1}{A_s \cdot n_s}$	Tubes. k. yAL	$\frac{1}{P}\left[\left(1+\delta\right)\right]$	$n\left(\frac{1-X_{A}}{1-X_{A}}\right)^{-1}$	$\delta X_{\rm A}$]. (41) 0.5	3.35987005	0.45
16				14505 - AI				0.55	3.96915045	0.35
17		A_{S}	n _{Tubos}	I	AI	δ		0.6	4.67261638	0.3
18	m ²	pies ²	Adimensiona	al 1b mol/s	mol/s	Adimensional		0.65	5.49548379	0.25
19	0.001963495	0.021124069	10	0.0015	0.68175	1		0.7	6.4746833	0.2
20								0.75	7.66746983	0.15
21								0.8	9.1697621	0.1
22								0.85	11.161375	0.05
23								0.9	14.0459997	
24								0.95	19.1117833	L(pies)
25								0.99	31.1626438	
	• • • • • • • • • • • • • • • • • • •	2 atm 5	atm 8 atm	n 11 atm	14 atm	17 atm	20 atm	23 atm (Comparación	+ : 4

Anexo 6. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 14 atm.

19		• E ×	√ <i>f</i> _x =	(\$D\$19*\$F	\$5*\$D\$5)*((1+\$F\$19)*LN((1/(1-H9))-\$	F\$19*H9)/(\$B\$1	L9*\$C\$19*\$E\$	12*	\$B\$5*\$:\$5)										
	А	В	С	D	E	F	G	Н	1	J		к	L		м		N			0		Р
3	$C_{\rm AI}$	У AI	Р		Т	R		X _A	L													-
4	1b mol/pie ³	Adimensional	atm	°R	°C	atm.pies3/(1	lb mol.°R)	Adimensional	pies		X		P	erfil d	e conv	ersión	a 17 a	ıtm				
5	0.0174034	1	17	1337.67	470	0.730	2413	0	0											_	-	
6								0.05	0.16417182		0.95											
7	C = v	$\frac{P}{(39)}$						0.1	0.34566367		0.85											
8		RT						0.15	0.54645651		0.8											
9								0.2	0.76889189		0.75		_		_							
10	E_a	R	Т	A	k			0.25	1.01576513		0.7				_		_					
11	cal/mol	cal/(mol.K)	K	s ⁻¹	s ⁻¹			0.3	1.29045075		0.65		1		_							
12	19701	1.96	743.15	97800	0.13069426			0.35	1.59707437		0.6		1		_							
13								0.4	1.94075368		0.55		1		_							
14		E_{α}	, F _A	.R.T	[(1	$\begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix}$		0.45	2.32794444		0.5	1										
15	k = 978	300 <i>e</i> RT	$L = \frac{1}{A_{s} \cdot n_{Tuk}}$	$k. y_{AI}. P$	$\int [(1+0) \ln t]$	$\left(\frac{1-X_{A}}{1-X_{A}}\right)^{-o}$	X_{A} . (41)	0.5	2.76695181		0.45	Ţ										
16			5 14					0.55	3.26871213		0.35	I										
17		A_S	n Tubos	F	AI	δ		0.6	3.84803702		0.3	4										
18	m ²	pies ²	Adimensional	lb mol/s	mol/s	Adimensional		0.65	4.52569254		0.25	┥			_							
19	0.001963495	0.021124069	10	0.0015	0.68175	1		0.7	5.33209213		0.2	++			_							
20								0.75	6.31438692		0.15	† ⊢									_	
21								0.8	7.55156879		0.1										_	
22								0.85	9.19172057		0.05										_	
23								0.9	11.5672939		0	2	4 6	8	10 1	2 14	16 1	8 20) 22	2.4	26	
24								0.95	15.7391156		ľ	-				L(pies)				2.	20	
25								0.99	25.6633537		L											_
	4 - F	2 atm 5 a	atm 8 atm	11 atm	14 atm	17 atm	20 atm	23 atm Co	mparación		(+)	-	4									

Anexo 7. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 17 atm.

110	, (· E ×	$\checkmark f_x =$	(\$D\$19*\$F	\$5*\$D\$5)*((1+\$F\$19)*LN	(1/(1-H10))-	\$F\$19*H10)/(\$B	\$19*\$C\$19*\$	E\$12	2*\$B\$5	*\$C\$	5)						
1	А	В	С	D	E	F	G	Н	1	J		К	L	М	N		0		Ρ
3	C_{AI}	У АІ	Р		Т	F	2	X _A	L										
4	1b mo1/pie ³	Adimensional	atm	°R	°C	atm.pies ³ /(lb mol.°R)	Adimensional	pies		X	A	Perfild	le conversi	ón a 20 a	tm			
5	0.0204746	1	20	1337.67	470	0.730	2413	0	0		1							-	
6								0.05	0.13954605		0.95								
7	C = v	P (39)						0.1	0.29381412		0.5								
8	CAI - YAI	RT						0.15	0.46448803		0.8								
9								0.2	0.6535581		0.75								
10	E_a	R	Т	A	k			0.25	0.86340036		0.7					_		_	
11	cal/mol	cal/(mol.K)	K	s ⁻¹	s ⁻¹			0.3	1.09688313		0.65					_		_	
12	19701	1.96	743.15	97800	0.13069426			0.35	1.35751321		0.6		1						
13								0.4	1.64964063		0.55		1						
14		$\underline{E_a}$	F	$A_{AI}.R.T$	[(1)	~]	0.45	1.97875277		0.5		1						
15	k = 978	00 <i>e RT</i>	$L = \frac{1}{A_{s} \cdot n_{Tu}}$	$k. y_{AI}$	$\frac{1}{P} \left[(1 + \delta) \right]$	$n\left(\frac{1-X_{A}}{1-X_{A}}\right)^{-1}$	$\delta X_{\rm A}$]. (41)	0.5	2.35190904		0.45								
16			5 14	505 7 AI		^		0.55	2.77840531		0.35								
17		As	n Tubos	F	AI	δ		0.6	3.27083146		0.3	4				_			
18	m ²	pies ²	Adimensional	1b mol/s	mol/s	Adimensional		0.65	3.84683866		0.25	+							
19	0.001963495	0.021124069	10	0.0015	0.68175	1		0.7	4.53227831		0.2	+						_	
20								0.75	5.36722888		0.15	ϯ							
21								0.8	6.41883347		0.1	1							
22								0.85	7.81296248		0.05								
23								0.9	9.8321998		0)	2 4 6	8 10	12 14	16 15	8 2.0	22 -	
24								0.95	13.3782483		Ì			L(pies	5)	10 11	. 10		
25								0.99	21.8138506		L								_
	<	2 atm 5	atm 8 atm	11 atm	14 atm	17 atm	20 atm	23 atm Co	mparación		\oplus	-	4						_

Anexo 8. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 20 atm.

18	,	· · ×	√ <i>f</i> x =	(\$D\$19*\$F	\$5*\$D\$5)*(((1+\$F\$19)*LN	(1/(1-H8))-\$	F\$19*H8)/(\$B	\$19*\$C\$19*\$E\$	12*	\$B\$5*\$	C\$5)										
	А	В	С	D	E	F	G	Н		J		К	L	.	М			N		0		Ρ
3	$C_{\rm AI}$	У AI	Р		Т	R		X _A	L													-
4	1b mol/pie ³	Adimensional	atm	°R	°C	atm.pies3/(1	b mol.°R)	Adimensiona	l pies		X	A	Pe	erfil de	con	versió	n a 23	atm				
5	0.0235457	1	23	1337.67	470	0.730	2413	0	0		1	•										
6								0.05	0.12134439		0.95				_							
7	C = v	P (30)						0.1	0.25549054		0.9			_								
8	$c_{AI} = y_{AI}$	RT (39)						0.15	0.40390264		0.05											
9								0.2	0.56831139		0.75		,								_	
10	Ea	R	Т	A	k			0.25	0.75078292		0.7							_				
11	cal/mol	cal/(mol.K)	K	s ⁻¹	s ⁻¹			0.3	0.95381142		0.65							_	_			
12	19701	1.96	743.15	97800	0.13069426			0.35	1.18044627		0.6		1									
13								0.4	1.43447011		0.55		1		_							
14		Ea	F	R.T	[(1)	1	0.45	1.72065458		0.5											
15	k = 978	$00e^{-RT}$	$L = \frac{1}{A_{a} n_{m}}$	k. v	$\frac{1}{P} \left[(1 + \delta) \right]$	$n\left(\frac{1}{1-X_{1}}\right) -$	δX_{A} . (41) 0.5	2.04513829		0.45	1										
16			···s···h	ibos ···· / Al·		A		0.55	2.41600462		0.35											
17		As	n _{Tubos}	I	7 AI	δ		0.6	2.84420127		0.33											
18	m ²	pies ²	Adimensional	lb mol/s	mol/s	Adimensional		0.65	3.34507709		0.25							_	_			
19	0.001963495	0.021124069	10	0.0015	0.68175	1		0.7	3.94111158		0.2	+			_			-	-			
20								0.75	4.66715555		0.15	t –					_					
21								0.8	5.58159432		0.1											
22								0.85	6.79388042		0.05										_	
23								0.9	8.54973896				2 4	6	8	10	12	14	16	18	20	
24								0.95	11.6332594		Ĭ		- 1	2	~	L(pies)			10	10	20	
25								0.99	18.9685658		L											1
	<	2 atm 5	atm 8 atm	11 atm	14 atm	17 atm	20 atm	23 atm C	omparación		\oplus	-	4									

Anexo 9. Hoja de cálculo para el perfil de conversión a 23 atm.